

科学研究費助成事業 研究成果報告書

令和 6 年 6 月 25 日現在

機関番号：82401

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2019～2023

課題番号：19K11999

研究課題名(和文) 微細構造表面における濡れ現象の解明とモデリング

研究課題名(英文) Numerical Simulation and Modelling of Wetting Phenomena on Surfaces with Micro/Nano-Structures

研究代表者

大西 順也 (Onishi, Junya)

国立研究開発法人理化学研究所・計算科学研究センター・研究員

研究者番号：20376495

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,400,000円

研究成果の概要(和文)：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ことを目的として、数値シミュレーションコードを開発し、様々な問題に適用した。その結果、本研究で開発した数値シミュレーションコードは、微細構造表面上における気液界面挙動をよく再現することを確認した。また、矩形流路内におけるキャピラリー流れの数値シミュレーションでは、先端部の移動速度や幾何学的構造、内部流動構造を明らかにした。さらに、接触線摩擦モデルを用いた液滴衝突シミュレーションでは、接触線の前進過程と後退過程で摩擦係数を変えることで、より実験結果を忠実に再現できる可能性があることを示した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究は表面機能の発現機構に関する初歩的な取り組みである。本研究では、接触線運動のモデル化に関して流体力学に基づいた観点を採用することで、実験結果を再現することに成功した。しかしながら、まだ未解明な点が残っており、今後は分子動力学的な観点の導入などの新しい発展が期待される。一方、工学的な応用に関しては、このような取り組みを継続することで、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機能が実現されると期待できる。また、今後は更なる大規模な数値シミュレーションの実施が必要であり、その実現のためには、ハードウェアの特性を活用したソフトウェアの開発が必須である。

研究成果の概要(英文)：A numerical simulation code was developed and applied to various problems in order to clarify the design requirements of microstructures necessary for the development and enhancement of surface functions.

As a result, it was confirmed that the numerical simulation code developed in this study reproduced well the gas-liquid interfacial behavior on the microstructured surface. Numerical simulations of capillary flow in a rectangular channel revealed the velocity, geometry, and internal flow structure at the liquid front. Furthermore, droplet impact simulations using a contact line friction model showed that changing the friction coefficient between the advancing and receding processes of the contact line may reproduce the experimental results more faithfully.

研究分野：数値流体工学

キーワード：ハイパフォーマンス・コンピューティング 濡れ 微細構造 流体工学 混相流

1. 研究開始当初の背景

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。また、微細構造の静的な性質に比べ、動的な性質は不明な点が多い。たとえば、柱状の微細構造を付加することで撥水性表面を実現できることはよく知られているが、同じような撥水性能（液滴の静止状態における接触角で評価することが多い）を持つ表面であっても、表面上の液滴の移動しやすさ（液滴が滑落し始めるときの基盤傾斜角で評価することが多い）は微細構造の詳細や材料により大きく異なることがある。

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。

2. 研究の目的

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正常マルチスケール・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ことを目的とする。

3. 研究の方法

本研究で実施するシミュレーションにおいては、気液界面の移動・変形、気液界面における物理量変化・保存則等を精度よく扱えるような計算手法が必要である。本研究では、先行研究を参考に、計算精度、計算効率、計算プログラムの開発コスト等の観点から、次のような計算手法を採用する。まず、気液界面の追跡にはレベルセット法 (Level-set method, LSM) を採用する。LSM はスカラー関数を用いて界面の位置・形状を陰的に表現する手法の1つであり、気液二相流解析に限らず多くの分野で活用されている。利点としては、移動・変形する気液界面の運動を、固定格子の上で扱うことができることなどが挙げられる。一方、特に気液二相流解析の分野においては、質量保存則を満足しないことが問題となることが多い。この問題に対しては、レベルセット関数の微分値から体積変化を評価することで、レベルセット関数の値を補正するといった方法を用いることとする。次に、気液界面における境界条件の処理には Ghost Fluid 法 (GFM) を採用する。GFM は、気液界面と格子が一致していなくても、境界条件を精度よく課することができる手法であり、Dirichlet 条件、Neumann 条件、Jump 型条件等の各種境界条件に対して適用することができる。GFM の特徴は界面における物理量の不連続な変化を sharp に扱えることである。なお、本研究では、GFM と同様の手法を固体表面における境界条件（例：速度の粘着条件）等にも適用する。

濡れ現象は、大小様々なスケールを伴うマルチスケール現象である。特に、固体表面と気液界面の交差する接触線や、そこに形成される接触角の動的性質は、連続体力学や分子動力学など単一の力学原理だけでは表現することができない。本研究では、これらの動的性質については分子スケールの詳細には立ち入らず、実験観測値に基づいたモデルを用いることとする。そして、この接触線モデルを連続体力学に基づいて気液二相流れ数値シミュレーションに導入することで、微細構造内外の大規模な伝熱・流動構造、気液界面構造の解析を実現する。また、開発したモデルとシミュレーションコードの妥当性については、液滴の衝突過程などに関する既往実験との定量的・定性的な比較検証を通して実施する。

開発した数値シミュレーション手法を用いて、濡れ現象の発現過程における微細構造内部の運動状態と、微細構造や材料特性が運動状態に及ぼす影響を解明する。特に、濡れ現象に関する代表的な性質に対して、様々なパラメータの影響を個別的に評価することで感度解析を実施する。

工学的な応用においては、表面近傍だけでなく、機器全体にわたる濡れ過程の解析が必要になる。そのような状況に対しては、計算機資源の観点から、微細構造を直接的に扱わない、簡易的なモデルを用いたシミュレーションの実現が望まれる。そこで、より巨視的な観点に基づいた接触線摩擦モデルの検討を行う。

4. 研究成果

(1) 数値シミュレーション手法の妥当性に関する検証

本研究で用いる数値シミュレーション手法の妥当性を検証するために、柱状構造を持つ表面に衝突する液滴のシミュレーションを実施し、結果を既存の実験結果と比較した。なお、ここで

用いた柱状構造は一辺が $300\ \mu\text{m}$ の正方形を断面に持ち、 $300\ \mu\text{m}$ 間隔で規則正しく格子状に配置されている (Sivakumar et al. 2005). 本研究で実施した数値シミュレーションでは、柱状構造の配置に対して平行方向と斜め方向で、液滴の変形度合いが大きく異なること、また、その時間変化が実験結果と定量的にもよく一致することを確認した (図1 参照).

また、衝突速度を変えたり、別の表面微細構造を用いたりした異なる条件に対しても、同様に液滴挙動の数値シミュレーションを実施し、接触角などが実験結果と概ね良好に一致することを確認した.

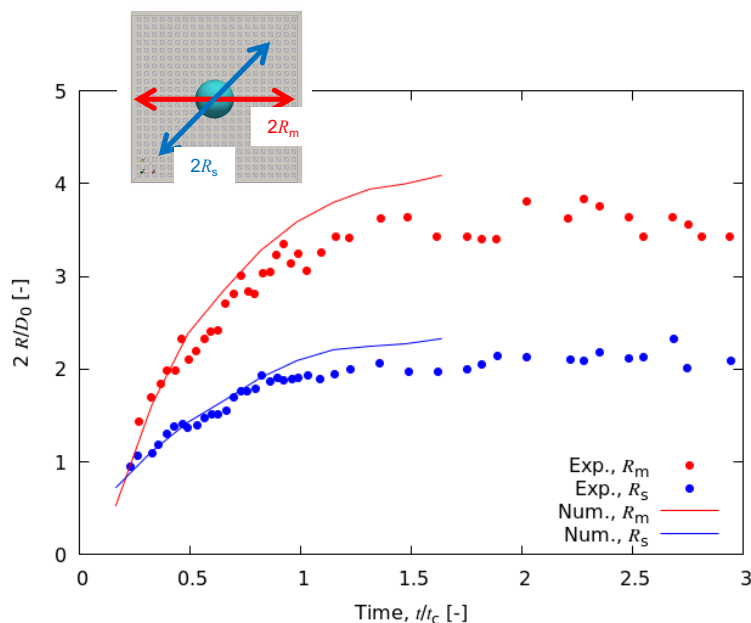


図1 柱状構造を持つ表面に衝突する液滴の変形. 赤: 平行方向, 青: 斜め方向.

(2) 矩形溝内キャピラリー流れにおける溝形状の影響に関する調査

矩形溝内部のキャピラリー流れに関する数値シミュレーションを実施した. なお, このようなキャピラリー流れは様々な応用分野で見られるものの, 流路の一部が開放されているため気液界面の運動の自由度が大きいことから, 完全に閉鎖された流路に比べ学術的な理解が進んでいない. 一方, 物体表面に多数の溝を形成することで表面上の液滴の運動に異方性を与えることができることが知られており, 工学的な応用について盛んに議論されている. 本研究では, 異方性を最大とするような流路形状の最適設計を目的として, まずは矩形流路に限定し, その最適なアスペクト比を探索した.

図2は, 本研究で実施した数値シミュレーションによって, 矩形溝内部におけるキャピラリー数の移動速度に対する溝アスペクト比の影響を調査した結果である. なお, 溝高さとして, $10\ \mu\text{m}$, $20\ \mu\text{m}$, $30\ \mu\text{m}$ の3ケースについて調査を実施した. 比較対象として, Lucas-Washburn 理論を拡張した理論 (Kolliopoulos et al. 2019) による予測値を用いた. なお, この理論では, 開放部の気液界面における速度境界条件として slip モデルもしくは no-slip モデルの適用を提案しているが, no-slip モデルを適用した方が実験結果とよく一致するとされている. 本研究による数値シミュレーションの結果はこれを支持するものとなった. また, キャピラリー流れの移動速度を最大になるのは, 溝のアスペクト比が 0.8 程度であることを確認した. さらに, 液滴先端部における幾何学的構造や, その内部における流動構造を明らかにした.

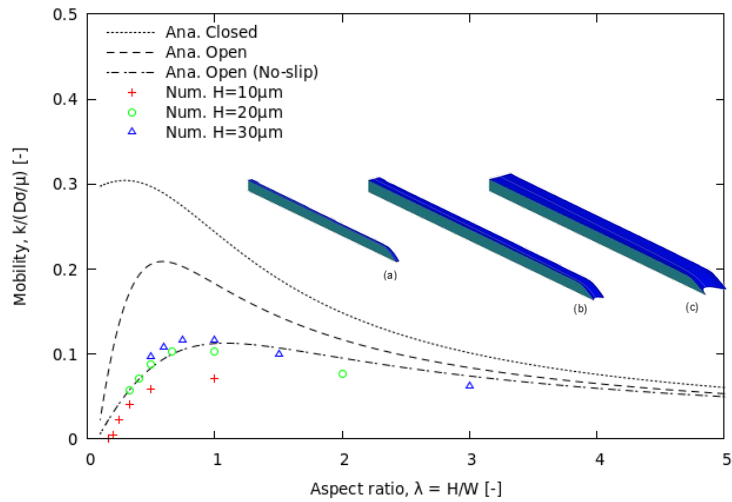


図2 矩形溝内におけるキャピラリー流れの移動速度に対する溝アスペクト比の影響。

(3) 接触線摩擦モデルに関する検証

本研究では、接触線摩擦モデルの妥当性を検証するために、既存の実験及び数値シミュレーション (Bussmann et al. 1999) と同じ条件設定の数値シミュレーションを実施し、結果を比較検証した。この検証では、直径 $D_0 = 2 \text{ mm}$ 、初速 $V_0 = 1 \text{ m/s}$ の液滴が傾斜面に衝突する状況を考える。なお、液相と気相はそれぞれ水と空気であり、数値シミュレーションでは共に非圧縮性流体として扱う。

図3は本研究で実施した数値シミュレーションの結果で、接触線摩擦係数をそれぞれ (a) $\mu_f = 300 \text{ Pa} \cdot \text{s}$ 、(b) $\mu_f = 0 \text{ Pa} \cdot \text{s}$ とした場合のものである。なお、(b)は従来の静的接触角を仮定したモデルに相当する。図3からは、接触線摩擦モデルの導入により液滴の挙動が大きく変化することがわかる。なお、既存の実験や数値シミュレーションと比較したところ、(b)より(a)の方がよく一致すること、(a)では接触線の後退過程より前進過程の方がよく一致することを確認した。このことから、接触線摩擦モデルを導入する際は、前進過程と後退過程で異なる摩擦係数を用いる必要があることが示唆される。

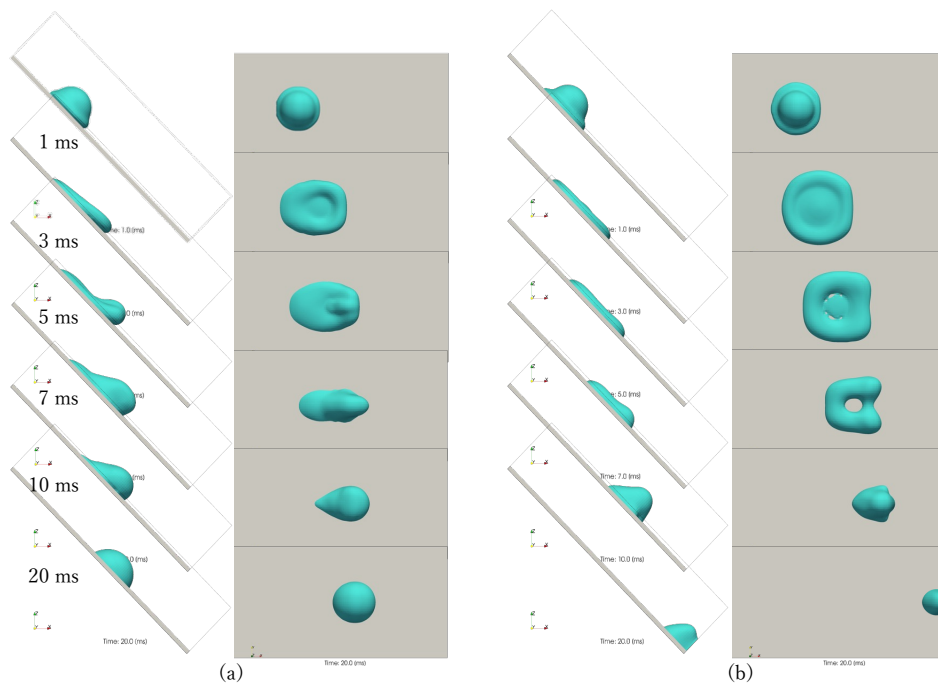


図3 傾斜面に衝突する液滴を側面または上面から見た様子。(a)は摩擦モデルを用いた結果、(b)は静的接触角を用いた結果。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計0件

〔学会発表〕 計5件（うち招待講演 0件 / うち国際学会 4件）

1. 発表者名 Junya Onishi
2. 発表標題 Numerical simulation of droplet impact using a contact-line friction model
3. 学会等名 14th Asian Computational Fluid Dynamics Conference (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Junya Onishi
2. 発表標題 Capillary flow in open microchannels with rectangular cross-sections: a numerical study
3. 学会等名 76th Annual Meeting of the Division of Fluid Dynamics (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 J. Onishi and N. Shikazono
2. 発表標題 Numerical Study on the Effect of Cross-sectional Shape on the Capillary Flow in Microchannels
3. 学会等名 13th Asian Computational Fluid Dynamics Conference (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 大西 順也, 鹿園 直毅
2. 発表標題 矩形微細流路内のキャピラリー流れに関する数値解析
3. 学会等名 日本機械学会 熱工学コンファレンス2021
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Junya Onishi, Naoki Shikazono
2. 発表標題 Validation of Numerical Simulation of Drop Motion on Surfaces with Micro Patterns
3. 学会等名 Proceedings of ASME-JSME-KSME Joint Fluids Engineering Conference 2019 (国際学会)
4. 発表年 2019年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関