

微流体速度流型影响因素数值模拟分析

陈 禾 余海燕

(天津大学精密仪器与光电子工程学院 天津 300072)

摘 要 微流体速度流型对微流控芯片分离分析和混合反应效果都有重要影响。本文采用数值分析的方法研究在压力驱动和电渗驱动方式下管道大小与形状、弯曲管道以及表面粗糙度对微流体速度流型的影响。模拟结果表明管道的形状和大小对微流体的动量传递有很大的影响,进而影响微流体的速度流型。电渗驱动下弯道引起的弯道内外径速度差可以通过改变弯道形状和电渗强度的方法进行改善。对摩擦力的模拟中发现小管径密集粗糙颗粒的情况下得到的流型是最好的。模拟结果对微流控芯片的设计加工具有一定的指导意义。

关键词 微流体 速度流型 弯道 粗糙度

20世纪90年代初,瑞士Manz和Widmer提出以微电机加工技术(microelectromechanical systems, MEMS)为基础的“微型全分析系统”(micro total analysis systems, μ TAS),其目的是将化学分析设备微型化、集成化,最大限度地把分析实验室的功能集成到方寸大小的芯片上。因此,又称为“芯片实验室”(lab on a chip, LOC)。微流控芯片是 μ TAS的主要发展方向,广泛应用于生物分析和化学检测等领域,例如细胞、DNA、蛋白质、药品、酶、抗体分析等,是新世纪分析科学、微机电加工、生命科学、化学合成、分析仪器及环境科学等交叉的重要发展前沿^[1]。

微流控芯片从作用形式上主要分为分离分析器和混合反应器两大类。微流体速度流型对分离分析和混合反应的效果都有重要影响。本文采用数值模拟的方法对管道大小、形状、弯曲管道、还有管道的表面粗糙度等几个因素对微流体的速度流型的影响分别进行模拟研究。本研究旨在通过软件模拟掌握微流体的一些运动规律,以便为微流控芯片的设计方法和理论研究提供指导。

1 数值模拟基本条件及参数设定

在压力驱动下不同大小和不同截面形状的管道中速度流型峰宽比的数值模拟中采用正方形、长方形、圆形和三角形截面的管道。管道截面的边长从 $10\ \mu\text{m}$ 开始,以 $10\ \mu\text{m}$ 为间隔递增到边长为 $100\ \mu\text{m}$,长方形管道一边固定为 $10\ \mu\text{m}$,另一边如上变化,驱动压力为 1000Pa ,出口端压力为0。

在电渗驱动下不同截面形状管道内速度流型的数值模拟分别采用圆形、正方形和三角形管道。圆形

管道直径 $50\ \mu\text{m}$,正方形和三角形管道截面边长为 $50\ \mu\text{m}$,外加电场都为 1000V ,出口端压力设定为0。

在电渗驱动下,弯道对速度流型产生影响的数值模拟中,采用弯曲角度为 90° 和 180° 两种管道。管道的直径从 $10\ \mu\text{m}$ 开始递增到 $100\ \mu\text{m}$,管道长度为 $200\ \mu\text{m}$,驱动电压为 1000V 。对于单个弯道的优化设计,所用管道的参数和上面是一样的,只是在弯道处的形状上进行优化,使内外径的路程尽量相同(见图1)。

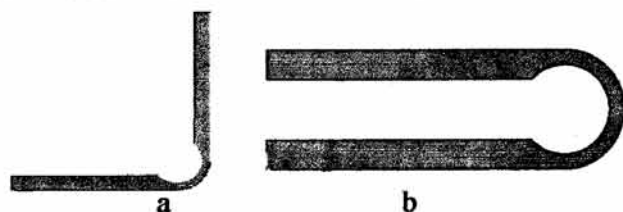


图1 优化设计中采用的管道
a. 为 90° 的弯道;b. 为 180° 的弯道

在不同粗糙颗粒的数值模拟中,分别采用三角形粗糙颗粒和半圆形粗糙颗粒。在这里考察相对粗糙度的影响,粗糙颗粒的尺寸不变。三角形粗糙颗粒的高和宽都为 $0.5\ \mu\text{m}$,半圆形粗糙颗粒的半径为 $0.5\ \mu\text{m}$ 。管道的宽度分别为 $5\ \mu\text{m}$, $10\ \mu\text{m}$ 和 $20\ \mu\text{m}$ 。粗糙颗粒的间隔分别为 $0\ \mu\text{m}$ 、 $0.5\ \mu\text{m}$ 、 $1.0\ \mu\text{m}$ 、 $2.0\ \mu\text{m}$ 、 $4.5\ \mu\text{m}$ 和 $9.5\ \mu\text{m}$ 。

以上模拟,均采用水作为流体, $\rho=998.5\text{kg}/\text{m}^3$, $\mu=0.001003\text{kg}/(\text{m}\cdot\text{s})$,通道内的速度都没有超过 $v=0.001\text{m}/\text{s}$,根据雷诺数公式:

$$\text{Re} = \frac{\rho v d_c}{\mu} \quad (1)$$

在上述条件下雷诺数都低于100,属于低雷诺数层流范围。

2 数值模拟结果与分析

笔者采用多物理场模拟软件 ANSYS 对不同管道大小和形状进行数值模拟。在模型中分离求解三维不可压缩流体,进行层流设置,不考虑流体重力,不求解能量方程,流体属性为水,质量分率为 1×10^{-6} ,粘度为 0.1,驱动方式,压力驱动和电渗流驱动两种方式。

理论上,在压力和电渗驱动下可以得到抛物线和塞状速度流型,下面针对不同的条件考察各种因素对速度流型产生的影响。考虑到双电层厚度与管道尺寸相比很小,所以忽略双电层的厚度,直接模拟电渗速度流型^[2]。

2.1 对不同大小和形状管道模拟

在压力驱动下,微流体速度流型为抛物线型,抛物线的尖锐程度与微流体的混合有一定关系。在这里我们引入速度流型的峰值 V (即速度最大值)与管道特征尺度 a 的比值作为衡量抛物线速度流型尖锐程度的参数。通过对 $15 \sim 100 \mu\text{m}$ 的正方形、长方形、圆形和三角形管道进行模拟,得到 V/a 的值(见图 2)。

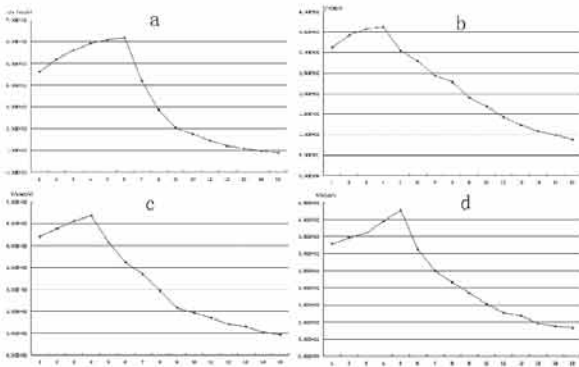


图 2 不同管道中速度最大值与管道特征尺度的比值

a. 正方形管道;b. 方形管道;c. 圆形管道;d. 三角形管道

通过图 2 看出,在不同形状的管道中 V/a 转折点有所不同。正方形管道中的速度流型转折点发生在 $20 \mu\text{m}$ 管道处,在长方形、圆形管道和三角形管道分别出现在 $22 \mu\text{m}$ 、 $18 \mu\text{m}$ 和 $24 \mu\text{m}$ 处。

在电渗驱动下直径 $50 \mu\text{m}$ 圆形、边长 $50 \mu\text{m}$ 正方形和三角形管道内速度流型的模拟结果(见图 3)。

图 3 可以看出,圆形管道内得到的速度流型和理论预测的几乎是一样的,正方形管道内对角线截面上的速度流型有一定的波动,在三角形的管道内速度截面发生较大的变形。

2.2 弯道的模拟

在电渗驱动下,由于弯道内外径距离不同和内

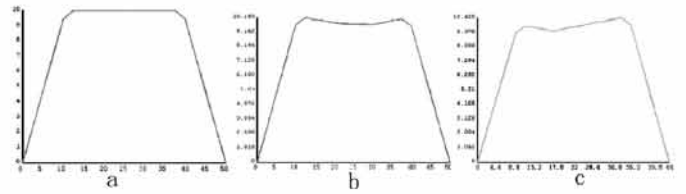


图 3 线速度流型

a. 电渗驱动下圆形管道速度流型;b. 正方形管道对角线速度流型;c. 三角形管道中。横坐标为 $L(\mu\text{m})$,纵坐标为速度 $(\mu\text{m}/\text{s})$

外径电场强度不同,所以会产生速度差。优化前后通过 90° 和 180° 弯道后的速度差(见图 4)。

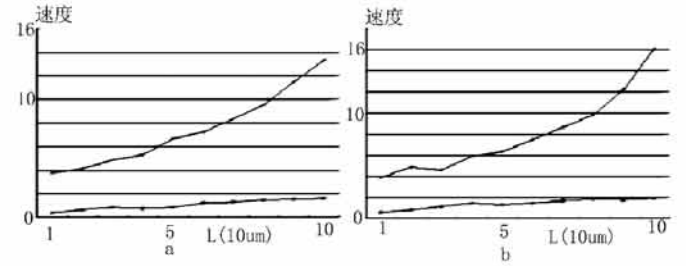


图 4 弯道改进后和改进前速度差的对比
a. 90° 弯道;b. 180° 的弯道

在固定弯角为 90° 的情况下,试样经过弯道后内外径的粒子的速度差随着管道的直径增加而增加。在管道直径为 $10 \mu\text{m}$ 的时候速度差最小为 $3.6 \mu\text{m}/\text{s}$,当管道直径增加为 $100 \mu\text{m}$ 后,速度差变为 $13.4 \mu\text{m}/\text{s}$ 。在弯道为 180° 的情况下速度差的变化情况与 90° 的情况类似,在管道为 $10 \mu\text{m}$ 的情况下最小速度差为 $4 \mu\text{m}/\text{s}$, $100 \mu\text{m}$ 管道下最大速度差为 $16.2 \mu\text{m}/\text{s}$ 。

而优化后的速度差,无论在 90° 还是在 180° 的弯道中都没有超过 $2.0 \mu\text{m}/\text{s}$ 。

2.3 表面粗糙度的模拟

对粗糙度的模拟中我们通过近似采用三角形,半圆形两种构型来代表不同的粗糙度。对每种构型分别设定不同的相对粗糙度、不同的粗糙颗粒间隔几种情况进行研究,对三角形颗粒的模拟情况(见图 5)。

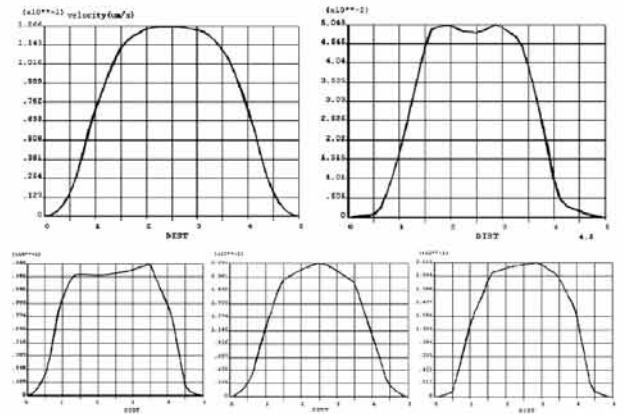


图 5 三角形颗粒粗糙度速度流型的变化情况

(a) 粗糙颗粒的间隔为 $0 \mu\text{m}$; (b) 粗糙颗粒的间隔为 $0.5 \mu\text{m}$; (c)、(d)、(e) 的间隔分别为 $2 \mu\text{m}$ 、 $4.5 \mu\text{m}$ 和 $9.5 \mu\text{m}$

对半圆形粗糙颗粒的模拟结果(见图6)。

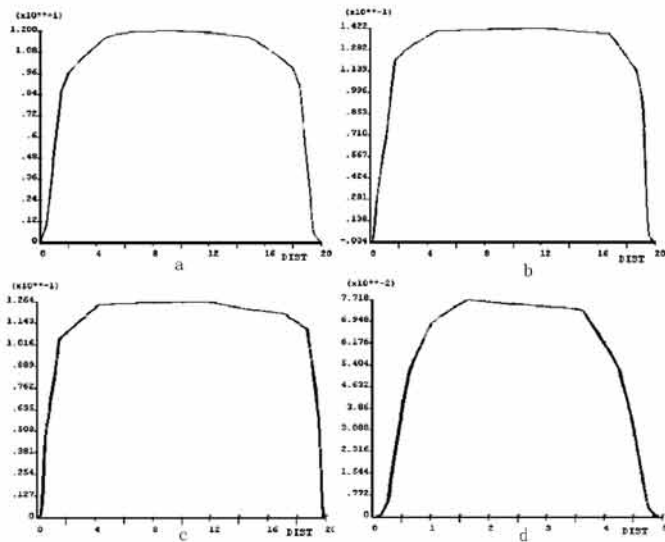


图6 半圆形颗粒不同粗糙度速度流型的变化情况
a. 粗糙颗粒的间隔为 $0\ \mu\text{m}$; b. 粗糙颗粒的间隔为 $2\ \mu\text{m}$;
c、d. 的间隔分别为 4.5 和 $9.5\ \mu\text{m}$

从图6中可以看出在三角形粗糙颗粒最致密的情况下速度流型最好。在间隔为 $0.5\ \mu\text{m}$ 和 $2.0\ \mu\text{m}$ 的情况下速度流型被严重地破坏,在 $0.5\ \mu\text{m}$ 的时候是破坏最严重的。当粗糙颗粒的间隔在 $4.5\ \mu\text{m}$ 和 $9.5\ \mu\text{m}$ 的时候速度剖面逐渐又恢复到较好的高斯型。半圆形粗糙颗粒对速度流型的影响比三角形颗粒的影响要大。从间隔 $0\ \mu\text{m}$ 开始都可以观察到粗糙颗粒对速度流型的明显影响,到间隔为 $9.5\ \mu\text{m}$ 的时候还可以发现有一定的影响。

3 结论

通过对管道大小、形状的模拟中发现 V/a 值的

变化规律, V/a 值反映流体速度变化的快慢。流体稳定后中心速度将不变,随着管径变大 V/a 值会减小,出现 V/a 的峰值。在小于 $30\ \mu\text{m}$ 的管道内流体还没有达到稳定,因此在设计上一般要采用大于 $30\ \mu\text{m}$ 的管道。

在电渗驱动的模拟中不同管道中速度流型有所不同,是因为圆形管道管壁与中心距离相等,各处受管壁作用完全相同。方形和三角形管道中各处受到管壁作用有一定差异,所以速度流型发生一些偏移。因此在检测中,一般不建议使用三角形截面的管道,尽量采用圆形和方形截面的管道。在弯道中随着管径增加内外径的速度差也一直增加,这个速度差是由内外径路程和电荷分布不同引起的。采用内外径路程相近的管道,通过优化设计改变弯道内电渗强度有效地减小内外径速度的差异。但是这种方法在制造工艺和操作流程上比较麻烦,需要在生产和设计水平上进一步提高。最后对粗糙度的研究发现,在三角形粗糙颗粒最致密的情况是速度流型最好的一种。半圆形粗糙颗粒对流体速度流型的破坏要比三角形颗粒大。这些结论将对芯片设计具有一定的指导意义。

参考文献

- 1 方肇伦. 微流控分析芯片[M], 北京:科学出版社,2003
- 2 N. A. Partankar; H. H. Hu. Numerical Simulation of Electroosmotic Flow, Analytical Chemistry, 1998, 70, 1870 ~ 1881

Numerical analysis on the influence factors of velocity profile in microfluidic

Chen He Yu Haiyan

(School of Precision Instrument and Opto-Electronics Engineering, Tianjin University, Tianjin 300072, China)

Abstract The capability of microfluidic chips which often works as separator and mixer is closed with velocity profile of microfluidic. This paper presents the factors influence on microfluidic velocity profile through numeric simulation. Through the simulation we find that the shape of microchannel produce greatest affection on microfluidic momentum. In single crook we change the density of charge in crook to adjust the velocity profile. Triangle granules in rough microchannel produce less affection on microfluidic than semi-circle granules. Those conclusions afford benefit for designing of microchannel and operation of experiment.

Key words Microfluidic Velocity profile Crook Roughness