

プロジェクト名(タイトル):

微細構造表面における濡れ過程の数値シミュレーション

利用者氏名:

○大西 順也(1)

理研における所属研究室名:

(1) 計算科学研究センター 複雑現象統一的解法研究チーム

1. 本プロジェクトの研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

近年、MEMS (Micro Electro Mechanical Systems) 技術の発達・普及に伴い、固体表面に微細構造(ここではナノ・マイクロメートルオーダーのものを考える)を成形することが容易になってきている。また、微細構造を利用することで、撥水、防汚、摩擦抵抗低減、高熱流束除熱、高速乾燥など、材料設計だけでは実現の難しい、新しい表面機能を創生する試みが数多くなされている。しかしながら、現時点においては、微細構造により発現する表面機能を予測・制御するための方法論は確立されていない。したがって、今後、産業応用に資する高性能・高耐久・高堅牢を兼ね備えた微細構造表面を実現するには、微細構造内外の流動・伝熱・気液界面運動の総合的な動的挙動、すなわち、濡れ現象がどのような機構で発現するのか、あるいは逆に、望ましい濡れ挙動を実現するにはどのような微細構造、材料が適しているのかといった問題を解決していく必要がある。

本研究では、大規模並列計算技術を活用することで、流動・伝熱・気液界面挙動の相互干渉による非定常マルチスケール・マルチフィジクス現象に対する直接数値シミュレーションを実現し、微細構造表面上の濡れ現象を機構論的に解明するとともに、微細構造の形状・寸法・配置に関するパラメトリック解析を実施し、表面機能の発現や高度化に必要な微細構造の設計要件を明らかにする。

2. 具体的な利用内容、計算方法

本年度は、自作コードの動作確認を目的として、微細構造表面における液滴衝突過程のシミュレーションを実施した。

微細構造としては、平板上に、正方格子状に配置した角柱を考えた。そして、角柱の断面(一辺 10 μm の正方形)および高さ(50 μm)を固定し、角柱間の間隔を変化させることとした(それぞれ 20, 40 μm)。また、間隔の異なる2つの微細構造を接続した複合的な微細構造も試した。初期形状(直径 0.125 mm)および初期速度(1 m/s)が同一の液

滴をそれぞれの微細構造表面に衝突させ、その挙動を観察した。

なお、液滴の物性値は水、微細構造の物性値は FDTD コーティングされたシリコン基板を想定し、設定した。

3. 結果

角柱間隔が広い場合、液滴は角柱の内部まで進行し、平板部まで到達したのち、微細構造内部で安定化した状態(Wenzel 状態)となった。一方、角柱間隔が狭い場合は、液滴はいったん微細構造内部に進行するものの、途中で反転し、最終的には微細構造から離脱した。また、角柱間隔の異なる微細構造を接続した複合構造の場合は、角柱間隔が広い構造の側に進行し、やはり微細構造内部で安定化した状態となった。

4. まとめ

上記の計算結果は、定性的には実験的観測と一致し、妥当であることが確認できた。実験と定量的な比較を行うためには、解析領域を広げたり、計算の時間・空間解像度を上げたりする必要があると予想される。また、今回は接触角を一定と仮定したが、動的なモデルの導入が必要となることも考えられる。

5. 今後の計画・展望

今後は、計算の時間・空間解像度の向上を目的として、より大規模な計算を実施することになると予想されるが、そのために重要となる並列性能等の検証を実施する予定である。また、動的接触角モデル等、新しい物理モデルを導入し、その妥当性を検証する予定である。検証計算の後には、角柱の大きさや形状、間隔等に対するパラメトリックスタディを実施し、微細構造とその上での濡れ現象の相関性について解析を進める予定である。

2022年度 利用報告書

【口頭発表】

Onishi, J. and Shikazono, N., "Numerical Study on the Effect of Cross-sectional Shape on the Capillary Flow in Microchannels," The 13th Asian Computational Fluid Dynamics Conference (ACFD), P00137, Jeju, Korea, 16-19 October (2022).