濡れ性が不均一な固体表面上のマイクロデバイス二相流体問題への 拡散界面追跡計算法の適用

Application of a Diffuse-interface Tracking Numerical Method
to Two-phase Fluid Motions on Heterogeneously-wetted Solid Surfaces in Micro Devices

高田 尚樹・産総研

松本 純一・産総研

松本 壮平・産総研

Naoki TAKADA, AIST

Junichi MATSUMOTO, AIST

Sohei MATSUMOTO, AIST

Key Words: Computational Fluid Dynamics, Phase-field Model, Contact Angle, Micro fabrication, Slug Flow, Chip-to-Wafer Bonding

1. 緒言

加速度検出や信号送受信を小型かつ低消費電力で行うマイクロ電気機械システム (MEMS) デバイスは自動車や携帯情報端末等様々な製品に組み込まれている。現在, MEMS デバイスの一層の普及と新規高付加価値製品の創出を目指し, 高集積・高機能・大面積薄型 MEMS の実現のために微小な気液または液液二相流体現象を利用する様々な高効率製造プロセスの開発が進められている^{(1),(2)}。プロセス設計には流体挙動への固体表面濡れ性効果の予測と制御が重要である。本報では, 化学・光学等各種マイクロデバイスや材料・デバイス製造プロセスに共通する固体表面上の微小二相流体挙動を予測するための拡散界面モデル (DIM)⁽³⁾に基づく数値流体力学シミュレーション法の概要と解析例を述べる。

2. 拡散界面モデル (DIM) 二相流シミュレーション法

DIM は, 異なる相と相が接触する境界である界面を「物性が連続かつ急激に変化する有限幅の体積領域」とモデル化する⁽³⁾。各相と相間に横たわる界面の領域は各々, 各時刻 t に座標 $\mathbf{x}$ の空間内で連続的に分布する指標関数 $\phi(\mathbf{x}, t)$ (または秩序変数) の異なる値で識別される (例えば, $\phi=1$ で液相, $\phi=-1$ で気相, $-1<\phi<1$ で界面を定義)。

本研究では非平衡系の自由エネルギー理論に基づく DIM (Phase-field model)⁽³⁾を採用し, 二相の自由エネルギーを定義する汎関数 Ψ の値が最小になるよう, 以下の化学ポテンシャル η の勾配に起因する物質移動が生じることで臨界点以下の条件で各相と $\kappa^{0.5}$ に比例する厚さの界面が形成される⁽³⁾。

$$\eta \equiv \frac{\delta \Psi}{\delta \phi} = \frac{\partial \psi}{\partial \phi} - \kappa_{\phi} \nabla^2 \phi \quad (1)$$

ψ は ϕ の二重戸型関数, 第 2 項は界面領域での自由エネルギー増加を表す⁽³⁾。流体相および界面の空間分布 ϕ は, 次の時間発展方程式を解いて得られる^{(4),(5),(6)}。

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\phi \mathbf{u}) = \nabla \cdot \left[\Gamma(\phi) (L_r u_r)^{-1} \nabla \eta \right] = \nabla \cdot (Pe_{\phi}^{-1} \nabla \phi) \quad (2)$$

時刻 t , 流速 $\mathbf{u}$ 等は代表長 L_r と速度 u_r で無次元化されている。 Pe_{ϕ} は Peclet 数である。易動度 $\Gamma(\phi)>0$ を含む右辺は, 平衡時には消え, 非平衡時に任意の正負の範囲の拡散係数を瞬時局所に持つことにより一定厚さの界面を構築する^{(4),(5),(6)}。

固体表面に接する流体界面 (接触線) を伴うマイクロスケールの気液・液液二相の挙動には, 固体表面への各流体相の親和性 (濡れ性) が強く影響する。本研究の DIM では, 固体表面法線方向 $\mathbf{n}$ の ϕ の勾配を規定する局所平衡仮定の境界条件式(3)で濡れ性を考慮する。流体界面と固体面が成す接触角 θ_w は単一のパラメータ γ_s により変化する ($\gamma_s=0$ で $\theta_w=90^\circ$)。

固体表面では No-flux 条件(4)も式(2)に課される⁽⁶⁾。

$$\mathbf{n} \cdot \nabla \phi = -\gamma_s \kappa_{\phi}^{-1}, \quad \mathbf{n} \cdot \nabla \eta = 0 \quad (3), (4)$$

上記 DIM 法は, 濡れ性が不均一な場合も簡潔な条件(3)で接触角を瞬時局所で設定し, 複雑な幾何学演算無しに厚さ一定の界面を自律的に構築できる。この利点は, 界面の形状と移動が複雑で表面張力や毛細管力の影響が顕著な, MEMS 製造に関する微小二相流体挙動シミュレーションを容易にする。

3. DIM 二相流シミュレーション法の評価・適用

本節では, MEMS デバイス製造プロセスに関連する非圧縮性粘性二相流への DIM シミュレーション法の適用例を示す。

3-1 DIM 法の毛細管現象への適用性 高さ $h=1\text{mm}$ 及び幅 w の矩形管内の無重力下の空気-水系二相を想定した。3次元座標系 (x, y, z) の計算領域は立方セルで一様分割し, 各 x, y 方向境界の平坦な固体壁に静的接触角 $\theta_w=61^\circ$ または 56° の親水性条件を適用した⁽⁶⁾。 z 方向管両端は各々域境界から 1024 セル離れた所で大気圧に開放されたとした。

Fig. 1 Snapshots of the liquid permeating the rectilinear channel with cross-section aspect ratio $\varepsilon=h/w=2$.

Fig. 2 Time history of the interface moving velocity V^* for $\varepsilon=2$.

アスペクト比 $\varepsilon=h/w=2$ に対する各無次元時刻 t^* の液相空間分布の結果を図1に示す。界面は平均密度の等値面で表されている。新水性が強い(θ_w が小さい)条件で液相はより速く浸透することが定性的に良く再現されている。図2でも、気相を無視した1次元理論解と同様に θ_w の減少に対する気液界面の無次元移動速度 V^* の増加が示されている。他の物性・流路条件でもDIM法の結果は理論解⁽⁷⁾と良好に一致することを確認している。

3-2 マイクロ中空繊維基材内気液スラグ流 大面積フレキシブル表示パネル光学素子等に適用する次世代型MEMSデバイス製造プロセス⁽¹⁾に関する二相流シミュレーション^{(8),(9)}を述べる。プロセス概要と実験装置を図3に示す。紫外線硬化性樹脂が水平流路を左から右へ、機能性流体材料が垂直流路を上から下へT型ミキサー部に流入し、交互に分裂することで単分散スラグ流体が中空繊維基材内部に連続形成される。基材内部に二相が充填された後、紫外線を照射して樹脂を硬化させると機能性流体材料が封入されたマイクロセルの構造が完成する⁽¹⁾。

Fig. 3 Multiphase fluid flow pattern in a micro hollow fiber substrate for MEMS device fabrication⁽¹⁾.

Fig. 4 The single slug bubble moving in the channel at $\theta_w=45^\circ$.

Fig. 5 The cross-sectional-averaged density and pressure increase distributions.

上述の中空機材内微小セル構造作成プロセスに関する二相流シミュレーションを述べる。まず、DIM法を評価するための試験的解析⁽⁸⁾で、 $20 \times 20 \times 280$ 個の立方セルで

一様分割された $\varepsilon=h/w=1$ の3次元(x, y, z)領域の二相を、 $h=750\mu\text{m}$ で $\theta_w=45^\circ$ または 60° の流路内を断面平均速度 $U_m=5 \times 10^{-3}\text{m/s}$ で流れる常温大気圧の空気-水と想定した($Re=2.87$, $Ca=\mu_L U_m / \sigma = 8.80 \times 10^{-5}$, $Oh=\mu_L / (\rho_L \sigma h)^{0.5} = 5.54 \times 10^{-3}$, μ_L は液相の粘性係数, σ は表面張力)。初期に一樣流入境界近傍に置かれた単一気泡は体積と形状を保ちつつ液相と等速移動する適切な結果(図4, 5)が得られた。また、 θ_w が大きく曲率半径が大きくなるとラプラス則に従って気泡内圧力が減少する妥当な結果が確認される。

Fig. 6 The CFD simulation result of a mono-dispersed gas-liquid flow in a circular micro channel⁽⁹⁾.

次に、実在対象の空気-水系条件で実施した有限要素法^{(5),(9)}によるCFDシミュレーションにより得られた計算結果を図6に示す。 θ_w はミキサー内で 30° 、中空機材内で 10° とした。実験⁽¹⁾と同様に、スラグ流体の連続的な生成が確認される⁽⁹⁾。瞬時局所の流速と圧力の3次元分布の本解析結果は、実験データとともに製造プロセスの評価・設計に必要な情報として活用している。

3-3 デバイス Chip-Wafer 接合のための液膜挙動 大きさと機能が異なる複数のMEMS・IC ChipのSi Waferへの積層・統合でChip・Wafer両面の濡れ性を利用する配置自律制御型C2W接合技術⁽²⁾に関する定性評価シミュレーションを述べる。本接合技術(図7)では、Waferの親水部分(図中水色)に滴下した水滴(数 μL)と固体面の間での毛細管力により複数種類のWaferから切り出したMEMSやIC chipを所定位置へ自律的に配置出来る。

Fig. 7 The self-alignment MEMS-IC Integration technique⁽²⁾.

Fig. 8 The computational domain for CFD simulation of a contact-line motion over many parallel Au wire electrodes.

図 8 は接触角 $\theta_{w,3}=90^\circ$ の配線電極が平行に複数配置された Chip-Wafer 間隙の一部を模した計算領域を表す。上部壁面が Chip 表面に該当する。二相は密度比 $\rho_L/\rho_G=828.4$, 粘性比 $\mu_L/\mu_G=5.502$ を持つ。2 条件下で得られた同時刻の界面位置 (図 9) および Wafer 上の接触線移動速度 V^* (図 10) の計算結果の比較から、電極配線間隔 l_y が広がると接触線はより速く移動する (Chip-Wafer 間で液体がより均一に広がる) ことが確認される。今後、プロセス設計指針を提示するため当該シミュレーションを継続し、Chip-Wafer 配置精度に対して汚れや電極・凹凸パターニングのため接触角が不均一な Chip・Wafer 両表面が与える影響を評価予定である。

Fig. 9 Snapshots of the gas-liquid interface and fluid velocity distribution in gap space of $20\Delta z$ between parallel solid walls at the same point of time.

Fig. 10 The contact-line moving velocity in each of two cases of the ratio of Au-wire gap spacing to the wire width.

4. 結 言

本報では、MEMS デバイス製造プロセスにおける固体表面濡れ性効果が顕著なマイクロ二相流動問題^{(1),(2)}のための、拡散界面モデル (DIM)⁽³⁾に基づく数値流体力学シミュレーション法^{(4),(5),(6)}の概要と事例を示した。なお、上述以外に、複合材料製造プロセスに関して、炭素繊維強化プラスチック (CFRP) 部材成形の微視的解明⁽¹⁰⁾のため、固体表面濡れ性境界条件を導入する DIM 計算法と構造格子上で任意形状の物体境界を設定出来る Immersed Boundary Method (IBM) との連成による円・楕円断面単繊維周り樹脂流れ及び繊維束内への樹脂含浸流れの解析も行われている⁽¹¹⁾。

近年、DIM 二相流シミュレーションで使用する界面指標関数 ϕ の時間発展方程式として、Cahn-Hilliard (CH) 型式⁽²⁾以外に、界面曲率依存拡散流束を排除した Allen-Cahn (AC) 型の式が提案されている⁽¹²⁾。修正 AC 式は、定式化が若干異なるものの、保存性の高い Level-set 法^{(13),(14)}の式と同等であり⁽¹²⁾、その拡散項が ϕ に関する空間 2 階偏微分で与えられるため界面形成を CH 式よりも効率的に計算できると考えられる。本研究でも修正 AC 式の適用を検討中である。

謝 辞

上記研究の前半は、独立行政法人新エネルギー・産業技術総合開発機構 (NEDO) の「異分野融合型次世代デバイス製造技術開発プロジェクト (BEANS Project)」で得られたものである。また、後半部は、総合科学技術会議が制度設計した最先端研究開発支援プログラム (FIRST) により、採択課題「マイクロシステム融合研究開発」(江刺プロジェクト) への日本学術振興会 (JSPS) を通じた助成の下で実施された。

文 献

- (1) Matsumoto, S., Takada, N. and Matsumoto, J., Transactions of the Japan Society of Mechanical Engineers, C, Vol. 76 (2010), pp. 1911–1913 (<http://ci.nii.ac.jp/naid/110007685434>).
- (2) Lu, J., Takagi, H. and Maeda, R., Proc. IEEE Sensors 2011 conference (2011), pp. 1121–1124.
- (3) Anderson, D. M., McFadden, G. B. and Wheeler, A. A., Annu. Rev. Fluid Mech., Vol. 30 (1998), pp. 139–165 (DOI: 10.1146/annurev.fluid.30.1.139).
- (4) Takada, N. and Tomiyama, A., JSME Int. J. Ser. B - Fluids Therm. Eng., Vol. 49 (2006), pp. 636–644 (DOI: 10.1299/jsmeb.49.636).
- (5) Matsumoto, J. and Takada, N., Int. J. Comput. Fluid Dyn., Vol. 22 (2008), pp. 555–568 (DOI:10.1080/1061856080238226).
- (6) Takada, N., Matsumoto, J., Matsumoto, S. and Ichikawa, N., Journal of Computational Science and Technology, Vol. 2 (2008), pp. 318–329 (DOI:10.1299/jcst.2.318).
- (7) Ichikawa, N., Hosokawa, K. and Maeda, R., J. Colloid Interface Sci., Vol. 280 (2004), pp.155–164 (DOI: 10.1016/j.jcis.2004.07.017).
- (8) Takada, N., Matsumoto, J. and Matsumoto, S., Proc. JSME Kanto Branch 15th Annual Meeting (2009), pp.101–102.
- (9) Matsumoto, J., Takada, N. and Matsumoto, S., Proceedings of NCTAM, Vol. 60 (2011), Paper No. 251.
- (10) Inoue, Y., Matsumoto, M., Hojo, M., Takada, N., Adachi, T. and Ishida, K., J. of the Japan Society for Composite Materials, Vol. 36 (2010), pp. 94–103 (DOI:10.6089/jscm.36.94).
- (11) Ishida, K., Inoue, Y., Hojo, M., Adachi, T. and Takada, N., Proc. JSME 23rd Computational Mechanics Conference (JSME-CMD2010) (2010), CD-ROM, Paper No. 105.
- (12) Chiu, P-H. and Lin, Y-T., J. Comput. Phys., Vol. 230 (2011), pp. 185–204 (DOI: 10.1016/j.jcp.2010.09.021).
- (13) Olsson, E. and Kreiss, J. Comput. Phys., Vol. 210 (2005), pp. 225–246 (DOI:10.1016/j.jcp.2005.04.007).
- (14) Tan, N., Aoki, T., Inoue, K. and Yoshitani, K., Transactions of the Japan Society of Mechanical Engineers, Series B, Vol. 77 (2011), pp. 1699–1714 (DOI: 10.1299/kikaib.77.1699).