دانشکده مهندسی

گروه مکانیک

شبیه‌سازی عددی اختلاط در جریان‌های میکرو با استفاده از الکتروکینتیک

جعفر جماعتی

رساله دکتری

تابستان ۱۳۹۱

به نام خدا

دانشگاه فردوسی مشهد
دانشکده مهندسی
گروه مکانیک

عنوان رساله:

شبیه‌سازی عددی اختلاط در جریان‌های میکرو با استفاده از الکتروکینتیک

مولف:

جعفر جماعتی

ارائه شده جهت اخذ درجه دکتری
در رشته مهندسی مکانیک گرایش تبدیل انرژی

استاد راهنما:

دکتر حمید نیازمند

استاد مشاور:

دکتر سیدعلی میربزرگی

تابستان ۱۳۹۱

بسمه تعالی

صورت‌جلسه دفاع از رساله دکتری

جلسه دفاع از رساله آقای جعفر جماعتی دانشجوی دوره دکتری رشته مکانیک، گرایش تبدیل انرژی در ساعت ۹:۰۰ روز ۱۳۹۱/۶/۳۱ در محل دانشکده مهندسی با حضور امضاکنندگان ذیل تشکیل گردید. پس از بررسی‌های لازم، هیأت داوران رساله نامبرده را با نمره به عدد ۱۹/۴۶ ، به حروف نوزده و چهل و شش و با درجه مورد تأیید قرار داد.

عنوان رساله:

شبیه‌سازی عددی اختلاط در جریان‌های میکرو با استفاده از الکتروکینتیک

هیأت داوران: **امضا**

- **داور مدعو رساله: دکتر محمدسعید سعیدی**
  استاد گروه مکانیک، دانشگاه صنعتی شریف
- **داور مدعو رساله: دکتر ابراهیم شیرانی**
  استاد گروه مکانیک، دانشگاه صنعتی اصفهان
- **داور رساله: دکتر محمد مقیمان**
  استاد گروه مکانیک، دانشگاه فردوسی مشهد
- **داور رساله: دکتر جواد ابوالفضلی اصفهانی**
  استاد گروه مکانیک، دانشگاه فردوسی مشهد
- **استاد راهنما: دکتر حمید نیازمند**
  استاد گروه مکانیک، دانشگاه فردوسی مشهد
- **استاد مشاور: دکتر سید علی میربزرگی**
  استادیار گروه مکانیک، دانشگاه بیرجند
- **دبیر تحصیلات تکمیلی : دکتر محمد پسندیده‌فرد**
  دانشیار گروه مکانیک، دانشگاه فردوسی مشهد
- **مدیرگروه: دکتر حمید نیازمند**
  استاد گروه مکانیک، دانشگاه فردوسی مشهد

قدردانی و تشکر

با سپاس از ایزد منان، وظیفه خود می‌دانم که از زحمات تمامی اساتیدی که افتخار حضور در محضرشان را داشته‌ام، تشکر و قدردانی نمایم. مخصوصا از جناب آقای دکتر حمید نیازمند که علاوه بر راهنمایی‌های ارزنده علمی، همواره باعث دلگرمی و امید بوده‌اند، کمال تشکر را دارم. همچنین از آقای دکتر سید علی میربزرگی به جهت راهنمایی‌های ارزنده ایشان قدردانی می‌نمایم. از خانواده عزیزم بخصوص پدر و مادرم، برای حمایت بیدریغشان در تمام دوران زندگی و تحصیلی تشکر می‌کنم. از دوستان خوبم بویژه احسان و علی کمال تشکر را دارم. در پایان از همسر مهربان و صبورم قدردانی می‌کنم که بدون حضورش تحمل سختی‌ها ممکن نبود.

جعفر جماعتی

تابستان ۹۱

فهرست مطالب

فهرست مطالب I

فهرست علائم V

فهرست شکل‌ها VIII

فهرست جدول‌ها XIII

چکیده XIV

فصل اول: مقدمه ۱

۱-۱) MEMS و کاربردها ۱

۱-۲) لایه دوگانه الکتریکی ۲

۱-۳) الکتروکینتیک ۳

۱-۳-۱) الکتروفورسیس ۴

۱-۳-۲) پتانسیل ته نشینی ۴

۱-۳-۳) پتانسیل استریمینگ (پتانسیل جریانی) ۴

۱-۳-۴) الکترواسموتیک ۵

۱-۴) اختلاط در ریزمجراها ۵

۱-۴-۱) مخلوط‌گرهای ریزجریانی فعال ۶

۱-۴-۲) مخلوط‌گرهای ریزجریانی غیرفعال ۸

۱-۵) فناوری شیمی سطح ۹

۱-۶) اختلاط الکترواسموتیکی فعال/غیر فعال ۱۰

۱-۷) مطالعات انجام شده در زمینه پدیده‌های الکتروکینتیکی ۱۱

۱-۸) مطالعات انجام شده برای اختلاط تحت اثرات الکتروکینتیک ۱۵

۱-۹ ساختار پیشبرد پروژه ۱۷

فصل دوم: مدلسازی ریاضی ۱۹

۲-۱) میدان الکتریکی ۲۰

۲-۲) معادلات انتقال برای یون‌های الکتریکی ۲۱

۲-۳) معادلات جریان تحت اثرات الکتروکینتیک ۲۲
۲-۳-۱) تشابه میدان پتانسیل الکتریکی و میدان جریان در جریان‌های الکترواسموتیک ۲۲
۲-۴) معادله حاکم بر میدان غلظت ۲۳
فصل سوم: شرایط مرزی و روش عددی ۲۴
۳-۱) مقدمه ۲۴
۳-۲) نکاتی در مورد تولید شبکه ۲۴
۳-۳) روش حل تکراری معادلات جریان الکترواسموتیک ۲۶
۳-۴) شرایط مرزی ۲۶
۳-۴-۱) شرایط مرزی میدان جریان سیال ۲۶
۳-۴-۲) شرایط مرزی معادله غلظت گونه ۲۷
۳-۴-۳) شرایط مرزی پتانسیل الکتریکی خارجی ۲۷
۳-۴-۴) شرایط مرزی پتانسیل الکتریکی داخلی ۲۸
۳-۴-۵) شرایط مرزی میدان غلظت یونی ۲۸
۳-۵) انفصال معادلات اندازه حرکت ۲۹
۳-۶-۱) محاسبه جمله جابجایی ۳۱
۳-۶-۲) تخمین کمیت جابجا شده ϕ روی وجوه ۳۲
۳-۶-۳) محاسبه جمله پخش ۳۳
۳-۷) انفصال معادله پیوستگی (معادله اصلاح فشار) ۳۴
فصل چهارم: بررسی تحلیلی اثرات الکتروکینتیکی بر جریان درون ریزمجراها ۳۷
۴-۱ مقدمه ۳۷
۴-۲) استخراج معادله پواسان- بولتزمن از معادلات انتقال مومنتوم و یون‌ها ۳۷
۴-۳ ارزیابی حل‌های معادله P-B برای توزیع پتانسیل الکتریکی ۴۲
۴-۴) بررسی اثرات الکتروکینتیکی بر میدان سرعت در جریان فشار- محرک ۴۸
۴-۵) میدان پتانسیل القایی ۵۳
۴-۶) بررسی اثرات الکتروکینتیکی بر میدان دما در جریان فشار- محرک ۶۱
فصل پنجم: بررسی اختلاط توسط جریان‌های الکتروکینتیکی ۶۳

۵-۱) جریان الکترواسموتیک درون ریزمجرای تخت با دیواره همگن ۶۳
۵-۱-۱) حل عددی جریان الکترواسموتیک با اعمال مدل هلمهولتز- اسمولوکوفسکی درمرزها ۶۳
۵-۱-۲) بررسی میدان‌های جریان ترکیب الکترواسموتیک و فشار- محرک ۶۷
۵-۲) بررسی اختلاط در جریان‌های دوبعدی توسط مدل تقریبی H-S: ریزمجرای ناهمگن با یک تکه ناهمگنی ۶۹
۵-۲-۱) تعیین معیار غلظت مناسب ۷۰
۵-۲-۲) تعریف کارایی اختلاط ۷۳
۵-۲-۳) اثر موقعیت تکه ناهمگن ۷۹
۵-۲-۴) اثر اندازه تکه ناهمگن ۸۰
۵-۳) بررسی اختلاط در جریان‌های دوبعدی توسط مدل تقریبی H-S: ریزمجرا ناهمگن با چند تکه ناهمگنی ۸۲
۵-۳-۱) معرفی و طراحی ریزمخلوط‌گر قراردادی ۸۳
۵-۳-۲) اثر گرادیان فشار بر میدان جریان الکترواسموتیک ۸۴
۵-۳-۳) راندمان اختلاط ریزمخلوط‌گر ترکیبی از جریان فشار محرک و الکترواسموتیک ۸۸
۵-۳-۴) بررسی ظرفیت اختلاطی (Mixing Capacity) ۹۱
۵-۳-۵) نتیجه و جمع بندی ۹۲
۵-۴) مقایسه مدل‌سازی کامل و مدل H-S: میدان جریان و غلظت دوبعدی ۹۳
۵-۴-۱) مقایسه مدل‌سازی کامل و مدل H-S: میدان جریان دوبعدی بدون دبی جرمی خالص ۹۳
۵-۴-۲) مقایسه مدل‌سازی کامل و مدل H-S: میدان جریان دوبعدی با دبی جرمی ۹۸
۵-۴-۳) مقایسه مدل‌سازی کامل و مدل H-S: میدان دوبعدی غلظت و راندمان اختلاط ۱۰۳
۵-۵) مطالعه اختلاط در جریان‌های الکترواسموتیکی سه‌بعدی به کمک مدل H-S ۱۰۷
۵-۵-۱) معرفی و نامگذاری ریزمخلوط‌گرها ۱۰۸
۵-۵-۲) بررسی راندمان اختلاط ریزمخلوط‌گرهای سه‌بعدی ۱۱۳
۵-۵-۳) بررسی ظرفیت اختلاطی در ریزمخلوط‌گرهای سه‌بعدی ۱۲۱
۵-۵-۴) نتیجه‌گیری و جمع‌بندی ۱۲۲
۵-۶) بررسی مدل H-S در محاسبه میدان جریان و راندمان اختلاط (میدان جریان سه‌بعدی) ۱۲۲
۵-۷) بررسی مدل H-S در مقادیر مختلف K ۱۲۷
فصل ششم-نتیجه‌گیری و پیشنهادات ۱۲۹

۶-۱) نتایج ۱۲۹
۶-۱-۱) میدان پتانسیل الکتریکی ۱۲۹
۶-۱-۲) مساله پتانسیل جریانی ۱۳۰
۶-۱-۳) بررسی میدان‌های جریان ترکیبی الکترواسموتیک و فشار- محرک در ریزمجراهای ناهمگن ۱۳۰
۶-۱-۴) مقایسه حل تقریبی H-S و حل کامل معادلات انتقال الکترولیت ۱۳۲
۶-۲) پیشنهادات ۱۳۳
مراجع ۱۳۴

فهرست علائم

علائم انگلیسی	
B	نسبت فشار یونی به فشار دینامیکی، $B = k_b T_{ref} n_0 / \rho U_{ref}^2$
Br	عدد برینکمن، $Br = \mu U_{ref}^2 / k\,\Delta T_{ref}$
C	عدد غلظت گونه، $[1/m^3]$
D	ضریب پخش مولکولی، $[m^2/s]$
e	بار پایه، $e = 1.602 \times 10^{-19}\,[C]$
E	میدان الکتریکی، $E = E^*/(\Psi_{ref}/H)$
H	ارتفاع ریزمجرا، $[m]$
I	چگالی جریان الکتریکی، $I = I^*/I_{ref}$
I_{ref}	چگالی جریان الکتریکی مرجع، $I_{ref} = \rho_{e,ref} U_{ref}\,[C/m^2 s]$
I_C	چگالی جریان الکتریکی هدایتی
I_S	چگالی جریان الکتریکی استریمینگ
k	ضریب هدایت گرمایی، $[w/m^2 K]$
K	پارامتر ضخامت لایه دوگانه الکتریکی، $K = \kappa H$
k_b	ثابت بولتزمن، $k_b = 1.381 \times 10^{-23}\,[J/K]$
M. C.	ظرفیت اختلاطی، $[kg/s]$
n_0	غلظت یونی محلول همگن، $[ions/m^3]$
P	فشار، $P = P^*/\rho U_{ref}^2$
Pr	عدد پرانتل، $Pr = \nu/\alpha$
q_S	چگالی سطحی بار دیواره، $q_S = q_S^*/H\rho_{e,ref}$
Re	عدد رینولدز، $Re = U_{ref} H/\nu$
Sc	عدد اشمیت، $Sc = \nu/D$
q_S	چگالی سطحی بار دیواره، $q_S = q_S^*/H\rho_{e,ref}$
T	دمای مطلق، $T = T^*/T_{ref}$

T_{ref}	دمای مرجع ، $T_{ref} = 298\ [K]$
u	سرعت در جهت x ، $u = u/U_{ref}$
U_{ref}	سرعت مرجع در جریان فشار محرک: $U_{ref} = (-dp/dx)H^2/8\mu$، الکترواسموتیک: $U_{ref} = \varepsilon E\zeta/\mu$
u_S	سرعت لغزشی، $u_S = u_S/U_{ref}$
v	سرعت در جهت y، $v = v/U_{ref}$
V	سرعت (بردار سرعت)
w	سرعت در جهت y، $w = w/U_{ref}$
x	مولفه مختصات، $x = x^*/H$
y	مولفه مختصات، $y = y^*/H$
z	مولفه مختصات، $z = z^*/H$، عدد والانس یونی الکترولیت متقارن $z = 1$

علائم یونانی

α	ضریب پخش حرارتی، $[m^2/s]$
β	ضریب لغزش، $\beta = \beta^*/H$
δ	مقدار گرادیان پتانسیل الکتریکی در مرکز، $\delta = (d\psi/dy)_{y=1/2}$
ϵ	راندمان اختلاط موضعی، [%]
$E_{ch,r}$	راندمان نسبی اختلاط ریزمجرا، [%]
ϵ	راندمان اختلاط موضعی، [%]
ε_0	عبوردهی خلاء، $\varepsilon_0 = 8.854 \times 10^{-12}[C/Vm]$
ε_r	ثابت دی الکتریکی نسبی الکترولیت
θ	دما، $\theta = (T - T_w)/\Delta T_{ref}$
ϕ	پتانسیل خارجی/القایی، $\phi = \phi^*/\Psi_{ref}$
κ	پارامتر دیبای- هوکل، $\kappa = (2z^2e^2n_0/\varepsilon_r\varepsilon_0k_bT_{ref})^{1/2}, [m^{-1}]$
μ	لزجت سیال، $[Ns/m^2]$
ρ	چگالی سیال ، $[kg/m^3]$
ρ_e	چگالی الکتریکی خالص، $\rho_e = \rho_e^*/\rho_{e,ref}$

$\rho_{e,ref}$	چگالی الکتریکی خالص مرجع، $\rho_{e,ref} = zen_0, [C/m^3]$
σ	انحراف معیار
σ_w	انحراف معیار وزن دار
σ_{av}	هدایت الکتریکی متوسط الکترولیت، $\sigma_{av} = \sigma_{av}^* / \sigma_{ref}$
σ_{ref}	هدایت الکتریکی مرجع، $\sigma_{ref} = Dz^2e^2n_0/k_bT_{ref}, [1/\Omega m]$
ψ	پتانسیل الکتریکی داخلی، $\psi = \psi^*/\Psi_{ref}$
ψ_c	پتانسیل الکتریکی در وسط ریزمجرا، $\psi_c = \psi_c^*/\Psi_{ref}$
ψ_{ref}	پتانسیل الکتریکی مرجع، $\Psi_{ref} = k_bT_{ref}/ze, [V]$
ζ	زتاپتانسیل دیواره، $\zeta = \zeta^*/\Psi_{ref}$

زیرنویس و بالانویس‌ها

*	کمیت دارای بعد
′	مشتق نسبت به y
b	بالایی
c	مرکز
t	پایینی
w	دیواره
t	پایینی

فهرست شکل‌ها

شکل ۱-۱ توزیع پتانسیل الکتریکی بر اثر آرایش بارهای الکتریکی در مجاورت فصل مشترک مایع و جامد..... ۳

شکل ۱-۲ نحوه جابجایی بارهای الکتریکی توسط جریان‌های استریمینگ و هدایتی در جریان فشار محرک ۵

شکل ۱-۳ دسته‌بندی ریزمخلوط‌گرهای فعال..... ۷

شکل ۱-۴ دسته‌بندی مخلوط‌گرهای ریزجریانی غیرفعال ۹

شکل ۱-۵ شماتیک جریان الکترواسموتیک در مجاورت یک سطح با بار (A) همگن ($\zeta = -\zeta_0$) و (B) ناهمگن ($\zeta = +\zeta_0$) برای حالت $\zeta_0 > 0$ ۱۰

شکل ۳-۱ بررسی استقلال راندمان اختلاط از تعداد نقاط شبکه ۲۵

شکل ۳-۲ نامگذاری یک حجم کنترل دلخواه و نقاط مجاور آن در حوزه دوبعدی..... ۳۰

شکل ۴-۱ محورهای مختصات و خواص فیزیکی دیواره ریزمجرای مسطح..... ۳۸

شکل ۴-۲ خطوط هم‌تراز مربوط به معادله (۴-۲۳)..... ۴۵

شکل ۴-۳ مقدار مشتق پتانسیل الکتریکی در صفحه میانی ریزمجرا بر حسب تابعی از $\mathbf{K}$ و برای چند مقدار مختلف زتاپتانسیل..... ۴۶

شکل ۴-۴ حل‌های تحلیلی مختلف و حل عددی (رانج-کوتا) معادله پواسان- بولتزمن ۴۶

شکل ۴-۵ مقایسه نتایج حل‌های تحلیلی مختلف با حل عددی برای مقدار پتانسیل در مرکز ۴۷

شکل ۴-۶ مقایسه حل‌های تحلیلی جدول ۴-۱ و حل‌های عددی ۴۸

شکل ۴-۷ سرعت لغزش به عنوان تابعی از زتاپتانسیل برای ضرایب لغزش مختلف ۵۰

شکل ۴-۸ اثر زتاپتانسیل بر پروفیل سرعت در حضور لغزش ۵۱

شکل ۴-۹ پیش‌بینی سرعت لغزش توسط حل‌های مختلف معادله پواسان- بولتزمن ۵۲

شکل ۴-۱۰ اثرات لغزش و لایه دوگانه الکتریکی بر توزیع سرعت ۵۲

شکل ۴-۱۱ هدایت الکتریکی متوسط بر حسب تابعی از زتاپتانسیل..... ۵۵

شکل ۴-۱۲ چگالی بار سطحی بر حسب تابعی از زتاپتانسیل..... ۵۷

شکل ۴-۱۳ تغییرات ولتاژ القایی بر حسب مقادیر مختلف K بدون وجود لغزش ۵۷

شکل ۴-۱۴ تغییرات ولتاژ القایی در حضور لغزش..... ۵۹

شکل ۴-۱۵ ولتاژ القایی بر حسب تابعی از زتاپتانسیل برای ضرایب لغزش مختلف..... ۵۹

شکل ۴-۱۶ اثرات لغزش جریان هدایتی و جریان استریمینگ ۶۰

شکل ۴-۱۷ دمای بدون بعد در مرکز ریزمجرا به صورت تابعی از $\boldsymbol{\beta}$ و پتانسیل دیوار $\boldsymbol{\Psi_W}$ برای K=20 و $\mathbf{Br} = -\mathbf{1}$ ۶۲
شکل ۴-۱۸ توزیع دمای بی‌بعد در عرض ریزمجرا برای مقادیر مختلف ضریب لغزش ۶۲
شکل ۵-۱ حل عددی و تحلیلی میدان سرعت الکترواسموتیک درون ریزمجرای همگن ۶۵
شکل ۵-۲ خطوط جریان بدست آمده توسط حل تحلیلی [۷۹] (خطوط توپر) و حل عددی (خط چین) ۶۹
شکل ۵-۳ خطوط جریان برای شرایط مرزی نامتقارن و دبی جریانی صفر با شرایط مرزی ۶۷
شکل ۵-۴ خطوط جریان در میدان‌های ترکیبی از جریان فشار- محرک و جریان دیواره محرک (RE =1) ۶۸
شکل ۵-۵ خطوط جریان مربوط به ساده‌ترین طرح از ریزمجرای ناهمگن ۷۰
شکل ۵-۶ میدان‌های جریان مربوط به معادله (۵-۴): خطوط جریان (سمت راست) و خطوط هم‌تراز غلظت (سمت چپ) ۷۱
شکل ۵-۷ میزان غلظت متوسط و انحراف معیار برای میدان‌های جریان شکل ۵-۶ ..... ۷۲
شکل ۵-۸ انحراف معیار وزن‌دار با تابع وزنی سرعت برای میدان‌های جریان شکل ۵-۶ ..... ۷۳
شکل ۵-۱۰ کارایی اختلاط برای میدان‌های جریان شکل ۵-۶ ..... ۷۴
شکل ۵-۱۱ میزان کارایی نسبی ریزمجرا و کارایی مطلق ریزمجرا برای میدان‌های جریان شکل ۵-۶ ..... ۷۴
شکل ۵-۱۲ طول لازم برای رسیدن به راندمان اختلاط دلخواه برای میدان‌های جریان شکل ۵-۶ ..... ۷۶
شکل ۵-۱۳ طول اضافه بعد از تکه ناهمگن برای رسیدن به راندمان اختلاط دلخواه برای میدان‌های جریان شکل ۵-۶ .... ۷۶
شکل ۵-۱۴ پروفیل ناپیوسته و پروفیل‌های پیوسته پیشنهادی معادل برای زتاپتانسیل ۷۷
شکل ۵-۱۵ میزان اختلاط در طول ریزمجرا با استفاده از پروفیل‌های منقطع و پیوسته برای سرعت لغزشی در دیواره ۷۹
شکل ۵-۱۶ اثر تغییر موقعیت تکه ناهمگنی بر عملکرد اختلاط (طول تکه ناهمگنی $L_p=L/6$) ۸۰
شکل ۵-۱۷ اثر اندازه تکه ناهمگنی بر عملکرد اختلاط ۸۱
شکل ۵-۱۸ مشخصات ریزمجرای ناهمگن مورد بررسی و محورهای مختصات ۸۲
شکل ۵-۱۹ یک نمونه از آرایش تکه‌های ناهمگنی بار و خطوط جریان الکترواسموتیک با E مثبت از چپ به راست ۸۴
شکل ۵-۲۰ سه آرایش متفاوت برای بارهای قسمت میانی و جریان الکترواسموتیک ناشی از آنها، الف) خطوط جریان؛ ب) توزیع غلظت ۸۶
شکل ۵-۲۱ اثر ترکیب جریان فشار- محرک با جریان الکترواسموتیک مورد نظر در آرایش NP/PN. الف) خطوط جریان، ب) توزیع غلظت ۸۷
شکل ۵-۲۲ تغییرات راندمان اختلاط در طول ریزمجرا برای اختلاف فشارهای مختلف و آرایش‌های متفاوت تکه‌های ناهمگنی بار ۸۸

شکل ۵-۲۳ تغییرات راندمان اختلاط در طول ریزمجرا به ازای مقادیر مختلف بار روی تکه‌های ناهمگنی و مقادیر متفاوت **ΔP** ۸۹
شکل ۵-۲۴ تغییرات راندمان نسبی اختلاط به ازای تغییرات اختلاف فشار **ΔP** برای سه آرایش بار مختلف ۹۰
شکل ۵-۲۵ تغییرات ظرفیت اختلاطی به ازای تغییرات اختلاف فشار **ΔP** برای چند آرایش مختلف از تکه‌های ناهمگنی بار ۹۲
شکل ۵-۲۶ خطوط جریان و بردارهای سرعت در ریزمجرای ناهمگن با الگوی بار (NP/NP) در قسمت میانی A) حل عددی بر مبنای مدل H-S، و B) حل عددی معادلات ارنست- پلانک ۹۴
شکل ۵-۲۷ خطوط جریان و بردارهای سرعت در ریزمجرای ناهمگن با الگوی بار (PN/NP) در قسمت میانی A) حل عددی بر مبنای مدل H-S، و B) حل عددی معادلات ارنست- پلانک ۹۵
شکل ۵-۲۸ خطوط جریان و بردارهای سرعت در ریزمجرای ناهمگن با الگوی بار (PP/NN) در قسمت میانی A) حل عددی بر مبنای مدل H-S، و B) حل عددی معادلات ارنست- پلانک ۹۶
شکل ۵-۲۹ خطوط جریان و بردارهای سرعت در ریزمجرای ناهمگن با الگوی بار (NP/NP) در قسمت میانی با استفاده از حل عددی مدل H-S (نیمه بالایی شکل) و حل عددی معادلات ارنست- پلانک (نیمه پایینی شکل) ۹۷
شکل ۵-۳۰ خطوط جریان و بردارهای سرعت در ریزمجرای ناهمگن با الگوی بار (NP/NP) در قسمت میانی A) حل عددی بر مبنای مدل H-S، و B) حل عددی معادلات ارنست- پلانک ۹۸
شکل ۵-۳۱ خطوط جریان و بردارهای سرعت در ریزمجرای ناهمگن با الگوی بار (PN/NP) در قسمت میانی A) حل عددی بر مبنای مدل H-S، و B) حل عددی معادلات ارنست- پلانک ۹۹
شکل ۵-۳۲ خطوط جریان و بردارهای سرعت در ریزمجرای ناهمگن با الگوی بار (PP/NN) در قسمت میانی A) حل عددی بر مبنای مدل H-S، و B) حل عددی معادلات ارنست- پلانک ۱۰۰
شکل ۵-۳۳ خطوط جریان و بردارهای سرعت در ریزمجرای ناهمگن با الگوی بار (PN/PN) توسط حل عددی بر مبنای مدل H-S (سمت چپ) و حل عددی معادلات ارنست- پلانک (سمت راست) ۱۰۱
شکل ۵-۳۴ سرعت متوسط محاسبه شده توسط مدل تقریبی H-S (منحنی خط‌چین) و شبیه‌سازی کامل (منحنی نقطه-چین) درون ریزمجرای ناهمگن با الگوی بار (PN/PN) ۱۰۲
شکل ۵-۳۵ میدان غلظت در ریزمجرای ناهمگن با الگوی بار (PN/PN) توسط حل عددی بر مبنای مدل H-S (سمت چپ) و حل عددی معادلات ارنست- پلانک (سمت راست) ۱۰۴

شکل ۵-۳۶ خطوط هم‌تراز غلظت درون ریزمجرای ناهمگن با الگوی بار (PN/PN) با استفاده از حل تقریبی H-S (منحنی-های خط‌چین) و حل عددی معادلات ارنست- پلانک (منحنی‌های نقطه‌چین) ۱۰۵
شکل ۵-۳۷ میزان راندمان اختلاط محاسبه شده توسط مدل تقریبی H-S (منحنی‌های خط‌چین) و حل عددی معادلات ارنست- پلانک (منحنی‌های نقطه‌چین) با الگوی بار (PN/PN) برای سه مقدار مختلف ۱۰۶
شکل ۵-۳۸ مشخصات ریزمجرای مورد بررسی در صفحات ناهمگنی بار و محورهای مختصات..... ۱۰۷
شکل ۵-۳۹ الگوهای جریان و خطوط هم‌تراز غلظت برای جریان مرکب الکترواسموتیک و فشار- محرک در صفحه میانی درون ریزمجرای سه‌بعدی با E مثبت از چپ به راست ۱۰۹
شکل ۵-۴۰ وضعیت‌های متفاوت ناهمگنی روی دیواره ریزمجرای سه‌بعدی و میدان جریان و غلظت مربوطه با توجه به جهت میدان خارجی و نحوه ورود دو سیال در ورودی ریزمجرا (ترکیب جریان الکترواسموتیک و فشار- محرک). ۱۱۰
شکل ۵-۴۱ اثر میدان فشار خارجی بر جریان و نحوه اختلاط درون ریزمجرای سه‌بعدی ۱۱۲
شکل ۵-۴۲ راندمان اختلاط در طول ریزمجرا برای اختلاف فشارهای مختلف و الگوهای متفاوت ناهمگنی روی صفحات $(\mathbf{x}-\mathbf{z})$ به همراه **Ex**..... ۱۱۳
شکل ۵-۴۳ راندمان اختلاط در طول ریزمجرا برای اختلاف فشارهای مختلف و الگوهای متفاوت ناهمگنی روی صفحات $(\mathbf{x}-\mathbf{y})$ به همراه **Ex**..... ۱۱۵
شکل ۵-۴۴ میدان‌های غلظت و خطوط جریان مربوط به نمودار شکل ۵-۴۳ ، حالتی که صفحه چرخش گردابه‌ها موازی با فصل مشترک دو سیال مورد اختلاط است ۱۱۶
شکل ۵-۴۵ راندمان اختلاط در طول ریزمجرا برای دو اختلاف فشار مختلف و موقعیت‌های متفاوت الگوی (PN/PN) روی صفحات ریزمجرا..... ۱۱۷
شکل ۵-۴۶ میدان‌های غلظت و جریان مربوط به وضعیت‌های X-Y, EY و X-Z, EZ ، حالتی که صفحه چرخش گردابه‌ها عمود بر فصل مشترک دو سیال مورد اختلاط است ۱۱۸
شکل ۵-۴۷ تغییرات راندمان نسبی اختلاط بر حسب اختلاف فشار $\mathbf{\Delta P}$ برای آرایش‌های بررسی شده در شکل ۵-۴۶... ۱۲۰
شکل ۵-۴۸ تغییرات ظرفیت اختلاطی به ازای تغییرات اختلاف فشار $\mathbf{\Delta P}$ برای آرایش‌های شکل ۵-۴۶ ..... ۱۲۱
شکل ۵-۴۹ سرعت متوسط محاسبه شده توسط مدل تقریبی H-S (منحنی خط‌چین) و شبیه‌سازی کامل (منحنی نقطه-چین) درون ریزمجرای سه‌بعدی با الگوی بار (PN/PN) ۱۲۳
شکل ۵-۵۰ مقایسه میدان جریان به دست آمده در صفحه میانی $(\mathbf{z}=\mathbf{0.5})$ از ریزمجرای سه‌بعدی توسط مدل H-S (سمت چپ) و شبیه‌سازی کامل (سمت راست) با الگوی بار (PN/PN)..... ۱۲۴

شکل ۵-۵۱ میدان غلظت به دست آمده توسط مدل تقریبی H-S (سمت چپ) و شبیه‌سازی کامل (سمت راست) درون ریزمجرای ناهمگن با الگوی بار (PN/PN) ۱۲۵
شکل ۵-۵۲ مقایسه میدان جریان و خط مسیر ذرات به دست آمده توسط مدل تقریبی H-S (سمت چپ) و شبیه‌سازی کامل (سمت راست) درون ریزمجرای ناهمگن با الگوی بار (PN/PN) ۱۲۶
شکل ۵-۵۳ میزان راندمان اختلاط محاسبه شده توسط مدل تقریبی H-S (منحنی‌های خط‌چین) و شبیه‌سازی کامل (منحنی‌های نقطه‌چین) با الگوی بار $(\mathbf{pn/pn})$ ۱۲۷
شکل ۵-۵۴ مقادیر بدست آمده برای راندمان اختلاط توسط مدل‌سازی کامل برای $\mathbf{K = 21, 31, 41}$ برای الگوی بار (PN/PN) ۱۲۸

فهرست جدول‌ها

جدول ۱-۱ عملکرد ریزمجراهای فعال ۷
جدول ۱-۲ عملکرد ریزمجراهای غیرفعال ۸
جدول ۱-۳ برخی ترکیب‌های جریان الکترواسموتیک در ریزمجراهای ناهمگن ۱۱
جدول ۴-۱ برخی از روابط ارائه شده برای میدان پتانسیل الکتریکی به همراه شرایط مرزی اعمال شده برای آنها ۴۳
جدول ۴-۲ هدایت الکتریکی متوسط، چگالی بار سطحی و ولتاژ القایی مربوط به توزیع‌های پتانسیل جدول ۴-۱ ..... ۵۵
جدول ۵-۱ مقادیر سرعت متوسط پیش‌بینی شده توسط مدل تقریبی H-S و شبیه‌سازی کامل..... ۱۰۳
جدول ۵-۲ ارزیابی شاخص‌های مهم در میزان اثر اختلاطی گردابه..... ۱۱۹

بسمه تعالی

مشخصات رساله/پایان نامه تحصیلی دانشجویان

دانشگاه فردوسی مشهد

عنوان رساله/پایان نامه: شبیه‌سازی عددی اختلاط در جریان‌های میکرو با استفاده از الکتروکینتیک

نام نویسنده: جعفر جماعتی

نام استاد راهنما: دکتر حمید نیازمند

نام استاد مشاور: دکتر سید علی میربزرگی

دانشکده : مهندسی	**گروه:** مکانیک	**رشته تحصیلی:** تبدیل انرژی
تاریخ تصویب: ۸۷/۱۲/۲۴		**تاریخ دفاع:** ۹۱/۶/۳۱
مقطع تحصیلی: کارشناسی ارشد ○ دکتری ●		**تعداد صفحات:** ۱۴۰

چکیده رساله/پایان نامه: در این رساله، ویژگی‌های جریان‌های الکتروکینتیکی مورد مطالعه قرار گرفته شده است. اثر پارامترهای فیزیکی مانند زتاپتانسیل و ضریب لغزش بر میدان پتانسیل و میدان جریان به صورت تحلیلی مورد بررسی قرار گرفته شده است. نتایج این بررسی نشان می‌دهد که استفاده از معادله مرسوم پواسون- بولتزمن برای ریزمجراهای باریک عاری از اشکال نیست و نیاز به حل معادلات ارنست- پلانک برای توزیع بارهای الکتریکی است. بر مبنای این یافته‌ها، اختلاط ناشی از اثرات الکتروکینتیکی در جریان‌های دوبعدی و سه‌بعدی درون ریزمخلوط‌گرهای مبتنی بر ریزمجرای ناهمگن به صورت کیفی و کمی بررسی شده است. برای شبیه‌سازی جریان الکترواسموتیک درون ریزمجرای ناهمگن، معادلات ناویر-استوکس برای جریان، ارنست-پلانک برای توزیع بارهای الکتریکی و معادله غلظت به روش عددی در هندسه دوبعدی و سه‌بعدی حل شده است. در حالتی که ریزمجرا ناهمگن و هندسه‌ی مورد مطالعه سه‌بعدی باشد، مدل‌سازی عددی پدیده بسیار پرهزینه است و دستیابی به حل دقیق با دشواری‌های زیادی همراه است. در بیشتر مطالعات انجام شده برای سادگی شبیه‌سازی، از مدل تقریبی هلمهولتز- اسمولوکوفسکی استفاده شده است که فقط مبتنی بر حل معادله ناویر-استوکس به همراه شرط مرزی لغزشی است. اعتبار مدل هلمهولتز-اسمولوکوفسکی برای پیش‌بینی میدان‌های جریان دوبعدی به خوبی مورد بررسی قرار گرفته است اما تا کنون میزان دقت نتایج حاصله از آن برای میدان غلظت و راندمان اختلاط در جریان‌های دو بعدی و سه-بعدی ارزیابی نشده است. از این رو ضروری است که اختلاط الکتروکینتیکی به صورت مدون مورد بررسی قرار گیرد که این کار هدف این رساله است. در این تحقیق، مفاهیم مناسب برای بررسی اختلاط معرفی شده است و با استفاده از آنها پدیده اختلاط درون ریزمخلوط‌گرها مطالعه شده است. انتظار می‌رفت که وجود این نواحی چرخشی در جریان‌های سه‌بعدی نیز باعث افزایش راندمان اختلاط گردد، اما بر خلاف انتظار مشاهده شد که در برخی موارد از جریان‌های سه‌بعدی، وجود گردابه اثر افزایشی روی راندمان اختلاط ندارد. یافته‌های این مطالعه نشان می‌دهد که میزان نامتقارنی در میدان جریان سیال عامل تعیین کننده در ایجاد اختلاط است. مطالعه ریزمخلوط‌گرهای سه‌بعدی مختلف نشان داد که در جریان‌های سه‌بعدی بسته به وضعیت صفحه فصل مشترک دو سیال مورد اختلاط با گردابه‌های جریان، راندمان اختلاط می‌تواند بهبود و یا حتی کاهش یابد. این نتایج تاکید می‌کند که بررسی دو بعدی اختلاط نمی‌تواند به صورت کامل اختلاط درون ریزمخلوط‌گرهای الکتروکینتیکی را شرح دهد. از مقایسه مدل تقریبی هلمهولتز-اسمولوکوفسکی با نتایج مربوط به حل کامل معادلات مشخص شد که در جریان‌های دوبعدی مدل تقریبی هلمهولتز-اسمولوکوفسکی به خوبی می‌تواند برای پیش‌بینی راندمان اختلاط با دقتی در حد ۱٪ به کار گرفته شود. اما در جریان‌های سه‌بعدی، مدل تقریبی زمانی دقت مناسب دارد که الگوی ناهمگنی تعبیه شده در قسمت میانی با نواحی همگن ریزمجرا اختلاف قابل توجهی داشته باشد. این یافته می‌تواند برای طراحی ریزمخلوط‌گرها در تراشه‌های آزمایشگاهی مورد استفاده قرار بگیرد.

کلمات کلیدی: ،

کلید واژه:

۱. اختلاط سه‌بعدی

۲. ریزمخلوط‌گر

۳. جریان الکترواسموتیک

۴. توزیع بار ناهمگن

۵. مدل هلمهولتز- اسمولوکوفسکی

امضای استاد راهنما:

تاریخ:

فصل اول: مقدمه

۱-۱) MEMS و کاربردها

در سال‌های اخیر رشد روزافزون تکنولوژی ساخت سیستم‌های با اندازه مینیاتوری باعث شده است تا ریزسیستم‌ها در کاربردهای متنوعی به خدمت گرفته شوند. مطالعه کلی این ریزسیستم‌ها تحت عنوان "ریز سیستم‌های الکترومکانیکی" و با نام اختصاری MEMS (Micro-Electro-Mechanical Systems) شناخته می‌شود. گسترش این فناوری چنان سرعت گرفته است که ریزسیستم‌هایی با مقیاس طولی میکرو و نانو برای کاربردهای تجاری و تحقیقات علمی رواج پیدا کرده‌اند. به نحوی که امروزه در بسیاری از کاربردها مانند ریزشتاب‌سنج‌ها در کیسه‌ی هوای خودرو، فشارسنج‌ها در برخی لوازم پزشکی، ریزمحرک‌ها در میکروسکوپ‌های الکترونی و ریزسیستم‌های جریانی برای انتقال هوشمند دارو، مورد استفاده قرار می‌گیرند. یک بخش وسیع از کاربردهای MEMS مبتنی بر تعامل بین سیال و یک ریزابزار است و مطالعه‌ی خصوصیات این سیستم‌ها در حیطه مبحث ریزجریان‌ها مورد بررسی قرار می‌گیرد. بسیاری از فرآیندهای بیوشیمی و بیولوژیکی ارتباط نزدیکی با مطالعه ریزجریان‌ها دارند و با بررسی ریزجریان‌ها، کاربردهای خلاقانه‌ای مانند ریزتراشه‌های آزمایشگاهی (Lab-on-a-Chip) ابداع شده است. غالبا بنیادی‌ترین عضو در یک سیستم ریزجریانی عبارت است از یک کانال با قطر بسیار کم (قطر هیدرولیکی بین ۱ تا ۱۰۰ میکرومتر) که ریزمجرا نامیده می‌شود. به دلیل کوچک بودن مقیاس طولی ریزمجراها، نسبت سطح به حجم در آنها نسبتا بالا است و بنابراین برخی پدیده‌های سطحی که در جریان‌های مقیاس بزرگ بی‌اثر هستند، در ریزجریان‌ها منشاء اثرات قابل توجهی هستند. بررسی کامل اثرات حادث در فصل مشترک سیال و سطح جامد توسط علم الکتروکینتیک صورت می‌گیرد. با درک صحیح از تعامل بین سیال و سطح جامد می‌توان از ریزمجراها برای مقاصد گوناگون مانند ریزمبدل‌های مورد استفاده در خنک‌کاری سیستم‌های الکترونیکی، واکنشگرهای جداساز برای سلول‌های زیستی، تجزیه‌گرهای خون استفاده کرد.

در بسیاری از کاربردهای ریزسیستم‌ها، اختلاط گونه‌های سیال از اهمیت بالایی برخوردار است. اساسی‌ترین نکته در اختلاط با مقیاس میکرونی این است که عامل این پدیده پخش مولکولی است و ذاتا فرآیند کندی می‌باشد، به ویژه زمانی که ضریب پخش کم باشد. به علاوه در این سیستم‌ها عدد رینولدز مربوط به ریزجریان‌های مایع بسیار اندک است. در رژیم‌های جریان با عدد رینولدز کم، اختلاط مغشوش به وجود نمی‌آید و بنابراین اختلاط فقط محدود به اثرات پخش مولکولی خواهد بود. در نتیجه بهبود راندمان اختلاط درون ریزسیستم‌ها یکی از چالش‌های MEMS است. برای بهبود اختلاط درون ریزسیستم‌ها

می‌توان به مکانیزم‌های اختلاط فعال و یا غیرفعال متوسل شد. هر کدام از این روش‌ها مزایا و معایب خاص خود را دارند. استفاده از روش‌های فعال غالبا نتایج بهتری در مقایسه با روش‌های غیرفعال دارد. با این حال این روش، به سازوکارهای ویژه و تجهیزات اضافی نیاز دارند که برای مقاصد مورد نظر در طراحی MEMS مناسب نیستند. در مقابل روش‌های غیرفعال به صورت مستقل و با تکیه بر ویژگی‌های ذاتی خود مانند هندسه و مشخصات فیزیکی می‌توانند منجر به بهبود اختلاط شوند. اخیرا با استفاده از فناوری‌های جدید در زمینه شیمی سطوح و با استفاده از خواص پدیده‌های الکتروکینتیکی ریزمجراهایی ساخته شده است که با وجود هندسه‌ی ساده توانایی ایجاد جریان‌های پیچیده را دارند و می‌توانند به عنوان ریزمخلوط-گرهای قدرتمند ایفاء وظیفه نمایند. نکته اساسی درباره ریزمخلوط‌گرهای الکتروکینتیکی این است که خواص سطحی آنها به نحوی تنظیم شود که بتواند سیال مجاور خود را به طور موثرتر و مناسب‌تر تحت تاثیر قرار دهد. تمام تعامل بین سطح جامد و سیال مجاور از طریق لایه‌ی دوگانه الکتریکی صورت می‌گیرد که در قسمت بعدی معرفی می‌شود.

۱-۲) لایه دوگانه الکتریکی

لایه‌ی دوگانه‌ی الکتریکی اساس و بنیان یک ریزمخلوط‌گر الکتروکینتیکی را تشکیل می‌دهد. در صورت نبودن لایه دوگانه الکتریکی، ریزمجراهای پر شده از سیال هیچ تفاوتی با مجراهای معمولی نخواهند داشت و حتی به دلیل افت‌فشارهای بزرگ مورد بی‌توجهی قرار می‌گرفتند. بروز این پدیده و تعامل آن با سایر عوامل مربوط به ریزسیستم‌ها باعث شده است تا جریان مایع درون ریزمجراها شاهد پدیده‌های مختلفی باشد. معلوم شده است که هنگامی که یک سطح جامد در مجاورت یک الکترولیت قرار می‌گیرد، روی دیواره جامد، بارهای سطحی ساکن القاء می‌شود. علت پیدایش این بارهای الکتریکی روی سطح جامد به مکانیزم‌های مختلفی از قبیل جذب یون‌ها از الکترولیت به سطح جامد، حل شدن یون‌های روی سطح در سیال الکترولیت و یونیزاسیون گروه‌های سطحی ارتباط داده شده است. در ریز سیال‌هایی که الکتروکینتیک در آنها اهمیت دارد، یونیزاسیون گروه‌های سطحی مکانیزم غالب است. بارهای الکترواستاتیکی به وجود آمده در سطح جامد، یون‌های مخالف درون الکترولیت را جذب و یون‌های موافق خود را دفع می‌کند به نحوی که در مجاورت دیواره‌ی جامد، یون‌های حاوی بار الکتریکی به یک آرایش پایدار می‌رسند. به این لایه که در آن توزیع بارهای الکتریکی درون سیال تحت اثر دیواره تغییر کرده است، لایه دوگانه‌ی الکتریکی و یا به اختصار EDL گفته می‌شود. مطابق شکل ۱-۱ به علت جاذبه بارهای الکتریکی ساکن روی سطح، غلظت بارهای الکتریکی (یون‌های) ناهمنام در مجاورت سطح جامد افزایش یافته است. بلافاصله در مجاورت دیواره یک لایه از یون‌های الکتریکی ناهمنام وجود دارد که به علت جاذبه بارهای سطح کاملا به دیواره جامد چسبیده و بی‌حرکت هستند. به این لایه ساکن، لایه استرن گفته می‌شود و ضخامت آن کمتر از یک نانومتر است. بعد از این