

Analiza wpływu ścianki na dyfuzję nanocząstek w mikrokanale

Magistrant: Krzysztof Zembrzycki

Opiekun: Prof. Dr hab. Tomasz Kowalewski

Instytut Podstawowych Problemów Techniki PAN
Zakład Mechaniki i Fizyki Płynów

Plan seminarium

Wstęp:

- przepływ w mikrokanale
- metody pomiaru poślizgu
- ruchy Browna przy ścianie

Symulacje numeryczne:

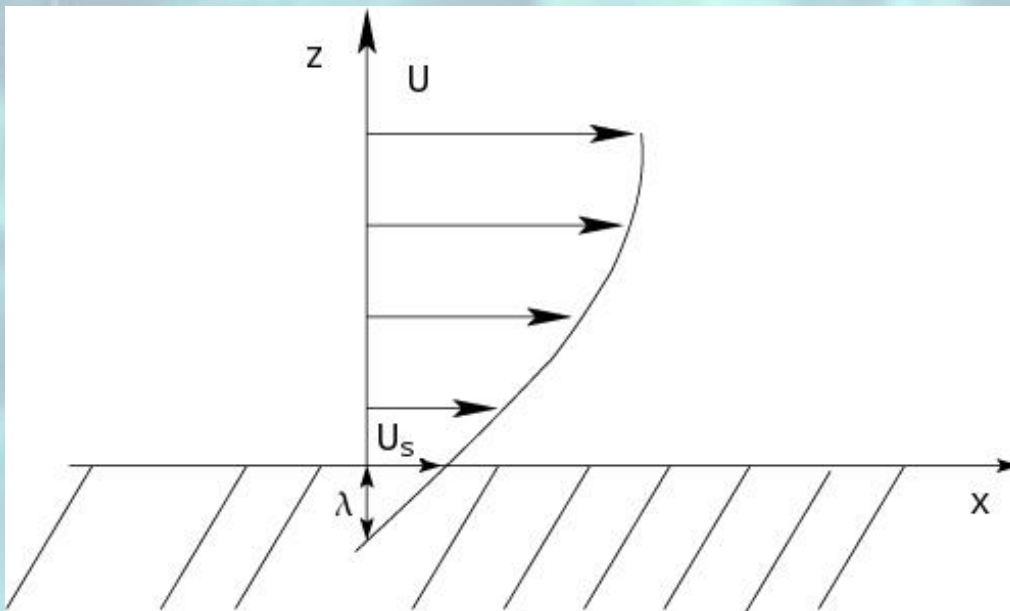
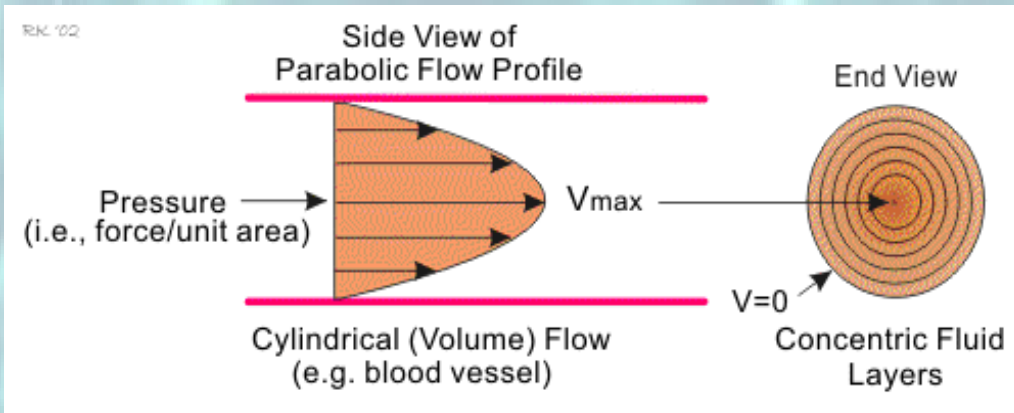
- model kanału
- wyniki symulacji

Pomiary doświadczalne:

- środek kanału
- ścianka kanału
- komputerowa analiza obrazów
- wyniki pomiarów

Konkluzje

Efekt ścianki



Model standardowy:

- brak poślizgu $V_s = 0$
- paraboliczny rozkład prędkości płynu

Najnowsze badania:

- prędkość płynu przy ścianie $V_s \neq 0$

Jak zmierzyć pole prędkości?

Pomiary poślizgu

Najczęściej używane metody:

- PIV (ang. Particle Image Velocimetry)
- FCS (ang. Fluorescence Correlation Spectroscopy)
- SFA (ang. Surface Force Apparatus)

r. 2002, 2004

PIV: <i>Tretheway</i> [19.79,80]	Glass	Water	$\approx 0^\circ$	–	10^2 s^{-1}	No-slip
	Glass+OTS		120°	2 \AA		$0.9 \mu\text{m}$
PIV: <i>Joseph</i> [19.72] r. 2005	Glass	Water	$\approx 0^\circ$	5 \AA (rms)	10^2 s^{-1}	50 nm
	Glass+OTS		95°			No-slip
	Glass+CDOS		95°			50 nm
SP: <i>Churaev</i> [19.66] r. 2002	Quartz	KCl solutions	–	2 nm (pp)	10^5 s^{-1}	No-slip
	Quartz+TMS	KCl solutions	$80-90^\circ$	25 nm (pp)		5–8 nm
FC: <i>Lumma</i> [19.74] r. 2003	Mica	Water	–	15 nm (pp)	10 s^{-1}	$0.5-0.86 \mu\text{m}$
	Glass	Water	$5-10^\circ$			$0.6-1 \mu\text{m}$
		NaCl solutions				

Ruchy Browna

Współczynnik dyfuzji D :

$$D = \frac{k_B T}{3 \pi \mu d_p}$$

T – temperatura płynu

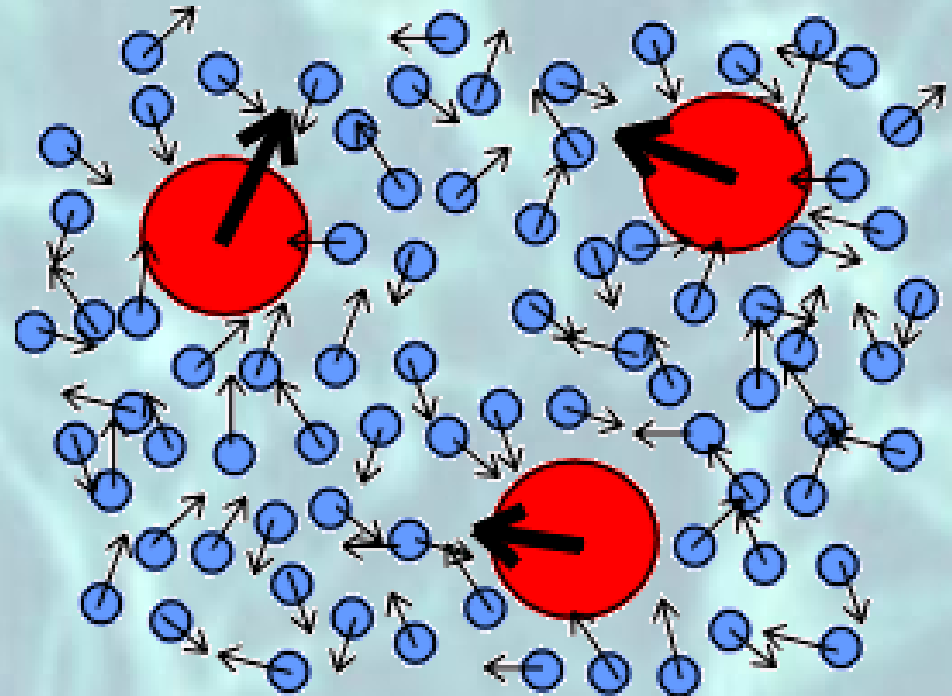
μ - lepkość płynu

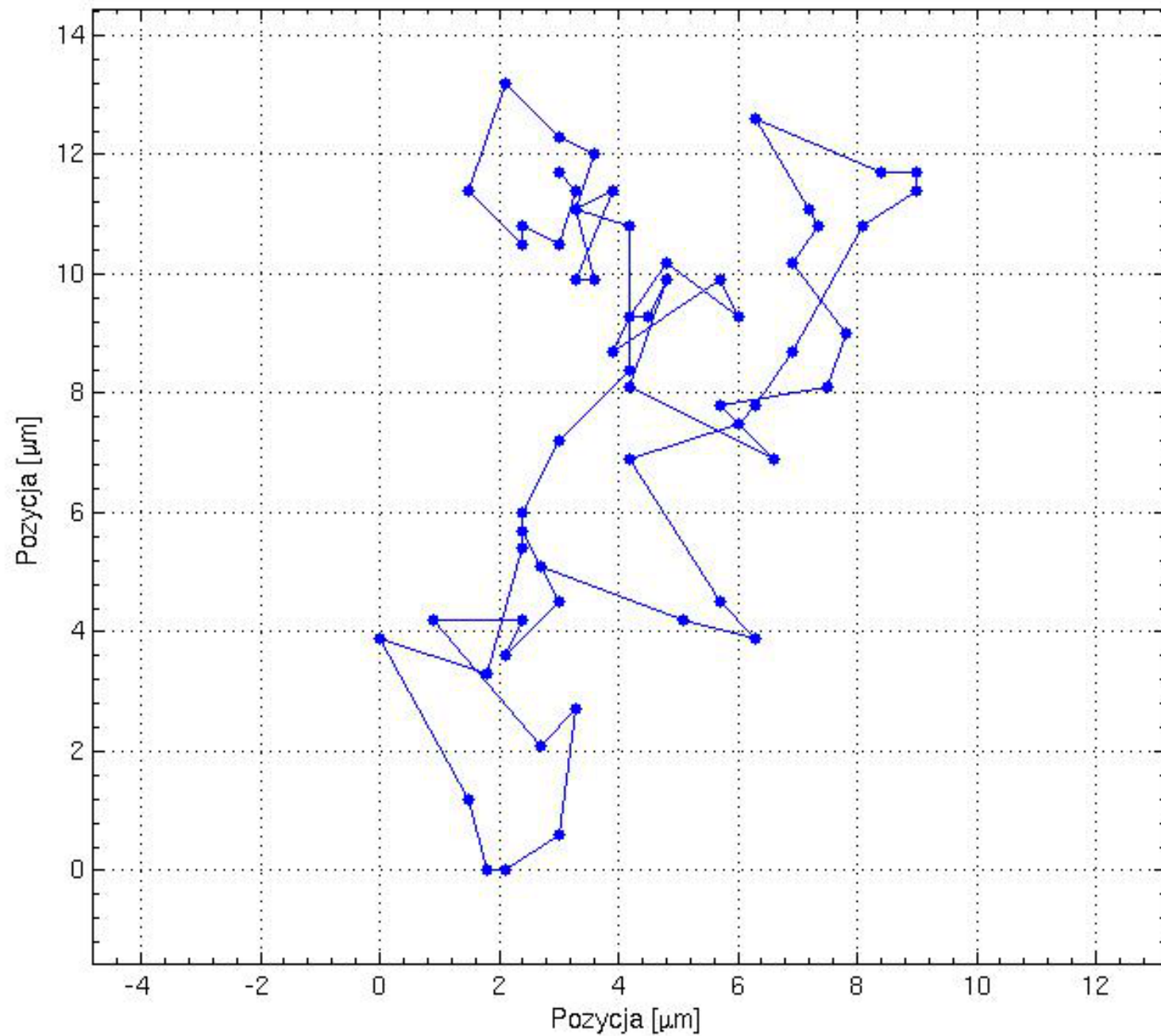
d_p – średnica cząstki

- średnia droga:

$$\langle s^2 \rangle = a D \Delta t$$

$a = 2,4,6$ - współczynnik
zależny od wymiaru





Ruchy Browna przy ścianie

$$D_{\perp} = \beta_{\perp} D,$$

$$D_{\parallel} = \beta_{\parallel} D,$$

Model autorstwa E. Lauga i T. Squires (LS)

(metoda Stokeslet'ów)

$$\beta_{\perp} = 1 - \frac{3d_p}{8h} [1 + 2I(Kn)] + O\left(\frac{d_p^3}{8h^3}\right),$$

$$\beta_{\parallel} = 1 + \frac{3d_p}{16h} [1 - 2J(Kn)] + O\left(\frac{d_p^3}{8h^3}\right),$$

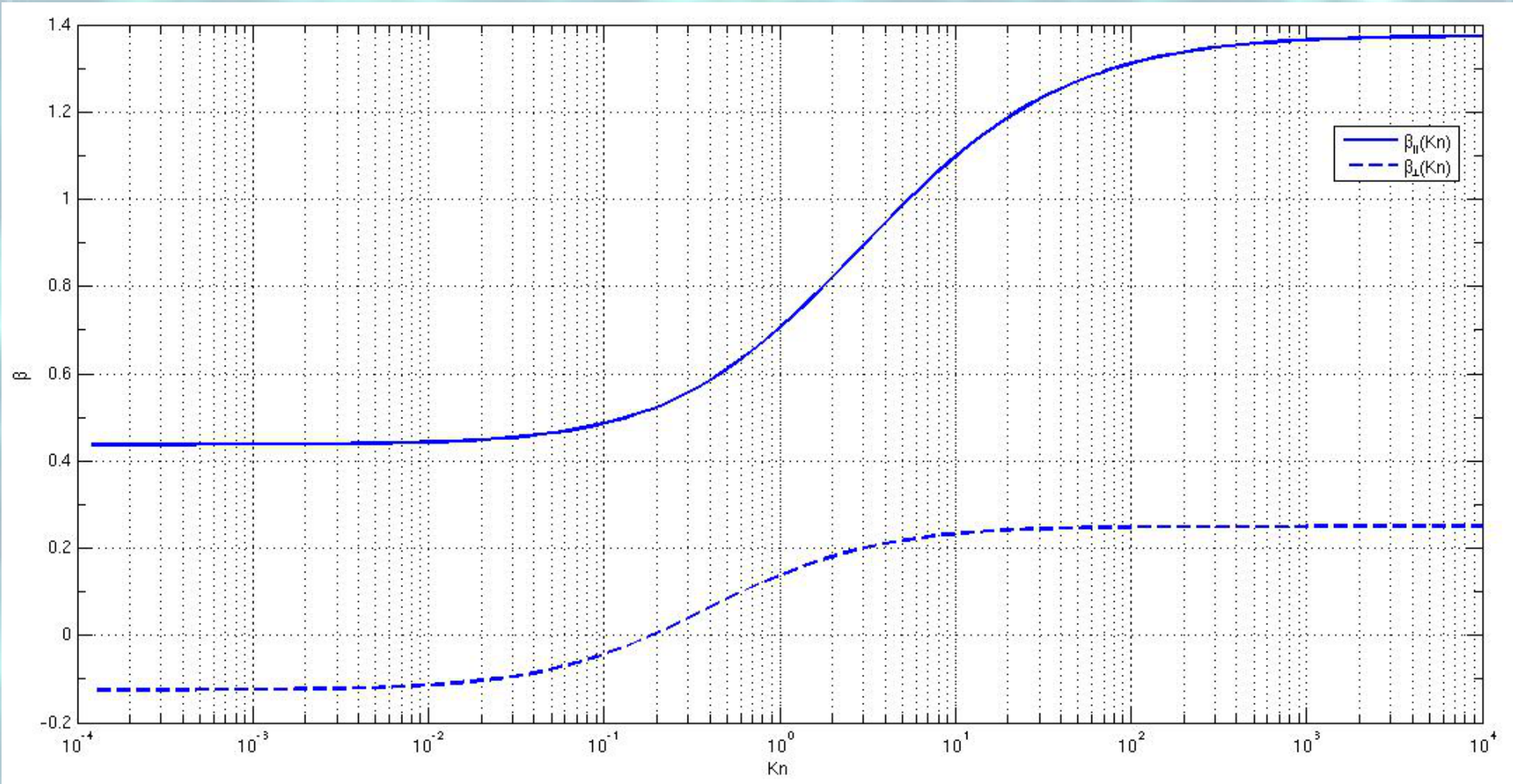
$$Kn = \frac{\lambda}{h},$$

gdzie:

λ – długość poślizgu,

d_p – średnica cząstki,

h – odległość środka cząstki od ścianki.



Wykres współczynników β_{\perp} i β_{\parallel} w funkcji liczby Knudsen (różna długość poślizgu). W obliczeniach przyjęto wartości znormalizowane do promieni cząstki, tzn. $d_p = \frac{1}{2}$, $h=1$

Symulacje numeryczne

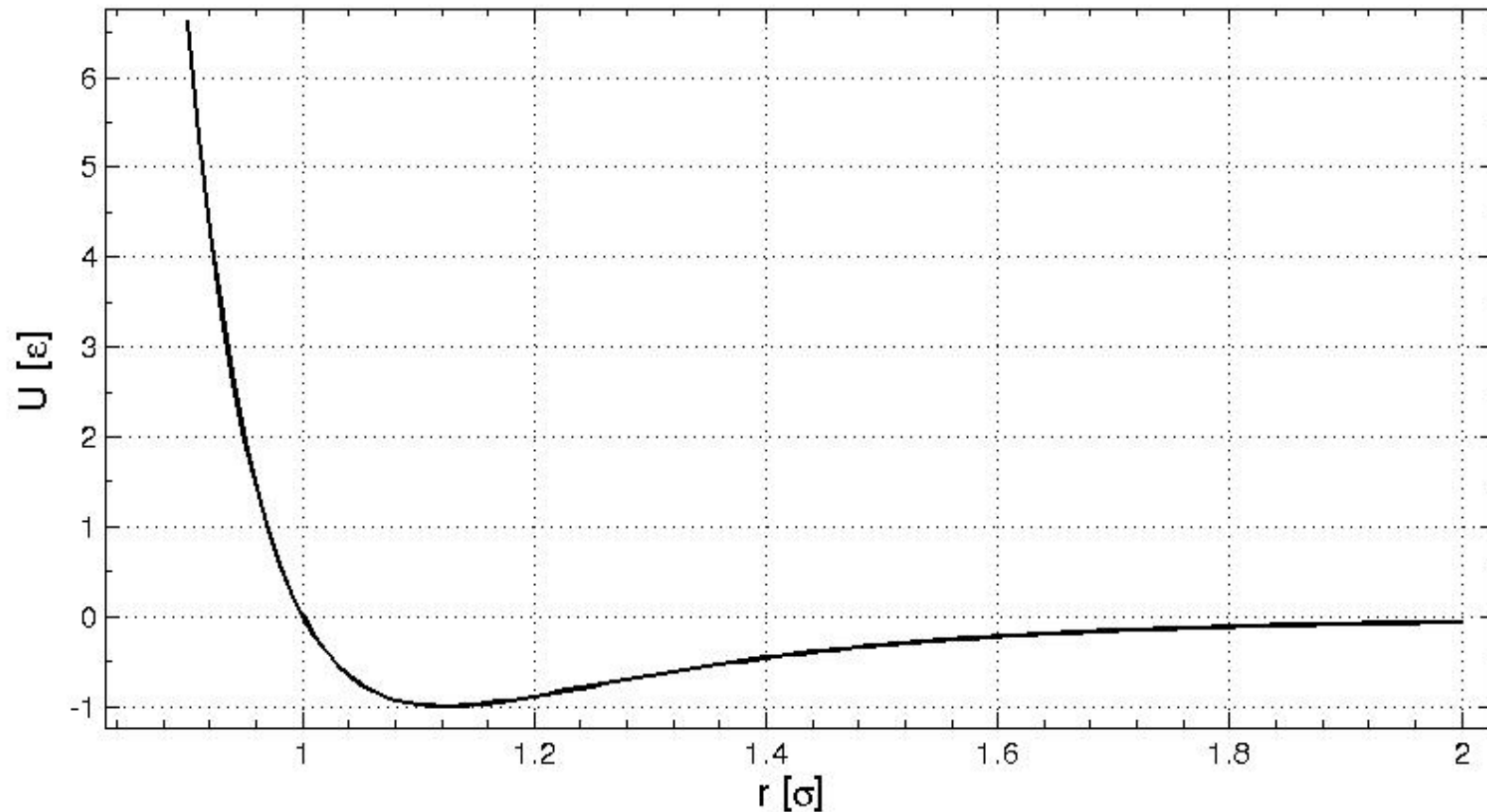
- symulacje metodą dynamiki molekularnej
- program LAMMPS (ang. Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator) w wersji z 7 lipca 2009, Sandia National Laboratories
- granularny model oddziaływań (zmodyfikowany potencjał Lennarda-Jonesa)

$$U(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right],$$

gdzie:

ϵ – głębokość studni potencjału $\left[\frac{\text{kcal}}{\text{mol}} \right]$,

σ – skończona odległość $[\text{Å}]$, dla której $U(\sigma) = 0$.



- zasady mieszania Lorentza–Berthelota:

$$\sigma_{ij} = \frac{\sigma_i + \sigma_j}{2},$$

$$\epsilon_{ij} = \sqrt{\epsilon_i \epsilon_j}.$$

Model ośrodka

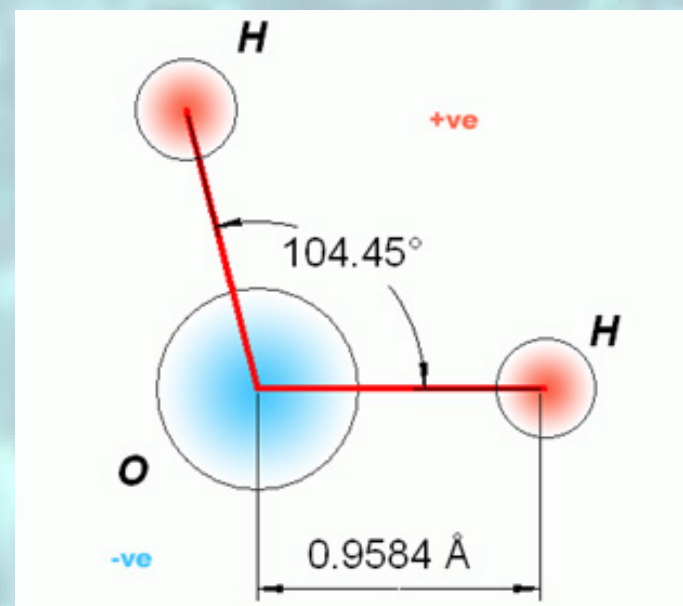
- model molekuł wody TIP4P

średnica $\phi_{H_2O} = 2.81 \text{ \AA}$ $\epsilon_{H_2O} = 0,155 \frac{\text{kcal}}{\text{mol}}$, $\sigma_{H_2O} = 3,1536 \text{ \AA}$

średni odstęp między molekułami wody wynosi 3.105 \AA

gęstość w temperaturze 298K

wynosi $18 \frac{\text{g}}{\text{mol}}$.



Model ścian oraz cząstki koloidalnej

- cząstka koloidalna: polistyren -> węgiel

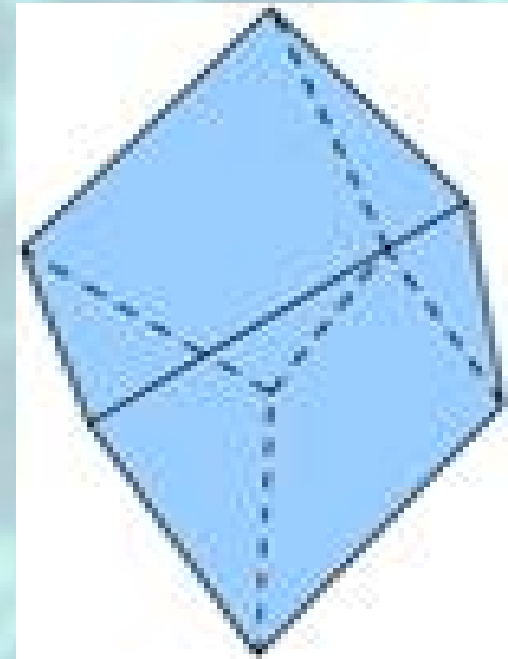
$$\epsilon_C = 0,102 \frac{\text{kcal}}{\text{mol}}, \quad \sigma_C = 3,35 \text{ \AA} \quad \phi_C = 240 \text{ \AA}$$

- ściany kwarcowe SiO_2 :

$$\epsilon_{\text{Si}} = 3,15 \frac{\text{kcal}}{\text{mol}}; \quad \sigma_{\text{Si}} = 1,84 \text{ \AA}$$

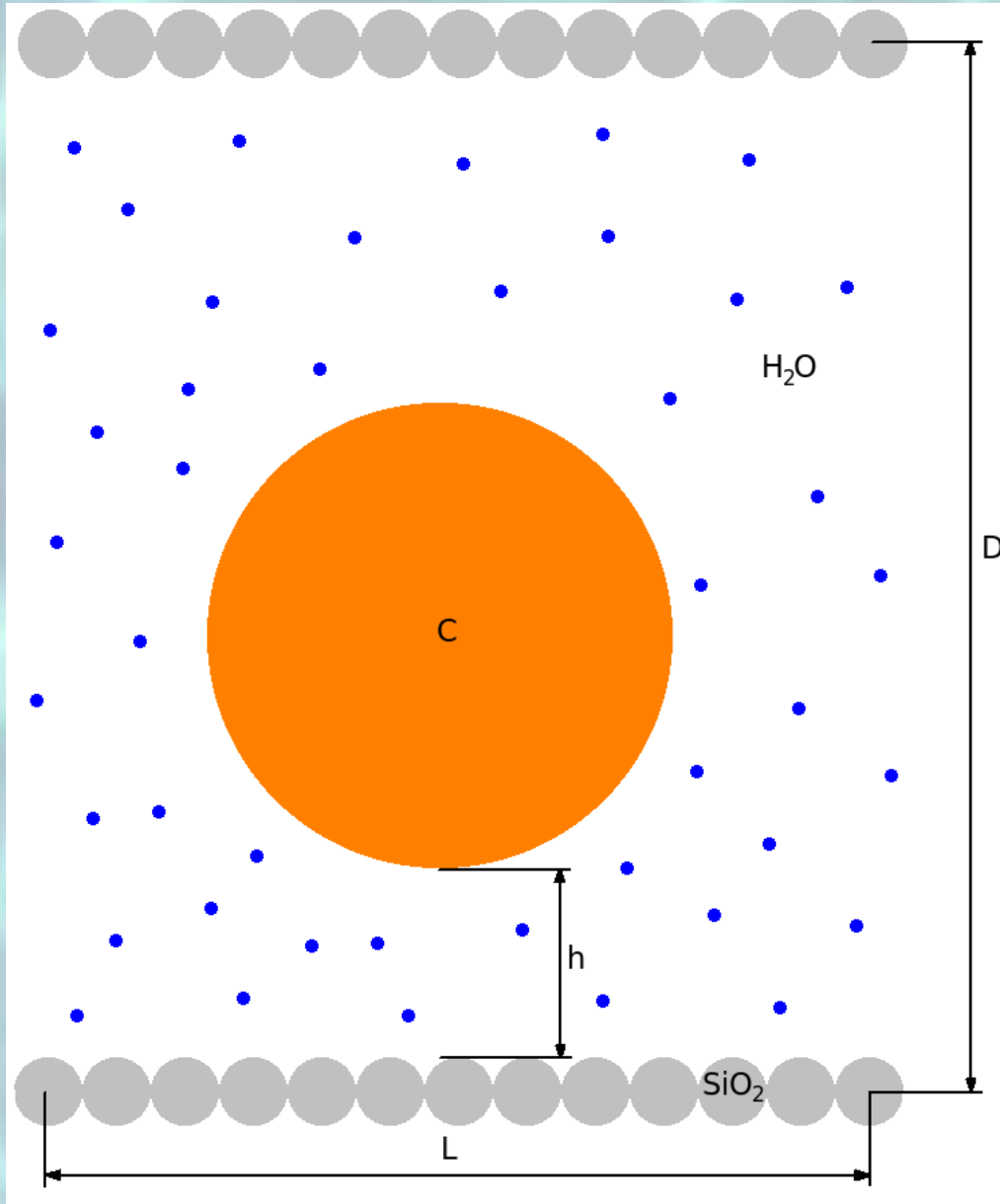
$$\epsilon_{\text{SiO}_2} = \sqrt{\epsilon_{\text{Si}} 2 \epsilon_{\text{O}}} = 0,9882 \frac{\text{kcal}}{\text{mol}},$$

$$\sigma_{\text{SiO}_2} = \frac{\sigma_{\text{Si}} + \sigma_{\text{O}}}{2} = 2,503 \text{ \AA}$$



Trapezoedr trygonalny

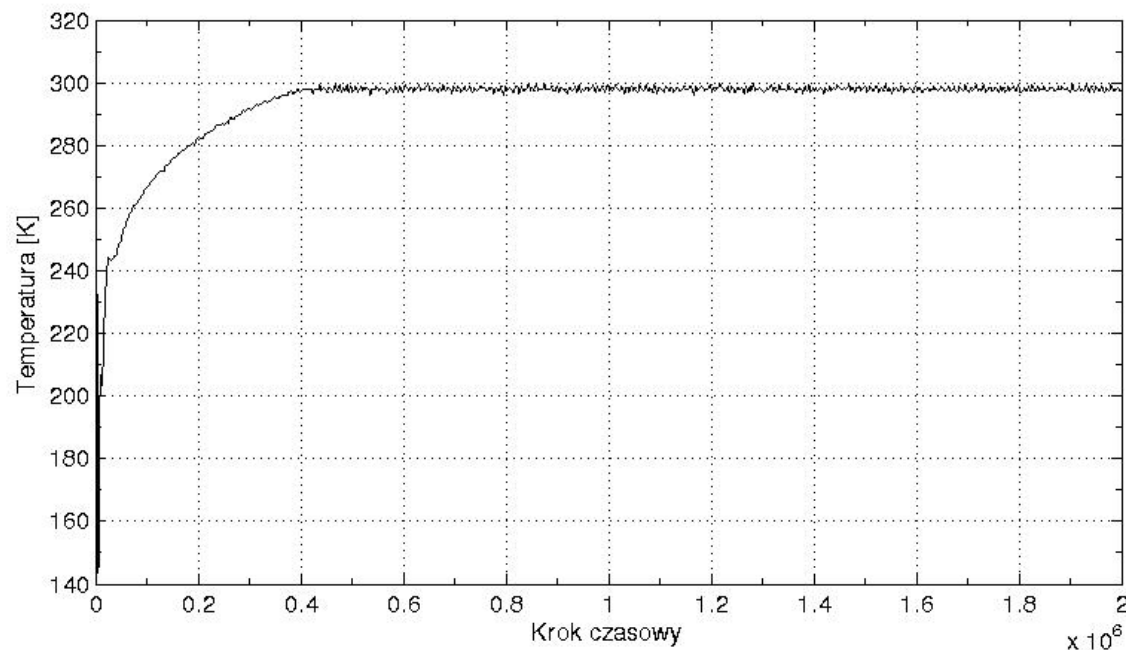
Obszar symulacji



- krok czasowy 0.01fs
- całkowita liczba cząstek ok. 243000
- liczba kroków 2000000 = 20ps
- czas obliczeń ok 72h (24 CPU)
- cząstka $R=12\text{nm}$

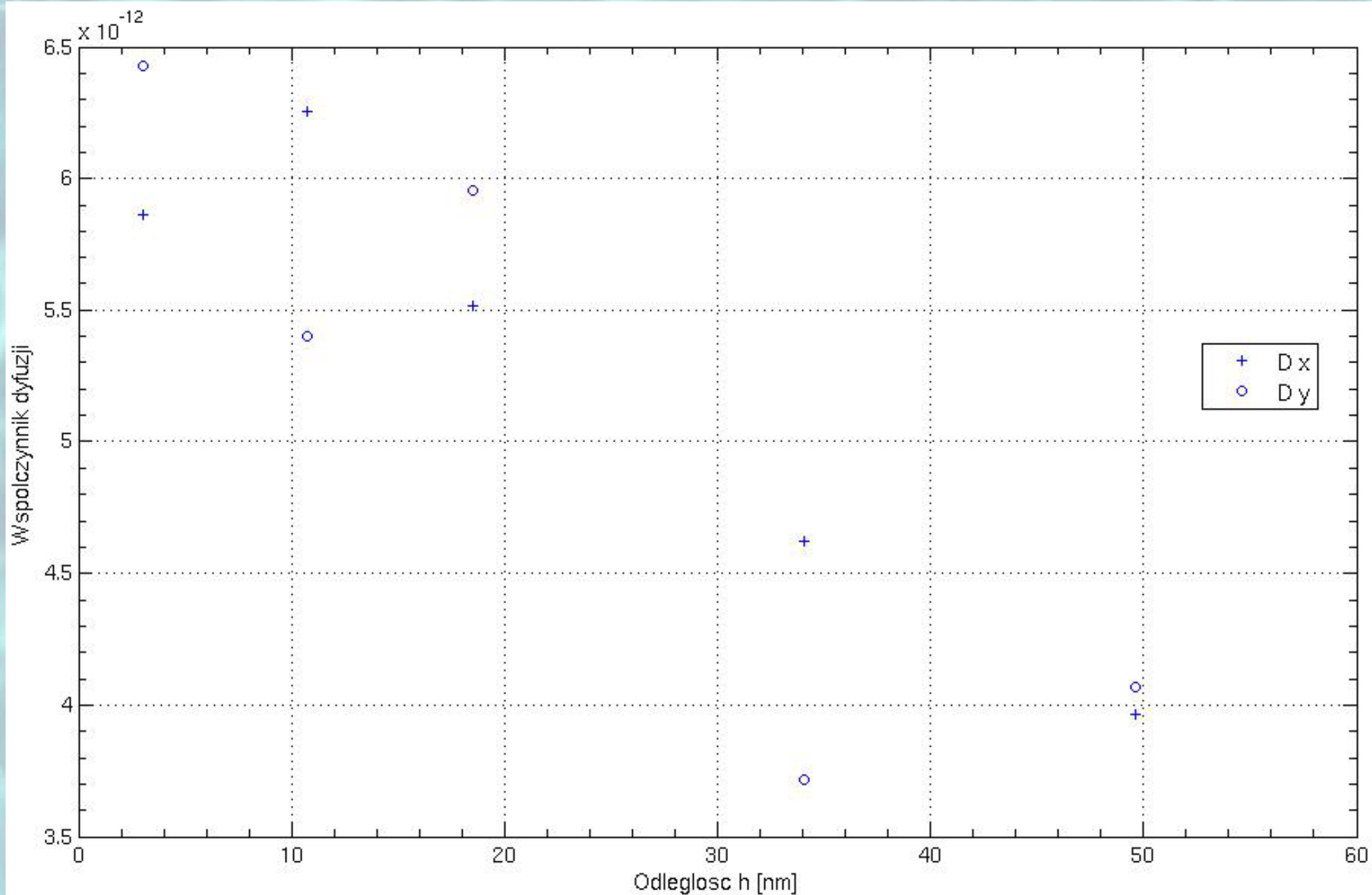
$$L = 155,25 \text{ nm} \quad D = 155,25 \text{ nm}$$

Wyniki R=12nm



Odległość h [nm]	Współczynni k dyfuzji $D_{\parallel} * 10^{-12}$	Współczynni k dyfuzji $D_{\perp} * 10^{-12}$
3,01	5,86	6,43
10,77	6,26	5,4
18,54	5,52	5,95
34,06	4,62	3,71
49,58	3,96	4,07
∞	20,3	20,3

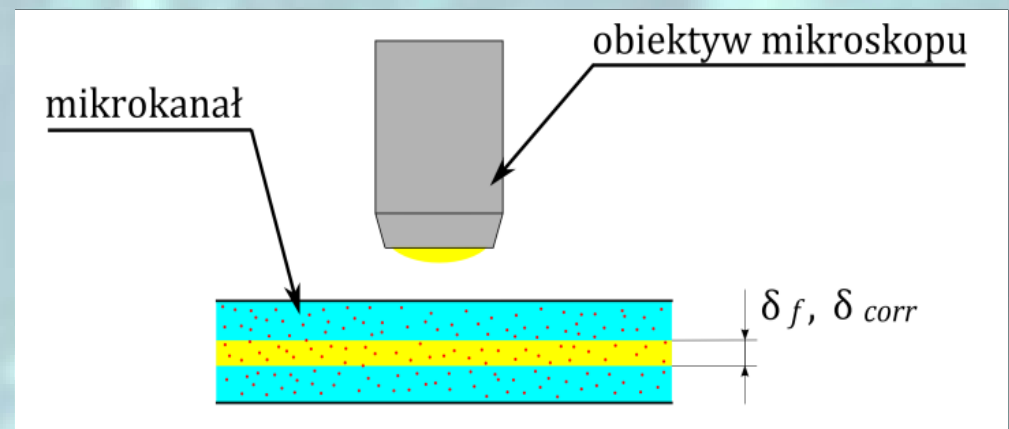
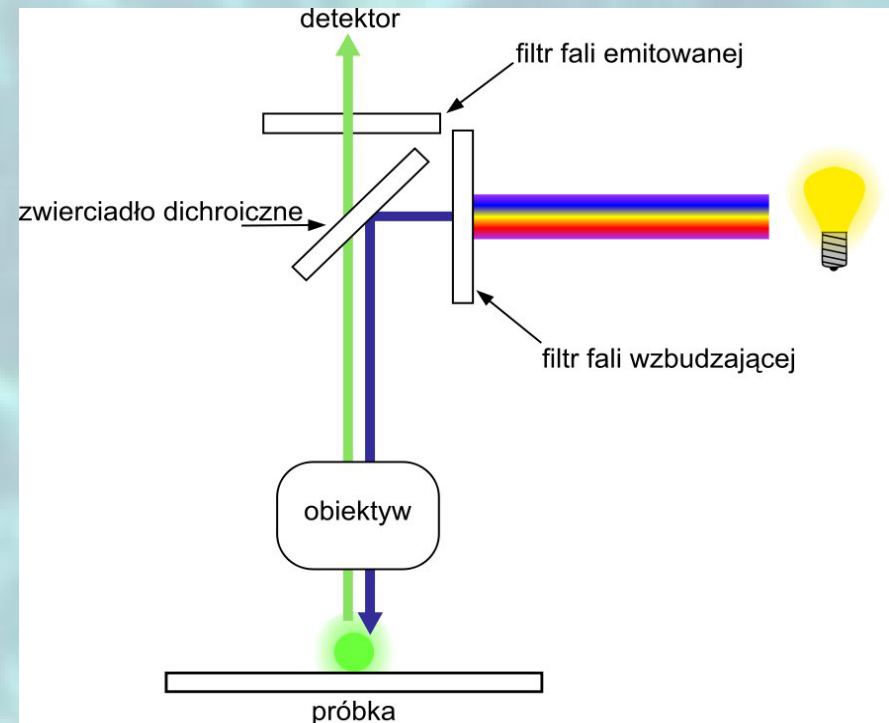
← obliczone ze wzoru



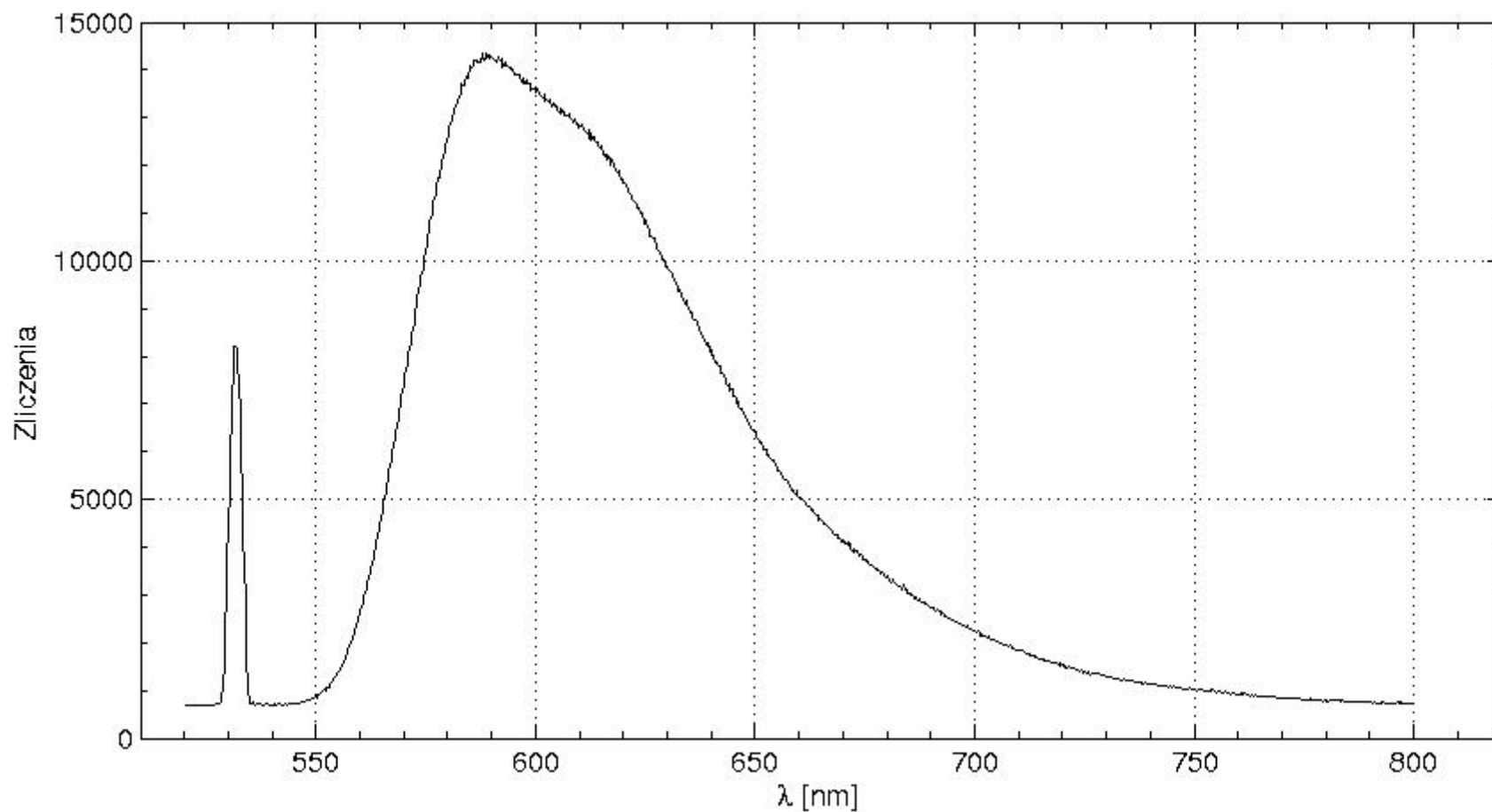
Ze spadkiem odległości, współczynnik rośnie -> brak poślizgu

Badania eksperymentalne cz. 1

- pomiar ruchów Browna cząstek z dala od ścian kanału metodą mikroskopii fluorescencyjnej.
- cząstki fluorescencyjne o średnicy 300nm
- oświetlenie lampą rtęciową

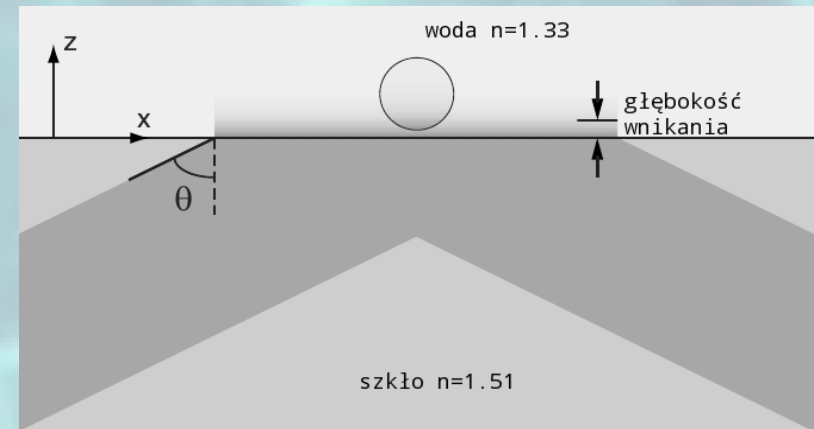


Widmo cząstek fluorescencyjnych



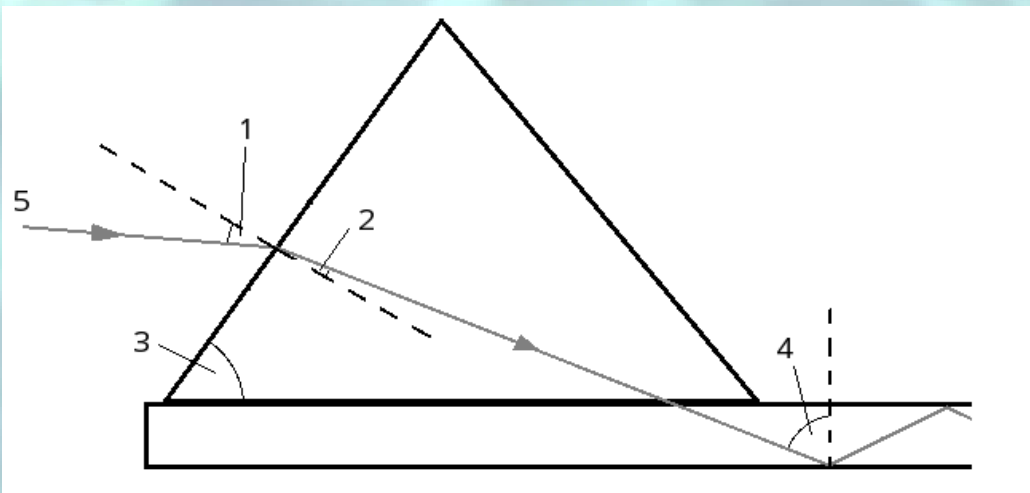
Badania eksperymentalne cz. 2

- badanie ruchów Browna cząstek blisko ściany
- oświetlanie metodą fali zanikającej



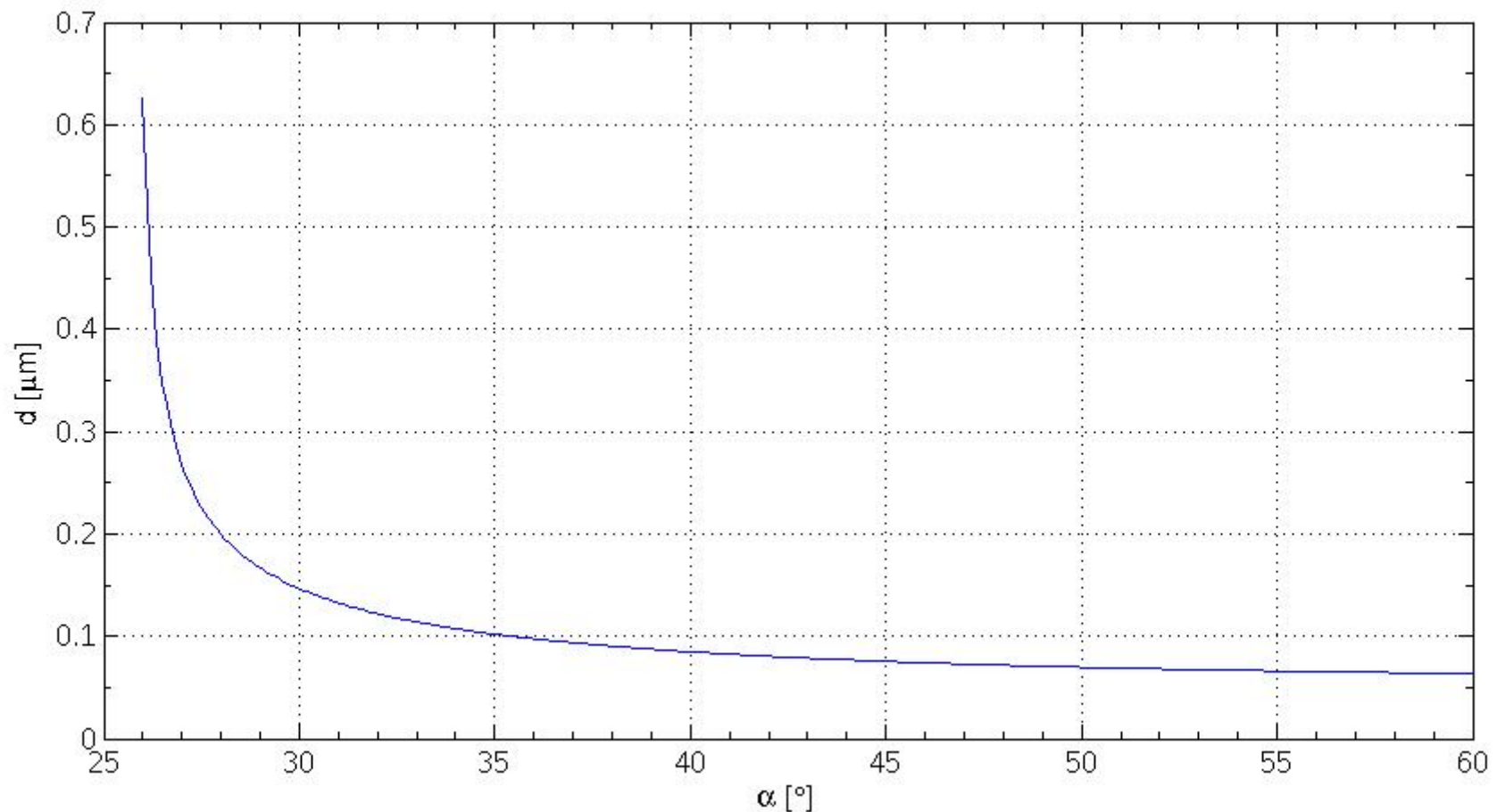
$$\theta_c = \arcsin\left(\frac{\eta_2}{\eta_1}\right),$$
$$I(z) = I(0) e^{-\frac{z}{d}},$$
$$d = \frac{\lambda}{4\pi} \left[\eta_1^2 \sin^2(\theta) - \eta_2^2 \right]^{-\frac{1}{2}}.$$

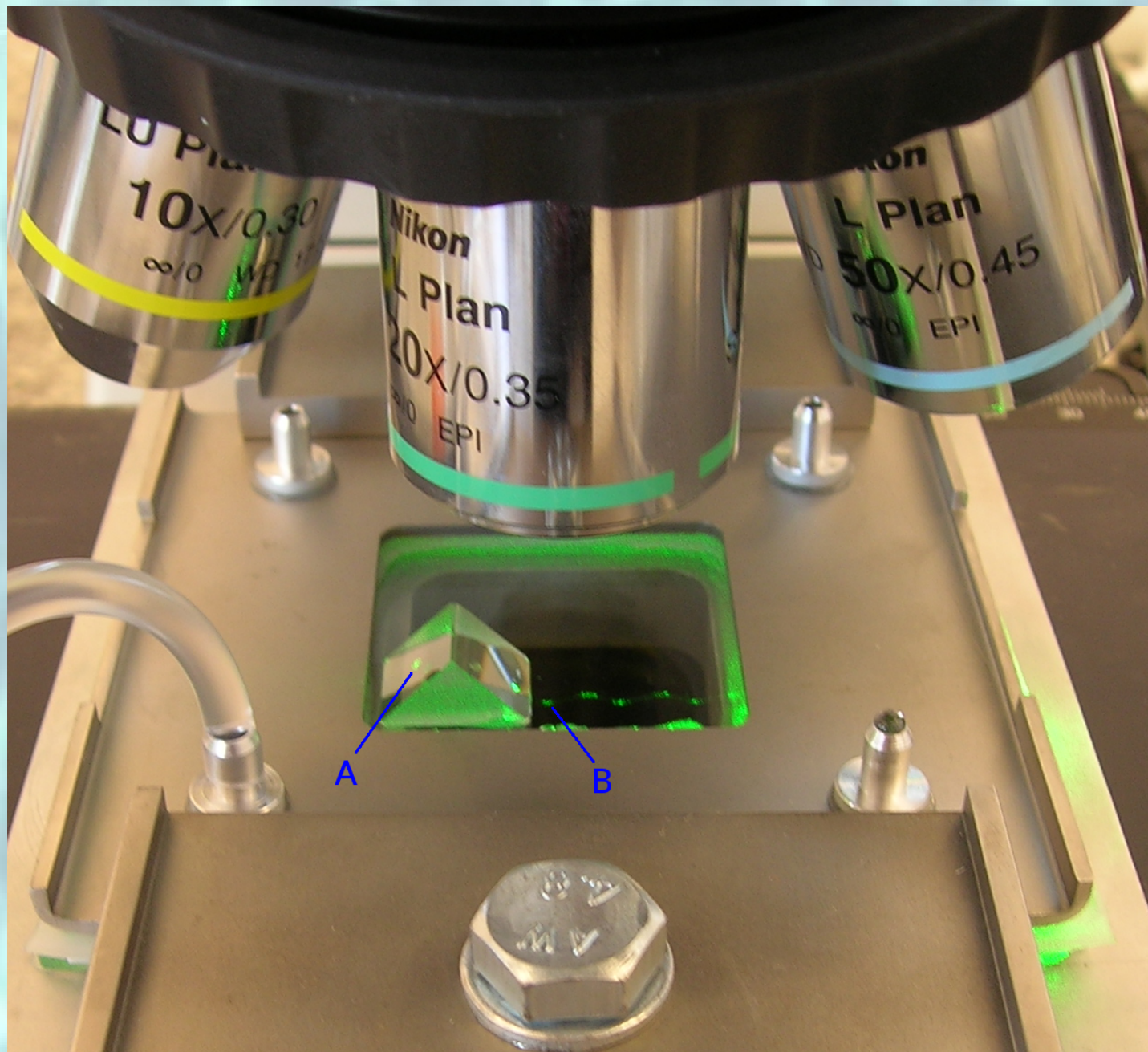
$$d \leq 100 \text{ nm}$$



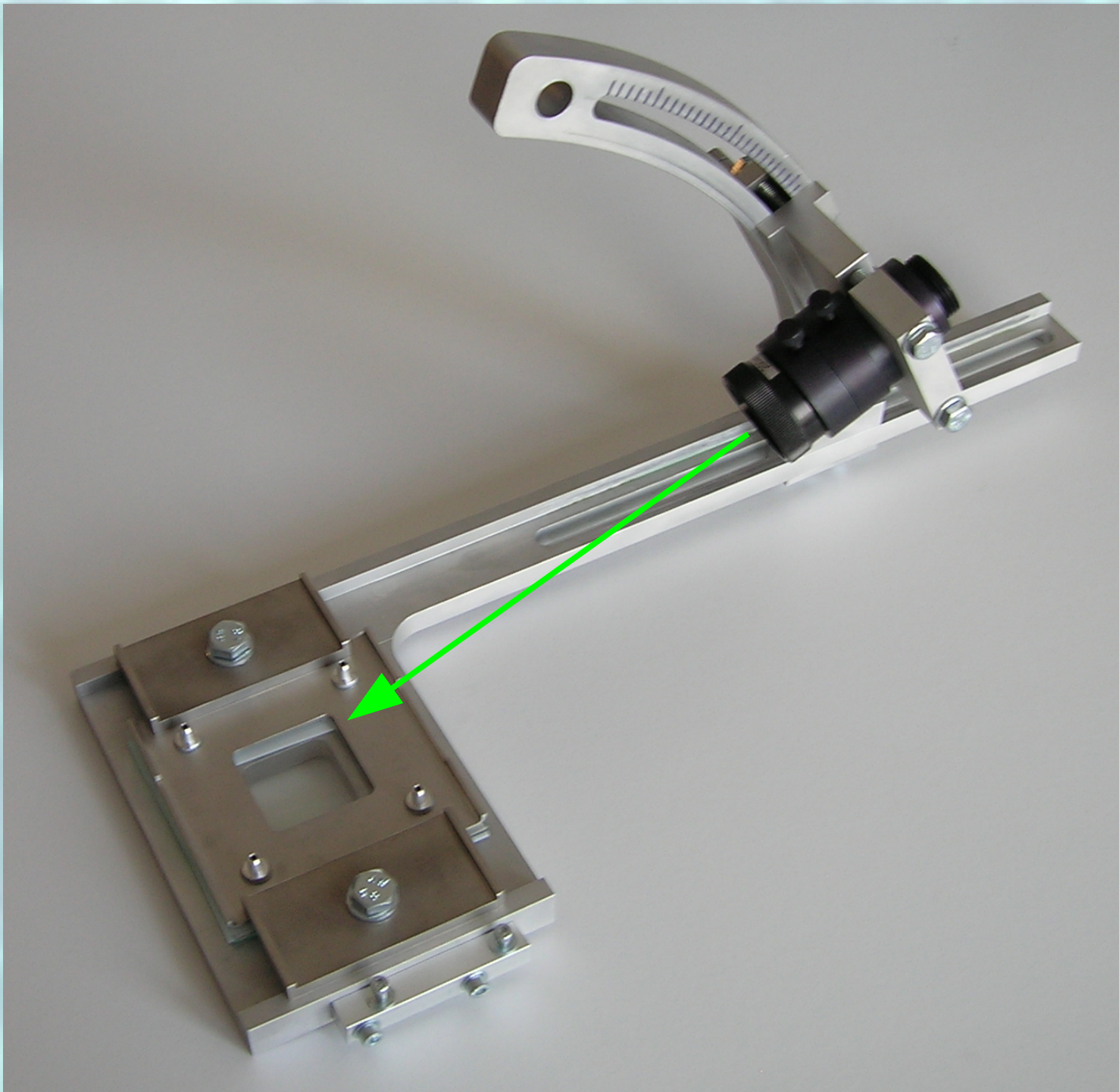
Współczynniki załamania wody i szkła
wynoszą odpowiednio $\eta_1=1.51$ $\eta_2=1.33$

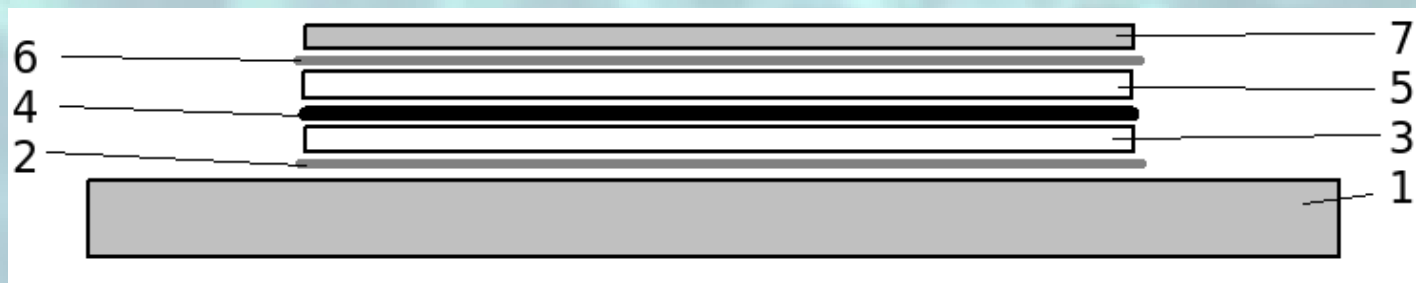
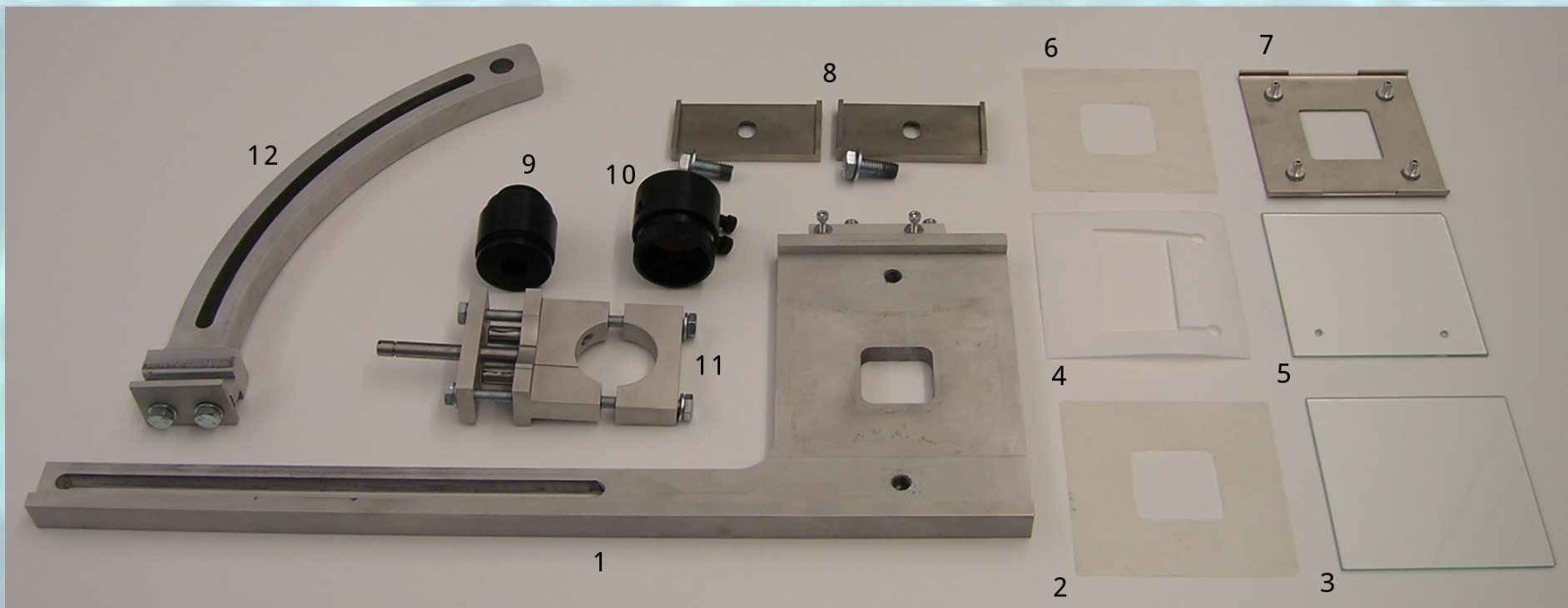
Kąt graniczny wynosi $\theta_c \approx 61,7^\circ$



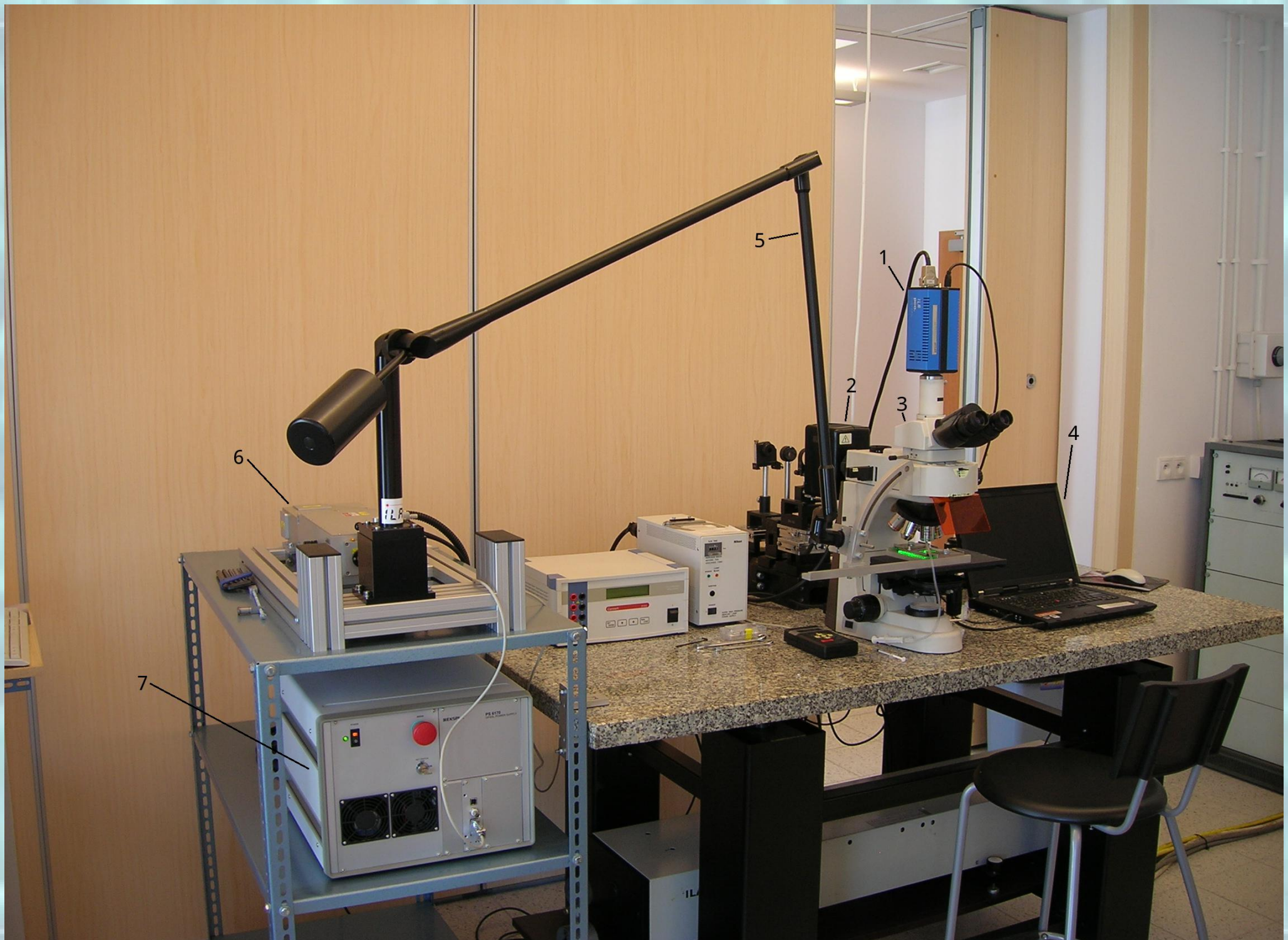


Obszar pomiaru (B) -> $300 \times 250 \mu\text{m}$





1 - Podstawa, 2,6 – przekładki silikonowe,
 5,3 – płytki kwarcowe (ściany kanału),
 4 – Przekładka teflonowa (kontur kanału).



6

5

1

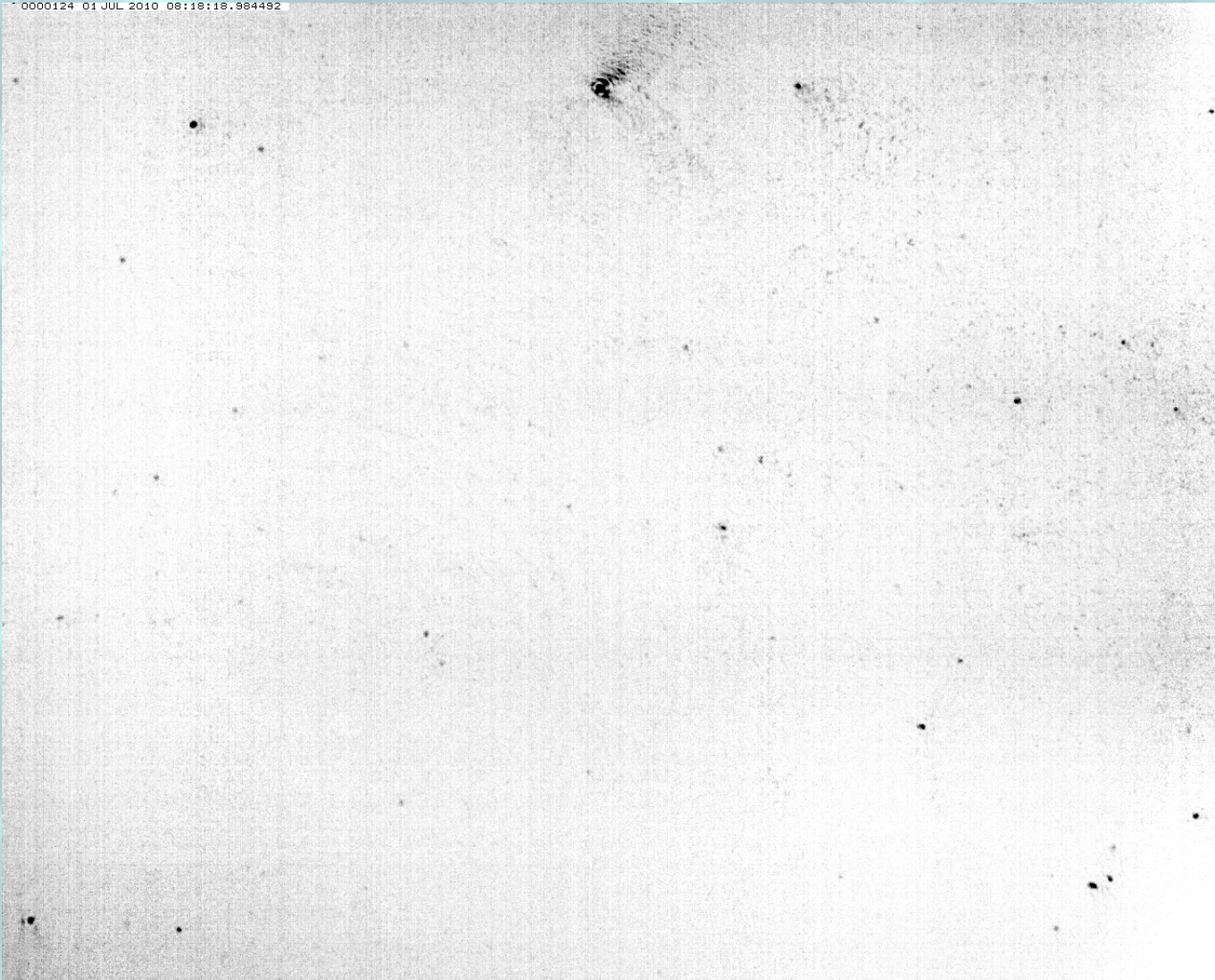
2

3

4

7

Analiza obrazów

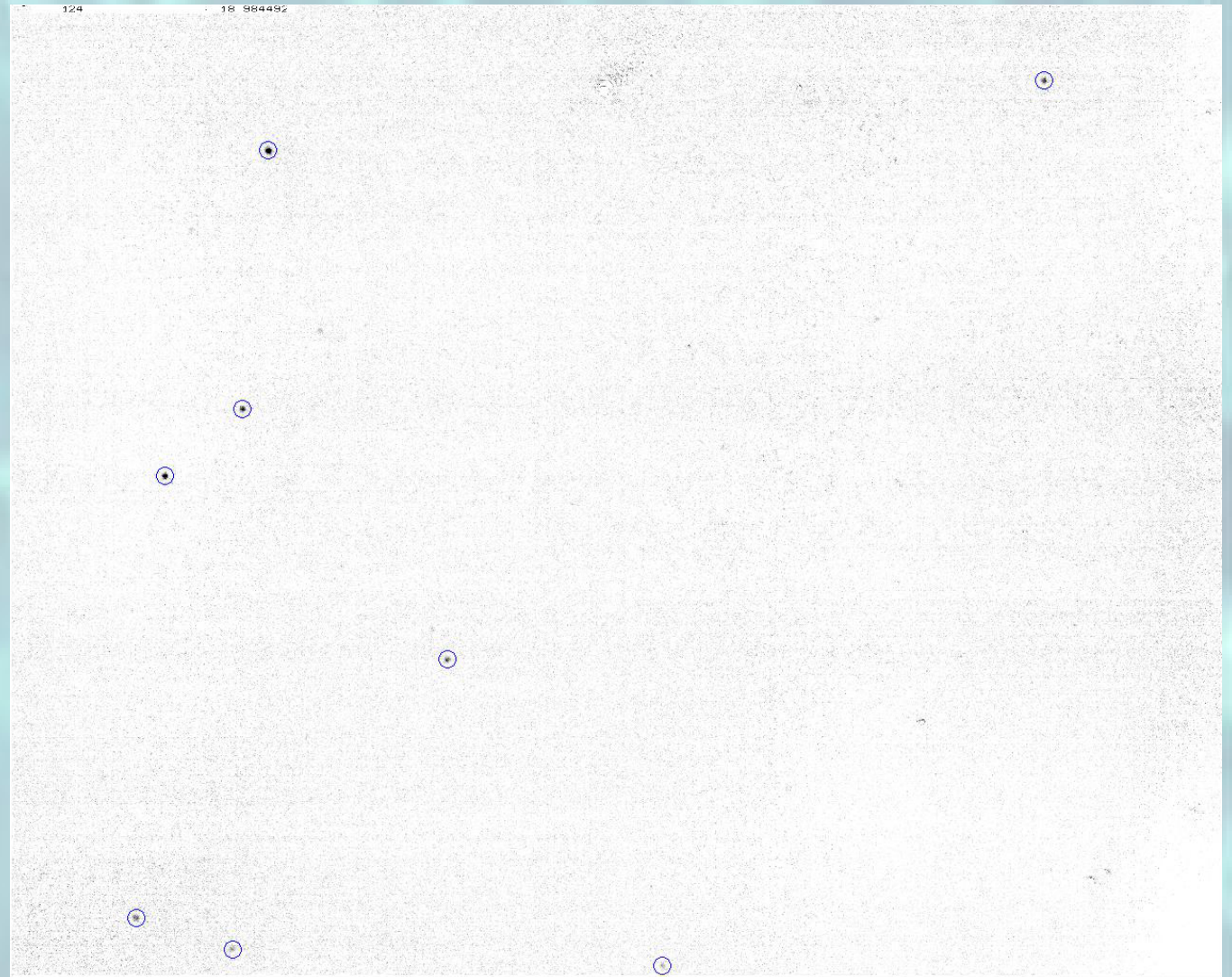
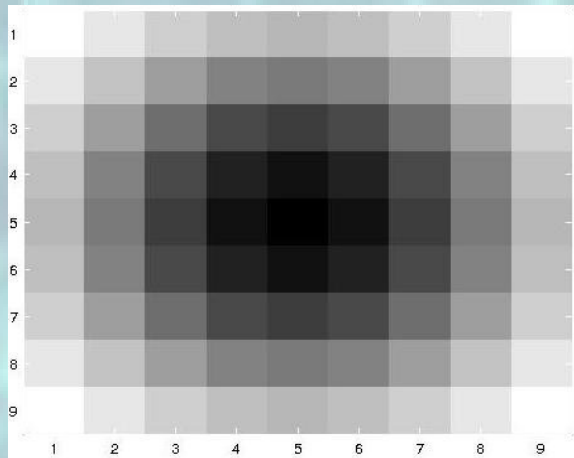


Pojedyncza seria -> 500 obrazów



Metoda wykrywania cząstek

$$f(x, y) = e^{-\frac{(x^2 + y^2)}{2\sigma^2}},$$



300x250 μm

Wyniki R=150nm

Pozycja w kanale	Współczynnik dyfuzji $D_{\parallel} * 10^{-12}$	Wartość średnia 10^{-12}
środek	0,91	0,93
środek	0,96	
ścianka	0,84	0,83
ścianka	0,81	
Wartość teoretyczna w nieskończonym ośrodku	1,62	

$$\beta_{\parallel} = \frac{D_{\parallel s}}{D_{\parallel}} = \frac{0,83 * 10^{-12}}{0,93 * 10^{-12}} = 0,8892,$$

$$J(Kn) = \frac{3r + 8h \left(1 + O\left(\frac{r^3}{h^3}\right) - \beta_{\parallel} \right)}{6r} = 0,537993,$$

$$\lambda = Kn * h = 4,623 * 160 * 10^{-9},$$

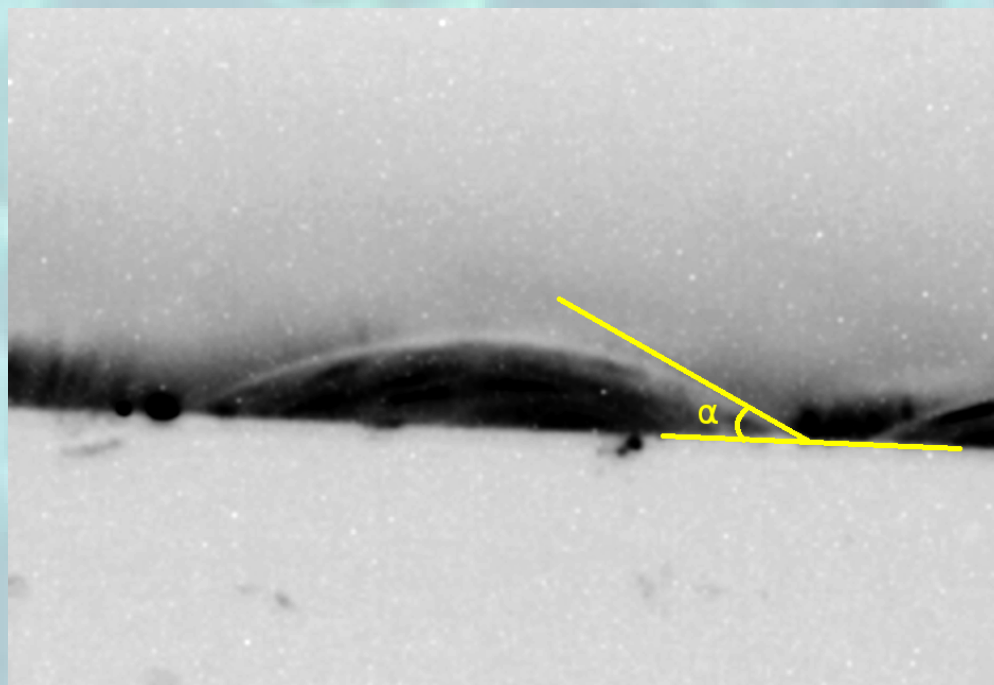
$$\lambda \approx 740$$

$$\Delta \lambda = 250 \text{nm}$$

Dyskusja rezultatów

- hipoteza hydrofobowości powierzchni ściany

Seria pomiarowa	Kąt α [°]
1	36
2	29
3	48
4	33
5	36

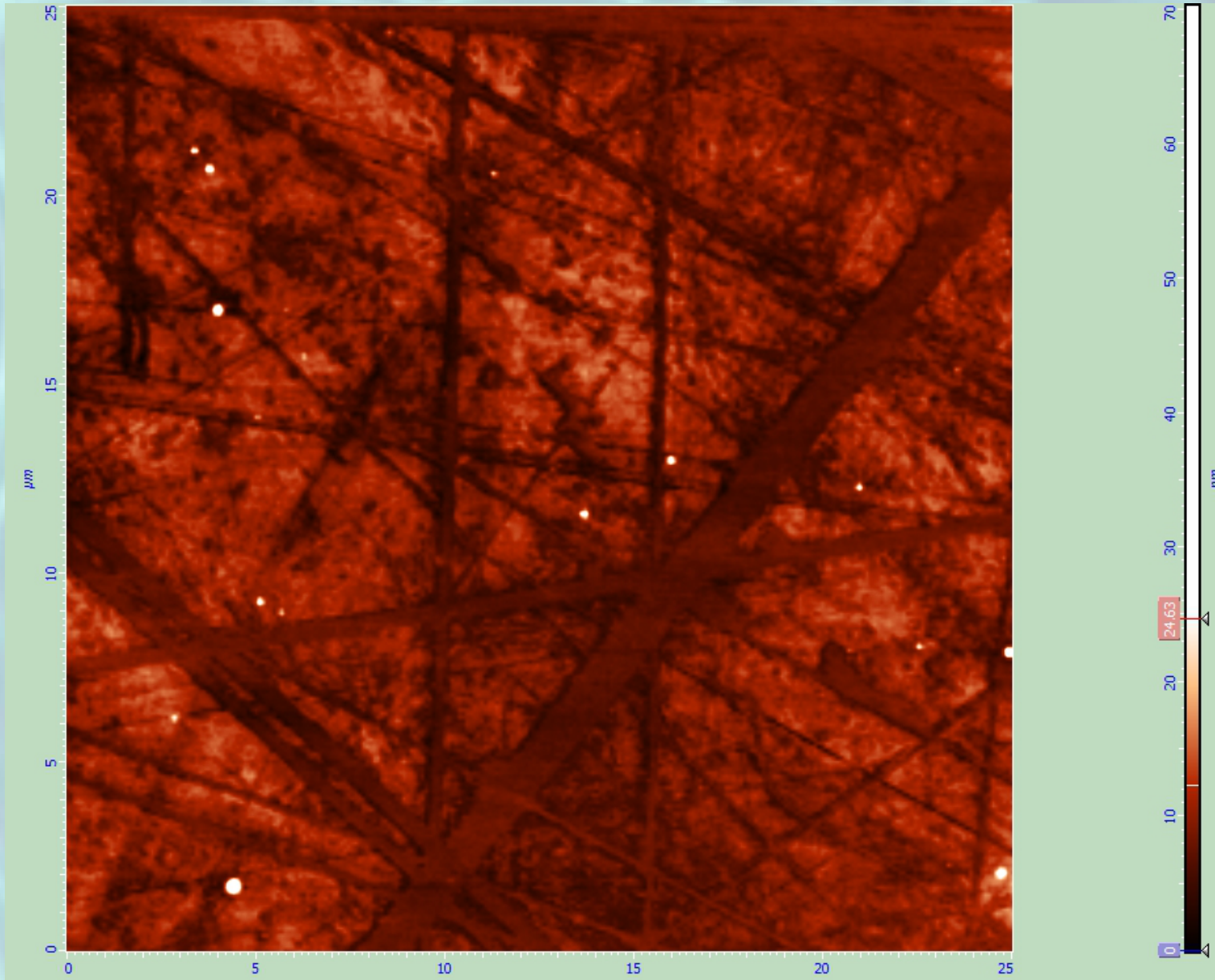


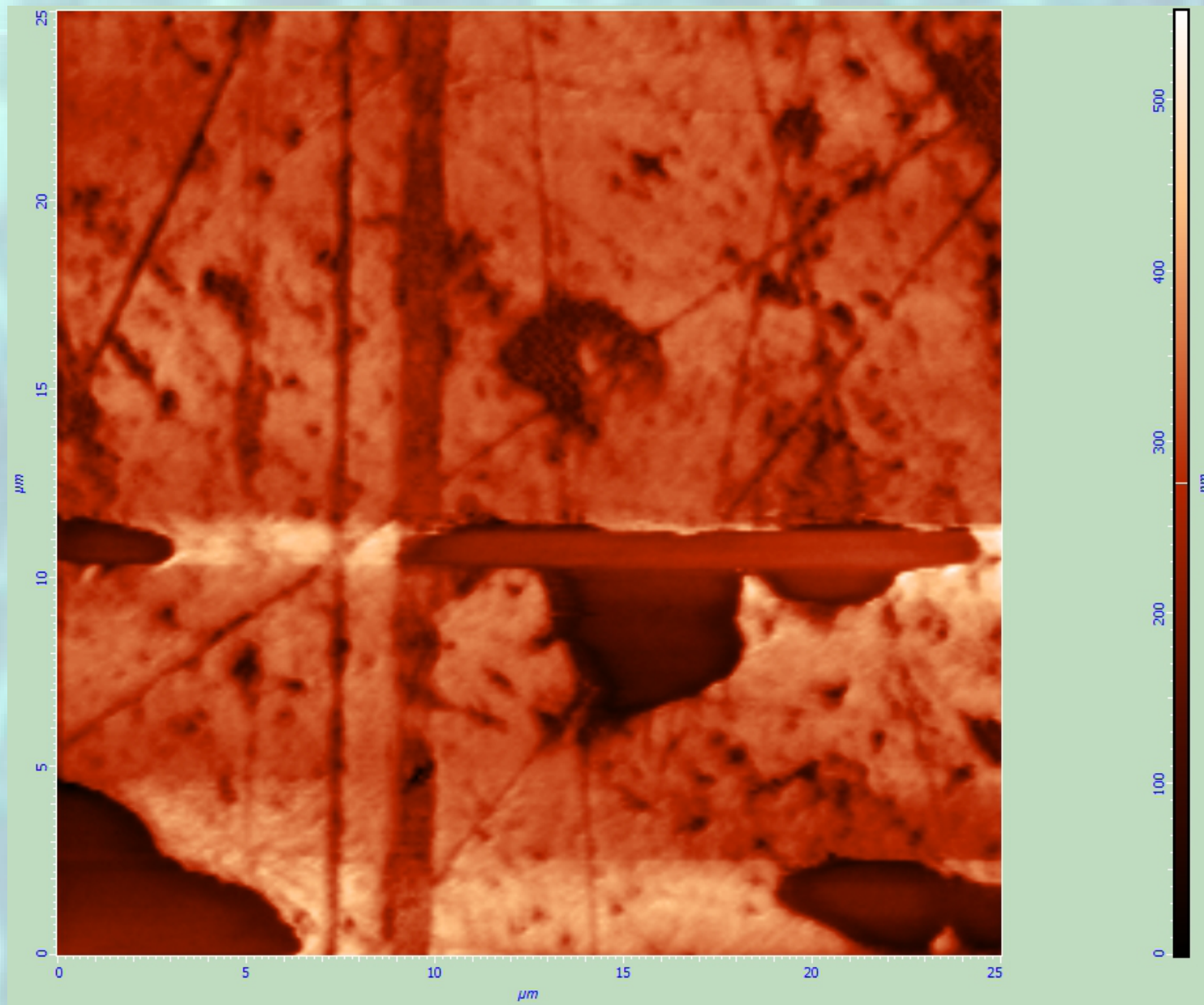
$\alpha < 90^{\circ}$ - hydrofilowa

$90^{\circ} < \alpha < 150^{\circ}$ - hydrofobowa

$\alpha > 150^{\circ}$ - superhydrofobowa

- hipoteza nanopęcherzyków powietrza (B. Borkent)





Powierzchnia pokryta rysami ($\sim 200\text{nm}$), brak pęcherzyków.

Konkluzje

- brak poślizgu w symulacji
- duży rozrzut współczynników dyfuzji otrzymanych w wyniku symulacji i teoretycznych
- konieczność przeprowadzenia symulacji 3D z większą ilością kroków czasowych
- potwierdzenie istnienia poślizgu na ścianie w eksperymencie
- duża wartość wyznaczonego poślizgu
- konieczność przeprowadzenia dalszych badań z użyciem mniejszych cząstek.