



بررسی اثر هندسه و بارگذاری سطح بر اختلاط الکترواسموتیک در میکروکانال‌های همگرا(واگرا) با استفاده از روش شبکه بولتزمن

یاسر بساطی¹، امیدرضا محمدی پور²، حمید نیازمند^{3*}

1- دانشجوی کارشناسی ارشد، مهندسی مکانیک، دانشگاه فردوسی مشهد، مشهد،

2- استادیار، مهندسی مکانیک، دانشگاه پیام نور، تهران

3- استاد، مهندسی مکانیک، دانشگاه فردوسی مشهد، مشهد

* صندوق پستی 9177948944، niazmand@um.ac.ir

اطلاعات مقاله

مقاله پژوهشی کامل

دریافت: 19 بهمن 1395

پذیرش: 05 اردیبهشت 1396

ارائه در سایت: 02 تیر 1396

کلید واژگان:

شبکه بولتزمن

اختلاط

الکترواسموتیک

نرنست-پلانک

میکرو کانال همگرا-واگرا

چکیده

در این تحقیق اثرات توزیع پتانسیل سطحی ریزمجرای و تغییرات هندسی آن بر میزان اختلاط در جریان‌های الکترواسموتیک مورد بررسی قرار گرفته است. هندسه‌های مورد بررسی شامل کانال‌های مستقیم، همگرا، واگرا و همگرا-واگرا است. شبیه‌سازی جریان الکترواسموتیک با تکیه بر حل معادلات ناویر-استوکس و نرنست-پلانک برای محاسبه توزیع میدان سرعت و بار الکتریکی به کمک روش عددی شبکه بولتزمن صورت گرفته است. صحت شبیه‌سازی با مقایسه میان حل عددی به دست آمده از روش شبکه بولتزمن و حل تحلیلی موجود در شرایط بارگذاری یکنواخت مورد ارزیابی قرار گرفته است و در نهایت میدان جریان و پدیده اختلاط در حضور بارگذاری‌های ناپیوسته سطحی به منظور دست‌یابی به الگوی اختلاطی مناسب بررسی شده است. نتایج عددی حاکی از بهبود قابل ملاحظه اختلاط در ریزمجرای همگرا است که در عین حال با کاهش نسبتاً زیاد دبی همراه بوده است و بالعکس استفاده از میکروکانال‌های واگرا منجر به افزایش دبی و کاهش اختلاط شده است. از این رو با استفاده از هندسه‌های همگرا-واگرا می‌توان به تعادل مناسبی از دبی و راندمان اختلاط دست یافت. نتایج عددی نشان می‌دهد که استفاده از ریزمجرای همگرا-واگرا سبب ایجاد راندمان اختلاط 90٪ همراه با دبی مناسب در مقایسه با ریزمجرای واگرا-همگرا می‌شود.

Geometry and zeta potential effects on electroosmotic mixing in converging (diverging) microchannel using lattice boltzmann method

Yaser Basati¹, Omid Reza Mohammadipour², Hamid Niazmand^{1*}

1- Department of Mechanical Engineering, Ferdowsi University of Mashhad, Mashhad, Iran.

2- Department of Mechanical Engineering, Payame Noor University (PNU), Tehran, Iran

* P.O.B. 9177948944 Mashhad, Iran, niazmand@um.ac.ir

ARTICLE INFORMATION

Original Research Paper
Received 07 February 2017
Accepted 25 April 2017
Available Online 23 June 2017

Keywords:
Lattice Boltzmann Method
Mixing
Electroosmotic
Nernst-Planck
Converging-diverging microchannel

ABSTRACT

In this study, effects of zeta potential distribution and geometrical specifications are numerically investigated on mixing efficiency in electroosmotic flows. Considered geometries include straight, converging, diverging, and converging-diverging microchannels. Electroosmotic flow simulations are conducted based on the N-S and Nernst-Planck equations for momentum and ionic charges distributions, respectively, by lattice Boltzmann method. Numerical simulations are validated against available analytic electroosmotic flow solutions in homogeneous straight channels, and then flow patterns and mixing performances in the presence of non-uniform zeta potential distributions are investigated in these research for enhanced mixing performances. Numerical results indicate that converging channel leads to a sizable increase in mixing efficiencies, while at the same time the flow rate decreases. In contrast, diverging channels increase the flow rate, while decreasing the mixing efficiency. Therefore, it is expected to achieve a balance between the mixing efficiency and mass flow rate using converging-diverging geometries. Numerical results indicate that mixing efficiency of about 90% can be reached with a converging-diverging microchannel with a reasonable decrease in mass flow rate as compared to its geometrical diverging-converging counterpart channel.

1- مقدمه

یکی از کاربردهای مهم و خلاقانه سیستم‌های میکرو سیالاتی، ریزتراشه‌های آزمایشگاهی می‌باشد. یک ریزتراشه آزمایشگاهی شامل یک آزمایشگاه در مقیاس میکرو با آرایه‌ای از میکروکانال‌ها، الکتروود، حسگرها و مدارهای الکترونیکی است. الکتروودها در مکان‌های مختلف قرار دارند، به طوری که با

در چند دهه گذشته کاربردهای سیستم‌های میکروسیالاتی در شیمی و بیوشیمی مانند بیوراکتورها، سیستم‌های ایمنی‌سنج و همچنین در اهداف زیستی مانند تجزیه و تحلیل و سنتز RNA / DNA رو به فزونی بوده است.

Please cite this article using:

Y. Basati, O. R. Mohammadipour, H. Niazmand, Geometry and zeta potential effects on electroosmotic mixing in converging (diverging) microchannel using lattice boltzmann method, Modares Mechanical Engineering, Vol. 17, No. 6, pp. 331-341, 2017 (in Persian)

برای ارجاع به این مقاله از عبارت ذیل استفاده نمایید:

است. یوشیدا و همکاران [15] جریان الکترواسموتیک بین دو صفحه موج با چگالی بار غیریکنواخت را به کمک شبکه بولتزمن مطالعه کردند.

وانگ و همکاران [16] اختلاط تحت جریان الکترواسموتیک را به روش شبکه بولتزمن با حل معادله پواسن-بولتزمن، معادلات مومنتم و انتقال جرم بررسی کردند. وانگ و همکاران [17] اختلاط جریان الکترواسموتیک درون یک ریز مجرای تخت در اثر حضور موانع مربعی شکل را به کمک شبکه بولتزمن بررسی کردند در این کار آن‌ها معادله پواسن-بولتزمن (با تقریب دیبای)، معادلات ناویر-استوکس و انتقال جرم را حل کردند.

لین و چن [18] جریان الکترواسموتیک در میکروکانال ناهمگن را با استفاده از شبکه بولتزمن مورد بررسی قرار دادند. در این کار آن‌ها توزیع بولتزمن را برای توزیع غلظت یونی بکار بردند و اثرات ناهمگنی در توزیع زتاپتانسیل، غلظت مولار یونی، ارتفاع کانال، نوسانی بودن میدان الکتریکی و فشار در جریان الکترواسموتیک و فشار محرک موردبررسی قرار گرفت. محمدی پور و نیازمند [19] جریان الکترواسموتیک موازی را به کمک شبکه بولتزمن مورد مطالعه قرار داده و دو مدل جدید از معادلات لتیس بولتزمن به‌منظور حل معادلات پواسن-بولتزمن و ارنست-پلانک ارائه نمودند. نتایج کار آن‌ها بیان می‌کند که وجود یک دیواره باردار میانی به سبب افزایش نیروی حجمی وارد بر سیال موجب افزایش دبی می‌شود و این افزایش دبی با ضخامت دیواره میانی رابطه عکس دارد.

سای و همکاران [20] جدایش تحت اثر الکتروکینتیک درون میکروکانال‌های واگرا همراه با جریان‌های جانبی را به صورت آزمایشگاهی و عددی مورد بررسی قرار دادند. لی و همکاران [21] اختلاط توسط جریان الکترواسموتیک در یک کانال همگرا و واگرا را به‌صورت تجربی و عددی با استفاده تقریب اسمولوکوفسکی¹ بررسی کردند و نشان دادند که هندسه همگرا و واگرا سبب افزایش دیفیوژن می‌شود و با تغییر هندسه این قسمت می‌توان درجه دیفیوژن را کنترل کرد. همچنین گرادیان‌های غلظت متفاوتی را می‌توان با اعمال میدان الکتریکی متفاوت و تغییر هندسه میکروکانال به دست آورد. در مقایسه با یک میکروکانال T شکل ساده، این میکروکانال پروفیل غلظت بهتر در طول کوتاه‌تر را نتیجه می‌دهد.

باوجود وجود تحقیقات گسترده در زمینه بررسی اختلاط در جریان‌های الکترواسموتیک در تعداد کمی از این تحقیقات به‌جای توزیع بولتزمن از معادلات نرنست-پلانک برای تعیین دقیق توزیع یون‌ها استفاده شده است. این در حالی است که توزیع یونی بولتزمن تنها زمانی معتبر است که جریان از نظر توزیع یونی کاملاً توسعه یافته باشد [22]. بنابراین در الگوهای جریان اختلاطی الکترواسموتیک که شرایط جریان عموماً فاصله زیادی با حالت توسعه‌یافتگی دارد، نتایج مبتنی بر توزیع بولتزمن با خطا همراه خواهد بود. همچنین تغییر در هندسه کانال سبب انحراف از حالت توسعه یافتگی می‌شود بنابراین نیاز خواهد بود برای تعیین دقیق توزیع یونی از معادله نرنست-پلانک استفاده شود. در این تحقیق ضمن پرداختن به شرایط جریان در میکروکانال‌های همگرا (واگرا)، اثرات خواص ناهمگن سطحی بر اختلاط سیال مورد بررسی قرار گرفته است. برای این منظور تمامی معادلات حاکم بر جریان شامل معادلات لاپلاس، پواسن، نرنست-پلانک، ناویر-استوکس و معادله پخش به ترتیب برای توزیع میدان الکتریکی خارجی، توزیع میدان الکتریکی داخلی، توزیع غلظت یون مثبت و منفی، میدان جریان سیال و میدان غلظت حل به صورت عددی و با کمک روش شبکه بولتزمن حل می‌شوند.

استفاده از میدان الکتریکی می‌توان جریان مایع و عملیات دیگر بر روی تراشه را کنترل کرد. تقریباً هر برنامه که در آزمایشگاه می‌توان انجام داد با استفاده ریزتراشه‌های آزمایشگاهی امکان‌پذیر است. ازجمله مزایای استفاده از ریزتراشه‌های آزمایشگاهی کاهش در نمونه‌ها و مواد، زمان واکنش بسیار کوتاه و قابلیت حمل می‌باشد. یک ویژگی مشترک در بسیاری از این کاربردها شامل عبور جریان مایع از درون یک میکروکانال است [1]. با درک صحیح از تعامل بین سیال و سطح جامد می‌توان از میکروکانال‌ها برای مقاصد گوناگون مانند ریزمبدل‌های مورد استفاده در خنک کاری سیستم‌های الکترونیکی، واکنشگرهای جداساز برای سلول‌های زیستی و تجزیه‌گرهای خون استفاده کرد. در بسیاری از این کاربردها، مانند ریز سیستم‌های جریانی برای انتقال هوشمند دارو، اختلاط گونه‌ها دارای اهمیت فوق‌العاده‌ای می‌باشد. اما با توجه به آرام بودن جریان، اختلاط چندان قابل توجه نیست. در پدیده اختلاط مطلوب است که در حداقل زمان و کوتاه‌ترین طول ممکن، اختلاطی همگن به دست آید. اساسی‌ترین نکته در اختلاط با مقیاس میکرونی این است که عامل این پدیده پخش مولکولی است که ذاتاً فرایندی کند می‌باشد. برای بهبود اختلاط درون ریز سیستم‌ها می‌توان به مکانیزم‌های اختلاط فعال و یا غیرفعال متوسل شد که روش‌های فعال غالباً نتایج بهتری در مقایسه با روش‌های غیرفعال دارند [2]. با این حال این روش‌ها، تجهیزات اضافی نیاز دارند که برای مقاصد مورد نظر در طراحی سیستم‌های میکروالکترومکانیکی مناسب نیستند [3، 4]. در مقابل روش‌های غیرفعال به صورت مستقل و با تکیه بر ویژگی‌های ذاتی مسئله مانند هندسه و مشخصات فیزیکی می‌توانند منجر به بهبود اختلاط شوند [5، 6]. یکی از روش‌های غیرفعال، استفاده از ویژگی پدیده‌های الکتروکینتیک می‌باشد.

رن و لی [7] جریان الکترواسموتیک درون ریز مجرا با سطح مقطع دایره‌ای با زتاپتانسیل غیریکنواخت را به‌صورت عددی مدل‌سازی کردند و نشان دادند که زتاپتانسیل غیریکنواخت انواع مختلف پروفیل سرعت را ایجاد می‌کند. فو و همکاران [8] اثر تغییرات زتاپتانسیل را به‌صورت عددی مطالعه کردند. یانگو همکاران [9] یک مدل تحلیلی برای توصیف اثرات پتانسیل زتای غیریکنواخت در جریان الکتروکینتیک پیشنهاد کردند. بیدس و همکاران [10] با استفاده از الگوهای ناهمگن زتاپتانسیل و ایجاد جریان‌های گردابه‌ای راندمان اختلاط را افزایش دادند. جماعتی و همکاران [11] اثر ناهمگنی در توزیع زتاپتانسیل بر اختلاط جریان الکترواسموتیک را به صورت عددی و با استفاده از روش حجم محدود مطالعه کردند در این بررسی آن‌ها برای مدل‌سازی کامل جریان از معادله نرنست-پلانک استفاده و نتایج به‌دست‌آمده را با مدل اسمولوکوفسکی مقایسه کردند. علیزاده و همکاران [12] تأثیر دما بر توزیع یون‌ها در جریان الکترواسموتیک را با استفاده از شبکه بولتزمن درون یک ریز مجرای تخت با دمای ثابت بر روی دیواره‌ها مطالعه کردند و یک مدل جدید به‌منظور بررسی اثر دما بر توزیع یون را ارائه کردند.

وانگ و هو [13] به بررسی وجود مانع استوانه‌ای در جریان فشار محرک درون میکروکانال‌های Y شکل به‌صورت تجربی و عددی پرداختند و با مطالعه پارامترهایی همچون قطر مانع، محل قرارگیری و تعداد موانع در اعداد رینولدز مختلف یک طرح بهینه به‌منظور افزایش راندمان اختلاط ارائه کردند همچنین نشان دادند که وجود مانع سبب افزایش همرفت جانبی و بهبود اختلاط می‌شود. چاو و همکاران [14] به بررسی اثرات گرمای ژول در جریان‌های الکترواسموتیک و ترکیب فشار محرک با الکترواسموتیک در میکروکانال‌های به دیواره موجی شکل پرداختند و نشان دادند عملکرد انتقال حرارت وابسته به مقدار گرمایش ژول و ساختار هندسه است و مستقل از حالات جریان

¹ Smoluchowski

2- معادلات حاکم

برای تشریح معادلات ماکروسکوپی حاکم بر جریان از یک مجرای تخت مشابه شکل 1 به عنوان هندسه مرجع استفاده شده است. در این شکل ارتفاع ریز مجرا برابر با $H = 30\mu\text{m}$ بوده و در قسمت میانی خواص سطحی به صورت ناهمگن در نظر گرفته شده است که وظیفه اختلاط جریان را بر عهده دارد.

2-1- میدان الکتریکی خارجی

میدان الکتریکی خارجی، میدانی است که در فضای بین یک آند و یک کاتد رخ می‌دهد. توزیع پتانسیل الکتریکی آن با $\phi(x, y)$ معرفی شده و شدت میدان الکتریکی ناشی از آن توسط رابطه $\vec{E} = -\vec{\nabla}\phi$ تعیین می‌شود. با معرفی کمیت بی‌بعد به صورت $x^* = x/H$, $y^* = y/H$, $\phi^* = \phi/EH$ و پس از حذف بالانویس (*) معادله حاکم بر میدان الکتریکی خارجی به صورت معادله لاپلاس است [23]:

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} = 0 \quad (1)$$

شرایط مرزی پتانسیل الکتریکی خارجی در ورودی، خروجی و روی دیواره‌ها به صورت روابط (2) می‌باشند:

$$\phi(0, y) = 0[V], \quad \phi(L, y) = EL[V] \\ \left. \frac{\partial \phi}{\partial y} \right|_{\text{wall}} = 0 \quad (2)$$

2-2- میدان الکتریکی داخلی

توزیع پتانسیل الکتریکی $\psi(x, y)$ به وجود آمده در الکترولیت مجاور دیوار از طریق معادله پواسن به چگالی بار خالص الکتریکی ρ_e مرتبط می‌شود. با استفاده از فرم بی‌بعد شده $\psi^* = ze\psi/k_B T$, $\rho_e^* = \rho_e/ze n_0$ و پس از حذف بالانویس (*) معادله پواسن حاکم بر میدان الکتریکی داخلی به صورت رابطه (3) خواهد بود [23]:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} = -\frac{k^2 \rho_e}{2} \quad (3)$$

در رابطه (3) $k = KH$ پارامتر بی‌بعد ضخامت لایه دوگانه الکتریکی و $K = \sqrt{2ze^2 n_0 / \epsilon_r \epsilon_0 k_B T}$ پارامتر دبی-هوکل می‌باشد. شرایط مرزی این معادله در ورودی و خروجی تغییرات ناچیز گرادیان $\partial\psi/\partial x = 0$ و روی دیواره‌ها به صورت $\psi = \zeta(x)ze/k_B T$ می‌باشد. چگالی بار خالص الکتریکی متناسب با اختلاف غلظت عددی یون‌های مثبت و منفی می‌باشد $\rho_e = (n^+ - n^-)$ که تعیین آن نیازمند حل معادلات معادله نرنست-پلانک خواهد بود.

2-3- معادله نرنست-پلانک

معادله بقای جرم برای غلظت گونه‌های یون در یک الکترولیت بدون انجام هیچ گونه واپاشی رادیواکتیو و واکنش شیمیایی در شکل کلی و در حالت پایدار به صورت رابطه (4) نوشته می‌شود و با استفاده از فرم بی‌بعد شده

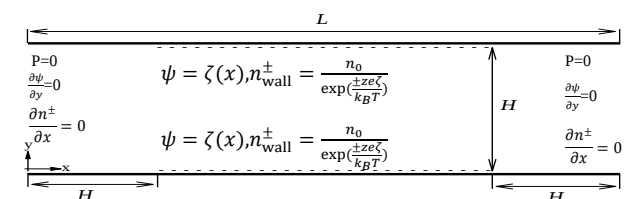


Fig. 1 Flow geometry and boundary conditions

شکل 1 هندسه مورد مطالعه و شرایط مرزی

n_i/n_0 به صورت رابطه (5) خواهد بود [23]:

$$\nabla \cdot (n^\pm \mathbf{u}) = \nabla \cdot (D^\pm \nabla n^\pm) + \nabla \cdot \left[\frac{z_i e n^\pm D^\pm}{k_B T} \nabla (\psi + \phi) \right] \quad (4)$$

$$\text{Re} \cdot \text{Sc}_i \left[\frac{\partial (un^\pm)}{\partial x} + \frac{\partial (vn^\pm)}{\partial y} \right] = \frac{\partial^2 n^\pm}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 n^\pm}{\partial y^2} \\ \pm \frac{\partial}{\partial x} \left(n^\pm \left(A \frac{\partial \phi}{\partial x} + \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) \right) \pm \frac{\partial}{\partial y} \left(n^\pm \left(A \frac{\partial \phi}{\partial y} + \frac{\partial \psi}{\partial y} \right) \right) \quad (5)$$

در رابطه $\text{Re} = \rho U_{\text{ref}} H / \mu$ عدد اشپیت، $\text{Sc}_i = \mu / \rho D_i$ عدد رینولدز، $U_{\text{ref}} = -e_r e_0 E \zeta / \mu$ سرعت مرجع، E شدت میدان الکتریکی خارجی و $A = EHze / k_B T$ نسبت ولتاژ اعمال شده خارجی به ولتاژ مبنا می‌باشد. شرایط مرزی معادله (5) در ورودی، خروجی تغییرات ناچیز در گرادیان غلظت $\partial n^\pm / \partial x = 0$ و با فرض وجود تعادل ترمودینامیکی در مجاورت دیواره به صورت $n_{\text{wall}}^\pm = \exp(\mp \zeta)$ می‌باشد.

2-4- معادله ناویر-استوکس

برای جریان پایدار سیال معادلات جریان در یک سیستم تحت اثرات الکتروکینتیک به صورت رابطه (6) نوشته می‌شود و با استفاده از فرم بی‌بعد شده $u^* = u/U_{\text{ref}}$ و $p^* = p/\rho U_{\text{ref}}^2$ به صورت رابطه (7) خواهد بود [23]:

$$\mathbf{u} \cdot \nabla (\rho \mathbf{u}) = -\nabla p + \mu \nabla^2 (\mathbf{u}) - \rho_e (\nabla \phi + \nabla \psi) \quad (6)$$

$$\mathbf{u} \cdot \nabla (u) = -\nabla p + \frac{1}{\text{Re}} \nabla^2 (u) - B \rho_e (A \nabla \phi + \nabla \psi) \quad (7)$$

در روابط (6) و (7) جمله آخر 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 الکترواسموتیک عامل حرکت سیال است.

در رابطه (7)، $B = n_0 k_B T / \rho U_{\text{ref}}^2$ ، نسبت فشار یونی به فشار دینامیکی است. شرایط مرزی حاکم بر معادله ناویر-استوکس در ورودی و خروجی شرط فشار صفر و در دیواره‌ها شرط عدم لغزش می‌باشد.

2-5- میدان غلظت

برای بررسی پدیده اختلاط میدان اسکالر برای غلظت یک گونه بایستی حل شود. معادله حاکم بر میدان غلظت در حالت پایدار با استفاده از فرم بی‌بعد شده $C^* = C/C_{\text{max}}$ و پس از حذف بالانویس (*) به شکل رابطه (8) است [21]:

$$\mathbf{u} \cdot \nabla C = \frac{1}{\text{Re} \cdot \text{Sc}} \nabla^2 C \quad (8)$$

در ورودی میکروکانال شرایط مرزی مربوط به یک گونه با دو غلظت متفاوت، به صورت مقادیر ثابت 0 و 1 و متناسب با ارتفاع از لبه پایینی مجرا اعمال می‌شود:

$$C(0, y) = \begin{cases} 0 & 0 < y < H/2 \\ 1 & H/2 < y < H \end{cases} \quad (9)$$

روی دیواره‌ها و در خروجی میکروکانال، گرادیان غلظت در جهت عمود بر مرز صفر لحاظ شده است:

$$\left. \frac{\partial C}{\partial n} \right|_{\text{wall}} = 0, \quad \left. \frac{\partial C}{\partial n} \right|_{x=L} = 0 \quad (10)$$

2-6- تعیین معیار غلظت مناسب

برای مطالعه کمی میزان اختلاط استفاده از یک معیار مناسب ضروری می‌باشد. در جریان‌های ساده و بدون گردابه استفاده از انحراف پروفیل غلظت نسبتاً رایج است و نتایج مطلوبی دارد [11]. در پژوهش حاضر از انحراف

مورد استفاده در این پژوهش، مؤلفه‌های سرعت و ضرایب وزنی عبارت‌اند از:

$$\begin{cases} c_0 = (0,0) \\ c_i = (\cos\theta, \sin\theta)c, \quad \theta = \frac{(i-1)\pi}{2}, \quad i = 1-4 \\ c_i = \sqrt{2}(\cos\theta, \sin\theta)c, \theta = \frac{(i-1)\pi}{2} + \frac{\pi}{4}, i = 5-8 \end{cases} \quad (18)$$

$$w'_i = \begin{cases} \frac{1}{3} & i = 1-4 \\ \frac{1}{12} & i = 5-8 \end{cases} \quad (19)$$

در رابطه (18) $c = \delta x / \delta t$ سرعت شبکه می‌باشد.

3-2- مدل لتیس بولتزمن جهت حل معادله پواسن

برای حل معادله پواسن حاکم بر پتانسیل الکتریکی داخلی ψ از مدل ارائه شده توسط محمدی پور و همکاران [19] استفاده شده‌است. که به صورت معادله (20) ارائه می‌شود:

$$h_i(r + c_i \delta t, t + \delta t) = h_i(r, t) + \frac{(h_i^{\text{eq}}(r, t) - h_i(r, t))}{\tau_h} + \frac{\delta t w_i (2\tau_h - 1) k^2 \rho_e}{4\tau_h} \quad (20)$$

در رابطه (20) تابع توزیعی تعادلی h_i^{eq} و ثابت تخفیف زمانی τ_h به کمک معادلات (21) و (22) تعریف خواهند شد.

$$h_i^{\text{eq}} = \begin{cases} \frac{\psi w'_i}{k_h} & i > 0 \\ \psi - \sum_{i \neq 0} h_i^{\text{eq}} & i = 0 \end{cases} \quad (21)$$

$$\tau_h = k_h \frac{\delta t}{\delta x^2} + \frac{1}{2} \quad (22)$$

در روابط (21) و (22) یک ثابت عددی دلخواه می‌باشد که با توجه به محدودیت عددی ثابت تخفیف زمانی انتخاب می‌شود و مقدار ماکروسکوپی ψ از رابطه $\psi = \sum_i h_i + \delta t k^2 \rho_e / 4$ محاسبه خواهد شد.

3-3- مدل لتیس بولتزمن جهت حل معادلات نرنست-پلانک

محمدی پور و همکاران [19] به منظور حل معادله نرنست-پلانک یک مدل جدید ارائه دادند که به صورت معادله (23) می‌باشد:

$$l_i^{\pm}(r + c_i \delta t, t + \delta t) = l_i^{\pm}(r, t) + \frac{1}{\tau_l} (l_i^{\text{eq}(\pm)}(r, t) - l_i^{\pm}(r, t)) \quad (23)$$

در رابطه (23) تابع توزیع چگالی گونه یون، $l_i^{\text{eq}(\pm)}$ تابع توزیع تعادلی یونی و τ_l ثابت تخفیف زمانی می‌باشد. تابع توزیع تعادلی یونی و ثابت تخفیف زمانی مطابق روابط (24) و (25) تعریف می‌شود:

$$l_i^{\text{eq}(\pm)} = \begin{cases} \frac{n^{\pm} w'_i}{c^2} \left[\frac{c^2}{k_l} + (Z^{\pm} \cdot c_i) + \frac{3(Z^{\pm} \cdot c_i)^2}{2c^2} - \frac{(Z^{\pm} \cdot Z^{\pm})}{2} \right] & i > 0 \\ n^{\pm} - \sum_{i \neq 0} l_i^{\text{eq}(\pm)} & i = 0 \end{cases} \quad (24)$$

$$\tau_l = \left(\frac{k_l}{\text{Re} \cdot \text{Sc}^{\pm}} \right) \left(\frac{\delta t}{\delta x^2} \right) + \frac{1}{2} \quad (25)$$

k_l یک پارامتر عددی جهت تطابق گام زمانی در حل معادله ارنست-پلانک و ناویر-استوکس می‌باشد. در رابطه (24) بردار Z بر حسب مشتقات میدان الکتریکی (رابطه 26) محاسبه می‌شود:

$$Z^{\pm} = \mp \left[\left(\frac{A \frac{\partial \phi}{\partial x} + \frac{\partial \psi}{\partial x}}{\text{Re} \cdot \text{Sc}^{\pm}} + u \right) i + \left(\frac{A \frac{\partial \phi}{\partial y} + \frac{\partial \psi}{\partial y}}{\text{Re} \cdot \text{Sc}^{\pm}} + v \right) j \right] \quad (26)$$

معیار وزن دار استفاده شده است که اثرات سرعت نیز در آن گنجانده شده است. به این ترتیب در مجاورت گردابه‌ها از ایجاد نوسان در میزان اختلاط در طول میکروکانال پرهیز می‌شود.

$$\sigma_w^2 = \frac{\int_0^H u(y)(C(y) - C_m)^2 dy}{\int_0^H u(y) dy} \quad (11)$$

در رابطه (11) C_m مقدار غلظت متوسط در هر مقطع است که به کمک رابطه (12) محاسبه می‌شود:

$$C_m = \frac{\int_0^H u(y)C(y) dy}{\int_0^H u(y) dy} \quad (12)$$

مقدار انحراف معیار غلظت‌ها در هر مقطع، σ_w ، معرف میزان ناهمگنی اختلاط در آن مقطع است. با توجه به تعریف σ_w ، مقدار $1 - \sigma_w$ می‌تواند به عنوان معیاری از میزان اختلاط تعبیر شود. بنابراین بر مبنای استفاده از انحراف معیار وزن‌دار غلظت‌ها در هر مقطع از میکروکانال، کارایی اختلاط به صورت نسبت میزان اختلاط در هر مقطع به میزان اختلاط حداکثر تعریف می‌شود:

$$\varepsilon_m = \frac{1 - \sigma_w}{1 - \sigma_{w,\min}} \quad (13)$$

در صورتی که اختلاط کامل به وجود آید، مقدار انحراف معیار وزن‌دار غلظت برابر حداقل خود یعنی صفر می‌رسد ($\sigma_{w,\min} = 0$) و لذا کارایی اختلاط برابر $\varepsilon_m = 1 - \sigma_w$ می‌شود.

3- مدل عددی

تمامی معادلات معرفی‌شده در بخش 2 با استفاده از روش لتیس بولتزمن حل شده‌اند. برای این منظور از چهار مدل لتیس بولتزمن استفاده شده است: مدل عددی ارائه شده توسط گینزبورگ [24] برای حل معادله لاپلاس، دو مدل ارائه شده توسط محمدی پور و همکاران [19] برای حل معادله پواسن و نرنست-پلانک و مدل BGK استاندارد برای حل معادله ناویر-استوکس، پیوستگی و غلظت که در ادامه به اختصار معرفی خواهند شد.

3-1- مدل لتیس بولتزمن جهت حل معادله لاپلاس

برای حل معادله لاپلاس (1) از مدل ارائه شده توسط گینزبورگ [24] استفاده شده است که همان معادله عمومی لتیس-بولتزمن بر مبنای تقریب BGK می‌باشد:

$$g_i(r + c_i \delta t, t + \delta t) = g_i(r, t) + \frac{1}{\tau_\phi} (g_i^{\text{eq}}(r, t) - g_i(r, t)) \quad (14)$$

در رابطه (14) g_i تابع توزیع، g_i^{eq} شکل تعادلی تابع توزیع و τ_ϕ ثابت تخفیف زمانی می‌باشد. میزان پتانسیل الکتریکی خارجی ϕ ، شکل تعادلی تابع توزیع و ثابت تخفیف زمانی به ترتیب مطابق روابط (15) تا (17) محاسبه می‌شوند:

$$\phi = \sum_i g_i \quad (15)$$

$$g_i^{\text{eq}} = \begin{cases} \frac{\phi w'_i}{k_g} & i > 0 \\ \phi - \sum_{i \neq 0} g_i^{\text{eq}} & i = 0 \end{cases} \quad (16)$$

$$\tau_\phi = k_g \frac{\delta t}{\delta x^2} + \frac{1}{2} \quad (17)$$

در روابط (16) و (17) k_g یک ثابت عددی دلخواه می‌باشد که متناسب با محدودیت‌های ثابت تخفیف زمانی انتخاب می‌شود. برای شبکه D2Q9

$$j_i^{\text{eq}} = w_i c_i \left[1 + \frac{3(c_i \cdot U)}{c_s^2} + \frac{9(c_i \cdot U)^2}{2c_s^4} - \frac{3U^2}{2c_s^2} \right] \quad (37)$$

$$\tau_c = \left(\frac{1}{\text{Re} \cdot \text{Sc}} \right) \frac{\delta t}{\delta x^2} + \frac{1}{2} \quad (38)$$

4- الگوریتم حل

در این بخش نحوه شبیه‌سازی و استفاده از مدل‌های لئیس-بولتزمن معرفی شده در قسمت قبل مورد بحث قرار می‌گیرد. قبل از شروع شبیه‌سازی لازم است که شبکه گرهی موردنیاز و استقلال از شبکه مورد بررسی قرار گیرد. در شبیه‌سازی جریان الکترواسموتیک از آنجا که ضخامت لایه دوگانه الکتریکی تنها کسر کوچکی از عرض ریز مجرا را شامل می‌شود، لازم است تا شبکه گرهی به نحوی انتخاب شود که تعداد کافی از نقاط گرهی برای شبیه‌سازی لایه دوگانه الکتریکی مهیا باشد.

نتایج عددی نشان می‌دهد که انتخاب شبکه گرهی برحسب پارامتر بی‌بعد ضخامت لایه دوگانه الکتریکی به صورت $6k \times 42k$ به‌درستی میدان‌های سرعت، پتانسیل، توزیع یونی و غلظت را شبیه‌سازی می‌کند. در حوزه جریان سیال برای اعمال شرط مرزی فشار از مدل زو-هی [25] و برای شرط مرزی عدم لغزش روی دیواره‌ها از مدل محمدی پور و همکاران [26] استفاده شده است. برای اعمال شرط مرزی سایر مدل‌ها نیز از تعاریف کمیات ماکروسکوپی برحسب مقادیر تابع توزیع مربوط به هر مدل استفاده شده است. به‌عنوان نمونه با اختصاص دادن کمیات ϕ_{wall} ، ψ_{wall} ، $n_{\text{wall}}^{\pm}$ و C_{wall} به یک گره مرزی واقع در دیواره پائینی مجرا روابط (39) تا (42) برای جهات مجهول حاصل می‌شود، در روابط (39) تا (42) زیرنویس i بیانگر مقادیر معلوم تابع توزیعی در گره مرزی است. به‌منظور شبیه‌سازی مرزهای مایل در حل تمامی معادلات حاکم از برونمایی تک معادله‌ای محمدی پور و همکاران استفاده شده است [26].

$$\begin{cases} g_2 = \frac{2}{3}(\phi_{\text{wall}} - \sum_i g_i) \\ g_{5,6} = \frac{1}{6}(\phi_{\text{wall}} - \sum_i g_i) \end{cases} \quad (39)$$

$$\begin{cases} h_2 = \frac{2}{3}(\psi_{\text{wall}} - \delta t \left(\frac{k^2 \rho_e}{4} \right) - \sum_i h_i) \\ h_{5,6} = \frac{1}{6}(\psi_{\text{wall}} - \delta t \left(\frac{k^2 \rho_e}{4} \right) - \sum_i h_i) \end{cases} \quad (40)$$

$$\begin{cases} l_2 = \frac{2}{3}(n_{\text{wall}}^{\pm} - \sum_i l_i) \\ l_{5,6} = \frac{1}{6}(n_{\text{wall}}^{\pm} - \sum_i l_i) \end{cases} \quad (41)$$

$$\begin{cases} j_2 = \frac{2}{3}(C_{\text{wall}} - \sum_i j_i) \\ j_{5,6} = \frac{1}{6}(C_{\text{wall}} - \sum_i j_i) \end{cases} \quad (42)$$

خلاصه‌ای از مراحل حل عددی به صورت یک فلوچارت در شکل 2 نشان داده شده است.

5- اعتبار سنجی

به‌منظور اعتبارسنجی جریان الکترواسموتیک توسعه‌یافته هیدرودینامیکی و یونی درون یک میکروکانال مستقیم با زتا پتانسیل یکنواخت شبیه‌سازی شده است. میزان بار سطحی به‌گونه‌ای انتخاب می‌شود که با برقراری رابطه

$$n^{\pm} = \sum_i l_i^{\pm} \quad (27)$$

3-4- مدل لئیس بولتزمن جهت حل معادلات ناویر-استوکس

مدل لئیس بولتزمن متناظر با معادله ناویر-استوکس در حضور نیروی خارجی عبارت است از:

$$f_i(r + c_i \delta t, t + \delta t) - f_i(r, t) = \Omega_i + \delta t F_i \quad (28)$$

در معادله (28)، مکان ذره، c_i مولفه سرعت شبکه در جهت i ، δt گام زمانی، F_i نیروی حجمی، f_i تابع توزیع چگالی ذره در جهت i و Ω_i بیانگر عملگر برخورد می‌باشد که در مدل استاندارد به‌صورت رابطه (29) بیان می‌شود:

$$\Omega_i = \frac{1}{\tau_f} (f_i^{\text{eq}}(r, t) - f_i(r, t)) \quad (29)$$

در رابطه (29) τ_f ثابت تخفیف زمانی و f_i^{eq} تابع توزیع تعادلی می‌باشد. w_i ضرایب وزنی مرتبط با شبکه سرعت می‌باشد که در شبکه دوبعدی و نه سرعت D2Q9 به کمک رابطه (30) تعریف می‌شود:

$$w_i = \begin{cases} 4/9 & \alpha = 0 \\ 1/9 & \alpha = 1 - 4 \\ 1/36 & \alpha = 5 - 8 \end{cases} \quad (30)$$

برای جریان‌های تراکم ناپذیر تابع توزیع تعادلی از رابطه (31) به دست می‌آید:

$$f_i^{\text{eq}} = w_i \rho \left[1 + \frac{c_i \cdot U}{c_s^2} + \frac{(c_i \cdot U)^2}{2c_s^4} - \frac{U^2}{2c_s^2} \right] \quad (31)$$

در معادله (31)، w_i ضریب وزن در جهت i بوده و c_s سرعت صوت در شبکه و برابر $c/\sqrt{3}$ می‌باشد. ρ و U به ترتیب چگالی و سرعت ماکروسکوپی می‌باشند. در شبیه‌سازی جریان سیال تراکم ناپذیر در رینولدزهای پایین، فشار از معادله حالت گاز ایده‌آل، $p = \rho c_s^2$ قابل محاسبه خواهد بود. کمیت‌های ماکروسکوپی سرعت و چگالی را می‌توان برحسب تابع توزیع محاسبه نمود: (معادلات (32) و (33))

$$\rho = \sum_i f_i \quad (32)$$

$$U = \frac{1}{\rho} \sum_i f_i c_i \quad (33)$$

برای واردکردن نیروی خارجی نیاز به یک طرح نیرویی است. در صورتی که ثابت تخفیف زمانی و بردار نیروی حجمی مطابق با روابط (34) و (35) تعریف گردند حل معادله (28) معادل با معادله (7) خواهد بود:

$$\frac{1}{\text{Re}} = (\tau_f - 0.5) c_s^2 \delta t \quad (34)$$

$$F_i = \frac{-B \rho_e w_i}{c_s^2} c_i \cdot \left[\left(A \frac{\partial \phi}{\partial x} + \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) i + \left(A \frac{\partial \phi}{\partial y} + \frac{\partial \psi}{\partial y} \right) j \right] \quad (35)$$

3-5- مدل لئیس بولتزمن جهت حل میدان غلظت

برای حل معادله میدان غلظت از شکل جدیدی از تابع توزیع به نام j_i استفاده می‌شود که نشان‌دهنده توزیع مقدار C در جهت i می‌باشد ($C = \sum_i j_i$) معادله حاکم بر این تابع توزیع مطابق رابطه (36) است:

$$j_i(r + c_i \delta t, t + \delta t) = j_i(r, t) + \frac{1}{\tau_c} (j_i^{\text{eq}}(r, t) - j_i(r, t)) \quad (36)$$

در رابطه (36) j_i^{eq} تابع توزیع تعادلی برای غلظت و τ_c ثابت تخفیف زمانی می‌باشد. تابع توزیع تعادلی غلظت و ثابت تخفیف زمانی مطابق روابط (37) و (38) تعریف می‌شود:

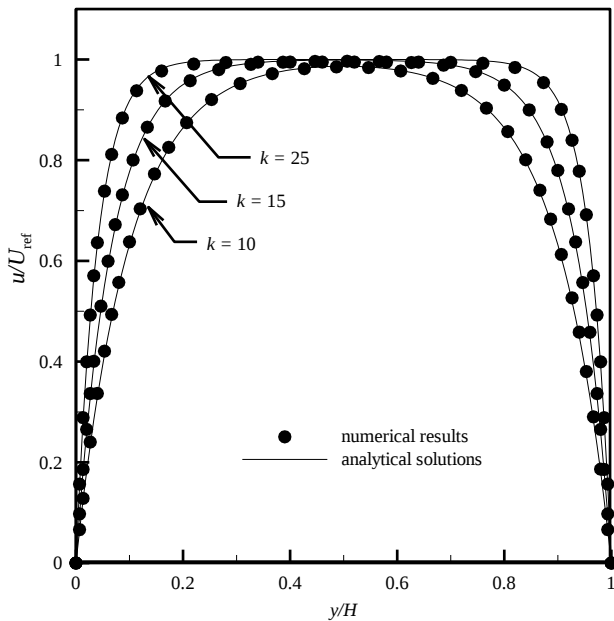


Fig. 3 Comparison of numerical velocity distributions with analytical profiles for different values of Debye-Hückel

شکل 3 مقایسه توزیع سرعت عددی با نتایج تحلیلی در پارامترهای مختلف دیبای-هوکل

راه کار ازدیاد مرز مشترک انتخاب شده است. از سوی دیگر طبیعت جریان الکترواسموتیک این امکان را فراهم می آورد تا با تغییر در بار سطحی به توان به الگوی جریان دلخواه دست یافت. در این راستا ابتدا با ایجاد زتاپتانسیل ناهمگن در میکروکانال مستقیم به عنوان هندسه مرجع راندمان اختلاط بهبود یافته و در ادامه اثر همگرایی و واگرایی کانال مورد بررسی قرار خواهد گرفت. زتاپتانسیل ناهمگن، در فاصله $2H < x < 3H$ و $4H < x < 5H$ در نظر گرفته شده است. در تمامی حالات مقدار زتاپتانسیل در قسمت ابتدایی $0 < x < H$ و در قسمت انتهایی $6H < x < 7H$ صفر می باشد. در خارج این نواحی مقدار زتاپتانسیل روی دیواره یکنواخت است. فارغ از هندسه کانال، زمانی که ناهمگنی در توزیع زتاپتانسیل وجود دارد توزیع زتاپتانسیل، $\zeta(x)$ بر روی دیواره ها به صورت روابط (44) در نظر گرفته شده است:

$$\zeta(x) = \begin{cases} \zeta = -25(\text{mV}) & H < x < 2H \\ \zeta = -25(\text{mV}) & 3H < x < 4H \\ \zeta = -25(\text{mV}) & 5H < x < 6H \end{cases} \quad (44)$$

در قسمت ناهمگن برای توزیع زتاپتانسیل می توان آرایش های متفاوتی متصور شد. با ثابت در نظر گرفتن مقدار زتاپتانسیل و تغییر در علامت آن و پس از حذف حالت آینه ای سه آرایش متفاوت برای توزیع زتاپتانسیل ناهمگن ایجاد خواهد شد که به ترتیب برای حالات 1 تا 3 در معادلات (45) تا (47) بیان شده است:

حالت 1

$$\zeta(x) = \begin{cases} \zeta_{\text{up,wall}} = 50(\text{mV}) & 2H < x < 3H \\ \zeta_{\text{up,wall}} = -50(\text{mV}) & 4H < x < 5H \\ \zeta_{\text{down,wall}} = -50(\text{mV}) & 2H < x < 3H \\ \zeta_{\text{down,wall}} = +50(\text{mV}) & 4H < x < 5H \end{cases} \quad (45)$$

حالت 2

$$\zeta(x) = \begin{cases} \zeta_{\text{up,wall}} = -50(\text{mV}) & 2H < x < 3H \\ \zeta_{\text{up,wall}} = -50(\text{mV}) & 4H < x < 5H \end{cases}$$

$ze\zeta/k_B T \leq 1$ تقریب دیبای-هوکل معتبر باشد. در این حالت حل معادلات حاکم منجر به یک حل تحلیلی مطابق رابطه (43) خواهد شد [23]:

$$u(y) = -\frac{e_0 e_r E \zeta}{\mu} \left[1 - \frac{\cosh(ky - kH/2)}{\cosh(kH/2)} \right] \quad (43)$$

در شکل 3 نتایج عددی و تحلیلی موجود برای پروفیل سرعت در سه مقدار مختلف k از 10، 15 و 20 با هم مقایسه شده اند، همانطور که مشاهده می شود تطابق خوب بین نتایج حاصل از حل شبکه بولتزمن و حل تحلیلی (43) موید صحت شبیه سازی صورت گرفته است.

6- نتایج

با توجه به پایین بودن عدد رینولدز جریان در میکروکانال ها، مکانیزم غالب در فرایند اختلاطی در ابعاد میکرو، پدیده پخش مولکولی است. بنابراین هرگونه بهبود در اختلاط مستلزم تقویت پدیده پخش در جریان است. در تحقیق پیش رو همان طور که در بخش معادلات حاکم اشاره شد، جریان ورودی به صورتی نیمه غلیظ و نیمه رقیق در نظر گرفته شده است. در این حالت مرز مشترک دو سیال با غلظت متفاوت به علت وجود بیشترین گرادیان غلظت اهمیت بسیار زیادی در میزان پخش مولکولی غلظت دارد. به طور خاص هرچه این مرز طولانی تر باشد فرصت بیشتری برای پخش مولکولی و در نتیجه راندمان بیشتری برای اختلاط به همراه خواهد داشت. در مساله مورد بررسی با توجه به ثابت بودن طول مجرا، ایجاد جریان های عرضی در مجرا به عنوان

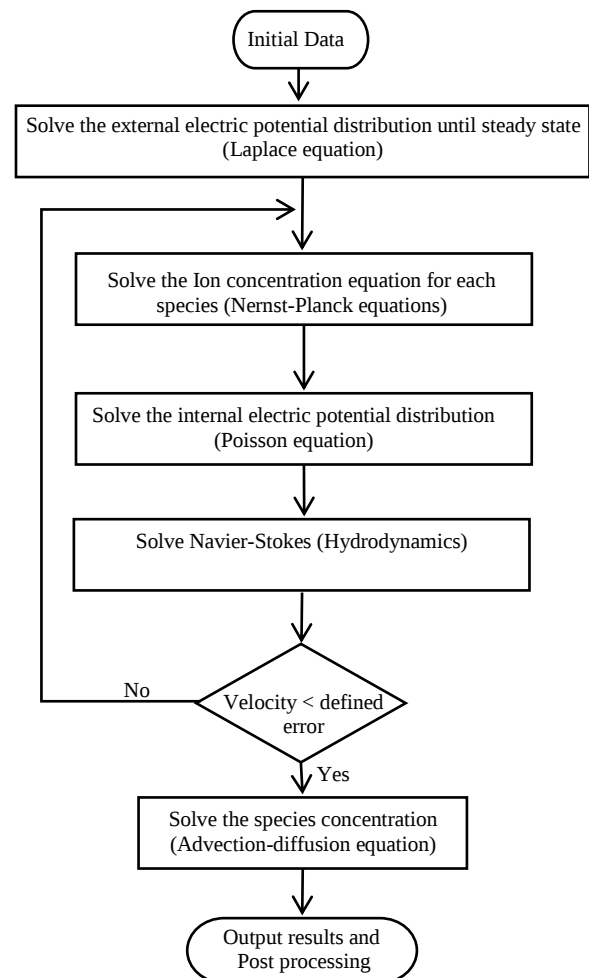


Fig. 2 LBM solution algorithm for the coupled governing equations

شکل 2 الگوریتم حل لیتس بولتزمن برای معادلات کوپل شده

$(x=H)$ کاهش و در انتهای آن $(x=6H)$ افزایش خواهد یافت. در توجیه این تغییر فشار به این نکته اشاره می‌شود که پدیده الکترواسموتیک در این نوع بارگذاری رفتاری همچون یک میکرو پمپ دارد و مشابه هر پمپ دیگری، موجب پیدایش یک گرادیان فشار مثبت در دو انتهای خود یعنی دو انتهای ناحیه بارگذاری خواهد شد. از سوی دیگر از آنجایی که فشار در ابتدا و انتهای مجرا ثابت و برابر با صفر در نظر گرفته شده است، تغییرات فشار ناشی از وجود میکروپمپ (جریان الکترواسموتیک میانی)، منجر به پیدایش دو گرادیان فشار منفی در نواحی بدون بار ابتدایی و انتهایی مجرا خواهد شد.

شکل 5 تغییرات فشار در خط مرکزی مجرا را نشان می‌دهد. اولین و آخرین اکسترمم نشان داده شده در شکل 5 نشان‌دهنده فشار در ابتدا و انتهای ناحیه باردار میانی است. علاوه بر این هر یک از تغییرات بار سطحی در ناحیه باردار، منجر به اکسترمم‌های نسبی در توزیع فشار خواهد شد. با این وجود این اکسترمم‌های نسبی تغییری در روند صعودی فشار در ناحیه میانی ایجاد نخواهد کرد.

توزیع جریان آن‌گونه که در شکل 6 نشان داده شده است جزئیات بیشتری از جریان را مشخص می‌سازد. همان‌گونه که در این تصویر مشاهده می‌شود میدان سرعت در ابتدای مسیر و پیش از شروع ناحیه باردار میانی تحت تأثیر گرادیان فشار منفی توزیع سهموی خواهد داشت و با رسیدن به ناحیه باردار میانی، جریان به‌سوی دیوارها متمایل می‌گردد. در ناحیه $3H < x < 4H$ بار سطحی مخالف (مثبت) موجب شکل‌گیری جریان ثانویه در خلاف جهت جریان می‌گردد. البته قدرت این جریان به‌گونه‌ای نیست تا بتواند با جریان از چپ به راست سیال مقابله کند، لذا در نهایت این جریان مخالف، به ایجاد یک گردابه منتهی خواهد شد. جریان سیال در مواجهه با این گردابه ناچار به تغییر مسیر و حرکت در عرض مجرا (جریان عرضی) خواهد شد تا ادامه مسیر را در مجاورت دیوار پایینی طی نماید. باگذشت از گردابه جریان با یک حرکت عرضی مجدداً عرض مجرا در برمی‌گیرد تا اینکه در $x=5H$ با دومین گردابه روبرو می‌گردد. درنهایت پس از عبور از گردابه دوم جریان با یک انبساط (حرکت عرضی سوم) مجدداً به میانه مجرا بازگشته و تمامی عرض مجرا را تحت تأثیر خود قرار می‌دهد. پس از عبور از ناحیه باردار میانی جریان تحت تأثیر گرادیان منفی انتهای مجرا، با توزیع سهموی سرعت، مسیر خود را به اتمام می‌رساند. به این ترتیب توزیع بار سطحی معرفی شده در

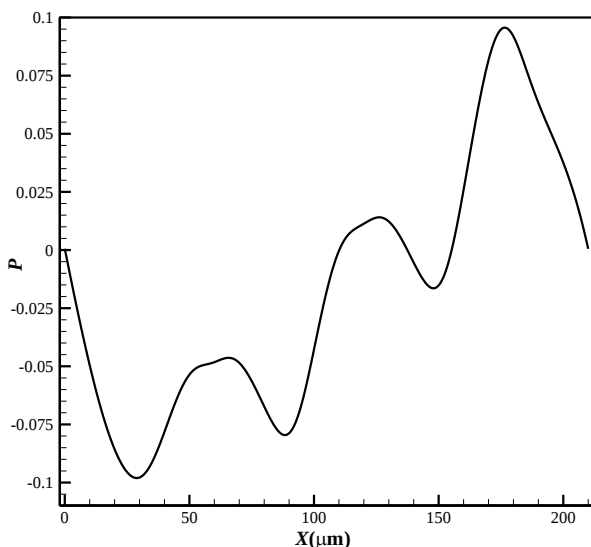


Fig. 5 Pressure variations along the centerline for the reference case
شکل 5 تغییرات فشار در خط میانی مجرا شکل مرجع

$$\zeta(x) = \begin{cases} \zeta_{\text{down_wall}} = +50(\text{mV}) & 2H < x < 3H \\ \zeta_{\text{down_wall}} = +50(\text{mV}) & 4H < x < 5H \end{cases} \quad (46)$$

حالت 3

$$\zeta(x) = \begin{cases} \zeta_{\text{up_wall}} = 50(\text{mV}) & 2H < x < 3H \\ \zeta_{\text{up_wall}} = -50(\text{mV}) & 4H < x < 5H \\ \zeta_{\text{down_wall}} = +50(\text{mV}) & 2H < x < 3H \\ \zeta_{\text{down_wall}} = -50(\text{mV}) & 4H < x < 5H \end{cases} \quad (47)$$

سایر پارامترها و خواص سیال مورد استفاده در جدول 1 ذکر شده است.

به منظور بررسی اثر هندسه در ابتدا لازم است تا از میان آرایش‌های مختلف برای توزیع زتا پتانسیل ناهمگن یک حالت به‌عنوان توزیع مرجع انتخاب شود. در این راستا در شکل 4 دبی و راندمان اختلاط ایجادشده در هر حالت باهم مقایسه شده‌اند. نتایج نشان می‌دهند که ایجاد ناهمگنی در توزیع زتا پتانسیل سبب بهبود راندمان اختلاط و کاهش دبی جریان خواهد شد. در این میان از بین توزیع‌های ایجاد شده برای توزیع زتا پتانسیل، حالت 2 بیشترین راندمان در اختلاط را ایجاد خواهد کرد که به میزان 25.9 درصد بیش از حالت توزیع یکنواخت زتا پتانسیل می‌باشد. با توجه به اینکه در هر سه حالت فرض شده برای توزیع زتا پتانسیل دبی تقریباً یکسانی ایجاد شده است در ادامه کار حالت 2 به‌عنوان بارگذاری مرجع انتخاب می‌شود.

در حالت مرجع (هندسه تخت و بارگذاری بر اساس معادله (46))، با توجه به باردار بودن قسمت میانی مجرا ($H < x < 6H$) شکل‌گیری جریان از این ناحیه شروع خواهد شد. با شروع جریان فشار در ابتدای این ناحیه

جدول 1 ثوابت و خواص فیزیکی

Table 1 Constants and physical properties.

پارامتر	مقدار (واحد)
D	$2 \times 10^{-9} (\text{m}^2/\text{s})$
n_0	$1.116 \times 10^{20} (\text{ion}/\text{m}^3)$
e_r	80
ζ	-25(mV)
E	-30(V/mm)
ρ	$1 \times 10^3 (\text{kg}/\text{m}^3)$
μ	$1 \times 10^{-3} (\text{Pa} \cdot \text{s})$
Sc	1×10^4

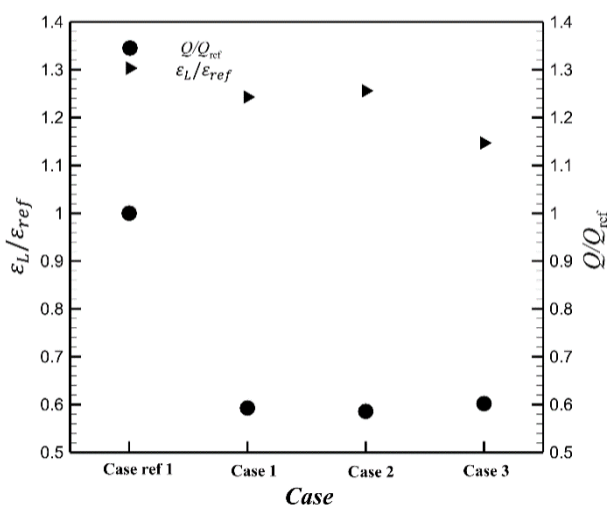


Fig. 4 Comparison between mixing performance and mass flow rate for homogeneous and heterogeneous plain channels for various zeta potentials

شکل 4 مقایسه بین راندمان اختلاط و دبی کانال‌های تخت همگن و ناهمگن برحسب بارگذاری‌های مختلف

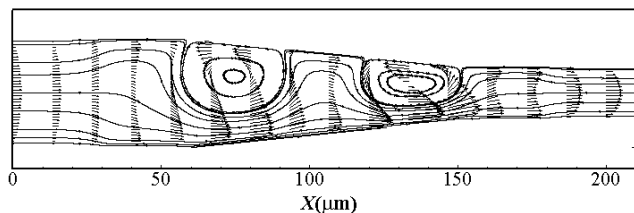


Fig. 8 Streamlines and velocity vectors in geometry 1

شکل 8 خطوط جریان و بردارهای سرعت در هندسه 1

جهت افزایش آن عمل می‌نماید با این وجود در شرایط مورد بررسی اثر اول غالب بوده و دبی در مقایسه با حالت مرجع به میزان 31.87 درصد کاهش می‌یابد.

الگوی جریان نشان داده شده در شکل 8 کم و بیش مشابه حالت مرجع می‌باشد با این وجود همگرایی مجرا در قسمت انتهایی به علت هدایت دو جریان غلیظ و رقیق به سمت یکدیگر موجب تقویت اختلاط در این ناحیه خواهد شد. علاوه بر این کاهش سرعت متوسط و دبی جریان در مقایسه با حالت مرجع فرصت بیشتری را برای اختلاط فراهم می‌آورد. توزیع غلظت در طول مجرا در شکل 9(a) نشان داده شده است. ترسیم تغییرات راندمان اختلاط جریان در طول مجرا (شکل 9(b)) حاکی از راندمان 92.43 درصدی اختلاط در خروجی است که نشان از بهبود چشم‌گیر (7.63 درصدی) اختلاط در مقایسه با حالت مرجع دارد.

دومین هندسه‌ای که در این بخش مورد بررسی قرار می‌گیرد مجرای واگرا است.

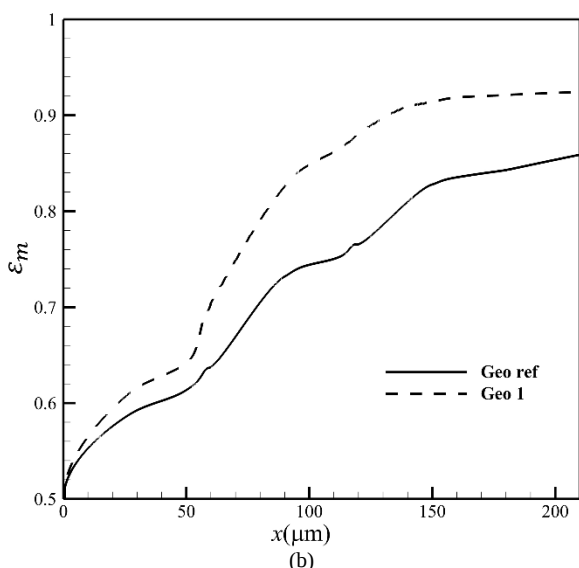
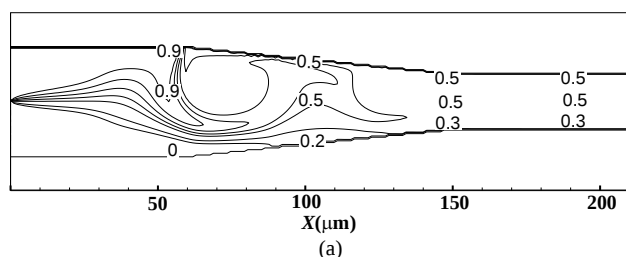


Fig. 9 (a) Concentration distribution in the geometry 1, (b) Mixing efficiency changes along the microchannel

شکل 9 (a) توزیع غلظت در هندسه 1، (b) تغییرات راندمان اختلاط در طول ریزمجرا

1

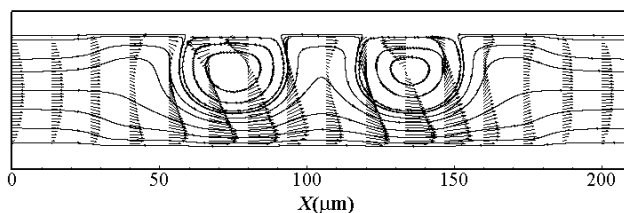


Fig. 6 Streamlines and velocity vectors in reference geometry at $Re=0.01$

شکل 6 خطوط جریان و بردارهای سرعت هندسه مرجع در عدد رینولدز 0.01

رابطه (46) می‌تواند با ایجاد سه حرکت عرضی منجر به ازدیاد طول خط جریان به میزان 11 درصد در مقایسه با طول مجرا گردد و به دنبال آن موجب تسریع در اختلاط گردد.

با این وجود از این نکته نباید غافل شد که وجود گردابه در میدان جریان موجب افزایش مقاومت مسیر در مقابل جریان و در نهایت کاهش دبی عبوری از جریان خواهد شد. به عبارت دیگر در مبحث بهبود اختلاط ناشی از تغییر در الگوی جریان، دو جنبه اساسی جریان یعنی میزان (راندمان) اختلاط و دبی جریان برخلاف یکدیگر تغییر خواهند کرد. اگرچه با تغییر در شرایط بارگذاری سطحی می‌توان به الگوهای متنوعی از جریان دست‌یافت اما آنچه موضوع اصلی تحقیق حاضر است، اثر هندسه مجرا و به‌طور خاص هم‌گرایی و واگرایی مجرا بر روی میزان اختلاط و دبی عبوری است. بنابراین از بارگذاری معرفی‌شده در رابطه (46) به‌عنوان یک نمونه در الگوهای اختلاطی استفاده خواهد شد و با حفظ آن و تنها با تغییر در هندسه اثرات هندسه بر اختلاط و دبی عبوری از مجرا مورد بررسی قرار می‌گیرد. از این پس و برای مقایسه بهتر، از شرایط جریان نشان داده‌شده در شکل 6 به‌عنوان شرایط مرجع یاد خواهد شد. حل معادله حاکم بر غلظت در هندسه مرجع (توزیع غلظت نشان داده شده در شکل 7) حاکی از اختلاط 85.87 درصدی جریان با دبی عبوری با میزان $1.249e - 002 \text{ (}\mu\text{Lit/s)}$ می‌باشد.

برای بررسی اثر هندسه مجرا بر شرایط جریان، در گام بعدی با حفظ توزیع بار سطحی، دیوارهای مجرا در بازه $2H < x < 5H$ با شیب $1/12$ به سمت داخل متمایل می‌گردد تا در این حالت مجرا در قسمت میانی خود مطابق شکل 8 همگرا گردد. در مجرای همگرا و در تمامی هندسه‌هایی که در ادامه مورد بررسی قرار خواهند گرفت، عرض مجرا در ابتدای هندسه برابر با عرض مرجع انتخاب شده است اما عرض مجرا در انتها مطابق با شرایط هندسی می‌تواند، بزرگتر، کوچکتر و یا مساوی با عرض مرجع باشد. با این شرایط در هندسه نشان داده شده در شکل 8، عرض انتهایی مجرا نصف عرض ابتدایی آن خواهد بود. این امر موجب می‌گردد تا از یک‌سو حجم سیال درون مجرا در مقایسه با حالت مرجع کاهش یابد و از سوی دیگر با افزایش سطح باردار (اضافه طول سطح مورب در مقایسه با سطح مستقیم)، نسبت نیروی محرک جریان به حجم سیال افزایش یابد. اثر اول در جهت کاهش دبی و اثر دوم در

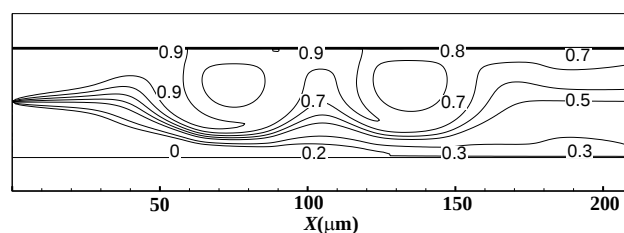


Fig. 7 Concentration distribution in the reference geometry

شکل 7 توزیع غلظت در حالت مرجع

کاهش دبی خواهد شد و در مقابل استفاده از کانال واگرا همراه با کاهش راندمان موجب تقویت دبی عبوری می‌گردد. به این ترتیب می‌توان پیش‌بینی نمود که استفاده همزمان از این دو هندسه می‌تواند بهبود متعادل‌تری از منظر اختلاط و یا دبی در مقایسه با حالت مرجع به همراه داشته باشد. برای بررسی صحت این ادعا دو هندسه دیگر مطابق شکل 12 در نظر گرفته می‌شود. در شکل 12(a) دیوارهای ناحیه باردار میانی در محدوده شکل‌گیری اولین جریان گردابه‌ای با شیب $1/12$ به سمت بیرون واگرا شده است. پس از آن جریان فاصله میان دو گردابه را از میان یک مسیر مستقیم می‌پیماید و در نهایت دیوارهای مجرا در ناحیه $4H < x < 5H$ با شیب $1/12$ به عرض ابتدایی مجرا (عرض مرجع) بازمی‌گردد. در شکل 12(b) این تغییرات هندسی با تغییر در چیدمان به گونه‌ای اعمال شده‌اند که مجرا در بخش ابتدایی همگرا و در بخش انتهایی واگرا باشد. در این حالت کانال مستقیم در فاصله میان دو گردابه عرضی برابر با نیمی از عرض ابتدایی (عرض مرجع) خواهد داشت. این امر موجب می‌گردد تا ضمن حفظ سه حرکت عرضی در طول مسیر، دو جریان غلیظ و رقیق بخشی از مسیر را با فاصله نزدیک‌تر نسبت به یکدیگر (در مقایسه با حالت مرجع) طی نمایند.

در نقطه مقابل در شکل 12(a) این بخش از مسیر با فاصله گرفتن دو جریان غلیظ و رقیق از یکدیگر طی می‌شود. بنابراین پیش‌بینی می‌شود شکل 12(b) عملکرد بهتری نسبت به شکل 12(a) در مورد اختلاط داشته باشد. توزیع غلظت نشان داده‌شده در شکل‌های 13(a-b) و تغییرات راندمان در طول جریان (13-c) با تایید این پیش‌بینی نشان می‌دهد که راندمان اختلاط در خروجی هندسه شکل 12(b) با میزان 90، در حدود 4.87% بیشتر از راندمان اختلاط در خروجی شکل 12(a) باشد. از سوی دیگر طول سطوح باردار در هر دو حالت با یکدیگر برابر است بنابراین هیچ یک از دو هندسه برتری خاصی از این منظر ندارند. اما حجم سیال درون مجرا در هندسه 12(a) به میزان 25 درصد بیشتر از هندسه 12(b) می‌باشد. بنابراین بدیهی است که هندسه 12(a) دبی بیشتری در مقایسه با هندسه 12(b) داشته باشد. مقادیر عددی نشان می‌دهد که دبی عبوری از هندسه 12(b) در حدود 2% کمتر از هندسه 12(a) می‌باشد.

به عنوان جمع‌بندی نتایج، مقادیر نسبی راندمان اختلاط در خروجی و دبی چهار هندسه غیرمستقیم در مقایسه با حالت مرجع در شکل 14 نشان داده شده است. همان‌طور که در این شکل مشاهده می‌شود کانال همگرا و

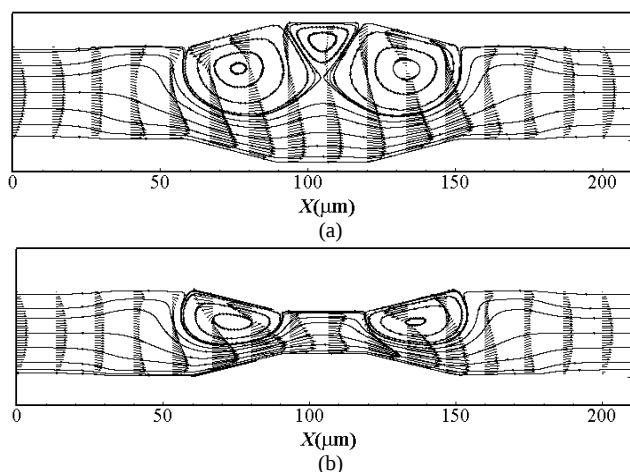


Fig. 12 Streamlines and velocity vectors a) in geometry 3, b) in geometry 4

شکل 12 خطوط جریان و بردارهای سرعت (a) در هندسه 3، (b) در هندسه 4

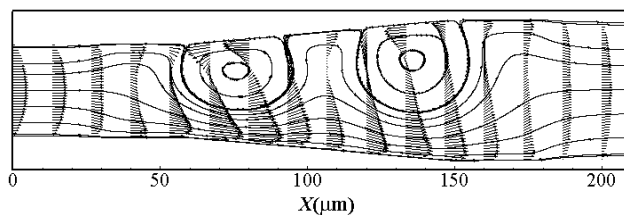


Fig. 10 Streamlines and velocity vectors in geometry 2

شکل 10 خطوط جریان و بردارهای سرعت در هندسه 2

در این حالت مطابق شکل 10 دیوارهای مجرا در فاصله $2H < x < 5H$ با شیب $1/12$ به سمت بیرون متمایل گردیده است. در این حالت برخلاف مجرای همگرا، حجم سیال درون مجرا در مقایسه با حالت مرجع افزایش یافته است. علی‌رغم اینکه افزایش حجم سیال موجب می‌گردد تا نسبت نیروی سطحی به حجم سیال کاهش یابد، شرایط جریان به گونه‌ای است که دبی عبوری در این حالت 24.09 درصد بیشتر از حالت مرجع می‌باشد. الگوی جریان آن‌گونه که در شکل 10 نشان داده شده است تفاوت ساختاری قابل ملاحظه‌ای نسبت به حالت مرجع ندارد. با این وجود عریض‌تر بودن مجرا در بخش انتهایی مجرا موجب گردیده است تا در انبساط انتهایی جریان پس از عبور از گردابه دوم، جریان‌های غلیظ و رقیق از یکدیگر فاصله بگیرند. لذا عملکرد اختلاطی جریان آن‌گونه که در شکل 11(a) و 11(b) نشان داده شده است با راندمان 79.67 درصد در خروجی به میزان 7.21 درصد پایین‌تر از حالت مرجع خواهد بود.

تا اینجا کار مشخص شد که همگرایی مجرا موجب بهبود راندمان و

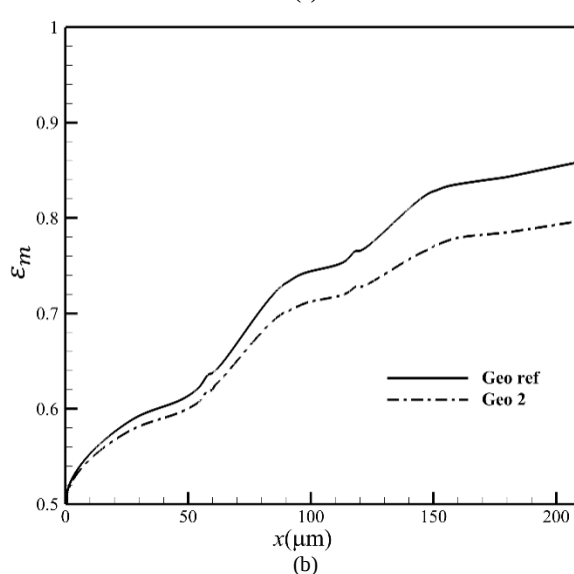
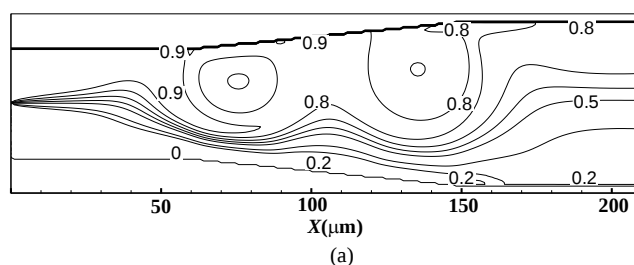


Fig. 11 (a) Concentration distribution in the geometry 2, (b) Mixing efficiency changes along the microchannel

شکل 11 (a) توزیع غلظت در هندسه 2، (b) تغییرات راندمان اختلاط در طول ریزمجرا

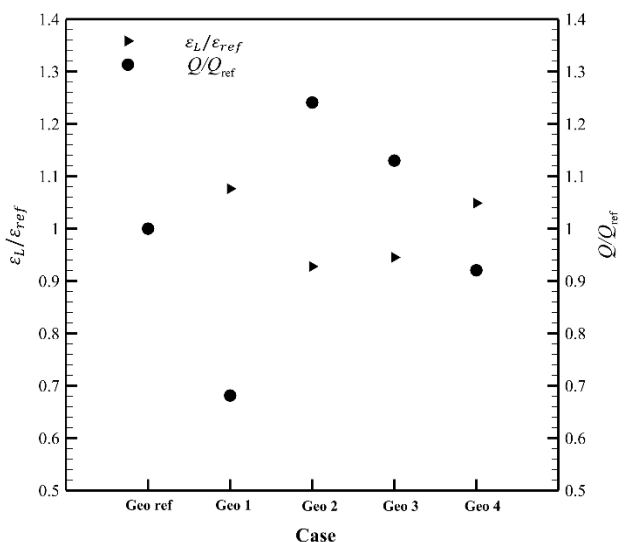


Fig. 14 Comparison between mixing performances and mass flow rates of homogeneous and heterogeneous channels with different geometries
شکل 14 مقایسه بین راندمان اختلاط و دبی کانال همگن و کانال ناهمگن برحسب هندسه‌های مختلف

نرست-پلانک در تعیین توزیع یونی استفاده شده است. نتایج حاصل از شبیه‌سازی را می‌توان در موارد زیر خلاصه نمود:

- همگرایی میکروکانال مجرا موجب بهبود راندمان و کاهش دبی خواهد شد.
- میکروکانال واگرا همراه با کاهش راندمان موجب تقویت دبی عبوری می‌گردد.
- استفاده همزمان از این دو هندسه می‌تواند بهبود متعادل‌تری از نظر اختلاط و یا دبی در مقایسه با حالت مرجع به همراه داشته باشد.
- زمانی که افزایش دبی مورد نیاز است می‌توان با استفاده از ترتیب واگرا همگرا بدون ایجاد تغییر قابل‌ملاحظه‌ای در راندمان اختلاط، دبی جریان را افزایش داد.
- زمانی که بهبود اختلاط مدنظر باشد می‌توان با استفاده از ترتیب همگرا واگرا راندمان اختلاط را بدون نگرانی از افت قابل‌ملاحظه دبی، افزایش داد.

8- فهرست علائم

ضریب پخش مولکولی (m^2/s)	D
میدان الکتریکی خارجی (V/m)	E
ارتفاع محفظه اختلاط در قسمت خروجی (μm)	h
ارتفاع میکروکانال (μm)	H
طول میکروکانال (μm)	L
فشار (kPa)	P
دبی حجمی	Q
سرعت مرجع (m/s)	u_{ref}
سرعت (m/s)	u
مولفه‌های طول و عرض (m)	x, y
ضریب گذردهی خلا ($1/\text{kg.m}^3$)	e_0

علائم یونانی

واگرا موجب تغییرات قابل‌توجهی در راندمان اختلاط خروجی و دبی جریان نسبت به حالت مرجع می‌گردند اما این تغییرات اثر منفی قابل‌ملاحظه‌ای به ترتیب بر دبی و راندمان اختلاط به همراه دارد. در مقابل استفاده از هندسه‌هایی شامل هر دو مجرای همگرا و واگرا می‌تواند اثرات کنترل‌شده‌ای بر راندمان اختلاط و دبی داشته باشد. به‌طور خاص در زمانی که افزایش دبی مورد نیاز است می‌توان با استفاده از ترتیب واگرا همگرا بدون ایجاد تغییر قابل‌ملاحظه‌ای در راندمان اختلاط خروجی، دبی جریان را افزایش داد. در مقابل اگر بهبود اختلاط مدنظر باشد می‌توان با استفاده از ترتیب همگرا واگرا راندمان اختلاط خروجی را بدون نگرانی از افت قابل‌ملاحظه دبی، افزایش داد.

7- نتیجه‌گیری

در این پژوهش اثر همگرایی و واگرایی میکروکانال با خواص سطحی ناهمگن بر اختلاط جریان الکترواسموتیک با استفاده از شبکه بولتزمن مورد بررسی قرار گرفت. به‌منظور شبیه‌سازی کامل جریان الکترواسموتیک از حل معادله

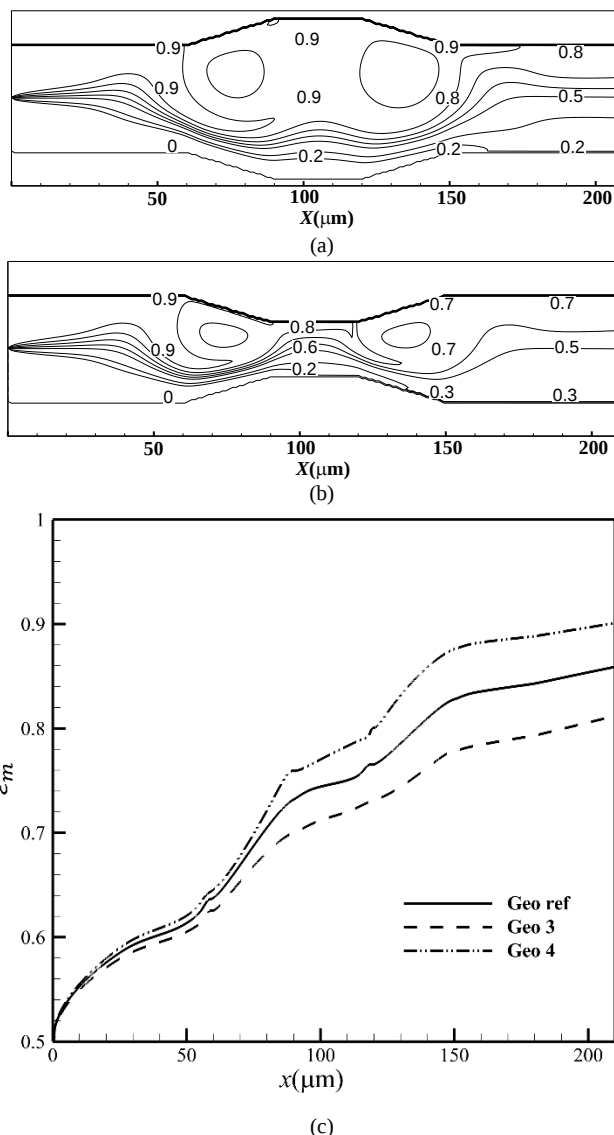


Fig. 13 Concentration distribution a) in geometry 3, b) in geometry 4, (c) Mixing efficiency changes along the microchannel

شکل 13 توزیع غلظت (a) در هندسه 3، (b) در هندسه 4، (c) تغییرات راندمان اختلاط در طول ریزمجرا

- potentials: Requirements of flow rate and current continuities, *Langmuir*, Vol. 20, No. 10, pp. 3863-3871, 2004.
- [10] E. Biddiss, D. Erickson, D. Li, Heterogeneous surface charge enhanced micromixing for electrokinetic flows, *Analytical Chemistry*, Vol. 76, No. 11, pp. 3208-3213, 2004.
- [11] J. Jamaati, A. R. Farahinia, H. Niazmand, Investigation of Mixing in Electroosmotic Micromixers using Nernst-Planck Equations, *Modares Mechanical Engineering*, Vol. 15, No. 4, pp. 203-213, 2015. (in Persian, فارسی)
- [12] A. Alizadeh, L. Zhang, M. Wang, Mixing enhancement of low-Reynolds electro-osmotic flows in microchannels with temperature-patterned walls, *Journal of colloid and interface science*, Vol. 431, pp. 50-63, 2014.
- [13] C. Wang, Y. Hu, Mixing of Liquids Using Obstacles in Y-Type Microchannels, *Tamkang Journal of Science and Engineering*, Vol. 13, No. 4, pp. 385-394, 2010.
- [14] C.-C. Cho, C.-L. Chen, Characteristics of combined electroosmotic flow and pressure-driven flow in microchannels with complex-wavy surfaces, *International Journal of Thermal Sciences*, Vol. 61, pp. 94-105, 2012.
- [15] H. Yoshida, T. Kinjo, H. Washizu, Analysis of electro-osmotic flow in a microchannel with undulated surfaces, *Computers & Fluids*, Vol. 124, pp. 237-245, 2016.
- [16] M. W. a. Z. L. Jinku Wang, Lattice boltzmann simulations of mixing enhancement by the electroosmotic flow in microchannels, *Modern Physics Letters B*, Vol. 19, pp. 1515-1518, 2005.
- [17] D. Wang, J. L. Summers, P. H. Gaskell, Modelling of electrokinetically driven mixing flow in microchannels with patterned blocks, *Computers & Mathematics with Applications*, Vol. 55, No. 7, pp. 1601-1610, 2008.
- [18] T. Y. Lin, C. L. Chen, Analysis of electroosmotic flow with periodic electric and pressure fields via the lattice Poisson-Boltzmann method, *Applied Mathematical Modelling*, Vol. 37, No. 5, pp. 2816-2829, 2013.
- [19] O. R. Mohammadipour, H. Niazmand, Numerical simulation of a flat electroosmotic driven flow in the presence of a charged mid-plate, *International Journal of Modern Physics C*, Vol. 26, No. 07, pp. 1550078, 2015.
- [20] C. H. Tsai, M. Hung, C. L. Chang, L. W. Chen, L. M. Fu, Optimal configuration of capillary electrophoresis microchip with expansion chamber in separation channel, *Journal of Chromatography A*, Vol. 1121, No. 1, pp. 120-128, 2006.
- [21] J. S. Lee, Y. Hu, D. Li, Electrokinetic concentration gradient generation using a converging-diverging microchannel, *Analytica Chimica Acta*, Vol. 543, No. 1, pp. 99-108, 2005.
- [22] J. S. Lee, Y. Hu, D. Li, Electrokinetic concentration gradient generation using a converging-diverging microchannel, *Analytica Chimica Acta*, Vol. 543, No. 1, pp. 99-108, 2005.
- [23] S. Mirbozorgi, H. Niazmand, M. Renksizbulut, Electro-osmotic flow in reservoir-connected flat microchannels with non-uniform zeta potential, *Journal of Fluids Engineering*, Vol. 128, No. 6, pp. 1133-1143, 2006.
- [24] I. GINZBURG, Equilibrium-type and link-type lattice Boltzmann models for generic advection and anisotropic-dispersion equation, *Advances in water resources*, Vol. 28, No. 11, pp. 1171-1195, 2005.
- [25] Q. Zou, X. He, On pressure and velocity boundary conditions for the lattice Boltzmann BGK model, *Physics of fluids*, Vol. 9, No. 6, pp. 1591-1598, 1997.
- [26] O. Mohammadipoor, H. Niazmand, S. Mirbozorgi, A new curved boundary treatment for the lattice Boltzmann method, *Modares Mechanical Engineering*, Vol. 13, No. 8, pp. 28-41, 2013. (in Persian, فارسی)
- راندمان اختلاط (/.) ε_m
- ثابت نسبی دی‌الکتریک سیال ε_r
- راندمان اختلاط در خروجی ε_L
- راندمان اختلاط در خروجی حالت مرجع ε_{ref}
- زتانسیل (V) ζ
- لزجت دینامیکی (kg/m.s) μ
- چگالی (kg/m³) ρ
- چگالی خالص بار الکتریکی (C/m³) ρ_e
- مقدار انحراف معیار توزیع غلظت (mol/m³) σ
- میدان پتانسیل خارجی (V) ϕ
- میدان پتانسیل الکتریکی داخلی (V) ψ
- زیر نویس‌ها
- حالت مرجع ref
- خروجی L
- ### 9- مراجع
- [1] J. Yahng, S. Jeoung, D. Choi, D. Cho, J. Kim, H. Choi, J. Paik, Fabrication of microfluidic devices by using a femtosecond laser micromachining technique and μ -PIV studies on its fluid dynamics, *Journal of the Korean Physical Society*, Vol. 47, No. 6, pp. 977-981, 2005.
- [2] E. B. Cummings, S. Griffiths, R. Nilson, P. Paul, Conditions for similitude between the fluid velocity and electric field in electroosmotic flow, *Analytical Chemistry*, Vol. 72, No. 11, pp. 2526-2532, 2000.
- [3] S. Jeong, J. Park, J. M. Kim, S. Park, Microfluidic mixing using periodically induced secondary potential in electroosmotic flow, *Journal of Electrostatics*, Vol. 69, No. 5, pp. 429-434, 2011.
- [4] N. Loucaides, A. Ramos, G. E. Georgiou, Configurable AC electroosmotic pumping and mixing, *Microelectronic Engineering*, Vol. 90, pp. 47-50, 2011.
- [5] H. Le The, H. Le Thanh, T. Dong, B. Q. Ta, N. Tran-Minh, F. Karlsen, An effective passive micromixer with shifted trapezoidal blades using wide Reynolds number range, *Chemical Engineering Research and Design*, Vol. 93, pp. 1-11, 2015.
- [6] V. Papadopoulos, I. Kefala, G. Kaprou, G. Kokkoris, D. Moschou, G. Papadakis, E. Gizeli, A. Tserepi, A passive micromixer for enzymatic digestion of DNA, *Microelectronic Engineering*, Vol. 124, pp. 42-46, 2014.
- [7] L. Ren, D. Li, Electroosmotic flow in heterogeneous microchannels, *Journal of colloid and interface science*, Vol. 243, No. 1, pp. 255-261, 2001.
- [8] L.M. Fu, J. Y. Lin, R. J. Yang, Analysis of electroosmotic flow with step change in zeta potential, *Journal of Colloid and Interface Science*, Vol. 258, No. 2, pp. 266-275, 2003.
- [9] J. Yang, J. Masliyah, D. Y. Kwok, Streaming potential and electroosmotic flow in heterogeneous circular microchannels with nonuniform zeta