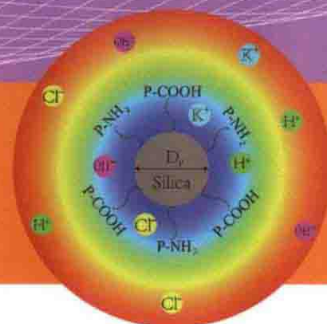


微纳电动流体运输基础 及数值实现

周腾 闻利平 史留勇 ○ 著

WEINA DIANDONG LIUTI SHUYUN
JICHU JI SHUZHI SHIXIAN



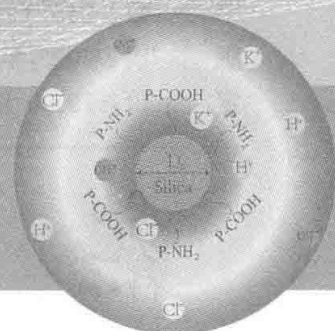
华中科技大学出版社
<http://press.hust.edu.cn>

国家重点研发计划资助 (2022YFB3805900以及2022YFB3805904)

微纳电动流体输运基础 及数值实现

周腾 闻利平 史留勇 著

WEINA DIANDONG LIUTI SHUYUN
JICHU JI SHUZHIXIAN



华中科技大学出版社

<http://press.hust.edu.cn>

中国·武汉

内 容 简 介

微纳电动流体输运是微纳流控芯片中常见的现象,由于电力在流体与粒子操控方面的优势,其在生物检测、能源化工、材料合成等领域有重要应用。本书主要阐述微米、亚微米至纳米尺度下流体及颗粒在电驱动下流动及输运规律,采用 COMSOL Multiphysics 有限元软件对颗粒与流体输运问题进行直接数值实现,案例包括基本的双电层理论、微尺度电泳及电渗现象,及其较为热门的纳米孔相关应用等,为微纳流控系统精准电动流体操控与多学科交叉提供数值解决方案,可作为相关方向研究生和学者的参考资料。

图书在版编目(CIP)数据

微纳电动流体输运基础及数值实现/周腾,闻利平,史留勇著.—武汉:华中科技大学出版社,2022.11

ISBN 978-7-5680-8878-7

I.①微… II.①周… ②闻… ③史… III.①纳米技术-应用-电流体动力学-流体输送-研究 IV.①O361.4

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2022)第 234717 号

微纳电动流体输运基础及数值实现

Weina Diandong Liuti Shuyun Jichu ji Shuzhi Shixian

周 腾 闻利平 史留勇 著

策划编辑:张 毅

责任编辑:狄宝珠

封面设计:廖亚萍

责任监印:朱 玢

出版发行:华中科技大学出版社(中国·武汉)

电话:(027)81321913

武汉市东湖新技术开发区华工科技园

邮编:430223

录 排:武汉正风天下文化发展有限责任公司

印 刷:武汉科源印刷设计有限公司

开 本:710mm×1000mm 1/16

印 张:12.5

字 数:245 千字

版 次:2022 年 11 月第 1 版第 1 次印刷

定 价:79.00 元



本书若有印装质量问题,请向出版社营销中心调换
全国免费服务热线:400-6679-118 竭诚为您服务
版权所有 侵权必究

前言

本书针对微纳通道中的流体以及颗粒在电驱动下的电泳、电渗等现象进行了讨论,重点阐述了微纳尺度下的颗粒、流体相关的数值模拟。相关的数值模拟均采用 COMSOL Multiphysics 有限元软件完成,通过求解偏微分方程或偏微分方程组来实现实际物理现象的仿真,进而达到使用数学方法求解物理现象的目的。通过数值计算能够将宏观与微观相连接,能够对实验结果进行补充解释,并验证实验的正确性。

微流控芯片技术已发展成为一个生物、化学、医学、流体、电子、材料、机械等学科交叉的崭新研究领域。部分研究者并不擅长数值模拟的 COMSOL 程序的构建,本书在提供案例的同时还附带程序构建的具体步骤,读者在使用时可以根据需求对程序进行拓展以加深研究,获得更深入的思考。

本书的正文部分包括了微纳流体力学基础知识(第 1 章)、纳米通道中双电层的流体特性(第 2 章)、交流电场中胶体粒子之间的相互作用(第 3 章)、光诱导介电泳原理下的微颗粒运动机理(第 4 章)、一种二维拓扑优化混合器(第 5 章)、功能基团修饰的纳米颗粒刷层电荷特性(第 6 章)、纳米颗粒在聚电解质刷层修饰纳米孔内的电动输运(第 7 章),以及纳米尺度受限空间中表面电荷调节的非对称离子输运(第 8 章)。

值得注意的是,本书并不是对微纳芯片的研究综述,主要是针对微纳尺度下流体以及颗粒在电驱动下的数值模拟研究,不涉及相关的微纳尺度加工技术和材料制备。

本书主要是基于一些已发表的期刊文章来撰写,在此感谢在读博士生何孝涵、王天义,在读硕士生吴之豪、李沛然、赵明星、卞钦、赵俊程等同学在书稿整理、绘图等工作中给予的大力支持。感谢海南大学机电工程学院和中科院理化技术研究所的关心与帮助,感谢国家重点研发计划资助(2022YFB3805900 和 2022YFB3805904)、海南省重点研发项目(ZDYF2022SHFZ301 和 ZDYF2022SHFZ033)、国家自然科学基金(52075138 和 61964006)提供的支持。

目 录

1 微纳流体力学基础知识	1
1.1 微纳流体简介	1
1.2 电动力学基础知识	3
2 纳米通道中双电层的流体特性	22
2.1 引言	22
2.2 数学模型	22
2.3 数值实现	23
2.4 本章小结	34
3 交流电场中胶体粒子之间的相互作用	36
3.1 引言	36
3.2 数学模型	38
3.3 数值实现	40
3.4 结果与讨论	51
3.5 本章小结	59
4 光诱导介电泳原理下的微颗粒运动机理	62
4.1 引言	62
4.2 数学模型	67
4.3 数值实现	72
4.4 结果与讨论	80
5 一种二维拓扑优化混合器	91
5.1 引言	91
5.2 数学模型	96
5.3 模型建立	97
5.4 结果与讨论	104
5.5 本章小结	109

6	功能基团修饰的纳米颗粒刷层电荷特性	112
6.1	引言	112
6.2	数学模型	114
6.3	数值实现	117
6.4	结果与讨论	128
6.5	本章小结	134
7	纳米颗粒在聚电解质刷层修饰纳米孔内的电动输运	136
7.1	引言	136
7.2	数学模型	138
7.3	数值实现	141
7.4	结果与讨论	153
7.5	本章小结	159
8	纳米尺度受限空间中表面电荷调节的非对称离子输运	163
8.1	引言	163
8.2	数学模型	165
8.3	数值实现	166
8.4	结果与讨论	171
8.5	本章小结	191

1 微纳流体力学基础知识

自微米纳米技术产生以来,针对微米纳米尺寸下生物微颗粒的操控一直都是热点之一,通过何种方法能够实现颗粒的分离、富集、捕获、排列和融合是科学家们迫切想要解决的问题。随着生物学和医学技术的迅速发展,生物粒子例如肿瘤细胞(Goralczyk et al., 2022; Guerzoni et al., 2022; Guo et al., 2022; Habibey et al., 2022)和 DNA 分子(Kurleya et al., 2022; Yang et al., 2022; Yin et al., 2022; Zhang et al., 2022)的检测和跟踪以及操控逐渐受到了科学家们的关注(Beh et al., 2014; Chen and Jiang 2017; Fornell et al., 2017; Hatori et al., 2018; Islam et al., 2018; Liu et al., 2022; Solsona et al., 2019; Zhang and Chen 2021)。微流控芯片(microfluidic chip),又称微全分析系统(micro total analysis system, μ -TAS)或者芯片实验室(lab-on-a-chip),指的是在一个尽可能小的平台上分离、固定、纯化以及分析生物粒子(Udoh et al., 2016; van Oudenaarden and Hollfelder 2022; Wang et al., 2017; Wang et al., 2011; Wang et al., 2019; Zhu et al., 2015; Zou et al., 2019; Zubaite et al., 2017)。微流控芯片技术的出现给我们提供了一种全新的思路,它能够将生物、化学、医学分析过程的基本操作单元集成到一块微米尺度的芯片上,自动完成分析的全过程(Takken and Wille 2022; Tomov et al., 2017; Tonin et al., 2016; Tresset and Iliescu 2016; Tsui et al., 2011; Wang et al., 2019; Wang et al., 2022; Xuan et al., 2022; Yang et al., 2022; Yao et al., 2018; Yin et al., 2022)。

本章将简要介绍微流体的起源、发展和应用以及从微流体到纳流体的演变。微纳流体在微米、纳米级通道中质点运动方面的许多应用是相关的。在微纳流体领域中,电动力学已经成为操纵质点方面最有前途的工具之一。因此,对质点在电动力下微纳级通道中运动的综合理解对于微流控装置的发展至关重要。

1.1 微纳流体简介

微流体是一种处理液体(包括液滴和悬浮颗粒)的技术,它在几何上局限于一个很小的范内,通常大于 1 μm 、小于 1 mm。最初发展微流体体系是因为生物和化学领域的微量分析工具的需要,特别是由于 20 世纪 80 代基因组爆炸式发展(Sachdev et al., 2016)。同时,在精密加工技术上的重要发展,成功运用在微电子学上,这也推动了微流体发展(Perez-Gonzalez 2021; Perez et al., 2015; Solsona et al., 2019;

Zagnoni and Cooper 2011; Zhang et al., 2019)。类似于集成电路对计算和自动化的重要影响,微流体对各种生物和化学上的运用,有着同样重要的革新化的作用。狭小的微通道和高集成通信网络满足了生化领域的许多要求,例如样本体积小、花费低、响应快速、大规模并行、自动分析、灵敏度高和可携带性强,以及最小的交叉污染。图 1-1 所示为基于液滴的微反应器和 DEP 的细胞分选器,图 1-2 所示为微流控装置中 CTCs 的磁分选。

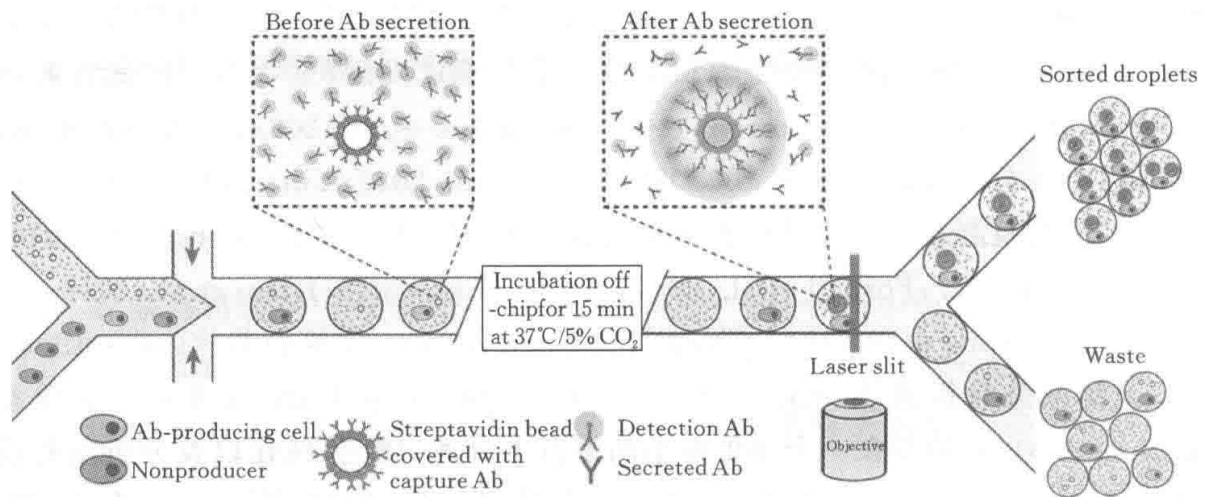


图 1-1 基于液滴的微反应器和 DEP 的细胞分选器

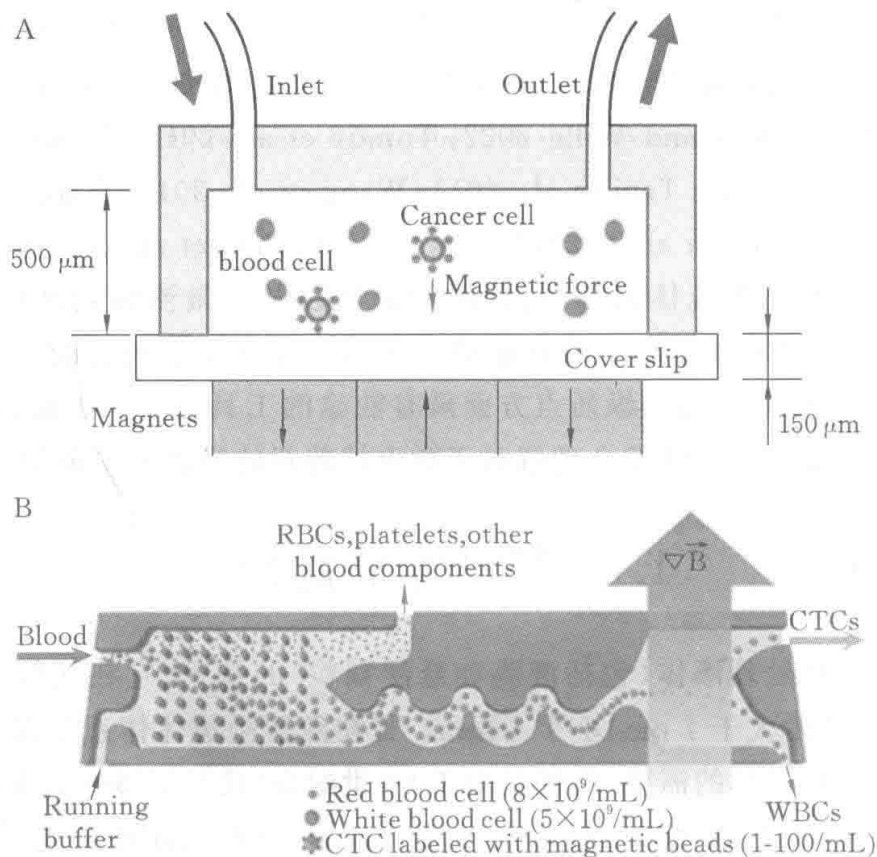


图 1-2 微流控装置中 CTCs 的磁分选

微流体系统有着广泛且潜在的运用,包括生物检测、化学和生物反应器、医药合成、临床诊断和环境监测等(Chan et al., 2021; Connors-Burrow et al., 2013; Mazutis et al., 2009; Mihai et al., 2013; Pekin et al., 2011; Thon et al., 2013)。

近年来,在单分子研究方面,人们对基于纳流体检测的兴趣逐渐上升,这要求至少一个典型尺寸的微管道在 100 nm 以下。从微流体向纳流体的演变过程中,伴随着新的物理现象(Thomas et al., 2018; Thomas et al., 2021; Ud-Din et al., 2016; Udoh et al., 2016; van der Veecken et al., 2019; van Horik et al., 2020; van Oudenaarden and Hollfelder 2022; Vardaka et al., 2020)。例如,离子在纳流体中的移动是通过表面电荷控制的,体离子浓度的独立是由于不断提高的面体比(Vella et al., 2015; Vella et al., 2016; Villasmil et al., 2021; Visaveliya et al., 2022; Vitiello et al., 2015; Vorkas et al., 2022; Vrablik et al., 2019; Wang et al., 2011)。这种独特的现象提供了一种可能性,即选择性地控制离子通过纳米孔来达到不同的目的(Vella et al., 2015; Vella et al., 2016; Villasmil et al., 2021; Visaveliya et al., 2022; Vitiello et al., 2015; Vorkas et al., 2022; Vrablik et al., 2019; Wang et al., 2011; Whiteside and Strauss 2014; Whiteside et al., 2017a; Whiteside and Zebryk 2015; Whiteside and Fowler 2014; Whiteside et al., 2022; Whiteside 2016; Whiteside et al., 2017b; Whiteside et al., 2014)。当这种典型的纳流体的长度变得可与德拜长度相比较时,这种电荷可控性变得更加重要。

1.2 电动力学基础知识

1.2.1 双电层

双电层理论研究的是电极-溶液界面结构,本质上是界面化学(物理)。在一般情况下,当大多数固体表面与离子水溶液接触时,它们往往会获得表面电荷。在带电表面的附近会形成由相反电荷离子所构成的一层薄膜,即双电层(electrical double layer, EDL)。如图 1-3 所示,双电层由紧密层和扩散层组成,其中在紧密层内的离子受到强大的静电力作用是固定不动的,而在扩散层内的离子则可以自由移动,图中包括固相(电极)和液相(溶液),橙色带正号的圆表示正电荷,蓝色带负号的圆表示负电荷。在扩散层内由净电荷所产生的电势服从经典的泊松方程(Poisson's equation):

$$-\epsilon_0\epsilon_f\nabla^2\varphi=\sum_{i=1}^nFz_ic_i$$

式中: ϵ_0 和 ϵ_f 分别表示真空中的绝对介电常数和溶液中相对介电常数; φ 指的是流体中的电势; F 指的是法拉第常数; z_i 指的是第 i 个离子的化合价; c_i 指的是第 i 个

粒子的摩尔浓度; n 指的是粒子的总价数。

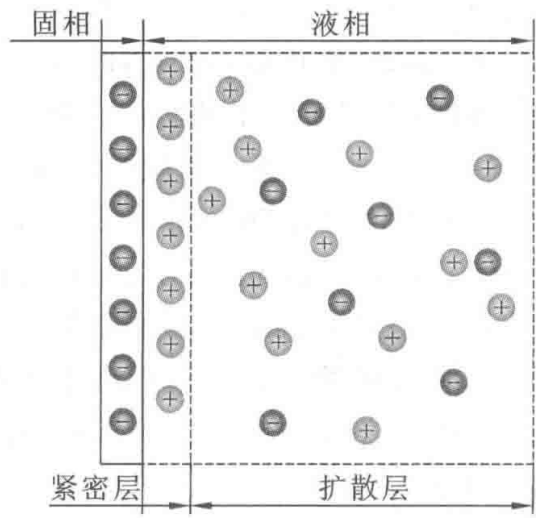


图 1-3 双电层结构图

固体表面形成的表面电荷一般分为三种形式：离子双电层、吸附双电层、偶极双电层 (Double et al., 2007) (Double, At, and Interfaces 2007) (Double, At, & Interfaces, 2007)。

(1) 离子双电层。当表面带有易解离分子基团时，例如羧基在盐溶液中出现电离现象，导致固体表面产生负电荷或正电荷形成电场，从而吸引溶液中离子在固体表面形成双电层，如图 1-4(a) 所示。

(2) 吸附双电层。液体与固体界面之间产生电荷或质子的转移，导致溶液中的离子在固 / 液界面上均匀排布，产生双电层，如图 1-4(b) 所示。

(3) 偶极双电层。当固 / 液界面受到电场影响时，溶液中的离子在界面处形成偶极子，并且进行定向均匀排布，从而产生双电层，如图 1-4(c) 所示。

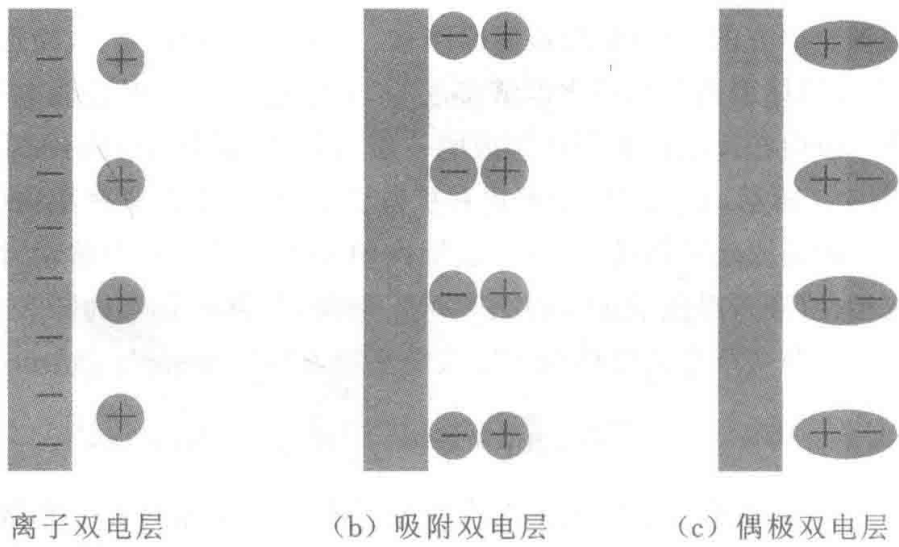


图 1-4 三种形式的双电层

德拜长度一个是描述双电层厚度的物理量,一般情况下用 λ_D 来表示:

$$\lambda_D = \sqrt{\epsilon_0 \epsilon_f RT / \sum_{i=1}^n F^2 z_i^2 C_{i0}}$$

式中: ϵ_0 和 ϵ_f 分别代表真空中绝对介电常数与溶液中相对介电常数; z_i 是第 i 种离子的化合价; C_{i0} 是溶液中离子的体积浓度; T 是溶液温度; F 是法拉第常数; R 是通用气体常数。

一般情况下离子在溶液中的运动主要由扩散、对流通量和电迁移来控制,这三项组成了著名的 Nernst-Planck 方程用来描述溶液中的离子通量:

$$N_i = -D_i \nabla c_i + u c_i - z_i \frac{D_i}{RT} F c_i \nabla \varphi$$

对式中的离子浓度利用 Boltzmann 分布进行解析求解:

$$c_i = C_{i0} \exp\left(-z_i \frac{F\varphi}{RT}\right)$$

得到 Poisson-Boltzmann 方程:

$$\nabla^2 \frac{zF\varphi}{RT} = \frac{1}{\lambda_D^2} \sinh\left(\frac{zF\varphi}{RT}\right)$$

式中: z 是 z_i 的绝对值,并且我们通过德拜长度的公式可以得出结论,双电层的 EDL 厚度主要是由各离子的体积浓度决定的。例如,在 25 °C 的室温下,将一个固体表面浸入 100 mM KCl 溶液中,得到的双电层厚度约为 1 nm。通过 Poisson-Boltzmann 方程我们可以得到当溶液域的外边界满足 Boltzmann 分布时,双电层在没有外部电场及流场的干扰下处于平衡状态。

去质子化 / 质子化反应是自然界中一种十分常见的化学反应,例如氧化还原反应、大分子物质发生水解反应等。当分子中的质子(H) 在外加作用下脱出从而产生碱性基团的过程被称为去质子化反应;同样分子获得质子(H) 产生酸性基团的过程被称为质子化反应。有些固体表面与离子溶液接触时也会在固 / 液界面处发生去质子化 / 质子化反应,从而导致固体表面产生离子双电层。这一现象在表面涂层技术和膜结构设计中得到了广泛应用。



上述式中两个反应均为平衡反应,反应平衡系数分别为 K_a 和 K_b ,一般来说反应平衡系数越大,反应越容易进行。同时当溶液中的质子(H) 量增加时,也会对反应平衡产生影响。

电场能量密度一般指的是单位体积内所蕴含的电场能量,可以用来描述区域内电场强度或两物体发生交互作用时的充放电效果。在一个存在自由电荷的水溶液系统中,当我们向溶液中添加少量电荷 $\delta\rho_f$ 时,系统中的总能量密度增加量如下:

$$\delta\omega = \int \varphi \delta\rho_f d^3r$$

其中 φ 是静电势, 假设原始的电荷密度与溶液不发生改变。通过 Gauss 定律我们可以得出电位移 D 与电荷密度增量 ρ_f 之间的关系:

$$\nabla \cdot D = \rho_f$$

电能密度增量 ω 与电位移 D 的关系:

$$\delta\omega = \int \varphi \nabla \cdot \delta D d^3r$$

其中 δD 是与电荷量相关的电位移增量, 所以得出:

$$\delta\omega = \int \nabla \cdot (\varphi \delta D) d^3R - \int \nabla \varphi \cdot \delta D d^3r$$

$$\delta\omega = \int \varphi \delta D \cdot dS - \int \nabla \varphi \cdot \delta D d^3r$$

根据 Gauss 定律, 如果介质处于有限空间范围, 则可以忽略表面项, 得出:

$$\delta\omega = - \int \nabla \varphi \cdot \delta D d^3r = \int E \cdot \delta D d^3r$$

由传统方法得出 $D = \epsilon_0 \epsilon_f E$, 且溶液中的 ϵ_f 不受电场影响。我们假设位移场的增量从 0 到 D , 得到:

$$\omega = \int_0^D \delta\omega = \int_0^D \int E \cdot \delta D d^3r$$

$$\omega = \int \int_0^E \frac{\epsilon_0 \epsilon_f \delta(E^2)}{2} d^3r = \frac{1}{2} \int \epsilon_0 \epsilon_f E^2 d^3r$$

通过上述式子可以推出:

$$\omega = \frac{1}{2} \int E \cdot D d^3r$$

这一结果表明了电场能量密度与电位移之间的关系, 经常被大多数经典线性理论模型引用。

1.2.2 电渗

当外部电场平行施加在一个静止的带电表面时, 在带电表面的双电层内部, 多余的反离子将会向相反带电的电极运动, 并拖曳黏性流体。由双电层内净电荷和外加电场之间的静电相互作用产生的诱导流动称为电渗或者电渗流 (electroosmotic flow, EOF), 其示意图如图 1-5 所示, 带正号的圆表示正电荷, 带负号的圆表示负电荷, E 表示外部施加的电场, u 表示流体的速度。

根据动量守恒定律, 流体的运动是由修正后的纳维-斯托克斯 (Navier-Stokes) 方程和连续性方程所控制:

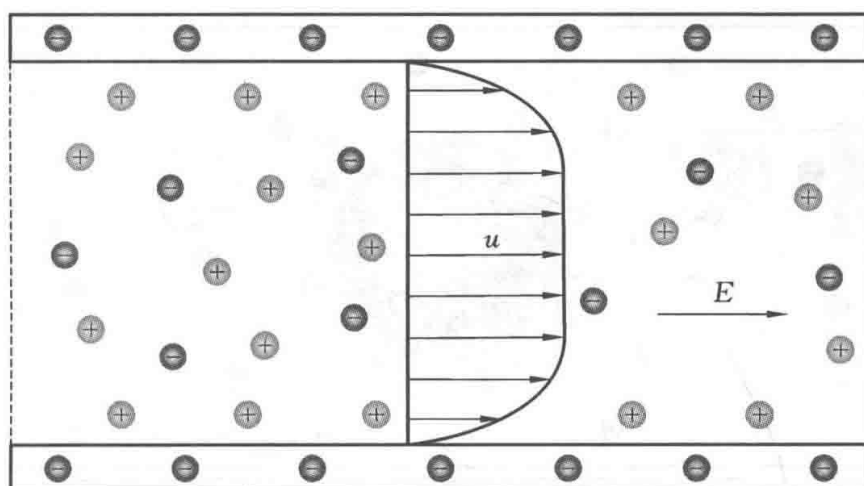


图 1-5 电渗流示意图

$$\rho \left(\frac{\partial u}{\partial t} + u \cdot \nabla u \right) = -\nabla p + \mu \nabla^2 u - \epsilon_0 \epsilon_f \nabla^2 \phi E$$

$$\nabla \cdot u = 0$$

式中： ρ 指的是流体密度； u 指的是流体速度； t 指的是时间； p 指的是压力； μ 指的是流体动力学黏度； E 指的是外部施加电场的强度。

双电层的厚度为纳米级，远小于微流控器件的特征长度，因此在微通道内的电渗流速度分布几乎是均匀的，属于柱塞流，所以可以使用一恒定的速度来描述双电层外的电渗流速度，即 Helmholtz-Smoluchowski 速度，公式如下：

$$u_{\text{EOF}} = -\frac{\epsilon_0 \epsilon_f \zeta E}{\mu}$$

式中： ζ 是指双电层的 Zeta 电势。

1.2.3 电泳

电泳(electrophoresis, EP)指的是悬浮在水溶液中的带电粒子在外部施加电场的作用下，与其表面周围流体介质发生相对运动的现象。如图 1-6 所示，微通道中间悬浮有一个带负电荷的粒子，其外表面的双电层会吸引流体介质中的正电荷并产生聚集，在外部施加电场 E 的作用下，该带负电粒子会产生速度大小为 u_p 且运动方向与电场方向相反的运动，而带电粒子周围流体的速度大小为 u_f ，运动方向与粒子运动方向相反，粒子与流体产生相对运动，则粒子的电泳速度大小为 $u_{\text{EP}} = u_p + u_f$ ，除此之外，上下两个固相和液相的交界面处还存在一个电渗流速度 u_{EOF} 。

当悬浮粒子的半径尺寸远大于粒子表面的双电层厚度时，满足双电层薄层假设，双电层局部放大可视为一个平面，此时电泳的速度可以表述为：

$$u_{\text{EP}} = -\frac{\epsilon_0 \epsilon_f \zeta_p E}{\mu}$$

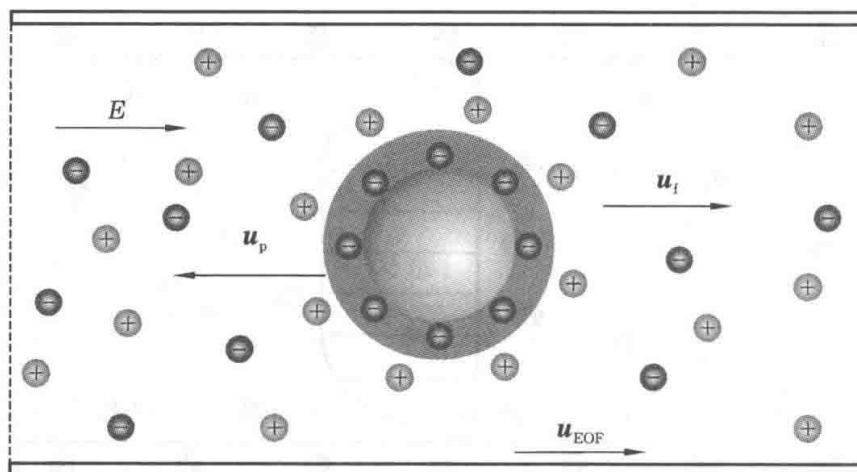


图 1-6 电泳示意图

式中, ζ_p 是指颗粒的 Zeta 电势。

1.2.4 介电泳与光诱导介电泳

电泳运用在微流控芯片中,以其快速高效且易于操控的优点可用于各类样品的分离分析当中。然而在实际的运用中,也有许多待操控的微颗粒是不带电的,这就意味着这些不带电粒子无法利用电泳技术来实现操控功能,在这种情况下介电泳(dielectrophoresis, DEP)技术应运而生。介电泳也称双向电泳,指的是浸入在水溶液中的可极化粒子在空间非均匀电场中被极化,并受到电场力作用从而发生泳动的现象(Pohl, 1978)。介电泳相对于电泳最大的区别在于受到介电泳作用的粒子带电与否均可,同时需要外部施加的电场是非均匀的。粒子所受介电力的大小与粒子本身带电与否无关,只与粒子的大小和电学性质、周围流体介质的电学性质以及外部施加电场的场强和频率等参数有关。

介电泳示意图如图 1-7 所示,悬浮在流体介质中的可极化粒子在外部施加非均匀电场的作用下被极化,进而发生泳动的现象。根据粒子与流体介质的不同极化程度可以将介电泳分为正介电泳和负介电泳两种情况。如图 1-7(a)所示,当粒子的极化程度大于周围溶液的极化程度时($\epsilon_p > \epsilon_f$),粒子所受介电泳力指向电场强度高的方向,称为正介电泳(positive DEP, p-DEP)。如图 1-7(b)所示,当粒子的极化程度小于周围溶液的极化程度时($\epsilon_p < \epsilon_f$),粒子所受介电泳力指向远离电场强度高的方向,称为负介电泳(negative DEP, n-DEP)。这里还需要补充的是,及时改变图 1-7 中所示的电场方向,即改变正负极位置,对应的正负介电泳也不会发生改变,颗粒的运动方向也不会发生改变,这是因为改变外加交流电场的方向时,颗粒周围由于极化所产生的感应电荷也会随之改变,而决定颗粒运动方向的电场梯度并没有发生改变。

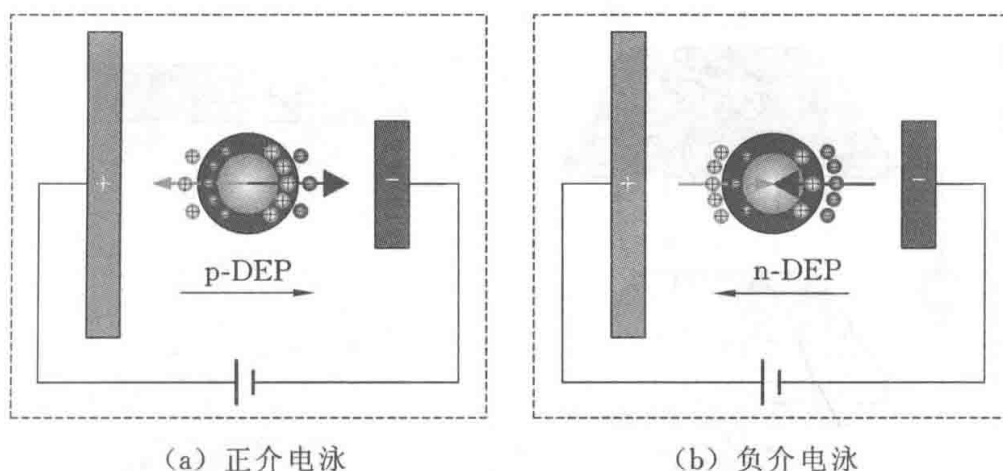


图 1-7 介电泳示意图

采用介电泳技术的微流控芯片中使用的物理电极多为金属材料,为实现精确操控一些生物粒子的功能,往往需要设计形状复杂的电极,加工成本高的同时对加工工艺的要求也较高,并且加工出的物理电极适用范围小,往往只能在单一种类的芯片中使用,扩展性低意味着使用成本的增加。光诱导介电泳是在介电泳原理的基础上,用光学图案照射光导层形成的虚拟电极代替实体的物理电极,形成非均匀电场后与介电泳相结合的一种技术。采用光诱导介电泳的微流控芯片操控粒子与传统的介电泳芯片相比,受力机制是一样的,不同之处在于光诱导介电泳对粒子本身带电与否不做限制,同时对电场的要求是需要有局部的空间非均匀电场,光诱导介电泳芯片基本原理示意图如图 1-8(a)所示。图 1-8(b)所示为光诱导介电泳芯片的截面示意图,上下两层皆为有氧化铟锡(indium tin oxide, ITO)的导电玻璃,其中下层的玻璃上还有沉积的光导层,材料为氢化非晶硅等光电导材料。这种光电导材料的特性是在光照条件下会产生电子空穴对,即光生载流子,由于光照区域光生载流子的浓度升高使得该区域的电导率随之增大,在光照区和暗区就会产生不同的电压降,进而在中层充满溶液的微通道内形成一个空间非均匀电场,最后对通道内的粒子实现介电操控。

电泳力作为介电泳技术中几个重要的物理量之一,能否准确地计算其数值的大小直接影响使用介电泳技术的芯片的效果。电偶极子法是计算介电泳力的常用方法,通过该方法获得的作用在半径为 r 的球形颗粒上的时间平均介电泳力可以表示为:

$$F_{\text{DEP}} = 2\pi r^3 \epsilon_0 \epsilon_f \text{Re}[K(\omega)] \nabla |E_{\text{rms}}|^2 \quad (1-1)$$

式中: Re 指的是虚数的实部; $K(\omega)$ 指的是克劳修斯-莫索提因子(Clausius-Mossotti factor); ω 指的是交流电场的频率; E_{rms} 指的是均方根电场强度。外加电场为 $E = -\nabla\varphi$, 其与电势有关且满足拉普拉斯(Laplace)方程:

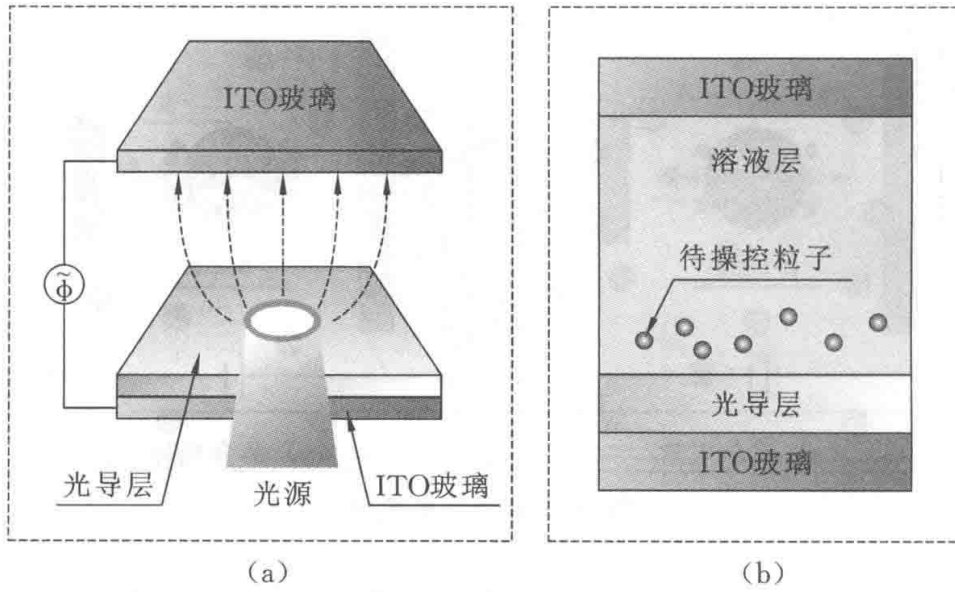


图 1-8 光诱导介电泳示意图

$$\nabla \cdot (\bar{\epsilon} \nabla \varphi) = 0 \quad (1-2)$$

克劳修斯 - 莫索提因子的实部与介电泳的性质有关,当它的值为正时,说明此时粒子受到正介电泳的影响会往电场强度高的区域运动,反之当它的值为负时,粒子受到负介电泳的影响会往电场强度低的区域运动,它的计算公式如下:

$$K(\omega) = \frac{\bar{\epsilon}_p - \bar{\epsilon}_f}{\bar{\epsilon}_p + \bar{\epsilon}_f} \quad (1-3)$$

式中: $\bar{\epsilon}_p$ 和 $\bar{\epsilon}_f$ 分别是颗粒和流体介质的复介电常数,且它们的值分别为 $\bar{\epsilon}_p = \epsilon_0 \epsilon_p - i\sigma_p/\omega$ 和 $\bar{\epsilon}_f = \epsilon_0 \epsilon_f - i\sigma_f/\omega$,而 σ_f 和 σ_p 分别是颗粒和流体介质的电导率, $i = \sqrt{-1}$ 代表虚数的单位。

使用电偶极子法计算介电泳力时也有一定的局限性,该方法仅在粒子的存在并不会显著影响电场且粒子的尺寸远小于微通道的特征长度时才有效,但是如果当微流控设备的特征长度和粒子的尺寸大小相当时,用电偶极子法计算介电泳力是不够精确的。先前的研究表明,直接积分粒子表面上的麦克斯韦应力张量(Maxwell stress tensor, MST) 是计算介电泳力最严密的方法,即使对于高度不均匀的电场和形状不规则的粒子也能求得严格的解(Al-Jarro et al.,2007 ;Rosales et al.,2005 ;Wang et al.,1997),公式如下:

$$F_{DEP} = \int T \cdot n d\Gamma = \int \bar{\epsilon} \left[EE - \frac{1}{2}(E \cdot E)I \right] \cdot n d\Gamma \quad (1-4)$$

式中: T 指的是麦克斯韦应力张量; Γ 指的是粒子的表面; I 为单位张量。有学者揭示,通过电偶极子法计算得出的介电泳力只是由麦克斯韦应力张量法导出的一阶介电泳力(Wang et al.,1997)。该方法在静电场和交变电场下均能使用,只是推导

出的公式组成略有区别。在静电场下, $\bar{\epsilon} = \epsilon_0 \epsilon_f$, 将 E 分为 x 、 y 、 z 三个方向的分量, 即 $E = [E_x, E_y, E_z]^T$, 那么 EE 和 $(E \cdot E)I$ 的公式如下:

$$EE = \begin{bmatrix} E_x^2 & E_x E_y & E_x E_z \\ E_y E_x & E_y^2 & E_y E_z \\ E_z E_x & E_z E_y & E_z^2 \end{bmatrix}^T$$

$$(E \cdot E)I = (E_x^2 + E_y^2 + E_z^2)I = \begin{bmatrix} E_x^2 + E_y^2 + E_z^2 & 0 & 0 \\ 0 & E_x^2 + E_y^2 + E_z^2 & 0 \\ 0 & 0 & E_x^2 + E_y^2 + E_z^2 \end{bmatrix}$$

代入式(1-4) 可得, 静电场下 MST 方法计算介电泳力的公式为:

$$F_{\text{DEP}} = \int T \cdot n d\Gamma = \int \bar{\epsilon} \left[EE - \frac{1}{2} (E \cdot E) I \right] \cdot n d\Gamma$$

$$= \epsilon_0 \epsilon_f \int \begin{bmatrix} \frac{1}{2} (E_x^2 - E_y^2 - E_z^2) \cdot n_x + E_x E_y \cdot n_y + E_x E_z \cdot n_z \\ E_y E_x \cdot n_x + \frac{1}{2} (E_x^2 - E_y^2 - E_z^2) \cdot n_y + E_y E_z \cdot n_z \\ E_z E_x \cdot n_x + E_z E_y \cdot n_y + \frac{1}{2} (E_x^2 - E_y^2 - E_z^2) \cdot n_z \end{bmatrix} d\Gamma \quad (1-5)$$

对于交变电场, 式(1-5) 中的 $\bar{\epsilon} = \epsilon_0 \epsilon_f - i\sigma_f/\omega$, 进行分析时需要引入欧拉公式, 有如下方程:

$$e^{i\omega t} = \cos(\omega t) + i\sin(\omega t), \quad e^{-i\omega t} = \cos(\omega t) - i\sin(\omega t)$$

$$\cos(\omega t) = \frac{e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}}{2}, \quad \sin(\omega t) = \frac{e^{i\omega t} - e^{-i\omega t}}{2i}$$

令交变电场 $E(t) = E_0 (\cos(\omega t) + i\sin(\omega t)) = E_0 e^{i\omega t}$, E_0 为它的峰值电压, 则它的共轭 $E^*(t) = E_0 (\cos(\omega t) - i\sin(\omega t)) = E_0 e^{-i\omega t}$, 取其实部得到它的瞬时值表达式, 即:

$$\text{Re}(E(t)) = \text{Re}(E e^{i\omega t}) = \frac{1}{2} (E(t) + E(t)^*)$$

代入麦克斯韦应力张量 T 中, 可得:

$$T = \frac{1}{4} \bar{\epsilon} \{ [(E + E^*)(E + E^*)] - \frac{1}{2} [(E + E^*) \cdot (E + E^*)] I \}$$

将麦克斯韦应力张量 T 分为两部分, 第一部分是时间平均下的应力张量 T_1 :

$$T_1 = \frac{1}{4} \text{Re}(\bar{\epsilon}) \left[EE^* + E^* E - \frac{1}{2} (E \cdot E^* + E^* \cdot E) I \right]$$

第二部分是在时间平均下消失的瞬时项 T_2 :

$$T_2 = \frac{1}{4} \text{Re}(\bar{\epsilon}) \left[EE + E^* E^* - \frac{1}{2} (E \cdot E + E^* \cdot E^*) I \right]$$