

Mô phỏng hoạt động của linh kiện QCM 10 MHz khi hoạt động dưới sự ảnh hưởng của lưu chất theo phương pháp trường cặp đôi

- Dương Tấn Phước
- Nguyễn Đăng Giang
- Trương Hữu Lý
- Lê Trâm Ngọc Dũng

Trung tâm nghiên cứu và đào tạo thiết kế vi mạch ICDREC, ĐHQG-HCM

- Vũ Lê Thành Long
- Trương Văn Phát
- Ngô Võ Kế Thành

Trung tâm Nghiên cứu Triển khai, Khu Công nghệ cao TP.HCM

(Bài nhận ngày 02 tháng 01 năm 2016, nhận đăng ngày 02 tháng 12 năm 2016)

TÓM TẮT

Bài báo này trình bày việc mô phỏng hoạt động linh kiện vi cân tinh thể thạch anh QCM với tần số cộng hưởng 10 MHz khi hoạt động trong môi trường lưu chất (máu, nước, dung dịch có độ nhớt cao ...). Do linh kiện QCM hoạt động trên chất nền là tinh thể áp điện nên việc mô phỏng phải sử dụng phần tử có hỗ trợ thuộc tính áp điện (SOLID 226). Việc xác định ứng xử của linh kiện trong lưu chất là rất quan trọng khi hướng đến các ứng dụng thực tế. Dựa trên phương pháp

Từ khóa: linh kiện vi cân tinh thể thạch anh, QCM, FSI, Ansys Fluent, Ansys Mechanical, CFD

GIỚI THIỆU

Ngày nay, các linh kiện vi cơ điện tử đang được nhiều sự quan tâm nhờ ưu điểm nhỏ gọn, độ chính xác và độ nhạy cao, khả năng ứng dụng rộng rãi trong hầu hết các lĩnh vực như tự động, y tế và truyền thông. Các linh kiện vi cơ điện tử có thể chuyển đổi và truyền tải tín hiệu, cũng như khả năng cảm nhận được môi trường xung quanh dựa trên sự thay đổi các tính chất vật lý khác nhau. Một trong số đó là hiệu ứng áp điện khi chất nền của linh kiện có khả năng chuyển đổi năng lượng điện thành dao động cơ học và ngược lại. Các linh kiện áp điện được phân loại dựa trên kiểu dao động cơ học của phần tử chất nền, điển

trường cặp đôi lưu chất-cấu trúc, hai phương pháp mô phỏng phần tử hữu hạn và động lực học lưu chất sử dụng phần mềm Ansys Mechanical và ANSYS Fluent đã được thực hiện nhằm xác định các tín hiệu đầu ra. Phương pháp định lượng chất tải trên bề mặt linh kiện cũng đã bước đầu được xây dựng nhằm tạo đường chuẩn làm cơ sở hướng đến ứng dụng trong cảm biến sinh học và hóa học.

hình là vi cân tinh thể thạch anh QCM (Quartz Crystal Microbalance) với dạng dao động sóng trượt theo chiều dày (Thickness shear mode). Việc quan sát các phân bố ứng suất, sự suy hao năng lượng hay ứng xử bề mặt của linh kiện QCM trong điều kiện hoạt động dựa trên thực tế là các yếu tố cần thiết trong việc chế tạo và hướng đến ứng dụng loại linh kiện này trong cảm biến sinh học. Mô phỏng luôn là một quá trình cần thiết để giảm thiểu thời gian và chi phí thực hiện trước khi chế tạo linh kiện.

Hiện tại, đã có nhiều nghiên cứu về việc mô phỏng hoạt động của linh kiện QCM, tuy nhiên,

việc khảo sát ảnh hưởng trực tiếp của lưu chất đến hoạt động của linh kiện QCM là không nhiều, có thể kể đến một số nghiên cứu tiêu biểu như công trình “Design and simulation of flow cell chamber for quartz crystal microbalance sensor array” của tác giả Jaruwongrungrsee, K , hoặc “Simulation of sample transport” của tác giả Mats Jönsson, các nghiên cứu này đã có xem xét đến đáp ứng của lưu chất xung quanh và trên bề mặt linh kiện, tuy nhiên vẫn chưa xem xét đến hiện tượng tiêu tán năng lượng gây ra tần số giảm chấn cho linh kiện.

Trong bài báo này, nhóm nghiên cứu đã tiến hành mô phỏng hoạt động của linh kiện QCM trong môi trường lưu chất. Quy trình mô phỏng được xây dựng theo phương pháp trường cặp đôi (Fluid Structure Interaction). Đây là phương pháp tính toán kết hợp giữa phương pháp phần tử hữu hạn và động lực học lưu chất. Phương pháp này cho phép tính toán được quá trình tương tác giữa linh kiện với lưu chất ngoài thông qua các biên trường cặp đôi. Phương pháp định lượng chất tải trên bề mặt linh kiện cũng đã bước đầu được xây dựng nhằm hướng đến ứng dụng trong cảm biến sinh học và hóa học.

VẬT LIỆU VÀ PHƯƠNG PHÁP

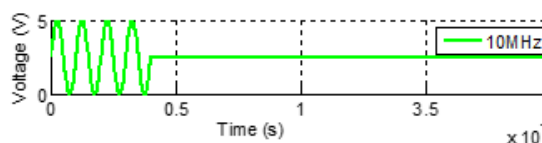
Vật liệu

Để khảo sát ảnh hưởng của lưu chất lên hoạt động của linh kiện QCM, chúng tôi tiến hành phân tích năng lượng tiêu tán thông qua hệ số giảm chấn của tín hiệu thu được từ quá trình phân tích quá độ (transients). Mục đích của việc này là nhằm xác định sự tiêu hao năng lượng do độ nhớt của lưu chất ảnh hưởng vào quá trình hoạt động

Năng lượng trong quá trình dao động của linh kiện tiêu tán dần là do ảnh hưởng của lưu chất xung quanh. Vì vậy, muốn xác định được hệ số giảm chấn thì phải thiết lập được mô hình tương tác giữa hai miền lưu chất và cấu trúc. Bài toán được chúng tôi đặt ra gần với đáp ứng thực tế nhất là bài toán cấu trúc linh kiện QCM khi

hoạt động có tương tác với miền lưu chất xung quanh ở nhiệt độ ổn định. Đây là trạng thái tương tác qua lại hai chiều (two ways).

Với cấu trúc đã có được ứng với từng vùng tần số hoạt động, nhóm tiếp tục sử dụng phương pháp phân tích tương tác giữa cấu trúc và lưu chất, tuy nhiên, trong giai đoạn này, lưu chất sẽ là dung dịch lỏng và có các tác nhân hóa học bám vào bề mặt điện cực. Quá trình này nhằm cung cấp cái nhìn trực quan về đáp ứng của linh kiện QCM khi hoạt động trong môi trường lỏng với vai trò là cảm biến sinh học, từ đây có thể lập ra cơ sở dữ liệu nhằm đối chiếu kết quả đo đạc sau này. Quá trình phân tích các đáp ứng của tinh thể khi có điện áp được thiết lập với đầu vào là điện áp kích 5 V trong khoảng thời gian 0,39964 μ s. Sau đó tiến hành cất tải (bỏ điện áp kích) và phân tích đáp ứng đầu ra. Tương ứng với thời gian lấy mẫu là 0,0004 μ s. Hình 1 trình bày quy luật gia tải điện áp kích thích vào linh kiện QCM 10 MHz.

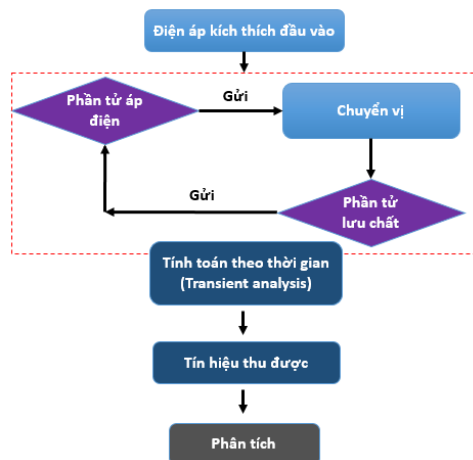


Hình 1. Điện áp kích thích đặt vào linh kiện

Phương pháp

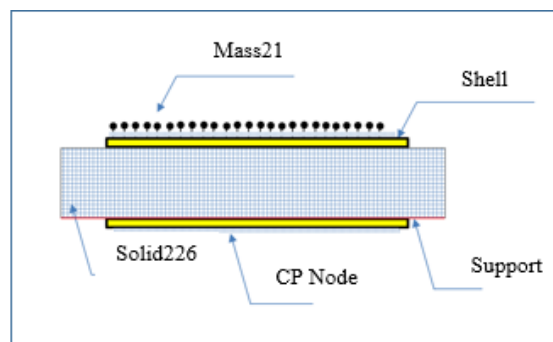
Quy trình mô phỏng linh kiện QCM được tiến hành trên cơ sở phương pháp phần tử hữu hạn và phương pháp động lực học lưu chất. Vai trò của phương pháp phần tử hữu hạn là tính toán ra ứng suất, biến dạng, chuyển vị của linh kiện khi kích thích điện áp. Dữ liệu chuyển vị sẽ được gửi sang phần tính toán động lực học lưu chất với vai trò như tham số đầu vào. Tại đây, phương pháp động lực học lưu chất sẽ dựa trên chuyển vị và tính toán ra giá trị áp suất tại toàn bộ các khu vực có liên quan trong miền lưu chất. Dữ liệu áp suất này sẽ được gửi trực tiếp và được xem như đầu vào của quá trình tính toán cấu trúc. Quá

trình tính toán lặp với sự trao đổi thông tin về chuyển vị và áp suất giữa hai phương pháp sẽ được tiến hành liên tục.



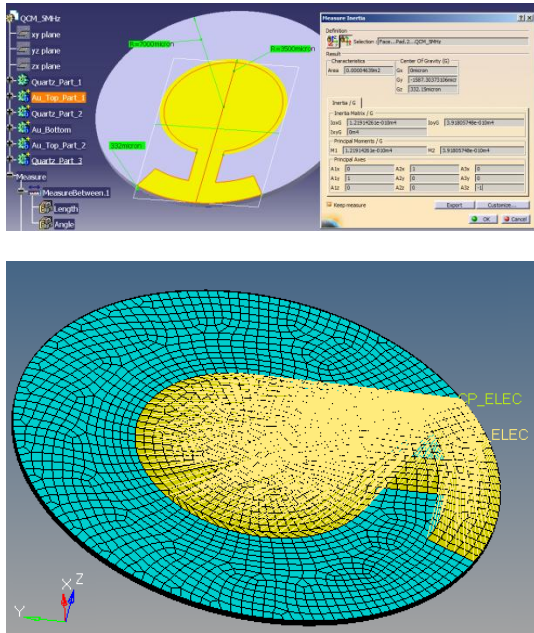
Hình 2. Quá trình thực hiện dựa trên phương pháp trường cặp đôi

Phương pháp phần tử hữu hạn với sự hỗ trợ của phần mềm ANSYS Version 15 được sử dụng để phân tích đáp ứng của linh kiện trong trường hợp định lượng chất tải trên điện cực, module sử dụng là ANSYS Transient và ngôn ngữ lập trình tính toán MATLAB được sử dụng để xử lý tín hiệu và phân tích tần số. Mô hình được xây dựng bao gồm miền lưu chất và miền cấu trúc, bề mặt tiếp xúc giữa hai miền gọi là các interface. Điều kiện biên cấu trúc của cảm biến gia tốc được mô tả như trong mô hình giải tích, điều kiện biên lưu chất bao gồm hai biên wall thay thế cho phần đế thạch anh, các biên interface được thiết lập tại bề mặt tiếp xúc với cấu trúc cảm biến. Điều kiện thực hiện mô phỏng là ở nhiệt độ 25 °C, mô hình dòng chảy tầng, không khí được xem như khí lý tưởng, áp suất dư bằng 0 atm, áp suất khí quyển là 1 atm, vận tốc dòng khí ban đầu bằng 0 m/s. Mô hình phân tích được trình bày thông qua Hình 3.



Hình 3. Mô hình linh kiện QCM với chất tải ở trên bề mặt điện cực trong môi trường lưu chất

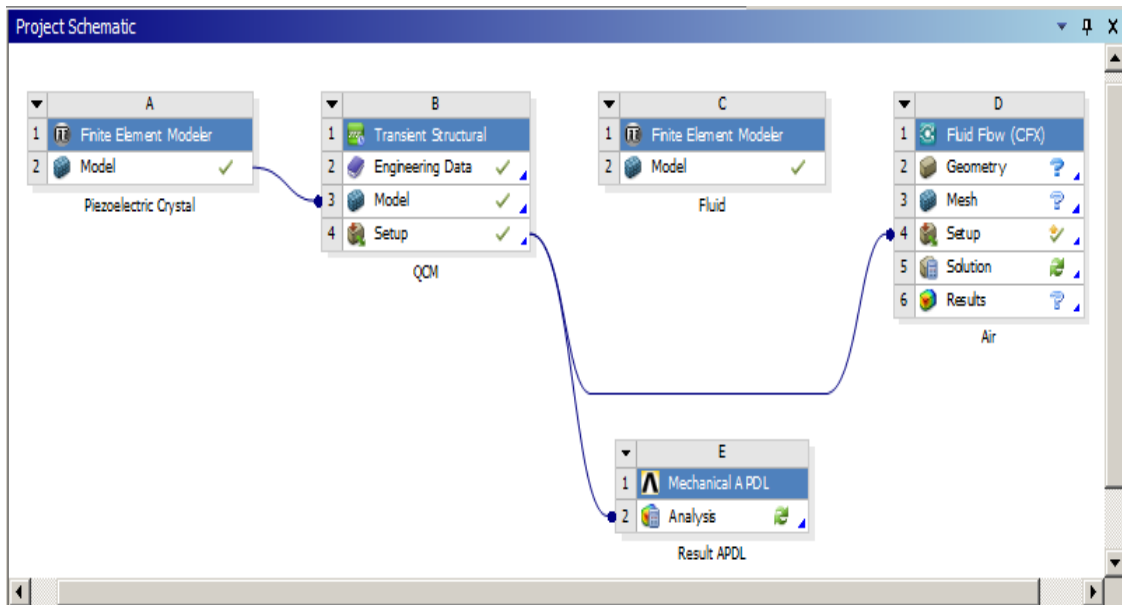
Mô hình được xây dựng trong không gian ba chiều (3D) và sử dụng phần tử bậc hai nhằm tăng độ chính xác của kết quả phân tích. Dữ liệu đầu ra sẽ thông qua các phép phân tích và xử lý tín hiệu như phân tích tương quan, phân tích tín hiệu trên miền tần số (Fourier) để tạo cơ sở dữ liệu. Mô hình phần tử hữu hạn của linh kiện QCM được xây dựng bằng phần tử SOLID226 có hỗ trợ phân tích hiệu ứng áp điện (Piezoelectric). Số bậc tự do tại mỗi nút là 3 bao gồm chuyển vị theo phương x, y, z (U_x , U_y , U_z) và điện áp (VOLT). Phần tử MASS21 được sử dụng để mô hình hóa phân tử khí bám trên bề mặt màng cảm biến và có xét đến quán tính của khối lượng. Sử dụng kỹ thuật ràng buộc điểm (CP Node) để mô hình hóa liên kết giữa điện cực và tinh thể thạch anh. Quá trình phân tích sử dụng kỹ thuật đáp ứng quá độ (transient) và tính toán bằng phương pháp chồng chất (superposition). Vật liệu dùng trong mô phỏng đặc trưng bởi các ten xơ bất đẳng hướng và phụ thuộc vào góc quay tinh thể. Kết quả toàn bộ quá trình được đánh giá dựa trên độ suy hao năng lượng và độ dịch tần số.



Hình 4. Mô hình 3D của cấu trúc và biên dạng lưới sau khi thiết lập

Hình 4 trình bày giai đoạn tiền xử lý với hai bước cơ bản là thiết kế mô hình 3D và chia lưới mô hình. Lưới được chia theo cấu trúc hình lục diện với số phần tử là 20420 phần tử bậc nhất (không có nút giữa) với mật độ đều nhằm tăng độ chính xác nhưng kích thước các ma trận không lớn như dùng phần tử tam giác. Tiêu chí chia lưới được xét đến là skewness nhỏ hơn 0,4; aspect nhỏ hơn 2 để tránh hiện tượng dominate giữa các ma trận khi lắp ghép, và jacobian lớn hơn 0,8 nhằm tránh sai số khi chuyển về phần tử chủ trong không gian tham chiếu, mục đích là tăng tốc độ hội tụ nghiệm trong quá trình phân tích theo thời gian và tránh sai số do mapping dựa trên cơ sở phần tử tốt hơn.

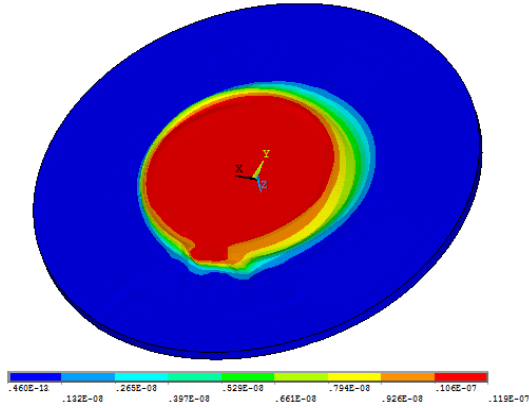
Quá trình mô phỏng sử dụng trình giải MFX trong môi trường ANSYS Workbench thông qua module phân tích Transient – đặc trưng cho cấu trúc và module phân tích CFX – đặc trưng cơ lưu chất như Hình 5.



Hình 5. Lưu đồ phân tích và tính toán trường cặp đôi (FSI)

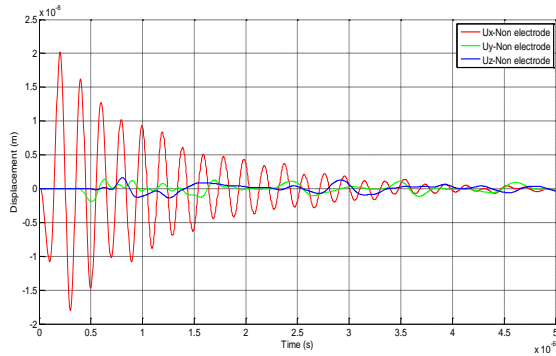
KẾT QUẢ

Kết quả toàn bộ quá trình được đánh giá dựa trên phổ ứng suất - chuyển vị của linh kiện QCM, tín hiệu chuyển vị thu được theo ba phương và phổ tần số đáp ứng của linh kiện.



Hình 6. Phổ chuyển vị của linh kiện

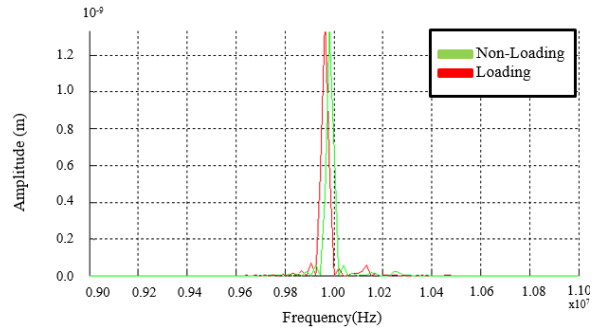
Hình 6 cho thấy kết quả phân bố chuyển vị của linh kiện QCM trong điều kiện có tải, kế đến, tiến hành phân tích tín hiệu thu được từ một điểm trên điện cực, giá trị và dạng của tín hiệu đầu ra được trình bày trong Hình 7.



Hình 7. Dạng tín hiệu thu được từ điện cực theo ba phương của linh kiện QCM tần số cộng hưởng 10 MHz

Kết quả của quá trình mô phỏng trường cặp đôi được trình bày trong hình 7, dữ liệu chuyển vị theo thời gian kể từ sau khi kích thích dao động có dạng hàm điều hòa với biên độ tắt dần. Biên độ dao động của linh kiện QCM bị tắt dần trong

một chu kỳ đầu tiên kể từ khi kích thích. Bên cạnh đó, nhóm cũng phân tích và tính toán ra giá trị tần số trong trường hợp có tải và không tải với một hằng số độ nhớt cố định. Kết quả được trình bày ở Hình 8



Hình 8. Phổ tần số của linh kiện

Phổ tần số thu được sau khi phân tích cho thấy kết quả tần số cộng hưởng hội tụ tại 9,9965 MHz, xấp xỉ giá trị tần số lựa chọn thiết kế ban đầu theo phân tích đáp ứng điều hòa. Do đó, mô hình phần tử hữu hạn sử dụng để phân tích ứng xử của linh kiện có thể chấp nhận được. Kế đến, nhóm tiến hành phân tích trường hợp linh kiện đã phủ màng cảm biến và hoạt động trong các môi trường lưu chất khác nhau.

Để xác định cụ thể giá trị hệ số giảm chấn ứng với từng hệ số độ nhớt lưu chất, nhóm tiến hành phân tích nhiều thông số độ nhớt. Kết quả được trình bày trong Bảng 1.

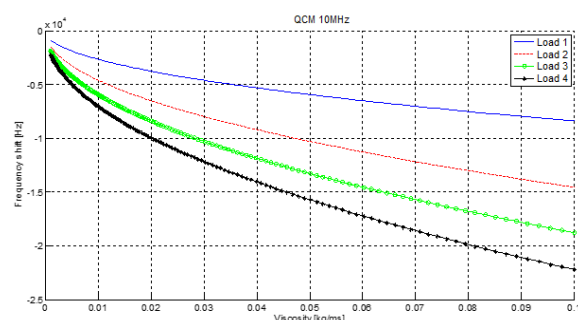
Bảng 1. Giá trị hệ số tắt dần, tần số giảm chấn, số squeeze và độ dịch tần số theo độ nhớt

Độ nhớt (kg/ms)	0,1	0,05	0,01	0,005
Tần số giảm chấn (MHz)	9,887	9,901	9,928	9,977
Số Squeeze	2,556	2,246	1,989	1,775
Hệ số tắt dần	0,863	0,784	0,632	0,57
Độ dịch tần số (MHz)	0,1095	0,0955	0,0685	0,0195

Mối quan hệ giữa độ dịch tần số và độ nhớt của chất tải. Độ nhớt thay đổi trong khoảng từ 0,005 đến 0,1 kg/ms. Đồ thị độ dịch tần số so với tần số cộng hưởng của QCM với giá trị độ nhớt luôn liên tục, và với cùng với một giá trị độ nhớt, độ dịch tần số luôn lớn khi QCM đang hoạt động ở tần số cao hơn. Ngoài ra, tỉ lệ giá trị lớn nhất và nhỏ nhất của độ dịch tần số ở cùng một hài trên cùng một linh kiện QCM luôn trong khoảng gần bằng 10 tương ứng với độ nhớt 0,1 kg/ms là 0,1095 MHz và độ nhớt 0,005 kg/ms là 0,0195 MHz và, điều đó cho thấy tỉ lệ ảnh hưởng của độ nhớt lên linh kiện QCM là khá giống nhau khi linh kiện QCM chịu tải khác nhau. Như vậy, có thể kết luận, độ dịch tần số cộng hưởng của linh kiện QCM phụ thuộc vào tần số cộng hưởng cơ bản của nó. Khi tần số cộng hưởng cơ bản càng lớn thì độ dịch tần số càng lớn. Điều này phù hợp với lý thuyết của Sauerbrey và Kanazawa [5, 6].

Như vậy, với mỗi linh kiện QCM có tần số cộng hưởng cơ bản khác nhau, có thể xây dựng được công thức tuyến tính gần đúng nhất, và khi tiến hành sử dụng QCM trong thực tế, thông qua việc tiến hành đo đạc tối thiểu ít nhất bốn lần kết hợp với các phương pháp chọn kết quả sẽ đưa ra giá trị độ nhớt của chất tải gần đúng nhất. Nhằm hướng đến ứng dụng trong sinh học, bốn loại lưu chất được chọn là máu, nước, dung dịch với các độ nhớt khác nhau với các giá trị lần lượt là 0,003

kg/ms, 0,0032 kg/ms, 0,0034 kg/ms và 0,0036 kg/ms. Kết quả được trình bày ở Hình 10.



Hình 10. Đồ thị thể hiện sự thay đổi độ dịch tần số của linh kiện QCM tần số cộng hưởng 10 MHz với bốn loại lưu chất

KẾT LUẬN

Nhóm nghiên cứu đã trình bày được quy trình mô phỏng ứng xử của linh kiện QCM trong môi trường lưu chất. Nhóm cũng đã khảo sát được hoạt động của linh kiện QCM trong điều kiện bình thường và khi có tải với kết quả gần đúng trong môi trường mô phỏng Ansys Mechanical và ANSYS CFX dựa trên phương pháp trường cặp đôi FSI. Với thành quả này nhóm đã bước đầu xây dựng được phương pháp định lượng chất tải thông qua xử lý tín hiệu số ngõ ra của linh kiện QCM. Đây chính là tiền đề quan trọng để nhóm nghiên cứu hướng đến việc ứng dụng vào lĩnh vực cảm biến trong tương lai.

Simulating the operation of 10 MHz quartz crystal microbalance under the effect of fluid used couple field method

- **Duong Tan Phuoc**
- **Nguyen Dang Giang**
- **Truong Huu Ly**
- **Le Tram Ngoc Dung**

IC Design Research and Education Center, VNU-HCM

- **Vu Le Thanh Long**
- **Truong Van Phat**
- **Ngo Vo Ke Thanh**

Research & Development Center, Saigon Hitech-Park – HCM City

ABSTRACT

This article presents the simulation of operation of 10 MHz resonance frequency quartz crystal microbalance device QCM in case of fluid domain (blood, water, high viscosity fluid ...). Because QCM device operates in piezoelectric substrate, simulation has to use the structure-electric couple field element (SOLID 226). Determination of behaviors of device in the case

of fluid domain is important for applications. Couple field method (structure-fluid) including finite element method and computational fluid dynamic method was used to determine output signals. The loading quantitative method on surface's devices was built for the applications in biological and chemical sensors.

Key words: quartz crystal microbalance device, QCM, FSI, Ansys Fluent, Ansys Mechanical, CFD

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1]. C.T. Leondes, MEMS/NEMS: Handbook techniques and applications, *Sprinter Science & Business Media*, 1, 325–335 (2008).
- [2]. S. Middehoek, Handbook of sensors and actuators, Elsevier, 8 (2000).
- [3]. H.M. Shizari, Quartz Crystal Microbalance/Heat Conduction Calorimetry (QCM/HCC), a new technology capable of isothermal high sensitivity, mass and heat flow measurements at a solid/gas interface, Doctor of Philosophy, USA, 12–69 (2000).
- [4]. H.H. Lu, Y.K. Rao, T.Z. Wu, Y.M. Tzeng, Direct characterization and quantification of volatile organic compounds by piezoelectric module chips sensor, *Sensors and Actuators B: Chemical*, 137, 741–746 (2008).
- [5]. G.Z. Sauerbrey, Use of quartz vibration for weighing thin films on a microbalance, *J. Physic*, 155, 206–212 (1959).
- [6]. K.K. Kanazawa, J.G. Gordon, Frequency of a quartz microbalance in contact with liquid, *Analytical Chemistry*, 57, 1771–1772 (1985).