

■受領No.1325

固体面上での気泡成長に与える固体面摩擦の影響の非経験的記述と成長促進への応用



代表研究者

伊藤 高啓 中部大学 教授

1. 研究目的

沸騰現象は工学的にさまざまな分野で用いられている。沸騰における気泡形成は、液体の圧力がその温度における蒸気圧よりも十分低くなる状態（過熱状態）となったときにおこるが、一般的に気泡は固体面上で生長する。したがって、固体面での流体-固体間相互作用（摩擦）が気泡成長に与える影響を明らかにすることは気泡の成長を予測するうえで重要である。本研究では、分子動力学的手法を用いて分子レベルで平滑な面における摩擦の液体-気体界面の運動に対する影響を調べるとともに、工学的表面ではかならず存在する固体表面の凹凸が与える影響を実験的に明らかにすることを目的として行った。

2. 研究内容

2.1 分子動力学解析

分子動力学を用いた解析は図1に示すような、2枚の平行平板の間に流体が挟まれた体系で行っ

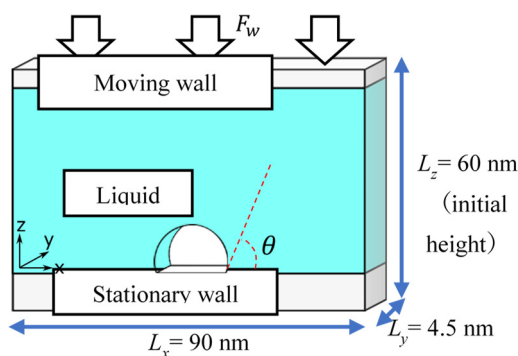


図1 分子動力学計算体系

た。体系はx方向が90nm、y方向4.5nm、z方向（初期）約60nmの大きさとした。x方向およびy方向には周期境界条件を課した。この体系では後述する気泡の直径(>22nm)に比べてy方向の長さが短いため、気泡の挙動やそれに伴って発生する流れ場はx-z平面内での2次元的なものとなる。また、上下の壁面のうち、下側の壁面の位置は固定されているが、上側の壁面にはz方向に一定の力 F_w を加えたうえで、自由にz方向に並進運動できるようにした。力 F_w を適切な値にすることで壁面下面での流体の圧力を任意のほぼ一定の圧力に保つことができる。

流体分子間および流体と壁面分子の間の相互作用はアルゴンなどの希ガスの性質をよく再現するレナードジョーンズポテンシャルを用いて表した。壁面分子間の相互作用はハーモニックポテンシャルを用いた。壁面分子の配置は壁面での摩擦の影響をみるため、体心立方格子bccのものと同面心立方格子fccの2種類で行った。格子定数はbccの場合は0.45nm、fccの場合は0.30nmとした。壁面-流体間のレナードジョーンズポテンシャルのエネルギー深さに関する係数(ϵ)は、各壁面格子に対して液体が3種類の濡れ性（静止接触角がおおむね60度、90度および110度）を示すように選んだ。その際、2つの壁面格子に対して概ね同じ静止接触角を示すよう係数を調節した。このようにすることで、気泡成長への接触角の違いの影響も併せ

表 1 壁面の構造および相互作用ポテンシャル値

Case	#1f	#1b	#2f	#2b	#3f	#3b
Lattice	fcc	bcc	fcc	bcc	fcc	bcc
a (nm)	0.3	0.45	0.3	0.45	0.3	0.45
ϵ_{fw} (kJ/mol)	0.38	0.45	0.48	1.8	0.56	2.1

表 2 静止接触角および摩擦係数

Case	#1f	#1b	#2f	#2b	#3f	#3b
θ (deg)	115	115	86	86	63	63
β (kPa · s/m)	1.6	125	1.9	233	5.7	592

て調べることができる。表 1 に各条件でのパラメータ値を示す。

また、表 1 の各パラメータを用い、静止接触角および固液間の摩擦係数を求めた結果を表 2 に示す。ここで、摩擦係数は流体が固体に対して相対運動をするときに発生する壁面の接線方向応力と固液間の速度差の比として定義した。接触角は各壁面格子に対し、同じ値を得ることができているのが確認された。また、摩擦係数は格子に依存して二けた程度異なった値をとっている。このことは流体と固体との間の速度差が同じであれば、fcc 構造の場合の方が壁面での応力が 1/100 程度になり、流体は固体の表面を滑りやすくなっていることを示している。

気泡成長の計算はあらかじめ、過熱状態で定常とした液体分子の一部を円筒状に取り除くことによって気泡核を人工的に作成し、その後さらに減圧によって過熱度を大きくすることで気泡を成長させることによって行った。また、計算中の分子の温度は壁面にのみ Langevin 法による温度制御をかけることにより、壁面温度が一定となるようにした。

図 2 に各条件における気泡体積 V_g の時間変化を示す。初期の体積の差を引いた増分を比較すると、接触角が小さいほど増加が速かった。また、同一の接触角で比較をすると、fcc 格子の場合の方が bcc 格子の場合に比べて小さかった。次に壁面近傍の流体粒子の質量流束の界面直交成分の分布を調べた。図 3 に壁面近傍の流体速度の x 方向成分の分布を示す。図に示されるよう接触線近傍の液相部

速度は気泡拡大にともなって正の値をとってはいないが界面（密度分布より定義）の移動速度（Case #1f、1b : 10m/s、#2f、#2b : 7m/s、#3f、#3b : 5m/s）よりもかなり遅かった。このことは液相部の流体粒子が界面に「置き去り」にされ、蒸発が起こっていることを示している。液相速度が界面移動速度よりも遅い原因は壁面での摩擦によるものと考えられる。また、fcc の場合は bcc の場合よりも液体部分の速度は大きかった。これは fcc の方が摩擦係数が小さく、流体の易動性が良かったためと考えられる。一方、接触線から離れた部分ではこの速度差は小さく、蒸発速度が小さいことがわかった。また、fcc、bcc 間での差異はほとんど見られなかった。これらのことにより、分子レベルで平滑な表面においても固液間摩擦により気泡成長が影響をうけることがわかった。

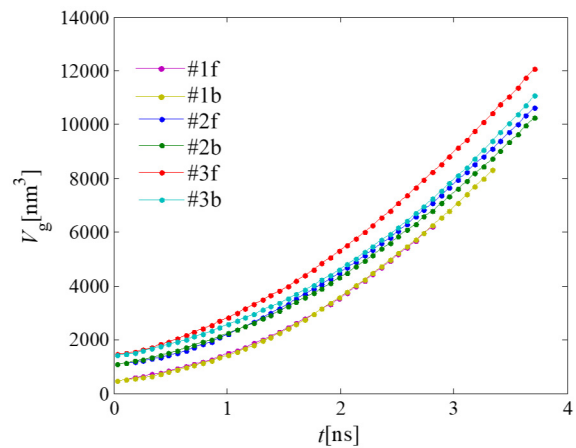


図 2 気泡体積の時間変化

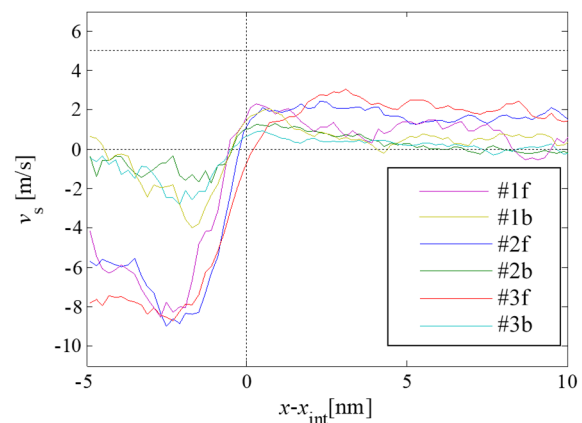


図 3 接触線近傍の流体速度の分布

2.2 実験

実験はフォトリソグラフィと反応性イオンエッチングにより凹凸加工を施したシリコンウェハ上に移動接触線を形成し、その際の界面形状を高速カメラによって計測する手法で行った。加工は水平方向10mm、鉛直方向長さが10~750 μ mの長方形溝を掘ることによって行った。測定はシリコンウェハ試料表面が鉛直になるように固定し、ポンプで試液(エチレングリコール)を送り出すことによって試料表面上を接触線が上昇する体系とした。図4に溝鉛直長さが100 μ mのときの接触角の時間変化を示す。溝に接触線がトラップされることにより接触角が変動している様子がわかる。このときの界面形状を調べたところ、接触角変動にともなう界面の変形は壁面のごく近傍に限られており、その領域の厚さは粘性による壁面速度変動が壁面から離れる方向に伝播する速度を考慮することによってあらわすことができることがわかった。このことはこの変形する領域での応力のバランスを考慮したモデルにより凹凸面での気泡の成長への影響を記述することができることを示唆している。

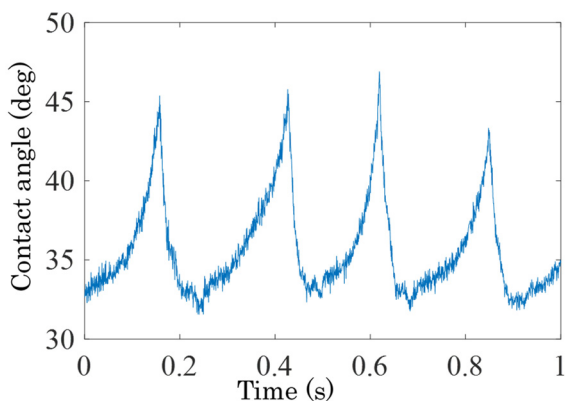


図4 凹凸表面を移動する接触線の接触角

3. 発表 (研究成果の発表)

- [1] Takahiro Ito, Tatsuya Tsuneyoshi, Yoshiyuki Tsuji, Kenji Katoh, Tatsuro Wakimoto, Interface Deformation Near the Moving Contact Line on a Periodically Roughened Surface, APS-DFD 2018, Q27.00007 (Atlanta, 2018).
- [2] Souta KAKAMU, Tatsuya TSUNEYOSHI, Takahiro ITO, Yoshiyuki TSUJI, Molecular Dynamics Simulation of the Bubble Growth Under Various Wall Conditions, Int. Conf. Fluid Dyn. (ICFD 2018), GS1-21 (仙台, 2018).
- [3] 各務 颯汰, 恒吉 達矢, 伊藤 高啓, 辻 義之, 分子動力学法を用いた壁面上での気泡核成長における壁面近傍蒸発流束の影響, 日本機械学会東海支部講演会, #411 (岐阜, 2019).