

Mechanika płynów W mikro i nano skali

Tomasz A. Kowalewski
Zakład Mechaniki i Fizyki Płynów
IPPT PAN, Warszawa
<http://fluid.ippt.gov.pl/>

Mechanika płynów

Główne gałęzie rozwoju w XXI wieku



- Aerodynamika, atmosfera
problem:
turbulencja i skala



- *Microfluidics* – czyli
Nano-mikro-bio przepływy
problem:
wpływ nowych zjawisk,
często nie zidentyfikowanych
lub nie posiadających
precyzyjnego opisu
fizycznego



- Aktualne wyzwanie: rozwój metod numerycznych i metod eksperymentalnych w mikroprzepływach

Mikroświat a mechanika płynów

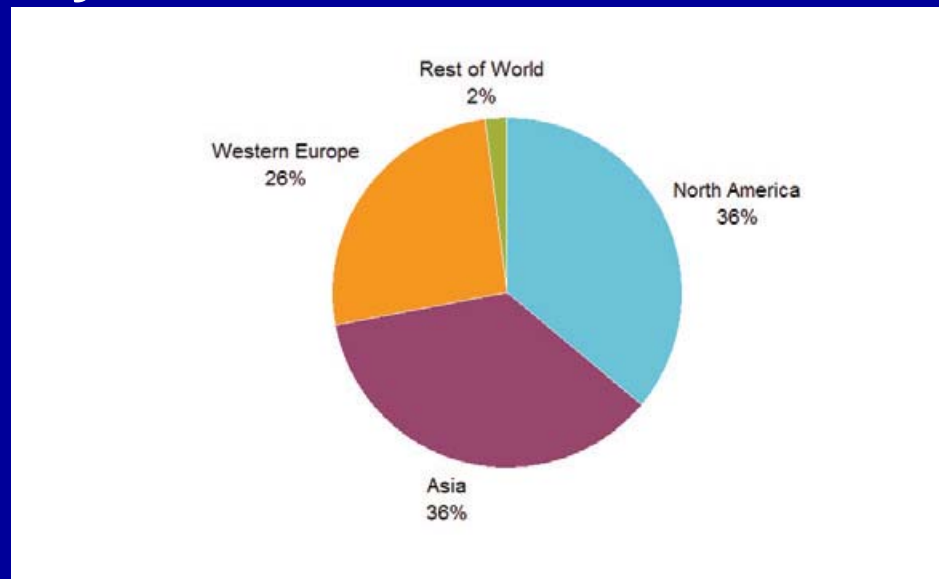
- ✓ Nanotechnologia, czyli „There’s Plenty of Room at the Bottom! *R.P. Feynman 1959*
- ✓ Funkcje systemów biologicznych są oparte na mechanizmach oddziaływań w skali nano z płynami, wykorzystują przepływy do komunikacji i sygnalizacji.
- ✓ Systemy bio-analazy, zarówno w makro skali jak i obecnie budowane mikro-analizatory (microTAS, Lab-on-Chip) to wielofunkcyjne układy przepływowe
- ✓ Nowe zjawiska związane z manipulacją pojedynczymi makromolekułami
- ✓ Samoorganizacja – podstawa budowy materiału biologicznego
- ✓ Nanorurki, nanowłókna, nanodruty, nanocząstki jako zawiesiny w płynach – i ich wykorzystanie jako sensory biochemiczne, materiał biomedycyny regeneracyjnej, antybakteryjne opatrunki



Konieczność połączenia wielu skal zjawisk i sprzężenie mechanizmów mechanicznych, fizycznych i chemicznych

Nanotechnologia uznana za wyzwanie dla nauki XXI wieku

- **2001** National Nanotechnology Initiative (USA)
<http://www.nano.gov> ~ \$1.3mld/rok
- **2003** NMP priority: Nano-technologies and Nano-science:
<http://cordis.europa.eu/nanotechnology/> ~ 1.4mld € / rok –
programy EU
- **2005** suma wydatków B+R \$10bln !



Nanonauka: 1 nm – 100 nm

- Nauka o systemach, materiałach, procesach i urządzeniach na własności czy funkcjonowanie których decydujący wpływ ma efekt wymiaru „nano”.

- Nanotechnologia

- Mikro i Nanomechanika

- Mikroprzepływy

- Nanoprzepływy

- Nanopłyyny

Nanomedycyna

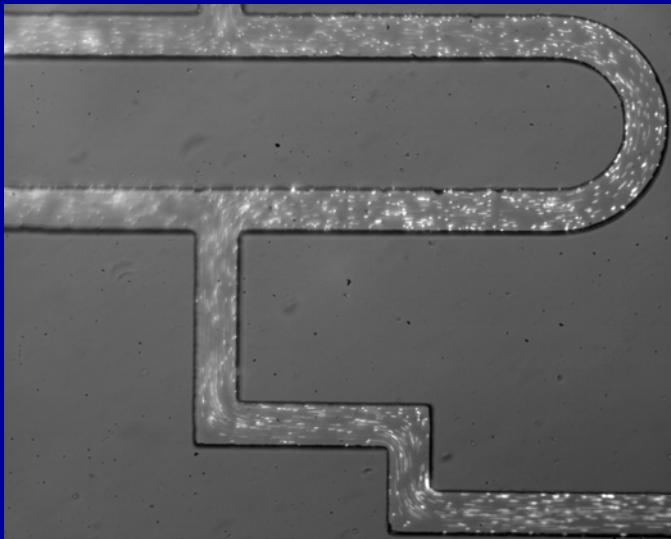
Nanooptyka

Nanoelektronika

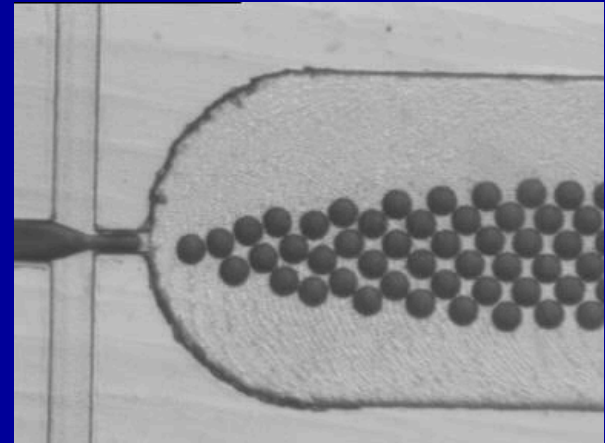
Nanometrologia

Niektóre problemy w mikroprzepływach

- ✓ Mała liczba Reynoldsa – jak doprowadzić do mieszania w mikroskali
- ✓ Efekty powierzchniowe \gg objętościowych – jak zmusić ciecz do wypełnienia kanału
- ✓ Opór lepki i spadek ciśnienia - jak wymusić przepływ?
- ✓ Przepływ wielofazowy – jak uwzględnić oddziaływania hydrodynamiczne + elektrostatyczne + magnetyczne w obecności ścianek
- ✓ Sortowanie, mikrodozowanie, enkapsulacja

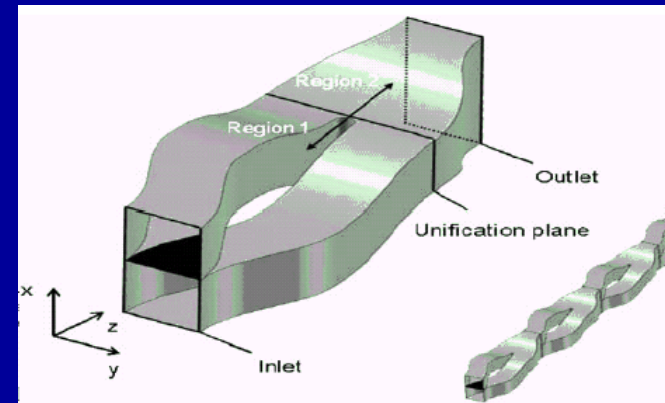
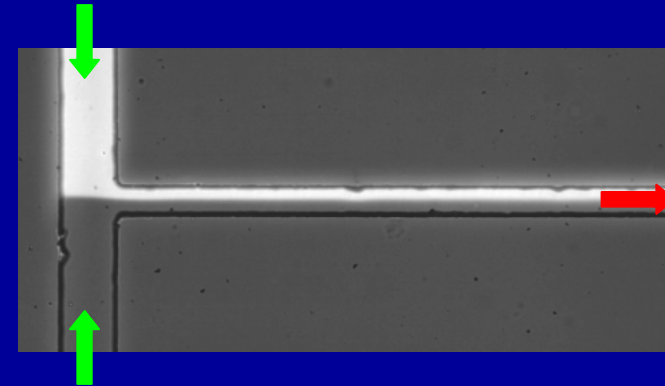
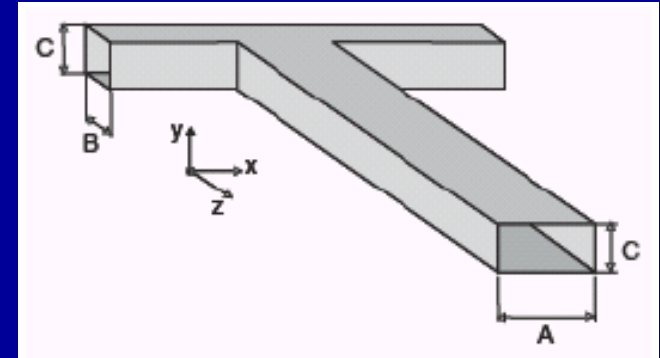


150 μm

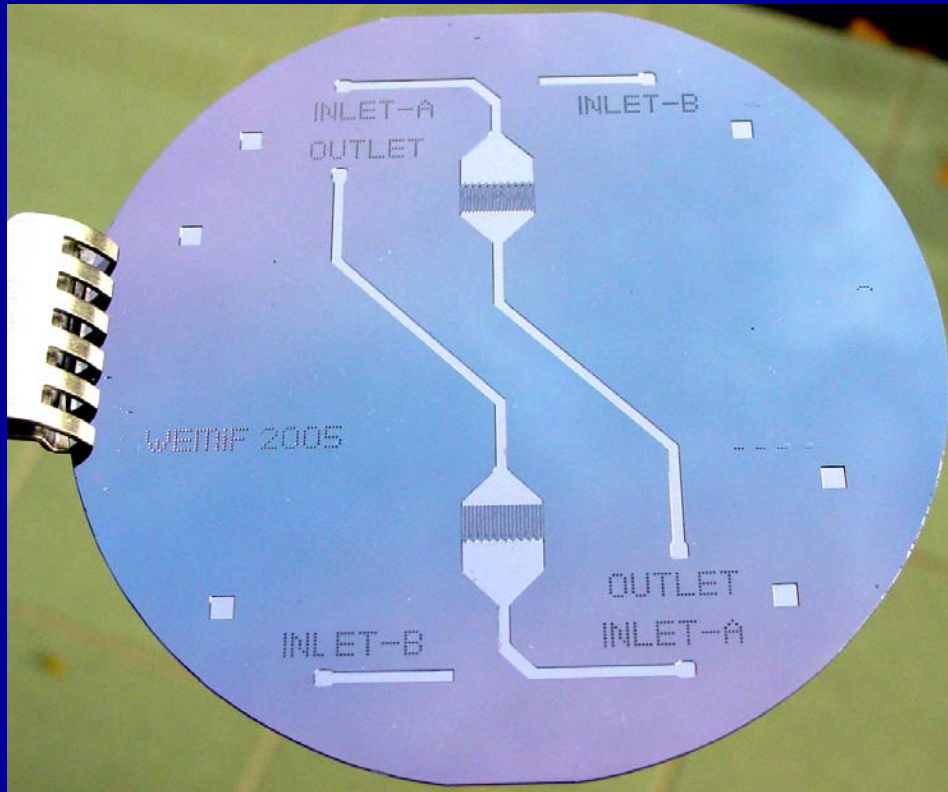


Mieszalniki mikroprzepływowe

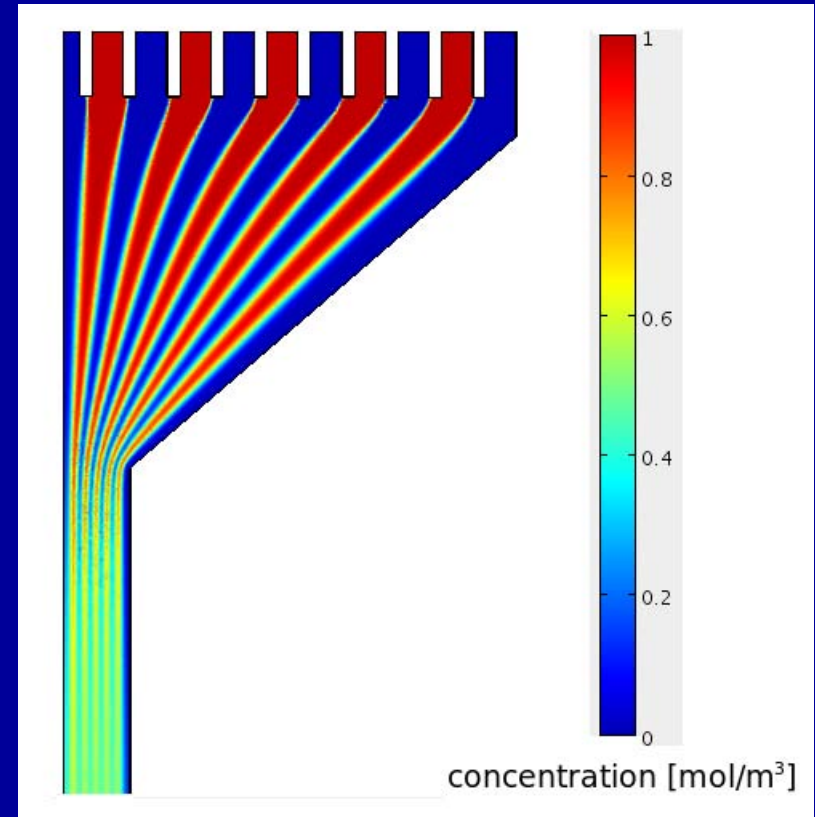
- intensyfikacja procesu mieszania – jedno z głównych zagadnień w wymianie ciepła i masy
 - inżynieria komputerowa
 - chemia
 - biologia i medycyna
- urządzenia mikro-przepływowe:
 - małe wymiary
 - niewielkie prędkości
- brak turbulencji
- tylko dyfuzja
- tradycyjne mikro-miksery – duże opory przepływu



Mieszalniki mikroprzepływowe

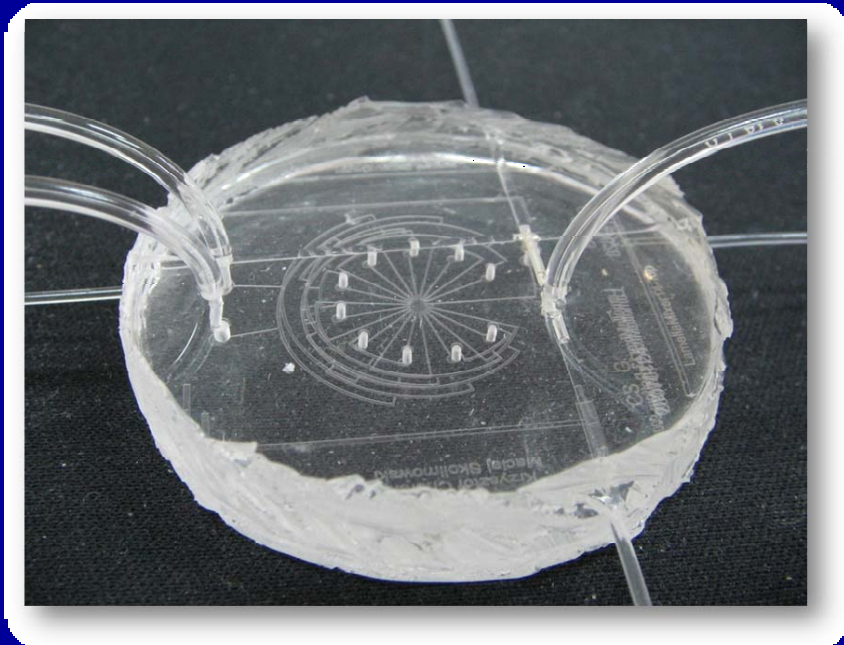


PWr – mikser na podłożu krzemowym

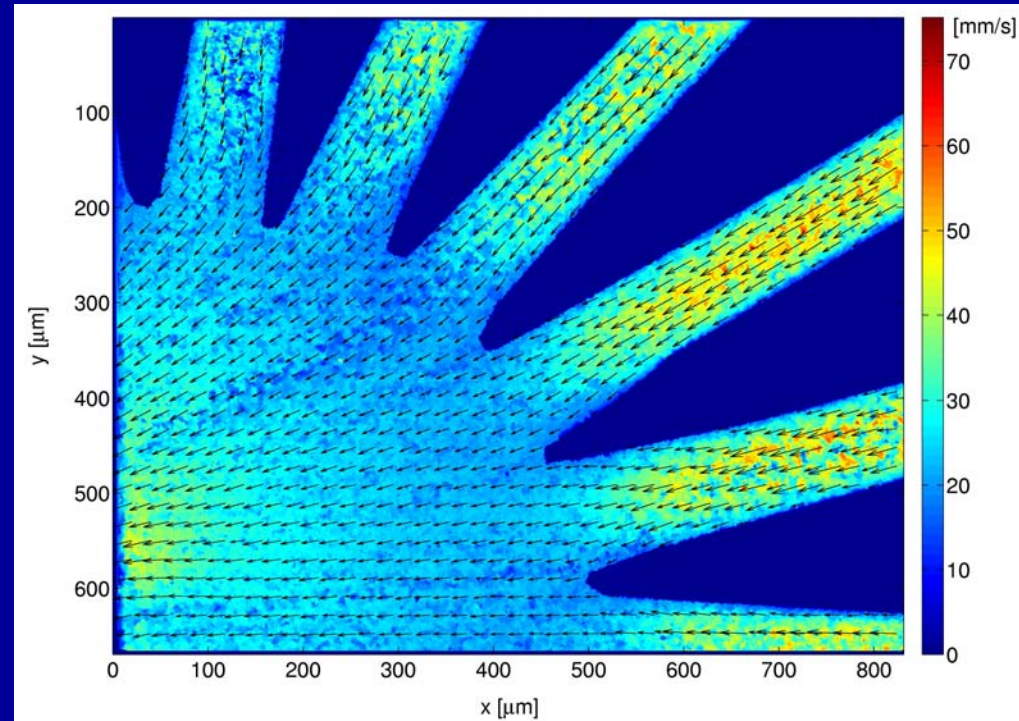


IPPT – symulacja numeryczna

Mieszalniki mikroprzepływowe



PW – mikser wykonany technika PDMS



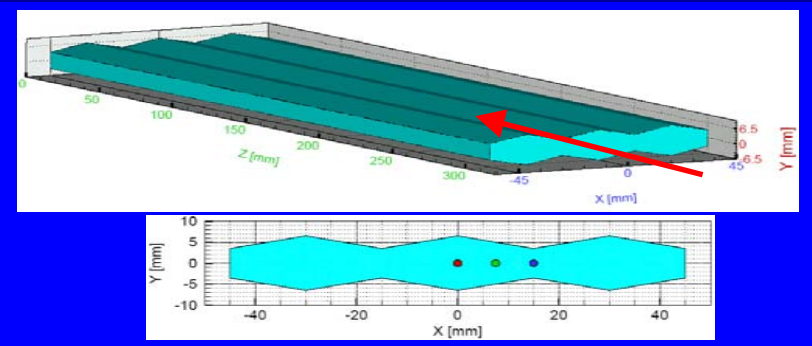
IPPT – analiza pola prędkości

Mieszalniki mikroprzepływowe

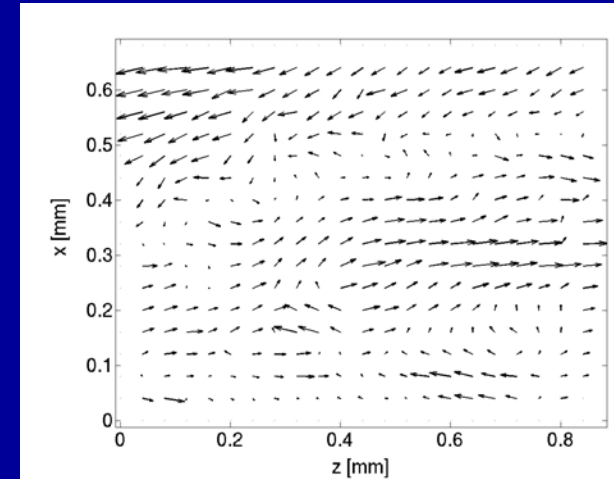
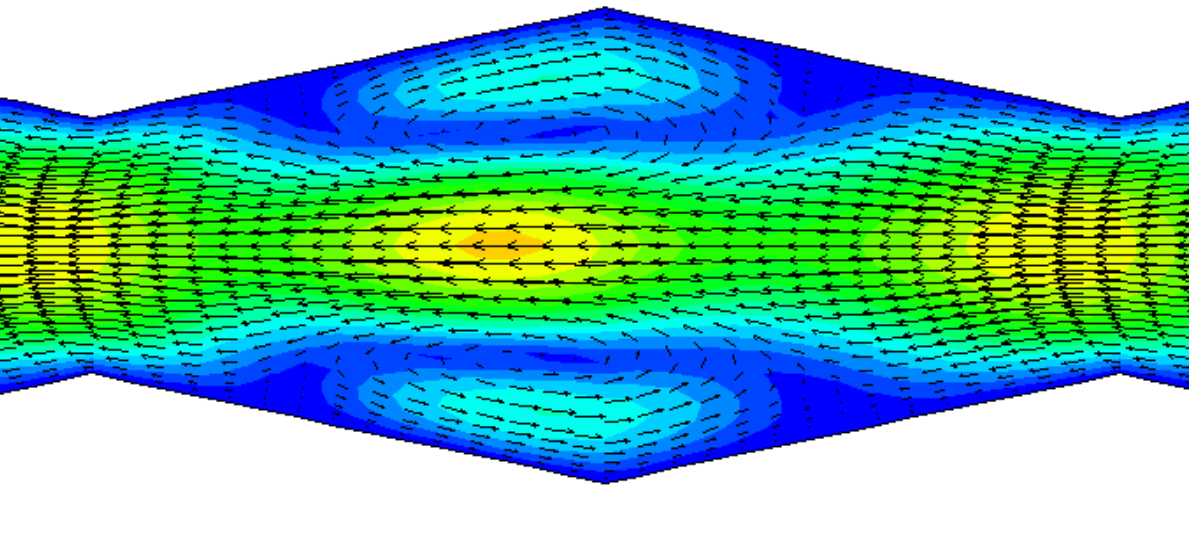
Analiza stabilności

Symulacja numeryczna

Eksperyment

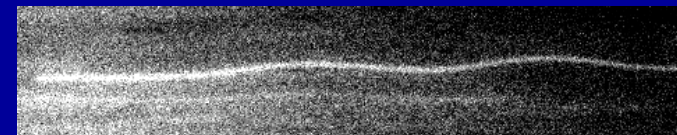


normalized V_{xy} : 0.005 0.015 0.025 0.035 0.045 0.055 0.065 0.07



PW – analiza stabilności
IPPT – analiza numeryczna i eksperymentalna

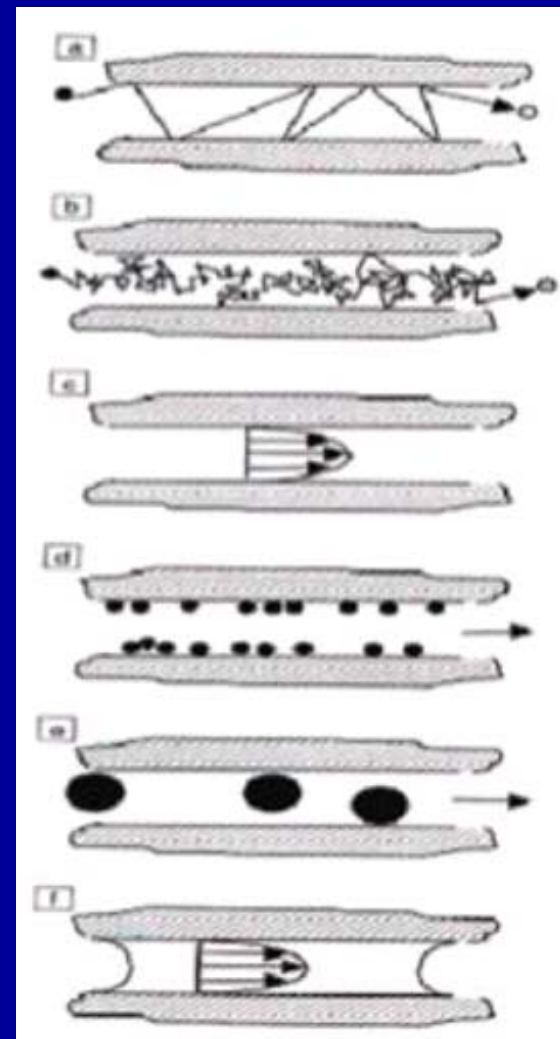
$$Re_{cr} < 100$$



Niektóre problemy w nanoprzepływach

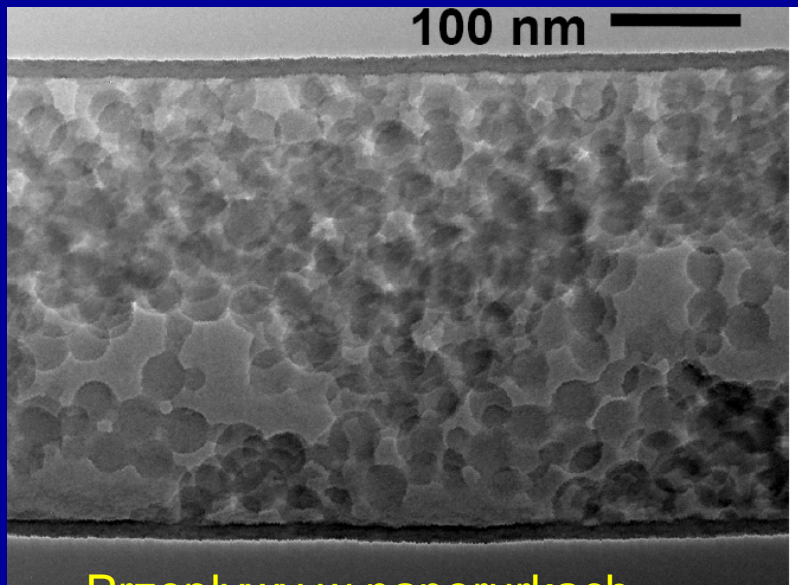
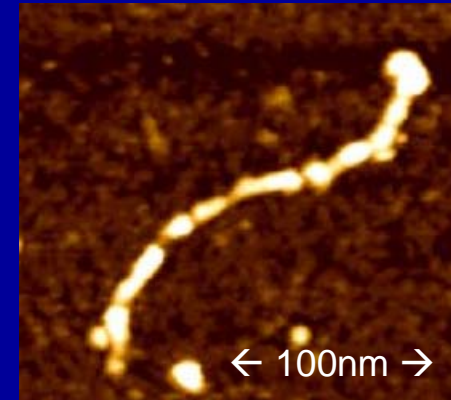
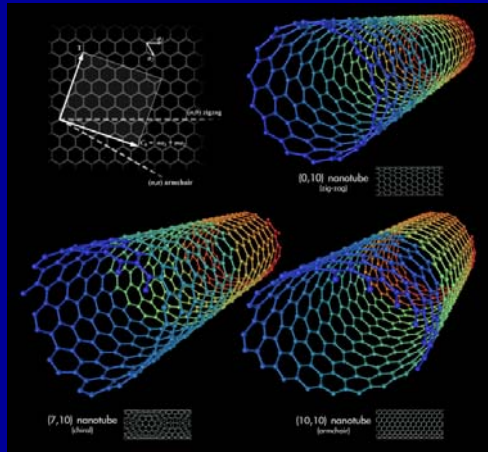
- ✓ Przepływ „balistyczny” - dyfuzja Knudsena
- ✓ Makro i nano dyfuzja
- ✓ Przepływ ośrodka ciągłego
- ✓ Makro i nano porowatość
- ✓ Włókna molekularne, np. włókna wody w CNT
- ✓ Efekty kapilarne

warunki brzegowe
studnie potencjału
konformacje

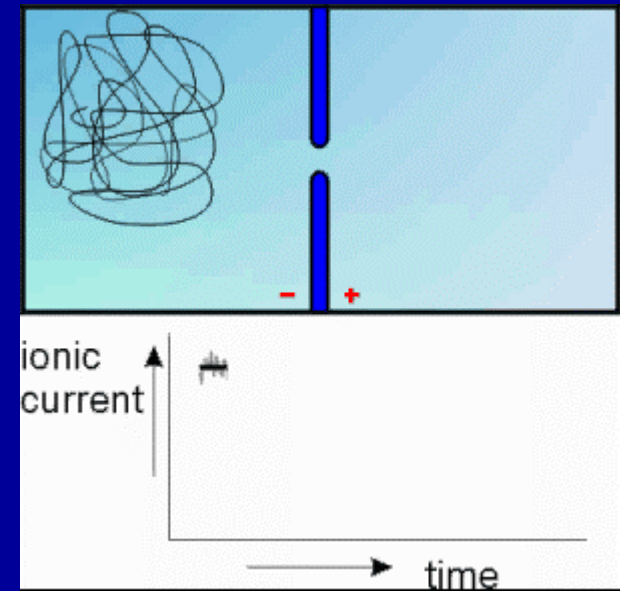


Nanoprzepływy

Nanorurki i nanopory

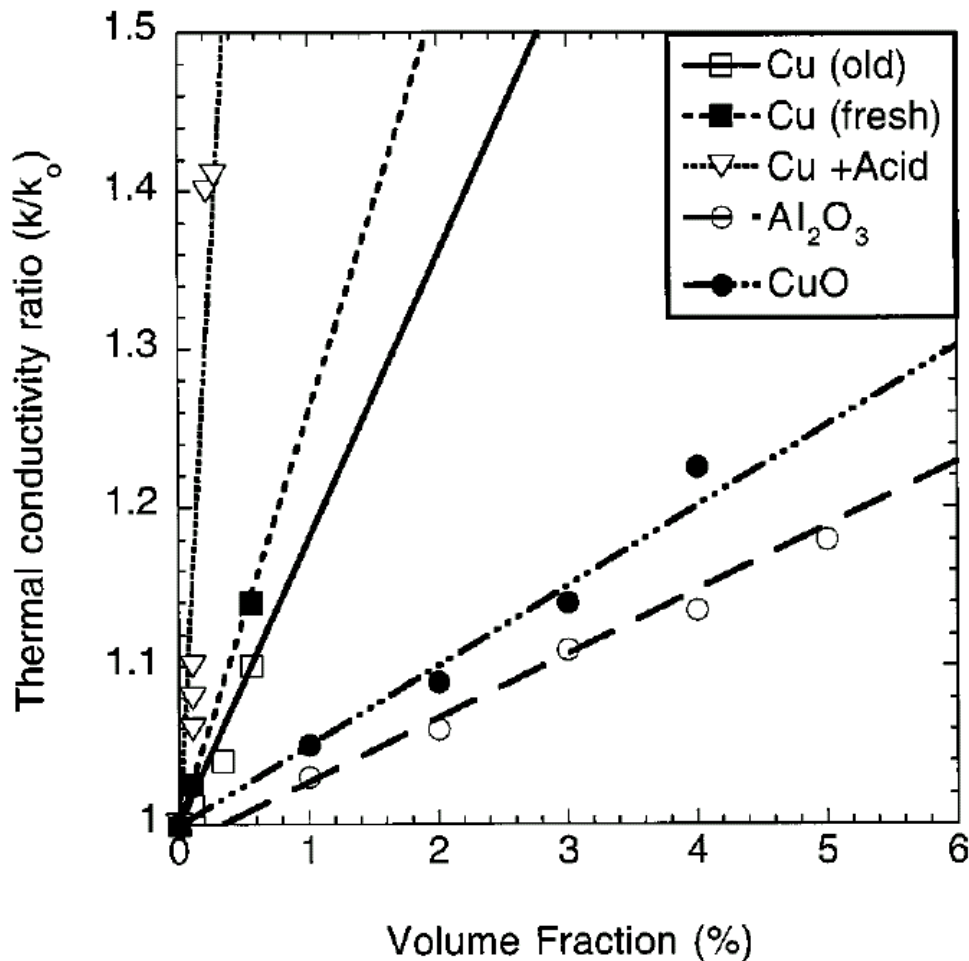


Przepływy w nanorurkach
Univ. Penn. 2005



Rozciąganie i detekcja łańcucha
DNA w 10nm nano-porze
A.J. Storm, TU Delft, 2004

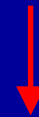
Nanopłyyny



Nanofluid - zawiesina nanocząstek.

Niezwykłe efekty:

- wzrost przewod. ciepła
- wzrost lepkości



- konwekcja Browna ?
- nanowarstwy molekuł ?
- aglomeraty ?

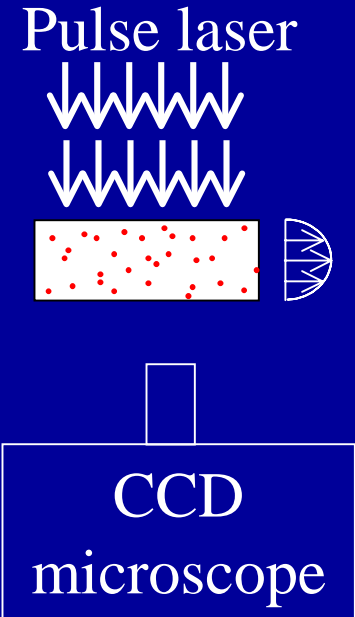
Eastman et al. , Appl. Phys. Lett. 78, 2001, D <10nm

Pomiar charakterystyk przepływu w skali mikro i nano

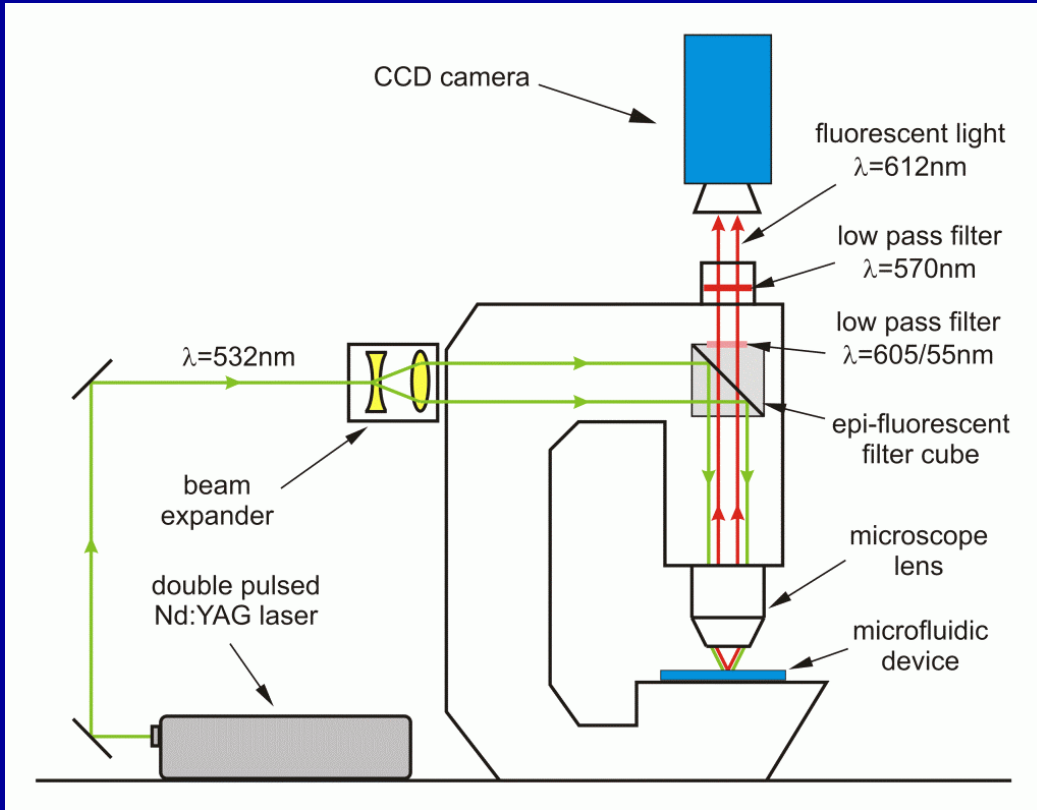
- micro-Particle Image Velocimetry (μ -PIV)

Santiago, et al., *Exp. Fluids*, 1998, 25(4), 316-319.

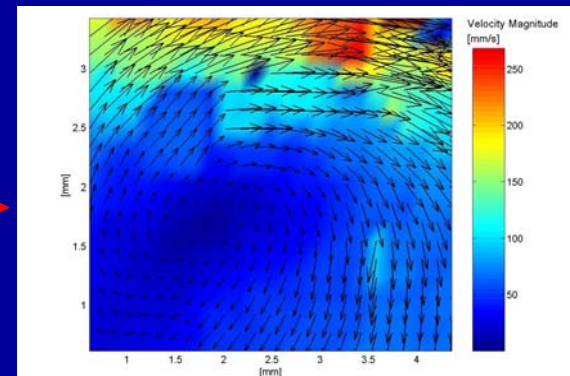
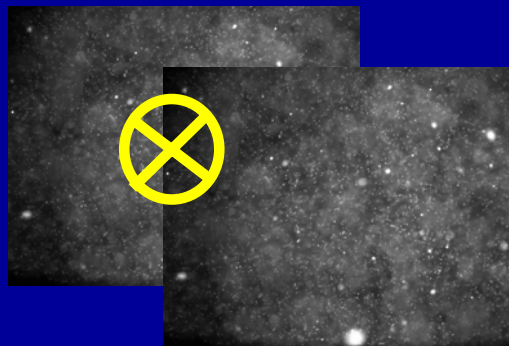
- fluorescencja mikroskopowa
- analiza ruchów Browna, mikroreologia
- elektropomiary

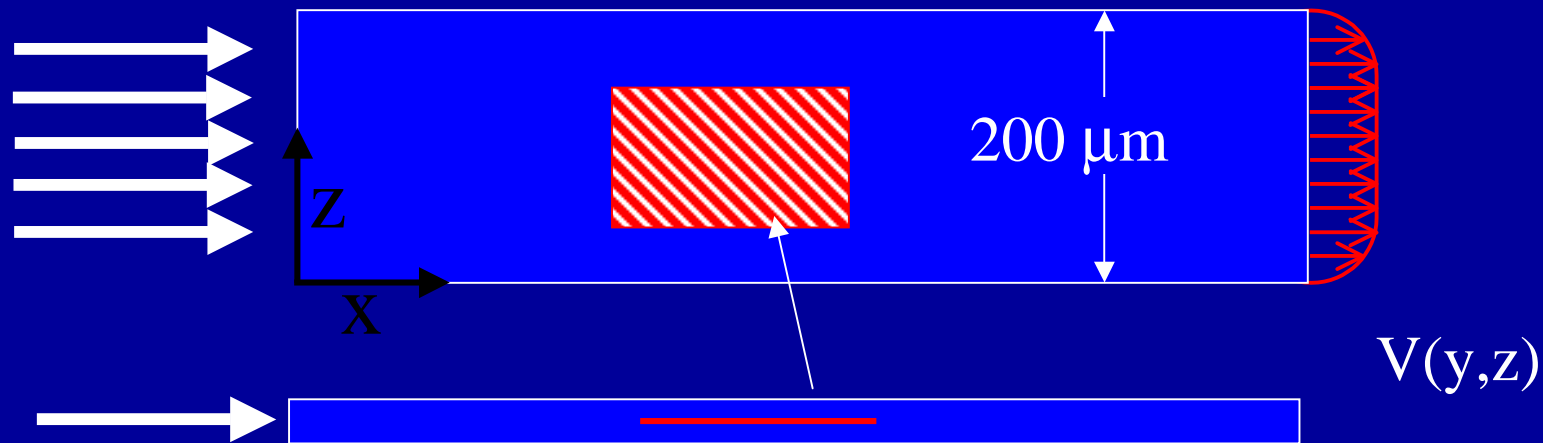


Micro Particle Image Velocimetry (μ PIV)



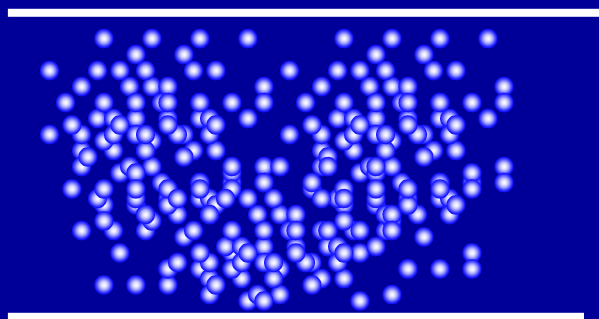
**Cząstki
fluorescencyjne pod
mikroskopem**



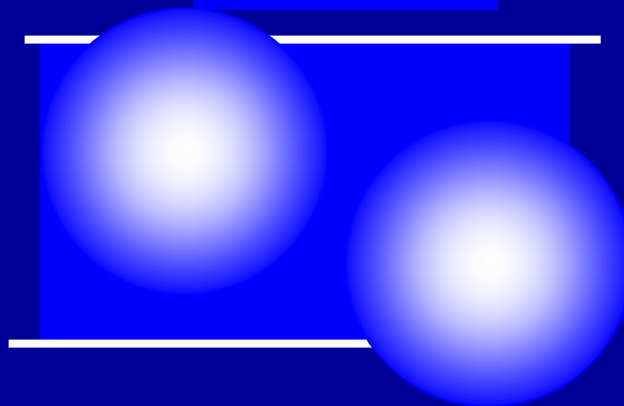


microPIV i nanoPIV

500 μm channel



500 nm



NonoPIV Tracers

- Znaczniki fluorescencyjne – 20nm – 200nm
- Bakterie jako posiew
- Quantum dots – półprzewodnikowe kryształy 2 -16nm

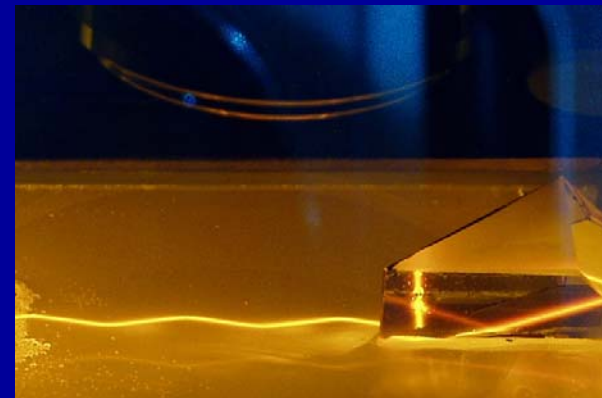
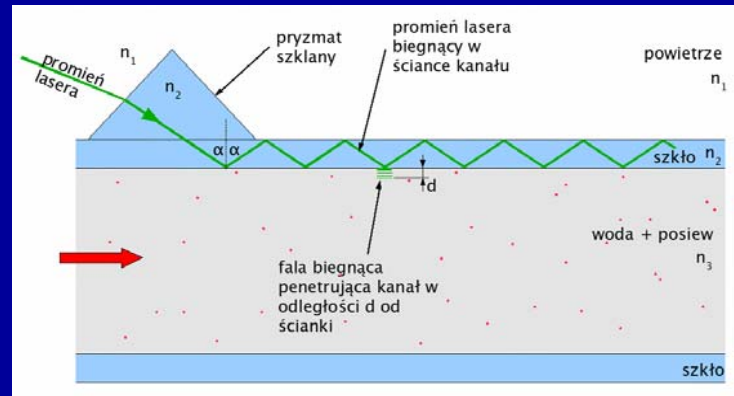
Exp. Fluids 2006, Kenneth Breuer, Brown University



Fluorescence of CdSe quantum dots
D. Talapin, University Hamburg

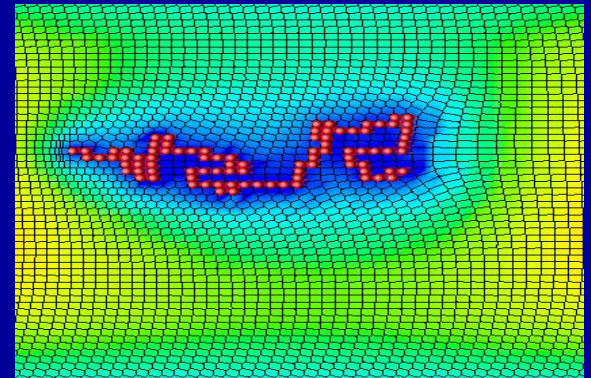
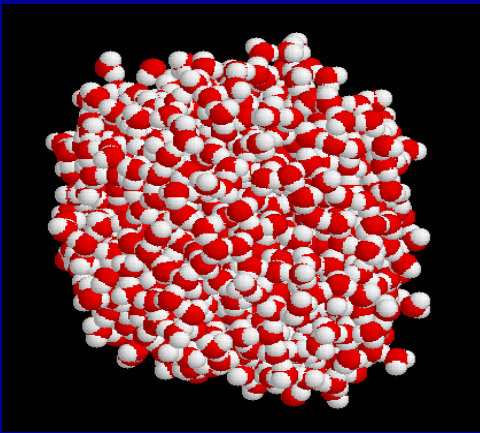
Pomiar przy ściankach

- Metoda całkowitego odbicia światła TIR
- Plazmony – rezonansowe oddziaływanie światła z nanowarstwa metaliczną



Metody numeryczne

- Dynamika molekularna (MD)
- Cząstki dysypatywne (DPD)
- Metody hybrydowe mikro/meso skalowe
- Uzupełnienie opisu ciągłego metodami klasycznymi (poślizg, oddziaływania elektrostatyczne, dyskretne elementy mechaniczne)



Nanoskala: stan nierównowagowy, fluktuacje własności fizycznych, oddziaływania elektrostatyczne jonów, swobodnych elektronów.

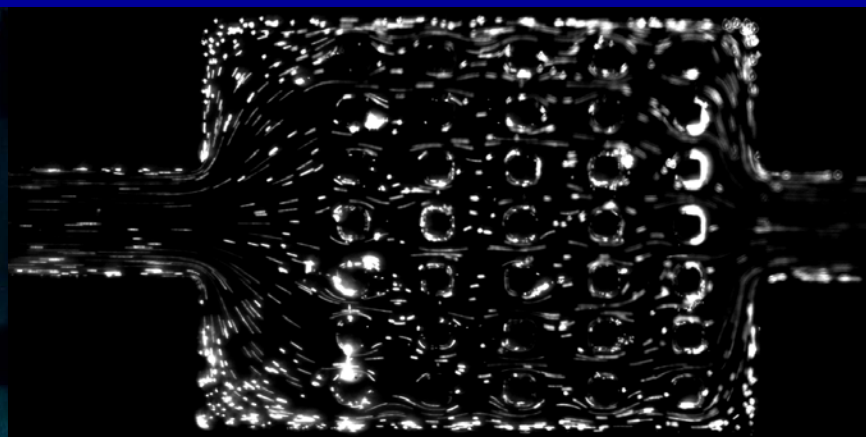
Projekty bio-nano-medyczne

- Mikroskopowa analiza przepływów biologicznych
- Oddziaływanie z przepływem mikrocząstek
- Lab-on-Chip jako narzędzie diagnostyczne
- Nanocząstki i ich oddziaływanie z komórkami
- Nanowłókna i kropki kwantowe w diagnostyce komórkowej
- Nano-włókna jako macierz do kultury tkanek

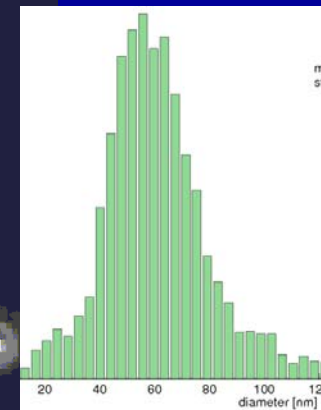
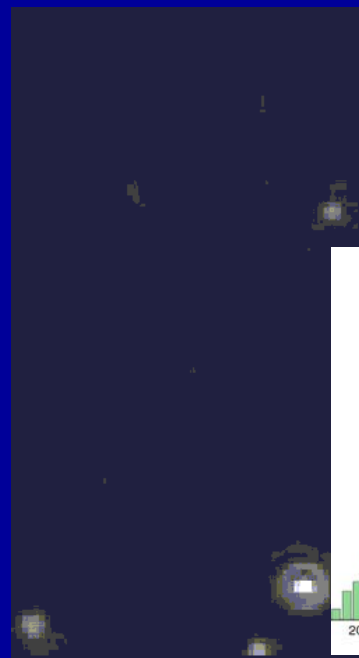
System mikroprzepływowy



Pomiar pola prędkości
metodą nano-PIV



Separacja mikrocząstek

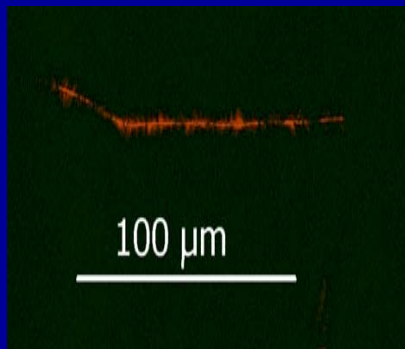


Pomiar nanocząstek Ag

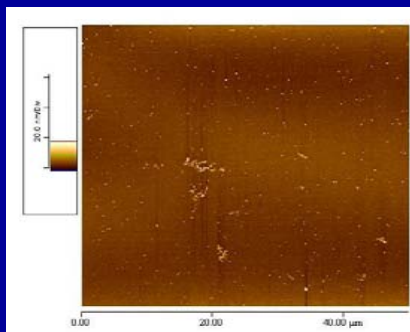
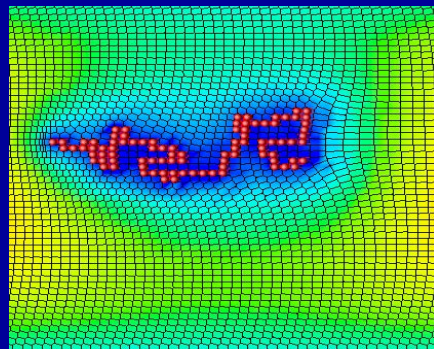
Nanocząstki fluorescencyjne

Rozciąganie DNA, Komórki

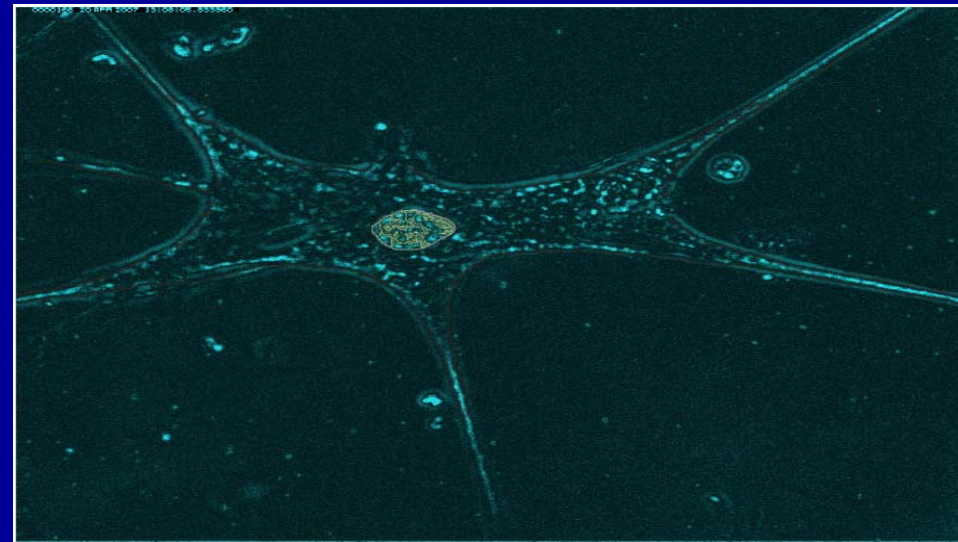
- Transport sond diagnostycznych oraz biologicznie aktywnych cząsteczek do żywej komórki.
- Białka jako rusztowania dla nanocząsteczek, komórek, leków.
- Wielofunkcyjne sondy strukturalne.



DNA w przepływie rozciągającym



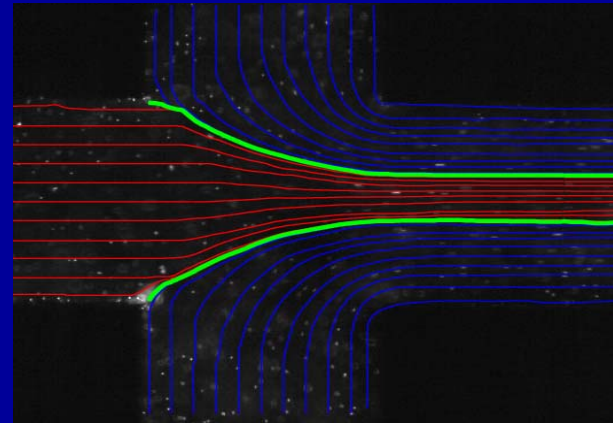
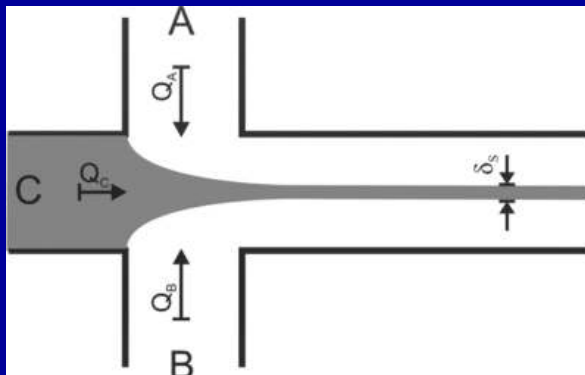
Obraz AFM



Astrocyt z nanocząstkami fluorescencyjnym
(współpraca D. Elbaum, A. Nowicka)

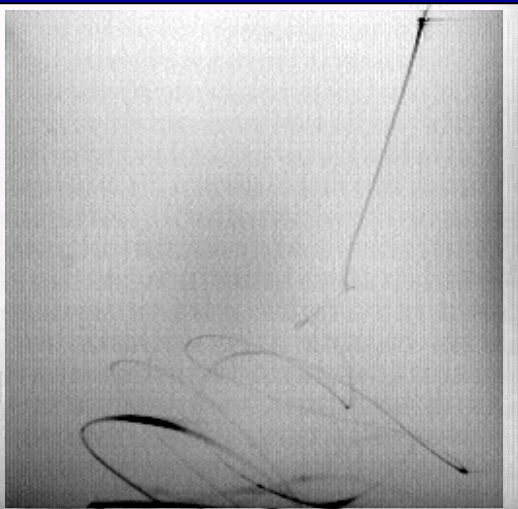
Ogniskowanie przepływu

- Transport sond diagnostycznych
- Transport wskaźników
- Rozwijanie włókien, łańcuchów białkowych

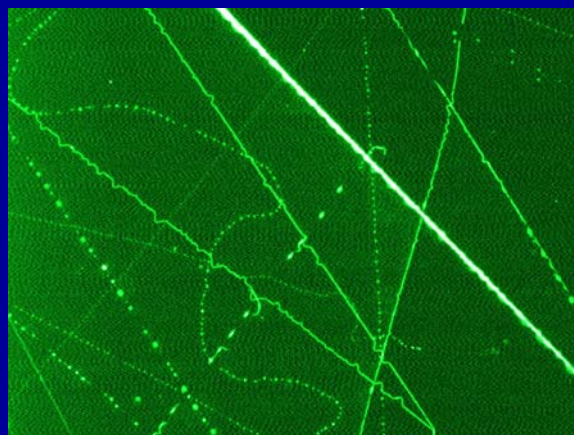


P.Ł. + IPPT

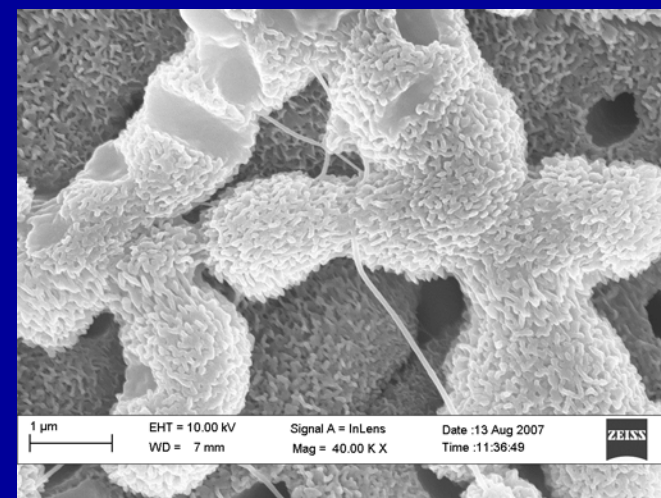
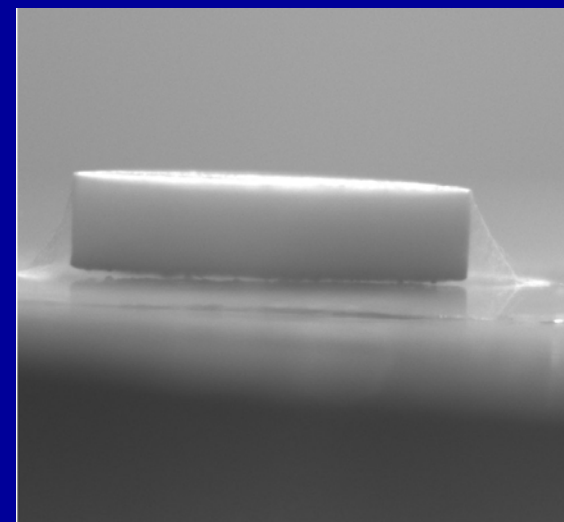
Nanowłókna: biosondy, biomateriały



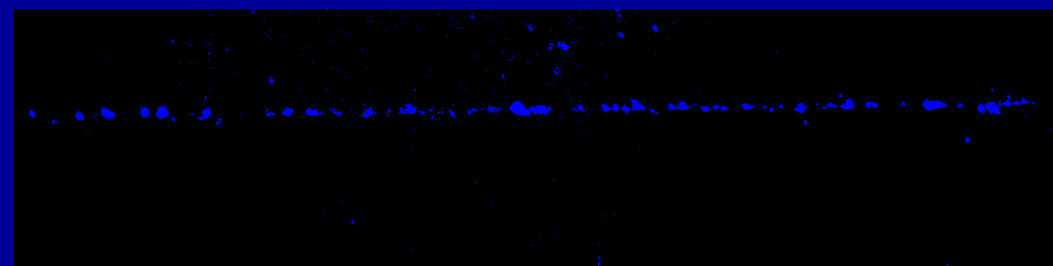
30kV



Włókna BSA



SEM hydroksyapatytu na powierzchni nanowłókien z biopolimeru w testach materiałów do implantów tkanki kostnej (współpraca Imperial College UK) PAN 9.05.08



Włókno z nanokropkami (QDs) ZnO (współp. IF PAN)

Biosondy fluorescencyjne (FRET)

Rusztowania dla inżynierii tkankowej

Systemy „drug delivery”

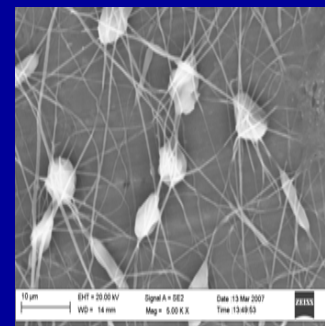
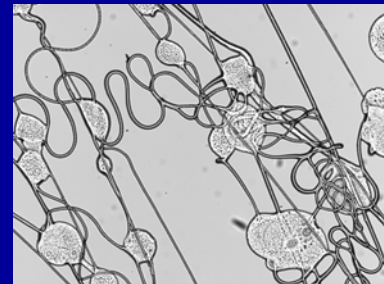
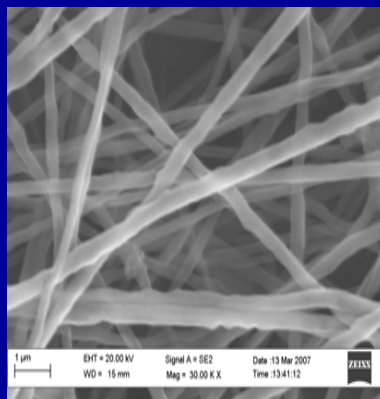
Degradowalne opatrunki zewnętrzne i wew.

Bioabsorbowalne membrany

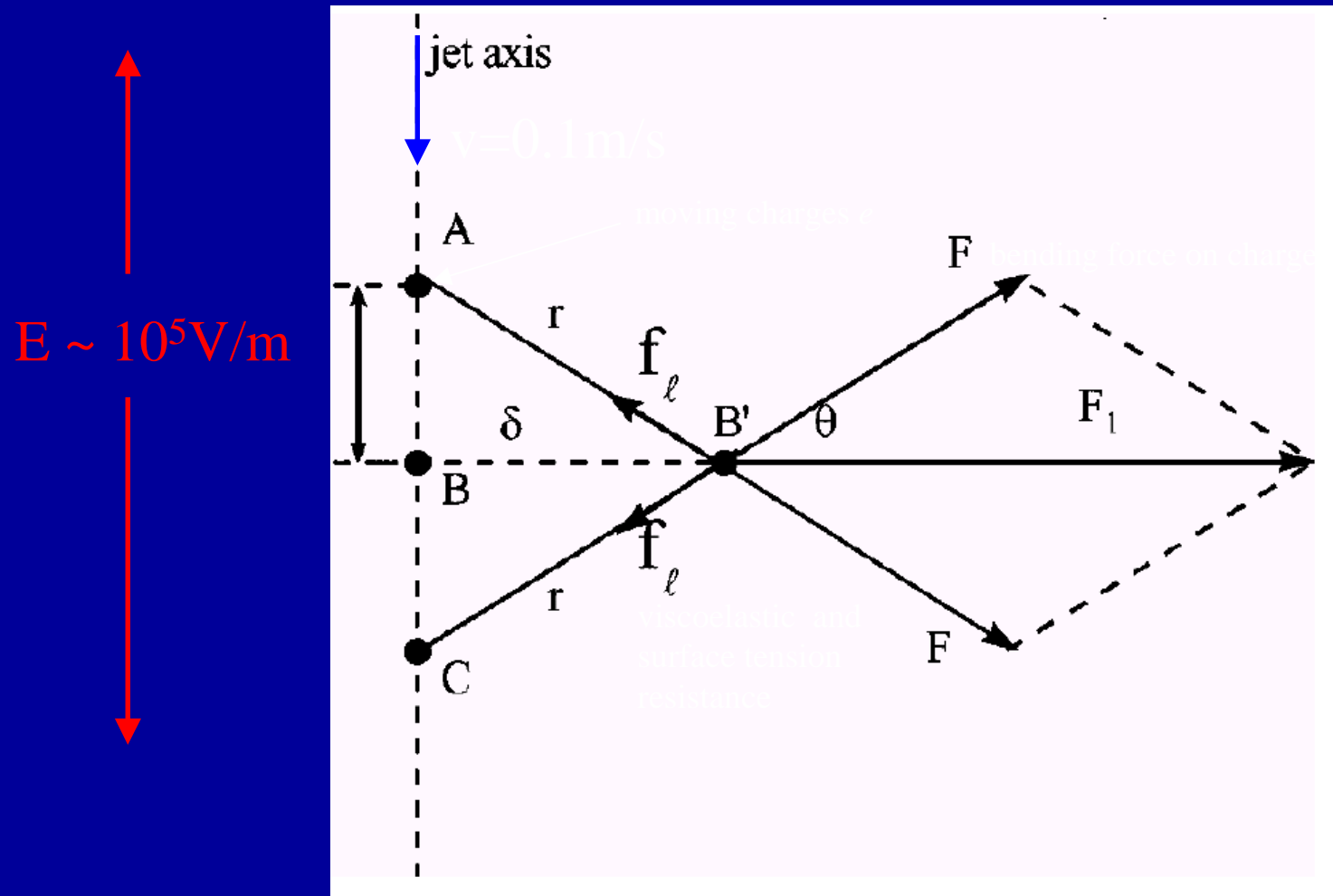
Sztuczna skóra, integracja tkanki kostnej

Optymalizacja procesu elektroprzędzenia

- ✓ Wpływ przewodnictwa elektrycznego (NaCl)
- ✓ Lepkość, wiskoelastyczność
- ✓ Napięcie powierzchniowe
- ✓ Geometria i natężenie pola elektrycznego
- ✓ Wydatek cieczy



Electroprądzenie - model



Ładunki (jony) poruszając się w polu elektrycznym destabilizują strugę, napięcie powierzchniowe, i siły wiskoelastyczne przeciwdziałają tej destabilizacji

Electro-spinning

Prosty model mechaniczny

*Bilans naprężenia σ : μ - lepkość, G –moduł elastyczności
 dl/dt – rozciągnięcie*

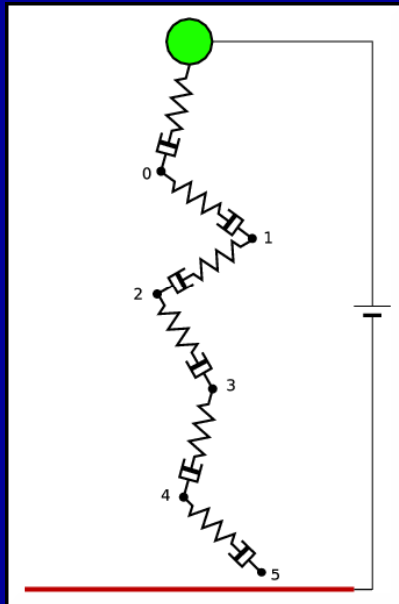
$$\frac{d\sigma}{dt} = G \frac{dl}{ldt} - \frac{G}{\mu} \sigma$$

$$m \frac{dv}{dt} = -\frac{e^2}{l^2} - \frac{eV_0}{h} + \pi a^2 \sigma$$

*Bilans momentu: V_0 – napięcie, e – ładunek,
 a – promień, h - odległość pipeta-kolektor*

$$\frac{dl}{dt} = -v$$

Warunek kinematyczny prędkości włókna v

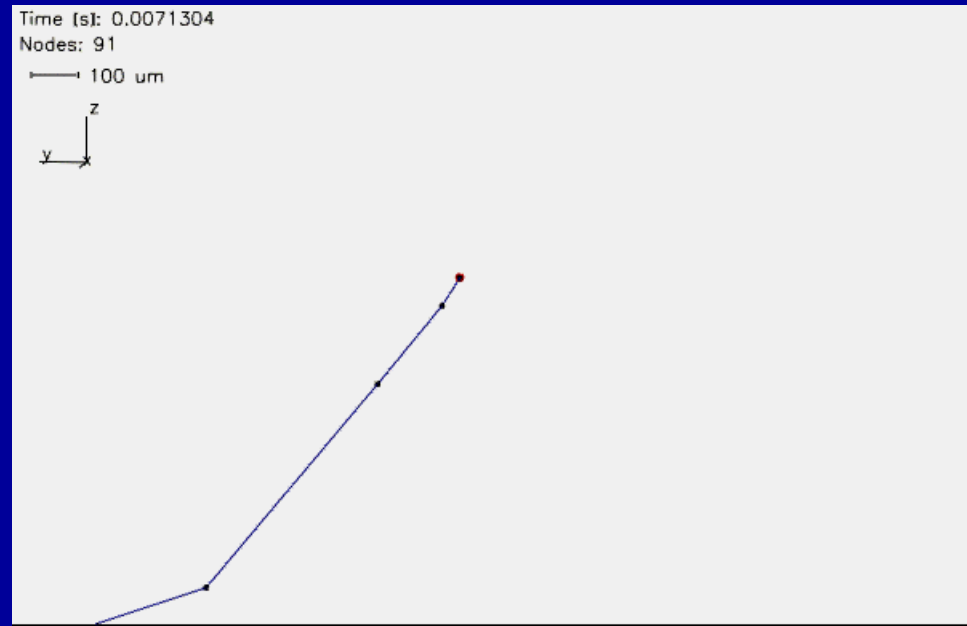


$$\frac{d}{dt} \left(\pi |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_{i+1}| a_{i,i+1}^2 \right) = 0$$

$$\frac{d\sigma_{i,i+1}}{dt} = G \frac{(\mathbf{r}_{i+1} - \mathbf{r}_i) (\mathbf{V}_{i+1} - \mathbf{V}_i)}{(\mathbf{r}_{i+1} - \mathbf{r}_i)^2} - \frac{G}{\mu} \sigma_{i,i+1}$$

$$m_i \frac{d\mathbf{V}_i}{dt} = q_i \sum_{j \neq i} q_j C_{i,j} \frac{\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|^3} + q_i \mathbf{E} \\
+ \pi a_{i,i+1}^2 \sigma_{i,i+1} \frac{\mathbf{r}_{i+1} - \mathbf{r}_i}{|\mathbf{r}_{i+1} - \mathbf{r}_i|} - \pi a_{i-1,i}^2 \sigma_{i-1,i} \frac{\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_{i-1}}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_{i-1}|} \\
+ \pi a_{i,i+1} \alpha \frac{\mathbf{r}_{i+1} - \mathbf{r}_i}{|\mathbf{r}_{i+1} - \mathbf{r}_i|} - \pi a_{i-1,i} \alpha \frac{\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_{i-1}}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_{i-1}|}$$

Analiza numeryczna

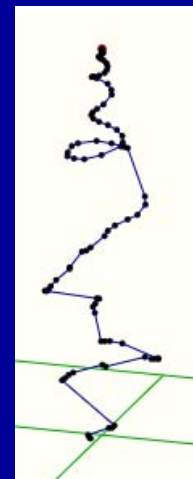
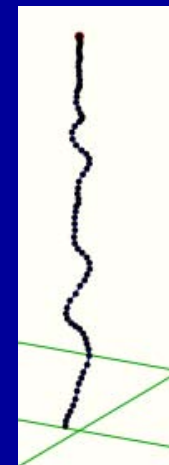
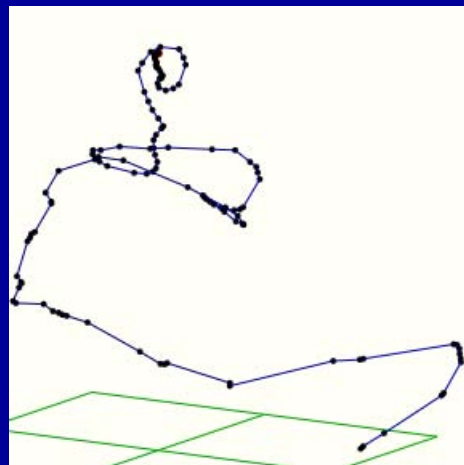
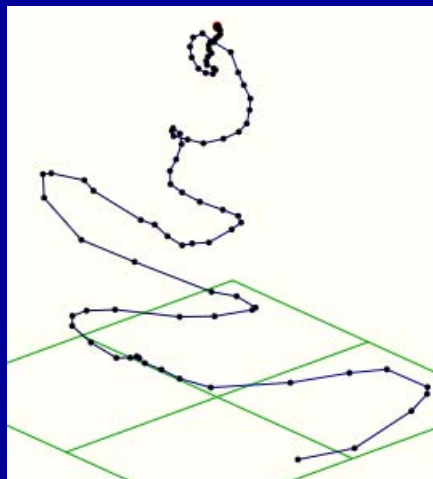
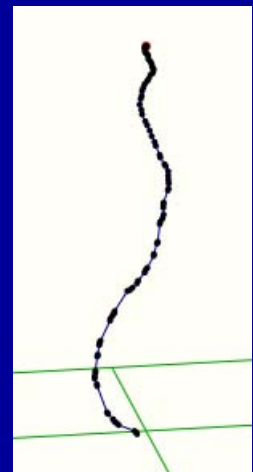


$\alpha = 0.21\text{N/m}$

$\alpha = 0.023\text{N/m}$

$\Phi = 2500\text{V}$

$\mu = 50\text{ Pa s}$ $G = 2 \cdot 10^5\text{ Pa}$ $G = 5 \cdot 10^4\text{ Pa}$



PERSPEKTYWY ROZWOJU

- Rozwój wieloskalowych metod numerycznych przewidujących zachowanie się cząstek, polimerów, włókien i komórek w systemach mikroprzepływowych
- Rozwój bazy laboratoryjnej dla walidacji założeń budowanych modeli; testy biologiczne

SWOT

- Strength – wielodyscyplinarna grupa, już częściowo aktywna w problematyce bio i mikro problemów
- Weakness – indywidualizm wyboru tematów uwarunkowany istniejącymi zobowiązaniami i kontaktami naukowymi
- Opportunities – brak kompleksowej ekspertyzy mikroprzepływowej w Kraju wobec gwałtownie rozwijającego się rynku mikrosystemów, spodziewanego masowego ich wykorzystania dla diagnostyki zapobiegawczej
- Threats – konieczność wejścia w nowe obszary wiedzy, okres „nauki” to możliwa utrata korzyści i impetu w dotychczasowej specjalizacji

1 Krajowa Konferencja Nano i Mikromechaniki



8 – 12 lipca 2008r
Zamek w Krasiczynie