

令和 4 年 5 月 17 日現在

機関番号：34416

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2019～2021

課題番号：19K04178

研究課題名(和文)電気力学を考慮した固体面濡れ性変化の流体力学モデリング

研究課題名(英文)Hydrodynamic modeling of wettability change considering electrostatics

研究代表者

山本 恭史 (Yamamoto, Yasufumi)

関西大学・システム理工学部・教授

研究者番号：90330175

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,400,000円

研究成果の概要(和文)：固体表面の濡れやすさが電圧をかけることで変化するエレクトロウエットング(EW)について、シミュレーションで再現する方法を開発することを目的として以下のことを行った。
1. 既存のシミュレーターでは、濡れの問題の扱いがよい加減な場合や再現不可能な場合が多くあるため、幅広い濡れの問題に対応するためのモデル開発・改良を行った。2. EWを電気流体力学の現象ととらえて、電気力学の方程式を解いて液体に作用する力を計算する新手法の開発を行った。
その結果、広範囲に適用可能なシミュレーターが作成され、電圧と濡れやすさの関係について、低電圧時・高電圧時それぞれ実験で見られる傾向が再現できる可能性が示された。

研究成果の学術的意義や社会的意義

電圧と濡れやすさの変化がどのような関係にあるかは、部分的には実験に合う理論式があるが、電圧が大きい条件などでは成立せず、その部分の物理もよく分かっていない。本研究では、EW現象を静電力学の問題ととらえたシミュレーションで再現できるかを試みた。
本当に濡れ性が変化しているのではなく、静電気力でそのように見えるだけという1つの見解につながる結果が得られた。この結果と開発されたシミュレーターは、マイクロTAS(微小総合分析装置)やEWディスプレイ等の新技術の開発・設計・運用に大変有用となる。

研究成果の概要(英文)：For the purpose of developing a simulation method for electrowetting (EW), in which the wettability of a solid surface changes by applying voltage, the followings were performed.

1. In the existing simulators, there are irresponsible or unreproducible treatments for the wettability, so we have developed and improved a model to deal with a wide range of wetting phenomena. 2. Taking EW as a phenomenon of electrohydrodynamics, we developed a new method to solve the equation of electrical dynamics and calculate the force acting on the liquid.
As a result, a simulator that can be applied in a wide range was created, and it was shown that there is a possibility that the tendency seen in the experiment at low voltage and high voltage can be reproduced for the relationship between voltage and wettability.

研究分野：流体工学

キーワード：電気流体力学 表面張力 微小スケール 濡れ性

様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

生化学分野等において、 μ -TAS (micro Total Analysis System) あるいは Lab-on-a-chip と呼ばれるマイクロ流体素子装置が注目されている。プログラム可能なマイクロ流体素子装置を達成する 1 つの手法として、回路表面の濡れ性を電圧操作により変化させるエレクトロウェットティング (EW) 技術がある。EW によりチップ上の液滴の作成・輸送・分割・統合が可能であることが確認され、その応用として、調整機能付きレンズや電子ペーパー、屋外用電子ディスプレイや光ファイバー用スイッチなどが研究開始以前より現在まで検討され続けている。

表面張力効果の 1 つである EW では、平衡状態の形状はエネルギー最小化原理より推定することが出来る。しかし、平衡状態の形状が決まっても、ディスプレイのような瞬時応答が必要な装置では、その応答特性が重要となるはずである。EW により流体が機敏に変化するには、流体粘度が小さい方が良く、粘度が小さいと平衡状態で静止するまでに時間を要する。この応答特性を知るためには、流動解析が不可欠となり、流体シミュレーションは非常に有用なツールとなる。申請者らのグループでは、EW 効果を表現するために半経験式 (Young-Lippmann 式⁽¹⁾) を用いた混相流シミュレーターを開発しており、実験をうまく再現できていた⁽²⁾。しかし、半経験式を用いた手法では、適用範囲に制限があるし、そもそも実際に濡れ性が変化しているのか、そう見えるだけかという議論⁽³⁾もあった。

2. 研究の目的

先に述べた Young-Lippmann 式⁽¹⁾は、濡れ性を表す接触角の余弦が電圧の 2 乗に比例するというものであるが、実験データは、電圧を上げると接触角が 0° (余弦が 1) に近づいて飽和するのではなく、接触角が $30^\circ \sim 60^\circ$ 程度で飽和する。これは、「印加電圧が高いほど濡れ性が良くなっていく(ように見える)」のは限られた範囲であることを意味する。この関係式はどの範囲で破綻するのか、なぜ破綻するのかは物理的に興味深く、それを説明できれば非常に有用である。申請者は、この現象を電気力学と流体力学を統合した数値解析により再現し、EW 現象の本質を解明することを目的として行われた。

3. 研究の方法

本研究では、具体的に次のような項目に関して、数値解析モデルの開発とシミュレーションを行った。

(1) 混相流シミュレーターの機能向上

本研究で検討するシミュレーションでは、まず、気液界面の影響を精度良く表現する必要がある。本研究では、自家製の Front-tracking 法シミュレーションコードに対し、以下の改善を試みた。

- ・ Front-tracking 法の質量保存性の改善。
- ・ Adaptive-mesh-refinement (AMR) を用いた、局所細分化格子による界面近傍の精度向上。
- ・ 界面に吸着した界面活性剤効果の検討。
- ・ 相変化の組み込み。

(2) 広範囲に適用可能な濡れモデルの開発

エレクトロウェットティングをシミュレーションで再現するためには、固体面の濡れ性を高精度に再現できる混相流シミュレーターが必要である。申請者はこれまでに、一般化ナビエ境界条件 (GNBC) を組み込んだ Front-tracking シミュレーターを開発してきたが、GNBC-Front-tracking は液滴が固体面へ衝突する際に生じる勢いによる、高速な濡れ広がりを再現できない。高速に濡れ広がるような場合は、接触線の上側の流体塊が接触線を乗り越えて新たに壁面と接触することで、接触線の位置が進むということが起きているはずである。そこで、GNBC-Front-tracking に加えて高速な濡れ広がりを表現するための液塊回転モデルを併用する接触線移動モデルを開発してきた。しかし接触のための閾値という数値計算上の追加パラメータや、濡れ広がる勢いが小さくなった時点で液塊回転モデルを無効にする切替操作も必要となり、汎用性がないという問題があった。そこで、Lukyanov と Pryer⁽⁴⁾が分子動力学シミュレーション結果に基づいて提案した非浸透条件を緩和モデルの援用を検討した。非浸透条件緩和により壁面近くのマーカーが固体面に自然に接地できるようになり、しきい値が不要となり、低速時には自動的にモデルが切り替わることが期待できる。この新しい濡れモデルについて 2 次元での応用と 3 次元化を検討した。

さらに、壁面形状が平面でない場合の検討も行った。

(3) 狭小流路系 EW に関する 3 次元シミュレーションの分析結果に基づく 2 次元モデル開発

狭い流路内の流れを扱うには、ヘレシヨ-近似がよく使われるが、接触角変化は 2 次元では表

現できない .Young-Lippmann 式による 3 次元シミュレーションデータを詳細に分析することで、2 次元面に垂直な方向の曲率を与えるモデル化を開発し、2 次元シミュレーションで実験を再現できるかを検討した。

(4) 差分法による電気流体力学シミュレーション

エレクトロウェットングの現象そのものが、本当に濡れ性が変化しているのか、濡れ性が変化しているように見えるだけなのかという議論を検討するため、また、Young-Lippmann 式が成立せずに接触角変化が飽和することの原因を検討するため、Young-Lippmann 式を用いず、電気流体力学の問題としてエレクトロウェットングの問題を扱う。本研究では、まず、マクスウェル方程式から電場を差分法で解き、電気力を直接評価するコードを作成し、3 次元の Front-tracking コードに組み込むことで電気流体力学シミュレーションコードの開発をおこなった。特に、電気伝導率比が大きい条件では、差分法の計算がうまくいかないことが分かったため、改善策を検討した。

(5) 境界要素法による電気流体力学シミュレーション

(4)の検討で、差分法による計算方法の改善を試みたが、本来厚みの無い気液界面を計算格子数個の幅でばかして表現する手法では限界があることが分かった。そのため、境界のみを離散化しグリーンの公式を利用する境界要素法の適用を試みた。3 次元での境界値の高精度な数値計算は困難で、解析積分公式の適用を試みた。さらに、Front-tracking 法での混相流計算に反映させるための適切な静電気力の表現、固気・固液界面での扱いなど、詳細に検討を行った。

4. 研究成果

上記の方法により得られた成果を次に述べる。

(1) 混相流シミュレーターの機能向上

・液面に落下する液滴により大気泡が生成する現象を、界面近傍を AMR により高精度化した Front-tracking により再現し、衝突時の液滴のわずかな形状変化が大気泡を生成するか否かに大きな景況があることを確認した。

・温度操作による固体面の濡れ性変化による液滴移動現象を、広範囲の温度変化に対応できるように TCUP 法を援用した GNBC-Front-tracking によりシミュレートした時に、液滴質量が大きく変化してしまうコードの不具合が生じたため、質量保存性について検討した。温度の界面近傍での急峻な変化を表現できるかどうか大きな影響を及ぼすことが分かったが、それに応じた物性の適切な与え方等、TCUP 法に関する部分にさらなる検討が必要であることが分かった。

・界面近傍を AMR により高精度化し、界面活性剤の濃度計算も組み込んだ Front-tracking コードを開発し、活性剤添加液中のテイラー気泡の運動をシミュレートした。界面と管壁の間の狭い隙間が AMR により計算できるようになり、活性剤の影響によりテイラー気泡の上昇速度が変化することが再現できるようになった。

・Front-tracking 法のシミュレーターに相変化現象を再現する機能を追加した。エネルギー方程式の離散化の際に、界面をまたぐセルにおける拡散項・対流項の扱いに工夫が必要であることが分かり、提案した手法により、与えたエネルギーがもれなく相変化に使用されるように改善出来た。

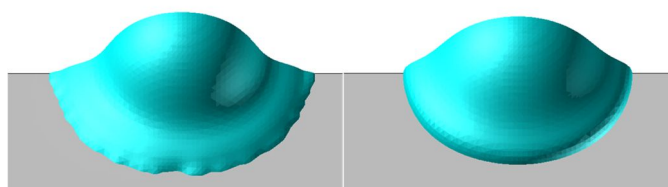


図 1. 3 次元液滴衝突モデルの改善結果。左：改善前、右改善後。固体面での扱いに不備があると、計算セルに依存するいびつな形状となってしまうが、非浸透条件緩和モデルによりセルに依存しない自然な形状が再現できるようになった。

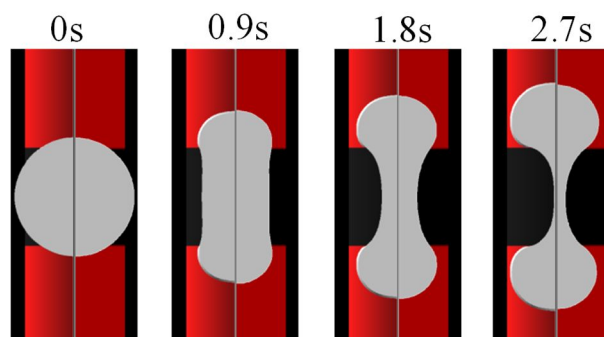


図 2. 狭小流路でのエレクトロウェットングによる液滴分裂のシミュレーション。各図の左側が 3 次元シミュレーション、右側が 2 次元シミュレーション。検討した 2 次元手法で 3 次元の結果を再現しようとしたが、分裂時刻が一致せず、さらなる検討が必要となった。

(2) 広範囲に適用可能な濡れモデルの開発

- GNBC-Front-tracking コードは、固体面を平面である前提で接触線近傍の4格子に滑り速度を与えるものである。壁面形状が平面でない1例として、ノズルのように角を有する固体面から液が流出する系の再現が可能となるコードの開発を行った。細いノズルから垂れる液滴の寸法がノズルの濡れ性によって変化する実験を再現できるようになった。

- 非浸透条件緩和モデルを適用した液塊回転モデルの検証を行うため、カーテンコーティングによる液膜塗布シミュレーションを試みた。非浸透条件緩和モデルが様々な対象に適用できる可能性が分かってきたが、現在引き続き検討中である。

- 非浸透条件緩和モデルを3次元Front-trackingに適用した。気液界面の接地位置の変更は、2次元と異なり、非常に複雑な計算となるため、コードの大幅な変更が必要となった。図1に結果の例を示す。固体面に衝突する液滴が高速に濡れ広がる現象を再現するには、非浸透条件緩和モデルが有効であることが示された。

(3) 狭小流路系 EW に関する3次元シミュレーションの分析結果に基づく2次元モデル開発

エレクトロウエットによる液滴分裂のシミュレーションを行うには、狭小流路中であっても、接触角の変化を適切に表現しないとイケないため、3次元シミュレーションが必要となる。申請者が過去に行った3次元シミュレーションの結果から接触角の影響を2次元シミュレーションにどのように組み入れれば2次元計算が可能になるか3次元データを分析して検討した。界面形状の仮定と体積保存関係に基づくモデルを開発し、2次元シミュレーションを行った(図2)。3次元データの特徴を捉えられている部分もあるが、液滴分裂時刻など2次元では再現できていない部分が多く、

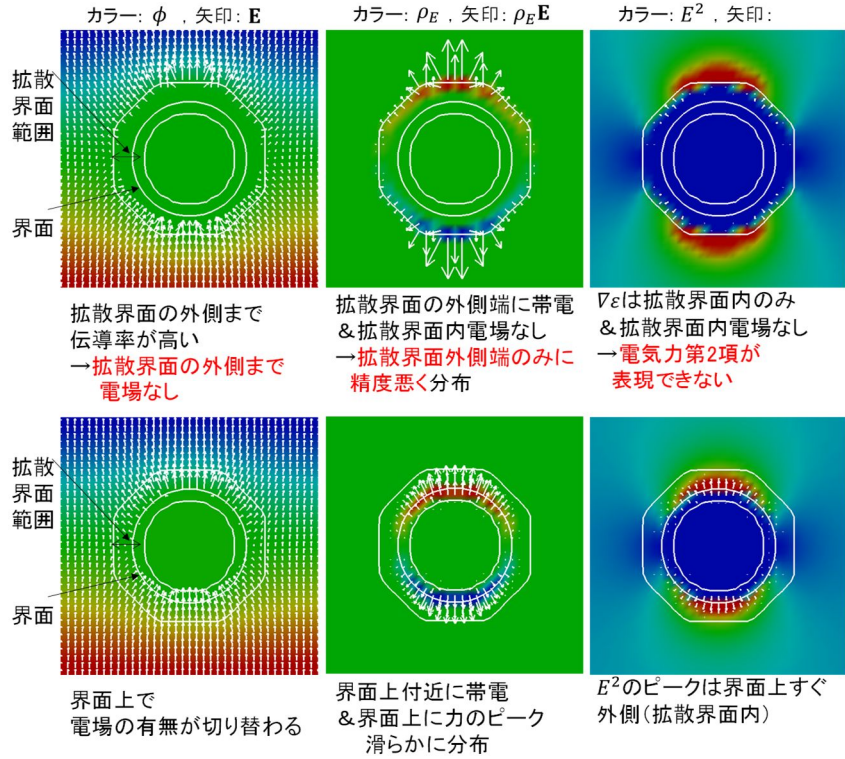


図3. 差分法による高電気伝導率比条件での液滴周りの電気力の計算結果。上段：単純な拡散界面の取り扱い，静電気力を適切に液滴界面で計算できない。下段：提案手法による改善結果。 ϕ ：電位， E ：電場， ρ_E ：帯電量。

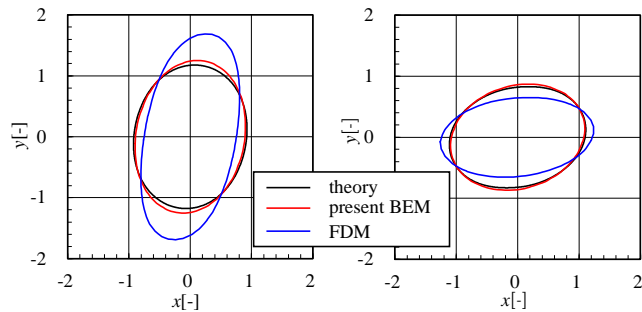


図4. 電場とせん断流れ中の液滴の形状。差分法では再現できない電気伝導率比が大きい場合の理論形状が本研究で開発された境界要素法により高精度に再現できるようになった。

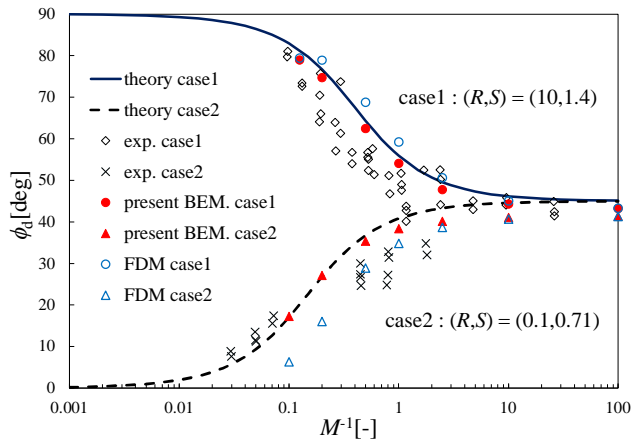


図5. 電場とせん断流れ中の液滴の，電場強さによる姿勢の変化。差分法では再現できない電場強さでも，境界要素法により計算可能になり，実験・理論とよく一致している。

引き続き検討が必要である。

(4) 差分法による電気流体力学シミュレーション

図3に示すように電場中の液滴の形状を計算する際に、界面の内外での電気伝導率が何桁も異なる時、差分法により電場を計算すると、上段に示すようにぼかした界面(混相流シミュレーションで良く用いられる)では、静電気力が適切に表現できないことが分かった。そこで、差分法における電気伝導率の取り扱いを変更し、さらにFront-tracking法で用いる界面3角要素を利用して、帯電量の計算と界面近傍の電場の計算に工夫を凝らした改善策を考案した。図3下側に示すように、界面近傍の電場、帯電量、静電気力を妥当に与えることが出来るようになった。このコードに固体面の影響を追加して、エレクトロウェットingの再現を検討したが、固体面の取り扱いが困難であり、次に示す境界要素法の方が、発展する可能性があることが分かった。

(5) 境界要素法による電気流体力学シミュレーション

Front-tracking法では、気液界面を3角要素で分割して表現する。この要素をそのまま境界要素法で利用することが出来る。境界要素法では、界面を厚みの無い境界として扱うことが可能であり、さらに、界面の表裏を区別して扱うことが可能となるため、電気伝導率比が大きくても特に問題にはならない。ただし、特異点となる境界での積分計算を適切に行わないと高精度な表現が不可能となることが確認された。そこで、解析積分公式⁽⁵⁾を適用することで界面での電位と電場が高精度に得られるようになった。図4に電場とせん断流れが課された場における液滴形状、図5に電場の強さを変化させた場合の液滴の姿勢の変化、のシミュレーション結果を理論や実験とともに示す。(4)で示した差分法によるコードでも、条件によっては妥当な結果が得られていたが、電圧条件などによって、変形が激しくなると理論形状を再現できなかった。一方、境界要素法を用いた開発手法では理論形状を良く再現し、かつ広い電圧範囲にわたって実験とよく一致する結果が得られるようになった。

この開発コードにさらに、絶縁層固体境界での取り扱いを組み込んでEWを再現する系のシミュレーションを行った。固体面の帯電による静電気力の影響を、流体運動に反映する方法が難しく、様々な検討を行った。固体表面にごく薄い検査体積を考えて発散定理を用い、固体面表裏でのマクスウェル応力の差による力を計算し、さらにその力を速度に変換して境界条件として表現する等の工夫が必要であった。結果を図6に示す。低電圧時にはYoung-Lippmann式と同程度の上昇率で接触角余弦が変化し、高電圧時には飽和することが再現できた。ただし、低電圧時の線形性は再現できておらず、さらなる検討が必要である。

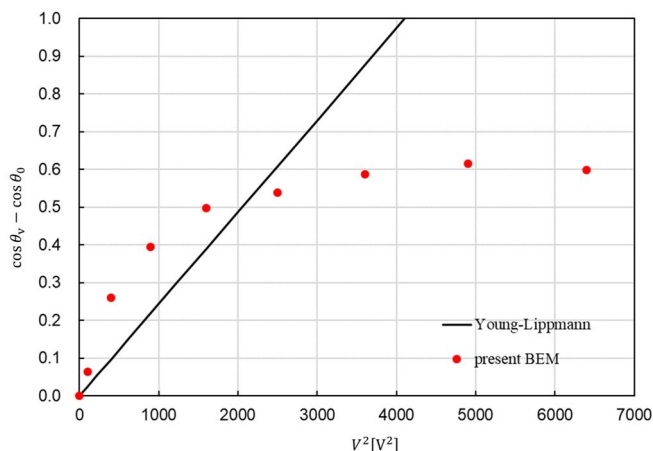


図6. 電圧2乗と接触角余弦の関係の、境界要素法を用いた開発手法によるシミュレーション結果。Young-Lippmannの式と異なり、高電圧で飽和することが再現できている。ただし、低電圧時の線形性が見られない。

<引用文献>

- (1) F. Mugele, J.-C. Baret, Electrowetting: from basics to applications, Journal of Physics: Condensed Matter, Vol.17, 2005, R705-R774.
- (2) Y. Yamamoto, T. Ito, T. Wakimoto, K. Katoh, Numerical and theoretical analyses of the dynamics of droplets driven by electrowetting on dielectric in a Hele-Shaw cell, Journal of Fluid Mechanics, Vol.839, 2018, 468-488.
- (3) T. B. Jones, An electromechanical interpretation of electrowetting, Journal of Micromechanics and Microengineering, Vol.15, 2005, 1184-1187.
- (4) A. V. Lukyanov, T. Pryer, Hydrodynamics of Moving Contact Lines: Macroscopic versus Microscopic, Langmuir, Vol.33, 2017, 8582-8590.
- (5) 浦郷正隆, 三次元 Laplace 方程式の基本解の解析的積分公式とその勾配, 日本機械学会論文集 A 編, 66 巻, 2000, 254-261.

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計0件

〔学会発表〕 計12件（うち招待講演 0件 / うち国際学会 0件）

1. 発表者名 田尾 圭汰, 山本 恭史, 大友 涼子, 田地川 勉, 板東 潔
2. 発表標題 Front-tracking法を用いた固体面への液体塗布の再現
3. 学会等名 日本機械学会関西学生会2021年度学生員卒業研究発表講演会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 藤村 大輝, 山本 恭史, 大友 涼子, 田地川 勉, 板東 潔
2. 発表標題 固体面の高速な濡れ表現のための非浸透条件緩和モデルを用いた3次元Front-trackingコードの開発
3. 学会等名 日本機械学会関西学生会2021年度学生員卒業研究発表講演会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 八木 佑真, 山本 恭史, 大友 涼子, 田地川 勉, 板東 潔
2. 発表標題 Front-tracking法を用いた相変化現象の数値解析
3. 学会等名 日本機械学会関西学生会2021年度学生員卒業研究発表講演会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 北 澄人, 山本 恭史
2. 発表標題 AMR-Front tracking法による活性剤添加液中の気泡運動シミュレーション
3. 学会等名 日本機械学会関西支部第97期定時総会講演会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 吉川和輝, 山本恭史
2. 発表標題 境界要素法とfront-tracking法を組み合わせた電場中液滴挙動のシミュレーション
3. 学会等名 混相流シンポジウム2021
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 吉川 和輝, 山本 恭史, 大友 涼子, 田地川 勉, 板東 潔
2. 発表標題 電気流体力学シミュレーションのための 境界要素法による円形液滴に作用する静電気力の計算法
3. 学会等名 日本機械学会 関西学生会2019年度学生員卒業研究発表講演会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 小芝健太, 山本恭史
2. 発表標題 温度操作による液滴駆動のFront-tracking-TCUPシミュレーション (質量保存性について)
3. 学会等名 日本機械学会関西支部第95期定時総会講演会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 山本 恭史, 宮本 和真
2. 発表標題 電場中液滴の電気流体力学シミュレーション
3. 学会等名 日本混相流学会 混相流シンポジウム 2019
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 相坂享佑, 山本恭史
2. 発表標題 Hele-Shawセルにおけるエレクトロウエットティングの一般化ナビエ境界条件に基づく2次元近似モデルの開発
3. 学会等名 第32回数値流体力学シンポジウム
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 川口直樹, 山本恭史
2. 発表標題 液面に落下する液滴による大気泡生成のAMRFront-trackingシミュレーション
3. 学会等名 第32回数値流体力学シンポジウム
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 川上耕平, 山本恭史
2. 発表標題 固体面に衝突する液滴による濡れ挙動を再現する非浸透条件緩和モデルの検討
3. 学会等名 第32回数値流体力学シンポジウム
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 平下尚悟, 山本恭史
2. 発表標題 GNBC-Front-tracking法による角を考慮した動的な濡れのシミュレーション
3. 学会等名 第32回数値流体力学シンポジウム
4. 発表年 2019年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
--	---------------------------	-----------------------	----

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------