

令和 5 年 6 月 22 日現在

機関番号：18001

研究種目：若手研究

研究期間：2021～2022

課題番号：21K14098

研究課題名(和文) 三相界面の微視的力学バランスに基づいた固体表面ナノバブル制御指針の構築

研究課題名(英文) Construction of Guideline for Surface Nanobubble Controlling Based on Microscopic Mechanical Balance at Three-Phase Contact Line

研究代表者

永島 浩樹 (Nagashima, Hiroki)

琉球大学・工学部・助教

研究者番号：00759144

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,500,000円

研究成果の概要(和文)：固体表面ナノバブルの制御指針を得るために、固体壁面のナノバブルの三相界線における微視的力学的バランスを、分子動力学(MD)法を用いて解析を行った。微視的力学バランスの解析は、密度分布より算出したナノバブルの見かけの接触角とヤングの式より算出した接触角を比較することで行なった。ヤングの式における各表面張力は、計算領域を微小領域に分割し、その領域内の圧力をMD法より計算することで算出した。解析は、固体壁面の濡れ性、凹凸などの壁面形状、壁面温度などを変化させて行なった。その結果より、壁面の濡れ性、壁面形状、壁面温度によりナノバブルの形状を制御できる可能性が示唆された。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究成果の学術的意義は、実験では観測が難しい固体壁面上のナノバブルの三相界線の微視的力学的バランスを分子動力学法により解析し、壁面の濡れ性、壁面形状、壁面温度により三相界線の力学的バランスがどのように変化するかを明らかにしたことである。本研究により得られた知見に基づいて、壁面特性により三相界線の力学的バランスをコントロールすることで、固体壁面上のナノバブルの形状を制御できると考えられる。固体壁面上のナノバブルは流体の摩擦低減効果、固体表面の伝熱制御、沸騰の初期現象として工学的に重要であり、特に熱工学分野における本研究成果の社会的意義は大きいと考えられる。

研究成果の概要(英文)：In order to construct a guideline for the control of nanobubbles on solid surfaces, the microscopic mechanical balance at the three-phase interface was analyzed using molecular dynamics (MD). The mechanical balance was analyzed by comparing the apparent contact angle of nanobubbles computed from the density distribution with the contact angle derived from Young's equation. Each surface tension in Young's equation was calculated by dividing the computational domain into small areas and calculating the pressure in those areas using the MD method. The analysis was performed by varying the wettability of the solid wall, the shape of the wall (e.g., unevenness), and the temperature of the wall. The results suggest that the shape of nanobubbles can be controlled by the wettability of the wall, the wall shape, and the wall temperature.

研究分野：分子熱流体工学

キーワード：ナノバブル 分子動力学法 三相界線 ヤングの式 力学的バランス 濡れ性 壁面形状 壁面温度

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属します。

1. 研究開始当初の背景

ナノバブルはその小ささのため、気泡内のラプラス圧力が数十気圧になり、ヘンリーの法則より気泡はすぐに液体に溶解してしまうと考えられていた。しかし2000年以降、原子間力顕微鏡によりナノバブルの存在が相次いで明らかになり、ナノバブルに関する研究は盛んに行われている。特に、固体表面上のナノバブルは流体の摩擦低減効果、固体表面の伝熱制御、沸騰の初期現象として工学的に重要であり、存在が明らかにされて以降、実験とシミュレーションの両面から研究されている。これまでの研究はナノバブルの生成や安定性に関するものが中心であり、ナノバブルの発生と安定性にはピンングという固体表面の物理的構造または濡れ性と溶質の濃度が関係していることまでは明らかとなっている。しかし、ナノバブルの工学的応用を考えた場合、ナノバブルの形状や生成位置、個数などを制御する技術が必要である。この技術を確立するためには、複数のナノバブルの形状や個数が増えるオストヴァルト熟成と呼ばれる現象を制御する必要がある。

そこで本研究では、固体表面のナノバブルの三相界線(固体-液相-気相)における微視的力学バランスに着目する。巨視的バブルの場合、三相界線での力学的バランスはヤングの式により各相間の表面張力と接触角が関連づけられる。このヤングの式は、固体表面の10nm程度の液滴表面の三相界線においても成立することが明らかにされている。しかし、ナノバブルの液相側の接触角は巨視的な液滴の接触角よりもはるかに大きい値であることが明らかとなっており、このヤングの式が固体表面のナノバブルのような微視的な三相界線においても成立するかは明らかにされていない。固体表面のナノバブルの形状変化やオストヴァルト熟成の発生は、三相界線における微視的な力学バランスが変化することで引き起こされると考えられるため、ナノバブルの三相界線における微視的な力学的関係性を明らかにすることはナノバブルを制御する上で重要である。さらに、工学的に固体表面のナノバブルを制御する場合、この三相界線における微視的力学バランスが、どのような場合にどのように変化するかを知る必要があるが、これまでこの点に関する知見はほとんどない。

2. 研究の目的

本研究の目的は、固体表面のナノバブルを制御し工学的に利用することでことである。この目的を達成するために、固体表面のナノバブルの三相界線における微視的力学バランスのメカニズムを特定する。さらに、三相界線の微視的力学バランスと巨視的物理量(固体表面の物理的構造または濡れ性、表面温度など)との関係性を明らかにすることで、固体表面上のナノバブルの形状変化やオストヴァルト熟成を引き起こすメカニズムを解明する。これらの知見に基づいて、固体表面上のナノバブルの制御方法に関する指針を示すことで目的を達成する。

3. 研究の方法

本研究では、分子動力学(MD)法を用いて固体表面のナノバブルの三相界線における微視的力学バランスメカニズムを解明し、巨視的物理量との関係性を明らかにした。まず、固体表面ナノバブルの三相界線における微視的力学バランスメカニズムを特定するために、三相界線の巨視的な力学関係式であるヤングの式の成立性について解析を行った。MD計算の計算系は擬二次元系とし、計算系を微小領域に分割し、微小領域内の溶液の圧力テンソルを分子の位置と速度より算出した。算出した圧力テンソルより各相間の表面張力を求め、この表面張力を用いてヤングの式に基づいて接触角を見積もった。ヤングの式より見積もった接触角は、密度分布より算出した見かけの接触角と比較することでナノバブルの微視的三相界線におけるヤングの式の成立性について解析を行った。次に、固体表面の濡れ性、固体表面の形状、固体表面の温度を変化させ、ナノバブルの三相界線における微視的力学バランスがどのように変化するかについての解析を行った。

4. 研究成果

まず、濡れ性を変化させた解析では、表面の一部を疎水性にし、それ以外の濡れ性を親水性から中性に変化させて行った。この解析より、濡れ性を変化させることで固体表面ナノバブルの形状が変化し、親水性和疎水性の表面では、濡れ性を変化させた表面の境界で三相界線がピンングされることが分かった。一方、中性と疎水性の表面では、ピンングは観測されなかったが、安定的に固体表面にナノバブルが発生することが分かった。さらに、濡れ性を変化させた表面の境界で三相界線がピンングされている場合、見かけの接触角とヤングの式より算出した接触角は一致しないことがわかった。一方、三相界線がピンングされていない場合は、見かけの接触角とヤングの式より算出した接触角は一致することがわかった。この結果より、三相界線がピンングされている場合は、ヤングの式では考慮されていない力が気体と固体間の表面張力方向に働いていることが示唆された。

次に、表面に凹凸形状を作成した解析では、親水性の表面に凹凸の形状を作成した場合、凹凸内部は液体分子で満たされ、固体表面にナノバブルは発生しないことが分かった。一方、中性の

表面に凹凸の形状を作成した場合、凹凸の形状によりナノバブルの形状が変化し、凹凸の体積が小さい場合は固体表面にナノバブルが安定的に発生しないことが分かった。この結果より、凹凸の幅と深さによりナノバブルの発生を制御できることがわかった。

最後に、表面温度を変化させた解析では、溶液の温度のみを制御した場合と比較して、固体表面のナノバブルの形状が変化することがわかった。表面張力の比較より、表面温度を変化させることで表面張力も変化することで、表面ナノバブルの形状が変化することを確認した。

これらの解析結果より、固体表面の濡れ性、表面形状、表面温度により固体表面ナノバブルの三相界線における力学的バランスを変化することが明らかとなったため、これらの表面特性によりナノバブルの形状を制御できる可能性が示唆された。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計0件

〔学会発表〕 計3件（うち招待講演 0件 / うち国際学会 2件）

1. 発表者名 Yusuke Jonosono, Shin-ichi Tsuda, Takashi Tokumasu, and Hiroki Nagashima
2. 発表標題 Molecular Dynamics Study of Mechanical Balance at Three-Phase Interface of Nanobubble on Solid Surface
3. 学会等名 The 19th International Conference on Flow Dynamics (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Takumi Ijichi, Shin-ichi Tsuda, Takashi Tokumasum, and Hiroki Nagashima
2. 発表標題 Evaluation of thermodynamic properties in hydrogen/oxygen mixture modelled by Lennard-Jones fluid
3. 学会等名 The 27th Thermodynamics Conference (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 城ノ園 優佑, 津田 伸一, 徳増 崇, 永島 浩
2. 発表標題 固液界面ナノバブルの三相界線における力学的バランスに関する 分子動力学の解析
3. 学会等名 第13回マイクロ・ナノ工学シンポジウム
4. 発表年 2022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
---------	---------