

平成19年 4月10日

平成18年度「コンタクトライン近傍流体の動力学」活動報告書

東京理科大学 上野 一郎

1. 構成メンバ

氏名 (50音順)	所属
上野 一郎	東京理科大学理工学部
木村 達人	神奈川大学工学部
小宮 敦樹	東北大学流体科学研究所
塩見 淳一郎	東京大学工学系研究科
松本 聡	宇宙航空研究開発機構
丸山 茂夫	東京大学工学系研究科

2. 本年度 WG 会合開催実績

(1) 第1回: 2006/8/16, /17 (IHTC13 (Sydney) 期間中に開催). 参加メンバー: 上野・小宮・塩見・丸山.

(2) 第2回*: 2006/9/28 (日本宇宙フォーラム). 参加メンバー: 上野・小宮・塩見・丸山・松本・理科大学生3名.

(3) 第3回: 2006/11/8 (ICFD(松島)期間中に開催). 参加メンバー: 上野・小宮・塩見.

(4) 第4回*: 2007/2/28 (東北大学流体科学研究所). 参加メンバー: 上野・木村・小宮・塩見・松本.

*: 旅費請求を行った会合

3. 活動目的

固体表面上において液滴や液膜の移動によるいわゆる「濡れ」の現象は、窓ガラス上をしたたり落ちる雨滴や、コップややかんに注いだ水の動きなど、身近に存在し日常的によく見かける現象である。この濡れの問題は身近な例に限らず、工業的にも幅広い業種において見られる。機械設計・開発時においては、要素間の潤滑や除熱など熱流体力学の問題は必然的に生起するため、考慮が不可欠な事象である。さらに当該熱流体现象は、国際宇宙ステーションや大規模プラントなどサブミクロメートルオーダーから、マイクロ・ナノロボッ

トなどナノメートルオーダーに至るまで非常に幅広い領域に亘るものであると同時に、各スケール間の相互作用も含めた複雑なものである。すなわち、「濡れ性」と呼ばれる性質は界面近傍の分子レベルからなるミクロな現象が、液滴全体の形状や運動といったマクロ的な挙動に影響を与えるというメゾスコピックな現象であると言える。

本研究グループでは、このようなメゾスコピックな熱流体力学に関する知見を蓄積すると共に、宇宙環境における部分的な濡れを有する系を利用した応用技術の高効率化、また部分的濡れを有する系の環境制御可能性を目指して研究を行っている。特に宇宙環境においてこのような系が大きく寄与するのは熱流体现象を利用した技術であり、沸騰や凝縮現象を伴う熱交換器の伝熱特性に直結する問題であると言える。また、結晶成長や薄膜コーティング、軌道上あるいは宇宙運行施設等におけるより高速な水質試験技術などを含む化学反応試験、さらに動植物の環境保持に深く関与している。一方、今後人類が宇宙進出するにつれ、さまざまな重力レベルでの産業あるいは生活活動を行うことが考えられる。このような環境での活動を行うにあたり、これまで重力が全く考慮されていなかった「濡れ」という問題に対して、重力をパラメータとして新しい理解・制御法の確立を行うことは極めて重要かつ不可欠なことである。

本研究グループでの活動では、まず相変化・化学反応を考慮せず、固体面上を移動する液滴前縁部（固液気3相境界線（コンタクトライン：以下 CL））近傍領域に注目した研究を、マクロ熱流体力学的な実験的アプローチによるもの、分子動力学法を利用した計算力学的アプローチによるものを実施している。

4. 活動内容

本研究グループでは、前述の通り主に実験および分子動力学法を用いた数値計算から当該現象にアプローチしている。研究体制および内容を以下に示す。

○実験的研究[担当:上野(東理大),小宮(東北大),松本(JAXA)]

(i) 高精度干渉計を用いた, 固体面上を移動する液滴前縁および後縁コンタクトライン近傍流体のプロファイル再構築 (Figs. 1-3) (上野・小宮・松本), (ii) 位相シフト技術の導入による干渉計の高精度化 (Fig. 4) (小宮・松本), (iii) コンタクトラインの移動に対する固体面上温度勾配の影響 (上野).

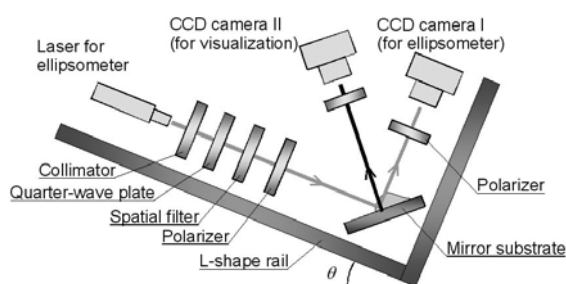


Fig. 1 Experimental apparatus for detecting precursor film ahead the traveling droplet on the solid substrate.

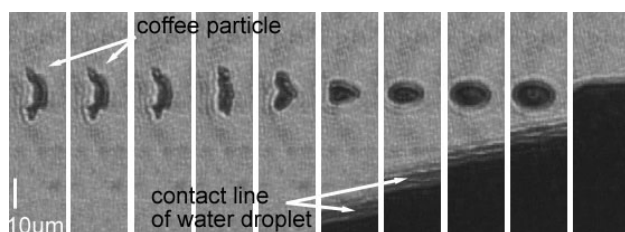


Fig. 2 Typical example of a series of snapshots of fringe pattern (obtained by CCD camera I in Fig. 1) in the case of silicon-water system with frozen coffee particle. The droplet travels upward in this figure. The coffee droplet melts before the macroscopic contact line reaches it. The frame interval is 2.0 s.

(i)では, これまでの研究成果による前縁部近傍流体の動力学に関する知見の蓄積に加え, さらに後縁部近傍流体に関する知見蓄積を目指した新しい実験的研究を開始した. 今年度は特に, 移動液滴前方に存在する先行薄膜と呼ばれる領域の存在長さの計測を試み, 従来の理論的研究および実験的研究との比較を行った. 来年度以降においては, 当該現象に関する周囲流体の影響に注目して研究を継続していく予定である.

(ii)においては, (i)でも記述した先行薄膜領域の長さおよび厚さのより精密な計測実現を目指して, 当該実験系における位相シフト技

術の導入を行ってきた.

(iii)では, これまでの等温系での実験だけでなく, 実際の熱伝達機器等への応用を目指して, 固体面上の温度分布を制御した状態でのCLの移動に注目して, 実験装置系の構築および予備的实验を行ってきた. これにより, 来年度以降においては先行薄膜領域における熱伝達問題も含めた研究の実現を目指す.

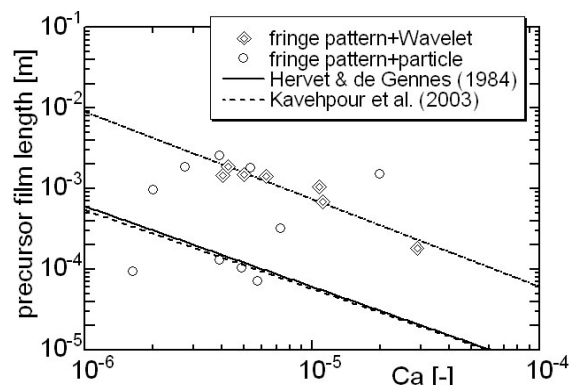


Fig. 3 Precursor film length as a function of non-dimensional number $Ca \equiv \rho v U_{CL} / \sigma$, where ρ is the fluid density, v the fluid viscosity, U_{CL} the traveling speed of the macroscopic contact line, and σ the surface tension; double diamond indicates evaluated precursor film lengths by applying Wavelet transformation to the time series of brightness data of the fringe pattern. Solid and dashed lines indicate theoretical prediction¹⁾ and empirical equation²⁾, respectively. Circle mark presents positions where tiny particle ahead the advancing droplet was affected by the precursor film.

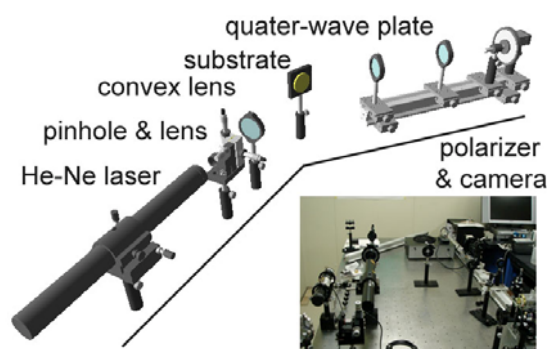


Fig. 4 New-designed experimental apparatus applying the phase-shift ellipsometry.

○分子動力学法を用いた数値計算[担当:上野(東理大),木村(神奈川大),塩見・丸山(東大)]

- (i) 固体面上を移動するナノスケール液滴に関する動力学 (木村・上野),
- (ii) カーボンアルコール系に関するポテンシャル構築およびコード開発 (木村),
- (iii) カーボンナノチューブ内外における水の移動 (Fig. 5) (丸山・塩見)
- (iv) 移動するナノ液滴に対するナノスケール粗さの影響 (Fig. 6) (上野),
- (v) ナノ液柱に生起する不安定性 (Fig. 7) (上野)

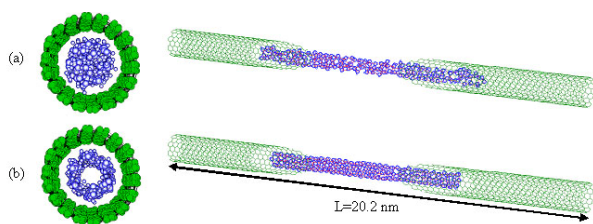


Fig. 5 (a) A typical initial condition of a saturated water cluster in a (9, 9) SWNT, and (b) the ice-nanotube crystallized by lowering the SWNT temperature to 200 K (N=6).

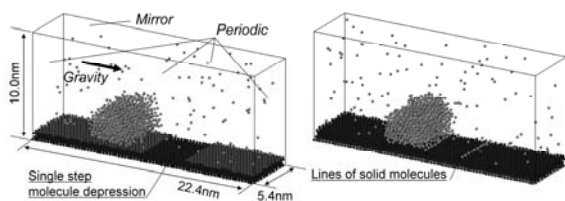


Fig. 6 Target geometries for MD simulation considering the effect of nanometer-scale roughness on the solid substrate upon the traveling droplet; a fully span-wise single-step-molecule depression (left) and double-line structure of solid molecules located perpendicular to the direction of the gravity (right).

(i) 特に CL 近傍をミクロ的に注目し、分子スケールでの CL およびその移動時のダイナミクスの理解を目指して研究を行った。来年度以降は解析スケールの巨大化を実現し、マクロ的な Navier-Stokes 方程式上での取り扱いに向けてより精密なモデル化を目指した解析を行っていく予定である。

(ii) これまで行ってきた解析は主に Lennard-Jone 流体を対象としてきたが、工業的に非常に重要となる系の解析実現を目指し、試験流体として水やアルコールを、さらに試験固体としてカーボンを採用した際のポテン

シャル系の構築を行ってきた。これらの研究により、より現実的な現象解析が実現される。

(iii) 近年その工業的応用が爆発的に伸びているカーボンナノチューブに注目し、水との相互作用に関する知見蓄積を行ってきた。将来的にはナノチューブを固体基板上に規則的に密集成長させたナノチューブカーペットの電子機器への応用実現や、微小重力環境下での高品質製造技術確立を目指した研究を行っていく予定である。

(iv) いわゆる固体面上を流体が移動する際に問題となる「粗さ」に関し、分子スケールでのその問題の存在と制御実現を目指して研究を行っているものである。特に、ナノスケール粗さの付与により、移動液滴の運動の受動的制御の可能性を示しており、固体面上での液滴ハンドリング技術の開発をも視野に入れた解析を行っていく予定である。

(v) 実験(i)で記述した固体面上を移動する液滴後縁部に生起するサテライト液滴の形成に関する分子的な解析を目指して行っている。これにより微小液滴生成の制御技術などの開発をも視野に入れているものである。

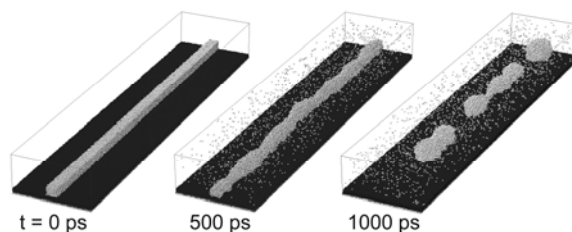


Fig. 7 Typical example of Rayleigh-Plateau-like instability on nanometer-scale liquid bridge sitting on the solid substrate.

5. 成果

- 1) Ueno, I., Konisho, T., Kawase, T. & Watanabe, T., Existing length of precursor film ahead advancing droplet on solid substrate, Proc. 25th Int. Symp. Space Technology & Science (25th ISTS) (Kanazawa, 6/4-/11, 2006), CD-ROM (paper # 2006-h-14) (4 pages), 2006.
- 2) Ueno, I., & Kochiya, K., Effect of suspended particles upon drying process of volatile droplet sitting on solid surface, 36th COSPAR (Committee on Space Research Scientific Assembly, Beijing, China, 16-23 July 2006), CD-ROM (#COSPAR2006-A-02200, 1 page). 2006.
- 3) Ueno, I., Konisho, T., & Hirose, K., Dynamics of fluid in the vicinity of contact line of droplet traveling on solid substrate, Proc. 8th Int. Workshop on Short-Term

- Experiments under Strongly Reduced Gravity Conditions (Drop Tower Days 2006 in Japan) (10/30 - 11/1, 2006, Toki & Tsukuba, Japan), pp.66-67, 2006.
- 4) Ueno, I., Konisho, T., Kawase, T., & Watanabe, T., On precursor film formed ahead advancing contact line of traveling droplet on solid substrate, Proc. 3rd Int. Conf. Flow Dynamics (11/7-9 06, Matsushima, Miyagi, Japan), pp.75-76, 2006.
 - 5) Ueno, I., Konisho, T., Kawase, T., & Watanabe, T., Precursor film length ahead droplet traveling on solid substrate, Proc. 3rd Int. Conf. The International Marangoni Association (IMA-3) (11/14-17 06, Gainesville, FL, USA), (1-page abst.) 2006
 - 6) 東風谷和範・上野一郎, 固体面上液滴内における粒子運動とパターン形成, 第43回日本伝熱シンポジウム講演論文集 I (名古屋, 5/31-6/2 2006), pp.265-266, 2006.
 - 7) 小仁所匠, 川瀬智也, 渡邊拓也, 上野一郎, 固体面上を移動する液滴前縁部近傍に存在する先行薄膜の可視化と存在領域の検出, 可視化情報 26 Suppl. 1 (第34回可視化情報シンポジウム講演論文集, 7/24-/26, 2006, 新宿), pp.65-68, 2006.
 - 8) 小仁所匠, 川瀬智也, 渡邊拓也, 上野一郎, 固体面上を移動する液滴前縁部近傍流体の動力学 - 液滴移動と先行薄膜の関係 -, 日本機械学会 2006 年度年次大会講演論文集 III (9/18-/22, 2006, 熊本, 発表日 9/20), pp. 377-378, 2006.
 - 9) 東風谷和範, 上野一郎, 固体面上液滴蒸発過程における液滴内微粒子の影響, 日本機械学会 2006 年度年次大会講演論文集 III (9/18-/22, 2006, 熊本, 発表日 9/20), pp. 379-380, 2006.
 - 10) 上野一郎, 小宮 敦樹, 木村達人, 塩見淳一郎, 丸山茂夫, 松本聡, 「コンタクトライン近傍流体の動力学」研究班WG活動報告, 第23回宇宙利用シンポジウム (2007/1/15-1/17, 東京)講演論文集, pp.90-93, 2007.
 - 11) A. Komiya, S. Maruyama, Precise and Short-time Measurement Method of Mass Diffusion Coefficients, Experimental Thermal and Fluid Science, Vol.30-6, (2006-6), pp. 535-543.
 - 12) S. Maruyama and A. Komiya, In-Situ Measurement of Small Diffusion Field Using Phase- Shifting Interferometer, Journal of Flow Visualization and Image Processing, Vol.13-3, (2006-10), pp. 243-264.
Komiya, S. Maruyama and S. Moriya, Measurement of Mass Diffusion Coefficient of Micro Quantity Proteins Using Phase Shifting Interferometer, Proceedings of the 13th International Heat Transfer Conference, Sydney, Australia, (2006-8), CD-ROM MST-10.
 - 13) 小宮敦樹・円山重直・守谷修一: 非定常拡散場の局所計測による物質拡散係数の濃度依存性評価, 第 43 回日本伝熱シンポジウム講演論文集, 名古屋, (2006-6), 291-292 頁.
 - 14) A. Komiya S. Maruyama and S. Moriya, Evaluation of Concentration Dependency on Diffusion Coefficient by Local Measurement of Transient Diffusion Field, Proceedings of the 43rd National Heat Transfer Symposium of Japan 2006, Nagoya, (2006-6), Vol. I , pp.291-292.
 - 15) 小宮敦樹・円山重直・守谷修一: タンパク質拡散現象に及ぼす広域緩衝液の影響評価, 第27回日本熱物性シンポジウム講演論文集, 京都, (2006-10), 358-360 頁.
 - 16) A. Komiya, S. Maruyama and S. Moriya, Evaluation of the Influence of Universal Buffer on Diffusion Phenomena of Proteins, Proceedings of the 27th Japan Symposium on Thermophysical Properties, Kyoto, (2006-10), pp.358-360.
 - 17) Wang, C. S., Chen, J. S., Shiomi, J. & Maruyama, S., A study on the thermal resistance over solid-liquid-vapor interfaces in a finite-space by a molecular dynamics method, International Journal of Thermal Science (in press).
 - 18) Y. Shibuta and S. Maruyama, A molecular dynamics study of the effect of a substrate on catalytic metal clusters in nucleation process of single-walled carbon nanotubes, Chem. Phys. Lett., 437, pp. 218-223, 2007.
 - 19) Einarsson E., Murakami, Y., Kadowaki, M., Duong, H. M., Inoue, M. & Maruyama, S., Production and applications of vertically aligned single-walled carbon nanotubes, Therm. Sci. Eng., 14-3, pp. 47-49, 2006
 - 20) Maruyama, S., Igarashi, Y., Taniguchi, Y. & Shiomi J., Anisotropic Heat Transfer of Single-Walled Carbon Nanotubes, J. Therm. Sci. Tech., 1-2, pp. 138-148, 2006.
 - 21) Kakehi K., Noda, S., Chiashi S. & Maruyama, S., Supported Ni catalysts from nominal submonolayers grow single-walled carbon nanotubes, Chem. Phys. Lett., 428, pp. 381-385, 2006.
 - 22) Murakami, Y., and Maruyama, S., Detachment of vertically aligned single-walled carbon nanotube films from substrates and their re-attachment to arbitrary surfaces, Chem. Phys. Lett., 422, pp. 575-580, 2006.
 - 23) 塩見淳一郎, 丸山茂夫, 「カーボンナノチューブ内部での水の輸送と相変化に関する分子動力学シミュレーション」, 日本機会学会 2006 年次大会講演論文集, vol. 3, pp. 383-384, 2006.
 - 24) 塩見淳一郎, 木村達人, 丸山茂夫, 「カーボンナノチューブ内での水の相変化」, 熱工学コンファレンス 2006 講演論文集 No. 6, pp. 25-26, 2006.
 - 25) 丸山茂夫, 塩見淳一郎, 宮内雄平, 林原, アンペリグスタフ, 単層カーボンナノチューブの誘電泳動分離, 第 32 回フラーレンナノチューブ総合シンポジウム, 名古屋, p. 64, 2007.
 - 26) 塩見淳一郎, 木村達人, 丸山茂夫, カーボンナノチューブ内部での水の相変化に関する分子動力学, 第32回フラーレンナノチューブ総合シンポジウム, 名古屋, p. 39, 2007.