

基于 COMSOL Multiphysics 的静电纺丝电场分析

刘正华¹, 王 兢¹, 杜海英^{1,2}

(1. 大连理工大学 电子科学与技术学院, 辽宁 大连 116023; 2. 大连民族学院 机电信息工程学院, 辽宁 大连 116605)

摘 要: 针对静电纺丝过程难以控制这一问题,应用 COMSOL Multiphysics 软件,采用矢量图、等高线图等方法描述电场的分布,对多种条件下静电纺丝中纺丝装置的电场进行仿真,并预测轨迹的分布,包括普通的静电纺丝、以及增加平板形、环形等不同形状辅助电极的情况. 计算与分析结果表明,辅助电极的加入对电场的分布产生了较大的影响. 最后,使用加入平行辅助电极的静电纺丝装置进行了纺丝实验,得到的椭圆形沉积图案与相应的仿真结果一致.

关键词: 静电纺丝; 电场仿真; 半导体传感器; 有限元分析; COMSOL Multiphysics

中图分类号: TQ340.64; TS151 **文献标志码:** A doi:10.13705/j.issn.1671-6833.2016.03.010

0 引言

静电纺丝技术广泛地应用于生物组织工程、有机高分子聚合物的合成,以及无机纳米材料的合成等许多领域^[1]. 通过对静电纺丝过程参数的控制,科研人员成功地制备出了多种形貌的纳米纤维,包括纳米线、纳米管、纳米带、纳米棒等. 为了对静电纺丝的取向进行控制,科研人员通过改变接收极等方式制备了取向一致的静电纺丝,拓展了静电纺丝的应用范围^[2]. 静电纺丝的过程十分复杂,COMSOL Multiphysics 或 Ansoft 等有限元工具软件已广泛用于静电纺丝装置电场分布的仿真分析.

基本的静电纺丝装置由高压电源、带喷丝头的容器和接收极板三部分组成,如图 1 所示. 静电纺丝过程中,在高压电源的偏置下,纺丝前驱液在针头端形成泰勒锥并喷射出来,形成纤维状的喷射细流. 充满电荷的喷射细流在电场力、表面张力、黏弹力及库仑力等多个力的作用下向收集板运动. 在纤维的运动过程中,由于一系列不稳定过程,纤维不断劈裂拉伸,同时由于有机溶剂的挥发,纤维直径不断减小,最终,在收集板上形成了无纺布式的二维纳米结构.

基本的静电纺丝装置结构简单,但很多条件

下基本的静电纺丝装置并不能满足减小沉积面积等需求,需要添加辅助电极^[3]或者采用同轴喷头等方法^[4]. CUI 等^[5]应用 COMSOL Multiphysics 软件对静电纺丝装置的电场进行分析,并根据仿真结果改进了仿真装置成功地抑制了静电纺丝过程中纤维的发散趋势. YE 等^[6]应用 Ansoft Maxwell 软件对电场进行仿真,分析了鸟巢状结构纳米纤维膜产生的原因.

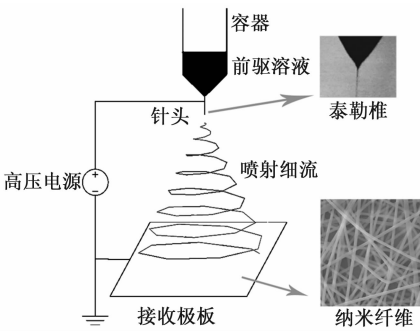


图 1 基本的静电纺丝装置示意图

Fig. 1 Basic electrospinning device

为了分析添加环形辅助电极和平板辅助电极下的电场分布,并预测沉积区域的分布,采用 COMSOL Multiphysics 软件对多种条件下静电纺丝中的电场进行了计算与分析,并在仿真结果的指导下进行了实验.

收稿日期:2015-12-01; 修订日期:2016-01-22

基金项目:国家自然科学基金资助项目(61574025, 61131004, 61501081)

通信作者:王兢(1955—),女,辽宁沈阳人,大连理工大学教授,博士生导师,主要从事传感器及敏感材料研究,
E-mail: wangjing@dlut.edu.cn.

1 电场分析方法

静电场可以根据泊松方程及边界条件进行准确的解析计算,但由于静电纺丝装置的复杂性,描述静电纺丝装置电场的方程不存在解析解.为了解决这一问题,可以对静电纺丝装置的电场进行简化或者应用数值方法求解近似值.单针头静电纺丝装置的电场可以被简化为匀强电场,匀强电场方向由针头指向极板,电场强度为^[7]

$$E = v/D . \tag{1}$$

式中: E 为电场强度; v 为针头电压; D 为针头与极板间距离.显然,这种简化难以准确地描述静电场的分布.若纺丝装置中添加了辅助极板,简化后的电场公式仍然较为复杂^[8],且误差较大,因此,应用数值方法求解近似值是更好的解决方法.

笔者应用 COMSOL Multiphysics 对单针头静电纺丝装置、添加了环形辅助电极以及添加了平行辅助电极的静电纺丝装置的电场进行了仿真计算,应用 COMSOL Multiphysics 中的 AC/DC 模块,对静电纺丝装置进行建模,定义材料,施加激励.

2 电场分析在不同纺丝环境下的应用

2.1 单针头静电纺丝装置的电场分析

首先定义一个长宽都为 22 cm,高度为 16 cm 的长方体,所有对电场的计算都在这个范围内进行,以在保证计算精度的前提下减少仿真的计算量;然后定义接收极板为长宽都为 16 cm 的正方形,其厚度为 2 mm;最后定义针头为半径 0.5 mm,高度为 1 cm 的圆柱体.

根据设置的参数,建立仿真的几何模型,并定义除针头与极板以外的区域为空气,定义针头和极板为铜,参数如表 1 所示.

表 1 介质参数表

Tab.1 Media properties

参数	空气	铜
相对介电常数	1	1
相对导磁率	1	1
表面发射率	—	0.5
电导率/($\text{s} \cdot \text{m}^{-1}$)	0	$5.998\text{e}+7$
参考电阻率/($\Omega \cdot \text{m}$)	—	$1.72\text{e}-8$

对针头施加电压为 13.3 kV 的激励,接收极板接地,并进行网格划分,得到经过原点的 yz 平面电场分布图如 2 所示.

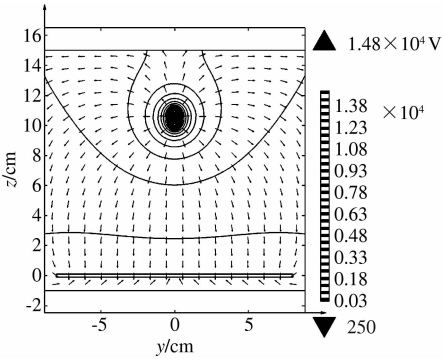


图 2 单针头静电纺丝装置 yz 平面电场分布示意图

Fig.2 Electric field orientation of yz -plane in single-needle electrospinning device

从图 2 可以看出,单针头静电纺丝装置的电场分布较有规律,针头附近的电场呈辐射状指向四周;靠近极板部分的电场则较为均匀,类似匀强电场.另外,针头附近密集的电位等高线说明针头附近电位下降很快,电场很强,而极板附近稀疏的等高线表明电场强度较低.显然,将单针头静电纺丝装置的电场简化为匀强电场是不准确的,会对计算造成一定误差,这是因为静电纺丝过程中的喷射细流带有电荷,会受电场的影响.从文献[9]可知,在单针头静电纺丝装置中,喷射细流的轨迹为螺旋状.从实验可知,单针头静电纺丝会在锡纸上沉积为一个圆形的区域.但有时由于对纺丝效果的要求不同,或者需要对静电纺丝进行控制,如控制纺丝的沉积面积,单针头静电纺丝装置就无法满足要求,需要添加合适的辅助电极.

2.2 添加环形辅助电极的静电纺丝装置的电场仿真

环形电极通常用来约束静电纺丝的发散程度,其通常位于针头与极板之间,并施加独立的偏置电压.图 3 所示为一个添加了环形辅助电极的静电纺丝装置几何模型.其中,针头与极板间距离为 10 cm,针头施加 13.3 kV 电压,环形电极直径 3 cm,高 1 cm,施加 11 kV 电压,且环形电极下缘高度为 8 cm.

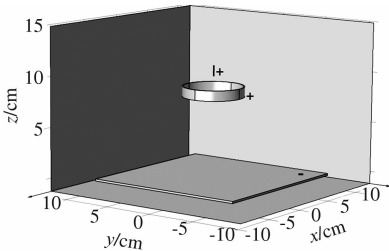


图 3 添加环形辅助电极的静电纺丝装置几何模型

Fig.3 Geometry model of electrospinning device with circle auxiliary electrode

经过原点的 yz 轴截面电场分布如图 4 所示, 与图 2 相比, 电场在环形电极的内部发生了弯曲, 在环形电极以下的部分, 电场的发散趋势相对较小. 而且从图 2 可以看出, 电场在针头附近的发散程度最高, 环形电极放置在距离针头较近的位置能取得较好的效果. 对比两图的电位等高线可见, 辅助电极的引入使电位的下降缓和, 针头附近的电场减小. 在环形电极的作用下, 带电纤维的运动会受到一定程度上的抑制, 沉积面积也会因此减小, 这与文献[8]中的实验结果一致.

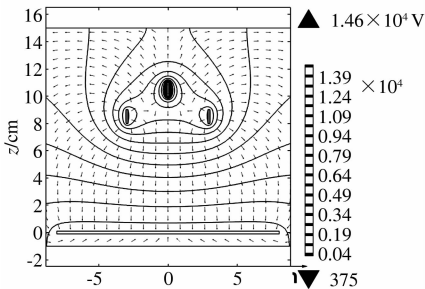


图 4 添加环形辅助电极的静电纺丝装置
 yz 截面电场方向示意图

Fig.4 Electric field orientation of yz -plane in electrospinning device with circle auxiliary electrode

2.3 添加平行极板的静电纺丝装置的电场仿真

为了控制接收的静电纺丝沉积纤维的形状, 需要在静电纺丝装置中添加平行极板. 对这种具有平行板辅助电极的纺丝进行建模和仿真, 其装置几何模型如图 5 所示. 针头距离极板 10 cm 并施加 13.3 kV 电压, 接收极板接地. 两个辅助极板高 2 cm, 宽 5 cm, 厚 0.2 cm, 并都施加 10 kV 电压. 两个辅助极板都平行于 xz 平面且到 z 轴的距离都为 3 cm.

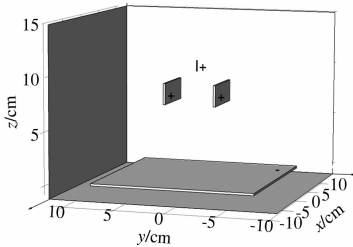


图 5 添加了平行辅助电极的静电纺丝装置几何模型图
Fig.5 Geometry model of electrospinning device with parallel auxiliary electrodes

为了更直观地观察添加了辅助极板后的电场分布, 分别截取了经过原点的 yz 平面和 xz 平面. 其中, yz 截面的电场的仿真结果如图 6 所示, xz 截面的电场仿真结果如图 7 所示. 从图 6 可见, 辅助极板附近的电场方向有明显的改变, 电场线有

聚拢的趋势, 两极板间的电场方向指向轴心, 这一趋势会使带电的喷射细流沿 y 轴的运动受到抑制. 而图 7 所示为 xz 截面的电场, 与图 2 相比, 极板附近的电场没有受到极板的影响, 电场方向与加入极板之前基本一致, 所以带电的喷射细流沿 x 轴的运动不会受到抑制. 因此, 由于辅助极板的作用, 静电纺丝的沉积结果应该为椭圆形.

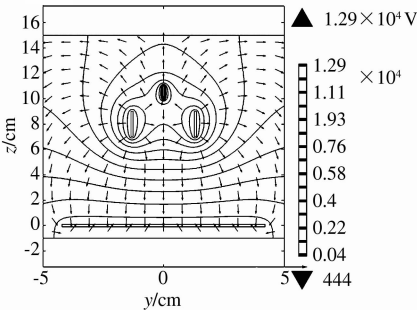


图 6 添加了平行辅助电极的静电纺丝装置
 yz 截面电场方向示意图

Fig.6 Electric field orientation of yz -plane in electrospinning device with parallel auxiliary electrodes

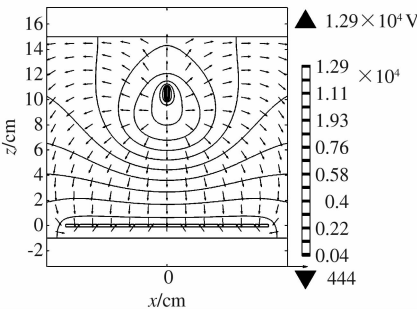


图 7 添加平行辅助电极的静电纺丝装置
 xz 截面电场方向示意图

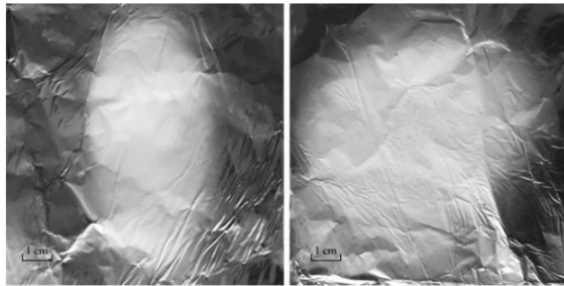
Fig.7 Electric field orientation of xz -plane in electrospinning device with parallel auxiliary electrodes

为了验证仿真分析的正确性, 笔者进行了带有平行极板辅助电极的静电纺丝实验, 其装置如图 8 所示.



图 8 添加了平行辅助电极的静电纺丝实验装置图
Fig.8 Experiment device of electrospinning with parallel auxiliary electrodes

图9中(a)图给出添加了平行辅助极板后的静电纺丝沉积在铝箔上的照片,展现出了一个明显的椭圆形;图9(b)为未添加辅助极板的静电纺丝沉积在铝箔上的照片,沉积面积相对较大,且呈圆形.由此可见,实验结果与理论分析一致.



(a) 添加平行辅助电极后

(b) 添加平行辅助电极前

图9 静电纺丝沉积示意图

Fig. 9 Fiber deposition area of different electrospinning devices

3 结论

静电纺丝技术成本低廉,效果良好,但由于其原理的复杂性与过程的不可控性,限制了其应用的范围.笔者采用 COMSOL Multiphysics 软件对单针头静电纺丝装置、添加了环形辅助电极以及添加了平行极板的静电纺丝装置电场进行了建模与仿真.根据仿真结果截取的不同平面,直观地分析了电场的分布,分析了纺丝的沉积趋势,并通过实验验证了仿真的准确性.仿真结果表明,基于 COMSOL Multiphysics 的电场仿真有着仿真结果准确,可以应对复杂模型等优点.

参考文献:

[1] LI Z P, FAN Y J, ZHAN J H. In_2O_3 nanofibers and nanoribbons: Preparation by electrospinning and their

formaldehyde gas-sensing properties [J]. European Journal of inorganic chemistry, 2010 (21): 3348 – 3353.

[2] LI D, WANG Y L, XIA Y N. Electrospinning nanofibers as uniaxially aligned arrays and layer-by-layer stacked films [J]. Advanced materials, 2004, 16(4): 361 – 366.

[3] ARRAS M M L, GRASL C, BERGMEISTER H, et al. Electrospinning of aligned fibers with adjustable orientation using auxiliary electrodes [J]. Science and technology of advanced materials, 2012, 13(3): 035008.

[4] 司军辉,崔志香,刘琼,等.静电纺丝制备 PLA – PCL 核 – 壳结构复合纤维 [J]. 郑州大学学报 (工学版), 2015, 36(5): 20 – 24.

[5] CUI X J, LI L M, XU F. Controlled assembly of poly (vinyl pyrrolidone) fibers through an electric-field-assisted electrospinning method [J]. Applied physics A, 2011, 103(1): 167 – 172.

[6] YE X Y, JIN Y N, HUANG X J, et al. Simulation of electrical field for the formation mechanism of Bird's Nest patterned structures by electrospinning [J]. Chinese Journal of polymer science, 2013, 31(3): 514 – 520.

[7] RENEKER D H, YARIN A L, FENG H, et al. Bending instability of electrically charged liquid jets of polymer solutions in electrospinning [J]. Journal of applied physics, 2000, 87(9): 4531 – 4547.

[8] KARATAY O, DOGAN M, UYAR T, et al. An alternative electrospinning approach with varying electric field for 2D-aligned nanofibers [J]. IEEE Transactions on nanotechnology, 2014, 13(1): 101 – 108.

[9] KARATAY O, DOGAN M. Modelling of electrospinning process at various electric fields [J]. Micro & nano letters, 2011, 6(10): 858 – 862.

Electric Field Analysis in Electrospinning Based on COMSOL Multiphysics

LIU Zhenghua¹, WANG Jing¹, DU Haiying^{1,2}

(1. College of Electronic Science and Technology, Dalian University of Technology, Dalian 116023, China; 2. College of Mechanical and Electronic Engineering, Dalian Nationalities University, Dalian 116605, China)

Abstract: In order to solve the problem that electrospinning process is hard to control, FEA tool software COMSOL Multiphysics was used to simulate the electric field orientation within the electrospinning. Based on the vector maps and contour lines, the electric fields distribution was analyzed. Which includes single-needle electrospinning device, electrospinning device with circle and orparallel auxiliary electrodes. Experiment with parallel auxiliary electrodes was conducted, and the deposition area with the ellipse shape matched the simulation result.

Key words: electrospinning; electric field simulation; semiconductor sensor; FEA; COMSOL Multiphysics