

## 2024年度 研究成果報告書(短期)

## 研究テーマ

## 散逸粒子動力学によるマイクロ流路内の溶液混合プロセスの解析

## 代表研究者

## 研究要旨

近年、マイクロ流路内における化学合成が検討されており、2相流を用いた化学合成では、溶液が均一に混合される時間は流路の断面形状や表面粗さが影響することが予測されている。しかしながら、このような予測の理論的な解析は実施されておらず、ナビエ・ストークスの式などを用いた数値計算や有限要素法を用いた解析手法では、複雑なメソスケールの解析が不可能である。

散逸粒子動力学法(DPD法)は、複数の原子を1つの粒子として粗視化した分子動力学法(粗視化分子動力学法)であり、溶融高分子の高次構造や変形挙動などの解析手法として用いられている。粗視化分子動力学法として一般的にブラウン動力学を用いた粗視化分子動力学法が用いられる。この方法では粒子の周囲の分子を連続体として扱い、連続体である溶媒から受ける熱ゆらぎをランダム力として表現する。よってランダム力と摩擦力は粒子毎に独立に作用するため質量は保存するが、運動力は保存しない。一方、本研究で用いるDPD法では、粒子間に作用する力は、すべて2粒子力であり、Newtonの第3法則が満たされるため、運動量が保存される。したがって粒子間の2粒子間の相互作用を計算することにより、複雑な流体現象を解析可能である。

上記のような課題に対して、汎用DPDプログラムでは流体の壁面における摩擦を考慮できない。DPD法を用いた流体解析については、流路の壁面を均一な境界壁として扱い、壁面と流体の相互作用と流体間の相互作用を検討した結果が報告されている。しかし、複雑な流路パターンの場合は流路の壁面を粒子の集合として扱う必要がある。また微細流路を流れる2相流の混合過程を解析した例は存在しない。そこで我々は壁面の摩擦を考慮できる独自のプログラムを開発し、流路内における溶液の混合状態の解析を実施した。

本研究では矩形断面と半円形断面を有する流路をモデル化し、Y字流路から2種類の溶液を流路内に定速で流したときに、溶液が均一に混合するまでの時間を明らかにした。

なお、本研究成果については、国際会議 MicrotAS2024、電気学会 第41回「センサ・マイクロマシンと応用システム」シンポジウム(添付資料)において発表を実施した。

## 研究成果

2相流は流体を bead A と bead B (Fluid bead) を用いて表現し、bead A と bead B を流路断面の半分の幅の中にランダムに配置した。モデルの境界条件は流路の長さ方向(z軸)を周期境界条件に設定し、流動方向の混合状態の変化を解析した(図1(a))。また、流路の壁面はビーズ C (wall bead) で構成し、流路の開口幅が  $260\ \mu\text{m}$  ( $26\sigma$ )、深さが  $70\ \mu\text{m}$  ( $7\sigma$ ) の矩形断面(図1(b))と半円形断面(図1(c))を有する流路の DPD モデルを作成した。なお、顕微鏡を用いて、インクを用いたマイクロ流体デバイスの流動状態を観察した結果、流量  $0.01\sim 0.1\text{mL}/\text{min}$  の範囲で2相流が形成されることが確認された。

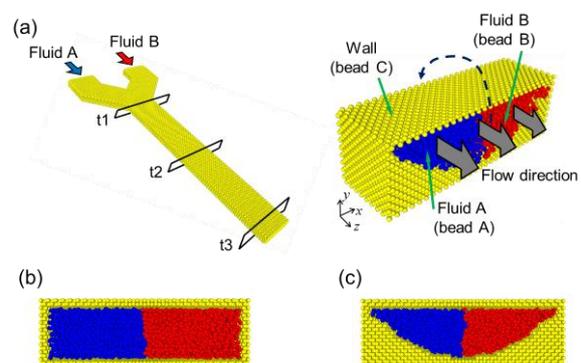


図 1. (a)2相流のDPDモデル、(b)矩形断面流路モデル、(c)半円形断面流路モデル

流動計算は1つのfluid beadの流動方向(z軸方向)に作用させる流動力  $f_z$  を、0から  $20\epsilon/\sigma$  ( $\epsilon/\sigma$  は力のDPD単位)の範囲で変化させて実施した。粒子間の相互作用はfluid bead同士は引力、fluid beadとwall bead間には斥力が作用するように設定した。流体の

壁面における摩擦損失を考慮するために、fluid bead が wall bead に接触したときに bounce-back アルゴリズムを用いて fluid bead の速度を反転させた。DPD 法では流体や壁面を複数の粒子を用いて粗視化しているため、単位系が無次元化される。したがって水の拡散係数( $10^{-9}\text{m}^2/\text{s}$ )と fluid bead の平均自乗変位の傾きから算出する拡散係数を比較することにより、DPD モデルの単位系を SI 単位に変換した。

混合時間を解析する前に、矩形断面モデルにおける流路幅方向の fluid bead の速度分布が、Navier-Stokes 式による計算結果と一致ことを確認した(図 2)。

図 3 に流動力  $f_z=10\epsilon/\sigma$  における fluid bead の時間変化を示す。時間の経過とともに混合状態が変化していることが確認できる。また、0.50s の画像を比較すると、半円形断面の方が均一に混合していることが予想できる。

平均流速と流動力の関係を計算した結果、平均流速が約 0.02 m/s のとき、流動力  $f_z$  は矩形断面では  $10\epsilon/\sigma$ 、半円形断面では  $20\epsilon/\sigma$  となった。

流路内で fluid bead が均一に混合するまでの時間を明らかにするために、流路断面の流路幅の半分の領域における bead B の密度の時間変化を、計算結果から解析した。図 4 に流動力  $f_z=2\epsilon/\sigma$  のときの流路幅の半分の領域における bead B の密度の時間変化を示す。図 4 において密度が 1.0 に到達したときの均一に混合されたことになり、半円形断面流路の方が早く混合されることが確認できる。図 4 における

図 5 に均一混合時間と平均流速の変化を示す。半円形断面流路は矩形断面よりも均一混合時間が短く、高速で流動させることにより均一混合時間が減少し、流速が 0.01 m/s 以上で均一混合時間が一定となる傾向が確認された。

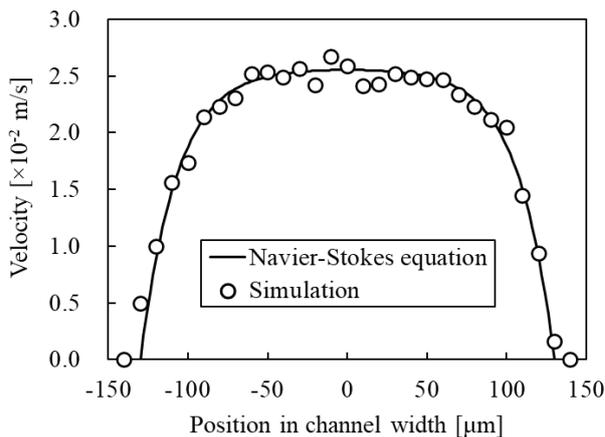


図 2 矩形断面流路モデルと Navier-Stokes 式の流路幅方向の速度分布

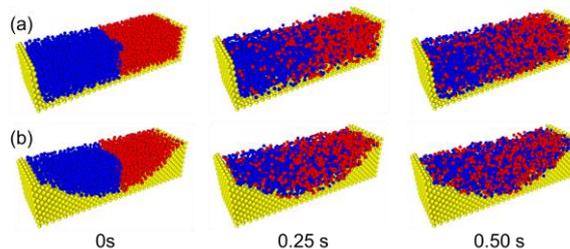


図 3. 流動力  $f_z=10\epsilon/\sigma$  における fluid bead の時間変化

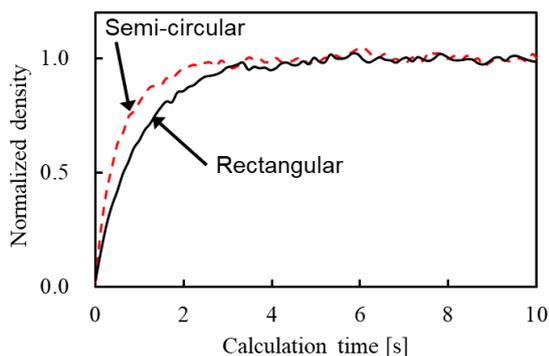


図 4. 流路幅の半分の領域における bead B 密度の時間変化 ( $f_z=2\epsilon/\sigma$ )

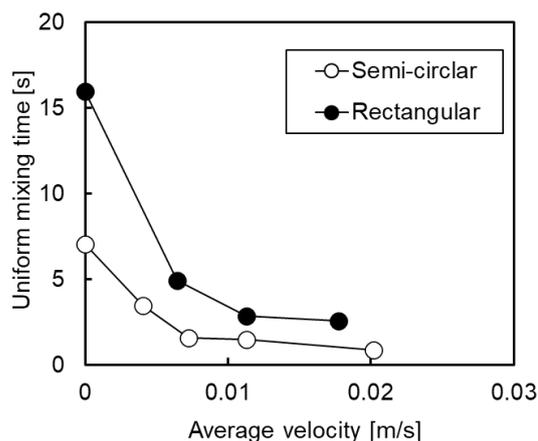


図 5. 均一混合時間と平均流速の変化

## 添付資料

資料の詳細は、当財団までお問い合わせください。