



# コンピュータシミュレーションによる 携帯型化学分析システムの改善

## 課題

- 測定不能なほど小さい規模で作動する微細電気機械システム (MEMS) を設計すること
- プリコンセントレータにできる限り多くの被分析物を収集させ、ごく短時間でその大半またはすべてを放出させること

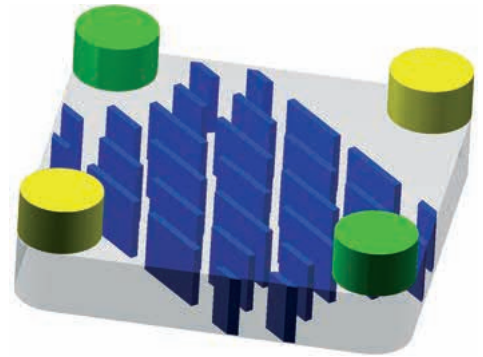
## 経緯

Lockheed Martin 社の 100% 出資子会社である Sandia 社は、有毒物質検出のファーストレスポンドのために設計された携帯型化学分析システム ChemLab を開発しました。ChemLab システムの第一段階は、吸入ガス流から被分析物をサンプル採取し、命令によりそれらを分離段階に排出するプリコンセントレータですが、微細な規模で流れを測定することは非常に難しい作業であるため、プリコンセントレータの設計は困難をきわめていました。そこで、Sandia 社のエンジニアは、ESI Group のコンサルタントと協力して、ESI の CFD-ACE+ 計算流体力学 (CFD) ソフトウェアを用いてプリコンセントレータを通過する流体の流れおよび化学反応のシミュレーションを行いました。その結果、最初のコンセプト設計では、流体が各吸着支柱と十分に接触せずにプリコンセントレータの側面に沿って勢いよく流れており、被分析物の吸着が不足していることが示されました。そこで、Sandia 社と ESI のエンジニアは、接触を改善し、吸着および脱着段階を最適化するために、吸着支柱を再配置して設計の変更を行いました。

## メリット

- プリコンセントレータ設計の大幅な改善
- シミュレーションによる試作回数の削減

Sandia 社の ChemLab は、軍用化学物質や有毒な工業用化学薬品を検出できる持ち運び可能な携帯型化学分析システムであり、本土防衛、国防、環境および医療の分野に利用することができます。平面的なプリコンセントレータは、パターン金属皮膜による加熱素子を支持する窒化ケイ素薄膜で構成されており、この薄膜は、干渉物質を通過させながら対象の被分析物を選択的かつ可逆的に吸着するために、テンプレート多孔質ゾルゲルでコーティングされています。まず、収集段階において、対象とする被分析物を含むガス流がプリコンセントレータチャンバーを通過し、プリコンセントレータ膜に吸着されます。その後、搬送ガスが装置に流入する間に、薄膜抵抗マイクロヒーターを用いて吸着面が加熱されます。これにより、約 0.2 秒間にわたる幅の狭い集中的な化学パルスにおいて収集された被分析物が熱的に脱着されます。

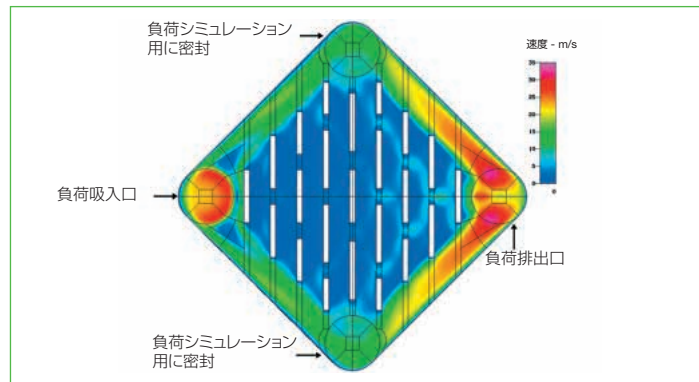
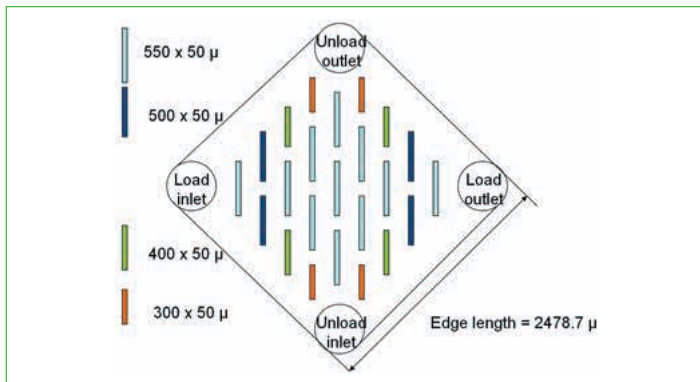


## 設計上の課題

プリコンセントレータを設計するエンジニアにとって、最小限の時間で吸着面上のできる限り多くの被分析物を収集し、センサーによる検出用に被分析物の流れの鋭いピークを提供することは大きな課題です。設計変数には、プリコンセントレータの形状、吸着および脱着段階における質量流量、吸着および脱着段階における搬送ガス、吸着および脱着動力学、および脱着温度プロファイルなどが含まれます。しかし、ChemLab などのマイクロ流体装置は、装置のサイズが小さいことから、局所的な流量の測定に必要なセンサーを取り付けることがほぼ不可能であるため、従来の試作と試験による設計手法には不向きです。そのため、定量的な情報がない場合、エンジニアは通常、設計の最適化を試みる際に自身の直感と推測に頼らざるを得ません。

今回の例では、CFD-ACE+ を用いてプリコンセントレータの性能をシミュレートすることにより、従来の設計手法からの大幅な改善を達成することができました。CFD シミュレーションを行った結果、初期設計では各支柱により生じる障害を回避するために流体がプリコンセントレータの両端に沿って勢いよく流れることが判明し、流れと支柱の接触が非常に少ないことが示されました。この問題点を解決するために、エンジニアは支柱の配列を見直しました。その基本的な考え方は、プリコンセントレータの側面に沿う逃げ道を塞ぐように支柱を配置することであり、これはガス流が支柱の列の中を強制的に通過するようにプリコンセントレータのあらゆる部分に支柱を配置することで実現されました。そこで、この形状を用いて解析を再実行したところ、吸着支柱との接触が大幅に増え、流れプロファイルが大きく改善されることが示されました。

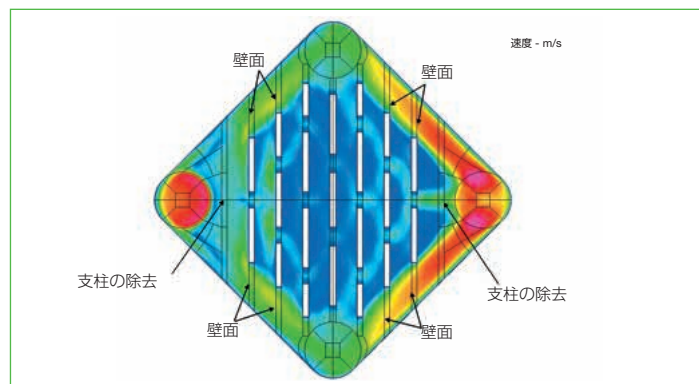
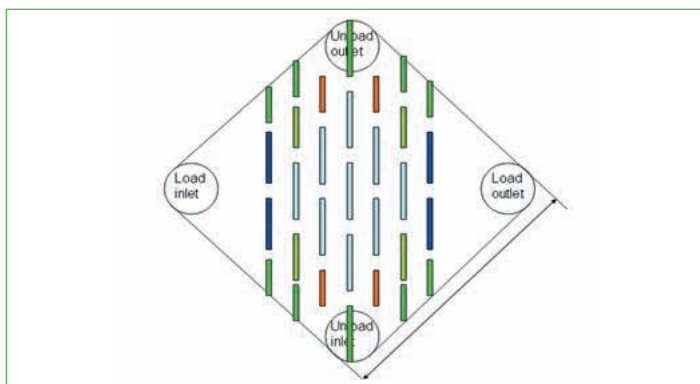
こうして最適な流れが得られる形状を決定した後、被分析物の吸着および脱着に関わる表面反応を測定するために 4 種類のシミュレーションが実行されました。これは、吸着段階に対して 2 種類の流量を使用し、脱着段階に対して 2 種類のガスと 2 種類の流量を使用するというものでした。これらのシミュレーション結果により、流量 300mL/分 で被分析物が最も多く吸着されることが示されました。なお、被分析物濃度は 60mL/分 の場合にチップの前後で劇的に減少し、吸入口から離れた支柱では実質的に被分析物は検出されませんでした。



ガスと支柱の接触が不十分な初期設計

「マイクロデバイスの設計、製造、試験には膨大なコストがかかる場合があります。そのため、マイクロプリコンセントレータの挙動をシミュレーションできるということは、新しい設計を迅速かつ低コストに推進するために必要不可欠なことです。今回の ESI Group とのパートナーシップは、マイクロ流体力学、化学反応、流れなどの CFD シミュレーションに関する経験を通

じてモデルを迅速に作成および検証し、改善設計を予測することができるようになったため、非常に有益なものでした。現在我々は、提案された設計変更の織り込みを行っているところです。」 - サンディア国立研究所、技術スタッフの主要メンバー、Ron Manginell 氏



CFDを利用したプリコンセントレータを通過する流れの改善

## ESI グループについて

ESI は、試作プロセスと製造プロセスにおいて「材料の物理特性」を重視したデジタルシミュレーションソフトウェアを世界に先駆けて開発・提供してきました。ESI では、一貫性のある産業向けアプリケーション製品群の開発に幅広く取り組んできた結果、試験環境下における製品挙動の現実的なシミュレーション、ユーザーが希望する製品性能に合わせた製造プロセスの微調整、製品性能に影響を与える環境の検証を行うことに成功しました。ESI の製品は、シミュレーションベースの設計を目標とした協調的かつ開放的な独自の環境を提供し、仮想プロトタイプ継続的・協調的な改良と製品開発プロセスにおける物理プロトタイプ削減を同時に実現しています。ESI グループは世界中に 750 名を超えるハイレベルな専門技術者を擁し、30 力国以上に製品・サービスを提供しています。また、NYSE ユーロネクスト・バリ証券取引所 C 部に上場しています。詳しくは、<http://www.esi.co.jp> をご覧ください。



### EUROPE

**CZECH REPUBLIC & EASTERN EUROPEAN COUNTRIES**  
MECAS ESI s.r.o.  
Brojova 2113/16  
326 00 Pilsen  
Czech Republic  
T. +420 377 432 931  
F. +420 377 432 930

**FRANCE ESI France**  
Parc d'Affaires Silic  
99, rue des Solets - BP  
80112  
Mergenthalerallee 15-21  
94513 Rungis cedex  
France  
T. +33 (0)1 49 78 28 00  
F. +33 (0)1 46 87 72 02

**GERMANY ESI GmbH**  
Sales & Technical  
Headquarters  
Mergenthalerallee 15-21  
D-65760 Eschborn  
Germany  
T. +49 (0)6196 9583 0  
F. +49 (0)6196 9583 111

**ITALY ESI Italia srl**  
Via San Donato 191  
40127 Bologna  
Italy  
T. +39 0516335577  
F. +39 0516335578  
T. +39 0516335601

**SPAIN ESI GROUP HISPANIA, S.L.**  
Parque Empresarial  
Arroyo de la Vega  
C/ Francisca Delgado,  
11 - planta 2ª  
26108 Alcobendas  
(Madrid)  
Spain  
T. +34 91 484 02 56  
F. +34 91 484 02 55

**SWITZERLAND Calcom ESI SA**  
Parc Scientifique  
EPFL / PSE-A  
1015 Lausanne-EPFL  
Switzerland  
T. +41 21 693 2918  
F. +41 21 693 4740

**UNITED KINGDOM ESI-UK Ltd.**  
The Magdalen Centre  
Oxford Science Park  
Oxford OX 4 4GA  
United Kingdom  
T. +44 (0) 1865 784 829  
F. +44 (0) 1865 784 004

### SOUTH AMERICA

**SOUTH AMERICA ESI Group South America Ltda.**  
Rua Artur de Azevedo,  
1857 cj. 45  
São Paulo - SP  
05404-015  
Brazil  
T./F. +55 11 3062-3698

**ESI Group Headquarters ESI Group**  
100-102 Avenue de Suffren  
75015 Paris  
**FRANCE**  
T. +33 (0)1 53 65 14 14  
F. +33 (0)1 53 65 14 12

### NORTH AMERICA

**USA ESI North America**  
32605 W 12 Mile Road  
Suite 350  
Farmington Hills, MI  
48334-3379  
USA  
T. +1 (248) 381-8040  
F. +1 (248) 381-8998

**USA ESI North America**  
6767 Old Madison Pike  
Suite 600  
Huntsville, AL 35806  
USA  
T. +1 (256) 713-4700  
F. +1 (256) 713-4799

### ASIA

**CHINA ESI-ATE Holdings Limited**  
Room 16A,  
Base F Fu Hua Mansion  
No. 8 Chaoyangmen  
North Avenue  
Beijing 100027  
China  
T. +86 (10) 6554 4907  
F. +86 (10) 6554 4911

**CHINA ZHONG GUO ESI CO., LTD**  
Unit 401-404, bldg G,  
Guangzhou Soft-Park No.  
11, Caipin Road, Guangzhou  
Science City (GSC)  
Guangzhou 510663  
China  
T. +86 (020) 3206 8272  
F. +86 (020) 3206 8107

**INDIA ESI India**  
Indrakrupa #17, 100  
feet ring road  
3rd phase, 6th block,  
Banashankari 3rd stage  
Bangalore 560 085  
India  
T. +91 98809 26926  
F. +91 80401 74705

**JAPAN Nihon ESI K.K.**  
Headquarters and  
Sales Division  
5F and 16F Shinjuku Green  
Tower Bldg. 6-14-1,  
Nishi-Shinjuku  
Shinjuku-ku, Tokyo 160-0023  
Japan  
T. +81 3 6381 8490  
F. +81 3 6381 8488

**KOREA Hankook ESI**  
157-033, 5F MISUNG  
bldg., 660-6,  
Deungchon-3Dong,  
Gangseo-ku,  
South Korea  
T. +82 2 3660 4500  
F. +82 2 3662 0084

**SOUTH-EAST ASIA ESI Group South-East-Asia Office**  
12A-2, Persiaran  
Puteri 1  
Bandar Puteri Puchong  
47000 Puchong,  
Selangor  
Malaysia  
T. +603-80607993  
F. +603-80607661