

ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΗ ΑΝΑΛΥΣΗ ΑΝΑΜΙΞΗΣ ΔΙΑΛΥΜΑΤΩΝ ΒΙΟΜΟΡΙΩΝ ΣΕ ΜΙΚΡΟΑΝΑΜΙΚΤΗ ΜΕ ΑΝΑΓΛΥΦΟ ΨΑΡΟΚΟΚΑΛΟΥ

Α. Χατζηγεωργίου¹, Α. Γ. Μπουντουβής¹, Γ. Κόκκορης^{1,2,*}

¹Σχολή Χημικών Μηχανικών, ΕΜΠ, Αθήνα

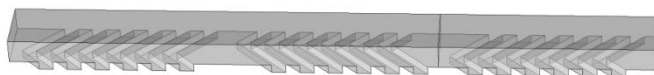
²Ινστιτούτο Νανοεπιστήμης & Νανοτεχνολογίας, ΕΚΕΦΕ «Δημόκριτος», Αθήνα

(*g.kokkoris@inn.demokritos.gr)

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Οι μικροαναμίκτες αποτελούν αναπόσπαστο κομμάτι των μικροεργαστηρίων σε ψηφίδα (Lab-on-a-chip, LoC): Ένας καλά σχεδιασμένος μικροαναμίκτης μπορεί να μειώσει το αποτύπωμα (διαστάσεις) του LoC, να αυξήσει την ευαισθησία και να μειώσει το χρόνο ανάλυσης. Σε βιοαναλύσεις που λαμβάνουν χώρα σε LoC, η ανάμιξη διαλυμάτων βιομορίων είναι δύσκολη λόγω αφενός της απουσίας τύρβης στα μικροκανάλια (αριθμός Re κοντά στο 1) και αφετέρου των πολύ μικρών συντελεστών διάχυσης των βιομορίων.

Ο σκοπός της εργασίας είναι η υπολογιστική μελέτη του προβλήματος ανάμιξης διαλυμάτων βιομορίων σε μικροαναμικτή ο οποίος αποτελείται από κανάλι ορθογωνικής διατομής με ανάγλυφο ψαροκόκαλου στον πυθμένα (staggered herringbone micromixer, SHM)^[1]. Ο SHM αποτελείται από μία σειρά από όμοιες δομικές μονάδες (σχήμα 1) σε κάθε μία από τις οποίες γίνεται ένας κύκλος ανάμιξης. Το πλήθος των δομικών μονάδων που απαιτούνται για πλήρη ανάμιξη ορίζει και το μήκος του μικροαναμικτή. Η χρήση του ανάγλυφου ψαροκόκαλου δημιουργεί συνιστώσες ταχύτητας κάθετες στην κύρια διεύθυνση της ροής, προκαλώντας χαοτική συναγωγή^[2] διευκολύνοντας έτσι την ανάμιξη. Η υπολογιστική μελέτη περιλαμβάνει την αριθμητική επίλυση των εξισώσεων Navier-Stokes, συνέχειας και του ισοζυγίου μάζας της διαλυμένης ουσίας (βιομορίων) σε μόνιμη κατάσταση στην τριδιάστατη γεωμετρία του SHM. Η επίλυση πραγματοποιείται με το εμπορικό λογισμικό Comsol Multiphysics που βασίζεται στη μέθοδο των πεπερασμένων στοιχείων.



Σχήμα 1: Σχηματική απεικόνιση γεωμετρίας SHM με 1.5 κύκλους ανάμιξης (1.5 δομικές μονάδες)^[1,3]

Η αριθμητική επίλυση αναδεικνύει συμμετρίες και περιοδικότητες στο πεδίο ροής στο μικροαναμικτή οι οποίες επιτρέπουν την επίλυση του πεδίου ροής στα $\frac{3}{4}$ της δομικής του μονάδας. Όσον αφορά το πεδίο συγκέντρωσης, για την αντιμετώπιση των ασταθών λύσεων λόγω του υψηλού αριθμού Pe και των απότομων μεταβολών της συγκέντρωσης εφαρμόζονται μέθοδοι σταθεροποίησης και αυξάνεται η πυκνότητα του υπολογιστικού πλέγματος με χρήση προσαρμοζόμενου πλέγματος. Διατυπώνεται κριτήριο πύκνωσης του πλέγματος το οποίο είναι συνάρτηση της ταχύτητας του ρευστού, της πρώτης και της δεύτερης παραγώγου της συγκέντρωσης και του μήκους των στοιχείων του πλέγματος. Τα αποτελέσματα των υπολογισμών συγκρίνονται ικανοποιητικά με πειραματικές μετρήσεις της απόδοσης ανάμιξης^[1]. Οι υπολογισμοί δείχνουν ότι α) οι εναλλαγές συμμετρικών και ασύμμετρων ψαροκόκαλων μπορούν να μειώσουν το μήκος του SHM κατά 9% και β) η ύπαρξη υπερυδρόφοβων επιφανειών στον πυθμένα του καναλιού μπορεί να μειώσει το μήκος του κατά 42%.

ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

- [1] Stroock AD, Dertinger SKW, Ajdari A, Mezic I, Stone HA, Whitesides GM. (2002). Science, 295(5555):647-651.
- [2] Aref H. (2002). Phys. Fluids. 14(4):1315-1325
- [3] Kee SP, Gavriilidis A. (2008). Chem. Eng. J., 142(1):109-121.