

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

Σε βιοαναλύσεις που λαμβάνουν χώρα σε μικροεργαστήρια σε ψηφίδα (Lab-on-a-chip, LoC), η ανάμιξη διαλυμάτων βιομορίων είναι δύσκολη λόγω αφενός της απουσίας τύρβης στα μικροκανάλια (αριθμός Reynolds <10) 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 mixer, SHM). Η μελέτη 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 Peclet ($\sim 10^4$) και των απότομων μεταβολών της συγκέντρωσης εφαρμόζονται μέθοδοι σταθεροποίησης και χρησιμοποιείται προσαρμοζόμενο πλέγμα. Τα αποτελέσματα των υπολογισμών συγκρίνονται ικανοποιητικά με πειραματικές μετρήσεις της απόδοσης ανάμιξης. Οι υπολογισμοί δείχνουν ότι το μήκος του SHM που απαιτείται για πλήρη ανάμιξη μπορεί να μειωθεί κατά α) 8% με εναλλαγή συμμετρικών και ασύμμετρων ψαροκόκαλων, β) 39% για συνθήκες ολίσθησης (υπερ-υδροφοβικότητας που δημιουργεί μεγάλο μήκος ολίσθησης) στο ανάγλυφο του ψαροκόκαλου και γ) 49% με παρεμβολή συμμετρικών ψαροκόκαλων στη περίπτωση (β).

ΕΙΣΑΓΩΓΗ

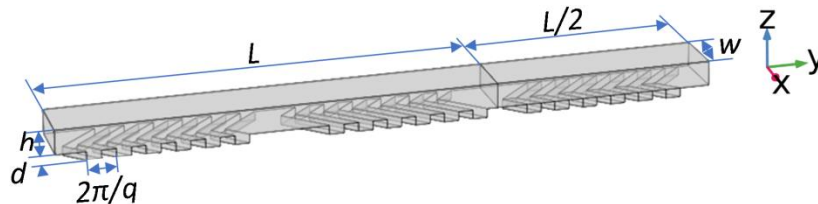
Τα μικροεργαστήρια σε ψηφίδα είναι συστήματα που ολοκληρώνουν μεγάλης κλίμακας εργαστηριακές διεργασίες σε μία ψηφίδα. Οι διεργασίες που λαμβάνουν χώρα σε ένα LoC είναι χημικές ή/και φυσικές (π.χ. αναμίξεις ή διαχωρισμοί). Οι μικροαναμικτές αποτελούν αναπόσπαστο κομμάτι των μικροεργαστηρίων σε ψηφίδα (Lab-on-a-chip, LoC): Ένας καλά σχεδιασμένος μικροαναμικτής μπορεί να μειώσει το αποτύπωμα (διαστάσεις) του LoC, να αυξήσει την ευαισθησία και να μειώσει το χρόνο ανάλυσης. Οι μικροαναμικτές διακρίνονται σε παθητικούς και ενεργητικούς. Οι ενεργητικοί χρησιμοποιούν μια εξωτερική πηγή ενέργειας για την ανάμιξη, ενώ οι παθητικοί χρησιμοποιούν ενέργεια μόνο για την άντληση.

Λόγω του μικρού μεγέθους της διατομής του καναλιού των μικροαναμικτών, η ροή είναι συνήθως στρωτή ($Re < 10$). Έτσι, η διαδικασία ανάμιξης συμβαίνει μόνο σε μοριακό επίπεδο και συνεπώς εξαρτάται από τη μοριακή διάχυση και το συντελεστή διάχυσης, $D^{[1]}$. Ο χρόνος, t , που ένα μόριο χρειάζεται για να διανύσει τη μέση τετραγωνική απόσταση $\langle x^2 \rangle$ είναι ανάλογη προς το $\langle x^2 \rangle / D$. Στο μικροαναμικτή, η απόσταση x θα μπορούσε να είναι το ύψος ή το πλάτος του καναλιού, d ($x=d$). Εάν η ροή είναι μονοδιάστατη, για να είναι βέβαιο ότι έχει προκύψει πλήρης ανάμιξη, ο χρόνος διάχυσης πρέπει να είναι ίσος με τον χρόνο παραμονής, $\tau=L/U$ (L μήκος μικροαναμικτή και U μέση ταχύτητα ρευστού). Επομένως, το μήκος του μικροαναμικτή ώστε το διάλυμα να είναι πλήρως αναμεμιγμένο (μήκος ανάμιξης) είναι ανάλογο του $d^2 U / D = d Pe$, όπου Pe είναι ο αριθμός Peclet που εκφράζει το λόγο συναγωγής προς διάχυση^[1,2]. Το μήκος ανάμιξης, λόγω της γραμμικής του εξάρτησης από τον Pe , είναι απαγορευτικά μεγάλο σε διαλύματα βιομορίων καθώς ο D των βιομορίων είναι μικρότερος από 10^{-10} m²/s (π.χ. ινωδογόνο^[1], DNA^[3]).

Ο μόνος τρόπος για να αυξηθεί ο ρυθμός ανάμιξης είναι η αύξηση της επιφάνειας μεταξύ των προς ανάμιξη διαλυμάτων και η μείωση της απόστασης στην οποία τα μόρια πρέπει να διαχυθούν. Οι παραπάνω στόχοι μπορούν να επιτευχθούν με τη χαοτική συναγωγή^[4,5]. Η χαοτική συναγωγή προκαλείται από την έκταση και την αναδίπλωση του ρευστού, η οποία υπό προϋποθέσεις μπορεί

να προκαλέσει μια εκθετική απομάκρυνση τροχιών που ξεκινούν από κοντινές θέσεις. Αυτή η χαοτική κατάσταση μπορεί να φανεί κατά την Lagrangian θεώρηση της κίνησης του ρευστού. Για να συμβεί αυτό, είναι αναγκαίο το σύστημα των συνήθων διαφορικών εξισώσεων που προκύπτουν κατά τη Lagrangian θεώρηση να είναι μη γραμμικές και να έχουν πάνω από ένα βαθμό ελευθερίας (non-integrable)^[6]. Αυτή η προϋπόθεση ισχύει αν η ροή είναι τριδιάστατη (3D), ενώ για μια 2D ροή, πρέπει α) η ροή να είναι συμπιεστή ή β) το ρευστό μη Νευτωνικό ή γ) η ροή να εξαρτάται από το χρόνο, δηλαδή πέρα από τις δύο χωρικές μεταβλητές χρειάζεται ακόμα μια μεταβλητή^[5,6].

Ένας από τους πιο αποτελεσματικούς παθητικούς μικροαναμίκτης είναι ο μικροαναμίκτης με ανάγλυφο κλιμακωτού ψαροκόκαλου στον πυθμένα [staggered herringbone mixer (SHM), Σχήμα 1], ο οποίος δημιουργεί χαοτική συναγωγή σε ένα ευρύ πεδίο αριθμών Re ^[2]. Ο SHM προτάθηκε για πρώτη φορά το 2002 από τους Whitesides et al.^[2] και έκτοτε, η απόδοσή του και η χρήση του ως μικροαναμίκτης^[7,8] αλλά και σε νέες εφαρμογές, ως μικροαντιδραστήρας^[9], εναλλάκτης θερμότητας^[10] και συσκευή διαχωρισμού κυττάρων^[11], εξακολουθούν να διερευνώνται.



Σχήμα 1. Σχηματικό διάγραμμα γεωμετρίας SHM με 1.5 μοναδιαία κελιά (1.5 κύκλους ανάμιξης)^[2,12]. Οι διαστάσεις φαίνονται στον Πίνακα 1.

Ο SHM (Σχήμα 1) αποτελείται από ένα ορθογωνικής διατομής κανάλι με ανάγλυφα αυλάκια στον πυθμένα του. Αυτά τα αυλάκια έχουν ασύμμετρο σχήμα V (η κορυφή του V δεν είναι στο μέσο του πλάτους της γεωμετρίας). Η ασύμμετρία ποσοτικοποιείται από τον συντελεστή ασύμμετρίας, ρ , ο οποίος ορίζεται ως ο λόγος της απόστασης στην οποία εμφανίζεται η κορυφή του V προς το συνολικό πλάτος της διατομής. Τα αυλάκια περιοδικά αναστρέφονται. Το μήκος στο οποίο κατανέμονται οι δύο ομάδες των αυλακιών είναι ένας κύκλος ανάμιξης ή ένα μοναδιαίο κελί. Ένας τέτοιος μικροαναμίκτης αποτελείται από πολλά μοναδιαία κελιά στη σειρά. Τα γεωμετρικά χαρακτηριστικά που χρησιμοποιήθηκαν για την παρούσα εργασία παρουσιάζονται στον Πίνακα 1.

Πίνακας 1. Χαρακτηριστικές παράμετροι του SHM του Σχήματος 1

Χαρακτηριστικές παράμετροι του SHM	Whitesides et al. ^[2]	Gavriilidis and Kee ^[12]
Ύψος καναλιού, h (μm)	69.7	85
Βάθος αυλακιού, d (μm)	30.6	30.6
Διάνυσμα κυματισμού, q (μm^{-1})	$2\pi/100$	$2\pi/100$
Πλάτος καναλιού, w (μm)	200	200
Παράγοντας ασύμμετρίας, ρ	$2/3$	$2/3$
Γωνία αυλακιού με άξονα y , θ ($^\circ$)	45	45
Αριθμός αυλακιών ανά μοναδιαίο κελί, N	12	12
Μήκος μοναδιαίου κελιού, L (mm)	2	1.516

Στη βιβλιογραφία το υπολογιστικό πρόβλημα της ανάμιξης αντιμετωπίζεται με την επίλυση του ισοζυγίου μάζας της διαλυμένης ουσίας^[7] ή με ιχνηλασία σωματιδίων (particle tracing)^[12]. Και στις δύο προσεγγίσεις είναι αναγκαίος ο υπολογισμός του πεδίου ροής. Σε υψηλούς Pe , η εφαρμογή της μεθόδου ιχνηλασίας είναι ευκολότερη, καθώς αποφεύγονται οι ασταθείς λύσεις της συγκέντρωσης που προκύπτουν από την επίλυση του ισοζυγίου μάζας της διαλυμένης ουσίας. Ωστόσο, με τη μέθοδο ιχνηλασίας δεν μπορεί να διερευνηθεί η επίδραση του D στην απόδοση ανάμιξης και κυρίως δεν μπορούν να αντιμετωπιστούν προβλήματα που περιέχουν χημικές αντιδράσεις.

Στην παρούσα εργασία, εστιάζουμε στη μελέτη ανάμιξης στο SHM. Αν και ο Pe είναι μεγάλος (της τάξης του 10^4), επιλύεται το ισοζύγιο μάζας και αντιμετωπίζεται το πρόβλημα των ασταθών λύσεων με προσαρμοζόμενο πλέγμα υψηλής πυκνότητας και με χρήση μεθόδων σταθεροποίησης.

Γίνεται σύγκριση των αποτελεσμάτων με μετρήσεις από τη βιβλιογραφία και προτείνονται εναλλακτικές γεωμετρίες που βελτιώνουν την απόδοση ανάμιξης στο SHM.

ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΟ ΜΟΝΤΕΛΟ

Το προφίλ ταχύτητας προκύπτει από τις εξισώσεις συνέχειας και Navier-Stokes σε μόνιμη κατάσταση,

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (1)$$

$$\rho(\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u} = \nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{u} \quad (2)$$

όπου \mathbf{u} , ρ , μ και p είναι η ταχύτητα, η πυκνότητα, το δυναμικό ιξώδες και η πίεση του ρευστού.

Το μαθηματικό μοντέλο της ανάμιξης συμπληρώνεται με την εξίσωση διατήρησης μάζας της διαλυμένης ουσίας στη μόνιμη κατάσταση,

$$D \nabla^2 c - \mathbf{u} \cdot \nabla c = 0 \quad (3)$$

όπου c είναι η συγκέντρωση της διαλυμένης ουσίας και D είναι ο συντελεστής διάχυσης της στο διαλύτη. Τα διαλύματα θεωρούνται αραιά και συνεπώς οι ιδιότητες του ρευστού δεν εξαρτώνται από τη συγκέντρωση της διαλυμένης ουσίας. Έτσι, οι εξισώσεις (1) και (2) λύνονται ανεξάρτητα από την εξίσωση (3). Ο D είναι ισότροπος και σταθερός.

Αντί της μορφής των παραπάνω εξισώσεων, προτιμάται η αδιάστατη μορφή τους γιατί φαίνεται η εξάρτηση από τους αδιάστατους αριθμούς Re και Pe :

$$\bar{\nabla} \cdot \bar{\mathbf{u}} = 0 \quad (4)$$

$$Re(\bar{\mathbf{u}} \cdot \bar{\nabla})\bar{\mathbf{u}} = \bar{\nabla} \bar{p} + \bar{\nabla}^2 \bar{\mathbf{u}} \quad (5)$$

$$\bar{\nabla}^2 \bar{c} - Pe \bar{\mathbf{u}} \cdot \bar{\nabla} \bar{c} = 0 \quad (6)$$

Η αδιαστατοποίηση της ταχύτητας, των χωρικών συντεταγμένων και της πίεσης γίνεται με τη μέση ταχύτητα στην είσοδο του μικροαναμίκτη, $u_{av,in}$, την υδραυλική διάμετρο της εισόδου, d_h , και μια πίεση αναφοράς ίση με $\mu u_{av,in}/d_h$, αντίστοιχα. Η αδιαστατοποίηση δείχνει ότι η αδιάστατη ταχύτητα, $\bar{\mathbf{u}}$, εξαρτάται μόνο από τον Re στην είσοδο του μικροαναμίκτη ($\rho u_{av,in} d_h / \mu$). Η αδιαστατοποίηση της συγκέντρωσης στην εξίσωση (6) γίνεται με μια συγκέντρωση αναφοράς ίση με 1 mol/m^3 . Η αδιάστατη συγκέντρωση, \bar{c} , εξαρτάται από τον Pe στην είσοδο του μικροαναμίκτη ($u_{av,in} d_h / D$) και την $\bar{\mathbf{u}}$.

Το πρόβλημα που αντιμετωπίζεται αφορά την ανάμιξη δύο διαλυμάτων με μία διαλυμένη ουσία, το ένα με $\bar{c}=1$ και το άλλο με $\bar{c}=0$, στο SHM. Έτσι, στην είσοδο του SHM επιβάλλεται προφίλ αδιάστατης συγκέντρωσης με τιμή 1 στη μισή διατομή και 0 στην υπόλοιπη. Η συνέχεια του προφίλ εξασφαλίζεται με τη χρήση συνάρτησης σφάλματος.

Η απόδοση του μικροαναμίκτη αξιολογείται με την απόδοση ανάμιξης (mixing efficiency, ME), η οποία σε εγκάρσια διατομή ορίζεται ως εξής

$$\%ME = \left(1 - \frac{1}{\bar{c}_\infty} \sqrt{\frac{\iint (\bar{c} - \bar{c}_\infty)^2 dA}{A}} \right) 100 \quad (7)$$

όπου \bar{c}_∞ είναι η συγκέντρωση του πλήρως αναμεμιγμένου διαλύματος και A είναι η επιφάνεια της εγκάρσιας διατομής. Η απόδοση ανάμιξης είναι 0 για μη αναμεμιγμένα και 100% για πλήρως αναμεμιγμένα διαλύματα.

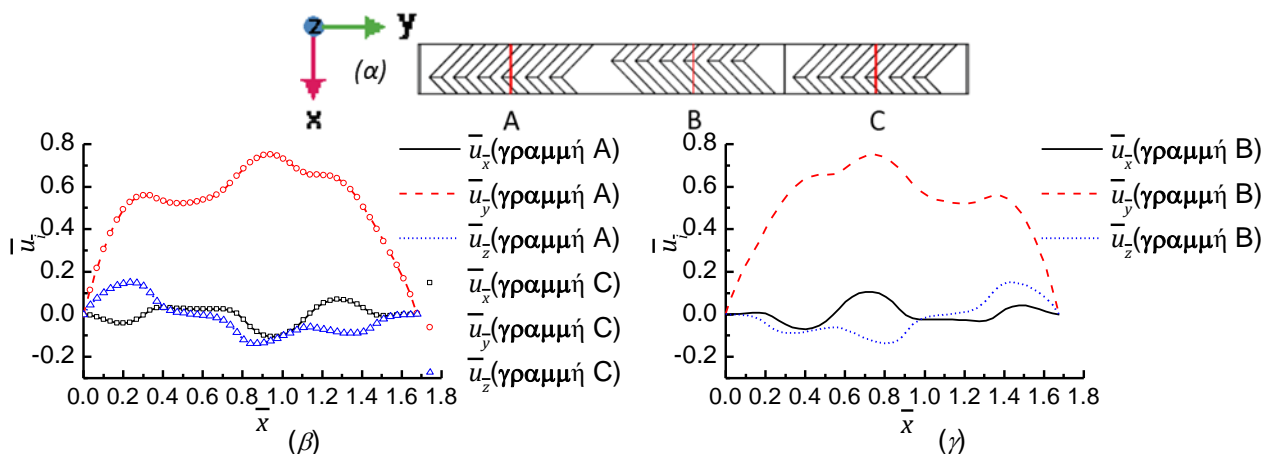
Οι διαφορικές εξισώσεις (4-6) επιλύθηκαν στο 3d χωρίο του SHM με τη μέθοδο των πεπερασμένων στοιχείων και τη χρήση του λογισμικού COMSOL Multiphysics. Για την αντιμετώπιση των ασταθών λύσεων λόγω του υψηλού Pe , χρησιμοποιούνται σχήματα ανάντη καθ' ομορροή (Streamline-Upwind)/Petrov-Galerkin^[13] και σχήματα πλευρικής σταθεροποίησης (crosswind stabilization)^[14]. Προς την ίδια κατεύθυνση, χρησιμοποιείται προσαρμοζόμενο

υπολογιστικό πλέγμα με κριτήρια πυκνωσης το μήκος των ακμών των στοιχείων, την ταχύτητα, την πρώτη και δεύτερη παράγωγο της συγκέντρωσης. Η συνάρτηση και οι παράμετροι της που παρέχουν το κριτήριο πυκνωσης προκύψαν μέσα από επίλυση 2δ προβλημάτων. Η πυκνότητα του πλέγματος τόσο για τις εξισώσεις (4-5) όσο και για την εξίσωση (6) καθορίζεται από μελέτες ανεξαρτησίας της λύσης από το πλέγμα. Τα αποτελέσματα σε όλες τις περιπτώσεις παρουσιάζουν σύγκλιση σε σταθερή λύση. Η διαφορά της τελικής λύσης από την λύση με υποδιπλάσιο πλήθος στοιχείων είναι < 1%.

ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ ΚΑΙ ΣΥΖΗΤΗΣΗ

Περιοδικότητα του προφίλ ταχύτητας στο χώρο

Ο υπολογισμός της ταχύτητας σε ένα SHM με πολλά μοναδιαία κελιά στη σειρά έχει σημαντικό υπολογιστικό κόστος. Για να μειωθεί το υπολογιστικό κόστος, αξιοποιείται η περιοδικότητα του πεδίου ροής από κελί σε κελί^[12,15]. Σημειώνεται ότι η υπόθεση περιοδικότητας είναι σωστή σε αρκούντως μεγάλη απόσταση από την είσοδο και έξοδο του μικροαναμίκτη (περίπου μετά το πέρας του πρώτου αυλακιού). Στο Σχήμα 2β φαίνεται η περιοδικότητα από κελί σε κελί στις τρεις συνιστώσες της ταχύτητας πάνω σε γραμμές εγκάρσιες στη ροή, στις γραμμές A και C στο Σχήμα 2α. Η γραμμή A απέχει απόσταση $L/4$ από την είσοδο ενώ η απόσταση AC είναι L .



Σχήμα 2. (α) Κάτοψη μικροαναμίκτη με 1.5 μοναδιαία κελιά στη σειρά με τις τρεις κόκκινες γραμμές όπου γίνεται σύγκριση του προφίλ ταχύτητας. Η γραμμή A απέχει απόσταση $L/4$ από την είσοδο ενώ οι αποστάσεις AB και BC είναι $L/2$. Οι αδιάστατες συνιστώσες ταχύτητας κατά μήκος (β) των γραμμών A και C και (γ) της γραμμής B. $Re = 1$.

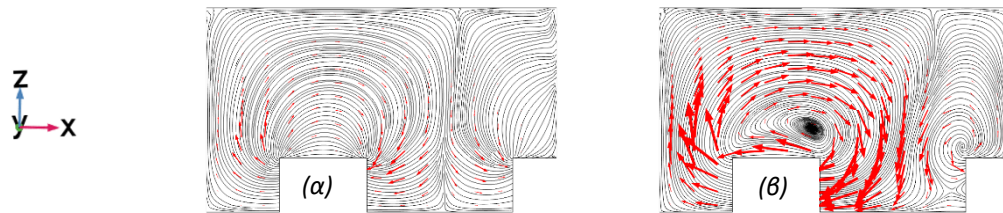
Εκτός από την περιοδικότητα ανά κελί, η μελέτη έδειξε μία ακόμη συμμετρία στο πεδίο ροής. Στο Σχήμα 2γ φαίνονται οι συνιστώσες της ταχύτητας στη γραμμή B (Σχήμα 2α) η οποία βρίσκεται σε απόσταση $L/2$ από την γραμμή A. Συγκρίνοντας τις ταχύτητες στα Σχήματα 2β και 2γ παρατηρείται μία ιδιότυπη συμμετρία σε απόσταση ίση με το μισό ενός μοναδιαίου κελιού. Οι συνιστώσες της ταχύτητας κατά μήκος των γραμμών A και C μπορούν να προκύψουν μέσω μετασχηματισμού των αντίστοιχων συνιστωσών της γραμμής B, και αντίστροφα. Εμφανίζουν κατοπτρική συμμετρία στο επίπεδο zy με μόνη διαφορά ότι η συνιστώσα στον άξονα x αλλάζει πρόσημο. Αυτή η ιδιότυπη συμμετρία εκφράζεται από τις εξισώσεις (8). Η περιοδικότητα και η συμμετρία μειώνουν το υπολογιστικό κόστος καθώς επιτρέπουν την επίλυση του πεδίου ροής στα $3/4$ του μοναδιαίου κελιού και όχι σε $1/2$ για να αποκλειστεί η επιρροή από την είσοδο και την έξοδο.

$$\begin{aligned}\bar{u}_{\bar{x}}(\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}) &= -\bar{u}_{\bar{x}}(\bar{w} - \bar{x}, \bar{y} + \frac{L}{2}, \bar{z}) \\ \bar{u}_{\bar{y}}(\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}) &= \bar{u}_{\bar{y}}(\bar{w} - \bar{x}, \bar{y} + \frac{L}{2}, \bar{z}) \\ \bar{u}_{\bar{z}}(\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}) &= \bar{u}_{\bar{z}}(\bar{w} - \bar{x}, \bar{y} + \frac{L}{2}, \bar{z})\end{aligned}\quad (8)$$

Προφίλ ταχύτητας για διαφορετικές περιπτώσεις διαβροχής των τοιχωμάτων

Το Σχήμα 3 απεικονίζει τις ροϊκές γραμμές και τα κάθετα ως προς την κύρια ροή διανύσματα

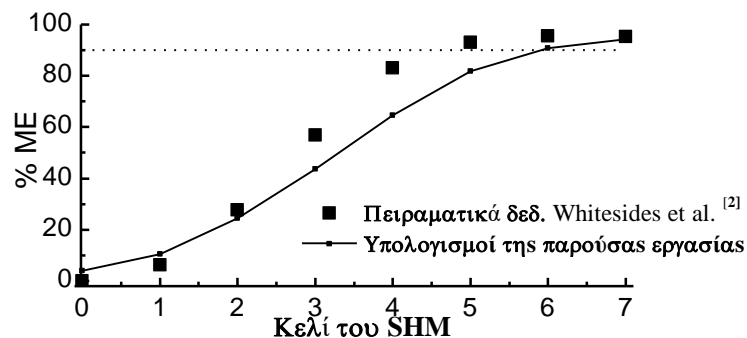
ταχύτητας (\bar{u}_x, \bar{u}_z) σε μία εγκάρσια διατομή για δύο διαφορετικές συνθήκες διαβροχής στα τοιχώματα του καναλιού ($Re=0.12$). Οι συνθήκες διαβροχής εκφράζονται με διαφορετικές συνοριακές συνθήκες. Στο Σχήμα 3α, ισχύει συνθήκη μη ολίσθησης στα τοιχώματα του καναλιού (πλήρης διαβροχή των τοιχωμάτων). Στο Σχήμα 3β, ισχύει συνθήκη ολίσθησης στο κάτω τοίχωμα του SHM (πάνω και μέσα στα αυλάκια του ανάγλυφου), και συνθήκη μη ολίσθησης στο αριστερό, δεξιό και πάνω τοίχωμα του καναλιού. Η τελευταία περίπτωση μπορεί να προκύψει όταν το κάτω τοίχωμα του SHM είναι υπερυδροφόβο και δημιουργεί πολύ μεγάλο μήκος ολίσθησης, ενώ στα υπόλοιπα τοιχώματα έχουμε πλήρη διαβροχή. Στη δεύτερη περίπτωση (Σχήμα 3β) το μέτρο της κάθετης ως προς την κύρια ροή ταχύτητας είναι μεγαλύτερο σε σύγκριση με την πρώτη (Σχήμα 3α). Το μεγαλύτερο μέτρο α) δημιουργείται λόγω της ολίσθησης πάνω και μέσα στα αυλάκια που επιτρέπουν στο υγρό να διέλθει ευκολότερα μέσα από αυτά και β) αναμένεται να οδηγήσει σε υψηλότερη απόδοση ανάμιξης.



Σχήμα 3. Οι ροϊκές γραμμές και τα διανύσματα (με ίδια κλίμακα) της εγκάρσιας ταχύτητας σε απόσταση $L/4$ από την είσοδο με συνθήκες (α) μη ολίσθησης σε όλα τα τοιχώματα και (β) ολίσθησης στα κάτω τοίχωμα και μη ολίσθησης στα υπόλοιπα.

Προφίλ συγκέντρωσης: Σύγκριση με πειραματικά δεδομένα

Στο Σχήμα 4 παρουσιάζεται η απόδοση ανάμιξης από την υπολογιστική ανάλυση και συγκρίνεται με αυτή που προκύπτει από πειραματικά δεδομένα συνεστιακού μικροσκοπίου σάρωσης^[2] για $Pe=20000$ και $Re=8$. Η σύγκριση είναι ικανοποιητική. Η απόκλιση μπορεί να οφείλεται στο γεγονός ότι η εκπομπή φθορισμού σε υψηλές συγκεντρώσεις στο συνεστιακό μικροσκόπιο σάρωσης δεν είναι ευθέως ανάλογη της συγκέντρωσης^[16].

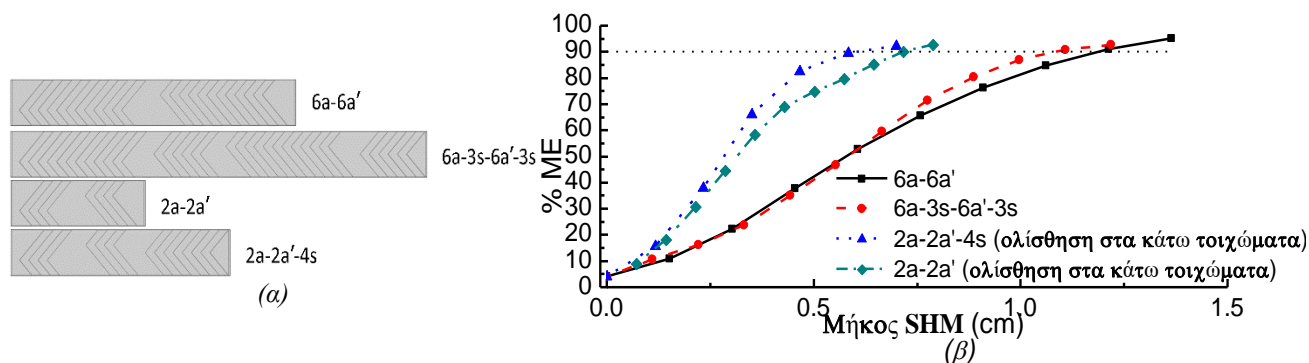


Σχήμα 4. %ME στην έξοδο κάθε διαδοχικών κελιών όπως υπολογίστηκαν στην παρούσα εργασία (στο 50% της διατομής) και πειραματικά δεδομένα των Whitesides et al.^[2] με συνεστιακό μικροσκόπιο σάρωσης (στο 50% της διατομής). Η γεωμετρία αφορά την 1^η στήλη του Πίνακα 1. $Pe=20000$ και $Re=8$.

Η επίδραση της υπερυδροφοβικότητας και των συμμετρικών αυλακιών στην απόδοση ανάμιξης του SHM

Στο Σχήμα 5β απεικονίζονται οι καμπύλες της απόδοσης ανάμιξης για διαφορετικές γεωμετρίες (Σχήμα 5α) και συνθήκες διαβροχής για $Re=0.12$ και $Pe=12000$. Τα γεωμετρικά χαρακτηριστικά για τη βασική δομή του SHM (6a-6a', Σχήμα 5α) είναι σύμφωνα με αυτά των Gavriilidis et al.^[12] (βλ. Πίνακα 1). Θεωρούμε συνθήκες μη ολίσθησης στα τοιχώματα. Η δεύτερη δομή (6a-3s-6a'-3s) είναι ίδια με την πρώτη με προσθήκη 3 συμμετρικών αυλακιών μετά το τέλος μιας ομάδας ασύμμετρων. Η τρίτη δομή (2a-2a') σχηματίζεται από μία ομάδα 2 ασύμμετρων αυλακιών ακολουθούμενη από μία ομάδα άλλων 2 αντεστραμμένων ασύμμετρων υπό συνθήκες ολίσθησης (υπερυδροφοβικότητας που δημιουργεί μεγάλο μήκος ολίσθησης) στο κάτω τοίχωμα του SHM. Η

τέταρτη δομή (2a-2a'-4s) είναι ίδια με την τρίτη με προσθήκη 4 συμμετρικών αυλακιών. Στις δύο τελευταίες περιπτώσεις τα ασύμμετρα αυλάκια μειώνονται από 6 (της βασικής δομής) σε 2 αφού λόγω της συνθήκης ολίσθησης στο κάτω τοίχωμα αυξάνεται η κάθετη στη ροή ταχύτητα (Σχήμα 3).



Σχήμα 5. (α) Εναλλακτικές γεωμετρίες που δοκιμάστηκαν για αύξηση της απόδοσης ανάμιξης. (β) Η απόδοση ανάμιξης συναρτήσει του μήκους του καναλιού για τις γεωμετρίες του Σχήματος 5α. $Pe = 1.2E4$ και $Re = 0.12$.

Τα αποτελέσματα στο Σχήμα 5β δείχνουν ότι η δομή 6a-3s-6a'-3s μειώνει το μήκος ανάμιξης κατά 8% και η συνθήκη ολίσθησης στο κάτω τοίχωμα του καναλιού με τη δομή 2a-2a' μειώνει δραστικά το μήκος ανάμιξης κατά 39%. Τέλος, η προσθήκη συμμετρικών αυλακιών (2a-2a'-4s) μειώνει το μήκος ανάμιξης κατά 49% σε σχέση με την αρχική δομή (6a-6a').

ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ

Μελετήθηκε υπολογιστικά τόσο το πεδίο ταχύτητας όσο και το πεδίο συγκέντρωσης στο μικροαναμίκτη SHM. Η μελέτη του πεδίου ταχύτητας ανέδειξε περιοδικότητα στο μήκος ενός μοναδιαίου κελιού αλλά και μία ιδιότυπη συμμετρία στο μισό μήκος του μοναδιαίου κελιού που επιτρέπει την επίλυση στα $\frac{3}{4}$ του μοναδιαίου κελιού. Η απόδοση ανάμιξης, όπως προκύπτει από το υπολογισμένο πεδίο συγκέντρωσης, συγκρίνεται ικανοποιητικά με πειραματικά αποτελέσματα από συνεστιακό μικροσκόπιο σάρωσης. Η παρεμβολή συμμετρικών αυλακιών στο μοναδιαίο κελί του μικροαναμίκτη (που περιέχει μόνο ασύμμετρα αυλάκια) σε συνδυασμό με την ολίσθηση στο κάτω τοίχωμα του μικροαναμίκτη (ως αποτέλεσμα ενίσχυσης της υδροφοβικότητάς του) μείωσαν το μήκος που απαιτείται για πλήρη ανάμιξη μέχρι και 49%.

ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

- [1] Nguyen N-T, N.-T. Nguyen. *Micromixers: Fundamentals, Design and Fabrication*. (2011)
- [2] Stroock AD, Dertinger SKW, Ajdari A, Mezic I, Stone HA, Whitesides GM. *Science* 295 (2002) 647-651.
- [3] Smith DE, Perkins TT, Chu S. *Macromolecules* 29(4). (1996) 1372-1373.
- [4] Sundararajan P, Stroock AD. *Annu Rev Chem Biomol Eng.* 3(1) (2012) 473-496.
- [5] Aref H. *Philos Trans R Soc A Math Phys Eng Sci.* 333(1631) (1990) 273-288.
- [6] Ottino JM. *The Kinematics of Mixing : Stretching, Chaos, and Transport*. (1989)
- [7] Wang D, Ba D, Liu K, et al. *Micromachines* 8(11) (2017) 1-13.
- [8] Kim CK, Yoon JY. *Proc Inst Mech Eng Part E J Process Mech Eng.* 231(4) (2017) 880-887.
- [9] Cantu-Perez A, Al-Rawashdeh M, Hessel V, Gavriilidis A. *Chem Eng J.* (227) (2013) 34-41.
- [10] Marschewski J, Brechbühler R, Jung S, Ruch P, Michel B, Poulikakos D. *Int J Heat Mass Transf.* 95 (2016) 755-764.
- [11] Yu X, Xia Y, Tang Y, et al. *Small* 13(24) (2017) 1-12.
- [12] Kee SP, Gavriilidis A. *Chem Eng J.* 142(1) (2008) 109-121.
- [13] Brooks AN, Hughes TJR. *Comput Methods Appl Mech Eng.* 32(1-3) (1982) 199-259.
- [14] Gomes Dutra Do Carmo E, Galeão AC. *Comput Methods Appl Mech Eng.* 88(1) (1991) 1-16.
- [15] Williams MS, Longmuir KJ, Yager P. *Lab Chip* 8(7) (2008) 1121-1129.
- [16] Rüttinger S, Buschmann V, Krämer B, Erdmann R, Macdonald R, Koberling F. *J Microsc.* 232(2) (2008) 343-352.