

匯流處構型對 T 型微流道中液滴流生成機制之影響

苗志銘* 厲復霖**

*國防大學理工學院機電能源及航太工程學系 **國防大學理工學院國防科學研究所

摘要

本研究之主要目的在利用計算流體力學(CFD)軟體 FLUENT™，在層流模式下求解 Navier-Stokes 方程組，探討在 T 型微流道匯流處加上不同形狀及數量之障礙物，對二相流中所形成微液滴形態及流場現象改變之影響。由研究結果可知，對於 T 型微流道中二相流場中液滴的生成、截斷(break-up)及分離過程之流場現象，均可準確地以數值方法加以模擬及預測；而在流道匯流處加入不同形狀或數量障礙物的設計，確實可控制消散相出口動量及流道內局部壓力變化，使液滴分離時間提早，生成長度較短的液滴。本研究即利用此原理，控制液滴生成長度比原 T 型微流道減少 1.6~11.3% 之間；另外，三角形障礙物具有在匯流處產生局部側向力的特性，在設計時較方形障礙物具彈性，未來應考慮不對稱的障礙物設計，並配合改變流場 Ca 及 Q_R 值，將可在液滴生成控制上進行更廣泛的研究。

關鍵詞：計算流體力學，T 型微流道，微液滴流，二相流，擠出模式

Effect of Microfluidic T-junction Shape on the Two-Phase Droplet Generation Patterns

Jr-Ming Miao*, Fuh-Lin Lih**

*Department of Mechtronic, Energy and Aerospace Engineering, Chung Cheng Institute of Technology, National Defense University

**Graduate School of Defense Science, Chung Cheng Institute of Technology, National Defense University

ABSTRACT

The formation of two-phase droplet flow pattern in different designs of T-junction microchannels were systemically investigated with CFD technique. Present results clearly displayed the formation and break-up process of droplet flow as the disperse fluid interacted with the cross continuous fluid near the junction of microchannels. The length of droplet is sensitive to the shape of microfluidic T-junction channel, and it can be decreased for 1.6~11.3% by installing the obstacles at the same inlet flow rate. Further, the results also showed the placement of triangular asymmetric shape of obstacle has more influence on the control mechanism of droplet formation control than the square shape obstacles. In addition, the inertia convective phenomenon within microdroplets is observed for some particular cases.

Keywords: CFD, t-type microchannel, microdroplet, two-phase flow, squeezing model.

文稿收件日期 96.3.27.; 文稿修正後接受日期 96.4.24.
Manuscript received March 27, 2007; revised April 24, 2007.

一、前言

近年來，由於微機電系統(micro-electro mechanical system, MEMS) 暨其技術的逐漸成熟，基於全分析系統(μ -TAS)生物晶片(bio-chip)的迅速發展，微型化已成了不可避免的趨勢，其中微流體的應用與控制更扮演了舉足輕重的角色。在微尺度下多相流場(multiphase flows)中所形成的微液滴(microdroplet)現象，因具備了相界面間無質傳、不易污染試劑及操控多樣性的流場特性，所以常被應用於各種化學合成、生醫檢測及藥物輸送等領域，是應用上極有潛力的一種新技術。例如在 1998 年，Burns *et al.* [1]即利用此效應，將其整合於 DNA 檢測裝置中，藉由在微流道中產生的氣泡加壓以驅動試劑；又如 2005 年時，Nguyen and Wu [2]也曾發表 Micromixer - a Review 一文，詳述目前常見的微混合器依作動方式不同，可概分為被動式的微混合器(passive micromixer)及主動式的微混合器(active micromixer)，而本研究所探討的微液滴效應，就是應用於文中被動式微混合器—液滴式微混合器(droplet micromixer)的一種。同年，Wang *et al.* [3]同樣將此技術運用於聚合酶鏈反應(polymerase chain reaction, PCR)晶片上，為此效應的應用領域拓展了更有實務價值的方向。

目前各界在進行生命科學及分析化學等相關研究時均遭逢極大瓶頸，即檢測試劑成本過高，且樣品通常得來不易，因此研究不斷朝向小量樣品及試劑的消耗、反應快速進行以及能夠一次輸出大量檢測結果的方向而努力，正因為微液滴流具備可操控、構型簡單及製程容易的優勢，因此在微流體研究中一直佔有相當重要的地位，而關於其在微流道中生成及液滴尺寸控制的相關研究更是一直不曾間斷過。如 2001 年，Thorsen *et al.* [4]分析在二種不相溶液體中產生微液滴的各種型態，並將其區分為散佈(monodisperse droplets)、螺旋(helices)及帶狀(ribbons)三種，同時也探討此現象與流道幾何構型及相對應的入口壓力間的關係；同年，Handique and Burns [5]以數學模型探討狹縫型微流道中所形成液滴內的單向位移(unidirectional displacement)現象，並說明此種效應對提升兩試劑的混合大有助益；在 2003 年，Tice *et al.* [6,7]以無機染料取代有機染料作為試

劑，證明在低 Ca 數與雷諾數(Reynolds number, Re)下，多種試劑組成的微液滴在直型及彎曲型微流道中可產生內部迴流(internal recirculation)現象，使得微液滴內的試劑迅速達到完全混合；同年，Song *et al.* [8]以實驗方式，藉由改變流道幾何構型、連續相與消散相進口流率比及表面張力等參數，討論其對微液滴內試劑混合效率增強的影響程度；2004 年，Zheng *et al.* [9]藉由控制進口試劑 Ca 數及體積分率，使產生的液滴自不同流道分別流入主流道，探討此種設計對蛋白質結晶之影響；另外，Tice *et al.* [10]又再以控制試劑的黏滯係數、 Ca 數及進口流率作為變化參數，探討這些因子對所形成微液滴內試劑混合效率的影響，結果發現在特定操作條件下，使用黏滯係數較高的工作試劑會得到最佳的混合效果。

為釐清微液滴在連續流晶片(continuous-flow biochip)內的生成機制，Cristni and Tan [11]同時以實驗及數值方法，對微液滴的產生、分離及結合進行許多研究及相關論文的回顧，文中特別針對流場物理性質及流道幾何構型的交互關係做了深入的比較與探討；Link *et al.* [12]則在方型截面微流道中置入方型的障礙物，藉以控制液滴產生型態及行進的方向；同年，Anna *et al.* [13]也是以改變試劑的黏滯係數、 Ca 數及進口流率作為變化參數，再次證明這三種主要參數對微液滴分離及生成長度的影響。Guillot and Colin [14]發現流場是否形成微液滴流的關鍵，是取決於試劑的進口流率值，而不僅僅是 Ca 數，而流場型態轉變的關鍵乃是由阻隔-夾斷(blocking-pinching)機制所決定；另外，Stone and Stone [15]研發一種液滴式微混合器，同時以其所謂的向後追蹤影像(backtrace imaging)法分析在任意時間下不同微流道截面處的試劑混合情形。

微液滴的組成成份除了液-液相外，在生物晶片的應用上也使用液-氣相的模式，因此 Garstecki *et al.* [16]以實驗方法，探討二相流在 T 型微流道中液滴及氣泡形成的機制，結果顯示當 Ca 數小於 10^{-2} 時，使連續相液滴或消散相氣泡截斷的機制為流道內微氣泡上游處連續相逐漸升高的壓阻，而不是相界面上的剪應力，並推導出產生液滴或氣泡的長度與試劑進口流率的關係式；Menech [17]則利用數值模擬方法，以相位場模型(phase-field model)預測液滴截斷

的機制，並分析液滴分離與 Ca 數之間的關係；Tan *et al.* [18] 利用數值與實驗方法，預測並控制液滴產生的位置、大小及頻率，同時發現衛星液滴 (satellite droplet) 的生成；Liu *et al.* [19] 則是將液滴流應用在微反應器的設計上，利用其無消散 (no-dispersion) 的流場特性控制及增加試劑間的混合效果，大幅地提高了微反應器的操作範圍；Hong and Wang [20] 針對同軸圓形微流道模型，在調整不同連續相及消散相試劑進口流率比及 Ca 數的條件下，得到當二相進口流率比 (Q_d/Q_c) 0.1 時，生成之液滴尺寸較不會受到進口流率的影響，只和 Ca 數成線性反比關係；而當 $Q_d/Q_c < 0.1$ 時，生成液滴之尺寸則與進口流率有著十分密切的關係，此時可藉由調整進口流率達到控制液滴尺寸及形狀之目的。

最近，Kinoshita *et al.* [21] 以加入螢光粒子的甘油溶液與純矽油作為工作試劑，利用共焦式微粒子影像測速儀 (confocal micro-PIV) 觀察在三維 T 型微流道中所形成的二相液滴流場，並從三維方向視角及不同景深截面分析在液滴內部之自旋流速度場分布情形；Collins and Lee [22] 發展一套影像處理方式並以特定近似三角形階梯式脈衝速度注入連續相試劑，而消散相進口流速則固定為常數，藉由改變二相的進口流速比率，達到控制液滴生成頻率與長度的目的。Mohr *et al.* [23] 將液滴流特性運用於 PCR 晶片的設計上，以避免樣品的污染或吸附，同時採用改變試劑進口流速等多種控制液滴生成方式，使此種晶片之設計與應用更加廣泛；Nguyen *et al.* [24] 結合液滴流與磁流體 (ferrofluids)，探討在不同液滴長度、試劑黏滯係數及外加電場強度等參數時，對液滴流內部型態所產生的影響，以作為未來磁流體運用於生物晶片研究的基礎。

由以上的文獻回顧可知，二相微液滴流場特性之研究是目前相當受到重視的一個課題，尤其是各種微液滴生成尺寸控制方法的探討，以及在不同元件幾何構型限制下的應用。過去許多學者在相關研究中，常藉由調整連續及消散相流道寬度比、進口流量比例、黏滯係數比值、表面張力或流體與壁面的接觸角等方式，以影響二相界面間表面張力與流動剪力之相互作用達到控制液滴生成之目的。根據 Garstecki *et al.* [16] 的研究指出：二種不相溶的液體在 T 型微流道所形成的液滴流場，可由連續相 Ca 數的

變化而將液滴形成機制區分為擠出 (squeezing)、滴出 (dripping) 及噴出 (jetting) 三種模式。例如當 Ca 數小於 10^{-2} 時，微液滴的生成機制屬於擠出模式，而本研究所探討的連續相 Ca 數經計算所得為 2.6×10^{-3} ，明顯低於該標準值，因此可將本研究中微液滴的生成機制歸類為擠出模式；同時，該研究結果也顯示，在此型態的流場中，使液滴截斷的機制為因消散相阻塞連續相流經的流道而使得液滴上游處連續相壓力逐漸升高所產生的壓阻，而不是二相界面上的剪應力。因此，本研究嘗試利用數值模擬方法，選擇應用於生物晶片最廣泛的 T 型微流道，並考量實體模型製程之簡易程度，在 Ca 數及二相進口流率不變的條件下，於流道匯流處加入 1~2 個方形或三角形障礙物，希望藉由改變消散相與連續相匯流處的局部動量與壓力變化，達到控制液滴生成尺寸及頻率的目標。此一設計就現有的文獻中尚無發現，且目前針對微液滴流各種控制及應用的相關研究，絕大多數都是以實驗方式進行，僅有近年的少數研究是以計算流體力學作為工具，對此類型流場進行更深入的探討，其主要原因就是當利用數值方法進行二相流流場計算時，必須確實掌握二相流界面間的壓力變化參數，而此數據獲得是相當困難的工作，因此若能以可行的數值工具準確地預估此流場型態，將可節省大量時間與金錢，並提供更加完整的研究數據。

在進行數值模擬工作時，先使用繪圖軟體 PRO/E 建構實體模型，然後以 ICEM/CFD 產生相對應之多區塊結構型網格系統，再以計算流體力學軟體 FLUENT 6.2.16 作為求解運算器，設定初始、邊界條件及所使用之數值方法，進行二相流場模擬，最後再以後處理軟體 TECPLOT 及 FIELDVIEW 將計算結果可視化，並藉由運算出之流場結構計算出生成液滴長度、頻率等相關參數。

二、數值方法

本研究所使用的工作試劑，是以橄欖油作為連續相液體 ($\mu_c = 1.8 \times 10^{-2} \text{ kgm}^{-1}\text{s}^{-1}$, $\rho_c = 1.08 \times 10^3 \text{ kgm}^{-3}$, $u_c = 5.3 \times 10^{-2} \text{ ms}^{-1}$)，去離子水作為消散相液體 ($\mu_d = 10^{-3} \text{ kgm}^{-1}\text{s}^{-1}$, $\rho_d = 10^3 \text{ kgm}^{-3}$, $u_d = 4 \times 10^{-2} \text{ ms}^{-1}$)，二試劑間之表

面張力值為 $3.65 \times 10^{-2} \text{ Nm}^{-1}$ ，與流道壁面的接觸角則為 150 度。研究中將探討正方形及三角形二種障礙物構型效應，同時，依障礙物放置的數量及位置不同，將各種構型規劃成研究矩陣如表 1 所示。另外，根據 Buckingham- π 理論分析，在微液滴流場的研究中， Ca 數與二相流進口流率比將是探討此流場型態最為重要的無因次參數，而微液滴之生成頻率可用史卓荷數表示，因此下面將分別針對各參數之定義加以說明。

表 1. 研究矩陣

模 型	A	B	C	D
障 礙 物 形 狀	/	正 方 形	三 角 形	正 方 形
障 礙 物 位 置	/	下 游	下 游	上 游
障 礙 物 數 量	0	1	1	1
模 型	E	F	G	
障 礙 物 形 狀	三 角 形	長 方 形	三 角 形	
障 礙 物 位 置	上 游	上、下 游	上、下 游	
障 礙 物 數 量	1	2	2	

2.1 Ca 數(Capillary number, Ca)

在多相流的問題中，各相界面間的表面張力是影響流場型態的關鍵力源，它與黏滯力和表面張力的比值成正比，在本研究中定義為：

$$Ca = \frac{u_c \mu_c}{\gamma} \quad (1)$$

此處 u_c 是主流道中連續相流體的平均速度，可由連續相的進口體積流率除以流道的進口截面積計算得出；而 γ 為連續相流體與消散相流體之間表面張力， μ_c 則為連續相流體的動力黏滯係數(dynamic viscosity)。

2.2 二相流進口流率比(Q_R)

二相進口流率比也是影響液滴流生成與否

的重要參數之一，在本研究中將其定義為：

$$Q_R = \frac{Q_d}{Q_c} \quad (2)$$

(2) 式中 Q_d 為消散相流體的進口體積流率，而 Q_c 則為連續相流體的進口體積流率，根據 Tice *et al.* [10] 的研究，在 T 型微流道中， Q_R 值與所形成的液滴長度 l_w 成正比，即 Q_R 值愈大，液滴長度愈長，反之， Q_R 值愈小，則所形成的液滴長度將會愈短。

2.3 史卓荷數(Strouhal number, St)

在研究中將使用無因次的史卓荷數來計算流道內消散相微液滴產生的頻率，計算式寫為：

$$St = \frac{fl}{u_c} \quad (3)$$

其中 f 為消散相的液滴產生的頻率(s^{-1})， l 為主流道寬度， u_c 則為主流道中連續相流體的平均速度。

三、統御方程式

統御方程式是由質量、動量項皆遵守雷諾傳輸定理守恆原則(conservation principle)的雷諾均值 Navier-Stokes 方程式，因本研究並不考慮熱(質)傳問題，所以實際的統御方程式僅包括質量守恆及動量守恆二個傳輸方程式。

在進行流場模擬之前，必須針對數值模型之物理特性與條件進行基本的假設，包括：

- (1) 連續相與消散相流體物理性質皆為常數，且流場為非定常不可壓縮層流；
- (2) 兩工作流體間之表面張力為固定常數；
- (3) 忽略流道內壁之表面粗糙度效應；
- (4) 工作流體間不相溶且不產生任何化學反應。

經上述假設條件，可將二個傳輸方程式分別表示如下：

質量守恆方程式：

$$\nabla \cdot \bar{U} = 0 \quad (4)$$

動量守恆方程式：

x 方向：

$$\rho(\partial u/\partial t) + \rho \nabla \cdot (\bar{U}u) = \rho \bar{g} - \nabla P + \mu \nabla^2 u + S_x \quad (5)$$

y 方向：

$$\rho(\partial v/\partial t) + \rho \nabla \cdot (\bar{U}v) = \rho \bar{g} - \nabla P + \mu \nabla^2 v + S_y \quad (6)$$

(5)與(6)式中， u 、 v 分別為 x 、 y 方向的速度分量； $\bar{\rho g}$ 代表的是流場的體力(body force)，在本研究中可忽略不計；另外， S 則為源項(source term)。當流場雷諾數大時，因慣性力遠大於黏滯力，所以黏滯力可忽略不計，但對於微流道流場而言，因為流速非常低，換算之雷諾數相當小，故黏滯力對流場的發展，將顯得極為重要。

另外，在二相流流場的計算過程中，因本研究探討的對象是屬於氣-液或液-液、氣-固、液-固或氣-液-固三相四種常見型態之一的液-液二相流的問題，而目前數值方法對多相流界面位置的解算，可區分為 Euler-Lagrangian 法及 Euler-Euler 法兩種。Euler-Lagrangian 法是藉由粒子追蹤法以捕捉多相流中粒子、氣泡或液滴的運動軌跡，再求解其與流體間的動量、質量與能量交換以獲得最終流場數值解，此方法大多用以探討有關質點移動、質點之間的相對位移及質點受力等現象，不適合本研究所需；Euler-Euler 法則是依各相所占體積分率，分別推導出各相流場方程式，再進行求解。在 FLUENT 軟體中，內建三種 Euler-Euler 法則模組，分別是 VOF 模組(volume of fluid model)、Mixture 模組及 Eulerian 模組。由於本研究是以兩種不相溶的液體作為試劑，且 Ca 數與 Q_R 值將決定微液滴之生成機制，因此在模擬上將採用 VOF 模組，對二相流共存所形成的界面變化進行計算。

所謂 VOF 模組，其實就是以各相在計算域內所佔的體積分率，判斷出每一網格內是否有相界面的存在，再進而追蹤界面隨時間變化的情形。若以 α_q 表示為 q 相流體的體積分率值， $\sum_{q=1}^n \alpha_q = 1$ ，當 $\alpha_q = 0$ 時，代表此網格內並無 q 相流體； $\alpha_q = 1$ 時，則代表此網格內流體皆為 q 相流體；若 $0 < \alpha_q < 1$ ，則表示網格內存在二相界

面。

根據 VOF 模組之定義，界面計算之體積分率方程式與質量守恆方程式近似，以確保計算域內流體體積與質量之守恆，方程式表示如下：

$$\partial \alpha_q / \partial t + \bar{U} \cdot \nabla \alpha_q = S_{\alpha_q} / \rho_q \quad (7)$$

S_{α_q} 為源項，在沒有外加力源的情況下，其值為 0。由於體積分率方程式是與質量守恆、動量守恆方程式進行耦合計算，當流場速度場由 Navier-Stokes 方程組 (4)~(6) 式解出後，就可代入(7)式算出新的 α_q 值，得到新的二相流界面變化，進而獲得整個計算域流場分佈情形，因此，當計算域內同時包括二相流存在時，其每一網格內的流體性質、二相界面及其邊界上的通量均需加以考慮。

另外，在以 VOF 模組進行計算時，需將研究中密度較大的去離子水選擇為主要相(primary phase)，其體積分率表示為 α_1 ，橄欖油則視為次要相(secondary phase)，而其體積分率表示為 α_2 。根據 VOF 模組定義，同時存在主、次要相網格內之流體物理性質 ρ 及 μ 可表示為：

$$\rho = \alpha_2 \rho_2 + (1 - \alpha_2) \rho_1 \quad (8)$$

$$\mu = \alpha_2 \mu_2 + (1 - \alpha_2) \mu_1 \quad (9)$$

由上述方式將可得到二相流場在每一網格內隨時間變化的情形，除此之外，整個計算域的流場變化，必須將每一網格所得結果加以相連，以確保整個計算域界面描述之正確性。在本研究中，界面重建是使用幾何重建法(geometric reconstruction scheme)，此方法是目前處理二相界面問題時最精確且應用最為廣泛的方法之一。此方法共有三步驟：首先將二相共存網格之相界面以網格中心進行線性化處理，再計算流場通過此線性界面上法線和切線速度向量的分佈，最後考量通量的平衡而計算出每一個網格內新的二相體積分率，得到重建後新的二相界面。

最後，在微流道液滴流生成與運動的研究中，為能夠更加精確地模擬在二相間自由表面邊界上速度與壓力的變化情形，也將考慮表面

張力效應，以連續表面力模型 (continuum surface force model, CSF 模型) 加以表示。由於 CSF 模型是將表面張力視為一連續橫跨於二相界面的作用力，因此需作為動量守恆方程式計算時的源項，表示為：

$$\overline{F}_s = \gamma \kappa \nabla \alpha_q \quad (10)$$

其中， γ 為二相間的表面張力， α_q 為二相的體積分率， κ 為二相界面的曲率，定義為：

$$\kappa = \nabla \cdot \hat{n} \quad (11)$$

$$\hat{n} = \frac{\overline{n}}{|\overline{n}|} \quad (12)$$

(11)與(12)式中的 \hat{n} 為二相界面上的單位法向量，是由二相界面上的法向量 $\overline{n} = \nabla \alpha_q$ 計算而得。

四、研究模型與網格系統

本研究目的為在於使用數值模擬工具作為微流道內非穩態微液滴流場生成機制的初探，將著重於微液滴形成過程及設置障礙物後改變流道匯流處幾何構型對微液滴型態影響的探討。為簡化計算流程，本文將以二維 T 型微流道為主要研究對象，其幾何構型如圖 1 所示。連續相的橄欖油由左方之 inlet 1 進口流入，消散相的去離子水由下方的 inlet 2 流入，兩流體在距離 inlet 1 進口 $2l$ 長度處交會，可預期的是，表面張力、剪應力與微液滴逐漸生成而阻塞連續相流體流動而形成的壓阻力三種效應的相互影響，在特定操作條件下將使得消散相斷裂而週期地形成微液滴，隨著連續相流體的驅動而往下游出口處 outlet 流出。連續相(inlet 1)與消散相(inlet 2)進口流道寬度比設定為 2:1，主流道寬度 $l=100\mu\text{m}$ ，長度則為 $30l$ 。

表 1 為研究矩陣，共分為七種模型，定義為 Model A~G。由於 T 型微流道之液滴生成機制屬於剪應力流主控模式 (shear-flow dominated model)，本研究的目的除探討 T 型微流道內微液滴生成的機制外，最重要的是嘗試於二進口流道匯流處加入不同形狀或數量的障礙物，希望藉由改變流道幾何構型，影響消散相與連續相

匯流處的局部動量與壓力值，進而達到控制液滴生成尺寸及頻率的目的。研究的障礙物構型為方形及三角形，障礙物的數量為 1 或 2 個，圖 2 為各研究模型之幾何構型，流場之 Re 數為 2， Ca 數為 2.6×10^{-3} ， Q_R 則為 0.38，消散相及連續相工作流體分別為去離子水與橄欖油。

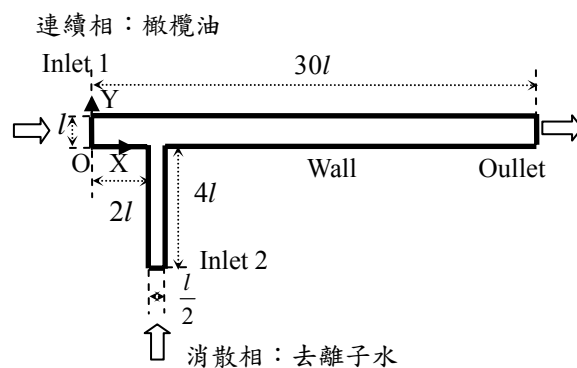


圖 1. T 型微流道幾何構型示意圖 (Model A)。

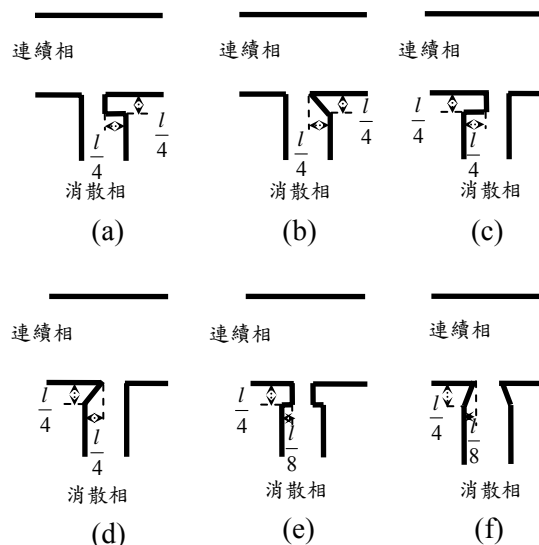


圖 2. 各算例障礙物位置及幾何尺寸示意圖：(a)Model B，(b)Model C，(c)Model D，(d)Model E，(e)Model F，(f)Model G。

在計算網格系統之製作上，是採用 ICEM/CFD 軟體中 HEXA 模組進行建構，計算域依構型不同分為 4~9 個區塊，共計 7,125 個網格，格點正交性品質達 0.9 以上，圖 3 顯示的是 Model A 格點系統分佈情形。同時，因本研究流場雷諾數相當小，在進行非穩態流場計算時，時間步階的選擇也必須格外小心，以避免影響

計算的結果，故研究時考量流場真實情況，經時間步階大小測試後，將時間步階設定為 5×10^{-6} 秒，收斂條件所有物理量（特別是質量項）皆收斂至八個量級以上為準。計算所使用之載台為使用Pentium 2.8 GHz 中央處理器，2 GB 記憶體，作業系統為Windows XP之個人電腦。

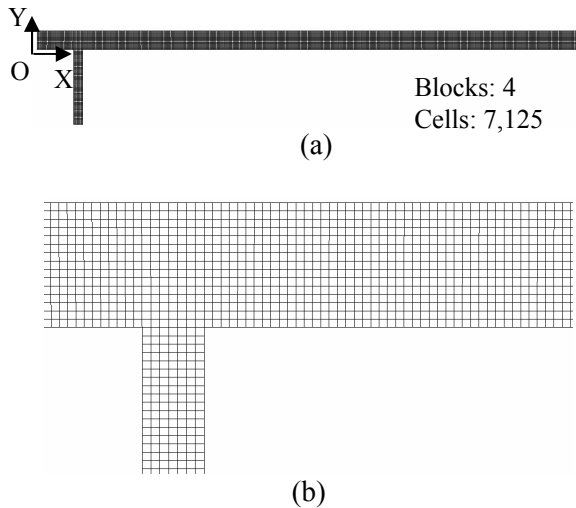


圖 3. T 型微流道網格系統示意圖 (Model A):
(a)全計算域網格，(b)局部網格。

五、數值方法

在計算流體力學使用上，適當的數值方法選用對計算結果的精確性影響極大，本研究選擇二維雙倍精準度之分離式(segregated)運算器進行求解，並假設流場為不可壓縮層流。對於壓力項的處理是選擇PRESTO! (pressure staggering option)為離散法則，而其他物理量之離散皆採用二階上風法(second order upwind scheme)，至於壓力項與速度項之耦合則是採用PISO(pressure-implicit with splitting of operators)法則。另外，根據現有的條件參數，初始條件設定除inlet 2 進口管完全為充滿Y方向速度分量為 $4 \times 10^{-2} \text{ ms}^{-1}$ 消散相的去離子水外，其餘所有計算域皆為具X方向速度分量為 $5.3 \times 10^{-2} \text{ ms}^{-1}$ 連續相的橄欖油，而二試劑間之表面張力值則設定為 $3.65 \times 10^{-2} \text{ Nm}^{-1}$ 。在邊界條件的設定上：首先在進口管入口流處，因已知各進口面流入試劑成分及速度，所以在進口面入口(inlet 1、2)可設為速度流入(velocity inlet)邊界條件；出口

流(outlet)設為壓力流出(pressure outlet)邊界條件，在操作壓力為1 atm下，設定出口靜壓為0 Pa；最後在壁面(wall)邊界條件的設定上，則均設定為無擴散通量(zero diffusive flux)及無滑移(no-slip)邊界條件，試劑與壁面接觸角之設定使用經實際測量所得的150度。

六、結果與討論

本研究之連續相 Ca 數為 2.6×10^{-3} ，微液滴的生成機制屬於擠出模式，由圖4顯示，當流道內消散相液滴在匯流處與連續相流體交會而逐漸生成，然後分離的整個過程共受到三種力量相互牽制與作用，分別是表面張力($F_\gamma \approx -\gamma l$)、剪應力($F_\tau \approx \mu Q_c (l_w / \varepsilon^2)$)及因消散相阻塞流道所引發的壓阻力($F_R \approx \mu Q_c (l_w^2 / \varepsilon^3)$) [16]。上式中之 l 定義為流道寬度， l_w 為液滴長度， ε 則為液滴頂端與上管壁的間距，當 $\varepsilon \ll l_w$ 時，流道壓阻力值對液滴分離的影響將大於剪應力。因此，研究中首先針對T型微流道內液滴生成與分離現象進行模擬，同時設置一壓力值觀測點 P_b ，其位置($X=150\mu\text{m}$, $Y=50\mu\text{m}$)亦標示於圖4中，藉由觀測此點壓力值的變化情形驗證Garstecki *et al.* [16]的觀點，比較時壓力項 \bar{P} 與時間項 \bar{t} 的變化量分別以 $\mu_c u_c / l$ 及 u_c / l 進行無因次化處理；接著在匯流處加入方形或三角形障礙物後，嘗試由流道壓阻值的改變討論其對流場液滴生成機制的影響，並在不改變二相流進口流率比的條件下，達到控制微液滴尺寸與生成頻率之目標。

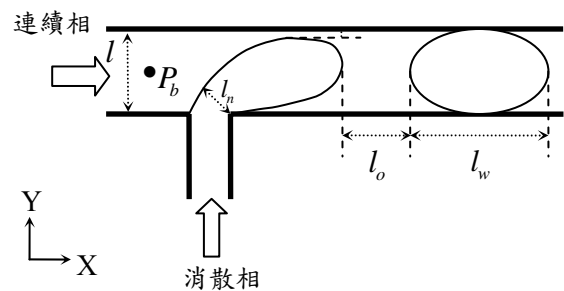


圖 4. 液滴幾何參數符號示意圖。

6.1 二維 T 型微流道內液滴流場生成機制

為進行構型設計結果的比較，在研究初期，先針對無障礙物存在的 T 型微流道(定義為 Model A)進行液滴生成過程的模擬工作，以引為爾後各項設計比對之參考。在連續相流道進口處，使用橄欖油作為試劑，以 $5.3 \times 10^{-2} \text{ ms}^{-1}$ 的速度流入(inlet 1)；而消散相流體則使用去離子水作為工作流體，並以 $4 \times 10^{-2} \text{ ms}^{-1}$ 的速度流入(inlet 2)；圖 5 為消散相以 $Q_R=0.38$ 向上流入，與自左向右流入的連續相液體在流道匯流處形成液滴時，整個過程的消散相流體體積分率變化圖。由圖中可看出液滴的生成概略可區分為四個階段：(1)消散相流入主流道中，此時由於表面張力的作用，將使消散相形成如球狀的小水泡(如圖 5(a))；(2)消散相水泡持續向上成長，由於二試劑間並不相溶，因此連續相將無法穿越消散相水泡，此時在水泡左側由於連續相阻塞流道所產生的壓阻，將迫使二相界面變形並擠壓水泡逐漸向下游運動(如圖 5(b))；(3)當水泡向流道下游方向愈拉愈長時，其頸部的長度 l_n 也愈來愈短(如圖 5(c))；(4)當 $\bar{t}=3.18$ 時， ε 達到最小值約 $18.2 \mu\text{m}$ 時，相界面接觸到匯流處右側轉角，水泡於此時斷開，消散相縮回 inlet 2 出口(如圖 5(d))，原水泡即形成一個獨立的液滴持續向下游運動(如圖 5(e)、(f))。

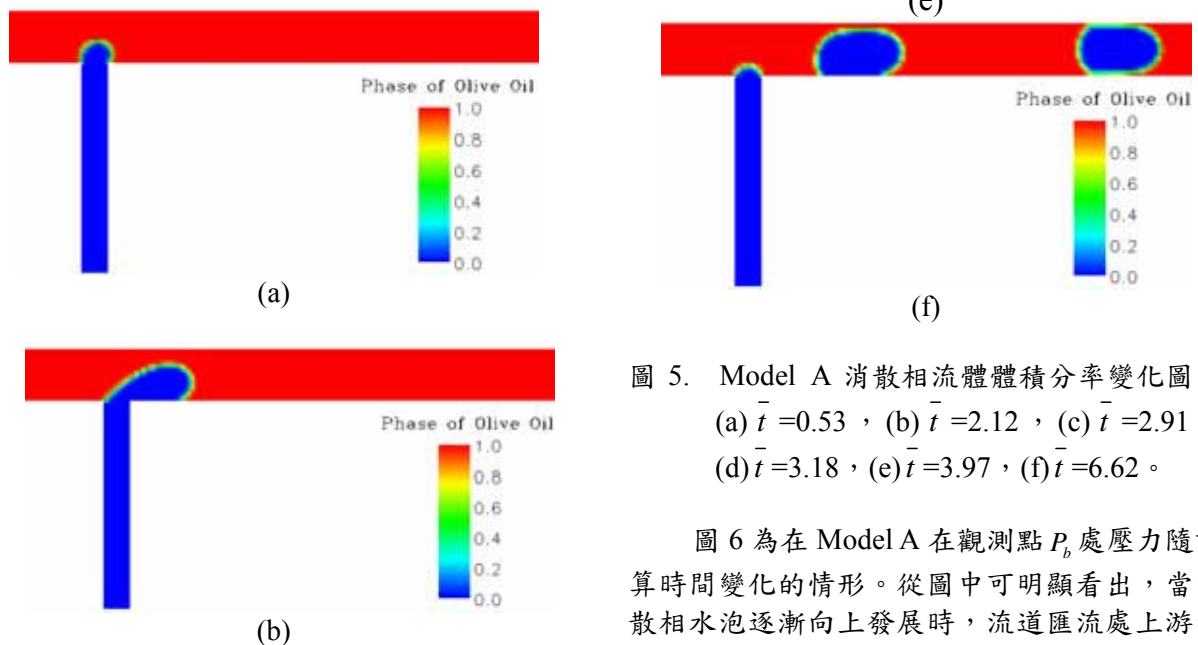


圖 5. Model A 消散相流體體積分率變化圖：
(a) $\bar{t}=0.53$ ，(b) $\bar{t}=2.12$ ，(c) $\bar{t}=2.91$ ，
(d) $\bar{t}=3.18$ ，(e) $\bar{t}=3.97$ ，(f) $\bar{t}=6.62$ 。

圖 6 為在 Model A 在觀測點 P_b 處壓力隨計算時間變化的情形。從圖中可明顯看出，當消散相水泡逐漸向上發展時，流道匯流處上游的壓力也將隨之升高(點 a)，直到水泡幾乎佔據主流道時，壓力到達最高值(點 b)，水泡也受此高壓作用而產生分離，形成單獨的液滴向下

游運動，此時壓力隨即迅速下降（點 c），直到下次水泡再度形成，歷經同樣過程產生下一顆液滴，如此反覆循環，最後形成研究中所獲得的二相液滴串流場。由圖 5、6 的結果可知，從液滴的形成、拉伸，到最後分離的整個過程，本研究均可以利用數值方法清楚地加以捕捉，同時微液滴的尺寸、生成頻率及因表面張力作用所形成的二相界面也可清楚地觀察到，甚至是在液滴內部因剪力作用所產生的旋流現象（如圖 7），也可以藉由速度向量圖的呈現，進行定性及定量的探討，而此現象也是未來將此成果運用於微流體完全混合的相關研究時，所需掌握的重要關鍵技術之一。最後，當液滴流型態到達穩定周期後，可計算得到此時的液滴長度 l_w 為 $159\mu\text{m}$ ，液滴之間距 l_o 約為 $326.9\mu\text{m}$ ，而 St 則為 0.314。

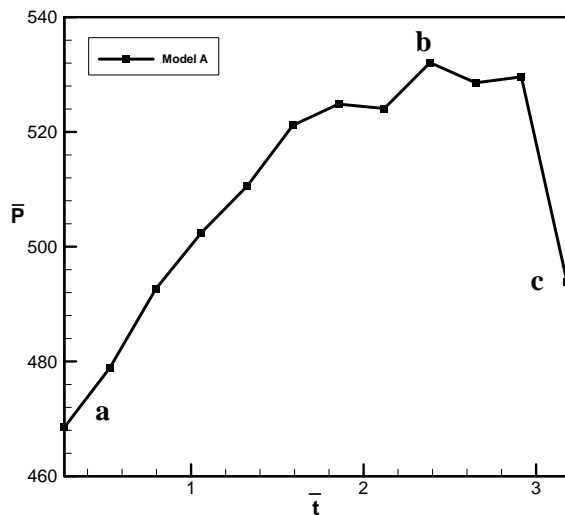
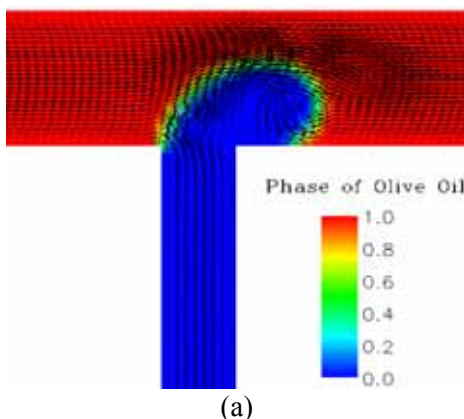
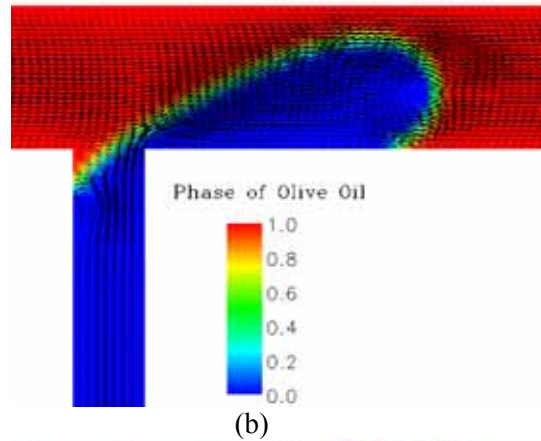


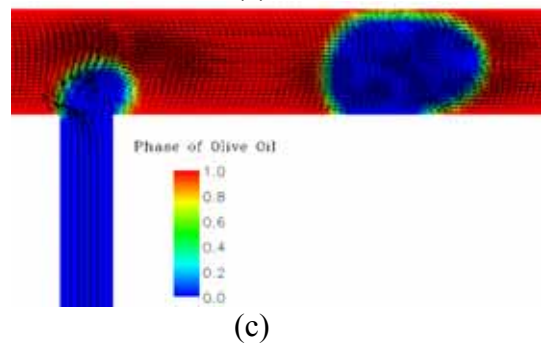
圖 6. Model A 在 P_b 處之壓力隨時間變化圖。



(a)



(b)



(c)

圖 7. Model A 消散相流體連續分率及速度向量分佈圖：(a) $\bar{t}=1.32$ ，(b) $\bar{t}=2.91$ ，(c) $\bar{t}=3.97$ 。

6.2 在匯流處加入不同形狀障礙物效應

在本節中，主要探討在 T 形微流道匯流處加上正方形及三角形障礙物，對所生成液滴形狀及流場現象改變之影響。首先探討在匯流處右側加入一個 $25 \times 25 \mu\text{m}$ 正方形障礙物的構型 (Model B)，當計算初始及邊界條件保持不變，與 Model A 算例相同，由圖 2(a) 可看出，此構型的消散相出口截面縮小至 Model A 的一半，根據質量守恆定律，消散相的出口平均速度將會提升，例如當 $\bar{t}=2.91$ 時，計算所得平均速度為 $7.9 \times 10^{-2} \text{ms}^{-1}$ ，較 Model A 的 $5.2 \times 10^{-2} \text{ms}^{-1}$ 為高，此時 Ca 數及初始的 Q_R 值雖然並未增加，但由於消散相出口速度的增加，使得產生的水泡向 +Y 方向的動量提高，同時液滴頸部長度也較短，造成液滴的生成提早。圖 8 為 Model B 計算所得的消散相流體連續分率變化圖，若將圖 8 與相同計算時間的圖 5 作一比較，可觀察出當經過相同的時間後，Model B 所生成的水泡與 Model A 相比，二相界面顯得變形量較少，且水

泡向下游方向移動的趨勢也比較緩慢，此現象在水泡形成初期尚不明顯，但是由時間到達 $\bar{t}=2.84$ 時，Model B 的第一顆液滴已生成（見圖 8(b)），而在此同時，Model A 的消散相水泡卻尚未自匯流處分離即可看出，在匯流處右側加入一個正方形障礙物將使液滴的分離時間提早，此結果與前面的預測亦完全符合。

若計算 Model B 所生成的液滴長度，可發現 l_w 比 Model A 減少了約 10%，成為 $142.3\mu\text{m}$ ，而 l_o 也減少了 15%，由原來的 $326.9\mu\text{m}$ 變成了 $278.2\mu\text{m}$ ， St 則增加到了 0.353，這證明了在匯流處加入方形障礙物，改變消散相的出口動量，確實可達到控制液滴提早生成的目的。

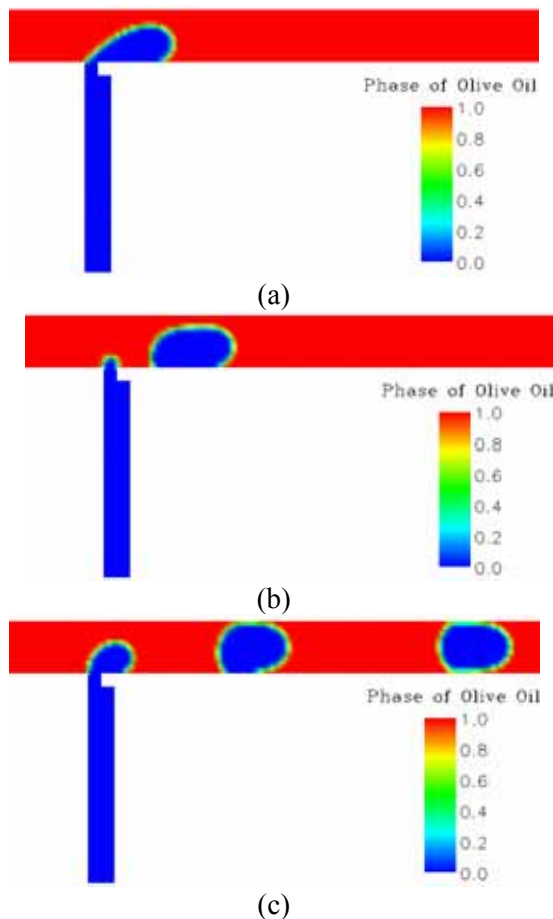


圖 8. Model B 消散相流體連續分率變化圖：
(a) $\bar{t}=2.12$ ，(b) $\bar{t}=2.91$ ，(c) $\bar{t}=6.62$ 。

接著，若將 Model B 的正方形障礙物自其對角切開，成為一個等邊三角形，同樣置於匯流處右側(Model C，如圖 2(b))，此構型的消散相出口流道截面寬度與 Model B 相同，亦為

$25\mu\text{m}$ 。圖 9 為 Model C 計算所得的消散相流體體積分率變化圖，若將圖 9 與圖 8 作一比較，可發現二者所得 l_w 、 l_o 及消散相出口平均速度值差距不大，但是由於 Model C 的三角形障礙物設計，使得消散相在出口時，增加了些微向 -X 方向的慣性動量，惟因流場雷諾數小，所以對液滴分離時間的影響並不大，只使 l_w 增加了約 3%，成為 $146.2\mu\text{m}$ 。圖 10 為 Model A、B、C 在 P_b 處所量得的壓力連續變化曲線比較，由圖中也可看出，匯流處前 P_b 的壓力值將隨著水泡成長逐漸提升，且 Model B、C 的設計將導致因壓阻增加造成的界面變形，提早與障礙物前緣接觸，並切斷水泡而產生獨立液滴，這也是造成 Model B、C 液滴的分離時間均較 Model A 早，且生成的液滴長度及間距也比 Model A 短的最主要原因。

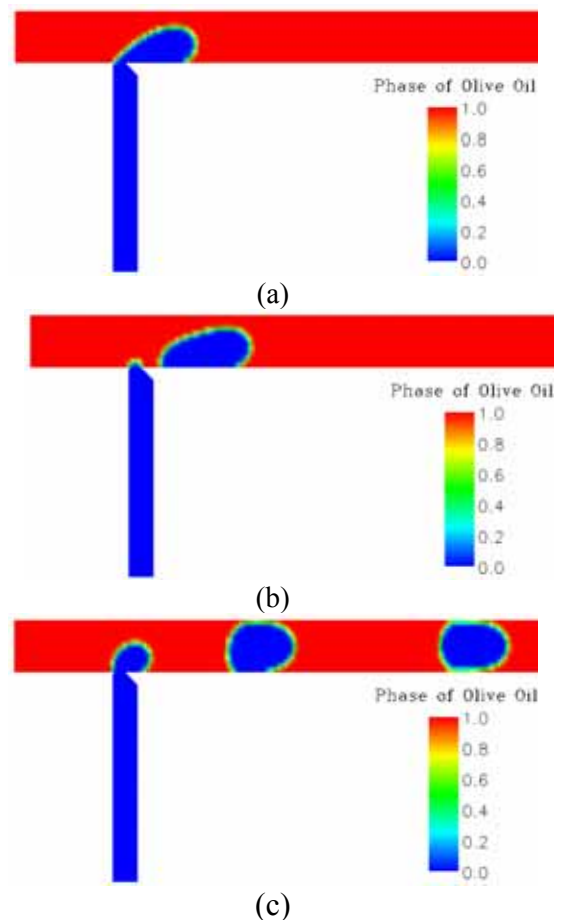


圖 9. Model C 消散相流體連續分率變化圖：
(a) $\bar{t}=2.12$ ，(b) $\bar{t}=2.91$ ，(c) $\bar{t}=6.62$ 。

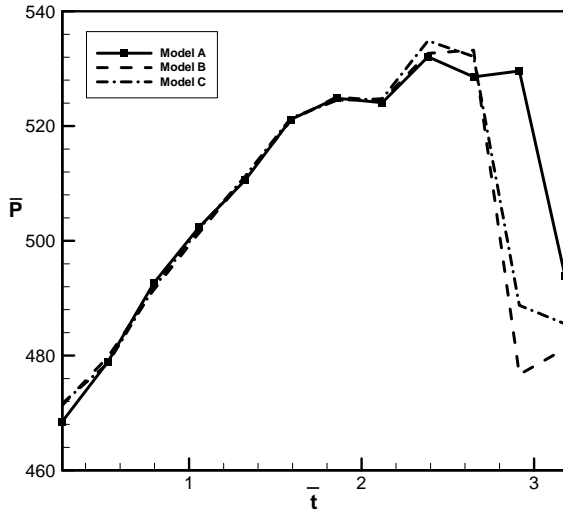


圖 10. Model A、B、C 在 P_b 處之壓力隨時間變化圖。

若是將同樣的正方形及三角形障礙物改放置於匯流處的左側 (Model D、E, 如圖 2(c)、(d)), 並以相同的參數及條件加以計算。從得到的流場模擬結果發現, Model D 的流場型態與 Model B 幾乎差異不大, 這是由於二者的消散相出口平均速度及 X、Y 方向的速度分量都幾乎相同, 唯有因消散相出口位置右移, P_b 距生成水泡左側相界面較遠, 使得所得壓力值較小, 除此之外, 液滴生成的機制均不會有明顯地改變; 但是 Model E 的結果 (如圖 11 所示) 卻與 Model C 有部份差距, 經計算所得其 l_w 為 $156.4\mu\text{m}$, l_o 為 $310.3\mu\text{m}$, St 則為 0.325, 探討其原因主要是由於 Model E 受到左側三角形障礙物的影響, 其消散相出口之 -X 方向速度分量比 Model C 小, 使得產生的匯流處壓阻值較低, 此結果可由圖 12 各構型微 T 型管在 P_b 處所量得的壓力連續變化曲線比較圖看出。因此, 在二算例液滴頸部長度相同時, Model E 的液滴將延後分離, 且所生成的液滴長度及間距較 Model C 長。

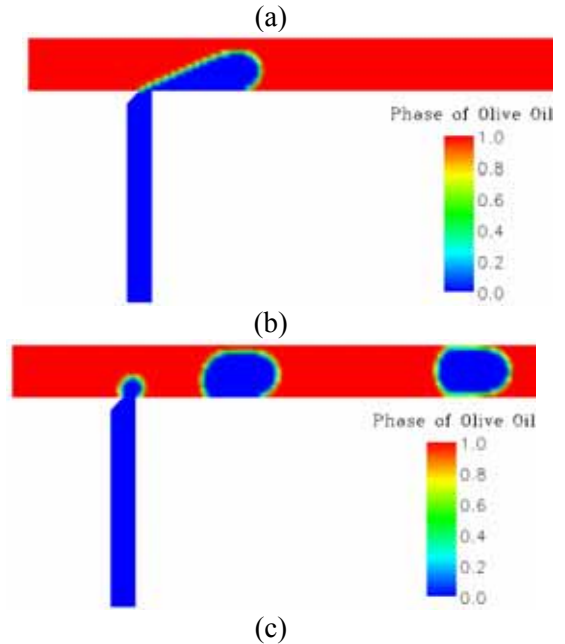
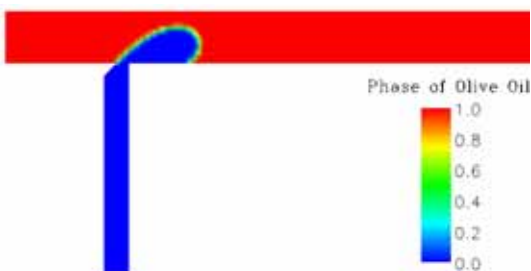


圖 11. Model E 消散相流體連續分率變化圖: (a) $\bar{t}=2.12$, (b) $\bar{t}=2.91$, (c) $\bar{t}=6.62$ 。

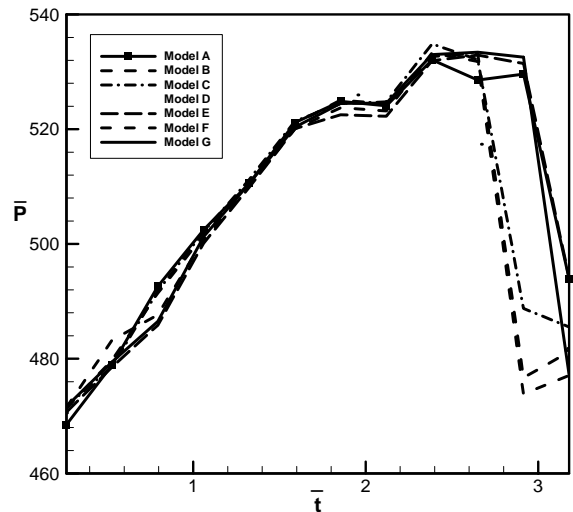


圖 12. Model A~G 在 P_b 處之壓力隨時間變化圖。

6.3 在匯流處加入不同數量障礙物效應

最後, 將原一個正方形障礙物一分為二, 改為兩個 $12.5 \times 25\mu\text{m}$ 的方型障礙物 (Model F, 如圖 2(e)), 但出口截面寬度仍維持 $25\mu\text{m}$ 不變, 此設計得到的消散相出口平均速度與 Model B、D 算例相同, P_b 處的壓力變化趨勢也並無太大差距, 與 Model A 相比, 此設計同樣使液滴的頸部縮短而分離較早, 所生成的液滴長度與間隔與 Model B、D 也大致相同, 但均比 Model

A 所計算為短，可知在匯流處加入對稱方形障礙物的設計，無論擺放位置為何均不會造成流場型態的改變，此點由 Model B、D、F 的壓力連續變化曲線趨勢相同可獲得說明。

另外，若將原一個三角形障礙物也增加為二個，三角形高度維持 $25\mu\text{m}$ 不變，但底部的長度減少一半，成為 $12.5\mu\text{m}$ (Model G，如圖 2(f))，消散相出口截面寬度同樣維持 $25\mu\text{m}$ ，以同樣初始及邊界條件進行流場模擬，結果可發現計算生成液滴長度與間隔幾乎與 Model E 相同，分別為 $156.4\mu\text{m}$ 及 $309\mu\text{m}$ ，可知障礙物構型對稱的設計方式將使出口 $\pm X$ 方向動量相互抵消，只會單純增加消散相出口流速，與 Model A 相比，整體壓力變化曲線會有所提升，也因此使得液滴提早分離，生成液滴長度與間隔較 Model A 為短。

以上各算例計算所得之參數綜整如表 2 所示，由結果發現在左側加入三角形障礙物設計的 Model E、G，可使因為消散相出口流速增加所引起液滴提早截斷的效應降低，而生成所有模型中除 Model A 外長度最長的液滴，均達到約 $156\mu\text{m}$ ，而 Model B、C、D、F 則因為障礙物引起的高壓阻值效應 (Model D 除外)，比 Model A 減少了 10% 以上的液滴長度。由以上這些完整數據的獲得，可知透過適當的數值模擬方法，將可準確地預測出不同幾何構型設計下 T 型微流道中二相流場的型態及趨勢，並運用流場可視化進行定性及定量的研究；同時，在 T 型微流道的設計中，利用在進口管匯流處加入不同形狀或是數量障礙物的作法，也確實可以達到控制液滴生成時間、改變液滴長度及形狀的目的。研究結果顯示，放置一個或兩個方形障礙物的效果並不明顯，未來可能應考慮不對稱形狀的障礙物設計，才可在液滴生成控制上提供更廣泛的應用。

表 2. 各算例生成液滴及流場相關參數

模 型	A	B	C	D
$l_w (\mu\text{m})$	159.0	142.3	146.2	141.0
$l_o (\mu\text{m})$	326.9	282.1	286.0	278.2
St	0.314	0.353	0.349	0.359
模 型	E	F	G	
$l_w (\mu\text{m})$	156.4	141.0	156.4	
$l_o (\mu\text{m})$	310.3	275.6	309.0	
St	0.325	0.356	0.328	

七、結論

本研究的主要目的在利用數值方法，探討在 T 型微流道匯流處，藉加入不同形狀及位置的障礙物，分析其對此流場型態中液滴生成機制的影響，以尋求控制液滴流場的新方法。此方式不需改變試劑表面張力、黏滯係數等物理性質，或調整試劑間的進口流量比，只需針對實際應用時的需求選擇適當的流道幾何構型設計，就可以獲得不同尺寸的液滴大小。研究的障礙物形狀包括方形及三角形，數量分別為一個或二個，設定連續相及消散相工作流體分別為橄欖油與去離子水，流場之 Ca 數為 2.6×10^{-3} ， Q_R 則為 0.38。經由本研究的模擬結果分析，可歸納出下列幾點重要結論：

(1) 本研究成功的以數值方法，模擬二維多相流之流場現象，包括液滴的生成、截斷、分離機制、流道內壓力及速度場的變化，以及改變流道設計對液滴長度或頻率的影響等，均可準確的加以預測，此方法不但可節省大量時間與金錢，更可提供完整的研究數據，並引為設計上一有效的參考工具。

(2) 若不改變流場 Ca 數及 Q_R 值，僅在消散相流體出口匯流處加入方形或三角形障礙物，消散相出口平均流速將會因出口截面的縮減而提高，同時，由於出口寬度變小，產生的水泡頸部長度也隨之變短，此效應將使液滴的截斷與分離現象提早發生，生成長度較短的液滴，本研究即利用此原理，控制液滴長度比原 Model A 減少 1.6~11.3% 之間。

(3) 在匯流處加入不同數量及位置方形障礙物的幾種算例 (Model B、D、F)，其控制液滴生成的長度差異並不明顯，相反地，三角形障礙物具有改變消散相出口動量，進而影響流道內壓力變化的特性，在設計時就顯得較具彈性，未來應考慮不對稱的障礙物設計，並配合改變流場 Ca 及 Q_R 值，將可在液滴生成控制上進行更廣泛的研究。

(4) 由流場可視化所得到消散相液滴內部產生的旋流效應，未來將可應用於微混合器或微反應器的設計上，藉增加擴散的距離與時間，增進試劑混合及化學反應進行的效率。

致謝

本研究承蒙國科會專題研究計畫編號 NSC-95-2221-E-014-036 之經費支助，僅此致謝。

參考文獻

- [1] Burns, M. A., Johnson, B. N., Brahmasandra, S. N., Handique, K., Webster, J. R., Krishnan, M., Sammarco, T. S., Man, P. M., Jones, D., Heldsinger, D., Mastrangelo, C. H., and Burke, D. T., "An Integrated Nanoliter DNA Analysis Device," *Science*, Vol. 282, pp. 484-487, 1998.
- [2] Nguyen, N. T., and Wu, Z., "Micromixer—a Review," *J. Micromech. Microeng.*, Vol. 15, pp. R1-16, 2005.
- [3] Wang, W., Li, Z. X., Luo, R., Lu, S. H., Xu, A. D., and Yang, Y. J., "Droplet-based Micro Oscillating-flow PCR Chip," *J. Micromech. Microeng.*, Vol. 15, pp. 1369-1377, 2005.
- [4] Thorsen, T., Roberts, R. W., Arnold, F. H., and Quake, S. R., "Dynamic Pattern Formation in a Vesicle-generating Microfluidic Device," *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 86, pp. 4163-4166, 2001.
- [5] Handique, K., and Burns, M. A., "Mathematical Modeling of Drop Mixing in a Slit-type Microchannel," *J. Micromech. Microeng.*, Vol. 11, pp. 548-554, 2001.
- [6] Song, H., Tice, J. D., and Ismagilov, R. F., "A Microfluidic System for Controlling Reaction Networks in Time," *Angew. Chem. Int. Ed.*, Vol. 42, pp. 767-772, 2003.
- [7] Tice, J. D., Song, H., Lyon, A. D., and Ismagilov, R. F., "Formation of Droplets and Mixing in Multiphase Microfluidics at Low Values of the Reynolds and the Capillary Numbers," *Langmuir*, Vol. 19, pp. 9127-9133, 2003.
- [8] Song, H., Bringer, M. R., Tice, J. D., Gerdt, C. J., and Ismagilov, R. F., "Experimental Test of Scaling of Mixing by Chaotic Advection in Droplets Moving Through Microfluidic Channels," *Appl. Phys. Lett.*, Vol. 83, pp. 4664-4666, 2003.
- [9] Zheng, B., Tice, J. D., and Ismagilov, R. F., "Formation of Arrayed Droplets by Soft Lithography and Two-phase Fluid Flow, and Application in Protein Crystallization," *Adv. Mater.*, Vol. 16, pp. 1365-1368, 2004.
- [10] Tice, J. D., Lyon, A. D., and Ismagilov, R. F., "Effects of Viscosity on Droplet Formation and Mixing in Microfluidic Channels," *Anal. Chim. Acta.*, Vol. 507, pp. 73-77, 2004.
- [11] Cristini, V., and Tan, Y. C., "Theory and Numerical Simulation of Droplet Dynamics in Complex Flows—a Review," *Lab Chip*, Vol. 4, pp. 257-264, 2004.
- [12] Link, D. R., Anna, S. L., Weitz, D. A., and Stone, H. A., "Geometrically Mediated Breakup of Drops in Microfluidic Devices," *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 92, 054503, 2004.
- [13] Anna, S. L., Christopher, G. F., and Noharuddin, N., "Droplet Breakup in Shear and Elongation Dominated Flows in Microfluidic Devices," IMECE 2005-80625, Orlando, Florida, USA, 2005.
- [14] Guillot, P., and Colin, A., "Stability of Parallel Flows in a Microchannel after a T-junction," *Phys. Rev. E*, Vol. 72, 066301, 2005.
- [15] Stone, Z. B., and Stone, H. A., "Imaging and Quantifying Mixing in a Model Droplet Micromixer," *Phys. Fluids*, Vol. 17, 063103, 2005.
- [16] Garstecki, P., Fuerstman, M. J., Stone, H. A., and Whitesides, G. M., "Formation of Droplets and Bubbles in a Microfluidic T-junction—Scaling and Mechanism of Break-up," *Lab Chip*, Vol. 6, pp. 437-446, 2006.
- [17] Menech, M. D., "Modeling of Droplet Breakup in a Microfluidic T-shaped Junction with a Phase-field Model," *Phys. Rev. E*, Vol. 73, 031505, 2006.
- [18] Tan, Y. C., Cristini, V., and Lee, A. P., "Monodispersed Microfluidic Droplet Generation by Shear Focusing Microfluidic Device," *Sensors and Actuators B*, Vol. 114, pp. 350-356, 2006.
- [19] Liu, K., Ding, H., Chen, Y., and Zhao, X. Z., "Droplet-based Synthetic Method Using Microflow Focusing and Droplet Fusion," *Microfluidics Nanofluidics*, Vol. 3, pp. 239-243, 2007.
- [20] Hong, Y., and Wang, F., "Flow Rate Effect on Droplet Control in a Co-flowing Microfluidic Device," *Microfluidics Nanofluidics*, in press, 2007.
- [21] Kinoshita, H., Kaneda, S., Fujii, T., and

- Oshima, M., “Three-dimensional Measurement and Visualization of Internal Flow of a Moving Droplet Using Confocal Micro-PIV,” *Lab Chip*, Vol. 7, pp. 338-346, 2007.
- [22] Collins, J., and Lee, A. P., “Control of Serial Microfluidic Droplet Size Gradient by Step-wise Ramping of Flow Rates,” *Microfluidics Nanofluidics*, Vol. 3, pp. 19-25, 2007.
- [23] Mohr, S., Zhang, Y. H., Macaskill, A., Day, P. J. R., Barber, R. W., Goddard, N. J., Emerson, D. R., and Fielden, P. R., “Numerical and Experimental Study of a Droplet-based PCR Chip,” *Microfluidics Nanofluidics*, in press, 2007.
- [24] Nguyen, N. T., Beyzavi, A., Ng, K. M., and Huang, X., “Kinematics and Deformation of Ferrofluid Droplets under Magnetic Actuation,” *Microfluidics Nanofluidics*, in press, 2007.