

液滴の蒸発による基板上でのパターン形成の数値シミュレーション

日大生産工(院) ○関谷 駿
日大生産工 野々村 真規子

阿南工業高等専門学校 山田 耕太郎
広島大学 小林 亮

1 まえがき

溶液を蒸発させたあとには、基板上に様々なパターンが形成される。例えば、コロイド分散液やポリマー溶液を蒸発させると、放射状、同心円状、ドット状などが蒸発と対流によって形成される。¹⁾²⁾

文献³⁾ではこのパターン形成について、数理モデルを作成し、空間1次元の数値計算を行っている。本研究では文献³⁾のモデルを空間2次元で数値計算を行うことで、どのようなパターンが形成されるかを調べる。

2 数理モデル

液滴の厚みを $h(\mathbf{r}, t)$ という変数を用いて表す。 $\mathbf{r} = (x, y)$ は位置、 t は時間を表す。次の式で h は時間発展する。³⁾

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \nabla \cdot \left\{ \frac{1}{3} h^3 \nabla \left[-\gamma \chi(h) \nabla \cdot \left(\frac{\nabla h}{\sqrt{1+(\nabla h)^2}} \right) + \chi'(h) \left(\gamma \frac{1}{\sqrt{1+(\nabla h)^2}} - \Gamma \right) + h \right] \right\} - f_e \quad (1)$$

式(1)の右辺第1項は表面張力、右辺第3項は重力項である。右辺第2項は溶液と基板が接触しているところでのみ値を持つ。図1に示すように、溶液と基板との接触角 θ と、界面張力 γ_{lv} 、 γ_{sv} 、 γ_{ls} の間にはヤングの関係式が成立している。 $\cos \theta$ が $1 / \sqrt{1+(\nabla h)^2}$ 、 $\gamma_{lv} = \gamma$ 、 $\gamma_{sv} - \gamma_{ls} = \Gamma$ であることを考慮すると、この右辺第2項の括弧の中はヤングの式そのものであることがわかる。式(1)の最後の項は蒸発を表し、次のように書ける。

$$f_e = e[p_0 \exp(A\Phi) - p_v] \quad (2)$$

ただし、

$$\Phi = -\gamma \chi(h) \nabla \cdot \left(\frac{\nabla h}{\sqrt{1+(\nabla h)^2}} \right) + \chi'(h) \left(\frac{\gamma}{\sqrt{1+(\nabla h)^2}} - \Gamma \right) \quad (3)$$

とした。関数 $\chi(h)$ はその場所が濡れているかを表す指標関数で、数値計算では、

$$\chi(h) = \begin{cases} \tanh\left(\frac{h}{\delta}\right) & h > 0 \\ 0 & h \leq 0 \end{cases} \quad (4)$$

を用いた。

液滴内に含まれる物質が基板上に析出するという過程は、溶質の量 $s(\mathbf{r}, t)$ 、析出物質の量 $q(\mathbf{r}, t)$ を用いて次のように表している。³⁾

$$\frac{\partial s}{\partial t} = \nabla \cdot \left\{ \frac{1}{3} h^2 s \nabla \left[-\gamma \chi(h) \nabla \cdot \left(\frac{\nabla h}{\sqrt{1+(\nabla h)^2}} \right) + \chi'(h) \left(\gamma \frac{1}{\sqrt{1+(\nabla h)^2}} - \Gamma \right) + h \right] \right\} + D_s \nabla \cdot \left[h \nabla \left(\frac{s}{h} \right) \right] - G(h, s, q) \quad (5)$$

$$\frac{\partial q}{\partial t} = \nabla \cdot [\hat{D}_q \nabla q] + G(h, s, q) \quad (6)$$

$$\hat{D}_q(h, s) = \frac{D_q \chi(h) \left[1 + \tanh\left(\frac{s - hc_1}{\delta_q} \right) \right]}{2} \quad (7)$$

析出は関数 $G(h, s, q)$ で表す。(図2)

$$G(h, s, q) = \begin{cases} \omega_1 q(s - hc_1) & s < hc_1 \\ \omega_2 s(q - k(h, s)) & s \geq hc_1, q \geq k(h, s) \\ \omega_3 q(q - k(h, s)) & s \geq hc_1, q \geq k(h, s) \end{cases} \quad (8)$$

析出により Γ が変わる効果を入れるため

$\Gamma = \Gamma_0 + \Gamma_q \tanh(q/\delta_q)$ とした。

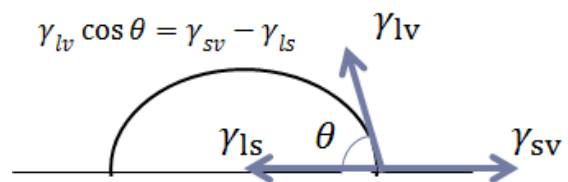


図1 ヤングの式。ここで γ_{lv} は液/気界面張力、 γ_{sv} は固/気界面張力、 γ_{ls} は液/固界面張力である。

Numerical Simulation of the pattern formation on the substrate by evaporation of the droplets

Shun SEKIYA, Kohtarou YAMADA, Makiko NONOMURA and Ryo KOBAYASHI

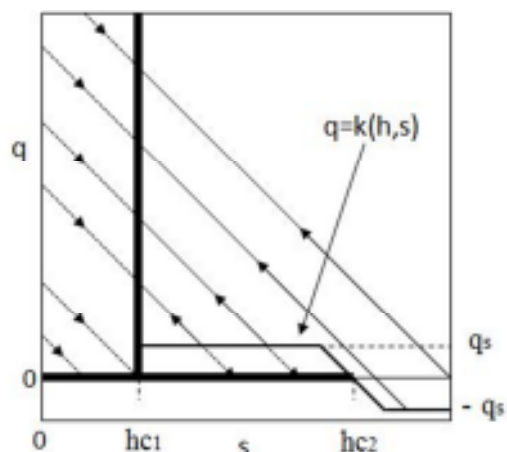


図2 s-q平面でのダイナミクス

2 シミュレーション結果及び検討

図3は空間1次元で液滴の蒸発の計算結果である。時間がたって液滴が蒸発し、基板上的の h の値が小さくなっていく様子が再現できていることがわかる。

次に、析出を考慮して空間1次元でシミュレーションを行った結果を図4に示す。蒸発させた後の析出物質 q の空間分布を表示している。ある一定の周期で析出が起こっていることがわかる。

空間2次元で計算した結果を図5と図6に示す。これらの図は基板上的の析出物質 q の空間分布を上から見た形である。図5は $\Gamma_q = 0.0$ 、図6は $\Gamma_q = 1.0$ としている。図5と図6を比較すると図5では中心で山のようにになっているのに対し、図6では中心で同心円状のパターンが見られるようになっていることがわかる。

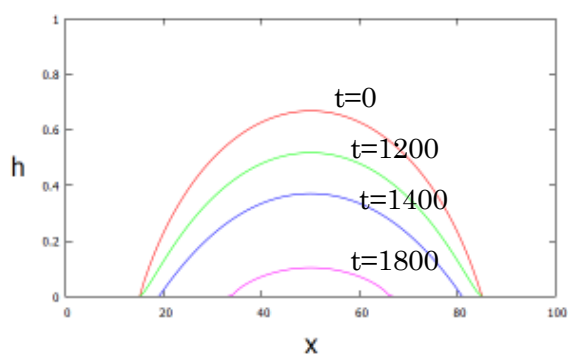


図3 液滴の蒸発

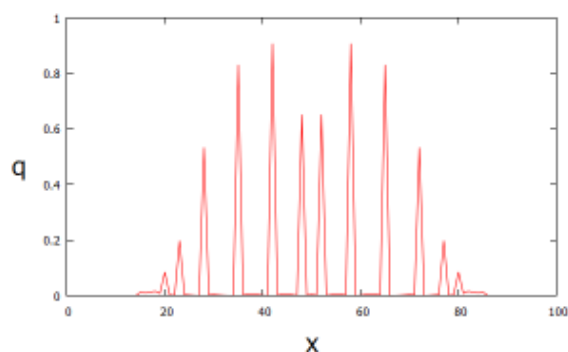


図4 析出物質 q の空間分布

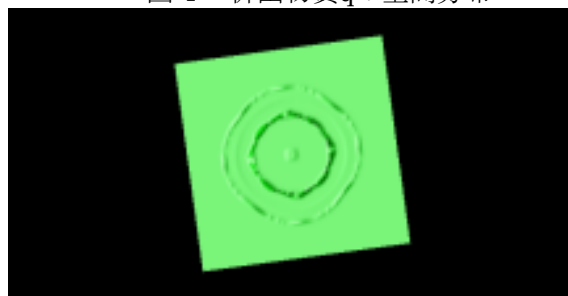


図5 $\Gamma_q=0.0$

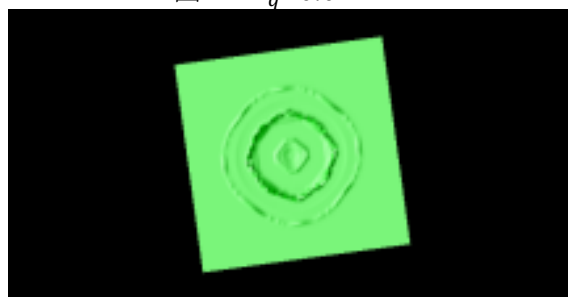


図6 $\Gamma_q=1.0$

3 まとめ

2次元の数値シミュレーションを行うことができた。現在より良い結果を出すためにメッシュサイズを細かくするなどの計算の改善に取り組んでいる。

「参考文献」

- 1) O.Karthauss, L.Grasjo, N.Maruyama and M.Shimomura, Chaos 9,308,(1990)
- 2) R.D.Deegan, Phys.Rev.E61,475,(2000)
- 3) M.Nonomura, R.Kobayashi, Y.Nishiura and M.SHIMOMURA, Periodic Precipitation during Droplet Evaporation on a Substrate, Journal of the Physical Society of Japan Vol. 72, No. 10 (2003)
- 4) L.Frastia, A.J.Archer and U.Thiele, Modelling the formation of structured deposits at receding contact lines of evaporating solutions and suspensions, Soft Matter, 11363,(2012)