

## 科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 28 年 4 月 25 日現在

機関番号：14301

研究種目：挑戦的萌芽研究

研究期間：2013～2015

課題番号：25600158

研究課題名(和文) 誘起電荷電気浸透現象を利用した高機能マイクロ流路の最適設計法の開発

研究課題名(英文) Development of design optimization method for micro-fluid devices using induced-charge electrophoresis

研究代表者

泉井 一浩 (Izui, Kazuhiro)

京都大学・工学(系)研究科(研究院)・准教授

研究者番号：90314228

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,100,000円

研究成果の概要(和文)：誘起電荷電気浸透現象は、流体中に配置された誘電体の誘電分極によって形成される電気二重層による電場と、流体中のイオンの相互作用により生じる流れである。この現象を利用したマイクロスケールの流体装置の創成設計を目的として、デバイス設計のためのマルチフィジックス・トポロジー最適化法の開発を行った。設計の評価関数を明らかにしたあと、最適化問題を定式化し、その実装方法を示した。最適設計法を実際に実装し、高効率のマイクロポンプの設計案を導出した。

研究成果の概要(英文)：In this research, design methodology of micro-pumps using induced-charge electrophoresis based on topology optimization concept was developed. Design criteria for micro-pumps were clarified and the design problem was formulated as topology optimization problem based on multiphysics numerical analysis. The developed design methodology was implemented as a computer program and several numerical design solutions were provided.

研究分野：最適システム設計

キーワード：最適設計 マイクロ流路デバイス 誘起電荷電気浸透現象 トポロジー最適化

### 1. 研究開始当初の背景

MEMS 技術の発展に伴い、チップ上に微小な流路、反応室、混合室等を設けた小型化学分析器、 $\mu$ -TAS (Micro-Total Analysis Systems) が近年注目を集めている。 $\mu$ -TAS は微量の試薬で迅速かつ高感度の化学分析を行うことが可能であり、DNA 解析や血液検査、有害物質の検出など、その応用範囲は多岐にわたる。

$\mu$ -TAS における重要な構成要素のひとつとして、マイクロポンプが挙げられる。マイクロポンプは  $\mu$ -TAS を始めとする微小な流路を有するマイクロ流路デバイスへの液体搬送に用いられ、その主な駆動方式はダイヤフラム機構を利用する機械式と、電気浸透や磁性流体を利用する非機械式に分類される。中でも電気浸透を利用した非機械式マイクロポンプは、構造が単純で小型化が容易であると共に、拍動を生じないことから高精度な液体搬送が可能であるという特徴を持つ。

電気浸透とは、固体と液体の界面に集積するイオンが、外部から与えられた電圧によって移動し、それに伴い液体が流れる現象である。この電気浸透を利用したマイクロポンプは、前述のように多くの利点を有しているものの、直流電圧を用いることから稼働中に電気分解が生じるため、気泡の発生、電極の劣化、サンプルの汚染等を生じる問題を持つ。そこでこれらの問題を抜本的に解決するため、誘起電荷電気浸透と呼ばれる現象を利用したマイクロポンプが近年注目を集めている。誘起電荷電気浸透は交流電圧の下で生じる電気浸透現象であり、電気分解を生じにくい特徴がある。この誘起電荷電気浸透を利用したマイクロポンプを設計する上で、ポンプ内部に配置する固体、すなわち誘電体の形状は極めて重要であり、より多くの吐出量を得るためにも適切な形状を選ぶ必要がある。

### 2. 研究の目的

マイクロポンプ本体の内部に配置する誘電体の形状については、三角形や矩形といった基本形状を用いたマイクロポンプに関する研究がこれまでに幾つか報告されており、誘起電荷電気浸透を利用することで電気分解が生じにくい非機械式マイクロポンプが実現可能である。しかし、従来の研究では誘電体を単純な形状に想定し、試行錯誤的に誘電体形状を決めていることから、必ずしもそれらが最適な形状であるとは言い難い。この課題を解決するため本研究では、誘起電荷電気浸透を利用したマイクロポンプの設計にトポロジー最適化の考え方を展開するための方法論の構築を行った。

トポロジー最適化の基本的な考え方は、構造最適化問題を材料分布問題に置き換えることにあり、これにより構造の形状のみならず、形態の変更をも許容した設計自由度の高い構造最適化が可能となる。

流体問題を対象としたトポロジー最適化に関する研究は、Borravall and Petersson (2003)により始まるが、これまでの流体問題を対象としたトポロジー最適化に関する研究では、そのほとんどが流れ場のみに着目しており、流れ場と温度場が連成する最適化問題に関する研究は近年幾つか報告があるものの(Matsumori et al., 2013; Yaji et al., 2015)、誘起電荷電気浸透のように、流れ場と電氣場が連成する最適化問題への展開は未だほとんど報告されていない。

本研究では、誘起電荷電気浸透を利用したマイクロポンプの吐出量最大化を目的として、流れ場と電氣場の連成問題を考慮した新しいトポロジー最適化手法を構築し、ポンプ内部の最適な誘電体形状を求める。

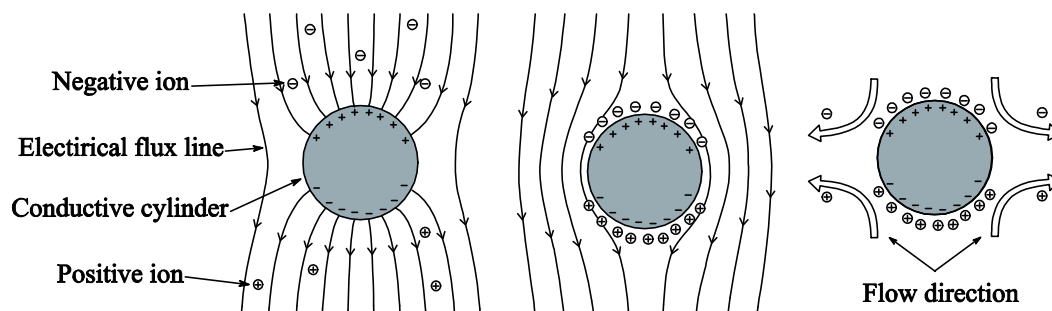


図1 誘起電荷電気浸透現象の原理

### 3. 研究の方法

起電荷電気浸透の簡単な例として図1に示す電解液中の導体円柱を考える。導体円柱に対し外部から電圧を印加すると、直後に電場が形成され導体表面に電荷が移動する。これに伴い電解液中のイオンは電場に沿って移動し、導体表面に集積して電氣二重層を形成

する。この電氣二重層中のイオンは導体表面へ向かう電場を遮蔽するため、電氣二重層に供給される電荷の量は徐々に減少して、一定時間の後に定常状態に達する。

定常状態における電場は、図1の中央図のように円筒を避けるように形成される。これにより電氣二重層中のイオンが円筒を沿う

ように移動するため、それらに引きずられるようにして流れが生じる。円筒の場合は、上下で符号が逆の等しい量の電荷が誘起するため、図1右のように上下対称の流れとなる。ここで電場の向きを逆転すると、表面に誘起する電荷と、それに伴って集積するイオンの符号がそれぞれ入れ替わるが、結果的に元の場合と全く同じ流れが生じる。

そのため、誘起電荷電気浸透は交流電圧を用いても誘起される流れの方向は常に変わらず、これを利用することで交流電圧を用いた電気浸透ポンプを実現できる。

従来の直流電圧を用いる電気浸透ポンプでは、電解液中のイオンが極板に集まり、極板近傍での電位差が大きくなることで電気分解が生じるため、気泡の発生、電極の劣化、サンプルの汚染などの問題を抱えている。これに対し、交流電圧を用いる電気浸透ポンプでは、極板近傍での電位差が大きくなる前に極板の正負が入れ替わることで電気分解の発生を抑制することが可能である。

一般的に、誘起電荷電気浸透の支配方程式を定式化する際は、正負それぞれのイオン濃度  $c_+$  および  $c_-$  の二種類の電解質が含まれた電解液について、両者の価数  $Z$  および拡散係数  $D_f$  がそれぞれ等しいと仮定する。この場合、電気素量  $e$  に対して、電荷密度を  $\rho_{el} = Ze(c_+ - c_-)$  とすると、電解液中の静電ポテンシャル  $\psi$  は次のポアソン方程式に従う。

$$\nabla \cdot (\epsilon_{\text{fluid}} \nabla \psi) = -\rho_{el}$$

ここで、 $\epsilon_{\text{fluid}}$  は電解液の誘電率を表す。また、正負それぞれのイオン流束密度を  $\mathbf{J}_+$  および  $\mathbf{J}_-$  とすると、イオン濃度と流束密度には次の保存則が成り立つ。

$$\frac{\partial c_{\pm}}{\partial t} = -\nabla \cdot \mathbf{J}_{\pm} \quad (\text{複号同順})$$

なお、電解液がイオン濃度に関して十分に希薄である場合、イオン流束密度は次のネルンストプランク方程式で表される。

$$\mathbf{J}_{\pm} = -D_f \left( \nabla c_{\pm} + \frac{\pm Ze}{k_B T} c_{\pm} \nabla \psi \right) \quad (\text{複号同順})$$

ここで、 $k_B$  はボルツマン定数、 $T$  は絶対温度である。

また、電気二重層中におけるイオンの移動に起因して生じる体積力を  $\mathbf{f}_{el}$  とすると、流れ場の流速  $\mathbf{u}$  および圧力  $p$  は、次の連続の式及びナビエ・ストークス方程式に従う。

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{u} &= 0 \\ \rho_{\text{fluid}} \left( \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} \right) &= -\nabla p + \eta \nabla^2 \mathbf{u} + \mathbf{f}_{el} \end{aligned}$$

ここで、 $\rho_{\text{fluid}}$  は流体の密度、 $\eta$  は粘性係数を表し、 $\mathbf{f}_{el}$  は静電ポテンシャルの勾配と電荷密度の積を用いて、次式で与えられる。

$$\mathbf{f}_{el} = -\rho_{el} \nabla \psi$$

ここで、誘起電荷電気浸透を利用したマイクロポンプの設計要件を明確化すると共に、

その要件を満足する最適構造を創出するための目的汎関数を用いて最適化問題の定式化を行う。

マイクロポンプの基本性能として、 $\mu$ -TAS などのマイクロ流体デバイスに効率良く液体搬送を行うことは極めて重要である。誘起電荷電気浸透を利用したマイクロポンプでは、ポンプ内部に配置する誘電体の位置や形状が吐出量に大きく影響することから、本研究ではトポロジー最適化によって、誘電体の最適構造を創出することを目的とする。すなわち、液体の吐出量最大化を目的として、誘起電荷電気浸透を利用したマイクロポンプのトポロジー最適化手法を構築する。

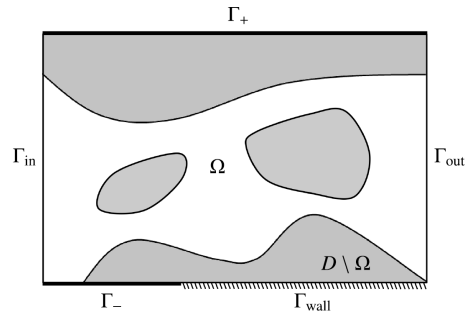


図2 最適設計の境界条件

ここで、図2に示す固定設計領域を考えた場合、この要件を満足する最適構造を創出するためには、 $\Gamma_{\text{PEC}} = \Gamma_{\text{in}} \cup \Gamma_{\text{out}}$  での流量を目的汎関数に設定し、その最大化を行えば良い。そこで、本研究では次の目的汎関数の最小化問題を考える。

$$\inf_{\chi \in X_{\text{ad}}} J = -\int_{\Gamma_{\text{out}}} \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} d\Gamma$$

なお、誘電体の誘電率  $\epsilon^{\text{diel}}$  と流体の誘電率  $\epsilon^{\text{fluid}}$  からなる  $\epsilon = \epsilon^{\text{diel}} + (\epsilon^{\text{fluid}} - \epsilon^{\text{diel}}) \chi$  を用いて、電気場の支配方程式を次式のように表現する。

$$\nabla \cdot (\epsilon(\chi) \nabla \Phi_{\beta}) = -\frac{1}{\lambda^2} \mathbf{P}_{\beta}$$

ここで、 $\Phi_{\beta} = (\Phi_R, \Phi_I)^T$ 、 $\mathbf{P}_{\beta} = (P_R, P_I)^T$  であり、 $\Phi_R, \Phi_I$  は電位の実部と虚部、 $P_R, P_I$  は電荷密度の実部と虚部である。

#### 4. 研究成果

提案法を数値例に適用した結果を示す。図3のような境界条件のもとで最適化を行った。ここでは、 $\Gamma_{\text{in}}$  と  $\Gamma_{\text{out}}$  を周期境界として、図中  $x_1$  方向の流量最大化問題を考える。

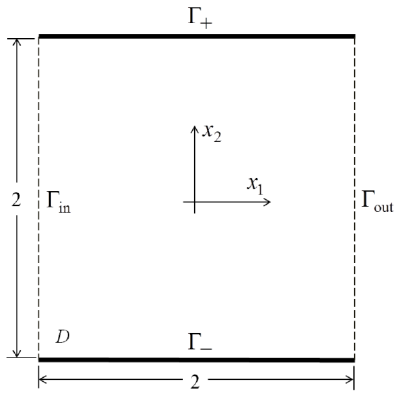


図3 設計領域

本提案手法によって得られた最適構造を図4(a)に示す．青色領域は誘電体領域を表し，白色領域は流体領域を示す．

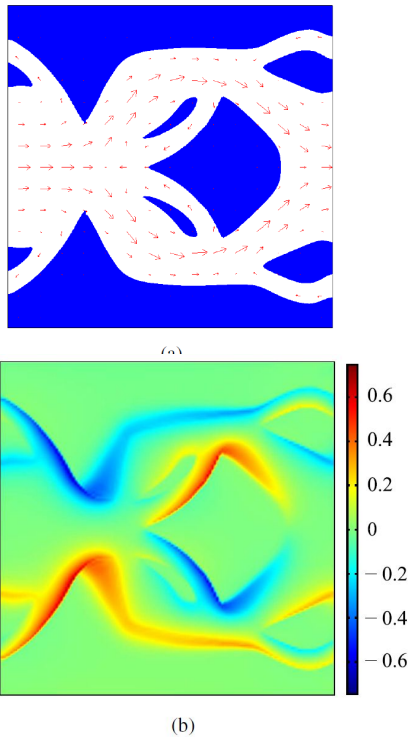
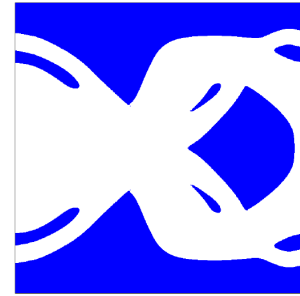


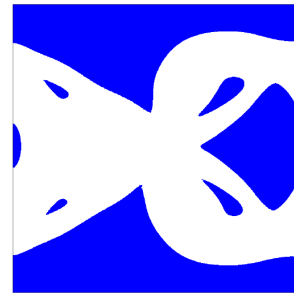
図4 最適構造(a)と電荷密度(b)

図に示すように，得られた最適構造は  $x_1$  軸に対して対称であり，図4(b)の電荷密度の分布からもわかるように，符号が逆の電荷が  $x_1$  軸について対称に分布する．これにより， $x_2$  軸方向に向きが逆で，同じ正味量の流れが生じ，それらが相殺されている．

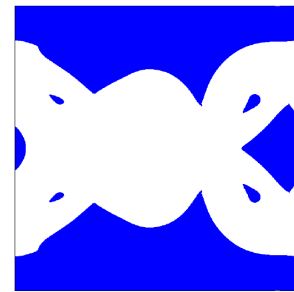
また，逆向き  $-x_1$  方向への流れは，斜面近傍に誘電体片を配置されることによって，流路が狭まり，かつその誘電体小片周りに生じる誘起電荷電気浸透による流れによって，弱められていることがわかる．また，印加する交流の周波数を  $\omega = 2.0, 3.0, 4.0$  として最適化を行った結果，図5(a), (b), (c)に示す異なる最適構造がそれぞれ得られた．これにより，印加する交流周波数毎に最適な構造を創出可能であることがわかった．



(a)



(b)



(c)

図5 異なる周波数に対する最適構造

## 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 1 件)

田中隆太, 矢地謙太郎, 佐藤綾美, 泉井一造, 山田崇恭, 西脇眞二, 誘起電荷電気浸透流を用いたマイクロポンプを対象としたレベルセット法に基づくトポロジー最適化, 日本機械学会論文集, Vol. 82, No. 835 (2016), p.15-00406.

〔学会発表〕(計 3 件)

田中隆太, 矢地謙太郎, 山田崇恭, 泉井一造, 西脇眞二, レベルセット法による形状表現を用いた誘起電荷電気浸透流を利用したマイクロポンプの最適設計法の開発, 第18回計算工学講演会, 日本計算工学会, 2013年6月19日-21日, 東京, 日本, No.E-2-3.

田中隆太, 矢地謙太郎, 山田崇恭, 泉井一造, 西脇眞二, レベルセット法に基づくトポロジー最適化を用いた誘起電荷電気浸透を利用したマイクロポンプの創生的最適設計法の構築, 精密工学会 2014 年関西地方定期

学術講演会講演論文集，(2014)，pp. 2-3.

田中隆太，矢地謙太郎，山田崇恭，泉井一浩，西脇眞二，誘起電荷電気浸透流を利用したマイクロ流路デバイスのレベルセット法に基づくトポロジー最適化，第19回計算工学講演会，日本計算工学会，2014年6月11日-13日，広島，日本，No.F-10-1.

Tanaka, R., Yaji, K., Yamada, T., Izui, K., Nishiwaki, S., A level set based topology optimization method for micropump design utilizing induced-charge electro-osmosis, 11th World Congress on Structural and Multidisciplinary Optimisation (WCSMO-11), 7-12 June, 2015, Sydney, Australia, No.1148.

〔図書〕(計 0 件)

○出願状況(計 0 件)

○取得状況(計 0 件)

〔その他〕

精密工学会 2014 年関西地方定期学術講演会  
ベストプレゼンテーション賞：田中隆太，矢地謙太郎，山田崇恭，泉井一浩，西脇眞二，  
"レベルセット法に基づくトポロジー最適化を用いた誘起電荷電気浸透を利用したマイクロポンプの創生的最適設計法の構築"，精密工学会 2014 年関西地方定期学術講演会講演論文集，(2014)，pp. 2-3.

## 6. 研究組織

### (1)研究代表者

泉井 一浩 (Kazuhiro IZUI)  
京都大学大学院・工学研究科・准教授  
研究者番号： 90314228

### (2)研究分担者

西脇 眞二 (Shinji NISHIWAKI)  
京都大学大学院・工学研究科・教授  
研究者番号： 10346041

山田 崇恭 (Takayuki YAMADA)  
京都大学大学院・工学研究科・助教  
研究者番号： 30598222

### (3)連携研究者

なし