

科学研究費助成事業（科学研究費補助金）研究成果報告書

平成 25 年 6 月 13 日現在

機関番号： 14401
 研究種目： 若手研究(B)
 研究期間： 2010～2012
 課題番号： 22760131
 研究課題名（和文） 異種液体接触に伴う物理化学的非平衡性により誘起される
 高速現象の複合スケール解析
 研究課題名（英文） Multi-scale analysis on high-speed phenomena induced by the physico-chemical nonequilibrium upon contact between different liquids
 研究代表者
 山口 康隆 (YAMAGUCHI YASUTAKA)
 大阪大学・大学院工学研究科・准教授
 研究者番号： 30346192

研究成果の概要（和文）： 異種成分で構成される液滴同士の衝突と固体壁面上における液滴の挙動を解析した。粒子法を用いたマクロスケール解析では、拡散界面モデルによる界面張力の定式化を確立し、密度、表面張力が異なり、更に相互液体間に界面張力を有する異種液滴間の衝突のシミュレーションを実現した。また並行して行った分子動力学によるナノスケール解析では、固体壁に接する水、及び水-アルコールの混合物の液滴について、壁面における電氣的ポテンシャルとアルコール混合が濡れに与える影響について検討を加えた。

研究成果の概要（英文）： Collision between liquid droplets with different composition and droplet wetting on a solid surface were investigated. In the macroscopic analysis using the particle method, interfacial tensions were formulated and the collision of liquid droplet with different density, surface tension and interfacial tension were successfully simulated. Molecular dynamics simulations of the wetting of liquid droplet on a solid surface revealed the effects of electric potential of solid surface as well as of alcohol mixing on the wetting feature.

交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2010年度	1,900,000	570,000	2,470,000
2011年度	900,000	270,000	1,170,000
2012年度	500,000	150,000	650,000
年度			
年度			
総計	3,300,000	990,000	4,290,000

研究分野：分子流体力学

科研費の分科・細目：機械工学・流体工学

キーワード：相界面，物理化学的效果，分子動力学法

1. 研究開始当初の背景

自由界面を有する液体挙動はインクジェットなど様々な工業分野で現れるが、高精細、高速化が進む半導体、印刷分野においては現在、マイクロメートルレベルの空間スケールの液滴を、マイクロからミリ秒レベルの時間スケールでの精度で制御することが要求されている。従来はこのような課題に対し、ア

ルコールや有機物など溶質の付加などといった操作により、飛沫の抑制、インクの安定固着などの技術改良が進められてきたが、これらの操作は、現象の理解、観察に基づくというよりはむしろ、経験的、試行錯誤的に進められてきたものであり、今後の更なる微細化、高速化に際し、表面積体積比の増大に伴い顕著となる物理化学的要因の影響の本質

的理解が不可欠である。一方、解析の側面では、気液界面の大変形を伴う流体運動の解析については、VOF法、レベルセット法、Phase-Field法、格子ボルツマン法、MPS法、SPH法等による解析例があるが、精度の良い現象再現は単成分液相で低ウェーバー数領域に限られるなど未だ発展段階であり、図1に示すような系に代表される複数の成分間の接触に伴う表面張力差、親疎媒性、拡散などにより誘起される強い非平衡現象の解析は極めて困難である。

研究代表者は、研究開始当初までに粒子法の一つであるSPH法により自由界面運動を伴う流れの解析を行ってきた。この方法の利点として界面の大変形、分裂、合体の再現が容易、あるいは溶液の濃度などの情報を付加でき、定性的な特性を良く再現できるという点が挙げられるが、反面、表面張力の定式化が未確立、定量的な取り扱いが困難であるなどの問題点がある。そこで、新たに表面張力モデルを導入、妥当性を確認し、これを用いた単一成分系における液滴液膜衝突の大規模解析を行った。この解析により、クラウン構造と飛沫の発生、それに続く液柱の形成を再現し、高速度カメラ観察との時空間的一致を示した。

2. 研究の目的

次なる展開として異種流体間の液滴液膜衝突が考えられる。予備実験により液滴側に親媒性のアルコール、疎媒性のトルエンを用いた場合に、その後の飛沫の発生挙動や液柱形状、更には上昇する成分など現象が劇的に異なることが高速カメラ観察により明らかになった。これは前述のように工学的重要性が高いにも拘わらず、理解が進んでいない現象である。

そこで、本研究ではマイクロメートルレベルの異種成分液滴の衝突挙動を取り上げ、粒子法によるマクロスケール解析に加え、分子動力学によるナノスケール解析を併用したシミュレーションを行うことで、異種液体接触により誘起される表面張力差、親疎媒性など物理化学的非平衡性が、長さマイクロメートルオーダー、時間マイクロ、ミリオーダーの界面挙動に与える影響について解析を行う。長期的には分子、ナノレベルの特性がマクロレベルの動的現象として現れる複合系についての体系的な解析手法の確立への足がかりとする。

3. 研究の方法

本課題の解析系は、大きく異種液滴同士

の衝突のSPH法による大規模シミュレーションと、化学的親媒性、疎媒性など物理化学的要素抽出のための異種液体界面間接触に関する分子動力学シミュレーションの2つか

4. 研究成果

異種成分で構成される液滴同士の衝突と固体壁面上における液滴の挙動を取り上げ、粒子法によるマクロスケール解析に加え、分子動力学によるナノスケール解析を併用したシミュレーションを行った。

前者については、拡散界面モデルによる粒子法における界面張力の定式化を確立し、これを用いて、密度、表面張力が異なり、更に相互の液体間での界面張力を有する異種液滴間の衝突のシミュレーションを実現した。またこの結果について、他グループの実験結果との比較による検証を行い、モデルの妥当性を示した。これらの成果を国内の査読付き学会誌に投稿し受理されたほか、国際学会を含む複数の学会で発表した。

後者については、水、および水-アルコールの混合物の液滴が固体壁接する系に対して濡れ性の変化を解析した。特に壁面における電氣的ポテンシャルが濡れと局所的な拡散性に与える影響について、詳細に検討を加えた。また濡れの定量化に関連して、固液、気液、固気各々の間の界面張力を別個に平面状の液膜系で算出した結果、液滴系で観測される接触角と、接触角の三相界面での釣り合いを表すYoungの式から導かれる接触角が概ね一致することが示唆された。その他では、ナノスケールの流動に対し、アルコールの添加が壁面付近でのせん断力やすべりに影響を与えることを示した。これらの成果を査読付き国際学会誌で発表したほか、国際学会を含む複数の学会で発表した。

これらのマクロ、ナノスケールの解析により、異種液体の接触が液液、気液、固液界面に与える影響が明らかになり、複合スケール解析の足掛かりとなる結果が得られた。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計2件)

1. D. Surblys, Y. Yamaguchi, K. Kuroda, T. Nakajima and H. Fujimura, "Analysis on wetting and local dynamic properties of

single water droplet on a polarized solid surface: a molecular dynamics study," J. Chem. Phys., vol. 135 (2011), pp. 014703_1-8.

2. 橋本 雄太, 山田 辰也, 山口 康隆, 酒井 啓司, 中島 但, 藤村 秀夫, "表面張力, 界面張力差を考慮した異種液滴間衝突の SPH シミュレーション," 混相流, vol. 25, no. 5, (2011), pp. 451-458.

[学会発表] (計 30 件)

1. D. Surblys, S. Nishida, S. Nakaoka, Y. Yamaguchi, K. Kuroda, T. Nakajima, H. Fujimura, "Molecular dynamics study on the wetting of a liquid droplet on a solid surface," 8th KSME-JSME Thermal and Fluids Engineering Conference, Incheon, Korea, (2012), pp. FR09-009_1-2.
2. S. Nakaoka, D. Surblys, Y. Yamaguchi, K. Kuroda, T. Nakajima, H. Fujimura, "Molecular dynamics study on the relation between molecular rotational diffusion and local viscosity of water," 8th KSME-JSME Thermal and Fluids Engineering Conference, Incheon, Korea, (2012), pp. FR09-008_1-2.
3. D. Surblys, Y. Yamaguchi, S. Nakaoka, K. Kuroda, T. Nakajima, H. Fujimura, "Molecular dynamics analysis on the microscopic properties of single water and water-alcohol droplets at solid-liquid interface," 4th International Conference on Heat Transfer and Fluid Flow in Microscale (HTFFM-IV), (2011), pp. htffm-iv-129_1-5.
4. Y. Hashimoto, Y. Yamaguchi, K. Kuroda, T. Nakajima and H. Fujimura, "SPH simulations of binary collision between liquid droplets with different physical properties," 4th International Conference on Heat Transfer and Fluid Flow in Microscale (HTFFM-IV), (2011), pp. htffm-iv-125_1-4.
5. Y. Yamaguchi, D. Surblys, S. Nakaoka, K. Kuroda, T. Nakajima, H. Fujimura, "Molecular analysis on the dynamic properties of water droplet at solid-liquid interface based on MD simulations," Proceedings of the ASME/JSME 2011 8th Thermal Engineering Joint Conference, Honolulu, USA, (2011), pp. AJTEC2011-44474_1-5.
6. Y. Yamaguchi, D. Surblys, S. Nakaoka, K. Kuroda, T. Nakajima, H. Fujimura, "MD analysis on the local dynamic properties of water molecules in a droplet through rotational diffusion," 7th International

Conference on Flow dynamics, Sendai, Japan, (2010), pp. 348-349.

7. 西田 翔吾, 新垣 英亮, 山口 康隆, 黒田 孝二, 中島 但, 藤村 秀夫, "液滴の三相界面における力学的バランスに関する分子動的解析," 第 26 回数値流体力学シンポジウム, (2012), pp. E02-1_1-3.
8. 中岡 聡, 山口 康隆, 黒田 孝二, 中島 但, 藤村 秀夫, "アルコール添加が水と固体界面における速度すべりに与える影響についての分子動力学的研究," 第 26 回数値流体力学シンポジウム, (2012), pp. E01-4_1-4.
9. 中岡 聡, 山口 康隆, 黒田 孝二, 中島 但, 藤村 秀夫, "水へのアルコール添加が固液界面における速度すべりに与える影響に関する分子動力学解析," 日本流体力学会 年会 2012, (2012), pp. 088_1-4.
10. スルプリス ドナタス, 西田 翔吾, 山口 康隆, 黒田 孝二, 中島 但, 藤村 秀夫, "アルコール添加が水液滴の濡れ性に与える影響に関する分子動力学解析," 日本流体力学会 年会 2012, (2012), pp. 087_1-4.
11. 中岡 聡, 山口 康隆, 黒田 孝二, 中島 但, 藤村 秀夫, "アルコール添加が水のせん断流に与える影響に関する分子動力学的考察," 第 57 回音波と物性討論会, (2012), pp. 13-16.
12. 西田 翔吾, スルプリス ドナタス, 山口 康隆, 黒田 孝二, 中島 但, 藤村 秀夫, "固体面上に接する液滴の三相界面における力学的バランスに関する分子動力学的考察," 第 49 回日本伝熱シンポジウム, (2012), pp. 233-234.
13. スルプリス ドナタス, 山口 康隆, 黒田 孝二, 中島 但, 藤村 秀夫, "表面ポテンシャル及びアルコール添加物が液滴の濡れ性に与える影響に関する分子動力学解析," 第 49 回日本伝熱シンポジウム, (2012), pp. 231-232.
14. 中岡 聡, 山口 康隆, 黒田 孝二, 中島 但, 藤村 秀夫, "アルコール添加による水の壁面抵抗低減についての分子動力学解析," 第 49 回日本伝熱シンポジウム, (2012), pp. 229-230.
15. 山口 康隆, スルプリス ドナタス, 中岡 聡, 黒田 孝二, 中島 但, 藤村 秀夫, "固体面近傍における水のミクロの濡れと局所的な動的挙動に関する分子動力学解析," 応用物理学会 界面ナノ電子化学研究会 (NICE) 第 11 回講演集, (2012), pp. 1-7.
16. スルプリス ドナタス, 中岡 聡, 西田 翔吾, 山口 康隆, 黒田 孝二, 中島 但, 藤村 秀夫, "固体壁面上における水-アルコール混合物液滴の濡れに関する分子動力学解析," 第 25 回数値流体力学シンポジウム, 大阪, (2011), pp. B11-2_1-4.
17. 中岡 聡, スルプリス ドナタス, 山口

康隆, 黒田 孝二, 中島 但, 藤村 秀夫, "アルコール添加による水の壁面抵抗低減についての分子動力学考察," 第 25 回数値流体力学シンポジウム, 大阪, (2011), pp. B11-1_1-3.

18. 橋本 雄太, 山口 康隆, 黒田 孝二, 中島 但, 藤村 秀夫, "表面張力, 界面張力差を考慮した異種液滴間衝突の SPH シミュレーション," 第 25 回数値流体力学シンポジウム, 大阪, (2011), pp. E05-2_1-3.

19. 山口 康隆, スルプリス ドナタス, 中岡 聡, 西田 翔吾, 黒田 孝二, 中島 但, 藤村 秀夫, "水液滴の動的挙動とミクروسケールの界面構造に関する解析," 粉体工学会「計算粉体力学研究会」2011 年度第 2 回研究会, 京都, (2011).

20. 山口 康隆, スルプリス ドナタス, 中岡 聡, 西田 翔吾, 黒田 孝二, 中島 但, 藤村 秀夫, "水滴の濡れ挙動に及ぼす壁面分極とアルコール添加効果の分子動力学解析," 日本学術振興会「水の先進理工学」第 183 委員会 第 6 回研究会, 熱海, (2011), pp. 25-30.

21. スルプリス ドナタス, 中岡 聡, 山口 康隆, 黒田 孝二, 中島 但, 藤村 秀夫, "固体面上における水-アルコール混合液滴の濡れに関する分子動力学解析," 日本流体力学会年会 2011, 東京, (2011), pp. 3G25_1-4.

22. 中岡 聡, スルプリス ドナタス, 山口 康隆, 黒田 孝二, 中島 但, 藤村 秀夫, "水の分子回転拡散と局所的粘性の相関についての分子動力学考察," 日本流体力学会 年会 2011, 東京, (2011), pp. 3G24_1-3.

23. 橋本 雄太, 山口 康隆, 黒田 孝二, 中島 但, 藤村 秀夫, "表面張力, 界面張力の異なる液滴間衝突の SPH シミュレーション," 日本混相流学会年会講演会 2011, 京都, (2011), pp. 288-289.

24. 中岡 聡, スルプリス ドナタス, 山口 康隆, 黒田 孝二, 中島 但, 藤村 秀夫, "水分子の回転拡散と局所的粘性の相関についての分子動力学考察," 日本混相流学会年会講演会 2011, 東京, (2011), pp. 34-35.

25. 山口 康隆, スルプリス ドナタス, 中岡 聡, 黒田 孝二, 中島 但, 藤村 秀夫, "固体面上における水液滴の濡れと局所的粘性に及ぼす壁面極性の影響に関する分子動力学解析," 第 56 回音波と物性討論会, 京都, (2011), pp. 43-48.

26. スルプリス ドナタス, 中岡 聡, 山口 康隆, 黒田 孝二, 中島 但, 藤村 秀夫, "回転拡散と局所的粘性の相関についての分子動力学的研究," 第 48 回日本伝熱シンポジウム, 岡山, (2011), vol. 1, pp. 247-248.

27. 秋山 直也, 山口 康隆, 黒田 孝二, 中島 但, 藤村 秀夫, "異なる濡れ性を有する固体壁面上における液滴挙動の SPH シミュレーション," 第 23 回計算力学講演会, 北見, (2010), pp. 640-641.

28. 秋山 直也, 山口 康隆, 黒田 孝二, 中島 但, 藤村 秀夫, "異なる濡れ性を有する固体壁面上における液滴挙動の SPH シミュレーション," 混相流学会年会講演会 2010, 浜松, (2010), pp. 120-121.

29. 橋本 雄太, 山口 康隆, 黒田 孝二, 中島 但, 藤村 秀夫, "気液, 液液界面を有する液滴挙動の SPH シミュレーション," 混相流学会年会講演会 2010, 浜松, (2010), pp. 114-115.

30. 小川 和也, 山口 康隆, Surblyis Donatas, 黒田 孝二, 中島 但, 藤村 秀夫, "水-アルコール系液滴の固液接触挙動に及ぼす壁面電荷の影響に関する分子動力学解析," 第 59 回理論応用力学講演会, 東京, (2010), pp. 135-136.

[図書] (計 0 件)

[産業財産権]

○出願状況 (計 0 件)

○取得状況 (計 0 件)

[その他]

<http://www-gcom.mech.eng.osaka-u.ac.jp>

6. 研究組織

(1) 研究代表者

山口 康隆 (YAMAGUCHI YASUTAKA)

大阪大学・大学院工学研究科・准教授

研究者番号 : 30346192