

## حل عددی جریان الکترواسموتیک در ریزمجراهای با خواص سطحی ناهمگن

علی رضا فراهی نیا<sup>۱</sup>، جعفر جماعتی<sup>۲</sup>، حمید نیازمند<sup>۳</sup>

<sup>۱</sup> دانشجوی کارشناسی ارشد، مهندسی مکانیک، دانشگاه فردوسی مشهد a.farahinia@gmail.com

<sup>۲</sup> استادیار، مهندسی مکانیک، دانشگاه رازی کرمانشاه j.jamaati@razi.ac.ir

<sup>۳</sup> استاد، مهندسی مکانیک، دانشگاه فردوسی مشهد niazmand@um.ac.ir

### چکیده

به منظور مطالعه جریان الکترواسموتیک<sup>۱</sup> درون ریزمجراهای ناهمگن، معادلات ناویر-استوکس برای جریان، ارنست-پلانک<sup>۲</sup> برای توزیع بارهای الکتریکی، همگی به روش عددی در یک ریزمجرای دوبعدی با هندسه کانال تخت حل شده‌اند. میدان جریان الکترواسموتیک درون ریزمجراهای ناهمگن ممکن است بسیار پیچیده و دارای نواحی چرخشی باشد که برای ایجاد اختلاط بسیار ایده‌آل است. این میدان جریان شدت متاثر از ضخامت لایه دوگانه الکتریکی (که با ثابت دیبای-هوکل،  $K$ ، تعیین می‌شود)، مقدار زتاپتانسیل دیواره و نحوه ناهمگنی زتاپتانسیل است. بسته به پارامترهای جریان، مدل‌سازی و رسیدن به حل درست جریان و توزیع بارهای الکتریکی درون ریزمجراهای ناهمگن با دشواری‌های زیادی همراه است. به همین دلیل مدل‌های ساده‌تر و تقریبی مانند مدل هلمهولتز-اسمولوکوفسکی نیز برای حل این جریان‌ها ارائه شده است که در آن اثر نیروی میدان الکتریکی بر سیال توسط سرعت لغزشی در دیواره ریزمجرا مدل می‌شود. در این مقاله علاوه بر اینکه حل دقیق معادلات جریان الکترواسموتیک برای چند ریزمجرای ناهمگن انجام شده است، نتایج مربوط به مدل تقریبی هلمهولتز-اسمولوکوفسکی نیز بدست آمده تا کارایی و دقت این مدل تقریبی در محاسبه میدان جریان‌های الکترواسموتیک مورد ارزیابی قرار گیرد. برای این مقایسه میدان جریان و بار الکتریکی در مقادیر مختلف از زتاپتانسیل و ثابت دیبای-هوکل و برای چند توزیع زتاپتانسیل انجام شده است. مقایسه نتایج نشان می‌دهد که مدل تقریبی فقط می‌تواند در یک محدوده مشخص از زتاپتانسیل و ثابت دیبای هوکل با دقت نسبتاً مناسب استفاده شود. نتایج این مطالعه می‌تواند برای مدل‌سازی میدان جریان الکترواسموتیک درون ریزمجراهای ناهمگن مورد استفاده قرار گیرند.

### واژه‌های کلیدی

جریان الکترواسموتیک، ریز مجرای ناهمگن، مدل هلمهولتز-اسمولوکوفسکی

### مقدمه

بنیادی‌ترین عضو در یک سیستم ریزجریانی عبارت است از یک کانال با قطر بسیار کم (قطر هیدرولیکی بین ۱ تا ۱۰۰ میکرومتر) که ریزمجرا<sup>۳</sup> نامیده می‌شود. بررسی کامل اثرات بوجود آمده در فصل مشترک سیال و سطح جامد توسط علم الکتروکینتیک صورت می‌گیرد. یکی از پدیده‌های مهم الکتروکینتیک، جریان الکترواسموتیک است که در آن سیال حاوی یون بر اثر اعمال میدان الکتریکی به حرکت وا داشته می‌شود. میدان جریان الکترواسموتیک درون ریزمجراهای ناهمگن ممکن است بسیار پیچیده و دارای نواحی چرخشی باشد. از این رو این جریان‌ها می‌توانند برای ایجاد اختلاط در ریزجریان‌ها بسیار مطلوب باشند. بخصوص اینکه توجه داشته باشیم که عدد رینولدز مربوط به ریزجریان‌های مایع بسیار اندک است، لذا اختلاط تنها محدود به اثرات پخش مولکولی است [۱] و ذاتاً فرآیند کندی است بخصوص زمانی که ضریب پخش کم باشد.

با افزایش عدد رینولدز امکان ایجاد جریان‌های نامتقارن و بهبود اختلاط وجود دارد، اما برای ایجاد جریان‌های مغشوش در ریزمجراها بایستی هزینه سنگین افت فشار زیاد را پرداخت و غالباً این کار به لحاظ جنبه‌های عملی چندان موجه نیست. تحت این شرایط تنها راه حل ممکن برای افزایش اختلاط، متوسل شدن به مکانیزم‌هایی است که از طریق هیدرودینامیک جریان، طول پخش مولکولی را کاهش می‌دهند.

برای بهبود اختلاط درون ریزسیستم‌ها می‌توان از مکانیزم‌های

اختلاط فعال و غیرفعال بهره برد. در روش فعال، جریان سیال انرژی لازم برای اختلاط را می‌تواند توسط روش‌های صوتی یا مافوق صوتی، الکتروفورسیس، پالس زمانی الکتروکینتیکی، اغتشاشات فشار، الکتروهیدرودینامیک، میدان مغناطیسی یا میدان حرارتی تامین کند.

[۲-۵]

در حالی که در مکانیزم‌های غیرفعال از روش‌هایی مانند ورقه

ورقه کردن، ریزمجراهای متقاطع، ریزمجراهای زیگزاگ، ساختار سه

بعدی مارپیچ، موانع تعبیه شده و مجراهای پیچ خورده از طریق عوامل هندسی و تغییر مسیر سیال، باعث افزایش اختلاط می‌شوند.

[۶-۸]

ریزمجراهایی که در این مقاله مورد مطالعه قرار گرفته‌اند دارای میدان‌های جریانی هستند که از هر دو مکانیزم فعال و غیرفعال بهره می‌برند، چون در آن‌ها وجود ناهمگنی بصورت یک مکانیزم غیرفعال و اعمال میدان الکتریکی به عنوان یک مکانیزم فعال عمل می‌کند.

### میدان الکتریکی

هنگامی که سیال الکتروولت در مجاورت دیواره جامد قرار می‌گیرد، بر اثر پتانسیل به وجود آمده در فصل مشترک مایع و جامد، بارهای الکتریکی درون سیال در مجاورت دیواره تشکیل لایه دوگانه الکتریکی می‌دهند. اعمال میدان الکتریکی بر چنین سیستمی منجر به حرکت بارهای الکتریکی و به تبع آن توده سیال می‌شود. اگر سطح جامد ساکن باشد و الکتروولت حاوی یون که در مجاورت سطح قرار دارد، بر اثر اعمال میدان الکتریکی خارجی به حرکت در آید، پدیده الکترواسموتیک رخ می‌دهد. در این پدیده تعیین میدان الکتریکی از اهمیت خاصی برخوردار است.

باتوجه به تئوری الکترواستاتیک، رابطه بین  $\Psi$ ، پتانسیل الکتریکی کل (مجموع پتانسیل الکتریکی داخلی  $\psi$  و خارجی  $\phi$ ) و چگالی بار خالص،  $\rho_e$ ، در هر نقطه از محلول الکتروولت توسط معادله پواسان مشخص می‌شود که شکل بی بعد آن به صورت زیر است:

$$\nabla^2 \Psi = -\frac{K^2}{2} \rho_e \quad (1)$$

$K = \kappa H$  پارامتر بی بعد دیبای هوکسل و  $\kappa = ze(2n_0/\epsilon_r \epsilon_0 K_b T)^{1/2}$  معکوس ضخامت مشخصه لایه دوگانه الکتریکی است. در رابطه بالا  $n_0$ ،  $e$ ،  $\epsilon_r$ ،  $\epsilon_0$ ،  $K_b$  و  $T$  به ترتیب عدد والانس الکتروولت متقارن، بار پایه الکترون، غلظت عددی توده یون‌ها در محلول یکنواخت، نفوذپذیری خلا، ثابت دی الکتریک محلول، ثابت بولتزمن و دمای مطلق الکتروولت است. برای یک محلول الکتروولت متقارن معادله حاکم بر چگالی خالص بارهای الکتریکی در لایه دوگانه الکتریکی در شکل بی بعد به صورت زیر تعیین می‌شود:

$$\rho_e = n^+ - n^- \quad (2)$$

که  $n^+ = n^{+*}/n_0$ ،  $n^- = n^{-*}/n_0$  و  $\rho_e = \rho_e^*/zen_0$  مقادیر بی‌بعد برای غلظت عددی یون‌های مثبت، غلظت عددی یون‌های منفی و چگالی خالص بارهای الکتریکی است.

### معادلات انتقال برای یون‌های الکتریکی

محاسبه غلظت‌های یونی از حل معادلات انتقال یون‌ها که با نام معادلات ارنست-پلانک شناخته می‌شوند، به دست می‌آیند. شکل بی‌بعد این معادلات بصورت زیر می‌باشد:

$$\vec{\nabla} \cdot (\vec{V} n^+) = \frac{\{\nabla^2 n^+ + \vec{\nabla} \cdot [n^+ (\nabla \psi + A \nabla \phi)]\}}{Re Sc^+} \quad (3)$$

$$\vec{\nabla} \cdot (\vec{V} n^-) = \frac{\{\nabla^2 n^- + \vec{\nabla} \cdot [n^- (\nabla \psi + A \nabla \phi)]\}}{Re Sc^-} \quad (4)$$

در این معادلات  $\vec{V}$  بردار سرعت،  $Sc^+ = \mu/\rho D^+$  عدد اشتمیت،  $Re = \rho U_{ref} H/\mu$  عدد رینولدز و  $U_{ref} = \epsilon_r \epsilon_0 E_{ref} \zeta/\mu$  سرعت مرجع در جریان الکتروسموتیک است.  $D^+$  ضرایب پخش مولکولی برای یون‌های مثبت و منفی هستند و  $A = E_{ref} H/(K_b T/ze)$  یک پارامتر بی بعد است که معرف نسبت ولتاژ اعمالی خارجی به ولتاژ مینا است. در شرایط دمای محیط مقدار ولتاژ مینا برابر  $K_b T/ze = 25mV$  است.

در معادلات مذکور جمله سمت چپ تساوی مربوط به پخش جابجایی است. جمله اول در سمت راست تساوی مربوط به پخش مولکولی یون‌هاست و جمله دوم در سمت راست تساوی مربوط به پخش ناشی از مهاجرت یون‌ها بر اثر پتانسیل الکتریکی است.

### معادلات جریان تحت اثرات الکتروکنتیک

برای جریان سیال در شرایط دائمی و با خواص فیزیکی ثابت، معادلات جریان در یک سیستم تحت اثرات الکتروکنتیک در شکل بی بعد به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$\nabla \cdot (\vec{V} \cdot \vec{V}) = -\vec{\nabla} P + \frac{\nabla^2 \vec{V}}{Re} - B \rho_e (\nabla \psi + A \nabla \phi) \quad (5)$$

$B = n_0 K_b T/\rho U_{ref}^2$  یک پارامتر بی‌بعد است که معرف نسبت فشار یونی به فشار دینامیکی است و فشار بی بعد به صورت  $U_{ref} = \epsilon E_{ext} \zeta/\mu$  و  $P = P^*/\rho U_{ref}^2$  (سرعت مرجع در جریان‌های الکترواسموتیک) تعریف شده است. جمله آخر در معادله فوق نیروی حجمی ناشی از اثرات میدان الکتریکی و یون‌های باردار درون سیال است. این نیروی الکتریکی مشابه با نیروی گرانشی به صورت یک نیروی حجمی اثر می‌کند و در جریان‌های الکتروسموتیک این نیرو عامل حرکت سیال است.

در یک مساله با جریان الکتروسموتیک عامل اصلی حرکت سیال درون مجرا، نیروی حجمی الکتریکی است. ابتدا میدان الکتریکی خارجی،  $\phi$ ، بدست می‌آید. در آغاز مقدار پتانسیل ناشی از لایه دوگانه الکتریکی یعنی  $\psi$ ، درون حوزه برابر با صفر و روی دیواره‌ها برابر با مقدار زتاپتانسیل در نظر گرفته می‌شود. سپس معادلات مربوط به میدان الکتریکی داخلی و خارجی با مقدار اولیه  $n^+ = 0$  حل می‌شوند و میدان پتانسیل داخلی،  $\psi$ ، توسعه می‌یابد و بعد از آن معادلات ارنست-پلانک حل می‌گردند تا توزیع غلظت برای یون‌های مثبت و منفی یعنی  $n^+$  و  $n^-$  بدست آید. سپس چگالی بارهای الکتریکی  $\rho_e$  از رابطه  $\rho_e = n^+ - n^-$  بدست می‌آید. در این مرحله اولین تخمین برای نیروی الکتریکی حجمی قابل محاسبه است و می‌توان با استفاده از آن میدان جریان را بدست آورد.

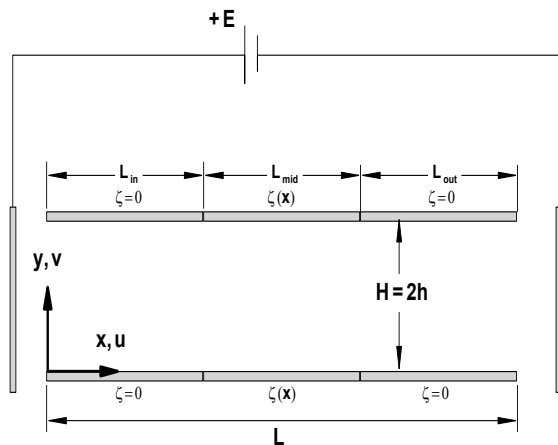
برای محاسبه میدان جریان ابتدا میدان فشار حدس زده می‌شود و سپس معادلات اندازه حرکت برای حل میدان سرعت حل می‌گردد. با استفاده از میدان سرعت بدست آمده، معادله پیوستگی جهت اصلاح میدان‌های فشار و سرعت حل می‌شود. از آنجا که میدان جریان، چگالی بار الکتریکی را تحت تاثیر قرار می‌دهد، لذا مجدداً

$$u_{wall} = -\frac{\varepsilon \varepsilon_0}{\mu} \psi_{wall} \quad (7)$$

در حقیقت با اعمال شرط بالا، اثر لایه دوگانه الکتریکی و حضور یون‌ها بر سیال به صورت یک شرط مرزی لغزشی روی دیواره‌ی جامد اعمال می‌شود. با این کار دیگر نیازی به اعمال اثر نیروی الکتریکی در معادله ناویر-استوکس نیست و میدان سرعت الکترواسموتیک از حل معادلات ناویر-استوکس بدون نیروی حجمی و با شرط لغزشی مذکور حل می‌شوند، یعنی:

$$\nabla \cdot (\vec{V} \cdot \vec{V}) = -\vec{\nabla} P + \frac{1}{Re} \nabla^2 \vec{V} \quad (8)$$

ریزمجره‌ای که در این مقاله بررسی شده‌اند همگی بصورت یک ریزمجره‌ی تخت دوبعدی دارای ارتفاع  $H$  و طول  $L = 10H$  می‌باشند که طول آنها به سه قسمت ابتدایی، میانی و انتهایی به ترتیب با طول‌های  $L_{in} = 4H$ ،  $L_{mid} = 2H$  و  $L_{out} = 4H$  تقسیم شده است. (شکل ۲) در قسمت‌های ابتدایی و انتهایی دیواره‌ها همگن و در قسمت میانی دیواره‌ها دارای تکه‌های ناهمگنی بار الکتریکی غیریکنواخت هستند به طوری که زتاپتانسیل وابسته به آن‌ها،  $\zeta(x)$ ، شامل مقادیر مثبت و منفی می‌شود. ریزمجره‌های مورد بررسی در بخش میانی خود دارای چهار تکه ناهمگنی می‌باشد.



شکل ۲: مشخصات ریزمجره‌ی ناهمگن مورد بررسی و محورهای مختصات

### مقایسه مدل‌سازی کامل و مدل تقریبی هلمهولتز اسمولوکوفسکی: میدان جریان دوبعدی بدون دبی جرمی خالص

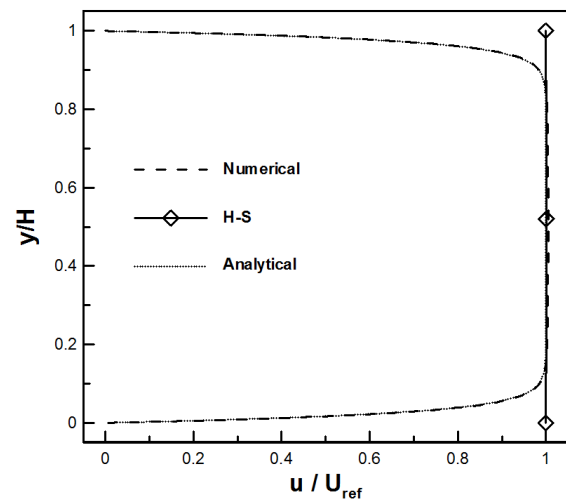
طبق مدل H-S برای جریانی از یک الکترولیت با ثابت دی‌الکتریک نسبته  $\varepsilon_r = 78.5$ ، چگالی  $\rho = 1000 \text{ kg/m}^3$  و لزجت  $\mu = 1.025 \times 10^{-3} \text{ Pa} \cdot \text{s}$  و ثابت دیبای- هوکل  $K = 41$  درون ریزمجره با ارتفاع  $H = 3.95 \text{ } \mu\text{m}$  و  $\zeta = -25 \text{ mV}$  و قدرت میدان الکتریکی  $E_{ext} = 14.59 \text{ V/mm}$ ، سرعت لغزشی ایجاد شده در مجاورت دیواره برابر با  $u_s = 0.254 \text{ mm/s}$  است. چنانچه مقدار زتاپتانسیل روی دیواره ریزمجره همگن نباشد، توزیع سرعت لغزشی نیز روی دیواره ناهمگن خواهد بود.

معادلات ارنست-پلانک حل می‌شوند تا توزیع غلظت‌های یونی و چگالی خالص بارهای الکتریکی بدست آید. در ادامه توزیع پتانسیل خارجی و داخلی محاسبه می‌شود. این مراحل آنقدر تکرار می‌گردند تا همگرایی مناسب حاصل شود.

### جریان الکترواسموتیک درون ریزمجره‌ی تخت با دیواره همگن

چنانچه جریان سیال توسعه یافته باشد، توزیع سرعت برای یک جریان الکترواسموتیک خالص با شدت میدان خارجی  $E_{ext}$  به صورت زیر به دست می‌آید:

$$u(y) = \frac{\varepsilon_r \varepsilon_0 E_{ext} \zeta}{\mu} \left( 1 - \frac{\psi(y)}{\zeta} \right) \quad (6)$$

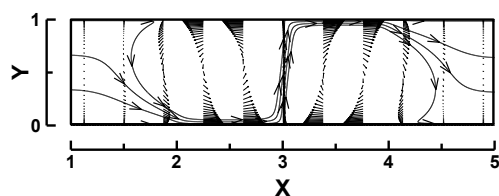


شکل ۱: حل عددی مدل کامل، مدل تقریبی هلمهولتز اسمولوکوفسکی و حل تحلیلی میدان سرعت الکترواسموتیک درون ریزمجره‌ی همگن

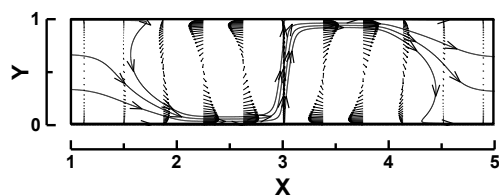
به عنوان اعتبارسنجی حل عددی برای  $\zeta^* = 25 \text{ mV}$  و  $K = 41$  و  $E_{ext} = 14.59 \text{ V/mm}$  سرعت مربوط به جریان الکترواسموتیک درون ریزمجره‌ی مستقیم و با سطح مقطع یکنواخت در حالتی که خواص دیواره همگن باشد، بصورت عددی حل شده است و در شکل ۱ با حل تحلیلی مقایسه شده است.

پروفیل جریان الکترواسموتیک درون ریزمجره‌های همگن مطابق با شکل ۱ به جز ناحیه‌ی کوچکی در مجاورت دیواره، تقریباً مقدار یکنواختی است. ضخامت این ناحیه‌ی کوچک که تحت اثر دیواره قرار دارد، بستگی به پارامتر بدون بعد دیبای- هوکل،  $K$ ، دارد. این مشخصه‌ها باعث شده است تا در شرایط خاص بتوان راه حل ساده و تقریبی مبتنی بر مدل هلمهولتز-اسمولوکوفسکی برای حل میدان سرعت ارائه نمود. در این روش میدان جریان توسط حل معادلات ناویر-استوکس با شرایط مرزی لغزشی که از روی میدان الکتریکی اعمالی و بارهای دیواره تعیین می‌شوند، صورت می‌گیرد. در این حالت میدان سرعت برای یک سیال لزج با بار خالص صفر توسط شرط مرزی این چنین بیان می‌گردد:

دور از دیواره تقریباً مشابه است در حالی که در مجاورت دیواره‌ها، نتایج دو مدل اختلاف فاحش دارند و میدان‌های جریان کاملاً متفاوت هستند. این نتایج برای  $K = 41$  بدست آمده و برای مقادیر کمتر از آن اختلاف نتایج بیشتر می‌گردد.



a) H-S modeling



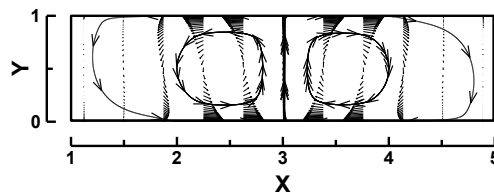
b) EOF simulation

شکل ۴: خطوط جریان و بردارهای سرعت در ریزمجرای ناهمگن با الگوی بار (pn/np) در قسمت میانی ( $2 < x < 4$ ) حل عددی بر مبنای مدل H-S، و (b) حل عددی معادلات ارنست-پلانک

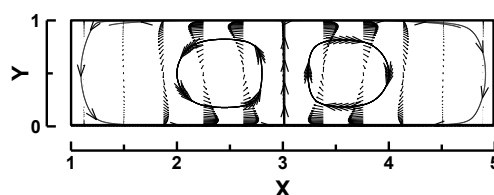
#### مراجع

- [1] Chen, J., Luo, W., Yang, R. 2006. "Electroosmotic flow driven by DC and AC electric fields in curved microchannels", *Jap. J. Appl. Phys.*, Vol. 45, pp.7983-7990
- [2] Ahmed, D., Mao, X., Juluri, B., Huang, T. 2009. "A fast microfluidic mixer based on acoustically driven sidewall-trapped microbubbles". *Microfluid. Nanofluid.*, 7, 727-731.
- [3] Campisi, M., Accoto, D., Damiani, F., Dario, P. 2009. "A soft-lithographed chaotic electrokinetic micromixer for efficient chemical reactions in lab-on-chips". *J. Micro-Nano Mech.*, 5, 69-76.
- [4] Zhang, Z., Yim, C., Lin, M., Cao, X. 2008. "Quantitative characterization of micromixing simulation". *Biomicrofluidics*, 2, 034104.
- [5] Wang, Y., Zhe, J., Chung, B.T.F., Dutta, P. 2008, "A rapid magnetic particle driven micromixer. *Microfluid*". *Nanofluid.*, 4, 375-389.
- [6] Tsai, R., Wu, C. 2011, "An efficient micromixer based on multidirectional vortices due to baffles and channel curvature". *Biomicrofluidics*, 5, 014103.
- [7] Jain, M., Yeung, A., Nandakumar, K. 2009, "Induced charge electro osmotic mixer Obstacle shape optimization". *Biomicrofluidics*, 3, 022413.
- [8] Tofteberg, T., Skolimowski, M., Andreassen, E., Geschke, O. 2010, "A novel passive micromixer Lamination in a planar channel system. *Microfluid*". *Nanofluid.*, 8, 209-215.

برای حالتی که اندازه زتاپتانسیل در قسمت میانی  $|z| = 25 \text{ mV}$  و در سایر قسمت‌ها صفر باشد. میدان سرعت با استفاده از مدل H-S و نیز شبیه سازی کامل توسط حل معادلات ارنست-پلانک به دست آمده است و برای الگوی بار (pn/np) در شکل ۳ نشان داده شده است.



b) H-S modeling



b) EOF simulation

شکل ۳: خطوط جریان و بردارهای سرعت در ریزمجرای ناهمگن با الگوی بار (pn/np) در قسمت میانی ( $2 < x < 4$ ) حل عددی بر مبنای مدل H-S، و (b) حل عددی معادلات ارنست-پلانک

#### مقایسه مدل سازی کامل و مدل تقریبی هلمهولتز اسمولوکوفسکی: میدان جریان دوبعدی با دبی جرمی

هر چند وجود قسمت اختلاط‌گر و جریان‌های چرخشی حادث در آن مطابق شکل ۳ باعث ایجاد اختلاط بیشتر می‌شود، اما باید توجه داشت که در کانال مورد بررسی، دبی جرمی حائز اهمیت می‌باشد لذا بررسی حالت بدون جریان جرمی صرفاً به این جهت بوده است که بتوانیم در مورد مکانیزم و الگوی جریان اظهار نظر کنیم، بنابراین سیستم اختلاطی را به نحوی طراحی می‌کنیم که اختلاط و پمپاژ سیال را به صورت همزمان داشته باشیم. برای تامین جریان جرمی مناسب، مقدار بار الکتریکی در قسمت‌های ورودی و خروجی به صورت یکنواخت و برابر با یک مقدار غیر صفر در نظر گرفته می‌شود. بررسی شکل ۴ نشان می‌دهد که نتایج میدان جریان به دست آمده توسط مدل H-S جز در ناحیه مجاور دیواره‌ها کاملاً شبیه میدان جریان حاصل از حل معادلات ارنست-پلانک می‌باشد. ضخامت این ناحیه بستگی مستقیم به پارامتر دیبای-هوکل،  $K$ ، دارد.

#### نتایج

تطابق خوب نتایج مدل تقریبی H-S با شبیه‌سازی کامل در میدان‌های جریان دوبعدی بررسی شد و نشان داده شد که جریان در فاصله