

УДК 004.9

Стахів В.,
Матвійків О.,
Климкович Т.,
Підцерковний В.

Національний університет «Львівська політехніка»

МОДЕЛЮВАННЯ ТА ДОСЛІДЖЕННЯ АКТИВНОГО РОТАЦІЙНОГО МІКРОЗМІШУВАЧА ДЛЯ МІКРОФЛЮЇДНИХ ПРИСТРОЇВ

© Стахів В., Матвійків О., Климкович Т., Підцерковний В., 2021

У статті розроблено дизайн лаб-чипа для змішування речовин трьох типів та модель активного мікрозмішувача. Досліджено змішування часточок при різних кутових швидкостях обертання ротаційного мікрозмішувача.

Ключові слова - мікроміксер, ламінарний потік, мікрофлюїдний пристрій, моделювання, COMSOL Multiphysics

Вступ

Мікрофлюїдні пристрої широко застосовуються у різних областях, включаючи синтез фармацевтичних інгредієнтів, біологічний аналіз і біомедичні застосування, хімічну реакторну техніку та інтенсифікацію процесів. Мікроструктуровані пристрої забезпечують переваги порівняно з традиційним обладнанням для макроустаткування, включаючи підвищені швидкості тепло- та масообміну, властиві високому відношенню площі поверхні до об'єму [1].

Основними проблемами в розвитку мікрофлюїдних установок є складний розподіл потоку, необхідний для всіх вхідних отворів пристрою, запобігання засміченню каналів, особливо при використанні мікропристроїв, а також проблеми змішування, що спостерігається в мікромасштабі при використанні мініпристроїв. Для розробки ефективних пристроїв розробляються різноманітні мікроміксери [2].

Класифікація мікрозмішувачів та їх переваги

Перемішування істотно впливає на перебіг хімічних реакцій. Активні і пасивні методи мікроперемішування - один із напрямів інтенсифікації процесів в хімії і в хімічних технологіях. Мікрозмішувачі активно розробляються в останні два десятиліття [24, 25], і є не тільки засобом тонкого змішування розчинів, а й потужним інструментом для проведення хімічних реакцій, оскільки здатні забезпечити рівномірність розподілу молекул, атомів і іонів реагуючих речовин, близьку до ідеальної.

Відповідно до загальноприйнятої класифікації, прийнято розрізняти два класи мікроміксерів - пасивні і активні (рис.1). У пасивних мікрозмішувачах використовується енергія потоку, яка створюється насосом або компресором. До типових пасивних мікрозмішувачів відносяться мікроміксери з поділом потоку на багато паралельних ламінарних потоків (slit-type interdigital micromixer); зигзагоподібні; з хаотичним перемішуванням шляхом формування вихорів і поворотів (спіральні, з поворотами на 90° тощо); з впорскуванням струменів в потік; із зіткненням струменів; із закруткою потоків тощо [24].

У разі активних мікрозмішувачів для інтенсифікації перемішування до енергії потоку додаються різні зовнішні сили: ультразвук; акустичні вібрації; п'єзоелектричні вібрації мембрани;

електрокінетична нестійкість; магнітогідродинамічні; маленькі імпелери; вбудовані мікроклапани / мікронасоси тощо.

Інтенсивні дослідження та розроблення мікрофлюїдних змішувачів протягом останніх двох десятиліть були зумовлені низкою переваг, які випливають із унікальної поведінки рідини в мікрорідинному середовищі. На мікромасштабному рівні властивості рідини стають більш контрольованими і дають можливість контролювати різні процеси, що здійснюються в мікроканалах.



Рис.1. Типи мікрозмішувачів

Спочатку мікрозмішувачі були орієнтовані на створення оптимальних умов для проведення реакцій з високою кінетикою, які вимагають швидкого перемішування та для проведення експрес-аналізів, зокрема для біологічних процесів [25]. Крім короткого часу перемішування і стабільності режиму течії (в тому числі двофазної), мікроструктуровані змішувачі характеризуються малим внутрішнім об'ємом.

Це особливо корисно при роботі з токсичними, вибухонебезпечними речовинами, а також коли кількість реагентів обмежена через їх високу вартість. Крім того, малий поперечний розмір мікроканалів дозволяє легко керувати тепловим режимом в пристрої, [30].

Малий розмір порівняно зі звичайними системами змішування призводить до збільшення відношення поверхні до об'єму. Ця характеристика надає мікрозмішувачам можливість контролювати теплопередачу, що дозволяє використовувати їх для проведення реакцій, у яких потрібне швидке нагрівання та охолодження реакційної суміші. Ще однією важливою рушійною силою в розробці змішувачів і реакторів на основі мікрофлюїдики є їх можливе застосування в якості елементів складніших та багатофункціональних MEMC.

Розроблення дизайну лаб-чипа та моделі мікроміксеру

Лаб-чип для змішування трьох видів речовин (рис.2) складається з двох скляних пластин (1, 2) з мережею мікроканалів, трьох вхідних отворів (3, 4, 5), реакційної камери (6), змішувача (7) та вихідного отвора (8).

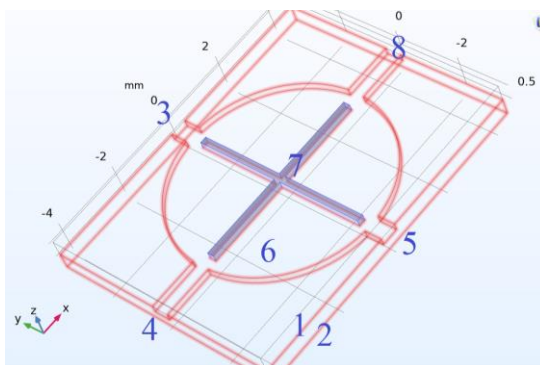


Рис.2. Дизайн лаб-чипа для змішування речовин трьох видів

На першому етапі дослідження бралися однотипні часточки з радіусом 10 нм та густиною 2200 кг/м³. Частинки надходять у область моделювання через вхідні отвори по 50 частинок з початковою швидкістю, рівною швидкості рідини, кожні 50 мілісекунд. Впорскування частинок триває одну секунду. Після модель працює ще секунду, але частинки вже на поступають. Загалом в реакційну камеру надходить $3 \times 21 \times 50 = 3150$ частинок.

Модель є збіркою, що містить обертові та нерухомі області. Тому, щоб частинки могли вільно перетинати границю між нерухомим і рухомим областями, на цій границі задаються умови неперервності.

Модель однофазного потоку рідини базуються на рівняннях Нав'є-Стокса, які у можна представити наступним чином:

$$\rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \rho(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = \nabla \cdot [-p\mathbf{I} + \mathbf{K}] + \mathbf{F} \quad (1)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (2)$$

де

ρ – густина (одиниця СІ: кг/м³)

\mathbf{u} — вектор швидкості (одиниця СІ: м/с)

p - тиск (одиниця СІ: Па)

\mathbf{K} - тензор в'язкого напруження (одиниця СІ: Па) \mathbf{F} - вектор об'ємної сили (одиниця СІ: Н/м³)

Перше рівняння є рівнянням збереження імпульсу. Друге - рівнянням неперервності і являє собою рівняння збереження маси.

Щоб закрити систему рівнянь 1-2, необхідні додаткові співвідношення. Для ньютонівської рідини, яка має лінійну залежність між напруженням і деформацією, Стокс вивів наступний вираз:

$$\mathbf{K} = 2\mu\mathbf{S} - \frac{2}{3}\mu(\nabla \cdot \mathbf{u})\mathbf{I} \quad (3)$$

Де \mathbf{S} - тензор швидкості деформації:

Частинки підпорядковуються другому закону Ньютона:

$$\frac{d}{dt}(m_p \mathbf{v}) = \mathbf{F}_t \quad (3)$$

де

m_p (одиниця СІ: кг) - маса частинок,

\mathbf{v} (одиниця СІ: м/с) - швидкість руху частинок,

\mathbf{F}_t (одиниця СІ: Н) - це загальна сила, яка діє на частинку. У цьому прикладі загальною силою є F_D (Drag Force) сила опору, для якої застосовується закон Стокса

$$\mathbf{F}_D = 3\pi\mu d_p(\mathbf{u} - \mathbf{v}) \quad (4)$$

де

• \mathbf{u} (одиниця СІ: м/с) - швидкість рідини,

• μ (одиниця СІ: Па s) - динамічна в'язкість рідини, і

• d_p (одиниця СІ: м) - діаметр частинок

Сила, що діє на рідину від частинок, не враховується. Оскільки нам необхідно виконати дослідження перехідного потоку рідини, на вході ми вказуємо початкову швидкість потоку та на виході граничну умову нульового тиску. Початкові значення в каналі залишаються за замовчуванням, тобто $(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = (0, 0)$ і $p = 0$.

Метою роботи є розроблення активного мікрозмішувача для дослідження моделі руху частинок при змішуванні речовин. Розроблена модель вивчає змішування частинок у реакційній камері з водою при кімнатній температурі. Для розроблення та дослідження моделі активного мікроміксера

було обране інтерактивне середовище моделювання COMSOL Multiphysics®. Дизайн мікроміксера представлено на рис.3. Мікрозмішувач містить три вхідні та один вихідний отвори діаметром. Радіус реакційної камери становить 3 мм, розмір лопаті – 2,625x0,2 мм, ширина вхідних та вихідного отворів 0,5 мм

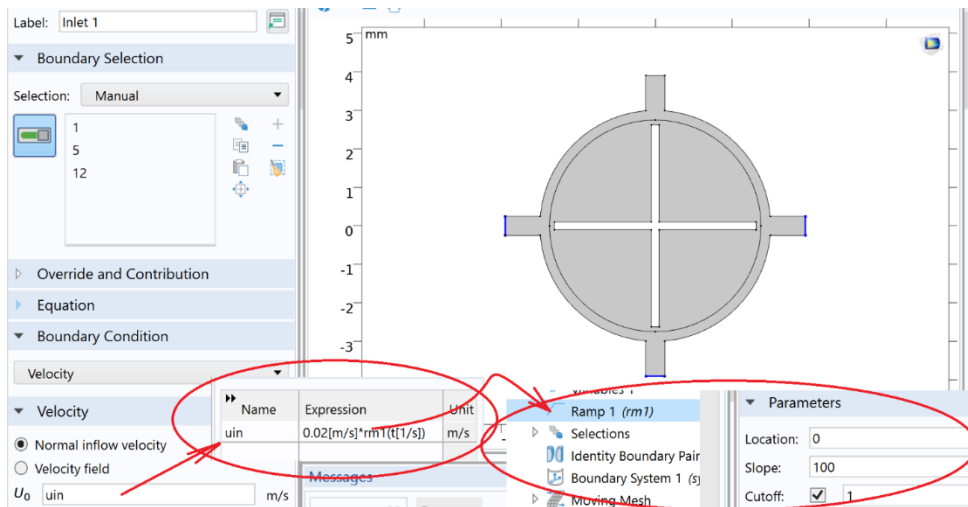


Рис.3. Модель мікромексера та узгодження початкових і граничних умов

Щоб узгодити початкові та граничні умови для перехідної моделі було використано вбудовану функцію Ramp зі згладжуванням, як показано на рис.3. Гранична умова для швидкості на вході повинна відповідати початковій умові швидкості. Початкова швидкість в цій моделі буде нульовою, тому швидкість на вході повинна бути збільшена від нуля до максимального значення протягом певного періоду часу. У даному випадку час наростання становить 0,01 секунди.

Результати моделювання

При заданих початкових та граничних умовах ми отримуємо наступний розподіл поля тиску (рис.4).

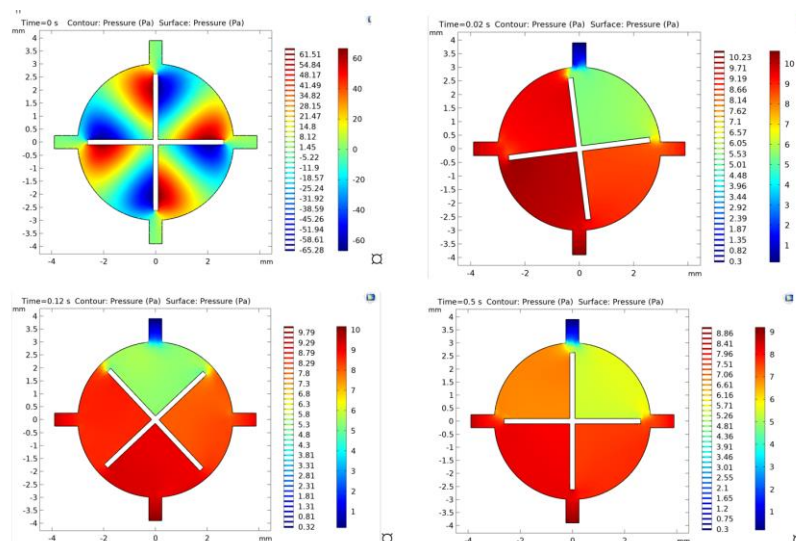


Рис.4. Розподіл тиску у різні моменти часу

У початковий момент поле тиску симетричне щодо лопатей мікроміксера (максимальний тиск спостерігається перед лопатями, мінімальний – за ними, враховуючи напрям їх руху). При запуску мікрозмішувача, мінімальний тиск спостерігається у чверті, яка містить вихідний отвір, максимальний у протилежній до неї чверті, змінюючись циклічно, відповідно до руху лопатей. У початковий момент мінімальний тиск становить $-65,3$ Па, максимальний $64,8$ Па. Під час руху мікроміксера \min тиск коливається у межах $0,17$ - $0,19$ Па, а \max у межах $9,08$ - $10,8$ Па.

Розподіл швидкостей представлено у моменти часу $t=0$ с; $0,06$ с; $0,12$ с та $0,24$ с (рис.5).

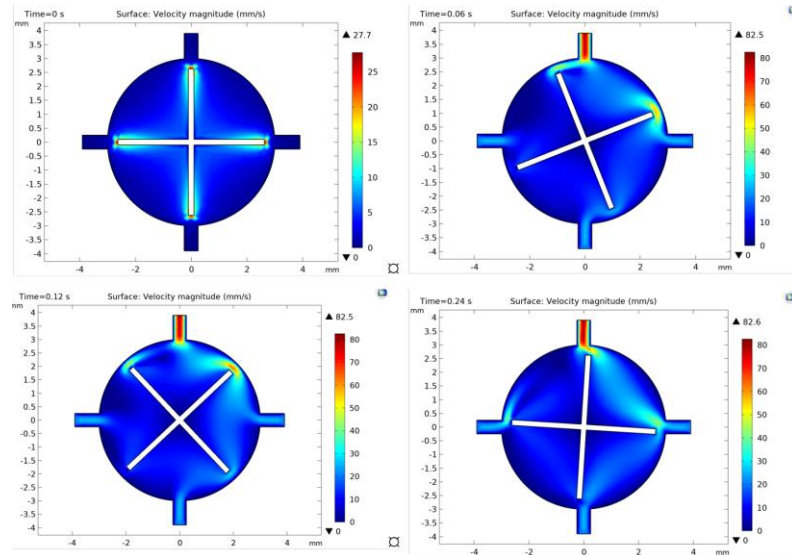


Рис.5. Розподіл поля швидкостей у різні моменти часу

Як і поле тиску, поле швидкостей у початковий момент часу є симетричним, з максимальними значеннями швидкості на краях лопатей мікроміксерів ($27,7$ мм/с). З початком руху мікрозмішувача максимальна швидкість спостерігається у вихідному каналі. Її максимальне значення циклічно коливається у межах $82,5$ - $82,6$ мм/с.

На рис.6 представлено розміщення частинок у реакційній камері на різних моментальних знімках для різних кутових швидкостей (1 , 2 та 3 об/с). Колір частинок відрізняється для кожного вхідного отвору, що зручно дозволяє візуалізувати ефект змішування.

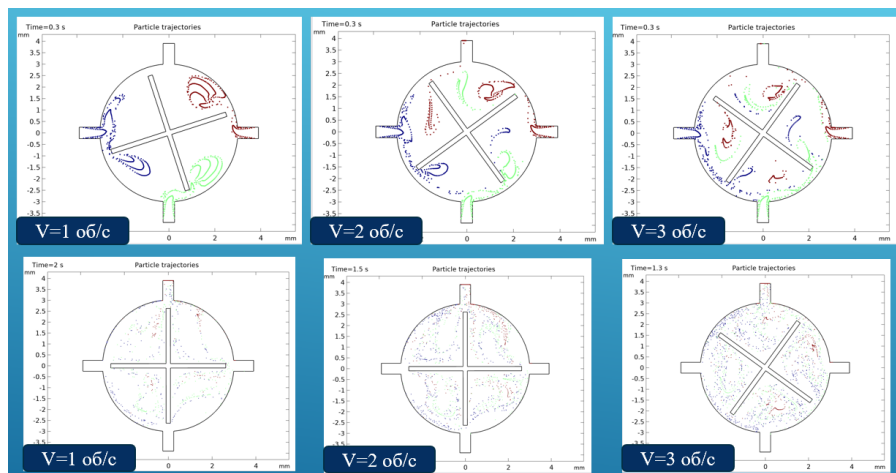


Рис.5. Розміщення часточок у різні моменти часу для різних кутових швидкостей

Частинки нормально проникають всередину з впускних отворів і, починають приймати параболічний профіль, поступово переміщуючись, через наявність обертових лопатей. У верхньому ряді рис.6 представлено розміщення частинок у реакційній камері в момент часу $t=0,3$ с. Зі збільшенням швидкості обертання лопатей збільшується рівномірність розташування часток різних кольорів у камері. У нижньому ряді рис.6 показано момент, коли після припинення поступання нових часток у камеру ($t=1$ с) часточки розташовані рівномірно по всій камері. При швидкості 1 об/с цей час становить 2 с, при швидкості 2 об/с – 1,5 с, а при швидкості 3 об/с 1,3 с.

Висновки

В результаті моделювання активного мікрозмішувача з чотирма обертовими лопатями побудовано поле тиску, поле швидкостей та координати частинок у реакційній камері для різних кутових швидкостей лопатей (1, 2 та 3 об/с). Рівномірне розташування часток у камері досягається при швидкості 1 об/с через 1 с, при швидкості 2 об/с – 0,5 с, а при швидкості 3 об/с 0,3 с. Це показує можливість застосування розробленої конструкції мікрозмішувача для рівномірного змішування трьох нерозчинних компонентів з розміром фракцій 10 нм до однорідної суміші.

Література

1. H. Santana, J. L. Silva, Adriano G. P. da Silva, Alan C. Rodrigues, R.de L. Amaral, D. Noriler, O. Taranto Development of a New Micromixer “Elis” for Fluid Mixing and Organic Reactions in *Millidevices Industrial & Engineering Chemistry Research* 2021, 60, 25, 9216–9230
2. Cai G. Z.; Xue L.; Zhang H. L.; Lin J. H. A Review on Micromixers. *Micromachines* 2017, 8, 274–300. 10.3390/mi8090274
3. Hessel V., H. Löwe, Schönfeld F. Micromixers— a review on passive and active mixing principles // *Chem. Eng. Sci.* 2005. V. 60. P. 2479-2501.
4. Capretto L., Cheng W., Hill M., Zhang X. Micromixing Within Microfluidic Devices // *Top. Curr. Chem.* 2011. V. 304. P. 27-68, DOI: 10.1007/128_2011_150
5. Абиев Р.Ш., Сироткин А.А. Микрореакторы со сталкивающимися струями: современное состояние и перспективы применения в химических технологиях (обзор) // *Известия СПбГТИ (ТУ).* 2020. №54, с.54-65

V. Stakhiv,
O. Matviyiv,
T. Klymkovych,
V. Pidtserkovnyi

Lviv Polytechnic National University

MODELING AND RESEARCH OF ACTIVE ROTARY MICROMIXER FOR MICROFLUID DEVICES

© Stakhiv V., Matviyiv O., Klymkovych T., Pidtserkovnyi V., 2021

The article develops a laboratory design for mixing substances of three types and a model of active micromixer. The mixing of the particles of the angular velocities of the micromixer is investigated.

Keywords - micromixer, laminar flow, microfluidic devices, modeling, COMSOL Multiphysics