

doi:10.3969/j.issn.1001-3539.2017.02.013

微流控芯片热压成型仿真研究*

傅志红, 易琪, 刘卫, 张磊

(中南大学机电工程学院, 长沙 410083)

摘要:建立了聚甲基丙烯酸甲酯(PMMA)的黏弹性材料模型,利用有限元仿真软件Abaqus,以填充率为质量评价标准,对微流控芯片热压印的填充过程进行仿真。研究在等温条件(模具与芯片温度相同)下时间、温度和压力对微流控芯片沟槽填充效果的影响。仿真结果表明,压印温度和压印力对PMMA聚合物填充效果的影响较大,提高温度和压力都能达到加快聚合物填充速率和提高复制率的作用;时间参数的影响主要体现为增大PMMA的应力松弛现象,延长压印时间同样能达到提高复制率的作用。

关键词:聚甲基丙烯酸甲酯;热压成型;黏弹性;填充率;仿真

中图分类号: TQ320.66 **文献标识码:** A **文章编号:** 1001-3539(2017)02-0060-04

Numerical Simulation of Hot Embossing of Microfluidic Chip

Fu Zhihong, Yi Qi, Liu Wei, Zhang Lei

(College of Mechanical and Electrical Engineering of Central South University, Changsha 410083, China)

Abstract : The viscoelastic material model of the polymethyl methacrylate(PMMA) was established. The replication rate of the microstructure was set as the judging basis, and the filling process of microfluidic chip during hot embossing was studied by finite element simulation software Abaqus. The influence of time, temperature and force in the filling result were studied under isothermal conditions. The results show that the temperature and force of embossing have a great effect on the filling ratio, and both increasing the temperature and force can achieve the result of accelerating polymer filling rate and increasing the rate of replication. The effect of time is mainly reflected by the stress relaxation of PMMA and the filling rate also can be increased by extending the embossing time.

Keywords : polymethyl methacrylate ; hot embossing ; viscoelastic ; filling rate ; numerical simulation

热压印是一种在各个领域内具有发展前景的复制工艺,如微型机械、微光学、化学、生物医学和仿生等领域^[1-5]。热压工艺广泛应用于宏观和微结构的制造,特别是具有高深宽比的结构^[6-7]。

传统的注射成型,注射压缩成型以及热压成型都被广泛用于微尺度结构的复制,但是微压印相对于其他的复制技术来说具有压印模具的成本相对较低、压印过程简单以及对于微结构来说复制精度较高的优点^[8]。压印工艺包括加热、保压和冷却脱模三个步骤,而施压及保压是关系到聚合物最终填充质量的关键一步。压印过程中材料的变形行为对时间、温度和压力状况是高度敏感的^[9],笔者选择了微流控芯片的平面应变模型,采用聚甲基丙烯酸甲酯(PMMA)为压印材料,研究压印过程中聚合物的填充率与时间、温度、和压力的关系。

1 材料模型和参数

结晶型聚合物和无定型聚合物是热塑性聚合物中的两个主要种类,由于无定型聚合物能够在相

对较大的温度范围内成型,所以它在热压成型中的使用更加广泛^[10]。PMMA作为一种典型的无定型聚合物具有成型温度低、透明度及硬度高等优点,是制作微流控芯片的理想材料。

无定型聚合物随温度升高表现出三种不同的状态。温度低于玻璃化转变温度 T_g 时的玻璃态,表现为坚硬的玻璃体;当温度升高到 T_g 附近时,称为橡胶态,此时聚合物表现为具有时间依赖性的橡胶体,而且在外力的作用下具有可逆和不可逆两种变形状态,此时的聚合物表现为黏弹性。温度继续升高时,将会到粘流态,有外力作用时呈现出黏性流动状态。而在热压印过程中,材料温度处于橡胶态,采用黏弹性模型能够准确地描述其力学性能。

描述无定型聚合物黏弹性的力学模型有很多,如Maxwell、Voigt、广义Maxwell和修正广义

* 湖南省重点研发计划(应用基础研究)项目(2015 JC3008)

联系人:傅志红,博士,教授,主要从事聚合物微挤出、压印研究

收稿日期:2016-12-02

Maxwell 等^[11]。Maxwell 模型表征的是弹簧和粘壶单元的串联组合,能够描述材料的流体和松弛特性,而 Voigt 模型则是弹簧和粘壶单元的并联组合,能够描述材料的固体和蠕变特性。广义 Maxwell 模型则是多个 Maxwell 的并联以补充单个模型的不足,而修正广义 Maxwell 模型则是在广义 Maxwell 模型的基础上并联一个弹簧,能够较好描述聚合物材料在大变形中的黏弹性特性。因此笔者选取修正广义 Maxwell 模型。

该模型的松弛模量 $E(t)$ 表示为:

$$E(t) = E_{\infty} + \sum_{i=1}^N E_i \exp\left(-\frac{t}{\lambda_i}\right) \quad (1)$$

$$E_0 = E_{\infty} + \sum_{i=1}^N E_i \quad (2)$$

其中, E_0 为起始模量, E_{∞} 为 t 为 ∞ 时的松弛模量, N 为模型中 Maxwell 单元的数量, E_i 为模型中第 i 个 Maxwell 单元的松弛模量, λ_i 为模型中第 i 个 Maxwell 单元的时间常数, N 为模型中 Maxwell 单元数量。

将式 (1) 和式 (2) 两边同时除以 E_0 :

$$e(t) = 1 - \sum_{i=1}^N e_i [1 - \exp\left(-\frac{t}{\lambda_i}\right)] \quad (3)$$

$$1 = e_{\infty} + \sum_{i=1}^N e_i \quad (4)$$

通过拟合材料的松弛模量曲线,得到四阶 Prony 级数形式,如表 1 所示^[12]。

表 1 PMMA 黏弹性模型 Prony 级数

N	E_i	λ_i
1	0.348	1
2	0.196	10
3	0.032 7	100
4	0.001 38	1 000

黏弹性模型的另一主要特征为温度依赖性,即时温等效原理。笔者采用 WLF 模型,它的表达式为:

$$\lg \alpha_T = \frac{-C_1(T - T_s)}{C_2 + T - T_s} \quad (5)$$

式中, α_T 为位移因子, T 为实测温度, T_s 为参考温度, C_1, C_2 为材料参数。

PMMA 黏弹性模型 WLF 方程参数为: T_s 为 105°C , C_1 为 14.1, C_2 为 55.82^[11]。

2 有限元仿真模型

为了确定微流控芯片热压印合适的工艺条件,建立了如图 1 所示的热压印有限元模型。为了简化模型,只考虑通道的截面的一半。仿真采用有限元模拟软件 Abaqus/Explicit。模型采用理想化的平面应变热力耦合单元模型,网格类型为 CPE4RT。

在实验时, PMMA 基板放置在加热板上而模具

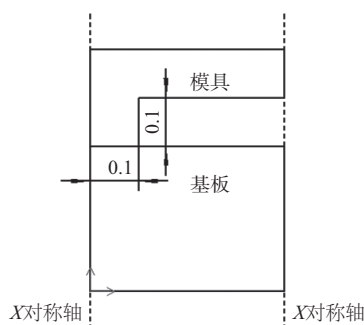


图 1 热压印有限元模型

向下施加载荷,因此在 Abaqus 软件仿真中采用面接触模型。模具材料使用铝合金,选择硬度较大的模具表面作为主面,硬度较小的 PMMA 基板表面作为从面。在压印成型过程中模具的变形与基板相比可以忽略不计,故将模具视为刚体。在仿真时对模型做出以下假设:

(1) 在整个压印过程中下压过程和材料的变形较为缓慢,看作准静态转变;

(2) 压印时基板与模具的温度相同,因此它们之间视为没有热交换和热传递发生;

(3) 实际聚合物基板厚度 (1.5 mm) 远大于微结构尺寸 (0.1 mm),在仿真时基板厚度设为 0.3 mm 以减少网格数量。

3 仿真结果分析

3.1 热压印时间对 PMMA 基板流动变形的影响

黏弹性材料的时间依赖性具体表现为在温度高于 T_g 时对恒定载荷的响应。为了研究压印时间对等温条件下 PMMA 基板成型的影响,定义填充率为被压入凹槽部分的聚合物与凹槽的面积比,并以此作为评价指标。温度定为 135°C ,施加载荷为 10 kN,而且载荷在 $t=10$ s 时线性加载至最大值并保持恒定,基板在不同时间的填充率情况如图 2 所示。

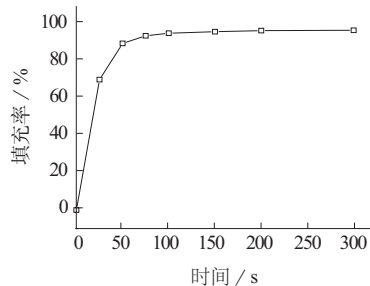


图 2 PMMA 基板的流动变形仿真结果

从图 2 的曲线图趋势可以看出,保压时间越长,聚合物的流动填充情况越好。聚合物的时间依赖性

表现为应力松弛作用的增大,在填充开始到 25 s 的时间范围内,聚合物的填充速率明显比 50 s 以后的填充速率大,这是因为在刚开始进行压印的时候,聚合物的流动并未受到阻力,因此压印的速率会比较快。随着空腔逐渐填满,聚合物流体与模具表面接触产生压强,导致实际压力的减小,填充速率的降低。同时材料的硬化现象也是填充率降低的原因。

3.2 热压印温度对 PMMA 基板流动变形的影响

为研究热压印温度对 PMMA 基板流动变形的影响,将压印载荷设定为 10 kN,温度定为 115°C ($T_g+10^{\circ}\text{C}$), 125°C ($T_g+20^{\circ}\text{C}$), 135°C ($T_g+30^{\circ}\text{C}$),在相同时间内模拟得到以上三种条件下的填充率状况,得到的曲线如图 3 所示。

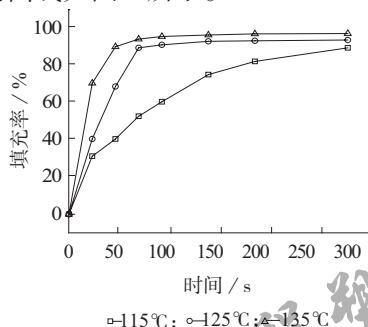


图3 不同热压印温度下 PMMA 流动填充率变化曲线

从图3的变化趋势可以看出,在相同的压印力条件下,提高压印温度可以提高聚合物的填充速率,而在较低的温度时只要增加保压时间同样能够达到提高填充率的作用。但是这并不意味着温度越高对压印成型越有利,因为随着温度的升高,聚合物弹性减弱而黏性增强,使得 PMMA 聚合物的流动性增强不利于沟道的填充。同时温度升高也会导致模具和基板的加热和冷却时间增加,不利于实际生产效率的提高。

3.3 压力载荷对 PMMA 基板流动变形的影响

为研究压力载荷对 PMMA 基板流动变形的影响,将热压印温度设定为 135°C ,载荷分别取 6, 8, 10 kN,在相同的时间段内仿真得到以上三种情况下的填充率状况,得到的曲线如图 4 所示。

从图4的变化趋势可以看出,在同样的保压时间内,PMMA 聚合物的填充率随着压印压力的升高而增大。在压印压力较小时,增加保压时间同样能达到理想的填充效果。与 PMMA 聚合物的温度依赖性类似的是,当 PMMA 填充到一定程度后,PMMA 与模具表面接触产生压强,使得实际压力减小,PMMA 的填充速率降低。增大压印力与升高温

度一样都可以提高 PMMA 聚合物的填充率,但是考虑到设备的工作条件,应该将压力值控制在合理范围内。

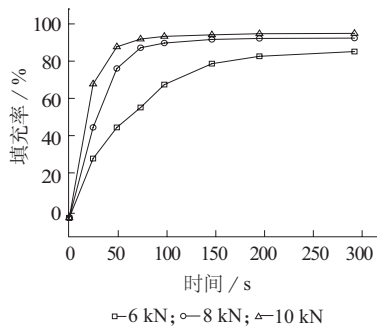


图4 不同热压印载荷下 PMMA 流动填充率变化曲线

4 结论

通过建立 PMMA 的黏弹性材料模型,利用有限元仿真软件对微流控芯片压印时间、温度和压力等成型参数的影响规律进行研究。仿真结果表明,微压印工艺中压印温度和压力对 PMMA 聚合物的填充效果影响较大,为了提高填充效率可以采用增加温度或者压力的方法来实现。但是在实际的压印成型过程中,应该考虑到设备的工作条件,温度过高则需要较长的升温时间,使得整体的压印周期过长;而压力过高则会对设备产生损坏,因此要综合考虑来确定适当的工艺参数。

参考文献

- [1] Han Kang-Soo, Lee Hyunju, Kim Donghwan, et al. Fabrication of anti-reflection structure on protective layer of solar cells by hot-embossing method[J]. Solar Energy Materials and Solar Cells, 2009, 93(8): 1 214-1 217.
- [2] Lee Gwobin, Chen Shuhui, Huang Guanruey, et al. Microfabricated plastic chips by hot embossing methods and their applications for DNA separation and detection[J]. Sensors and Actuators B-chemical, 2001, 75: 145-148.
- [3] Yin Zhifu, Cheng E, Zou H, et al. Fabrication of two dimensional polyethylene terephthalate nanofluidic chip using hot embossing and thermal bonding technique[J]. Biomicrofluidics, 2014, 8(6): 066 503.
- [4] Diane D C, Heidi O, Michael V, et al. Hot embossing of transparent high aspect ratio micro parts[J]. Microsystem Technologies, 2014, 20(10-11): 1 967-1 973.
- [5] Malic L, Zhang X, Brassard D, et al. Hot embossing of photonic crystal polymer structures with a high aspect ratio[J]. Journal of Micromechanics and Microengineering, 2011, 21(2): 17-25.
- [6] Worgull M, Kolew A, Heilig M, et al. Physical modelling, numerical simulation and experimental investigation of microfluidic devices with amorphous thermoplastic polymers using a hot embossing process [J]. Journal of Materials Processing Technology,

- 2016, 229:36–53.
- [7] Mauno S, Christoph V, Alexander K, et al. Hot embossing of photonic crystal polymer structures with a high aspect ratio[J]. Journal of Micromechanics and Microengineering, 2011, 21(2):17–25.
- [8] 谈卫国, 许忠斌, 蒋兴浩. 聚合物微纳加工设备的研究进展[J]. 橡塑技术与装备, 2015, 41(2):6–13.
- Tan Weiguo, Xu Zhongbin, Jiang Xinghao. Advances in polymer micro nanofabrication equipment[J]. China Rubber / Plastics Technology and Equipment, 2015, 41(2):6–13.
- [9] Cheng G, Sahli M, Gelin J C, et al. Physical modelling, numerical simulation and experimental investigation of microfluidic devices with amorphous thermoplastic polymers using a hot embossing process[J]. Journal of Materials Processing Technology, 2016, 229:36–53.
- [10] Worgull M, Kolew A, Schneider M, et al. Hot embossing of high performance polymers[J]. Microsystem Technologies, 2011, 17(4):585–592.
- [11] 傅志红, 王志伟, 尹业刚, 等. PMMA 变温松弛模量获取方法的实验研究[J]. 塑料工业, 2014, 42(9):51–54.
- Fu Zhihong, Wang Zhiwei, Yin Yegang, et al. The experimental study of PMMA variable temperature relaxation modulus method[J]. China Plastics Industry, 2014, 42(9):51–54.
- [12] 王志伟. PMMA 挤出滚压成型工艺数值模拟与优化研究[D]. 长沙: 中南大学, 2015.
- Wang Zhiwei. The numerical simulation and optimization study of PMMA extrusion rolling forming process[D]. Changsha: Central South University, 2015.

投稿须知

1 稿件内容

稿件应注重科学性、实用性及时效性,要求技术新颖,论点明确,论据可靠,数据准确,文字通顺、简练。稿件内容必须真实,避免抄袭,请作者文责自负。引用他人成果时,请按《著作权法》有关规定说明出处。内容应未曾发表过或被其他出版物刊载过,且无一稿多投。

2 稿件要求

凡属于重大科技获奖的论文和重点项目资助的论文,请在来稿第一页注明名称及批准号,我刊将优先刊登。

(1) 题目、作者署名及单位。题目力求简明、醒目,反映出文章的主题,一般不超过 20 个汉字。作者姓名在题目下按序排列,不同工作单位的作者,应在姓名右上角加注阿拉伯数字序号。作者单位须写全称并注明省份、城市和邮政编码。联系人信息(包括姓名,学历或职称,主要研究方向)注在第一页下方。

(2) 摘要及关键词。论文需要同时提供中文和英文摘要,摘要以提供论文的内容梗概为目的,不加评论和补充解释,应简明、确切地论述研究目的、原理和结论,具有相对独立性。中文和英文摘要均要求采用报道性摘要类型。具体要求:中英文摘要均为一段式,内容比较具体,一般需要列举关键数据。中英文摘要内容基本一致,中文摘要以 200~300 字为宜,英文摘要可略详。关键词要求 3~8 个。

(3) 正文。正文各部分都应简洁明了。层次标题一律用阿拉伯数字连续编号,尽量减少层次;不同层次的数字之间用小圆点相隔,末位数字不加标点符号。如“1”,“1.1”等。文中量、单位及符号的使用应符合国际标准和国家标准。

(4) 图表。图表要设计合理,简单自明。每一幅图都应有图序和简短确切的图名,横纵坐标均要注明物理量及其单位,线条图要用矢量格式的图,或将 *.opg, *.dwg, *.eps 等格式的图打包压缩随投稿一起上传。表格请使用三线表,每一表格都应有表序和简短确切的表题。图表标题一律用中文表达。

(5) 参考文献。以作者亲自阅读过的主要原始文献为限,不可引用非公开出版或发表的文献,不能引用其他文章中引用的但未经核对原文的文献,要注意引用最新的文献。参考文献要有一定的数量,研究性论文至少 10 篇。参考文献的著录按文章中引用的顺序依次排列,中文参考文献要有对照英文部分(英文部分不编号)。无论中外文的作者,一律采用姓前名后的形式著录;作者不超过 3 人时可全部著录,超过 3 人时,只著录前 3 位,其后加“等”或“et al”。综述类论文的参考文献著录项目适当简化,可参见本刊相关栏目文章样式。作者对所引文献的准确性和完整性负责。

3 投稿方式

请作者登陆“工程塑料网”(http://www.epa1973.com),进入杂志社之页,点击“网上投稿”后投稿。来稿请注明详细地址、电话、邮箱等信息,便于通知联系。一般一个月左右可以查询稿件审理意见,超过 3 个月未收到修改意见或回复的可自行处理。

4 注意事项

为适应我国信息化建设需要,扩大学术交流渠道,本刊已编入国内外著名数据库。稿件一经录用,将同时被数据库收录,作者著作权使用费与本刊稿酬一次性给付。如作者不同意收录,请在投稿时声明,否则将视为同意。