

離子液滴在電場下的形變與力學關係

Wei-Chun Lin¹, Bo-Yu Shih¹, Alice Hu², Yu-Chieh Lo³, and Hsuan-Teh Hu¹

¹ 國立成功大學土木工程系

² 香港城市大學機械工程系

³ 國立交通大學材料科學與工程學系
a2402882@gmail.com

科技部計畫編號: MOST 106-2221-E-009-074 MOST 107-2625-M-006-007

摘要

離子液體是液態的離子化合物，由有機陽離子和無機或有機陰離子藉由庫倫靜電吸引力組成，具有低揮發性、高熱穩定性，在生物、化工等領域做為溶劑使用，以減少有機溶劑對於環境的污染，因此離子液體也被稱為綠色溶劑。近年來環保意識的提升，對於離子液體的研究量也逐年上升，離子液體是具有前瞻性的新科技。

目前離子液體的研究多數針對特定的實驗現象或物理、化學性質，少有在奈米尺度下針對力學行為的研究，在液體變形行為過大和尺度過小時現有的電流體動力學理論不足夠解釋變形的現象，實驗方面由於尺度過小難以精確的在奈米尺度下控制液體。

為了瞭解離子液體在奈米尺度下的大變形行為，本研究用分子動力學模擬液滴在電場下的拉伸行為，建立簡單且較為通用的高分子離子液體模型，分析施加不同外加電場下受拉伸時的流場變化、液體變形與其中的力學行為。並改變溫度和透過統計力學得到液體的表面張力、黏度，探討離子液體受拉伸至極限細度時的變化與表面張力、黏度的關係。

關鍵詞：離子液體、分子動力學、電場

1. Introduction

離子液體[1-3]由於低揮發性、高熱穩定性、高導電度等特質運用在生物、化工等領域做為溶劑或電解質，離子液體逐漸取代原本的有機溶劑，離子液體可依所需的物理化學性質來設計不同陽離子與陰離子的組合，因此離子液體溶劑也被稱為設計者溶劑是一個具有前瞻性和未來潛力的新興科技。離子液體電流體動力學研究[4-6]顯示藉由電場操縱離子液滴的可能性，可以控制溶有特定溶質的離子液體形狀，幫助實驗的操作，做為電解液可透過操作離子液體變形而控制電路中電流的開關。

離子液滴在電場下的電流體研究[6-10]，目前大多使用流體力學加上電磁學理論，做連體力學的模擬或建立數學模型的研究，再配合動力學分析電場對液滴的影響，研究顯示液體的黏度、表面張力、介電常數、電導率、密度等液體的物理性質是影響電場下離子液體的重要參數。本研究以分子動力學[11-15]作為模擬與分析的理論基礎在更小尺度下進行模擬，透過原子體系的運動，探討液滴變形中原子的受力行為和液體中陽離子和陰離子運動的變化，針對奈米尺度下分子的行為研究。

圖 1 為在電子顯微鏡 (transmission electron

microscopy) 中發現離子液體 (2-dimethyl-3-propylimidazolium-bis(trifluoromethylsulphonyl)imide) 在電場下形成雙錐結構，其中由約 20 奈米的通道連結，在此實驗中，兩個電極成為流體儲存槽，電極不再為自由邊界，典型的泰勒錐模型[16, 17]不能解釋此實驗觀察到的結構及其物理行為。在這項研究中，我們使用 MD 模擬來研究 10 nm 的離子液滴在電場下的電流體動力學行為，重點關注影響奈米通道直徑的因素，液體的表面張力和黏度隨著溫度的升高而降低，藉由改變溫度和電場，探討電場、表面張力和黏度對離子液體在電場下奈米通道的尺度變化影響，這項研究的結果有助於解釋實驗中離子液體在電場下形成的雙錐結構，以及在奈米打印技術、電紡絲等電流體工程[18, 19]中，提供參數控制方面更好操作策略。

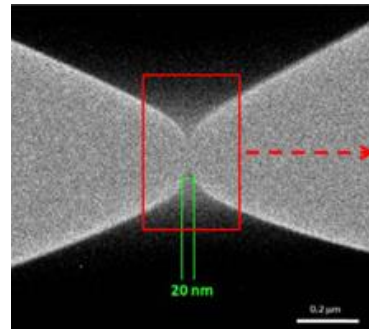


圖 1 電子顯微鏡下離子液體在電場下形成雙錐結構

2. Materials and Methods

大多數的工程用離子液體都屬於長鏈高分子結構，本研究不涉及化學反應，離子中電荷不隨著反應而轉移，我們選擇創造虛構的分子，並保留長鏈的特徵，以簡單的鏈狀分子做模擬，如圖 2，長鏈分子由 10 顆原子所組成，每顆原子質量相同，其中第三顆原子帶有一個正電荷或是負電荷，量值同電子電荷。MD 模擬使用 Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator (LAMMPS) 軟體，分子間勢能使用 Lennard-Jones 和 Coulombic 勢的組合(式 1)截止半徑為 7Å，分子中的分子鏈勢能以 Finite-extensible-nonlinear-elastic (FENE) 勢能(式 2)模擬，參考惰性氣體 Ar 質量與勢能，本模型原子量設置為 40，為了模擬液體較大的吸引力，選用較大的 ϵ 值，經由試務法大量嘗試不同的參數組合，得到 Lennard-Jone 勢能函數參數 $\epsilon=0.27$ eV、 $\sigma=3$ Å，FENE 勢能函數參數 $K=0.09$ eV/Å²、 $R_0=8.3$ Å 表現出最佳的模擬效果，計算的時間步長是 1 fs。

對於初始條件，我們需要沒有電場下穩定平衡狀態

的離子液滴，是一個在給定溫度下的球形配置。最初 800 個陽離子和 800 個陰離子在具有周期性邊界條件的立方體盒中，模擬盒足夠大（400×400×400Å）排除週期性條件的影響並允許分子在真空中模擬環境中形成 10 nm 液滴(圖 2)，MD 計算使用 NVT 系綜溫度設定為 2100 K 運行 200000 fs 進行平衡，如圖 3。接著改變不同溫度，以 1800 K 到 3600 K 間隔 300 K，運行 100000 fs 進行平衡，加入固定電場 0.04 volt/Å 至 0.16 volt/Å 間隔 0.03 volt/Å，當存在外部電場 E 時，電場作用力 $F_i = q_i E$ 根據其電荷 q_i 施加在每個原子上，測量原子間的力量變化以及原子中細度隨時間的變化。

$$E(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] + \frac{Cq_i q_j}{r} \quad (1)$$

$$E(r) = -0.5KR_0^2 \ln \left[1 - \left(\frac{r}{R_0} \right)^2 \right] + 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] + \epsilon \quad (2)$$

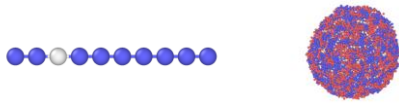


圖 2 離子液體分子與液滴示意圖

黏度[20, 21]根據 Green Kubo 法[22, 23]如式 3，其中 η 為粘度，V 為體積， K_B 為波爾茲曼常數 T 為絕對溫度， P_{xy} 為系統剪切應力，使用 NPT 系綜和週期性邊界計算，消除液滴表面的影響，數值積分採用 Trapezoidal rule，積分運算 1000000 fs 得液體的黏度。

$$\eta = \frac{V}{K_B T} \int_0^\infty \langle P_{xy}(0) P_{xy}(t) \rangle dt \quad (3)$$

表面張力根據 Tolman 法[24-28]如式 4，其中 γ_p 為表面張力， $p_\perp(z)$ 為法向壓力， p_\parallel 為切向壓力，使用 NPT 系綜和週期性邊界消除三個面的邊界，再使用 NVT 系綜將一個方向的模擬盒子長度放大，另兩個方向維持週期性邊界，使模擬系統中出現上下兩個表面，猶如一個薄膜的模擬。計算三個方向的壓力值，具有週期性邊界方向的壓力值代表液體原子內部的壓力值，不具有週期性邊界方向上的壓力值代表液體原子內部的壓力加上系統與真空介面中的壓力，兩個壓力值相減算得表面張力，每 1000 fs 計算一次表面張力值，取系統平衡後 1000000 fs 計算結果平均。

$$\gamma_p = \frac{L_z}{2} (p_\perp(z) - p_\parallel(z)) = \frac{L_z}{2} \left[\langle p_z \rangle - \frac{\langle p_x \rangle + \langle p_y \rangle}{2} \right] \quad (4)$$

3. Results

施加電場之前，計算不同溫度時液體的黏度與表面張力，黏度與表面張力為在週期性邊界條件下的塊狀液體而非液滴，計算結果如圖 3。在溫度為 1800 K 至 3600 K，結果顯示黏度介於 0.009 Pa·s 到 0.002 Pa·s，表面張力介於 242 mN/m 到 493 mN/m，黏度隨溫度升高為曲線減少，溫度越高時變化幅度越小，表面張力隨溫度升高為線性遞減，兩個物理量與溫度的變化趨勢皆與大

多數的液體相同。

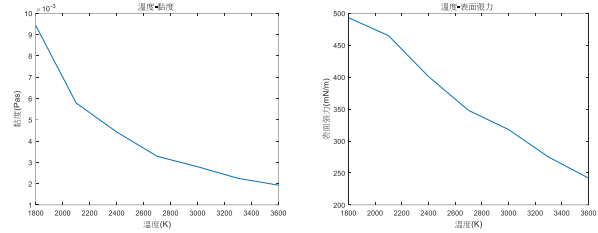


圖 3 不同溫度下液體的黏度與表面張力

以分子動力學模擬半徑為 10 nm 的液滴(16000 顆原子)在真空中施加電場的變形現象，以 NVT 系綜溫度控制在 1800 至 3600 K，加入電場在 Y 方向，大小為 0.04、0.07、0.10、0.13、0.16 volts/Å。

變形結果顯示如圖 4，當電場過大或溫度過低時(圖 4 左)，表面張力無法抵抗電場的作用力，表面的原子會直接脫離液體，液滴因原子的脫離而失去原本的電中性，所受電場造成的淨力不再為 0，若是帶有正電荷的陽離子脫離，則液滴會往負極方向移動。

當電場小或溫度高時(圖 4 右)，在任何溫度和電場大小的組合下變形行為大致相同，細度變化趨勢相同，液滴分別經歷旋轉、小變形、大變形、斷裂，溫度越高或電場越小反應時間越慢。考量工程上的應用，細度與斷裂時間是本研究的重點，如圖 5，液體在長度 30 nm 時變化速度急速增加發生大變形行為，在大約 60 nm 時斷裂。溫度越高時黏度越小液體流動性越佳，陽離子與陰離子往兩極移動的現象越大，表面張力越小液滴越不易維持球狀，越容易變形，因此溫度提高降低黏度和表面張力，液體拉伸速度加快，電場加大離子受到更大的電荷力，往兩極移動現象和變形速度都加快，更快速的發生斷裂，如表 1。其中黏度與斷裂時間呈正相關，黏度越大斷裂時間越久，在任何電場下趨勢接近直線如圖 6。

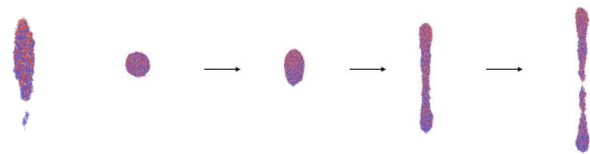


圖 4 離子液體變形示意圖

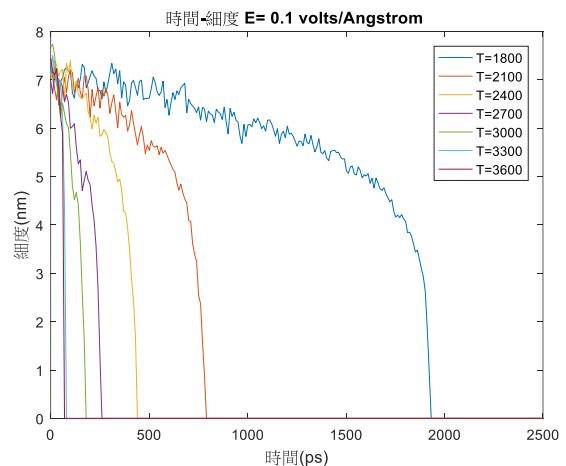


圖 5 液體細度隨時間變化圖

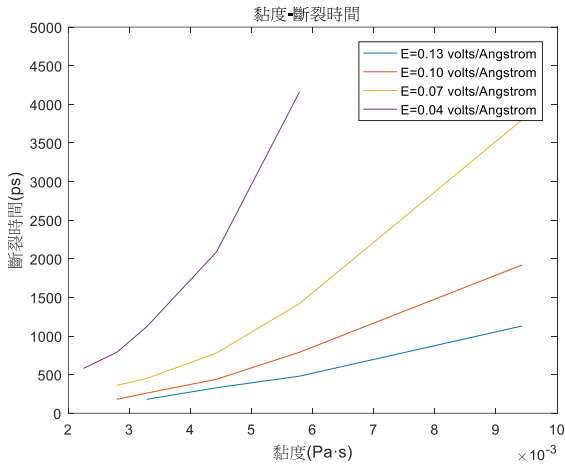


圖 6 黏度與斷裂時間關係圖

表 1 不同溫度電場下液體斷裂時間表

電場/溫度	1800	2100	2400	2700	3000	3300	3600
0.16	780	340	200	130	80	60	40
0.13	1130	480	330	180	120	90	20
0.1	1920	790	440	260	180	70	70
0.07	3800	1420	780	450	360	220	80
0.04	>8000	4160	2090	1120	790	580	150

為了更加了解離子液滴在電場下的變形以及力學行為，我們計算陰、陽離子中帶有電荷的原子質心位置隨時間的變化以及速度場、力場隨時間的變化，以 NVT 系綜溫度控制在 2700 K，加入電場在 Y 方向大小為 0.04 volts/Å，此液體斷裂時間為 1120 ps。

如圖 7 在 Y 方向電場作用下正電荷往正 Y 方向移動，負電荷往負 Y 方向移動，整個系統所受外力互相抵消，合力為 0，根據動量守恆定律，系統質心維持原本的運動狀態，即為靜止。在此分子模擬中，平衡階段正負電荷質心位置與系統質心有一小偏差值，正電荷質心初始 X 方向位置為 -0.014 nm，Z 方向位置為 -0.033 nm，負電荷質心初始 X 方向位置為 0.010 nm，Z 方向位置為 0.048 nm，液滴直徑為 10nm，正負電荷質心偏移整體質心量僅有直徑的 0.1-0.5%，但此偏移量不會消失，在液體斷裂前都在中心上下震盪。帶有電荷的原子質心會依正負電荷往電場方向(Y 方向)移動，在斷裂前最大移動到 3.5 nm 處，此時液體總長約為 62 nm，約電荷質心位置偏離中心約為總長的 0.05%。離子液體長度變化速率隨時間會逐漸加快，在 800 ps 時長度為 20 nm，為初始直徑的 2 倍，在 1000 ps 時為 30 nm，之後會快速拉長至 62 nm，在 1120 ps 時斷裂。

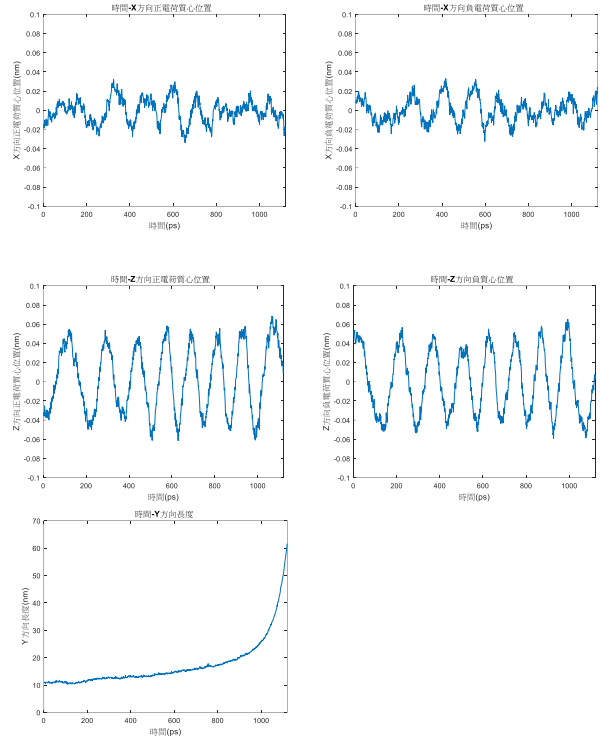


圖 7 陰、陽離子中帶有電荷的原子質心位置隨時間變化圖與長度隨時間變化圖

速度場與力場算法為將模擬盒子沿 X、Y、Z 三軸方向每 0.4 nm 切取一個網格，計算網格內原子在平均時間 10 ps 上的力和速度，再以繪圖軟體畫出向量圖，藉以分析變形行為與力和速度之間的關聯。如圖 8，時間為 0 ps 時為未加入電場的狀態，力場在表面比內部大，表面的原子由於表面張力效應會受到向內的吸引力，內部的原子受四面八方均勻的力互相抵消，因此力的量值與表面的力相比較小。如圖 9 與圖 10 速度場無特定方向，表面的原子受到較大的淨力因此速度較內部的原子大。施加電場後，液滴形狀逐漸被拉長，表面的力場依然是向內且垂直於表面方向，給予液滴向內收縮的力，內部的力場在 800 ps 前的 Y 分量大多向內，抵抗電場造成的外力，在 800 ps 後 Y 分量力場大多向外，此時與液體開始發生大變形的時間相同。

為了更清楚的了解電場力與原子間吸引力的變化，計算每 100 ps Y 分量的原子間吸引力、電荷力、合力在網格內的平均值，電荷力算法為將網格中平均時間內的靜電荷乘以電場大小，繪製如圖 10，橫軸為網格距離所有原子質心位置，位置 0 為原子質心位置，縱軸為力的大小。原子間吸引力皆為向內，在正 Y 方向為負值，負 Y 方向為正值，給予液滴抵抗電場拉伸的力，其中在 Y 方向位置最大與最小時有最大的力，即為表面張力的作用。正負電荷隨著電場逐漸往兩邊移動，正電荷往正 Y 方向，負電荷往負 Y 方向，產生與原子間吸引力相反方向的力，造成液滴的拉伸，電荷隨著時間越來越集中，電荷力逐漸增大。合力在 800 ps 前皆為向內的力，但此力為網格內的平均力，在電場的作用下仍有部分的原子向兩側移動，使液滴逐漸被拉伸，在 800 ps 後合力在位置中心附近的正 y 方向出現正值，負 y

方向出現負值，代表此時的電荷力已經與原子的內聚力互相抵銷，之後時間向外拉伸的力範圍逐漸增加，液體開始快速向外變形。從力場的變化圖知道表面張力的作用使液滴表面有強大的內聚力，表面的原子不會脫離液滴。800 ps 前內部力場雖然在平均時間網格內原子的平均力是向內作用，但整體液滴形狀仍會被拉長，帶有正負電荷的原子持續往正負極移動，在 800 ps 後電荷的集中現象使電力作用加大，突破原子間的吸引力，使液滴形狀產生大變形至斷裂。

速度場在 300 ps 內為所有原子都順時針或逆時針旋轉，此時為整個液滴的旋轉，在液體逐漸拉成橢圓形時，速度場依然具有 X、Z 方向的旋轉，但液滴整體維持橢圓而不再轉動，在 1000 ps 後，速度場沿著 Y 方向接近直線流動至斷裂。液滴整體的旋轉為初始電荷質心與所有原子的質心位置差造成，電場施加在 Y 方向，因此 X、Z 方向的電荷質心偏差會產生一力矩，造成液滴的轉動，隨著轉動使電荷質心位置正負交替，轉動方向也順逆時針交替，Z 方向的質心差較 X 方向大，因此在 Z-Y 投影的速度場轉動較為明顯。在液滴逐漸拉成橢圓形時，橢圓的轉動慣量較圓形大，產生的力矩不足以造成整個橢圓形液滴的轉動，但電荷質心偏差依然存在，因此液滴內部存在 X、Z 方向的旋轉，在液滴進入大變形階段，電荷力超過原子間的吸引力，Y 方向的力過大使速度場皆指向 Y 方向，旋轉的現象消失。

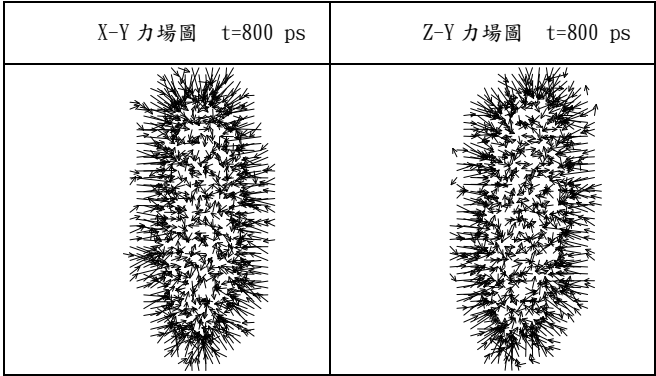
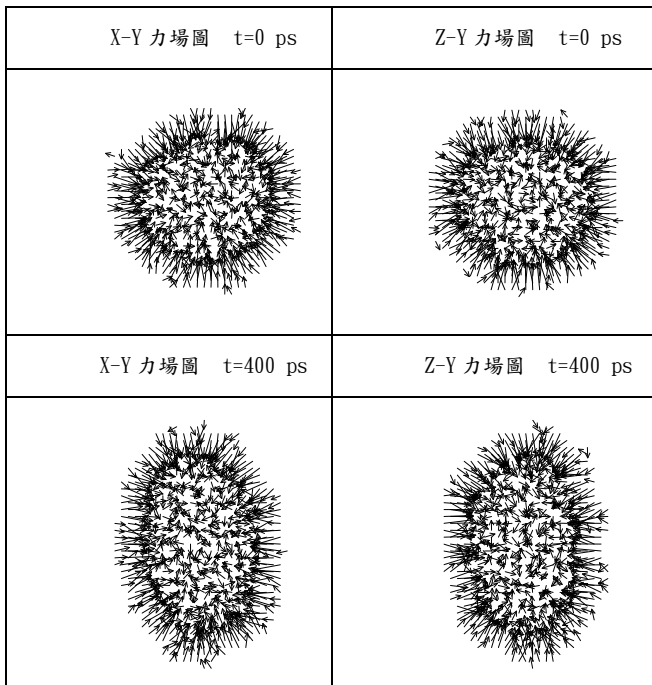
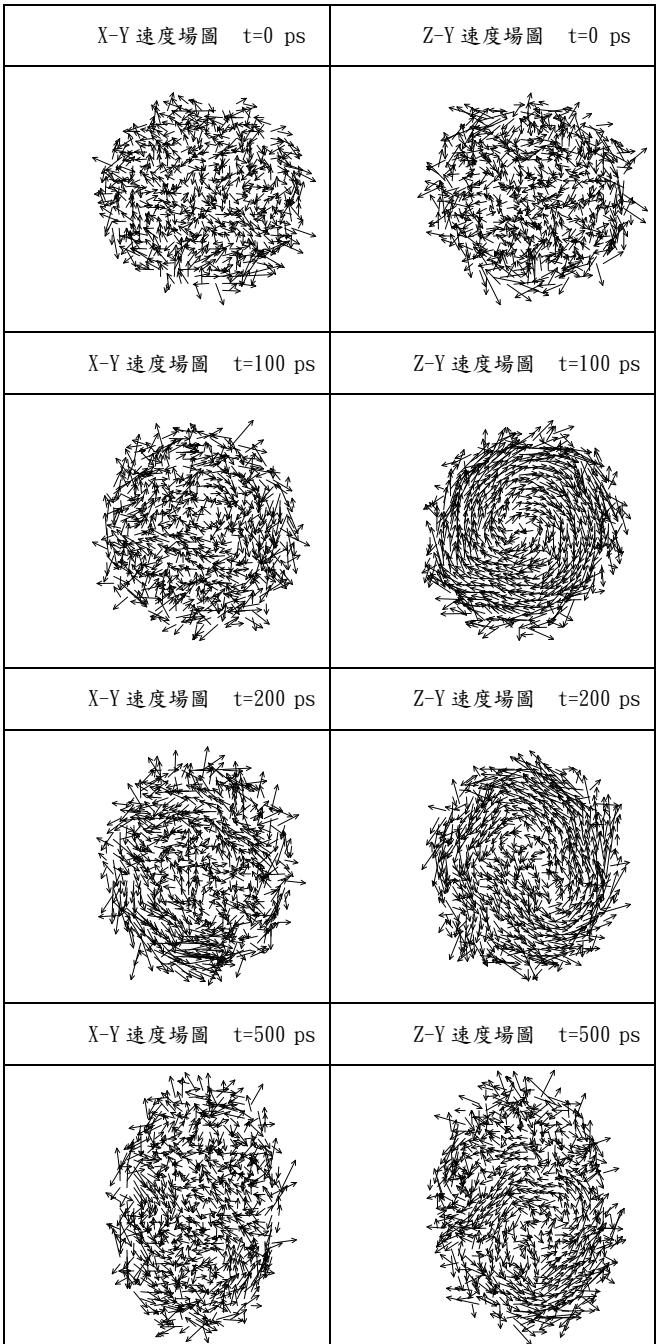


圖 8 不同時間與方向力場圖



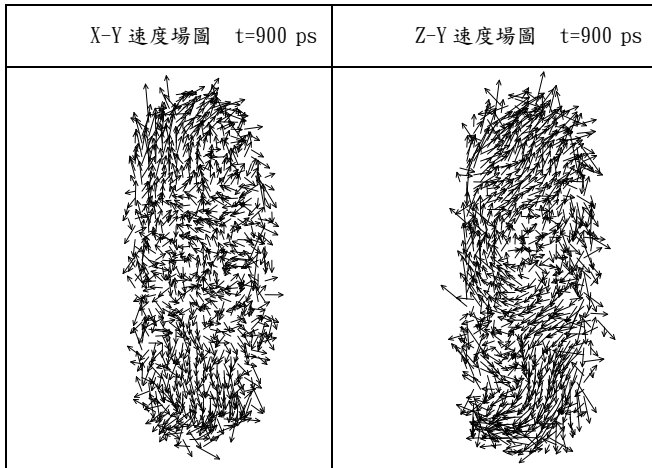


圖 9 不同時間與方向速度場圖

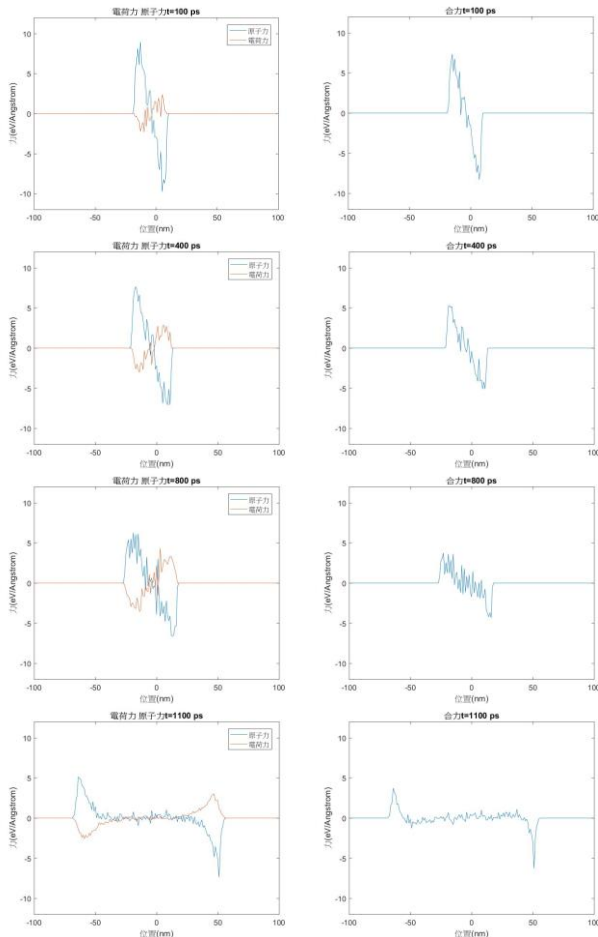


圖 10 原子間吸引力、電荷力、合力在網格內的平均值(橫軸為網格距離所有原子質心位置，位置 0 為原子質心位置，縱軸為力的大小)

4. 結論

本研究以分子動力學模擬直徑為 10 nm 的離子液滴施加電場，探討變形行為和力場跟速度場的關聯，並改變不同溫度和電場，比較液體細度變化的速率。液滴加入電場後陽離子和陰離子會依照電荷正負往電極兩端移動，帶動液體變形。電荷質心的偏移位置產生的力矩，在液體中出現旋轉的流場。在液滴變形小還維持球體狀態時，此力矩會拖動整個液滴旋轉，旋轉使電荷質心位置改變，力矩方向也會改變，造成旋轉方向和速度的改變如簡諧運動。變形長度達到原直徑的大約 3 倍時，原子間吸引力因拉長造成原子密度的降低而減弱，電荷力隨著電場造成的電荷集中現象而增強，使液滴變形快速而斷裂。改變不同的溫度和電場，溫度升高黏滯力和表面張力降低，電場的增加造成電荷力的增強，液滴斷裂時間加快，液滴變形和力學行為都相同。表面張力主要影響液滴表面分子是否會產生脫離，黏滯力主要影響斷裂時間，若表面張力夠大即使液滴表面分子不會脫離，黏滯力與斷裂時間呈正相關，黏滯力越大斷裂時間越久，在任何電場下趨勢接近直線。本研究中真空下液滴受電場的拉伸現象會持續至斷裂，未能找到平衡狀態，還不能完整的解釋圖 1 中的實驗現象，但本研究仍能更加瞭解電場中液滴的變形和力學關係，並且有助於靜電噴霧和電泳等複雜的電流體動力學問題的模擬。

5. 致謝

感謝成功大學土木系、交通大學材料系、科技部計畫(MOST 106-2221-E-009-074 和 MOST 107-2625-M-006-007)提供研究相關經費與資源。

6. 參考文獻

- [1] Yu G, Zhang S, Zhou G, Liu X, Chen X. Structure, interaction and property of amino-functionalized imidazolium ILs by molecular dynamics simulation and Ab initio calculation. *AICHE Journal* 2007;53(12):3210-21.
- [2] Johnson KE. What's an Ionic Liquid? 2007.
- [3] SuoJiang Z, XiaoMin L, XiaoQian Y, HaiFeng D, XiangPing Z. Frontiers, progresses and applications of ionic liquids. *SCIENCE IN CHINA PRESS* 2009;39:1134-44.
- [4] Ahn MM, Yang YD, Im DJ, Oh JM, Kang IS. Selective cation depletion from an ionic liquid droplet under an electric field. *Journal of Molecular Liquids* 2017;244:117-23.
- [5] Lee DW, Im DJ, Kang IS. Measurement of the Interfacial Tension in an Ionic Liquid–Dielectric Liquid System Using an Electrically Deformed Droplet. *The Journal of Physical Chemistry C* 2013;117(7):3426-30.
- [6] Xie L, Yang L-j, Qin L-z, Fu Q-f. Temporal instability of charged viscoelastic liquid jets under an axial electric field. *European Journal of Mechanics - B/Fluids* 2017;66:60-70.

- [7] Zhang J, Song Y, Li D. Electrokinetic motion of a spherical polystyrene particle at a liquid-fluid interface. *J Colloid Interface Sci* 2018;509:432-9.
- [8] Wei W, Zhang Y, Gu Z. Deformation and mechanical behavior of electrohydrodynamic droplet under external electric field. *Chinese Science Bulletin (Chinese Version)* 2013;58(3):197.
- [9] Sheikholeslami M, Soleimani S, Ganji DD. Effect of electric field on hydrothermal behavior of nanofluid in a complex geometry. *Journal of Molecular Liquids* 2016;213:153-61.
- [10] Iwai T, Yoshinaga T. Transition of breakup modes for a liquid jet in a static electric field. *Proceedings of the Estonian Academy of Sciences* 2015;64(3):449.
- [11] Zong D, Yang Z, Duan Y. Wettability of a nano-droplet in an electric field: A molecular dynamics study. *Applied Thermal Engineering* 2017;122:71-9.
- [12] Zhao Y, Dong K, Liu X, Zhang S, Zhu J, Wang J. Structure of ionic liquids under external electric field: a molecular dynamics simulation. *Molecular Simulation* 2012;38(3):172-8.
- [13] Wang B-B, Wang X-D, Duan Y-Y, Chen M. Molecular dynamics simulation on evaporation of water and aqueous droplets in the presence of electric field. *International Journal of Heat and Mass Transfer* 2014;73:533-41.
- [14] Mendez-Morales T, Carrete J, Cabeza O, Gallego LJ, Varela LM. Molecular dynamics simulations of the structural and thermodynamic properties of imidazolium-based ionic liquid mixtures. *J Phys Chem B* 2011;115(38):11170-82.
- [15] Langroudi SMM, Ghassemi M, Shahabi A, Nejad HR. A molecular dynamics study of effective parameters on nano-droplet surface tension. *Journal of Molecular Liquids* 2011;161(2):85-90.
- [16] Taylor G. Studies in Electrohydrodynamics. I. The Circulation Produced in a Drop by Electrical Field. *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences* 1966;291(1425):159-66.
- [17] Taylor G. Disintegration of Water Drops in an Electric Field. *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences* 1964;280(1382):383-97.
- [18] Park J-U, Lee JH, Paik U, Lu Y, Rogers JA. Nanoscale Patterns of Oligonucleotides Formed by Electrohydrodynamic Jet Printing with Applications in Biosensing and Nanomaterials Assembly. *NANO LETTERS* 2008;8:4210-6.
- [19] Fenn JB, Mann M, Meng CK, Wong SF, Whitehouse CM. Electrospray Ionization for Mass Spectrometry of Large Biomolecules. *Science* 1989;246(4926):64-71.
- [20] Murshed SMS, Estellé P. A state of the art review on viscosity of nanofluids. *Renewable and Sustainable Energy Reviews* 2017;76:1134-52.
- [21] Koca HD, Doganay S, Turgut A, Tavman IH, Saidur R, Mahbubul IM. Effect of particle size on the viscosity of nanofluids: A review. *Renewable and Sustainable Energy Reviews* 2018;82:1664-74.
- [22] Tretiakov KV, Scandolo S. Thermal conductivity of solid argon from molecular dynamics simulations. *J Chem Phys* 2004;120(8):3765-9.
- [23] Kirova EM, Norman GE. Viscosity calculations at molecular dynamics simulations. *Journal of Physics: Conference Series* 2015;653:012106.
- [24] Werth S, Horsch M, Hasse H. Molecular simulation of the surface tension of 33 multi-site models for real fluids. *Journal of Molecular Liquids* 2017;235:126-34.
- [25] Sun L, Li X, Hede T, Tu Y, Leck C, Agren H. Molecular dynamics simulations of the surface tension and structure of salt solutions and clusters. *J Phys Chem B* 2012;116(10):3198-204.
- [26] Sinha N, Singh JK. Effect of nanoparticles on vapour-liquid surface tension of water: A molecular dynamics study. *Journal of Molecular Liquids* 2017;246:244-50.
- [27] Peng T, Li Q, Chen J, Gao X. Quantitative analysis of surface tension of liquid nano-film with thickness: Two stage stability mechanism, molecular dynamics and thermodynamics approach. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications* 2016;462:1018-28.
- [28] Daivis PJ, Evans DJ. Comparison of constant pressure and constant volume nonequilibrium simulations of sheared model decane. *The Journal of Chemical Physics* 1994;100(1):541-7.

Shape Deformation and Mechanical Relationship of Ionic Liquid Droplet under An Electric Field

Wei-Chun Lin¹, Bo-Yu Shih¹, Alice Hu²,
Yu-Chieh Lo³, and Hsuan-Teh Hu¹

¹ Department of Civil Engineering, National Cheng Kung University, Tainan, 70101, Taiwan

² Department of Mechanical and Biomedical Engineering, City University of Hong Kong, Hong Kong, China

³ Department of Materials Science and Engineering, National Chiao Tung University, Hsinchu, 30010, Taiwan

Abstract

Ionic liquid is an ionic compound in liquid state. It consists of organic cations and inorganic or organic anions by Coulomb electrostatic attraction. It has low volatility and high thermal stability. It is used as a solvent in biological and chemical fields to reduce organic solvents for the environment. Pollution, so ionic liquids are also known as green solvents. In recent years, environmental awareness has increased, and research on ionic liquids has increased year by year. Ionic liquids are forward-looking new technologies.

At present, the research of ionic liquids is mostly directed to specific experimental phenomena or physical and chemical properties. There are few studies on mechanical behavior at the nanometer scale. The current electrohydrodynamics theory is not enough to explain the deformation when the liquid deformation behavior is too large and the scale is too small. In the experimental aspect, it is difficult to accurately control the liquid at the nanometer scale because the scale is too small.

In order to understand the large deformation behavior of ionic liquids at the nanometer scale, this study used molecular dynamics to simulate the tensile behavior of droplets under electric field, and established a simple and more general polymer ionic liquid model to analyze the application of different applied electric fields. Flow field changes during stretching, liquid deformation and mechanical behavior therein. The temperature and the surface tension and viscosity of the liquid were obtained by statistical mechanics. The relationship between the change of the ionic liquid and the surface tension and viscosity was studied.

Keywords: ionic liquid, molecular dynamics, electric field

離子液滴在電場下的形變與力學關係

Wei-Chun Lin¹, Bo-Yu Shih¹, Alice Hu², Yu-Chieh Lo³, and Hsuan-Teh Hu¹

¹ 國立成功大學土木工程系

² 香港城市大學機械工程系

³ 國立交通大學材料科學與工程學系

a2402882@gmail.com

科技部計畫編號: MOST 106-2221-E-009-074 MOST 107-2625-M-006-007

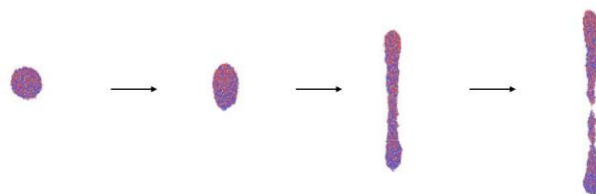
離子液體是液態的離子化合物，由有機陽離子和無機或有機陰離子藉由庫倫靜電吸引力組成，具有低揮發性、高熱穩定性，在生物、化工等領域做為溶劑使用，以減少有機溶劑對於環境的污染，因此離子液體也被稱為綠色溶劑。近年來環保意識的提升，對於離子液體的研究量也逐年上升，離子液體是具有前瞻性的新科技。

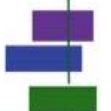
目前離子液體的研究多數針對特定的實驗現象或物理、化學性質，少有在奈米尺度下針對力學行為的研究，在液體變形行為過大和尺度過小時現有的電流體動力學理論不足夠解釋變形的現象，實驗方面由於尺度過小難以精確的在奈米尺度下控制液體。

為了瞭解離子液體在奈米尺度下的大變形行為，本研究用分子動力學模擬液滴在電場下的拉伸行為，建立

簡單且較為通用的高分子離子液體模型，分析施加不同外加電場下受拉伸時的流場變化、液體變形與其中的力學行為。並改變溫度和透過統計力學得到液體的表面張力、黏度，探討離子液體受拉伸至極限細度時的變化與表面張力、黏度的關係。

關鍵詞：離子液體、分子動力學、電場





中華民國力學學會年會暨

第 42 屆全國力學會議授權同意書

為推廣科技部優良成果，積極協助產業技術升級，提升我國科技水準，厚植國家經濟發展基礎，並促進產學合作的機會，茲同意無償授權科技部工程科技推展中心將本人於

中華民國 107 年 11 月 23-24 日，由國立台北科技大學主辦

會議名稱：2018 中華民國力學學會年會暨第 42 屆全國力學會議

口頭發表論文

海報展覽

專題演講

之錄影檔、聲音檔、照片、投影片、論文摘要及全文內容，予以數位典藏並上網公開播放。本資料僅供科技部工程司產學媒合之目的使用。

立同意書人：_____

身分證字號：_____

聯絡電話：_____

中華民國 年 月 日

科技部工程科技推展中心

ENGINEERING & TECHNOLOGY PROMOTION CENTER,

