

В. Стахів, О. Матвійків, Т. Климкович, В. Підцерковний
Національний університет “Львівська політехніка”

МОДЕЛЮВАННЯ ТА ДОСЛІДЖЕННЯ АКТИВНОГО РОТАЦІЙНОГО МІКРОЗМІШУВАЧА ДЛЯ МІКРОФЛЮЇДНИХ ПРИСТРОЇВ

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

Розроблено дизайн лаб-чипа для змішування речовин трьох типів та модель активного мікрозмішувача. Досліджено змішування часточок за різних кутових швидкостей обертання ротаційного мікрозмішувача.

Ключові слова: мікроміксер; ламінарний потік; мікрофлюїдний пристрій; моделювання; COMSOL Multiphysics.

Вступ

Мікрофлюїдні пристрої широко застосовують у різних сферах, серед яких синтез фармацевтичних інгредієнтів, біологічний аналіз і біомедичні застосування, хімічна реакторна техніка та інтенсифікація процесів. Мікроструктуровані пристрої забезпечують переваги порівняно із традиційним обладнанням для макроустаткування, зокрема підвищені швидкості тепло- та масообміну, притаманні високому відношенню площі поверхні до об'єму [1].

Основні проблем розвитку мікрофлюїдних установок – складний розподіл потоку, необхідний для усіх вхідних отворів пристрою, запобігання засміченню каналів, особливо у разі використання мікропристроїв, а також проблеми змішування, що спостерігаються у мікромасштабі під час застосування мініпристроїв. Для створення ефективних пристроїв розробляють різноманітні мікроміксери [2].

Класифікація мікрозмішувачів та їхні переваги

Перемішування істотно впливає на перебіг хімічних реакцій. Активні й пасивні методи мікроперемішування – один із напрямів інтенсифікації процесів у хімії та 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 ведення хімічних реакцій, оскільки здатні забезпечити рівномірність розподілу молекул, атомів та іонів речовин, які реагують, близьку до ідеальної.

Відповідно до загальноприйнятої класифікації, прийнято розрізняти два класи мікроміксерів – пасивні й активні (рис. 1). У пасивних мікрозмішувачах використовується енергія потоку, яку створює насос або компресор. До типових пасивних мікрозмішувачів належать мікроміксери з поділом потоку на багато паралельних ламінарних потоків (*slit-type interdigital micromixer*); зигзагоподібні; із хаотичним перемішуванням унаслідок формування вихорів і поворотів (спіральні, із поворотами на 90° тощо); із впорскуванням струменів у потік; із зіткненням струменів; із закручуванням 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 пояснюються низкою переваг, зумовлених унікальною поведінкою рідини в мікрорідинному середовищі. На мікромасштабному рівні властивості рідини стають контрольованішими і дають можливість контролювати різні процеси, що здійснюються у мікроканалах.



Рис. 1. Типи мікрозмішувачів

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

Це особливо корисно під час роботи із токсичними, вибухонебезпечними речовинами, а також коли кількість реагентів обмежена через їх високу вартість. Крім того, малий поперечний розмір мікроканалів дає змогу легко керувати тепловим режимом у пристрої [30].

Малий розмір порівняно зі звичайними системами змішування приводить до збільшення відношення поверхні до об'єму. Ця характеристика надає мікрозмішувачам можливість контролювати теплопередачу, тому їх можна використовувати для проведення реакцій, у яких потрібні швидке нагрівання та охолодження реакційної суміші. Ще одним важливим чинником, який спонукає до розроблення змішувачів і реакторів на основі мікрофлюїдики, є їх можливе застосування як елементів складніших та багатофункціональних MEMS.

Розроблення дизайну лаб-чипа та моделі мікроміксера

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

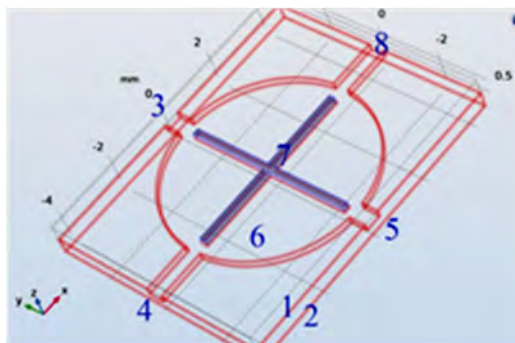


Рис. 2. Дизайн лаб-чипа для змішування речовин трьох видів

На першому етапі дослідження брали однотипні часточки із радіусом 10 нм та густиною 2200 кг/м³. В область моделювання через входні отвори надходять по 50 частинок із початковою швидкістю, яка дорівнює швидкості рідини, кожні 50 мілісекунд. Впорскування частинок триває одну секунду. Потім модель працює ще секунду, але частинки вже не надходять. Загалом у реакційну камеру надходить 3×21×50 = 3150 частинок.

Зібрана модель містить обертові та нерухомі області. Тому, щоб частинки могли вільно перетинати межу між нерухомими і рухомими областями, на ній задано умови неперервності.

Модель однофазного потоку рідини ґрунтується на рівняннях Нав'є – Стокса, які можна подати так:

$$\rho \frac{d\mathbf{u}}{dt} = -\nabla p + \nabla \cdot \mathbf{K} + \mathbf{F} \quad (1)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (2)$$

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 та являє собою рівняння збереження маси.

Щоб закрити систему рівнянь (1)–(2), необхідні додаткові співвідношення. Для ньютонівської рідини, із лінійною залежністю між напруженням і деформацією, Стокс вивів такий вираз:

$$\mathbf{K} = \mu (\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T) + \lambda (\nabla \cdot \mathbf{u}) \mathbf{I} \quad (3)$$

де \mathbf{S} – тензор швидкості деформації. Частинки підпорядковані другому закону Ньютона:

$$\mathbf{F} = m_p \mathbf{a} - \mathbf{F}_D \quad (3a)$$

де m_p – маса частинок, (одиниця СІ: кг); \mathbf{v} – швидкість руху частинок, (одиниця СІ: м/с); $\mathbf{F}t$ – загальна сила, яка діє на частинку, (одиниця СІ: Н). У цьому прикладі загальною силою є F_D (Drag Force) – сила опору, до якої застосовується закон Стокса

$$\mathbf{F}_D = -\zeta \mathbf{v} \quad (4)$$

де u – швидкість рідини, (одиниця СІ: м/с); μ – динамічна в'язкість рідини, (одиниця СІ: Па s); dp – діаметр частинок, (одиниця СІ: м).

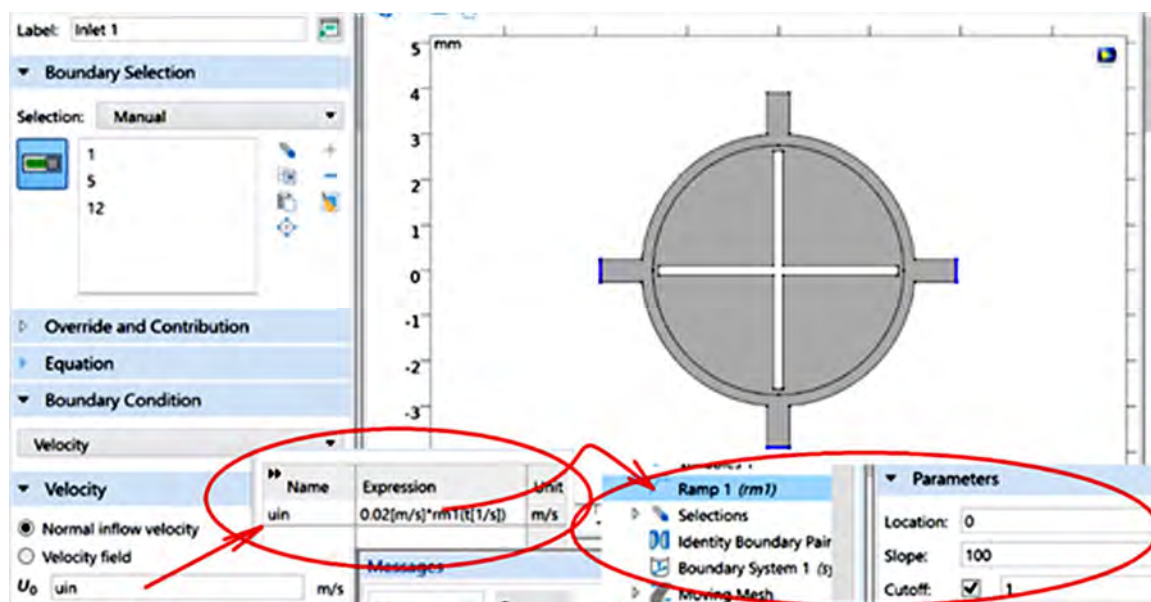


Рис. 3. Модель мікроміксера та узгодження початкових і граничних умов

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

Поставлено мету: розробити активний мікрозмішувач для дослідження моделі руху частинок під час змішування речовин. Розроблена модель вивчає змішування частинок у реакційній камері з водою за кімнатної температури. Для розроблення та дослідження моделі активного мікроміксера вибрано інтерактивне середовище моделювання COMSOL Multiphysics®. Дизайн мікроміксера наведено на рис. 3. Мікрозмішувач містить три вхідні та один вихідний отвори. Радіус реакційної камери становить 3 мм, розмір лопаті – $2,625 \times 0,2$ мм, ширина вхідних та вихідного отворів 0,5 мм.

Щоб узгодити початкові та граничні умови для перехідної моделі, використано вбудовану функцію Ramp зі згладжуванням, як показано на рис. 3. Гранична умова для швидкості на вході повинна відповідати початковій умові швидкості. Початкова швидкість у цій моделі буде нульовою, тому швидкість на вході повинна зрости від нуля до максимального значення протягом певного періоду часу, у нашому випадку час зростання становить 0,01 с.

Результати моделювання

За заданих початкових та граничних умов отримуємо розподіл поля тиску наведений на рис. 4.

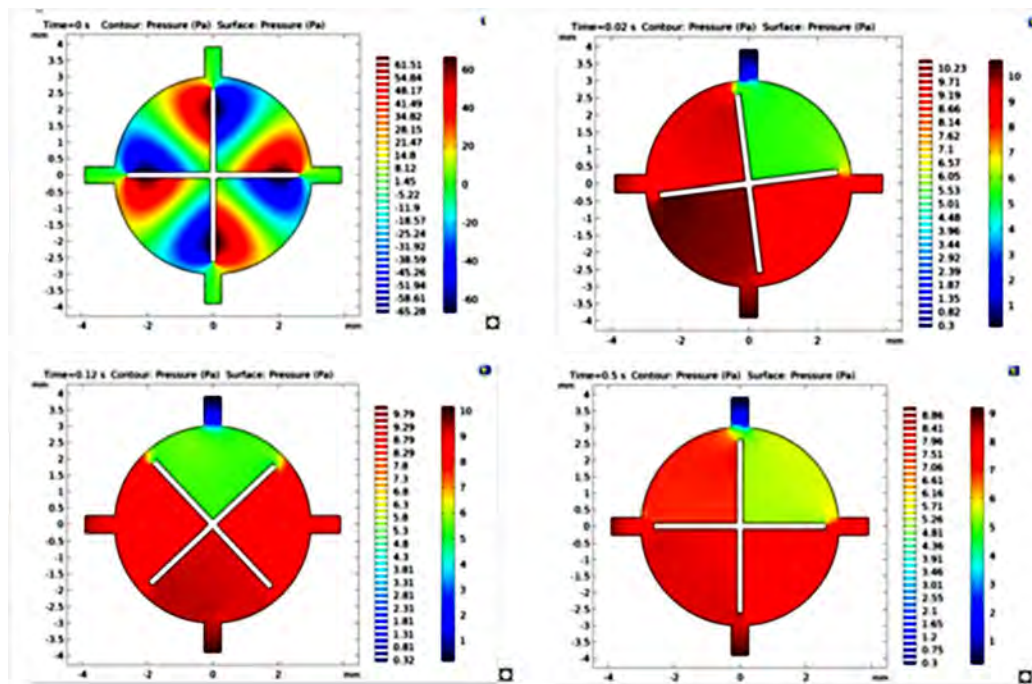


Рис. 4. Розподіл тиску в різні моменти часу

У початковий момент поле тиску симетричне щодо лопатей мікроміксера (максимальний тиск спостерігається перед лопатями, мінімальний – за ними, враховуючи напрям їх руху). Після 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 подано у моменти часу $t = 0$ с; $0,06$ с; $0,12$ с та $0,24$ с (рис. 5).

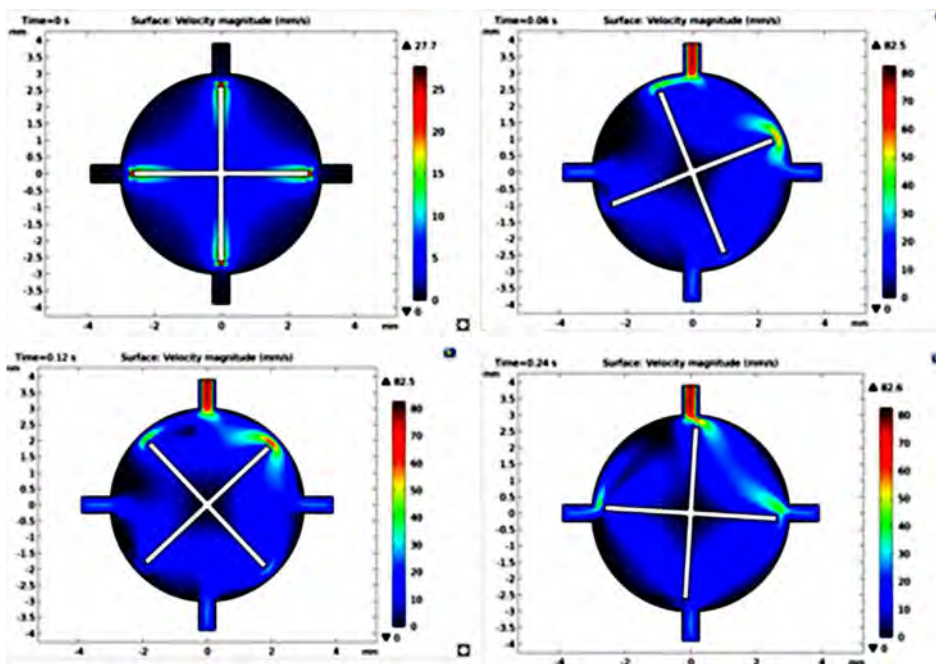


Рис. 5. Розподіл поля швидкостей у різні моменти часу

Як і поле тиску, поле швидкостей у початковий момент часу є симетричним, із максимальними значеннями швидкості на краях лопатей мікроміксера (27,7 мм/с). Із 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 на різних моментальних знімках відображено розміщення частинок у реакційній камері для різних кутових швидкостей (1, 2 та 3 об./с). Колір частинок відрізняється для кожного вхідного отвору, що зручно, оскільки дає змогу візуалізувати ефект змішування.

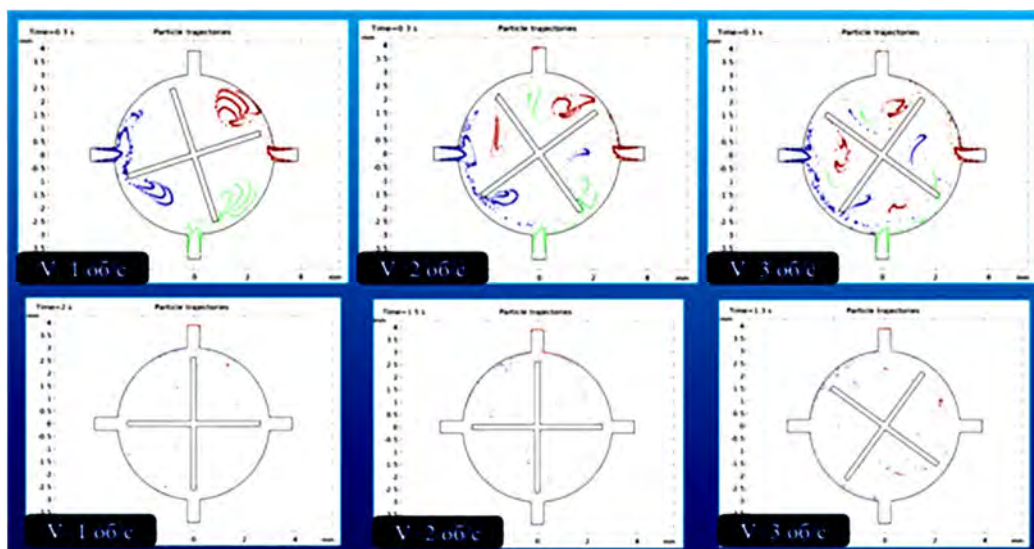


Рис. 6. Розміщення часточок у різні моменти часу для різних кутових швидкостей

Частинки нормально проникають всередину із впускних отворів і починають набувати параболічного профілю, поступово переміщуючись, через наявність обертових лопатей. У верхньому ряду (рис. 6) відображено розміщення частинок у реакційній камері в момент часу $t = 0,3$ с. Зі зростанням швидкості обертання лопатей збільшується рівномірність розташування часток різних

кольорів у камері. У нижньому ряду на рис. 6 показано момент, коли після припинення надходження нових часток у камеру ($t = 1$ с) часточки розташовані рівномірно по всій камері. За швидкості 1 об./с цей час становить 2 с, за швидкості 2 об./с – 1,5 с, а за швидкості 3 об./с – 1,3 с.

Висновки

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

Література

1. Santana, H., Silva, J. L., Adriano, G. P. da Silva, Alan C. Rodrigues, R. de L. Amaral, Noriler, D., Taranto, O. Development of a New Micromixer “Elis” for Fluid Mixing and Organic Reactions in Millidevices *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2021, 60, 25, 9216–9230. <https://doi.org/10.1021/acs.iecr.1c00770>
2. Cai, G. Z., Xue, L., Zhang, H. L. J., Lin, H. A. Review on Micromixers. *Micromachines*, 2017, 8, 274–300. [10.3390/mi8090274](https://doi.org/10.3390/mi8090274) <https://doi.org/10.3390/mi8090274>
3. Hessel, V., Löwe, H., Schönfeld, F. Micromixers – a review on passive and active mixing principles. *Chem. Eng. Sci.*, 2005, Vol. 60, 2479–2501. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2004.11.033>
4. Capretto L., Cheng W., Hill M., Zhang X. Micromixing Within Microfluidic Devices. *Top. Curr. Chem.*, 2011, Vol. 304, 27–68. DOI: 10.1007/128_2011_150. https://doi.org/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, 54–65. <https://doi.org/10.36807/1998-9849-2020-54-80-54-65>.

V. Stakhiv, O. Matviykov, T. Klymkovych, V. Pidtserkovnyi
Lviv Polytechnic National University

MODELING AND RESEARCH OF ACTIVE ROTARY MICROMIXER FOR MICROFLUID DEVICES

© Stakhiv V., Matviykov 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.

Key words: micromixer; laminar flow; microfluidic devices; modeling; COMSOL Multiphysics.