

# Hele-Shaw セルにおけるエレクトロウェッティングの 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

## Development of a two-dimensional approximation model of electrowetting in a Hele-Shaw cell based on a generalized Navier boundary condition

- 相坂享佑, 関大院, 大阪府吹田市山手町 3-3-35, k613537@kansai-u.ac.jp
- 山本恭史, 関西大, 大阪府吹田市山手町 3-3-35, yamayas@kansai-u.ac.jp
- Kyosuke Aisaka, Graduate School of Science and Engineering, Kansai University,  
3-3-35 Yamate-cho, Suita-shi, Osaka
- Yasufumi Yamamoto, Kansai University, 3-3-35 Yamate-cho, Suita-shi, Osaka

A simulation method to analyze droplet splitting by electrowetting on dielectric (EWOD) in a Hele-Shaw cell was studied. In order to reproduce the shape evolution, moving speed of droplet, and splitting time observed in the experiment by the two-dimensional numerical simulation, the droplet surface curvature reproduced in the three-dimensional numerical simulation was analyzed. Then, how to give the curvature and the dynamic contact angle in the two-dimensional calculation was investigated. We proposed a two-dimensional simulation method constructed by using a Hele-Shaw model and a generalized Navier boundary condition for representing moving contact line in a framework of the front-tracking method. In addition, the iteration computation to adjust the dynamic contact angle was considered. The simulation method employing the iteration computation achieved to approach splitting time to that by the three-dimensional simulation.

### 1. 緒言

DNA 解析や光学表示装置に用いられるマイクロ流体素子のために、表面張力の効果を利用する方法がよく用いられる。固体表面の濡れ性は、表面張力の固体面での作用方向を決定する。その濡れ性を電場により変化させるエレクトロウェッティングは、制御のしやすさと省消費電力の点で期待されている技術である。

Lu ら<sup>(1)</sup>は Hele-Shaw セルにおけるエレクトロウェッティングによる液滴の移動・分裂の実験と 2 次元シミュレーションを行った。2 次元計算に用いる Hele-Shaw 近似では、速度場が圧力勾配のみによって決まるため、濡れの影響を圧力境界条件の形で表現する必要があり。Lu ら<sup>(1)</sup>は 1 つのパラメータで濡れの影響をモデル化して 2 次元計算を行った。しかし、時間応答が実験結果と合わず、パラメータを調整しても分裂が早すぎるか分裂しない結果しか得られていない。

Yamamoto ら<sup>(2)(3)</sup>は Lu らの実験結果を再現するため、3 次元 Front-tracking 法によるシミュレーションを行った。移動や分裂に関して実験結果の液滴形状、移動速度や角度変化の時間スケールを精度よく再現出来ている。しかし、3 次元シミュレーションでは非常に計算コストがかかる。

また、Guan ら<sup>(4)</sup>は CLSVOF を用いた 2 次元シミュレーションを行い、Waker ら<sup>(5)</sup>の実験結果を精度よく再現することができている。ただし、断面形状は固定されており、動的接触角は考慮されていない。

本研究では、Hele-Shaw 近似を用いて、さらに動的接触角を考慮した Front-tracking 法による 2 次元近似モデルを開発する。3 次元シミュレーションデータから、2 次元では得ることができない界面の形状を詳細に分析することで、曲率や動的接触角の値を一般化ナビエ境界条件 (GNBC) に基づいて表現する方法を検討する。

### 2. 3 次元計算手法

#### 2 - 1. Front-tracking 法

気体・液体の複数の流体を含む系を、密度・粘度が場所によって異なる 1 つの流体とみなしてフロントマーカー情報を用いて矩

形格子上で解く方法である。界面はマーカーで構成された微小な三角形で表され、マーカーを追跡することにより、界面の移動が表現される。そのため、計算格子に依存せず界面位置を陽的に知ることができる。Fig.1 に示すように、どの格子点がどちらの流体であるかを表す指標関数  $I$  を用いて密度  $\rho$ 、粘度  $\mu$  を式(1)(2)で計算する。

$$\rho = (1 - I)\rho_0 + I\rho_1 \quad (1)$$

$$\mu = (1 - I)\mu_0 + \mu\rho_1 \quad (2)$$

#### 2 - 2. 一般化ナビエ境界条件 (GNBC)

移動接触線を表現するため、GNBC-Front-tracking<sup>(2)</sup>の手法を用いる。ヤング式の不釣り合いの力に比例する滑り速度  $\mathbf{u}_{slip}$  を、近似デルタ関数を用いて接触線近傍の格子点で表現する。

$$\mathbf{u}_{slip} = \chi \frac{\sigma}{\mu_1} \sum_{cl} (\cos \theta_s - \cos \theta_d) \mathbf{t}_{lw} D_{2D}^* (\mathbf{x} - \mathbf{x}_{cl}) \quad (3)$$

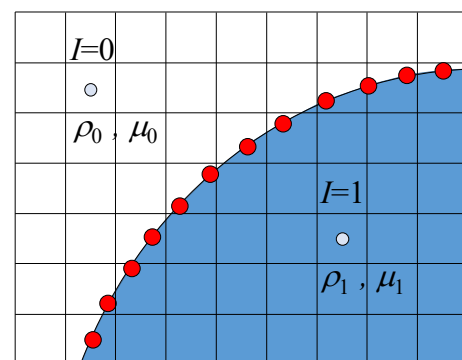


Fig. 1 Front-tracking method.

ここで、 $\sigma$ は表面張力、 $\mu$ は液の粘度、 $\theta_s$ 、 $\theta_d$ はそれぞれ静的および動的接触角、 $\mathbf{x}$ 、 $\mathbf{x}_{cd}$ はそれぞれ格子点と接触線位置、 $\mathbf{t}_w$ は接触線に垂直で壁に平行な単位ベクトルである。 $\gamma$ は無次元滑りパラメータで濡れの動特性を表す。 $D_{2D}^*$ は壁に平行な2方向のみ考慮した無次元の近似デルタ関数である。

### 2 - 3. 静的接触角の電圧依存表現

エレクトロウエットングの効果を表現するため、式(3)で 사용되는静的接触角 $\theta_s$ を Young-Lippmann の式(4)を用いて電圧依存とする。

$$\cos \theta_{sv} = \cos \theta_s + \frac{c}{2\sigma} V^2 \quad (4)$$

ここで、 $\theta_{sv}$ は電圧印加時の下壁面における静的接触角、 $c$ は面積当たりの静電容量、 $V$ は正電極のみにかかる電圧である。

### 3. 計算対象

Fig.2 に示す Lu らが実験を行っている系を対象とする。上側壁面に絶縁性の低い撥水性膜で覆われた負電極を配置することで、液は常に接地された状態とみなせる。下側壁面には、撥水膜と絶縁層で合成容量  $c=3.6 \times 10^{-5} \text{F/m}^2$  の膜があり、その下に一辺 1cm 角の正方形の負電極を、その両端に同じ寸法の正電極を配置する。印加電圧は  $V=50.4\text{V}$  である。流路幅は  $b=530\mu\text{m}$ 、液はグリセリン水溶液 ( $\mu=0.020\text{Pa}\cdot\text{s}$ 、 $\sigma=0.067\text{N/m}$ ) で、半径  $R=6\text{mm}$  である。静的接触角は前進、後退でそれぞれ  $\theta_{A}=108.6^\circ$ 、 $\theta_{R}=98.4^\circ$  である。

### 4. 2次元モデル

2次元モデルには、2次元の Front-tracking 法を用いる。マーカーから接線ベクトル  $\mathbf{t}$ 、2次元の法線ベクトル  $\mathbf{n}_{2D}$  を計算する。ナビエ・ストークス方程式に対して Hele-Shaw 近似を行うと、壁垂直方向に平均した2次元速度場  $\mathbf{U}$  は式(5)となる。

$$\mathbf{U} = -\frac{b^2}{12\mu} (\nabla p - \mathbf{F}) \quad (5)$$

また、連続条件より圧力  $p$  は式(6)を満たす。

$$\nabla^2 p = \nabla \cdot \mathbf{F} \quad (6)$$

ここで、 $\mathbf{F}$  は表面張力による力である。式(6)を解くため圧力境界条件として  $\mathbf{F}$  をラプラス則より式(7)で与える。

$$\mathbf{F} = \sigma \kappa \delta \mathbf{n}_{2D} \quad (7)$$

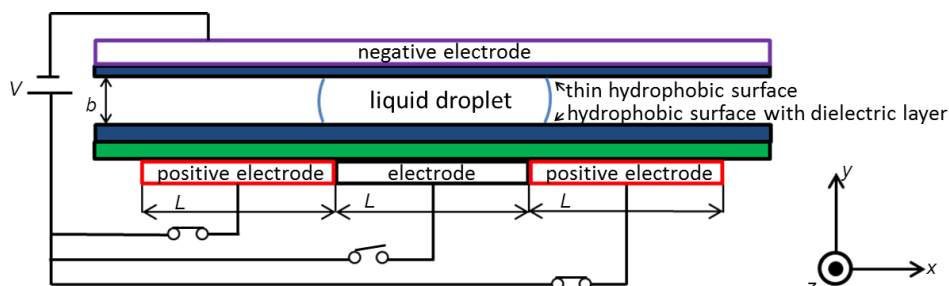


Fig.2 Schematic of electrowetting in a Hele-Shaw model.

ここで、 $\delta$ はデルタ関数、 $\kappa$ は曲率である。圧力  $p$  が求まると、速度場  $\mathbf{U}$  が決まる。よって、 $\mathbf{F}$  に含まれる曲率  $\kappa$  を与えることができれば2次元計算が可能と考えられる。ここで、曲率  $\kappa$  は  $xz$  面の曲率  $\kappa_{xz}$  と  $yn$  面の曲率  $\kappa_{yn}$  ( $n$ : 界面の法線方向) の2方向の和である。 $\kappa_{xz}$  は、 $\mathbf{t}$  の線に沿う微分を Front-tracking 法の手続きで求める。しかし、2次元計算では  $\kappa_{yn}$  を求めることができない。そこで、3次元データの界面形状を詳細に分析し、与え方を検討した。まずは、電極上と電極外の場合にわけて以下のように条件を仮定した。

電極上では、濡れ性が向上して接触角が小さくなる方向に移動する。下側接触線に引っ張られるため、観察した条件では、ほぼ直線的な断面形状であったので、 $\kappa_{yn}^{on}$  を 0 とする。また、上下の壁面の滑り速度が同じであると仮定し、界面の断面形状が直線であることを考えると、GNBC より電極上の下壁面および上壁面の動的接触角が  $\theta_{d}^{onb} = 70^\circ$ 、 $\theta_{d}^{ont} = 110^\circ$  と決まる。

電極外では、上下の移動に差はほとんどなく円弧形状を保ったままひっぱられるため、Fig.3 に示す平行線と交わる円弧の幾何学から  $\kappa_{yn}^{out}$  を式(8)で与える。

$$\kappa_{yn}^{out} = -\frac{2 \cos \theta_d^{out}}{b} \quad (8)$$

このとき、電極外の動的接触角  $\theta_d^{out}$  を与える必要がある。電極上、電極外それぞれ速度が一樣であると仮定して、電極上で前進した液滴の体積と電極外で後退した液滴の体積についての保存を表す式(9)を考える。

$$\mathbf{u}_{slip}^{on} \cdot \mathbf{n}_{2D} l_{on} b = \mathbf{u}_{slip}^{out} \cdot \mathbf{n}_{2D} l_{out} b \quad (9)$$

ここで、 $\mathbf{u}_{slip}^{on}$ 、 $\mathbf{u}_{slip}^{out}$  はそれぞれ電極上および電極外での滑り速度、 $l_{on}$ 、 $l_{out}$  はそれぞれ電極上および電極外に乗っている接触線の長さである。式(9)に GNBC を用いて電極外の動的接触角  $\theta_d^{out}$  は式(10)で与える。

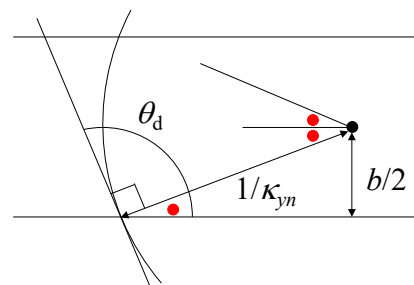


Fig.3 curvature in the y-n plane.

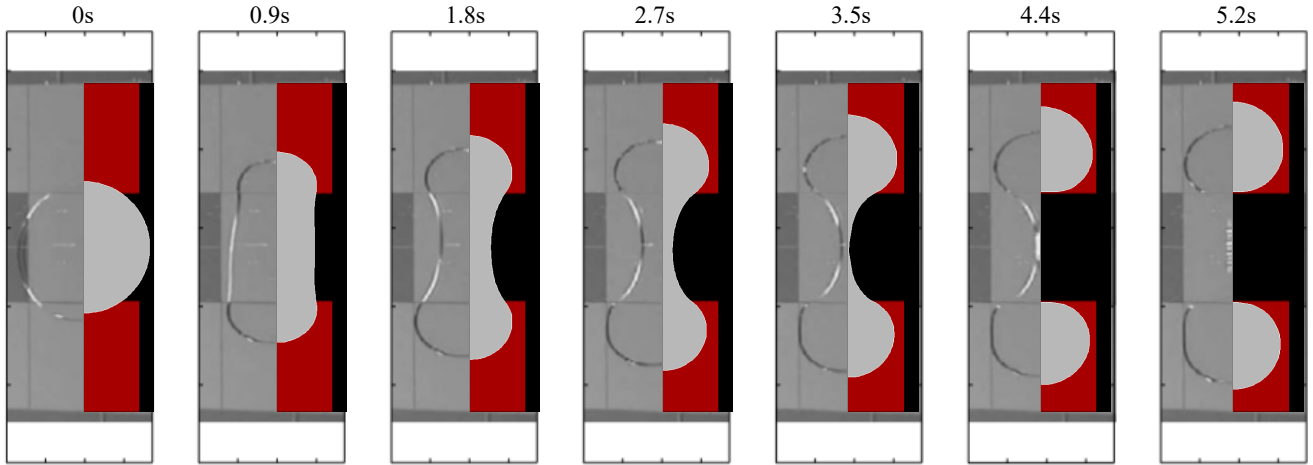


Fig. 4 Temporal change of droplet contours of splitting two-dimensional simulation (A) (right half of each panel gray: droplet ,red: positive electrode) with experimental observation (left half panel) by Lu et al.<sup>(1)</sup>

$$\theta_d^{\text{out}} = \cos^{-1} \left\{ \cos \theta_{sR} - (\cos \theta_{sV} - \cos \theta_d^{\text{on},b}) \frac{l_{\text{on}}}{l_{\text{out}}} \right\} \quad (10)$$

$$\mathbf{u}_{\text{slip}}(\mathbf{x}_s) = \sum_{\mathbf{x}} \mathbf{U}(\mathbf{x}) D_{2D}^*(\mathbf{x} - \mathbf{x}_s) \quad (11)$$

このように与えた条件を用いて 2 次元計算を行う。この計算方法を(A)とする。

要素中心位置における流体速度より GNBC を用いて式(12)から動的接触角 $\theta_d$ を求める。

$$\theta_d = \cos^{-1} \left( \cos \theta_s - \frac{\mu_1}{\chi \sigma} \mathbf{u}_{\text{slip}} \cdot \mathbf{n}_{2D} \right) \quad (12)$$

### 5. 2次元計算モデルの評価と改良

Fig.4 に 2 次元シミュレーション(A)の結果を実験結果に重ねて示す。実験結果と比較すると、分裂時間が短くなっている。Fig.5 に電極外の動的接触角 $\theta_d^{\text{out}}$ の時間変化を示す。4 節で仮定して式(10)で与えた接触角が 3 次元のシミュレーションデータと比較して大きかったと考えられる。そこで、動的接触角 $\theta_d$ の値を調整する反復計算を含む計算を行う。

これを全要素にわたって積分して平均した値 $\theta_d$ が仮定して与えた値 $\theta_d'$ と一致しているかを確認し、一致していなかったらこの値を

Fig.6 に反復計算のフローチャートを示す。式(10)で求めた接触角を仮の角度 $\theta_d'$ として、(A)と同様に Hele-Shaw 近似を用いて速度場 $\mathbf{U}$ の計算を行う。計算方法(B)では、電極外において界面各要素位置での流体速度を格子状の速度から式(11)のように補間する。

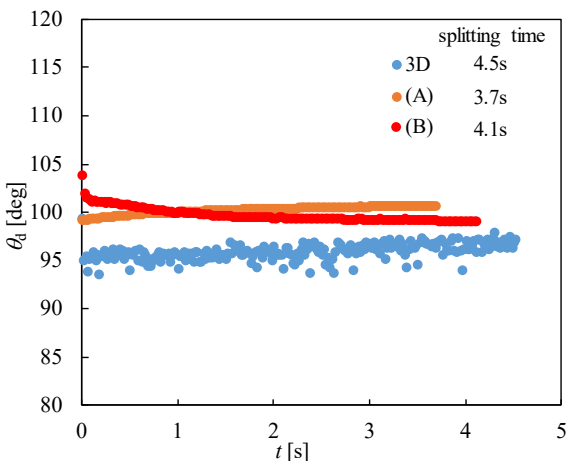
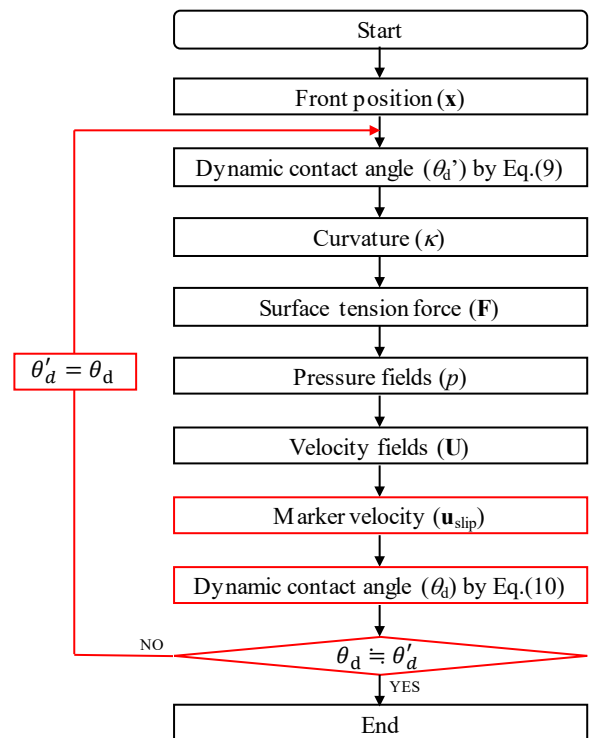


Fig. 5 Temporal change of contact angle except on the positive electrode before the start of droplet splitting.

Fig. 6 Flow chart of the iterative computation.

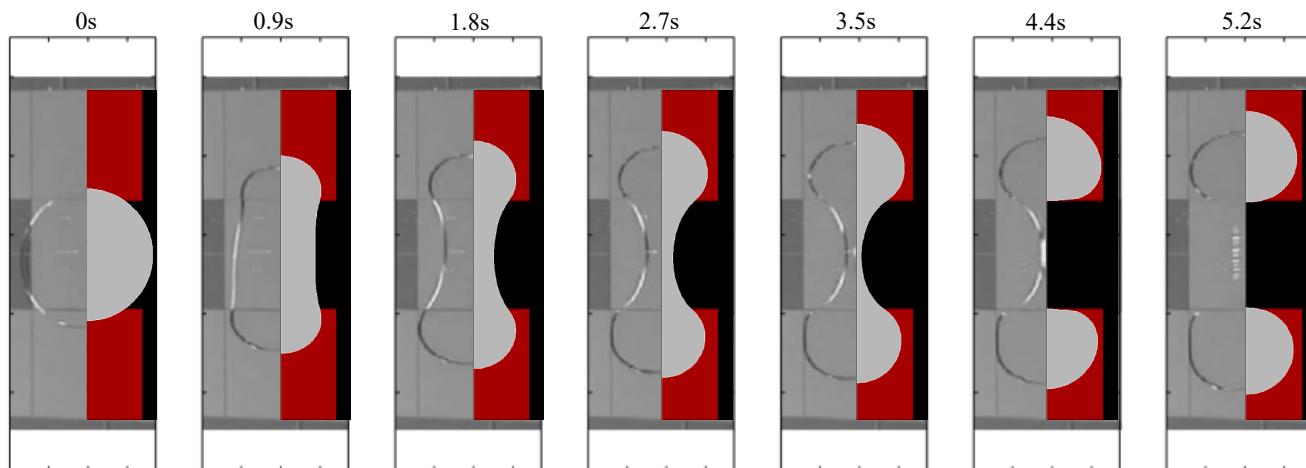
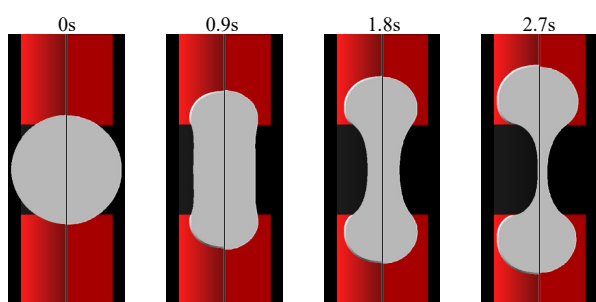
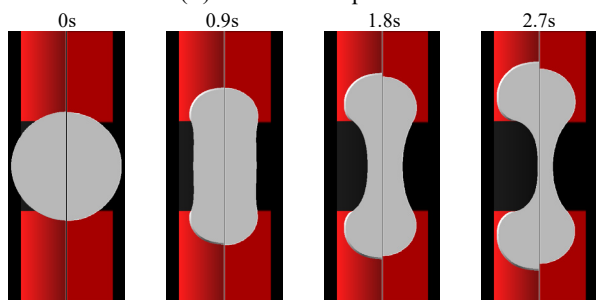


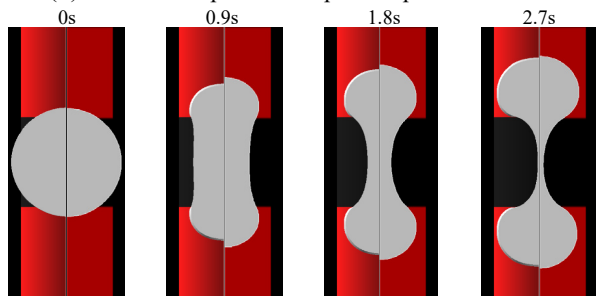
Fig. 7 Temporal change of droplet contours of splitting two-dimensional simulation (B) with experimental observation (see caption of Fig.3)



(A) no iterative computation.



(B) iterative computation except on the positive electrode.



(C) iterative computation on the whole of the electrodes.

Fig.8 Temporal change of droplet contours of splitting two-dimensional simulation (right half) with three-dimensional simulation (left half panel) ( $\chi=0.02$ ).

仮の角度  $\theta_d'$  としてもう一度計算を行う。この接触角が一致するまで反復計算を行う。Fig.7 に反復計算を含んだ(B)の計算結果を実験結果に重ねて示す。反復計算を含まない場合(A)と比べると時間応答が少し遅くなり実験結果に近づいたが、まだ分裂時間が一致していない。

そこで電極上で仮定した条件についても変更する。わずかな曲率でも時間応答に影響を与えるので、界面の断面形状を直線から円弧と変更し電極外と同様に  $\kappa_m^{on}$  を式(13)で与えることにする。

$$\kappa_{yn}^{on} = -\frac{\cos \theta_d^{on,b} + \cos \theta_d^{out,t}}{b} \quad (13)$$

上下の動的接触角  $\theta_d^{ont}$ ,  $\theta_d^{onb}$  については 4 節で決めた値を仮の角度として電極外と同様に反復計算を行う。この計算方法を(C)とする。しかし、Hele-Shaw で求まる電極上の速度が大きすぎるため GNBC を満たす角度が決まらなかった。今回は実験との一致は先の課題として、まず 3 次元シミュレーションと一致するモデルを検討するため、電極上で式(12)が計算可能な  $\chi$  の範囲を考え、0.009 から 0.02 に変更してみた。Fig.8 に(A) (B) (C)の 3 パターンでのシミュレーション結果を示す。Fig.9 に各計算方法の電極外の動的接触角の時間変化を示しており、(B)と(C)では同じような動的接触角となっているが、時間応答が大きく異なっている。最も分裂の速い(C)では、Fig.10 に示すように電極上の  $\kappa_m$  が常に負の値をとっている。これによって、進行方向先端のラプラス圧が下がることで、電極上に速く引き寄せられることとなる。今回の条件では、この(C)が 3 次元計算に最も近かった。

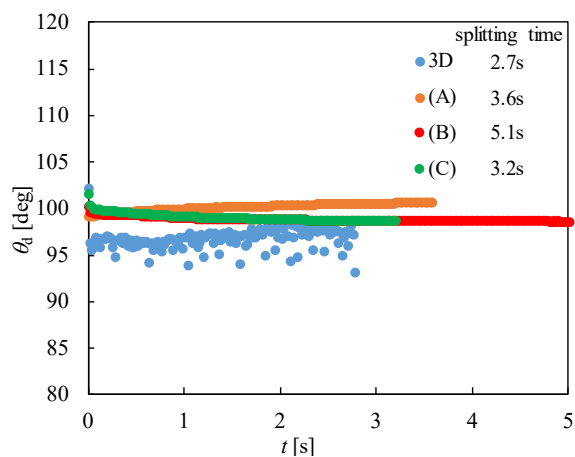


Fig. 9 Temporal change of contact angle except on the positive electrode before the start of droplet splitting( $\chi=0.02$ ).

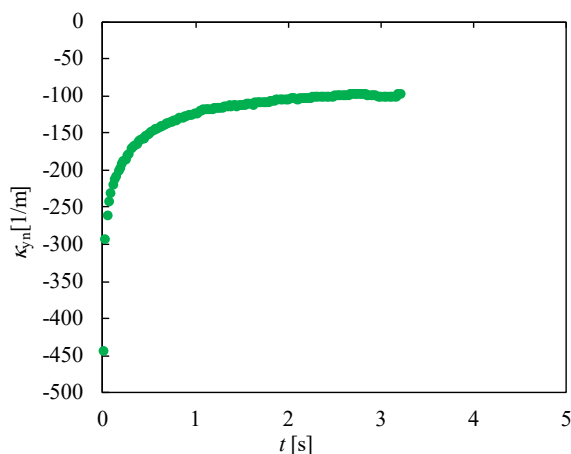


Fig. 10 Temporal change of curvature in the  $y$ - $n$  plane on the positive electrode before the start of droplet splitting by model (C).

## 6. 結論

Hele-Shaw モデルにおいて 2 次元計算を行うために、3 次元データを詳細に分析して、曲率や動的接触角の与え方の検討を行った。また、2 次元シミュレーションを行い、2 次元モデルの評価と改良を行った。

計算方法(A)では、分裂時間が実験結果と一致しなかったので、反復計算を含む計算方法(B)と(C)の計算も行った。全領域で Hele-Shaw 式と GNBC の両方を満たすように反復する(C)では、分裂時間が 3 次元のシミュレーション結果に近づいたが一致はしなかった。今後は分裂時間だけでなく界面の形状に着目するなどして 2 次元モデルの評価を行っていく必要がある。

## 謝辞

本研究は JSPS 科研費 19K04178 の助成を受けた。

## 参考文献

- (1) Lu, H.-W., Glasner, K., Bertozzi, A. and Kim, C.-J., "A diffuse-interface model for electrowetting drops in a Hele-Shaw cell," *J. Fluid Mech.*, 590 (2007), pp. 411-435.
- (2) Yamamoto, Y., Ito, T., Wakimoto, T. and Katoh, K., "Numerical and theoretical analyses of the dynamics of droplets driven by electrowetting on dielectric in a Hele-Shaw cell," *J. Fluid Mech.*, 839 (2018), pp. 468-488.
- (3) 山本, 加藤, 大友, 脇本, 伊藤, "エレクトロウエッティングによる Hele-Shaw セル内液滴運動の数値解析," 混相流シンポジウム 2017 講演論文集, (2017).
- (4) Guan, Yin., Li, Baiyun., and Xing, Lu., "Numerical investigation of electrowetting-based droplet splitting in closed digital microfluidic system: Dynamics, mode, and satellite droplet," *Physics of Fluids.*, 30 (2018).
- (5) Waker, S.W., Shapiro, B., and Nochetto, R. H., "Electrowetting with contact line pinning: Computational modeling and comparisons with experiments," *Phys. Fluids* 21 (2009)