

Elektrische Erregung von Strömungen in Mikrokanälen

I. Meisel, P. Ehrhard

Institut für Kern- und Energietechnik Programm Mikrosystemtechnik

September 2004

Forschungszentrum Karlsruhe

in der Helmholtz-Gemeinschaft

Wissenschaftliche Berichte

FZKA 6762

Elektrische Erregung von Strömungen in Mikrokanälen

I. Meisel, P. Ehrhard

Institut für Kern- und Energietechnik Programm Mikrosystemtechnik

Forschungszentrum Karlsruhe GmbH, Karlsruhe

2004

Impressum der Print-Ausgabe:

Als Manuskript gedruckt Für diesen Bericht behalten wir uns alle Rechte vor

Forschungszentrum Karlsruhe GmbH Postfach 3640, 76021 Karlsruhe

Mitglied der Hermann von Helmholtz-Gemeinschaft Deutscher Forschungszentren (HGF)

ISSN 0947-8620

urn:nbn:de:0005-067624

Elektrische Erregung von Strömungen in Mikrokanälen mit Anwendung für einen Mikromischer

Im vorliegenden Bericht werden neue Ergebnisse zur mathematischen Behandlung und numerischen Simulation von Flüssigkeits-Mikroströmungen vorgestellt und diskutiert. Die Erkenntnisse werden auf die Optimierung eines Mikromischers angewandt. Zunächst wird der Satz der asymptotischen Randbedingungen abgeleitet, wobei in primitiven Variablen (Geschwindigkeitskomponenten u, v, Druck p) argumentiert wird und die Einbeziehung des selbstinduzierten elektrischen Feldes aufgezeigt wird. Es werden Simulationen zur elektrischen Erregung einer Wirbelstraße sowie zur elektrisch erregten Strömung in einer Kanalauffaltung vorgestellt und die Ergebnisse diskutiert.

Electrical excitation of flows in micro–channels with application to micro mixer

In the present work, new results regarding the mathematical treatment and the numerical simulation of liquid micro–flows are presented and discussed. The results are applied to the optimization of micro–mixers. At first, the set of asymptotic boundary conditions is derived, where the formulation appears in primitive variables (velocity components u, v, pressure p) and the self–induced electrical field is taken into account. Simulations of the electrical excitation of a vortex street and of the electrical excitation of the flow in a folded channel are presented and the results are discussed.

Inhaltsverzeichnis

1	Ein	leitung	1
2	Asymptotik		2
	2.1	Grundgleichungen	2
	2.2	Entdimensionierung	3
	2.3	Reskalierung	4
	2.4	Lösung der Differentialgleichungen in der elektrischen Doppelschicht .	5
	2.5	Asymptotische Anpassung	5
3	Simulationsergebnisse		7
	3.1	Elektrisch erregte Wirbelstraße	7
	3.2	Elektrisch erregte Kanalauffaltung	14
4	\mathbf{Zus}	ammenfassung und Ausblick	17

1 Einleitung

Mikromechanische Techniken gewinnen in der Mikro–Verfahrenstechnik und chemischer und biologischer Analytik immer mehr an Bedeutung. Durch die Weiterentwicklung herkömmlicher Fertigungsverfahren wie z.B. Bohren, Fräsen, Prägen, Abformen, Ätzen oder Lithographie ist es heute möglich, Gerätekomponenten mit kleinsten Abmessungen herzustellen – Mikropumpen, Mikroventile und Mikrowärmetauscher sind nur einige Beispiele für Anwendungen in der Mikrosystemtechnik. Oftmals müssen sehr kleine Gas– oder Flüssigkeitsmengen im Nano– bis Picoliterbereich vermischt oder auf ihre Zusammensetzung hin untersucht werden. Dies erfordert entsprechend präzise Verfahren für die Dosierung und den Transport der Substanzen.

Eine wichtige Komponente solcher Geräte sind Mikromischer-Module, welche die Vermischung kleinster Flüssigkeitsmengen bewerkstelligen müssen. Aufgrund der geometrischen Abmessungen solcher Mikromischer im Bereich von einigen hundert Mikrometern und Strömungsgeschwindigkeiten im Bereich von mm/s bis cm/s werden diese Strömungsvorgänge in den allermeisten Fällen laminar verlaufen, so daß die in makroskopischen Systemen oftmals auftretende Turbulenz hier nicht ausgenutzt werden kann; auch können mechanische Rühranlagen aufgrund der geringen Abmessungen in mikromechanischen Systemen kaum realisiert werden. Es besteht somit Bedarf an neuen Verfahren, um die Mischung von sehr geringen Flüssigkeitsmengen auf kleinstem Raum zu erreichen.

Hier soll ein Verfahren untersucht werden, welches auf dem Phänomen der elektrischen Doppelschicht (engl. Electrical Double Layer, EDL) beruht. Dieses beruht auf der Tatsache, daß Wände eine Ladung tragen, also elektrisch nicht neutral sind. Ebenso enthalten Flüssigkeiten geladene Teilchen (Ionen). Die Wechselwirkung des elektrischen Feldes dieser Teilchen mit dem elektrischen Feld der geladenen Wände erzeugt in Wandnähe eine diffuse Flüssigkeitsschicht, welche elektrisch nicht neutral ist. Diese Schicht wird durch die Debye–Länge l_D charakterisiert und ist sehr dünn ($l_D < 1 \ \mu m$); daher kann dieser Effekt in makroskopischen Strömungen vernachlässigt werden. In mikrofluidischen Strömungen (typische Längen im Bereich von 100 μm) kann dieser wandnahe Bereich jedoch durchaus einen nennenswerten Einfluß auf die Gesamtströmung haben.

2 Asymptotik

2.1 Grundgleichungen

Die beschreibenden Grundgleichungen sind die Kontinuitätsgleichung und die Navier-Stokes-Gleichungen für ein inkompressibles, Newtonsches Fluid mit der konstanten Dichte ρ und der dynamischen Viskosität μ mit zusätzlichen elektrischen Volumenkrafttermen. Wir beschränken uns auf ebene Geometrien und beschreiben die Strömung in Wandnähe in einem lokal-orthogonalen Koordinatensystem mit der tangentialen Koordinate x und der wandnormalen Koordinate y. Die Koordinate y = 0 lokalisiert die Grenzfläche zwischen der festen Wand (y < 0) und dem Fluid (y > 0).

Die elektrische Ladungsdichteverteilung in der Flüssigkeit ρ_e läßt sich durch durch eine Exponentialfunktion beschreiben, vgl. z.B. [4]

$$\rho_e = -\frac{q_W}{l_D} e^{-y/l_D} \quad , \tag{2.1}$$

mit q_W als elektrischer Ladung der Wand und l_D der Debye–Länge der Flüssigkeit. Durch diese Verteilung der Ladungsträger wird nach

$$\nabla \vec{E}_0 = \frac{\rho_e}{\varepsilon_r \varepsilon_0} \tag{2.2}$$

ein selbstinduziertes elektrisches Feld $(0, E_{y0})^T$ in Wandnormalenrichtung erzeugt. Dabei steht ε_0 für die Dielektrizitätskonstante des Vakuums und ε_r für die relative Dielektrizitätskonstante der Flüssigkeit.

Der Ausdruck (2.2) kann in y-Richtung integriert werden und liefert die wandnormale Komponente des selbstinduzierten elektrischen Feldes in der Flüssigkeit

$$E_{y0}(y) = \frac{1}{\varepsilon_r \varepsilon_0} \int_{-\infty}^{y} \rho_e dy = \frac{q_W}{\varepsilon_r \varepsilon_0} e^{-y/l_D} \quad .$$
(2.3)

Weiterhin wird angenommen, daß von außen ein externes elektrisches Feld $\vec{E} = (E_x, E_y)^T$ auf die Flüssigkeit wirkt, was in den Navier–Stokes–Gleichungen weitere Volumenkraftterme bedingt. Die Grundgleichungen lauten somit

$$u_x + v_y = 0$$
 , (2.4)

$$\rho(u_t + uu_x + vu_y) = -p_x + \mu(u_{xx} + u_{yy}) + \rho_e E_x \quad , \tag{2.5}$$

$$\rho(v_t + uv_x + vv_y) = -p_y + \mu(v_{xx} + v_{yy}) + \rho_e E_y + \rho_e E_{y0} \quad , \qquad (2.6)$$

wobe
iu,vdie Geschwindigkeitskomponenten in wandtangentialer b
zw. –normaler Richtung bedeuten, p den Druck und

$$\rho_e E_x = -\frac{q_W E_x}{l_D} e^{-y/l_D} \quad , \tag{2.7}$$

$$\rho_e E_y = -\frac{q_W E_y}{l_D} e^{-y/l_D} \quad , \tag{2.8}$$

$$\rho_e E_{y0} = -\frac{q_W^2}{\varepsilon_r \varepsilon_0 l_D} e^{-2y/l_D} \tag{2.9}$$

 \mathbf{T}

gilt. Diese Ausdrücke eingesetzt in (2.5, 2.6) ergeben

$$u_x + v_y = 0 , (2.10)$$

$$\rho(u_t + uu_x + vu_y) = -p_x + \mu(u_{xx} + u_{yy}) - \frac{q_W E_x}{l_D} e^{-y/l_D} \quad , \tag{2.11}$$

$$\rho(v_t + uv_x + vv_y) = -p_y + \mu(v_{xx} + v_{yy}) - \frac{q_W E_y}{l_D} e^{-y/l_D} - \frac{q_W^2}{\varepsilon_r \varepsilon_0 l_D} e^{-2y/l_D} . (2.12)$$

Die Randbedingungen an der Wand sind

$$y = 0:$$
 $u = 0, v = 0$. (2.13)

Der letzte Term auf der rechten Seite von Gleichung (2.11) beschreibt die Wirkung von elektrischen Kräften tangential zur Wand, hervorgerufen durch Kräfte auf die elektrischen Ladungen in Wandnähe in einem von außen angelegten elektrischen Feld. Der vorletzte Term auf der rechten Seite von Gleichung (2.12) modelliert elektrische Kräfte im externen Feld, welche normal zur Wand wirken. Der letzte Term auf der rechten Seite von Gleichung (2.12) steht für die selbstinduzierten elektrischen Kräfte normal zur Wand, welche aufgrund der Nicht-Gleichverteilung der Ladungsträger in der Flüssigkeit (EDL) entstehen.

2.2 Entdimensionierung

Die Entdimensionierung der Gleichungen bringt die Terme (bis auf die auftretenden dimensionslosen Kennzahlen) in die Größenordnung ~ 1 , was zum einen Vorteile für eine numerische Behandlung des Problems hat (schnelle Konvergenz der numerischen Verfahren, kleine Rundungsfehler). Andererseits wird die Beurteilung der Größenordnung der einzelnen Terme anhand der dimensionslosen Kennzahlen ermöglicht. Es wird mit den Skalen

$$X = \frac{x}{d_0}$$
, $Y = \frac{y}{d_0}$, $U = \frac{u}{u_0}$, $V = \frac{v}{u_0}$, $P = \frac{pd_0}{\mu u_0}$, $T = \frac{u_0}{d_0}t$

entdimensioniert, wobe
i d_0 die Kanalweite und u_0 eine typische Geschwindigkeit be
deutet. Die Gleichungen lauten somit

$$U_X + V_Y = 0 , (2.14)$$

$$Re(U_T + UU_X + VU_Y) = -P_X + U_{XX} + U_{YY} - \delta^{-2} \overline{\Pi}_x e^{-Y/\delta} , \qquad (2.15)$$

$$Re(V_T + UV_X + VU_Y) = -P_X + V_{XX} + V_{YY} - \delta^{-2} \overline{\Pi}_x e^{-Y/\delta} , \qquad (2.16)$$

$$Re(V_T + UV_X + VV_Y) = -P_Y + V_{XX} + V_{YY} - \delta^{-2}\Pi_y e^{-1/\delta} - \delta^{-2}\Pi_0 e^{-21/\delta} (2.16)$$

mit

Ì

$$Re = \frac{u_0 d_0}{\nu}, \quad \delta = \frac{l_D}{d_0} \ll 1, \quad \Pi_0 = \frac{q_W^2 l_D}{\varepsilon_r \varepsilon_0 \mu u_0} > 0, \quad \left(\frac{\overline{\Pi}_x}{\overline{\Pi}_y}\right) = \frac{q_W l_D}{\mu u_0} \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \end{pmatrix} \quad (2.17)$$

und den Randbedingungen

$$Y = 0: U = 0, V = 0 . (2.18)$$

2.3 Reskalierung

Die Längenskala des exponentiellen Abfalls der elektrischen Terme ist $l_D = \epsilon d_0$, während für den Kanal seine Breite d_0 charakteristisch ist. Dies zeigt, daß zwei unterschiedliche Längenskalen im Problem auftreten. Es ist daher naheliegend, das Problem mittels asymptotischer Methoden in Teilgebieten zu behandeln und die Teillösungen danach zusammenzusetzen.

Einen Anhaltspunkt für die Art der Aufteilung des Lösungsgebietes bekommt man, wenn man sich vor Augen hält, daß die Exponentialfunktionen in den elektrischen Termen sehr schnell von dem Wert an der Wand auf Null in der Flüssigkeit abfallen; dieser Abfall vollzieht sich innerhalb einer sehr dünnen Schicht an der Wand von der Dicke ~ l_D bzw. ~ $l_D/2$. Die elektrischen Kräfte müssen also nur in diesen dünnen, wandnahen Schichten in den Gleichungen mitgeführt werden; im übrigen Strömungsgebiet sind keine elektrischen Kräfte präsent. Diese Beschränkung der elektrischen Kräfte auf den Wandbereich rührt daher, daß nur im Wandbereich ein nennenswerter Überschuß einer Ladungsträgersorte vorhanden ist, so daß nur hier die Netto-Ladungsträgerdichte ρ_e von Null verschieden ist; weit weg von der Wand ist die Flüssigkeit elektrisch neutral.

Im wandnahen Bereich ist die oben eingeführte Skalierung für die wandnormale Richtung $Y = y/d_0$ unpassend, weil die exponentiellen Verläufe der elektrischen Terme, wie schon erwähnt, mit l_D skalieren. Es wird daher eine Reskalierung der wandnormalen Richtung Y und der wandnormalen Geschwindigkeitskomponente V durchgeführt gemäß

$$\tilde{Y} = \frac{Y}{\delta}, \quad \tilde{V} = \frac{V}{\delta} \quad .$$
(2.19)

Wird dies in die Gleichungen (2.14–2.16) eingeführt, so ergibt sich

$$U_X + V_{\tilde{Y}} = 0 \quad , \tag{2.20}$$

$$Re(U_{T} + UU_{X} + \tilde{V}U_{\tilde{Y}}) = -P_{X} + U_{XX} + \delta^{-2}U_{\tilde{Y}\tilde{Y}} - \delta^{-2}\overline{\Pi}_{x}e^{-Y} , \qquad (2.21)$$

$$Re(V_T + UV_X + VV_{\tilde{Y}}) = -\delta^{-2}P_{\tilde{Y}} + V_{XX} + \delta^{-2}V_{\tilde{Y}\tilde{Y}} - \delta^{-3}\Pi_y e^{-T} - \delta^{-3}\Pi_0 e^{-2T} ,$$
(2.22)

ein Gleichungssystem, welches für die elektrische Doppelschicht skaliert ist.

2.4 Lösung der Differentialgleichungen in der elektrischen Doppelschicht

In der führenden Ordnung können die Impulsgleichungen (2.21, 2.22) gemäß

$$0 = U_{\tilde{Y}\tilde{Y}} - \overline{\Pi}_x e^{-Y} \quad , \tag{2.23}$$

$$0 = -P_{\tilde{Y}} + \tilde{V}_{\tilde{Y}\tilde{Y}} - \delta^{-1}\overline{\Pi}_{y}e^{-\tilde{Y}} - \delta^{-1}\Pi_{0}e^{-2\tilde{Y}}$$
(2.24)

angenähert werden. Aus (2.23) ergibt sich nach zweimaliger Integration und Berücksichtigung der Randbedingung (2.18) die "innere" Lösung für U zu

$$U = \overline{\Pi}_x (e^{-\tilde{Y}} - 1) + C_1(X)\tilde{Y} \quad .$$
 (2.25)

Die Kontinuitätsgleichung (2.20) liefert in Verbindung mit (2.25) und der Randbedingung (2.18) die "innere" Lösung für \tilde{V}

$$\tilde{V} = -\frac{1}{2}C_{1,X}\tilde{Y}^2 \quad , \tag{2.26}$$

und (2.24) gibt mit (2.26) für das "innere" Druckfeld

$$P = -C_{1,X} \cdot \tilde{Y} + \delta^{-1} \overline{\Pi}_y e^{-\tilde{Y}} + \frac{1}{2} \delta^{-1} \Pi_0 e^{-2\tilde{Y}} + C_4(X) \quad .$$
 (2.27)

2.5 Asymptotische Anpassung

Kernströmung:

$$U_B(T, X, Y) \mapsto U_B(T, X, \delta Y)$$

$$V_B(T, X, Y) \mapsto V_B(T, X, \delta \tilde{Y})$$

$$P_B(T, X, Y) \mapsto P_B(T, X, \delta \tilde{Y})$$
(2.28)

 $\lim_{\delta \to 0} :$

$$U_B(T, X, \delta \tilde{Y}) \mapsto U_B(T, X, 0)$$

$$V_B(T, X, \delta \tilde{Y}) \mapsto V_B(T, X, 0)$$

$$P_B(T, X, \delta \tilde{Y}) \mapsto P_B(T, X, 0)$$
(2.29)

Wandnahe Strömung aus (2.25–2.27):

$$U_W = \overline{\Pi}_x (e^{-Y/\delta} - 1) + C_1(X)Y/\delta \quad , \tag{2.30}$$

$$V_W = -\frac{1}{2}C_{1,X}\delta^{-2}Y^2 \quad , \tag{2.31}$$

$$P_W = -C_{1,X} \cdot Y/\delta + \delta^{-1} \overline{\Pi}_y e^{-Y/\delta} + \frac{1}{2} \delta^{-1} \Pi_0 e^{-2Y/\delta} + C_4(X) \quad , \qquad (2.32)$$

 $\lim_{\delta \to 0} :$

$$U_W = -\overline{\Pi}_x \quad , \tag{2.33}$$

$$V_W = 0$$
 , (2.34)

$$P_W = C_4(X)$$
 . (2.35)

Damit die wandnahe Lösung angepaßt werden kann, muß die freie Konstante C_1 zu Null gewählt werden. Die Randbedingungen für die Kanalströmung ergeben sich somit aus (2.29) und (2.33–2.35) zu

$$U_B(T, X, 0) = -\overline{\Pi}_x \quad , \tag{2.36}$$

$$V_B(T, X, 0) = 0 \quad , \tag{2.37}$$

$$P_B(T, X, 0) = C_4(X)$$
 . (2.38)

Am Rand des Gültigkeitsbereiches der Kernlösung gilt demnach nicht die Haftbedingung; stattdessen wird mit (2.36) ein endlicher Geschwindigkeitswert auf der "Wand" vorgegeben. Gleichung (2.37) besagt, daß in erster Näherung innerhalb der dünnen, wandnahen Schicht keine Geschwindigkeitskomponente senkrecht zur Wand auftritt. Der Vorteil dieser asymptotischen Näherung liegt in der numerischen Behandlung von Strömungen mit elektrischer Doppelschicht. Wollte man den sehr dünnen, wandnahen Bereich der elektrischen Doppelschicht numerisch auflösen, so würde dies einen erheblichen Aufwand bedeuten, da das Rechengitter in diesen Bereichen sehr fein sein müßte. Mit Hilfe der Näherung (2.36, 2.37) werden die elektrischen Kräfte über die Randbedingung asymptotisch berücksichtigt und müssen in der numerischen Berechnung nicht mehr explizit aufgelöst werden; stattdessen können die herkömmlichen Impulsgleichungen ohne elektrische Kräfte verwendet werden.

Die wandnahe Lösung lautet

$$U_W = \overline{\Pi}_x (e^{-Y} - 1) \quad , \tag{2.39}$$

$$V_W = 0$$
 , (2.40)

$$P_W = \delta^{-1} \overline{\Pi}_y e^{-\tilde{Y}} + \frac{1}{2} \delta^{-1} \Pi_0 e^{-2\tilde{Y}} + P_B(T, X, 0) \quad .$$
 (2.41)

Diese analytische Lösung kann der Kernlösung U_B , V_B , P_B superponiert werden, um eine Näherungslösung in unmittelbarer Wandnähe zu erhalten, welche im übrigen dann auch die Haftbedingung an der Wand erfüllt. Gemäß (2.41) wird der Druck P_B aus der Kernströmung der wandnahen Schicht aufgeprägt, ähnlich wie dies auch in viskosen Grenzschichten der Fall ist. Dem überlagert ist die Wirkung der elektrischen Kräfte. Der zweite Term ist immer positiv ($\Pi_0 > 0$) und wird durch das selbstinduzierte elektrische Feld verursacht. Somit kommt es an allen Wänden infolge des selbstinduzierten elektrischen Feldes zu einem Druckanstieg in der Flüssigkeit. Der erste Term resultiert aus der wandnormalen Komponente eines extern angelegten elektrischen Feldes. Verursacht die wandnormale Komponente des Feldes eine elektrische Kraft auf die Wand zu, so ergibt sich ein Druckanstieg zur Wand hin. Weist die elektrische Kraft von der Wand weg, so fällt der Druck zur Wand hin ab.

3 Simulationsergebnisse

In diesem Kapitel werden die bisher erzielten Simulationsergebnisse vorgestellt und diskutiert.

3.1 Elektrisch erregte Wirbelstraße

Die Streckung und Auffaltung der Austauschfläche zwischen den zu mischenden Flüssigkeiten ist entscheidend für die Effizienz eines Verfahrens zum Mischen von Flüssigkeiten. In makroskopischen Strömungen kann dies z.B. durch mechanische Rühranlagen oder durch Turbulenz in der Strömung erreicht werden. Auf mikroskopischen Abmessungen unter einem Millimeter sind mechanische, bewegte Komponenten jedoch kaum realisierbar, und die Reynolds–Zahl ist in Mikromischer– Strömungen so klein, daß Turbulenz als Mittel zur Vermischung entfällt.

Die hier vorgestellte Methode zur Vermischung beruht ebenfalls auf der Streckung und Auffaltung der Austauschfläche. Dabei wird die Tatsache ausgenutzt, daß von außen eingebrachte, elektrische Kräfte eine Mikroströmung im Bereich der elektrischen Doppelschicht beeinflussen. Mit Hilfe dieser Kräfte sollen Teile der zu mischenden Flüssigkeiten quer zur Hauptströmungsrichtung bewegt werden. Dadurch entstehen Flüssigkeitssträhnen, die in die Hauptströmung getrieben werden und so eine Auffaltung der Austauschfläche ermöglichen.



Abbildung 3.1: Wirkung elektrisch erzeugter Flüssigkeitssträhnen.

Zur Erzeugung solcher Flüssigkeitssträhnen benötigen wir Wände, welche senkrecht oder zumindest in einem großen Winkel zur Haupströmungsrichtung stehen, siehe Abbildung 3.1. In der Nähe dieser Wände beschleunigen die elektrischen Kräfte eine wandparallele Strömung, welche so in die Haupströmung eintritt und eine Auffaltung der Austauschfläche bewirken kann.

In einer ersten Anwendung dieser Methode wird die Strömung in einem Kanal mit eingebautem Zylinder betrachtet. Dies ist zwar auf Mikro–Abmessungen technisch schwierig herzustellen, läßt aber den Vergleich mit Wohlbekanntem (Karmansche Wirbelstraße) zu, so daß man einen Anhaltspunkt zur Beurteilung der Ergebnisse hat. Abbildung 3.2 zeigt einen Mikromischer mit zwei Zuführungen für die zu mischenden Flüssigkeiten, dem Zylinder in der Mischstrecke und dem Auslaß für



Abbildung 3.2: Mögliche Konfiguration eine Mikromischers.

das Gemisch. Hier wird nur der Teil der Mischers simuliert, welcher den Zylinder und die Abführstrecke für das Gemisch enthält. Abbildung 3.3 zeigt das Rechengebiet für die zeitabhängige Berechnung der elektrisch erregten Wirbelstraße. Mit Hilfe eines zeitabhängigen, externen elektrischen Feldes wird eine Kraft $F_{el}(t)$ aufgebracht, welche (ebenso wie das Feld) senkrecht zur Kanalrichtung steht. Deshalb gibt es keine Kraftkomponente parallel zu den Kanalwänden, und es wird keine elektrisch angetriebene Strömung parallel zu den Kanalwänden auftreten. In der näheren Umgebung des Zylinders hingegen erfährt die Flüssigkeit eine elektrische Kraft in y-Richtung, wodurch in der Zylinderumgebung eine elektrisch getriebene Strömung entsteht. In Abhängigkeit von der momentanen Feldrichtung wird Flüssigkeit entweder nach oben oder nach unten vom Zylinder weg als Strähne in die Hauptströmung getrieben. In Abbildung 3.4 ist der sinusförmig angenommene Verlauf der elektrischen Kraft F_{el} über der Zeit aufgetragen. Für zwei ausgezeichnete Zeitpunkte (maximale elektrische Kraft nach oben und nach unten) ist das Stromlinienfeld der Zylinderumströmung gezeigt. Weist die elektrische Kraft nach oben (unabhängig von ihrem Betrag), so befindet sich der Staupunkt der Umströmung immer genau am untersten Punkt des Zylinders, während der hintere Ablösepunkt der Umströmung immer genau am obersten Punkt des Zylinders sitzt. Von diesem Punkt löst nun die Strähne ab und wird von der Hauptströmung mitgenommen. Dabei wird die Strähne zu einem Wirbel aufgerollt, welcher stromab geschwemmt wird. Analoge Vorgänge lassen sich beobachten, wenn die elektrische Kraft am Zylinder nach unten weist. Dieses diskrete Verhalten von Stau- und Ablösepunkt resultiert aus der Verwendung der asymptotischen Randbedingungen (2.36,2.37); in der Realität wandern die Punkte natürlich kontinuierlich über die Zylinderoberfläche. An den Kanalwänden ist die Haftbedingung erfüllt, da dort in der gewählten Konfiguration (elektrisches Feld genau senkrecht zu den Kanalwänden) keine elektrischen Kräfte wirken. Am Einlaß wird eine konstante normale Geschwindigkeit vorgegeben. Am Auslaß wird eine konvektive Randbedingung verwendet, welche unphysikalische Reflektionen von Wirbeln am Ausströmrand verhindert. Zur Verringerung des numerischen Aufwandes wird am Zylinder die elektrische Doppelschicht nicht explizit räumlich aufgelöst. Vielmehr werden die asymptotisch abgeleiteten Randbedingungen (2.36, 2.37) verwendet.

Abbildung 3.5 zeigt Ergebnisse von Simulationen ohne und mit elektrischem Feld für verschiedene Werte der dimensionslosen Anregungsfrequenz $fd_{Zyl}/u_0 = 0.17, 0.1, 0.07, 0.05.$



Abbildung 3.3: Mikromischer-Kanal mit eingebautem Zylinder.



Abbildung 3.4: Umströmung des Zylinders.

Dabei bedeutet f die Anregungsfrequenz, d_{Zyl} den Durchmesser des Zylinders und u_0 die mittlere Strömungsgeschwindigkeit. Die Zylinder-Reynolds-Zahl beträgt $u_0d_{Zyl}/\nu =$ 10 mit $u_0 = 0.1 m/s$, $d_0 = 100 \ \mu m$, $\nu = 10^{-6} \ m^2/s$, und die Amplitude der Feldstärke ist $E_y = 50 \ V/mm$ sowie $q_W = 0.03 \ C/m^2$, $l_D = 1 \ \mu m$, $\mu = 10^{-3} \ Pas$. Die Feldstärke wird mit einer Sinusfunktion in der Zeit variiert (siehe Abbildung 3.4). Das Teilbild 3.5a zeigt zum Vergleich den Fall ohne elektrisches Feld. Erwartungsgemäß entsteht bei der niedrigen Zylinder-Reynolds-Zahl keine selbsterregte Karmansche Wirbelstraße. Wie die oben blau und unten rot eingefärbten Farbstoff-Streichlinien zeigen, findet keine konvektive Vermischung der oberen und der unteren Kanalhälfte statt, und der Mischvorgang ist auf diffusive Effekte an der horizontalen Austauschfläche zwischen den Flüssigkeiten beschränkt. Unter dem Einfluß elektrischer Kräfte hingegen vergrößern die wechselseitig ablösenden Wirbel die Austauschfläche zwischen den Flüssigkeiten und falten sie auf; dabei hängt die Stärke des Effektes von der Stärke des elektrischen Feldes ab. Die Teilbilder 3.5b,c,d,e zeigen die Ergebnisse für die dimensionslosen Frequenzen 0.17, 0.1, 0.07, 0.05. Im Teilbild 3.5b findet ebenfalls wenig Vermischung der beiden Teilströme statt. Die Teilbilder 3.5c und 3.5d zeigen ein intensiveres Ineinanderfließen der roten und der blauen Farbstoffe, während sich die Vermischung in Teilbild 3.5e wieder verschlechtert. Offensichtlich gibt es eine optimale Anregungsfrequenz, bei der die Vermischung maximal wird.

Dies wird auch in Abbildung 3.6 deutlich. Hier wird ein imaginärer Farbstofffaden bekannter Länge l_0 auf die Austauschfläche zwischen den zu mischenden Flüssigkeiten gelegt, siehe Teilbild 3.6a. Es wird angenommen, daß der Farbstoff masselos ist und der Strömung ohne Schlupf folgt; unter diesen Annahmen verbleibt der Faden immer genau auf der Austauschfläche zwischen den Flüssigkeiten. Während der Faden stromab transportiert wird, erfährt er der Strömung entsprechend eine Längung und Auffaltung. Nach einer bestimmten Zeit T wird die Länge des Farbstofffadens l_T bestimmt und mit der ursprünglichen Länge l_0 verglichen. Dieses Verhältnis l_T/l_0 ist ein Maß für die Vergrößerung der Austauschfläche zwischen den Flüssigkeiten. Die Teilbilder 3.6b,c,d,e entsprechen den Strömungskonfigurationen in den Teilbildern 3.5b,c,d,e mit den dimensionslosen Anregungsfrequenzen 0.17, 0.1, 0.07, 0.05. Die Länge des Fadens wird für alle Fälle nach 45 dimensionslosen Zeiteinheiten bestimmt und mit der Ausgangslänge l_0 verglichen. In den vier Fällen werden Verlängerungen des Fadens um die Faktoren 4.26, 5.63, 5.57, 4.41 gemessen. Dieses Ergebnis unterstreicht die obige Vermutung, daß eine optimale Anregungsfrequenz existiert, denn offensichtlich bewirkt die Anregung mit der dimensionslosen Frequenz 0.1 die größte Längung des Fadens.

Eine weitere Möglichkeit, die Vermischung zu beurteilen, ist das Konzentrationsfeld. Dabei wird ein Teilstrom der Flüssigkeit mit einem löslichen Stoff beaufschlagt, während der andere Teilstrom diesen Stoff nicht enthält. Durch Skalierung ergeben sich die Konzentrationen $c_1 = 1$ und $c_2 = 0$ in den beiden Teilströmen. In der Strömung verteilt sich der Stoff durch Konvektion und Diffusion in der Flüssigkeit. Perfekte Vermischung ist dann erreicht, wenn der Stoff im Querschnitt des Auslasses gleichmäßig in der Flüssigkeit verteilt ist. Dort erwarten wir die Konzentration $\overline{c} = 0.5$. In Abbildung 3.7 werden die Konzentrationen $c_1 = 1$ und $c_2 = 0$ in den beiden Flüssigkeiten durch die Farben rot und blau dargestellt; grüne Farbe entspricht einer Konzentration von $\bar{c} = 0.5$. Die Zylinder-Reynolds-Zahl beträgt $Re_{Zyl} = 10$, die Amplitude der Feldstärke ist $E_y = 5 V/mm$. Größere Feldstärken sind numerisch nur auf extrem verfeinerten Gittern zu berechnen. Dies hängt mit der Zell-Peclet–Zahl $Pe_Z = UL/D$ zusammen, welche für stabile numerische Lösungen das Kriterium $Pe_Z < 2$ erfüllen muß. Dabei bedeutet U eine mittlere Geschwindigkeit in der Zelle, L eine mittlere Länge für die Zelle, und D den Stoffdiffusionskoeffizienten. Aufgrund großer elektrischer Felder wird die Geschwindigkeit U in Zylindernähe groß, so daß eine Reduktion von L erforderlich wird. Die Rechenzeit für diese Simulation liegt ohnehin schon bei mehreren Tagen, so daß auf eine weitere Gitterverfeinerung verzichtet wird. Die Schmidt–Zahl hat in dieser Rechnung einen Wert von $Sc = \nu/D = 100$, wobei ν die kinematische Viskosität der Flüssigkeiten



Abbildung 3.5: Farbstoff–Streichlinien in der Zylinderumströmung.

und D die Stoff-Diffusionskonstante bedeutet. Alle Flüssigkeitseigenschaften sind in beiden Teilströmen gleich angenommen. In Abbildung 3.7 finden sich schwache unphysikalische Oszillationen der berechneten Konzentration, welche auf das zu grobe Gitter zurückzuführen sind. Es wird dennoch davon ausgegangen, daß die numerische Rechnung die physikalischen Vorgänge in guter Näherung richtig wiedergibt. Es ist eine deutliche Vergrößerung der Austauschfläche zwischen den Flüssigkeiten aufgrund der stromab schwimmenden Wirbel zu erkennen; eine weitere Streckung



Abbildung 3.6: Farbstofflinien auf der Austauschfläche zwischen den Flüssigkeiten.

wird durch die Verzögerung der Strömung nahe den Kanalwänden (Haftbedingung an den Wänden) verursacht.

Betrachtet man die Mikrokanal–Strömung mit elektrisch erregter Wirbelstraße aus Sicht der Systemtheorie, so stellt sich die Frage, unter welchen Umständen sich Lösungsverzweigungen (Bifurkationen) – eventuell bis hin zu chaotischem Verhalten – einstellen. Für bestimmte Werte eines äußeren Parameters kann sich eine periodi-



Abbildung 3.7: Konzentrationsfeld im Mikromischer mit elektrisch erregter Wirbelstraße.

sche, wohlgeordnete Systemantwort einstellen, welche sich im Phasenraum zweier oder mehrerer abhängiger Variablen als sog. Grenzzyklus (= geschlossene Trajektorie) darstellen läßt. Überschreitet dieser äußere Parameter einen Schwellwert, so kann sich die Systemantwort nicht nur quantitativ, sondern auch qualitativ ändern. Diese abrupte Änderung des Zeitverhaltens muß sich im Verlauf der Trajektorie im Phasenraum widerspiegeln. Es können mehrere solche Schwellwerte für den äußeren Parameter existieren, und somit auch mehrere qualitative Änderungen des Lösungsverhaltens auftreten. Eine solche Folge von Bifurkationen kann letztendlich zum chaotischen Verhalten des Systems führen. Im hier betrachteten Fall ist es naheliegend, als abhängige Variablen die Geschwindigkeitskomponenten der Strömung zu verwenden. Als äußerer Parameter bietet sich die Amplitude des elektrischen Feldes E_y an. Abbildung 3.8 zeigt die Lage der Meßstelle (X_0, Y_0) zur Aufnahme der Zeitreihen $U(X_0, Y_0, T)$ und $V(X_0, Y_0, T)$ im Strömungsgebiet. Die Trajektorien im Phasenraum für zwei verschiedene Amplituden $E_y = 50 V/mm$ und $E_y = 100 V/mm$ des elektrischen Feldes sind in Abbildung 3.9 gezeigt. Der linke Phasenraum zeigt einen Grenzzyklus für kleine Anregungsamplitude 50 V/mm. Das zugehörige Frequenzspektrum zeigt klar die Anregungsfrequenz 0.1. Rechts hingegen zeigt die Trajektorie im Phasenraum, daß für eine Anregungsamplitude von 100 V/mm ein chaotisches Zeitverhalten ohne erkennbare Struktur vorliegt. Dies wird auch durch das Frequenzspektrum belegt. Die äußere Anregungsfrequenz 0.1 dominiert nicht mehr; stattdessen findet man ein breites, kontinuierliches Frequenzband, wobei das Vorhandensein von Frequenzen kleiner als 0.1 auf eine vorausgegangene Periodenverdopplungskaskade hinweist, ein typisches Merkmal für den Ubergang zum Chaos.



Abbildung 3.8: Lage der Meßstelle für die Aufnahme der Zeitreihen $U(X_0, Y_0, T)$ und $V(X_0, Y_0, T)$.

Um zu mischen, ist eine chaotische Strömung ideal, denn die Austauschfläche zwischen den zu mischenden Flüssigkeiten wächst mit der Zeit stark an; auch Turbulenz, welche in Mischeranlagen auf makroskopischem Maßstab gute Vermischung ermöglicht, ist in der Regel das Resultat chaotischer Vorgänge. Ob es möglich oder



Abbildung 3.9: Phasenraum der Geschwindigkeitskomponenten U, V und zugehörige Frequenzspektren.

notwendig ist, chaotische Phänomene auszunutzen, um optimale Vermischung zu erreichen, hängt von der konkreten Problemstellung ab.

3.2 Elektrisch erregte Kanalauffaltung

Bisher haben wir die Wirkung von Einbauten (Zylinder) im Mischungskanal betrachtet. Vom Standpunkt der Fertigung aus sind solche Einbauten schwierig zu realisieren. Eine weitere Möglichkeit ist die Auffaltung des Kanals, um so elektrische Grenzschichten zu erhalten, die rechtwinklig zur Hauptströmung stehen. Die Abbildungen 3.10 und 3.11 zeigen die Konzentrationsverteilung in einem aufgefalteten Kanal ohne und mit elektrischer Erregung. Wie schon in Abbildung 3.7 steht rot für $c_1 = 1$, blau für $c_2 = 0$ und grün für $c \simeq 0.5$. Die Kanal-Reynolds-Zahl, gebildet mit der Kanalweite $d_0 = 100 \ \mu m$, beträgt $Re_{d_0} = 10$. Das elektrische Feld hat eine Amplitude von $E_y = 20 V/mm$, ist senkrecht ausgerichtet $(E_x = 0)$ und oszilliert sinusförmig in der Zeit; alle anderen Simulationsdaten $(u_0, \mu, \nu, q_W, l_D)$ sind identisch mit denen, die auch bei der elektrisch erregten Wirbelstraße in Kapitel 3.1 verwendet wurden. Auch bei diesen Simulationen beträgt die Schmidt-Zahl Sc = 100. Das Gitter ist aus Rechenzeitgründen so grob gewählt, daß noch leichte Oszillationen im Konzentrationsfeld auftreten. Die Tendenz wird jedoch deutlich: Ohne elektrisches Feld bleiben die beiden Flüssigkeiten aufgrund der niedrigen Reynolds–Zahl voneinander getrennt, so daß Diffusion nur eine geringe Vermischung bewirken kann. Die Beeinflussung der Strömung durch externe elektrische Kräfte hingegen bewirkt eine sehr starke Auffaltung der Austauschfläche zwischen den beiden Flüssigkeiten und ermöglicht so eine deutlich bessere Vermischung.



Abbildung 3.10: Aufgefalteter Kanal ohne elektrisches Feld.



Abbildung 3.11: Aufgefalteter Kanal mit elektrischem Feld.

Offensichtlich reicht schon eine einzige Kanalauffaltung aus, um die Vermischung zweier Flüssigkeiten mittels elektrischer Kräfte wesentlich zu verbessern, obwohl die angelegte Amplitude der Feldstärke mit 20 V/mm sehr moderat bleibt. Eine Hin-



Abbildung 3.12: Trajektorie im Phasenraum für die Strömung im aufgefalteten Kanal.

tereinanderschaltung mehrerer solcher Auffaltungen würde eine weitere, deutliche Verbesserung bewirken.

Die Strömung im aufgefalteten Kanal ist bis zum Ende des Simulationszeitraumes nicht chaotisch. Abbildung 3.12 zeigt die Trajektorie im Phasenraum, gebildet aus den Geschwindigkeitskomponenten an einem festen Ort im Strömungsgebiet nahe dem Auslaß. Der Anlaufvorgang ist noch nicht abgeschlossen, weshalb noch keine geschlossenen Trajektorien auftreten. Es ist jedoch deutlich zu erkennen, daß es sich bis zu diesem Zeitpunkt um eine periodische Strömung ohne chaotisches Verhalten handelt.

Auch im Fall der elektrisch erregten Wirbelstraße im Mikrokanal läßt sich der Grad der Vermischung noch weiter steigern, ohne die Feldstärke zu erhöhen. Beispielsweise können mehrere Einbauten im Kanal angebracht werden, in einer bestimmten Anordnung und in einem bestimmten Abstand zueinander, so daß die Vermischung durch Resonanz optimal wird. Auch der Versperrungsgrad der Einbauten, also ihre Größe im Verhältnis zur Kanalweite, hat einen Einfluß auf die Vermischung. Bei großen Einbauten entstehen in den engen Spalten zwischen Einbauten und Kanalwänden hohe Übergeschwindigkeiten, welche die Trägheitseffekte in der Strömung betonen.

4 Zusammenfassung und Ausblick

Es wird ein asymptotisches Modell für die Behandlung elektrischer Doppelschichten (EDL) abgeleitet und diskutiert. Die EDL wird ausgenutzt, um die Vermischung von Flüssigkeiten im Mikromischer zu optimieren. Mittels von außen angelegter, zeitabhängiger elektrischer Felder wird die Austauschfläche zwischen den Flüssigkeiten vergrößert und so die Vermischung verbessert. Das asymptotische Modell wird in Form einer modifizierten Randbedingung in die numerischen Simulationen eingebracht, um den Rechenaufwand zu verringern. Weiterhin werden die Vermischungsgüte und –effizienz charakterisiert und bewertet, und es werden weitere Verbesserungsmöglichkeiten für das Design von Mikromischern aufgezeigt.

Wie im Verlauf der bisherigen Arbeiten deutlich wird, bedeutet die volle numerische Simulation einer Strömung mit Konzentrationsgleichung einen erheblichen Aufwand; Parametervariationen sind daher nicht effizient durchzuführen. Zur Verringerung des numerischen Aufwandes wird ein niedrig-dimensionales Modell entwickelt, mit dem das Verzweigungsverhalten der elektrisch angeregten Strömung bei Variation des äußeren Parameters (Amplitude des elektrischen Feldes) wesentlich effektiver untersucht werden kann. Außerdem werden bessere, zuverlässige Kriterien zur Bewertung der Vermischungsgüte erarbeitet. Dies wird mittels Ortskorrelationsfunktionen und Ortsfrequenzspektren realisiert.

Literatur

- C. Effenhauser. Integrated Chip-Based Microcolumn Separation Systems. In: A. Manz und H. Becker (Hrsg.), *Microsystem Technology in Chemistry and Life Sciences*, S. 51–82. Springer, 1999.
- [2] Ehrhard, P. und Meisel, I. Asymptotic model for the hydrodynamic treatment of electrical double layers at solid walls in microchannels, GAMM 2002, 25.– 28.03.2002, Augsburg.
- [3] Ehrhard, P. und Meisel, I. Strömungs– und Transportprozesse in Mikrokanälen, FZKA 6680, 2002.
- [4] Hunter, R.J. Zeta Potential in Colloid Science: Principles and Applications. Academic Press, 1981.
- [5] Janssens-Maenhout, G.G.A. und Schulenberg, T. Linear and nonlinear interface model based on the electric double layer theory, FZKA 6669, 2002.
- [6] Meisel, I. und Ehrhard, P. Numerische Simulationen zu einer elektrisch erregten Wirbelstraße mit Anwendung für einen Mikromischer, GAMM 2002, 25.– 28.03.2002, Augsburg.
- [7] Meisel, I. und Ehrhard, P. Simulation of electrically-excited flows in microchannels for mixing application, MSM 2002, 21.–25.04.2002, San Juan, Puerto Rico, USA.
- [8] Meisel, I., Ehrhard, P., und Schulenberg, T. Mikromischer für Flüssigkeiten und Verfahren zum Mischen von Flüssigkeiten, Patentanmeldung 10213003.5.