

高分子を含む液滴の蒸発過程シミュレーション

(東大院工) ○小林潤, 牧野真人, 奥菌透, 土井正男

【はじめに】

高分子溶質を含む溶液を基板上に滴下して作られる液滴がゆっくりと蒸発していく現象を計算機実験によって観察しています。液滴が溶媒のみからなる場合には滴は球帽形状を保持したまま消えてなくなります。一方高分子溶液は初期は球帽形を保ちますが、次第に表面形状がゆがみ、こぶのような形状をした溶質を残して蒸発を終えます。これはちょうどコーヒの雫をテーブルにこぼした跡として輪っかのような模様の染みができる現象に似ています。

近年では印刷・塗布を用いて有機デバイスを作成する技術が発達していますが、デバイスの高性能化のためには最終形状が均一な平坦膜であることが要請されます。このような背景の下で本研究では、さまざまなパラメータや初期条件を与えた場合の液滴の蒸発の最終形状がどのように決まるのかということ調べています。

【結果と考察】

溶液の拡散係数を変えて計算した結果の例を図に示します。図の上段はポリスチレン-アニソール溶液の拡散係数の物性値、下段はそれより 2 桁ほど大きくした値で計算したもので、蒸発のはじめから終わりまでの形状変化を左から右へ示しています。青色で塗られた部分の濃さが溶質高分子の濃度を、赤色の線が蒸発流束の大きさをそれぞれ表しています。

蒸発に伴って液滴内部の中心から端に向かって溶質高分子が移流していく様子が見てとれます。これは液滴の端の部分の接触線が固定されていることと、蒸発流束が接触線近傍で非常に大きくなっていることによって生じる流動によるものです。ある部分の溶質高分子の濃度がある値に達した場合、その部分はゲル化状態になります。ゲル化した部分では蒸発や流動が起こらないものとしているので、その部分は蒸発の終わりまで固定されます。最終形状の凹凸は、ゲル化によって引き起こされるものであることがわかります。

拡散係数が大きい場合は拡散が移流に均衡し、溶質濃度が一様に近い状態のまま蒸発が進行していくことがわかります。この場合ゲル化は液滴の全域でほぼ同時に起こるため、最終形状に凹凸を生じないことがわかります。

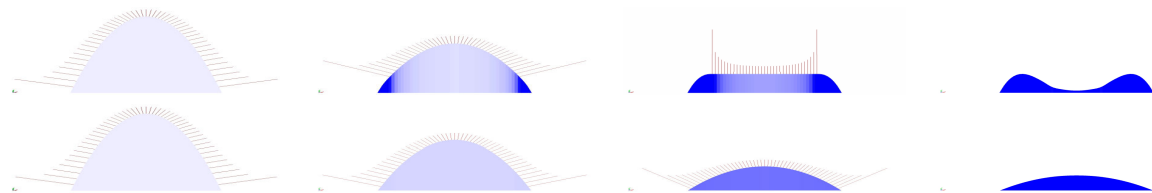


図 拡散係数による蒸発過程の違い

発表では、表面張力や粘度、拡散係数、そして蒸発速度などの違いによって生じる蒸発の様子の違いなどを説明し、さらに界面活性剤の存在下でのマランゴニ効果や液滴どうしの相互作用の効果などについても言及します。