

文章编号 1004-924X(2015)增-0403-07

被动式微混合器微通道外形及障碍物布局

陈雪叶*, 李铁川

(辽宁工业大学 机械工程与自动化学院, 辽宁 锦州 121001)

摘要:开展了通过优化微通道形状和障碍物布局来增强被动式微混合器混合效果的研究。研究显示,改变微通道形状和设置障碍物,从而提高被动式微混合器中的混沌对流,是提高样品混合效率的简单有效方法。对 6 种不同形状的微通道完成了有限元分析仿真与数值仿真。结果显示:不同结构按混合效率由高到低依次排列为:方波型>正弦型>折线型>T 型>口型>连环型。最后,在最好的微通道外形-方波型微通道内对比了障碍物布局对微混合器混合效率的影响,得到了非对称多组障碍物布局的最优结构,此结构可适用 Pe 数为 750 以下的流体。仿真结果表明,微通道形状和障碍布局的优化设计可以有效提高被动式微混合器的混合效率。

关键词:被动式微混合器;通道外形;障碍物布局;仿真

中图分类号:TH703 **文献标识码:**A **doi:**10.3788/OPE.20152313.0403

Micro-channel shapes and obstacle layout in passive micromixers

CHEN Xue-ye*, LI Tie-chuan

(Faculty of Mechanical Engineering and Automation, Liaoning
University of Technology, Jinzhou 121001, China)

* Corresponding author, E-mail: xueye_chen@126.com

Abstract: This paper focuses on optimizing the micro-channel shapes and obstacle layouts in the micro-channel to enhance the mixing effect of a passive micromixers. Experiments show that changing the channel shape and setting obstacles can enhance chaotic convection in the passive mixer, and they are simple methods to improve the sample mixing efficiency. Six kinds of channel shapes and two kinds of obstacle layouts have completed and simulated. The mixing efficiency in sequence is: the square-wave > the multi-wave > the zigzag > the T-shape > the mouth shape > the loop. Finally, the obstacle layout in the best microchannel-the square-wave microchannel is compared and its effect on the mixing efficiency of the mixer is studied. So the asymmetry layout of obstacles has been obtained, which can be applied to the fluid mixing at Pe less than 750. Simulation results show that optimized design of the channel shape and obstacle layout can improve effectively sample mixing efficiency in the passive micromixer. It is verified that the optimization of the structure is an effective design of microfluidic devices.

Key words: passive mixer; micro-channel shape; obstacle layout; simulation

收稿日期:2015-04-15;修订日期:2015-05-20.

基金项目:国家自然科学基金(No. 51405214);辽宁省博士科研启动基金(No. 20141131);辽宁省教育厅科学研究一般项目(No. L2014241);辽宁工业大学教师基金(No. X201301)

1 引言

微流控芯片技术已经引起越来越多的关注。混合过程是微流体芯片设计过程中的重要部分。为了增强混合,各种各样微混合器被提出。微混合器是一类重要的微机械电子装置^[1-3]。根据输入能量的不同,微混合器可分为被动微混合器和主动微混合器。主动微混合器需要外部能源,如磁力,电场力或者声场来驱动混合。然而被动微混合器只是简单地利用几何形状或流体特性就能实现混合。由于主动混合器需要借助外部动力,参数就会变得越来越复杂。因此,被动微混合器的混合就更容易研究和描述。目前,被动混合器可进一步分为混沌对流混合器、并联复合微混合器和连续层压微混合器、喷射混合器、液滴微混合器。由于被动混合器的混合不用借助外力,因此在微通道的流动主要表现为层流。被动混合器的混合主要是由分子扩散和混沌对流来实现的。Kamholz 等人利用 T 型微混合器完成了分子间相互作用的定量分析,定量地分析了 Albumin 和 Albumin Blue 580^[4]。Ismagilov 等人利用 Y 型混合器,在理论上和实验研究上,研究了横向扩散的尺度效应^[5]。Wong 等人提出了由硅和玻璃材料制作而成的 T 型被动混合器,在不同的注射压力和速度下,进行了两种微流体混合实验,并进行了计算机仿真研究^[6]。实验表明,该 T 型被动混合器混合时间为毫秒量级。He 等人在 Y 型微混合器内加入了更复杂的结构,把 27 μm 的微通道做成之字形,以增加接触面积^[7]。Munson 等人提出了微流控层流混合器^[8]。Bessoth 等人提出了分流合并式混合器,有效地减少了扩散混合路径^[9]。Chung 等人开发了一种菱形微通道的分流合并式微混合器并利用 CFD 进行了仿真,仿真结果与实验结果达到了很好的一致性^[10]。Julio 等人研究了在横向流和表面张力同时作用下分流合并式微混合器的混合效果^[11]。Stroock 等人为了加速混沌对流提出了交错排列人字形混合器^[12]。Kang 等人基于交错人字形混合器提出了障碍嵌入式微混合器^[13-14]。Lee 等人提出了集混合,运输和反应功能于一体的微流控芯片系统^[15]。很多文献显示多种设计布局可提高样品混合效率,然而,被动微混合器的设计还需要进一步研究。

本文研究了通道形状和通道内障碍物布局对样品混合效率的影响。仿真了 6 种微通道结构,得到了最优通道外形-方波形。最后,在此模型下加入障碍物布局,得到了优化的混合器结构。

2 控制方程

等温不可压缩牛顿流体的控制方程为连续性方程和 Navier - Stokes 方程:

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (1)$$

$$\rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \rho \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} + \nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{u} = 0, \quad (2)$$

式中: \mathbf{u} 为速度矢量, ρ 为流体密度, t 为时间, p 为压力, μ 为动力学黏度。

样本浓度的控制方程为对流扩散方程:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla c - D \nabla^2 c = 0, \quad (3)$$

式中: c 为样本浓度, D 为样本对流扩散系数。

Pe 数是无量纲数值,用来表示流动方向上对流与扩散的相对比例:

$$Pe = \frac{UW}{D}, \quad (4)$$

式中: U 为流线方向平均流速, W 为通道宽度, D 为对流扩散系数。随着 Pe 数的增大,输运量中扩散运输的比例减少,对流运输的比例增大。

对流扩散系数 D 受系统的温度,压力,和混合组分的浓度影响,其代表物质分子的扩散能力。与 Fick 定律相关:

$$J = -D \frac{dc}{dx}, \quad (5)$$

式中: J 为样本通量, x 为坐标轴。

3 通道形状对混合效率的影响

3.1 6 种通道结构

六种通道形状分别为 T 型,口型,环型,折线型,正弦型,方波型。微通道的横向长度是 1 000 μm ,通道宽度为 50 μm 。除了 T 型通道,其它微通道均有 3 个循环周期并且垂直高度均为 180 μm 。图 1 所示为仿真状态下的 6 种构型。

3.2 仿真机混合效率的计算

基于有限元理论,仿真研究运用了多物理场耦合仿真软件 COMSOL 3.5a。仿真分析运用了软件中的不可压缩斯托克斯流体模块和对流扩散

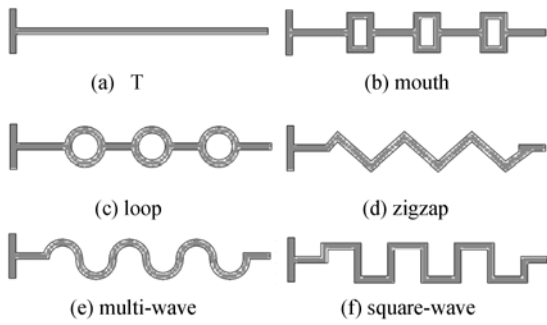


图 1 仿真状态下 6 种通道构型

Fig. 1 Six micro-chanel shapes of micromixers

模块。流体密度为 998.2 kg/m^3 , 边界速度为无滑移。两个入口初始浓度分别设为 0.0 mol/L 和 1.0 mol/L 。边界浓度设为绝缘/对称。出口边界条件设为对流量。由于计算机运存限制, 此仿真模型为二维模型。

为了研究样本混合程度, 混合通道内任意截面的混合效率为^[16]:

$$\eta = 1 - \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left(\frac{c_i - \bar{c}^*}{\bar{c}^*} \right)^2}, \quad (6)$$

式中: N 为样本点的总个数, c_i 和 \bar{c}^* 分别为测得浓度和期望浓度。混合效率的范围为 $0(0\%, \text{无混合})$ 到 $1(100\%, \text{全混合})$ 。一般地, 当混合效率在 80% 到 100% 时, 混合方案可被实验接受, 混合度要求越高, 对混合效率的要求也就越高。

表 1 方波型混合器不同流速下的混合效率表

Tab. 1 Mixing efficiency of the square wave micromixer at eight flow rates

流速($\mu\text{m/s}$)	25	50	75	100	125	150	175	200
Pe	250	500	750	1 000	1 250	1 500	1 750	2 000
混合效率(%)	99.71	94.58	85.57	76.43	68.35	61.49	55.70	50.81

其效率流速曲线如图 3 所示。可以更清楚地看到方波型混合器中混合效率与流速之间的关系。流速越快, 混合效率越低, 并且达到某一数值后, 混合器将不能满足混合要求。由图 3 知此方波型混合器流速在 $25 \sim 75 \mu\text{m/s}$ 内时, 可得到 80% 以上的混合效率。

4 方波型混合器混合效率探究

由于微通道内加入了障碍物, 产生了混沌对流以致混合效率得到了提高。影响混合效率的敏

3.3 结果与讨论

图 2 所示为 6 种通道设计在 8 种流速下的混合效率。任意一种流速下方波型微通道设计都要优于其它 5 种结构。6 种结构在同一流速下的混合效率依次排列为: 方波型 > 正弦型 > 折线型 > T 型 > 口型 > 环型。

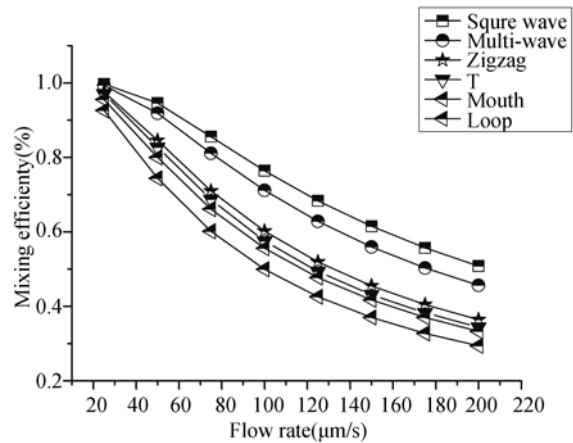


图 2 6 种构型的混合效率-流速曲线

Fig. 2 Mixing efficiency-Flow rate curve of six shapes

为了更明显地表示混合效率随流速的变化情况, 方波型混合器不同流速下的混合效率如表 1 所示。流速越快混合效率越低。当流速达到 $100 \mu\text{m/s}$ 时, 混合效率已低于 80% 。

感性因子排序为: 非对称布置 > 障碍物数量 > 障碍物几何形状^[17]。障碍物圆形截面形状为最佳选择。验证了利用障碍物不对称设计在方波型通道的优势。方波型混合器混合的横向长度是 $3000 \mu\text{m}$, 垂直高度 $1000 \mu\text{m}$, 通道宽度是 $100 \mu\text{m}$ 。

4.1 障碍物在通道内的最优位置

定义三个点: 点 1 在上方, 点 2 和点 3 分别在左、右下角这样形成三角形排列。点 1 和上通道壁之间的距离是 $20 \mu\text{m}$ 。点 2 和点 3 和下通道壁之间的距离是 $20 \mu\text{m}$ 。点 2 和点 3 之间的距离是

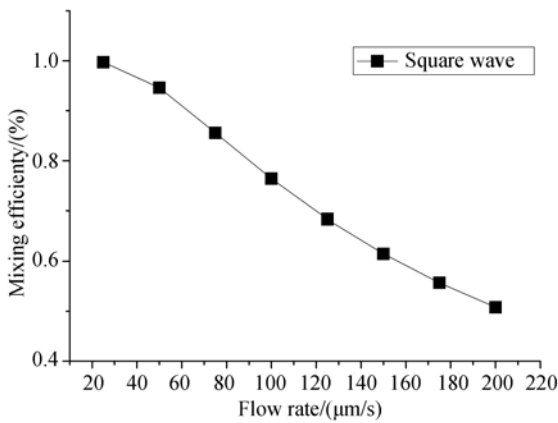


图 3 方波型混合器混合效率-流速曲线

Fig. 3 Mixing efficiency-Flow rate curve of the square wave mixer

60 μm 。

图 4 显示障碍物布局三个位置的模拟仿真图:入口、中心和出口。在图 4(1)中,点 2 和左侧壁的水平距离为 20 μm 。图 4(2)中,点 1 到左右壁面具有相同的距离。图 4(3)中,点 3 到右侧壁面的距离为 20 μm 。

根据模拟结果,图 5 给出了方波型混合器混合效率效率位置直方图。

由图 5 知道当障碍物设置在中心位置时,混

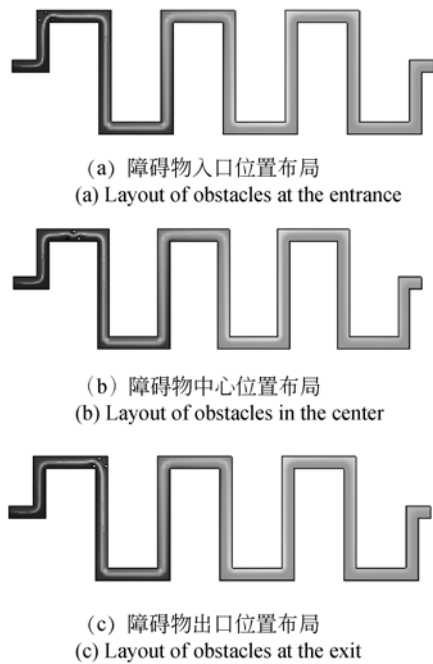


图 4 障碍物三种位置布局

Fig. 4 Three positions of obstacle

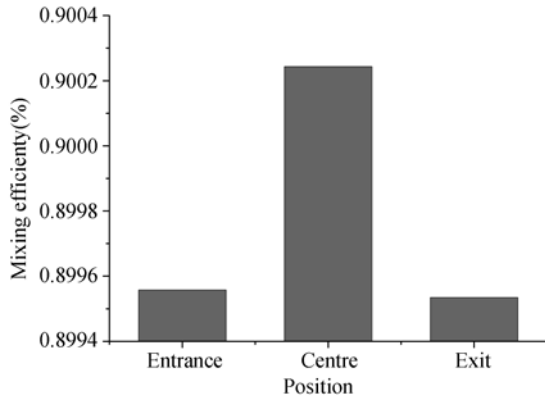


图 5 方波型通道中障碍物 3 种布局的混合效率直方图

Fig. 5 Mixing efficiency-position histogram of square-wave channel mixer

合器的混合能达到最好。图 5 中,从左至右 3 种位置的混合效率分别为 89.96%, 90.02%, 和 89.95%。即根据混合效率排序为中心位置 > 入口位置 > 出口位置。其中出入口位置对混合效率的影响接近。

4.2 3 个障碍物相对位置的摆放关系对混合效率的影响

障碍物相对位置的摆放分对称和非对称两种。而根据 D (图 6 标注)的大小,根据对称性的布局又扩展成 8 种模型。图 6 给出了对称性布局,其中 D 分别取 0 μm , 20 μm , 40 μm 和 60 μm 。

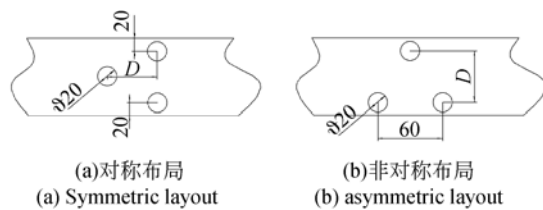


图 6 障碍物对称和非对称布局示意图

Fig. 6 Obstacles symmetric design and asymmetric design schematic

为了定量地研究模型混合效应,两种布局的混合效率在图 7 中显示。根据 8 组数值仿真获得的结果,在图 7 中进行了对比。

由图 7 知,任何 D 值下,非对称布局的混合效率都高于对称布局。对比之下,非对称布局对混合器混合效率的提高都有显著的优势。即非对称布局产生的混沌对流较之对称布局更加强烈。

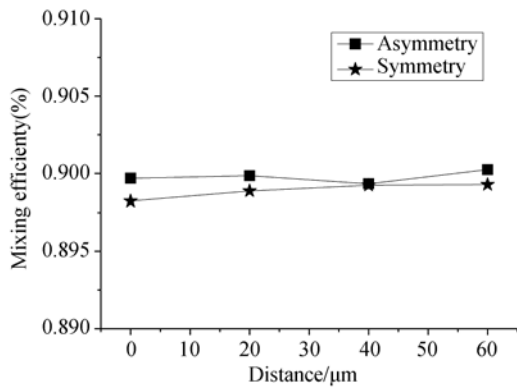


图 7 对称性布局设计下混合效率对比图

Fig. 7 Mixing efficiency-Distance curve of two layouts

4.3 多组障碍物混合效率探究

为得到更好的混合效率, 在微通道内设置了 6 组障碍物。图 8(a) 为 6 组对称结构布局仿真图而图 8(b) 给出的是非对称布局仿真图。图 8(c) 和图(d) 分别为为无障碍物通道和 T 通道作为对比参照。

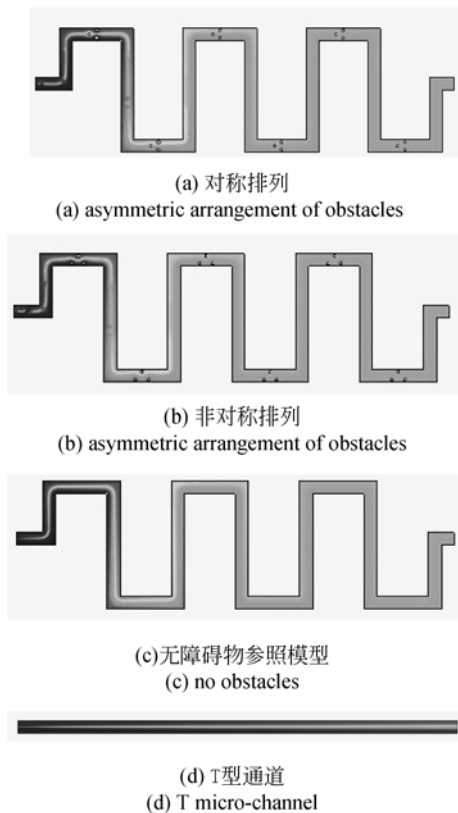


图 8 4 种多组障碍物单元布局仿真图

Fig. 8 Simulation diagrams of four different layouts

图 8 仿真图是在 Pe 数为 750 时的结果。通过图 8, 能清楚地看到存在障碍物的两种结构在通过第四组障碍物单元时就已经混合充分, 而没有障碍物的通道到了第五个障碍物单元对应的位置才完全混合。在此 Pe 数下, T 通道至出口处都没达到完全混合。

为数值化分析方波型多障碍物单元混合器的优势, 根据 4 种通道不同 Pe 数下仿真结果得到图 9。图 9 给出了不同 Pe 数下混合效率曲线图。

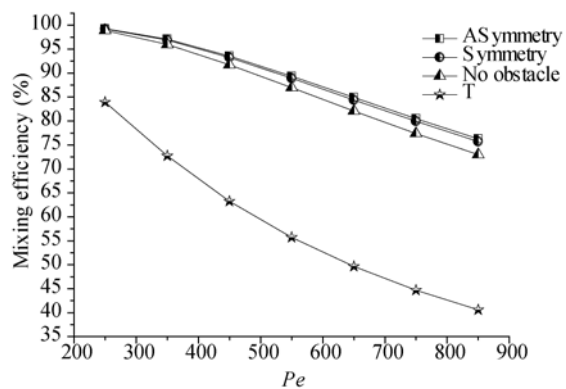


图 9 不同 Pe 下 4 种混合器混合效率图

Fig. 9 Mixing efficiency-Flow rate curve of three designs

图 9 以曲线形式描述了 4 种混合器的混合表现, 随着 Pe 数的提高, 混合效率在逐渐降低。由 T 型混合器与其他 3 种混合器对比可知, 方波型结构对混合器混合效率的提升明显, 当 Pe 数低于 300 时, T 型混合器混合效率已经低于 80%, 而其他 3 种混合器大约在 Pe 低于 700 时混合效率才下降到 80%。对比 3 种方波型通道, 障碍物的非对称设计也有加强混沌对流提高混合表现的作用, 而且可以从图中看出, 随着 Pe 数的增加, 混合效率提高的越明显。

4.4 多障碍物单元混合器有效混合时的 Pe 范围

从图 9 可以看非对称布局是由于其他 3 种混合器的。图 10 清楚地给出了有效混合时的 Pe 数范围。其中 Pe 选取为 250 ~ 850, 间隔为 100。

从图 10 中可知, 混合器混合效率随 Pe 数增大而降低, 当 Pe 数增到到某一数值时, 混合效率将不能达到有效混合(少于 80%)。当 Pe 数达到

750 时,混合效率为 80.5%,即 Pe 小于 750 时混合器可以得到有效混合。

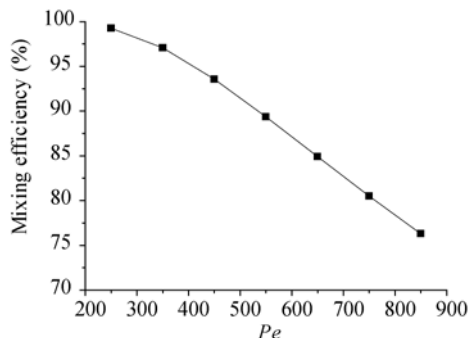


图 10 非对称多障碍物布局混合器不同 Pe 数下的混合效率图

Fig. 10 Mixing efficiency-flow rate curve of asymmetric design

参考文献:

- [1] 范建华, 邓永波, 宣明, 等. PC 微流控芯片黏接筋与溶剂的协同辅助键合[J]. 光学 精密工程, 2015, 23(3): 708-713.
FAN J H, DENG Y B, XUAN M, *et al.*. Synergistic bonding process of solvent and tendon for PC-based microfluidic chips[J]. *Opt. Precision Eng.*, 2015, 23(3): 708-713.
- [2] 许晓威, 陈立国, 贺文元, 等. 数字微流控芯片半月形驱动电极的设计[J]. 光学 精密工程, 2014, 22(3): 633-640.
XU X W, CHEN L G, HE W Y, *et al.*. Design of crescent driving electrode for digital electrowetting-on-dielectric device [J]. *Opt. Precision Eng.*, 2014, 22(3): 633-640.
- [3] 赵天, 杨志刚, 刘建芳, 等. 利用压电微泵驱动和脉动混合可控合成金纳米粒子[J]. 光学 精密工程, 2014, 22(4): 904-910.
ZHAO T, YANG Z G, LIU J F, *et al.*. Controlled synthesis of gold nanoparticles based on PZT micropump and pulsating mixing[J]. *Opt. Precision Eng.*, 2014, 22(4): 904-910.
- [4] KAMHOLZ A E, WEIGL B H, FINLAYSON B A, *et al.*. Quantitative analysis of molecular interaction in microfluidic channel: The T-sensor[J]. *Anal. Chem.*, 1999, 71: 5340-5347.
- [5] ISMAGILOV R F, STROOCK A D, KENIS P J A, *et al.*. Experimental and theoretical scaling laws for transverse diffusion broadening in two-phase laminar flows in microchannels[J]. *Appl. Phys. Lett.*, 2000, 76: 2376-2378.
- [6] WONG S H, WARD M. Micro T-mixer as a rapid mixing micromixer[J]. *Sensors and Actuators B*, 2004, 100(3): 359-379.
- [7] HE B, BURK B J, *et al.*. A picoliter-volume mixer for microfluidic analytical systems[J]. *Analytical Chemistry*, 2001, 73(9): 1.
- [8] MUNSON M S, YAGER P. Simple quantitative optical method for monitoring the extent of mixing applied to a novel microfluidic mixer[J]. *Anal. Chim. Acta.*, 2004, 507: 63-71.
- [9] BESSOTH F G, DEMELLO A J, MANZ A. Microstructure for efficient continuous flow mixing[J]. *Anal. Commun.*, 1999, 36: 213-215.
- [10] CHUNG C K, SHIH T R. Effect of geometry on fluid mixing of the rhombic micromixers[J]. *Microfluidic and Nanofluidics*, 2008, 4(5): 419 - 425.
- [11] JULIO M, OTTINO S W. Introduction: Mixing in microfluidics[J]. *Philosophical of Transactions of the Royal Society of London: Series A*, 2004, 362(1818): 923 - 935.
- [12] STROOCK A D, DERTINGER S K W, Ajdari A,

5 结 论

本文对 6 种微通道结构和两种障碍物在微通道中的布局进行了计算流体动力学模拟和有限元分析。从数值仿真结果中,可以看到方波型微通道结构是混合效率最高的。混合性能由高到低依次是:方波型>正弦型>折线型>T 型>口型>连环型。为了实现更好的混合效果,我们进行了障碍物布局的优化设计。仿真结果显示:非对称障碍物布局在提高样品混合方面是最优的,本文实现的通道构造可适用 Pe 数为 750 以下的流体混合。改变通道外形以及通道内优化障碍物布局都是增强混沌对流的简单而且有效的手段,此两种方法在被动式微混合器优化设计方面都有着重要的研究意义。

- et al.* Chaotic mixer for microchannels[J]. *Science*, 2002, 295: 647-651.
- [13] KANG TAE GON, SINGH MRITYUNJAY K, *et al.* Chaotic mixing using periodic and aperiodic sequences of mixing rotocols in a micromixer[J]. *Microfluid Nanofluid*, 2008, 4: 589-599.
- [14] KANG T G, KWON T H. Colored particle tracking method for mixing analysis of chaotic micromixers[J]. *J. Micromech Microeng*, 2004, 4: 891-899.
- [15] LEE W B, WENG C H, Biomedical microdevices synthesis of iron oxide nanoparticles using a microfluidic system[J]. *Biomed Microdevices*, 2009, 11: 161-171.
- [16] TRAN-MINH N, KARLSEN F, DONG T. *A Simple and Low Cost Micromixer for Laminar Blood Mixing: Design, Optimization, and Analysis*[M]. Biomedical Informatics and Technology, Springer Berlin Heidelberg, 2014: 91-104.
- [17] CHEN X, LIU C, XU Z. Research on Layout optimization of obstacles in a passive micromixer[J]. *Micro and Nanosystems*, 2012, 4(2): 123-127.

作者简介:



陈雪叶(1982—),男,黑龙江佳木斯人,博士,副教授,主要从事微流控技术方面的研究。E-mail: xueye_chen@126.com



李铁川(1988—),男,河北沧州人,硕士研究生,2013年于燕山大学获得学士学位,主要研究方向为微流控技术。E-mail: 138317a@sina.com