

課題名(タイトル):

Numerical simulation of wetting processes on patterned surfaces

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. 本課題の研究の背景、目的、関係する課題との関係
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, 接触線摩擦モデルを用いた液滴衝突過程シミュレーションを実施した。

本研究で用いる接触線摩擦モデルでは, Voinov-Cox 理論に基づいて, 接触角を接触線速度の関数として与える。Voinov-Cox 理論では, 接触角とその平衡値の3乗の差が, 接触線速度に比例すると仮定する。また, その比例定数を接触線摩擦係数と呼ぶ。本モデルは, 接触線運動に関するパラドックスを解決するために導入された巨視的モデルであるが, 実現象をよく再現することなどから, 注目を集めている。また, 分子運動論との関連なども議論されている。

本研究では, 壁面に衝突する液滴の濡れ広がり挙動を考

え, 数値シミュレーションを実施し, 実験や他の数値シミュレーションの結果と比較することで, 接触線摩擦モデルの妥当性を検証した。

3. 結果

本シミュレーションにおいて, 接触線摩擦モデルの有無による影響を調査したところ, 接触線摩擦モデルがない場合は液滴が素早く滑落するのに対して, 接触線モデルを導入することで液滴に粘りのような効果が見られるようになった。また, 接触線摩擦係数を適当に調整することで, 液滴の滑落速度は実験の場合とほぼ同じにすることができた。なお, 接触線摩擦係数は, 流体粘性係数と同じ次元を持つが, 実験的に計測することは難しい。

また, 衝突後の液滴形状の変化について実験結果と比較したところ, 衝突直後液滴が濡れ広がる過程はよく再現されているのに対して, 液滴が収縮する速さには顕著な違いが観察された。これは, 接触線摩擦係数を濡れ広がり過程に対して最適化したためと考えられる。今後は, 収縮過程の接触線摩擦係数を濡れ広がり過程のものから変更することで, 液滴の収縮過程を精度よく再現することを試みたい。

4. まとめ

接触線摩擦モデルを導入することで, 液滴の衝突挙動がある程度再現できることが示された。

5. 今後の計画・展望

今後は, 濡れ広がり過程と収縮過程における接触線摩擦係数を変更した条件での比較検証を進める予定である。

2024 年度 利用研究成果リスト

【雑誌に受理された論文】

【会議の予稿集】

【口頭発表】

【ポスター発表】

【その他(著書、プレスリリースなど)】