



اثرات ویسکوالاستیسیته و پتانسیل جریانی بر واکنش‌های سطح در میکروآکتورها

مسلم فاتحی^۱، آرمان صادقی^{۲*}

^۱ دانشکده مهندسی نفت آبادان، دانشگاه صنعت نفت، آبادان، ایران
^۲ گروه مهندسی مکانیک، دانشگاه کردستان، سنندج، ایران

تاریخچه داوری:

دریافت: ۱۳۹۷/۰۳/۱۴
بازنگری: ۱۳۹۷/۰۷/۰۱
پذیرش: ۱۳۹۷/۰۸/۱۹
ارائه آنلاین: ۱۳۹۷/۰۸/۲۹

کلمات کلیدی:

ویسکوالاستیسیته
پتانسیل جریانی
میکروآکتور
واکنش‌های سطح

خلاصه: بسیاری از سیالات زیستی مورد بررسی در آزمایشگاه‌های روی تراشه رفتاری غیرخطی دارند. همچنین به علت اندازه بسیار کوچک مجاری موجود در اجزای مختلف آزمایشگاه‌های روی تراشه، همانند میکروآکتورها و میکروهلم‌زن‌ها، جریان فشار-محرك مایعات در این اجزا با پدیده پتانسیل جریانی همراه خواهد بود که تمایل به کاهش سرعت سیال دارد. تحقیق حاضر به بررسی اثرات پتانسیل جریانی و رفتار غیرنیوتنی سیال حامل بر انتقال جرم و واکنش‌های سطح در میکروآکتورهای ناهمگن می‌پردازد. در این راستا از مدل ویسکوالاستیک پی-تی-تی برای پیشبینی رفتار غیرخطی سیال استفاده می‌شود. معادلات حاکم در حالت بدون بعد به وسیله روش تفاضل محدود بر اساس شبکه‌بندی غیریکنواخت حل می‌شوند. نتایج نشان می‌دهند که اثرات پتانسیل جریانی با افزایش قدرت یونی الکترولیت و افزایش ضخامت دولایه الکتریکی تقویت می‌شود. تقویت این اثرات باعث کاهش سرعت سیال و به تبع آن سرعت انتقال آنالیت به پایین دست میکروآکتور شده و در نهایت منجر به کاهش نرخ واکنش‌های سطح می‌شود. اثرات پتانسیل جریانی چنان شدید است که در حالات حدی ممکن است باعث افزایش ۱۰۰ درصدی زمان رسیدن سطح به حالت اشباع شود. اگرچه الاستیسیته با افزایش سرعت سیال در نزدیکی جدار منجر به کاهش زمان اشباع می‌شود، با این وجود اثرات آن بسیار کمتر از اثرات پتانسیل جریانی است.

۱- مقدمه

در سال‌های اخیر، سامانه‌های میکروالکترومکانیکی^۱ به خاطر کاربردهای وسیع مخصوصاً در صنایع درمانی و بیولوژیکی که ابزارهای ریزسیالشی به نام آزمایشگاه‌های-روی-تراشه (آزروشه)^۲ در حال توسعه هستند، محبوبیت زیادی پیدا کرده‌اند [۳-۱]. آزروشه‌ها ریزآزمایشگاههایی بر روی یک ریزتراشه می‌باشند که برای تشخیص‌های بالینی مورد استفاده قرار می‌گیرند. مزایای اصلی این دستگاه‌ها سهولت استفاده، سرعت تجزیه و تحلیل بالا و مصرف کم نمونه است [۴].

میکروآکتورها یکی از اجزای اصلی آزروشه‌ها هستند که در مقایسه با همتایانشان در مقیاس متعارف دارای ویژگی‌های منحصر به فردی هستند. به عنوان نمونه، کاهش طول مشخصه در این وسیله‌ها باعث افزایش گردانین غلظت می‌شود که در واقع نیروی محرکه انتقال جرم است. همچنین، نسبت سطح به حجم بالا در مقیاس میکرو باعث افزایش سرعت واکنش‌های سطح

می‌شود. از آن گذشته، افزایش کارایی در واحدهای مبتنی بر میکروآکتورها بوسیله رویکرد افزایش تعداد میکروآکتورها اتفاق می‌افتد نه به وسیله افزایش اندازه آنها. بنابراین، انعطاف‌پذیری بیشتری در زمینه پاسخ به تقاضای متغیر بدست می‌آید زیرا، در صورت نیاز، به راحتی تعداد معینی از سیستم‌ها می‌توانند خاموش شوند یا سیستم‌های بیشتری به واحد تولیدی اضافه شوند [۵].

میکروآکتورها بطورکلی به دو دسته همگن و ناهمگن تقسیم می‌شوند که در میکروآکتورهای همگن واکنش در فاز محلول اتفاق می‌افتد اما در مورد ناهمگن، یکی از واکنشگرها روی یک سطح جامد ثابت شده و دیگر واکنش‌دهنده‌ها به وسیله سیال حامل به سطح نزدیک می‌شوند [۶]. در هر دو مورد، فرایند انتقال جرم را می‌توان به عنوان زیر مجموعه‌ای از مسئله پراکندگی حل‌شونده با واکنش شیمیایی در نظر گرفت. با مرور پیشینه این موضوع، در مورد پراکندگی حل‌شونده در محلول به یکی از تحقیقات برجسته انجام شده بوسیله تیلور [۷] روبرو می‌شویم. تیلور در سال ۱۹۵۳، روشی را برای بررسی تغییرات محوری غلظت متوسط در داخل یک کانال دایره‌ای

1 Micro-Electro-Mechanical-Systems (MEMS)
2 Lab-on-a-Chip (LOC)

* نویسنده عهده‌دار مکاتبات: a.sadeghi@eng.uok.ac.ir



جریانی بر روی واکنش‌های سطح در میکروآکتورهای بیولوژیکی ناهمگن فشار-محرك پرداخته می‌شود. جهت مدل‌سازی رفتار ویسکوالاستیک سیال از مدل پی-تی-تی^۲ استفاده می‌شود. سطح مقطع میکروآکتور به صورت مستطیلی در نظر گرفته شده و جریان سیال توسعه یافته فرض می‌شود. حل معادلات در حالت بدون بعد توسط روش تفاضل محدود صورت می‌گیرد و در ادامه تأثیر ضخامت نسبی دولایه الکتریکی، رفتار رئولوژیک سیال و قدرت یونی الکترولیت بر سینتیک واکنش‌های سطح مورد بررسی قرار می‌گیرد.

۲- پیکربندی مسئله

در این تحقیق انتقال ذرات از لحاظ الکتریکی خنثی در یک میکروآکتور ناهمگن با سطح مقطع مستطیلی و اتصال آن با سایت‌های ثابت شده بر جداره مورد بررسی قرار می‌گیرد. شماتیک مسئله به همراه سیستم مختصات و دیگر جزئیات در شکل ۱ نشان داده شده است. فرض می‌شود که سیال حامل یک سیال زیستی با رفتار رئولوژیکی ویسکوالاستیک قابل توصیف بوسیله مدل پی-تی-تی است. همچنین فرض می‌شود که این سیال دارای خواص ترموفیزیکی ثابت است و حاوی یک نمک متقارن است که به گونه‌های آنیون و کاتیون تجزیه شده است. پتانسیل زتای جداره نیز ثابت و یکنواخت در نظر گرفته می‌شود به این معنی که تغییرات احتمالی ویژگی‌های سطحی به دلیل مکانیزم جذب و دفع ناچیز فرض می‌شود. همچنین از تغییرات لزجت سیال بر اثر غیریکنواختی غلظت یونی صرف‌نظر می‌شود. از آنجایی که طول ورودی هیدرودینامیکی جریان‌های با عدد رینولدز کوچک فقط کسر ناچیزی از قطر هیدرولیکی کانال است، جریان بطور کامل توسعه یافته در نظر گرفته می‌شود. با توجه به تقارن، تحلیل به یک چهارم سطح مقطع کانال محدود می‌شود.

۲-۱- توزیع پتانسیل الکتریکی

پتانسیل الکترواستاتیکی ϕ در هر نقطه از کانال حاصل اعمال پتانسیل خارجی در امتداد کانال Φ و پتانسیل دولایه الکتریکی ψ است. تحت شرایط توسعه یافته هیدرودینامیکی $\psi = \psi(x, y)$ و بنابراین ϕ بصورت زیر داده می‌شود:

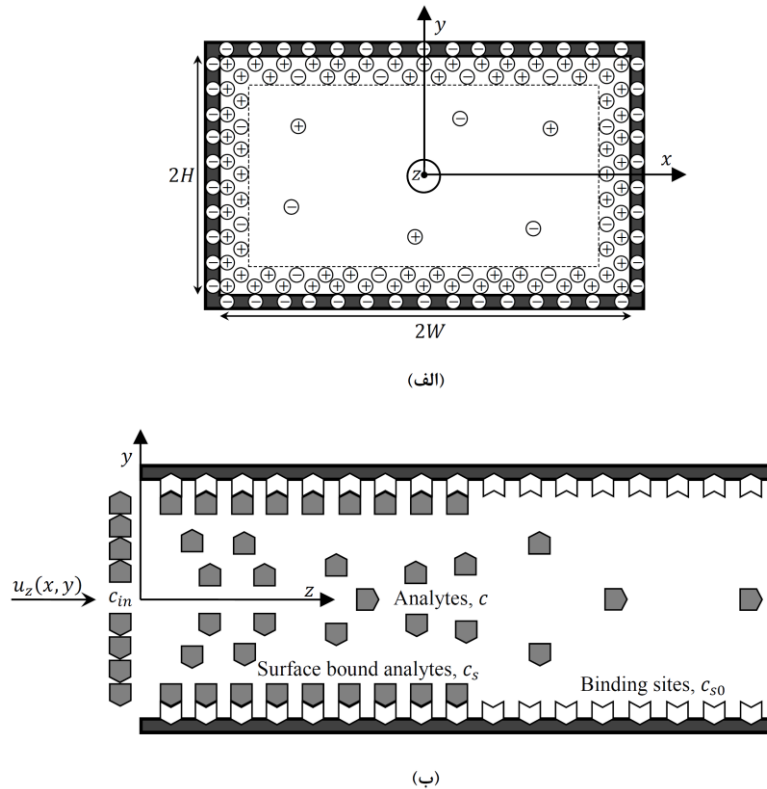
$$\phi(x, y, z) = \Phi(z) + \psi(x, y) \quad (1)$$

ارائه نمود که این روش و همچنین نمونه‌های پیشرفته‌تر آن که بوسیله محققان دیگری ارائه شده‌اند [۸-۱۰] به عنوان تئوری پراکندگی تیلور شناخته می‌شود. اولین کار در زمینه تعمیم مسئله پراکندگی به شرایطی که در سطح واکنش انجام می‌شود توسط سوبرامانیا و گیل انجام شده است [۱۱]. این محققین، یک حل تحلیلی را برای پراکندگی امتزاج پذیر در جریان لایه‌ای داخل لوله‌های مدور در حضور یک واکنش درجه اول برگشت ناپذیر در جداره‌های کانال توسعه دادند.

برخلاف انواع واکنش‌هایی که معمولاً در تحقیقات مرتبط با مهندسی شیمی صورت می‌گیرد، واکنش‌هایی که در کاربردهای بیولوژیکی اتفاق می‌افتد عمدتاً برگشت‌پذیر هستند. یکی از اولین تلاش‌ها در مدل‌سازی واکنش‌های سطحی برگشت‌پذیر در دستگاه‌های بیولوژیکی توسط گلیسر انجام شد [۱۲]. او بصورت عددی سینتیک اتصال و تفکیک بین آنالیت حل شده در سیال و یک لیگاند ثابت بر روی سطح را بررسی کرد. این کار به وسیله کارهای تحقیقاتی دیگری بر روی واکنش‌های سطحی در وسیله‌های بیولوژیکی ریزسیالشی، هم به روش‌های تئوری [۱۳-۶ و ۱۵] و هم تجربی [۱۸-۱۶]، ادامه داده شده است.

در تمامی تحقیقات انجام شده در زمینه میکروآکتورهای بیولوژیکی فشار-محرك اثرات رفتار رئولوژیک غیرخطی سیال حامل ناچیز فرض شده است. این در حالیست که بسیاری از سیالات زیستی مورد بررسی در آزرشوها دارای رفتاری ویسکوالاستیک هستند [۱۹]. به علاوه، جریان مایعات در میکروکانال‌ها الزاماً تحت تأثیر اثرات الکتروسینتیک است؛ بدین صورت که جداره کانال در تماس با سیال با آن یون مبادله می‌نماید که منجر به تجمع یون‌ها در داخل سیال و در نزدیکی جدار جهت خنثی شدن بار الکتریکی آن می‌شود. تجمع یون‌ها در نزدیکی جدار منجر به ایجاد یک ناحیه‌ی دارای بار الکتریکی خالص می‌گردد که دو لایه الکتریکی^۱ نامیده می‌شود [۲۰]. جریان سیال منجر به تجمع یون‌های موجود در دولایه الکتریکی در انتهای کانال می‌شود که در نهایت به ایجاد یک اختلاف پتانسیل بین دو سر کانال، معروف به پتانسیل جریانی، می‌انجامد. میدان الکتریکی متناظر با پتانسیل جریانی با اثرگذاری بر روی یون‌ها منجر به ایجاد یک نیروی بازدارنده در مقابل حرکت سیال می‌شود که به کاهش سرعت جریان می‌انجامد. با وجود اهمیت اثرات پتانسیل جریانی، این پدیده نیز در مطالعات مربوط به میکروآکتورها مورد توجه قرار نگرفته است.

در تحقیق حاضر برای اولین بار به اثرات ویسکوالاستیسیته و پتانسیل



شکل ۱: شماتیک میکروآکتور؛ (الف) نمای سطح مقطعی شامل دو لایه‌های الکتریکی بین جداره داخلی کانال و خطوط هاشور و (ب) نمای جانبی شامل اجزای واکنش دهنده

Fig. 1. Schematic representation of the microreactor; (a) transverse view including the EDLs between the channel inner wall and the dashed lines and (b) lateral view containing the reactive components

عدد والانس یون، بار پروتون، دمای مطلق و غلظت یون در شرایط خنثی می‌باشند. همچنین پارامتر ν نمایانگر فاکتور فضایی است که اهمیت اندازه یون را در توزیع آن نشان می‌دهد و به صورت $\nu = b^2 n$ تعریف می‌شود که در آن b اندازه مؤثر یونی است. دانسیته‌ی بار برای یک محلول متقارن که برای آن می‌توان نوشت $Z_+ = -Z_- = Z$ به صورت زیر می‌باشد [۲۲]:

$$\rho_e = Ze(n_+ - n_-) = -2n_0 Ze \frac{\sinh\left(\frac{Ze\psi}{k_B T}\right)}{1 + 4\nu \sinh^2\left(\frac{Ze\psi}{2k_B T}\right)} \quad (4)$$

با جایگذاری عبارت دانسیته بار در معادله (۲) و بی‌بعد کردن آن با توجه به معادله (۱) و همچنین این نکته که Φ یک تابع خطی از مختصه محوری است، رابطه زیر به دست می‌آید:

پتانسیل الکترواستاتیکی به وسیله معادله‌ی پواسون با دانسیته بار خالص در هر نقطه از محلول مرتبط می‌شود [۲۱]:

$$\nabla^2 \varphi = -\frac{\rho_e}{\epsilon} \quad (2)$$

در این معادله ϵ ثابت گذردهی می‌باشد. به منظور محاسبه‌ی دانسیته‌ی بار ابتدا باید توزیع یونی محاسبه شود. از آنجایی که ما با شرایط توسعه یافته هیدرودینامیکی مواجه هستیم غلظت گونه یونیم با استفاده از توزیع بولتزمن حاصل می‌شود [۲۱]:

$$n_i = \frac{n_0 e^{-\left(\frac{Z_i e \varphi}{k_B T}\right)}}{1 + 4\nu \sinh^2\left(\frac{Ze\psi}{2k_B T}\right)} \quad (3)$$

در این معادله پارامترهای n_0 ، T ، ϵ ، Z ، k_B به ترتیب ثابت بولتزمن،

که در آن گرادین فشار محوری فقط ناشی از اختلاف فشار اعمالی به دو سر کانال است چرا که فشار اسمزی، به دلیل اینکه در جهت محوری گرادین غلظت یونی وجود ندارد، صفر است. همچنین E_S میدان الکتریکی ایجاد شده توسط پتانسیل جریانی است و بنابراین، با توجه به وابستگی آن به جریان، نامشخص است. برای به دست آوردن E_S توجه به این نکته ضروری است که در حالت پایا جریان الکتریکی عبوری از هر سطح مقطع کانال برابر صفر است به این دلیل که در مسئله حاضر مدار کامل مورد نیاز برای تداوم جریان وجود ندارد. چنین چیزی بدین معنی است که جریان ناشی از E_S ، که در اینجا با I_M نشان داده می‌شود، با جریان ایجاد شده توسط جریان سیال I_S بالانس می‌شود یعنی

$$I = I_S + I_M = 0 \quad (9)$$

برای I_S و I_M می‌توان نوشت [۲۳]:

$$I_S = 4 \int_0^H \int_0^W u_z \rho_e dx dy \quad (10)$$

$$I_M = 4 \lambda_m E_S HW \quad (11)$$

در رابطه (۱۱) پارامتر λ_m نمایانگر هدایت الکتریکی میانگین در سطح مقطع کانال است. با جایگذاری رابطه (۴) در معادله (۱۰) و جایگذاری معادله حاصل و رابطه (۱۱) در معادله (۹) و بدون بعد سازی به دست می‌آوریم:

$$E_S^* = \frac{\lambda_m E_S}{2eZn_0 u_{ref}} = \frac{\int_0^1 \int_0^\alpha \frac{u^* \sinh \psi^*}{1 + 4\nu \sinh^2(\psi^*/2)} dx^* dy^*}{\alpha} \quad (12)$$

که در آن $u^* = \frac{u_z}{u_{ref}}$ و $\mu = -H^\nu (\partial p / \partial z) / 2\mu$ و u_{ref} سرعت مرجع است.

قدم بعدی تعیین اجزای تانسور تنش در معادله (۸) است که لازمه آن مشخص بودن رئولوژی سیال است. می‌توان نشان داد که این مؤلفه‌های تنش برای مدل پی-تی-تی به صورت زیر هستند [۱۹]:

$$\frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x^{*2}} + \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial y^{*2}} = K^2 \frac{\sinh \psi^*}{1 + 4\nu \sinh^2(\psi^*/2)} \quad (5)$$

در این معادله $K = H / \lambda_D$ و $y^* = \frac{y}{H}$ ، $x^* = \frac{x}{H}$ ، $\psi^* = \frac{Ze\psi}{k_B T}$ پارامتر بی‌بعد دبی-هاکل است که در آن $\lambda_D = (\epsilon n e^2 Z^2 / \epsilon k_B T)^{-1/2}$ مقدار طول دبی را نشان می‌دهد که معیاری از ضخامت دو لایه است. معادله پتانسیل الکتریکی بی‌بعد، معادله (۵)، تحت شرایط مرزی بی‌بعد زیر حل می‌شود.

$$\left. \frac{\partial \psi^*}{\partial x^*} \right|_{x^*=0} = \left. \frac{\partial \psi^*}{\partial y^*} \right|_{y^*=0} = 0, \quad (6)$$

$$\psi^* \Big|_{x^*=\alpha} = \psi^* \Big|_{y^*=1} = \zeta^*$$

که در آن $\zeta^* = \frac{Ze\zeta}{k_B T}$ پتانسیل زتای بی‌بعد و $\alpha = \frac{W}{H}$ نسبت عرض به ارتفاع کانال است.

۲-۲- توزیع سرعت

چگونگی تبادل مومنتوم در داخل جریان بوسیله معادل کوشی بیان می‌شود که به صورت زیر است [۱۹]:

$$\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = -\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \mathbf{F} \quad (7)$$

در این معادله ρ دانسیته‌ی سیال، p فشار، $\boldsymbol{\tau}$ تانسور تنش و \mathbf{F} بردار نیروهای حجمی است. نیروی حجمی برای مسئله حاضر به وسیله $\rho_e \mathbf{E}$ داده می‌شود که در آن \mathbf{E} میدان الکتریکی است. در شرایط توسعه یافته، اثرات مؤلفه‌های سرعت عرضی نسبت به سرعت محوری ناچیز است؛ بنابراین، با توجه به معادله پیوستگی که به صورت $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$ است، بردار سرعت به فرم $\mathbf{u} = [0, u_z(x, y)]$ در می‌آید. با یادآوری این که برای جریان توسعه یافته پایا $\frac{D\mathbf{u}}{Dt}$ ، معادله مومنتوم در جهت محوری به فرم زیر ساده می‌شود:

$$0 = -\frac{\partial p}{\partial z} + \frac{\partial \tau_{xz}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yz}}{\partial y} + \rho_e E_S \quad (8)$$

گرفتن شرایط مرزی زیر حل شوند:

$$\left. \frac{\partial u^*}{\partial x} \right|_{x^*=0} = \left. \frac{\partial u^*}{\partial y} \right|_{y^*=0} = 0, \quad (19)$$

$$u^* \Big|_{x^*=\alpha} = u^* \Big|_{y^*=1} = 0$$

لازم به ذکر است که، با وجود ابعاد بسیار کوچک ابزار مورد بررسی، در معادله (۱۹) از شرط مرزی عدم لغزش استفاده شده است. علت این است که عدد نادسن، که به عنوان معیار اعتبار فرض محیط پیوسته و شرایط مرزی عدم لغزش استفاده می‌شود، به علت کوچکی فاصله بین مولکولی در مایعات (از مرتبه آنگستروم) بسیار کوچکتر از مقدار آستانه ۰/۰۰۱ برای آغاز انحراف از شرایط مرزی عدم لغزش است [۲۴].

۲-۳- توزیع غلظت

درک اولیه‌ای از مکانیزم واکنش برای توسعه معادلات انتقال جرم در یک میکروآکتور ضروری است. در مکانیزم معمول جذب - دفع، سه جزء در واکنش وجود دارد. اولین جزء در واقع نمونه‌ای است که به کانال تزریق می‌شود که آنالیت نام دارد و غلظت آن در اینجا با نشان داده می‌شود. آنالیت‌ها تنها جزء موجود در سیال حامل هستند. همچنین نمونه‌هایی با ویژگی‌های معلوم با غلظت c_s بر روی سطح قرار می‌گیرند که آنها را سایت‌های اتصال‌دهنده گویند و، درنهایت، آنالیت‌هایی را که با سایت‌های اتصال‌دهنده پیوند برقرار می‌کنند آنالیت‌های جذب‌شده گویند که غلظت آنها را با c_s نشان می‌دهیم. معادله حاکم بر انتقال آنالیت بصورت زیر است:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{uc}) = \nabla \cdot (D\nabla c) \quad (20)$$

که در آن D ضریب نفوذ آنالیت است. شرایط مرزی مربوط به معادله‌ی (۲۰) شامل تقارن در صفحات میانی کانال، شرایط ورودی معلوم با غلظت c_{in} ، صفر بودن $\frac{\partial c}{\partial z}$ در خروجی و برابری شار جرمی آنالیت در دیواره و نرخ افزایش غلظت آنالیت‌های جذب شده است که آخری به صورت زیر بیان می‌شود [۱۵]:

$$\frac{\partial c_s}{\partial t} = -D\nabla c \cdot \hat{N} = -D \frac{\partial c}{\partial N} \quad (21)$$

در این معادله N جهت نرمال به سمت خارج دیواره و \hat{N} بردار واحد

$$\tau_{xz} = \frac{\mu}{\Lambda} \frac{\partial u_z}{\partial x}, \quad \tau_{yz} = \frac{\mu}{\Lambda} \frac{\partial u_z}{\partial y} \quad (13)$$

که در آن μ ضریب لزجت بوده و Λ تابع ضریب تنش است که به صورت زیر داده می‌شود:

$$\Lambda = 1 + 2 \frac{\epsilon \lambda^2}{\mu^2} (\tau_{xz}^2 + \tau_{yz}^2) \quad (14)$$

در معادله (۱۴) پارامترهای ϵ و λ به ترتیب نمایانگر ضریب کشش و زمان آسایش سیال هستند. با جایگذاری مؤلفه‌ای تنش از رابطه (۱۳) در رابطه (۸) خواهیم داشت:

$$0 = -\frac{\partial p}{\partial z} + \rho_e E_s + \frac{\mu}{\Lambda} \left(\frac{\partial^2 u_z}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial y^2} \right) - \frac{\mu}{\Lambda^2} \left(\frac{\partial \Lambda}{\partial x} \frac{\partial u_z}{\partial x} + \frac{\partial \Lambda}{\partial y} \frac{\partial u_z}{\partial y} \right) \quad (15)$$

فرم بدون بعد معادلات (۱۳) تا (۱۵) به صورت زیر است:

$$\tau_{xz}^* = \frac{1}{\Lambda} \frac{\partial u^*}{\partial x^*}, \quad \tau_{yz}^* = \frac{1}{\Lambda} \frac{\partial u^*}{\partial y^*} \quad (16)$$

$$\Lambda = 1 + 2 \frac{\epsilon We^2}{K^2} (\tau_{xz}^{*2} + \tau_{yz}^{*2}) \quad (17)$$

$$\frac{1}{\Lambda} \left(\frac{\partial^2 u^*}{\partial x^{*2}} + \frac{\partial^2 u^*}{\partial y^{*2}} \right) - \frac{1}{\Lambda^2} \left(\frac{\partial \Lambda}{\partial x^*} \frac{\partial u^*}{\partial x^*} + \frac{\partial \Lambda}{\partial y^*} \frac{\partial u^*}{\partial y^*} \right) = -2 + GE_s^* K^2 \frac{\sinh \psi^*}{1 + 4\nu \sinh^2(\psi^*/2)} \quad (18)$$

که در آنها $\tau^* = H\tau / \mu u_{ref}$ و $G = \epsilon e^{\gamma} Z^{\gamma} n^{\gamma} \lambda_D^{\gamma} / \mu \lambda_m$ و همچنین $We = \lambda u_{ref} / \lambda_D$ نمایانگر عدد وایزنبرگ است که معیاری از میزان الاستیسیته سیال است. لازم به ذکر است که جملات سمت راست معادله (۱۸) به ترتیب از بی بعد سازی گرادبان فشار و نیروی حجمی الکتروسیتیکی در معادله (۱۵) ناشی شده‌اند. واضح است که روابط (۱۲) و (۱۶) تا (۱۸) کوپل بوده و بنابراین می‌بایست به صورت همزمان با در نظر

$$\frac{\partial \Theta_S}{\partial t^*} = \Xi Da [\Theta_w (1 - \Theta_S) - K_D \Theta_S] \quad (29)$$

در این معادله Da و K_D به ترتیب عدد دامکوهلر و ثابت تعادل سینتیکی هستند که به فرم زیر داده می‌شوند:

$$Da = \frac{k_a c_{S0} H}{D}, \quad K_D = \frac{k_d}{k_a c_{in}} \quad (30)$$

با فرض اینکه در زمان صفر غلظت اولیه صفر باشد، شرایط اولیه بدون بعد برای معادله‌ی (۲۹) به صورت زیر می‌باشد:

$$\Theta_S|_{t^*=0} = 0 \quad (31)$$

مجموعه‌ی معادلات حاکم به همراه شرایط اولیه و مرزی با استفاده از روش تفاضل محدود حل می‌گردند. جزئیات حل عددی مربوطه در بخش ۲-۴ ارائه شده است. پس از محاسبه‌ی میدان غلظت، پارامترهای فیزیکی مورد نظر قابل محاسبه هستند. یکی از اصلی‌ترین پارامترها در مقالات بیوشیمی غلظت متوسط محیطی آنالیت‌های جذب شده می‌باشد. فرم بدون بعد این پارامتر بصورت زیر ارائه می‌شود:

$$\Theta_{S, \text{pav}}(z^*, t^*) = \frac{\int_0^1 \Theta_S|_{x^*=\alpha} dy^* + \int_0^\alpha \Theta_S|_{y^*=1} dx^*}{1+\alpha} \quad (32)$$

پارامتر مهم دیگر متوسط مقداری Θ_S بر روی کل سطح کانال می‌باشد که بصورت زیر بیان می‌گردد:

$$\Theta_{S, \text{av}}(t^*) = \frac{\int_0^{L^*} \Theta_{S, \text{pav}} dz^*}{L^*} \quad (33)$$

۲-۴- حل عددی

مجموعه‌ی معادلات حاکم به همراه شرایط اولیه و مرزی با استفاده از روش تفاضل محدود حل شد. به دلیل گرادیان‌های زیاد پتانسیل الکتریکی در نزدیکی‌های جدار، لازم است که گره‌های بیشتری در این نواحی قرار گیرد. همچنین در مراحل اولیه واکنش گرادیان غلظت در ابتدای کانال بسیار

درجهت N می‌باشد. به طور معمول، سمت چپ معادله (۲۱) به c_S و c_S غلظت آنالیت در مجاورت جدار c_w بصورت زیر ارتباط می‌یابد [۱۵]:

$$\frac{\partial c_s}{\partial t} = k_a c_w (c_{S0} - c_s) - k_d c_s \quad (22)$$

در این معادله k_a و k_d به ترتیب نرخ‌های همبستگی و تفکیک را نشان می‌دهند. غلظت آنالیت و از طریق معادلات (۲۱) و (۲۲) به همدیگر وابسته هستند. با فرض ضریب نفوذ ثابت برای آنالیت، معادله بقای بدون بعد آنالیت برای جریان توسعه یافته پایا به همراه شرایط اولیه و مرزی مربوطه به صورت زیر درمی‌آیند:

$$\frac{\partial \Theta}{\partial t^*} + u^* \frac{\partial \Theta}{\partial z^*} = \frac{\partial^2 \Theta}{\partial x^{*2}} + \frac{\partial^2 \Theta}{\partial y^{*2}} + \frac{1}{Pe^2} \frac{\partial^2 \Theta}{\partial z^{*2}} \quad (23)$$

$$\Theta|_{t^*=0} = \frac{\partial \Theta}{\partial x^*} \Big|_{x^*=0} = \frac{\partial \Theta}{\partial y^*} \Big|_{y^*=0} = \frac{\partial^2 \Theta}{\partial z^{*2}} \Big|_{z^*=L^*} = 0 \quad (24)$$

$$\frac{\partial \Theta}{\partial x^*} \Big|_{x^*=\alpha} = -\frac{1}{\Xi} \frac{\partial \Theta_S}{\partial t^*} \quad (25)$$

$$\frac{\partial \Theta}{\partial y^*} \Big|_{y^*=1} = -\frac{1}{\Xi} \frac{\partial \Theta_S}{\partial t^*} \quad (26)$$

$$\Theta|_{z^*=0, t^*>0} = 1 \quad (27)$$

که

$$\Theta = \frac{c}{c_{in}}, \quad \Theta_S = \frac{c_S}{c_{S0}}, \quad t^* = \frac{Dt}{H^2}, \quad (28)$$

$$z^* = \frac{z}{HPe}, \quad Pe = \frac{Hu_{ref}}{D}, \quad \Xi = \frac{c_{in} H}{c_{S0}}, \quad L^* = \frac{L}{HPe}$$

در این معادلات L طول کانال، Pe عدد پکلت و Ξ ظرفیت جذب نسبی را نشان می‌دهند. فرم بدون بعد معادله‌ی (۲۲) نیز به صورت زیر است:

گرفت و با انجام تحلیل وابستگی به مش و وابستگی به تعداد فواصل زمانی برای میدان غلظت مشخص شد که استفاده از ۴۰ گره در جهات عرضی، ۸۰ گره در جهت محوری و ۸۰ فاصله زمانی از زمان تزریق تا اشباع برای اخذ نتایج دقیق کافی است. از آنجا که نرخ واکنش در زمان‌های کوچک بزرگتر است، جهت رسیدن به دقت بالاتر، فواصل زمانی ابتدایی کوچکتر در نظر گرفته شدند طوری که نسبت دو فاصله زمانی پیاپی برابر ۱/۰۳ در نظر گرفته شد.

۲-۵- اعتبار سنجی

از آنجا که هیچ کدام از کارهای موجود به طور دقیق منطبق با کار حاضر نیست، جهت اعتبار سنجی مدل‌سازی از حل‌های تحلیلی ارائه شده یا قابل ارائه برای حالت‌های خاص استفاده می‌نماییم. در این راستا، جهت بررسی مدل‌سازی صحیح رفتار ویسکوالاستیک سیال از حل تحلیلی ارائه شده توسط اولیویرا و پینهو برای جریان توسعه یافته سیال پی-تی-تی در کانال دو صفحه موازی در غیاب اثرات الکتروسیستیک استفاده می‌کنیم [۲۶]. این محققین رابطه زیر را برای سرعت متوسط بدون بعد جریان ارائه نمودند:

$$u_m^* = \frac{2}{3} + \frac{16}{5} \in We^2 \quad (37)$$

لازم به ذکر است که اولیویرا و پینهو در تعریف عدد بدون بعد وایزنبرگ از مقیاس طولی H استفاده نموده‌اند در حالی که در تحقیق حاضر از λ_D استفاده شده است. بنابراین مقایسه صحیح فقط برای حالتی ممکن است که H برابر λ_D در نظر گرفته شود و این یعنی $K = 1$. با در نظر گرفتن این مقدار و انتخاب $G = 0$ جهت حذف اثرات پتانسیل جریانی و همچنین اعمال $\alpha = 10000$ جهت حذف اثرات جداره‌های جانبی، مقایسه صحیح ممکن خواهد بود. در این شرایط مقادیر سرعت متوسط بدون بعد در جدول ۱ مقایسه شده‌اند که انطباق بسیار خوب نتایج در آن قابل مشاهده است.

از آنجا که در مقایسه قبل از اثرات الکتروسیستیک صرف نظر شده بود، لازم است مقایسه‌ای شامل این اثرات نیز انجام گیرد تا بتوان از صحت حل عددی میدان‌های پتانسیل الکتریکی و سرعت اطمینان یافت. بدین منظور، داده‌های عددی را با نتایج رابطه تحلیلی برای E_S^* با استفاده از فرضیات کوچک بودن پتانسیل الکتریکی جهت اعمال خطی‌سازی $\sinh \psi^* \cong \psi^*$ در معادلات حاکم و ناچیز بودن اثرات الاستیسیته و اندازه یونی مقایسه می‌نماییم. به راحتی می‌توان نشان داد که در این شرایط، E_S^* با در نظر

بیشتر از دیگر نواحی است و بنابراین فاصله بین گره‌ها در این نواحی نیز باید کمتر باشد. جهت ریز کردن شبکه محاسباتی در نواحی ذکر شده از نگاشت‌های زیر استفاده گردید [۲۵]:

$$\hat{x} = \frac{\ln \left[\left(\beta + \frac{x^*}{W^*} \right) / \left(\beta - \frac{x^*}{W^*} \right) \right]}{\ln \left[(\beta + 1) / (\beta - 1) \right]} \quad (34)$$

$$\hat{y} = \frac{\ln \left[\left(\beta + \frac{y^*}{H^*} \right) / \left(\beta - \frac{y^*}{H^*} \right) \right]}{\ln \left[(\beta + 1) / (\beta - 1) \right]} \quad (35)$$

$$\hat{z} = 1 - \frac{\ln \left[\left(\beta_z + 1 - \frac{z^*}{L^*} \right) / \left(\beta_z - 1 + \frac{z^*}{L^*} \right) \right]}{\ln \left[(\beta_z + 1) / (\beta_z - 1) \right]} \quad (36)$$

که در آنها $\beta = H^* = H/H = 1$ ، $W^* = W/H = \alpha$ پارامتر اتساع در جهات عرضی و β_z پارامتر اتساع در جهت محوری است. با استفاده از تبدیلات (۳۴) تا (۳۶) با ایجاد یک شبکه بندی یکنواخت در فضای محاسباتی $\hat{x} - \hat{y} - \hat{z}$ می‌توان به یک شبکه بندی غیریکنواخت در فضای فیزیکی دست یافت. بدین منظور، معادلات حاکم و شرایط مرزی مربوطه با استفاده از تبدیلات ذکر شده به فضای محاسباتی منتقل شدند. سپس معادلات حاکم تبدیل یافته با استفاده از روش تفاضل مرکزی برای مشتقات مکانی و روش تفاضل پیشرو برای مشتقات زمانی گسسته شده و معادلات جبری حاصل با بهره گیری از الگوریتم ماتریس سه قطری حل شدند. معیار نسبی همگرایی برای همه معادلات برابر 10^{-7} قرار گرفت. در ابتدا میدان‌های پتانسیل الکتریکی و سرعت با استفاده از یک شبکه محاسباتی ۱۰۰ در ۱۰۰ حل شدند. به علت وابستگی گرادیان پتانسیل الکتریکی به پارامتر K ، پارامتر اتساع در جهات عرضی برای میدان‌های پتانسیل الکتریکی و سرعت به صورت $\beta = 1 + 1/(3K)$ در نظر گرفته شد. از آنجا که گرادیان‌های عرضی در میدان غلظت چندان به پارامتر K وابسته نیستند، مقدار ثابت ۱/۱ برای β در نظر گرفته شد. به همین دلیل و همچنین توجه به این مسئله که به علت هزینه محاسباتی بسیار سنگین حل معادلات غلظت امکان استفاده از ۱۰۰ گره در جهت عرضی مقدور نبود، داده‌های میدان سرعت با استفاده از الگوریتم میانبایی دو خطی به گره‌های محاسباتی میدان غلظت منتقل شدند. همچنین پارامتر β_z برابر ۱/۲ قرار

Table 1. Comparison between the values of dimensionless average velocity obtained in the present study for large aspect ratios in the absence of the electrokinetic effects and those obtained from the analytical expression of Ref. [26] for pressure-driven flow in parallel-plate channels

جدول ۱: مقایسه مقادیر سرعت متوسط بدون بعد به دست آمده در تحقیق حاضر در مقادیر بزرگ نسبت منظر در غیاب اثرات الکتروستاتیک و مقادیر به دست آمده از رابطه تحلیلی مرجع [۲۶] برای جریان فشار محرک در کانال دو صفحه موازی

تفاضل نسبی (%)	مرجع [۲۶]	کار حاضر	$\in We^2$
۰/۲۰	۳/۸۶۶۷	۳/۸۵۹۱	۱
۰/۰۹	۱۶/۶۶۷	۱۶/۶۵۲	۵
۰/۰۲	۳۲/۶۶۷	۳۲/۶۷۲	۱۰
۰/۵۳	۱۶۰/۶۷	۱۶۱/۵۲	۵۰
۰/۹۳	۳۲۰/۶۷	۳۲۳/۶۵	۱۰۰

Table 2. Comparison between the values of dimensionless induced electric field obtained from the numerical solution for large aspect ratios in the absence of the viscoelastic and steric effects assuming and the predictions of Eq. (38)

جدول ۲: مقایسه مقادیر میدان الکتریکی القایی بدون بعد به دست آمده از حل عددی در مقادیر بزرگ نسبت منظر در غیاب اثرات الاستیسیته و فضایی با فرض $\zeta^* = 1$ و $G = 1$ و پیش بینی‌های رابطه (۳۸)

تفاضل نسبی (%)	رابطه (۳۸)	حل عددی	K
۰/۷۹	۰/۲۱۴۸	۰/۲۱۶۵	۲
۰/۳۱	۰/۱۲۷۹	۰/۱۲۸۳	۳
۰/۱۴	۰/۰۸۳۴۱	۰/۰۸۳۵۳	۴
۰/۰۹	۰/۰۵۸۱۹	۰/۰۵۸۲۴	۵

زمانی نفوذ به مقیاس زمانی واکنش را نشان می‌دهد. بنابراین در حالت حدی $Da \rightarrow 0$ زمان پخش آنالیت‌ها در کانال در مقایسه با زمان واکنش در جدار صفر است و این یعنی می‌توان فرض نمود که در تمامی نقاط غلظت آنالیت به صورت آنی به غلظت تزریق در ابتدای کانال می‌رسد [۱۵]. به عبارت دیگر، در همه نقاط از جمله در نزدیکی جدار خواهیم داشت $\Theta = 1$. با جایگذاری این مقدار در معادله (۲۹) خواهیم داشت:

$$\frac{\partial \Theta_s}{\partial t^*} = \Xi Da [1 - (1 + K_D) \Theta_s] \quad (39)$$

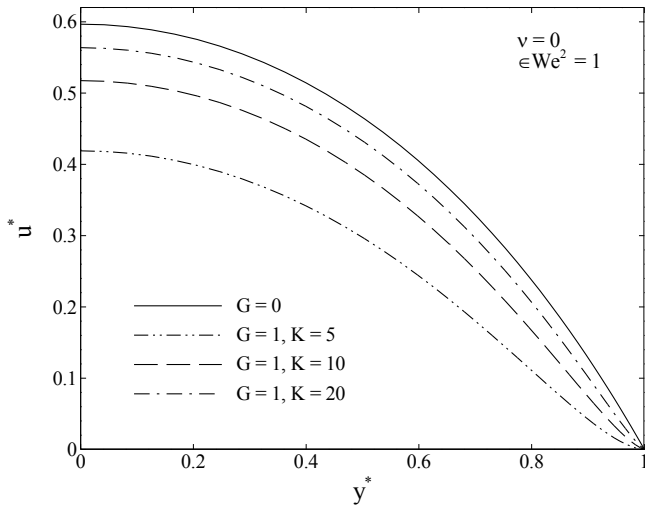
که با توجه به شرط اولیه (۳۱) نتیجه می‌دهد:

گرفتن یک کانال دو صفحه موازی به ارتفاع $2H$ به صورت زیر است:

$$E_s^* = 4\zeta^* \frac{K \cosh K - \sinh K}{2K^3 \cosh K + GK^2 \zeta^{*2} (\sinh K - K/\cosh K)} \quad (38)$$

داده‌های عددی بدست آمده با خطی سازی معادلات و همچنین اعمال $\alpha = 10000$ ، $\in We^2 = 0$ ، $\zeta^* = 1$ ، و $v = 0$ و $G = 1$ در جدول ۲ با پیش بینی‌های حل تحلیلی (۳۸) مقایسه شده‌اند. همانطور که مشاهده می‌شود انطباق کاملی بین نتایج برقرار است.

بعد از اعتبارسنجی هیدرودینامیک جریان، نوبت به واکنش‌های سطح می‌رسد. برای به دست آوردن رابطه‌ای تحلیلی برای واکنش‌های سطح به مفهوم فیزیکی عدد دامکوهرلر توجه می‌نماییم. این پارامتر نسبت مقیاس

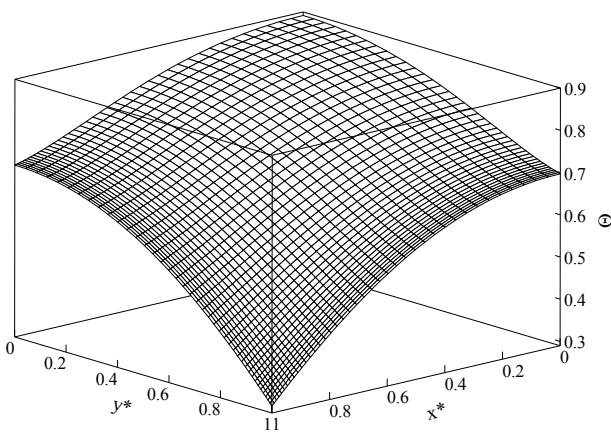


شکل ۳: توزیع سرعت در صفحه میانی عمودی برای مقادیر مختلف G و K

Fig. 3. Normalized velocity distribution at the vertical midplane for different values of G and K

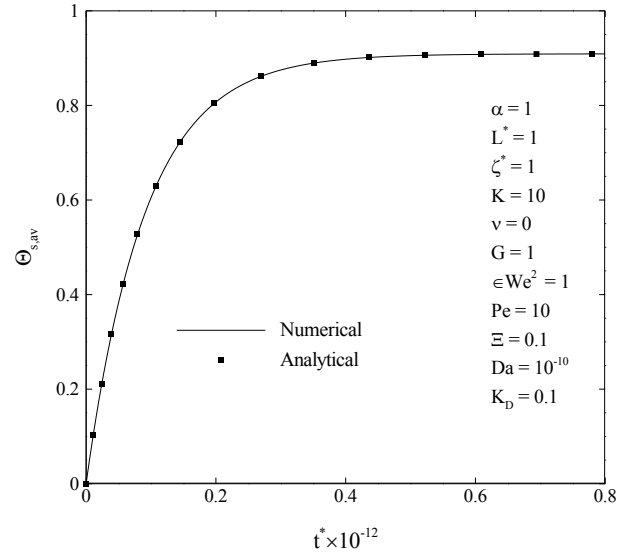
تحلیل نرخ واکنش‌های سطح لازم هستند.

شکل ۳ توزیع سرعت در صفحه میانی عمودی را برای $We^\gamma = 1$ در مقادیر مختلف G و K نشان می‌دهد. مورد $G = 0$ متناظر با حالتی است که از اثرات پتانسیل جریانی صرف‌نظر می‌شود. همانطور که انتظار می‌رود، به علت نبود مقاومت الکتروسینتیکی در مقابل جریان، در این شرایط سیال با سرعت‌های بیشتری حرکت خواهد کرد. ملاحظه می‌شود که با کاهش K سرعت جریان کاهش می‌یابد. دلیل فیزیکی این روند این است که با کاهش



شکل ۴: توزیع غلظت بدون بعد آنالیت در موقعیت محوری $z^* = 0.084$ برای $v = 0$ ، $t^* = 13$ ، $G = 1$ ، $K = 10$ ، $We^\gamma = 1$

Fig. 4. Distribution of dimensionless analyte concentration at the axial position of $z^* = 0.084$ for $v = 0$, $G = 1$, $K = 10$, $We^\gamma = 1$, and $t^* = 13$



شکل ۲: مقایسه بین نتایج عددی غلظت متوسط بدون بعد آنالیت‌های جذب شده برای $Da = 10^{-10}$ و پیش‌بینی‌های رابطه (۴۰)

Fig. 2. Comparison between the numerical results for dimensionless average concentration of surface bound analytes for $Da = 10^{-10}$ and the predictions of Eq. (40)

$$\Theta_S = \frac{1 - e^{-\Xi Da(1+K_D)t^*}}{1 + K_D} \quad (40)$$

جهت مقایسه نتایج عددی با پیش‌بینی‌های رابطه (۴۰) مقدار $Da = 10^{-10}$ در نظر گرفته شده و نتیجه در شکل ۲ نشان داده شده است. این شکل که مقادیر غلظت متوسط بدون بعد آنالیت‌های جذب شده را بر حسب زمان نشان می‌دهد حاکی از انطباق کامل نتایج عددی و تحلیلی است.

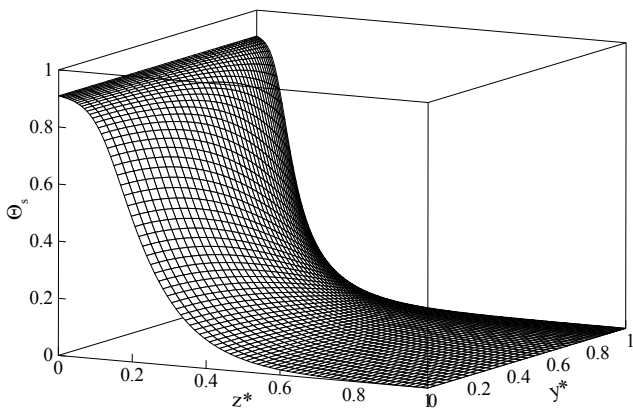
۳- نتایج و بحث

تحلیل انجام گرفته در قسمت قبل نشان داد که ۱۰ پارامتر بدون بعد شامل α ، K ، v ، G ، We^γ ، Pe ، Ξ ، Da و K_D واکنش‌های سطح در یک میکروآکتور با سیال حامل ویسکوالاستیک را کنترل می‌کنند. از آنجا که تعداد پارامترهای حاکم مسئله بسیار زیاد است، در اینجا تنها به اثرات K ، v ، G و We^γ می‌پردازیم و مابقی پارامترها را به صورت $\alpha = 1/\sqrt{2}$ ، $\zeta^* = 3$ ، $Pe = 10$ ، $\Xi = 0.1$ ، $Da = 10$ و $K_D = 0.1$ در نظر می‌گیریم مگر آنکه خلاف آن ذکر شود. همچنین طول بدون بعد کانال را برابر ۱ قرار می‌دهیم. تمامی مقادیر در نظر گرفته شده برای پارامترهای بدون بعد با استفاده از محدوده کاربردی پارامترها، ارائه شده در جدول ۳، انتخاب شده‌اند. ارائه نتایج را با ویژگی‌های هیدرودینامیکی آغاز می‌نماییم که برای

Table 3. Practical ranges of the physical parameters

جدول ۳: محدوده کاربردی پارامترهای فیزیکی

پارامتر	محدوده کاربردی	مرجع
H	$0.5-25 \mu\text{m}$	گرویس و جنسن [۱۵]
W	$10-250 \mu\text{m}$	گرویس و جنسن [۱۵]
L	$0.1-2 \text{mm}$	گرویس و جنسن [۱۵]
ζ	$1-100 \text{mV}$	کارنیاداکیس و همکاران [۲۷]
λ_D	$1-100 \text{nm}$	کارنیاداکیس و همکاران [۲۷]
b	$\sim 1 \text{nm}$	احمدیان یزدی و همکاران [۲۸]
λ_m	$0.14-1.6 \text{m}^{-1}$	هوتینک و همکاران [۲۹]
μ	$0.001-0.5 \text{Pas}$	کامپو-دیانو و همکاران [۳۰]
λ	$0-7 \text{s}$	کامپو-دیانو و همکاران [۳۰]
ϵ	$0-0.5$	کامپو-دیانو و همکاران [۳۰]
D	$43-100 \mu\text{m}^2\text{s}^{-1}$	گرویس و جنسن [۱۵]
c_{in}	$0.1 \mu\text{M}$	گرویس و جنسن [۱۵]
c_{S0}	$8-70 \text{fmolmm}^{-2}$	گرویس و جنسن [۱۵]
k_a	$1/2 \times 10^5 - 2/4 \times 10^5 \text{M}^{-1}\text{s}^{-1}$	گرویس و جنسن [۱۵]
k_d	$0-3/5 \times 10^{-3} \text{s}^{-1}$	گرویس و جنسن [۱۵]

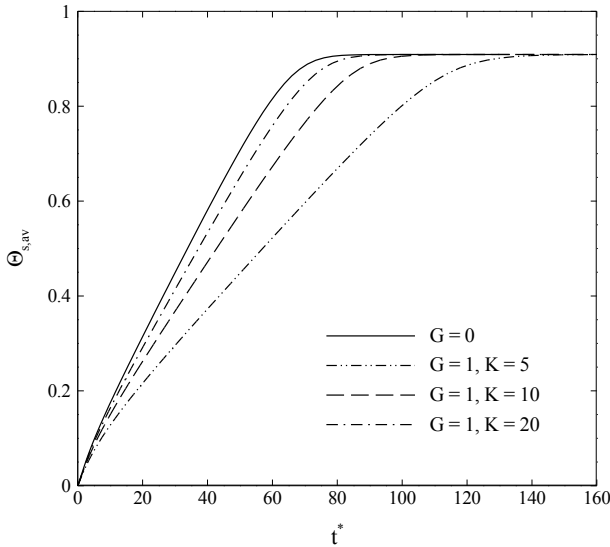


شکل ۵: توزیع غلظت بدون بعد آنالیت‌های جذب شده در جداره عمودی برای $t^* = 13$ و $\nu = 0$ ، $G = 1$ ، $K = 10$ ، $\epsilon We^2 = 1$

Fig. 5. Distribution of dimensionless concentration of surface bound analytes at the vertical wall for $\nu = 0$, $G = 1$, $K = 10$, $\epsilon We^2 = 1$, and $t^* = 13$

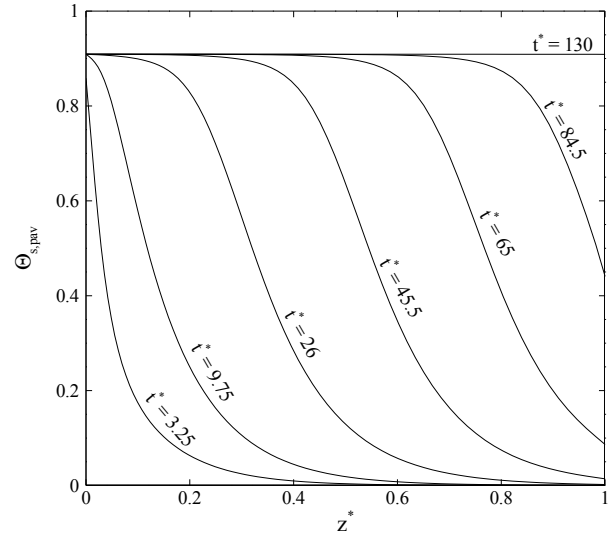
K ضخامت نسبی دولایه الکتربیکی افزایش می‌یابد. چنین چیزی بدین معناست که یون‌های دارای بار مخالف سطح در ناحیه وسیعتری حضور دارند و انتقال یون‌ها به پایین دست جریان و در نتیجه اختلاف پتانسیل جریانی بیشتر می‌شود.

شکل ۴ یک نمونه از توزیع سطح مقطعی Θ را نمایش می‌دهد. این شکل نشان می‌دهد که بیشینه پروفیل غلظت آنالیت در محور کانال، جایی که اثرات سطحی کمینه است، اتفاق می‌افتد. آنالیت‌هایی که نزدیک گوشه کانال حرکت می‌کنند دارای سرعت کمی هستند و همچنین در معرض واکنش با سایت‌های سطحی هر دو جداره افقی و عمودی هستند. بنابراین، بیشتر آنالیت‌ها به وسیله سایت‌های سطحی دیواره‌ها به دام می‌افتند و، با توجه به شکل، کمینه غلظت آنالیت در آنجا حاصل می‌شود.



شکل ۷: تغییرات زمانی غلظت متوسط بدون بعد آنالیت‌های جذب‌شده در مقادیر مختلف G و K برای $\nu=0$ و $We^\tau=1$

Fig. 7. Temporal variations of dimensionless average concentration of surface bound analytes at different values of G and K for $\nu=0$ and $We^\tau=1$



شکل ۶: تغییرات محوری غلظت متوسط محیطی بدون بعد آنالیت‌های جذب‌شده در زمان‌های مختلف برای $\nu=0, G=1, K=10, We^\tau=1$

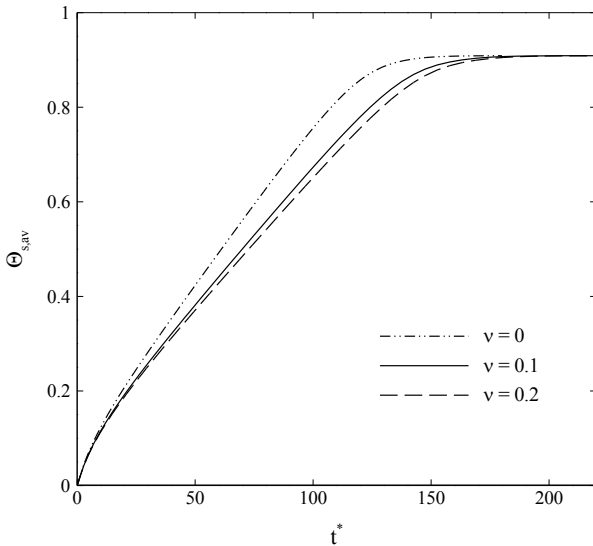
Fig. 6. Axial variations of dimensionless perimeter-averaged concentration of surface bound analytes at different times for $\nu=0, G=1, K=10, We^\tau=1$

وابسته به دو پارامتر G و K است. پارامتر اول را به نوعی می‌توان نمایانگر نسبت قدرت یونی الکتروولت به لزجت سیال در نظر گرفت. بنابراین، افزایش این پارامتر را می‌توان به معنای افزایش قدرت یونی الکتروولت به ازای مقدار ثابت لزجت فرض نمود. در نتیجه، طبیعی است که افزایش G منجر به افزایش اثرات پتانسیل جریانی و نهایتاً کاهش سرعت سیال شود. با کاهش سرعت سیال، آنالیت‌ها کندتر حرکت کرده و بنابراین حضور کمتری در نزدیکی سطح، خصوصاً در نواحی پایین دستی جریان، خواهند داشت. پس قابل انتظار است که با افزایش G نرخ واکنش‌های سطحی کاهش پیدا کرده و زمان بیشتری برای رسیدن سطح به حالت اشباع لازم باشد. چنین چیزی در شکل ۷ که تغییرات زمانی $\Theta_{S,av}$ را در مقادیر مختلف G و K برای $We^\tau=1$ نمایش می‌دهد قابل مشاهده است. این شکل همچنین نشان می‌دهد که افزایش K منجر به کاهش زمان اشباع سطح می‌شود. دلیل این است که، با توجه به شکل ۳، سرعت سیال تابعی افزایشی از K است. در شکل ۸ تغییرات زمانی $\Theta_{S,av}$ در مقادیر مختلف We^τ مورد توجه قرار گرفته است. همانطور که قبلاً گفته شد We^2 معیاری از میزان الاستیسیته سیال است. با افزایش We^2 سیال بیشتر و بیشتر مشابه یک جامد الاستیک رفتار می‌نماید. بنابراین، توزیع سرعت سیال بیشتر و بیشتر به یک توزیع یکنواخت نزدیک می‌شود. این بدین معنی است که سرعت در نزدیکی جدار افزایش می‌یابد که باعث انتقال سریعتر آنالیت‌ها به نقاط پایین

در ادامه، یک نمونه توزیع Θ_S در جداره عمودی در شکل ۵ مورد بررسی قرار می‌گیرد. به علت حضور کمتر آنالیت‌ها در پایین دست جریان، غلظت آنالیت‌های جذب شده تابعی کاهش از مختصات محوری است. در ابتدای کانال، به خاطر یکنواختی غلظت آنالیت، Θ_S مستقل از y^* است. برای دیگر نقاط محوری، به خاطر حضور کم آنالیت‌ها در مقادیر بزرگتر y^* ، Θ_S با نزدیک شدن به گوشه کم می‌شود.

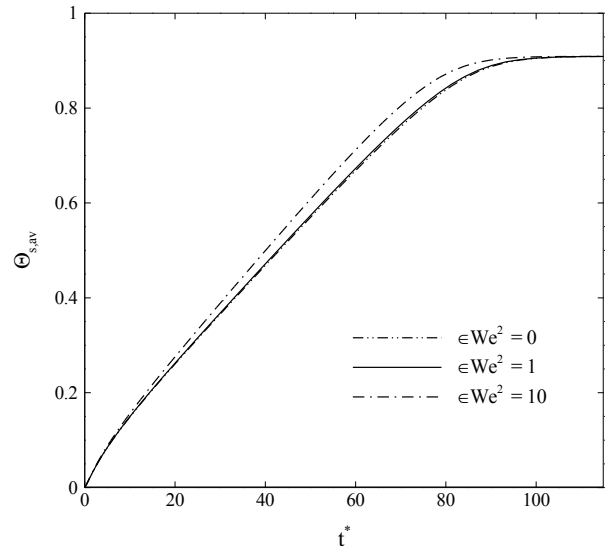
سیر تکامل زمانی $\Theta_{S,pav}$ در شکل ۶ نشان داده شده است. در ابتدا، آنالیت‌ها صرفاً در نزدیکی ورودی وجود دارند. از این‌رو، واکنش فقط در این ناحیه اتفاق می‌افتد. با توجه به وجود سایت‌های اتصال‌دهنده زیاد، فرایند واکنش با سرعت بالا اتفاق می‌افتد که باعث تخلیه محلول می‌شود. با افزایش زمان، سرعت واکنش در ناحیه ورودی کانال کاهش می‌یابد. همچنین آنالیت‌ها زمان کافی برای رسیدن به نقاط محوری بزرگتر را دارند. در نتیجه، ناحیه واکنش به پایین دست جریان گسترش می‌یابد. در مقیاس‌های زمانی بزرگتر، ناحیه بالادست جریان اشباع می‌شود که تحت این شرایط سرعت جذب با سرعت دفع برابر می‌شود. از این‌رو، آنالیت‌های ورودی به‌طور کامل به ناحیه پایین دست جریان انتقال می‌یابند.

یکی از مهمترین اهداف مطالعه حاضر بررسی اثرات پتانسیل جریانی بر واکنش‌های سطح است. برای یک کانال مشخص، اهمیت پتانسیل جریانی



شکل ۹: تغییرات زمانی غلظت متوسط بدون بعد آنالیت‌های جذب‌شده در مقادیر مختلف ν برای $\epsilon We^2 = 1$, $G = 1$, $K = 5$

Fig. 9. Temporal variations of dimensionless average concentration of surface bound analytes at different values of ν for $G = 1$, $\epsilon We^2 = 1$



شکل ۸: تغییرات زمانی غلظت متوسط بدون بعد آنالیت‌های جذب‌شده در مقادیر مختلف ϵWe^2 برای $\nu = 0$, $G = 1$, $K = 10$

Fig. 8. Temporal variations of dimensionless average concentration of surface bound analytes at different values of ϵWe^2 for $\nu = 0$, $G = 1$, $K = 10$,

الکتریکی بالاتر در صورت عدم لحاظ اندازه یونی انباشت غیر فیزیکی یون‌ها اتفاق خواهد افتاد. جهت ملاحظه اثرات سایز یونی، پتانسیل زتای بدون بعد را به ۴ افزایش داده و تغییرات زمانی غلظت متوسط بدون بعد آنالیت‌های جذب‌شده را در سه مقدار مختلف از ν در شکل ۹ نشان داده شده است. این شکل نشان می‌دهد که زمان اشباع تابعی افزایشی از فاکتور فضایی است. به عبارت دیگر، با افزایش اهمیت اندازه یونی نرخ واکنش‌های سطح کاهش می‌یابد. جهت تحلیل فیزیکی این نتایج باید به این نکته توجه کنیم که با در نظر گرفتن اندازه یون‌ها حد بالایی برای غلظت یونی در دو لایه الکتریکی ایجاد می‌گردد. در نتیجه، برای خنثی سازی بار الکتریکی جدار که در هر دو حالت با و بدون در نظر گرفتن اثرات فضایی ثابت است، لازم است که وسعت دو لایه افزایش یابد. با توسعه دو لایه به نواحی دور از جدار، که در آنها ذرات سیال دارای سرعت بیشتری هستند، انتقال یون‌ها به پایین دست جریان شدت می‌یابد و بنابراین میدان القایی قوی‌تری ایجاد می‌گردد. میدان قوی‌تر به معنی مقاومت بیشتر الکتروسینتیکی در مقابل جریان است و به کاهش سرعت سیال می‌انجامد که خود باعث کاهش آنالیت در پایین دست جریان و کاهش نرخ واکنش‌های سطح می‌گردد. لازم به ذکر است که مقدار $\kappa^* = 4$ حد بالای پتانسیل زتا در بسیاری از کاربردهای مربوطه است [۲۷] و بنابراین در بیشتر مسائل کاربردی می‌توان از اثرات فضایی صرف‌نظر نمود.

دست سطح می‌شود. بنابراین، می‌توان انتظار داشت که زمان رسیدن به اشباع با افزایش کاهش یابد؛ چنین چیزی در شکل ۸ مشاهده می‌شود. با مقایسه شکل‌های ۷ و ۸ واضح است که اثرات پتانسیل جریانی بر روی واکنش‌های سطح بسیار مهمتر از اثرات الایستیسیتی سیال هستند و حتی می‌توانند موجب افزایش حدود ۱۰۰ درصدی زمان رسیدن به حالت اشباع شوند.

نکته جالب توجه در شکل‌های ۷ و ۸ این است که $\Theta_{S,av}$ حتی در حالت اشباع نیز به ۱ نمی‌رسد. علت این امر جدا شدن مداوم درصدی از آنالیت‌های جذب شده حتی در حالت تعادل است. برای به دست آوردن مقدار Θ_S در حالت تعادل که آن را با $\Theta_{S,eq}$ نمایش می‌دهیم می‌توان از رابطه (۲۹) استفاده کرد. در شرایط پایا $\Theta_w = 1$ و $\partial\Theta_S / \partial t^* = 0$ که نتیجه می‌دهد $\Theta_{S,eq} = 1 / (1 + K_D)$. این رابطه نشان می‌دهد که فقط برای $K_D = 0$ مقدار $\Theta_{S,eq}$ به ۱ می‌رسد. به ازای $K_D = 0.1$ خواهیم داشت $\Theta_{S,eq} = 0.99$ که در تطابق کامل با نتایج حل عددی است.

در تمامی شکل‌های پیشین مقدار فاکتور فضایی برابر صفر در نظر گرفته شده بود. این بدین معنی است که در بدست آوردن توزیع یونی اثرات اندازه یون‌ها نادیده گرفته شده بود. چنین فرضی برای مقادیر کوچک پتانسیل زتا، از جمله مقدار $\kappa^* = 3$ که در شکل‌های پیشین اعمال شده بود، منجر به خطای قابل توجه در نتایج نمی‌شود چون تراکم یون‌ها آنقدر زیاد نیست که منجر به انباشت غیر فیزیکی آنها گردد. با این وجود، در پتانسیل‌های

۴- نتیجه گیری

در این تحقیق انتقال جرم و واکنش‌های سطح در یک میکروآکتور بیولوژیکی ناهمگن فشار-محرك مورد بررسی قرار گرفت. مهم‌ترین هدف تحقیق بررسی اثرات پتانسیل جریانی و الاستیسیته سیال بر روی واکنش‌های سطح بود. پتانسیل زتای جداره ثابت و یکنواخت در نظر گرفته شده و جریان به صورت توسعه یافته فرض شد. برای در نظر گرفتن اثرات رئولوژی غیرخطی سیال از مدل ویسکوالاستیک پی-تی-تی استفاده شد. معادلات حاکم در حالت بدون بعد توسط روش تفاضل محدود بر اساس شبکه بندی غیریکنواخت حل شدند. نتایج نشان دادند که افزایش قدرت یونی الکترولیت در لزجت ثابت و همچنین ضخیم شدن دولایه الکتریکی منجر به کاهش بیشتر سرعت سیال در نتیجه ایجاد پتانسیل جریانی می‌شود. با افزایش پتانسیل جریانی سرعت انتقال آنالیت‌ها به پایین دست کم شده و در نتیجه نرخ واکنش‌های سطح کاهش می‌یابد. نتایج نشان دادند که افزایش زمان اشباع در نتیجه اثرات پتانسیل جریانی می‌تواند تا ۱۰۰ درصد نیز باشد. به علاوه، نشان داده شد که الاستیسیته سیال منجر به کاهش زمان رسیدن به حالت اشباع می‌شود، با این وجود اثرات آن بسیار کمتر از پتانسیل جریانی است. همچنین نشان داده شد که اثرات اندازه یون بر واکنش‌های سطح نیز مشابه اثرات الاستیسیته هستند با این تفاوت که می‌توانند اندکی تأثیر گذاری شدیدتری داشته باشند. البته این اثرات تنها در مقادیر بزرگ پتانسیل الکتریکی خود را نشان می‌دهند و بنابراین در مقادیر معمول پتانسیل زتا قابل صرف نظر هستند.

منابع

- reveals epigenetic chimerism in preimplantation embryos, *Science* 341 (2013) 1110-1112.
- [4] M. Sadeghi, A. Sadeghi, M.H. Saidi, Electroosmotic Flow in Hydrophobic Microchannels of General Cross Section, *Journal of Fluids Engineering, Transactions of the ASME*, 138(3) (2016) 031104.
- [5] W. Ehrfeld, V. Hessel, H. Löwe, *Microreactors: New Technology for Modern Chemistry*, Wiley, Weinheim, 2000.
- [6] S. Jomeh, M. Hoorfar, Numerical modeling of mass transport in microfluidic biomolecule-capturing devices equipped with reactive surfaces, *Chem. Eng. J.*, 165(2) (2010) 668-677.
- [7] G. Taylor, Dispersion of Soluble Matter in Solvent Flowing Slowly through a Tube, *Proc. R. Soc. London, Ser. A*, 219(1137) (1953) 186-203.
- [8] R. Aris, On the Dispersion of a Solute in a Fluid Flowing through a Tube, *Proc. R. Soc. London, Ser. A*, 235 (1956) 67-77.
- [9] M. Pagitsas, A. Nadim, H. Brenner, Projection operator analysis of macrotransport processes, *J. Chem. Phys.*, 84 (1986) 2801-2807.
- [10] G.N. Mercer, A.J. Roberts, A Centre Manifold Description of Contaminant Dispersion in Channels with Varying Flow Properties, *SIAM J. Appl. Math.*, 50 (1990) 1547-1565.
- [11] R. Sankarasubramanian, W.N. Gill, Unsteady Convective Diffusion with Interphase Mass Transfer, *Proc. R. Soc. London, Ser. A*, 333 (1973) 115-132.
- [12] R.W. Glaser, Antigen-antibody binding and mass transport by convection and diffusion to a surface: A two-dimensional computer model of binding and dissociation kinetics, *Anal. Biochem.*, 213(1) (1993) 152-161.
- [1] K.S. Elvira, X.C. i Solvas, R.C.R. Wootton, A.J. deMello, The past, present and potential for microfluidic reactor technology in chemical synthesis, *Nat. Chem.*, 5(11) (2013) 905-915.
- [2] L. Martin, M. Meier, S.M. Lyons, R.V. Sit, W.F. Marzluff, S.R. Quake, H.Y. Chang, Systematic reconstruction of RNA functional motifs with high-throughput microfluidics, *Nat. Methods*, 9(12) (2012) 1192-1194.
- [3] C. Lorthongpanich, L.F. Cheow, S. Balu, S.R. Quake, B.B. Knowles, W.F. Burkholder, D. Solter, D.M. Messerschmidt, Single-cell DNA-methylation analysis

- [22] A. Sadeghi, M.H. Saidi, Z. Waezi, S. Chakraborty, Variational formulation on Joule heating in combined electroosmotic and pressure driven microflows, *Int. J. Heat Mass Transfer*, 61(1) (2013) 254-265.
- [23] C. Yang, D. Li, J.H. Masliyah, Modeling forced liquid convection in rectangular microchannels with electrokinetic effects, *Int. J. Heat Mass Transfer*, 41(24) (1998) 4229-4249.
- [24] S.G. Kandlikar, S. Garimella, D. Li, S. Colin, M.R. King, *Heat Transfer and Fluid Flow in Minichannels and Microchannels*, Elsevier, Oxford, 2006.
- [25] A. Anderson, J.C. Tannehill, R.H. Pletcher, *Computational Fluid Mechanics and Heat Transfer*, Hemisphere, Washington, 1984.
- [26] P.J. Oliveira, F.T. Pinho, Analytical solution for fully developed channel and pipe flow of Phan-Thien–Tanner fluids, *J. Fluid Mech.*, 387 (1999) 271-280.
- [27] G. Karniadakis, A. Beskok, N. Aluru, *Microflows and Nanoflows, Fundamentals and Simulation*, Springer, New York, 2005.
- [28] A. Ahmadian-Yazdi, A. Sadeghi, M.H. Saidi, Electrokinetic mixing at high zeta potentials: Ionic size effects on cross stream diffusion, *J. Colloid Interface Sci.*, 442 (2015) 8–14.
- [29] A.E. Hoetink, T.J.C. Faes, K.R. Visser, R.M. Heethaar, On the flow dependency of the electrical conductivity of blood, *IEEE Trans. Biomed. Eng.*, 51(7) (2004) 1251-1261.
- [30] L. Campo-Deano, R.P.A. Dullens, D.G.A.L. Aarts, F.T. Pinho, M.S.N. Oliveira, Viscoelasticity of blood and viscoelastic blood analogues for use in polydimethylsiloxane in vitro models of the circulatory system, *Biomicrofluidics*, 7 (2013) 034102.
- [13] D. Dutta, Solutal transport in rectangular nanochannels under pressure-driven flow conditions, *Microfluid Nanofluid*, 10(3) (2011) 691-696.
- [14] R. Hansen, H. Bruus, T.H. Callisen, O. Hassager, Transient convection, diffusion, and adsorption in surface-based biosensors, *Langmuir*, 28(19) (2012) 7557-7563.
- [15] T. Gervais, K.F. Jensen, Mass transport and surface reactions in microfluidic systems, *Chem. Eng. Sci.*, 61(4) (2006) 1102-1121.
- [16] B. Roy, T. Das, T.K. Maiti, S. Chakraborty, Effect of fluidic transport on the reaction kinetics in lectin microarrays, *Anal. Chim. Acta*, 701(1) (2011) 6-14.
- [17] H. Parsa, C.D. Chin, P. Mongkolwisetwara, B.W. Lee, J.J. Wang, S.K. Sia, Effect of volume- and time-based constraints on capture of analytes in microfluidic heterogeneous immunoassays, *Lab Chip*, 8(12) (2008) 2062-2070.
- [18] D. Mocanu, A. Kolesnychenko, S. Aarts, A. Troost-Dejong, A. Pierik, E. Vossenaar, H. Stapert, Mass transfer effects on DNA hybridization in a flow-through microarray, *J. Biotechnol.*, 139(2) (2009) 179-185.
- [19] H. Helisaz, M.H. Saidi, A. Sadeghi, Reduction of production rate in Y-shaped microreactors in the presence of viscoelasticity, *Anal. Chim. Acta*, 990 (2017) 121-134.
- [20] A. Sadeghi, Y. Kazemi, M.H. Saidi, Joule heating effects in electrokinetically driven flow through rectangular microchannels: An analytical approach, *Nanoscale Microscale Thermophys. Eng.*, 17(3) (2013) 173-193.
- [21] J.H. Masliyah, S. Bhattacharjee, *Electrokinetic and Colloid Transport Phenomena*, First ed., Wiley, New Jersey, 2006.