



## مطالعه عددی عملکردهای مختلف پدیده الکترووتینگ با روش لتیس بولتزمن و آنالیز خطای این روش

حبیب امین فر<sup>۱</sup>

دانشیار

موسی محمدپور فرد<sup>۲</sup>

دانشجوی دکترا

امروزه پدیده الکترووتینگ در کاربردهای پیشرفته‌ای در زمینه سیستم‌های میکرو و نانو الکترومکانیکال مطرح شده است. در این پدیده، برهمکنش بین میدان الکتریکی و بارهای سطحی باعث ایجاد نیروهای الکتریکی می‌شوند که سبب تغییر خاصیت ترکنندگی سطح می‌شوند. در کار حاضر ضمن بررسی عبارت خطای منته‌جه از بازیابی معادلات ناویر-استوکس از معادله لتیس بولتزمن برای مدل انرژی آزاد، با استفاده از مدلی که اخیراً توسط نویسندگان توسعه داده شده است، تمامی عملکردهای مطرح در پدیده الکترووتینگ (یعنی پخش، حرکت، تقسیم و ترکیب دو قطره) به شکل سه بعدی آن شبیه‌سازی شده‌اند. نتایج بدست آمده دارای تطابق خوبی با نتایج تحلیلی و تجربی موجود در ادبیات فن می‌باشند.

واژه‌های راهنما: الکترووتینگ، لتیس بولتزمن، مدل انرژی آزاد، میکرو قطره، ترکیب قطرات

### ۱- مقدمه

یکی از دلایل مهم توجه مجدد به موضوع ترشدن در چند سال گذشته مرتبط شدن آن به کاربردهای میکروسیالی می‌باشد. عبارت میکروسیال به دسته‌ای از تکنولوژی‌ها که برای کار بر روی حجم‌های خیلی کوچک از سیال (با حجم میکرو تا نانو) توسعه یافته‌اند، اطلاق می‌گردد. یکی از جنبه‌های مهمی که در مقیاس‌های طولی میکرو مطرح است، این نکته است که جریان در میکروسیال دارای عدد رینولدز<sup>۳</sup> پایینی می‌باشد.

وقتی یک سطح مشترک بین دو ماده ناهمسان ایجاد می‌شود، یک انرژی خاصی که متناسب با تعداد مولکول‌های حاضر در سطح مشترک است بوجود می‌آید. این انرژی، انرژی بین سطحی یا تنش سطحی نامیده می‌شود. با توجه به این نکته که در پدیده‌های ترشدن بطور مشخص یک مایع، یک جامد و یک محیط گازی وجود دارد، پس سه نوع تنش سطحی وجود خواهد داشت: مایع-گاز، جامد و مایع-جامد. هنگامیکه قطرات با یک سطح جامد تماس داشته باشند، سطح مشترک مایع-گاز بصورت یک کلاهک

<sup>۱</sup> دانشیار، دانشکده مهندسی مکانیک، دانشگاه تبریز

<sup>۲</sup> نویسنده مسئول، دانشجوی دکترا، دانشکده مهندسی مکانیک، دانشگاه تبریز، [Mohammadpour@azaruniv.edu](mailto:Mohammadpour@azaruniv.edu)

<sup>۳</sup> Reynolds number

کروی<sup>۱</sup> حفظ می‌شود که در انتهای آن قطره مایع با یک زاویه‌ی به سطح جامد متصل می‌گردد. این زاویه، زاویه تماس یا زاویه یانگ<sup>۲</sup> نامیده می‌شود. اگر در سطحی که قطره بر روی آن واقع شده است، یک الکترو د جاسازی شود، با اعمال پتانسیل الکتریکی (درست در نزدیکی سطح جامد) لایه مضاعف الکتریکی<sup>۳</sup> در داخل قطره تشکیل می‌شود، که منجر به کاهش انرژی سطح مشترک مایع- جامد می‌گردد. از معادله یانگ این کاهش در انرژی سطح سبب کاهش در زاویه تماس تعادلی بین مایع و جامد می‌شود و در نتیجه قطره بیشتر سطح را تر می‌کند. امروزه این پدیده بعنوان پدیده الکترووتینگ<sup>۴</sup> [۱] شناخته می‌شود که در کاربردهای پیشرفته‌ی در زمینه سیستم‌های میکرو و نانو الکترومکانیکال<sup>۵</sup> وارد شده است. برای نمونه می‌توان به استفاده از آن برای انتقال، اختلاط و توزیع میکروسایال‌ها [۲، ۳، ۴]، دستگاه‌های آزمایشگاهی<sup>۶</sup> مورد استفاده برای انجام تست بر روی نمونه‌های بیولوژیکی [۵ و ۶] و میکروپمپ‌ها [۷ و ۸] اشاره کرد.

برای بهینه‌سازی عملکرد سیستم‌های میکروسایالی در پروسه‌های چون الکترووتینگ، درک رفتار سیال در مقیاس میکرو کاملاً ضروری می‌باشد. در این مواقع شبیه‌سازی‌های کامپیوتری برای شناخت هر چه بهتر نیروهای محرک عامل حرکت و دینامیک حرکت یک قطره تحت تاثیر میدان الکتریکی و همچنین برای بهینه‌سازی پتانسیل الکتریکی اعمال به منظور افزایش سرعت در عملکردهای مطروحه، می‌توانند ابزار سودمندی باشند. البته لازم به ذکر است که آزمایشات تجربی هم قادر به پاسخگویی به این سوالات پاسخ می‌باشند، اما باید خاطر نشان شد که کار تجربی بر روی قطرات با مقیاس میکرو و نانو اولاً گران قیمت (معمولاً ساخت هر سیستم برای بررسی‌های الکترووتینگ هشت ماه به طول می‌انجامد [۹]) و ثانیاً با در نظر گرفتن مقیاس‌های طولی و زمانی حاکم انجام آنها کاملاً مشکل خواهد بود. بنابراین برای ساخت هرچه بهتر و کنترل دقیق‌تر و همچنین بهینه‌سازی وسایل مورد نظر، مدل‌سازی و شبیه‌سازی‌های صحیح می‌توانند بسیار مفید باشند.

در ادبیات فن، بررسی‌های عددی که در آنها عملکردهای پدیده الکترووتینگ بطور جامع مورد مطالعه قرار گرفته باشند، اندک است و در این میان کارهایی که در آنها این پدیده به شکل سه بعدی آن مورد بررسی قرار گرفته باشد، بسیار کمتر. از کارهای که در زمینه مربوط به مدل‌سازی و بررسی رفتار قطره تحت تاثیر میدان الکتریکی انجام شده است می‌توان به کارهای ذیل اشاره داشت:

کار دیکمپس و همکاران<sup>۷</sup> [۱۰]، در این کار یک مدل صرفاً برای پیش بینی تغییرات زاویه تماس در پخش متقارن قطره و مدت زمان لازم برای تثبیت زاویه تماس تحت تاثیر حضور میدان ارائه شده است. نتایج برای تغییرات زاویه تماس و زمان لازم در هر ولتاژ اعمالی، با نتایج تجربی انجام شده توسط نویسندگان مقایسه شده است که دارای تطابق خوبی می‌باشند.

<sup>1</sup> Spherical cap

<sup>2</sup> Young contact angle

<sup>3</sup> Electrical double layer

<sup>4</sup> Electrowetting phenomenon

<sup>5</sup> Micro and Nano-Electro-Mechanical Systems

<sup>6</sup> Lab-on-a-chip

<sup>7</sup> Decamps et al.

در کار دیگری که توسط چو و همکاران<sup>۱</sup> [۱۱] انجام شده است یک مدل اساسی برای نشان دادن اینکه چگونه پارامترهای یک دستگاه انجام آزمایش‌های تجربی بر روی تقسیم قطره تاثیر می‌گذارند، ارائه شده است. در کارهای جداگانه‌ی که توسط ورهيجن و همکاران<sup>۲</sup> و شاپيرو و همکاران<sup>۳</sup> به ترتیب در مراجع [۱۲] و [۱۳] بیان شده است، مدل‌های تعادلی برای شکل قطرات نیمکروی<sup>۴</sup> بر روی صفحات باردار ارائه شده است. با این تفاوت که در مرجع [۱۲] یک قطره هادی بر روی یک لایه عایق در نظر گرفته شده و تاثیر بارهای به دام افتاده (که در ولتاژهای بالا اتفاق می‌افتد). بر روی اشباع زاویه تماس<sup>۵</sup> بررسی می‌شود و در مرجع [۱۳]، با استفاده از یک چهارچوب کمینه‌سازی انرژی، چگونگی تاثیر مقاومت مایع مورد استفاده بر اشباع زاویه تماس بررسی شده است. مفهوم پدیده اشباع زاویه تماس نیز آن است که وقتی این پدیده رخ می‌دهد دیگر افزایش ولتاژ باعث تغییر زاویه تماس نمی‌شود.

اخیرا بهادر و همکاران<sup>۶</sup> [۱۴] یک مدل انرژی محور را با فرض اینکه قطره به صورت یک جسم صلب (برای اجتناب از تسخیر سطح مشترک مایع-گاز). حرکت می‌کند، صرفا برای بررسی نقش پارامتر موثر بر روی مدت زمان لازم برای حرکت یک قطره و به شکل سه بعدی از یک الکتروود غیرفعال به الکتروود فعال مجاور ارائه کرده‌اند.

در کار دیگری توسط لیئمن و همکاران<sup>۷</sup> [۱۵] انجام شده است، با در نظر گرفتن یک رفتار شبه استاتیک یعنی با صرفنظر از تاثیرات داخلی سیال<sup>۸</sup> (تغییرات انرژی داخلی به دلیل حرکت). به بررسی حرکت و تقسیم قطره به شکل سه بعدی پرداخته‌اند. در این کار برای ارزیابی شکل قطره تحت تاثیر میدان از نرم‌افزار تجاری بنام "Surface Evolver"<sup>۹</sup> [۱۶] استفاده شده است. و همچنین با توجه به نتایج ارائه شده این مدل به دلیل شبه استاتیکی بودن قادر به ارزیابی صحیح تغییرات شکل سطح مشترک مایع-گاز به هنگام حرکت نیست.

در کنار بررسی‌های سه بعدی فوق‌الذکر، کارهایی هم به شکل دو بعدی انجام شده است که در ادامه به مهمترین آنها هم اشاره می‌شود:

لو و همکاران<sup>۹</sup> [۱۷] با استفاده از یک مدل سطح مشترک نفوذکننده<sup>۱۰</sup>، توانسته‌اند فقط حرکت و تقسیم یک قطره را به صورت دو بعدی بررسی کنند. و در کار دوبعدی دیگری که اخیرا توسط والکر و همکاران<sup>۱۱</sup> [۱۸] انجام شده است مدلی را برای در نظر گرفتن تاثیر پدیده اشباع زاویه تماس و پسماند الکتریکی در بررسی حرکت و تقسیم قطره، ارائه کرده‌اند. با توجه به پیچیدگی‌های که مدل ارائه شده دارد و همچنین استفاده از روش تنظیم سطح<sup>۱۲</sup> (با توجه به ماهیت آن، این روش در تسخیر سطوح مرزی مشترک متحرک

<sup>1</sup> Cho et al.

<sup>2</sup> Verhijen et al.

<sup>3</sup> Shapiro et al.

<sup>4</sup> Sessile drops

<sup>5</sup> Contact angle saturation

<sup>6</sup> Bahadur et al.

<sup>7</sup> Lienemann et al.

<sup>8</sup> Internal fluid effects

<sup>9</sup> Lu et al.

<sup>10</sup> Diffuse interface model

<sup>11</sup> Walker et al.

<sup>12</sup> Level set method

کاملاً با مشکل مواجه است.)، قابل تعمیم به حالت سه بعدی نمی‌باشد. در کار حاضر سعی شده است ترکیبی از تمامی کارهای ذکر شده، ارائه شود؛ یعنی مدل هم قادر به شبیه‌سازی پخش متقارن قطره، حرکت و تقسیم یک قطره و همچنین ترکیب قطرات در حضور میدان الکتریکی باشد.

در کار حاضر پس از مروری مختصر بر معادلات حاکم، عبارت خطای منتهی از بازیابی معادلات ناویر- استوکس از معادله لئیس بولتزمن مدل انرژی آزاد با استفاده از بسط چاپمن انسکوگ بررسی شده است. پس از اطمینان از مناسب بودن خطای این روش برای سیستم‌های میکروسبیل، اقدام به شبیه‌سازی عملکردهای مختلف پدیده الکترووتینگ (یعنی پخش، حرکت، تقسیم و ترکیب دو قطره) با استفاده از مدلی که اخیراً توسط نویسندگان توسعه داده شده است [۱۹]، (به منظور نشان دادن قابلیت‌های روش لئیس بولتزمن) تحت تاثیر میدان الکتریکی به شکل سه‌بعدی شده است. مهمترین تمایز کار حاضر، مبنا قرار گرفتن روابط ترمودینامیکی بجای استفاده از روابط جریان و همچنین تغییر متغیرها از حالت هندسی به متغیرهایی چون چگالی و پتانسیل الکتریکی برای شبیه‌سازی عملکردهای اشاره شده می‌باشد. نتایج بدست آمده در تمامی موارد دارای تطابق خوبی با نتایج تحلیلی و تجربی موجود در ادبیات فن دارد.

## ۲- مواد و روش‌ها

در اکثر کاربردهای الکترووتینگ، قطرات مورد استفاده محلولی از آب و نمک و دارای طول مشخصه‌ی در حدود یک میلی‌متر و یا کمتر از آن می‌باشند و محیط پیرامون قطرات هم معمولاً هوا یا یک مایع غیر قابل ترکیب با قطره آب (برای مثال روغن) می‌باشد. تحت این شرایط، عدد بُند<sup>۱</sup> (معادله ۱)، که برابر است با نسبت نیروی جاذبه گرانشی به تنش سطحی، کوچکتر از یک خواهد شد. بنابراین در تمامی محاسبات انجام شده، از نقش عبارت جاذبه صرف‌نظر شده است [۱].

$$Bo = \sqrt{g\Delta\rho R^2 / \sigma_{lg}} \quad (1)$$

### ۲-۱- روش لئیس بولتزمن

طبیعت سینتیکی<sup>۲</sup> روش لئیس بولتزمن<sup>۳</sup> [۲۰، ۲۱، ۲۲] (به سبب استفاده از معادله توزیع بولتزمن) باعث به وجود آمدن چندین خاصیت مهم برای آن و متمایز شدن این روش از سایر روش‌های مرسوم عددی شده است. اول، عملگر جابجایی در فاز فضایی خطی می‌باشد، بر خلاف عبارت‌های غیر خطی در روش‌های ماکروسکوپی. دوم، معادلات تراکم ناپذیر ناویر- استوکس با استفاده از بسط چاپمن- انسکوگ<sup>۴</sup> می‌توانند از معادله لئیس بولتزمن به دست آیند [۲۳]. سوم، در این روش فشار از معادله حالت ترمودینامیکی محاسبه می‌گردد، در حالیکه در روش‌های ماکروسکوپی تراکم ناپذیر فشار از معادله پواسون که کرنش‌های سرعتی هم به صورت عبارت چشمه در آن عمل می‌کنند، حاصل می‌شود. چهارم، این روش خاصیت پردازش موازی<sup>۵</sup> ذاتی برای انجام محاسبات را دارد (به دلیل در نظر گرفتن تمام برخوردها<sup>۶</sup> در یک زمان). پنجم، شرایط

<sup>1</sup> Bond number

<sup>2</sup> Kinetic nature

<sup>3</sup> Lattice Boltzmann method

<sup>4</sup> Chapman-Enskog

<sup>5</sup> Parallel computing

<sup>6</sup> Collisions

مرزی ساده برای سطوح مشترک، که با توجه به چهارچوب ریاضی آن ( که یک روش مزوسکوپیک<sup>۱</sup> است.) امکان مدل سازی در سطح مولکولی وجود دارد، در نتیجه این روش مناسب برای استفاده در سیستم های میکروسیال شده است [۲۴].

تابع توزیع  $f_i(x,t)$  احتمال حضور یک ذره در گره  $x$ ، در زمان  $t$  و با سرعت  $v_{i\alpha}$  می باشد و معادله لتیس بولتزمن ذیل را ارضاء می کند

$$f_i(x + ev_{i\alpha}, t + e) - f_i(x, t) = \Omega_i \quad (۲)$$

که  $\Omega_i$  اپراتور برخورد و بیانگر نرخ تغییر توزیع در هر برخورد می باشد.  $e$  یک ثابت خیلی کوچکتر از طول مشخصه سیستم که معمولاً بعنوان عدد کندسن<sup>۲</sup> در نظر گرفته می شود. اندیس های  $\alpha$  و  $i$  سرعت مولفه ها و راستای سرعت را به ترتیب بیان می کنند. معادله لتیس بولتزمن با اپراتور برخورد BGK [۲۵] به شکل ذیل نوشته می شود

$$f_i(x + ev_{i\alpha}, t + e) - f_i(x, t) = -\frac{1}{\tau} [f_i(x, t) - f_i^{eq}(x, t)] \quad (۳)$$

که  $f_i^{eq}(x, t)$  توزیع تعادلی و  $\tau$  زمان آرامش می باشد. در روش لتیس بولتزمن چگالی سیال از رابطه ذیل

$$\rho(x, t) = \sum_i f_i(x, t) \quad (۴)$$

و سرعت ماکروسکوپی سیال هم با استفاده از رابطه (۵) محاسبه می شود.

$$u(x, t) = \frac{\sum_i f_i(x, t) v_{i\alpha}}{\sum_i f_i(x, t)} \quad (۵)$$

جهت حفظ شرط تراکم ناپذیری می بایست رابطه (۴) در کل دامنه حل ثابت باقی بماند. بدین منظور در حل یک مساله شرط همگرایی را روی این معادله تعریف می کنند (به صورت اختلاف گام فعلی و قبلی).

در کار حاضر به منظور مطالعه یک سیستم دوفازی مایع-بخار از روش لتیس بولتزمن مدل انرژی آزاد سه بعدی (حالت D3Q15) که اولین بار توسط سویفت<sup>۳</sup> و همکارانش [۲۶ و ۲۷] پیشنهاد شد، استفاده می شود. در این مدل  $f_i^{eq}$  دارای فرم کلی ذیل می باشد

$$f_i^{eq} = A + B (v_{i\theta} u_\theta) + C (u^2) + D (v_{i\theta} v_{i\zeta} u_\theta u_\zeta) + G_{\theta\zeta} (v_{i\theta} v_{i\zeta}) \quad (۶)$$

ضرائب در معادله فوق به گونه ای تعیین می شوند که بتوان از طریق بسط چایمن-انسکوگ به معادلات ناویر استوکس دست یافت. این بازیابی توام با یک عبارت خطا می باشد، یعنی

$$\{\text{عبارت خطا}\} + \{\text{معادلات ناویر استوکس}\} = \{\text{معادله لتیس بولتزمن}\}$$

اگر از بسط چایمن-انسکوگ استفاده شود معادلات ناویر-استوکس از معادله لتیس بولتزمن برای مدل انرژی آزاد سه بعدی (حالت D3Q15)، به شکل ذیل بدست خواهد آمد [۲۸]

<sup>1</sup> Mesoscopic

<sup>2</sup> Knudsen number

<sup>3</sup> Swift et al.

$$\begin{aligned}
\partial_t(\rho u_\gamma) + \partial_\alpha(\rho u_\alpha u_\gamma) = & -\partial_\alpha P_{\alpha\gamma} + \nu \partial_\alpha \{ [\partial_\beta(u_\beta) \delta_{\alpha\gamma} + 2S_{\alpha\gamma}] \rho \} \\
& - \frac{3\nu}{c^2} \partial_\alpha [\partial_\rho P_{\alpha\gamma} \partial_\beta(\rho u_\beta)] \\
& - \frac{3\nu}{c^2} \partial_\alpha [u_\gamma \partial_\beta P_{\alpha\beta} + u_\alpha \partial_\beta P_{\beta\gamma} + \partial_\beta(\rho u_\alpha u_\beta u_\gamma)] \\
& - \frac{3\nu^2}{c^2} \partial_\alpha \{ u_\gamma \partial_\beta [u_\lambda \partial_\lambda(\rho) \delta_{\alpha\beta} + u_\alpha \partial_\beta(\rho) + u_\beta \partial_\alpha(\rho)] \} \\
& - \frac{3\nu^2}{c^2} \partial_\alpha \{ u_\alpha \partial_\beta [u_\lambda \partial_\lambda(\rho) \delta_{\beta\gamma} + u_\gamma \partial_\beta(\rho) + u_\beta \partial_\gamma(\rho)] \} \\
& + \frac{3\nu^2}{c^2} \partial_\alpha \{ \partial_{t_0} [u_\beta \partial_\beta(\rho) \delta_{\alpha\gamma} + u_\alpha \partial_\gamma(\rho) + u_\gamma \partial_\alpha(\rho)] \}
\end{aligned} \tag{7}$$

$S_{\alpha\gamma}$  همان تانسور نرخ کرنش و  $P_{\alpha\gamma}$  تانسور فشار می‌باشند. همانطور که مشهود است، سطر اول معادله (۷)، معادله ناپیراستوکس بوده و جملات دیگر بیانگر عبارت خطا در این مدل هستند. همچنین با توجه به این معادله می‌توان دریافت که هر یک از جملات عبارت خطا از مرتبه دوم، عدد ماخ می‌باشند (چون گرادیان چگالی متناسب با مربع عدد عدد ماخ می‌باشد [۲۳]). بنابراین با در نظر داشتن این نکته که در پدیده الکترووتینگ (در تمام میکروسیال‌ها) جریان دارای سرعت خیلی پایین می‌باشد، می‌توان انتظار داشت عبارت خطا در شبیه سازی این گونه جریانات دارای مقداری خیلی کوچک باشد. در ادامه مروری بر معادلات مورد استفاده و چگونگی اعمال تاثیر میدان الکتریکی آورده شده است.

همانگونه که اشاره شد، اگر به سطحی که قطره بر روی آن واقع شده است، پتانسیل الکتریکی اعمال شود، در نزدیکی تقریباً سطح جامد لایه الکتریکی مضاعف در داخل قطره تشکیل می‌گردد. بنابراین در حضور میدان الکتریکی، انرژی آزاد سیستم برابر خواهد بود با مجموع انرژی آزاد لایه الکتریکی مضاعف و انرژی آزاد مکانیکی موجود (که مستقل از میدان الکتریکی است). در بررسی لایه الکتریکی مضاعف از دیدگاه انرژی آزاد، سه عنصر باید در نظر گرفته شوند: انرژی الکترواستاتیک بارهای سطحی و بارهای حجمی، اختلاف انتروپی به سبب توزیع غیریکنواخت یون‌ها و پیوند شیمیایی تشکیل یونهای بار سطحی، که در ادامه معادلات مربوط به هر کدام به تفکیک آورده شده است.

## ۲-۲- انرژی آزاد الکتریکی در لایه الکتریکی مضاعف

مجموع دو عنصر اول در لایه الکتریکی مضاعف (یعنی انرژی‌های الکترواستاتیک و انتروپی)، اصطلاحاً انرژی آزاد الکتریکی نامیده شده و به شکل ذیل تعریف می‌شود [۲۹]

$$F_{el} = U_{el} - T\Delta S \tag{8}$$

که در آن  $U_{el}$  بیانگر انرژی الکترواستاتیک،  $\Delta S$  اختلاف انتروپی و  $T$  دمای مطلق می‌باشد. انرژی الکترواستاتیک می‌تواند بصورت انرژی میدان در محلول یا به شکل دیگر، بعنوان انرژی بارهای سطحی و بارهای حجمی در میدان پتانسیل محلی تعریف شود. یعنی

$$\begin{aligned}
 U_{el} &= \frac{\epsilon_r \epsilon_0}{2} \int_V (\text{grad } \varphi)^2 dV \\
 &= -\frac{\epsilon_r \epsilon_0}{2} \int_A \varphi_0 (\partial \varphi / \partial n)_{\text{surf}} dA - \frac{\epsilon_r \epsilon_0}{2} \int_V \varphi \text{div grad } \varphi dV \\
 &= \frac{1}{2} \int_A \sigma \varphi_0 dA + \frac{1}{2} \int_V \rho \varphi dV
 \end{aligned} \quad (9)$$

برای محلول های رقیق حاصل ضرب دما در اختلاف انتروپی ( $\Delta S$ ) مابین توزیع یون ها در لایه الکتریکی مضاعف و همان یون ها و مولکول های مایع در محلول با  $\varphi=0$ ، بوسیله رابطه ذیل قابل محاسبه می باشد [۲۹]

$$-T\Delta S = \epsilon_r \epsilon_0 \int_V \varphi \text{div grad } \varphi dV - \epsilon_r \epsilon_0 \int_V dV \int_0^\varphi \text{div grad } \varphi d\varphi \quad (10)$$

با توجه به اینکه در اینجا سیستم غیر قابل تراکم می باشد، بنابراین برای  $F_{el}$  می توان نوشت

$$\begin{aligned}
 F_{el} = U_{el} - T\Delta S &= \epsilon_r \epsilon_0 \int_V \left\{ \frac{(\text{grad } \varphi)^2}{2} + \varphi \text{div grad } \varphi - \int_0^\varphi \text{div grad } \varphi d\varphi \right\} dV \\
 &= \epsilon_r \epsilon_0 \int_V \left\{ \int_0^\varphi \text{grad } \varphi d(\text{grad } \varphi) - \int_0^\varphi \varphi d(\text{div grad } \varphi) \right\} dV
 \end{aligned} \quad (11)$$

باید توجه داشت که موقعی که از صفر تا  $\varphi$  انتگرال گرفته می شود در  $\varphi=0$  (یعنی در غیاب میدان) همه سطوح بی بار هستند و پتانسیل در همه جا برابر صفر است. اما وقتی  $\varphi = \varphi$  همه سطوح پتانسیل نهایی خود را (یعنی  $\varphi_0$ ) دارند و در طول این فرآیند معادله پواسون- بولتزمن<sup>۱</sup> برای توزیع پتانسیل در داخل لایه الکتریکی مضاعف همواره صادق است.

## ۲-۳- انرژی آزاد شیمیایی در لایه الکتریکی مضاعف

اگر بار سطحی از یک یا چند نوع بار تشکیل شده باشد، انرژی آزاد شامل بخش شیمیایی هم خواهد شد [۳۰]

$$F_{chem} = -\epsilon_r \epsilon_0 \int_V [\varphi \text{div grad } \varphi + (\text{grad } \varphi)^2] dV \quad (12)$$

## ۲-۴- انرژی آزاد مکانیکی

برای یک سیستم دوفازی با وجود یک سطح جامد زیرین (که قطره بر روی آن واقع شده است)، انرژی آزاد آن می تواند توسط تابع انرژی آزاد لاندائو<sup>۲</sup> بیان شود [۳۱]

$$F_{mech} = \int_V [\psi_b(T, \rho) + \frac{\kappa (\text{grad } \rho)^2}{2}] dV + \int_S \psi_s(\rho_s) dS \quad (13)$$

که در آن  $\psi_b$  انرژی آزاد بالک می باشد و به شکل ذیل بصورت تابعی از انرژی آزاد مازاد<sup>۳</sup> بیان می شود

<sup>1</sup> Poisson- Boltzmann equation

<sup>2</sup> Landau free energy

<sup>3</sup> Excess free energy

$$\psi_b = W + \phi_b \rho - p_b \quad (14)$$

در معادله فوق  $W$  انرژی آزاد مازاد،  $\phi_b$  انرژی شیمیایی بالک و  $p_b$  فشار بالک می‌باشند و همچنین  $\psi_s$  انرژی آزاد سطح و  $\rho_s$  چگالی در روی سطح هستند. در واقع عبارت دوم در انتگرال اول معادله (۱۳) سهم انرژی آزاد به دلیل گرادیان چگالی موجود، می‌باشد.  $\kappa$  هم پارامتری است که تنش سطحی و ضخامت سطح مشترک بین دوفاز را تنظیم می‌کند [۳۲]. رابطه‌ی که بوسیله آن بتوان مقدار انرژی مازاد را در سیستم محاسبه کرد به شکل ذیل است

$$W = p_c (v_\rho^2 - \lambda \tau_\rho)^2 \quad (15)$$

که  $v_\rho = \frac{\rho - \rho_c}{\rho_c}$  و  $\tau_\rho = \frac{T_c - T}{T_c}$  چگالی و دمای کاسته شده و  $T_c = \frac{4}{\gamma}$ ،  $p_c = \frac{1}{\lambda}$  و  $\rho_c = \frac{\gamma}{\gamma}$  به ترتیب دما، فشار و چگالی بحرانی هستند. در معادله فوق  $\lambda$  مقدار ثابتی است که بزرگی آن به اختلاف چگالی دو فاز موجود در سیستم وابسته است و در اینجا مقدار آن برابر ۰/۱ می‌باشد [۳۲].

## ۲-۵- انرژی آزاد کل سیستم

اکنون با توجه به مشخص شدن تمام انرژی‌های آزاد موجود در سیستم، انرژی آزاد کل (یعنی شامل الکتریکی، شیمیایی و مکانیکی) را می‌توان برای سیستم مورد بررسی به شکل ذیل تعریف کرد [۱۹]

$$\Psi_\phi^t = \int_S \psi_s(\rho_s) dS + \int_V \left\{ \psi_b + \frac{\kappa}{2} (\partial_\alpha \rho)^2 - \left[ \frac{\varepsilon}{2} (\partial_\alpha \phi)^2 + \Pi \right] \right\} dV \quad (16)$$

که در آن  $\Pi = 2n^b k_B T [\cosh(\beta\phi) - 1]$  و فشار تراوشی<sup>۱</sup> نامیده می‌شود. با توجه به اینکه می‌دانیم تنش‌های سطحی موجود در سیستم برابر با کمینه انرژی آزاد سیستم هستند [۳۳]، به منظور استخراج روابط جدید برای این تنش‌های در حضور میدان الکتریکی، با استفاده از روش حساب تغییرات [۳۴] رابطه بدست آمده برای انرژی آزاد کل سیستم کمینه‌سازی می‌شود. با توجه به اینکه مقدار کمینه  $\Psi_\phi^t$  باید برابر با مقدار تعادلی انرژی آزاد سطحی باشد می‌توان برای تنش‌های سطحی نوشت [۱۹]

$$\begin{aligned} \sigma_{gl} &= \int_{\rho_g}^{\rho_l} \sqrt{2\kappa W} d\rho + \int_{\phi_g}^{\phi_l} \sqrt{2\varepsilon \Pi} d\phi \\ \sigma_{sg} &= \int_{\rho_s}^{\rho_g} \sqrt{2\kappa W} d\rho + \int_{\phi_s}^{\phi_g} \sqrt{2\varepsilon \Pi} d\phi \\ \sigma_{sl} &= \int_{\rho_s}^{\rho_l} \sqrt{2\kappa W} d\rho + \int_{\phi_s}^{\phi_l} \sqrt{2\varepsilon \Pi} d\phi + \phi_0 - \phi_l \rho_s \end{aligned} \quad (17)$$

اکنون می‌توان با استفاده از رابطه یانگ این تنش‌ها را به زاویه تماس مرتبط کرد

$$\cos \theta = \frac{\sigma_{sg} - \sigma_{sl}}{\sigma_{gl}} \quad (18)$$

و در نهایت برای بستن سیستم معادلات به منظور مطالعه رفتار قطره تحت تاثیر میدان الکتریکی با استفاده از مدل انرژی آزاد روش لیتیس بولتزمن، معادله ذیل برای محاسبه پتانسیل سطح بکار گرفته می‌شود [۳۲]

<sup>1</sup> Osmotic pressure



$$\phi_1 = 2\lambda\tau_p \sqrt{\kappa p_c} \operatorname{sign}\left(\frac{\pi}{2} - \theta\right) \left[\cos\left(\frac{\alpha}{3}\right)(1 - \cos\left(\frac{\alpha}{3}\right))\right]^{1/2} \quad (19)$$

که  $\alpha = \cos^{-1}(\sin^2 \theta)$  و  $\operatorname{sign}(x)$  تابع علامت می‌باشد. برای محاسبه سهم میدان الکتریکی باید مقدار  $\phi_1$  (یعنی مقدار پتانسیل الکتریکی در گذر از سطح مشترک جامد-مایع) معلوم باشد. به منظور تخمین مقدار آن ضخامت سطح مشترک مایع-جامد ۱۰ انگستروم در نظر گرفته شده است [۳۵].

## ۲-۶- شرایط مرزی

در شبیه‌سازی بخش هیدرودینامیکی، دو نوع مهم از شرایط مرزی مورد استفاده قرار گرفته‌اند: شرط مرزی ترکندگی و شرط مرزی عدم لغزش. با وجود آنکه این شرایط مرزی ساده بنظر می‌رسند اما به کار گیری آنها در فرآیند برنامه‌نویسی در هندسه‌های پیچیده می‌تواند مشکل باشد. در شبیه سازی‌های حاضر، شرط مرزی عدم لغزش هم با استفاده از قانون برگشت مستقیم<sup>۱</sup> مورد استفاده قرار گرفته است. شرط مرزی دیگر مورد استفاده در شبیه‌سازی، شرط مرزی متناوب<sup>۲</sup> می‌باشد، که این شرط در تمامی سطوح جانبی اعمال شده است. شکل (۱) نمای از سیستم مورد بررسی می‌باشد که تمامی شرایط مرزی مورد استفاده برای سطوح مختلف در آن نشان داده شده است.

در بخش الکتریکی، همانگونه که در شکل (۲) هم نشان داده شده است، در تمامی حالات شرط مرزی پتانسیل ثابت بر سطح زیرین و در سطوح مشترک مایع-گاز و گاز-جامد شرط مرزی گرادیان پتانسیل برابر صفر اعمال شده است.

## ۳- نتایج و بحث

در شبیه سازی‌های انجام شده به منظور اجتناب از پیچیدگی زیاد محیط پیرامون قطره به جای هوا (یعنی حالت چند جزی)، بخار آب (حالت دوفازی) در نظر گرفته شده است. در بخش حاضر ابتدا نتایج مربوط به پخش قطره و مقایسه نتایج آن از نکته نظر تغییرات مقداری و زمانی زاویه تماس با نتایج تحلیلی و تجربی آورده شده است. سپس در ادامه نتایج شبیه سازی‌های انجام شده برای سایر عملکردهای پدیده الکترووتینگ (یعنی حرکت، تقسیم و ترکیب قطرات) به همراه مقایسه نتایج آنها از نقطه نظر تغییرات شکل قطره و زمان آنها با نتایج تجربی موجود به ترتیب ارائه شده است. لازم به ذکر است که در تمامی آزمایش‌های تجربی ذکر شده، قطره یا قطرات مورد استفاده مخلوطی از گلیسرین و آب می‌باشند که بر حسب نوع عملکرد درصدهای استفاده شده از دو مایع ذکر شده برای تشکیل قطره یا قطرات متفاوت است. این مساله در صورت مقایسه مقدار لزجت‌های سینماتیکی قطرات (که در جداول (۱)، (۲)، (۳) و (۴) برای هر عملکرد آورده شده است) کاملاً مشهود است. همچنین در کار حاضر، شبکه‌های استفاده شده از نوع مکعبی با اضلاع واحد هستند (یعنی مطابق شکل (۱)،  $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 1$ ).

<sup>1</sup> Bounce-back

<sup>2</sup> Periodic boundary condition

نکته دیگری که باید به آن اشاره شود چگونگی مدلسازی سطح مشترک مایع- بخار می‌باشد. در کار حاضر سطح مذکور از نوع نفوذپذیر در نظر گرفته شده است (یعنی امکان تبادل جرم مابین دو فاز وجود دارد.) که ضخامت آن هم از رابطه ذیل محاسبه می‌شود [۳۲]

$$\zeta = \sqrt{\kappa \rho_c^2 / 4\lambda\tau_T p_c} \quad (20)$$

همچنین لازم به ذکر است با توجه به اینکه در روش لیتیس بولتزن پارامترهای بی‌بعد در محاسبات استفاده می‌شوند برای مثال واحد طول در این روش به اختصار LB unit نامیده می‌شود [۳۶ و ۱۹]. به منظور تبدیل واحدهای بی‌بعد موجود به واحدهای فیزیکی (که در کار حاضر واحدهای طول و زمان مورد توجه هستند)، در هر بخش پارامترهای لازم در جدولی برای محاسبه ضریب تبدیل مناسب آورده شده است.

### ۳-۱- پخش قطره

با توجه به ویژگی‌های شیمیایی یک سطح، قطره واقع شده بر روی آن سطح یک زاویه تماس اولیه مشخص خواهد داشت. برای در نظر گرفتن این مهم، یا باید اطلاعات ویژگی‌های سطح مذکور به عنوان بخشی از اطلاعات ورودی به برنامه داده شوند تا بر اساس آنها برنامه قادر به شبیه‌سازی یک قطره با آن زاویه باشد و یا اینکه مطابق شکل (۳) بر اساس زاویه تماس اولیه، مختصات مرکز یک قطره به صورت  $[x_{cent}, y_{cent}, R - h]$  (بطوریکه که حجم بالای سطح آن معادل حجم قطره مورد بررسی باشد) بعنوان بخشی از اطلاعات ورودی به برنامه داده شود. به منظور اجتناب از پیچیدگی غیر ضرور در کار حاضر با فرض معلوم بودن زاویه تماس اولیه، حالت دوم جهت شبیه‌سازی یک قطره، در نظر گرفته شده است. لازم به ذکر است که برای هر زاویه تماس اولیه می‌توان اندازه  $h$  را از روابط مثلثاتی تعیین کرد.

همانگونه که اشاره شد برای مقایسه از نظر زمانی باید فاکتور مناسب تبدیل تعریف شود، این فاکتور به شکل ذیل تعریف می‌شود

$$t_0 = \frac{V^*}{V} \cdot L_0^2 \quad (21)$$

که  $V^*$  ویسکوزیته سینماتیک بی‌بعد مورد استفاده در شبیه‌سازی و  $V$  ویسکوزیته سینماتیک می‌باشد.  $L_0 = \frac{r}{r^*}$  هم فاکتور تبدیل طول است که در آن شعاع قطره و  $r^*$  شعاع بی‌بعد قطره می‌باشد که در شبیه‌سازی استفاده شده است. برای بررسی صحت پیش‌بینی مقدار تغییرات زاویه تماس در ولتاژهای مختلف از نقطه نظر مقداری نتایج با حل تحلیلی ارائه شده توسط موگل و همکاران<sup>۱</sup> [۱] و از نکته نظر زمانی (یعنی مدت زمانی که لازم است تا قطره به زاویه تماس مورد نظر در آن میدان الکتریکی برسد) با نتایج تجربی دیکمپس و همکاران<sup>۲</sup> [۱۰] مقایسه شده است. اطلاعات مورد نیاز برای محاسبه ضریب تبدیل برای این بخش در جدول (۱) آورده شده است، در صورت جاگذاری خواهیم داشت:  $t_0 = 7/76 \times 10^{-5}$ .

در شکل (۴) منحنی تغییرات زاویه‌های تماس پیش‌بینی شده به ازاء ولتاژهای مختلف اعمالی با حل تحلیلی مقایسه شده است، همانگونه که ملاحظه می‌شود تطابق خیلی خوبی بین نتایج وجود دارد. برای

<sup>1</sup> Mugele et al.

<sup>2</sup> Decamps et al.

مقایسه از نکته نظر زمانی، با توجه به اینکه نتایج تجربی برای کاهش‌های غیریکسان ایجاد شده برای قطرات با زاویه‌های تماس اولیه یکسان، مدت زمان مشابه را برای رسیدن به حالت نهایی نشان داده‌اند، لذا سعی شد تا این موضوع در نتایج شبیه سازی هم نشان داده شود. به این صورت که دو قطره با زاویه‌های تماس اولیه یکسان و برابر با ۱۱۰ درجه در نظر گرفته شدند و سپس ولتاژهای متفاوت به گونه‌ی اعمال گردید که زاویه تماس نهایی در یکی از قطرات برابر ۹۲ درجه و در دیگری برابر ۷۶ درجه شود (زاویه‌های گزارش شده در آزمایش تجربی).

شکل (۵-الف) نتایج شبیه سازی را به همراه زمان برای حالتی که در آن قطره از زاویه تماس اولیه ۱۱۰ به ۹۲ درجه می‌رسد، نشان می‌دهد. همچنین در شکل‌های (۵-ب) و (ج) میدان سرعت در داخل قطره را قبل و بعد از اعمال میدان الکتریکی نشان داده شده است. شکل‌های (۶) هم چگونگی تغییر زاویه تماس با زمان و میدان سرعت را برای حالت دوم یعنی کاهش زاویه تماس از ۱۱۰ به ۷۶ درجه را نشان می‌دهند. با توجه به مقایسه‌ی که در شکل (۷) آورده شده است، تطابق خیلی خوبی میان نتایج شبیه سازی شده و نتایج تجربی وجود دارد.

### ۳-۲- حرکت قطره

اگر الکترودهای مورد استفاده در سطح زیرین به شکل مناسبی جاسازی شوند (به مانند شکل ۸) با اعمال ولتاژ می‌توان در قطره واقع شده بر روی آن الکترودها حرکت بوجود آورد. مطابق شکل، زمانیکه یکی از الکترودها فعال می‌شود در یک سمت قطره کاهش در زاویه تماس آن رخ خواهد داد. قطره به منظور ایجاد تعادل جرمی در وضعیت جدید پیش آمده، به سمتی که در آن کاهش زاویه تماس ایجاد شده، روانه می‌شود. در صورتیکه این عمل مرتباً تکرار شود می‌توان یک حرکت پیوسته در قطره ایجاد کرد که این اساس کار پمپ‌های است که با استفاده از پدیده الکترووتینگ کار می‌کنند [۷].

در شکل (۹) نتایج شبیه سازی انجام شده برای حرکت قطره به سبب اعمال میدان الکتریکی مطابق با شکل (۲-ب)، به شکل دید از بالای آن نشان داده شده است. برای محاسبه زمان مراحل مختلف از اطلاعات جدول (۲) استفاده شده است که با جاگذاری پارامترها، ضریب تبدیل برای این حالت برابر شده است با:  $t_0 = 3/35 \times 10^{-6}$ . در ادامه هم در شکل (۱۰) نمای جانبی نتایج شبیه سازی، آورده شده است. همانگونه که ملاحظه می‌شود با حرکت قطره به سمت راست، قطره سطح را بیشتر تر می‌کند و در نتیجه سطح تماس در حال افزایش و در مقابل ارتفاع قطره در حال کاهش می‌باشد.

اگر مقایسه‌ی بین نتایج شبیه سازی و نتایج تجربی لو و همکاران<sup>۱</sup> [۱۷] (یعنی شکل ۱۱-الف) انجام شود، قدرت شبیه سازی‌های انجام شده بیشتر آشکار می‌شود. لازم به ذکر است که در شکل (۱۱-الف) زمان برای قطره‌ای که بین دو صفحه واقع شده (یک صفحه در زیر قطره و دیگری بر روی آن، یعنی حالت ساندویچ) بیان شده است. علت کمتر بودن زمان‌های پیش بینی شده در شبیه سازی هم بخاطر استفاده از فقط یک صفحه است که قطره بر روی آن قرار گرفته است، چون نیروی مقاومتری در برابر حرکت ایجاد خواهد شد. بنابراین حرکت در مدت زمان کمتری نسبت به حالت دو صفحه‌ی آن انجام می‌شود.

<sup>1</sup> Lu et al.

همچنین در شکل (۱۱-ب) نمای جانبی از یک آزمایش تجربی [۳۷] حرکت قطره نشان داده شده است، که شکل قطره شبیه سازی شده کاملاً با آن تطابقت دارد.

در ادامه در شکل‌های (۱۲) نمای دید از بالا برای فرآیند حرکت قطره از ابتدا تا انتها به همراه نمایشی از میدان سرعت در برخی از گام‌های زمانی نشان داده شده است. لازم به ذکر است بخشی از سرعت‌های که در شکل (۱۲-ب) در مرز مشترک مایع-بخار ملاحظه می‌شود بیانگر تبادل جرمی در حالت تعادل میان دو فاز می‌باشد که در حالت واقعی هم وجود دارد. همچنین همانطور که در شکل (۱۲-ج) مشاهده می‌شود، در قسمتی از سطح مشترک مایع-بخار که تحت کشش قرار گرفته است تبخیر و در مقابل در قسمت نزدیک سطح به سبب افزایش ترشوندگی سطح، جذب بخار وجود دارد که این موضوع هم کاملاً با فیزیک مسئله مطابقت دارد. لازم به ذکر است با توجه به ماهیت مدل (که یک مدل انرژی محور ترمودینامیکی است)، مدل با توجه به مقدار انرژی آزاد در هر ناحیه بطور خودکار قادر به تشخیص تبخیرهای احتمالی در سیستم است. بخش دیگری از سرعت‌های نشان داده شده در شکل (۱۲-ب)، سرعت‌های زائدی هستند که مربوط به ضعف مدل در تسخیر درست سطح مشترک است که این ضعف در مدل حاضر نسبت به مدل اصلی آن به شدت کاهش داده شده است. برای اطلاعات بیشتر در مورد سرعت‌های زائد در مدل انرژی آزاد، به مرجع [۳۸] رجوع شود.

### ۳-۳- تقسیم قطره

به منظور شبیه سازی عمل تقسیم قطره پتانسیل الکتریکی مطابق شکل (۲-ج)، در نظر گرفته شد. نتایج شبیه سازی‌ها در این بخش با نتایج تجربی کیم و همکاران<sup>۱</sup> [۹] مقایسه شده است. برای محاسبه ضریب تبدیل در این قسمت از اطلاعات جدول (۳) استفاده شده است که مقدار ضریب تبدیل برابر شده است با:  $t_0 = 3/348 \times 10^{-6}$ . آزمایش تجربی انجام شده در این حالت هم با قطره‌ی که بین دو صفحه قرار دارد، انجام می‌شود که با اعمال میدان الکتریکی زاویه تماس در طرفین قطره از ۱۰۷ درجه به ۶۴ درجه کاهش داده شده است. با توجه به استفاده از دو صفحه در آزمایش مذکور، در این حالت هم انتظار آن وجود داشت که زمان‌های بدست آمده از شبیه سازی در مقایسه با تجربی آن کمتر باشند، این موضوع در شکل (۱۳) بصورت دید از بالا و در شکل (۱۴) بصورت نمای جانبی آورده شده است. در شکل (۱۵) هم نتایج آزمایش تجربی برای تقسیم یک قطره نشان داده شده است. همانگونه که ملاحظه می‌شود نتایج دارای تطابق خوبی (هم از نظر تغییرات شکل قطره و هم از نظر زمانی) هستند. در شکل (۱۶) هم فرآیند شبیه سازی تقسیم به همراه نماهای از میدان سرعت برای ارائه جزئیات بیشتر آورده شده است.

### ۳-۴- ترکیب قطرات

در این قسمت با اعمال میدان الکتریکی مطابق شرط مرزی شکل (۲-د)، ترکیب دو قطره شبیه سازی شده است. نتایج بدست آمده در این بخش با نتایج تجربی گنی و همکاران<sup>۲</sup> [۳۹] مقایسه شده است. اگر برای محاسبه ضریب تبدیل از اطلاعات جدول (۴) بهره گرفته شود مقدار ضریب تبدیل برابر خواهد بود با:

<sup>1</sup> Kim et al.

<sup>2</sup> Cooney et al.

شکل (۱۷) نتایج شبیه سازی ترکیب را به شکل نمای دید از بالا و شکل (۱۸) بصورت دید جانبی به همراه زمان سپری شده در هر مرحله را نشان می‌دهند. در این شبیه سازی هم با توجه به آزمایش تجربی انجام شده، هر دو قطره دارای زاویه تماس اولیه ۱۱۳ درجه می‌باشند که با اعمال میدان الکتریکی این زاویه تماس در سمتی که ولتاژ اعمال می‌شود به ۷۱ درجه کاهش داده شده است. همچنین به منظور آگاهی از چگونگی تغییر میدان سرعت در این حالت، نماهای از میدان سرعت برای وضعیت‌های مختلف در شکل (۱۹-ب) تا (۱۹-ه) نشان داده شده است.

نکته‌ای که باید در مورد آزمایش تجربی که نتایج آن در شکل (۲۰) آورده شده است ذکر شود اینست که این آزمایش به‌گونه‌ی انجام شده است که قطرات با سطح زیرین خود در تماس نمی‌باشند و بر روی دو سیم از جنس طلا در یک ارتفاع ۵۰ میکرومتری از سطح قرار دارند و در واقع با هیچ سطحی در تماس نمی‌باشند و زاویه تماس اولیه اشاره شده زاویه تماس رو قطره با سیم‌های است که بر روی آن واقع شده‌اند. به همین دلیل زمان‌های پیش بینی شده توسط شبیه سازی کمی بیشتر از نتایج تجربی آن می‌باشند. نکته دیگری که باید به آن اشاره شود مربوط به اختلاف ماهیت قطره در زمان‌های ۱/۲ و ۳/۷ ثانیه در این شکل می‌باشد. همانگونه که ملاحظه می‌شود اختلاف این دو حالت به رنگ قطره منتهی از ترکیب مربوط می‌شود که در زمان ۱/۲ ثانیه هنوز قطره حاصل از ترکیب رنگ نه‌ای خود را پیدا نکرده و پس از گذشت مدت زمان ۲/۵ ثانیه این امر محقق و رنگ قطره تثبیت شده است. به عبارت دیگر می‌توان گفت که پس از گذشت این زمان، قطره از نظر سرعت داخلی به حالت تعادل می‌رسد. این مسئله در شبیه سازی انجام شده هم قابل مشاهده است.

همانگونه که در شکل‌های (۲۱) ملاحظه می‌شود با وجود آنکه شکل قطره حالت نه‌ای خود را پیدا کرده است اما هنوز از نظر سرعت داخلی به حالت تعادل نرسیده است (شکل ۱۹-الف) و پس از تقریباً ۱/۵ ثانیه قطره از نظر میدان سرعت داخلی هم به حالت تعادل می‌رسد، یعنی شکل (۱۹-ب). علت اختلاف در زمان رسیدن به آرامش را هم می‌توان به وجود صفحه زیرینی که در شبیه سازی در نظر گرفته شده است، مرتبط دانست. هرچند این صفحه در ابتدا باعث افزایش زمان ترکیب به دلیل حرکت قطرات به سمت یکدیگر می‌شود، اما در ادامه موجبات کاهش مدت زمان لازم برای رسیدن به حالت تعادل را فراهم می‌کند.

#### ۴- نتیجه‌گیری

در کار حاضر ضمن بررسی عبارت خطای منتهی از بازیابی معادلات ناویر-استوکس از معادله لیتس بولتزمن برای مدل انرژی آزاد، عملکردهای مختلف مطرح در پدیده الکترووتینگ بخوبی شبیه سازی شدند. نتایج شبیه‌سازی‌ها در تمامی مورد با نتایج تجربی مقایسه شده است که تطابق خوبی بین نتایج مشاهده می‌شود. با توجه به این موضوع مشخص می‌شود که با اعمال تغییرات به سبب حضور میدان الکتریکی، روش لیتس بولتزمن مدل انرژی آزاد بر خلاف سایر مدل‌سازی‌ها، توانایی شبیه‌سازی هر چهار عملکرد الکترووتینگ را با دقت خیلی خوب و به صورت سه بعدی را دارد. با توجه به اینکه روش لیتس بولتزمن یک روش مزوسکوپیک می‌باشد، لذا توسعه انجام شده در ادامه برای توسعه این روش به مدل‌سازی و شبیه‌سازی تاثیر میدان

الکتریکی بر رفتار قطراتی که شامل ذرات نانو هستند، بسیار سودمند خواهد بود. مهمتر اینکه امکان بسط مدل برای بررسی الکترووتینگ در سیستم‌های چند جزئی هم وجود دارد.

## مراجع

- [1] Mugele, F., and Baret, J. C., "Electrowetting: From Basics to Applications", *J. Phys. Condens. Matter*, Vol. 17, pp. R705-R774, (2005).
- [2] Wixforth, C., Strobl, C., Gauer, A., Toegl, J., Scriba, J., and von Guttenberg, Z., "Acoustic Manipulation of Small Droplets", *Annal. Bioanal. Chem.*, Vol. 379, pp. 982-991, (2004).
- [3] Velev, D., Prevo, B. G., and Bhatt, K. H., "On-chip Manipulation of Free Droplets", *Nature*, Vol. 426, pp. 515-516, (2003).
- [4] Gascoyne, P. R. C., Vykoukal, J. V., Schwartz, J. A., Anderson, T. J., Vykoukal, D. M., Current, K. W., Conaghy, C. Mc., Becker, F. F., and Andrews, C., "Dielectrophoresis-Based Programmable Fluidic Processors", *Lab Chip*, Vol. 4, pp. 299-309, (2004).
- [5] Fair, R. B., Srinivasan, V., Ren, H., Paik, P., Pamula, V. K., and Pollack, M. G., "Electrowetting-based on-chip Sample Processing for Integrated Microfluidics", in *Proc. IEEE Int. Electron Devices Meeting (IEDM)*, Washington DC, USA, (2003).
- [6] Srinivasan, V., Pamula, V. K., Pollack, M. G., and Fair, R. B., "A Digital Microfluidic Biosensor for Multianalyte Detection", in *Proc. IEEE, Int. Conf. Micro Electro Mech. Syst.*, pp. 327-330, Kyoto, Japan, (2003).
- [7] Kim, C. J., "Micropumping by Electrowetting", *ASME Int. Mech. Eng. Cong. and Expo. IMECE2001/ HTD-24200*, New York, USA (2001).
- [8] Yun, K. S., Cho, I. J., Bu, J. U., Kim, G. H., Jeon, Y. S., Kim, C. J., and Yoon, E. A., "Micropump Driven by Continuous Electrowetting Actuation for Low Voltage and Low Power Operations", *Proc. IEEE Conf. Micro Electro Mechanical Systems*, pp. 487-490, Interlaken, Switzerland, (2001).
- [9] Walker, S., "Modeling, Simulating, and Controlling the Fluid Dynamics of Electrowetting on Dielectric", *University of Maryland, USA*, (2007).
- [10] Decamps, C., and Coninck, J. D., "Dynamics of Spontaneous Spreading under Electrowetting Conditions", *Langmuir* Vol. 16, pp.10150-10153, (2000).
- [11] Cho, S. K., Moon, H., Fowler, J., Fan, S. K., and Kim, C. J., "Splitting a Liquid Droplet for Electrowetting-based Microfluidics", In *International Mechanical Engineering Congress and Exposition*, New York, (2001).
- [12] Verheijen H.J.J., and Prins, M.W.J., "Reversible Electrowetting and Trapping of Charge: Model and Experiments", *Langmuir* Vol. 15, pp. 6616-6620, (1999).

- [13] Shapiro, B., Moon, H., Garrell, R., and Kim, C. J., "Equilibrium Behavior of Sessile Drops under Surface Tension, Applied External Fields, and Material Variations", *J. App. Phys.* Vol. 93, pp. 5794-5811, (2003).
- [14] Bahadur, V., and Garimella, S.V., "An Energy-based Model for Electrowetting-induced Droplet Actuation", *J. Micromech. Microeng.* Vol. 16, pp. 1494-1503, (2006).
- [15] Lienemann, J., Greiner, A., and Korvink, J. G., "Modeling, Simulation, and Optimization, *IEEE Transactions on Computer-Aided Design of Integrated Circuits and Systems*", Vol. 25, pp. 234-247, (2006).
- [16] Brakke, K. A., "Surface Evolver, Version 2.26c, Technical Report", Susquehanna University, PA, (2005).
- [17] Lu, H. W., Glasner, K., Bertozzi, A. L., and Kim, C. J., "A Diffuse Interface Model for Electrowetting Droplets in a Hele-Shaw Cell", *J. Fluid Mech.*, Vol. 590, pp. 411-435, (2007).
- [18] Walker, S., and Shapiro, B., "Modeling the Fluid Dynamics of Electrowetting on Dielectric (EWOD)", *J. Microelectromechanical Syst.* Vol. 15, pp. 986-1000, (2006).
- [19] Aminfar, H., and Mohammadpourfard, M., "Lattice Boltzmann Method for Electrowetting Modeling", *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 198, pp. 3852-3868, (2009).
- [20] Wolf-Gladrow, D. A., "*Lattice Gas Cellular Automata and Lattice Boltzmann Models: an Introduction*", Springer-Verlag, Heidelberg, (2005).
- [21] Succi, S., "*The Lattice Boltzmann Equation for Fluid Dynamics and Beyond*", Oxford University Press, Oxford, (2001).
- [22] Chen, S., and Doolen, G. D., "Lattice Boltzmann Method for Fluid Flows", *Annu. Rev. Fluid Mech.*, Vol. 30, pp. 329-364, (1998).
- [23] Luo, L. S., "Theory of the Lattice Boltzmann Method: Lattice Boltzmann Models for Nonideal Gases", *Phys. Rev. E*, Vol. 62, pp. 4982-4996, (2000).
- [24] Aminfar, H., and Mohammadpourfard, M., "Lattice Boltzmann BGK Model for Gas Flow in a Microchannel", *Proc. IMechE, Part C: J. Mechanical Engineering Science*, Vol. 222, pp. 1855-1860, (2008).
- [25] Bhatnagar, P. L., Gross, E. P., and Krook, M., "A Model for Collision Processes in Gases. I. Small Amplitude Processes in Charged and Neutral One-component Systems", *Phys. Rev.*, Vol. 94, pp. 511-525, (1954).
- [26] Swift, M. R., Osborn, W. R., and Yeomans, J. M., "Lattice Boltzmann Simulation of Non-ideal Fluids", *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 75, pp. 830-833, (1995).

- [27] Swift, M. R., Orlandini, E., Osborn, W. R., and Yeomans, J. M., "Lattice Boltzmann Simulations of Liquid-gas and Binary Fluid Systems", *Phys. Rev. E*, Vol. 54, pp. 5041-5052, (1996).
- [۲۸] موسی محمدپورفرد، "روش لئیس بولتزمن برای مدلسازی و شبیه‌سازی پدیده الکترووتینگ"، رساله دکترا، دانشکده مهندسی مکانیک، دانشگاه تبریز، ایران، (۱۳۸۸).
- [29] Landau, L. D., and Lifshitz, E. M., "*Electrodynamics of Continuous Media*", Pergamon Press, Sydney, (1960).
- [30] Overbeek, J. T. G., "The Role of Energy and Entropy in the Electrical Double Layer", *Colloids and Surfaces*, Vol. 51, pp. 61-75, (1990).
- [31] Landau, L. D., and Lifshitz, E. M., "*Statistical Physics*", Pergamon Press, London, (1958).
- [32] Briant, J., Wagner, A. J., and Yeomans, J. M., "Lattice Boltzmann Simulations of Contact Line Motion. I. Liquid-gas Systems", *Phys. Rev. E*, Vol. 69, pp. 031602-031615, (2004).
- [33] Cahn, J. W., "Critical Point Wetting", *J. Chem. Phys.*, Vol. 66, pp. 3667-3672, (1977).
- [34] Gelfand, I. M., and Fomin, S. V., "*Calculus of Variations*", Prentice-Hall Inc., USA, (2000).
- [35] Zhang, J., and Kwok, D. Y., "On the Validity of the Cassie Equation via a Mean-field Free-energy Lattice Boltzmann Approach", *J. Colloid and Interface Science*, Vol. 282, pp. 434-438, (2005).
- [36] Sukop, M. C., and Daniel, T. T., "*Lattice Boltzmann Modeling: an Introduction for Geoscientists and Engineers*", Springer, Netherlands, (2007).
- [37] Keck Graduate Institute, <http://microfluidics.kgi.edu/moviegallery.htm>, (2005).
- [38] Pooley, C. M., and Furtado, K., "Eliminating Spurious Velocities in the Free-energy Lattice Boltzmann Method", *Phys. Rev. E*, Vol. 77, pp. 046702-046709, (2008).
- [39] Cooney, C. G., Chen, C.Y., Emerling, M. R., Nadim, A., and Sterling, J. D., "Electrowetting Droplet Microfluidics on a Single Planar Surface, Microfluid Nanofluid", Vol. 2, pp. 435-446, (2006).



### فهرست نمادهای انگلیسی

$Bo$	: عدد بُند
$g$	: شتاب گرانشی
$R$	: شعاع
$f$	: تابع توزیع
$t$	: زمان
$x$	: مولفه طولی
$v$	: سرعت میکروسکوپی
$u$	: سرعت ماکروسکوپی
$c$	: سرعت واحد شبکه
$P$	: فشار
$F$	: نیرو
$U$	: انرژی
$T$	: دما
$S$	: انتروپی
$V$	: حجم
$A$	: سطح

### فهرست نمادهای یونانی

$\rho$	: چگالی
$\sigma$	: تنش سطحی
$\tau$	: زمان آرامش
$\nu$	: ویسکوزیته سینماتیک
$\varepsilon$	: ثابت دی‌الکتریک
$\varphi$	: پتانسیل

## اندیس پایین

مایع	l
گاز	g
جامد	s
راستای سرعت	i
مولفه‌های سرعت	$\alpha$

## اندیس بالا

تعادلی	eq
الکتریکی	el

## جدولها

جدول ۱- پارامترهای ضریب تبدیل زمان برای پخش

مورد استفاده در شبیه سازی	$v^* = 0.166^{\dagger}$	$r^* = 16 \text{ LB unit}$
مورد استفاده در آزمایش تجربی	$v = 8.39 \times 10^{-6} \text{ m}^2/\text{sec}$	$r = 1 \text{ mm}$

جدول ۲- پارامترهای ضریب تبدیل زمان برای حرکت

مورد استفاده در شبیه سازی	$v^* = 0.133$	$r^* = 16 \text{ LB unit}$
مورد استفاده در آزمایش تجربی	$v = 1.76 \times 10^{-5} \text{ m}^2/\text{sec}$	$r = 0.55 \text{ mm}$

جدول ۳- پارامترهای ضریب تبدیل زمان برای تقسیم

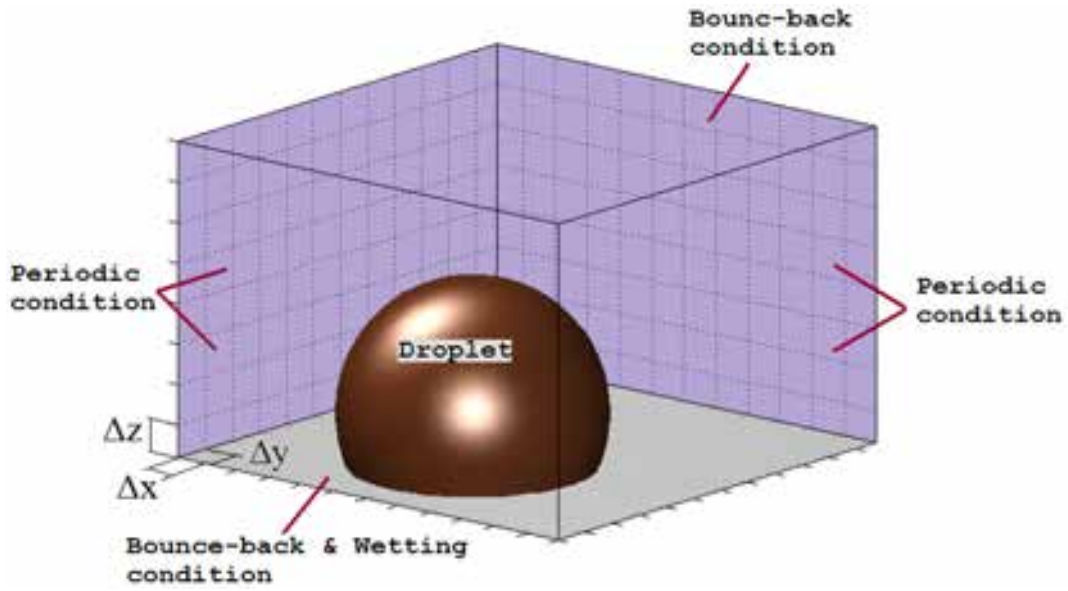
مورد استفاده در شبیه سازی	$v^* = 0.233$	$r^* = 18$
مورد استفاده در آزمایش تجربی	$v = 2.15 \times 10^{-4} \text{ m}^2/\text{sec}$	$r = 1 \text{ mm}$

جدول ۴- پارامترهای ضریب تبدیل زمان برای ترکیب

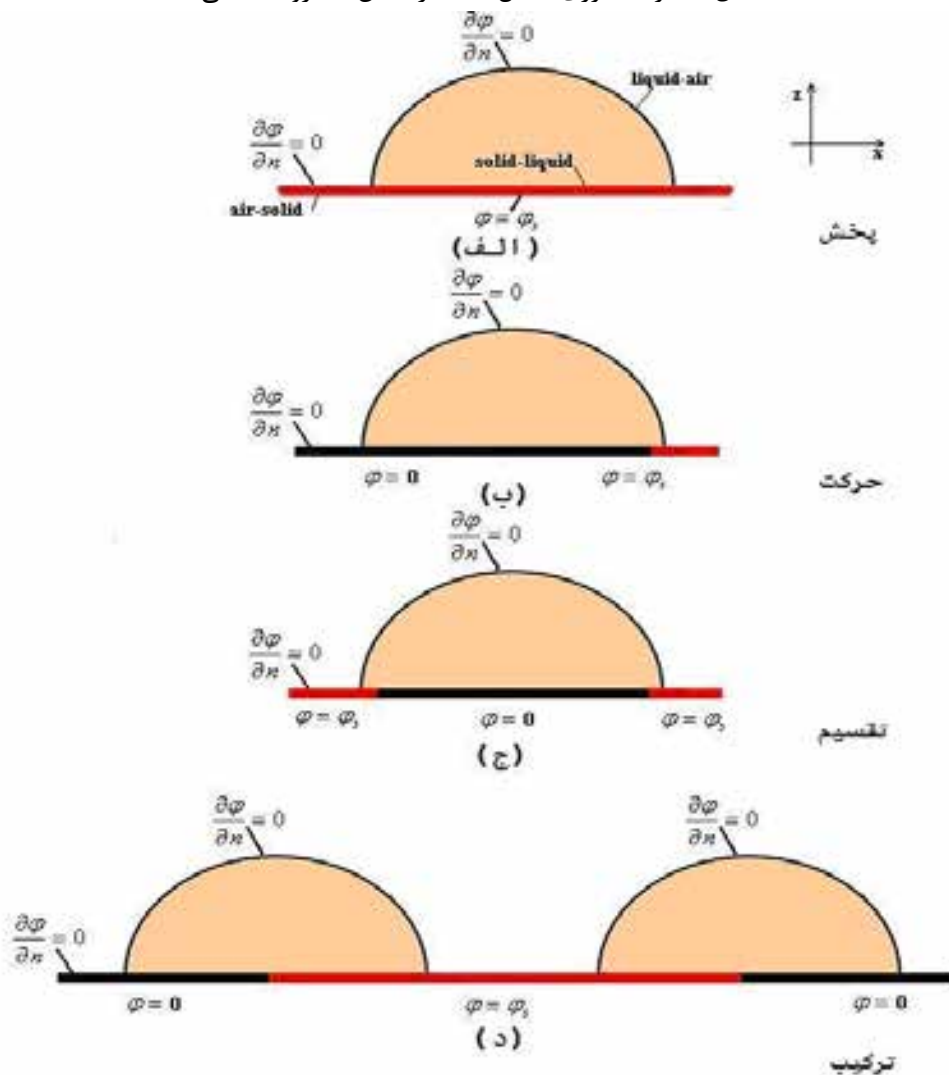
مورد استفاده در شبیه سازی	$v^* = 0.1667$	$r^* = 16 \text{ LB unit}$
مورد استفاده در آزمایش تجربی	$v = 1.04 \times 10^{-6} \text{ m}^2/\text{sec}$	$r = 1 \text{ mm}$

$$^{\dagger} \tau = 1.0 \rightarrow v^* = \left( \frac{2\tau - 1}{6} \right) \frac{\Delta r^2}{\Delta t} = 0.166$$

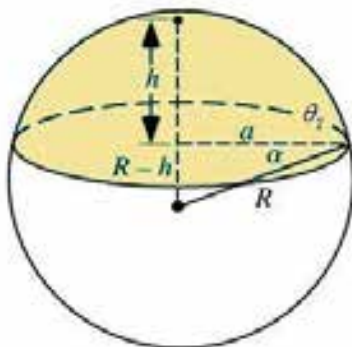
شکلها



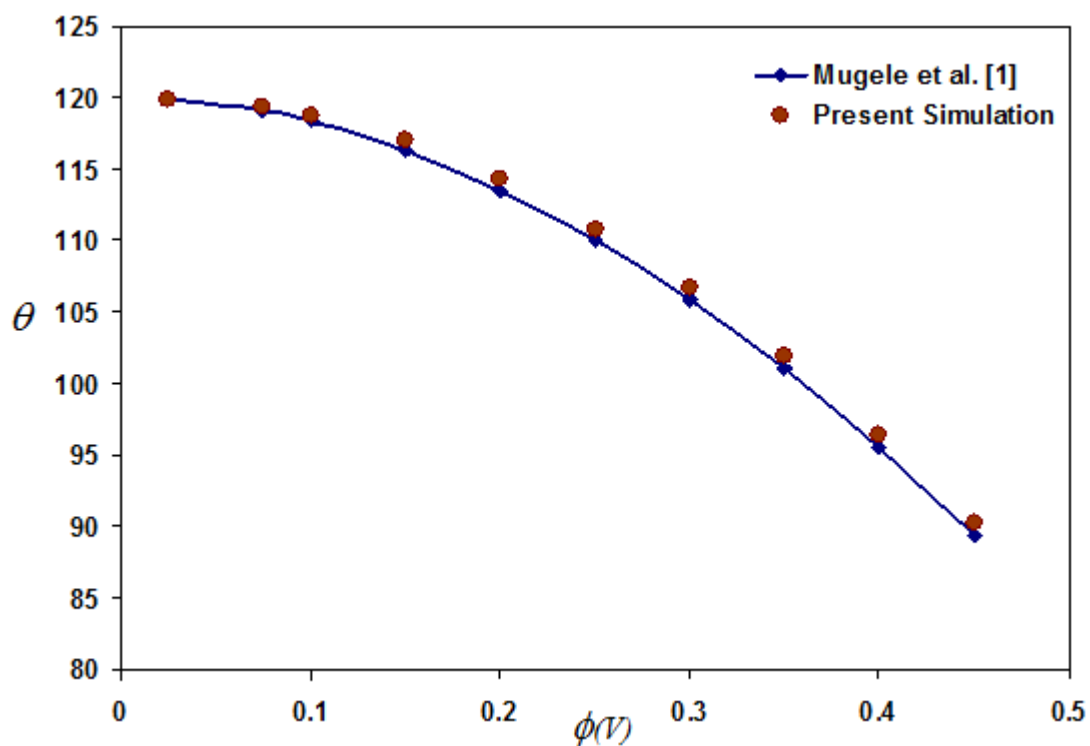
شکل ۱- شرایط مرزی اعمال شده در بخش هیدرودینامیکی



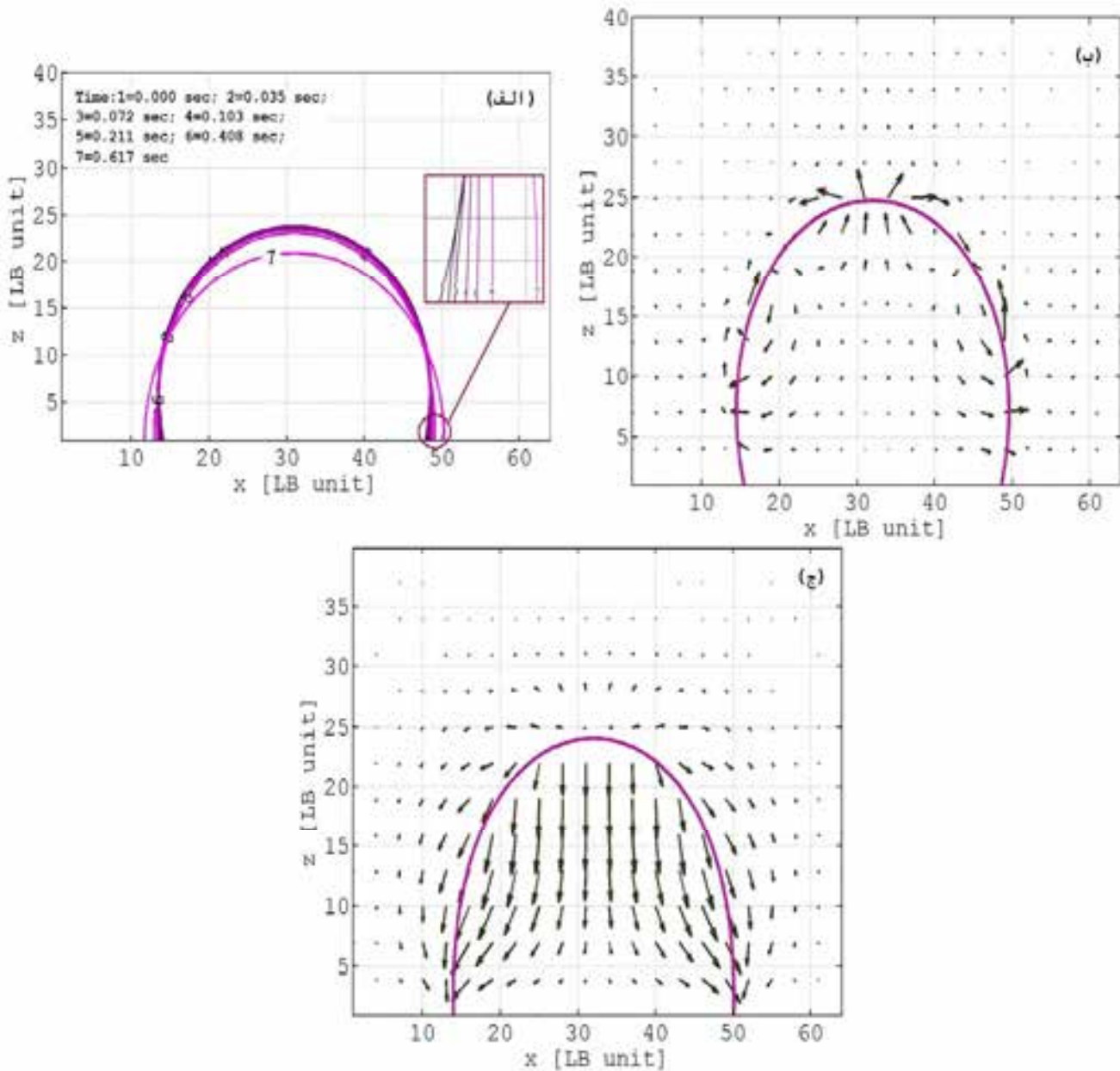
شکل ۲- چگونگی اعمال شرط مرزی پتانسیل ثابت در عملکردهای مختلف الکترووتینگ



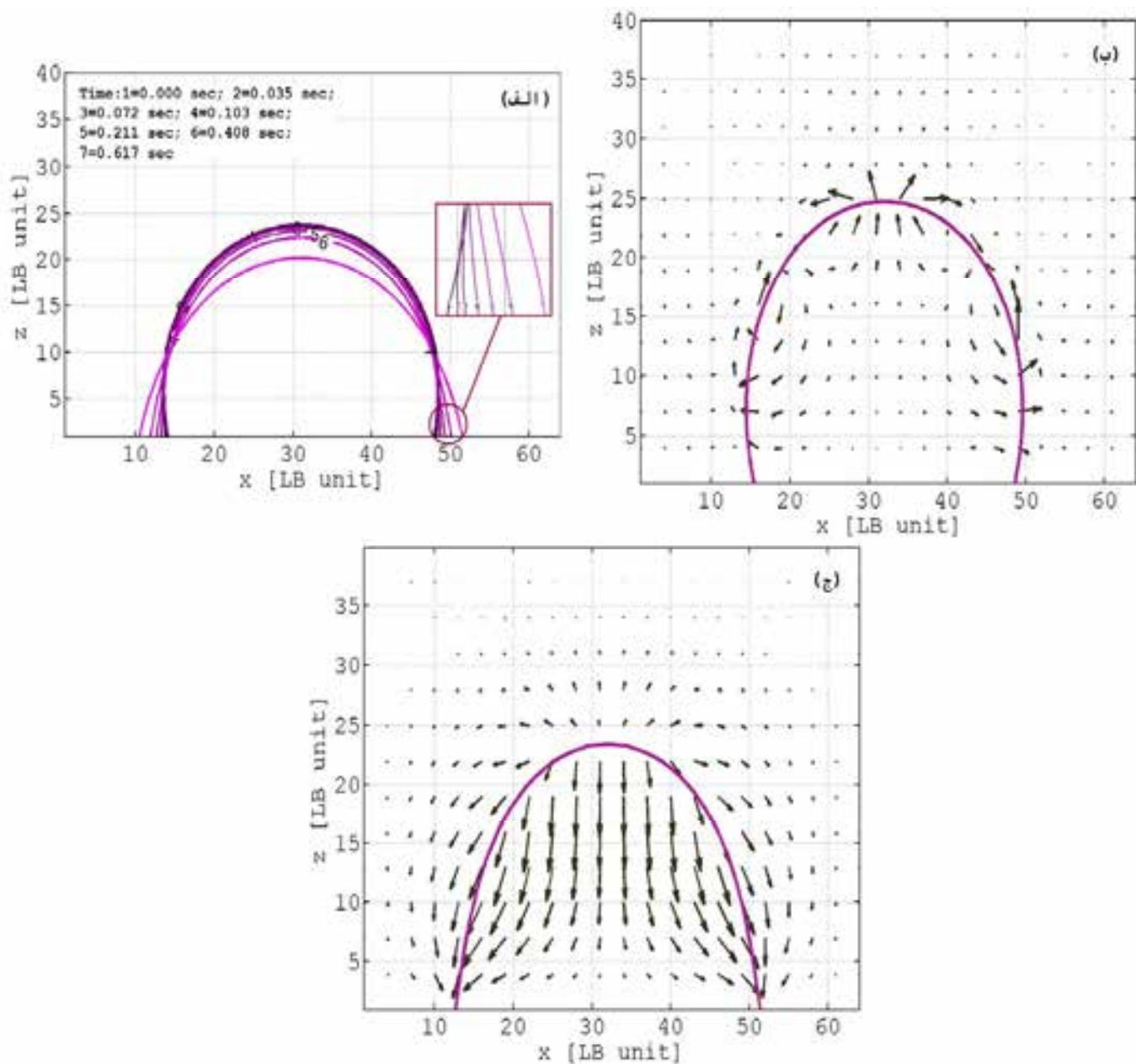
شکل ۳- چگونگی تعیین موقعیت مرکز قطره با توجه به زاویه تماس آن



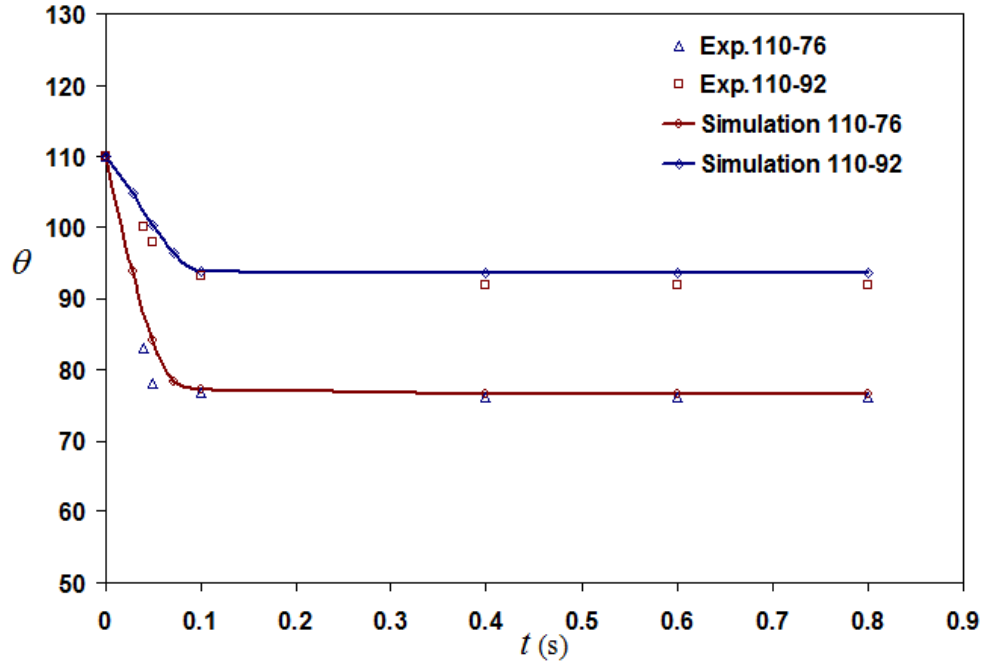
شکل ۴- تغییرات زاویه تماس با اعمال ولتاژ برای حالت  $\theta_0 = 120^\circ$



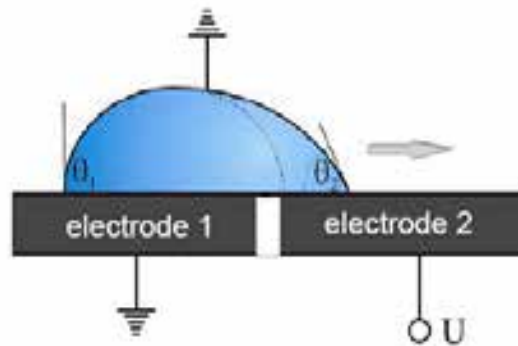
شکل ۵- چگونگی کاهش زاویه تماس در حالت  $92^\circ \rightarrow 110^\circ$  با  $\kappa = 0.001$  و  $\tau = 1.0$ ؛ الف) تغییرات با زمان. ب) میدان سرعت قبل از اعمال میدان. ج) میدان سرعت بعد از اعمال میدان.



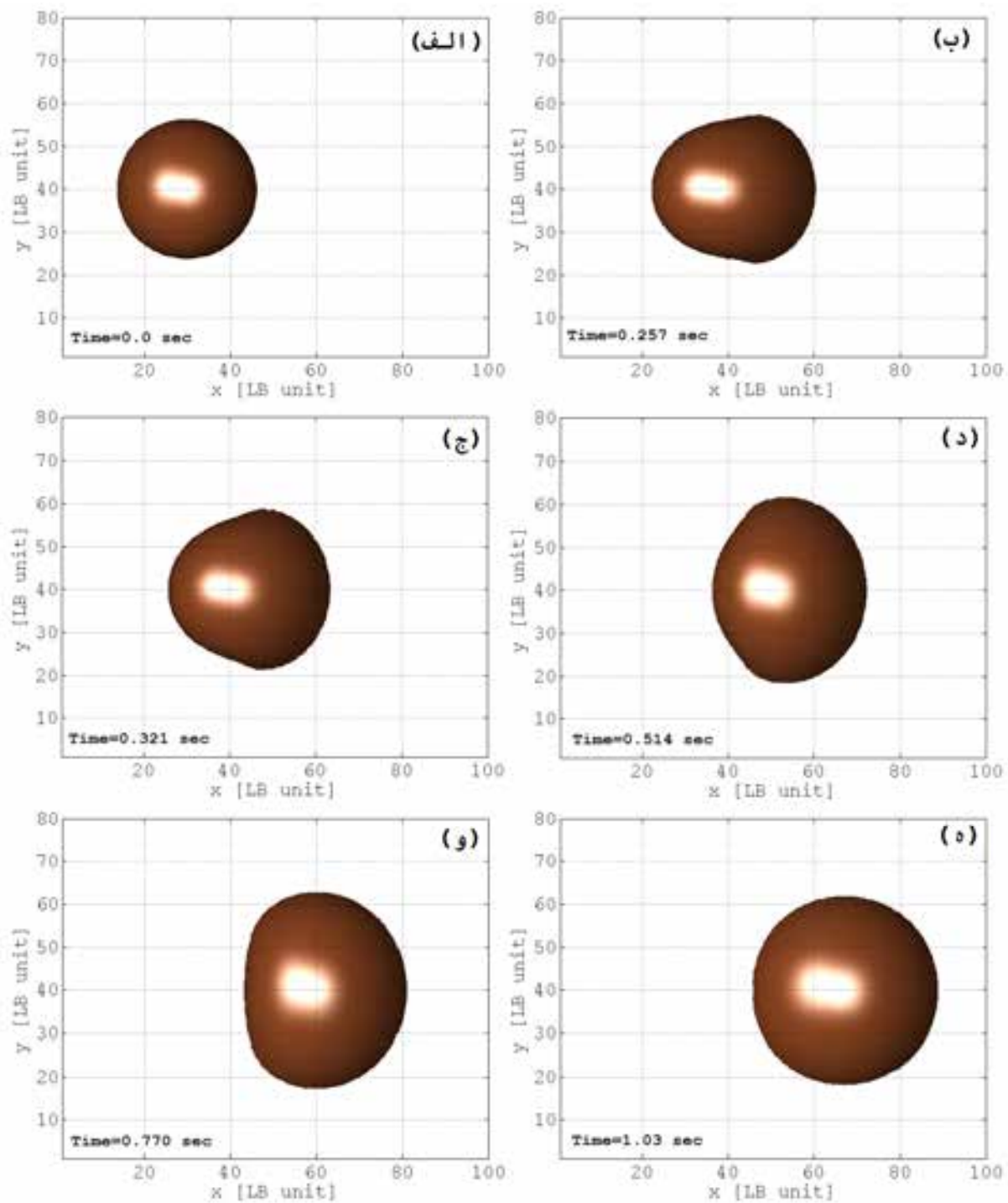
شکل ۶- چگونگی کاهش زاویه تماس درحالت  $\theta: 110^\circ \rightarrow 76^\circ$  با  $\kappa=0.001$  و  $\tau=1.0$  (الف) تغییرات با زمان. (ب) میدان سرعت قبل از اعمال میدان. (ج) میدان سرعت بعد از اعمال میدان.



شکل ۷- مقایسه رفتار زاویه تماس در زمان برای دو کاهش مختلف با نتایج تجربی

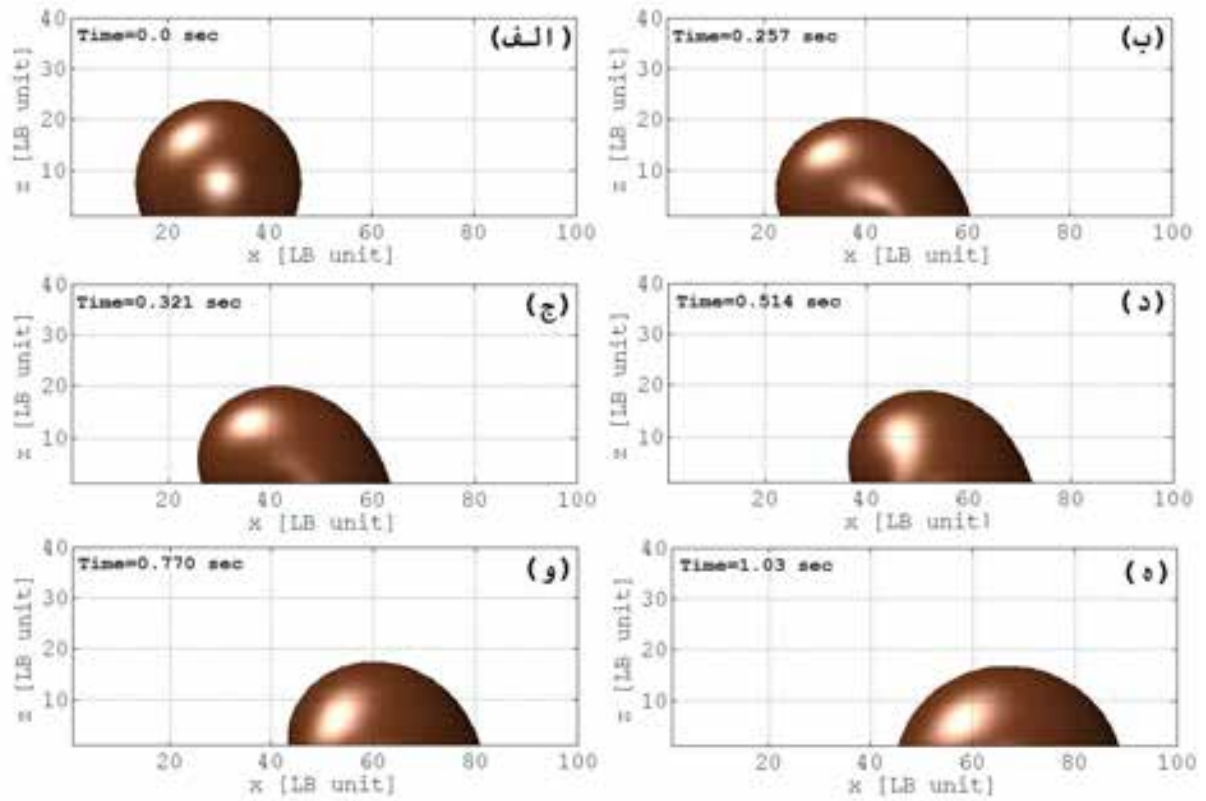


شکل ۸- طرحواره‌ی از چگونگی ایجاد حرکت در قطره با اعمال میدان الکتریکی

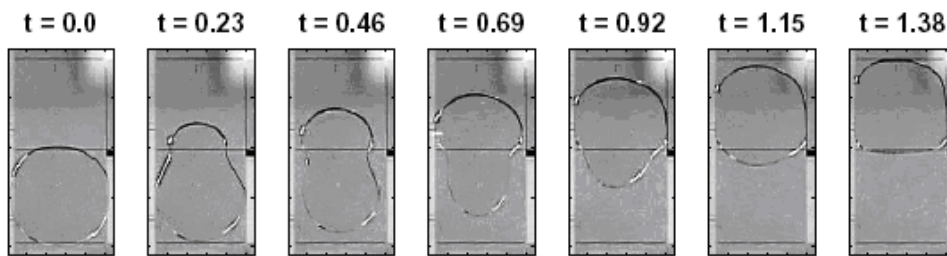


شکل ۹- شبیه سازی تغییر شکل و حرکت قطره در زمان‌های مختلف در اثر اعمال ولتاژ، دید از بالا با  $\tau=0.9$  و  $\kappa=0.001$

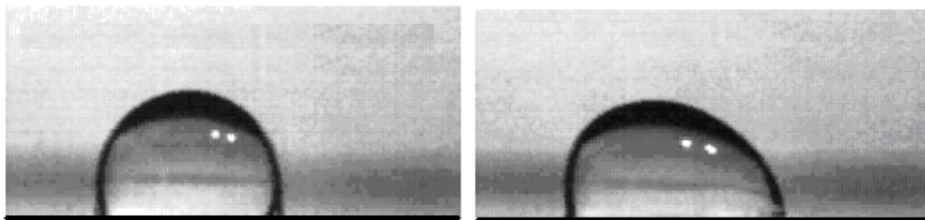




شکل ۱۰- شبیه سازی تغییر شکل و حرکت قطره در زمان های مختلف در اثر اعمال ولتاژ، دید از جانب با  $\tau=0.9$  و  $\kappa=0.001$



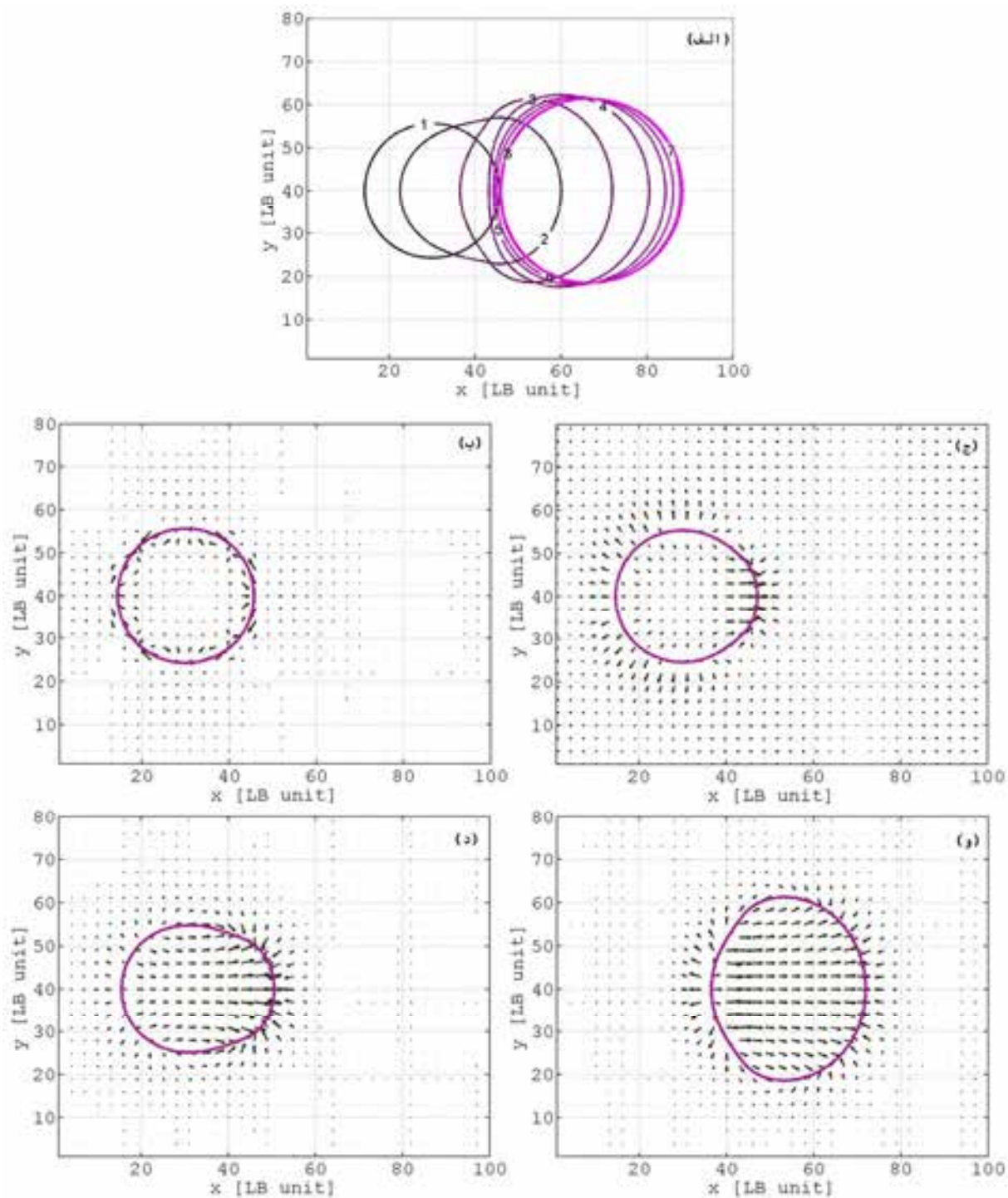
(الف)



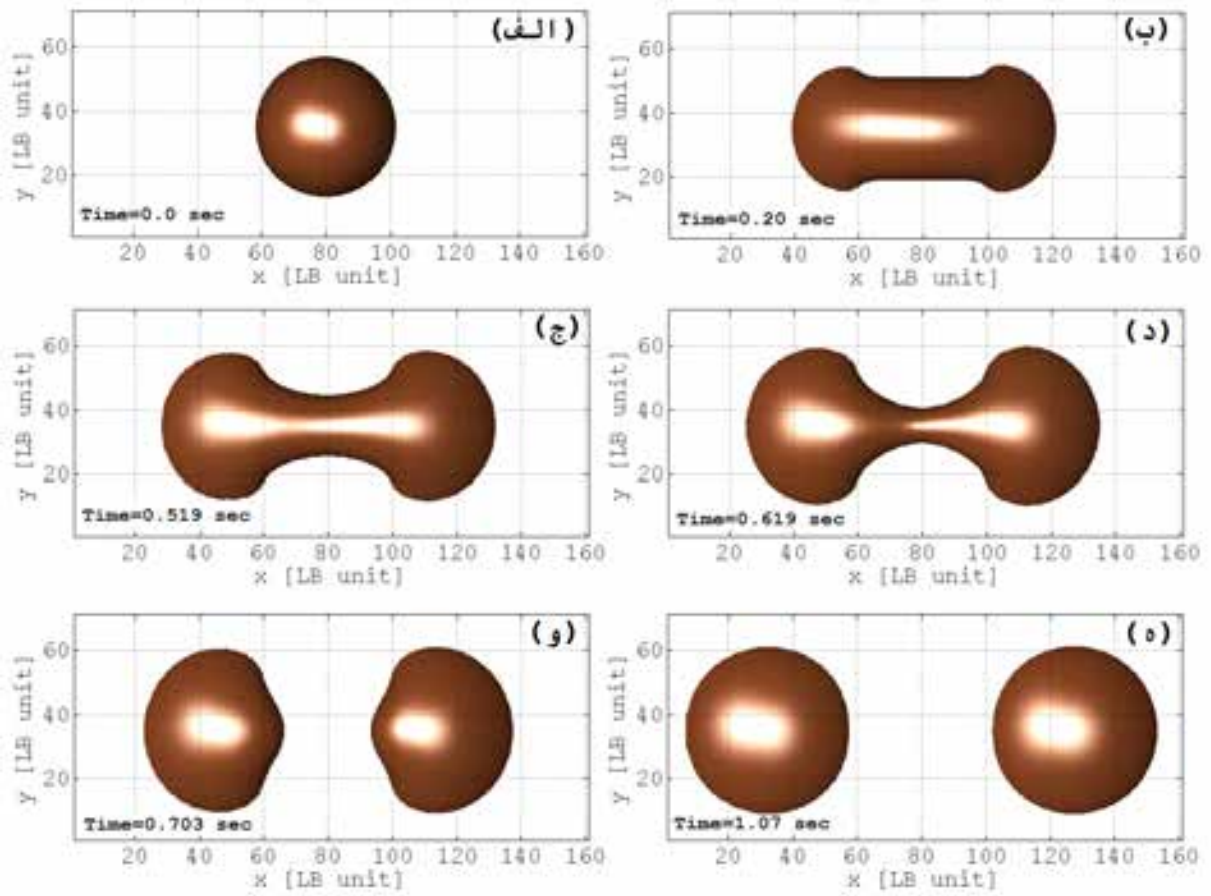
(ب)

شکل ۱۱- نتایج تجربی برای چگونگی تغییر شکل و حرکت قطره: الف) نمای دید از بالا در زمان های مختلف، در اثر اعمال

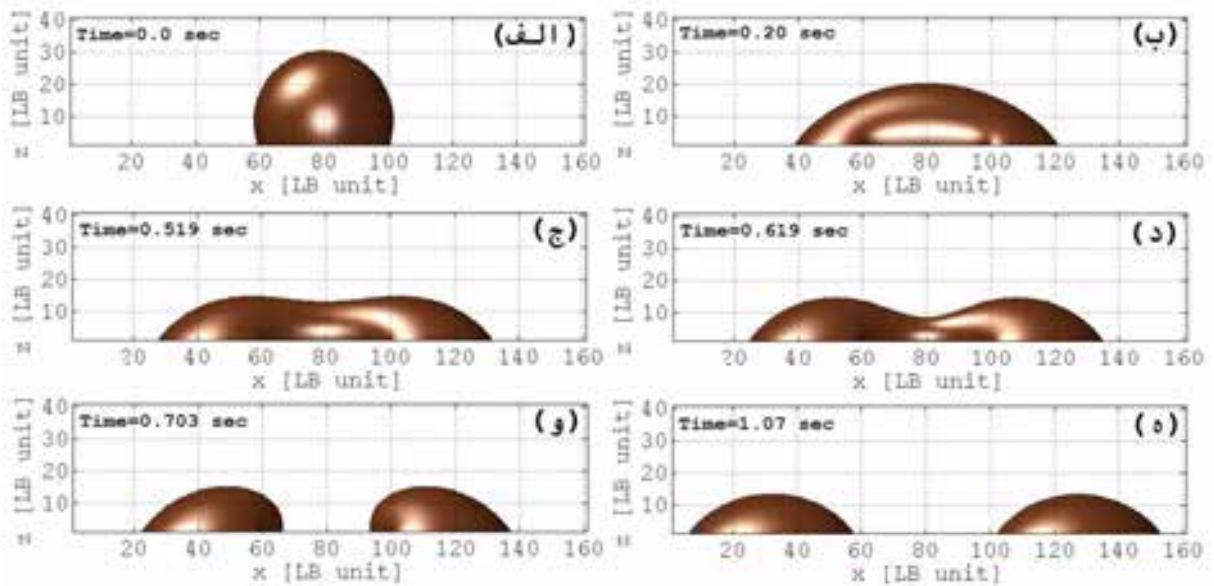
ولتاژ [  $76^\circ \rightarrow 110^\circ \theta$  : ۱۷]. ب) نمای جانبی [ ۳۷].



شکل ۱۲- حرکت قطره در نمای دید از جانب آن: الف) نمایش فرآیند حرکت از ابتدا تا انتها. ب) میدان سرعت قبل از شروع حرکت. ج) شروع حرکت در بخشی از قطره به سبب اعمال میدان. د) پیشروی تغییر میدان سرعت به داخل قطره. و) کاهش سرعت در قسمت جلو قطره

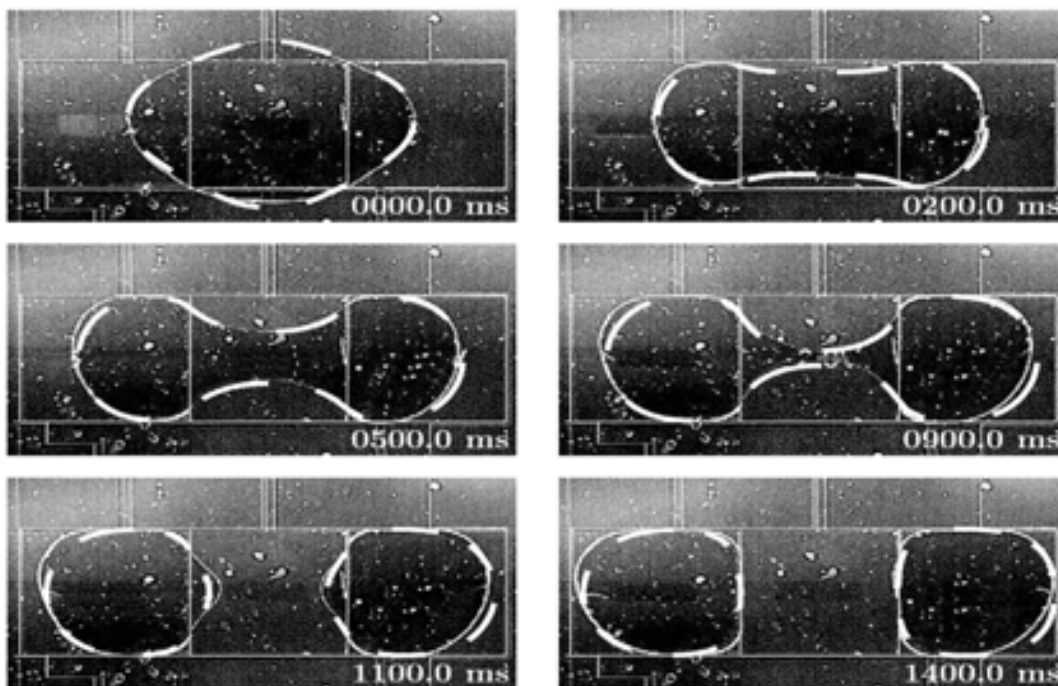


شکل ۱۳- شبیه سازی تقسیم یک قطره با استفاده از میدان الکتریکی؛ دید از بالا با  $\tau=1.0$  و  $K=0.001$

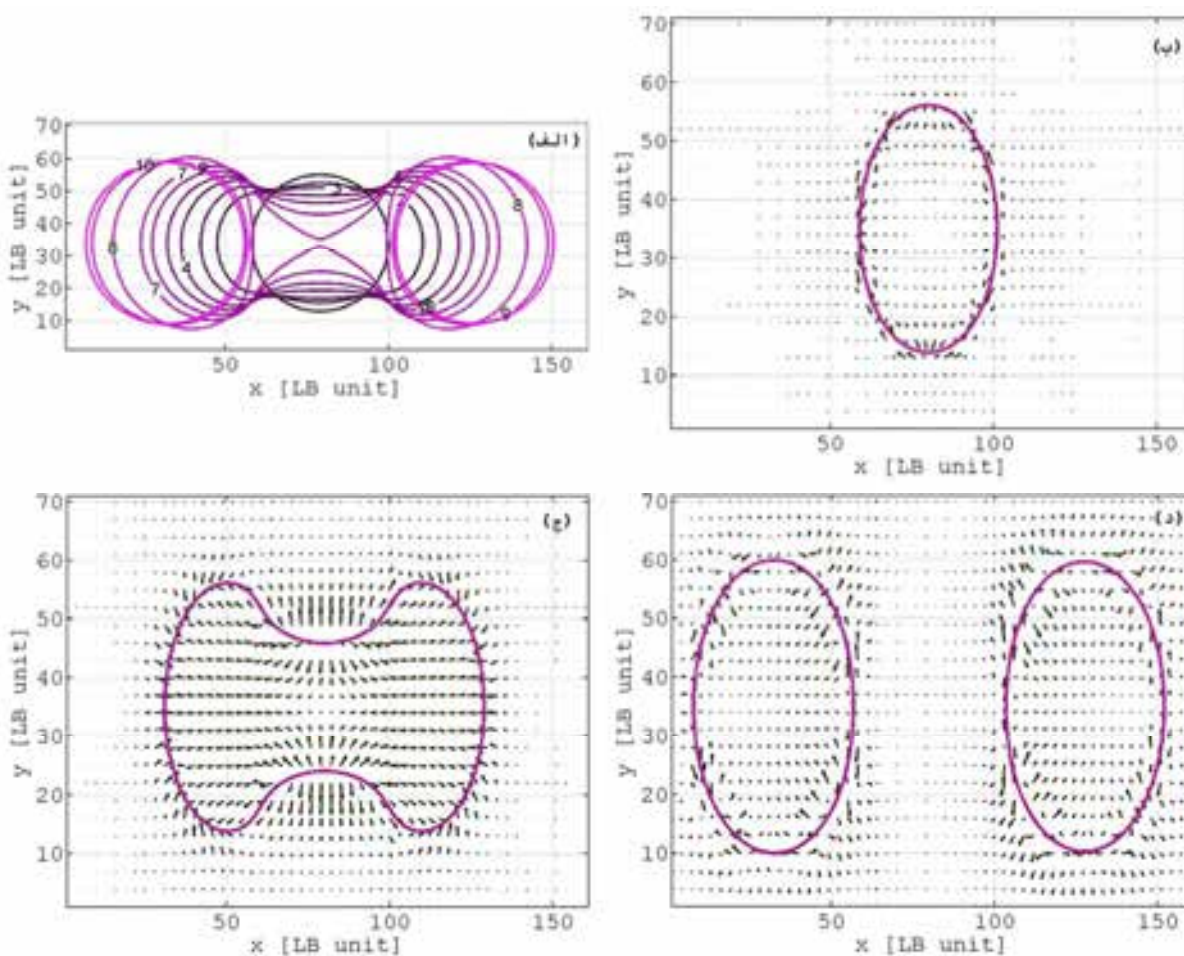


شکل ۱۴- شبیه سازی تقسیم یک قطره با استفاده از میدان الکتریکی؛ دید از جانب با  $\tau=1.2$  و  $K=0.001$

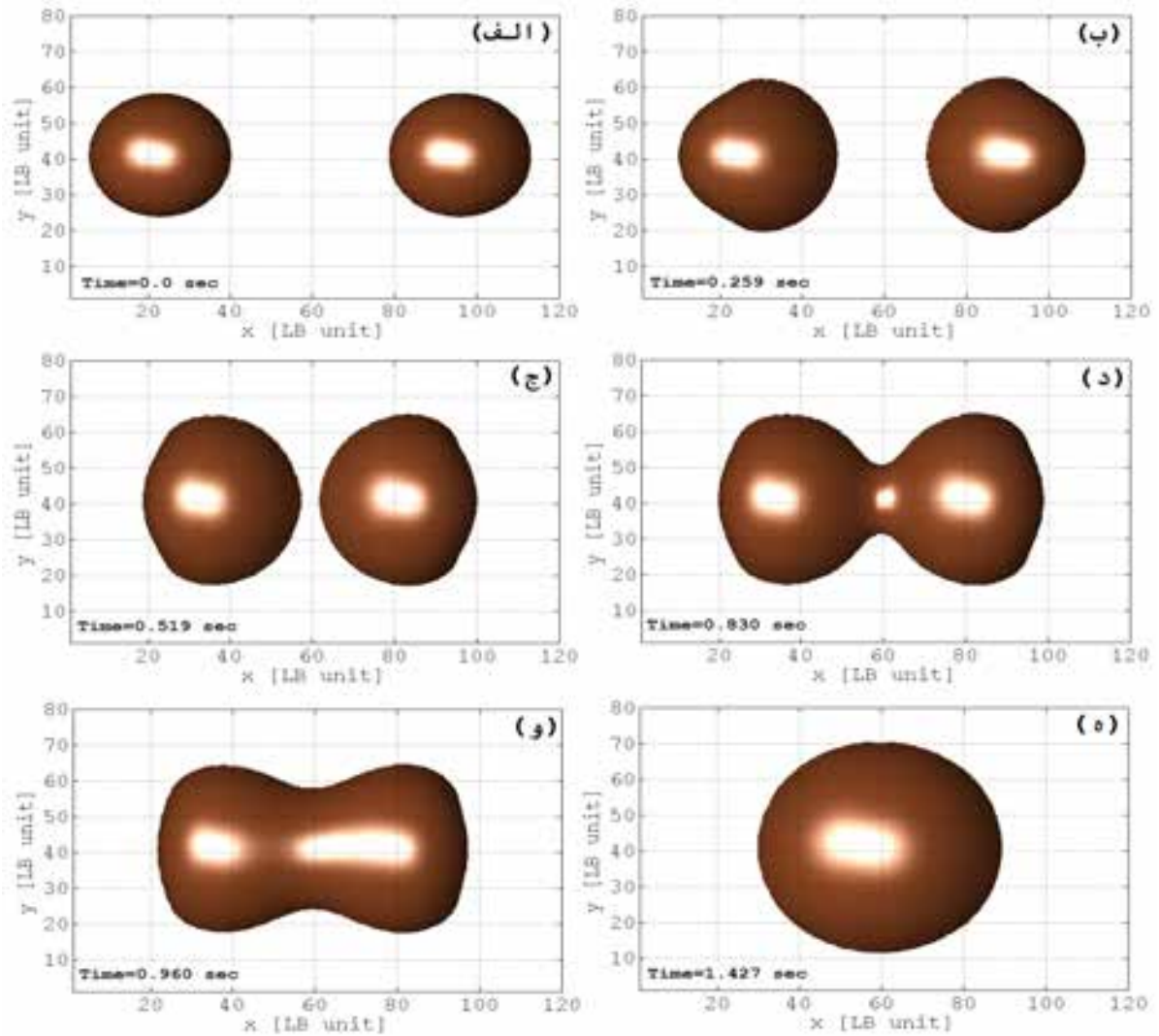




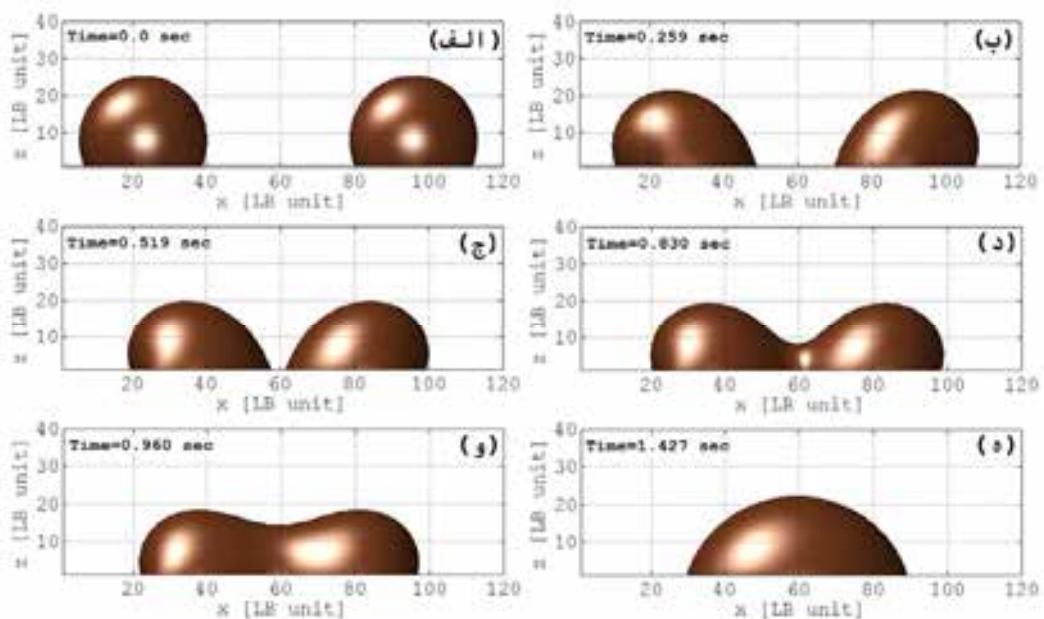
شکل ۱۵- نتایج تجربی تقسیم یک قطره با استفاده از میدان الکتریکی، در اثر اعمال ولتاژ  $64^\circ \rightarrow 107^\circ \theta$ .



شکل ۱۶- تقسیم قطره در نمای دید از بالای آن: الف) نمایش فرآیند تقسیم از ابتدا تا انتها. ب) میدان سرعت قبل از اعمال میدان. ج) میدان سرعت در یک زمان میانی. د) میدان سرعت پس از تقسیم

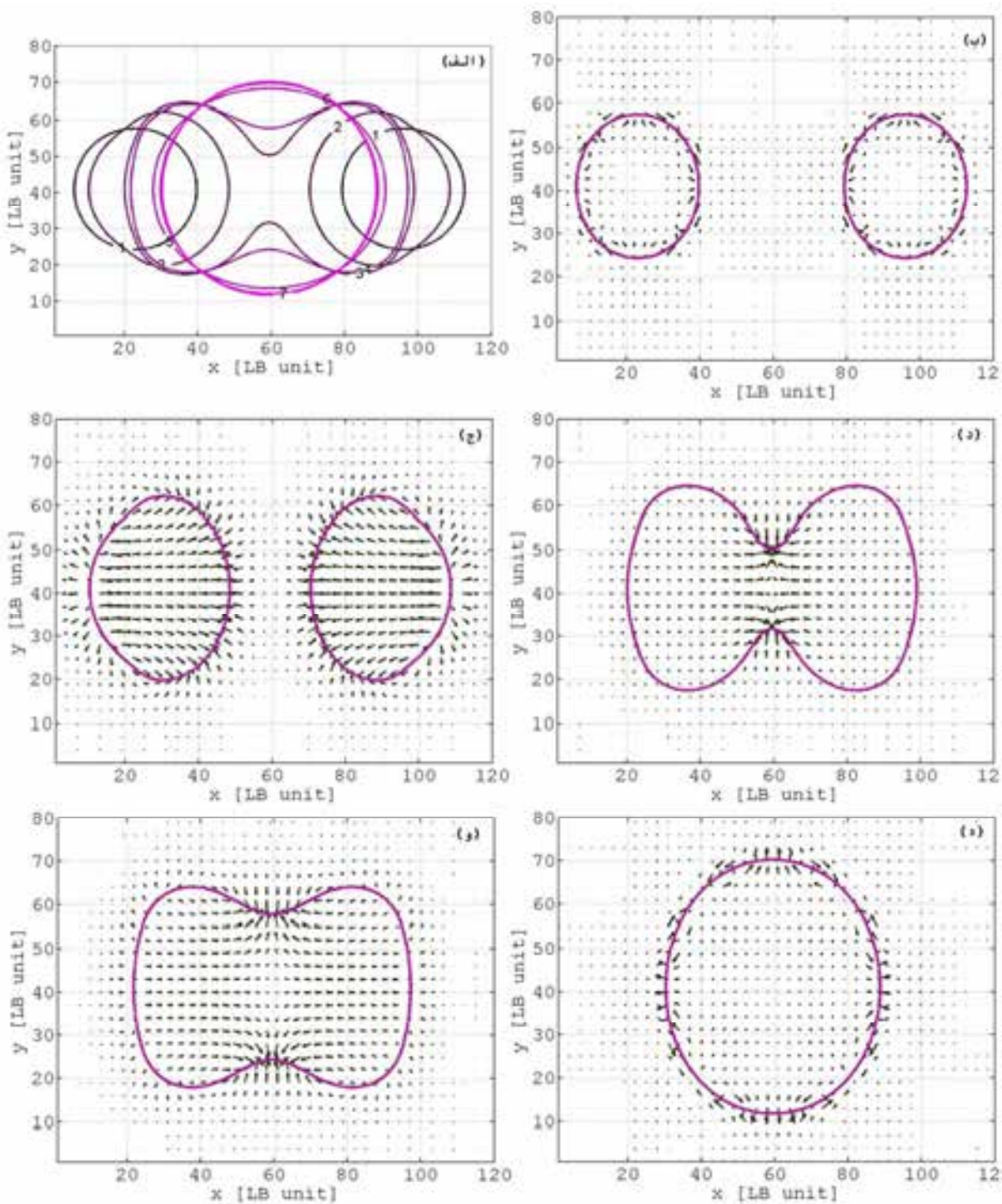


شکل ۱۷- شبیه سازی ترکیب دو قطره با استفاده از میدان الکتریکی؛ دید از بالا با  $\kappa=0.001$  و  $\tau=0.52$

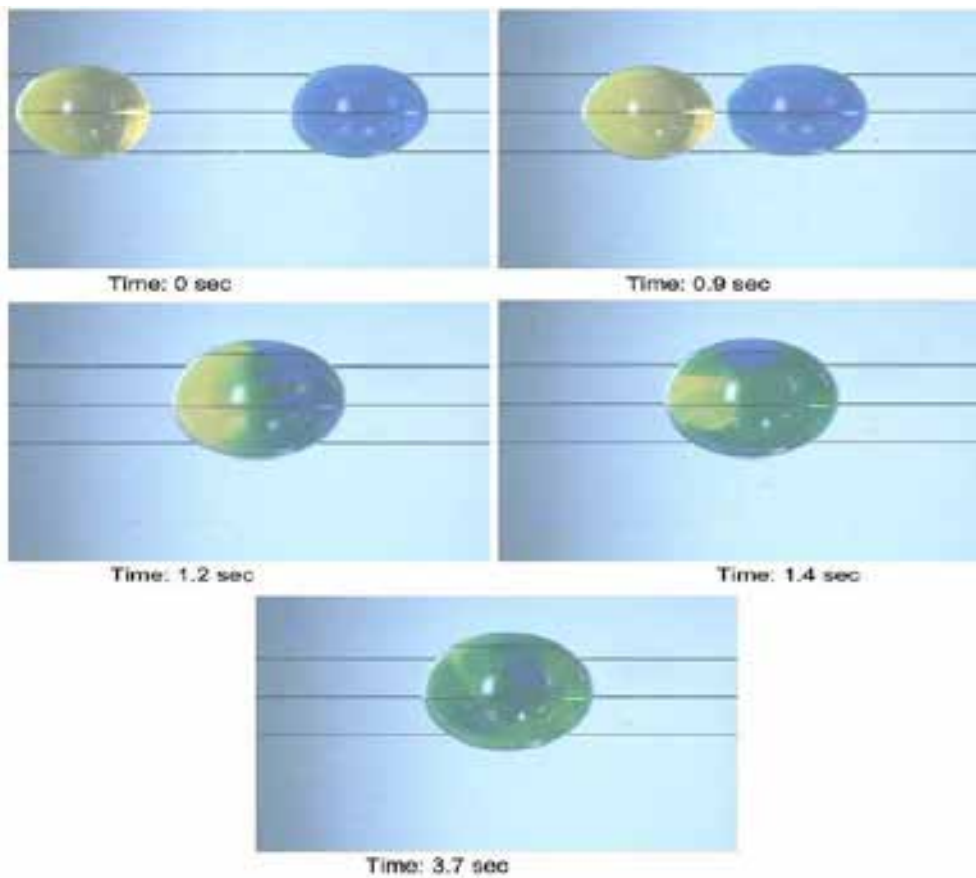


شکل ۱۸- شبیه سازی ترکیب دو قطره با استفاده از میدان الکتریکی؛ دید از جانب با ولتاژ،  $\kappa=0.001$  و  $\tau=0.52$

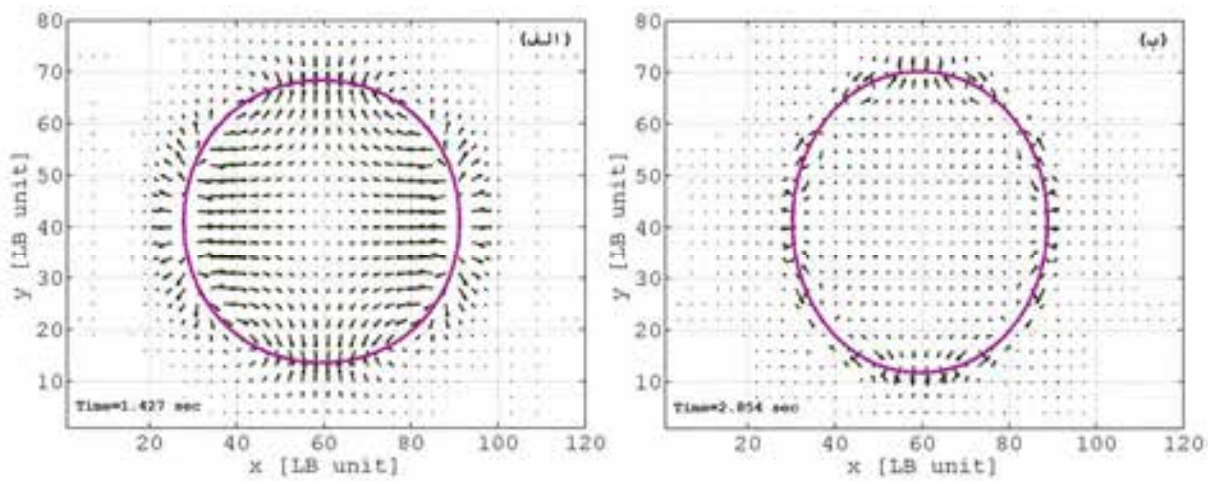




شکل ۱۹- ترکیب دو قطره در نمای دید از بالای آن: الف) نمایش فرآیند ترکیب از ابتدا تا انتها. ب) میدان سرعت قبل از اعمال میدان. ج) میدان سرعت قبل از برخورد دو قطره. د) میدان سرعت در هنگام برخورد. و) میدان سرعت در هنگام ترکیب. ه) میدان سرعت پس از ترکیب.



شکل ۲۰- نتایج تجربی برای ترکیب دو قطره با استفاده از میدان الکتریکی، در اثر اعمال ولتاژ  $71^\circ \rightarrow 113^\circ$ .



شکل ۲۱- تفاوت میدان سرعت حالت تعادلی و غیرتعادلی: الف) بلافاصله پس از ترکیب. ب) در حالت تعادل

## Abstract

Electrowetting has been implemented in modern applications in the area of Micro and Nano-Electro-Mechanical Systems (MEMS and NEMS). In the electrowetting phenomenon, electric forces which are generated because of interactions between electric field and surface charges, can lead to modify surface wetting properties. In the present study, in addition to error analysis for free energy-based LB method, the free energy based LB method which has been recently extended by the authors for modeling and simulation of electrowetting phenomenon, is applied to study of all electrowetting applications (i.e., spreading, motion, splitting and merging droplets). Comparing the results with the analytical and experimental results respectively shows good agreement between them.