

研究会報告

3rd Mini-Symposium on Liquids

— ソフトな界面の物理と化学 —

開催日：2009年6月20日

場所：岡山大学理学部大会議室

このミニシンポジウムは液体の物理・化学について議論をするために一昨年からはじまった。これまでの経緯と内容については以前の報告を参照してほしい[1]。今回のシンポジウムでは「ソフトな界面における物理と化学」というテーマが設定され、実験・理論を織り交ぜた6件の講演が行われた。異なるものが出会う場には往々にして興味深い現象が生じる。異なる「相」が出会う界面もその例外ではない。界面現象の本格的な研究は、分子の存在自体が仮説の域を出ていない時代—まして分子間力については何も知られていない時代—に始まった。ヤング、ラプラス、ポアソン、レイリーらが静力学によって毛管現象に取り組んだとき、むしろ、それを知ることによって分子間力を推測することが興味の一つであった。そしてファン・デル・ワールスが先駆的な近似理論を打ち立てる。

$$\Psi = F[\rho(z)] + \frac{1}{2}m \left| \frac{d\rho}{dz} \right|^2$$

ここで、 F は局所平均場自由エネルギー、 $\rho(z)$ は界面に垂直な方向における局所密度である。彼はエネルギーではなく自由エネルギーを採用し（すなわちエントロピーを考慮に入れ）、それに密度勾配の2乗項を加えた関数 Ψ を導入し、 $\int \Psi dz$ を極小化する $\rho(z)$ が平衡密度分布であり、この積分が表面張力であるとした[2]。前年のテーマは、液体論におけるファン・デル・ワールス描像であったが、界面研究でも彼は先見の明を示したのである[3]。現代ではより洗練された密度汎関数理論が発展し、あるいは分子シミュレーションの大規模・高速化が進み、分子間力から微視的構造と巨視的物性を求めるという方向の研究が進められている。また、実験手法の発展により、界面の微視的構造を精密に観測することが可能となってきた。一方、平均場密度汎関数理論よりも粗視化を進めた理論、流体力学理論、スケールリング手法等により、いままで手つかずであった広範な界面現象の理解が進んだ[4]。どちらの方向においても発展が続いている。実験と理論の関係に注目すると、多くの分野で両者が解離することが少なくない中、ソフト界面の研究領域では実験家が理論を考え、理論家が実験に取り組む相互乗り入れが、しばしば見られる。

今回の口頭発表では、扱う対象のスケールとして分子レベルの微視的構造（山口）から中規模構造（貞包、松原、甲賀）および巨視的物性（好村、奥村）が含まれ、内容としては界面における流体力学、濡れ（好村、奥村）、濡れ転移、界面張力、線張力（奥村、松原、甲賀）から、ソフト界面における分子配向を見る分光法（山口）、臨界点近傍におけるマイクロ相分離（貞包）が議論さ

れた（以上、敬称略）。ポスター発表では液体全般の話題に関して16件の発表が行われた。ポスター・セッションでも密度の高い発表と議論が行われ、何名かの参加者から『聞きたいポスターを聞く為には、ポスターセッションの時間が全く足りていない。』とのコメントをいただいた。世話人も同様な感想を持った。今後のプログラム編成を考える上での課題としたい。

謝辞

液体に関して議論すべき問題を議論し、共有すべき発展を共有するための場をもつことは必要であろう、ということでこのシンポジウムは2007年に始まり、今年で3回目に至った。そのような目的のシンポジウムに必要なものは、高度に組織された学会や大規模プロジェクトではなく、むしろ趣旨に賛同してもらえる発表者、参加者個人の自発的協力だろう。数名の参加者の方々からはこの点について評価、激励を頂いた。手弁当での運営に快く協力して頂いた口頭発表者の方々、素晴らしいポスターを用意して頂いたポスター発表者の方々、そして会場設営等で立ち働いてくれた岡山大学理論化学研究室の皆さんに感謝したい。

世話人

甲賀研一郎

秋山良

参考文献

- [1] 秋山良, 甲賀研一郎, 物性研究 **91** (2009), 700.
- [2] 毛管現象の分子理論の発展については、以下を参照のこと: J.S. Rowlinson and B. Widom, in *Molecular Theory of Capillarity*, (Dover Edition, 2002), Chap. 1–3.
- [3] 小貫明: ファンデルワールス方程式, 数理科学 2009年6月号 pp.58-60.
- [4] ドウジェンヌ, プロシャール, ケレ著, 奥村剛訳, 表面張力の物理学, 吉岡書店 (2003).

プログラム

12:55-13:00 Opening Remarks

13:00-13:30 山口祥一 (理化学研究所)

Interface-selective heterodyne-detected second-order nonlinear optical spectroscopy

13:30-14:00 貞包浩一朗 (京都大学)

Hierarchical structure induced by solvation effects of hydrophilic/hydrophobic ion pair in the mixture of water and 3-methylpyridine

14:00-14:30 奥村剛 (お茶の水女子大学)

New aspects of age-old problems of capillary and wetting

14:45-15:15 Poster Preview Session

15:15-16:30 Poster Presentation (with Coffee and Cookies)

16:30-17:00 好村滋行 (首都大学東京)

Hydrodynamics in multicomponent biomembranes

17:00-17:30 松原弘樹 (九州大学)

Study on line tension of air/hexadecane/aqueous surfactant system

17:30-18:00 甲賀研一郎 (岡山大学)

How soft interfaces get wet

ポスターセッション

1. 墨智成 (豊橋技術科学大学) A Thermodynamic Analysis of Osmolyte-Induced Protein Unfolding
2. 吉武裕美子 (東京電機大学) On the Origin of Contact Angle Hysteresis on Textured Surfaces
3. 横田万里亜 (お茶大物理) Coalescence of a Two-Dimensional Liquid Drop to a Liquid Bath
4. 磯部雅晴 (名古屋工業大学) Molasses Tail in Two Dimensions
5. 石崎麻利央 (岡山大学) Solvation Free Energy of Lennard-Jones Fluids
6. 坂牧隆司 (慶應義塾大学) Calculation of Thermodynamics Properties on Methane/Water Interface Using Fast Molecular Dynamics Simulation
7. 池田昌司 (筑波大学) Simulation and Theoretical Study of Glass Transition of 4d Hard Spheres
8. 齊藤国靖 (京都大学) Temperature Dependence of a Deposited Lennard-Jones Nanocluster on a Crystalline Surface
9. 金子敏宏 (慶應義塾大学) Phase Transition and Crystal Structure of Lennard-Jones Particles Confined in Slit Pores
10. 江里綾子 (お茶大物理) Rising of a Two-Dimensional Bubble
11. 狩野康人 (京都大学) An Analysis of Kirkwood Superposition Approximation in Multi-Component Hard Sphere Mixture
12. 秋山良 (九州大学) Attractive Interaction between Like-Charged Colloidal Particles in Electrolyte Solution
13. 古沢浩 (高知工科大学) Discriminating One-Dimensional Hard Rod Systems by Local Fluctuations
14. 末松安由美 (九州大学) Liquid-Solid Transitions in Lennard-Jones-Gauss Systems
15. 宮田竜彦 (分子科学研究所) Theoretical Study on Thermodynamic Stability of Micelles: MD/3D-RISM Approach
16. 吉留崇 (京都大学) Hydrophobicity at Low Temperatures and Cold Denaturation of a Protein