

クーロン系ソフトマターシミュレータによる電気浸透流の解析

(豊田中研・京大触媒電池) 吉田広顕, 金城友之, 鷲津仁志

【はじめに】

マイクロ・ナノスケールの固液界面における高効率のエネルギー輸送・変換のため、長距離クーロン力が活用される事例は多い。電気浸透流 (EO) ポンプは代表的な応用例の一つであり、表面に電荷を有するマイクロチャネルを電解質溶液で満たすと固液界面に電気二重層が生じ、電場の印可によりイオンを動かすと同時に溶媒を引きずり流動を生じさせるという機構である。昨年、谷口らにより提案された EO ポンプ⁽¹⁾は、ナノビーズ修飾したポリカーボネートのトラックエッチド (TE) 膜に交流電場を印加するというソフトマテリアルの特色を活かしたデバイスであり、複雑な MEMS 的仕事を必要とせず、直流高圧電場による水の電気分解を抑えられる、このような EO 現象の解析のためには、サブミクロン孔径のチャネルにおける電解質溶液の電場下における流動を扱わなければならない。また、カルボン酸基により負に帯電していると思われるポリカーボネート表面の状態予測や、界面すべりなどの分子レベルでの流動性の議論のためには、分子〜メソスケールにおけるシミュレーション手法の開発が必要である。本報告では、筆者らによるマルチスケールシミュレータによる EO ポンプの解析事例を紹介する。

【シミュレーション】

まず、イオン輸送、溶媒の流れ、外部電場を記述する方程式が互いに連成した連続体モデルを解析するための計算手法を作成した⁽²⁾。通常、イオン分布に Boltzmann 分布を仮定した簡略化したモデル方程式が用いられるが、非平衡過程や、バルク状態を定義できないマイクロあるいはナノチャネル系においてはこの仮定が適切でないケースがある。本研究では、イオン輸送過程を Nernst-Planck 方程式に基づいて直接数値解析し、マイクロチャネル内の電気浸透流を再現した (図 1)。

さらに、分子レベルにおいて電気二重層の生成およびイオンによる溶媒の引きずり効果を解析するため、Brown 粒子を Langevin 動力学により扱い、溶媒の流れを格子 Boltzmann 法により解析する手法を提案した⁽³⁾。さらに、イオン周囲の溶媒和を散逸粒子動力学で記述する手法⁽⁴⁾ など、各スケールにおける解析手法を提案している。

【参考文献】

- (1) 谷口学, 奥村泰志, 樋口博紀, 菊池裕嗣, ソフトマター研究会予稿集, 2012, P-27.
- (2) Yoshida, H.; Kinjo, T.; Washizu, H., in Proc. 3rd Euro. Conf. Microfluidics, 231 (2012).
- (3) Yoshida, H.; Kinjo, T.; Washizu, H., in Proc. 3rd Intl. Conf. Mol. Sim. (2013).
- (4) Kinjo, T.; Yoshida, H.; Washizu, H., J. Phys. Soc. Jpn. suppl. (in print).

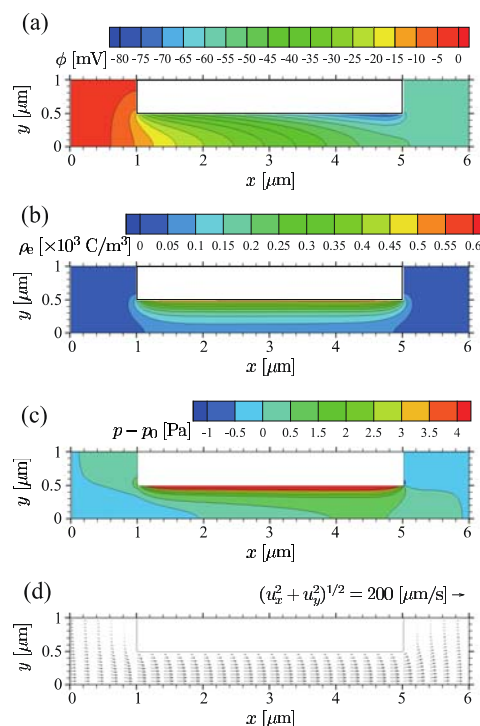


図 1 イオン流動シミュレータによる電気浸透流の解析例 (a) 静電ポテンシャル (b) 正味の電荷 (c) 圧力 (d) 流れ場. 壁面での表面電荷密度一定、左右に外部電位差を付与.