

濡れ性の異なる基板表面での液滴乾燥挙動の数値解析

両角 仁夫*, 李 榮娟

(受領日: 2010年4月30日、受理日: 2010年6月1日)

高知工科大学システム工学群

〒782-8502 高知県香美市土佐山田町宮ノ口185

E-mail: *morozumi.yoshio@kochi-tech.ac.jp

要約: 本研究では二相流格子ボルツマン法を用いて親液性および疎液性基板における液滴乾燥挙動の数値解析を行った。解析において、液滴の蒸発は気液界面と気相における粒子速度分布関数の差によりモデル化した。親液性基板の場合、乾燥初期においては接触線が固定されたまま接触角が減少、中期においては接触線の後退、さらに後期においては再び接触線が固定されるという3段階により乾燥が進行する結果が得られた。一方、疎液性基板の場合、乾燥過程の間において接触角はほぼ一定の値を維持したまま濡れ径が減少した。親液性基板および疎液性基板とも乾燥挙動の解析結果は既往の実験結果と概ね一致し、本解析で用いた蒸発モデルの妥当性が示された。

1. 緒言

インクジェット技術とはピコリットルオーダーの微小液滴を均一なサイズで吐出する技術であり、近年、電子デバイスや光学デバイスなどの製造プロセスに応用するインクジェット成膜法の開発がすすめられている^{1,2)}。この成膜法では、インクジェットノズルから吐出された機能性溶液の微小液滴を基板上に着弾させ、溶媒の蒸発・乾燥を経て機能性薄膜を形成させる。インクジェット成膜法を実用化するためには、微小液滴を基板上の任意の位置に精度良く着弾させるとともに、乾燥後の膜厚を均一に制御する手法を確立することが重要である。

基板上における液滴の着弾位置決め精度の向上に関しては、基板の表面エネルギーを利用して液滴のパターニングを行う方法が提案されている^{3,4)}。すなわち、基板に親液-疎液処理を施して濡れ性のコントラストを与え、液滴が自ら親液部へと移動する現象を利用するものであり、高精度な液滴パターニングが容易に達成できるものと期待されている。

一方、薄膜の膜厚制御に関しては、溶質を含む溶液滴を乾燥させた後の薄膜形状は基板の濡れ性が親液性あるいは疎液性であるかにより異なることが知られている。親液性基板の場合、液滴の外周部に沿って溶質がリング状に堆積する。これは

コーヒーステイン現象として知られ、液滴の接触線が固定(pinning)されたまま接触線近傍での溶媒の蒸発速度が増大することに起因し、液滴内において接触線へと向かう流れが生じるためであると説明されている^{5,6)}。これに対し疎液性基板の場合、液滴接触線は固定されず(depining)、乾燥とともに接触線は中心部へと後退し、その結果、中心部が盛り上がったドット状の薄膜が得られる^{7,8)}。

微小液滴を任意の位置にパターニングし、液滴乾燥後の薄膜形状を制御する手法を確立するためには、液滴が基板に着弾してから乾燥が完了するまでの過程における接触線の挙動を把握する必要がある。しかしながら、液滴の乾燥は溶液の物性(粘度、表面張力)、蒸発速度、液滴サイズ、基板条件(濡れ性、温度)など数多くのパラメータが関係し、これらの物性や条件が溶媒の蒸発とともに変化する複雑な過程である。したがって、液滴の乾燥過程における接触線挙動を把握するためには流動および熱・物質移動といった輸送現象のメカニズムを数値解析により明らかにすることが望まれている。

これまで、濡れ性の異なる基板上で液滴挙動を数値解析により検討した例がいくつか報告されている^{9,10)}。これらの数値解析では、密度比が大きく、自由表面を有する気液二相流を取り扱うこと

が可能である格子ボルツマン法を用いており、濡れ性の違いによる液滴の親液部への移動ならびにライン状の疎液部における液滴分裂挙動を検討している。しかしながら、液滴の乾燥過程を取り扱った数値解析はこれまで報告されていない。

そこで本研究では、これまでに提案されている二相流格子ボルツマン法に液滴蒸発モデルを導入することにより、基板上における液滴乾燥過程の数値解析を行う。親液性および疎液性基板表面での液滴乾燥における接触線の移動および蒸発挙動を考察し、液滴蒸発モデルの妥当性を検証する。

2. 数値解析

2.1 解析領域および基礎式

Fig.1 に解析領域を示す。2次元直角座標系を適用し、基板上に置かれた液滴内部の液相領域と周囲の気相領域を解析領域とし、液滴が乾燥する過程を解析する。ここで液滴の初期形状は球の一部であるとし、液滴の濡れ径および静的接触角はそれぞれ $d_{c,0}$ 、 $\theta_{c,st}$ とする。これまでに格子ボルツマン法による二相流モデルがいくつか提案されているが^{11,12)}、本研究では密度比が大きい場合の二相流解析を行うことが可能である Lee and Lin¹³⁾ が提案した二相流格子ボルツマン法を用いて解析を行った。また、粒子速度モデルには Fig. 2 に示す 2次元9速度モデルを用いた。この速度モデルにおいて、粒子は Fig. 2 に示す $\alpha = 1 \sim 8$ の方向および静止を表す $\alpha = 0$ の計9方向に移動する。式(1)および(2)に本解析で用いる粒子速度分布関数の時間発展方程式を示す。

$$\frac{\partial f_\alpha}{\partial t} + e_{\alpha i} \frac{\partial f_\alpha}{\partial x_i} = -\frac{1}{\lambda} (f_\alpha - f_\alpha^{eq}) + \frac{(e_{\alpha i} - u_i) [\partial_i \rho c_s^2 - \rho \partial_i (\varphi - \kappa \partial_j^2 \rho)]}{\rho c_s^2} \Gamma_\alpha(\mathbf{u}) - \varepsilon_{ev} (f_\alpha - f_{\alpha, gas}^{eq}) \quad (1)$$

$$\frac{\partial g_\alpha}{\partial t} + e_{\alpha i} \frac{\partial g_\alpha}{\partial x_i} = -\frac{1}{\lambda} (g_\alpha - g_\alpha^{eq}) + \frac{(e_{\alpha i} - u_i) \partial_i (\rho c_s^2 - p)}{c_s^2} (\Gamma_\alpha(\bar{u}) - \Gamma_\alpha(0)) + \frac{(e_{\alpha i} - u_i) [\kappa \partial_i (\partial_k \rho \partial_k \rho) - \kappa \partial_j (\partial_i \rho \partial_j \rho)]}{c_s^2} \Gamma_\alpha(\bar{u}) \quad (2)$$

ここで f_α , g_α は α 方向の粒子速度分布関数、 $e_{\alpha i}$ は計算格子上での粒子速度ベクトル、 λ は緩和時間、 ρ は密度、 u_i は流体速度、 p は圧力、 c_s は音速であり、

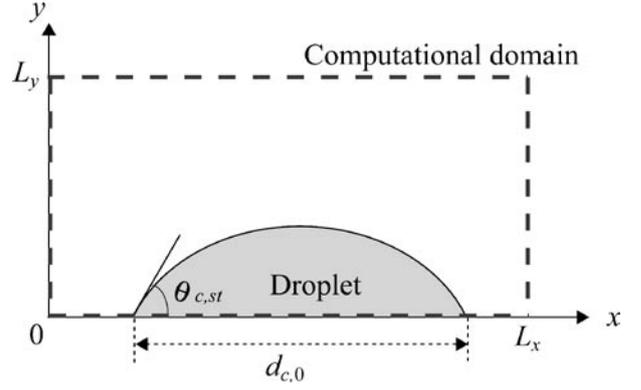


Fig. 1 Physical problem and computational domain

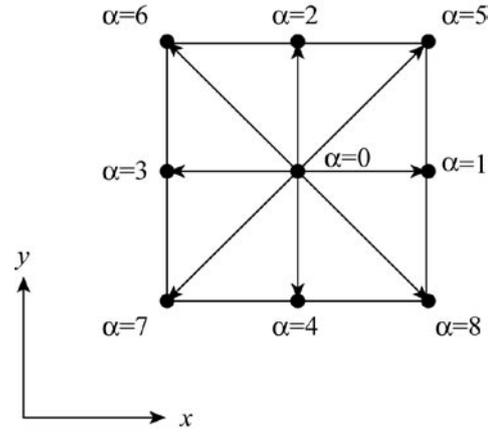


Fig. 2 Particle velocity model

κ は表面張力 σ と気液界面幅 D により与えられるパラメータである。 f_α^{eq} , g_α^{eq} は平衡分布関数であり、式(3)および(4)で与えられる。

$$f_\alpha^{eq} = t_\alpha \rho \left[1 + \frac{e_{\alpha i} u_i}{c_s^2} + \frac{(e_{\alpha i} e_{\alpha j} - c_s^2 \delta_{ij}) u_i u_j}{2c_s^4} \right] \quad (3)$$

$$g_\alpha^{eq} = t_\alpha \left[\frac{p}{c_s^2} + \rho \left(\frac{e_{\alpha i} u_i}{c_s^2} + \frac{(e_{\alpha i} e_{\alpha j} - c_s^2 \delta_{ij}) u_i u_j}{2c_s^4} \right) \right] \quad (4)$$

式(2)における Γ_α は式(5)より与える。

$$\Gamma_\alpha(\bar{u}) = t_\alpha \left[1 + \frac{e_{\alpha i} u_i}{c_s^2} + \frac{(e_{\alpha i} e_{\alpha j} - c_s^2 \delta_{ij}) u_i u_j}{2c_s^4} \right] \quad (5)$$

式(3) - (5) 中の t_α は重み係数である。さらに、 φ は気相と液相との間の相互作用力を表す化学ポテンシャルであり、次式により与えられる。

$$\varphi = 4\beta(\rho - \rho_l)(\rho - \rho_g)(\rho - \rho_m) \quad (6)$$

ここで ρ_l , ρ_g は液相、気相密度、 $\rho_m = (\rho_l + \rho_g)/2$ である。

2.2 液滴蒸発モデル

一般に、液相と気相の温度が等しい場合、気液界面における蒸発速度は飽和蒸気圧と気相の蒸気圧との差に比例¹⁴⁾し、気液界面での飽和蒸気圧は気液界面の温度、気相の蒸気圧は相対湿度と温度より推算される。また、気液界面において蒸発するためには蒸発潜熱が必要となる。この蒸発潜熱は周囲気相あるいは液相内部から供給されるため、結果として、気液界面の温度は低下する。数値解析において気液界面の正確な温度を推算するためには、エネルギー方程式を与え、液滴内部と周囲気相における温度場を解く必要があるが、本解析では、温度場を解かずに疑似的に液相から気相への相変化を与えることにより、気液界面での蒸発過程を考慮する。ここでは、二相流格子ボルツマン法において用いられる2つの粒子速度分布関数のうち f_α は気液二相の違いを表す変数であることから、 f_α の時間発展方程式である式(1)の右辺第3項に示す形により、蒸発を考慮した。すなわち、気液界面領域に対して粒子分布関数 f_α と気相における平衡分布関数 $f_{\alpha, \text{gas}}^{\text{eq}}$ との差により評価することにより、液相と気相の蒸気圧差を模擬する。ここで ε_{ev} は蒸発速度の大きさを与えるパラメータである。

2.3 濡れ性モデル

基板の濡れ性を考慮するため、本解析ではMartysらの提案した濡れ性モデル¹⁵⁾を用いた。本モデルでは、次式により基板と液相の間における付着力 F_{ad} を算出する。

$$F_{ad,i}(x_\alpha) = -\tau E(x_\alpha) \sum_{\alpha=0}^8 G_\alpha s(x_\alpha + e_{ci}) e_{ci} \quad (7)$$

ここで G_α は基板と液相との相互作用力関数であり、次式に示すように相互作用力パラメータ G_{ad} を用いて与えられるものとする。

$$G_\alpha = \begin{cases} 4G_{ad} & \alpha = 1-4 \\ G_{ad} & \alpha = 5-8 \\ 0 & \alpha = 0 \end{cases} \quad (8)$$

G_{ad} の値を調整することにより、基板の濡れ性、すなわち液滴の静的接触角を任意に設定することが可能となる。

2.3 解析方法

通常、格子ボルツマン法では粒子分布関数の時間発展方程式を粒子の並進過程(streaming step)と粒子同士の衝突過程(collisions step)の2つに分けて解いているが、本解析では式(1)および(2)を以

下に示す Pre-streaming collision step、Streaming step および Post-streaming collision step の3つのステップで解く¹³⁾。流体運動の巨視的変数である密度、速度および圧力は、Pre-streaming collision step で得られた粒子分布関数 \bar{f}_α および \bar{g}_α を用いて式(9)–(11)により算出される。

$$\rho = \sum_{\alpha} \bar{f}_\alpha \quad (9)$$

$$\rho u_i = \sum_{\alpha} e_{ci} \bar{g}_\alpha + \frac{\delta t}{2} \kappa \left[\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\partial \rho}{\partial x_k} \frac{\partial \rho}{\partial x_k} \right) - \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial \rho}{\partial x_i} \frac{\partial \rho}{\partial x_j} \right) \right] \quad (10)$$

$$p = c_s^2 \sum_{\alpha} \bar{g}_\alpha + \frac{\delta t}{2} u_i \frac{\partial \rho c_s^2}{\partial x_i} \quad (11)$$

また、基板の濡れ性を表す付着力は、次式に示す局所平衡流体速度の算出において与えられる。

$$\rho u_i^{\text{eq}} = \sum_{\alpha} \bar{g}_\alpha^{\text{eq}} e_{ci} + \frac{\delta t}{2} \{ F_{ad,i} + \rho g_i \} \quad (12)$$

ここで g_i は重力加速度である。

境界条件として、 $x=0$ および L_x に周期境界条件、 $y=L_y$ にbounce back条件を与える。また、 $y=0$ に質量保存型no-slip条件¹⁶⁾を与える。さらに、密度分布に関しては、気液界面において密度は急激に変化するのではなく、Fig. 3次式により界面を含む領域において連続的に分布するものとして与える。

$$\rho(z) = \frac{\rho_l + \rho_g}{2} + \frac{\rho_l - \rho_g}{2} \tanh\left(\frac{2z}{D}\right) \quad (13)$$

ここで ρ_l および ρ_g はそれぞれ液相および気相の密度、 z は界面からの距離である。本解析では、 $\rho^* = (\rho_l + \rho_g)/2$ を中心とした幅 $2D$ の領域を界面

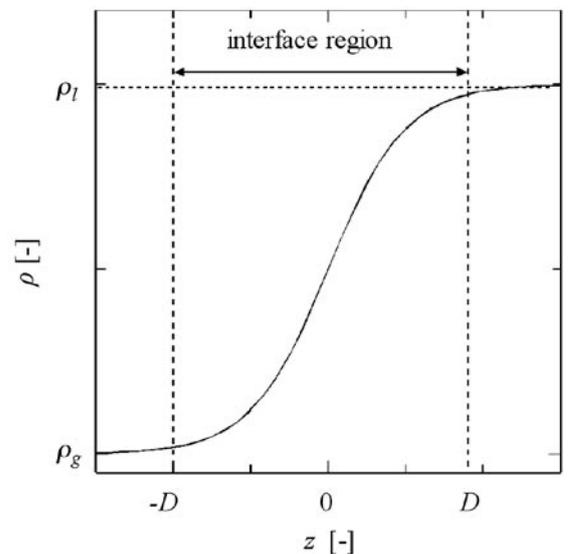


Fig. 3 Density profile in the interface region

領域とし、解析を行った。

2.4 解析条件

本研究では濡れ径 $d_{c0} = 200 \mu\text{m}$ の水滴の蒸発を想定し、解析条件を決定した。解析領域は $L_x = 400$ 、 $L_y = 150$ とした。解析に用いる物性値に関しては、液相粘度と表面張力の比である Ohnesorge 数 ($Oh = \mu_l / \sqrt{\rho \sigma (d_{c0}/2)}$) および表面張力と重力の比である Bond 数 ($B_o = (\rho_l - \rho_g)g(d_{c0}/2)^2/\sigma$) が実際の物性値より与えられる値と等しくなるように設定した。Table 1 に解析に用いた解析条件を示す。これらの物性値は、格子幅、時間刻みおよび液相密度を用いて与えられる無次元量である。

付着力パラメータ G_{ad} に関しては、基板上に置いた液滴が蒸発せずに静止状態になるまでの解析を行い、静的接触角 $\theta_{c,st}$ と付着力パラメータ G_{ad} の関係を事前に求める。Table 2 に付着力パラメータと静的接触角の関係を示す。さらに、蒸発速度パラメータ ε_{ev} は、その値を変化させて解析を行った。

3. 結果および考察

解析結果の考察を行うにあたり、乾燥過程における接触角 θ_c および蒸発速度 m_{ev} はそれぞれ式 (14) および (15) により算出した。

$$\theta_c = \begin{cases} \text{asin}\left(\frac{|\partial\rho/\partial x|_{\text{int}}}{|\partial\rho/\partial n|_{\text{int}}}\right) & \partial\rho/\partial x \geq 0 \\ \pi - \text{asin}\left(\frac{|\partial\rho/\partial x|_{\text{int}}}{|\partial\rho/\partial n|_{\text{int}}}\right) & \partial\rho/\partial x < 0 \end{cases} \quad (14)$$

$$m_{ev} = \frac{V_t - V_{t-\delta t}}{\delta t} \quad (15)$$

ここで $(\partial\rho/\partial n)_{\text{int}}$ および $(\partial\rho/\partial x)_{\text{int}}$ は液滴接触線における気液界面法線方向および x 方向の密度勾配、 V_t は時刻 t における液滴体積、 δt は時間刻み (=1) である。また、蒸発過程において液滴の水平方向中心位置が変化しなかったことから、液滴の濡れ径の変化が接触線の移動を表すものとして、結果の考察を行う。

3.1 親液性基板上での液滴乾燥挙動

Fig. 4 に $G_{ad} = -0.003$ とした親液性基板上での乾燥過程における液滴形状の変化を示す。また、Fig. 5 に蒸発速度パラメータ ε_{ev} を変化させた場合の液滴蒸発に伴う濡れ径 d_c および接触角 θ_c の経時変化を示す。 $\varepsilon_{ev} = 0.0001$ の場合、蒸発開始後、濡れ径一定のまま接触角が減少し、 $t = 20000$ 付近

Table 1 Computational conditions (Dimensionless parameters)

Liquid phase density ρ_l	1.0
Gas phase density ρ_g	0.0012
Viscosity ratio μ_l/μ_g	56
Surface tension σ	2.09×10^{-3}
Initial wetting diameter d_{c0}	100
Gravity acceleration g	1.14×10^{-9}

Table 2 Relationship between adhesive parameter and static contact angle

G_{ad}	$\theta_{c,st}$
-0.003	42.7°
0.000	89.8°
0.002	121.8°

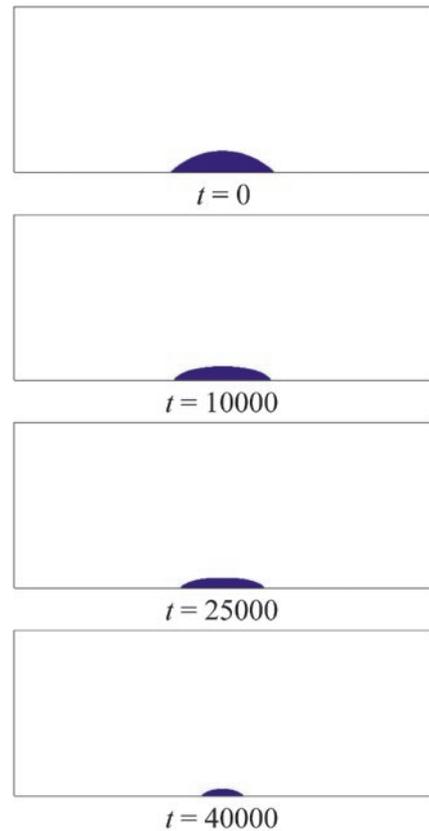


Fig. 4 Calculated results of droplet shape during drying process on hydrophilic surface ($G_{ad} = -0.003$, $\varepsilon_{ev} = 0.0001$)

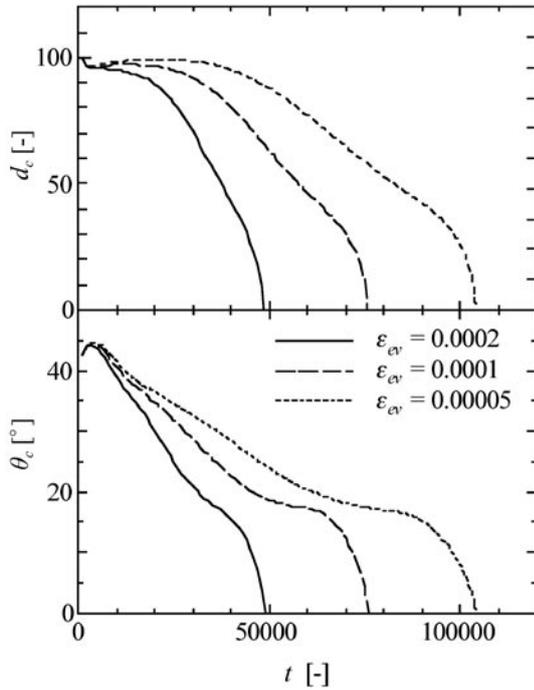


Fig. 5 Time variations of wetting diameter and contact angle of the evaporating droplet on hydrophilic surface ($G_{ad} = -0.003$)

より濡れ径の減少が開始する。このとき、接触角は引き続き減少する傾向を示すものの、 $t = 50000$ 付近において接触角がほぼ一定 ($= 20^\circ$) となる期間が見られる。その後、 $t = 60000$ 付近より、濡れ径および接触角ともに減少し、蒸発が完了する。このような蒸発挙動は ϵ_{ev} の値によらず同様の傾向であり、接触角が一定となる期間における接触角の値に大きな違いは見られなかった。さらに、本解析で得られた蒸発挙動は高分子基板表面での水滴蒸発挙動の実験結果¹⁷⁾と概ね同様の傾向を示している。

本解析では、気液界面上において蒸発速度は分布を持たず、一定値を与えているため、基板との濡れ性を考慮しない場合、Fig. 6 (a) のように接触線が後退しながら (depinning) 乾燥が進行すると考えられる。しかしながら、解析および実験結果では Fig. 6 (b) に示すように、蒸発初期においては接触線が固定されたまま (pinning) 液滴体積が減少する。したがって、親液性基板表面での液滴蒸発過程における接触線の固定あるいは後退は、蒸発速度の大きさによらず次式に示す Young の関係式¹⁸⁾に従う準静的な過程であることが示唆される。

$$\sigma \cos \theta_c = \sigma_{sg} - \sigma_{sl} \quad (16)$$

ここで、 σ は表面張力、 σ_{sg} および σ_{sl} は固相 - 気相間および固相 - 液相間の界面張力である。

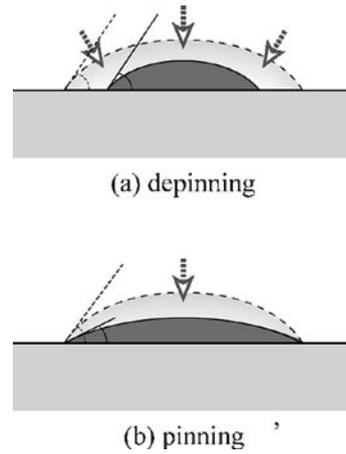


Fig. 6 Droplet evaporation behavior with depinning and pinning of contact line

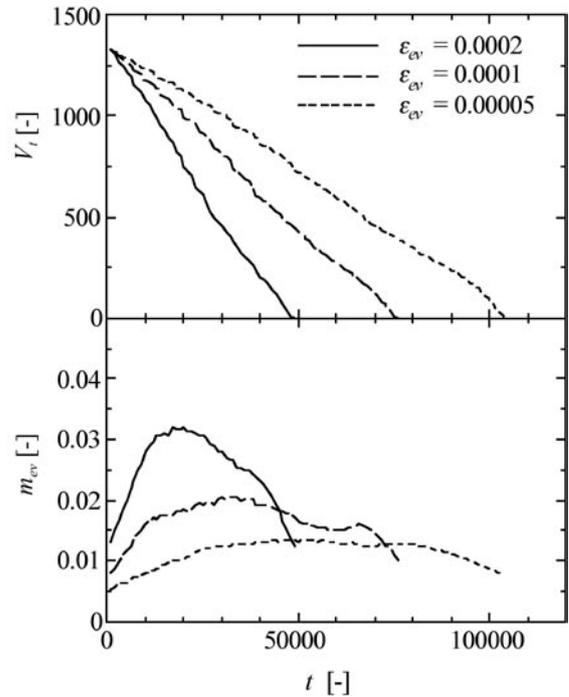


Fig. 7 Time variations of droplet volume and evaporation rate on hydrophilic surface ($G_{ad} = -0.003$)

溶質を含む液滴を親液性基板上で蒸発させた場合に観察されるリング状の堆積 (コーヒーステイン現象) は、蒸発過程において接触線が固定されたままであることがその原因であると説明されている。接触線が固定される理由として、接触線付近における溶質濃度の増加が挙げられている¹⁹⁾。これに対し、本解析では、溶質などを含まない液体を想定しているため、蒸発過程において接触線の移動が生じるものと考えられる。

Fig. 7 に乾燥過程における液滴体積と蒸発速度の経時変化を示す。蒸発開始後、蒸発速度は上昇

し、ほぼ一定となる期間が見られる。その後、乾燥の終了段階において蒸発速度は減少する。 ε_{ev} を増加すると、蒸発速度が一定の期間は短くなった。さらに、液滴の乾燥が終了するまでの時間は ε_{ev} の増加に伴い減少しているが、 ε_{ev} の増加率に比べると乾燥が終了するまでの時間は増加する結果となっている。本解析では、気液界面での粒子速度分布関数と周囲気相の平衡分布関数の差により液滴の蒸発を考慮し、気液界面での粒子分布関数の値は液滴表面の位置によらず一定であるため、解析で得られた蒸発速度の変化は液滴表面積の減少に依存する。したがって、接触線が固定されている期間と接触線が後退する期間における表面積の減少挙動に差異が生じるため、乾燥が終了するまでの時間に影響していると考えられる。

3.2 疎液性基板上での液滴乾燥挙動

Fig. 8に $G_{ad} = -0.002$ とした疎液性基板上での乾燥過程における液滴形状の変化を示す。また、Fig. 9に蒸発速度パラメータ ε_{ev} を変化させた場合

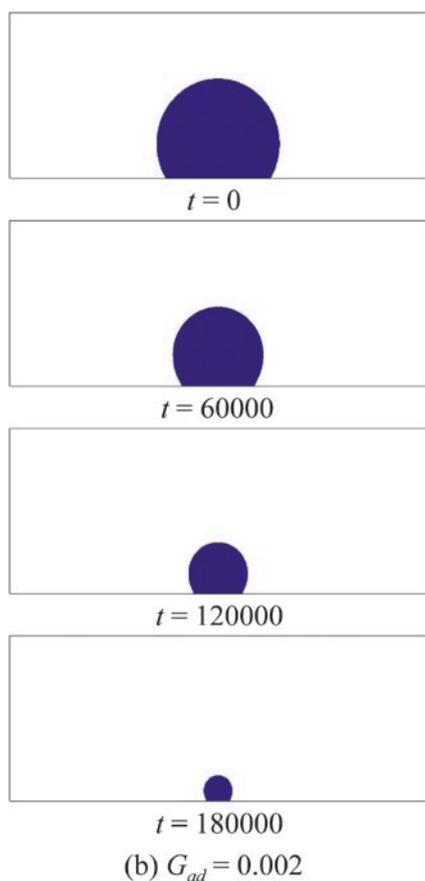


Fig. 8 Calculated results of droplet evaporation on hydrophilic and hydrophobic substrates ($G_{ad} = 0.002$, $\varepsilon_{ev} = 0.0001$)

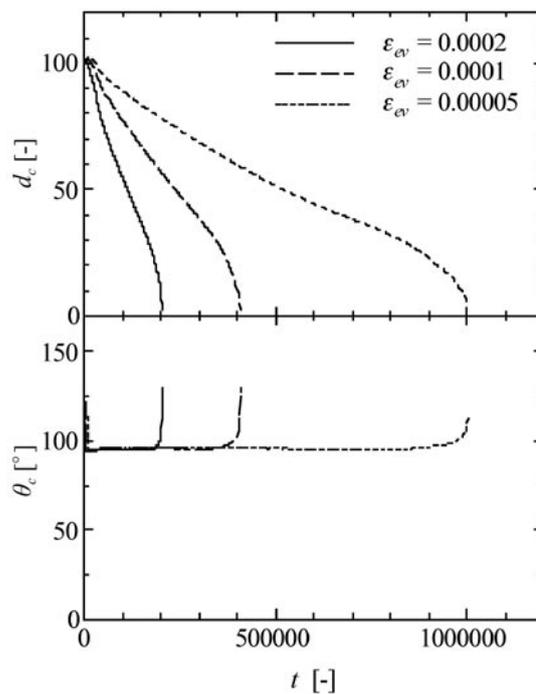


Fig. 9 Time variations of wetting diameter and contact angle of the evaporating droplet on hydrophobic substrates ($G_{ad} = 0.002$)

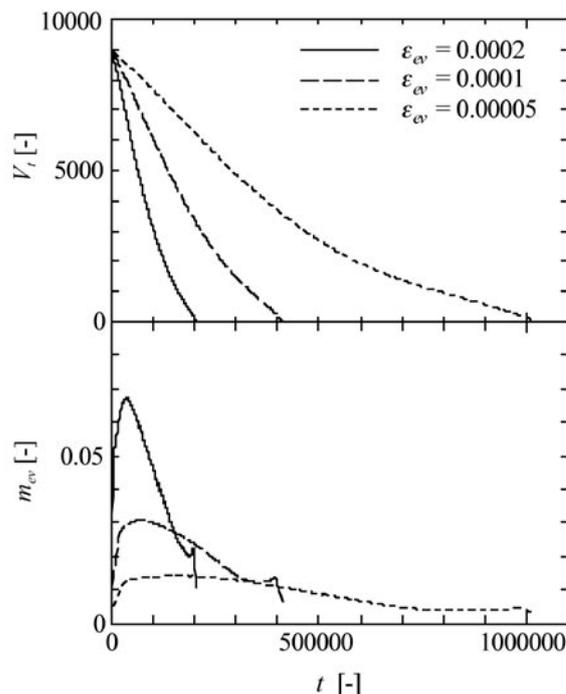


Fig. 10 Time variations of wetting diameter and contact angle of the evaporating droplet on hydrophobic substrates ($G_{ad} = 0.002$)

の液滴蒸発に伴う濡れ径 d_c および接触角 θ_c の経時変化を示す。疎液性基板上での乾燥の場合、接触角はほぼ一定のまま濡れ径が減少し、 ε_{ev} の値によらずほぼ同じ挙動を示した。また、乾燥過程における接触角は約 95° であり、静的接触角よりも小さい値であった。また、乾燥終了直前に接触角の増加が見られるが、これは、乾燥終了直前における液滴サイズが解析で与えた界面幅よりも小さくなり、液滴形状を捉える解像度が十分ではなくなったためであると考えられる。

Fig. 10 に乾燥過程における液滴体積と蒸発速度の経時変化を示す。親液性基板の場合とは異なり、蒸発速度は蒸発開始後に急激に上昇した後、乾燥が終了するまで減少する傾向を示している。また、乾燥が終了するまでの時間は ε_{ev} の増加に伴い減少しているが、 ε_{ev} の増加率にほぼ反比例している。疎液性基板の場合においては、接触線が固定されず接触角がほぼ一定のまま蒸発することから、球状液滴の蒸発挙動と類似すると考えられる。この場合、液滴表面積の減少は液滴サイズの2乗のみに依存すると考えることができる。その結果、表面積の減少挙動に変化が生じないため、乾燥が終了するまでの時間は蒸発速度にほぼ反比例すると考えられる。

4. 結言

本研究では、蒸発を考慮した二相流格子ボルツマン法により、親液性および疎液性基板上における液滴乾燥過程の数値解析を行った。その結果、以下の知見が得られた。

二相流格子ボルツマン法に用いる2つの粒子速度分布関数のうち、気液二相の違いを表す粒子分布関数に対して、気液界面領域と周囲気相における粒子分布関数の差を評価することにより蒸発過程を解析できることが示された。

親液性基板および疎液性基板表面での液滴乾燥挙動は、既往の実験結果と概ね良好に一致する結果であり、本解析で用いた蒸発モデルの妥当性が示された。しかしながら、本解析では、液滴内部および周囲気相との熱伝達を解析せずに液滴表面での蒸発を疑似的に扱っている。そのため、液滴内および周囲気相の温度場を計算し、液滴表面の温度を推算することにより、蒸発速度を定量的に評価する必要があると考える。

謝辞

本研究は科学研究費補助金基盤研究 (C)

(22560751) の助成を受けたものである。ここに謝意を表す。

文献

- (1) T. Shimoda, K. Morii, S. Seki and H. Kiguchi, "Inkjet printing of light-emitting polymer displays", MRS Bull., vol.28, no.11, pp.821-823, 2003.
- (2) H. Sirringhaus, T. Kawase, R. H. Friend, T. Shimoda, M. Inbse Karan, W. Wu and E. P. Woo, "High-Resolution inkjet printing of all-polymer transistor circuits", Science, vol.290, pp.2123-2126, 2002.
- (3) J. Drelich, J. L. Wilbur, J. D. Miller and G. M. Whitesides, "Contact angles for liquid drops at a model heterogeneous surface consisting of alternating and parallel hydrophobic/hydrophilic strips", Langmuir, vol.12, pp.1913-1922, 1996.
- (4) M. Morita, S. Yasutake, H. Ishizuka, J. Fukai and A. Takahara, "Site-selective coating of polymer thin film prepared by the ink-jet method on the patterned fluoroalkylsilane monolayer substrate", Chem. Lett., vol.34, no.7, pp.916-917, 2005.
- (5) R. D. Deegan, O. Bakajin, T. F. Dupont, G. Huber, S. R. Nagel and T. A. Witten, "Capillary flow as the cause of ring stains from dried liquid drops", Nature, vol.23, pp. 827-829, 1997
- (6) R. D. Deegan, "Deposition at pinned and depinned contact lines: pattern formation and applications", Ph. D dissertation, The University of Chicago, 1998.
- (7) B.-J. de Gans and U. S. Schubert, "Inkjet printing of well-defined polymer dots and arrays", Langmuir, vol.20, pp.7789-7793, 2004.
- (8) J. Fukai, H. Ishizuka, Y. Sakai, M. Kaneda, M. Morita and A. Takahara, "Effect of droplet size and solute concentration on drying process of polymer solution droplets deposited on homogeneous surfaces", Int. J. Heat Mass Transfer, vol.40, pp.3561-3567, 2006.
- (9) A. J. Briant, A. J. Wagner and J. M. Yeomans, "Lattice Boltzmann simulation of contact line motion. I. Liquid-gas systems", Phys. Rev. E., vol.69, 031602, 2004.
- (10) Y. Y. Yan and Y. Q. Zu, "A lattice Boltzmann method for incompressible two-phase flows on

- partial wetting surface with large density ratio”, *J. Comp. Phys.*, vol.227, pp. 763-775, 2007.
- (11) X. Shan, H. Chen, “Lattice Boltzmann model for simulating flows with multiple phases and components”, *Phys. Rev. E*, vol.47, no.3, pp.1815-1820, 1993.
- (12) T. Inamuro, T. Ogata, S. Tajima and N. Konishi, “A lattice Boltzmann method for incompressible two-phase flows with large density differences”, *J. Comp. Phys.*, vol.198, pp.628-644, 2004.
- (13) T. Lee and C-L. Lin, “A stable discretization of the lattice Boltzmann equation for simulation of incompressible two-phase flows at high density ratio”, *J. Comput. Phys.*, vol. 206, pp.16-47, 2005.
- (14) I. W. Eames, N. J. Marr and H. Sabir, “The evaporation coefficient of water: a review”, *Int. J. Heat Mass Transfer*, vol.40, pp.2963-2973, 1997.
- (15) N. S. Martys and H. Chen, “Simulation of multicomponent fluids in complex three-dimensional geometries by the lattice Boltzmann method”, *Phys. Rev. E*, vol.53, pp.743-750, 1996.
- (16) J. Bao, P. Yuan and L. Schaefer, “A mass conserving boundary condition for the lattice Boltzmann equation method”, *J. Comp. Phys.*, vol.227, pp.8472-8487, 2008.
- (17) M. E. R. Shanahan and C. Bourges, “Effect of evaporation on contact angles on polymer surfaces”, *Int. J. Adhes. Adhes.*, vol.14, pp.201-205, 1994.
- (18) T. Young, “An essay on the cohesion of fluids”, *Philos. Trans. Soc. London*, vol.95, pp.65–87, 1805.
- (19) J. Fukai, H. Ishizuka, Y. Sakai, M. Kaneda, M. Morita and A. Takahara, “Effects of droplet size and solute concentration on drying process of polymer solution droplets deposited on homogeneous surfaces”, *Int. J. Heat Mass Transfer*, vol.49, pp.3561–3567, 2006.

Lattice Boltzmann Simulation of Droplet Drying behavior on Substrates with Different Wettability

Yoshio Morozumi*, Rongjuan Li

(Received : April 30th, 2010, Accepted : June 1st, 2010)

*School of System Engineering, Kochi University of Technology
185 Miyanokuchi, Tosayamada, Kami city, Kochi 782-8502

E-mail:* morozumi.yoshio@kochi-tech.ac.jp

Abstract: A two dimensional Lattice Boltzmann simulation is performed to investigate the evaporation behavior of liquid droplet on substrates with different wettability. A stable discretization of the Lattice Boltzmann Equations is used to simulate two phase flows of liquid film and surrounding gas with large density ratio of 833.3. In hydrophilic substrates, the wetting diameter remains constant and the contact angles decreases in the initial stage, which indicates the contact line is pinned. In hydrophobic substrates, on the other hand, the wetting diameter decreases while the contact angle remains constant through the evaporation process, which indicates the contact line is de-pinned. In addition, we discuss the effect of evaporation rate on the evaporation behavior for substrates with different wettability.