

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 28 年 6 月 13 日現在

機関番号：34416

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2013～2015

課題番号：25420135

研究課題名(和文) 微小スケールにおける表面張力に関連する効果を利用した液操作に関する数値解析的研究

研究課題名(英文) Numerical analysis of liquid manipulation utilizing the various effect of surface tension in microscale

研究代表者

山本 恭史 (Yamamoto, Yasufumi)

関西大学・システム理工学部・准教授

研究者番号：90330175

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 4,000,000円

研究成果の概要(和文)：手のひらより小さいチップの上でDNA等の分析を行う装置がある。その装置上で簡易に液体を移動させるには表面張力の利用が考えられる。なぜなら、寸法が小さくなると重力や圧力に比べて長さ当たりの力である表面張力が相対的に大きくなるからである。その表面張力に関連する現象として、濡れ性(撥水性や親水性)とマランゴニ効果(表面張力が部分的に下がると引っ張られて流れが起きる現象)を積極的に利用すると効率よく液を動かせる。本研究では、それらの効果を効率よく利用する際の条件について検討できるシミュレーターの開発を行った。また、そのための精密なモデル開発や電気の影響で濡れ性を変化させるモデル開発を行った。

研究成果の概要(英文)：There is a device analyzing DNA on a tip which is smaller than a palm. To move a liquid droplet easily on a such device, the use of the surface tension is suitable. This is because the surface tension is relatively dominant comparing gravity and pressure when its size becomes small. A liquid droplet can be moved efficiently when phenomena as wettability (hydrophobic or hydrophilic) and Marangoni effect (a flow is caused when surface tension partially decreases) are utilized positively. In this study, we developed the simulator which could examine a condition when we used those effects efficiently. We also developed a precise model of wettability and a model for electrowetting.

研究分野：流体工学

キーワード：混相流 表面張力 濡れ性 微小スケール

1. 研究開始当初の背景

微小スケールにおける液の操作は、 μ -TAS (Micro-Total Analysis Systems) や流体を扱う MEMS (Micro Electro Mechanical Systems) 等で必要になる操作であり、主に MEMS 研究者によってさまざまな形で研究が行われてきた。IEEE の雑誌 Journal of Microelectromechanical Systems 等にも多数の論文が掲載されているが、どちらかというところ電気電子系の研究者による単一要素のモデルによる検討が多く、流体力学者による、表面張力に関して考えられる全影響を考慮したような力学的に精密な研究は見当たらなかった。

加藤らは、レーザーを液滴端に照射して部分的に濡れ性を変化させることで液滴を輸送する手法を提案し、限られた条件下の実験で有効性を確認している。この輸送の原理は、レーザー照射端の濡れ性が良くなり（接触角が小さくなり）表面張力の壁接線方向成分が大きくなるために、照射方向（高温側）への移動が起きることによる。しかし、液表面に温度差が出来ること、表面張力は温度に依存するためマランゴニ効果（表面張力の差による流れ）による表面の流動が起き、液滴そのものも低温側に移動する場合があると考えられる。このような微小スケールにおける液操作について、有効な液操作方法・条件について知見が得られれば、 μ -TAS 等のマイクロ流体素子における液操作などのさまざまな工学プロセスにおいて現象の予測と制御が可能となることが期待される。また、工学的応用に限らず、本研究の主題は「表面張力が支配する微小スケールでの流体现象」という流体力学の重要分野に直接関連するものであり、その学術的普遍性は極めて大きい。

2. 研究の目的

本研究は、微小スケールにおける液操作について、特に表面張力と濡れ性に着目して、有効な液操作方法・条件について、数値解析によって解明することを目的としている。流体に作用する力は、長さスケールが小さくなると、体積力（重力・浮力）・面積力（圧力・粘性摩擦応力）に比べて、長さ当たりの力である表面張力の影響が相対的に大きくなる。その状況で、界面活性剤の吸着や温度勾配が生じれば、表面張力の不均質による流動（マランゴニ効果）が、また、温度変化や電気的影響による固体表面の濡れ性変化が大きな影響を及ぼす。本研究では数値解析により、これら表面張力に関連する各要素の相互作用を検討し、実用的な液操作に関する重要な知見を得る。なお、この微小装置における液輸送を流体力学の問題として扱う場合、条件として現れる物性は、密度、粘度、比熱、熱伝導率、表面張力、平衡接触角（濡れ性）等であるが、これらはすべて温度の関数であるため、液の輸送に最適な条件や重要なパラメータ等を実験により正確に評価することは

非常に困難である。そこで本研究では、界面を陽に扱う Front-tracking 法に基づく数値解析により、本質的な要因とそれらのバランスを評価する。また、その数値計算の基礎としている動的濡れを表現するモデルについても高精度化・汎用化を検討した。

3. 研究の方法

本研究では、液操作における表面張力と濡れ性に着目した数値解析のために、以下のことを行った。

(1) 動的濡れモデルの高精度化

我々は Front-tracking 法に一般化ナビエ境界条件モデル (GNBC) を組み込んで動的濡れを表現したモデルを既に提案していたが、キャピラリー数（無次元濡れ速度）が大きい条件では、計算格子の解像度（シミュレーションのために空間を離散的な要素に分割する、その細かさ）によって結果が大きく異なり、いくら解像度を上げても収束しないことが分かった。そこで、モデルの問題点（表現できるスケールとモデルで想定されているスケールの違い）について考察し、ミクロスケールとマクロスケールを接続する理論モデルを併用することで、解像度に依存しない結果が得られるモデルを提案した。

(2) 密度・粘度・熱伝導率・比熱の温度依存性の検証と数値解析コードの高機能化

例えば、加藤らの実験に用いられている流体の粘度は、温度に対して指数関数的に変化すること、また液滴の前後で 100 近い温度差が生じる場合があることが分かっている。Front-tracking 法のコードでは、液体と気体が混ざった流れである混相流を 1 つの流体として扱うために、密度・粘度等の物性が位置によって異なる前提でコーディングされており、温度変化への対応も容易である。そのコードを用いて、液滴を濡れ性変化で移動させるシミュレーションに関して、流体の基本物性の温度依存性の影響を検証した。

(3) エレクトロウエットングを考慮した数値解析コードの開発と検証

エレクトロウエットングとは電極上の撥水性誘電膜に置かれた液滴に電圧を加えることにより、液滴の接触角が変化する現象のことであり、液体レンズの屈折率制御やマイクロポンプ等への応用に期待されている技術である。しかし、この液滴の挙動については現状で正確に予測できるモデルはなく、シミュレーションによる予測が大いに期待されるものである。この現象をシミュレートするために、本研究室で開発した濡れ性を考慮した Front-tracking シミュレーターに濡れ性の電場依存モデルを追加したコードを作成し、その性能を評価した。

(4) 動的濡れモデルの汎用化

我々が開発した GNBC-Front-tracking による動的濡れモデルは、固体壁面が計算格子に沿う平面の場合について提案された物であったが、より汎用性を持たせるために、計算格子に沿わない任意形状の固体面に対する動的濡れモデルを開発した。計算格子に沿わない固体面を表せる Immersed Boundary 法を併用した GNBC-Front-tracking 法を固体球の濡れについて適用し、妥当性を検討した。

4. 研究成果

(1) 動的濡れモデルの高精度化

図1に我々の開発コードによってシミュレートされた、液中に板を引き込んだ場合の液面の形状を示す。左端にある固体の板に引きずられて液面が沈み込むが、我々のこれまでに提案していたモデルでは、計算の解像度を変更すると(a)のように異なった結果となり収束しないことが確認された。原因は、計算で得られる接触角はマクロなスケールで観察されるものであるが、動的濡れモデルが想定しているのはミクロなスケールで観察される接触角であると考えられた。そこで、この解像度依存を改善するために、ミクロスケールとマクロスケールを接続する理論モデルを併用した。その結果、(b)で示されるように、解像度に全く依存しない結果が得られるようになった。これにより、我々が提案したモデルの適用先が飛躍的に拡大する。この成果は国際雑誌に掲載された。

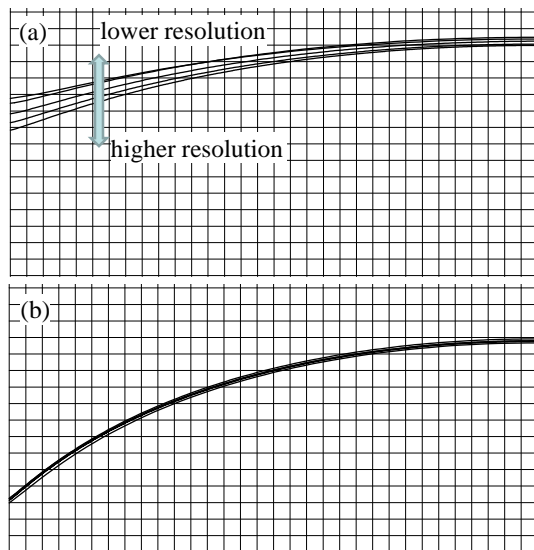


図1 液に板(図左端)を引き込んだ場合の液面(黒線)の様子。(a)元のモデル(解像度に依存して異なる結果を示す)、(b)改良モデル(解像度を変更しても全く同じ結果となる)。升目は計算格子で最高解像度の物を表している。低解像度の物はこれらの2倍、4倍...の大きさの格子で計算された。

(2) 密度・粘度・熱伝導率・比熱の温度依存性の検証と数値解析コードの高機能化

流体の物性値の温度依存性を確認するた

めに、各物性をそれぞれ温度依存させて濡れ性変化によって液滴を移動させるシミュレーションを行った。その結果、図2に示すように、熱伝導率・比熱については、ほとんど影響がないこと、粘度については多少変化はあるもののその影響は顕著ではないことが確認された。一方、密度を温度依存にすると、温度依存無しの場合に比べて液滴の移動速度が2倍程度大きくなるという結果となった。この理由を検討するため、液の形状(表面張力による圧力差に関連する)、表面張力の積分値(マランゴニ応力と濡れ性の結果の力となる)、壁面摩擦(移動の抵抗力となる)のバランスについて調べたり、液内部の流れを圧力駆動分とせん断力駆動分に分解して調べたが、決定的な要因は分からなかった。しかし、得られた結果と考察は有用であると考え、国際会議で発表を行った。

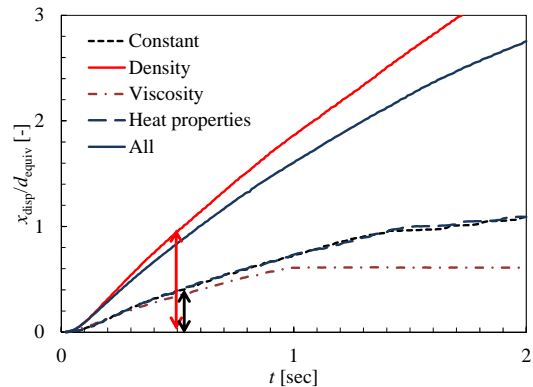


図2 液滴の移動距離 (Constant: 物性は固定, 以下温度に依存する物性が何かを示す, Density: 密度, Viscosity: 粘度, Heat properties: 熱伝導率と比熱, All: 全て)

ただし、我々のシミュレーションでは、流体の非圧縮性が仮定されているが、密度の温度依存による変化は非圧縮仮定を破るため、この矛盾により計算結果の信頼性が担保されていない。よって、圧縮性にも対応できる計算手法の検討が必要であるという考えに至った。これについては、概ねコードが完成しつつあるが、まだ動作検証の段階である。

(3) エレクトロウエット性を考慮した数値解析コードの開発と検証

液体と壁面間に電圧を印加することにより濡れ性を变化させるエレクトロウエット性を表現するため、静的接触角の電圧依存性を表す Young-Lippmann 式を考慮し、GNBC-Front-tracking 法に使用する壁面条件を電圧依存とするコードを作成した。ただし、図3に示すように、接触線にかかる電圧は電源電圧そのものではなく、液と電極間で作られるコンデンサーが直列に接続されたものと解釈されるため、電極上にある液の面積に応じて正電極と負電極にかかる電圧の割合が変化する。これを丁寧に表現することで、Suzuki ら が実験で確認している電極の切替

に伴う液滴の輸送を再現できるようになった(図4)。

レンズやディスプレイなど即応性が要求されるデバイスにエレクトロウエットングを利用する場合、最終的な形状のみではなく、電極の変化に対する応答特性が重要になると考えられる。流体の粘度が低いと応答が速いが狙った形状に止まるのが難しいし、粘度が高いと狙った形状に止まりやすいが応答が遅いと考えられる。このようなことから流体の流動まで再現したこのシミュレーターは非常に有用であると考えられる。現状で得られた成果を国際会議で発表予定である。今後はより実用的な計算を行っていく予定である。

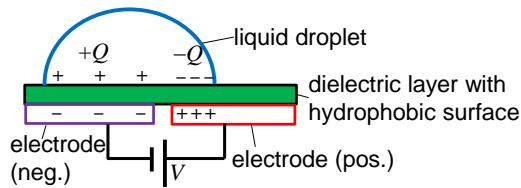


図3 液と電極で作られる直列接続コンデンサーの概念図

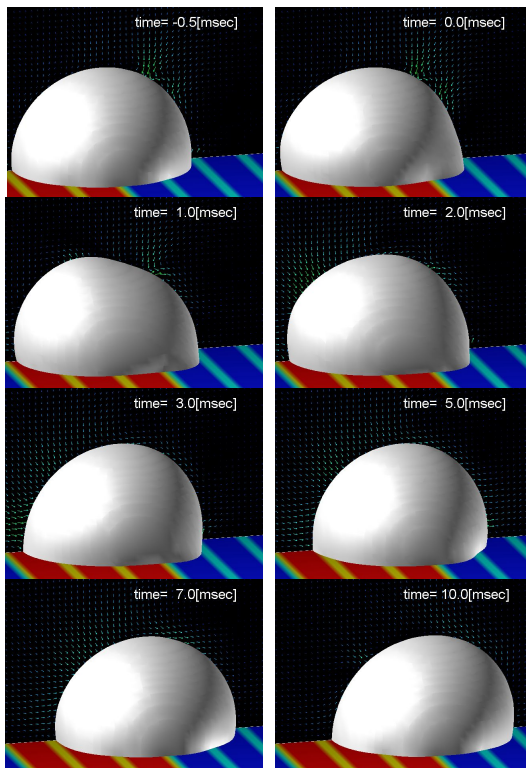


図4 エレクトロウエットングによる液滴移動の様子(壁面の赤色が正電極、青色が負電極を表す。左上から右・下に時間が経過している)

(4) 動的濡れモデルの汎用化

我々の提案する動的濡れモデルの汎用性を高めるため、固体面が平面でない(計算格子に沿わない)場合にも適用できるように、Immersed Boundary法を併用することを行った。図5に固体球を水面から沈降させた場合

の空気の巻き込みの様子の実験とシミュレーション結果を示す。図の左列は実験による観察、右列が本シミュレーションによる結果である。下部に球面の一部が見えており、すり鉢状の部分が液表面で固体球の沈降に伴って空気が引き込まれている様子と、最終的に固体球上部に小さい気泡が付着していることまで再現出来ている。また、固体面の濡れ性の違いによって、付着する気泡の大きさが変化することも実験を再現出来た。これにより我々の提案する動的濡れモデルの汎用性が広がり、妥当性が確認された。この結果を混相流シンポジウムで発表した結果、精選論文集への投稿を推薦され、掲載された。

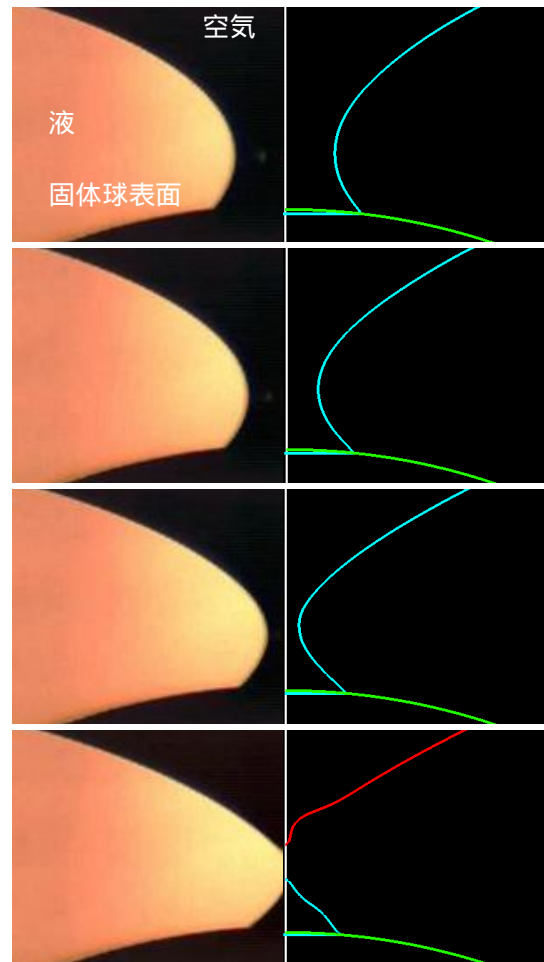


図5 固体球が液面から沈降する際に空気を引き込む様子の実験(左)とシミュレーション(右)の比較。上から下に向かって時間経過を表す。

<引用文献>

- 加藤健司, 脇本辰郎, 増田良平, 超音波振動およびレーザーを用いた固体面上の液滴の駆動に関する研究, 日本機械学会論文集 B 編, Vol.76, No.772, 2010, 2135-2142.
- Suzuki, K., Homma, H., Murayama, T., Fukuda, S., Takanobu, H., Miura, H., Journal of Advanced Mechanical Design, Systems, and Manufacturing, Vol.4, 2010, 365-372.

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文](計 2 件)

大友涼子,北優也,山本恭史,伊藤高啓,脇本辰郎,加藤健司,GNBC-Front-Tracking 法と Immersed Boundary 法を用いた固体球の動的な濡れのシミュレーション,混相流,査読有,29 巻 5 号,2016, pp.443-450.

DOI: 10.3811/jjmf.29.443

Yasufumi Yamamoto, Katsunori Tokieda, Tatsuro Wakimoto, Takahiro Ito, Kenji Katoh, Modeling of the Dynamic Wetting Behavior in a Capillary Tube Considering the Macroscopic-Microscopic Contact Angle Relation and Generalized Navier Boundary Condition, International Journal of Multiphase Flow, 査読有, Vol.59, 2014, pp.106-112.

DOI:10.1016/j.ijmultiphaseflow.2013.10.018

[学会発表](計 9 件)

山本恭史,大西祐司,大友涼子,伊藤高啓,脇本辰郎,加藤健司,エレクトロウエッティングによる狭小平板間における液操作のシミュレーション,混相流シンポジウム 2016, 2016 年 8 月 8-10 日,同志社大学,京都市.

Yasufumi Yamamoto, Ryoko Otomo, Takahiro Ito, Tatsuro Wakimoto, Kenji Katoh, Front-tracking Simulation of Electrowetting Droplet Manipulation, 9th International Conference on Multiphase Flow, 2016 年 5 月 22-27 日, Firenze, Italy.

大友涼子,北優也,山本恭史,伊藤高啓,脇本辰郎,加藤健司,GNBC-Front-tracking 法と Immersed Boundary 法を用いた固体球の動的な濡れのシミュレーション,混相流シンポジウム 2015, 2015 年 8 月 4-6 日,高知工科大,香美市.

山本恭史,土井康平,菊池和也,大友涼子,伊藤高啓,脇本辰郎,加藤健司,エレクトロウエッティングによる液滴操作のシミュレーション,混相流シンポジウム 2015, 2015 年 8 月 4-6 日,高知工科大,香美市.

Yasufumi Yamamoto, Ryota Funada, Kohei Sakaguchi, Ryoko Otomo, Takahiro Ito, Tatsuro Wakimoto, Kenji Katoh, Front-tracking simulation of a droplet manipulation by utilizing temperature dependency of fluid properties, ASME-JSME-KSME Joint Fluids Engineering Conference 2015, 2015 年 7 月 26-31 日, Seoul, Korea

北優也,山本恭史,伊藤高啓,脇本辰郎,加藤健司,GNBC-Front-tracking 法と

Immersed Boundary 法を用いた固体球の濡れのシミュレーション,第 28 回数値流体力学シンポジウム,2014 年 12 月 9-11 日,タワーホール船堀,東京.

山本恭史,船田亮太,伊藤高啓,脇本辰郎,加藤健司,物性の温度依存性を利用した液滴操作に関するシミュレーション,第 63 回理論応用力学講演会,2014 年 9 月 26-28 日,東京工業大,東京.

北優也,羽場豊,山本恭史,伊藤高啓,脇本辰郎,加藤健司,GNBC-Front-tracking 法と Immersed Boundary 法を用いた固体球表面の濡れのモデル開発,混相流シンポジウム 2014, 2014 年 7 月 28-30 日,北海道かでる 2・7,札幌市.

船田亮太,山本恭史,伊藤高啓,脇本辰郎,加藤健司,温度操作による液滴駆動のシミュレーション(物性の温度依存性の検討),第 27 回数値流体力学シンポジウム 2013 年 12 月 17-19 日,名古屋大学,名古屋市.

[その他]

ホームページ等

<http://www2.itc.kansai-u.ac.jp/~yamayasu/>

6. 研究組織

(1)研究代表者

山本 恭史 (YAMAMOTO, Yasufumi)

関西大学・システム理工学部・准教授

研究者番号: 90330175