

粗視化分子シミュレーションを用いた油滴駆動の分子モデリング

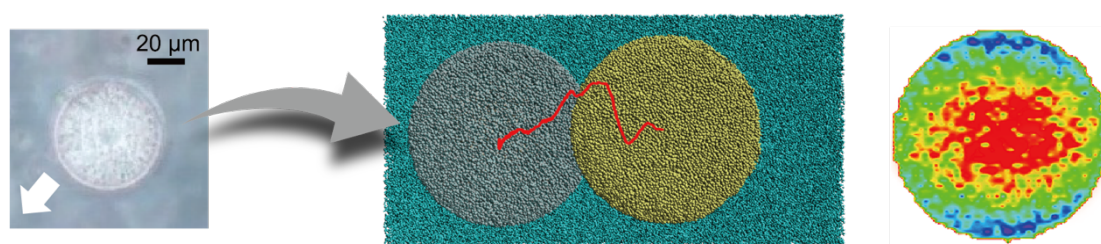
(慶應大理工) 佐々木 謙・石渡 悠幹・上野 和輝・小島 知也・伴野 太祐・○荒井 規允

Molecular Modeling of Active Oil Droplet Propulsion Using Coarse-Grained Molecular Simulation (*Keio University*) Ken Sasaki, Yuuki Ishiwatari, Kazuki Ueno, Tomoya, Kojima, Taisuke Banno, ○Noriyoshi Arai

This study employed dissipative particle dynamics (DPD) simulations to investigate the self-propelled motion of oil droplets in water–oil–surfactant systems. It is the first attempt to replicate self-propulsion models of oil droplets at the molecular level, contrasting previous simulations focused on Brownian motion and hydrodynamic behavior of colloidal particles. The DPD model reproduced droplet propulsion and visualized internal Marangoni flow, showing that larger droplet radii and more significant interfacial tension differences increase propulsion speeds. Additionally, surfactants with more potent oil–oil repulsion enhanced propulsion speed, suggesting that surfactant-induced local structures are crucial for self-propulsion.

Keywords : Active matter; Oil droplet; Molecular Simulation; Dissipative Particle Dynamics

本研究では、粗視化分子シミュレーションを用いて、水-油-界面活性剤系における油滴の自己駆動現象を調べた¹⁾。ブラウン運動やコロイド粒子の流体力学的挙動に焦点を当てたこれまでの研究とは対照的に、油滴の自己駆動現象を分子レベルのシミュレーションで再現した。粗視化分子シミュレーションの一種である DPD 法によって、油液滴駆動における内部のマランゴニ流を可視化し、液滴半径が大きく、界面張力の差が大きいほど推進速度が速くなることを示した。さらに、より強力な油-油反発を持つ界面活性剤が推進速度を向上させたことから、界面活性剤による局所構造が自己推進に重要であることが示唆された。



1) K. Sasaki, Y. Ishiwatari, K. Ueno, T. Kojima, T. Banno, N. Arai, *Chem. Phys. Lett.* **2024**, 857, 141680.