

コーヒーリングの3次元シミュレーション

北野静佳 (指導教員：工藤和恵)

1 はじめに

基板上的液滴の乾燥は、我々の生活に身近な現象であり、その一つにコーヒーリング現象というものがある。コーヒーリング現象とは、コーヒーが乾燥すると液滴内の水分が蒸発するが、そのときに液滴の端が中央に比べ蒸発しやすいため、減少した分の水分を補うために粒子が端に移動・堆積することで起きる現象である。この現象はインクジェットプリントや塗装など、乾いた後の液滴内にある粒子が均一になっていることが望ましい分野への貢献が期待されている。

本研究では、粒子の移動・堆積により発生するコーヒーリング現象の抑制を目的とした数値シミュレーションを行った。

2 先行研究

コーヒーリング現象の抑制に関する研究は多く行われている。例えば、P.J.Yunker 等の研究により、粒子を球形から楕円形にすることで、粒子間の相互作用が強くなり、粒子が均一に堆積され、コーヒーリング現象が抑制されることがわかった [1]。また、別の文献では、球形と非球形の粒子の相互作用により、空気と液滴の界面と液滴内の流れがどちらも外側に向かうとき、コーヒーリング現象が効果的に抑制されることがわかった [2]。

3 モデル

本研究では、Biased Random Walk (BRW) 法を用いて3次元シミュレーションを行う [3]。まず図 1(a) のような球状キャップの形の液滴を考える。粒子の大きさと同じ大きさの格子を配置し、この液滴内を粒子が上下左右前後にランダムに動く (図 1(b))。粒子がランダムに移動する確率は、以下の式で表される。

$$P_{\text{move}} = (p_{x+}, p_{x-}, p_{y+}, p_{y-}, p_{z+}, p_{z-}) \quad (1)$$

$$p_{x+} = \frac{1}{6} + \frac{V_x}{6V_{\text{max}}}, \quad p_{x-} = \frac{1}{6} - \frac{V_x}{6V_{\text{max}}}$$

$$p_{y+} = \frac{1}{6} + \frac{V_y}{6V_{\text{max}}}, \quad p_{y-} = \frac{1}{6} - \frac{V_y}{6V_{\text{max}}}$$

$$p_{z+} = \frac{1}{6} + \frac{V_z}{6V_{\text{max}}}, \quad p_{z-} = \frac{1}{6} - \frac{V_z}{6V_{\text{max}}}$$

ここで、 V_x, V_y, V_z は無次元速度成分を、 V_{max} は各方向の最大速度成分を表している。

また、速度の動径成分と z 成分については以下の式で表される。ここで、初期接触角を θ 、底面の半径を R 、液滴の初期の高さを h_0 とする。

$$V_r(r, z, t) = \frac{3}{8r(1-t)} [(1-r^2) - (1-r^2)^{-\lambda(\theta)}] \times \left(\frac{z^2}{h^2} - \frac{2z}{h} \right) - \frac{gh_0h}{2R} \left(\frac{z}{h} - \frac{3z^2}{2h^2} \right) \quad (2)$$

$$V_z(r, z, t) = \frac{3}{4(1-t)} [1 + \lambda(\theta)(1-r^2)^{-\lambda(\theta)-1}] \left(\frac{z^3}{3h^2} - \frac{z^2}{h} \right) + \frac{3}{2(1-t)} [(1-r^2) - (1-r^2)^{-\lambda(\theta)}] \left(\frac{z^2}{2h^2} - \frac{z^3}{3h^3} \right) h(0, t) + \left(\frac{gh_0}{4Rr} + \frac{g'h_0}{4R} \right) \left(z^2 - \frac{z^3}{h} \right) - \frac{g'h_0r}{2R} \frac{z^3}{h^2} h(0, t) \quad (3)$$

速度の x 成分と y 成分はそれぞれ $V_x = \frac{V_{rx}}{r}$, $V_y = \frac{V_{ry}}{r}$ で与えられる。 t は乾くのかかった時間、 $\lambda(\theta) = \frac{1}{2} - \frac{\theta}{\pi}$, r は動径座標、 z は鉛直座標、 h は液層の厚さ、 V_r は動径方向速度、 V_z は鉛直速度を表している。また、 $g(r, t) = -2h_0r[J(\theta)\lambda(\theta)(1-r^2)^{-\lambda(\theta)-1} + 1] \frac{1}{R} - f(Ma)$ と表され、 J は蒸発率、 $f(Ma)$ はマランゴニ効果関数を表している。

次に、粒子をお互いに一定の度合いで接着させクラスタを形成する。この接着頻度の度合いを P_{stick} として一定に固定する。粒子が移動し、その先で粒子がくっつくことで新たにクラスタを形成し、それを一つの粒子として次のステップで移動するというアルゴリズムでシミュレーションを行う。

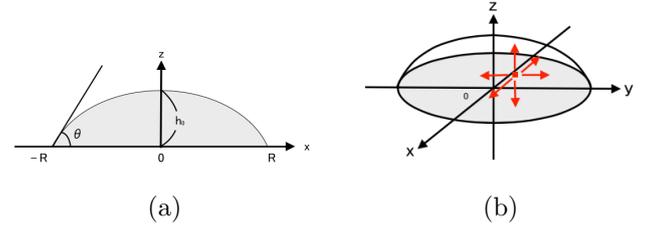


図 1: (a) 基板にある液滴モデルの断面図 (b) 粒子が液滴内を移動する方向

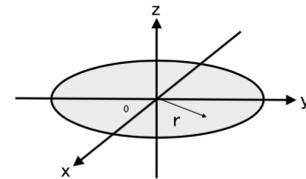


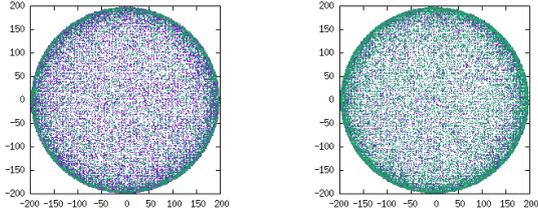
図 2: 液滴内の動径方向を表す図

4 シミュレーションと結果

前節のモデルをもとに、粒子が移動する3次元シミュレーションを行った。液滴内のうち粒子数に関する体積分率を ϕ とし、2 粒子の体積分率が (a) $\phi_1 = \phi_2 = 0.005$, (b) $\phi_1 = 0.003, \phi_2 = 0.007$ の 2 パターンで実行した。 P_{stick} の値を変化させることで粒子がどのように移動するか考察する。ここで、 P_{11} は粒子 1 同士の P_{stick} 、 P_{22} は粒子 2 同士の P_{stick} 、 P_{12} は粒子 1 と粒子 2 の間の P_{stick} を表している。また、図 3 から

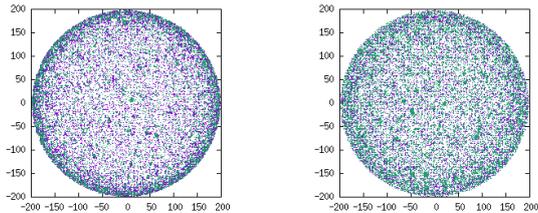
図6はシミュレーションの最終状態を上から見た図を表している。

図3から図6の結果より、 P_{stick} の値が小さいほどコーヒーリング現象が現れ、逆に P_{stick} の値が大きいほどコーヒーリング現象が現れなかった。これは P_{stick} が大きいほど、粒子が端に移動しきる前にクラスタを作ったため、端に偏ることなく全体に粒子が散らばったからである。また、粒子数を粒子ごとに変化させるとどのように移動するか考察する。粒子数(体積分率)を変えてみたところ、同じ P_{stick} での変化は見られなかった。この結果は、総粒子数が変わっていないこと、また2粒子それぞれの P_{stick} の値が同じであることが原因であると考えられる。



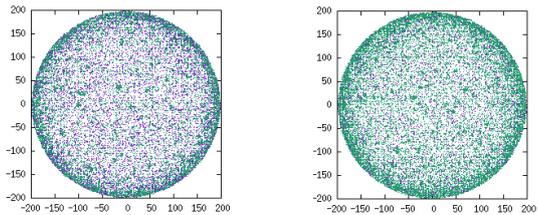
(a) $\phi_1 = \phi_2 = 0.005$ (b) $\phi_1 = 0.003, \phi_2 = 0.007$

図3: $P_{11} = P_{22} = 1, P_{12} = 1$



(a) $\phi_1 = \phi_2 = 0.005$ (b) $\phi_1 = 0.003, \phi_2 = 0.007$

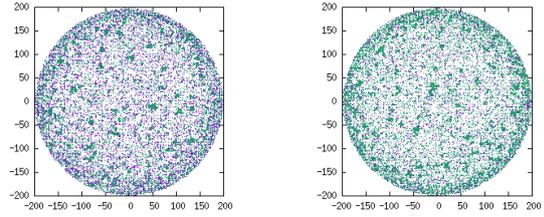
図4: $P_{11} = P_{22} = 100, P_{12} = 1$



(a) $\phi_1 = \phi_2 = 0.005$ (b) $\phi_1 = 0.003, \phi_2 = 0.007$

図5: $P_{11} = P_{22} = 1, P_{12} = 100$

また本研究では、コーヒーリング現象を数値的観点からも検証するために、粒子が存在する中心からの距離とその堆積数に着目して研究を進めた。図7は中心からの距離 r における円周上の粒子数の平均 H を求めたグラフである。ここで r, H を規格化するために底面の半径 R で割った値を軸とした。このグラフは P_{stick} の値が小さいとき、端に粒子が集中し、 P_{stick} の値が大きいとき、粒子が端に偏らず全体にまばらに広がっていることを示している。よって、 P_{stick} の値が大きいときに液滴の端とそれ以外の場所における粒子数の差があまり見られないことから、コーヒーリング現象を抑制できていると言える。



(a) $\phi_1 = \phi_2 = 0.005$ (b) $\phi_1 = 0.003, \phi_2 = 0.007$

図6: $P_{11} = P_{22} = 100, P_{12} = 100$

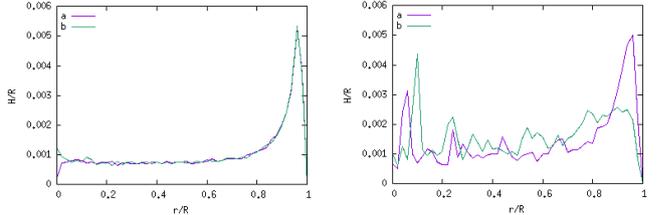


図3の側面図

図4の側面図

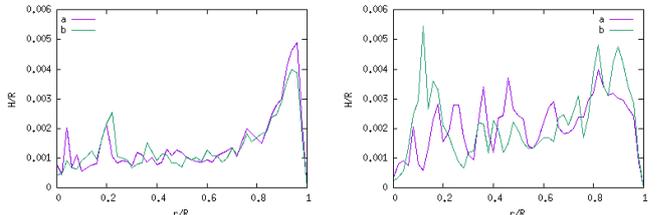


図5の側面図

図6の側面図

図7: 中心から等距離にある分子の高さの平均(側面図)

5 まとめと今後の課題

本研究では、2種類の粒子を用いて、コーヒーリング現象の移動過程を3次元シミュレーションで行った。それにより、 P_{stick} の値が大きいときにコーヒーリング現象は起きづらく、抑制されることがわかった。その原因は P_{stick} が大きいと粒子が端に移動する前に堆積してしまうからであると考えられる。これは、中心から等距離にある分子の高さの平均を求めたグラフからも確認できた。

しかし、本研究では2粒子には体積分率以外の違いはなかった。そのため今後は、接触角や液滴の半径を変えた場合や2粒子が違う物質の場合など、他の条件下でコーヒーリング現象がどのように発生してしまうのか、抑制できるのかについても検証していきたい。

参考文献

- [1] P. J. Yunker, T. Still, M. A. Lohr, and A. G. Yodh, "Suppression of the coffee-ring effect by shape-dependent capillary interactions" *Nature* **476**, 308311 (2011).
- [2] Ting Xu, Miu Ling Lam and Ting-Hsuan Chen, "Discrete Element Model for Suppression of Coffee-Ring Effect", *Sci. Rep.* **7**, 42817,(2017)
- [3] A. Crivoi, X. Zhong, and Fei Duan, "Crossover from the coffee-ring effect to the uniform deposit caused by irreversible cluster-cluster aggregation", *Phys. Rev. E* **92**, 032302 (2015).