

УДК 532.5; 532.6

## ВЛИЯНИЕ КОНФИГУРАЦИИ СОЕДИНЕНИЯ НА ФОРМИРОВАНИЕ МИКРОКАПЛИ В Т-ОБРАЗНОМ МИКРОКАНАЛЕ

Ф. Л. Ли, Дж.-М. Мiao\*

Центр общего образования Военной академии Республики Китай,  
83059 Каосюн, Тайвань, Китай

\* Пинтунский национальный университет науки и технологий,  
91201 Пинтун, Тайвань, Китай  
E-mails: fulinli@gmail.com, jmmiao@mail.npust.edu.tw

Исследуется процесс динамического формирования микрокапель воды при течении силиконового масла в Т-образном микроканале. При этом микрокапли воды формируются в соединении, когда перпендикулярно течению силиконового масла в прямой прямоугольный микроканал вводится поток воды. Изучается влияние геометрии ввода потока на гидродинамические характеристики формирования микрокапель воды. Для того чтобы исследовать формирование капли в соединении путем решения нестационарных трехмерных ламинарных уравнений Навье — Стокса, описывающих течение многофазной жидкости, разработана конечно-объемная разностная схема. Показано, что вычисленные значения длины и частоты генерации микрокапель хорошо согласуются с результатами эксперимента в Т-образном микроканале с прямыми и плоскими входами для обоих потоков жидкости (основная модель). Получены эмпирические корреляции между отношением объемных расходов и безразмерной длиной микрокапли или безразмерной частотой генерации капли при фиксированном капиллярном числе  $4,7 \cdot 10^{-3}$ . Показано, что в случае если прямой вход для потока воды меняется на расположенный ниже по течению вход с резким сужением, длина капли уменьшается приблизительно на 21 %.

Ключевые слова: вычислительная гидродинамика, Т-образный микроканал, конечно-объемная разностная схема, микрокапля, капиллярное число.

**Введение.** Развитие технологий с применением микроэлектромеханических систем (МЭМС) способствовало миниатюризации биомедицинских устройств диагностики, в которых используется микрокапельное течение, вызванное микромасштабными многофазными полями и характеризующееся отсутствием массообмена через поверхность раздела, малой вероятностью загрязнения и управляемым многообразием полей течения, и которые применяются при химическом синтезе, доставке лекарственных средств, в микрогидродинамике и при создании биочипов. При использовании химического реагента в микрожидкостных устройствах не в виде непрерывного потока, а в виде капель требуется меньший объем реагента для получения такой же чувствительности биочипа или скорости синтеза в химическом реакторе. Например, в работе [1] использовалась система генерации микрокапель в биочипе ДНК, в котором пузыри воздуха вносили капли реагента в микроканал, в [2] чипы в виде капель применялись для запуска полимеразной цепной реакции.

Работа выполнена при финансовой поддержке Национального научного совета Тайваня Республики Китай (грант № NSC99 2221 E 145 004).

© Ли Ф. Л., Мiao Дж.-М., 2015

Микросмесители можно разделить на активные и пассивные в зависимости от принципа их работы. В микроканалах активных микросмесителей, изготовленных с помощью МЭМС-технологий, для улучшения смешивания используются различные активные воздействия, такие как магнитное, электрическое, акустическое и тепловое воздействие воздуха. В пассивных микросмесителях микроканалы имеют криволинейную форму, чтобы турбулизовать поток и обеспечить малое число Рейнольдса в процессе смешивания. Вследствие высокого энергопотребления активных микросмесителей и сложности производства пассивных микросмесителей использование микросмесителей сплошных течений затруднено. В работах [3–6] выполнены комплексные эксперименты для определения влияния соотношения геометрических параметров канала, отношения объемных расходов, концентрации поверхностно-активного вещества и вязкости реагента на показатель смешения двух реагентов в микрокапле, сформировавшейся в микроканале Т-образного типа. Авторы работы [7] изучили формирование капли, управляя потоками деионизированной воды и наножидкостей в Т-образном микрожидкостном устройстве при различных температурах. Авторы [8], для того чтобы управлять формированием капли, совместили микронагреватель и температурные датчики в Т-образном канале. Важной задачей является исследование генерации микрокапель в простом микроканале с различной геометрией соединения с целью улучшения общей производительности биочипов или химических реакторов.

В проведенных исследованиях, как правило, использовался один подход, заключающийся в том, чтобы периодически генерировать капли в микрожидкостном устройстве путем непрерывного ввода двух несмешивающихся жидкостей в Т-образный микроканал. Несущая жидкость вводится в главный канал, диспергируемая жидкость подается во второй канал, расположенный под углом  $90^\circ$  к главному каналу. При определенных свойствах жидкостей и их расходах поток диспергируемой жидкости разделяется потоком несущей жидкости на капли в результате поверхностного взаимодействия в соединении. Авторы работы [9], изменяя давление диспергируемой жидкости (воды), микрокапли, полученные в результате взаимодействия двух несмешивающихся жидкостей в Т-образном микроканале, разделили на три группы: монодисперсные капли, спирали и капли-ленты. В работах [10, 11] описаны процесс формирования капли и механизм течения в Т-образном микроканале. Результаты проведенных исследований показывают, что на формирование капли могут оказывать воздействие несколько основных факторов включая геометрические параметры микроканала, отношения объемных расходов двух жидкостей  $Q_R = Q_d/Q_c$  и капиллярное число  $Ca = \mu_c u_c / \gamma$  [12–14] ( $Q_d$  — объемный расход диспергируемой жидкости;  $Q_c$  — объемный расход несущей жидкости;  $u_c$ ,  $\mu_c$  — скорость на входе и динамическая вязкость несущей жидкости соответственно;  $\gamma$  — поверхностное натяжение на границе двух жидкостей). Авторы работы [7] изменили размер генерируемых капель, меняя поверхностное натяжение между двумя несмешивающимися жидкостями путем нагрева потока ниже по течению от Т-образного соединения.

Несмотря на то что исследованию генерации капель в Т-образном микроканале посвящено большое количество экспериментальных работ, численных работ, посвященных изучению механизмов, оказывающих влияние на формирование капли в микроканале, сравнительно немного (см., например, [15–20]). Для того чтобы изучить процесс формирования капли в Т-образном микроканале, в настоящей работе с использованием численного подхода определены поля течения двух несмешивающихся жидкостей в соединении и проведено сравнение вычисленной длины капель с экспериментально полученной. Также изучено влияние геометрии входа диспергируемой жидкости на длину капель и частоту их генерации при том же капиллярном числе.

**1. Конфигурации исследованных Т-образных микроканалов.** На рис. 1 приведена схема Т-образного микроканала с прямоугольным сечением. Соотношение гео-

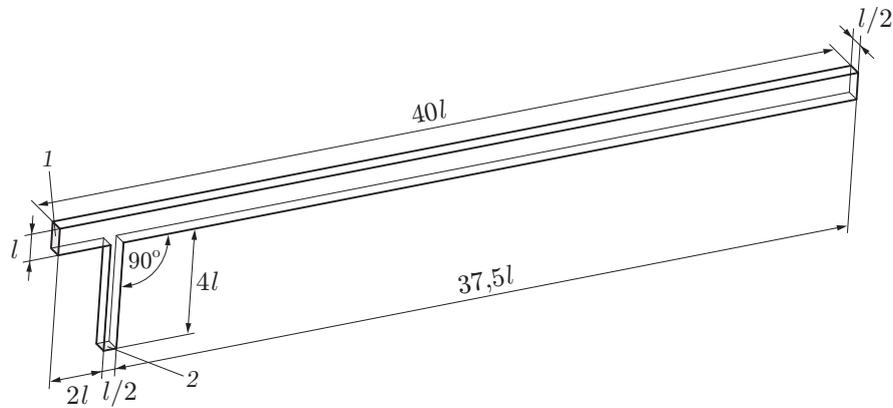


Рис. 1. Схема трехмерного микроканала с Т-образным соединением:  
1, 2 — входы в канал

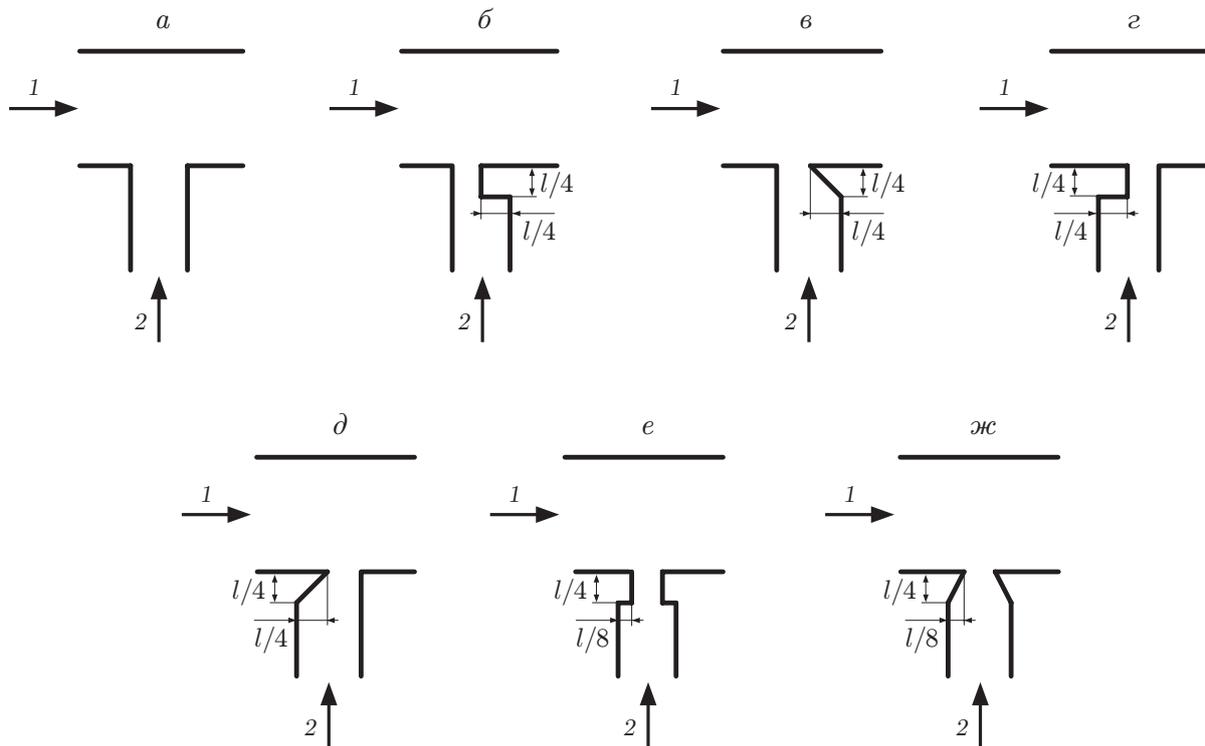


Рис. 2. Конфигурации входа для потока воды в различных моделях:  
а — модель А (основная модель), б — модель В (с резким сужением выше по течению), в — модель С (с постепенным сужением выше по течению), г — модель D (с резким сужением ниже по течению), д — модель Е (с постепенным сужением ниже по течению), е — модель F (с резким симметричным сужением), ж — модель G (с постепенным симметричным сужением); 1, 2 — входы

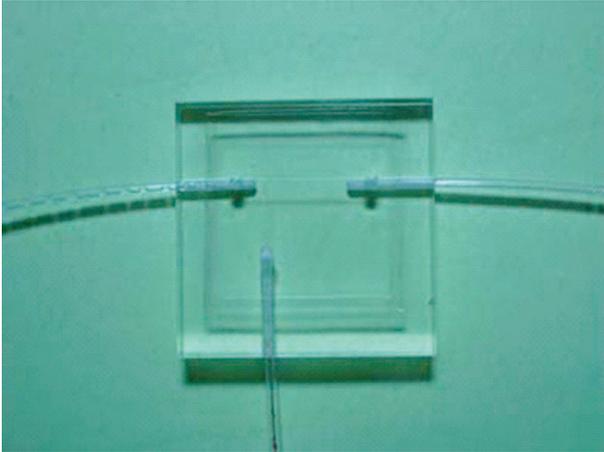


Рис. 3

Рис. 3. Т-образное соединение ПДМС-микроканала

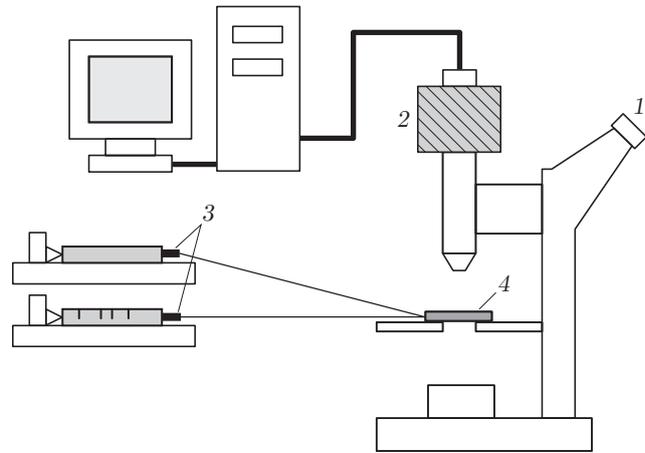


Рис. 4

Рис. 4. Схема экспериментальной установки для визуализации течения:

1 — оптический микроскоп Nikon SMZ645, 2 — ПЗС-матрица, 3 — шприц-насосы KDS-200, 4 — ПДМС-чип

метрических размеров поперечного сечения равно 0,5, ширина сечения главного канала  $l = 100$  мкм, длина главного канала составляет  $40l$ .

Для того чтобы исследовать влияние геометрии входа диспергируемой жидкости на формирование капель в соединении, используются резкое и постепенное сужения входа 2 для увеличения импульса диспергируемой жидкости. На рис. 2 показан вид сверху входных сечений 2 для моделей А–Г соответственно.

**2. Экспериментальная установка.** С использованием технологии мягкой литографии для модели А был изготовлен полидиметилсилоксановый (ПДМС) Т-образный микроканал (рис. 3). В экспериментах использовались силиконовое масло (вязкость  $\mu_c = 10^{-2}$  Па·с, плотность  $\rho_c = 9,3 \cdot 10^2$  кг/м<sup>3</sup>) в качестве несущей жидкости и деионизированная вода (вязкость  $\mu_d = 10^{-3}$  Па·с, плотность  $\rho_d = 10^3$  кг/м<sup>3</sup>) в качестве диспергируемой жидкости соответственно. Поверхностное натяжение на границе силиконового масла и деионизированной воды, как и в [10], полагалось равным  $3,65 \cdot 10^{-2}$  Н/м.

На рис. 4 показана схема экспериментальной установки для визуализации поля течения генерированных капель. Экспериментальная платформа состояла из оптического микроскопа Nikon SMZ645, цветной ПЗС-матрицы, используемой для фиксации изображения, и двух программируемых шприц-насосов KDS-200 для введения жидкостей во входные отверстия. В деионизированную воду добавлялся краситель для окрашивания генерируемых капель, изображения которых впоследствии фиксировались ПЗС-камерой. По результатам визуализации течения определялись два главных параметра генерируемых капель: длина капли и частота ее генерации. Для того чтобы проградуировать частоту генерации капли, использовалось число Струхала

$$St = fL/u_c,$$

где  $f$  — частота генерации капель;  $L$  — гидравлический диаметр главного канала.

**3. Численный анализ.** Для решения нестационарных трехмерных уравнений Навье — Стокса и определения поля течения двух несмешивающихся жидкостей в Т-образном микроканале в условиях ламинарного течения использовались пакет программ вычислительной гидродинамики Fluent 6.3.26 и конечно-объемная разностная схема (VOF) [21]. Жидкости полагались несжимаемыми и ньютоновскими.

3.1. *Определяющие уравнения.* Управляющие уравнения можно записать в общем виде

$$\begin{aligned}\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U}) &= 0, \\ \frac{\partial}{\partial t} (\rho \mathbf{U}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} \mathbf{U}) &= -\nabla p + \nabla \cdot [\mu (\nabla \mathbf{U} + (\nabla \mathbf{U})^T)] + \rho \mathbf{g} + \mathbf{F}, \\ \mathbf{U} &= u \mathbf{i} + v \mathbf{j} + w \mathbf{k},\end{aligned}$$

где  $\rho = \varphi_q \rho_d + (1 - \varphi_q) \rho_c$ ,  $\mu = \varphi_q \mu_d + (1 - \varphi_q) \mu_c$  — средневзвешенные по объему плотность и вязкость соответственно;  $\mathbf{F}$  — сила поверхностного натяжения:

$$\mathbf{F} = \frac{2\sigma \kappa \hat{\mathbf{n}}}{\rho_d + \rho_c},$$

$\sigma$  — коэффициент поверхностного натяжения;  $\hat{\mathbf{n}} = \mathbf{n}/|\mathbf{n}|$  — нормаль к поверхности;  $\mathbf{n} = \nabla \cdot \varphi_q$ ;  $\kappa = \nabla \cdot \hat{\mathbf{n}}$  — кривизна поверхности раздела [22]. Для восстановления поверхности раздела использовалась геометрическая схема [23], основанная на кусочно-линейной интерполяции [24]. Использование конечно-объемной разностной схемы позволяет контролировать объемную долю каждой фазы в каждой ячейке сетки в течение всего времени существования поверхности раздела. Предполагается, что объемная доля жидкой фазы в каждой ячейке равна  $\sum \varphi_q = 1$ . Заметим, что при  $\varphi_q = 0$  жидкая фаза в ячейке отсутствует; при  $\varphi_q = 1$  ячейка полностью занята жидкой фазой; при  $0 < \varphi_q < 1$  в ячейке существует двухфазная поверхность раздела. Восстановленная поверхность раздела переносится решением уравнения адвекции для  $\varphi_q$ . Для  $q$ -й фазы уравнение адвекции записывается в виде

$$\frac{\partial}{\partial t} (\varphi_q \rho_q) + \nabla \cdot (\varphi_q \rho_q \mathbf{U}_q) = 0.$$

Также учитывалась сила адгезии стенки, угол контакта трех фаз определялся следующим образом:

$$\hat{\mathbf{n}} = \hat{\mathbf{n}}_w \cos \theta_w + \hat{\mathbf{t}}_w \sin \theta_w,$$

где  $\hat{\mathbf{n}}_w$ ,  $\hat{\mathbf{t}}_w$  — нормальный и касательный к стенке единичные векторы соответственно. Полагается, что линия контакта поддерживает статический угол контакта  $\theta_w$  независимо от скорости и направления движения линии контакта. Комбинация этого угла контакта с рассчитанной нормалью поверхности, расположенной на расстоянии от стенки, равном длине одной ячейки, определяет локальную кривизну поверхности, и ее значение используется для коррекции величины массовой силы при вычислении поверхностного натяжения.

3.2. *Численные схемы.* Использовался сегрегированный трехмерный решатель с уравнением для давления с двойной точностью. Обе жидкости полагались несжимаемыми с постоянными свойствами, а течение жидкости в микроканале — ламинарным. Для дискретизации конвективных и диффузионных членов применялись противопоточная численная схема второго порядка точности и схема второго порядка точности с центральными разностями соответственно. При этом взаимосвязь давления и скорости определялась с помощью метода расщепления операторов (алгоритм PISO). В случае если число Куранта — Фридрихса — Леви для VOF-схемы меньше двух, временной шаг автоматически пересчитывался с использованием метода переменного шага.

3.3. *Вычислительная сетка.* Для построения в микроканале системы трехмерных структурированных сеток использовалось программное обеспечение ICEM/CFD. Полученная многоблочная структурированная вычислительная область, соответствующая заданной форме, имеет четыре подблока, каждый из которых дискретизируется модулем

HEXAICEM/CFD. Анализ влияния сетки на частоту генерации каплей показывает, что вычислительная область должна иметь 39 888 ячеек (для основной модели — модели А).

3.4. *Начальные и граничные условия.* Сначала микроканал заполнялся покоящейся несущей жидкостью — силиконовым маслом. На входе в микроканал задавались однородные профили скорости как для несущей, так и для диспергируемой жидкости. Статическое давление в главной выходной плоскости микроканала устанавливалось равным атмосферному. На стенках задавались граничные условия прилипания и отсутствия диффузионного потока массы. Статический угол контакта задавался равным  $140^\circ$  для всех стенок [10].

4. **Результаты исследования и их обсуждение.** Для визуализации течения и исследования формирования каплей использовалась ПДМС-микросхема, показанная на рис. 2,а ( $Ca = 4,7 \cdot 10^{-3}$ ,  $Q_R = 1,49$ ,  $Q_d = 2,5$  мл/мин,  $u_d = 4,17 \cdot 10^{-3}$  м/с).

4.1. *Формирование микрокапель в Т-образном соединении для модели А.* На рис. 5 приведена схема формирования микрокапель ( $\varepsilon$  — расстояние между каплями и стенкой микроканала в Т-образном соединении,  $l_n$  — ширина шейки капли,  $l_o$  — расстояние между каплями,  $l_w$  — длина капли).

Все вычисленные или экспериментально полученные результаты для модели А являются базовыми для сравнения с результатами, полученными для моделей В–Г. Сравнение экспериментальных и вычисленных значений  $l_w$  и  $St$  подтверждает адекватность используемой численной схемы.

На рис. 6 показана эволюция каплей в Т-образном канале. Параметр  $T$  является безразмерным периодом циклической генерации каплей,  $\bar{t} = t/(l/u_c)$  — безразмерное измеренное время формирования капли. В случае модели А при  $Ca = 4,7 \cdot 10^{-3}$ ,  $Q_R = 1,49$  средний измеренный период составляет 0,21 с. При  $t = T$  капля отделяется от поступающей в соединение диспергируемой жидкости. Последующую эволюцию капли можно описать следующим образом. Диспергируемая жидкость сначала движется вниз по течению в основном канале (см. рис. 6,а). Приложенное напряжение сдвига между несущей и диспергируемой жидкостями растягивает выталкиваемую часть диспергируемой жидкости (см. рис. 6,б). Поскольку выталкиваемая часть диспергируемой жидкости растягивается вниз по течению несущей жидкостью, ширина шейки  $l_n$  и расстояние  $\varepsilon$  уменьшаются до тех пор, пока капля полностью не отделится от диспергируемой жидкости (см. рис. 6,в,г). Для того чтобы понять механизмы воздействия на сформировавшуюся каплю, необходимо изучить зависимость от времени давления и напряжения сдвига между двумя несмешивающимися жидкостями выше по течению.

На рис. 7 показана зависимость от времени вычисленного осредненного по площади статического давления  $P_b$  на расстоянии 100 мкм выше по течению от Т-образного соединения в течение одного цикла формирования капли. При этом безразмерное давле-

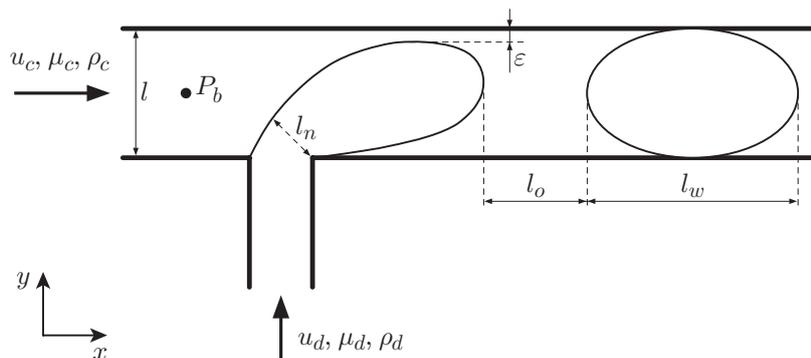


Рис. 5. Схема формирования микрокапли в Т-образном канале

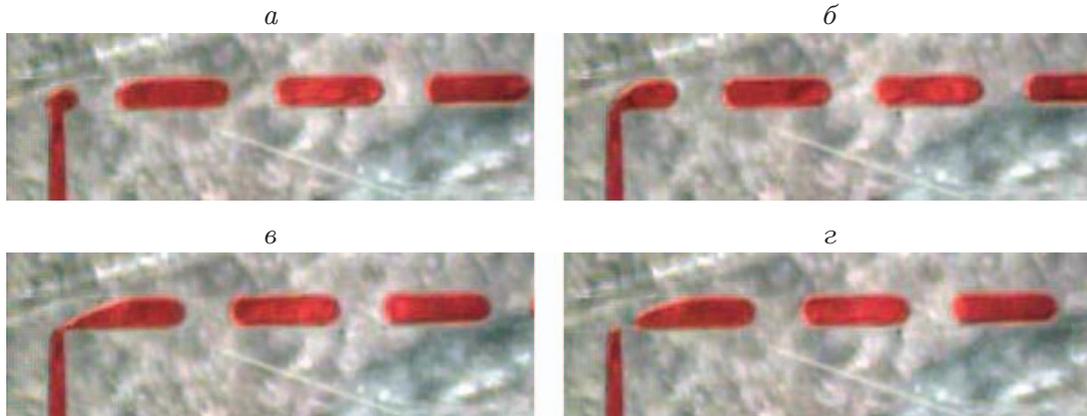


Рис. 6. Эволюция формирования капли для модели А при  $Ca = 4,7 \cdot 10^{-3}$ ,  $Q_R = 1,49$  в различные моменты времени:  
 $a - \bar{t} = \bar{T}/4$ ,  $б - \bar{t} = \bar{T}/2$ ,  $в - \bar{t} = 3\bar{T}/4$ ,  $г - \bar{t} = \bar{T}$

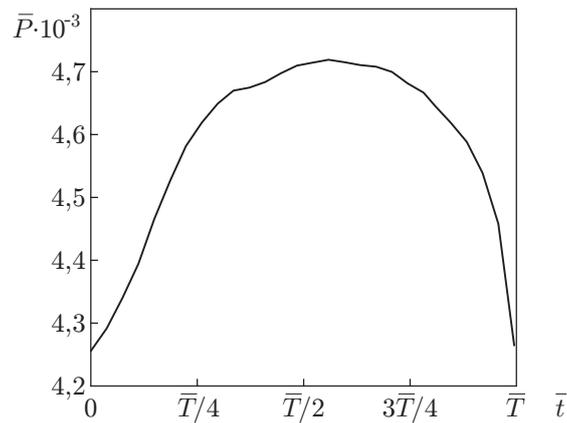


Рис. 7. Зависимость от времени вычисленного осредненного по площади статического давления на расстоянии 100 мкм выше по течению от Т-образного соединения для одного цикла формирования капли для модели А при  $Ca = 4,7 \cdot 10^{-3}$ ,  $Q_R = 1,49$

ние определялось по формуле  $\bar{P} = P_b / (\mu_c u_c / l)$ . При движении вверх по течению давление постепенно увеличивается, когда диспергируемая жидкость проникает в главный канал и занимает его часть. Если величина импульса диспергируемой жидкости мала, давление выше по течению достигает максимального значения в момент, когда движение по нормали диспергируемой жидкости в несущую жидкость прекращается. Диспергируемая жидкость начинает перемещаться вниз по течению вместе с несущей жидкостью. После достижения максимального значения выше по течению давление способствует движению диспергируемой жидкости вниз по течению в основном канале, а также блокирует поступление диспергируемой жидкости из второго канала. Когда двухфазная поверхность раздела растягивается ниже по течению от соединения, шейка капли уменьшается до тех пор, пока в потоке несущей жидкости не сформируется отдельная капля. В момент отделения капли от канала давление выше по течению уменьшается до минимального значения, поскольку диспергируемая жидкость вновь начинает поступать в основной канал. При понижении давления несущей жидкости выше по течению диспергируемая жидкость постепенно проникает в несущую жидкость в основном канале. Наблюдения показывают, что

Экспериментальные и расчетные значения  $l_w$ ,  $l_o$ ,  $St$   
для различных моделей при  $Ca = 4,7 \cdot 10^{-3}$ ,  $Q_R = 1,49$

Модель	$l_w$ , мкм		$l_o$ , мкм		St	
	Расчет	Эксперимент	Расчет	Эксперимент	Расчет	Эксперимент
A	499,0	530	255,5	290	0,655	0,604
B	395,1	—	178,7	—	0,828	—
C	401,8	—	185,5	—	0,814	—
D	396,0	—	174,5	—	0,825	—
E	437,8	—	203,5	—	0,739	—
F	398,6	—	172,8	—	0,819	—
G	416,7	—	194,4	—	0,783	—

процесс формирования микрокапли периодически повторяется и в значительной степени зависит от сил поверхностного натяжения, силы напряжения сдвига и градиента силы давления.

В расчетах и экспериментах для длины микрокапли, интервала между смежными микрокаплями и числа Струхала получены следующие результаты:  $l_w = 499$  мкм и  $l_w = 530$  мкм,  $l_o = 255,5$  мкм и  $l_o = 290$  мкм,  $St = 0,655$  и  $St = 0,604$  соответственно (см. таблицу). Видно, что вычисленные и экспериментальные значения различаются на 10 %. Это может быть обусловлено воздействием силиконового масла на стенку ПДМС-микроканала [25] или давления в течении, достигающего в эксперименте  $10^5$  Па [26–28], а также изменением динамического угла контакта вследствие нерегулярной шероховатости стенки чипов.

На рис. 8 показаны рассчитанные поля объемной доли и вектора скорости в центральной плоскости микроканала. Внутри каждой микрокапли видны две пары противовращающихся вихрей, один из которых расположен в головной части, второй — в хвостовой. Очевидно, рециркуляция вследствие наличия вихрей в поле течения микрокапли способствует смешиванию двух реагентов в микрокапле, что затрудняет использование рассматриваемых течений в микрогидродинамике при малых числах Рейнольдса.

4.2. *Влияние геометрии входа диспергируемой жидкости в канал на формирование микрокапли.* Для исследования влияния геометрии соединения на формирование микрокапель использовались конфигурации как с резким, так и с постепенным сужением вторичного канала (см. рис. 2). На рис. 2 видно, что моделях В–Г площадь сечения второго канала на входе в главный канал меньше, чем в модели А. Это означает, что в моделях В–Г диспергируемая жидкость вносит больший импульс в несущую жидкость, чем в модели А. Размеры сечения входа диспергируемой жидкости для модели с резким сужением выше по течению (модель В) равны  $50 \times 50 \times 100$  мкм (см. рис. 2,б). Замена модели А моделью В позволяет уменьшить площадь поперечного сечения соединения на 50 %. Расчеты показывают, что при  $Ca = 4,7 \cdot 10^{-3}$ ,  $Q_R = 1,49$  частота генерации капель в модели В приблизительно на 23,8 % больше, чем в модели А. Это обусловлено тем, что время достижения критического размера шейки (см. подп. 4.1) для динамического процесса формирования микрокапель уменьшается при увеличении импульса диспергируемой жидкости в положительном направлении  $y$  вследствие наличия препятствия в соединении канала. В случае модели С (см. рис. 3,в) изменение потока импульса дисперсной фазы в соединении канала происходит не только в положительном направлении  $y$ , но и в положительном направлении  $x$ .

Рассчитанная средняя длина микрокапли  $l_w$  для модели В составляет приблизительно 395,1 мкм, что на 20,8 % меньше, чем для модели А. Однако число Струхала увеличивается от  $St = 0,655$  в модели А до  $St = 0,828$  в модели В. Данные результаты (см. таблицу)

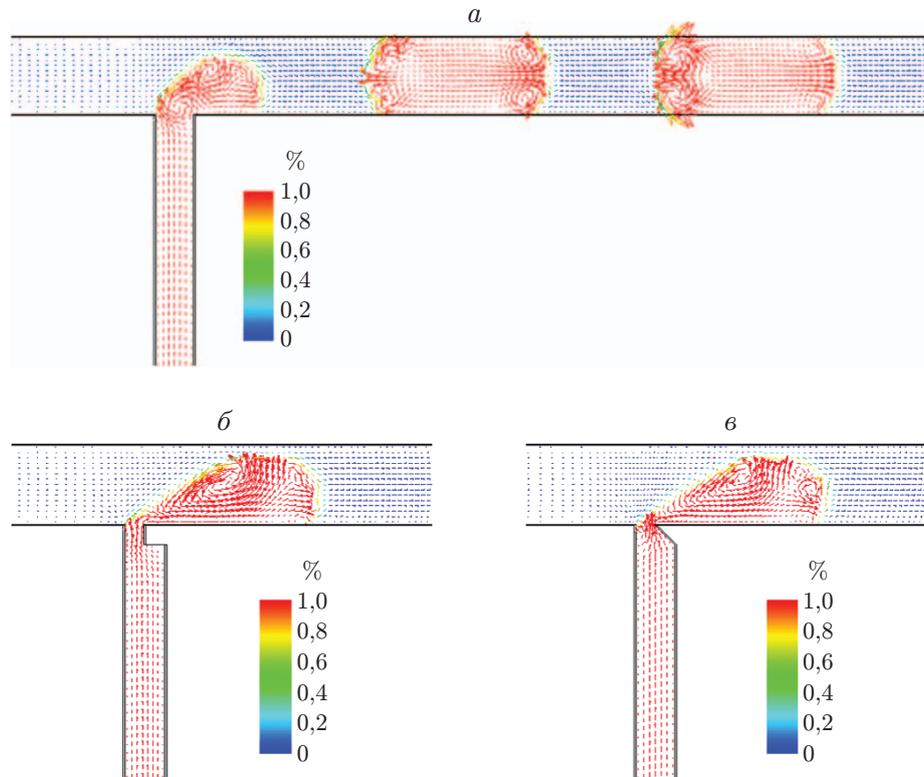


Рис. 8. Поля вычисленных объемных долей и вектора скорости формирования капли в центральной плоскости микроканала при  $Ca = 4,7 \cdot 10^{-3}$ ,  $Q_R = 1,49$ :  
 а — модель А, б — модель В, в — модель С

свидетельствуют о том, что компонента потока импульса диспергируемой жидкости существенно зависит от геометрии соединения и оказывает воздействие на длину микрокапли и частоту генерации. Это обусловлено тем, что отношение площади межфазной поверхности к объему микрокапли на стадии ее развития непосредственно связано с отношением потоков импульса несущей и диспергируемой жидкостей.

На рис. 8,б,в показаны вычисленные поля объемных долей и векторов скорости двух несмешивающихся жидкостей для моделей В и С соответственно. Видно, что поля векторов скорости для этих моделей подобны во всех областях, кроме области вблизи переднего края капли. Капли пара противорвращающихся вихрей (см. рис. 8,в) более отчетливо видны в модели с постепенным сужением канала выше по течению, чем в модели с резким сужением выше по течению. У моделей D–G при тех же значениях  $Ca$ ,  $Q_R$  поля вектора скорости аналогичны полям для моделей В, С.

4.3. *Влияние отношения объемных расходов на формирование микрокапли.* На рис. 9 показаны зависимость вычисленной безразмерной длины микрокапли  $l_w/l$  от  $Q_R$  для модели А при  $Ca = 4,7 \cdot 10^{-3}$ , а также соответствующие результаты, полученные в работах [10, 29–31]. Аппроксимирующая кривая регрессии определяется уравнением

$$l_w/l = 2 + \alpha Q_R, \quad \alpha = 1, 2, 3. \quad (1)$$

Проведенное сравнение показало, что вычисленная длина капли зависит от объемного расхода. Различие расчетных зависимостей, полученных в настоящей работе, и зависимостей, полученных в работе [10], при больших значениях  $Q_R$  обусловлено использованием различных геометрических соотношений ( $Q_R = 0,5$  и  $Q_R = 0,33$ ). Отношение  $l_w/l$  увеличивается при увеличении  $Q_R$  и фиксированном значении  $Q_C$ . Однако при малых значениях  $Q_R$

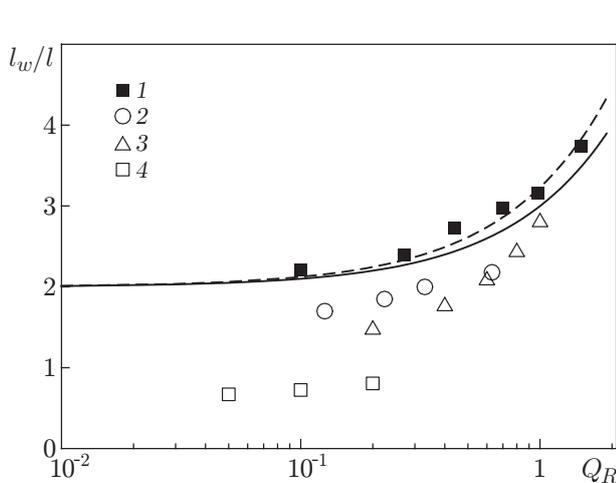


Рис. 9

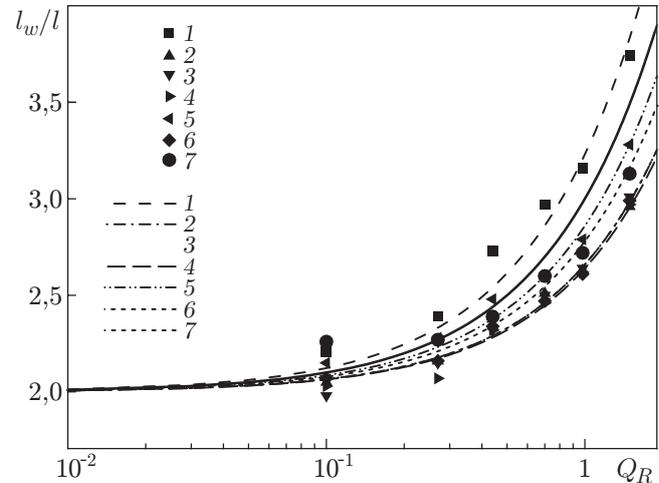


Рис. 10

Рис. 9. Зависимость  $l_w/l(Q_R)$  для модели А:

точки — результаты расчета (1 — настоящая работа ( $Ca = 4,7 \cdot 10^{-3}$ ), 2 — работа [29] ( $Ca = 2,323 \cdot 10^{-3}$ ), 3 — работа [30] ( $Ca = 5 \cdot 10^{-3}$ ), 4 — работа [31] ( $Ca = 10^{-2}$ )); линии — аппроксимирующие кривые регрессии (штриховая линия — настоящая работа, сплошная — работа [10])

Рис. 10. Зависимость  $l_w/l(Q_R)$  для исследованных моделей при  $Ca = 4,7 \cdot 10^{-3}$ :

точки — результаты расчета (1–7 — модели А–Г соответственно), линии — кривые аппроксимации (сплошная линия — работа [10], 1 — модель А ( $l_w/l = 2 + \alpha Q_R$ ,  $\alpha = 1,23$ ), 2 — модель В ( $l_w/l = 2 + \alpha Q_R$ ,  $\alpha = 0,66$ ), 3 — модель С ( $l_w/l = 2 + \alpha Q_R$ ,  $\alpha = 0,67$ ), 4 — модель D ( $l_w/l = 2 + \alpha Q_R$ ,  $\alpha = 0,64$ ), 5 — модель E ( $l_w/l = 2 + \alpha Q_R$ ,  $\alpha = 0,86$ ), 6 — модель F ( $l_w/l = 2 + \alpha Q_R$ ,  $\alpha = 0,66$ ), 7 — модель G ( $l_w/l = 2 + \alpha Q_R$ ,  $\alpha = 0,78$ ))

с увеличением этого параметра длина капли увеличивается постепенно, а при больших значениях  $Q_R$  с увеличением этого параметра увеличивается резко. При небольшом значении  $Q_R$  движущее давление  $Q_c$  определяет длину капли. Если импульс диспергируемой жидкости превышает определенное значение, импульсы диспергируемой и несущей жидкостей оказывают одинаковое влияние на длину капли.

На рис. 10 показана рассчитанная зависимость  $l_w/l(Q_R)$  для исследованных моделей. Кривая регрессии  $l_w/l(Q_R)$  определяется уравнением (1). В случае моделей E, G длина генерируемой капли больше, чем в других моделях, за исключением модели А. На рис. 2 видно, что угол наклона поверхности диспергируемой жидкости к несущей жидкости выше по течению для моделей E, G равен  $45^\circ$ , для остальных моделей —  $90^\circ$ . Можно предположить, что часть диспергируемой жидкости, выталкиваемая в несущую жидкость под углом наклона  $45^\circ$ , испытывает меньшее напряжение сдвига, чем жидкость, выталкиваемая под углом  $90^\circ$ . На рис. 11, 12 приведены зависимости  $St$ ,  $l_o/l$  от  $Q_R$  для исследованных моделей соответственно. Кривые регрессии определяются уравнениями

$$St = c + Q_R^d, \quad l_o/l = aQ_R^b.$$

На рис. 11 видно, что частота генерации капли увеличивается при увеличении  $Q_R$ , увеличение импульса диспергируемой жидкости и конструктивное сужение канала также способствуют увеличению частоты генерации капли. Однако на рис. 12 видно, что  $l_o/l$  уменьшается с увеличением  $Q_R$ .

**Заключение.** С использованием результатов визуализации течения на ПДМС-чипах и осредненных по числу Рейнольдса ламинарных уравнений Навье — Стокса, решаемых

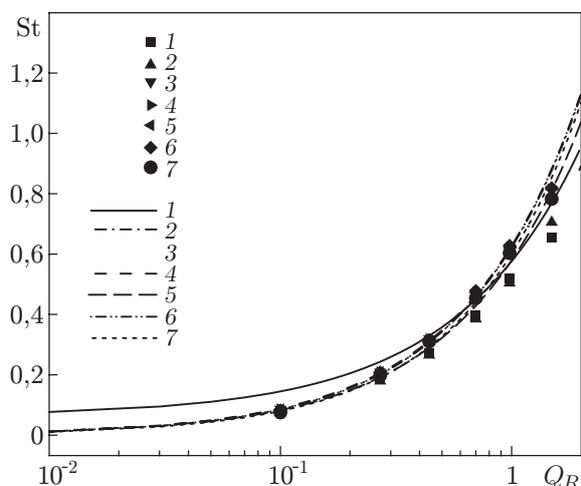


Рис. 11

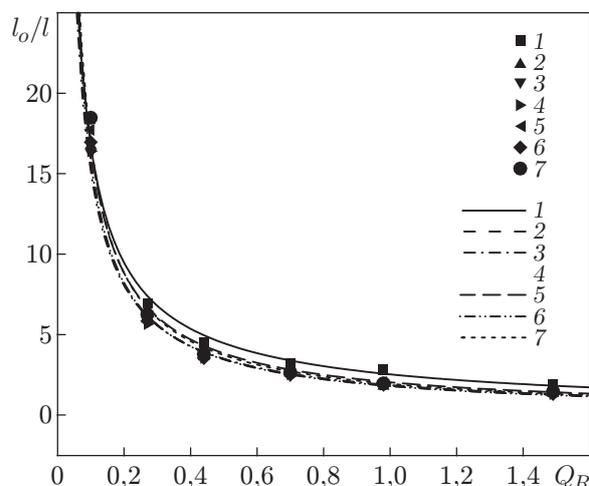


Рис. 12

Рис. 11. Зависимость  $St(Q_R)$  для исследованных моделей при  $Ca = 4,7 \cdot 10^{-3}$ :

точки — результаты расчета (1–7 — модели А–Г соответственно), линии — кривые аппроксимации (1 — модель А ( $St = c + Q_R^d$ ,  $c = 0,51$ ,  $d = 0,80$ ), 2 — модель В ( $St = c + Q_R^d$ ,  $c = 0,62$ ,  $d = 0,86$ ), 3 — модель С ( $St = c + Q_R^d$ ,  $c = 0,62$ ,  $d = 0,84$ ), 4 — модель D ( $St = c + Q_R^d$ ,  $c = 0,63$ ,  $d = 0,85$ ), 5 — модель Е ( $St = c + Q_R^d$ ,  $c = 0,58$ ,  $d = 0,84$ ), 6 — модель F ( $St = c + Q_R^d$ ,  $c = 0,65$ ,  $d = 0,86$ ), 7 — модель G ( $St = c + Q_R^d$ ,  $c = 0,60$ ,  $d = 0,88$ ))

Рис. 12. Зависимость  $l_o/l(Q_R)$  для исследованных моделей при  $Ca = 4,7 \cdot 10^{-3}$ :

точки — результаты расчета (1–7 — модели А–Г соответственно), линии — кривые аппроксимации (1 — модель А ( $l_o/l = aQ_R^b$ ,  $a = 2,53$ ,  $b = -0,82$ ), 2 — модель В ( $l_o/l = aQ_R^b$ ,  $a = 1,81$ ,  $b = -0,94$ ), 3 — модель С ( $l_o/l = aQ_R^b$ ,  $a = 1,86$ ,  $b = -0,91$ ), 4 — модель D ( $l_o/l = aQ_R^b$ ,  $a = 1,81$ ,  $b = -0,92$ ), 5 — модель Е ( $l_o/l = aQ_R^b$ ,  $a = 2,04$ ,  $b = -0,91$ ), 6 — модель F ( $l_o/l = aQ_R^b$ ,  $a = 1,80$ ,  $b = -0,94$ ), 7 — модель G ( $l_o/l = aQ_R^b$ ,  $a = 1,94$ ,  $b = -0,94$ ))

мых с помощью конечно-объемной разностной схемы, исследован динамический процесс формирования микрокапель в Т-образном микроканале. Рассмотрено семь тестовых моделей с различной геометрией соединения. Расчеты проводились при  $Ca = 4,7 \cdot 10^{-3}$ ,  $Q_R = 0,01 \div 1,49$ .

Результаты визуализации течения в ПДМС-микросхеме и расчета статического давления по численной модели показывают, что характеристики формирования микрокапель в Т-образном микроканале зависят от градиента силы давления, сдвиговой силы на стенках соединения и силы поверхностного натяжения на поверхности раздела. Полученные результаты также свидетельствуют о том, что способ формирования микрокапель зависит от конструкции соединения постепенно сужающегося второго канала с главным каналом. Наличие множественных вихрей внутри каждой микрокапли означает, что в биочипе с каналом формирования капель можно достигнуть быстрого смешивания.

При постоянных значениях  $Q_R$  асимметричное и симметричное сужения канала для диспергируемой фазы позволяют уменьшить длину микрокапли. В проведенном исследовании это позволяет уменьшить значение  $l_w/l$  на 12,3–20,8 % по сравнению с основной моделью А. Результаты расчетов, выполненных в данной работе, показывают, что значения  $l_w/l$ ,  $St$  увеличиваются по экспоненциальному закону с увеличением  $Q_R$  и не зависят от геометрии соединения второго канала. Для кривых  $l_o/l$  имеет место противоположная тенденция. Данное исследование также обеспечивает полные корреляции характеристик микрокапель для всех рассмотренных моделей Т-образного микроканала.

## ЛИТЕРАТУРА

1. **Burns M. A., Johnson B. N., Brahmasandra S. N., et al.** An integrated nanoliter DNA analysis device // *Science*. 1998. V. 282. P. 484–487.
2. **Wang W., Li Z. X., Luo R., et al.** Droplet-based microoscillating-flow PCR chip // *J. Micromech. Microengng.* 2005. V. 15. P. 1369–1377.
3. **Song H., Tice J. D., Ismagilov R. F.** A microfluidic system for controlling reaction networks in time // *Angew. Chem. Intern. Ed.* 2003. V. 42. P. 768–772.
4. **Tice J. D., Song H., Lyon A. D., Ismagilov R. F.** Formation of droplets and mixing in multiphase microfluidics at low values of the Reynolds and the capillary numbers // *Langmuir*. 2003. V. 19. P. 9127–9133.
5. **Song H., Bringer M. R., Tice J. D., et al.** Experimental test of scaling of mixing by chaotic advection in droplets moving through microfluidic channels // *Appl. Phys. Lett.* 2003. V. 83. P. 4664–4666.
6. **Tice J. D., Lyon A. D., Ismagilov R. F.** Effects of viscosity on droplet formation and mixing in microfluidic channels // *Anal. Chim. Acta.* 2004. V. 507. P. 73–77.
7. **Murshed S. M. S., Tan S. H., Nguyen N. T., et al.** Microdroplet formation of water and nanofluids in heat-induced microfluidic T-junction // *Microfluid Nanofluid.* 2009. V. 6. P. 253–259.
8. **Nguyen N. T., Ting T. H., Yap Y. F., et al.** Thermally mediated droplet formation in microchannels // *Appl. Phys. Lett.* 2007. V. 91. P. 084102.
9. **Thorsen T., Roberts R. W., Arnold F. H., Quake S. R.** Dynamic pattern formation in a vesicle-generating microfluidic device // *Phys. Rev. Lett.* 2001. N 6. P. 4163–4166.
10. **Garstecki P., Fuerstman M. J., Stone H. A., Whitesides G. M.** Formation of droplets and bubbles in a microfluidic T-junction — scaling and mechanism of break-up // *Lab. Chip.* 2006. N 6. P. 437–446.
11. **Korczyk P. M., Cybulski O., Makulska S., Garstecki P.** Effects of unsteadiness of the rates of flow on the dynamics of formation of droplets in microfluidic systems // *Lab. Chip.* 2011. N 11. P. 173–175.
12. **Anna S. L., Bontoux N., Stone H. A.** Formation of dispersions using “flow focusing” in microchannels // *Appl. Phys. Lett.* 2003. V. 82. P. 364–366.
13. **Guillot P., Colin A.** Stability of parallel flows in a microchannel after a T-junction // *Phys. Rev. E.* 2005. V. 72. P. 066301.
14. **Van Steijn V., Kleijn C. R., Kreutzer M. T.** Predictive model for the size of bubbles and droplets created in microfluidic T-junctions // *Lab. Chip.* 2010. N 10. P. 2513–2518.
15. **Abrahamse A. J., Van der Padt A., Boom R. M., De Heij W. B. C.** Process fundamentals of membrane emulsification: Simulation with CFD // *AIChE J.* 2001. V. 47. P. 1285–1291.
16. **Rayner M., Trägårdh G., Trägårdh C., Dejmek P.** Using the surface evolver to model droplet formation processes in membrane emulsification // *J. Colloid Interface Sci.* 2004. V. 279. P. 75–185.
17. **Van der Graaf S., Nisisako T., Schroën C. G. P. H., et al.** Lattice Boltzmann simulations of droplet formation in a T-shaped microchannel // *Langmuir*. 2006. V. 22. P. 4144–4152.
18. **Menech M. D.** Modeling of droplet break up in a microfluidic T-shaped junction with a phase-field model // *Phys. Rev. E.* 2006. V. 73. P. 031505.
19. **Sang L., Hong Y., Wang F.** Investigation of viscosity effect on droplet formation in T-shaped microchannels by numerical and analytical methods // *Microfluid Nanofluid.* 2009. N 6. P. 621–635.

20. **Protiere S., Bazant M. Z., Weitz D. A., Stone H. A.** Droplet breakup in flow past an obstacle: A capillary instability due to permeability variations // *Europhys. Lett.* 2010. V. 92. P. 54002.
21. **Hirt C. W., Nichols B. D.** Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries // *J. Comput. Phys.* 1981. V. 39. P. 201–225.
22. **Brackbill J. U., Kothe D. B., Zemach C.** A continuum method for modeling surface tension // *J. Comput. Phys.* 1992. V. 100. P. 335–354.
23. **Youngs D. L.** Time-dependent multi-lateral flow with large fluid distortion // *Numerical methods for fluid dynamics* / Ed. by K. Baines, M. Morton. N. Y.: Acad. Press, 1982. P. 273–285.
24. **Rider W. J., Kothe D. B.** Reconstructing volume tracking // *J. Comput. Phys.* 1998. V. 141. P. 112–152.
25. **Dangla R., Gallaire F., Baroud C. N.** Microchannel deformations due to solvent-induced PDMS swelling // *Lab. Chip.* 2010. N 10. P. 2972–2978.
26. **Holden M. A., Kumar S., Beskok A., Cremer P. S.** Microfluidic diffusion diluter: bulging of PDMS microchannels under pressure-driven flow // *J. Micromech. Microengng.* 2003. V. 13. P. 412–418.
27. **Gervais T., El-Ali J., Gunther A., Jensen K. F.** Flow-induced deformation of shallow microfluidic channels // *Lab. Chip.* 2006. N 6. P. 500–507.
28. **Hardy B. S., Uechi K., Zhen J., Kavehpour H. P.** The deformation of flexible PDMS microchannels under a pressure driven flow // *Lab. Chip.* 2009. N 9. P. 935–938.
29. **Raj R., Mathur N., Buwa V. V.** Numerical simulations of liquid-liquid flows in microchannels // *Indust. Engng Chem. Res.* 2010. V. 49. P. 10606–10614.
30. **Liu H., Zhang Y.** Droplet formation in a T-shaped microfluidic junction // *J. Appl. Phys.* 2009. V. 106. P. 034906.
31. **Gupta A., Murshed S. M. S., Kumar R.** Droplet formation and stability of flows in a microfluidic T-junction // *Appl. Phys. Lett.* 2009. V. 94. P. 164107.

*Поступила в редакцию 27/III 2013 г.*

---