

MPS法による高分子液滴蒸発のシミュレーション

科学技術振興機構 西谷 英輔¹

東京大学大学院 工学研究科 土井 正男

コーヒーなどの滴を机などの固い基盤上にこぼしてしまった時、しばらく放っておくと、リング状のコーヒーの”しみ”ができる。この現象は、液滴の蒸発に伴って生じる液滴内部の流動によるものであることが良く知られている [1, 2] が、蒸発過程の詳細については明らかになっていない。インクジェットから噴出され基盤に着弾した液滴の蒸発過程や、DNA チップの製造過程などにも関連する現象であり、理論及びシミュレーションによる理解が求められている。本研究では、粒子法の一つである MPS(Moving Particle Semi-implicit) 法 [3] を用いて、高分子液滴の蒸発に関する初歩的なシミュレーションを行った。

1 高分子液滴の蒸発モデル

高分子液滴の蒸発モデルを以下で簡単に説明する。溶媒の蒸発は粒子を消去することで対応し、MPS法の表面張力モデル [4] と基盤上液滴のモデル [5] も合わせて適用することにより、基盤と液滴の濡れ性を考慮する。また、MPS法は Lagrange 描像のシミュレーション手法であることに注意する。MPS法の詳細については、講演の際に紹介する。

$$\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = -\nabla P + \eta \Delta \mathbf{u} + \sum_{\alpha} \phi_{\alpha} \nabla \left(\frac{\delta F}{\delta \phi_{\alpha}} \right) + \sigma \kappa \delta(\mathbf{s}) \hat{\mathbf{n}} \quad (1)$$

$$\frac{D\phi_{\alpha}}{Dt} = L \Delta \left(\frac{\delta F}{\delta \phi_{\alpha}} \right) \quad (2)$$

ここで、 F には GL 型自由エネルギーを用いた。

2 結果

シミュレーションでは、初期状態として濃度が一様な高分子液滴を基盤上に置き、一定時間蒸発させた。図 1 は一定時間溶媒を蒸発させた後の液滴のスナップショットである。高分子の体積分率が多い所が赤色に、少ない所が青色に表示されている。このスナップショットを見てみると、

1. 液滴表面に、高分子濃度が高いクラスト（表皮）が形成されている
2. コンタクトライン付近の高分子濃度が高い（コーヒーステイン現象）

¹E-mail:nishitani@rheo.t.u-tokyo.ac.jp

様子が見て取れる。クラスト効果については、文献 [6] で報告されている。図 2 では、液滴の中心からの距離に対して高分子の体積分率をプロットした。液滴中心付近では、体積分率は初期体積分率 (0.05) からあまり変化していないが、コンタクトライン付近では急激に体積分率が上昇している様子がわかる。

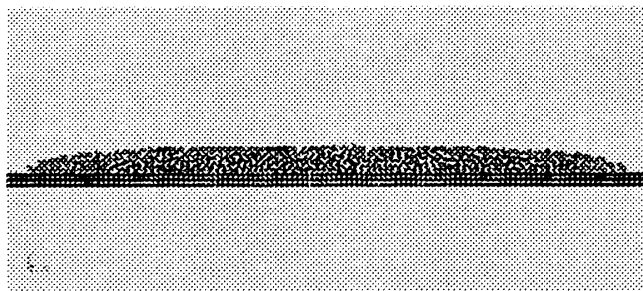


図 1: クラスト効果

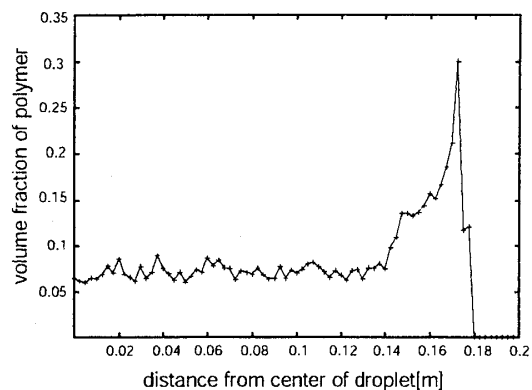


図 2: コーヒーステイン現象

謝辞

本研究は (独) 科学技術振興機構戦略的創造研究推進事業の下で行われた。

参考文献

- [1] R. D.Deegan et al, Nature **389** (1997), 827
- [2] R. D.Deegan et al, Phys.Rev.E **62** (2000), 756
- [3] S.Koshizuka and Y.Oka, Nucl. Sci. Eng. **123** (1996), 421
- [4] R.Duan,S.Koshizuka and Y.Oka,J. Nucl. Sci. Tech. **40** (2003), 501
- [5] Heng XIE, Seiichi KOSHIZUKA, Yoshiaki OKA, “Modeling of wetting effects on the liquid droplet impingement using particle method“, 第 5 3 回理論応用力学講演会予稿集
- [6] P.G. de Gennes, EPJE **7**(2002), 31