

DOI: 10.13718/j.cnki.xdzk.2021.08.019

微通道内受限液滴强化传质机理的 数值模拟研究

任 焘¹, 龙 威¹, 宋子璇¹, 刘 云¹, 宋鹏云²

1. 昆明理工大学 机电工程学院, 昆明 650500; 2. 昆明理工大学 化学工程学院, 昆明 650500

摘要: 微流控芯片内形成的微米级液滴, 由于具有极大的比表面积, 可以有效提高其混合速度和传热效果, 从而有效缩短反应时间, 在分析科学和材料合成领域具有显著优势, 但微尺度下液滴内部强化机制和作用原理目前尚不明确。基于微尺度多相流液滴动力学的基本理论, 建立了十字型共聚焦微通道模型, 采用相场方法分析了微通道内部液滴的流场特性及浓度分布规律, 进一步分析了微通道结构尺寸、毛细数、水含率对液滴混合效率的影响, 明确了微通道内强化传质的微观机理。研究发现: 通道宽度降低, 液滴受到壁面的压力增大, 会使液滴内部近壁面处产生对称涡旋, 从而强化液滴内部对流传质系数; 通道宽度为 $10\ \mu\text{m}$ 时, 液滴混合效率最高, 可达 96.5% ; 毛细数为 2.3×10^{-3} 时液滴的混合效率约为 63.6% , 是毛细数为 5.38×10^{-3} 的两倍; 水含率范围在 $0.2 \sim 0.6$ 范围内时存在最优值, 即水含率为 0.4 时混合效率可达 79% ; 相比于直通通道, 直角型通道混合效率增长 77.6% 。

关键词: 受限液滴; 强化传质; 混合效率; 共聚焦; 水含率

中图分类号: V211.1⁺7

文献标志码: A

文章编号: 1673-9868(2021)08-0152-09

微通道内受限液滴由于比表面积大和扩散距离短的特征, 在化学分析、材料合成和药物检测等领域可以有效缩短传质时间、提高混合传质效率, 并且能大大减少试剂的消耗量^[1-3], 因此, 微液滴技术被广泛应用于材料合成^[4]、药物筛选^[5-6]、蛋白质结晶^[7-8]等领域。当利用微通道内受限液滴作为微混合器时, 通道的结构参数、流体物性和入口流速等工作参数决定了受限液滴的流动形式、几何参数和壁面接触等特征, 从而直接影响液滴的传质过程和混合效果^[9]。因此, 明确微通道内受限液滴的内部强化传质机理及影响因素具有重要的科学研究意义和实践指导价值。

近年来, 国内外学者就微液滴混合器开展了丰富多样的研究。2003 年, Song 等^[10]首次发现, 当液滴流经弯曲通道时, 液滴内部试剂的混合速率会大大加快。Muradoglu 等^[11]通过对大量示踪粒子的跟踪, 分析了弯曲微通道中毛细数、黏度对混合过程的影响, 发现黏度比存在一个阈值, 低于该阈值时黏度比对混合的影响迅速减小。Cui 等^[12]在长 $1\ \text{mm}$ 和宽 $50\ \mu\text{m}$ 的通道中以一定角度内嵌微柱阵列, 通过改变液滴的运动轨迹使 W/O 微液滴内部产生不对称的涡流, 从而加强了液滴内部混合效果。Lim 等^[13]研制了一种交叉导流式微混合器, 可以在 $200\ \mu\text{m}$ 处达到 90% 以上的混合效率。夏国栋等^[14]通过对非对称分离重组扇形空腔微混合器进行三维数值模拟, 发现当 Re (雷诺数)较小时, 混合强度随着 Re (雷诺

收稿日期: 2021-04-09

基金项目: 国家自然科学基金-云南联合基金项目(U1302271); 云南省科技厅面上项目(2018FB096); 国家自然科学基金项目(51766006)。

作者简介: 任 焘, 硕士研究生, 主要从事微机电系统研究。

通信作者: 龙 威, 教授, 博士研究生导师。

数)的增大而逐渐减小. Feng 等^[15]通过三维数值分析与实验相结合的方法, 提出一种三维交叉结构微混合器, 该微混合器采用“X”和“rX”两种交叉单元进行交替重复排列, 可以实现混合增强. Jiang 等^[16]利用双光子荧光成像显微镜技术对弯曲通道内液滴内部的混沌对流动力学进行了可视化研究, 实现了在 $5 \mu\text{s}$ 对液滴内部的混合形态进行定量评价. 综上可知, 现有研究主要通过改变通道结构增加液滴混合效率^[11], 对于液滴内物质输运机理的认识多停留在对称流动循环模型^[17], 且大多数学者只分析改变通道结构对传质效果的影响, 而对于微通道内强化传质的微观机制目前尚未见报道. 因此, 本文以微尺度多相流液滴动力学为基础, 通过相场方法对微通道内受限液滴内外两相流的流场特性进行数值计算和分析, 结合显微粒子图像测速技术, 分析微米尺度下矩形截面微通道中受限液滴实现强化混合传质的微观机制和工作原理, 进一步分析微通道结构参数、毛细数和含水率等因素对相间浓度分布及混合指数的影响, 为微混合器的设计研究提供理论支持.

1 理论研究

1.1 物理模型

本文采用如图 1 所示的十字形共聚焦液滴发生器. 微流控芯片由 PDMS 和玻璃两层片基组成, 通道及进样口位于上层 PDMS 内, 分散相分别由 inlet 1 和 inlet 2 以相同流速进入, 连续相由 inlet 3 以不同的流速进入微通道, 两相在十字交汇处接触, 以流动共聚焦的方式生成微液滴.

在连续相入口持续不断地推动下, 一系列微液滴在主通道内沿流道方向运动, 同时液滴内部两相发生接触扩散混合, 当混合按一定比例完成后, 从主通道出口 outlet 流出, 并完成后续分离, 具体的通道结构参数如表 1 所示.

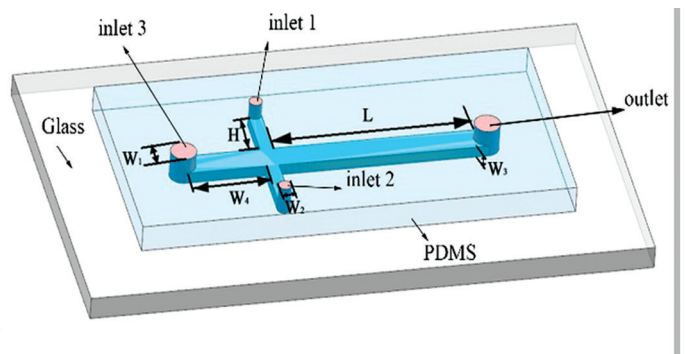


图 1 微通道芯片结构示意图

表 1 微通道结构参数

结构参数	$W_1/\mu\text{m}$	$W_2/\mu\text{m}$	$W_3/\mu\text{m}$	L/mm	$H/\mu\text{m}$
数值	10~50	25	50	1.1	50

1.2 数学模型

由于尺度效应的影响, 微米级通道内两相流的相界面厚度在 10^{-10} m 量级, 相当于液体分子的平均间距, 此时相界面内的流体物性参数存在跳跃式的突变, 这种不连续性导致传统的连续流体假设不再成立, 界面附近物性相关参数及其导数无法通过 N-S 方程进行求解. 因此, 本文采用 Boltzmann 方程描述微通道内两相流的界面空间分布及其动力学特性, 并利用弥散界面特征的相场方法对微通道内受限液滴及其周围流场进行计算和分析.

利用分子碰撞间隙理论写出的 Boltzmann 方程的一般表达式为

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \boldsymbol{v} \cdot \nabla f + \boldsymbol{F} \cdot \frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{p}} = \frac{f_0 - f}{\tau(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p})} \quad (1)$$

式中: f 表示流体分子随时间 t 、位置矢量 \boldsymbol{r} 及动量 \boldsymbol{p} 变化的分布函数, $f(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p}, t)$; f_0 表示平衡态下流体分子的分布函数; \boldsymbol{v} 表示不与其他流体分子发生碰撞的分子的速度, m/s ; \boldsymbol{F} 表示作用在粒子上的力, N ; $\tau(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p})$ 表示松弛时间, 它是位置与动量的函数.

为了研究粒子的能量输运, 需要求解 Boltzmann 方程以获得分布函数 $f(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p}, t)$, 于是将单位面积的能量流率写作:

$$\mathbf{q}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mu} \mathbf{v}(\mathbf{r}, t) f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) \varepsilon(\mathbf{p}) \quad (2)$$

式中: $\mathbf{q}(\mathbf{r}, t)$ 为能量矢量, $\mathbf{v}(\mathbf{r}, t)$ 为速度矢量, $\varepsilon(\mathbf{p})$ 是作为动量函数的粒子能量。

微通道内的液滴在没有外界扰动时, 液滴内的物质传输过程主要是通过浓度差造成的浓度梯度进行分子扩散, 由菲克定律:

$$J = -D \frac{\partial C}{\partial x_j} \quad (3)$$

式中: J 为扩散通量, $\text{mol}/(\text{m}^2 \cdot \text{s})$; D 为扩散系数, m^2/s ; C 为物质组分的浓度, mol/m^3 ; 负号表示扩散方向与浓度梯度方向相反。浓度扩散微分方程可由菲克第二定律描述:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D \frac{\partial C}{\partial x} \right) \quad (4)$$

由式(4)可知, 此时微通道内浓度随时间的变化与浓度扩散的二阶导数成正比。物质的传输过程中不但要考虑扩散, 还需要考虑流体运动对样品浓度分布的影响, 此时需要在菲克定律基础上增加对流项^[18], 因此, 物质扩散标量方程为

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla C = D \nabla^2 C \quad (5)$$

式中: \vec{v} 为流动速度, m/s ; D 为扩散系数, m^2/s ; t 为时间, s ; ∇ 为 Laplace 算子。

为了明确入口流速对液滴生成及混合效率的影响, 定义微通道入口处分散相流速与微通道内分散相和连续相的总流速之比为水含率 ε_d 。保持微通道总流速不变, 改变 ε_d 的大小, 即改变微通道内连续相与分散相的流速, 其计算公式为

$$\varepsilon_d = \frac{U_d}{U_d + U_c} \quad (6)$$

式中: U_d 为分散相速度, m/s ; U_c 为连续相速度, m/s 。

为了定量描述微液滴内混合程度, 定义混合指数 M_{de} :

$$M_{\text{de}} = \left(1 - \frac{\int_0^w |C - C_{\infty}|}{\int_0^w |C_0 - C_{\infty}|} \right) \times 100\% \quad (7)$$

式中: w 为通道宽度, μm ; C 为液滴平面各点浓度, C_0 为初始浓度, mol/m^3 , 无因次化后为 1.0; C_{∞} 是完全混合时的浓度, mol/m^3 , 无因次化后为 0.5。

2 数值模拟

2.1 边界条件

本文采用 Fluent 的相界面法进行二维数值计算: VOF 表面张力的处理采用连续表面张力模型 CSF, 界面曲率采用 PLIC 界面重构法, 采用 UDS 欧拉-示踪法来模拟液滴中浓度的扩散, 其中 inlet 1 浓度为 1 mol, inlet 2 浓度为 0, 扩散系数为 $10^{-20} \text{m}^2/\text{s}$ 。3 个入口均采用速度入口, 出口为压力出口, 固体壁面无滑移, 时间步长设置为 $1 \times 10^{-5} \text{s}$ 。各相工质的物性参数如表 2 所示。

表 2 连续相与分散相的物性参数

物性参数	黏度/ (Pa · s)	密度/ (kg · m ⁻³)	界面张力/ (N · m ⁻¹)	接触角/ °	流速/ (m · s ⁻¹)
连续相(硅油)	0.01	1 450	0.013	135	0.05
分散相(去离子水)	0.001	998			0.02

2.2 网格无关性验证

为了消除网格密度对计算结果有效性造成的影响, 本文首先进行网格独立性检验. 选取如图 1 所示的微通道模型, 网格划分采用四边形网格, 连续相入口速度为 0.05 m/s , 离散相入口速度为 0.03 m/s 时, 液滴混合指数随网格数的变化如图 2 所示.

由图 2 可知, 微液滴的混合指数随网格数呈先上升后稳定的趋势, 当网格数大于 20 000 时, 混合指数趋于稳定, 直通道混合指数保持在 41.5% 左右, 说明模型网格数在 2 万以上可保证计算结果的准确性. 综合考虑计算效率和计算结果的准确度, 本文的数值计算选取网格数为 21 674.

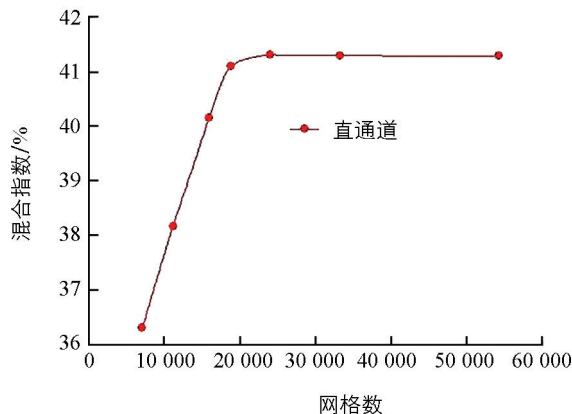


图 2 网格独立性验证

3 流场特性分析

本文采用图 3 所示的实验装置, 对微通道内受限液滴的混合过程进行墨水实验观测. 对比图 4 所示的数值计算结果, 实验观测呈现相似的现象. 如图 4 所示, 液滴在形成之初, 来自上下两个进口通道的蓝墨水和去离子水汇合接触, 相互挤压靠近, 此时可以看到两水相之间还有比较清晰的液膜分界面. 当受到连续相不断变大的剪切力作用, 染色水相和无色水相之间的界面逐渐融合, 形成一个受限液滴, 但由于两者内部着色颗粒的浓度差巨大, 因此在同一个水相液滴内部仍能明显看到颜色梯度. 随着液滴向下游运动, 着色颗粒在液滴内部逐渐混合弥散, 在 $187 \mu\text{m}$ 处的距离, 着色颗粒基本均匀分布在液滴内部.

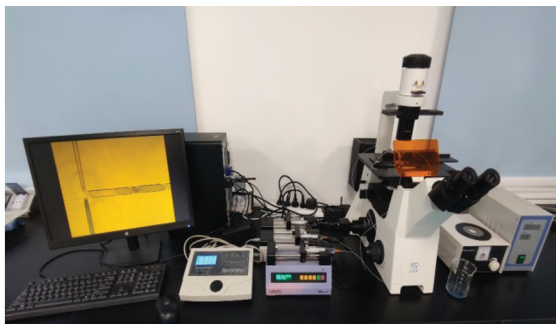


图 3 液滴混合观测实验装置



图 4 蓝墨水液滴混合实验图

为了明确受限微液滴内着色颗粒实现如此快速高效混合的微观机制, 本文通过数值计算的方法进一步分析微通道内受限液滴生成后其内部流场、两相流液界面、液相与通道固壁面之间的流场特性. 由于入口流速较低, 连续相以较低的雷诺数推动分散相液滴向通道下游运动, 此时两相流界面间主要通过分子扩散的形式进行混合. 同时, 对比数值计算和实验观测结果可以明显发现, 在液滴上下表面靠近通道内壁处存在明显的连续相液膜, 它被分散相液体紧紧挤压在固壁面一侧, 其局部黏度和密度等物性参数与液滴前后两侧连续相有显著不同, 并且由于分散相液滴的挤压作用, 呈现出一定的波纹状形态, 如图 5 所示. 另一方面, 在分散相液滴内部靠近上下界面处形成明显的螺旋形流动, 这也是

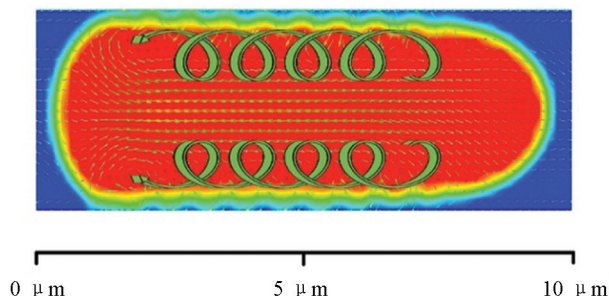


图 5 通道宽度 $30 \mu\text{m}$ 时液滴内部速度矢量图

使得液滴上下表面液膜呈现一定波纹状的主要原因. 这是由于随着通道宽度减小($<45 \mu\text{m}$), 挤压液膜受到壁面的范德华力作用增强, 同时挤压液膜内部在前后压差驱动下仍旧保持着水平方向的低速流动, 这就增大了壁面对挤压液膜的摩擦力, 从而使液滴内部靠近壁面的部分产生密集且对称的螺旋线型涡旋, 这种液滴内部的流动循环方式一方面将两相界面间由于浓度梯度驱动的液体分子有旋流动增强, 另一方面可以增强水平方向的对流扩散系数, 使得染色颗粒在液滴内部三维方向实现均匀有序的扩散. 由于液滴的尺寸在微米量级, 所以这种液滴内部的对流扩散距离也在微米量级, 因此大大地增强了液滴内部扩散系数, 客观上迅速提高了作为微混合器的液滴内部的混合效率. 基于以上分析可知, 微液滴混合器内部混合扩散效率同时受液液两相界面作用、液固界面挤压膜作用和液滴内循环结构几方面共同影响和决定, 因此, 有必要进一步分析通道结构、壁面粗糙度和亲疏水性、毛细数、入口流速、流体介质物性参数等因素对微液滴混合器内部流场特征和混合效率的影响.

4 影响因素

4.1 微通道结构

由实验观测结果可知, 减小通道宽度可以有效提高微通道内的液滴混合速率, 因此本文首先分析微通道宽度对液滴内混合指数的影响.

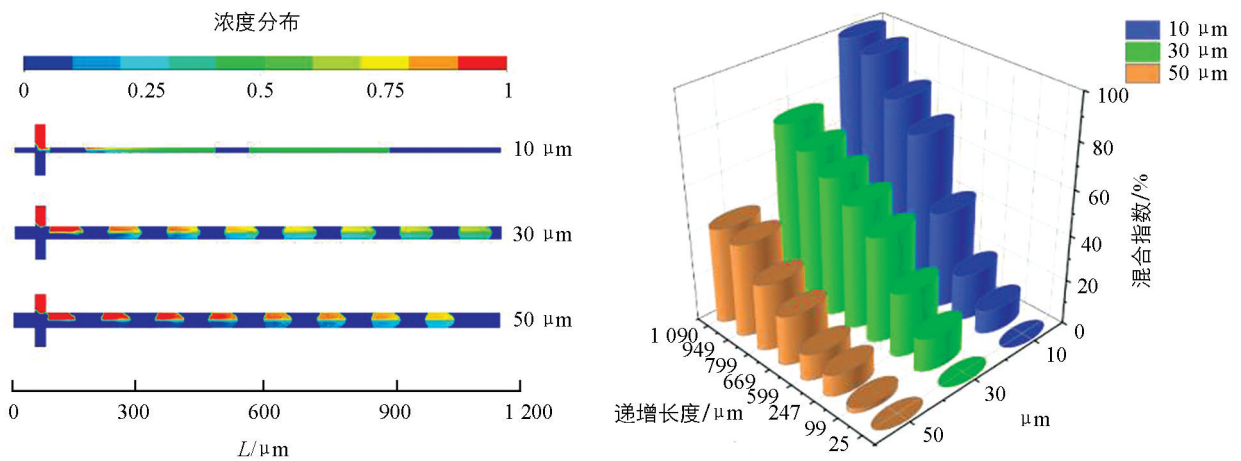


图 6 通道宽度对液滴混合指数的影响

分别取 $10, 30, 50 \mu\text{m}$ 的通道宽度与液滴的混合效率进行定量分析, 如图 6 所示, 在相同通道长度下, 液滴内混合效率随通道宽度的减小而不断增加, 通道宽度为 $30 \mu\text{m}$ 和 $50 \mu\text{m}$ 的混合指数的增长呈减缓的趋势, 而 $10 \mu\text{m}$ 宽度下的液滴的混合指数呈现较快的增长趋势; 在通道宽度为 $10 \mu\text{m}$ 时通道宽度过小, 传质扩散距离减小, 并且生成液滴呈长条状与通道壁面接触面积最大, 导致在生成液滴时就已达到混合完全状态, 在生成长条状液滴之后, 就已呈现绿色, 无明显传质过程; 在距离微通道入口约 $1090 \mu\text{m}$ 处, 通道宽度为 $10 \mu\text{m}$ 的混合效率是 $50 \mu\text{m}$ 的 2.5 倍, 可达 99.8%, 而 $30 \mu\text{m}$ 通道宽度的混合效率比 $50 \mu\text{m}$ 多 32.2%. 通道宽度为 $10 \mu\text{m}$ 时, 液滴与壁面接触面积较大, 壁面对液膜的压力较大, 导致液滴内部的分子内摩擦力不断增加, 传质扩散距离减小, 从而增强液滴内分子流动循环, 加快液滴内部传质; 当通道宽度增加到 $50 \mu\text{m}$ 时, 受限液滴与壁面接触面积减小, 壁面对液滴内摩擦作用减小, 分子内循环作用减弱, 混合效率降低. 尽管通道宽度为 $10 \mu\text{m}$ 时, 受限液滴传质过程最短, 混合效率最高, 但是其液滴长度最长, 对于细胞培养, 药物运输等相关方面应用适用性较差; 通道宽度为 $30 \mu\text{m}$ 时, 液滴生成频率最高, 可达 35 Hz 且混合效率可达 75% 以上, 因此通道宽度为 $30 \mu\text{m}$ 时, 为液滴传质混合过程的最佳微通道宽度.

虽然改变通道宽度能较为稳定地加快液滴内的物质混合过程, 但是对于要求结构紧凑效率高的微混合器而言, 过细的通道宽度必将影响微液滴的生成频率, 此时便可以通过改变通道形状的方法调节固液接触情况, 从而改变液滴在受挤压的两侧的受力情况, 进而影响挤压液膜对液滴表面的剪切作用和动量矩, 最终实现对液滴内循环结构的影响和利用. 本文建立了如图 7 所示的直通道型微通道(ST. L 型)、三角型微通道(ST. Q 型)、直角型微通道(ST. K 型)和梯形型微通道(ST. Z 型)结构 4 种通道模型, 固定通道宽度为 $50 \mu\text{m}$, 定量分析通道结构对液滴混合的影响.

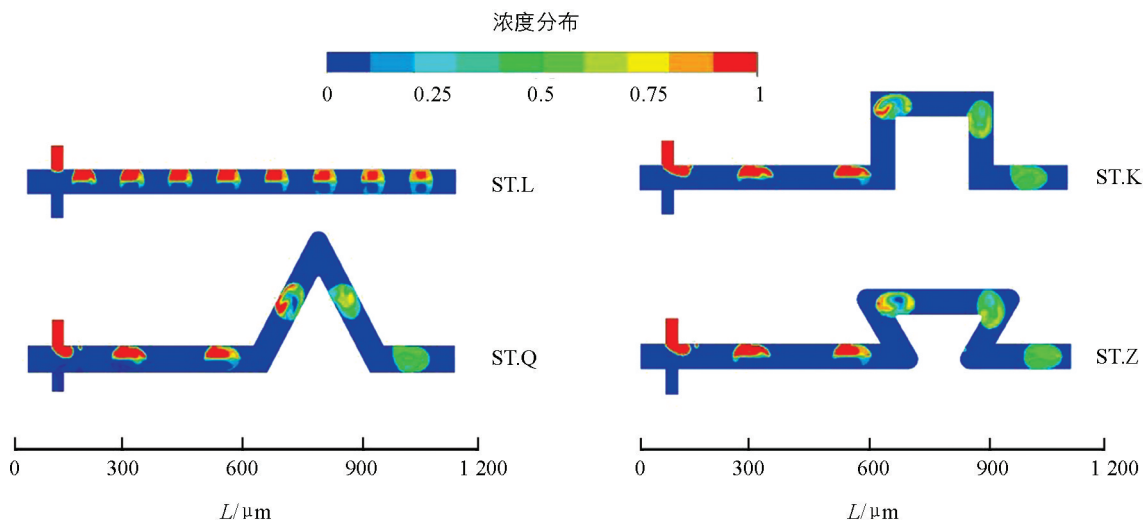


图 7 不同通道结构下浓度分布云图

如图 7 可知, ST. L 型微通道中液滴内部的混合效率较慢, 液滴到出口时混合指数只有 20%; ST. Q, ST. K, ST. Z 型的直通道段中的液滴与壁面的接触面积明显变小, 液滴经过弯折段后, 液滴混合效率都达到 98% 以上; 但是, ST. K 型通道的液滴混合效果优于 ST. Q 型和 ST. Z 型, 混合指数可达 99.2%. 这主要是由于: 首先, 微通道内的液阻较大, 使得液滴前端呈子弹状, 可加快液滴内部混合的速率; 其次, 液滴在进入弯折段时, 由于通道截面发生改变, 使通道内产生局部涡流, 加快了液滴混合速率; 最后, ST. K 型通道弯折角为 90° , 液滴的翻转折叠更加充分剧烈, 更大程度地打破了液滴在直通道中原本对称的流动形态, 从而使得液滴上下两层的物质实现交换及混合.

由图 8 可知, ST. L 型通道的液滴混合效率仅为 20%; ST. K 型通道的液滴混合效率最高, 可达 99.2%, 比 ST. L 型提高了 4.96 倍, ST. Q 型和 ST. Z 型的混合效率近似, 均约为 97% 以上, 并且液滴在 ST. Q, ST. K 和 ST. Z 型通道中运动到 $400 \mu\text{m}$ 时, 液滴混合效率就已经达到 ST. L 型通道在通道出口处所达到的混合效率. 同时, 液滴在 $680 \mu\text{m}$ 处时, ST. K 型通道比 ST. L 型通道的混合效率高 17%; 但是 ST. Q, ST. K, ST. Z 型通道在 $1050 \mu\text{m}$ 处均能达到 95% 以上的混合效率, 是 ST. L 型通道的 5 倍左右. 这是由于通道结构改变, 通道横截面积发生变化, 导致液滴在微通道流动时, 不断受到挤压和弯折, 受限液滴内的传质由分子自由扩散转为对流扩散, 液滴内分子循环流动从对称循环流动变成不规则循环流动, 从而强化受限液滴内传质.

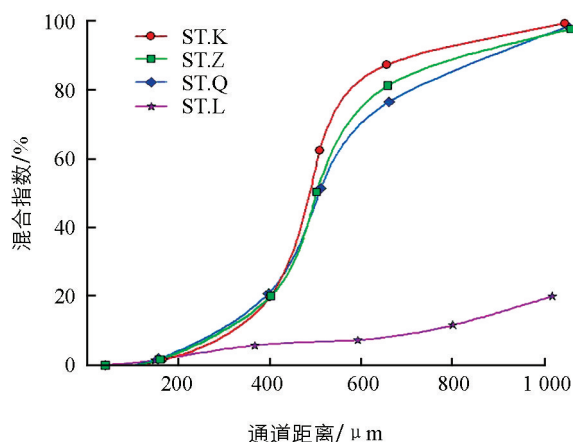


图 8 通道结构对混合指数的影响

4.2 毛细数

微通道中两相流界面间的作用效果主要受黏性作用和界面张力的影响,而黏性力与界面张力的相对重要性可以通过毛细数来表达,因此,研究毛细数能很好地分析黏性力和界面张力对液滴混合的影响。

如图 9 所示,随着毛细数的减小,直通道内液滴的混合指数呈线性增长.毛细数为 5.38×10^{-3} 时,液滴的混合指数最高约为 22%,毛细数为 3.85×10^{-3} 时,液滴的混合指数最高约为 45%,毛细数为 2.31×10^{-3} 时,液滴的混合效率是毛细数为 5.38×10^{-3} 的混合效率的 3 倍左右,可达 63%,这是由于在低毛细数下,界面张力引起的应力作用大于黏性应力,液滴界面将缩小成球形,液滴的表面能会转化一部分成为内能,加快液滴内部分子扩散运动,从而使混合更加充分。

4.3 水含率

水含率表征微通道内两相流的流速比.由于液滴在 $30 \mu\text{m}$ 的宽度下,微通道内液滴混合程度增长最为稳定.因此,本文选用了通道宽度为 $30 \mu\text{m}$ 的微通道研究液滴长度对液滴的混合效果的影响。

由图 10 可知,水含率为 0.6 时,液滴的混合效率为 62%;水含率为 0.2 时,液滴的混合效率是水含率为 0.6 的 1.15 倍,达 71.4%;水含率为 0.4 时,液滴的混合指数比水含率为 0.6 提高了 17%,可达 79%.这是由于受限液滴的传质不仅与接触壁面有关,还与两相流速有关,水含率为 0.2 时,虽然每个液滴经过通道的实际位移最长,但是液滴与壁面接触面积小,水含率为 0.6 时,虽然壁面接触面积大,但是每个液滴走过的实际位移最短;只有在水含率为 0.4 时,液滴走过的位移与壁面的接触面积达到最优值,但通过改变水含率,对液滴的强化传质影响较小。

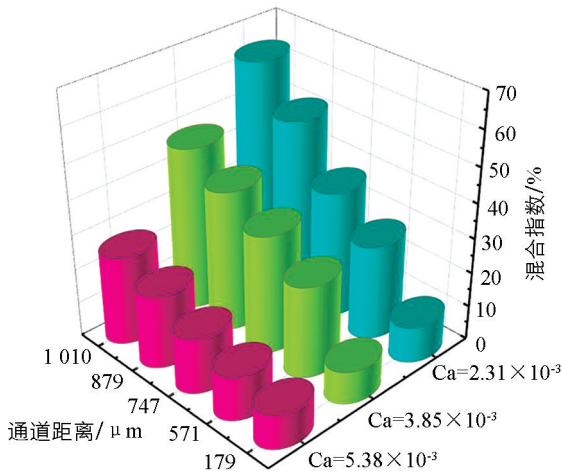


图 9 毛细数 Ca 对液滴混合指数的影响

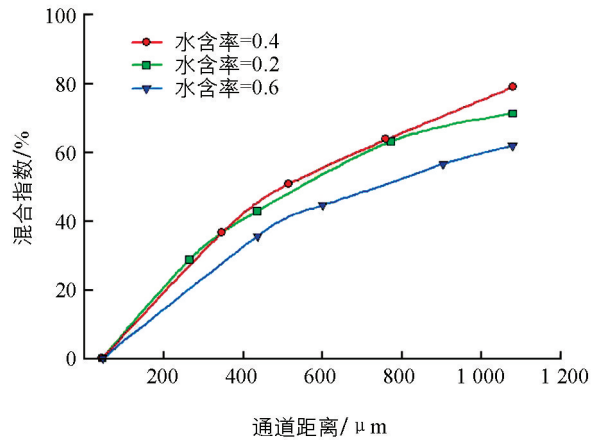


图 10 水含率对液滴混合指数的影响

5 结 论

本文通过数值模拟研究了微通道内受限液滴内传质情况,得到如下结论:

1) 明确了微通道内受限液滴实现强化传质的微观机制.在液滴上下表面靠近通道内壁处存在物性参数增强的连续相挤压膜,它在固壁面和分散相液滴的强力挤压下可以使局部液液扩散系数迅速增强,随着挤压作用越来越剧烈,挤压液膜会呈现出一定的波纹状.同时,由于壁面对挤压液膜的摩擦力,使液滴内部靠近壁面的部分产生密集且对称的螺旋线型涡旋,这种螺旋形内循环方式既增强了两相界面间液体分子的有旋流动,同时实现并增强了水平方向的对流扩散系数,因此迅速提高了受限液滴内部的混合效率。

2) 分析了微通道结构形状和通道宽度对微液滴混合器混合效率的影响.在相同通道长度下,减小微通

道的宽度可以有效减小局部传质扩散距离, 提高液滴内混合效率; 但是过细的通道宽度不仅带来加工制造的难度, 而且影响微液滴混合器的生成频率. 设置合理的直角弯道结构, 可以使液滴在经过弯道使两侧受力类型和大小发生改变, 从而改变挤压膜的长度和摩擦力作用效果, 同时通道截面发生改变, 使通道内产生局部涡流, 可以加快液滴内部混合的速率.

3) 明确了毛细数、通道宽度、水含率、通道结构对液滴混合效率的影响. 毛细数降低 2 倍, 液滴混合效率增加 3 倍; 通道宽度从 $50\ \mu\text{m}$ 降至 $10\ \mu\text{m}$ 时, 混合效率增加 2.5 倍; 水含率为 0.2 时, 液滴的混合指数是水含率的 0.6 的 1.15 倍, 水含率为 0.4 时, 液滴的混合指数比水含率为 0.6 时提高了 17%; ST. K 型通道的液滴混合效率最高, 可达 99.2%, 比 ST. L 型提高了 4.96 倍, ST. Q 型和 ST. Z 型的混合效率近似, 均约为 97% 以上.

参考文献:

- [1] 张吉松, 刘国涛, 王 凯, 等. 微通道内传递对液液分散过程的影响规律 [J]. 化工学报, 2015, 66(8): 2940-2946.
- [2] EDEL J B, FORT T, DEMELLO J C, et al. Microfluidic Routes to the Controlled Production of Nanoparticles [J]. *Chemical Communications*, 2002(10): 1136-1137.
- [3] SHESTOPALOV I, TICE J D, ISMAGILOV R F. Multi-Step Synthesis of Nanoparticles Performed on Millisecond Time Scale in a Microfluidic Droplet-Based System [J]. *Lab on A Chip*, 2004, 4(4): 316-321.
- [4] KOEHLER J M, VISAVELIYA N, KOEHLER A, et al. Controlling Formation and Assembling of Nanoparticles by Control of Electrical Charging, Polarization, and Electrochemical Potential [J]. *Nanotechnology Reviews*, 2014, 3(6): 553-568.
- [5] SCANLON T C, DOSTAL S M, GRISWOLD K E. A High-Throughput Screen for Antibiotic Drug Discovery [J]. *Bio-technology and Bioengineering*, 2014, 111(2): 232-243.
- [6] TAO Y, ROTEM A, ZHANG H D, et al. Artifact-Free Quantification and Sequencing of Rare Recombinant Viruses by Using Drop-Based Microfluidics [J]. *Chembiochem*, 2015, 16(15): 2167-2171.
- [7] ZHENG B, ROACH L S, ISMAGILOV R F. Screening of Protein Crystallization Conditions on a Microfluidic Chip Using Nanoliter-Size Droplets [J]. *Journal of the American Chemical Society*, 2003, 125(37): 11170-11171.
- [8] TESTE B, ALI-CHERIF A, VIOVY J L, et al. A Low Cost and High Throughput Magnetic Bead-Based Immuno-Agglutination Assay in Confined Droplets [J]. *Lab on a Chip*, 2013, 13(12): 2344-2349.
- [9] YANG L, LI S S, LIUA J X, et al. Fluid Mixing in Droplet-Based Microfluidics with T Junction and Convergent - Divergent Sinusoidal Microchannels [J]. *ELECTROPHORESIS*, 2018, 39(3): 512-520.
- [10] SONG H, TICE J D, ISMAGILOV R F. Microfluidic System for Controlling Reaction Networks in Time [J]. *Angew. Chem, Int. Ed*, 2003, 42(7): 768-772.
- [11] MURADOGLU M, STONE H A. Mixing in a Drop Moving Through a Serpentine Channel: A Computational Study [J]. *Phys Fluids*, 2005, 17(7): 073305.
- [12] CUI H H, LIM K M. Micro-Pillar Barriers for Guiding, Mixing and Sorting Droplets [C] // *TRANSDUCERS 2009 International Solid-State Sensors, Actuators and Microsystems Conference*. June 21-25, 2009, Denver, CO, USA. IEEE, 2009: 817-820.
- [13] LIM T W, SON Y, JEONG Y J, et al. Three-Dimensionally Crossing Manifoldmicro-Mixer for Fast Mixing in a Short Channel Length [J]. *Lab on a Chip*, 2011, 11(1): 100-103.
- [14] 夏国栋, 吴宏杰, 李 健, 等. 分离重组错位通道微混合器混合及结构研究 [J]. *工程热物理学报*, 2012, 33(8): 1353-1356.
- [15] FENG X S, REN Y K, JIANG H Y. An Effective Splitting and Recombination Micromixer with Self-Rotated Contact Surface for Wide Reynolds Number Range Applications [J]. *Biomicrofluidics*, 2013, 7(5): 054121.

- [16] JIANG L G, ZENG Y, ZHOU H B, et al. Visualizing Millisecond Chaotic Mixing Dynamics in Microdroplets: A Direct Comparison of Experiment and Simulation [J]. *Biomicrofluidics*, 2012, 6(1): 012810-012812.
- [17] 王佳男, 王嘉骏, 冯连芳, 等. 弯曲微通道中液滴内混合过程的数值模拟研究 [J]. *高校化学工程学报*, 2014, 28(2): 218-222.
- [18] KAMHOLZ A E, WEIG L B H, FINLAYSON B A, et al. Quantitative Analysis of Molecular Interaction Action in a Microfluidic Channel in the T-Sensor [J]. *Anal Chem*, 1999, 71(23): 5340-5347.

Numerical Simulation of Enhanced Mass Transfer Mechanism of Confined Droplets in Microchannels

REN Tao¹, LONG Wei¹, SONG Zi-xuan¹,
LIU Yun¹, SONG Peng-yun²

1. Faculty of Mechanical and Electrical Engineering, Kunming University of Science and Technology, Kunming 650500, China;

2. Faculty of Chemical Engineering, Kunming University of Science and Technology, Kunming 650500, China

Abstract: With the increasing demand of various chemical products in the social development, the conventional mixing method consumes a lot of raw materials, and the mixing is not uniform and the efficiency is low. Based on the basic theory of chemical process, across confocal micro-channel model is established. Using the method of UDS microchannel, this article analyzes the internal flow field characteristics of droplets and concentration distribution within the microchannel and the influence of structure size, capillary number, water containing rate on the droplet mixing efficiency, and makes clear the microscopic mechanism of strengthening mass transfer in microchannel. The results show that the mixing efficiency is 96.5% when the channel width is 10 μm ; when the capillary number is 2.3×10^{-3} , the mixing efficiency of the droplet was about 63.6%, which is twice that of 5.38×10^{-3} ; and when the water holdup range is 0.2—0.6, the mixing efficiency is the highest, up to 79%, when the water holdup is 0.4. Compared with direct channel, the mixing efficiency of rectangular channel increases by 77.6%.

Key words: limited droplet; enhanced mass transfer; mixing efficiency; confocal; water fraction

责任编辑 汤振金