

## مطالعه اختلاط در ریزمخلوط‌گرهای الکتروسموتیکی با حل معادلات ارنست-پلانک

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

در این مقاله پدیده‌ی اختلاط در ریزمخلوط‌گرها تحت اثرات الکتروسموتیکی<sup>۱</sup> بصورت عددی مدل‌سازی شده است. برای مدل‌سازی جریان الکتروسموتیک درون ریزمجراهای<sup>۲</sup> ناهمگن معادلات ناویر-استوکس برای جریان، ارنست-پلانک<sup>۳</sup> برای توزیع بارهای الکتریکی و معادله غلظت، همگی به روش عددی حل شده‌اند. حل دقیق این معادلات بخصوص معادله ارنست-پلانک به لحاظ عددی نیازمند ملاحظات عددی بسیاری است. لذا به منظور ساده‌سازی و کاهش هزینه محاسباتی، مدل تقریبی هلمهولتز-اسمولوکوفسکی<sup>۴</sup> ارائه شده است که در آن اثر نیروی میدان الکتریکی بر سیال با سرعت لغزشی در دیواره‌ی ریزمجرا جایگزین می‌شود. اعتبار مدل هلمهولتز-اسمولوکوفسکی<sup>۴</sup> برای پیش‌بینی میدان‌های جریان دوبعدی به خوبی مورد بررسی قرار گرفته است اما تاکنون میزان دقت نتایج حاصله از آن برای میدان غلظت و راندمان اختلاط در جریان‌های دوبعدی ارزیابی نشده است. در این مقاله پارامتر مناسبی برای ارزیابی اختلاط معرفی شده و با استفاده از آن اختلاط ناشی از جریان الکتروسموتیک درون ریزمجرای ناهمگن بررسی شده است. نتایج نشان می‌دهد که رفتار ریزمخلوط‌گرهای الکتروسموتیکی تحت تاثیر نحوه آرایش بار الکتریکی ناهمگن و مقدار زتاپتانسیل<sup>۵</sup> دیواره و مقدار ضخامت لایه دوگانه الکتریکی<sup>۶</sup> (که با پارامتر دیبای-هوکل،  $K$ ، مقیاس می‌شود) می‌باشد. به منظور معرفی بهترین ریزمخلوط‌گر از لحاظ اختلاطی، آرایش‌های متفاوت ناهمگنی روی دیواره مورد مقایسه قرار گرفته است. نتایج این مقایسه نشان می‌دهد، کانال‌هایی که الگوی ناهمگنی آن‌ها نامتقارن تر است، عملکرد بهتری در اختلاط دارند. مقایسه نتایج مدل ارنست-پلانک با مدل تقریبی هلمهولتز-اسمولوکوفسکی نشان داد که با افزایش ضخامت لایه دوگانه الکتریکی یا به عبارتی کاهش مقدار پارامتر دیبای-هوکل، انحراف مدل تقریبی و حل کامل بیشتر می‌گردد بطوری که نتایج مدل تقریبی هلمهولتز-اسمولوکوفسکی در محاسبه اختلاط فقط در یک

بازه مشخص از مقادیر زتاپتانسیل دیواره و پارامتر دیبای-هوکل دارای دقت مناسب هستند.

### واژه‌های کلیدی

ریزمخلوط‌گر، جریان الکتروسموتیک، مدل هلمهولتز-اسمولوکوفسکی

### مقدمه

هرچند که در جریان‌های با مقیاس ماکرو با افزایش عدد رینولدز جریان و ایجاد اغتشاش و پدیده توربلانس می‌توان میزان اختلاط را به طرز قابل ملاحظه‌ای افزایش داد، 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 لذا به منظور بهبود اختلاط درون ریزسیستم‌ها از مکانیزم‌های اختلاط فعال<sup>۷</sup> و غیرفعال<sup>۸</sup> استفاده می‌شود. در روش فعال یک منبع انرژی خارجی علاوه بر محرک اصلی جریان برای ایجاد آشفتگی نمونه‌ها به کار گرفته می‌شود، [۱-۲] در حالی که در روش غیر فعال، انرژی اختلاط از طریق جریان سیال تامین می‌شود و با طراحی خاص مشخصات هندسی و فیزیکی ریزمجرا ناحیه تماس و زمان تماس گونه‌ها افزایش می‌یابد. [۳-۵]

اختلاط در جریان الکتروسموتیک درون ریزمجرای با دیواره‌های همگن، تحت اثر نفوذ مولکولی صورت می‌گیرد و قدرتمند نیست، اما به کمک فناوری شیمی سطح<sup>۹</sup> و ایجاد ناهمگنی‌های سطحی در بارهای الکتریکی سطوح، می‌توان جریان‌های چرخشی قابل توجهی درون یک ریزمجرا تولید کرد که موجب افزایش راندمان اختلاط می‌شود. [۶-۷]

مشاهده شده است که میزان نامتقارنی در میدان جریان سیال عامل تعیین کننده‌ای در ایجاد اختلاط است بخصوص در طراحی قطعه‌های ناهمگنی، هرچه آرایش تکه‌های ناهمگنی بار روی دیواره‌ها نامتقارن تر باشد، عملکرد اختلاطی ریزمجرا بهتر خواهد بود و الزاماً افزایش اندازه بارها باعث افزایش راندمان اختلاط نخواهد شد. [۸]

در این مقاله عملکرد اختلاطی درون ریزمجراهای ناهمگن در شرایط مختلف بر حسب زتاپتانسیل دیواره و ثابت دیبای-هوکل هم

<sup>۱</sup> Electrokinetic  
<sup>۲</sup> Microchannel  
<sup>۳</sup> Nernst-Planck  
<sup>۴</sup> Helmholtz-Smoluchowski  
<sup>۵</sup> Zeta-potential  
<sup>۶</sup> Electro Double Layer (EDL)

<sup>۷</sup> Active  
<sup>۸</sup> Passive  
<sup>۹</sup> Surface-chemistry technology

از طریق حل معادلات ارنست-پلانک و هم با استفاده از مدل تقریبی هلمهولتز-اسمولوکوفسکی انجام شده است و میزان دقت مدل تقریبی مورد بحث قرار گرفته شده است.

### روش حل مدل هلمهولتز-اسمولوکوفسکی

تحت شرایط خاص، مدل سازی جریان الکترواسموتیک می تواند به کمک معادله هلمهولتز-اسمولوکوفسکی انجام شود. در این حالت میدان سرعت برای یک سیال لزج با بار خالص صفر توسط شرط مرزی زیر حل می شود:

$$u_{wall} = -\frac{\varepsilon \varepsilon_0}{\mu} \psi_{wall} \quad (1)$$

در حقیقت با اعمال شرط بالا، اثر لایه دوگانه الکتریکی و حضور یون ها بر سیال به صورت یک شرط مرزی لغزشی روی دیواره ی جامد اعمال می شود. 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 بالا حل می شوند، یعنی:

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

### میدان الکتریکی

با توجه به تئوری الکتروستاتیک، 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 الکترولیت توسط معادله پواسان مشخص می شود که شکل بی بعد آن به صورت زیر می باشد:

$$\nabla^2 \Psi = -\frac{K^2}{2} \rho_e \quad (3)$$

$K = \kappa H$  پارامتر بی بعد دیبای هوکل و  $\kappa = ze(2n_0/\varepsilon_r \varepsilon_0 K_b T)^{1/2}$  معکوس ضخامت مشخصه لایه دوگانه الکتریکی است. در رابطه بالا  $Z$ ،  $e$ ،  $n_0$ ،  $\varepsilon_r$ ،  $\varepsilon_0$  و  $K_b$  و  $T$  به ترتیب عدد والانس الکترولیت متقارن، بار پایه الکترون، غلظت عددی توده یون ها در محلول یکنواخت، نفوذپذیری خلا، ثابت دی الکتریک محلول، ثابت بولتزمن و دمای مطلق الکترولیت است. برای یک محلول الکترولیت متقارن معادله حاکم بر چگالی خالص بارهای الکتریکی در لایه دوگانه الکتریکی در شکل بی بعد به صورت زیر تعیین می شود:

$$\rho_e = n^+ - n^- \quad (4)$$

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

### معادلات انتقال برای یون های الکتریکی

محاسبه غلظت های یونی از حل معادلات انتقال یون ها که با نام معادلات ارنست-پلانک شناخته می شوند، به دست می آیند. شکل بی بعد این معادلات بدین صورت می باشد:

$$\vec{\nabla} \cdot (\vec{V} n^+) = \frac{\{\nabla^2 n^+ + \vec{\nabla} \cdot [n^+(\nabla \psi + A \nabla \phi)]\}}{Re Sc^+} \quad (5)$$

$$\vec{\nabla} \cdot (\vec{V} n^-) = \frac{\{\nabla^2 n^- + \vec{\nabla} \cdot [n^-(\nabla \psi + A \nabla \phi)]\}}{Re Sc^-} \quad (6)$$

در این معادلات بردار سرعت،  $Sc^\pm = \mu/\rho D^\pm$  عدد اششامیت،  $Re = \rho U_{ref} H/\mu$  عدد رینولدز و  $U_{ref} = \varepsilon_r \varepsilon_0 E_{ref} \zeta/\mu$  سرعت مرجع در جریان الکترواسموتیک است.  $D^\pm$  ضرایب پخش مولکولی برای یون های 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 مبنا است. در شرایط دمایی محیط مقدار ولتاژ مبنا برابر  $K_b T/ze = 25mV$  است.

در معادلات فوق جمله سمت چپ تساوی مربوط به پخش جابجایی است. جمله اول در سمت راست تساوی مربوط به پخش مولکولی یون هاست و جمله دوم در سمت راست تساوی مربوط به پخش ناشی از مهاجرت یون ها 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 می شود:

$$\nabla \cdot (\vec{V} \cdot \vec{V}) = -\vec{\nabla} P + \frac{\nabla^2 \vec{V}}{Re} - B \rho_e (\nabla \psi + A \nabla \phi) \quad (7)$$

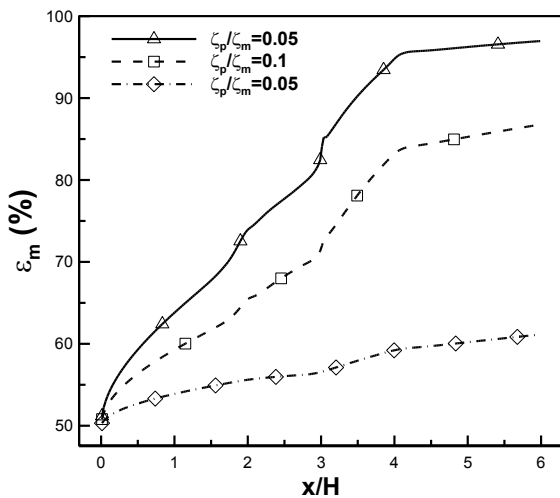
$B = n_0 K_b T/\rho U_{ref}^2$  یک پارامتر بی بعد است که معرف نسبت فشار یونی به فشار دینامیکی است و فشار بی بعد به صورت  $U_{ref} = \varepsilon E_{ext} \zeta/\mu$  و  $P = P^*/\rho U_{ref}^2$  (سرعت مرجع در جریان های الکترواسموتیک) تعریف شده است. جمله آخر در معادله فوق نیروی حجمی ناشی از اثرات میدان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

به منظور حل عددی معادلات جریان، از روش حجم محدود با متغیرهای هم مکان در شبکه ی غیریکنواخت استفاده شده است. از طرح سیمپل برای ارتباط میدان سرعت و فشار استفاده گردیده و برای پرهیز از جواب های شطرنجی در میدان جریان، در محاسبه نرخ جریان جرم جابجایی از طرح میانبایی رای-چو استفاده شده است. جملات پخش و جابجایی با استفاده از طرح تفاضل مرکزی در محل وجوه حجم کنترل محاسبه شده اند و در نهایت معادلات جبری حاصل به روش تکرار خط به خط حل شده اند.

### نتایج

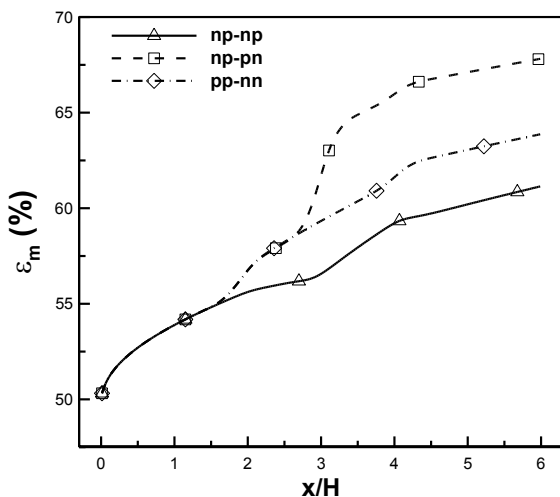
نتایج عددی نشان می دهد که اندازه طول و مکان ناهمگنی به صورت جدی بر میزان اختلاط ناشی از یک تکه ناهمگنی تاثیر می گذارند. برای بررسی اثر تکه های ناهمگنی بر عملکرد و ویژگی های اختلاطی ریزمجراهای ناهمگن، سه نوع ریزمخلوط گر معرفی شده است که

بعلاوه با افزایش  $\zeta_p/\zeta_m$  راندمان اختلاط در هر مقطع کاهش می-یابد، چراکه علاوه بر کاهش زمان حضور سیال درون ریزمجرا، افزایش سرعت متوسط سیال باعث می‌شود تا جریان های گردابه‌ای که در قسمت میانی وجود دارد، تضعیف گردند.



شکل ۲: تغییرات راندمان اختلاط در طول ریزمجرا به ازای زتاپتانسیل های مختلف و برای یک آرایش خاص تکه‌های ناهمگنی بار ( $k=41$ )

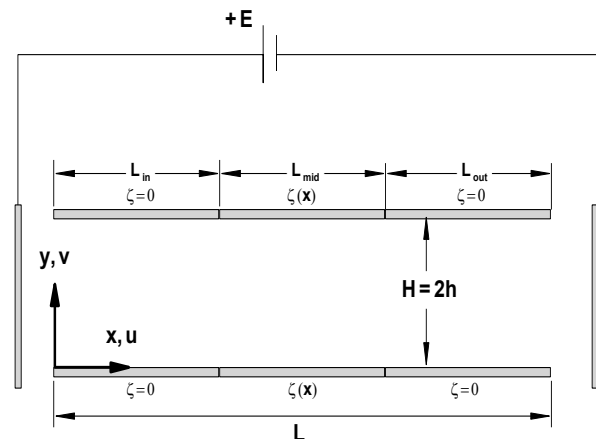
همانطور که قبلاً گفته شد ریزمخلوط‌گر مورد بررسی در بخش میانی خود دارای چهار تکه ناهمگنی می‌باشد. چیدمان این چهار تکه ناهمگنی می‌تواند در سه وضعیت کاملاً متفاوت (با حذف حالات آینه ای) صورت گیرد. مقایسه راندمان اختلاطی این آرایش‌ها در شکل ۳ نمایش داده شده است.



شکل ۳: تغییرات راندمان اختلاط در طول ریزمجرا به ازای زتاپتانسیل خاص ( $\zeta_p/\zeta_m = 0.5$ ) و برای آرایش‌های مختلف تکه‌های ناهمگنی بار ( $K = 41$ )

از این شکل مشاهده می‌شود برای سه آرایش بار نشان داده شده و به ازای یک زتاپتانسیل خاص، آرایش بار دوم (np/pn) بیشترین راندمان اختلاط را دارا می‌باشد. در این وضعیت، آرایش تکه‌های

تفاوت آن‌ها در نحوه آرایش تکه‌های ناهمگنی در بخش میانی آن‌ها است. ریزمجرای تخت دوعبدهی مورد مطالعه، در شکل ۱ نشان داده شده است که دارای ارتفاع  $H$  و طول  $L = 6H$  است و به سه قسمت ابتدایی، میانی و انتهایی به ترتیب با طول‌های  $L_{in} = 2H$ ،  $L_{mid} = 2H$  و  $L_{out} = 2H$  تقسیم شده است. در قسمت‌های ابتدایی و انتهایی دیواره‌ها همگن و در قسمت میانی دیواره‌ها دارای تکه‌های ناهمگنی بار الکتریکی غیر یکنواخت هستند به طوری که زتاپتانسیل وابسته به آن‌ها،  $\zeta(x)$ ، شامل مقادیر مثبت و منفی می-باشد.



شکل ۱: مشخصات ریزمجرای ناهمگن مورد بررسی و محورهای مختصات

### راندمان اختلاط ریزمخلوط‌گر

برای بررسی و مقایسه عملکرد ریزمخلوط‌گرهای مختلف نیاز به یک پارامتر مناسب برای تعیین میزان اختلاط داریم. در اینجا راندمان اختلاط را برای یک ریزمخلوط‌گر به صورت زیر معرفی می‌کنیم:

$$\epsilon_m = \frac{1 - \sigma_w}{1 - \sigma_{w,\min}} \quad (8)$$

$\sigma_w$ ، مقدار انحراف معیار غلظت‌ها در هر مقطع می‌باشد که معرف میزان غیریکنواختی غلظت در آن مقطع است که بصورت زیر تعریف می‌شود:

$$\sigma_w^2 = \frac{\int_0^H u(y)(C(y) - C_m)^2 dy}{\int_0^H u(y) dy} \quad (9)$$

$C_m$  مقدار غلظت متوسط در هر مقطع توسط رابطه زیر محاسبه می‌شود:

$$C_m = \frac{\int_0^H u(y)C(y) dy}{\int_0^H u(y) dy} \quad (10)$$

میزان زتاپتانسیل دیواره در میزان اختلاط الکتروکنتیک تاثیر بسزایی دارد. برای بررسی این مطلب در شکل ۲ راندمان اختلاط به ازای سه مقدار متفاوت  $\zeta_p/\zeta_m$  و برای یک آرایش خاص (np-np) مقایسه شده است. برای تمامی حالات مقدار  $K = 41$  در نظر گرفته شده است. همانطور که مشاهده می‌شود، در تمام موارد با پیش‌روی جریان در طول ریزمجرا، راندمان اختلاط بیشتر می‌شود.

## نتایج

رفتار ریزمخلوط‌گرهای الکترواسموتیکی تحت تاثیر نحوه آرایش بار الکتریکی ناهمگن و مقدار زتاپتانسیل روی دیواره و مقدار ضخامت لایه دوگانه الکتریکی (که با پارامتر دیبای-هوکل،  $K$ ، مقیاس می‌شود) می‌باشد. مدل‌سازی اختلاط الکتروکنتیکی می‌تواند با کمک مدل تقریبی H-S و یا از طریق حل کامل معادلات دقیق ارنست-پلانک انجام گردد که دارای دشواری زیادی در حل عددی است. در این بررسی نشان داده شد که با افزایش میزان زتاپتانسیل دیواره و یا کاهش  $K$  (که عکس آن مشخصه ضخامت لایه دوگانه الکتریکی است) مقدار اختلاف حل کامل معادلات و مدل هلمهولتز افزایش می‌یابد. نتایج عددی نشان می‌دهد که در محدوده  $K > 21$  و  $\zeta_p/\zeta_m < 0.1$  در مدل H-S در محاسبه راندمان اختلاط کمتر از ۱ درصد است و در خارج این محدوده برای  $K = 11$  و  $\zeta_p/\zeta_m = 0.5$  مقدار خطا به ۵ درصد می‌رسد. این میزان خطا ممکن است منجر به تفسیر نادرست از عملکرد ریزمخلوط‌گر گردد، بنابراین استفاده از مدل H-S برای این حالات توصیه نمی‌شود.

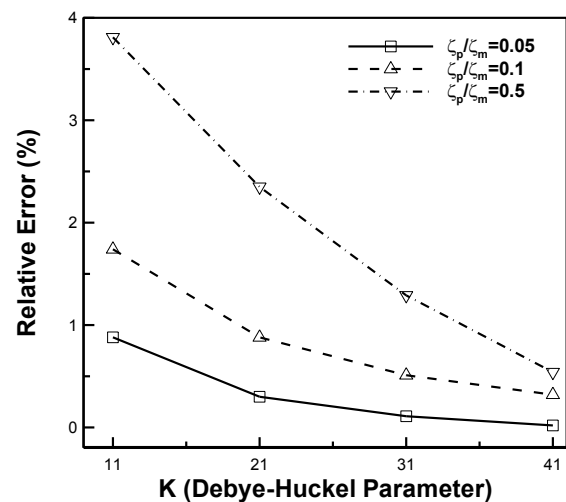
## مراجع

- [1] Du, Y., Zhang, Z., Yim, C., Lin, M., Cao, X. 2010. "A simplified design of the staggered herringbone micromixer for practical applications". *Biomicrofluidics*, 4, 024105.
- [2] Xu, B., Wong, T., Nguyen, N., Che, Z., Chai, J. 2010. "Thermal mixing of two miscible fluids in a T-shaped microchannel". *Biomicrofluidics*, 4, 044102.
- [3] Lee, C.Y., Lin, C.F., Hung, M.F., Tsai, C.H., Fu, L.M. 2006. "Experimental and numerical investigation into mixing efficiency of micromixers with different geometric barriers". *Mater. Sci. Forum*, 505-507, 391-396.
- [4] Neerinx, P.E., Denteneer, R.P.J., Peelen, S., Meijer, H.E.H. 2011. "Compact mixing using multiple splitting, stretching, and recombining flows". *Macromol. Mater. Eng.*, 296, 349-361.
- [5] Hardt, S., Pennemann, H., Schonfeld, F. 2006. "Theoretical and experimental characterization of a low-Reynolds number split-and-recombine mixer". *Microfluid. Nanofluid.*, 2, 237-248.
- [6] Jain, M., Yeung, A., Nandakumar, K. 2009. "Induced charge electro osmotic mixer: Obstacle shape optimization". *Biomicrofluidics*, 3, 022413.
- [7] Jain, M., Nandakumar, K. 2010. "Novel index for micromixing characterization and comparative analysis". *Biomicrofluidics*, 4, 031101.
- [8] Jamaati, J., Niazmand, H., Rensizbulut, M. 2013. "Investigation of electrokinetic mixing in 3D non-homogenous microchannels". *journal of computational and applied research in mechanical engineering*, Vol. 3, No. 1, PP. 41-52

ناهمگنی بار، کاملاً نامتقارن است؛ هر چه این عدم تقارن بیشتر باشد، میزان اختلاط افزایش می‌یابد.

برای بررسی عملکرد مدل H-S در مقادیر مختلف  $K$  شکل ۴ رسم شده است. در این شکل میزان خطای مدل H-S به ازای مقادیر مختلف  $K$  برای یک آرایش خاص np-pn و به ازای یک نسبت زتاپتانسیل مشخص محاسبه شده است. مشاهده می‌شود که با کاهش میزان  $K$ ، خطای ناشی از مدل‌سازی هلمهولتز-اسمولوکوفسکی برای محاسبه راندمان اختلاط بیشتر می‌گردد.

بعلاوه هر چقدر که مقدار نسبت زتاپتانسیل زیاد می‌شود، مقدار خطا افزایش می‌یابد، برای مثال در نسبت  $\zeta_p/\zeta_m = 0.05$  با کاهش  $K$  از ۴۱ به ۱۱ مقدار خطا نسبی حدود ۱ درصد افزایش می‌یابد، اما در نسبت  $\zeta_p/\zeta_m = 0.5$  برای همین وضعیت مشابه یعنی با کاهش  $K$  از ۴۱ به ۱۱ مقدار خطا نسبی حدود ۳ درصد افزایش یافته است.



شکل ۴: تغییرات خطای راندمان اختلاط برای آرایش (np-pn) در مقادیر مختلف  $K$  و نسبت زتاپتانسیل‌های متفاوت

این مطلب صحیح است چراکه ضخامت لایه دوگانه الکتریکی رابطه معکوسی با پارامتر دیبای-هوکل دارد، هر چه مقدار این پارامتر کمتر می‌گردد، لایه دوگانه الکتریکی ضخیم‌تر می‌شود. از طرف دیگر مقدار زتاپتانسیل دیواره نیز بطور مستقیم بر مقدار ضخامت لایه دوگانه الکتریکی تاثیر می‌گذارد و در نتیجه در مدل تقریبی هلمهولتز-اسمولوکوفسکی از ناحیه بزرگتری نسبت به حل کامل معادلات ارنست-پلانک، صرف نظر می‌شود و این سبب افزایش خطای مدل H-S می‌گردد. ممکن است به نظر برسد که خطای نسبی مدل H-S که برای آرایش np-pn حداکثر برابر با ۴ درصد بدست آمد، قابل چشم‌پوشی باشد، اما توجه به این نکته مهم است که این خطا می‌تواند در بررسی و مقایسه عملکرد ریزمخلوط‌گرهای مختلف منجر به نتایج نادرست گردد.