

Numerical Simulation on Operating Process of Freeze Tweezer for Manipulation of Micro/ Nano Objects

YANG Yang, LIU Jing*

(Technical Institute of Physics and Chemistry, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100080, China)

Abstract :As a new kind of micro/ nano manipulation tool , freeze tweezer was enabled by using the freezing force of a small volume of nucleotide ice to manipulate micro/ nano objects. It allows not only the simple actions such as picking-up , releasing , but also the complex manipulations like pulling and rotating objects with any shape , electric charge , weight , material or character. Such device can be integrated with other machines so as to construct certain automatic facility in micro sense. Following the working principle of the freeze tweezer , this paper is aimed to numerically simulate the operation behaviors of the freeze tweezer by using the corresponding fluid mechanics and heat transfer models. Through this comprehensive analysis , the working features and controlling activities of such device can be well understood , which allows for further designing and optimization of the micro/ nano freeze tweezers.

Key words :micro manipulation ;freeze tweezer ;numerical simulation ;micro/ nano device

EEACC :11982

微/ 纳米冰镊操作器执行过程的数值模拟

杨 阳,刘 静*

(中国科学院理化技术研究所,北京 100080)

摘 要 :冰镊是一种借助于针尖与作用对象之间形成的极微小冰晶来实现对物体灵巧操纵的微/ 纳米操作技术,应用该器件不仅可以实现如拾取、摆放等简单动作,更可以方便地实施如拉伸、旋转等复杂操作,且不受对象的形状、带电与否、重量、材料以及质地等限制,并可与其它机构结合,组成微观意义上的自动化设备。针对冰镊的工作原理,基于相应的流体力学及传热学数学模型,从数值计算角度对微纳米尺度下冰镊的执行过程进行了模拟,在此基础上可望更好地理解冰镊的工作状态及控制过程,从而有助于设计优化新的微/ 纳米冰镊器件。

关键词 :微操作;冰镊;数值模拟;微/ 纳米器件

中图分类号 :TB126

文献标识码 :A

文章编号 :1004-1699(2006)05-1673-04

近期,国际上在微/ 纳米操作技术方面的研究如火如荼,展示了一个有重大发展前景的前沿研究方向。随着自然科学与工程技术向微型化趋势的快速迈进,与此对应的微/ 纳米操作技术研究逐步引起了人们的广泛重视^[1-6]。操纵微小物体的工具,一般称为微/ 纳米镊,这是与宏观操纵过程中的机器人手相比拟而得来的。借助于微/ 纳米操作技术,人们可以随

意的加工和组装出三维 MEMS 元件,还可用以操纵微小生物学对象,亦或是将其用于移动微机器人系统从而完成相应的实践活动;纳米操作的目的在于在更小尺度上的操作如分子组装,以及对纳米尺度下的器件或生物学对象如 DNA、蛋白质等进行操作以满足各种分析目的;事实上,在医学生物学领域^[3],微操作技术已显示出关键作用,比如人们可据

收稿日期:2006-07-01

基金项目:国家自然科学基金资助(50575219)

作者简介:杨 阳(1982-),女,在读博士生,从事微/ 纳米流体研究,yangy@mail.ipc.ac.cn;

刘 静(1969-),男,研究员,博士生导师(通讯联系人),从事微/ 纳米流体,jliu@c1.cryo.ac.cn.

此建立起无损的微手术器械及微小器官检测技术, 以实现微生物样品如单个细胞、基因、蛋白质组等的操纵及刻画^[4-5]. 在有些场合下, 为了获得对问题的清晰认识, 需要对微材料进行分拣, 如从一堆杂乱的碳纳米管中挑出符合规格的单根碳纳米管来进行检测和评价^[6], 这都需要极为精细的拾取方法. 因此对微小物体的操纵, 当前已成为诸多研究与应用场合中极具挑战性的课题^[1-2].

在微/纳米操作研究方面, 迄今已有一系列形式多样的方法被相继提出^[7-13], 其工作原理大体基于机械、水力学、光压、超声、静电、电磁等效应或这些效应的组合^[14-16]实现. 发展微/纳米操作技术时, 需要兼顾操作器与对象之间相互作用的复杂度、精巧性、准确性及效率. AFM 是微/纳米操作家族中最为重要的工具之一, 已有许多作者讨论过它们的应用问题, 实现此类操作主要基于的是推动-接触模式^[9], 即: 需要对物体进行操作时, 可将 AFM 探针移至与对象接近的某个特定部位(该位置事先并不确定, 需通过不断测量 AFM 悬臂的变形来进行调整), 再通过移动基底, 即可借助于静电力将对象推进到所需要的位置. 由于传统的原子力显微镜仅具备一个针尖, 不能对物体实施抓取及开展相关研究, 因此这类操作仅限于简单动作如“推动”及“剪切”, 更复杂的任务如“拾取”及“摆放”等尚未被解决^[2,7-8]. 因此发展出可直接对微小物体实施抓取的技术具有十分重要的现实意义. 考虑到这一因素, Kim 及 Lieber 采用碳纳米管, 实现了一种可操作和探测纳米对象的纳米镊, 但该技术还存在如 Kim 及 Lieber 所指出的问题^[8], 即这种纳米镊在液体环境下操作时并不十分有效. 通常, 一些生物学对象如细胞由于尺寸较小、含有水份, 且比较柔软, 对其操作更显难度. 人们为此发展了著名的光镊技术来对液体中的微小对象进行操纵^[11-13], 但该方法的一个不足在于, 操纵较重的对象时可能会无能为力, 而且, 有时过强的激光束能量还可能给对象造成热损伤. 除上述方法之外, 研究者们也从其他如机械、水力学、电、磁、声等效应出发, 提出相应的微/纳米操作技术. 比如, 基于静电力发展的微操作器^[17], 在操作液体微滴以控制相应的微反应方面很有用处; 还通过电磁微针对操作对象产生特定的磁场梯度, 由此通过所诱发出的静态或动态作用力, 来对物体实施拉伸或捕获行为^[18]; 但这需要预先完成颗粒的粘附, 实施起来并非易事. 以上研究显示了微/纳米操作研究的活跃性, 但也可以看出, 各自方法均存在一定的特殊适用性, 亟需更多有效的方法被提出.

通常, 在不同环境下如水、真空、空气或腐蚀性环境中应用时, 对具体的微/纳米操作要求并不一致, 对于像柔软、含湿的 DNA、蛋白质、细胞膜及组织等, 常规的微操作存在极大困难^[4,7-10]. 研究者普遍认为, 与对此类物体在微/纳米尺度下的观察相比, 对其加以操纵显得更为复杂许多. 也因如此, 同许多业已得到蓬勃发展的纳米技术相比, 微/纳米操作问题的研究相对滞后.

2003 年, Liu 等提出一种崭新的微/纳米操作技术^[19], 采用针尖与对象之间形成的极微小冰晶来实现对物体的操纵(图 1), 因而可形象地称为冰镊. 与已有的各种微/纳米操作原理不同的是, 这种方法在操作时所需执行的只是冻结过程, 因而工作十分简便, 且其冻结功能在许多场合下(如研究生物学对象)具有特殊价值. 前期试验表明^[19], 应用冰镊可方便地对物体实施各种复杂的操作, 如拉伸、旋转等, 且不受对象的形状、轻重与否、柔软或是坚硬, 以及是否生物或非生物材料、含水或带电与否等的限制, 并可与其它机构结合, 组成微观意义上的自动化设备. 该技术在一些场合下可有效地替代传统的微/纳米镊系统, 且由于自身所具备的特定功能, 可望成为在微观水平上操纵或研究微小对象的重要工具. 为深入认识冰镊器件的执行过程, 本文对之进行了相应的数值模拟和分析.

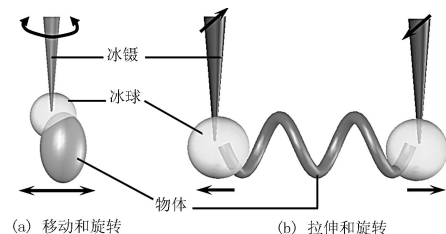


图 1 冰镊操作物体示意图

1 数值模拟及结果

前期在实验室实现的冰镊针尖的最小尺寸为 $20\mu\text{m}$ ^[19], 对此进一步微型化后可发展出用以操作更小对象的纳米冰镊. 为此, 本文针对这些可能的实际尺寸, 利用数值模拟的方法对微/纳米尺度冰镊的工作过程进行分析, 在此基础上可对冰镊的工作状态及控制过程更好地加以理解和剖析.

1.1 微米尺度冰镊的典型执行过程

由于操作物和冰镊尺寸不同, 在冰镊使用过程中操作方式会有所差别. 如图 2(a) 所示, 当冰镊针尖尺寸为 $200\mu\text{m}$ 时, 假设用以连接冰镊及对象的水滴直径为 5mm , 且处于室温环境中 (288K), 操作中使冰镊尖端斜穿入其内实施冻结. 当需要拾取

物体时,降低冰镊表面温度,使水滴冻结,即可在冰镊与物体之间形成冰球;一旦需要释放物体时,恢复冰镊表面温度,冰球随即融化从而完成释放过程。

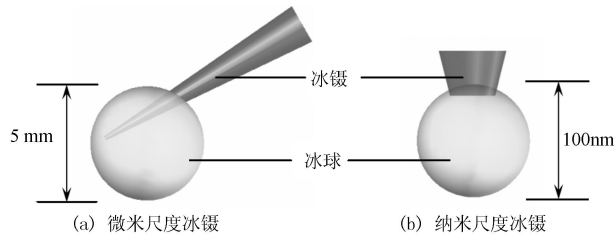


图 2 冰镊操作示意图

图 3 是借助计算流体力学通用软件——Fluent 得到的微米尺度冰镊执行工作过程的数值模拟结果. 图中为水滴/冰球中两相互垂直的纵截面,截面上红色区域代表液体状态,蓝色区域代表固体状态. 图 3(a)、3(b) 分别反映了冰镊拾取和释放物体的过程. 冰镊在拾取物体时,降低镊子表面温度至 248 K,使水滴从镊子表面附近开始冻结,随着时间的延续,冻结部位逐渐扩大,最终形成一个冰球;在释放物体的过程中,恢复镊子表面温度至室温,则冻结的冰球从镊子表面附近开始融化,随着时间的延续冻结部位逐渐减小,最终导致冰球融化而释放物体. 整个操作过程持续 20 s,水滴冻结为冰球需耗时 7 s,冰球融化为水滴历时 13 s,因此,冰镊从拾取物体到释放物体的整个过程,所需要的时间不会超过半分钟,这说明冰镊操作具有快捷性。

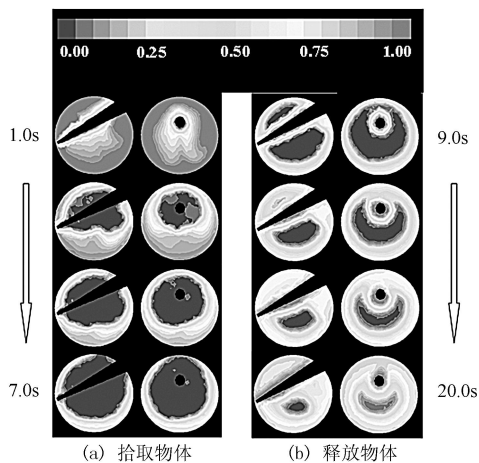


图 3 微米冰镊工作过程示意图

1.2 纳米尺度冰镊拾取物体的执行过程

由于此时器件尺寸极其微小,操作时将纳米冰镊垂直放置,同时使水滴悬垂于冰镊尖端,如图 2 (b) 所示. 取冰镊尖端尺寸为 20 nm,水滴直径为 100 nm. 图 4 反映的是纳米尺度冰镊对物体执行拾取过程的数值模拟结果,此时冰镊表面温度为 248 K. 同样,每幅图中左边为水滴/冰球的纵截面,右边

为横截面,截面上红色区域代表液体状态,蓝色区域代表固体状态. 由中可以看出,冰球随着时间的变化从冰镊表面开始成轴对称状增长,最终将全部水滴冻结. 而整个过程所消耗的时间只有 1×10^{-4} s,这更加体现了冰镊执行操作的快捷性。

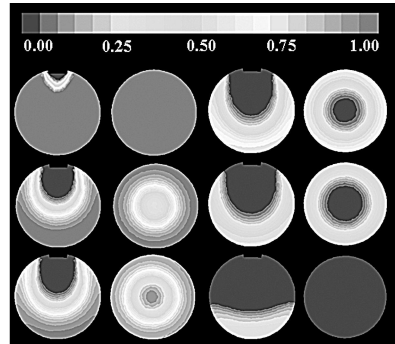


图 4 纳米冰镊拾取物体过程示意图

以上数值结果,考虑的主要是模拟冰镊操作无水物体时冻结其针尖与物体之间所粘附水滴的过程. 对于大量柔软、本身含湿的 DNA、蛋白质、细胞膜及组织等物体的操作,可直接将冰镊针尖与其接触,于是在冰镊实施冻结后即可促成含湿物体自身冻结,从而与冰镊连接在一起,这些过程也可利用上述数值模拟方法得到。

2 结束语

洁净的工作环境,可避免操作过程中的机械损伤,可实现各种复杂操作如拉伸、旋转等,与物体之间存在较强作用力,不受操作对象特征的限制,操作过程十分简便,易与其他控制机构结合等,这些都是冰镊的显著特征. 通过上述模拟不难发现,在已接触到操作对象的前提下,微米尺度冰镊从拾取到释放物体的整个过程,所需要的时间不超过半分钟,而纳米尺度冰镊拾取物体所需要的时间则更短,由此说明使用冰镊操作物体十分快捷. 而冰镊操作的准确度也是很高的. 在操作无水物体的过程中,冰镊并不与物体直接接触,而是利用其尖端附着水滴的冻结过程与物体产生作用力,因此不会出现因镊子尖端碰触物体而使其发生偏移而导致操作失败的情况;操作含湿物体时,由于冻结速度非常快,因此冰镊碰到物体后立即与物体粘连,亦不会导致操作失误. 当处于极高的环境温度时,水滴难以冻结致使冰镊无法操作;但当处于极低环境温度时,水滴在未操作时便会冻结,从而导致操作失败. 因此可根据冰镊所工作的环境温度来选择其尖端所附着的液体,高环境温度时使用高凝固点、熔解热小的液体;低环境温度时使用低凝固点、熔解热大的液体. 其所需液体体

积极小,不仅不会增加操作的成本,而且还可以扩大冰镊对环境的适应性。

本文通过数值模拟,研究了不同尺度下冰镊的工作过程,这些结果对于操作实际的微/纳米尺度冰镊具有积极的参考价值。

参考文献:

- [1] Kellermayer M S Z, Smith S B, Granzier H L, Bustamante C, Science[J], 1997, 276 (5315), 1112-1116.
- [2] Fernandez J M, Chu S, Oberhauser A F, Science[J], 2001, 292, 653-654.
- [3] Sato T, Pros. IROS 1996, Osaka[C]//Japan: IEEE Publisher, 1996. pp. 834-841.
- [4] Jager E W H, Inganäs O, Lundström I, Science[J], 2000, 288 (5475), 2335-2338.
- [5] Lu J H, Li H K, An H J, Wang G H, Wang Y, Li M Q, Zhang Y, Hu J, Am J. Chem. Soc [J]., 2004, 126 (36), 11136-11137.
- [6] Curran S, Carroll D L, Ajayan P M, Redlich P, Roth S, Rühle M, Blau W, Advanced Materials[J], 1998, 10 (4), 311-313.
- [7] Zhou J W L, Chan H Y, To T K H, Lai K W C, Li W J, IEEE-ASME Transactions on Mechatronics[J], 2004, 9 (2), 334-342.
- [8] Kim P, Lieber C M, Science[J], 1999, 286 (5447), 2148-2150.
- [9] Mirkin C A, Science[J], 1999, 286 (5447), 2095-2096.
- [10] Li G Y, Y N Xi, Wang C, Yu M M, Fung W K, Acta Mech Sinica[J], 2004, 20 (2), 117-124.
- [11] Ashkin A, Science[J], 1980, 210, 1081-1088.
- [12] MacDonald M P, Paterson L, Volke-Sepulveda K, Arlt J, Sibbett W, Dholakia K, Science[J], 2002, 296, 1101-1103.
- [13] Paterson L, MacDonald M P, Arlt J, Sibbett W, Bryant P E, Dholakia K, Science[J], 2001, 292 (5518), 912-914.
- [14] Foubert P, Vanoppen P, Martin M, Gensch T, Hofkens J, Helser A, Seeger A, Taylor R M, Rowan A E, Nolte R J M, De Schryver F C, Nanotechnology, 2000, 11, 16-23.
- [15] Sacconi L, Romano G, Ballerini R, Capitano M, De Pas M, Giuntini M, Dunlap D, Finzi L, Pavone F S, Optics Letters [J], 2001, 26 (17), 1359-1361.
- [16] Stark R W, Rubio-Sierra F J, Thalhammer S, Heckl W M, Eur. Biophys[J]. J. Biophys., 2003, 32 (1), 33-39.
- [17] Bhringer K F, Donald B R, MacDonald N C, Proc. IEEE Workshop on Micro Electro Mechanical Structures (MEMS) [C]// San Diego, CA, USA: IEEE Publisher, 1996, 7-12.
- [18] Matthews B D, LaVan D A, Overby D R, Karavitis J, Ingber D E, Applied Physics Letters[J], 2004, 85, 2968-2970.
- [19] Liu J, Zhou Y X, Yu T H, Journal of Micromechanics and Microengineering[J], 2004, 14, 269-276.

(上接第 1672 页)

参考文献:

- [1] 过增元. 国际传热研究前沿—微细尺度传热[J]. 力学进展, 2000, 30(1): 1-6.
- [2] Volz S, Saulnier J B, Lallemand M, et al. Transient Fourier Law Deviation by Molecular Dynamics in Solid Argon [J]. Phys. Rev. B., 1996, 54: 340-347.
- [3] Kaburaki H, Li J, Sidney Yip. Thermal Conductivity of Solid Argon by Classical Molecular Dynamics[J]. Materials Research Society Symposium Proceeding, 1998, 538: 503-508.
- [4] Lukes J R, Li D Y, Liang X G, et al. Molecular Dynamics Study of Solid Thin-film Thermal Conductivity[J]. Journal of Heat Transfer, 2000, 122: 536-543.
- [5] 冯晓利, 李志信, 梁新刚, 等. 纳米薄膜导热系数的分子动力学模拟[J]. 科学通报, 2000, 45(19): 2113-2117.
- [6] 吴国强, 孔宪仁, 孙兆伟, 等. 氩晶体薄膜法向热导率的分子动力学模拟[J]. 物理学报, 2006, 55(1): 01-05.
- [7] Mountain R D, MacDonald R A. Thermal Conductivity of Crystals: a Molecular-dynamics Study of Heat flow in a two-dimensional Crystal [J]. Physical Review B, 1983, 28 (6): 3022-3025.
- [8] Allen M P, Tildesley D J. Computer Simulation of Liquids [M]. Oxford: Clarendon Press, 1987: 71-108.
- [9] Maiti A, Mahan G D, Pantelides S T. Dynamical Simulations of Nonequilibrium Processes—heat flow and the Kapitza Resistance Across Grain boundaries [J]. Solid State Communications, 1997, 102(7): 517-521.
- [10] Hafskjold B, Ratkje S K. Criteria for Local Equilibrium in a System with Transport of Heat and mass[J]. Journal of Statistical Physics, 1995, 78: 463-494.
- [11] Asheghi M, Kurabayashi K, Kasnavi R, et al. Thermal Conduction in Doped Single-crystal Silicon Films[J]. Journal of Applied Physics, 2002, 91(8): 5079-5088.