

微小液滴の固体壁面への衝突ダイナミクス

—粒子シミュレーションによる解析—

松本 充弘、田浦 剛

1. はじめに

液滴が固体壁に衝突する現象は、さまざまな分野で見られる。スプレー塗装やミスト冷却などでは液滴サイズは mm 程度と比較的大きい。他方、サブミリメートルの微小液滴を均一・安定に吐出するインクジェットプリンティング技術においては、紙などへの単純な印刷だけではなく、集積回路や LED パネルなどのパターン形成や μ TAS (Micro Total Analysis System) の製造など、さまざまな応用が検討されている¹⁻⁴⁾。

このような微小液滴の固体壁面への衝突ダイナミクスを解析するために、我々は、粒子シミュレーションの代表的手法の一つである分子動力学法を用いてきた⁵⁻⁷⁾。この手法は、連続体力学に基づく従来の数値シミュレーション (CFD) を補完するものである。本稿では、こうした粒子シミュレーション手法の原理を解説し、その適用事例を紹介する。

2. 粒子シミュレーションとは

2.1 CFD 法と粒子法

対象液滴が微小化するのに伴い、液滴の飛行状況や壁面への衝突過程を直接観察することはますます困難になりつつあり、数値解析が重要な手段となる。多くの場合、数値流体力学

(Computational Fluid Dynamics, CFD) 計算が使われるが、これは液滴や周囲気体を連続体として取り扱う。自由表面をもつ液滴の変形挙動を追跡することは混相流数値解析の重要課題の 1 つであるが、衝突速度が 1-100 m/s と大きく、液滴が分裂したり大変形したりする場合に、精度よく安定なシミュレーションを行うことは簡単ではない。また、動的表面張力や接触角の時間変化など、本質が十分にわかっていない物理量を入力パラメータとして与えなければならないというもどかしさもつきまとう。

ここで紹介する「粒子シミュレーション」は、流体を連続体ではなく粒子の集合体として扱ったものである。その最もミクロなレベルの手法である「分子動力学 molecular dynamics 法、MD 法」では、液滴を液体分子の集団と考え、分子 1 つ 1 つの運動を計算機により追跡する。このため、分子の性質が適切にモデル化されている限り、表面張力などの物性は自動的に計算の中に組み込まれ、外部パラメータとして入力する必要がない。このような長所をうまく生かして、さまざまなタイプの粒子シミュレーション⁸⁾ が microfluidics の解析に応用されつつある。

2.2 粒子シミュレーション概説

一般に、物質を構成している原子・分子は運動方程式に従って運動しているので、原理的にはこの運動方程式に基づいて原子・分子の運動 (軌跡) を追跡することで物質の性質がわかるはずである。古典力学における Newton 運動方

2010年7月1日受付