

非一様な壁面からなるマイクロチャネル内の電気浸透流の解析

豊田中央研究所 吉田 広顕

Hiroaki Yoshida

Toyota Central R&D Labs., Inc.*

Electro-osmotic flows in micro channels having nonuniform cross-section and charge distribution are investigated by means of the lubrication approximation theory. Starting from the model system consisting of the Navier–Stokes equations, the Nernst–Planck equation, and the Poisson equation, a perturbation analysis is applied to the system. A slow variation of the structure and the charge distribution along the channel are assumed to derive a model equation that predicts the electro-osmotic flow rate. Specific situations are investigated using the model equation, in which the surfaces of undulated microchannels are charged negatively at a constant surface charge density, and are charged non-uniformly along the channel such that the net surface charge vanishes. For both cases, the electro-osmotic flow rate is evaluated and the dependency on geometrical parameters, such as the amplitude of the surface shape, is discussed.

1 はじめに

電解液と帯電壁からなる固液界面の液相側には、壁面の電荷を遮蔽するために厚みがデバイ長 (数 nm～数百 nm) 程度の電気二重層が形成される。電気二重層内ではイオンが不均一に分布し電気的中性が崩れるため、バルクにはない特異な現象 (界面動電現象) が起こる。たとえば、外部電場が印可されると層内の電荷が電場から力を受け、それに伴って

*〒480-1116 愛知県長久手市横道 41-1
h-yoshida@mosk.tytlabs.co.jp

電解液に駆動力が生じる。この駆動力は、コロイド粒子の電気泳動や、マイクロチャネル内の電気浸透流の主要因である。

近年のマイクロ/ナノ・スケールの加工技術の発展は目覚ましく、以前は制御することが困難だった界面動電現象を、積極的に工学利用するための研究・開発が行われるようになってきた [1]。たとえば、電気浸透流を利用した駆動部を持たないポンプの研究や [2]、圧力勾配により駆動される流れを利用した発電デバイスの開発などが挙げられる [3]。こうした工学応用への期待に比例して、関連する基礎研究も注目を集めている。とくに最近では、表面の観察・加工技術の進化と相俟って、表面粗さや表面構造の影響に着目した研究が盛んである [4]。

本研究では、表面構造が界面動電現象に及ぼす影響を明らかにするために、界面が平面ではない場合の電気浸透流を解析する。具体的には、波状壁からなるマイクロチャネルを考え、Navier–Stokes 方程式、Poisson 方程式、Nernst–Planck 方程式からなるモデル方程式系に対して、壁面形状および電荷密度分布の変化がチャネルに沿ってゆるやかに変化する場合の理論解析を実施し、流量を予測するモデルを導出する。その結果を、ゆるやかな変化を仮定しない場合の直接数値解析の結果を比較・検討し、妥当性を確かめる。今後は、電荷分布も周期的に変化する場合や、局所的な温度変化も考慮した系について解析を進める予定である。

2 問題設定と基礎方程式系

2.1 問題

x 軸方向に周期的なを持ち (周期 L)、壁面位置が $y = \pm h(x)$ と表されるチャネルを考える (図 1)。チャネル内 ($-h(x) < y < h(x)$) は、1 価のカチオン、アニオンおよび溶媒からなる電解液で満たされているとする。壁面の表面電荷密度は x の関数として与えられているとする ($\sigma(x)$)。 x 軸方向に電場が印可されており、壁面付近に形成される電気二重層が電場から受ける力により誘起される電気浸透流を、次節に示す方程式系に基づいて解析する。

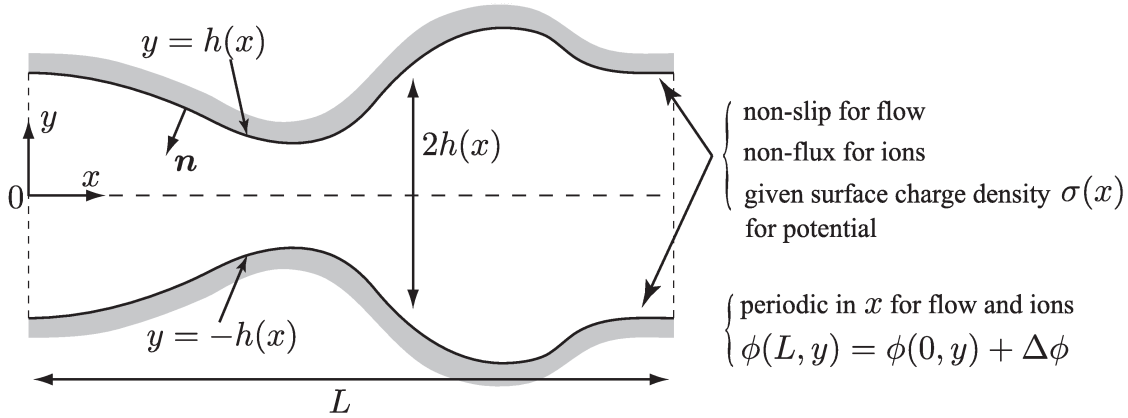


図1 Geometry of the problem.

2.2 方程式系

電解液は Newton 流体であるとし、したがって支配方程式は次に示す Navier–Stokes 方程式とする:

$$\frac{\partial u_j}{\partial x_j} = 0, \quad (1)$$

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho_0} \frac{\partial p}{\partial x_i} + \nu \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j^2} + \frac{F_i}{\rho_0}, \quad (2)$$

ここで、 t は時間、 x_i は空間座標、 $u_i(t, \mathbf{x})$ 、 $p(t, \mathbf{x})$ は電解液の流速、圧力をそれぞれ示す。ベクトル $\mathbf{F}(t, \mathbf{x})$ は電解液に働く体積力で、定数 ρ_0 、 ν は電解液の密度および動粘性係数をそれぞれ示す。本稿では、空間ベクトルをボールド体を用い、その成分には添字 i, j を付して表記する。重複する添字にはアインシュタインの縮約記法を用いる。

次に各イオン成分の保存方程式を示す。イオン濃度を C_m 、イオン流束を $\mathbf{J}_m$ と表記すると、保存方程式は次のようにかける ($m = a$: アニオン、 $m = c$: カチオン):

$$\frac{\partial C_m}{\partial t} + \frac{\partial J_{mj}}{\partial x_j} = 0. \quad (3)$$

$$J_{mi} = -\frac{ez_m D_m}{k_B T} C_m \frac{\partial \phi}{\partial x_i} - D_m \frac{\partial C_m}{\partial x_i} + C_m u_i, \quad (4)$$

ここで、 z_m 、 D_m は成分 m のイオンの価数、拡散係数をそれぞれ示し、 e 、 k_B 、 T はそれぞれ単位電荷、ボルツマン定数、温度である。本研究では温度 T は定数とする。式 (4) は Nernst–Planck 方程式と呼ばれているモデルで、右辺の各項は順に、電気泳動、拡散、対

流の効果をそれぞれ示す [5]. イオン分布により誘起される電位場 ϕ は, 次の Poisson 方程式にしたがう:

$$\varepsilon \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_j^2} = -\rho_e, \quad (5)$$

ここで, ε は電解液の誘電率である. 電荷密度 ρ_e は, イオン濃度と次の関係にある:

$$\rho_e = \sum_m F z_m C_m. \quad (6)$$

本研究では, 流体が電場から受ける力として式 (2) の体積力 $\mathbf{F}$ を次で定義する:

$$F_i = -\rho_e \frac{\partial \phi}{\partial x_i}. \quad (7)$$

2.3 固液界面の境界条件

流れを記述する Navier–Stokes 方程式に対しては, 固液界面で通常の滑りなし境界条件を課す:

$$u_i = 0, \quad \text{at } y = \pm h(x). \quad (8)$$

ナノスケール界面では, 単純な滑りなし条件ではなく, 界面で生じる滑りの効果を取り入れた境界条件モデルが必要となるが, 本研究で考えるスケールはマイクロオーダーであり, 滑りが生じるスケールより十分大きいので滑りなし条件を仮定する. イオン濃度については, 壁面を横切るフラックスがゼロとなる境界条件を課す:

$$n_j J_j = 0, \quad \text{at } y = \pm h(x), \quad (9)$$

ここで, $\mathbf{n}$ は流体領域の方向を向く壁面の単位法線ベクトルである. 式 (4) を式 (9) に代入すると, 境界条件の C_m による表記が得られる:

$$-\frac{e z_m D_m}{k_B T} C_m n_j \frac{\partial \phi}{\partial x_j} - D_m n_j \frac{\partial C_m}{\partial x_j} + C_m n_j u_j = 0. \quad (10)$$

最後に, 電位場に対する表面電荷密度が与えられている場合の境界条件は, 次の Neumann 型条件となる:

$$-\varepsilon n_j \frac{\partial \phi}{\partial x_j} = \sigma, \quad \text{at } y = \pm h(x). \quad (11)$$

3 壁面形状変化が緩やかな場合の理論解析

本節では、電気浸透流の流量を評価するための解析モデルを導出する。解析は文献 [6] により最初に電気二重層が薄い場合の電気浸透流に適用された Lubrication 近似解析法と呼ばれる手法に基づく。ここでは同手法を電気二重層が有限の厚みを持つ本問題へと適用する。解析のために以下の仮定をおく：(i) 流れは定常状態にある。(ii) 流速は比較的小さく式 (4) の移流項は (右辺第 3 項) は無視できる。(iii) ゼータポテンシャル (壁面上での電位) が小さく、Debye-Hückel 近似が成り立つ。(iv) 壁面形状変化および表面電荷密度の変化のスケールが、チャンネル幅に比べて十分に長い [$L \gg \bar{h}$; $\bar{h} = (1/L) \int_0^L h(x) dx$]. Lubrication 近似で本質的なのは仮定 (iv) である (図 2)。この仮定により $\delta = \bar{h}/L \ll 1$ となることを利用し、これを微小パラメータとした摂動展開法により解析を進める。

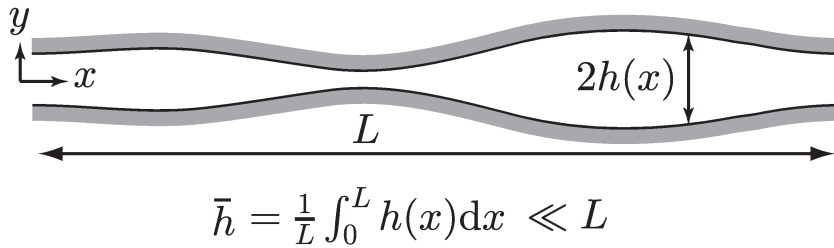


図2 Lubrication approximation.

さて、上記の仮定 (i)-(iii) を元の方程式系へと適用すると、問題は以下のように簡単化される：

$$\frac{\partial^2 \phi_e}{\partial x_j^2} = \kappa^2 \phi_e, \quad \frac{\partial^2 \phi_*}{\partial x_j^2} = 0, \quad (12)$$

$$0 = -\nabla p_* + \mu \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j^2} - \varepsilon \kappa^2 \phi_e \frac{\partial \phi_*}{\partial x_i}, \quad (13)$$

$$\frac{\partial u_j}{\partial x_j} = 0, \quad (14)$$

ここで、 ϕ_e および ϕ_* はそれぞれ表面電荷による内部電場と、外力として与えられる電位差の影響を示し、線形化の仮定 (iii) に基づき分離してある。また、 $p_* = p - \varepsilon \kappa^2 \phi_e^2/2$ は修正圧力、および $\kappa = (2C_0 F e / \varepsilon k_B T)^{1/2}$ (F : Faraday 定数) はデバイ長の逆数である。対応する境界条件は次の通りである：

$$u_i = 0, \quad \varepsilon n_j \frac{\partial \phi_e}{\partial x_j} = \sigma, \quad n_j \frac{\partial \phi_*}{\partial x_j} = 0, \quad \text{at } y = \pm h(x). \quad (15)$$

また $x = 0$ および L では $\phi_e, p_*, \mathbf{u}$ については周期境界, ϕ_* については電位差を考慮した境界条件を課す:

$$\phi_*(0, y) = \phi_*(L, y) + \Delta\phi. \quad (16)$$

簡単化の過程において, 仮定 (i) および (ii) を式 (4) に適用して得られる Boltzmann 分布 $C_m = C_0 \exp(-ez_m\phi/k_B T)$ (C_0 : 代表濃度) を用いた.

Lubrication 近似解析の中心となる仮定 (iv) を用いて, $\delta = \bar{h}/L$ を微小パラメータとする摂動展開を実施するために, 以下のようなスケーリングを施す:

$$x = \tilde{x}L, \quad y = \tilde{y}\bar{h}, \quad \mathbf{u} = \tilde{\mathbf{u}}u_0, \quad (17)$$

$$p_* = \tilde{p} \left(\frac{\mu u_0 L}{\bar{h}^2} \right), \quad \phi_e = \tilde{\phi}_e \left(\frac{\bar{h}\sigma_0}{\varepsilon} \right), \quad \phi_* = \tilde{\phi}_* \Delta\phi, \quad (18)$$

$$h(x) = \tilde{h}(\tilde{x})\bar{h}, \quad \sigma(x) = \tilde{\sigma}(\tilde{x})\sigma_0, \quad (19)$$

ここで, $u_0 = (\kappa^2 \bar{h}^3 \sigma_0 \Delta\phi / \mu L)$ であり, $\mu = \nu \rho_0$ は粘性係数, σ_0 は表面電荷密度の代表値である.

式 (17)~(19) のように定義した無次元変数を用いて方程式系を書き直す. なお, ここからは無次元変数に付したチルダ ($\tilde{}$) は煩雑を避けるために省略し, 必要な時にはその都度明記することにする. 方程式系は次のようになる:

$$\delta^2 \frac{\partial^2 \phi_*}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi_*}{\partial y^2} = 0, \quad (20)$$

$$\delta^2 \frac{\partial^2 \phi_e}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi_e}{\partial y^2} = (\bar{h}\kappa)^2 \phi_e, \quad (21)$$

$$0 = -\frac{\partial p}{\partial x} + \delta^2 \frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_x}{\partial y^2} + \phi_e \frac{\partial \phi_*}{\partial x} + \gamma \delta \phi_e \frac{\partial \phi_e}{\partial x}, \quad (22)$$

$$0 = -\frac{1}{\delta} \frac{\partial p}{\partial y} + \delta^2 \frac{\partial^2 u_y}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_y}{\partial y^2} + \frac{1}{\delta} \phi_e \frac{\partial \phi_*}{\partial y} + \gamma \phi_e \frac{\partial \phi_e}{\partial y}, \quad (23)$$

ここで $\gamma = \sigma_0 L / \varepsilon \Delta\phi$ である. 壁面上 ($y = \pm h(x)$) での境界条件は

$$n_x \delta \frac{\partial \phi_*}{\partial x} + n_y \frac{\partial \phi_*}{\partial y} = 0, \quad (24)$$

$$n_x \delta \frac{\partial \phi_e}{\partial x} + n_y \frac{\partial \phi_e}{\partial y} = -\sigma, \quad (25)$$

$$u_x = u_y = 0, \quad (26)$$

ここで, 壁面上での法線ベクトルの成分は $n_x = \pm \delta h' / (1 + \delta^2 h'^2)^{1/2}$ および $n_y = \mp 1 / (1 + \delta^2 h'^2)^{1/2}$ (h' は $h(x)$ の微分係数) となる.

境界値問題 (20)~(26) を解析するために、変数を δ のべき級数で展開する：

$$\phi_* = \phi_*^{(0)} + \delta\phi_*^{(1)} + \delta^2\phi_*^{(2)} + \dots, \quad (27)$$

$$\phi_e = \phi_e^{(0)} + \delta\phi_e^{(1)} + \delta^2\phi_e^{(2)} + \dots, \quad (28)$$

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}^{(0)} + \delta\mathbf{u}^{(1)} + \delta^2\mathbf{u}^{(2)} + \dots, \quad (29)$$

$$p = p^{(0)} + \delta p^{(1)} + \delta^2 p^{(2)} + \dots. \quad (30)$$

解析の目的は壁面の変化がゆるやかである極限，すなわち $\delta \rightarrow 0$ での電気浸透流 $u_x^{(0)}$ を求めることである．展開形を上の境界値問題へと代入し， δ のべき毎に整理することによって， $\phi_*^{(n)}$ や $\mathbf{u}^{(n)}$ などの展開係数に対する方程式と境界条件の組が得られる．これらの係数に対する境界値問題は，次に示すように低次から順に解くことが可能である．

まず，式 (20) および (24) から得られる $\phi_*^{(n)}$ に対する境界値問題について考える．2 次のオーダー，つまり δ^2 の係数までの解析により， $\phi_*^{(0)}$ を次のように求めることができる：

$$\frac{\partial\phi_*^{(0)}}{\partial x} = \frac{1}{g_1 h}, \quad \frac{\partial\phi_*^{(0)}}{\partial y} = 0, \quad (31)$$

ここで g_1 は次式で定義される量である：

$$g_k = \int_0^1 \tilde{h}(\tilde{x})^{-k} d\tilde{x}. \quad (32)$$

上式では $\tilde{h}$ および $\tilde{x}$ が無次元量であることを明記するためにチルダを付してある．次に式 (21) および (25) から得られる境界地問題を考える．解 $\phi_e^{(0)}$ は初項，つまり δ^0 の係数の解析のみから次のように得られる：

$$\phi_e^{(0)} = \frac{\sigma \cosh(\kappa \bar{h} y)}{\kappa \bar{h} \sinh(\kappa \bar{h} h)}. \quad (33)$$

さらに式 (23) から導かれる問題へと解析を進める．ここまでの解析で得られた式 (31) を用いると， $p^{(0)}$ は x のみの関数であることがわかる：

$$\frac{\partial p^{(0)}}{\partial y} = 0. \quad (34)$$

最後に式 (22) および (26) から得られる境界地問題を考える．式 (31)~(34) の結果を使うことにより，初項の解析から $u_x^{(0)}$ が次のように求められる：

$$u_x^{(0)} = \frac{1}{2} \frac{\partial p^{(0)}}{\partial x} (y^2 - h^2) + \frac{\sigma}{w_1 h (\kappa \bar{h})^3} (\cosh(\kappa \bar{h} h) - \cosh(\kappa \bar{h} y)). \quad (35)$$

電気浸透流の流量は上式をチャネル幅に渡って積分することにより得られる: $Q = 2 \int_0^h u_x dy$, ここで質量保存則 (14) より流量は x に依らないことに注意する. ところが, このままでは $\partial p^{(0)}/\partial x$ が未定のまま残ってしまう. そこでこの未定変数を消去するために, 圧力についての周期境界条件を用いる: $\int_0^1 (\partial p^{(0)}/\partial x) dx = 0$. 式 (35) を $\partial p^{(0)}/\partial x$ について解いて代入することにより, $\delta \rightarrow 0$ の極限での流量が次のように求まる:

$$Q = \frac{2\sigma_0\Delta\phi}{\mu\kappa^2 L g_1 g_3} \int_0^1 \frac{\tilde{\sigma}(\tilde{x})}{\tilde{h}(\tilde{x})^3} \left(\frac{\kappa\bar{h}}{\tanh(\kappa\bar{h}\tilde{h})} - \frac{1}{\tilde{h}} \right) d\tilde{x}, \quad (36)$$

ここで Q は z 方向単位長さあたりの有次元体積流量であり, g_1 および g_3 は式 (32) で定義される無次元量である. 上式では, 式 (17) および (19) で定義した $\tilde{x}$, $\tilde{h}$, および $\tilde{\sigma}$ に無次元量であることを明記するためにチルダを付した.

4 格子ボルツマン法による直接数値解析

本研究では, 得られた解析モデル (36) と比較するために, 前節の仮定 (i)-(iv) を用いずに元の問題を直接的に数値解析した結果も合わせて示す. 数値解析法としては格子ボルツマン法 [7, 8] を用いる. 格子ボルツマン法は, Navier-Stokes 型の方程式を解くための手法として比較的近年になって発案されたものである. 緩和過程の処理が局所的であることから, 従来手法に比べて複雑な境界形状を含む問題への適用が簡単であることや, 並列化に適しているといった利点が集め, 現在もさかんに研究されている. また最近では, 本研究のモデル方程式に含まれる移流-拡散型の方程式や, Poisson 方程式への拡張も進んでいる [9]. 本研究では, 独自に開発した式 (1)~(7) を連成して格子ボルツマン法により解くアルゴリズム [10, 11] を用いて数値解析する.

5 結果

本研究では, 正弦波状の壁面を持つチャネル内の電気浸透流について考える (図 3). 具体的には, 壁面の形状が $h(x) = \bar{h} - W \cos(2\pi x/L)$ (W : 壁面形状の振幅) のように表されている. まずはじめに, 壁面の表面電荷密度が一定の場合を考える (図 3(a)). 図 4 に, 電解液の平均イオン濃度 C_0 が 0.008 および 0.032 mol/m³ の場合の流量を (a) には壁面形状の振幅 W , および (b) には幾何学パラメータである $\delta = \bar{h}/L$ に対してプロットした. 3 節の理論解析で得られた式 (36) を実線で, 直接数値解析の結果をシンボルで示してある. 理論解析の結果は $\delta = \bar{h}/L \rightarrow 0$ の極限での流量であるのに対して, 直接数値解析は有限の δ に対する結果である. 電解液を特徴付けるパラメータは以

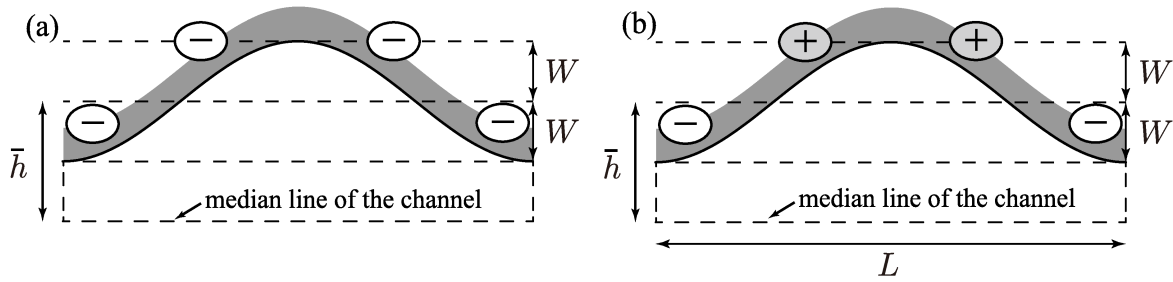


図3 Schematic diagram of the surface shape and the charge distribution.

下の通り: $\rho_0 = 1 \times 10^3 \text{ kg/m}^3$, $\nu = 0.889 \times 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$, $D_a = D_c = 1 \times 10^{-8} \text{ m}^2/\text{s}$, $-z_a = z_c = 1$, $\varepsilon = 6.95 \times 10^{-10} \text{ C}^2/\text{Jm}$. 温度は 273 K , 電場の強さを示すパラメータは $\Delta\phi/L = 1 \times 10^4 \text{ V/m}$, 表面電荷密度は $\sigma = -2 \times 10^{-5} \text{ C/m}^2$, 平均チャネル幅は $\bar{h} = 0.5 \mu\text{m}$ である. この設定の元では電気二重層の厚さの目安を与えるデバイ長はチャネル幅と比較的近い値を示す: $C_0 = 0.008$ のとき $\kappa\bar{h} = 4.86$, $C_0 = 0.032$ のとき $\kappa\bar{h} = 9.72$.

式 (36) の理論解析結果は $\delta \rightarrow 0$ の極限での流量を示している. すなわち, 壁面形状の変化の周波数が無限小である場合に対応する ($h(x) = \bar{h} - W \cos(2\pi\delta x/\bar{h})$ と書ける). 図 4 より有限の δ に対する結果が, δ の減少とともに実線で示した理論解へと適切に収束していることがわかる. また, 流量は振幅 W の増加とともに減少することがわかる. すなわち, 壁面の形状により電気浸透流は壁面が形状を持たない幅 $\bar{h}$ の直チャネルの場合 ($W = 0$) に比べて流量が小さい. これは, すでに報告のある壁面粗さが電気浸透流を抑制するという結果と整合する [4, 12, 13, 14]. 有限の δ は流量を減少する効果をもたらしており, 特に大きな振幅 W では δ の影響は大きい. 図 4(b) に $W/\bar{h} = 0.4$ に固定したときの流量の $\delta = \bar{h}/L$ に対する依存性を示した. 理論解析からのずれは非線形を示している; δ が小さい領域で急激に減少し, δ が大きくなるとともにゆるやかにゼロへと収束する. この結果は, 同様の物理的状況下で解析を行った文献 [4] の Fig. 3 とよく一致している.

次に, 壁面の表面電荷密度が分布持ち, チャネルに沿って平均すると有効電荷がゼロになる場合を考える:

$$\int_0^L \sigma(x) dx = 0. \quad (37)$$

x 方向に電場が印可されると正に帯電した部分と負に帯電した部分が互いに逆向きの力を受ける. したがって, チャネル壁が構造を持たず平面から成る場合には, 逆向きの駆動力

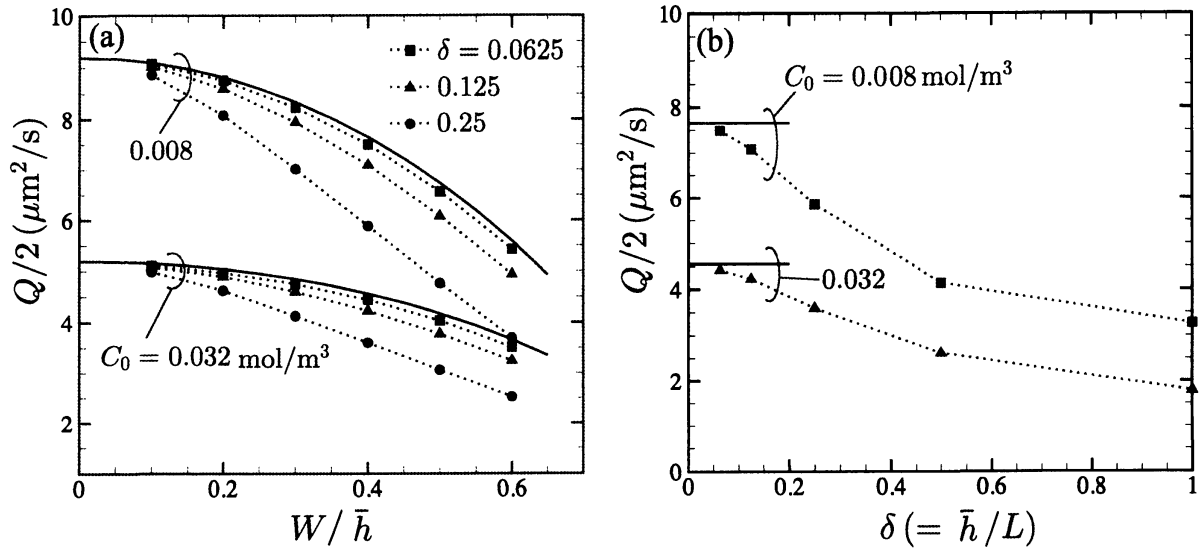


図4 Electro-osmotic flow rate in the channel with undulated walls (a) as functions of $W/\bar{h}$ and (b) as functions of δ at $W/\bar{h} = 0.4$. The surface charge density is constant ($\sigma = -2 \times 10^{-5} \text{ C/m}^2$). The solid lines indicate the analytical model in the limit of $\delta (= \bar{h}/L) \rightarrow 0$. The symbols indicate the results of the direct numerical analysis in the case of finite values of δ .

が打ち消し合い、 x 方向に正味の流れは誘起されない。一方、壁面が構造を持ちチャンネルの断面が x 方向に変化する場合には、力の均衡が破れて一方向の流れが誘起されることが予想される。この互いに逆向きの駆動力から壁面形状を利用して一方向流れを誘起するという発想は、希薄気体の Knudsen ポンプですでに適用されている [15, 16, 17, 18]. Knudsen ポンプとは、壁面の周期的な温度変化により誘起される熱遷移流を利用して、チャンネル壁の形状を工夫することにより一方向流れ、あるいは圧力差を生じさせる機構である。壁面形状を利用した電気浸透流は Ajdari によって提案されており電気二重層が薄い場合についての解析がなされている [19, 20]. ここでは、本研究での問題設定、すなわちチャンネル幅に比べて電気二重層が有限の厚みを持つ場合でも一方向流れを誘起することが可能かを調べる。ここでは、表面電荷密度 $\sigma(x)$ が次式のように分布している場合を考える：

$$\sigma(x) = \sigma_0 \cos\left(\frac{2\pi x}{L}\right), \quad (38)$$

ここで $\sigma_0 = -2 \times 10^{-5} \text{ C/m}^2$ と設定する。図 3(b) に示すとおり、負に帯電した領域は正に帯電した領域に比べてチャンネル幅が狭く、体積あたりの駆動力が大きくなるように設定されている。したがって、 x 方向に電場を印可すると負に帯電した壁面付近に形成される正に帯電した電気二重層が受ける力が大きく、 x 軸方向の正の向きに一方向流れが誘起

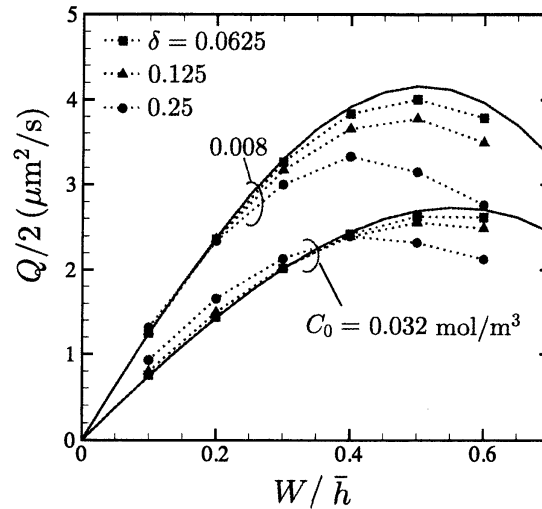


図5 Electro-osmotic flow rate in the channel with undulated walls as functions of the amplitude $W/\bar{h}$. The surface charge is distributed inhomogeneously along the channel. See the caption of Fig. 4.

されることが予想される。

図5に電気浸透流の流量を壁面形状の振幅 W に対してプロットしたものを示す。図4と同様に、理論解析で得られた式(36)を実線で、直接数値解析の結果をシンボルで示してある。壁面が平面の場合、すなわち $W = 0$ の場合には、逆向きの流れが打ち消しあうために確かに流量はゼロである。一方、 $W > 0$ では振幅の増加とともに流量が大きくなり、 $W/\bar{h} = 0.5-0.6$ 付近でピーク値をとる。これは確かに一方向流れが生じることを示している。同様の傾向は直接数値解析でも得られているが、ピークをとる W の値は少しシフトしている。電解液の平均濃度が $C_0 = 0.032$ の場合には、 W が小さい領域において、有限の δ の影響で $\delta \rightarrow 0$ の極限に比べて流量が大きくなっている。すなわち、壁面形状の変化が急な場合の方が流量が大きくなる。

以上の解析により、本研究で考える問題設定においてチャネル壁の表面電荷密度が平均的にゼロの場合でも一方向流れが誘起されることが確かめられた。本研究の次のステップとしては、マイクロ・ナノ加工技術を駆使して一方向流れを実験的確認や、多孔体のようにより複雑な流路形状を含む問題へ本解析手法を応用することを目指している。

6 まとめ

以下に本講究録をまとめる。

- 断面の形状および表面電荷密度が非一様に分布しているマイクロチャネル内の電気

浸透流について解析した。

- 形状および電荷密度がチャンネルに沿って緩やかに変化する場合について, Lubrication 近似法を適用して理論解析を行い, 流量を算出する解析モデルを導出した。
- 具体例として壁面が正弦波状に変化する場合をとりあげ, 理論解析により得られたモデルと直接数値解析の結果と比較して妥当性を確認した。また, 表面電荷密度が非一様に分布し正味の電荷がゼロになる場合でも, 壁面形状との組み合わせにより一方向の電気浸透流が起こりうることを確認した。

7 謝辞

本研究を進めるにあたり, 豊田中央研究所の金城友之博士, および鷲津仁志博士(元兵庫県立大教授)から多くの助言を頂きました。この場をお借りして深く感謝申し上げます。

参考文献

- [1] A. Siria, P. Poncharal, A.-L. Biance, R. Fulcrand, X. Blase, S. T. Purcell, and L. Bocquet, “Giant osmotic energy conversion measured in a single transmembrane boron nitride nanotube,” *Nature* **494**, 455 (2013).
- [2] R. Chein, H. Chen, and C. Liao, “Analysis of electro-kinetic pumping efficiency through finite-length nano-scale surface-charged capillaries,” *J. Electroanal. Chem.* **630**, 1 (2009).
- [3] F. H. J. van der Heyden, D. J. Bonthuis, D. Stein, C. Meyer, and C. Dekker, “Power generation by pressure-driven transport of ions in nanofluidic channels,” *Nano Lett.* **7**, 1022 (2007).
- [4] R. J. Messinger and T. M. Squires, “Suppression of electro-osmotic flow by surface roughness,” *Phys. Rev. Lett.* **105**, 144503 (2010).
- [5] J. Newman, *Electrochemical Systems*, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, NJ 2nd edition, 1991.
- [6] S. Ghosal, “Lubrication theory for electro-osmotic flow in a microfluidic channel of slowly varying cross-section and wall charge,” *J. Fluid Mech.* **459**, 103 (2002).
- [7] S. Chen and G. D. Doolen, “Lattice Boltzmann method for fluid flows,” *Annu. Rev. Fluid Mech.* **30**, 329 (1998).

- [8] S. Succi, *The lattice Boltzmann equation for fluid dynamics and beyond*, Oxford Univ. Press, New York, 2001.
- [9] H. Yoshida and M. Nagaoka, “Multiple-relaxation-time lattice Boltzmann model for the convection and anisotropic diffusion equation,” *J. Comput. Phys.* **229**, 7774 (2010).
- [10] H. Yoshida, T. Kinjo, and H. Washizu, “Coupled lattice Boltzmann method for simulating electrokinetic flows: a localized scheme for the Nernst–Planck model,” *Commun. Nonlinear Sci. Numer. Simulat.* **19**, 3570 (2014).
- [11] H. Yoshida, T. Kinjo, and H. Washizu, “Analysis of electro-osmotic flow in a microchannel with undulated surfaces,” *Computers & Fluids* **in press** (2015).
- [12] M. Wang, J. Wang, and S. Chen, “Roughness and cavitations effects on electro-osmotic flows in rough microchannels using the lattice Poisson-Boltzmann methods,” *J. Comput. Phys.* **226**, 836 (2007).
- [13] S. Bhattacharyya and A. K. Nayak, “Combined effect of surface roughness and heterogeneity of wall potential on electroosmosis in microfluidic/nanofuidic channels,” *J. Fluid. Eng.* **132**, 041103 (2010).
- [14] J. Liu, M. Wang, S. Chen, and M. O. Robbins, “Molecular simulations of electroosmotic flows in rough nanochannels,” *J. Comput. Phys.* **229**, 7834 (2010).
- [15] Y. Sone, Y. Waniguchi, and K. Aoki, “One-way flow of a rarefied gas induced in a channel with a periodic temperature distribution,” *Phys. Fluids* **8**, 2227 (1996).
- [16] K. Aoki, P. Degond, S. Takata, and H. Yoshida, “Diffusion models for Knudsen compressors,” *Phys. Fluids* **19**, 117103.p1 (2007).
- [17] K. Aoki, P. Degond, L. Mieussens, S. Takata, and H. Yoshida, “A diffusion model for rarefied flows in curved channels,” *Multiscale Model. Simul.* **6**, 1281 (2008).
- [18] K. Aoki, S. Takata, E. Tatsumi, and H. Yoshida, “Rarefied gas flows through a curved channel: Application of a diffusion-type equation,” *Phys. Fluids* **22**, 112001 (2010).
- [19] A. Ajdari, “Electro-osmosis on inhomogeneously charged surfaces,” *Phys. Rev. Lett.* **75**, 755 (1995).
- [20] A. Ajdari, “Generation of transverse fluid currents and forces by an electric field: Electro-osmosis on charge-modulated and undulated surfaces,” *Phys. Rev. E* **53**, 4996 (1996).