VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V BRNĚ
BRNO UNIVERSITY OF TECHNOLOGY

FAKULTA STROJNÍHO INŽENÝRSTVÍ
FACULTY OF MECHANICAL ENGINEERING

ENERGETICKÝ ÚSTAV
ENERGY INSTITUTE

NÁVRH MIKROFLUIDICKÉHO SMĚŠOVAČE
DESIGN OF MICROFLUIDIC MIXER

DIPLOMOVÁ PRÁCE
MASTER'S THESIS

AUTOR PRÁCE — Bc. Martin Abrahám
AUTHOR

VEDOUCÍ PRÁCE — doc. Ing. Pavel Rudolf, Ph.D.
SUPERVISOR

BRNO 2016

Zadání diplomové práce

Ústav:	Energetický ústav
Student:	**Bc. Martin Abrahám**
Studijní program:	Strojní inženýrství
Studijní obor:	Fluidní inženýrství
Vedoucí práce:	**doc. Ing. Pavel Rudolf, Ph.D.**
Akademický rok:	2015/16

Ředitel ústavu Vám v souladu se zákonem č.111/1998 o vysokých školách a se Studijním a zkušebním řádem VUT v Brně určuje následující téma diplomové práce:

Návrh mikrofluidického směšovače

Stručná charakteristika problematiky úkolu:

Mikrofluidická zařízení se často používají v lékařské diagnostické technice, protože využívají jen velmi malá množství krve i reagenčních chemikálií. Z hlediska hydromechaniky zde ovšem dochází k velkému problému s účinností směšovacích procesů, protože proudění je laminární a na směšování se nepodílejí turbulentní víry, ale pouze molekulární difuzivita. Výrobně jednoduchými, ale z pohledu návrhu relativně složitými jsou tzv. pasivní směšovače.

Cíle diplomové práce:

Cílem diplomové práce je optimalizace tzv. heringbone pasivního směšovače tak, aby bylo dosaženo maximálního promíchání při minimální hydraulické ztrátě. Výsledky budou porovnány se směšovačem na bázi větvení proudu.

Seznam literatury:

Karniadakis, G., Beskok, A., Aluru, N.: Microflows and Nanoflows, Springer, 2005

Marschewski, J. et al: Mixing with herringbone-inspired microstructures: overcoming the diffusion limit in co-laminar microfluidic devices, Lab on a Chip, 15, 1923–1933, 2015

Termín odevzdání diplomové práce je stanoven časovým plánem akademického roku 2015/16

V Brně, dne

L. S.

doc. Ing. Jiří Pospíšil, Ph.D. ředitel ústavu	doc. Ing. Jaroslav Katolický, Ph.D. děkan fakulty

Abstrakt

Mikrofluidická zařízení jsou stále častěji používána v oblasti medicíny, jelikož využívají pouze malých množství pracovních vzorků jako např. krve či reagenčních chemikálií. Pro práci s danými látkami mnohdy vyžadujeme efektivního smísení a zde nastává hlavní problém v mikrofluidických systémech. Z důvodu malých rozměrů je zde proudění pouze laminární a na mísení se tedy nepodílejí turbulentní víry, ale jen molekulární difuzivita.

Abstract

Microfluidic devices are more frequently being used in medicine as they operate with small amounts of test samples, such as blood or reagent chemicals. To work with such substances, effective mixing of the solution is usually required, which emerged as the most challenging problem in microfluidic systems. Due to the minor dimensions of the devices only laminar flow occurs, thus the turbulent eddies do not contribute to the mixing, but only the molecular diffusivity.

Klíčová slova

Mikrofluidika, Reynoldsovo číslo, laminární proudění, aktivní mísení, pasivní mísení, mikromísiče, CFD, Fluent, Staggered herringbone mixer

Key words

Microfluidics, Reynold's number, laminar flow, active mixing, passive mixing, micromixer, CFD, Fluent, Staggered herringbone mixer

Bibliografická citace mé práce:

ABRAHÁM, M. *Návrh mikrofluidického směšovače*. Brno: Vysoké učení technické v Brně, Fakulta strojního inženýrství, 2016. 83 s. Vedoucí diplomové práce doc. Ing. Pavel Rudolf, Ph.D..

Prohlášení

Prohlašuji, že jsem diplomovou práci na téma „Návrh mikrofluidického směšovače“ vypracoval samostatně s použitím odborné literatury a pramenů uvedených na seznamu, který tvoří přílohu této práce.

V Brně dne: ……

Bc. Martin Abrahám

Poděkování

Rád bych tímto poděkoval všem, kteří mi byli při vypracování této diplomové práce nápomocni. Zvláštní poděkování patři panu doc. Ing. Pavlu Rudolfovi, Ph.D za cenné připomínky, rady a odborné vedení této diplomové práce.

Obsah

1. Úvod **15**

2. Reynoldsovo číslo **16**

2.1 Laminární proudění 16

2.2 Navier – Stokesova rovnice 16

3. Mikromíchadla **18**

3.1 Aktivní mísiče 19

3.1.1 Narušování tlakového pole 19

3.1.2 Elektrokinetická nestabilita 20

3.1.3 Dielektroforezní poháněcí síla 20

3.1.4 Elektrosmáčecí otřesy 20

3.1.5 Magnetohydrodynamické mísiče 21

3.1.6 Ultrazvukové mísiče 21

3.2 Pasivní mísiče 22

3.2.1 Mísiče ve tvaru T a Y 22

3.2.2 Paralelní laminování 23

3.2.3 Sekvenční laminování 23

3.2.4 Zaměřování proudu 24

3.2.5 Mísiče s chaotickým prouděním 25

3.2.6 Staggered Herringbone Mixer (SHM) 25

3.2.7 Vícefázová mikrofluidika a kapkové mísiče 26

4. Využití mikromísičů **27**

4.1 Využití pro chemické reakce 27

4.1.1 Krystalizace 27

4.1.2 Extrakční procesy 28

4.1.3 Polymerizace 28

4.1.4 Organická syntéza 28

4.2 Využití v biologických a biochemických procesech 29

4.2.1 Enzymové zkoušky 29

4.2.2 Biologické zkoušky 30

4.2.3 Bioanalytické procesy, DNA, třídění a oddělování buněk 30

4.2.4 Skládání proteinů 31

4.3 Využití v detekčních aplikacích 31

4.3.1 Spektroskopie nukleární magnetické rezonance (NMR) 32

4.3.2 Infračervená spektroskopie (FT-IR) 32

4.3.3 Ramanova spektroskopie 33
5. Výpočtové modelování proudění 34
5.2 Herringbone pasivní směšovač 34
5.2.1 Výpočetní doména 35
5.2.2 Tvorba sítě 35
5.3 Mísič na bázi větvení proudu 36
5.3.1 Výpočetní doména 36
5.3.2 Tvorba sítě 37
5.4 Optimalizace pasivního směšovače herringbone 38
5.4.1 Rovné drážkování napříč kanálkem 38
5.4.2 Drážkování pod úhlem 45° 39
5.4.3 Hradbový mísič 39
5.4.4 Střídání drážek 39
5.4.5 Šípový mísič 39
5.4.6 Zubový mikromísič 40
5.5 Mísič ve tvaru písmene Y 41
5.6 CFD simulace proudění 41
5.6.1 Nastavení výpočetního softwaru 41
5.6.2 Řešení difuze v programu Ansys Fluent 41
5.6.3 Okrajové podmínky 41
5.6.4 Metody řešení 42
6. Postprocessing 43
6.1 Účinnost mikromísení 43
6.2 Herringbone pasivní směšovač 43
6.2.1 Rychlostní profil 46
6.2.2 Proudnice 47
6.3 Mísič na bázi přerozdělení proudu 49
6.3.1 Rychlostní profil 50
6.3.2 Proudnice 51
7. Optimalizace pasivního směšovače herringbone 52
7.1 Rovné drážkování napříč kanálkem 52
7.1.1 Rychlostní profil 53
7.1.2 Proudnice 54
7.2 Drážkování pod úhlem 45° 54
7.2.1 Rychlostní profil 56

7.2.2 Proudnice 57
7.3 Hradbový mísič 58
7.3.1 Rychlostní profil 59
7.3.2 Proudnice 60
7.4 Střídání drážek 61
7.4.1 Rychlostní profil 62
7.4.2 Proudnice 63
7.5 Šípový mísič 64
7.5.1 Rychlostní profil 65
7.5.2 Proudnice 66
7.6 Zubový mikromisíč 66
7.6.1 Rychlostní profil 68
7.6.2 Proudnice 69
7.7 Mísič ve tvaru písmene Y 69
7.7.1 Rychlostní profil 70
7.7.2 Proudnice 71
8. Srovnání výsledků 72
8.1 Účinnost a tlaková ztráta 72
9. Závěr 75
10. Použitá literatura 77
11. Seznam použitých zkratek a symbolů 81
12. Seznam příloh 83

1. Úvod

Mikrofluidika je odvětvím mechaniky tekutin, které se zabývá prouděním v zařízeních s mikro a nano rozměry. Samotná mikrofluidická zařízení si vystačí pouze s velmi malým množstvím pracovních látek a tato zařízení mají tedy obrovskou výhodu zejména v medicíně a bioanalytické chemii. V dnešní době jsou kladeny požadavky na získání tzv. lab – on – chip, tedy mikrofluidického čipu, kde bychom byli schopni všech operací od odběru vzorků až po jejich rozbor [1][2].

První část předkládané práce popisuje teorii proudění v mikrofluidických zařízeních. V další části práce jsou popsána zařízení pro mísení kapalin, která jsou nedílnou součástí těchto systémů, jelikož na mísení se nepodílí turbulentní víry (laminární proudění), ale pouze molekulární difuzivita. Poslední část rešeršní části pojednává právě o využití mikromísičů.

Ve výpočtové části diplomové práce je proveden postup výpočtu a samotný výpočet herringbone pasivního směšovače, který bude následně optimalizován. V této kapitole je dále navržen mikromísič na bázi větvení proudu. V další sekci výpočtové části se dostaneme ke stanovení účinností v optimalizovaných mísičích, které jsou následně srovnány s mísičem na bázi přerozdělení proudu z hlediska účinnosti a hydraulických ztrát.

2. Reynoldsovo číslo

Silové poměry v tekutinách jsou charakterizovány Reynoldsovým číslem (Re). To nám dává do souvislosti charakteristické rozměry, kinematickou viskozitu tekutiny a rychlost proudící tekutiny. Jedná se o poměr sil setrvačných a sil viskozních. Je dáno vztahem [3]:

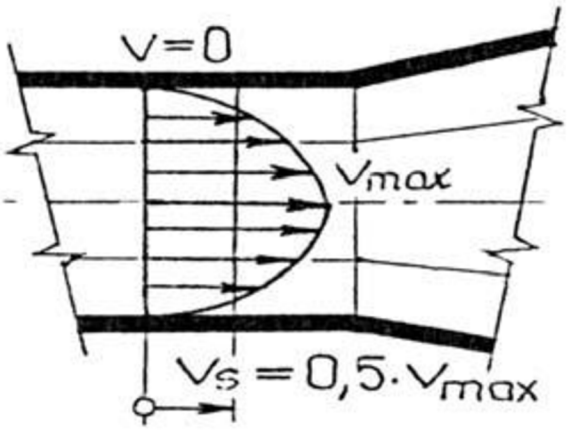
$$Re = \frac{u \cdot D}{\nu} \tag{1}$$

ν – kinematická viskozita [$m^2 \cdot s^{-1}$], u – rychlost [$m \cdot s^{-1}$], D – charakteristický rozměr [m], Re – Reynoldsovo číslo [-]

Svou velikostí určuje druh proudění, kdy do hodnoty Re < 2320 se jedná o laminární a od Re > 2320 se jedná o tzv. turbulentní proudění (v případě plně protékaného potrubí kruhového průřezu). V mikrofluidice nabývá Reynoldsovo číslo řádově jednotek až maximálně stovek, uvažujeme tu proto pouze laminární proudění. S tím nastává i problém míchání pracovních látek, protože se na mísení nepodílí turbulentní víry.

2.1 Laminární proudění

Laminární proudění je takové proudění, kdy se částice pohybují ve vrstvách. Rychlosti na rozdíl od proudění turbulentního nemají fluktuační složky, což má za následek nepřemisťování částic napříč průřezem. Takové proudění se vyskytuje v systémech s malými rozměry průtočných kanálů a menšími průtokovými rychlostmi. Rychlostním profilem u jednorozměrného laminárního proudění v trubici kruhového průřezu je rotační paraboloid [3].



Obr. 2.1 *Profil laminárního proudění v kruhovém potrubí [3]*

2.2 Navier – Stokesova rovnice

Navier-Stokesova rovnice je matematická formulace zákona zachování hybnosti proudící viskózní kapaliny. Tato diferenciální rovnice popisuje laminární proudění pro nestlačitelnou newtonskou tekutinu. Je dána vztahem [3]:

$$\overrightarrow{F_m} + \overrightarrow{F_p} + \overrightarrow{F_t} = \overrightarrow{F_s} \tag{2}$$

$$\vec{a} - \frac{1}{\rho} \cdot grad\, p + v \cdot \Delta\vec{v} + \frac{v}{3} \cdot grad\, div\, \vec{v} = \vec{v} \cdot grad\, \vec{v} + \frac{\partial \vec{v}}{\partial t} \tag{3}$$

$\overrightarrow{F_m}$ – silové působení vnějších hmotnostních sil [N], $\overrightarrow{F_p}$ – silové působení tlakových sil [N], $\overrightarrow{F_t}$ – silové působení třecích sil [N], $\overrightarrow{F_s}$ – silové působení setrvačných sil [N], $\vec{a}$ – výslednice vnějších zrychlení od hmotnostních sil, $grad\, p$ – vyjadřuje tlakové zrychlení od sil tlakových, $\Delta\vec{v}$ – třecí zrychlení od třecí síly, $div\, \vec{v}$ – zrychlení vlivem viskozity u stlačitelných kapalin od třecí síly, $\vec{v} \cdot grad\, \vec{v}$ – konvektivní složka zrychlení od setrvačné síly, $\frac{\partial \vec{v}}{\partial t}$ – lokální složka zrychlení od setrvačné síly

Běžně (v makrosvětě) je na stěně aplikována podmínka ulpívání. Tato podmínka nám říká, že kapalina ve vzájemné interakci se stěnou se pohybuje stejnou rychlostí jako stěna samotná, což ovšem v mikrofluidice z důvodů malých rozměrů vždy neplatí [3].

3. Mikromíchadla

Jak již bylo zmíněno v úvodu, hlavním problémem v mikrofluidice je mísení pracovních látek. V makroměřítku dochází z důvodu vysoké hodnoty Reynoldsova čísla (Re>2320) k tzv. turbulentnímu proudění a v proudu látky vznikají víry, které nám tyto pracovní látky promísí. V mikrofluidice z důvodu malých rozměrů dosahujeme pouze malých hodnot Reynoldsova čísla, proto uvažujeme pouze laminární proudění. Z tohoto důvodu jsme v mnohých případech nuceni zvýšit délku mikrokanálků, což může značně prodloužit mísící cestu. K mísení využíváme vedení tepla, proudění a difuzi. Mikromíchadla jsou převážně navrhována tak, aby se snížila mísící cesta a zvýšila kontaktní oblast s povrchem kanálků. Jsou rozdělena do dvou hlavních skupin na míchadla aktivní a pasivní [4] [5].

Aktivní míchadla využívají vnější energii, kde poháněcí síla může být důsledkem tlaku, ultrazvuku, změnou teploty nebo působícím magnetickým polem. Jejich největší výhodou je jejich efektivita, ovšem zapojení vnějších poháněcích zdrojů a výrobní ceny nejsou vhodné pro běžné aplikace. Nejsou také vhodné pro zkoumání biologických látek, kdy ultrazvukové vlny nebo vliv zvyšující se teploty by mohl narušit pracovní látku. Tato míchadla nejsou příliš dobrou volbou pro aplikaci v biologii a chemii [4] [5].

Pasivní míchadla si na rozdíl od aktivních vystačí pouze s mechanickou energií vlastního proudění. U tohoto druhu míchadel využíváme speciální návrhy a provedení tvaru mikrokanálků tak, že přerozdělíme tok pracovní látky. Přerozdělení toku nám způsobí snížení délky difuze látek a dojde k nárůstu jejich povrchové kontaktní plochy. Tato míchadla byla první popsaná mikrofluidická zařízení. Ve srovnání s míchadly aktivními nedochází k možnému poškození vzorku použitou metodou mísení, kterou u pasivních mísičů dosáhneme rozdělením proudu pracovní látky do podproudů využívající sériové a paralelní dělení, fokusované hydrodynamické proudy, chaotickou konvekci za pomocí rozdělení proudů do žeber nebo drážek na povrchu mikrokanálku nebo vpuštěním bubliny plynu či kapaliny jedné látky do proudu druhé pracovní látky [4] [5].

Samotné mísení látek je charakterizováno již výše zmíněným Reynoldsovým číslem. Dalšími podobnostními čísly jsou Pécletovo a Strouhalovo číslo. Pécletovo číslo pro mísení částic je dáno vztahem [6] [7]:

$$Pe = \frac{v \cdot L}{D} \tag{4}$$

v – rychlost proudění [$m.s^{-1}$], L – charakteristická délka mikrokanálku [m], D – koeficient difuze [$m^2.s^{-1}$]

Pokud jsou hodnoty Pe < 0,01 pak je dominantní difúze, pokud platí 0,001 < Pe < 104 pak je difúze s advekcí ve vzájemném poměru a při Pe > 104 je dominantní advekce [4] [5].

Strouhalovo číslo je vesměs spojeno s aktivními míchadly. Toto podobnostní číslo nám dává do souvislosti frekvenci vytváření vírů za překážkou, charakteristický rozměr a okamžitou rychlost vlastního proudění. Pro ustálené proudění je jeho hodnota 0. Strouhalovo číslo dáno vztahem [4][5]:

$$St = \frac{f \cdot L}{v} \tag{5}$$

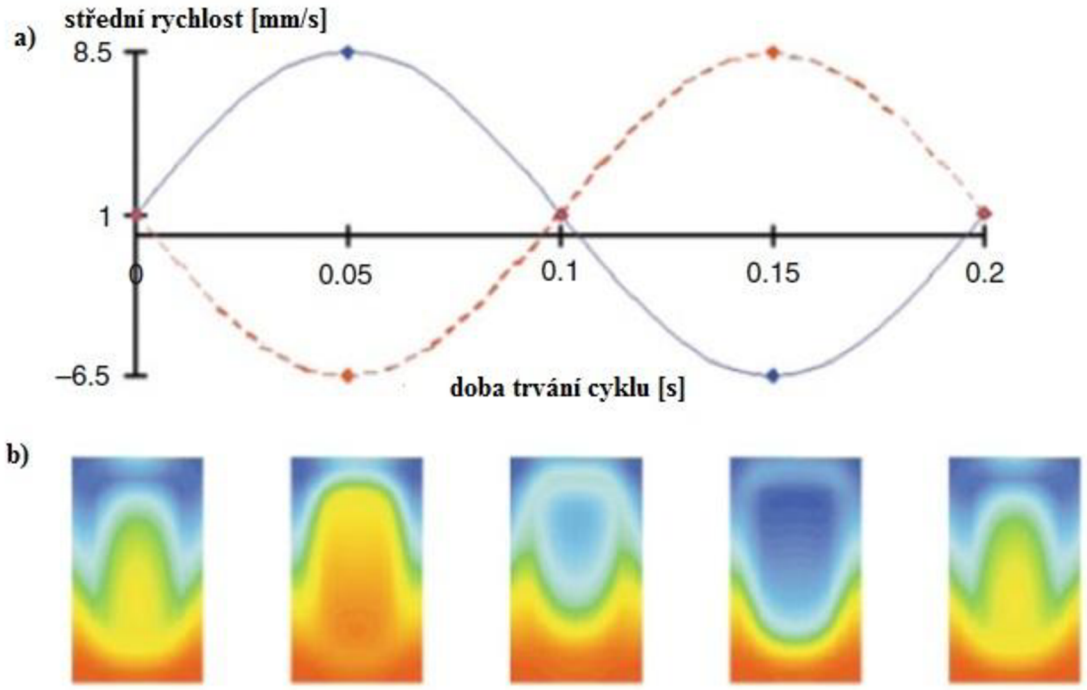
f – frekvence vytváření vírů [Hz], L – charakteristický rozměr [m], v – okamžitá rychlost proudění [m.s^{-1}]

3.1 Aktivní mísiče

Tento druh mísičů potřebuje vnější energii, která nám zajistí rychlostní rozdíly v proudící pracovní látce. Tímto dosáhneme samotného mísení. Nyní si popíšeme jejich jednotlivé druhy [4][5].

3.1.1 Narušování tlakového pole

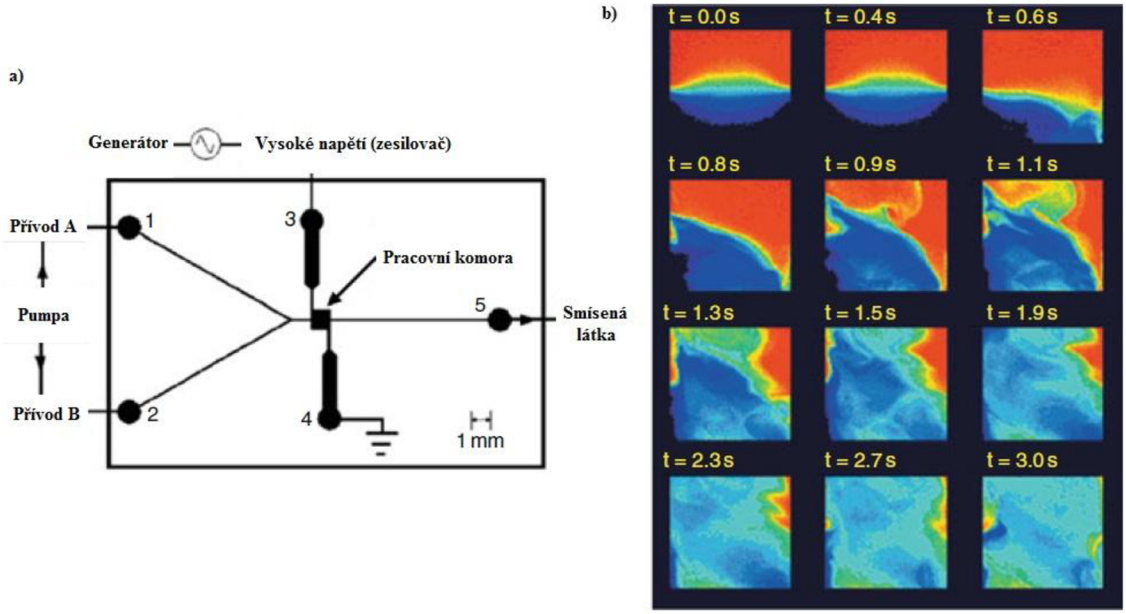
Jedná se o nejjednodušší způsob aktivního mísení. V tomto druhu mísičů vznikají vlivem pulzující rychlosti poruchy v samotném proudění. U běžných zařízení zahrnuje mísič jeden hlavní a více vedlejších kanálků kolmých na hlavní (tvar T), kde proud pracovní látky v hlavním kanálku je mísen vlivem pulzující rychlosti proudu pracovní látky z vedlejších kanálků a tím dochází k vzájemnému prolínání. Samotné pulzace jsou vytvářeny ve vedlejších kanálcích, kde je periodicky urychlován a zpomalován proud pracovní látky externí pumpou. Výsledné prolínání a difuze látek způsobí chaotickou konvekci, čímž dojde ke smísení látek. Tento druh aktivního mísení je velmi efektivní při nízkých Reynoldsových číslech – řádově desetiny až jednotky [5][6][7][8].



Obr. 3.1 *na obrázku* ***a)*** *vidíme střední rychlost v mikrokanálku v závislosti na době trvání mísení,* ***b)*** *tlakové pulzace mikrokanálku, upraveno dle [5]*

3.1.2 Elektrokinetická nestabilita

Tento druh mísičů využívá elektrokinetickou řídící sílu pro přenos pracovních látek a pro vytváření periodických poruch toku. Elektrokinetická řídící síla je způsobena proměnlivými elektrickými poli. Tato proměnlivá elektrická pole způsobují samotné mísení díky rychlému zvyšování a snižování kontaktních ploch tekutin. Zvýšení kontaktní plochy bylo výsledkem konstrukce kanálků ve tvaru T s aktivním pohonem a jejich spojení do vícenásobných zapojení, což vedlo ke kvalitnímu promíchání i při velmi nízkém Reynoldsovu číslu (Re<1). Frekvence řídícího signálu se pohybují od 0,1 do 5 Hz a mají většinou tvar sinusoidy. Velmi zajímavá je efektivnost mísení, která se pohybuje v rozmezí 50-90% [5][6][7][8].



***Obr. 3.2 a)** schéma mísiče využívajícího elektrokinetickou nestabilitu, **b)** změna kontaktních ploch tekutin v závislosti na čase, upraveno dle [5]*

3.1.3 Dielektroforezní poháněcí síla

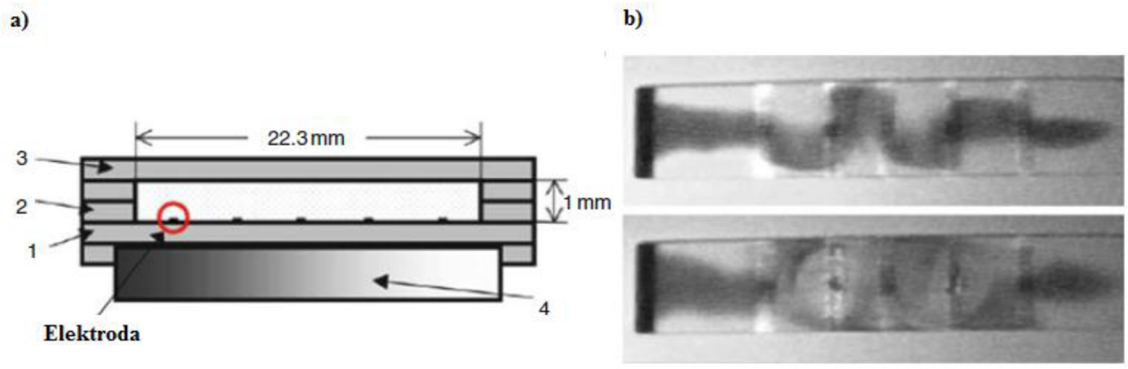
Při mísení pomocí dielektroforezní síly střídavá elektrická pole vytváří pohyb polarizovaných částic. Dipólový moment, který generuje elektrické pole, působí na částice a jejich vazby mezi indukovanými dipólovými náboji a elektrickým polem. Elektrické pole nám vytváří síť sil, která nám pohání částice směrem k nebo od elektrody. U těchto mísičů se kombinací použitého elektrického pole a rychlostí částic vytvářejí sedlovité bodové oblasti. Tímto vznikne neuspořádaný a chaotický pohyb pracovní látky, který vede k rychlému a velmi efektivnímu mísení látek [5][6][7][8].

3.1.4 Elektrosmáčecí otřesy

Pohyb kapek tekutiny může vytvářet strukturu toku v pracovní látce a zvyšuje mísení látek uvnitř kapek. Aktivním a často používaným způsobem mísení je elektrosmáčení na dielektrika (EWOD). EWOD závisí zejména na kontrole povrchového napětí kapky v závislosti na změnách elektrického pole. Kapky, které obsahují různé pracovní látky, mohou být elektricky poháněny k jejich srůstu díky jevu elektrosmáčení. Po jejich srůstu začne samovolná difuze látek v kapce a tím dojde k jejich vzájemnému mísení. Tento druh mísičů je schopen dosáhnout mísení ve velmi stísněných prostorách pracovní komory nebo kanálku [5][6][7][8].

3.1.5 Magnetohydrodynamické mísiče

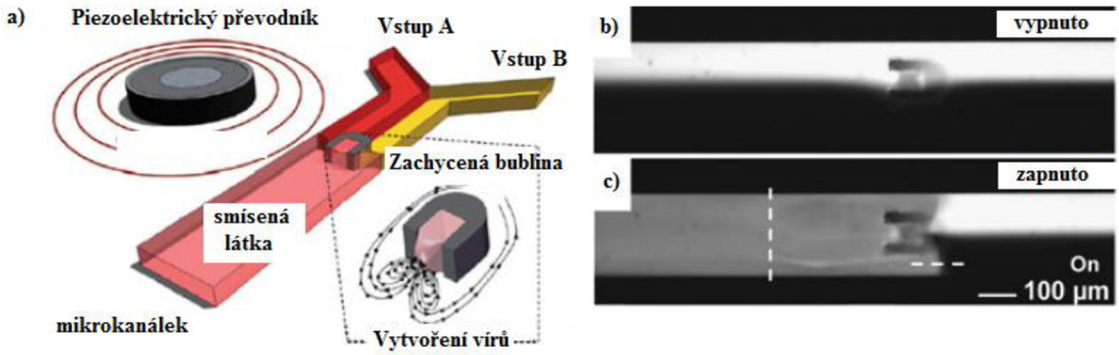
Tyto mísiče pracují díky indukování Lorentzových sil v elektrolytickém roztoku. Využívají pole elektrod uložených ve zdech kanálků k následnému vytvoření proudu v pracovní látce určené k mísení tak, že střídají potenciál na elektrodách. Spojením vytvořeného elektrického a magnetického pole vznikne výsledná Lorentzova síla. Celkový tok, který je vytvořen deformací a natahováním kontaktních ploch mezi pracovními látkami, zvyšuje mísení [5][6][7][8].



Obr. 3.3 *MHD mikromísič,* ***a)*** *schéma zařízení, 1 – spodní stěna s elektrodami, 2 – vrstvy vytvářející objem komory, 3 – horní stěna zařízení, 4 – permanentní magnet,* ***b)*** *deformace proudu tekutiny v důsledku Lorentzových sil a vytvoření vírů, upraveno dle [5]*

3.1.6 Ultrazvukové mísiče

Mísení může být docíleno v důsledku akustických podnětů, které jsou vytvořeny ultrazvukovými vlnami. Tyto vlny jsou do kanálku vpouštěny spojenými piezoelektrickými převodníky vyrobenými z keramiky. Ultrazvuk způsobuje akustické strhávání kapaliny kolmé na směr toku, které vede ke zvýšení mísení uvnitř kanálku. Ke zvýšení samotného mísení se využívá i vzduchových bublin, které jsou vpouštěny do mísiče. Pokud tyto bubliny vystavíme zvukovým vlnám, tak má jejich povrch efekt jako vibrující membrána, která způsobí proudící pohyb pracovních látek všemi směry. Tento jev, který známe pod pojmem kavitace, byl využit v mikrofluidických zařízeních s jednou bublinou nebo s více bublinami tvořícími pole [5][6][7][8].



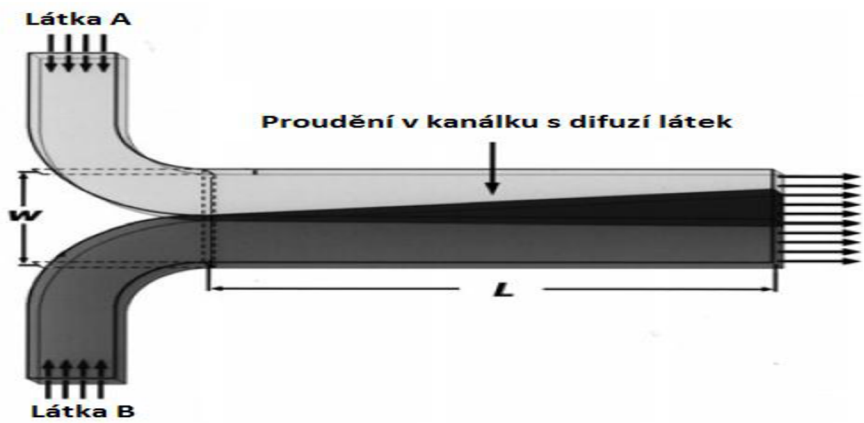
Obr. 3.4 ***a)*** *schéma ultrazvukového mísiče,* ***b)*** *proudění při vypnutém a* ***c)*** *při zapnutém šíření vln [5]*

3.2 Pasivní mísiče

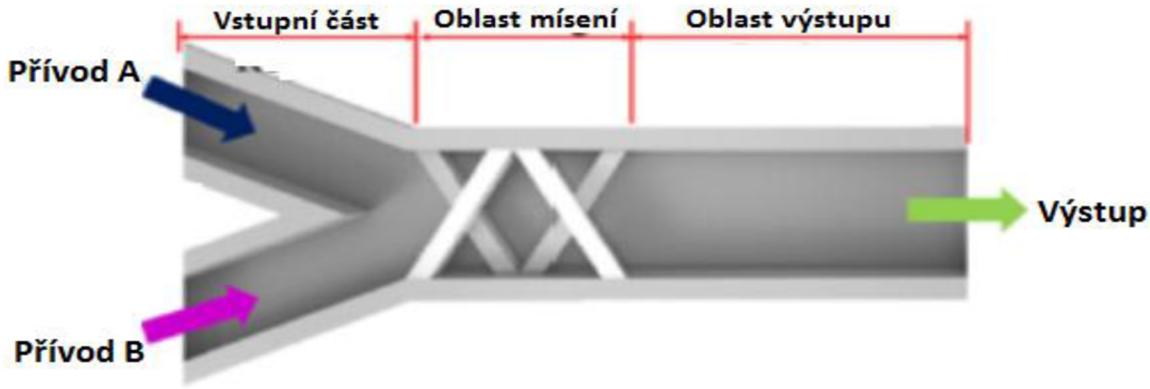
Jak již bylo zmíněno, pasivní mísiče nemají žádné pohyblivé části a nepotřebují žádnou vnější energii pro mísení, kterého je docíleno molekulární difuzí a chaotickým prouděním. Konstrukce těchto zařízení využívá geometrie mikrokanálku, která zvyšuje kontaktní plochu mezi pracovními látkami. Zvýšení chaotického proudění se provádí za pomoci manipulace s laminárním prouděním v kanálcích různými návrhy a změnami geometrie, což vede ke změně charakteru proudění. Modifikované proudění má kratší difuzní dráhu, která kladně působí na rychlost mísení [4][5][6].

3.2.1 Mísiče ve tvaru T a Y

Označení T a Y nám udává tvar a napojení kanálků, které je charakteristické pro dané zařízení. Mísení je dosáhnuto spojováním dvou pracovních látek a vzájemným kontaktem jejich proudů v kanálku. Tento základní design a samotné mísení zásadním způsobem závisí na vlastní difuzivitě látek a rozhraní mezi nimi. Proto je mísení pomalejší a je potřebný delší mikrokanálek. Ke zvýšení mísící účinnosti bylo již navrhnuto několik nepatrných změn v geometrii kanálků přidáním překážek na stěny nebo zvětšením drsnosti povrchu stěn kanálků. Další úsporu mísícího času je možno dosáhnout využitím větších hodnot průtoků pracovních látek nebo zúžením kanálku a tím zkrácením délky difúze [5][6][7][8].



Obr. 3.5 *Schéma mísiče ve tvaru písmene T využívající difúzi látek při mísení, upraveno dle [5]*



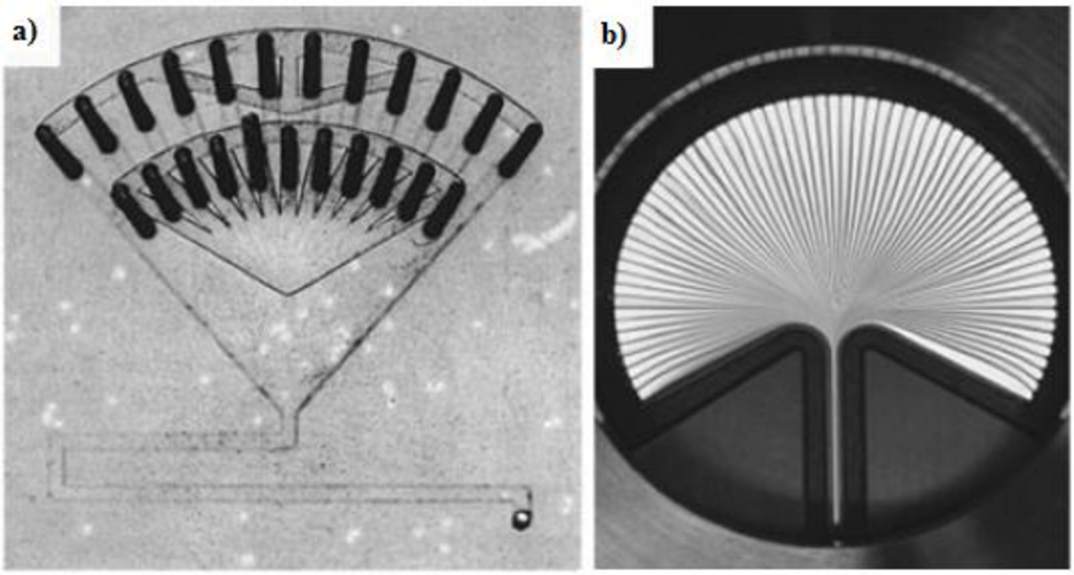
Obr. 3.6 *Mísič ve tvaru Y s vylepšením v podobě překážek, upraveno dle [5]*

3.2.2 Paralelní laminování

Jedná se o vylepšení předchozí skupiny mísičů využitím složitější konstrukce, která rozdělí přívodní hlavní proud do n podproudů a jejich zpětným spojením dojde k vytvoření spojeného proudu. U těchto mísičů je zvýšení mísícího procesu závislé na snížení délky difuze a zvýšení kontaktní plochy pracovních látek.

Laminování kapalin pro mísení se dosáhne dvěma různými uspořádáními přívodů. Tato uspořádání se nazývají bifurkační a paralelní. Bifurkace je dána střídavým uspořádáním přívodů, které jsou později spojeny skrz bifurkační kanál, následuje složený mísící kanál, kde probíhá samotné mísení. Paralelní přívod je častěji používanější.

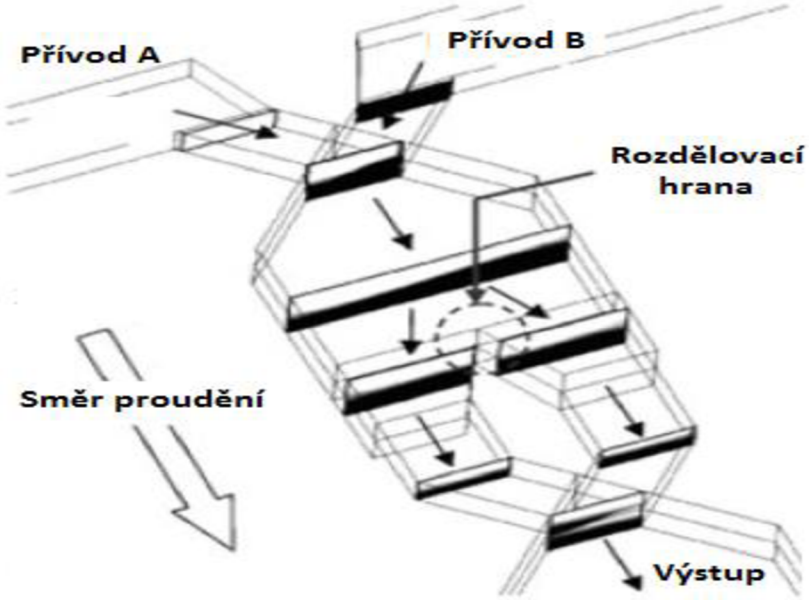
Paralelní druh mísičů je charakterizován konstrukcí přívodů pracovních látek. Ta je dána různými provedeními kanálkových polí, která vedou ke střídavému přívodu pracovních látek a tím zajistí vlastní mísení. Tento způsob mísení je založen na snaze ztotožnit proudy látek v jeden [5][6][7][8].



Obr. 3.7 *Mikromísiče využívající paralelního laminování,* ***a)*** *bifurkace,* ***b)*** *paralelní laminace, upraveno dle [5]*

3.2.3 Sekvenční laminování

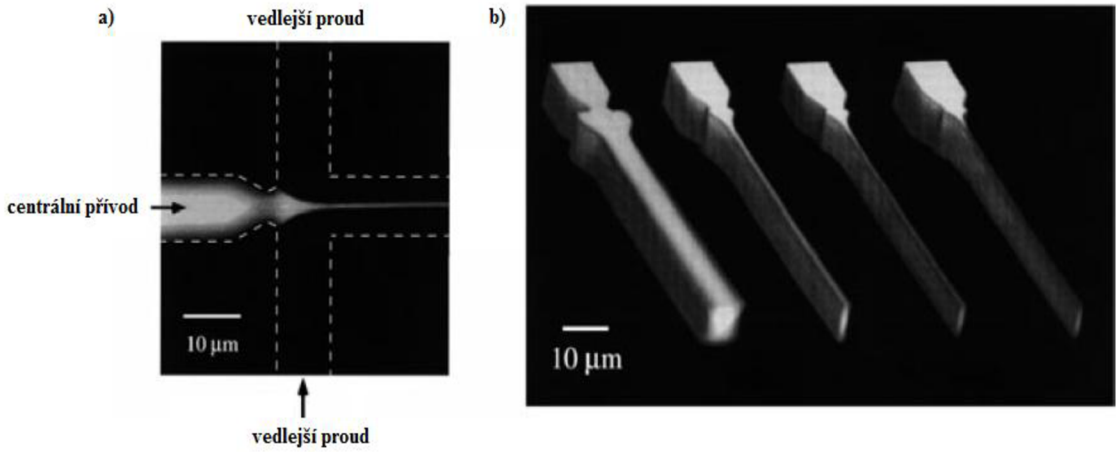
Tento druh mísičů je znám také pod zkratkou SAR (split and recombine), závisí na exponenciálním růstu kontaktní plochy a snižování délky mísící cesty k dosáhnutí kratší doby mísení. Rozdíl mezi předchozí skupinou mísičů je ve využité metodě k dosáhnutí laminace kapaliny. Už podle názvu sekvenční laminování je zřejmé, že se jedná o oddělené operace jako rozdělení proudu, znovuspojení proudu a jeho nové uspořádání. Jejich největší účinnost je při malých hodnotách Reynoldsova čísla [5][6][7][8].



Obr. 3.8 *Schéma mísiče na bázi sekvenčního laminování, upraveno dle [5]*

3.2.4 Zaměřování proudu

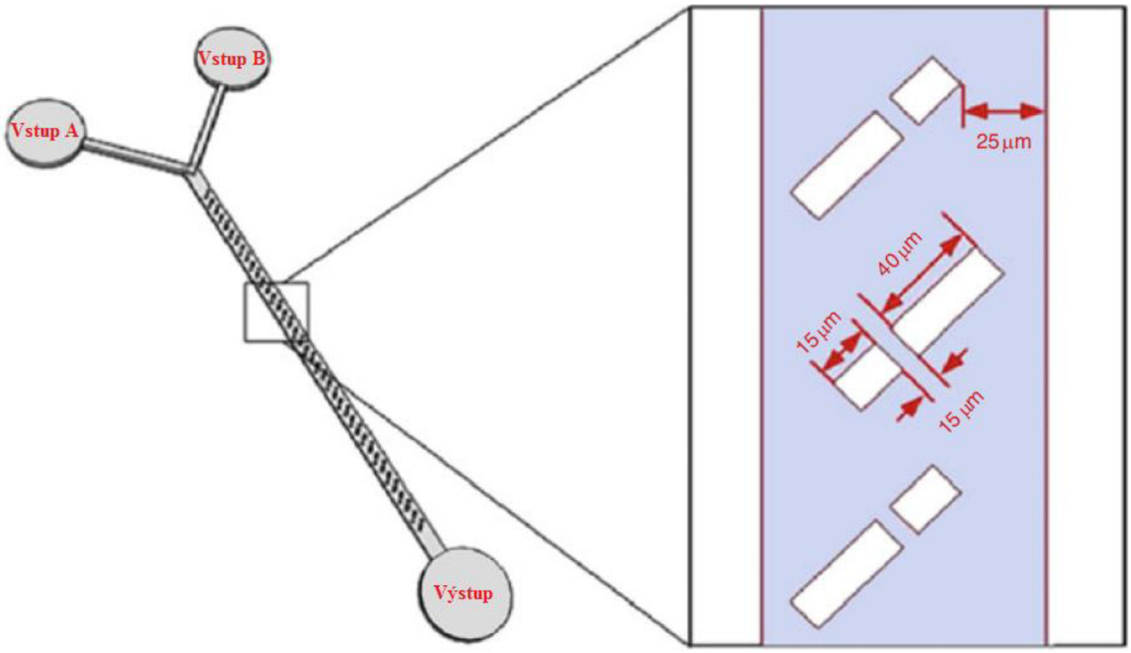
Hydrodynamické zaměřování proudu je jedním z řešení zkrácení mísícího procesu. Základní konstrukcí tohoto typu je dlouhý kanálek s třemi přívody pracovní látky. Při hydrodynamickém zaměřování mísená látka, která je dodávána středním přívodem, proudí v pouzdře tvořeném z proudů z kanálků bočních. Tyto boční proudy určují celkové proudění a šířku laminační vrstvy. Rostoucí šířka zaměřeného paprsku závisí na objemovém proudění mezi centrálním a bočními proudy. Doba mísení je nepřímo úměrná čtverci difuzní délky, takže rychlejšího mísení dosáhneme snížením šířky proudu. Zaměřený proud je funkcí míry průtoku tří přívodů. Změnou velikosti relativní rychlosti proudění bočních proudů docílíme zaměření centrálního proudu na zvolený výstup, kde již vychází smísená pracovní látka. [5][6][7][8].



Obr. 3.9 a) *mísič se zaměřováním proudu,* ***b)*** *různé tloušťky centrálního proudu v závislosti na bočních proudech, upraveno dle [5]*

3.2.5 Mísiče s chaotickým prouděním

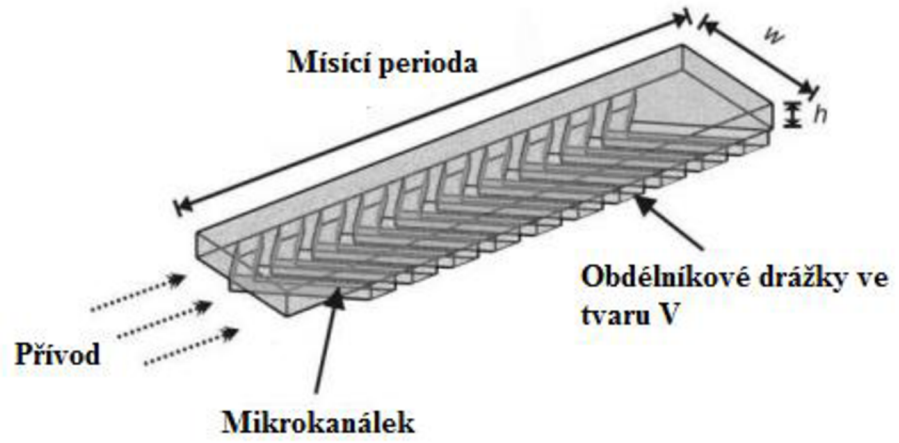
U mísičů, které jsme si již popsali, dochází k proudění pouze ve směru kanálku. To je důvodem, že není nijak ovlivněn příčný přenos látky. Chaotické proudění je takové, že se šíří i do jiných směrů a může vyvolat příčné proudění, které způsobuje exponenciální růst kontaktní plochy mezi pracovními látkami a tím výrazně zvyšuje samotné mísení. Příčné proudy mohou být také vytvářeny tvary kanálků, které jsou různě tvarovány a rozdělují nám daný proud. Tohoto efektu docílíme ve 2D zahnutým a ve 3D stočeným kanálkem a to vložením překážek na stěnu kanálku nebo překážkou přímo v kanálku. Jejich přítomnost nám mění směr proudu a vytváří se nám vír, který způsobí příčný přenos jedné látky do druhé. Tento způsob je využíván u proudění, kde Reynoldsovo číslo nabývá na mikrofluidiku poměrně vysokých hodnot (cca 100) [5][6][7][8].



Obr. 3.10 *Schéma mikromísiče s chaotickým prouděním vyvolaným překážkami v proudu, upraveno dle [5]*

3.2.6 Staggered Herringbone Mixer (SHM)

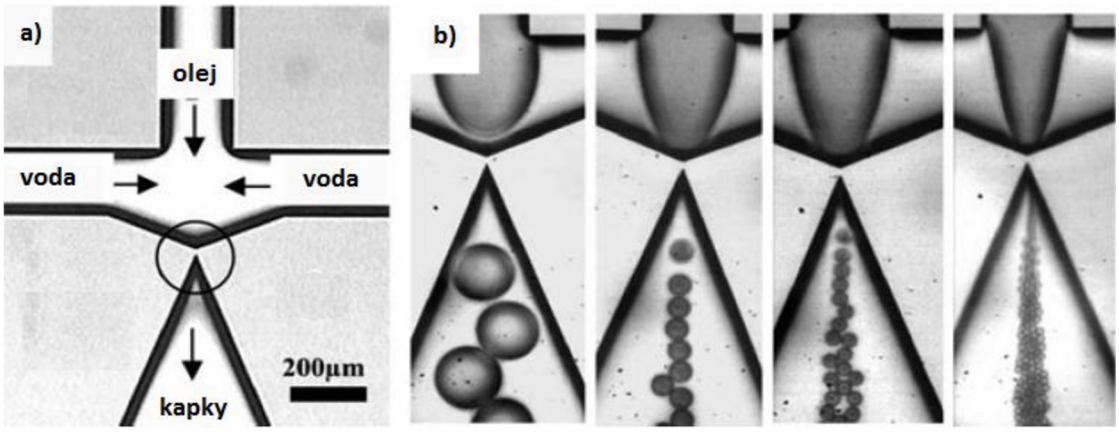
SHM je zástupcem mísičů s chaotickým prouděním, jedná se o velice efektivní a jednoduché zařízení pro mísení kapalin. Využívá obdélníkových drážek ve tvaru písmene V, které jsou zasazeny ve spodní stěně SHM. Výška těchto drážek bývá u různých autorů proměnlivá, ale nikdy by neměla přesáhnout 30 % výšky mikrokanálku. Při průchodu tekutin přes drážky dochází k vytvoření protiběžných vírů po průřezu, které mají za následek mísení kapalin. Jedná se o jeden z nejpoužívanějších mísičů v mikrofluidice, proto bude rozebrán i ve výpočetní části diplomové práce, kde dojde ke zhodnocení mísení a vytvoření návrhu SHM. V současné době se objevily i některé návrhy, které klasický SHM upravují například vložením bariéry do horní stěny mikrokanálku či implementací obdobných drážek ze spodní stěny i do stěny horní [5][6][7][8].



Obr. 3.11 *Schéma SHM mísiče využívajícího chaotického proudění, upraveno dle [5]*

3.2.7 Vícefázová mikrofluidika a kapkové mísiče

Kapky jsou v mikrofluidických zařízeních vytvářeny různými metodami jako například elektrickým polem a vstřikovacími jehlami či tryskami. Nejčastěji se ovšem využívá generování kapek v závislosti na nestabilním toku mezi navzájem nemísitelnými látkami, které vede k tzv. vícefázovému proudění. Příkladem vícefázových látek jsou emulze a pěny. Emulzifikace je postavena na míchání nesmísitelných kapalin, z čehož je ve výsledku směs polydisperzních kapek [5][6][7][8].



Obr. 3.12 a) *mísič s nemísitelnými kapalinami,* ***b)*** *směs kapek rozptýlených v kapalině, upraveno dle [5]*

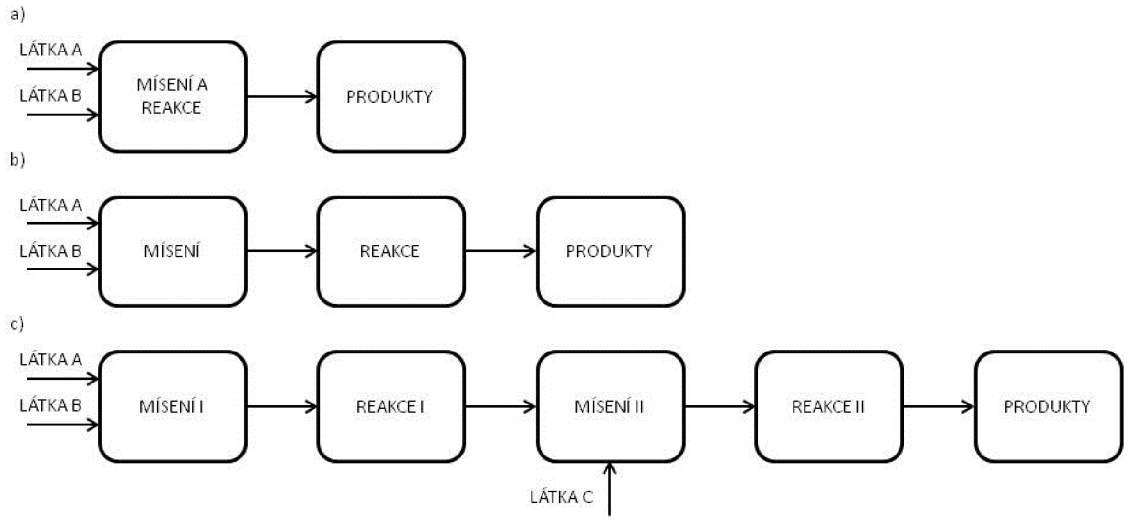
V mikrofluidice je vícefázové proudění tvořeno kontaktem dvou nemísitelných se kapalin, kdy v závislosti na vzájemném působení povrchových a viskózních sil vznikne vícefázové proudění, které může mít různé podoby. U tohoto procesu jsou také důležité síly mezi pracovními látkami, geometrie kanálku a jeho fyzikální vlastnosti [5][6][7][8].

4. Využití mikromísičů

Mikromísiče se v dnešní době již hojně používají pro velký počet aplikací napříč všemi obory. Mezi nejvýznamnější uplatnění těchto zařízení spolu s ostatními mikrofluidickými prvky patří využití na poli chemie a biochemie. V těchto oblastech se očekává největší progres těchto zařízení, jelikož mikromísiče nabízejí oproti běžně používaným zařízením obrovský rozdíl v množství látek potřebných pro jejich využití a tím značné snížení nákladů a zátěže pro živé organismy vzorky produkující [9].

4.1 Využití pro chemické reakce

Chemické mikrofluidické systémy jsou využívány pro krystalizaci, extrakci, polymeraci a i pro syntézu organismů. Tato využití již byla uskutečněna jak pro účely laboratorní, tak i pro průmyslové aplikace. V oblasti chemických reakcí je mikrofluidika využívána k výrobě mikroreaktorů, kde jsou mikromísiče velmi důležitou součástí a jsou zde využívány pro manipulaci se vzorky spolureagujících látek. Procesy chemických reakcí se dají dělit na kombinované, které v jedné fázi aplikují samotné mísení a dojde k reakci, sériové a na více za sebou jdoucích mísících cyklů například po přidání dalších reagujících látek. Hlavní výhodou mikromísení je v tomto případě mísící doba v porovnání s konvenčními metodami mísení látek [9] [10].



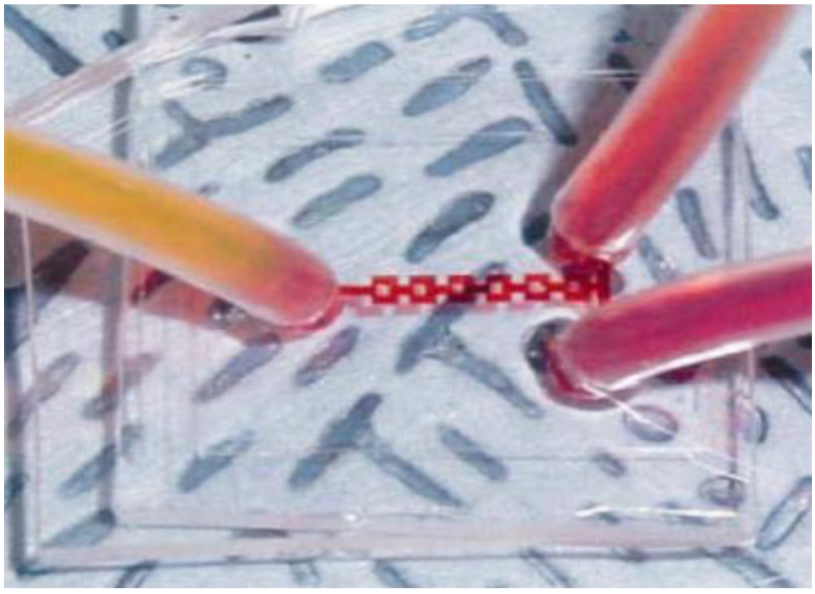
Obr. 4.1 *Schéma mikrofluidických systému v chemických procesech,* ***a)*** *kombinované,* ***b)*** *sériové a* ***c)*** *vícenásobné zapojení*

4.1.1 Krystalizace

Krystalizační procesy hrají velmi důležitou roli v chemickém průmyslu při vývoji léků, tvorbě fotografických materiálů a oddělování látek směsi. Oproti běžným metodám pro krystalizaci nám mikromísení nabízí vysokou flexibilitu a kontrolu nad samotným krystalizačním procesem, který je složen z nukleace a růstu krystalu. Pro tento typ chemických procesů jsou využívány nejčastěji pasivní mísiče ve tvaru písmen T a Y. V mikrokanálcích mísiče dochází k vysrážení vzorku - tvorbě výsledných pevných produktů. Konkrétní využití je například pro odstraňování šťavelanu vápenatého z těla. Ten při dostatečné koncentraci v lidském těle může končit až smrtí [9] [10] [11] [12].

4.1.2 Extrakční procesy

Nejčastější využití extrakce spojené s mikromísením je vyluhování cenných látek z kapalin nebo odstranění nežádoucích látek ze směsi pomocí různých činidel, což je velmi často používáno v potravinářském průmyslu. Samotná extrakce je složena z disperze a následného rozložení fází na požadované produkty. Hlavním parametrem, který k tomuto ději vede, je přenos látky přes jejich rozhraní (difúze). Tento jev je předpokladem pro využití mikromísičů, jelikož se mnohdy jedná o práci s malými průtoky z důvodu omezeného množství látek nebo při práci s látkami nebezpečnými. Zde je využíváno mísení například pro vytváření disperze dvou nemísitelných kapalin, rychlou extrakci fenolu z tekutých uhlovodíků nebo pro separaci a analýzu DNA z krevních vzorků při velmi nízkých průtocích pracovním prostorem mísiče [9] [13] [14].



Obr. 4.2 *Mísič s přerozdělením proudu využívaný v bioreaktorech, upraveno dle [13]*

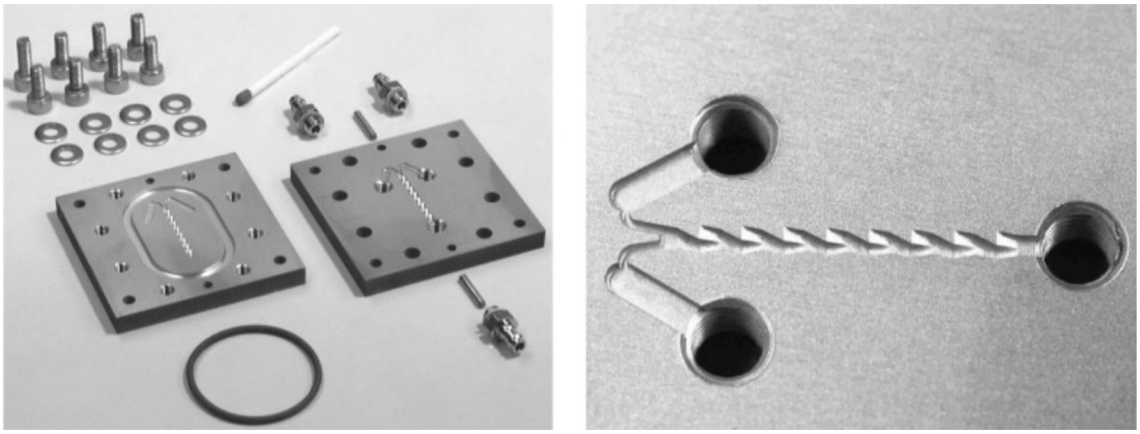
4.1.3 Polymerizace

Polymerizace je dalším z řady chemických procesů, který využívá mikrofluidiky. Jedná se o děj, kdy jsou monomery vázány do polymerních řetězců. Při polymerních reakcích je velmi žádána práce s molekulovou hmotností látek. Nejčastějšími faktory, které ovlivňují tuto práci, je teplota, koncentrace látek v systému a v neposlední řadě také vlastnosti používaných mísičů. Ty jsou voleny v závislosti na jejich vhodnosti pro dané použití a jejich hlavní výhoda spočívá v tom, že mají vysoký poměr kontaktních ploch k objemu látek a tento fakt výrazně usnadňuje kontrolu exotermních reakcí přes stěny mikrokanálků mísiče [9] [15] [16].

4.1.4 Organická syntéza

Organická syntéza využívající mikrokanálkových sítí je velmi často aplikována v procesech souvisejících s výrobou či výzkumem léčiv. V mikrofluidických systémech nám syntéza přináší mnoho výhod nejen v laboratorních podmínkách, ale i v různých

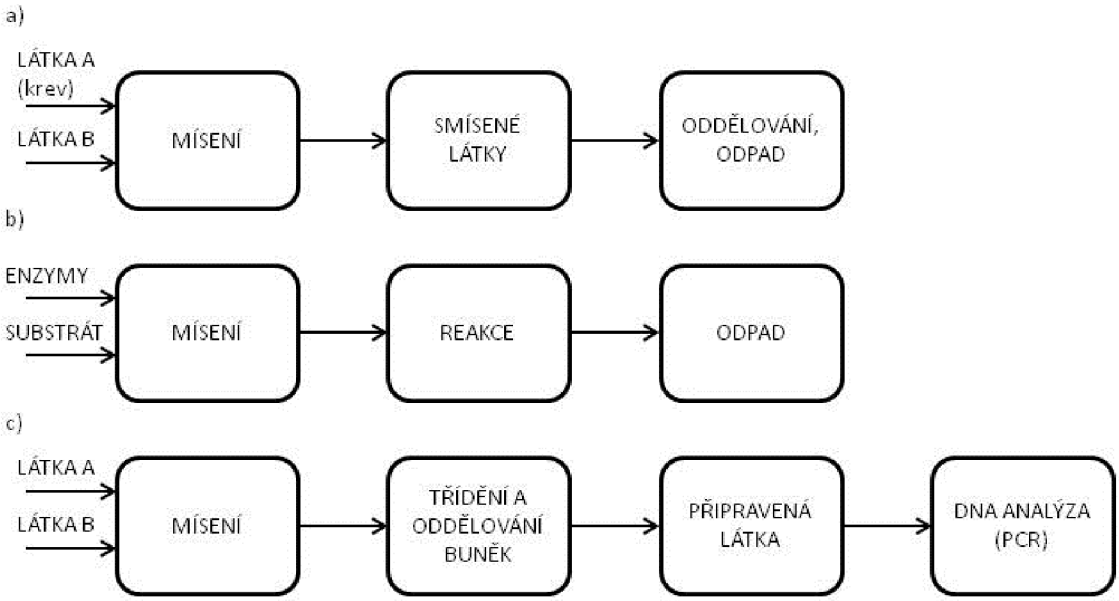
průmyslových odvětvích. Zde jsou využívány pasivní i aktivní mísiče, ale pouze pokud neovlivní pracovní organické látky v systému [9] [17] [18].



Obr. 4.3 *Vlevo vidíme mikromísič využívaný pro Kolbe – Schmittovu organickou syntézu, vpravo detail mikrokanálku, upraveno dle [18]*

4.2 Využití v biologických a biochemických procesech

V klinické medicíně a biologických výzkumech jsou mikrofluidické systémy již nedílnou součástí při výzkumu léčiv, analýze vzorků, hledání biochemických látek a i pro hledání symptomů nemocí. Tyto procesy jsou zahrnuty ve zkouškách enzymů, biologickém vyšetřování látek a pro skládání bílkovin [9] [19].



Obr. 4.4 *Využití v biologických procesech, a) biologické zkoušky, b) enzymové zkoušky, c) kompletní analýza DNA*

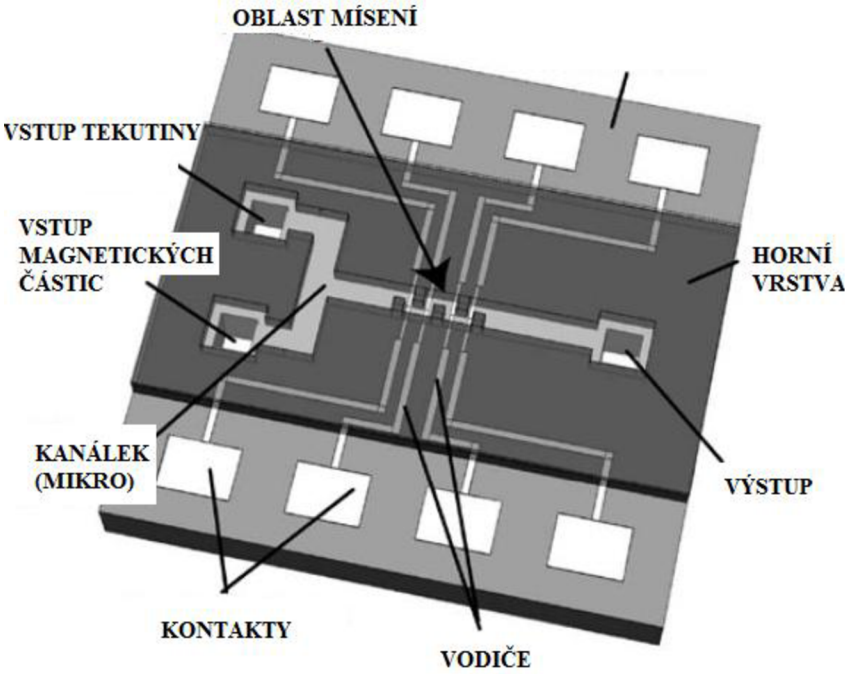
4.2.1 Enzymové zkoušky

Enzymové zkoušky jsou velmi často využívány v klinické a biologické chemii pro měření aktivity enzymů. Tyto zkoušky dělíme na kontinuální a přerušované, které jsou ovšem daleko méně používány. Podle tohoto dělení se vybírá různých metod ke

kvantifikování enzymatických procesů. Zapojení mikrofluidických systémů do těchto zkoušek přináší menší spotřebu potřebných vzorků, čímž dojde i ke snížení nákladů. Reagenty mohou být rychle smíseny s enzymy a dochází tedy zároveň k úspoře času. Další využití enzymových zkoušek ve spojení s mikrofluidikou je určování koncentrace malých molekul v pracovních látkách. Počáteční výzkum těchto dvou spojených systémů využíval mísič ve tvaru písmene T, který pracoval na základě elektrokinetické nestability, a sloužil k mísení nanolitrových množství pracovních látek. Dalším úspěšně odzkoušeným typem mísiče byl ultrazvukový, který byl využíván pro reakci mezi hemoglobinem a trypsinem [9] [19] [20].

4.2.2 Biologické zkoušky

Tento druh zkoušek byl v mikroměřítcích využíván již desetiletí. Jsou děleny do tzv. selektivního řazení biomolekul, které podrobuje dané částice testování pro konkrétní cíl či funkci. Zde musí být využity vysoce vyspělé technologie, které jsou schopny molekuly detekovat i přes práci s malými objemy pracovních látek. Druhým typem biologických zkoušek je zaměřené třídění buněk a je klíčovým procesem při využití v klinické medicíně a biologickém výzkumu. V těchto oblastech pracují při rozmezí Reynoldsova čísla mezi 0,08 – 16 [9] [21] [22].

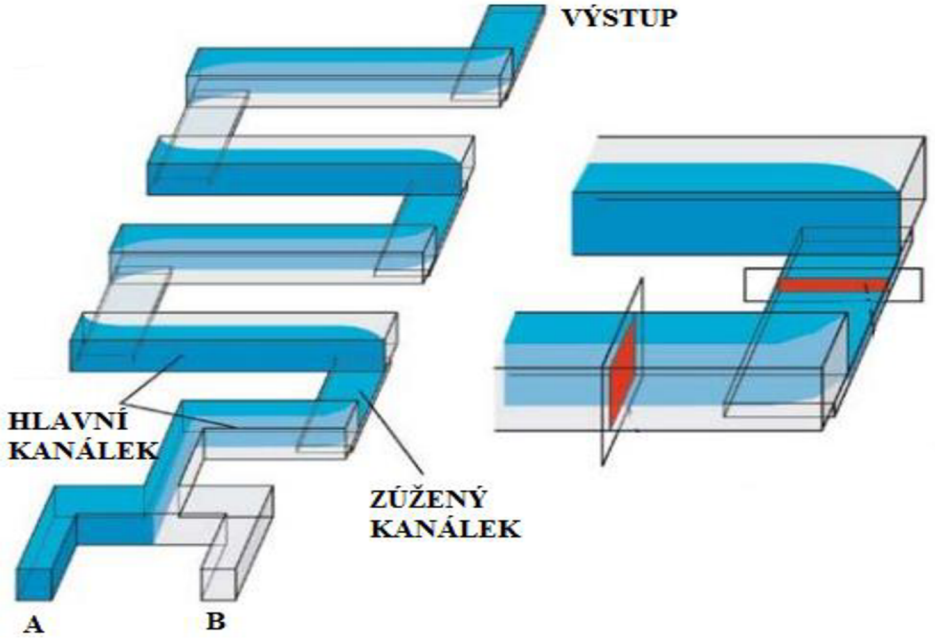


Obr. 4.5 *Magnetický mikromísič pro třídění buněk v pracovní látce, upraveno dle [21]*

4.2.3 Bioanalytické procesy, DNA, třídění a oddělování buněk

V této oblasti jsou mísiče využívány v řadě procesů od třídění a oddělování buněk, analýzy DNA až po kompletní biologickou analýzu vzorků. Jedná se o tzv. Micro Total Analysis System (µTAS) nebo často používané nástroje pro analýzu biologických vzorků – Lab on Chip (LOC). Tyto systémy mohou být vzájemně různě kombinovány a propojovány, což vede k vytvoření velmi důmyslných obvodů pro

zkoumání a analyzování vzorků. Zařízení a aplikace LOC vyžaduje aplikaci dalších mikrofluidických komponent jako jsou mikropumpy, ventily a právě mísiče, které mají za úkol spojení dvou a více vzorků pro dané účely. V biologickém inženýrství a částečně ve zkoumání DNA je klíčovou technologií tzv. polymerázová řetězová reakce (PCR). Tyto reakce jsou prováděny v systémech s využitím pasivních mísičů, u kterých jsme odkázáni na molekulární difuzi. V literatuře je popsána i aplikace mísičů aktivních, ale zde je nutno zaručit neporušení pracovních látek technologií provozu mísiče [9] [23] [24].



Obr. 4.6 *Mikromísič využívaný pro práci s DNA, vpravo vidíme detail zúžení mikrokanálku, upraveno dle [24]*

4.2.4 Skládání proteinů

Jedná se o proces, který je velmi důležitý pro fyziologické a genetické aktivity. Pro správnou funkci proteinů je nezbytná jejich prostorová struktura, což je ve vhodném uspořádání velmi důležitý faktor pro zdraví živých organismů. Množství nesprávně uspořádaných proteinů a jejich akumulace v lidském těle má za následek nepřeberné množství smrtelných nemocí od různých druhů rakoviny až po Alzheimerovu chorobu. V pracovním prostředí používaných zařízení na zkoumání těchto procesů jsou kladeny především časové požadavky na mikromísiče. Ty musejí být schopny mísení v řádu maximálně milisekund. Využívá se speciálních konstrukcí mísičů, které jsou schopny přeskládání např. pankreatických enzymů do 10 ms. Kromě samotné potřeby mísení jsou využívány pro sledování kinematiky skládání proteinů, což může být důležité pro další pokroky v medicíně [9] [25].

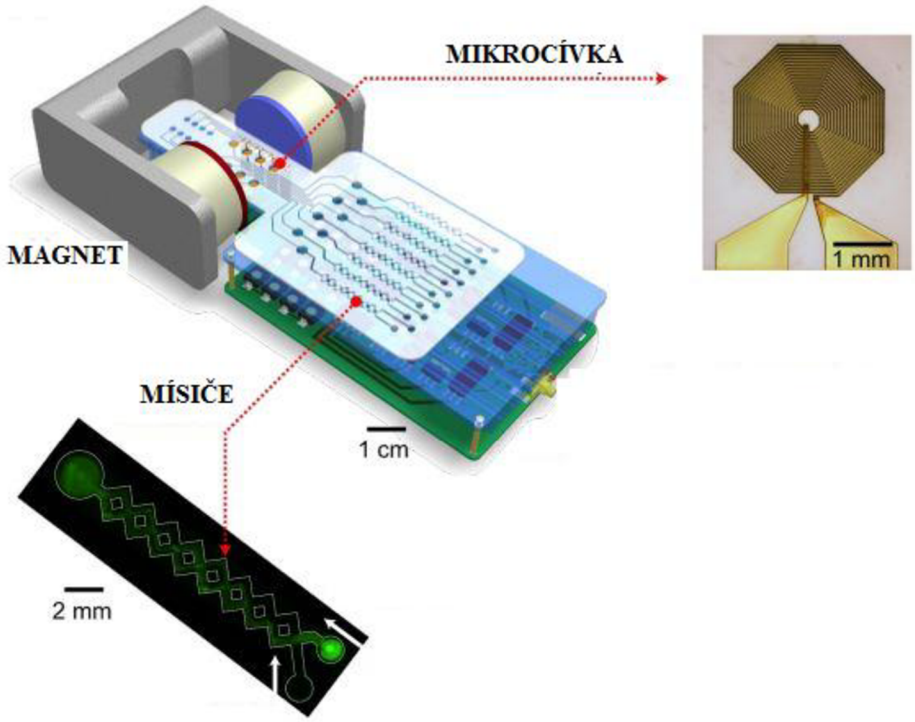
4.3 Využití v detekčních aplikacích

Využití mikrofluidických systémů v této oblasti nedestruktivních metod, které mají mnoho výhod pro chemické a biochemické procesy. Zjišťuje se zde skládání a

přeskládání proteinů, čehož docílíme využitím spektroskopických metod využívajících pro svoje potřeby mikromísičů [9] [25].

4.3.1 Spektroskopie nukleární magnetické rezonance (NMR)

Tento druh spektroskopie slouží k objasnění struktury molekul sloučených v chemických a biochemických procesech. Dopad NMR na zkoumané látky může být poněkud značný, jelikož za jistých podmínek vytváří dynamické změny struktury či funkce proteinů a nukleových kyselin. NMR se používá pro biologický výzkum genomických struktur, tvarových změn proteinů a výzkum léčiv. Zařízení používající konvenční metody založené na NMR jsou poměrně velkých rozměrů, stále ovšem rostou požadavky kompaktnějších zařízení pro specifické aplikace. Jedná se o zařízení v kombinaci s mikrokanálky mísiče, čímž by bylo možno dosáhnout rozpoznání a určení chemických směsí proudících přímo v mikrokanálcích. Mikromísiče zde jsou tedy spojeny s mikrocívkami jednotek NMR a tento způsob je používán pro rychlé zjišťování změn proteinových roztoků bez značné ztráty citlivosti zařízení oproti makrosvětu. V tomto odvětví existuje obrovský potenciál k vylepšení širokého spektra aplikací v molekulární biologii. Pro hlubší porozumění biologických reakčních procesů a jejich změn jsou ovšem potřebnější ještě mnohem důmyslnější návrhy těchto zařízení, které by byly schopny rychlejšího sledování a širší detekce vzájemného působení molekul [9] [25] [26].

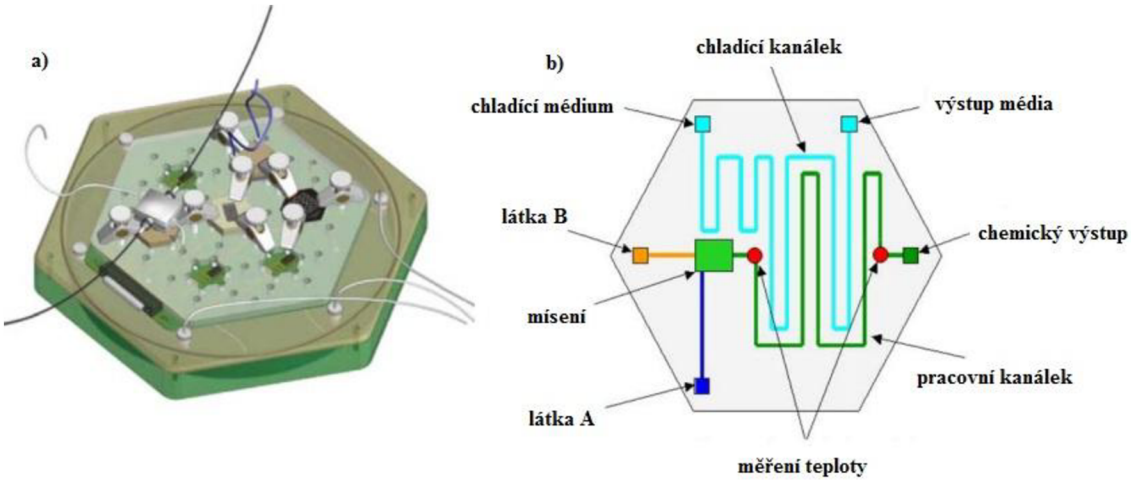


Obr. 4.7 *Schéma NMR zařízení se zabudovanými mikrocívkami, upraveno dle [26]*

4.3.2 Infračervená spektroskopie (FT-IR)

FT-IR spektroskopická metoda je využívána pro nedestruktivní určování struktur umělých látek a změn proteinového rozložení látek. Tato metoda je schopna určit každý

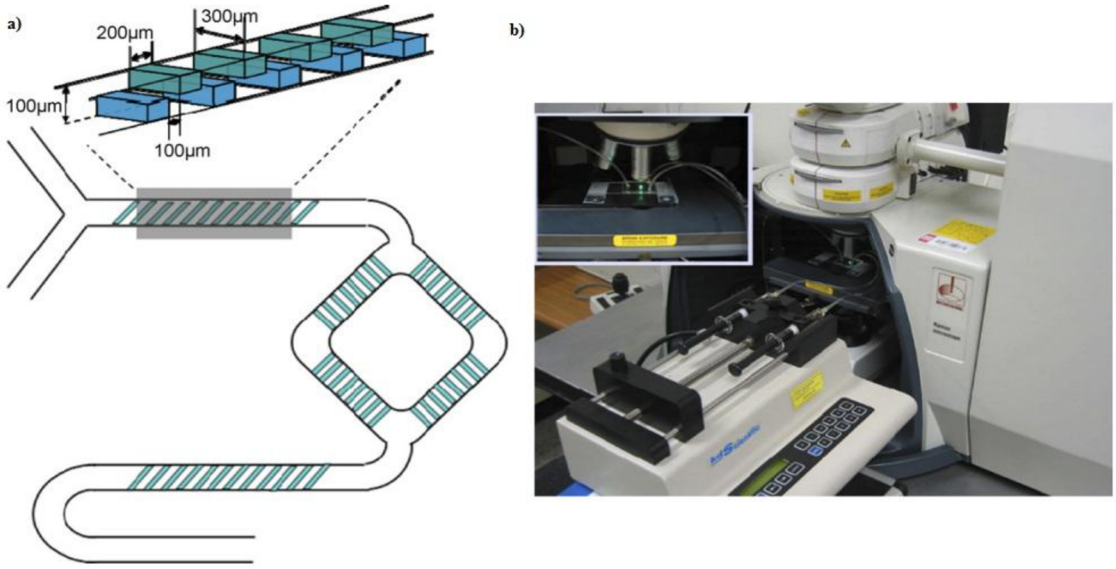
druh molekul absorpcí infračerveného záření přes tyto molekuly procházející změnou jejich dipólového momentu. Mikromísiče zde operativně ovlivňují množství pracovních látek regulací tloušťky mikrokanálků. Podobně jako u NMR se očekává obrovský progres i v této technice, což by mohlo mít za následek zmenšení dosud používaných zařízení a snížení mísícího času zkoumaných látek [9] [27].



Obr. 4.8 a) *zařízení pro FTIR spektroskopii,* ***b)*** *schéma a zapojení zařízení, upraveno dle [27]*

4.3.3 Ramanova spektroskopie

Ramanova spektroskopie je široce využívanou metodou v chemii a biochemii. Konkrétní využití je v oboru forenzní chemie, kde je velmi důležitým článkem při analýze léčiv, drog, ale i například pro ověřování pravosti historických dokumentů. Odebrané netekuté vzorky jsou rozpuštěny a následně podrobeny rozptylu laserového paprsku známého jako Ramanův jev [9] [28].



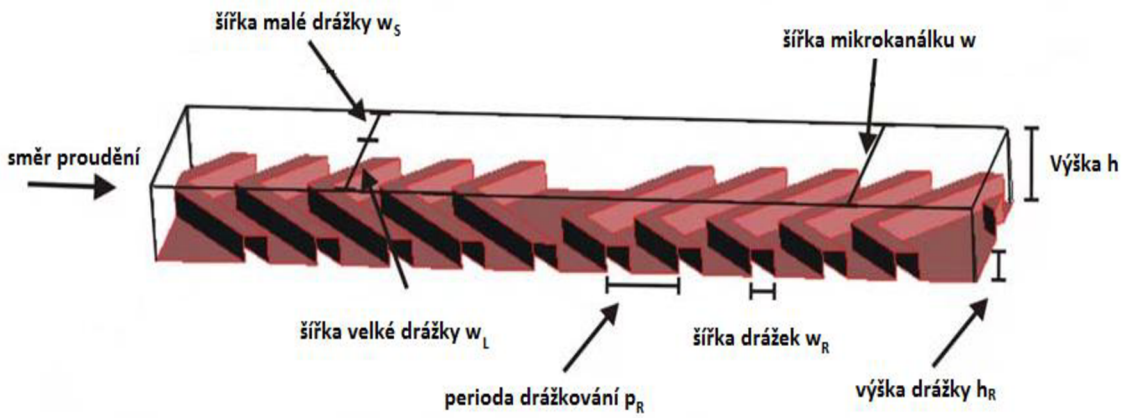
Obr. 4.9 a) *mikromísič s chaotickým prouděním,* ***b)*** *pracovní látka v mikrokanálku vystavená působení laserového paprsku, upraveno dle [28]*

5. Výpočtové modelování proudění

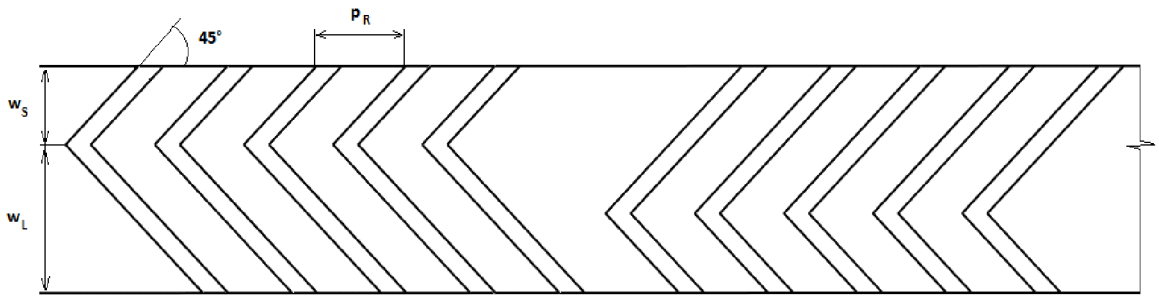
V této části diplomové práce bude popsán postup při tvorbě a návrhu jednotlivých mikromísičů, které budou následně podrobeny výpočtům pomocí CFD. První část analyzuje zařízení pro mísení tekutin, tzv. herringbone mísič. V další části je navržen mikromísič na bázi větvení proudu, který bude následně srovnán s optimalizací referenčního výpočtu herringbone mísiče. Bude zde rozebrán přístup k tvorbě sítě, stanovení okrajových podmínek a následné nastavení výpočtu v programu Fluent 15.0. Následně přejdeme k analýze vypočtených výsledků. Všechny typy mikromísičů jsou navrženy jako 3D modely.

5.2 Herringbone pasivní směšovač

Návrh výpočetní domény vychází z práce Torstena Lunde-Olesena [29], který svůj návrh následně srovnal s experimentem. Z tohoto modelu je převzat celkový průtok mikromísičem, který je Q_c = 8.67 µl/min. Na obrázku 5.1 a 5.2 jsou uvedeny hlavní rozměry zařízení. Tyto rozměry jsem následně aplikoval i na ostatní zařízení, které byly vystaveny CFD výpočtům. Toto zařízení je charakteristické drážkami ve tvaru písmene V na spodní straně mísiče. Drážky jsou nesymetrické vůči ose zařízení, kdy poměr šířky malé drážky oproti šířce celého mísiče je roven a_s = 0,35. Pro všechny simulace zařízení uvažujeme dva vstupy, na kterých je voda s etanolem ve vzájemném poměru 1:1.



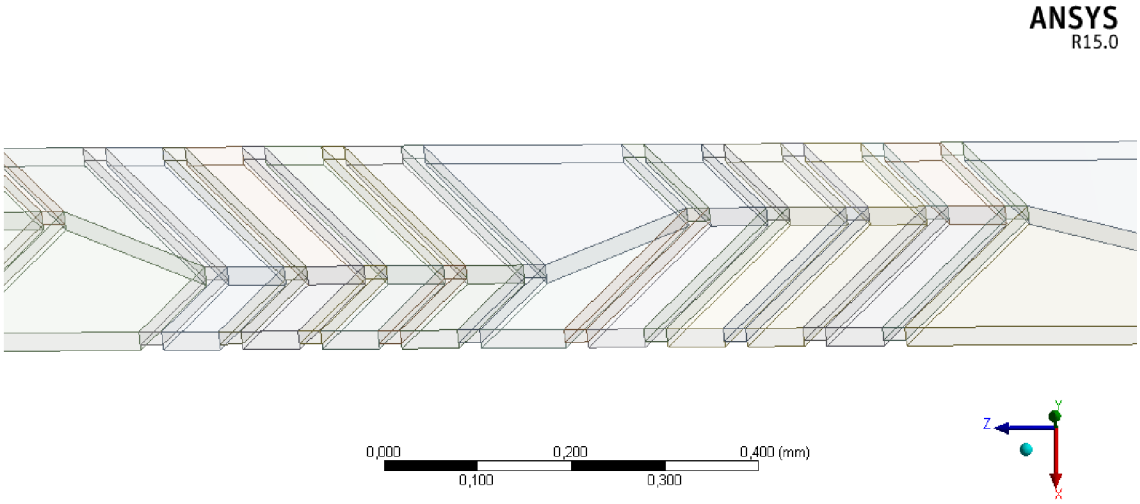
Obr. 5.2 *Schéma herringbone pasivního směšovače, upraveno dle [29]*



Obr. 5.3 *Pohled shora na mikromísič herringbone*

5.2.1 Výpočetní doména

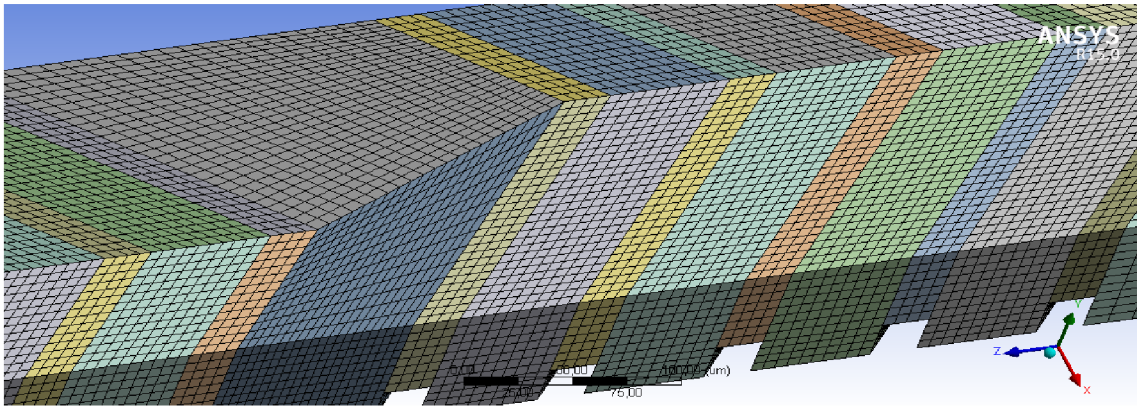
Tvorba výpočetní domény proběhla v programu SolidWorks jako 3D model. Hlavní rozměry mísiče byly podle obrázku 5.2, kdy celková délka zařízení L_c = 16 mm, šířka mikrokanálku w = 200 µm, výška mikrokanálku h = 80 µm, šířka malé drážky w_s = 70 µm, šířka velké drážky w_L = 130 µm. Samotné drážky byly tvořeny jako čtvercový profil, kdy výška drážky byla shodná s její šířkou h_R = w_R = 24 µm a perioda těchto drážek p_r = 85 µm. Počet drážek jednoho segmentu mísiče byl zvolen na 5 a po jednom segmentu došlo k otočení drážkování. Celkový počet segmentů zařízení byl 30. Drážky byly orientovány tak, aby úhel mezi stěnou kanálku a drážkou samotnou byl roven θ = 45°. Výsledný model byl poté přesunut do Ansys Geometry, kde bylo potřebné vytvoření vhodné dekompozice pro aplikaci co nejvhodnější sítě na tuto doménu.



Obr. 5.2.1 *Ukázka zvolené dekompozice v Ansys Geometry*

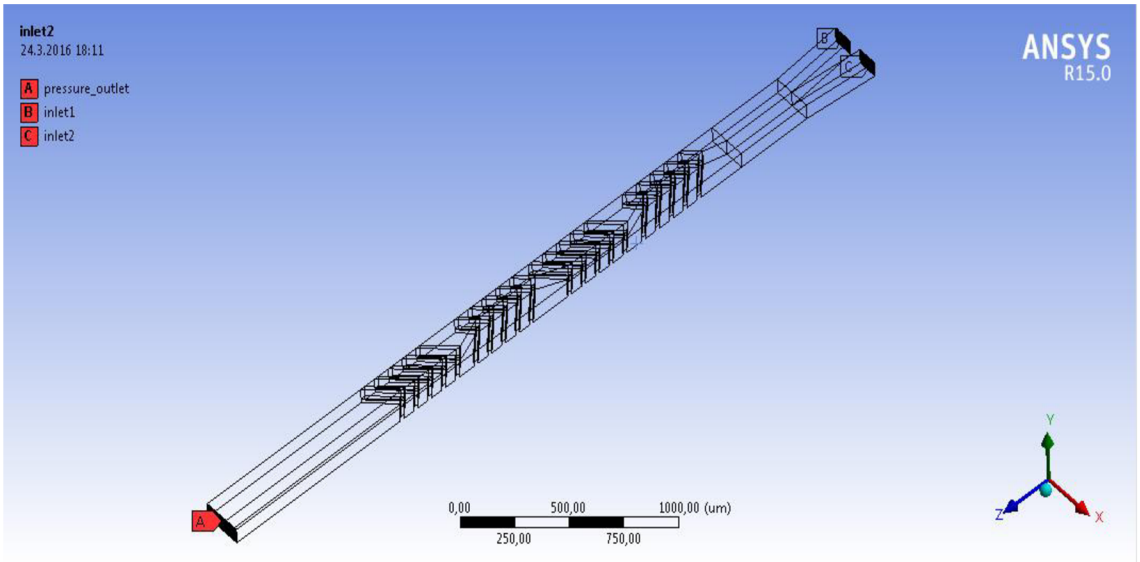
5.2.2 Tvorba sítě

Pro vytvoření sítě byl využit program Ansys Meshing. Aplikovaná síť byla vytvořena ručně a to s využitím prostorových prvků typu hexa přes celý objem výpočetní domény. Tuto síť jsem byl nucen vytvořit jako nekonformní a to z toho důvodu, že byl problém s vytvořením sítě konformní. Z tohoto důvodu jsem volil i větší počet prvků na celou doménu, kde výsledný počet prvků byl kolem 1 190 000 prvků.



Obr. 5.2.2 *Síť použitá na výpočtovou doménu*

Po vytvoření sítě je ještě nutno nastavit okrajové podmínky pro výpočetní doménu. Na stěnách mikrokanálku a i na všech stěnách drážek byla aplikována okrajová podmínka typu wall. Podmínka typu wall uvažuje podmínku ulpívání, což znamená nulovou rychlost kapaliny na stěně. V mikrosvětě tato podmínka ovšem nemusí vždy platit, ale pro naše výpočty ji uvažujeme. Na každý vstupní průřez do zařízení je stanovena okrajová podmínka typu velocity inlet, která znamená předepsání rychlosti na jednotlivé průřezy. Výstupní okrajová podmínka na konci zařízení je typu pressure outlet, kde kapalina vystupuje do konstantního tlaku. Všechny okrajové podmínky jsou shrnuty na obrázku 5.2.3.



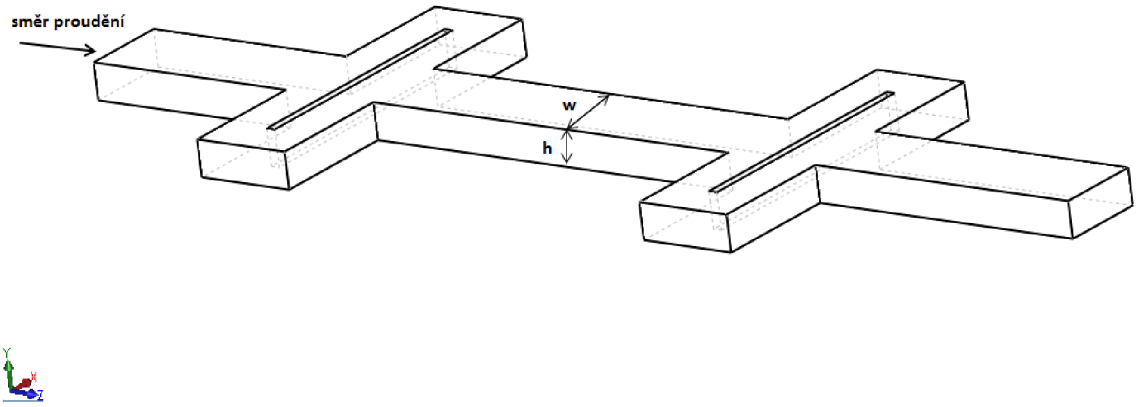
Obr. 5.2.3 *Stanovení okrajových podmínek, ilustrativní obrázek*

5.3 Mísič na bázi větvení proudu

Mikromísič na bázi větvení proudu je jedním z nejjednodušších pasivních směšovačů, čemuž odpovídá i samotná geometrie. Zde jsou pracovní látky míseny pomocí segmentů po délce zařízení, které nám rozdělí průtok do dvou větví a následně je opět spojí. Byl aplikován stejný celkový průtok zařízením a stejné pracovní látky.

5.3.1 Výpočetní doména

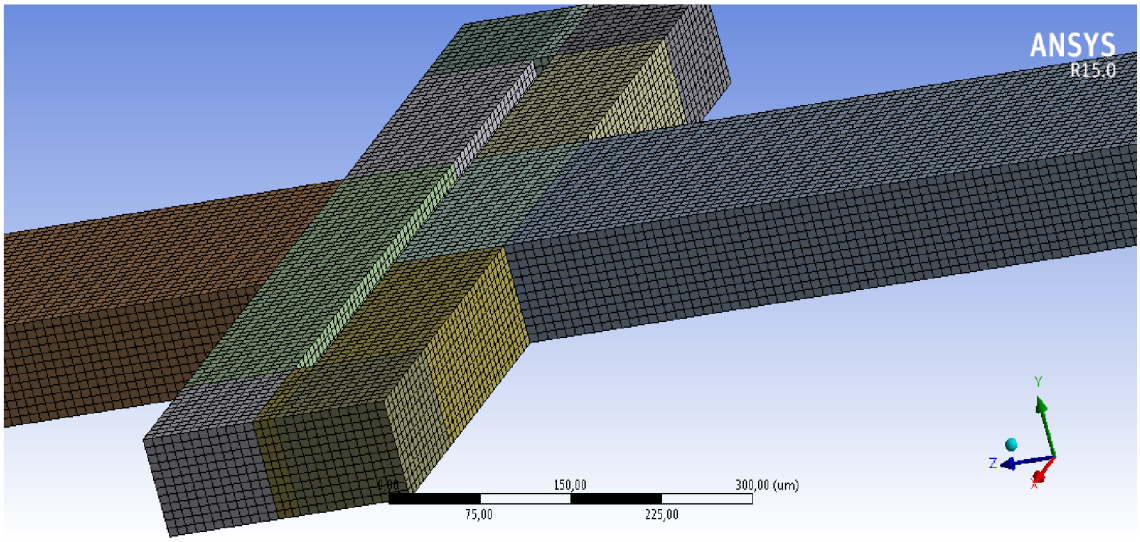
Bylo nutno dodržet základní rozměry mísiče shodné s herringbone mísičem, aby bylo možno porovnat výsledky. Celková délka zařízení byla zachována s předchozím případem stejně jako šířka a výška mikrokanálku. Jednotlivé segmenty tohoto mísiče byly voleny tak, aby odpovídaly dvěma segmentům mísiče herringbone. Na obrázku 5.2.1 můžeme vidět první dva segmenty zařízení, celý mísič se sestává z celkem čtrnácti. Výsledný 3D model bylo ještě nutno upravit pro tvorbu sítě výpočtové domény vhodnou dekompozicí.



Obr. 5.3.1 *První 2 segmenty mísiče na bázi přerozdělení proudu z celkových 14*

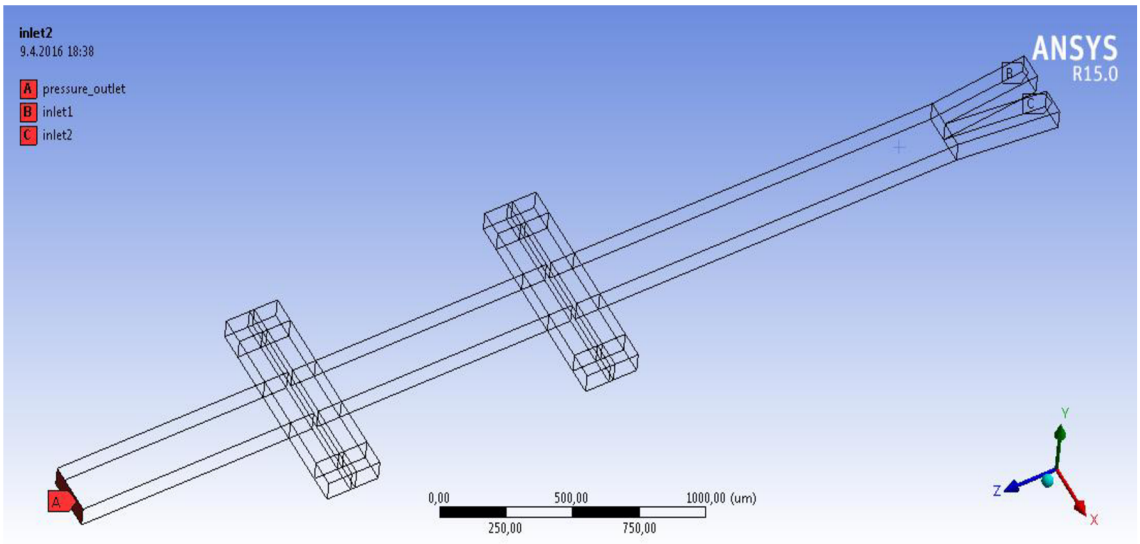
5.3.2 Tvorba sítě

Přístup k vytvoření sítě přes celý objem výpočtové domény byl volen tak, aby si byly sítě s předchozím případem co nejvíce podobné. Tato manuálně vytvořená síť byla složená z prostorových prvků typu hexa. Po vytvoření byla celková velikost sítě rovna 900 000 prvků.



Obr. 5.3.2 *Detail sítě jednoho segmentu mísiče s přerozdělením proudu*

Po vygenerování sítě bylo nutno přikročit ke stanovení okrajových podmínek. Stejně jako v předchozím případu byly tyto podmínky na stěnách mikrokanálku zařízení typu wall, na vstupních průřezech do zařízení byly nastaveny podmínky rychlostních vstupů velocity inlet. Na konci mikromísiče byl volen výstup do konstantního tlaku, tedy okrajová podmínka typu pressure outlet. Tyto podmínky jsou shrnuty na schématu výpočetní domény na obrázku 5.3.3.



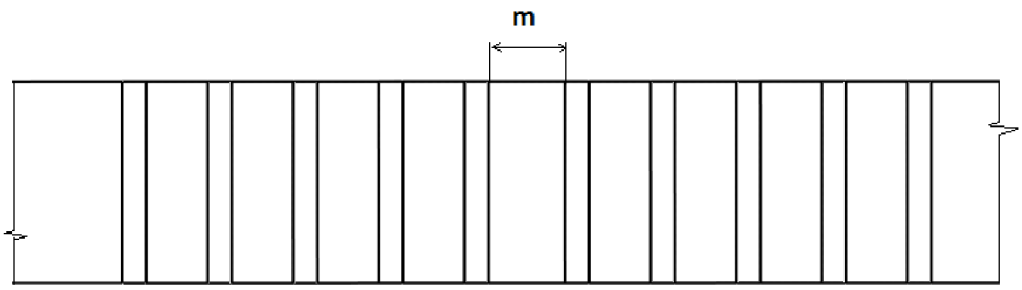
Obr. 5.3.3 *Okrajové podmínky na zkrácené verzi zařízení, na stěnách aplikovaná okrajová podmínka typu wall*

5.4 Optimalizace pasivního směšovače herringbone

V této podkapitole se bude práce zabývat optimalizací pasivního směšovače herringbone. Proběhne zde několik různých modifikací, které budou mít vliv na výslednou účinnost a tlakovou ztrátu daného zařízení. Všechna tato zařízení budou následně srovnána s neoptimalizovanou verzí herringbone mísiče a s mísičem na bázi přerozdělení proudu.

5.4.1 Rovné drážkování napříč kanálkem

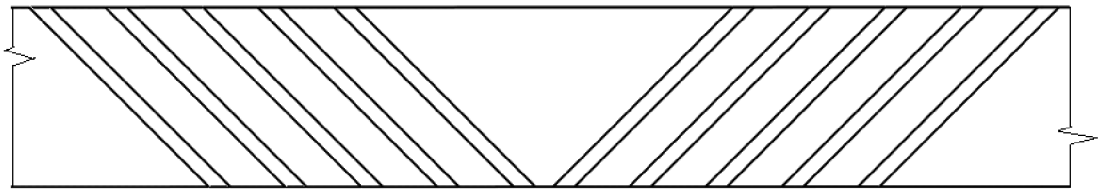
Tento návrh mísiče spočívá v umístění drážek kolmých na boční stěny kanálku přes celou délku zařízení. Každý segment zařízení obsahuje 5 drážek se stejnými rozměry jako u mísiče herringbone. Zachována zůstala i perioda drážkování s tím, že mezera mezi jednotlivými segmenty byla zvolena na m = 100 μm. Tvorba výpočtové domény, sítě a okrajových podmínek proběhla ve stejném smyslu jako u zařízení v předchozích kapitolách pro možnost porovnání výsledků.



Obr. 5.4.1 *Schéma zařízení s příčným drážkováním*

5.4.2 Drážkování pod úhlem 45°

Návrh tohoto mísiče proběhl za pomoci využití drážek jednotlivých segmentů, které svíraly se stěnou mikrokanálku úhel 45°. Mezi vloženými drážkami byla opět ponechána perioda jako v předchozích případech. Všechny segmenty byly složeny z pětice drážek, které jsou rozměrově rovněž shodné s mísičem herringbone. Segmenty byly neustále zrcadlově střídány přes celou délku zařízení. Na obrázku 5.4.2 můžeme vidět 2 segmenty tohoto zařízení.



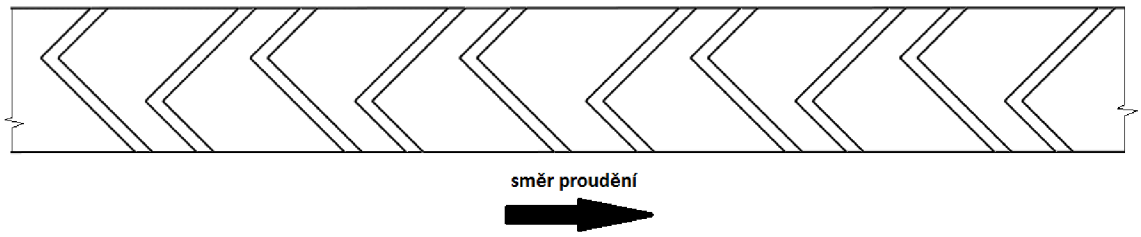
Obr. 5.4.2 *Schéma 2 segmentů mísiče*

5.4.3 Hradbový mísič

Konstrukce tohoto mísiče je inspirována podkapitolou 5.4.2. Schéma zařízení i hlavní rozměry jsou stejné. Jediný rozdíl v těchto dvou konstrukcích spočívá v tom, že každá lichá drážka zařízení byla o dalších 8 μm zvýšena. U tohoto mísiče tedy dochází ke střídání výšky drážek v segmentech, kdy jednou máme klasicky h_R = 24 μm a za ní vždy následuje drážka o výšce h_{R2} = 32 μm.

5.4.4 Střídání drážek

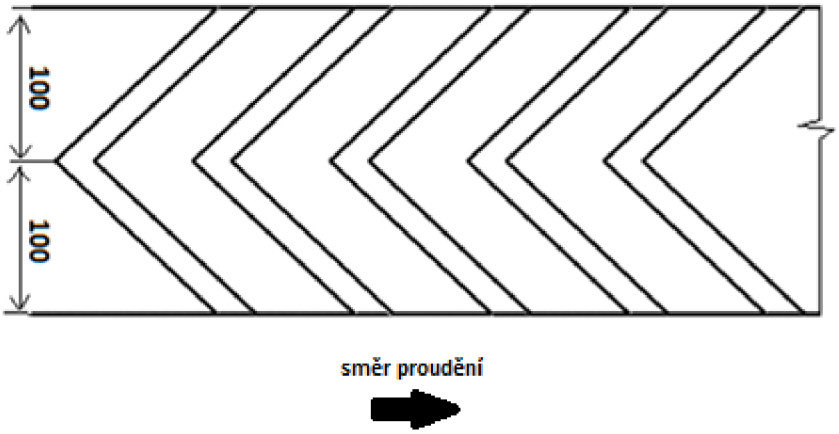
Koncepce tohoto mísiče vychází přímo z mísiče herringbone, kdy bylo využito navrhnutých drážek v jednotlivých segmentech. Změna návrhu spočívala v tom, že střídání drážek nebylo využíváno po segmentech, nýbrž přímo v jednotlivých segmentech. Následně došlo k ucelení daných segmentů, které v sobě skrývaly vždy po 5 drážkách. Vytvořené segmenty můžeme vidět na obrázku 5.4.3. Při řešení sítě bylo dbáno na stejné parametry jako u mísiče herringbone, čímž docílíme srovnatelných výsledků.



Obr. 5.4.3 *Obrázek s 2 segmenty mísiče s využitím drážek ve tvaru písmene V*

5.4.5 Šípový mísič

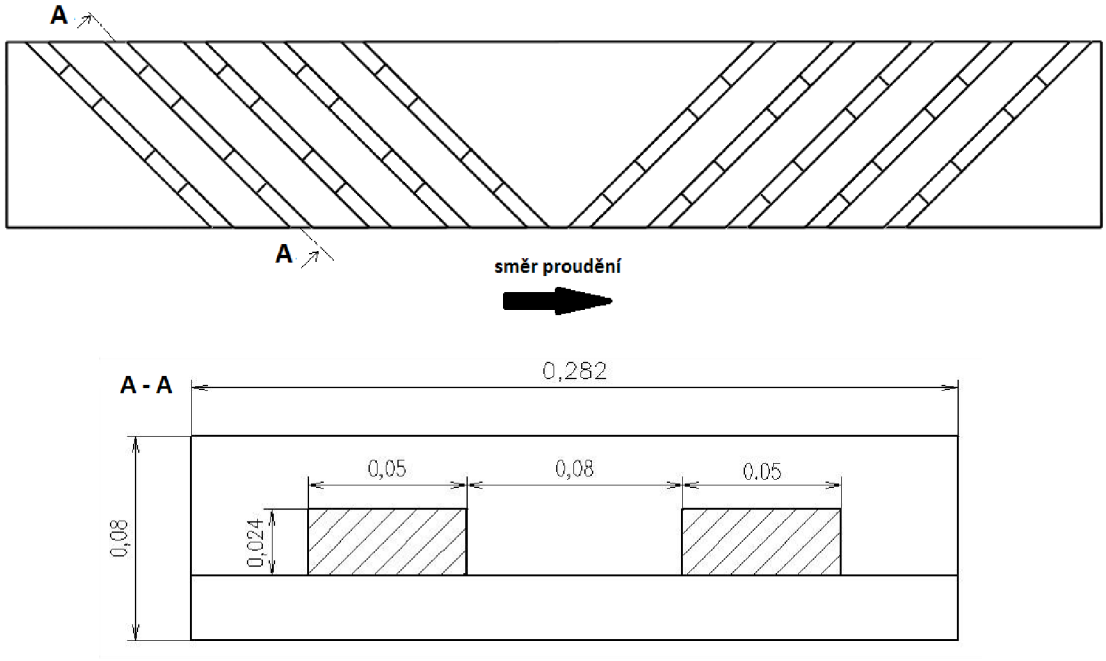
Návrh tohoto zařízení proběhl za předpokladu vytvoření drážek ve tvaru písmene V, které byly osově symetrické podle osy procházející středem zařízení. Výška a šířka drážek rozměrově odpovídá drážkám využívaným v mikromísiči zařízení herringbone.



Obr. 5.4.4 *Schéma jednoho segmentu šípového mísiče*

5.4.6 Zubový mikromísič

Návrh tohoto zařízení je inspirován podkapitolou 5.4.2. Schéma zařízení i hlavní rozměry drážek jsou shodné. Změna koncepce spočívá ve vytvoření dvou zubů na horní ploše drážek o výšce h_{R+} = 24 μm. Vytvořené drážky jsou skládány do segmentů po pěti kusech a následně otáčeny po délce zařízení. Schéma zařízení a řez drážkou je shrnut na obrázku 5.4.5.



Obr. 5.4.5 *Na horním obrázku je schéma zubového mísiče, dolní obrázek je zvětšený detail řezu prostředkem drážky*

5.5 Mísič ve tvaru písmene Y

Návrh tohoto zařízení proběhl bez využití jakýchkoli geometrických změn, kdy využíváme pouze přímý mikrokanálek. Tohle zařízení je zahrnuto v mé práci proto, aby bylo nastíněno, jakých dosáhneme změn účinnosti při využití drážkování a geometrických změn daných mísičů. Rozměry přímého kanálku i průtok byly zachovány jako ve všech předchozích případech. V přímém kanálku předpokládáme, že mísení bude docíleno pouze molekulární difúzí proudících látek, jelikož se nesnažíme proud pracovních látek jakkoli narušit. Tím bychom měli dosáhnout poměrně nízkých hodnot účinnosti po celé délce zařízení.

5.6 CFD simulace proudění

Výpočet simulace proudění využitím CFD je realizován ve výpočetním programu Ansys Fluent, který využívá metodu konečných objemů. Jak již bylo zmíněno, všechny úlohy jsou řešeny jako prostorové a výsledné výpočetní modely jsou tedy vhodné pro simulaci proudění v mikromísičích. Veškeré proudění v našich zařízeních je řešeno jako stacionární, jelikož nestacionární proudění se neočekává. V této podkapitole se budeme zabývat nastavením řešiče a použitými metodami.

5.6.1 Nastavení výpočetního softwaru

Samotný řešič je nastaven na možnost Pressure based. Jedná se o výpočetní schéma, které postupně v prostoru řeší Navier-Stokesovy rovnice v jednotlivých směrech x, y, z. Tato metoda je vhodná pro výpočet s pouze malou stlačitelností médií nebo médii nestlačitelnými, což při uvažování mísení vody s etanolem po délce mísiče považujeme za vhodné. Jelikož se pohybuje proudění pouze v laminární oblasti (Re = 1.8), kdy se na mísení v mikrokanálcích nepodílejí žádné turbulentní víry tak jako Viscous model vybíráme Laminar. Tento výpočtový model využívá k řešení Navier-Stokesových rovnic.

5.6.2 Řešení difuze v programu Ansys Fluent

Jelikož se na mísení látek v mikroměřítku nepodílejí turbulentní víry, ale přenos daných látek je řízen pouze molekulární difuzí, je nutno systém rovnic doplnit o další transportní rovnici. Využívá se funkce User defined Scalar (UDS). Tato funkce nám zajistí doplnění o další dvě transportní rovnice pro naše látky. Pro libovolný skalár ϕ_k Fluent řeší rovnice:

$$\frac{\partial}{\partial x_i}\left(\rho u_i \Phi_k - \Gamma_k \frac{\partial \Phi_k}{\partial x_i}\right) = S_{\Phi_k} \quad k = 1, \dots, N \tag{6}$$

Kde Γ_k je difuzní koeficient jednotlivých směsí a S_{Φ_k} je zdrojový člen.

5.6.3 Okrajové podmínky

Jak již bylo zmíněno, po tvorbě sítě byly předepsány okrajové podmínky na výpočetní doménu. V samotném řešiči je nutné tyto okrajové podmínky ještě blíže specifikovat. Podmínka typu wall na stěnách mísiče je tedy řešena jako nehybná zeď s podmínkou ulpívání kapaliny na stěně, což značí nulovou rychlost kapaliny na stěně.

Do mísiče máme dva rychlostní vstupy, na kterých jsou předepsány rychlostní vstupy velocity inlet přes složky rychlostí ve směru osy z. Hodnota této rychlosti byla stanovena z celkového průtoku zařízením a to v = 9,03125 $mm.s^{-1}$. Při řešení difuze pomocí UDS je zde nutno ještě doplnit poměr jednotlivých látek na každém vstupu, což v našem případě uvažujeme 1:1. UDS nám ještě v nastavení materiálů umožní nastavit koeficienty difuze pro jednotlivé látky. Koeficienty difuze pro každou látku je nutné spočítat ze společného koeficientu, který je na rozhraní voda/etanol roven $D = 1{,}9 \cdot 10^{-9}$ $m^2.s^{-1}$, vynásobením tohoto koeficientu hodnotou hustoty látek.

5.6.4 Metody řešení

Vzájemné působení rychlosti a tlaku je počítáno pomocí numerického schématu SIMPLE, které je náhradou rovnice kontinuity. Tímto numerickým schématem počítáme závislost rychlosti na gradientu tlaku iteračním přístupem. Pro počítání tlakového členu systému rovnic používáme přednastavené metody Standard, kterou docílíme dobré konvergence. Při prvních výpočtech je u hybnostního a u námi definovaných transportních rovnic nastaveno schéma First Order Upwind. Po klesnutí reziduí na hodnoty 10^{-6} u těchto členů zpřesníme výpočet přenastavením na schéma Second Order Upwind. Použitím tohoto konvektivně difuzního schématu je dosáhnuto vyšší přesnosti výsledku, jelikož je uvažován i vliv buněk před i za právě počítanou buňkou.

6. Postprocessing

V této kapitole jsou zanalyzovány výsledky dané výpočetním programem Ansys Fluent. Zde jsou již stanoveny účinnosti zařízení herringbone a mísiče na bázi přerozdělení proudu. Následně dojde ke stanovení hydraulických ztrát při proudění přes jednotlivé mikromísiče. Během vyhodnocování zmíněných veličin je kladen důraz na charakteristické proudění v mikrokanálcích zařízení. Veškeré sledované veličiny jsou následně graficky vyhodnoceny. Grafické zhodnocení výsledků proběhlo v programu Ansys CFD Post. Pro vykreslování hodnot koncentrace v příčných průřezech zařízení je využíváno funkce Contours. Samotné příčné průřezy jsou definovány v řezech roviny x-y v závislosti na délce zařízení (vzdálenost v ose z) jako ploch typu ISO Surface. V daných příčných průřezech jsou následně graficky vyhodnocovány proudnice jako 2D Streamlines, které jsou schopny seznámit uživatele s principem herringbone mísiče. Pomocí vektorů rychlosti a vířivosti v nadefinovaných rovinách je možno určit směr proudění a popsat tvorbu charakteristických vírů zvyšujících kvalitu mísení v mikroměřítku. U ostatních navrhovaných zařízení jsou dále vyhodnocovány pouze 3D proudnice, jelikož u ostatních zařízení nedochází k tak intenzivnímu zavíření jako u mísiče herringbone, pro který jsou dva protiběžné víry charakteristické.

Stanovení účinnosti jednotlivých mísičů proběhne podle vztahu uvedeného v kapitole 6.1. Hydraulické ztráty budou stanoveny jako tlakové ztráty přes celou délku zařízení tak, že bude vyhodnocen rozdíl statického tlaku mezi vstupem a výstupem látek do, respektive ze zařízení. Hodnoty statického tlaku jsou vyhodnoceny pomocí funkce Surface Integral jako střední integrální hodnota přes příčné průřezy (Area Weighted Average). V poslední fázi dojde k vyhodnocení a srovnání jednotlivých mísičů dle účinnosti v závislosti na hydraulické ztrátě.

6.1 Účinnost mikromísení

Stanovení účinnosti jednotlivých zařízení bylo prováděno po délce mikromísičů v příčných průřezech kolmých na směr proudění. V těchto příčných průřezech byla stanovována odchylka koncentrace od ideálního stavu promísení v každé buňce průřezu. Účinnost mikromísení je potom dána vzorcem [30]:

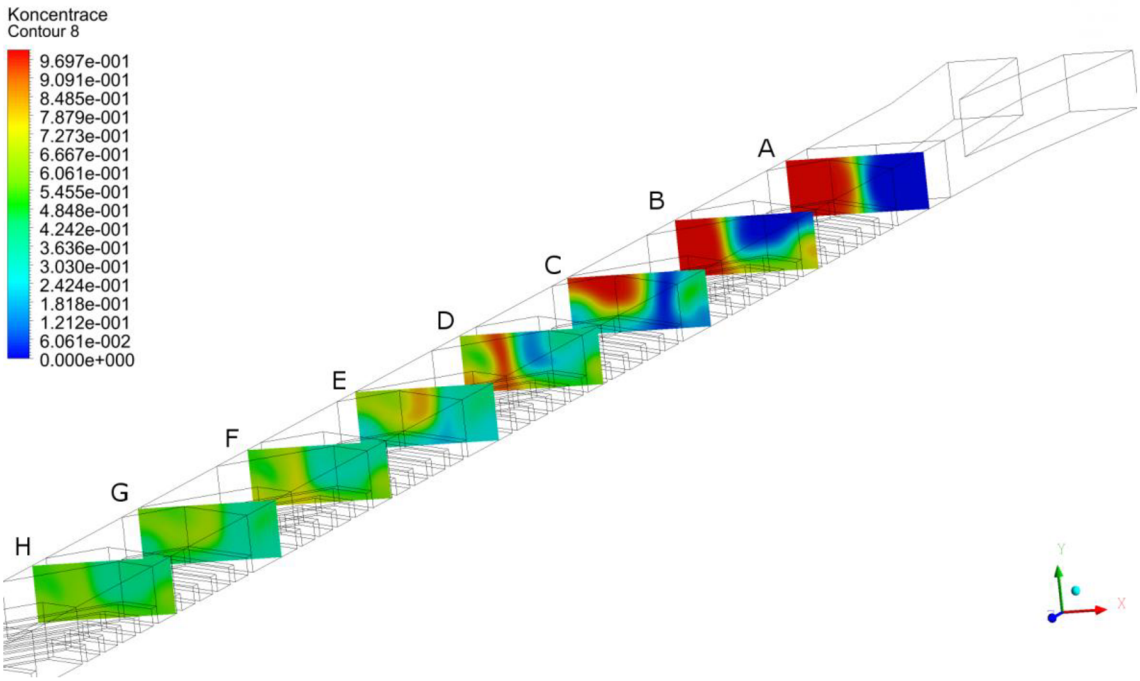
$$\eta = \left(1 - \sqrt{\frac{1}{N} \times \sum_{1}^{i} \frac{(c_i - c_{th})^2}{c_{th}^2}}\right) \times 100\% \tag{7}$$

Kde N je počet všech buněk zkoumaného průřezu, c_i je koncentrace v *i*-té buňce a c_{th} je maximální hodnota koncentrace dané látky v buňce. Tato hodnota je při poměru jednotlivých látek na vstupech 1:1 rovna vždy hodnotě 0.5, což by značilo ideální promísení.

6.2 Herringbone pasivní směšovač

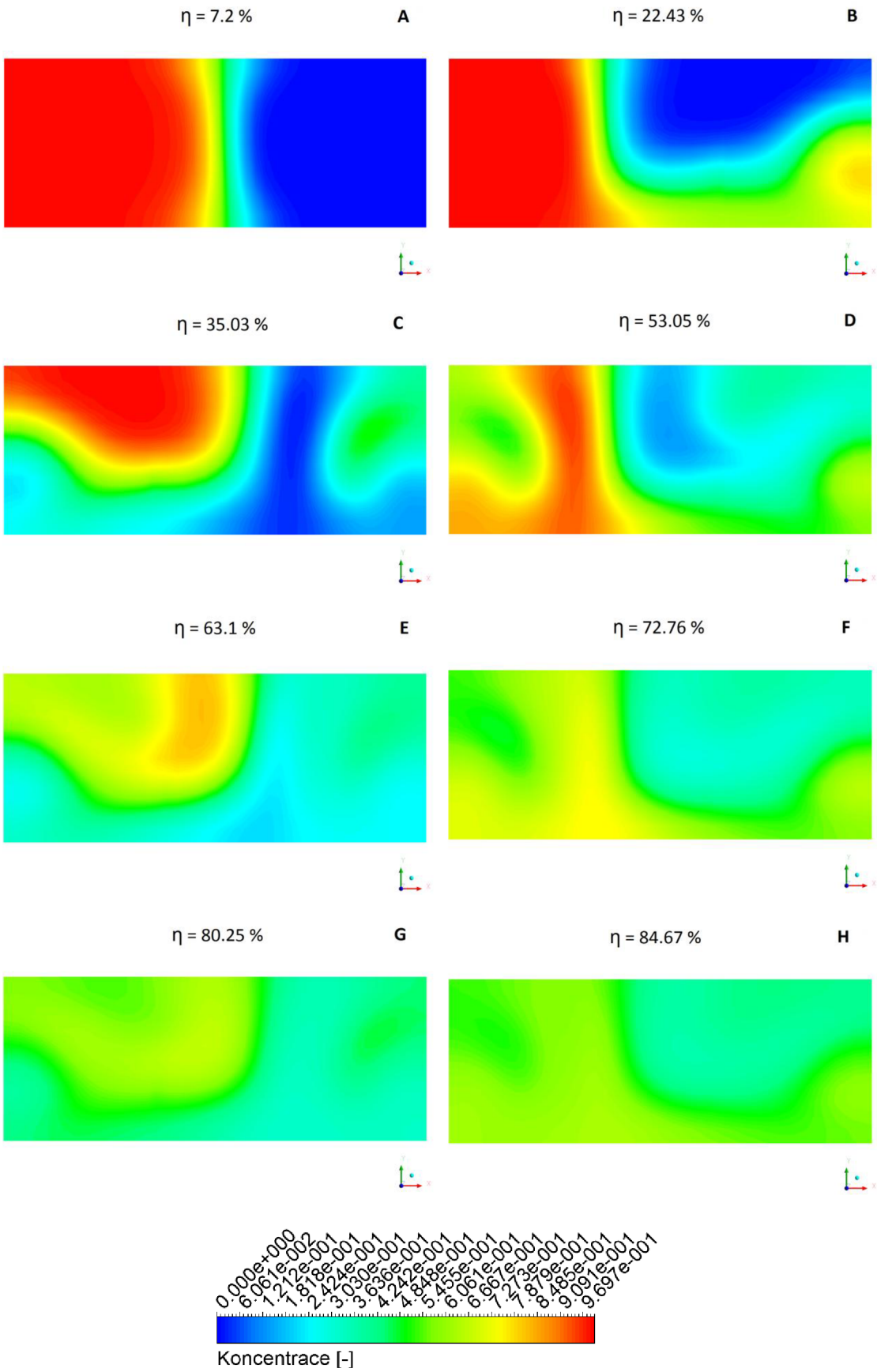
Tento typ zařízení pro mísení kapalin v mikroměřítku je hojně využíván díky své efektivnosti. Princip zařízení se díky drážkování opírá o tvorbu dvou protiběžných vírů, které se vlivem střídání segmentů po délce mísiče opakovaně přemisťují ze strany na

stranu. Na obrázku 6.2.1 je zobrazena první čtvrtina segmentů mikromísiče herringbone. Už z těchto hodnot koncentrace vody v příčných průřezech zařízení je zřejmé jak efektivního mísení dosáhneme na poměrně krátké vzdálenosti.



Obr. 6.2.1 *Kontury koncentrace vody za jednotlivými segmenty v příčných průřezech zařízení, při ideálním promísení je tato hodnota 0,5*

V těchto rovinách A – H byly dopočítány hodnoty účinnosti podle vztahu z kapitoly 6.1. Rovina A byla vytvořena ještě před samotným drážkováním a zde můžeme vidět pouze přenos látky molekulární difuzí, zde je hodnota účinnosti pouze η_A = 7,2 %. V rovině B dochází ke strmému nárůstu hodnoty účinnosti (η_B = 22,43 %) vlivem prvního segmentu mísiče, kapaliny dále přechází přes druhý segment a vlivem otočení drážek je vidět v řezu C znatelné promísení (η_C = 35,03 %). Následně dochází k další střídání drážek po délce zařízení a v rovině H již dojde k velmi efektivnímu promísení látek, zde je hodnota účinnosti η_H = 84,67 %. Nutno podotknout, že rovina H leží ve vzdálenosti 3.65 mm od počátku zařízení (L_c = 16 mm). Účinnost zařízení na konci jeho délky činí η = 99,4 % při tlakové ztrátě Δp = 683,03 Pa. Všechny hodnoty účinnosti stanovené v rovinách A – H jsou shrnuty v obrázku 6.2.2.

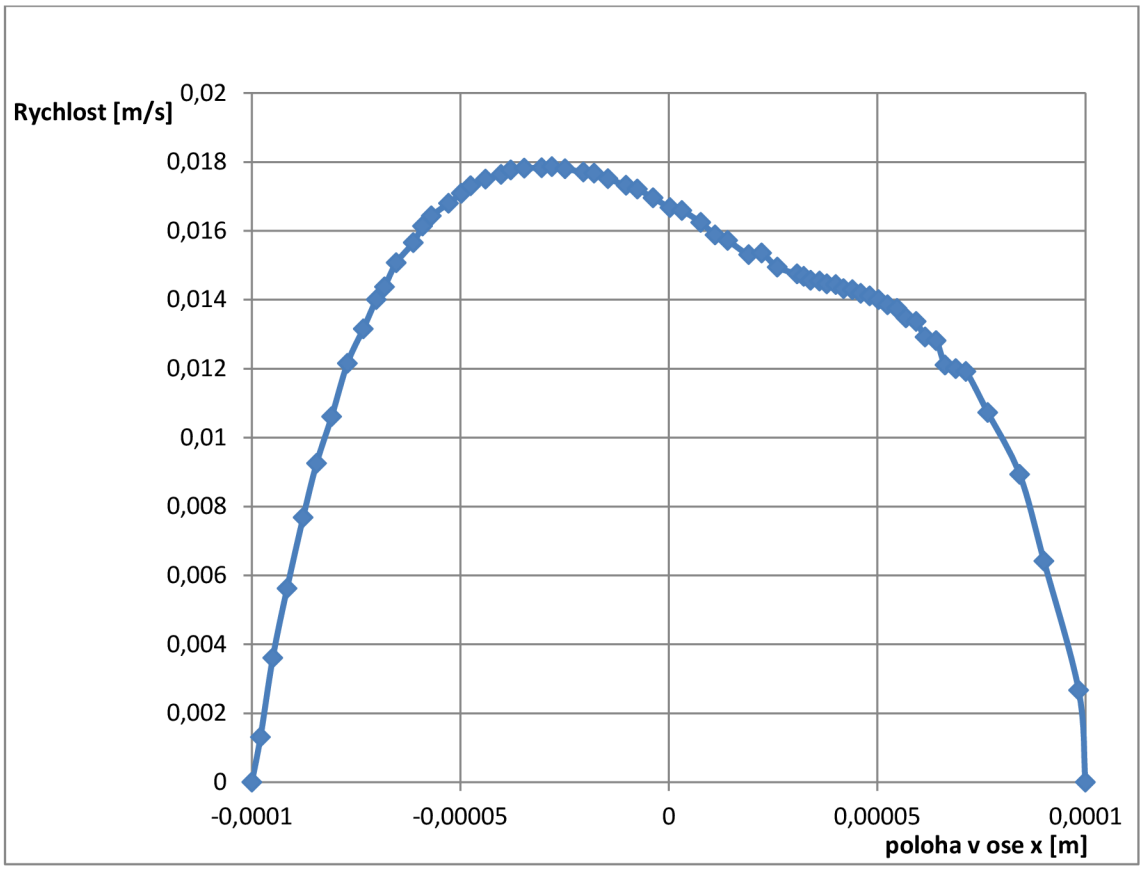


Obr. 6.2.2 *Obrázek hodnot koncentrace vody po délce zařízení (A-H)*

Na obrázku 6.2.2 tedy můžeme vidět kontury koncentrace vody v jednotlivých rovinách po délce zařízení. Zelená barva značí ideální promísení (0.5), červená a modrá barva (1 respektive 0) vyjadřuje nulové promísení látek, což samozřejmě značí i nulovou účinnost mísiče. Hodnoty koncentrace etanolu v těchto rovinách jsou inverzní k hodnotám koncentrace vody.

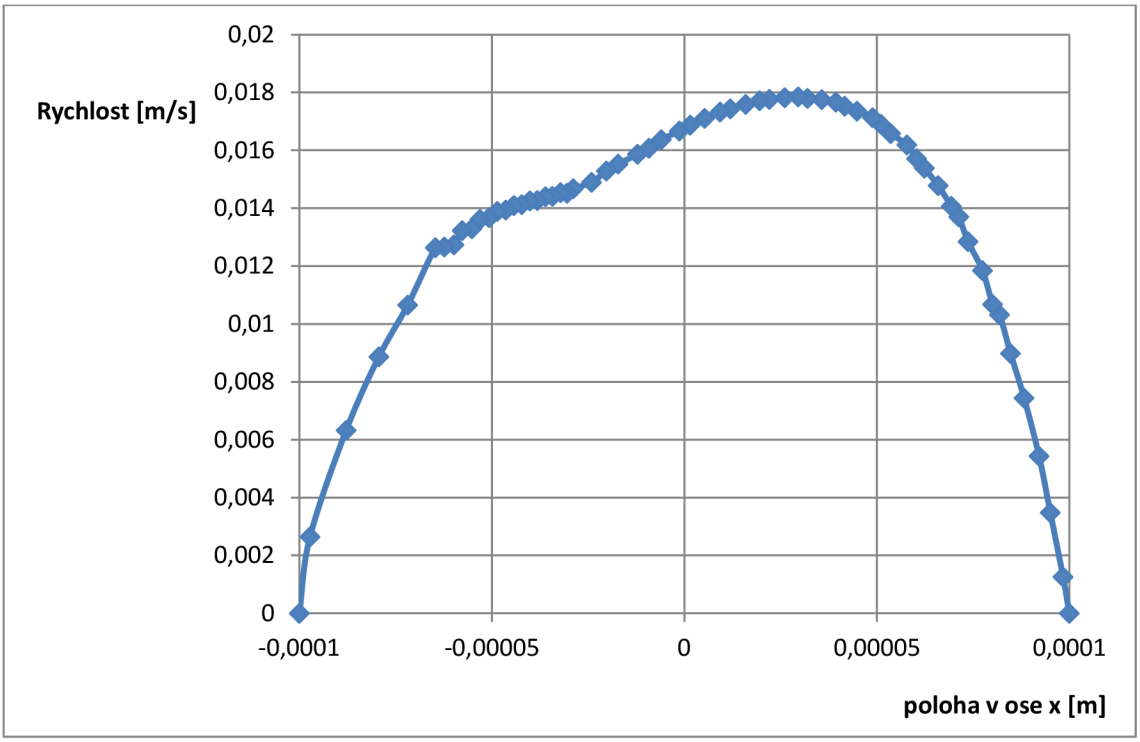
6.2.1 Rychlostní profil

Rychlostní profil v přímém kanálku má parabolický průběh. V pasivním mísiči herringbone dochází k deformaci tohoto rychlostního pole drážkováním zasazeným ve spodní stěně zařízení. Z grafu 6.2.1 je patrná deformace rychlostního profilu po jednom segmentu zařízení. Tento rychlostní profil byl vyexportován z Fluentu, kde byla nadefinována úsečka v polovině výšky kanálku v rovinách A – H. V těchto úsečkách byly následně vypsány rychlostní profily a graficky proloženy v MS Excel.



Graf 6.2.1 *Rychlostní profil vykreslený za 1. segmentem mísiče (rovina B)*

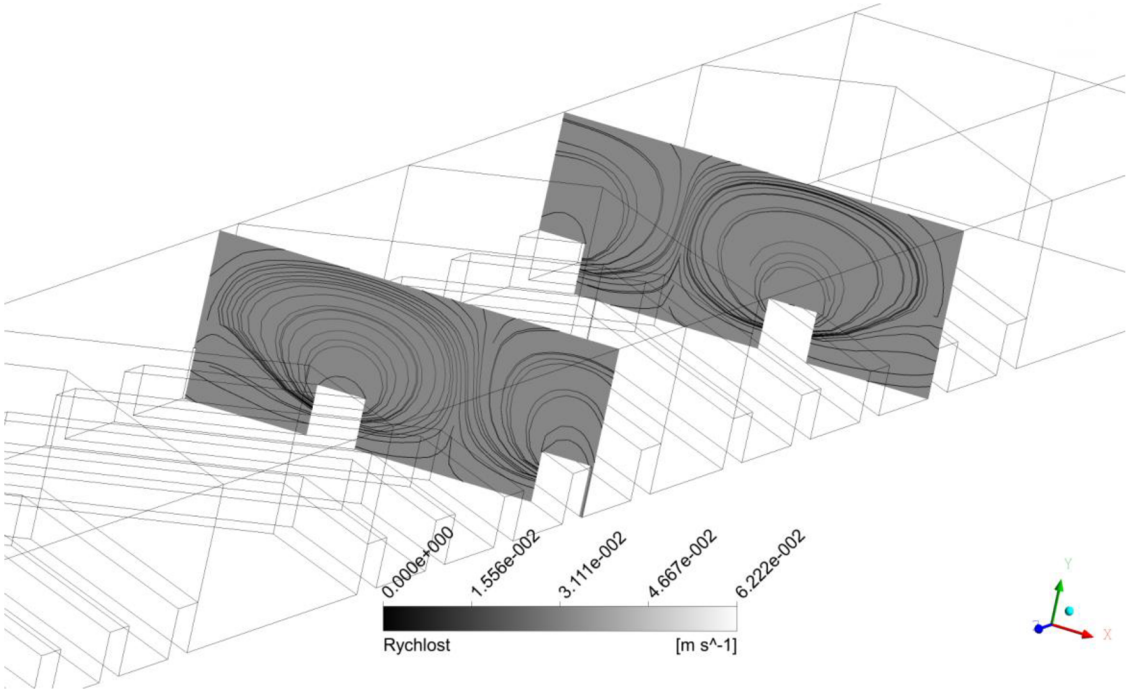
Jak již bylo uvedeno, tyto segmenty jsou střídány a následně dojde i k přehození nesymetrie ve tvaru rychlostního profilu ve směru osy x, což vidíme z grafu 6.2.2. Během průběhu pracovních látek zařízením dochází k neustálému přehazování nesymetrického rozložení rychlosti za jednotlivými segmenty.



Graf 6.2.2 *Rychlostní profil vykreslený za 2. segmentem mísiče (rovina C)*

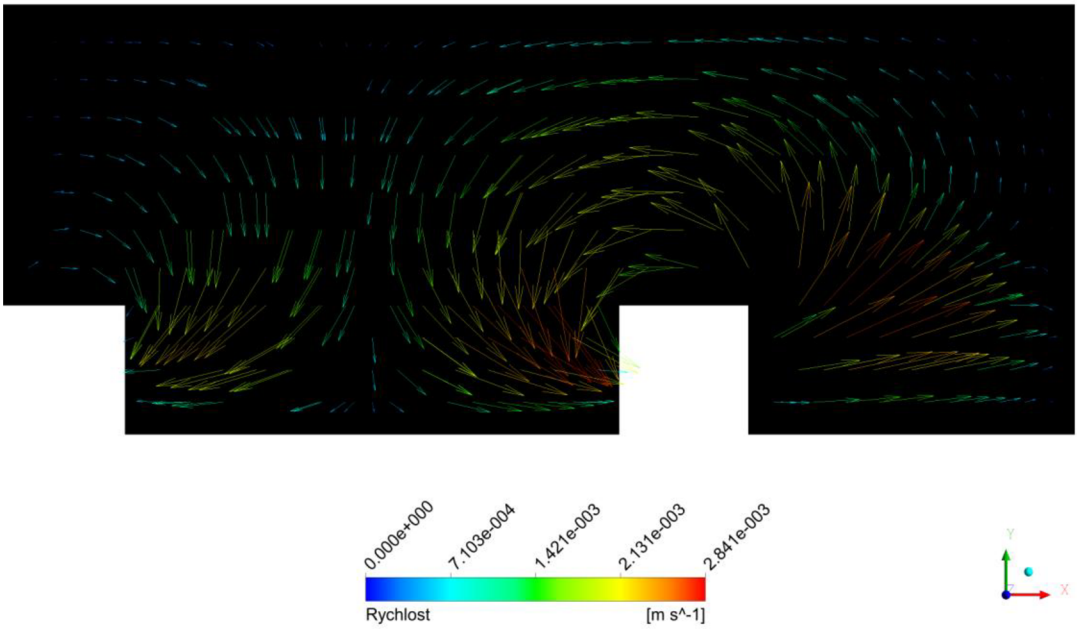
6.2.2 Proudnice

Grafickým vyhodnocením proudnic v příčných průřezech po délce zařízení dostaneme pohyb částic v ploše. V obrázku 6.2.3 můžeme vidět, že dochází k vytvoření dvou vírů o různých velikostech. Při vyhodnocení po prostřídání segmentů je zřejmé, že se tyto víry prohodí ze strany na stranu. Tyto víry jsou vytvořeny drážkami ve tvaru písmene V, které jsou pro tento mísič charakteristické.



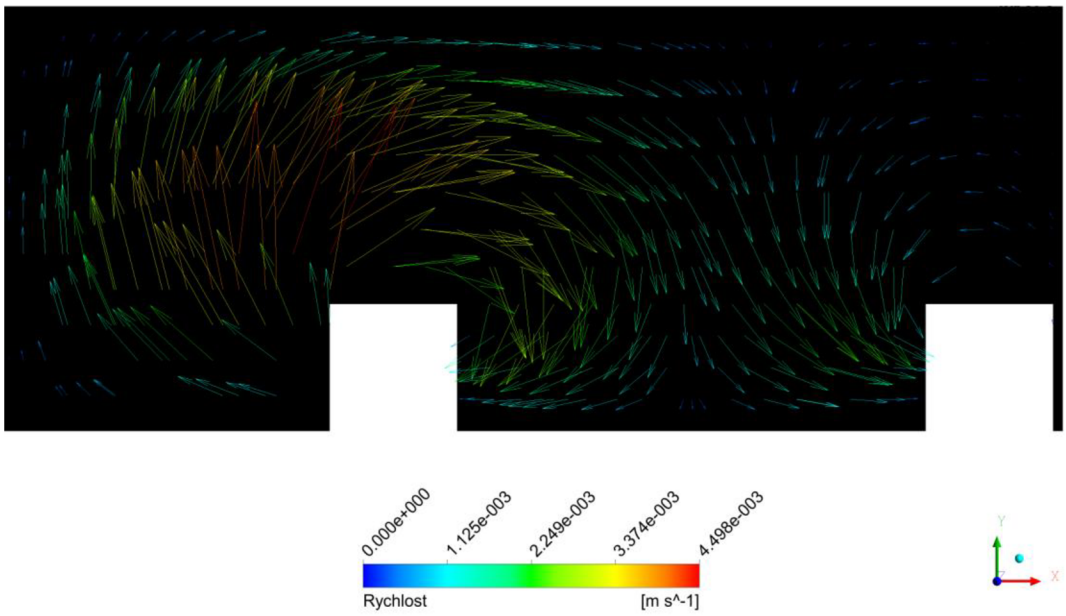
Obr. 6.2.3 *Proudnice vykreslené v příčných průřezech v segmentu 1 a 2*

K určení smyslu rotace vírů následně využijeme vektorů rychlostí v daných plochách. Na obrázku 6.2.4 můžeme vidět tangenciální rychlosti v prvním segmentu ovlivněné drážkami.



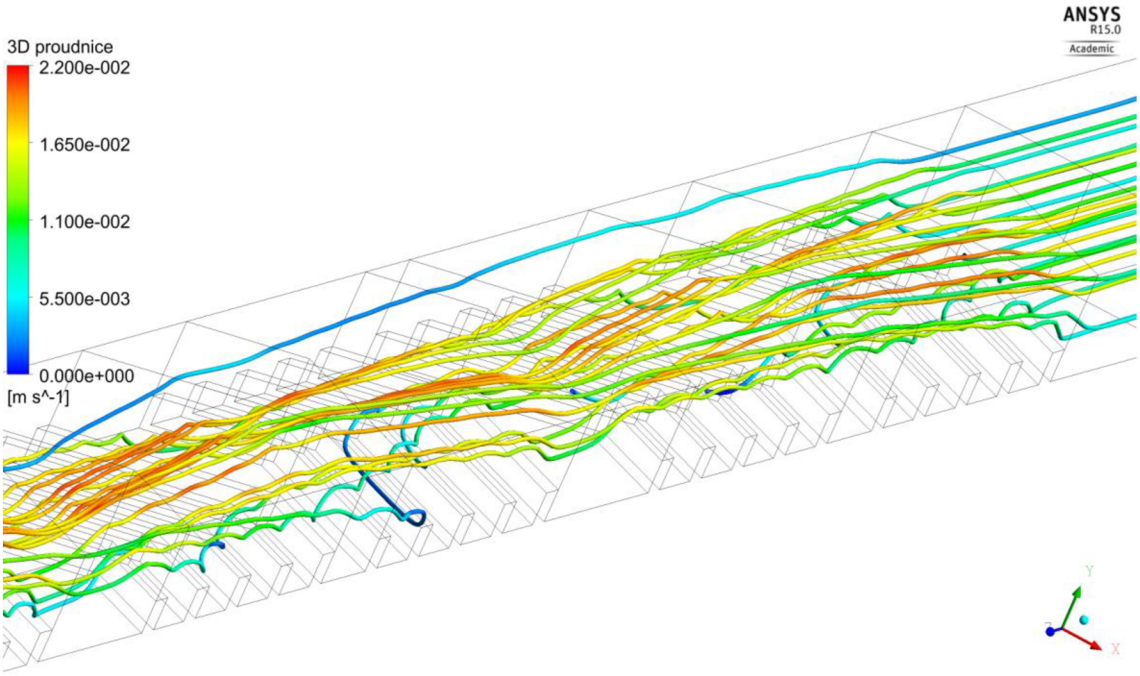
Obr. 6.2.4 *Vektory tangenciální rychlosti v prvním segmentu drážkování*

Vykreslením stejných rychlostí ve druhém segmentu mísiče můžeme vidět (obr. 6.2.5), že došlo i ke změně směru rotace vektorů rychlosti. Tento jev je způsoben střídáním drážkování po délce mísiče, kdy drážky vytvoří gradient tlaku, který urychluje kapaliny ve směru drážek. Tuto skutečnost můžeme považovat za velký přínos pro mísení v mikroměřítku.



Obr. 6.2.5 *Vektory tangenciální rychlosti v druhém segmentu drážkování*

Vykreslením 3D proudnic je ukázáno, jak se vlivem využívaných V drážek docílí rozvíření laminárního proudu. Tato skutečnost má zásadní vliv na promísení látek. Je to způsobeno tlakovým gradientem v drážkách, což žene kapalinu drážkou a dojde k přesunutí látek ze strany na stranu.

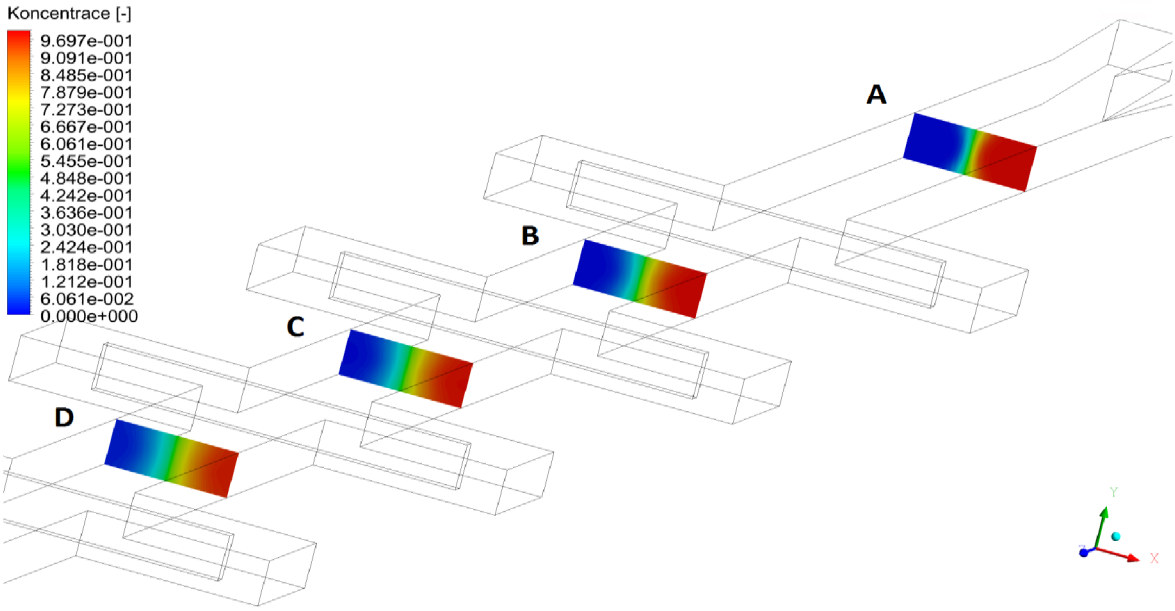


Obr. 6.2.6 *3D proudnice na prvních dvou segmentech herringbone mísiče*

6.3 Mísič na bázi přerozdělení proudu

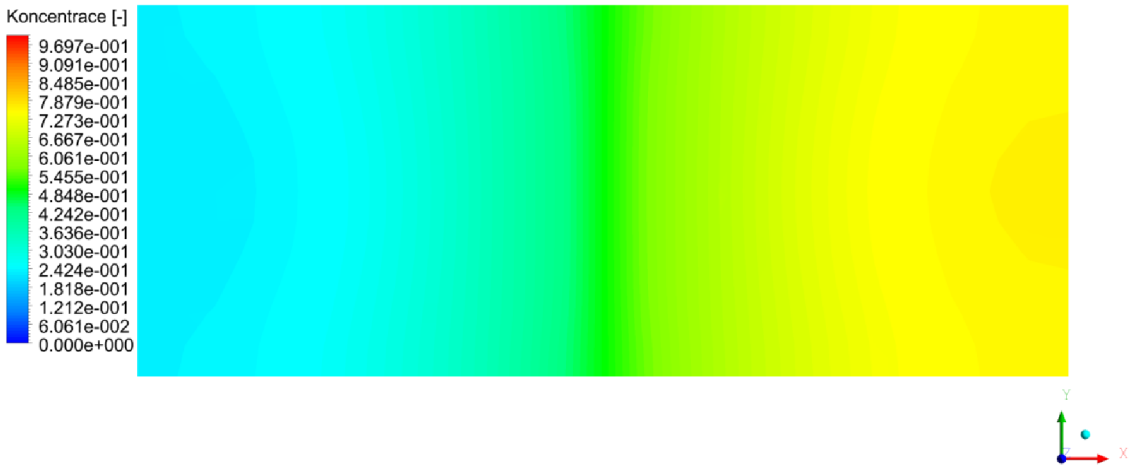
Simulace proudění v mísiči založeném na přerozdělení a následném znovu spojení proudu pracovních látek byly vyhodnocovány tak, aby bylo možné porovnat účinnost jednotlivých zařízení. U tohoto mísiče se při stejné hodnotě Reynoldsova čísla očekávají poměrně nižší účinnosti. Pro vyhodnocení účinnosti tohoto zařízení byly podobně jako v předchozím případě nadefinovány plochy za jednotlivými segmenty zařízení. Z obrázku 6.3.1 vidíme kontury koncentrace vody v těchto plochách, které jsou umístěny za každým mísícím segmentem. Z těchto kontur je patrné, že přenos látky je odkázán pouze na molekulární difuzi, jelikož segmenty mísiče při tomto Reynoldsově číslu (Re = 1.8) nemají příliš velký vliv na účinnost.

V rovinách A – H byly dopočítány hodnoty účinnosti podle vztahu z kapitoly 6.1. Rovina A byla vytvořena ještě před prvním segmentem, zde vidíme přenos látky závislý na difuzi látek. Zde je hodnota účinnosti η_A = 7 %. V rovině B dochází k pozvolnému nárůstu hodnoty účinnosti η_B = 14,63 % vlivem prvního segmentu mísiče. Za druhým mísícím segmentem zařízení (rovina C) je hodnota účinnosti η_C = 18,74 %. Následně dochází k přecházení kapalin přes další segmenty, kdy v rovině D je účinnost η_D = 20,59 %. Oproti zařízení typu herringbone je nárůst účinností pouze velmi malý v závislosti na délce zařízení (dva segmenty herringbone mísiče odpovídají jednomu segmentu zkoumaného zařízení). Všechny hodnoty účinnosti stanovené v rovinách A – D jsou shrnuty v obrázku 6.3.1.



Obr. 6.3.1 *Kontury koncentrace v příčných průřezech za jednotlivými segmenty zařízení*

Účinnost zařízení po celé jeho navrhované délce (L_c = 16 mm) nabývá maximální hodnoty účinnosti η = 58,46 % při tlakové ztrátě Δp = 577,88 Pa. Na obrázku 6.3.2 jsou vykresleny kontury koncentrace právě na konci zařízení. Celý mísič je složen z celkem čtrnácti segmentů.

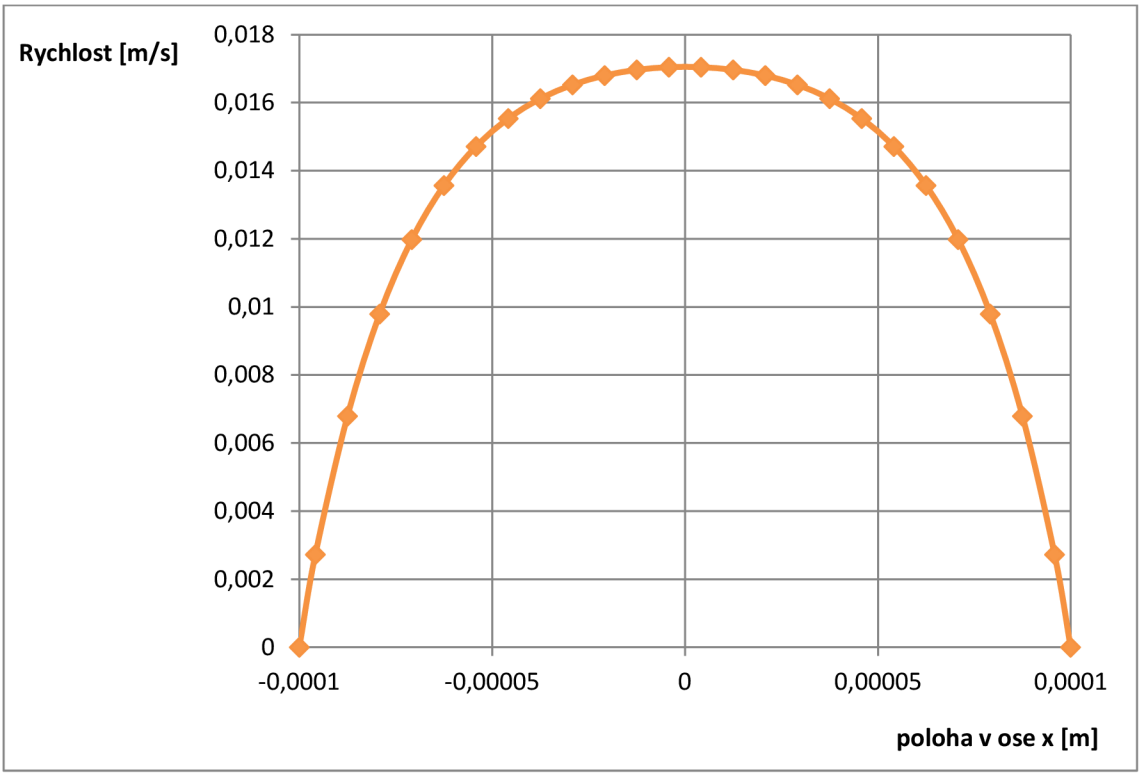


Obr. 6.3.2 *Kontury koncentrace na konci mísiče na bázi přerozdělení proudu*

Jak již bylo zmíněno, toto zařízení dosahuje oproti herringbone mísiči poměrně nízké účinnosti, což bude vysvětleno pomocí vykreslení rychlostního profilu a pomocí 3D proudnic v zařízení.

6.3.1 Rychlostní profil

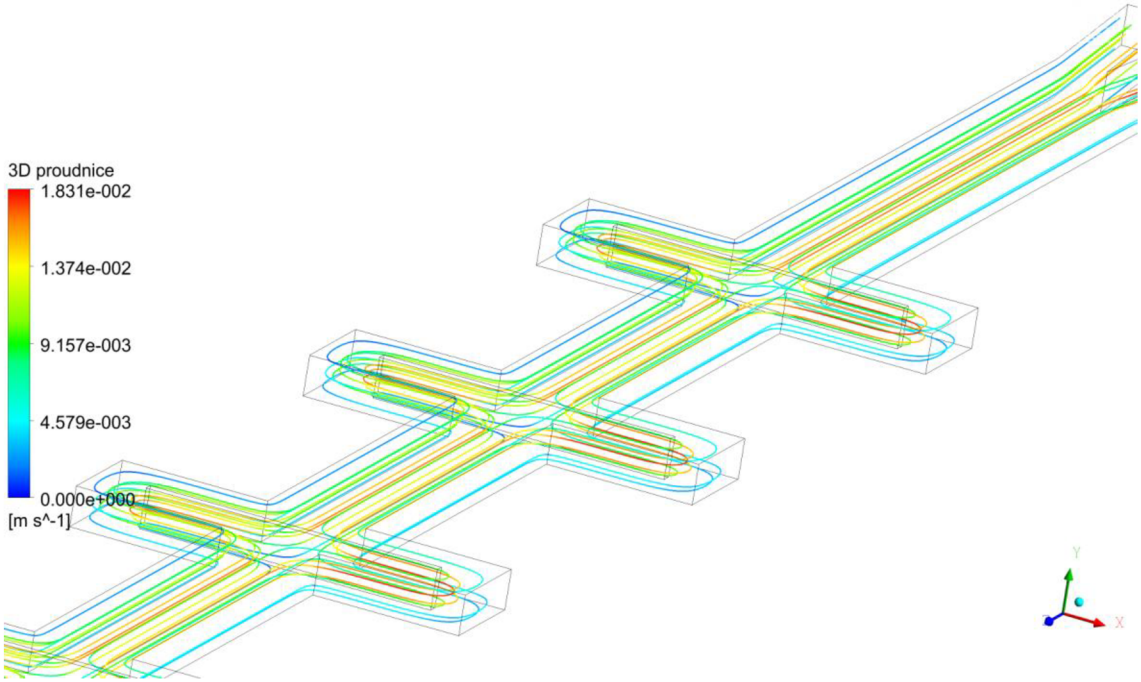
Rychlostní profil u tohoto zařízení byl vykreslen pomocí stejných funkcí jako pasivní směšovač herringbone. Vypsáním rychlostních profilů a následným grafickým zpracováním bylo zjištěno, že se rychlostní profil během průchodu přes celou délku zařízení takřka nemění a má parabolický tvar (graf 6.3.1).



Graf 6.3.1 *Vykreslený rychlostní profil za prvním přerozdělením proudu (rovina B)*

6.3.2 Proudnice

Z výsledků účinnosti a po vykreslení 3D proudnic v jednotlivých segmentech zařízení (obrázek 6.3.4) je zřejmé, že se látky po délce zařízení pohybují ve vrstvách a nedochází k tak intenzivnímu promísení jako v předchozím případě.



Obr. 6.3.4 *Vykreslené 3D proudnice na prvních třech segmentech zařízení*

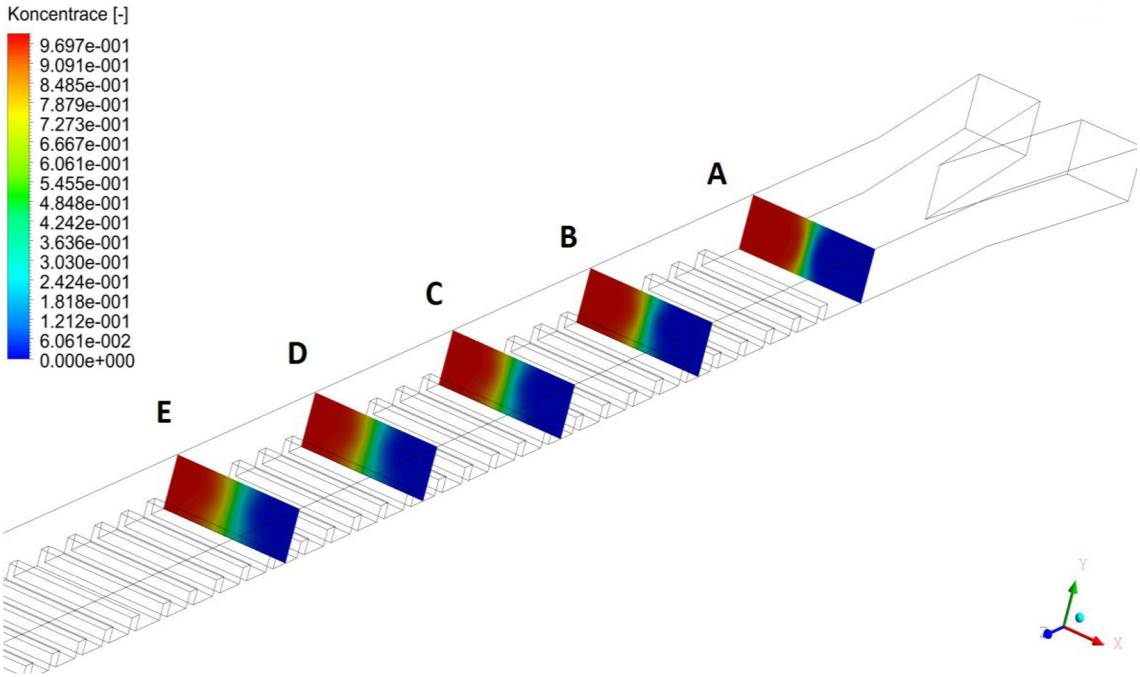
7. Optimalizace pasivního směšovače herringbone

V této kapitole proběhne zhodnocení jednotlivých obměn zařízení typu herringbone, kdy byla snaha o optimalizaci tohoto zařízení a srovnání i z hlediska hydraulických ztrát po jejich délce. Budeme zde postupně rozebírat extrémní případy využití drážek ve spodní straně zařízení, které byly popsány v podkapitole 5.4. Jako poslední bude zhodnoceno zařízení s přímým mikrokanálkem (podkapitola 5.5), aby bylo nastíněno jak je důležité využívání geometrických změn v mikromísičích. Postup při tvorbě a analýze výsledků je shodný s kapitolou 6.

7.1 Rovné drážkování napříč kanálkem

Tato podkapitola pojednává o zařízení, které je definováno v podkapitole 5.4.1. Je zde využíváno přímých drážek umístěných kolmo na stěnu mikrokanálku, kdy každých 5 kusů drážek tvoří segment. Stanovení okrajových podmínek a celkových průtoků je zachováno i pro následující zařízení tak jako tomu bylo v předchozích případech.

Po jednotlivých segmentech mísiče byly určeny hodnoty účinnosti (A – E). Rovina A byla vytvořena ještě před prvním segmentem, kde hodnota účinnosti stejně jako v předchozích případech dosáhla účinnosti η_A = 7 %. Po překonání prvního segmentu zařízení nepřichází žádný zásadní skok v nárůstu účinnosti. V rovině B je dosáhnuto účinnosti η_B = 9,3 %. O segment dále je hodnota účinnosti η_C = 11,15 % Po průchodu přes další segmenty zařízení (roviny D a E) dosahujeme hodnot účinnosti η_D = 12,77 % respektive η_E = 14,24 %. V obrázku 7.1.1 jsou graficky zhodnoceny kontury koncentrace ve stanovených rovinách.



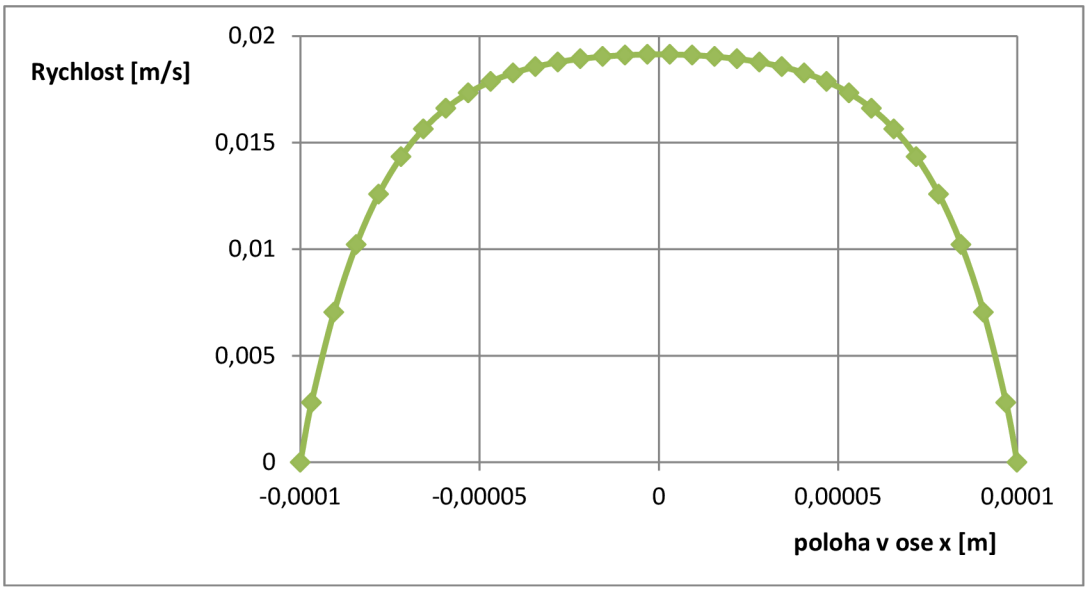
Obr. 7.1.1 *Kontury koncentrace po jednotlivých segmentech mikromísiče s přímými drážkami*

Na konci zařízení (L_c = 16 mm) dosahujeme účinnosti η = 47,09 % při tlakové ztrátě Δp = 739,65 Pa. Na obrázku 7.1.2 jsou zachyceny kontury hodnot koncentrace těsně před koncem zařízení, kde dosahujeme maximální účinnosti mísiče.

Obr. 7.1.2 *Kontury koncentrace s místem největší účinnosti daného zařízení (konec mísiče)*

Mikromísič s přímými drážkami umístěnými kolmo na stěnu mikrokanálku se zatím ukazuje nejhůře jak z pohledu maximální hodnoty účinnosti, tak i z hlediska tlakové ztráty po celé jeho délce. Je zde ovšem větší počet překážek pro proudění, jelikož byl kladen důraz na dodržení celkové délky pro všechna zařízení na L_C = 16 mm.

7.1.1 Rychlostní profil

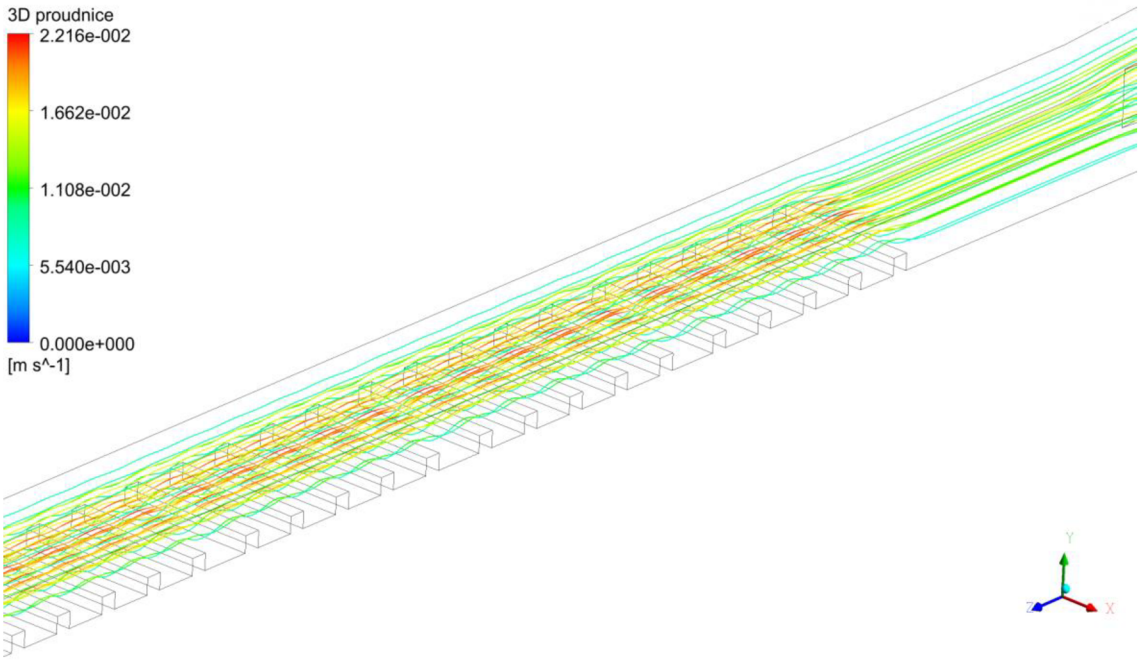


Graf 7.1.1 *Rychlostní profil mísiče s drážkami napříč vykreslený po prvních pěti drážkách, po délce zařízení se nemění*

Z grafu 7.1.1 je patrné, že u tohoto mísiče nedochází k žádné deformaci rychlostního profilu po délce mísiče. Tento parabolický profil tedy není ovlivněn drážkováním ve spodní straně mísiče, jelikož kapaliny se jen přes drážky převalují a nedojde k narušení vrstev proudění.

7.1.2 Proudnice

Vykreslením 3D proudnic u tohoto typu zařízení bylo zjištěno, že kapaliny nejsou zásadně ovlivněny drážkováním, které je kolmé na směr proudění. Kapaliny se v podstatě po délce zařízení pouze přes drážkování převalují, jelikož proud kapalin není nijak vychylován a vznikají tu pouze nepatrné sekundární rychlosti, které nejsou schopny samotný proud vychýlit.



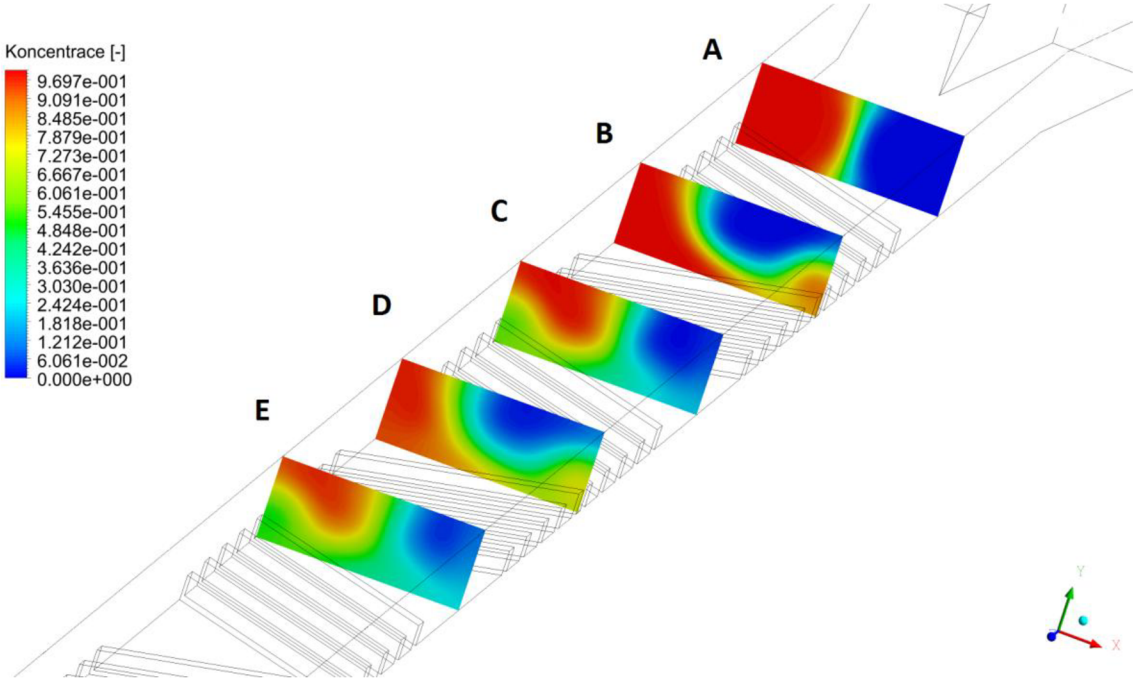
Obr. 7.1.3 *Schéma mísiče s přímými příčnými drážkami s vykreslenými 3D proudnicemi*

7.2 Drážkování pod úhlem 45°

Návrh tohoto zařízení byl popsán v podkapitole 5.4.2. V mikromísiči je využíváno drážkování na spodní straně mísiče, kde se jeden segment skládá z pěti kusů drážek. Samotné drážky svírají se stěnou zařízení úhel 45° a následně jsou zrcadlově otočeny.

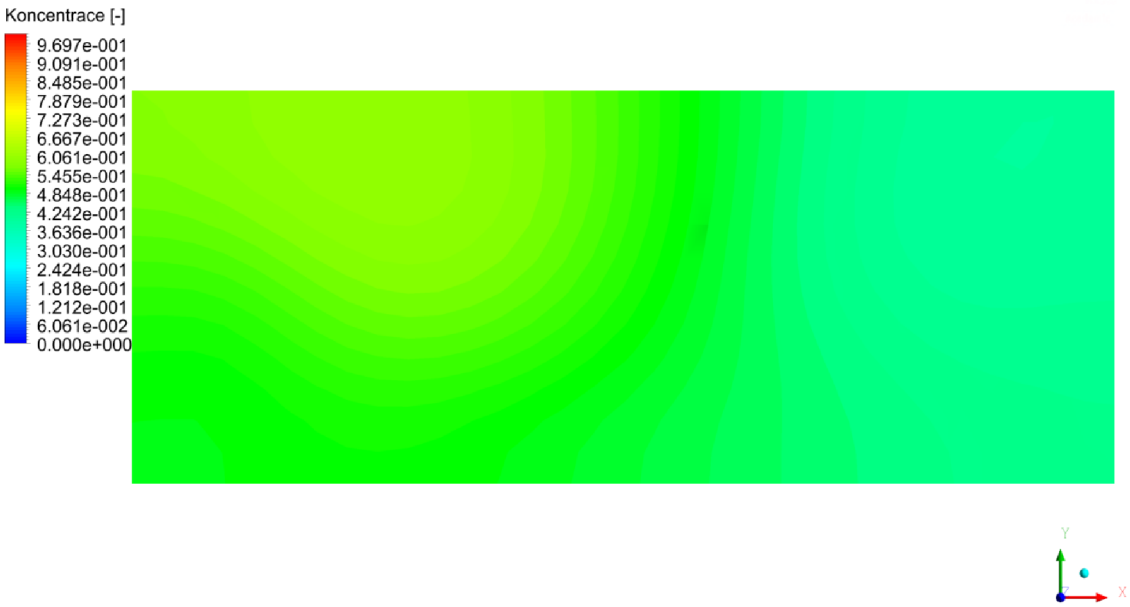
Vykreslením kontur na obrázku 7.2.1 v rovinách A – E lze usoudit, že po délce mísiče je docíleno vlivem drážkování pod úhlem přesouvání látek ze strany na stranu. Rovina A byla nadefinována ještě před samotným drážkováním a zde obdobně jako v předchozích případech hodnota účinnosti dosahuje η_A = 6,95 %. Následně dojde k průchodu kapaliny přes první mísící segment a hodnota účinnosti zde dosahuje η_B = 20,66 %. Směs putuje dále přes druhý segment, který má drážky otočeny. Po otočení drážek je hodnota účinnosti v rovině C η_C = 32,9 %. V rovině D je již vidět, že postupně

dochází k přesouvání látek v příčném průřezu a zde je hodnota účinnosti stanovena na η_D = 35,45 %. V řezu zařízení v rovině E je vidět už znatelného promísení pracovních látek a to η_E = 45,86 %.



Obr. 7.2.1 *Kontury koncentrace na prvních segmentech zařízení*

Na konci zařízení byla stanovena hodnota účinnosti na η = 86,58 % při tlakové ztrátě Δp = 624,06 Pa. V obrázku 7.2.2 jsou zachyceny kontury koncentrace na konci zařízení.

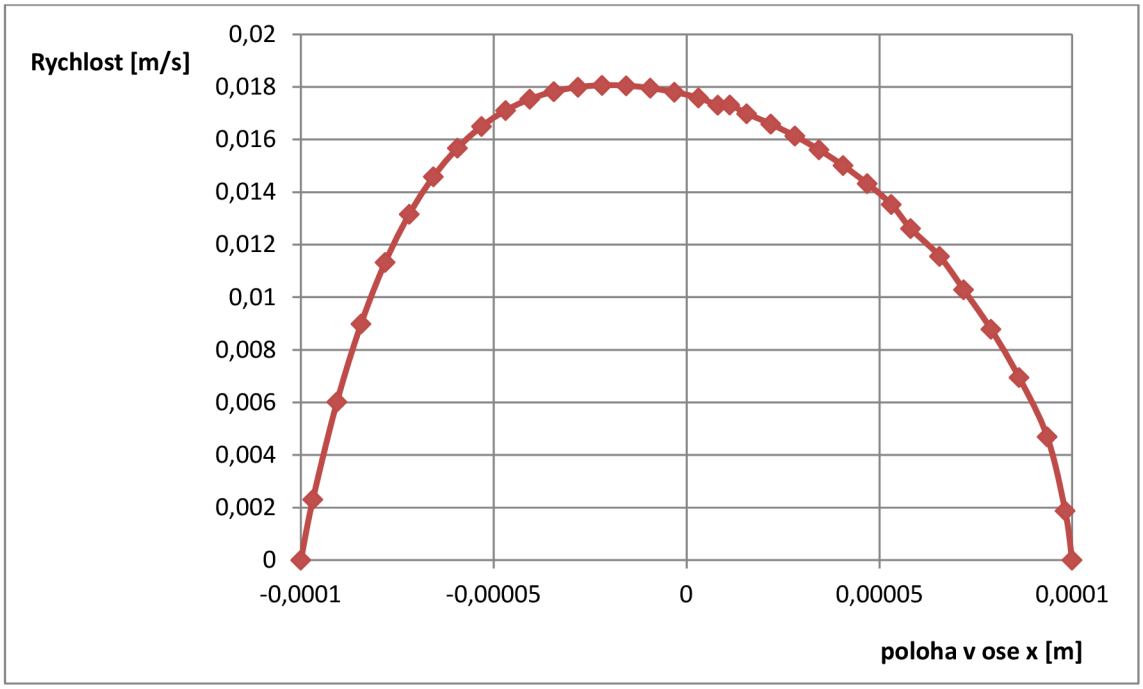


Obr. 7.2.2 *Hodnoty koncentrace na konci zařízení s drážkováním pod 45°*

Tento mikromísič dosahuje razantně vyšší účinnosti než zařízení v předchozí podkapitole. Jak již bylo zmíněno, je velmi důležité docílit toho, aby byly kapaliny tlačeny k přesunutí se na druhou stranu. Z dosavadních výsledků je patrné, že k přesouvání látek ve směru osy x dochází při natočení drážkování vůči boční stěně mikrokanálku.

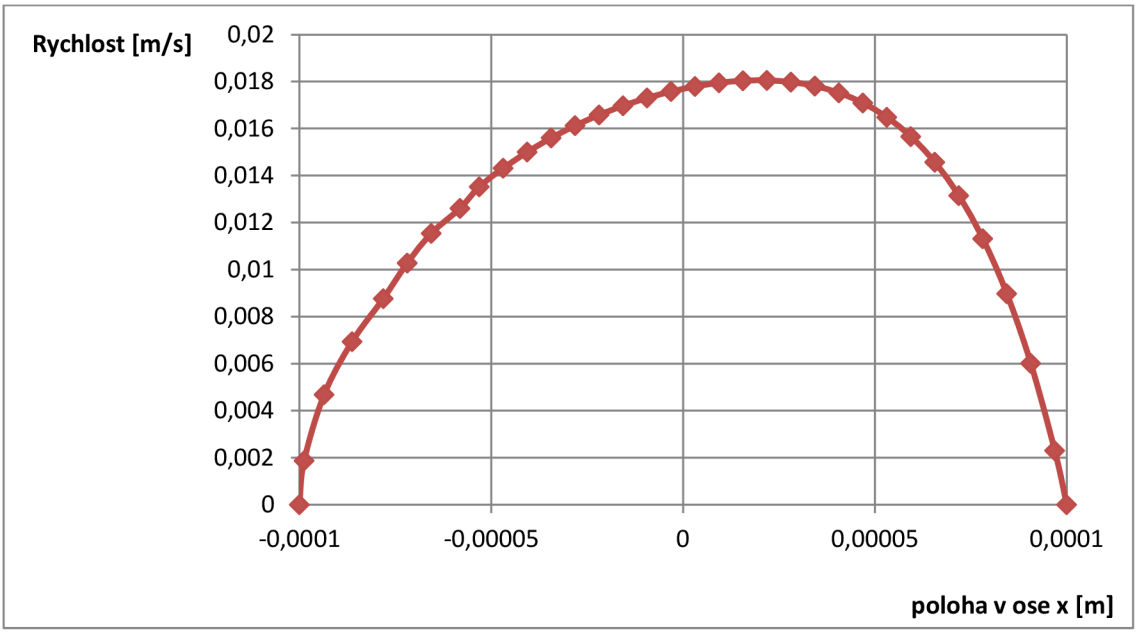
7.2.1 Rychlostní profil

Samotný rychlostní profil má ještě před drážkováním parabolický průběh. Během průběhu přes první mísící segment dojde k jeho deformaci vlivem tlakového gradientu vytvořeného v drážkách. V grafu 7.2.1 lze vidět deformovaný rychlostní profil.



Graf 7.2.1 *Deformovaný rychlostní profil za prvním mísícím segmentem zařízení*

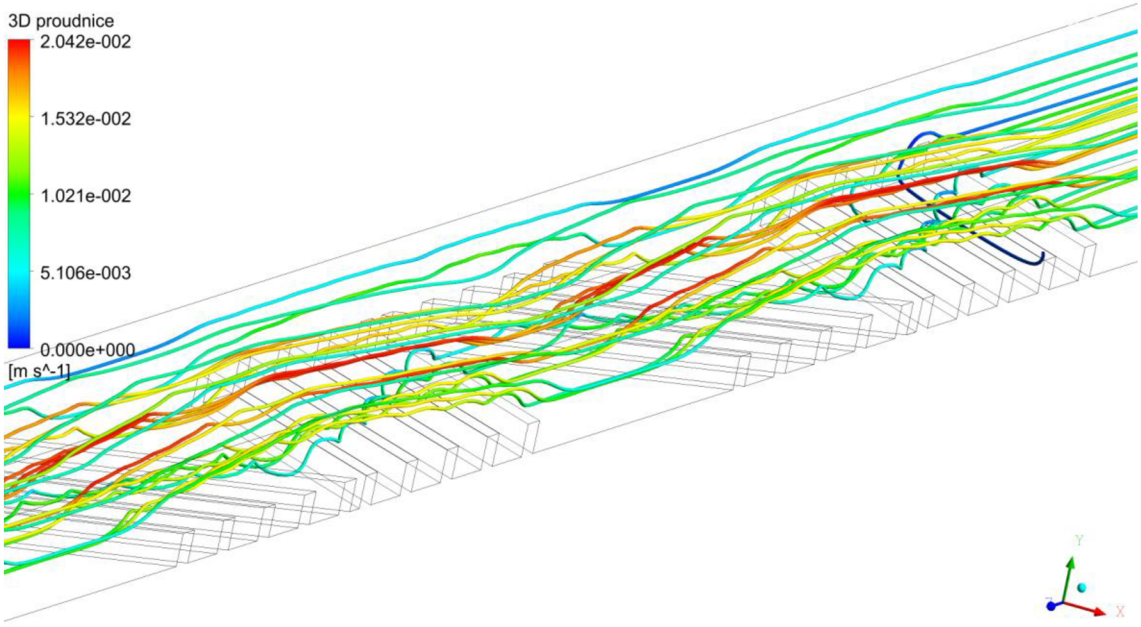
Následně dojde k přehození segmentů po délce zařízení. Vlivem druhého mísícího segmentu dojde i ke změně rychlostního profilu, který se vychýlí na druhou stranu. Tyto rychlostní profily jsou s každým dalším střídáním segmentů opakovaně vychylovány. Rychlostní profil za druhým mísícím segmentem je vykreslen v grafu 7.2.2.



Graf 7.2.2 *Rychlostní profil za druhým mísícím segmentem*

7.2.2 Proudnice

Při vykreslování proudnic u tohoto typu zařízení je zjevné ovlivnění proudu pracovních látek drážkováním. Z obrázku 7.2.3 je patrné, jak jsou částice unášeny i přímo ve směru drážek, kdy se již u prvního segmentu dostanou úplně na druhou stranu. Dále ve směru proudění tak dochází k cyklickému přesouvání proudu každé látky ze strany na stranu, což má za následek podstatně kvalitnější smísení látek než v předchozím případě.

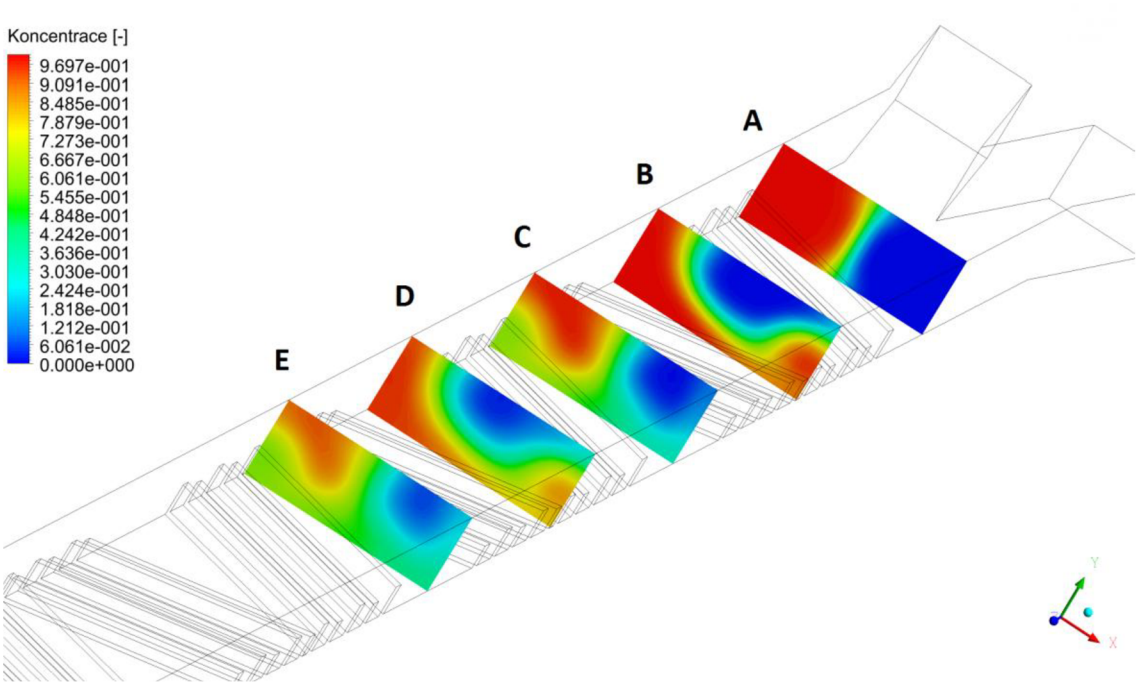


Obr. 7.2.3 *3D proudnice vykreslené na prvních 4 mísících segmentech zařízení*

7.3 Hradbový mísič

Konstrukce tohoto zařízení vychází z předchozího mikromísiče, kdy byla vytvořena každá lichá drážka vyšší. Návrh samotného zařízení je popsán v podkapitole 5.4.3. Modifikace zvýšení každé liché drážky mělo za úkol zvýšit celkovou účinnost zařízení při nepatrně vyšší tlakové ztrátě.

Po délce mikromísiče byly za jednotlivými segmenty nadefinovány roviny A – E. Rovina A leží ještě před prvním mísícím segmentem, zde hodnota účinnosti dosahuje η_A = 6,95 %. Cestou přes další mísící část zařízení se dostaneme do roviny B, kde se hodnota účinnosti pohybuje na η_B = 21,37 % a je zde vidět, jak se proud dostává na druhou stranu po směru osy x. Opětovným přehozením segmentů je v rovině C účinnost zvýšena na η_C = 35,13 %. V rovině D je potom hodnota účinnosti η_D = 39,43 % a po čtvrtém segmentu mísení je účinnost stanovena na η_E = 48,04 %. Vykreslené kontury koncentrace v předem definovaných plochách jsou shrnuty v obrázku 7.3.1.



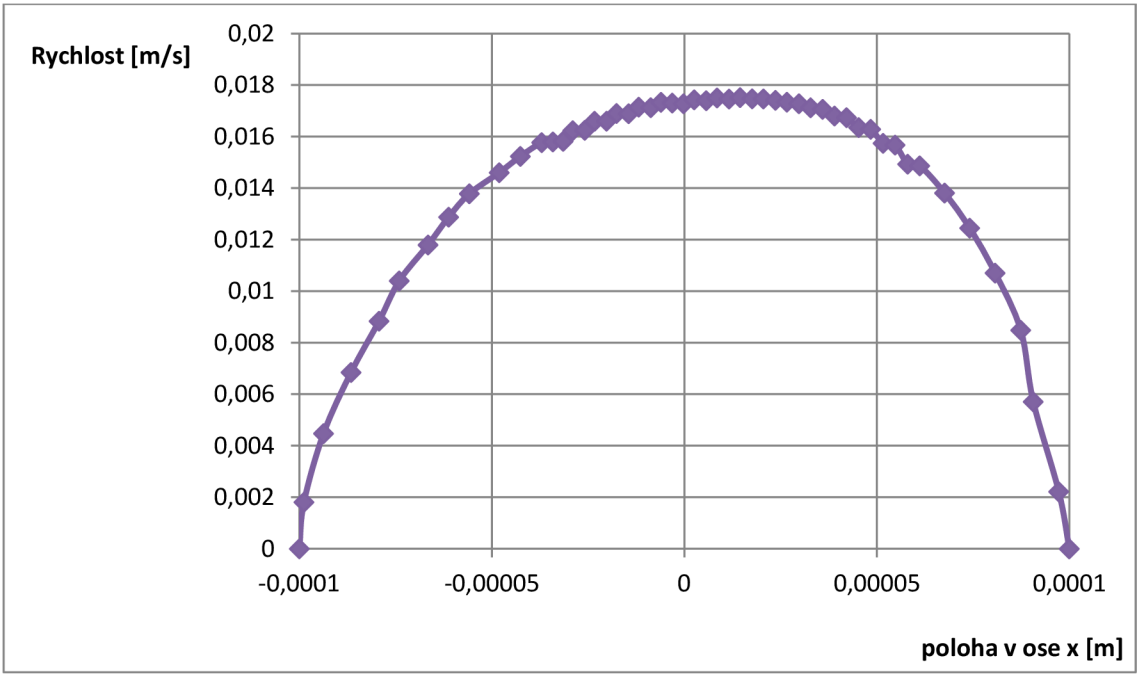
Obr. 7.3.1 *Kontury koncentrace v příčných rovinách A – E hradbového mísiče*

Hradbový mísič oproti zařízení se stejně vysokými drážkami v podkapitole 7.2 dosahuje vyšší účinnosti a to η = 97,08 % při zvýšení tlakové ztráty na Δp = 725,97 Pa. V obrázku 7.3.2 jsou vykresleny kontury koncentrace na konci mísiče. Zde je vidět skoro ideální promísení.

Obr. 7.3.2 *Vykreslené kontury koncentrace hradbového mísiče na konci zařízení*

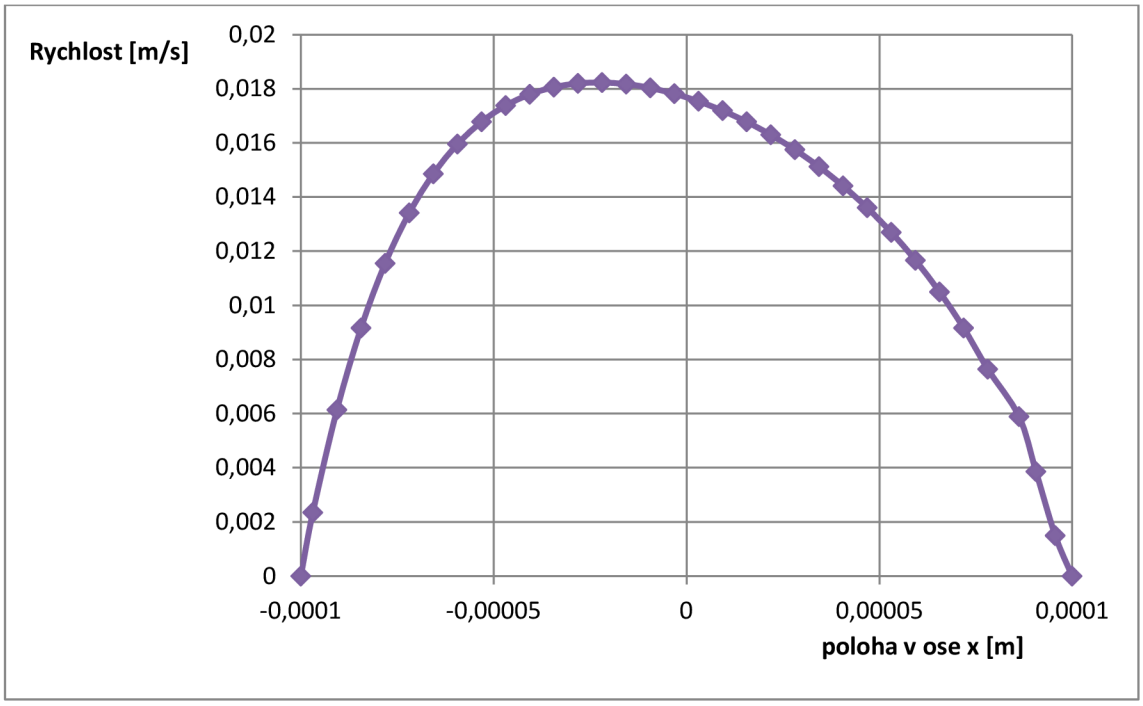
7.3.1 Rychlostní profil

Rychlostní profil před prvním drážkováním má ještě parabolický profil. Po průchodu přes první mísící segment dojde k vychýlení parabolického profilu, což má za následek přesunutí látky na druhou stranu. V grafu 7.3.1 je vykreslen rychlostní profil v tabulkovém procesoru.



Graf 7.3.1 *Rychlostní profil za prvním segmentem hradbového mísiče*

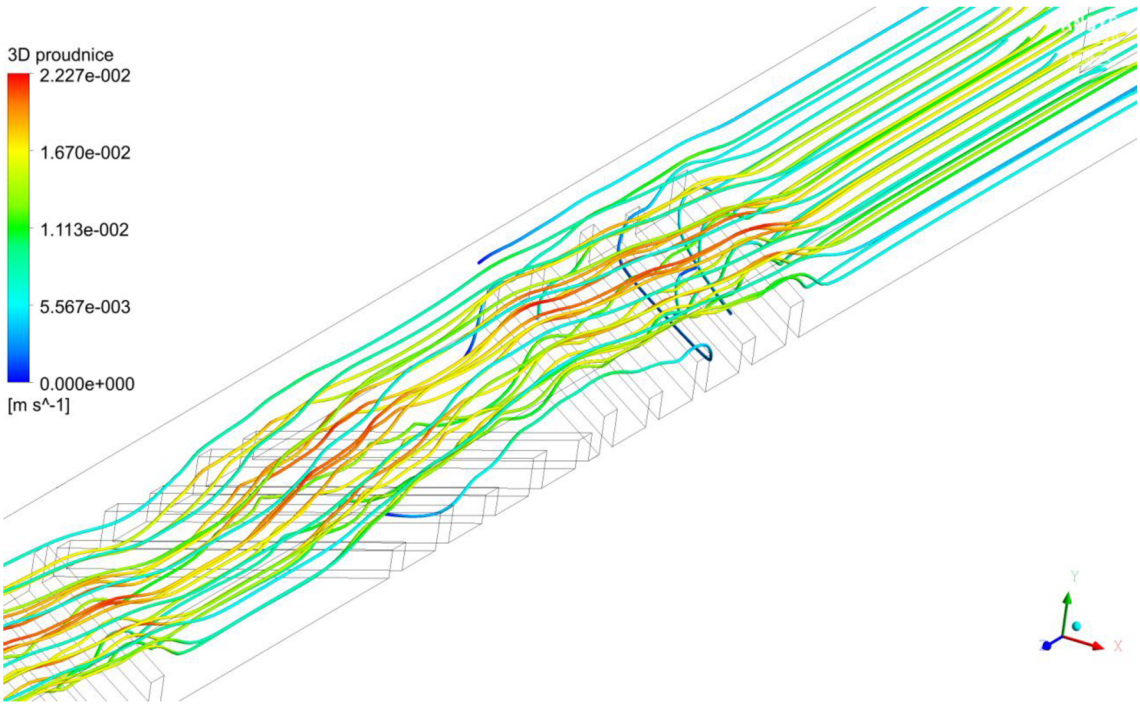
Po průchodu přes první mísicí segment dojde k vychýlení proudu a následuje další segment, po kterém v grafu 7.3.2 můžeme vidět i přetočení rychlostního profilu kolem osy x. Při průchodu dále zařízením se tento jev vlivem drážkování opakuje.



Graf 7.3.2 *Rychlostní profil hradbového mísiče za druhým segmentem*

7.3.2 Proudnice

Podobně jako v předchozím případě je znatelné ovlivnění vrstev laminárního proudu mísícími segmenty. Zvýšené drážky způsobují zvýšení stupně promísení, kdy dojde k převalení proudu kapaliny do drážky a zde vlivem tlakového gradientu v drážce dojde k přesunutí částic látky drážkou na opačnou stranu mísiče. Po délce celého zařízení je takto docíleno velmi efektivního promísení.

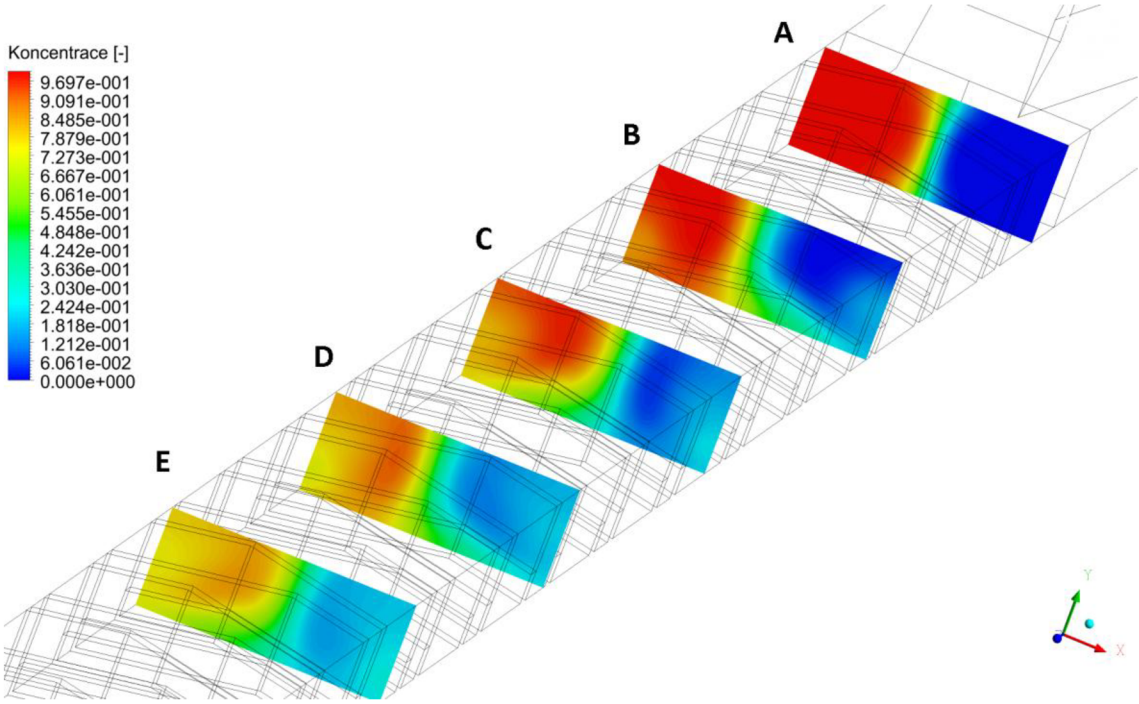


Obr. 7.3.3 *Vykreslené 3D proudnice na prvních částech hradbového mísiče*

7.4 Střídání drážek

Návrh tohoto zařízení využívá drážek ve tvaru písmene V, které jsou rozměrově stejně jako u herringbone mísiče, a je shrnut v podkapitole 5.4.4. Jeden mísící segment je složen z pěti kusů drážek a tyto drážky jsou zrcadlově střídány kolem osy x. Výsledný segment se tedy skládá z dvou stejně a 3 zrcadlově orientovaných drážek.

V nadefinovaných rovinách A – E po délce zařízení byla vyhodnocována účinnost. Před prvním segmentem, kde je přenos látky řízen pouze molekulární difuzí, je hodnota účinnosti η_A = 7,01 %. Po průchodu prvním mísicím segmentem zařízení je hodnota účinnosti rapidně zvýšena na η_B = 20,57 % z důvodu ovlivnění proudu drážkováním. Za druhým segmentem zařízení (rovina C) je vypočtená účinnost rovna η_C = 29,69 %. Z dosavadního poznání je vidět, že se látka postupně a však pomaleji dostává na druhou stranu zařízení oproti herringbone mísiči. Po průchodu přes třetí segment se hodnota účinnosti dostane na η_D = 38,12 %. Oproti mísiči popsanému v podkapitole 7.3 dosahuje zařízení zhruba o procento menší účinnosti. Proud látek dále putuje zařízením a v rovině E je vypočtená účinnost η_E = 45,4 %. V obrázku 7.4.1 jsou vykresleny kontury koncentrace v rovinách A – E, kde byla stanovena účinnost zařízení.



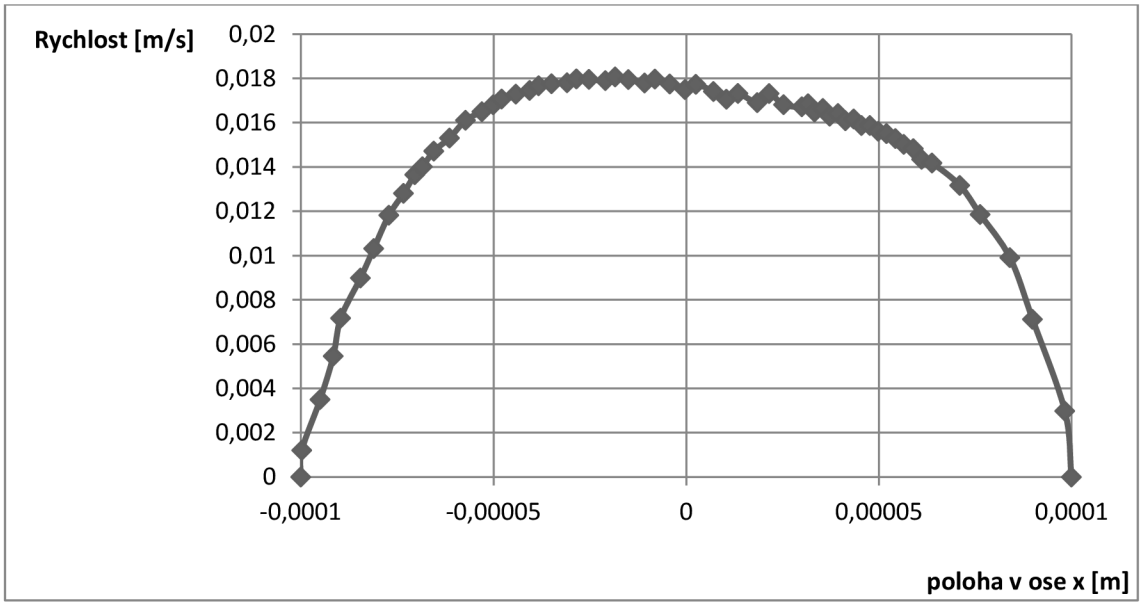
Obr. 7.4.1 *Kontury koncentrace za jednotlivými mísícími segmenty zařízení se střídáním drážek*

Navrhované zařízení dosahuje na jeho konci hodnoty účinnosti η = 92,68 % a tlaková ztráta podél celého mísiče je stanovena na Δp = 578,45 Pa. V obrázku 7.4.2 jsou vykresleny kontury koncentrace na konci zařízení, zde tedy zařízení dosahuje nejvyšší hodnoty účinnosti.

Obr. 7.4.2 *Kontury koncentrace na konci zařízení, zde je viditelné velmi kvalitní promísení v závislosti na tlakové ztrátě podél celého zařízení*

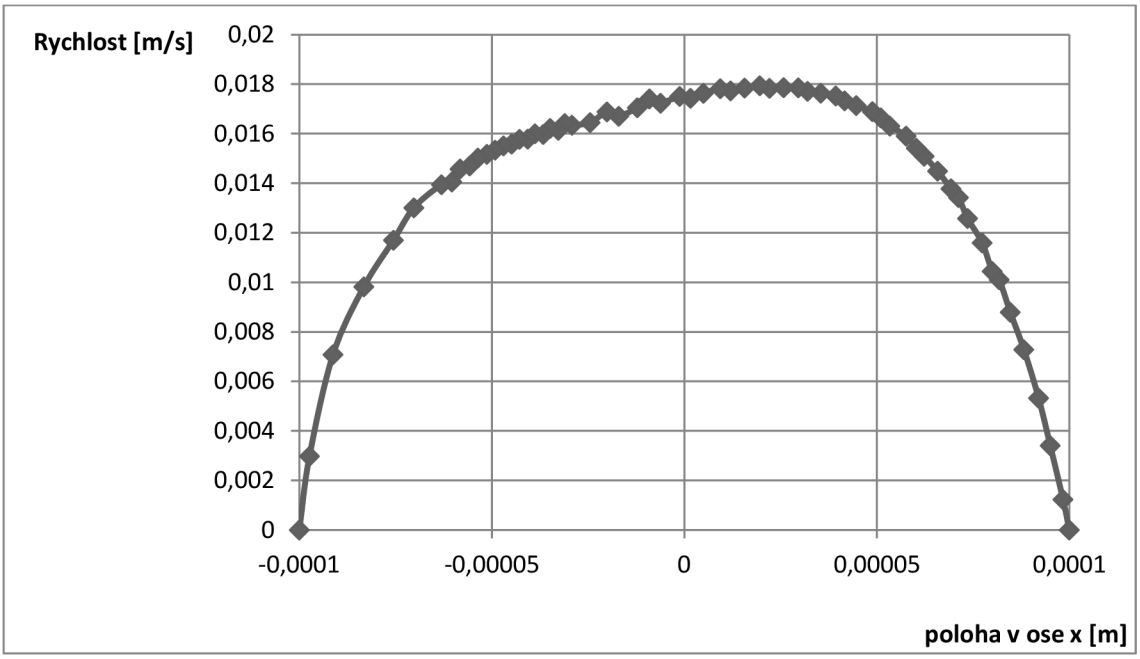
7.4.1 Rychlostní profil

Podobně jako v předchozím případě má rychlostní profil před drážkováním parabolický průběh. Ovlivněním proudu kapaliny v grafu 7.4.1 můžeme vidět deformaci rychlostního profilu. Vlivem drážkování dojde k postupnému přesouvání kapaliny na druhou stranu.



Graf 7.4.1 *Rychlostní profil po prvním segmentu zařízení se střídáním drážek*

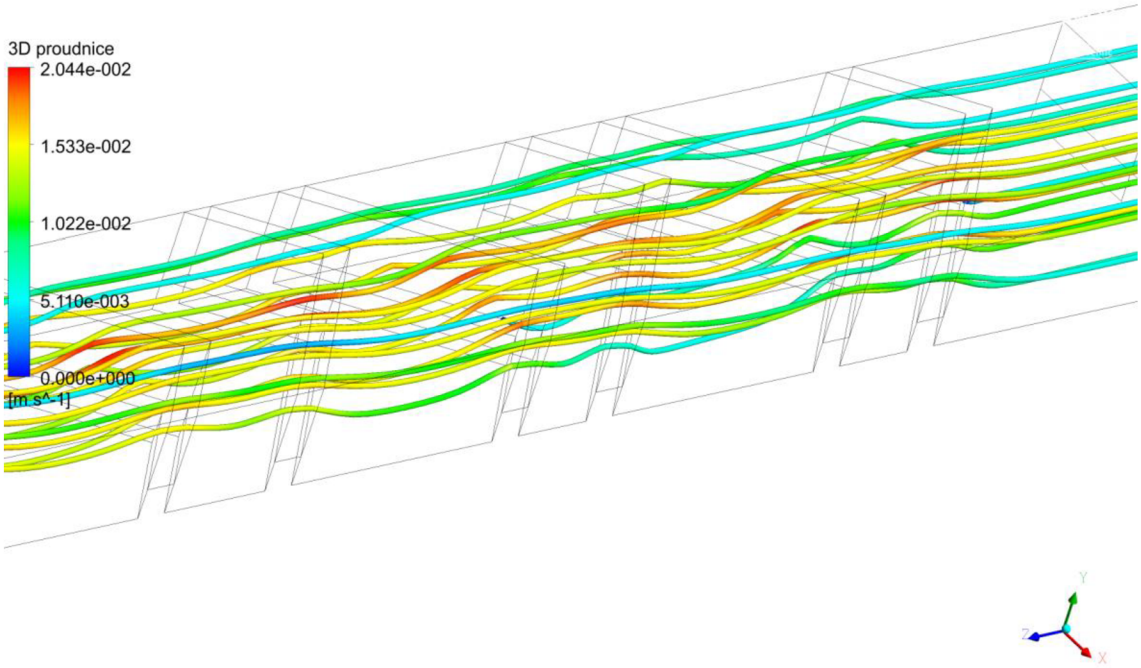
Následně kapaliny přechází přes druhý mísící segment a rychlostní profil se opět otočí. Tento proces se projevuje po celé délce zařízení, což má za následek efektivní promísení pracovních látek.



Graf 7.4.2 *Vykreslený rychlostní profil za druhým mísícím segmentem zařízení využívajícího střídání drážek*

7.4.2 Proudnice

Stejně jako v ostatních případech dochází ke znatelnému ovlivnění laminárního proudění drážkami ve tvaru písmene V zasazenými ve spodní straně zařízení. Vlivem drážkování dojde k vytvoření sekundárních rychlostí. Částice jsou tedy schopny se přenášet napříč proudem, čímž je docíleno samotného mísení.

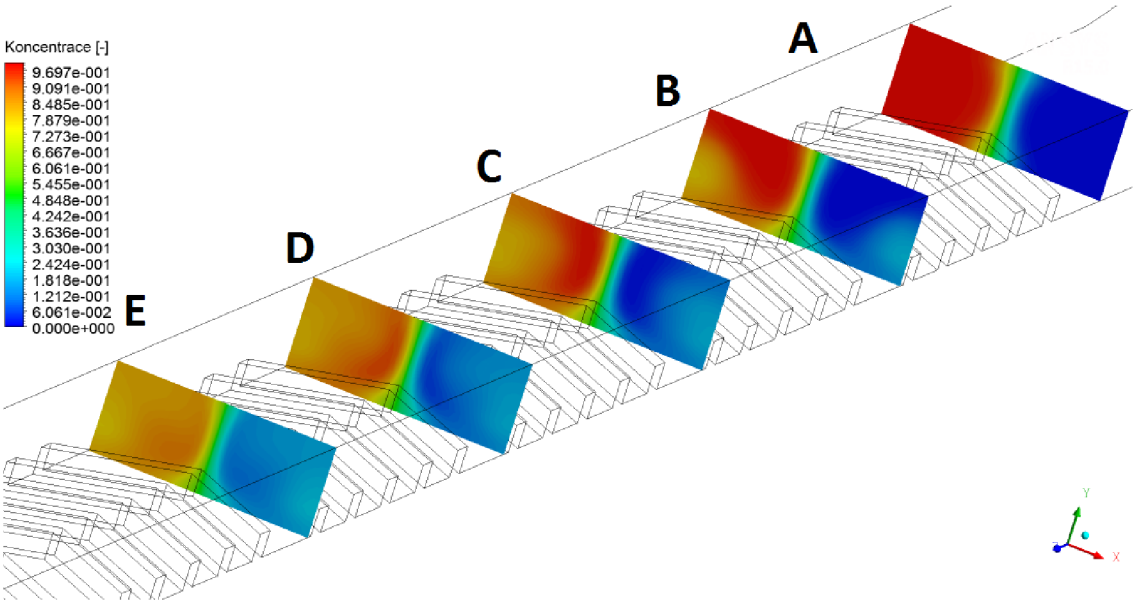


Obr. 7.4.3 *Vykreslené 3D proudnice laminárního proudění ovlivněného drážkováním ve spodní straně zařízení*

7.5 Šípový mísič

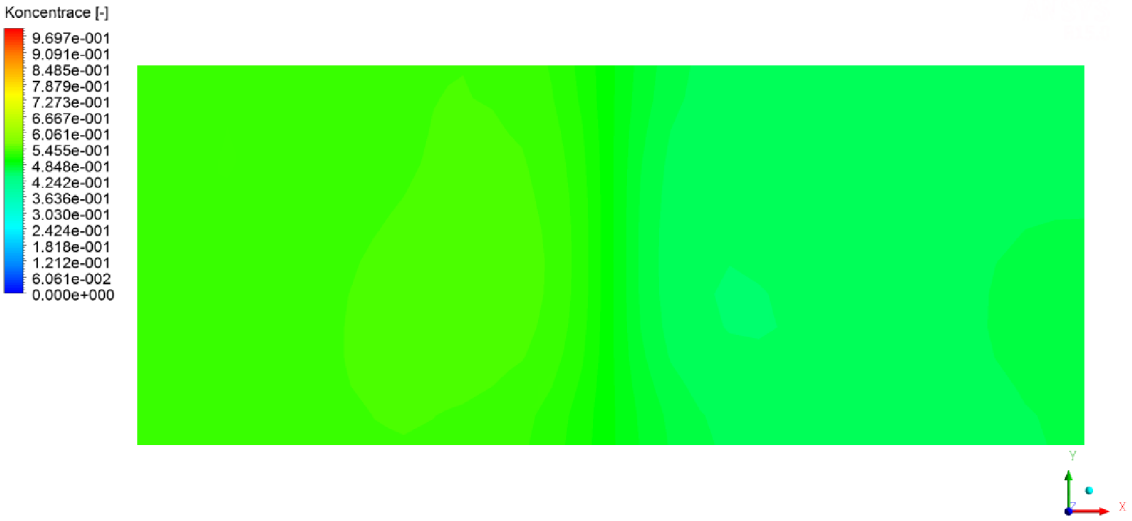
Tento mikromísič byl konstruován tak, aby byly využity drážky ve tvaru písmene V, které jsou symetrické vůči ose zařízení. Jsou umístěny po pěti kusech, což tvoří jeden mísící segment. Konstrukční návrh je shrnut v podkapitole 5.4.5.

Účinnost byla vyhodnocována v rovinách A – E, které byly nadefinovány uživatelem. Před prvním segmentem tak jako v ostatních případech je hodnota účinnosti η_A = 7,06 %, zde je mísení řízeno pouze molekulární difuzí. Za prvním mísícím segmentem účinnost dosahuje η_B = 17,73 %. Zvýšení této účinnosti je způsobeno ovlivněním laminárního proudu drážkováním ve tvaru písmene V. Po průběhu druhým mísícím segmentem zařízení (rovina C) je účinnost mísení stanovena na η_C = 22,87 %. Ze sledování proudění po délce zařízení není vidět tak intenzivní přechod kapalin ze strany na stranu tak jak to bylo u zařízení typu herringbone. Za třetím mísícím celkem je již hodnota účinnosti η_D = 28,64 %. Proud látek dále putuje zařízením a v rovině E je vypočtená účinnost η_E = 35,13 %. V obrázku 7.5.1 jsou vykresleny kontury koncentrace v rovinách A – E na začátku zařízení.



Obr. 7.5.1 *Kontury koncentrace na prvních segmentech šípového mísiče*

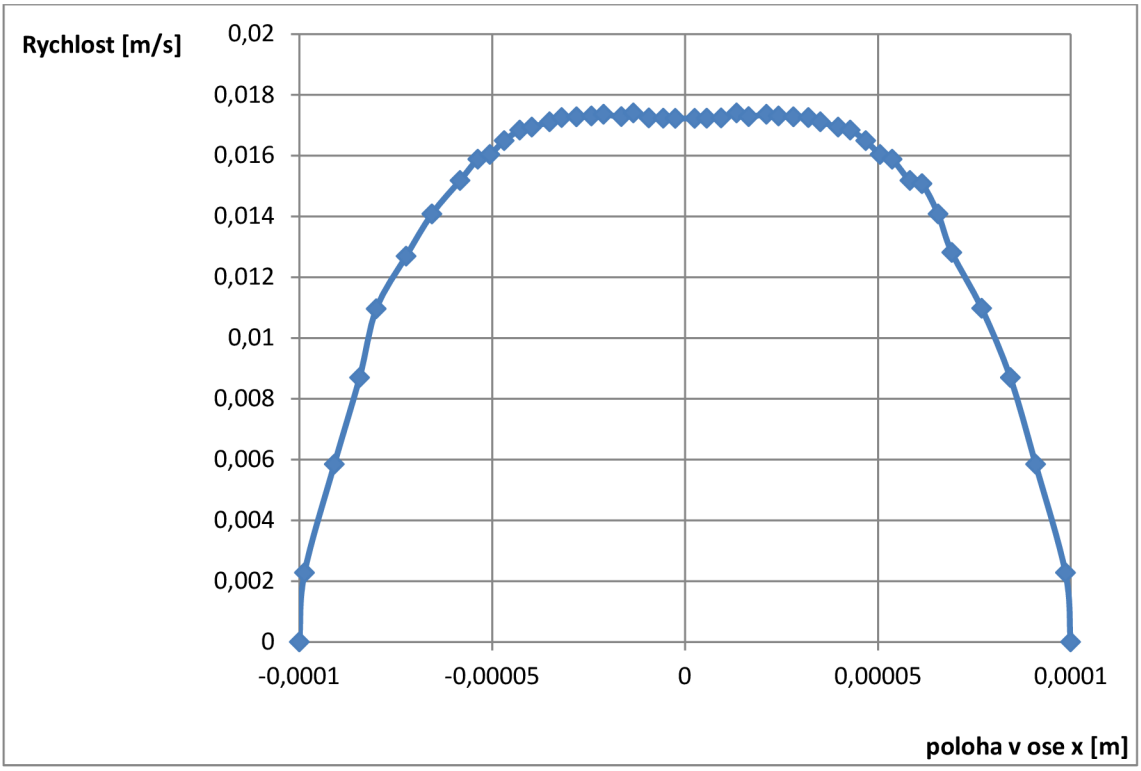
Šípový mísič na konci jeho navrhované délky dosahuje účinnosti η = 92,88 %. Tlaková ztráta na konci mikrokanálku je stanovena na Δp = 685,16 Pa. V obrázku 7.5.2 jsou vykresleny kontury koncentrace na konci zařízení. Zde je vidět, jak kvalitního promísení dosáhneme při využití tohoto zařízení.



Obr. 7.5.2 *Kontury koncentrace na konci šípového mísiče*

7.5.1 Rychlostní profil

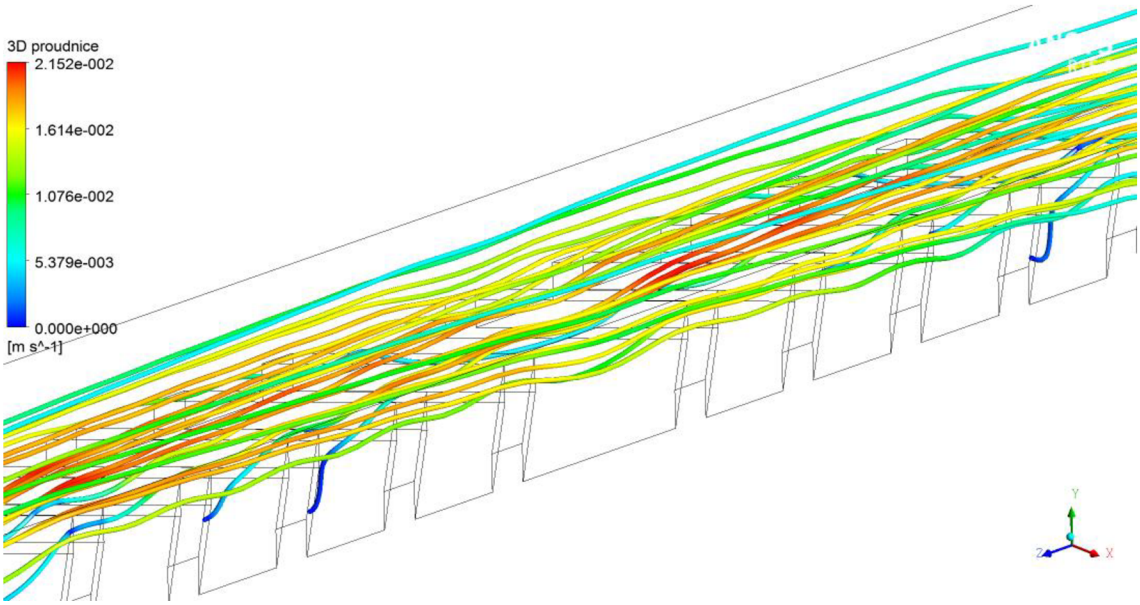
Samotný rychlostní profil před prvními drážkami ve tvaru šípů má parabolický průběh. Po průběhu přes mísící segmenty dojde k mírné deformaci špičky parabolického profilu, viz graf 7.5.1. Rychlostní profil je následně po délce zařízení konstantní.



Graf 7.5.1 *Rychlostní profil za segmenty šípového mísiče*

7.5.2 Proudnice

Vykreslením 3D proudnic na prvních segmentech zařízení je vidět, jak je laminární proud vcházející do mikrokanálku ovlivněn drážkami zasazenými do spodní strany. Z obrázku 7.5.3 je patrné, jak postupně dochází k přesunu částic v příčném směru zařízení, což má za následek výsledné promísení na konci zařízení.

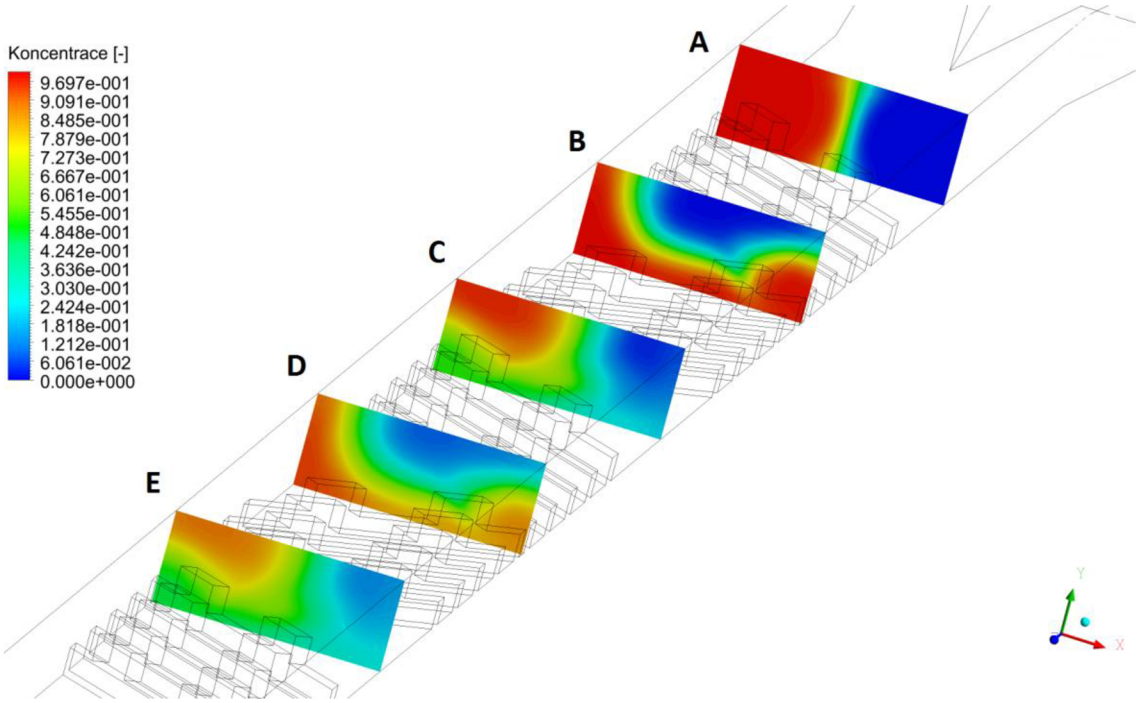


Obr. 7.5.3 *Vykreslené 3D proudnice na prvních segmentech šípového mísiče*

7.6 Zubový mikromisíč

Konstrukce tohoto zařízení vychází z mikromísiče z podkapitoly 7.2. Na každé drážce tohoto zařízení byly vytvořeny dva vyvýšené stupně o h_{R+} = 24 μm, což společně s drážkou tvoří zubové celky o celkové výšce h_c = 48 μm. Návrh samotného zařízení je popsán v podkapitole 5.4.6. Modifikace ve formě vyvýšení dvou zubů po délce drážky má za úkol zvýšit účinnost, která je následně vyhodnocena v závislosti na tlakové ztrátě.

Po délce mikromísiče byly za jednotlivými segmenty nadefinovány roviny A – E. Rovina A se nachází ještě před prvním mísícím segmentem. Zde hodnota účinnosti dosahuje η_A = 6,84 %. Látky přechází přes další segment zařízení do roviny B, kde se hodnota účinnosti pohybuje na η_B = 21,61 %. Zde je již zřetelné, jak je proud látek přesunut na druhou stranu po směru osy x. Dalším přehozením segmentů je docíleno zvýšení účinnosti a v rovině C je tato hodnota stanovena na η_C = 42,52 %. V rovině D je potom hodnota účinnosti η_D = 51,38 % a po čtvrtém segmentu mísení je účinnost stanovena na η_E = 56,93 %. Vykreslené kontury koncentrace v nadefinovaných plochách jsou shrnuty v obrázku 7.6.1.



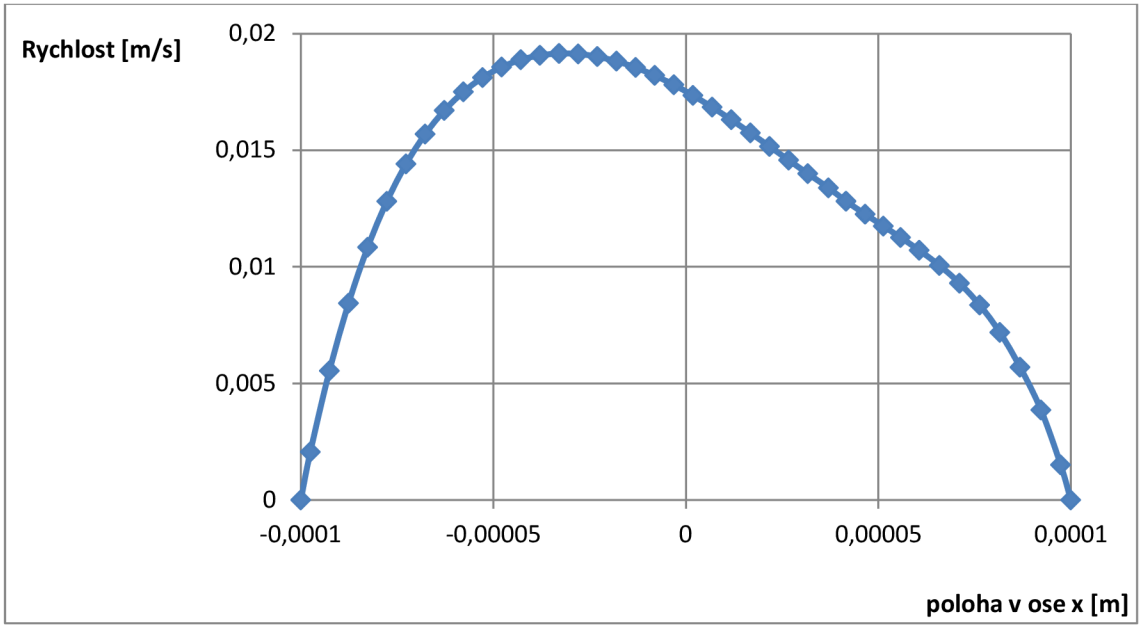
Obr. 7.6.1 *Koncentrace vody v nadefinovaných rovinách A - E*

Zubový mísič má na konci jeho navrhované délky účinnost η = 95,85 %. Tlaková ztráta na konci mikrokanálku je stanovena na Δp = 1 006,99 Pa. V obrázku 7.6.2 jsou vykresleny kontury koncentrace vody na konci zařízení, z kterých lze usoudit, že je dosáhnuto velmi kvalitního stupně promísení. Z pohledu na tlakové ztráty vychází tohle zařízení nejhůře, což je ovlivněno právě vytvořením překážek (zubů), které musí látky překonat.

Obr. 7.6.2 *Vykreslené kontury koncentrace na konci zařízení, z obrázku je patrné kvalitní promísení*

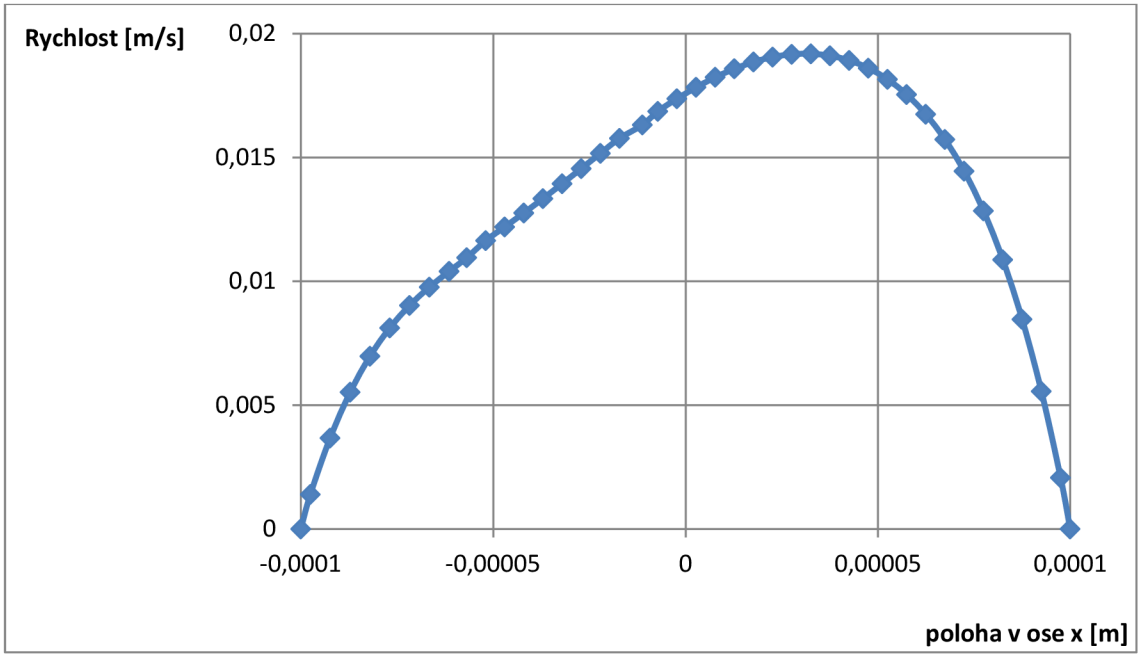
7.6.1 Rychlostní profil

Rychlostní profil před samotným drážkováním má jako v ostatních případech parabolický průběh. Za prvním segmentem mísiče (rovina B) je zřejmý deformovaný tvar rychlostního profilu, který je vykreslen v grafu 7.6.1.



Graf 7.6.1 *Rychlostní profil vykreslený za prvním segmentem (rovina B)*

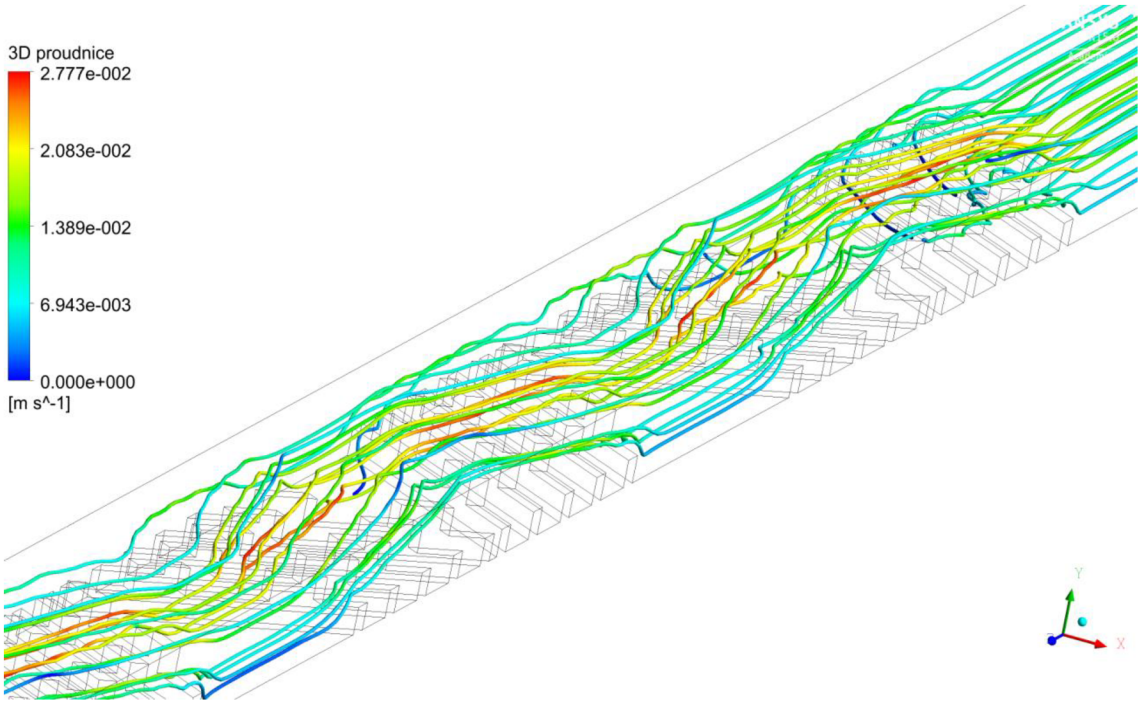
Po průchodu kapalin přes druhý segment zařízení dojde k otočení rychlostního profilu, který byl vykreslen do grafu 7.6.2 v rovině C. Po délce zařízení dochází k neustálému přesouvání tvaru rychlostního profilu za jednotlivými segmenty zařízení.



Graf 7.6.2 *Rychlostní profil vykreslený za druhým segmentem zubového mísiče*

7.6.2 Proudnice

Vykreslením 3D proudnic u tohoto typu zařízení je viditelné zjevné ovlivnění laminárního proudu pracovních látek drážkováním. Z obrázku 7.6.3 je patrné, jak jsou částice unášeny i přímo ve směru jednotlivých drážek. Částice jsou tedy vlivem jednotlivých segmentů neustále přesouvány z jedné strany na druhou.

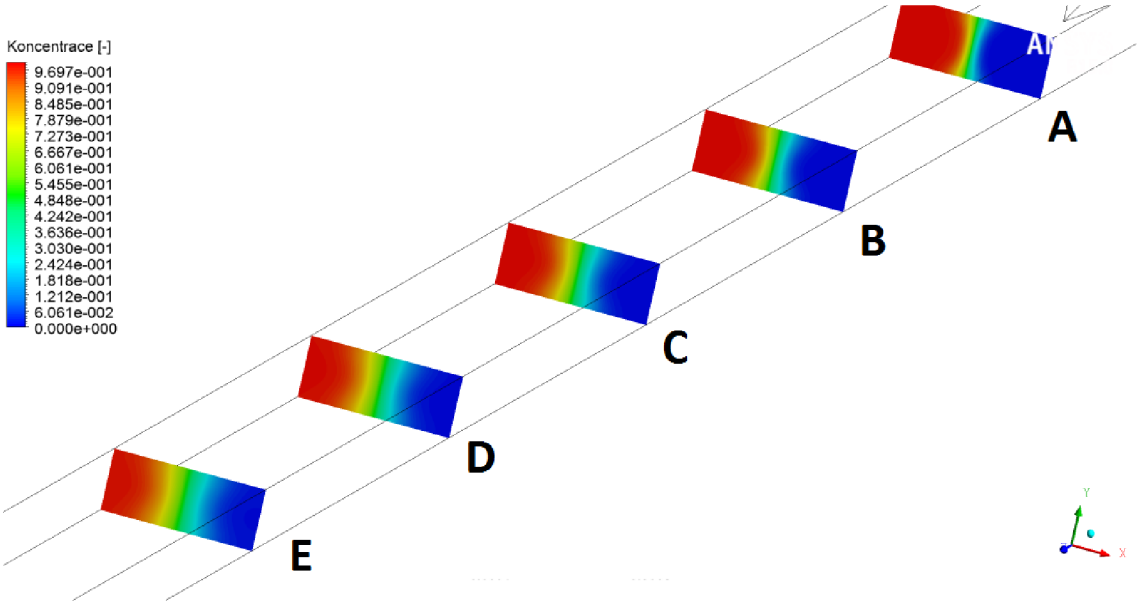


Obr. 7.6.3 *Vykreslené 3D proudnice na prvních segmentech zubového mísiče*

7.7 Mísič ve tvaru písmene Y

Tato jednoduchá konstrukce zařízení využívá pouze přímého mikrokanálku, který je obdélníkového tvaru se zachovanými hlavními rozměry. Tento návrh byl vytvořen, aby bylo zřetelné, jak je důležité při mísení kapalin v mikroměřítku využívání změn geometrie nebo použití drážkování v kanálcích. V tomto jednoduchém mikromísiči je přenos látky řízen pouze molekulární difuzí, která při navrhované délce dosáhne poměrně nízké účinnosti. Výsledná kvalita promísení je nevyhovující pro požadavky téměř všech aplikací využívajících mikromísení.

Na začátku zařízení je účinnost shodná jako ve všech předchozích případech (rovina A), pohybuje se kolem $\eta_A = 7$ %. Roviny B – E byly vytvořeny po délce zařízení s krokem 1 mm. V rovině B je účinnost stanovena na $\eta_B = 11{,}65$ %. Následné promísení v rovině C je vypočteno na hodnotu účinnosti $\eta_C = 18{,}28$ %. V délce 4 mm (rovina D) účinnost dosahuje $\eta_D = 21{,}18$ % a v rovině E je potom účinnost $\eta_E = 24{,}01$ %. Kontury koncentrace v jednotlivých rovinách A – E jsou vykresleny v obrázku 7.7.1.



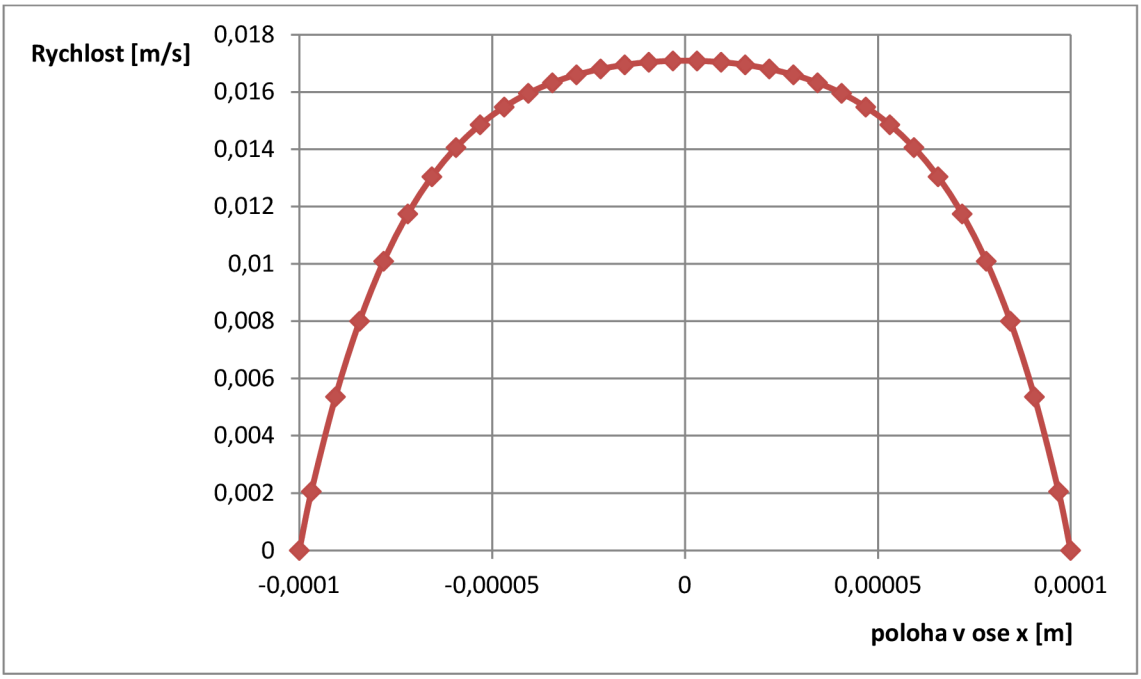
Obr. 7.7.1 *Samovolná difúze na prvních segmentech přímého kanálku*

Celková dosáhnutá účinnost zařízení je η = 46,85 %, tak jak bylo předpokládáno, jelikož samovolná difuze je zde velmi pomalá. Tlaková ztráta podél celého mísiče s přímým kanálkem je stanovena na Δp = 382,5 Pa. V obrázku 7.7.2 je vykreslena koncentrace vody na konci zařízení.

Obr. 7.7.2 *Kontury koncentrace na konci zařízení*

7.7.1 Rychlostní profil

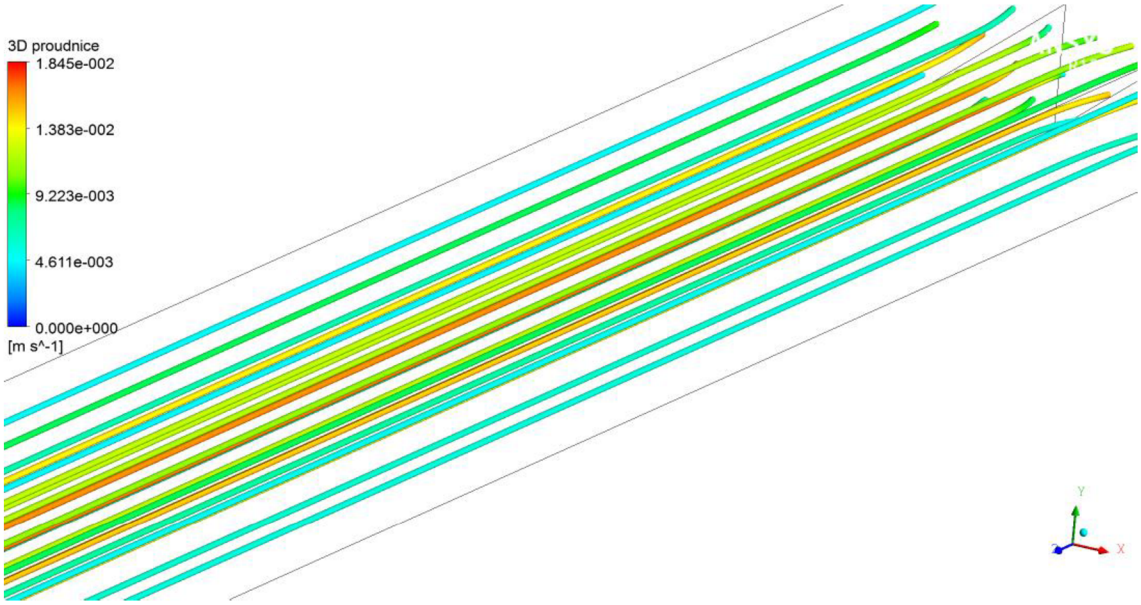
Vykreslení rychlostního profilu po délce zařízení je v každé rovině shodné, jelikož laminární proud není ovlivněn žádnými překážkami a ani jinými modifikacemi mikrokanálku. Výsledný rychlostní profil má tedy parabolický průběh, což lze vidět v grafu 7.7.1.



Graf 7.7.1 *Parabolický průběh rychlostního profilu u přímého kanálku*

7.7.2 Proudnice

Vykreslením 3D proudnic je potvrzen předpoklad, že nedochází k ovlivnění laminárního proudu. Pracovní látky se pohybují tedy pouze ve vrstvách po celé délce zařízení, což je ilustrováno v obrázku 7.7.3.



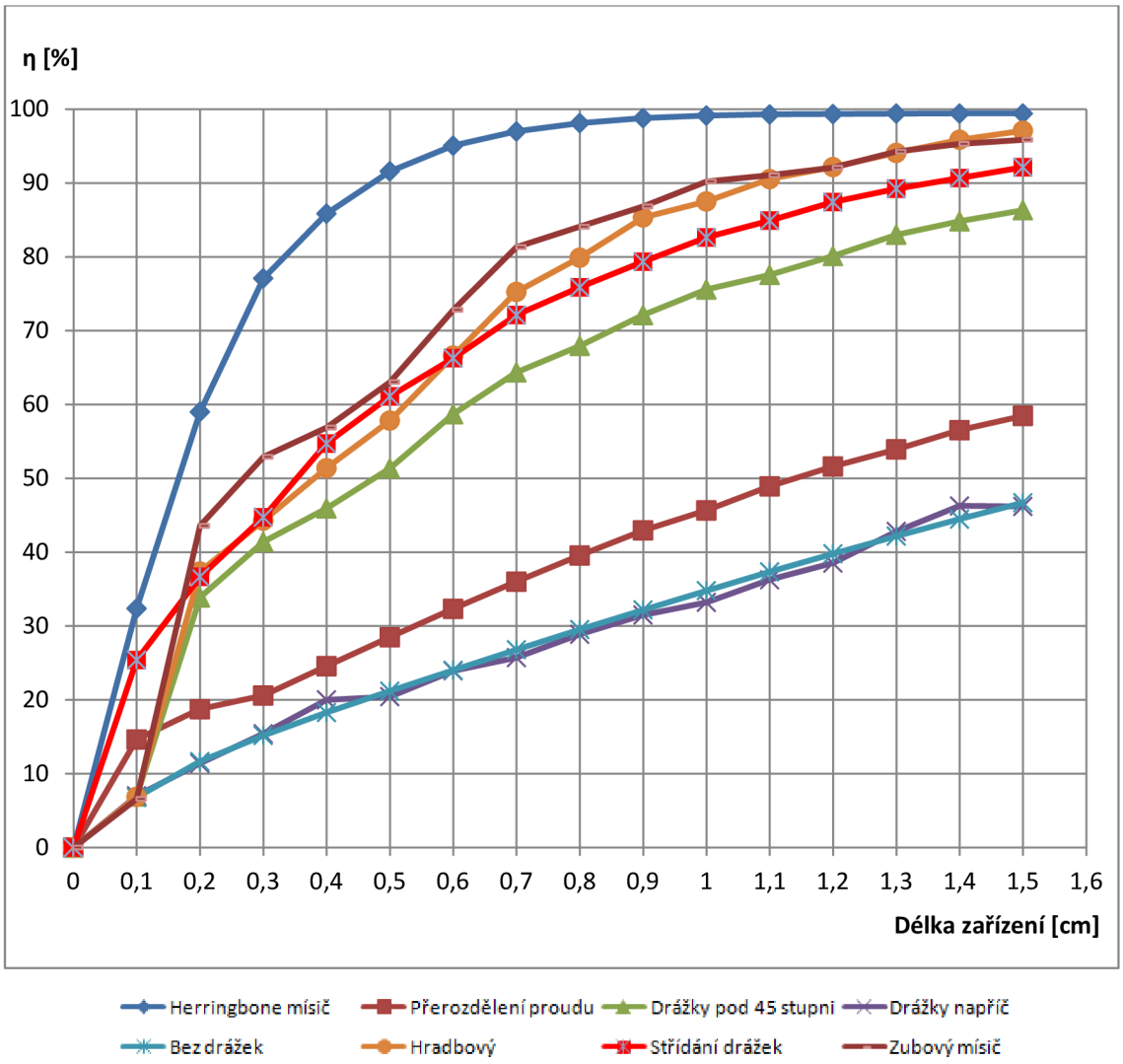
Obr. 7.7.3 *Vykreslené 3D proudnice, kapaliny proudí ve vrstvách*

8. Srovnání výsledků

V této kapitole dojde ke shrnutí výsledků a porovnání jednotlivých účinností všech navrhovaných zařízení a tlakových ztrát po jejich celkové délce.

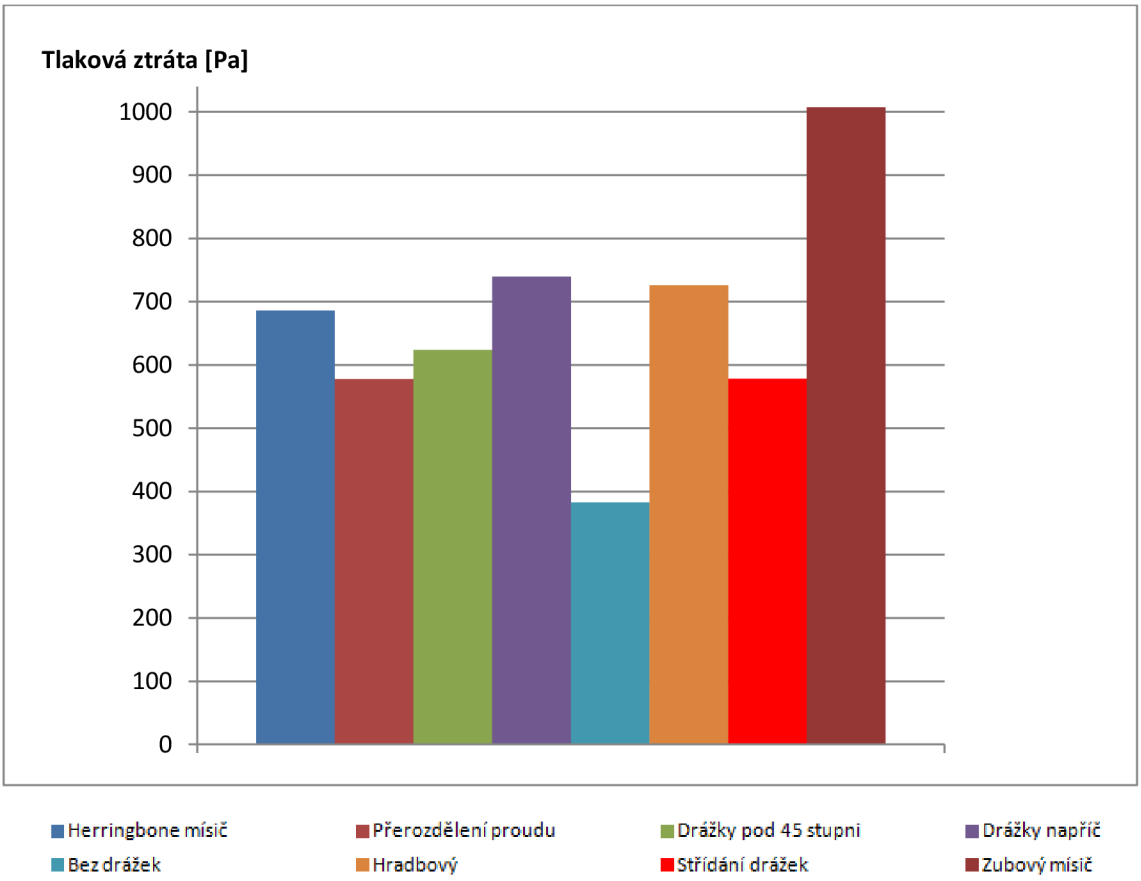
8.1 Účinnost a tlaková ztráta

Srovnání účinností proběhlo v příčných rovinách po délce zařízení, které byly vytvářeny s krokem 1mm. Všechny vypočtené účinnosti byly následně srovnány v grafu 8.1.



Graf 8.1 *Srovnání účinností v závislosti na délce zařízení*

Dalším kritériem pro srovnání všech typů mísičů byla tlaková ztráta. V grafu 8.2 jsou srovnána všechna zařízení z hlediska tlakových ztrát na jejich konci.



Graf 8.2 *Srovnání tlakových ztrát na konci jednotlivých mísičů*

Z vypočtených výsledků účinnosti je patrné, že nejvyšší účinnosti dosahuje mikromísič herringbone. V tomto zařízení dojde k téměř kompletnímu promísení (η = 99,4%). Zařízení na bázi přerozdělení proudu dosahuje účinnosti η = 58,46 % a bude porovnáno s ostatními zařízeními z hlediska účinnosti a tlakových ztrát. Přehledné vyhodnocení účinností a tlakových ztrát je shrnuto v tabulce 8.1.

	η [%]	Δp [Pa]
Herringbone mísič	99,4	683,09
Hradbový mísič	97,08	725,97
Zubový mísič	95,85	1006,99
Šípový mísič	92,88	685,16
Střídání drážek	92,68	757,45
Drážky pod 45°	86,58	624,06
Přerozdělení proudu	58,46	577,88
Drážky napříč	47,09	739,65
Bez drážek	46,85	382,5

Tab. 8.1 *Zhodnocení účinností a tlakových ztrát pro jednotlivá zařízení*

Při uvažování účinnosti mísení na minimálně 90%, což značí velmi kvalitní promísení, jsou vyhovující pouze případy se střídáním drážek, šípový, zubový a hradbový mísič. Zařízení s proměnlivou výškou drážek (hradbový mísič) dosahuje

ze zkoumaných návrhů nejvyšší účinnosti a to η = 97,08 %. Vysoké účinnosti dosahuje i tzv. zubový mísič. U tohoto zařízení je hodnota účinnosti stanovena na hodnotu η = 95,85 %. Šípový mikromísič dosahuje celkové účinnosti po délce zařízení η = 92,88 % a zařízení se střídáním drážek dosahuje η = 92,68 %.

Z hlediska tlakových ztrát dosahuje herringbone mísič na konci hodnoty Δp = 683,03 Pa. Zařízení na bázi přerozdělení proudu dosahuje na konci zařízení tlakové ztráty Δp = 577,88 Pa. Optimalizované mísiče s hodnotou účinnosti přesahující 90 % mají na svých koncích stanoveny tlakové ztráty na Δp = 757,45 Pa pro zařízení se střídáním drážek, Δp = 725,97 Pa pro hradbový mísič, Δp = 1006,99 Pa pro zubový mísič a Δp = 685,16 Pa pro šípový mísič. Při uvažování účinnosti vyšší jak 90 % a při minimální hydraulické ztrátě z mísičů splňujících tuto podmínku je nejvhodnějším optimalizovaným zařízením šípový mísič.

9. Závěr

V předkládané diplomové práci bylo studováno mísení kapalin v zařízeních s mikrorozměry. Cílem diplomové práce je návrh a optimalizace pasivního směšovače herringbone tak, aby bylo dosaženo maximálního promísení při minimální hydraulické ztrátě. Tyto výsledky jsou následně porovnány se směšovacím zařízením na bázi přerozdělení proudu.

V první části diplomové práce byla popsána teorie proudění v mikroměřítku, kde se pohybujeme pouze v laminární oblasti proudění. Z tohoto důvodu je nutná tvorba mísících zařízení, jelikož se na mísení kapalin nepodílí turbulentní víry ale pouze molekulární difuzivita. Další kapitola rešeršní části pojednává o typech mikromísičů, které se dělí na aktivní a pasivní. Zde jsou rozebrány jednotlivé principy těchto zařízení. V poslední části rešerše je popsána hlavní oblast využití mikromísičů a to na poli chemie a biochemie, kde značně roste úspora potřebných pracovních látek pro jejich analýzu.

Ve výpočtové částí práce je proveden návrh jednotlivých zařízení, které jsou na konci práce porovnány s mísičem na bázi přerozdělení proudu a se zařízením herringbone. Jako první je zpracován právě pasivní mísič herringbone. Toto zařízení je velmi efektivním řešením pro mísení kapalin v mikroměřítku. Ve spodní straně kanálku má aplikovány asymetrické drážky ve tvaru písmene V, které jsou následně otočeny. Těmito drážkami je docíleno tvorby dvou protiběžných vírů a otočením segmentů mísiče je docíleno přesunu pracovních látek ze strany na stranu. Přehazování látek je způsobeno vytvořeným tlakovým gradientem v samotných drážkách a tento gradient „žene“ látky ze strany na stranu po jednotlivých segmentech. Tímto způsobem je docíleno velmi vysokého stupně promísení.

V další části výpočtového modelování je proveden návrh a výpočet mísiče na bázi přerozdělení proudu. Z výsledků účinnosti a rozložení koncentrace látek v příčném průřezu na konci zařízení je patrné, že nedochází k tak kvalitnímu a intenzivnímu promísení. Již z těchto výpočtů bylo usouzeno, že tvorba drážek ve spodní stěně kanálku má přímý vliv na výslednou účinnost zařízení.

Předposlední část práce popisuje návrh zařízení, která využívají různých modifikací drážkování ve spodní stěně mísiče, a přímý kanálek. Výpočet přímým kanálkem byl proveden, aby bylo patrné, jak pomalé je mísení kapalin závislé pouze na molekulární difuzivitě. První návrh spočíval v přímých drážkách, které byly kolmé na stěnu kanálku. Tento navržený typ mísiče vyšel z hlediska účinnosti nejhůře, jelikož prakticky nedošlo k ovlivnění vrstev proudu. Tento výsledek nastínil, že je nutno využít drážek, které nebudou přímo kolmé na stěnu zařízení. Dalším navrhovaným zařízení byl mísič, který měl drážky svírající s mikrokanálkem úhel 45°. Tento mísič byl konkurence - schopný z hlediska účinnosti mísiči herringbone, jelikož došlo k přehazování látek ze strany na stranu za jednotlivými segmenty. Z návrhu tohoto mísiče poté vyšel hradbový mísič, který využívá proměnnou výšku každé drážky. Tato modifikace se ukázala jako dobré řešení pro zvýšení účinnosti. Dalším zařízením vycházející ze zařízení s drážkami pod 45° byl zubový mísič, který měl po délce drážky vytvořené dva zuby. Tyto vytvořené zuby se ovšem při zvýšení účinnosti podepsaly na tlakové ztrátě mísiče. Při konstrukci a návrhu dalšího typu mísiče bylo využito asymetrických V drážek zařízení herringbone, které nebyly střídány po segmentech, ale přímo v jednotlivých

segmentech. Posledním navrženým typem zařízení byl šípový mísič, který měl symetrické drážky ve tvaru písmene V po délce zařízení.

Při vyhodnocování účinnosti optimalizovaných zařízení bylo zjištěno, že ani jeden mikromísič není schopen konkurovat zařízení herringbone. Použitím zařízení typu herringbone docílíme takřka ideálního promísení. Všechna navržená zařízení měla stejnou délku, což se následně podepsalo na výsledných tlakových ztrátách. Tlakové ztráty byly ovlivněny ať již zvýšením či snížením počtu drážek, mezi kterými byla dodržována konstantní perioda u všech typů. Z výsledků účinnosti byla stanovena minimální hranice účinnosti promísení na 90 %, kdy tato hodnota již značí velmi kvalitní promísení. Ve výsledku byla vybrána čtyři zařízení a při porovnání tlakových ztrát byl vybrán šípový mísič, který měl tuto ztrátu nejnižší. Tento mísič byl následně ještě porovnán s mísičem na bázi přerozdělení proudu, který ovšem pro tuto hodnotu Reynoldsova čísla není vhodnou volbou.

Při zkoumání a návrhu pasivních mísičů na mísení kapalin v mikroměřítku by bylo možno docílit většího stupně promísení možným využitím drážkování v bocích a na horní stěně mikrokanálku. Další oblastí ke zlepšení výsledků daných výpočtovým modelováním by bylo možné zhodnocení platnosti podmínky ulpívání v těchto zařízeních.

10. Použitá literatura

[1] TESAŘ, V. Mikrofluidika. *Automa,* 2008, 6-9

[2] SMEJKAL, P., FORET, F. Microfluidics in Bioanalytical Instrumentation. *Chemické listy,* 2012, *106*, 104-112.

[3] ŠOB, František. *Hydromechanika*. Brno: Akademické nakladatelství CERM s.r.o, 2002. ISBN 8021420375.

[4] KARNIADAKIS, George, Ali BEŞKÖK a Narayana Rao ALURU. *Microflows and nanoflows: fundamentals and simulation*. New York: Springer, 2005, xxi, 817 s. Interdisciplinary applied mathematics. ISBN 03-872-2197-2.

[5] CAPRETTO, Lorenzo, Wei CHENG, Martyn HILL a Xunli ZHANG. Micromixing Within Microfluidic Devices. [online]. s. 27 [cit. 2014-03-08]. DOI: 10.1007/128_2011_150. Dostupné z: http://link.springer.com/10.1007/128_2011_150

[6] SUH, Yong Kweon a Sangmo KANG. A Review on Mixing in Microfluidics. *Micromachines* [online]. 2010, vol. 1, issue 3, s. 82-111 [cit. 2014-03-14]. DOI: 10.3390/mi1030082. Dostupné z: http://www.mdpi.com/2072-666X/1/3/82/

[7] LEE, Chia-Yen, Chin-Lung CHANG, Yao-Nan WANG a Lung-Ming FU. Microfluidic Mixing: A Review. *International Journal of Molecular Sciences* [online]. 2011, vol. 12, issue 12, s. 3263-3287 [cit. 2014-03-14]. DOI: 10.3390/ijms12053263. Dostupné z: http://www.mdpi.com/1422-0067/12/5/3263/

[8] *Springer handbook of nanotechnology*. Berlin: Springer-Verlag, 2004, 1222 s. ISBN 35-400-1218-4.

[9] JEONG, Gi Seok, Seok CHUNG, Chang-Beom KIM a Sang-Hoon LEE. Applications of micromixing technology. *The Analyst* [online]. 2010, **135**(3), 460- [cit. 2016-02-20]. DOI: 10.1039/b921430e. ISSN 0003-2654. Dostupné z: http://xlink.rsc.org/?DOI=b921430e

[10] STÅHL, Marie, Bengt L. ÅSLUND a Åke C. RASMUSON. Reaction crystallization kinetics of benzoic acid. *AIChE Journal*. 2001, **47**(7), 1544-1560. DOI: 10.1002/aic.690470708. ISSN 00011541. Dostupné také z: http://doi.wiley.com/10.1002/aic.690470708

[11] HASELHUHN, F. a M. KIND. Pseudo-polymorphic Behavior of Precipitated Calcium Oxalate. *Chemical Engineering & Technology* [online]. Weinheim: WILEY-VCH Verlag, 2003, **26**(3), 347-353 [cit. 2016-02-22]. DOI: 10.1002/ceat.200390053. ISSN 09307516. Dostupné z: http://doi.wiley.com /doi/10.1002/ceat.200390053/

[12] SCHWARZER, Hans-Christoph, Florian SCHWERTFIRM, Michael MANHART, Hans-Joachim SCHMID a Wolfgang PEUKERT. Predictive simulation of nanoparticle precipitation based on the population balance equation. *Chemical Engineering Science* [online]. 2006, **61**(1), 167-181 [cit. 2016-02-22]. DOI:

10.1016/j.ces.2004.11.064. ISSN 00092509. Dostupné z: http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0009250905004513

[13] YUN, Kwang-Seok a Euisik YOON. Microfluidic components and bio-reactors for miniaturized bio-chip applications. *Biotechnology and Bioprocess Engineering* [online]. 2004, **9**(2), 86-92 [cit. 2016-02-22]. DOI: 10.1007/BF02932989. ISSN 1226-8372. Dostupné z: http://link.springer.com/10.1007/BF02932989

[14] TROJER, Markus Andersson, Helena ANDERSSON, Ye LI, Jonatan BORG, Krister HOLMBERG, Magnus NYDÉN a Lars NORDSTIERNA. Charged microcapsules for controlled release of hydrophobic actives. Part III: the effect of polyelectrolyte brush- and multilayers on sustained release. *Physical Chemistry Chemical Physics* [online]. 2013, **15**(17), 6456- [cit. 2016-02-22]. DOI: 10.1039/c3cp50417d. ISSN 1463-9076. Dostupné z: http://xlink.rsc.org/?DOI=c3cp50417d

[15] IWASAKI, Takeshi a Jun-ichi YOSHIDA. Free Radical Polymerization in Microreactors. Significant Improvement in Molecular Weight Distribution Control. *Macromolecules* [online]. 2005, **38**(4), 1159-1163 [cit. 2016-02-22]. DOI: 10.1021/ma048369m. ISSN 0024-9297. Dostupné z: http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/ma048369m

[16] ROSENFELD, Carine, Christophe SERRA, Cyril BROCHON a Georges HADZIIOANNOU. High-temperature nitroxide-mediated radical polymerization in a continuous microtube reactor: Towards a better control of the polymerization reaction. *Chemical Engineering Science* [online]. 2007, **62**(18-20), 5245-5250 [cit. 2016-02-22]. DOI: 10.1016/j.ces.2006.12.074. ISSN 00092509. Dostupné z: http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0009250907000474

[17] EHRFELD, Wolfgang, Klaus GOLBIG, Volker HESSEL, Holger LÖWE a Thomas RICHTER. Characterization of Mixing in Micromixers by a Test Reaction: Single Mixing Units and Mixer Arrays. *Industrial* [online]. 1999, **38**(3), 1075-1082 [cit. 2016-02-22]. DOI: 10.1021/ie980128d. ISSN 0888-5885. Dostupné z: http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/ie980128d

[18] HESSEL, Volker, C. HOFMANN, P. LÖB, J. LÖHNDORF, H. LÖWE a A. ZIOGAS. Aqueous Kolbe–Schmitt Synthesis Using Resorcinol in a Microreactor Laboratory Rig under High-p,T Conditions. *Organic Process Research* [online]. 2005, **9**(4), 479-489 [cit. 2016-02-22]. DOI: 10.1021/op050045q. ISSN 1083-6160. Dostupné z: http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/op050045q

[19] HADD, Andrew G., Daniel E. RAYMOND, John W. HALLIWELL, Stephen C. JACOBSON a J. Michael RAMSEY. Microchip Device for Performing Enzyme Assays. *Analytical Chemistry* [online]. 1997, **69**(17), 3407-3412 [cit. 2016-02-22]. DOI: 10.1021/ac970192p. ISSN 0003-2700. Dostupné z: http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/ac970192p

[20] BURKE, Brian J. a Fred E. REGNIER. Stopped-Flow Enzyme Assays on a Chip Using a Microfabricated Mixer. *Analytical Chemistry* [online]. 2003, **75**(8), 1786-1791 [cit. 2016-02-22]. DOI: 10.1021/ac026173j. ISSN 0003-2700. Dostupné z: http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/ac026173j

[21] SUZUKI, H., C.-M. HO a N. KASAGI. A Chaotic Mixer for Magnetic Bead-Based Micro Cell Sorter. *Journal of Microelectromechanical Systems* [online]. 2004, **13**(5), 779-790 [cit. 2016-02-22]. DOI: 10.1109/JMEMS.2004.835775. ISSN 1057-7157. Dostupné z: http://ieeexplore.ieee.org/lpdocs/epic03/wrapper.htm?arnumber=1341453

[22] TAN, Wei-Heong, Yuji SUZUKI, Nobuhide KASAGI, Naoki SHIKAZONO, Katsuko FURUKAWA a Takashi USHIDA. A Lamination Micro Mixer for .MU.-Immunomagnetic Cell Sorter. *JSME International Journal Series C* [online]. 2005, **48**(4), 425-435 [cit. 2016-02-22]. DOI: 10.1299/jsmec.48.425. ISSN 1344-7653. Dostupné z: http://joi.jlc.jst.go.jp/JST.JSTAGE/jsmec/48.425?from=CrossRef

[23] BAO, Ning, Thuc T. LE, Ji-Xin CHENG a Chang LU. Microfluidic electroporation of tumor and blood cells: observation of nucleus expansion and implications on selective analysis and purging of circulating tumor cells. *Integrative Biology* [online]. 2010, **2**(2-3), 113- [cit. 2016-02-22]. DOI: 10.1039/b919820b. ISSN 1757-9694. Dostupné z: http://xlink.rsc.org/?DOI=b919820b

[24] LEE, Nae Yoon, Masumi YAMADA a Minoru SEKI. Development of a passive micromixer based on repeated fluid twisting and flattening, and its application to DNA purification. *Analytical and Bioanalytical Chemistry* [online]. 2005, **383**(5), 776-782 [cit. 2016-02-22]. DOI: 10.1007/s00216-005-0073-y. ISSN 1618-2642. Dostupné z: http://link.springer.com/10.1007/s00216-005-0073-y

[25] KAKUTA, Masaya, Dimuthu A. JAYAWICKRAMA, Andrew M. WOLTERS, Andreas MANZ a Jonathan V. SWEEDLER. Micromixer-Based Time-Resolved NMR: Applications to Ubiquitin Protein Conformation. *Analytical Chemistry* [online]. 2003, **75**(4), 956-960 [cit. 2016-02-22]. DOI: 10.1021/ac026076q. ISSN 0003-2700. Dostupné z: http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/ac026076q

[26] SHAO, Huilin, Tae-Jong YOON, Monty LIONG, Ralph WEISSLEDER a Hakho LEE. Magnetic nanoparticles for biomedical NMR-based diagnostics. *Beilstein Journal of Nanotechnology* [online]. 2010, **1**, 142-154 [cit. 2016-02-22]. DOI: 10.3762/bjnano.1.17. ISSN 2190-4286. Dostupné z: http://www.beilstein-journals.org/bjnano/content/1/1/17

[27] KEOSCHKERJAN, R, M RICHTER, D BOSKOVIC, F SCHNÜRER a S LÖBBECKE. Novel multifunctional microreaction unit for chemical engineering. *Chemical Engineering Journal* [online]. 2004, **101**(1-3), 469-475 [cit. 2016-02-22]. DOI: 10.1016/j.cej.2004.01.012. ISSN 13858947. Dostupné z: http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S1385894704000385

[28] LEE, Sangyeop, Junghyun CHOI, Lingxin CHEN, et al. Fast and sensitive trace analysis of malachite green using a surface-enhanced Raman microfluidic sensor. *Analytica Chimica Acta* [online]. 2007, **590**(2), 139-144 [cit. 2016-02-22]. DOI: 10.1016/j.aca.2007.03.049. ISSN 00032670. Dostupné z: http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0003267007006009

[29] *Integrated Microfluidic Mixer and Magnetic Bead Separator* [online]. Denmark, 2005 [cit. 2016-04-06]. Dostupné z: http://web-files.ait.dtu.dk/bruus/TMF/publications/MSc/MScTLO.pdf. M. Sc. E. Thesis. Department of Micro and Nanotechnology Technical University of Denmark.

[30] HOSSAIN, Shakhawat, Afzal HUSAIN a Kwang-Yong KIM. *Optimization of Micromixer with Staggered Herringbone Grooves on Top and Bottom Walls* [online]. [cit. 2016-05-16]. DOI: 10.1080/19942060.2011.11015390. ISBN 10.1080/19942060.2011.11015390. Dostupné z: http://www.tandfonline.com/doi/abs/10.1080/19942060.2011.11015390

11. Seznam použitých zkratek a symbolů

Seznam zkratek:

CFD	výpočtové modelování proudění (Computational Fluid Dynamics)
DNA	deoxyribonukleová kyselina (Deoxyribonucleic Acid)
EWOD	elektrosmáčení na dielektrika (Electrowetting on Dielectric)
FT – IR	infračervená spektroskopie (Fourier Transform Infrared Spectroscopy)
LOC	laboratoř na jednom čipu (Lab on a Chip)
MHD	magnetohydrodynamický mísič (Magnetohydrodynamic micromixer)
NMR	spektroskopie nukleární magnetické resonance (Nuclear magnetic resonance spectroscopy)
PCR	polymerázová řetězová reakce (Polymerase Chain Reaction)
SAR	přerozdělení proudu (Split and Recombine)
SHM	mikromísič herringbone (Staggered Herringbone Mixer)
µTAS	kompletní analýza vzorků (Micro Total Analysis Systems)

Seznam symbolů:

a_s	poměr šířky malé a velké drážky	[-]
c_i	poměrná i-tá koncentrace vody v ploše	[-]
c_{th}	poměrná teoretická koncentrace vody v ploše	[-]
D	charakteristický rozměr	[m]
D	koeficient difúze	[$m^2.s^{-1}$]
f	frekvence vytváření vírů	[Hz]
$\overrightarrow{F_m}$	silové působení vnějších hmotnostních sil	[N]
$\overrightarrow{F_p}$	silové působení tlakových sil	[N]
$\overrightarrow{F_t}$	silové působení třecích sil	[N]
$\overrightarrow{F_s}$	silové působení sil setrvačných	[N]
h	výška mikrokanálku	[µm]

h_R	výška drážky	[μm]
L	charakteristická délka mikrokanálku	[μm]
L_C	celková délka zařízení	[mm]
m	mezera mezi segmenty	[μm]
N	počet buněk příčného průřezu	[-]
Pe	Pécletovo číslo	[-]
p_R	perioda drážkování	[μm]
Q_C	celkový průtok zařízením	[$\mu l.min^{-1}$]
Re	Reynoldsovo číslo	[-]
St	Strouhalovo číslo	[-]
u, v	rychlost proudění	[$m.s^{-1}$]
w	šířka mikrokanálku	[μm]
w_L	šířka velkého drážkování	[μm]
w_R	šířka drážky	[μm]
w_S	šířka malého drážkování	[μm]
Δp	rozdíl statického tlaku	[Pa]
η	účinnost	[%]
θ	úhel mezi drážkami a stěnou kanálku	[°]
ν	kinematická viskozita	[$m^2.s^{-1}$]

12. Seznam příloh

1. CD – ROM, kde je umístěna diplomová práce ve formátu pdf a soubory s vyhodnocením