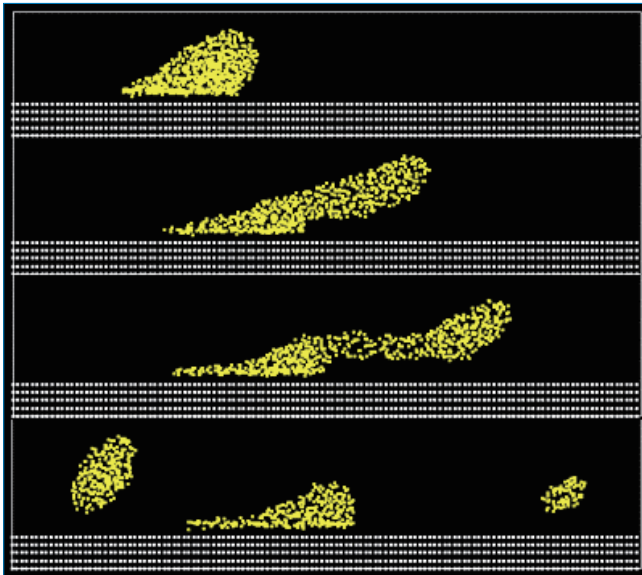


表面に拘束された液滴の動力学

ユニリーバ・リサーチでは、剪断のかかった表面に吸着された液滴の動力学の研究にDPD法を応用しています。この動力学は、洗浄、パーソナルプロダクト、油回収、および表面塗装の分野で、主要プロセスを推進している数多くのメカニズムを実証するのに役立っています。



上の図は、90度の接触角の滴が壊れる様子と、部分的に除去される様子を示しています。（引き離されたサブグループが、左から周期的境界条件まで再び入り込むことに注意してください。）スナップショットは、115、200、210、230時間単位で撮影されています。

外力によって動かされている固液界面の液滴とは、油性汚染が織物から除去されているとき、クリームカローションが皮膚上に塗られているとき、あるいはエマルジョン滴がミキサー刃によって壊れているときに起こるような状態のものをいいます。理論的及び計算的にアプローチすることが困難なために、このような液滴に対する定量的な理解が不足しています。このことは、これらの状況の中で起こっている流体力学、接触力、重力の間の複雑な相互作用についての洞察を得るという進歩を妨げてきました。その結果プロセス自体の改良が妨げられています。

最近、ユニリーバ・リサーチの科学者達は、散逸粒子動力学（DPD）法を拡張して、この系を定量的に取り扱いました。そして、液滴が離れるときもフォロジに関する実験結果と良い一致を得ただけでなく、予測される接触角に対するヤングの方程式と高い精度で一致しました。

DPDは、自然に多相の流体力学的と熱力学的な力を含む新しいシミュレーション法であり、液滴が壊れる状況を簡単に取り扱うことができます。更に、外部剪断効果を賦課することも簡単です。加えられたせん断速度と液滴サイズを見ると、現在の研究は低キャピラリー数(Caが最大でおよそ0.4)と低レイノルズ数(Re=31)の領域に集中しています。初期の出発形態は水の存在下で固相表面と接触している油滴でした。

シミュレーションによって、さまざまな油/表面と水/表面相互作用エネルギー平衡状態での液滴接触角を評価し、液滴形状に正確にフィットすることが明白である大きい角度に対するヤングの方程式とほぼ一致することを見出しました（下の表をご覧ください）。

Organization

Unilever

Products

BIOVIA Materials Studio DPD

シミュレーションを使って、接触角への剪断の効果を調べることにより、前進と後退とで角度が異なる接触角ヒステリシスの存在が確認されました。更に、ある剪断速度より上では、液滴は更に変形を続け、速度の増大に伴って表面に沿って動き、図に示したように、最終的には取り除かれます。この過程は、2つの特徴のあるタイムスケールを持つことで理解されます。その1つは液滴中での流れの形成を含んでおり、もう1つはエネルギー障壁に打ち勝たなければいけない過程である液滴の持ち上げを含んでいます。流れを与えることはエネルギー障壁を低下させ、その結果、はるかに短いスケールで液滴を持ち上げることができるような熱力学的な変動を可能にします。

water/solid interaction	oil/solid interaction	Contact angle (simulation)	Contact angle (Young)
40	20	68	60
40	40	91	90
20	40	114	120
20	80	145	149

このようなシミュレーションは、複雑な幾何学的な構造を持つ材料が加工変数の影響を与えられた状況について、だんだんと量的に理解するのに役立っています。このアプローチは、さらにもっと複雑なプロセスと単位操作を改善するために必要な理解を深めるのに有効な方法となっています。

参考文献

1. J.L. Jones, M. Lal, N. Ruddock and N.A. Spenley, Faraday Discuss., 1999, 112.