

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、微細構造内部における毛管流れのシミュレーションを実施した。

微細構造としては、断面が円形、または、矩形を持つ閉流路、および、断面が矩形を持つ開流路を考えた。そして、断面形状の幾何学的パラメータ(円管の場合は直径(10 - 30 μm), 矩形管の場合は横幅(10 - 60 μm), 高さ(10 - 30 μm)), および、接触角を変えた時の、流路内部における毛管流れの速さを評価した。また、その際に見られるメニスカス界面形状や、メニスカス内部の流動様式についても比較検討した。

なお、毛管流れの速さの評価においては、Lucas-Washburn 理論における mobility parameter を用いた。また、物性値は、水-水蒸気の二相系を想定し、設定した。

3. 結果

まず、閉流路の場合について述べる。円管の場合、接触角が大きい条件では、数値シミュレーションで得られた mobility parameter が、Lucas-Washburn 理論による予測値とよく一致することが確認された。一方、接触角が小さい条件では、両者にずれがみられた。これは、接触角が小さい場合、濡れ広がり速度が大きいため、接触線の動的な性質が現れたためと考えられる。実際、数値シミュレーションで観測された動的接触角を用いることで、数値シミュレーションと理論予測値がよく一致することが確認された。矩形の場合についても、やはり理論解析による予測値とよく一致することが確認された。

つぎに、開流路の場合について述べる。断面が矩形の開流路について mobility parameter を数値シミュレーションで評価したところ、気液界面における速度境界条件に対して”no-slip 条件”を適用することで得られる理論予測値と一致することが確認された。なお、このことは、既存の実験的観測と整合している。また、メニスカス内部の流動様式を検証したところ、気液界面における速度は”no-slip 条件”ではなく、”no-stress 条件”を満たしていることが確認された。この結果から、”no-slip 条件”に基づいた理論予測値は、実験計測値や数値シミュレーションによる評価値と一致するものの、物理的なメカニズムによるものではないことがわかった。

4. まとめ

様々な流路における毛管流れについて、メニスカス形状や内部の流動様式を数値シミュレーションで再現した。

5. 今後の計画・展望

今後は、矩形開流路を複数持つような固体表面に対して、その実効的な濡れ性について調査する予定である。

2023 年度 利用研究成果リスト

【口頭発表】

Onishi, J., " Numerical simulation of droplet impact using a contact-line friction model," The 14th Asian Computational Fluid Dynamics Conference (ACFD), Bengaluru, India, 30 October – 2 November (2023).

Onishi, J., " Capillary flow in open microchannels with rectangular cross-sections: a numerical study," 76th Annual Meeting of the Division of Fluid Dynamics, Washington, DC, United States, 19-21 November (2023).