

Microfluidics & Nanofluidics

Band 2

Timo Lindemann

**Droplet Generation
From the Nanoliter to the Femtoliter Range**

Shaker Verlag
Aachen 2008

Bibliographic information published by the Deutsche Nationalbibliothek

The Deutsche Nationalbibliothek lists this publication in the Deutsche Nationalbibliografie; detailed bibliographic data are available in the Internet at <http://dnb.d-nb.de>.

Zugl.: Freiburg, Univ., Diss., 2006

Copyright Shaker Verlag 2008

All rights reserved. No part of this publication may be reproduced, stored in a retrieval system, or transmitted, in any form or by any means, electronic, mechanical, photocopying, recording or otherwise, without the prior permission of the publishers.

Printed in Germany.

ISBN 978-3-8322-7458-0

ISSN 1866-5411

Shaker Verlag GmbH • P.O. BOX 101818 • D-52018 Aachen

Phone: 0049/2407/9596-0 • Telefax: 0049/2407/9596-9

Internet: www.shaker.de • e-mail: info@shaker.de

ABSTRACT

This thesis provides a general description of micro droplet generation at low and medium Weber numbers using analytical, numerical and experimental methods in an engineering manner of contemplation. Based on the presented results guidelines are deduced to support the designing and operating *any* type of micro droplet generator.

In the first chapter the basic differential equations are presented which are relevant for the droplet formation in the micro scale. Based on these fundamentals analytical and numerical descriptions of the droplet formation process will be discussed throughout the thesis. Important dimensionless numbers like the Reynolds, the Weber and the Ohnesorge number are introduced to describe the fluid flow in micro dimensions and the droplet formation qualitatively. Simple analytical expressions are derived for fluidic components like fluidic resistance, fluidic inertance, fluidic capacitance, an outflow model of a nozzle, an inlet resistance and junction effects like a contraction or an expansion of the cross section. Such compact models can be applied to build equivalent fluidic networks for more complicated fluidic systems. In this work some of the considered droplet generators are described by such a network approach.

The main part of the work is engaged with the fundamentals of droplet formation especially with the necessary criteria for a droplet ejection. Therefore the Weber number respectively the critical Weber number is used to derive sufficient critical parameters for the droplet formation like the critical velocity, the critical pressure, the critical time and the critical power. These parameters are introduced using an energetic approach based on the formulations stated in the previous chapter. These critical values are subsequently used to describe the sufficient boundary conditions for a successful droplet generation with a given setup. Moreover these critical values can also be used to depict the influence of the design and geometrical variations or parameter variations of the applied liquid. Since the energetic model is not capable to state the dynamic behavior of a given system it is complemented by a computational fluid dynamics (CFD) study concerning the dependence of the droplet formation process on the actuation dynamics. The role of the critical values is successfully validated using the CFD model. Based on this parameter maps for successful droplet generation in different droplet generation regimes like drop-on-demand, jet-on-demand or a jet ejection with subsequent Rayleigh breakup are presented. Finally a new, unique classification of the various droplet generation mechanisms known today is proposed. This classification is based on the underlying fluid dynamic working principle rather than on obvious design elements of the system or historical reasons.

As a prominent example of a droplet generator a bubble jet printhead design provided by Olivetti I-Jet was studied intensively. This work was carried out within an European project supported by the Federal Ministry of Education and Research

(BMBF), Germany (grant no. 16SV1607) within the EURIMUS program (IDEAL EM 42) applying the previously explained numerical and experimental methods. For a better understanding of the working principle the design and manufacturing of a bubble jet printhead and the characteristic values are presented. A fully three-dimensional CFD simulation model was set up to simulate the ejection process, the capillary filling and the thermal behavior of the printhead. Furthermore, the influence of specific design parameters and the optimization potential are explained in detail. The three-dimensional simulation model of the thermal inkjet printhead developed in this work provides a valuable approach to optimize the printhead regarding droplet volume, droplet velocity, droplet quality and print frequency including 3D sensitive aspects. The correctness of the used pressure boundary condition and the simulation model in the three-dimensional case was verified by comparing simulations with gravimetric and stroboscopic results. Thus, for the first time a fully 3D simulation of a bubble jet could be presented and validated. For the optimization or the design of a new printhead a variety of model parameters was investigated to study effects on, for example, geometry and ink properties.

The detailed description of the bubble jet printhead is complemented by the examination of seven alternative droplet generators in a more general manner to verify the analytical approach and the criteria to predict the conditions for droplet formation derived in chapter 3. The single droplet generators are studied with respect to dosage technology, experimental results, theoretical description or numerical models. Conclusively the agreement with the considerations presented in chapter 3 is verified. The results presented in this chapter are partially based on work by other persons and are cited where appropriate to complete this thesis. The obtained findings confirm the analytic model approach in general. The derived critical parameters for droplet ejection are in good agreement for most of the systems. The critical parameters provide a sufficient condition to predict droplet breakup in general. In one special case (TopSpot dispenser) droplet breakup is even observed below the critical parameters. This observation is explained by the fact, that the necessary condition for droplet breakup in fact is different from the conditions given by the critical parameters of the model.

To complete the thesis, guidelines for the systematic design of droplet generators are provided based on the presented results. Because the quest for a suitable droplet generator strongly depends on the main requirements and specifications of the system, it is distinguished therein between important main requirements along which the guidelines are developed. After the definition of these main requirements and the presentation of general design rules, specific design rules are recommended for typical applications. Using these recommendations an appropriate droplet generator can be designed from scratch or an existing droplet generator can be optimized.

ZUSAMMENFASSUNG

Diese Arbeit vermittelt ein allgemeines ingenieurmäßiges Verständnis für die Tropfenentstehung bei niedrigen und mittleren Weber Zahlen basierend auf analytischen, numerischen und experimentellen Untersuchungen. Aufbauend auf dieses Verständnis werden Richtlinien präsentiert, die den Entwurf und die Handhabung verschiedenster Mikrotropfenerzeuger unterstützen sollen.

Im ersten Kapitel werden die grundlegenden Differentialgleichungen dargestellt, welche für die Erzeugung mikroskopischer Tropfen relevant sind. Basierend auf diesen Grundlagen werden analytische und numerische Methoden diskutiert, die einen Tropfenentstehungsprozess beschreiben. Um den Fluss in mikroskopischen Dimensionen und die Erzeugung von mikroskopischen Tropfen qualitativ zu beschreiben, werden wichtige dimensionslose Zahlen wie die Reynolds, die Weber und die Ohnesorge Zahl eingeführt. Darüber hinaus werden für fluidische Bauelemente wie ein fluidischer Widerstand, eine fluidische Induktivität, eine fluidische Kapazität, ein Düsenausfluss, ein Einlaufwiderstand und Übergangseffekte wie eine plötzliche Querschnittserweiterung oder -verengung einfache analytische Ausdrücke hergeleitet. Solche so genannten Kompaktmodelle werden verwendet, um äquivalente fluidische Netzwerke komplexerer fluidischer Systeme aufzubauen. Einige der in dieser Arbeit untersuchten Tropfenerzeuger werden mit Hilfe eines solchen Netzwerkansatzes beschrieben.

Der hauptsächliche Teil der Arbeit befasst sich mit den Grundlagen der Tropfenerzeugung und besonders mit den notwendigen Kriterien einer Tropfenerzeugung. Unter Verwendung der Weber Zahl bzw. der kritischen Weber Zahl werden hinreichende kritische Parameter für die Tropfenerzeugung wie die kritische Geschwindigkeit, der kritische Druck, die kritische Zeit und die kritische Leistung hergeleitet. Basierend auf den zuvor dargelegten Grundlagen werden diese Parameter mit Hilfe eines energetischen Ansatzes hergeleitet. Die resultierenden kritischen Werte werden nachfolgend benutzt, um die hinreichenden Randbedingungen eines Systems für einen erfolgreichen Tropfenausstoß zu beschreiben. Darüber hinaus können diese kritischen Werte auch noch ausgenutzt werden, um beispielsweise den Einfluß von Design Varianten oder unterschiedlichen Flüssigkeit darzustellen. Da das energetische Modell nicht in der Lage ist, Aussagen über das dynamische Verhalten eines vorgegebenen Systems zu machen, wird es durch transiente fluiddynamische (CFD) Simulationen ergänzt, um die Abhängigkeit des Tropfenerzeugungsprozesses von der Antriebsdynamik zu untersuchen. Die Aussagekraft der, mittels des energetischen Modells berechneten kritischen Werte ist erfolgreich anhand des CFD-Modells validiert worden. Basierend darauf ist es zudem möglich, notwendige Kriterien für eine erfolgreiche Tropfenerzeugung zu definieren, abhängig von den unterschiedlichen

Mechanismen der Tropfenerzeugung wie "drop-on-demand", "jet-on-demand" oder Strahlausstoß mit nachfolgendem "Rayleigh Abriß". Schließlich wird eine neue, einzigartige Klassifizierung von unterschiedlichen Tropfenerzeugungsmechanismen vorgeschlagen. Im Gegensatz zu den üblichen Zuordnungen, bei denen die Unterscheidungsmerkmale meistens aus offensichtlichen "Designelementen" des Systems bestehen oder aufgrund historischer "Gründe" unterschieden wird, basiert diese Klassifizierung auf dem eigentlichen Arbeitsprinzip des Systems.

Ein bedeutender Vertreter eines Tropfenerzeugers, ein thermischer Tintendruckkopf der Firma Olivetti I-Jet, wurde intensiv unter Verwendung der zuvor erklärten numerischen und experimentellen Methoden untersucht. Diese Arbeit wurde im Rahmen eines europäischen Projektes durchgeführt, welches vom deutschen Ministerium für Bildung und Forschung (BMBF), (Fördernummer: 16SV1607) innerhalb des EURIMUS Programms (IDEAL EM 42) unterstützt wurde. Zum besseren Verständnis des Arbeitsprinzips wird der Aufbau und die Herstellung sowie die charakteristischen Größen eines thermischen Tintendruckkopfes präsentiert. Ein dreidimensionales CFD Simulationsmodell wurde aufgesetzt, um den Tropfenausstoß, die kapillare Befüllung und das thermische Verhalten des Druckkopfes zu simulieren. Darüber hinaus wird der Einfluß bestimmter Designparameter und das Optimierungspotential ausführlich erklärt. Das dreidimensionale Simulationsmodell stellt einen nützlichen Ansatz zur Verfügung, einen thermischen Tintendruckkopf hinsichtlich Tropfenvolumen, Tropfengeschwindigkeit, Tropfenqualität und Druckfrequenz zu optimieren, auch unter Berücksichtigung dreidimensionaler Aspekte. Die Anwendbarkeit der verwendeten Druckrandbedingung und des dreidimensionalen Simulationsmodells wird nachgewiesen, indem die Simulationen mit gravimetrischen und stroboskopischen Ergebnissen verglichen werden. Demzufolge konnte zum ersten Mal eine vollständig dreidimensionale Simulation eines thermischen Tintendruckkopfes gezeigt und validiert werden. Eine Vielfalt an Modellparametern wurde untersucht, um beispielsweise die Effekte von Geometrie-Variationen oder variierenden Tinteneigenschaften zu ermitteln. Mit Hilfe dieser Ergebnisse kann die Optimierung eines vorhandenen Druckkopfes oder die Konstruktion eines neuen unterstützt werden.

Zur Verifikation des analytischen Modells wird diese ausführliche Beschreibung eines thermischen Tintendruckkopfes ergänzt durch die allgemeinere Untersuchung von sieben weiteren Tropfenerzeugern. Auch hier werden jeweils die kritischen Parameter analysiert, die zu einem erfolgreichen Tropfenausstoß führen und mit den Abschätzungen, die in Kapitel 3 gezeigt werden, verglichen. Darüber hinaus werden die einzelnen Tropfenerzeuger jeweils anhand der Dosiertechnologie, der experimentellen Ergebnissen, der theoretischen Beschreibung oder numerischer Modelle beschrieben. Die in diesem Kapitel präsentierten Ergebnisse basieren teilweise auf der Arbeit von Kollegen. Sie vervollständigen diese Arbeit und wurden entsprechend gekennzeichnet. Die beobachteten Ergebnisse bestätigen den analytischen Ansatz basierend auf der energetischen Betrachtung. Die hergeleiteten

kritischen Parameter für die Tropfenerzeugung stimmen ebenfalls für die meisten Systeme überein. Die kritischen Parameter stellen hinreichende Bedingungen dar, um allgemein einen Tropfenausstoß vorauszusagen. Allerdings kann in einem besonderen Fall, dem TopSpot Dispenser, sogar ein Tropfenabriss unterhalb der kritischen Parameter beobachtet werden. Das kann dadurch erklärt werden, dass sich die notwendige Bedingung für einen Tropfenabriss in Wahrheit von den kritischen Parametern des Modells unterscheiden.

Zur Vervollständigung der Arbeit werden Richtlinien für die systematische Konstruktion von Tropfenerzeugern erläutert, basierend auf den gezeigten Ergebnissen und den erreichten Erkenntnissen. Da die Suche nach einem passenden Tropfenerzeuger stark von den Hauptanforderungen des Systems abhängen, werden Richtlinien verschiedener Hauptanforderungen unterschieden. Nach der Definition dieser Hauptanforderungen und der Aufführung von allgemeingültigen Designregeln, werden spezielle Designregeln für typische Anwendungen empfohlen. Durch Verwendung dieser Empfehlungen kann ein geeigneter Tropfenerzeuger von Grund auf entworfen werden oder ein existierender Tropfenerzeuger optimiert werden.