



Universitatea Politehnică din București

Școala Doctorală de Inginerie Energetică

Facultatea de Energetică

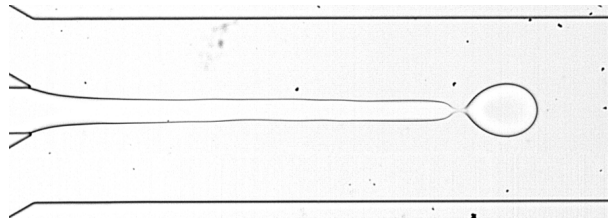
Departamentul de Hidraulică, Mașini Hidraulice și Ingineria Mediului

Laboratorul REOROM

Nr. Decizie Senat ... din ../..../....

TEZĂ DE DOCTORAT

Studiul interfețelor în microcanale sub influența câmpurilor externe



Doctorand: drd. ing. Eugen Chiriac

Conducător: Prof. dr. ing. Corneliu Bălan

Comisia de doctorat

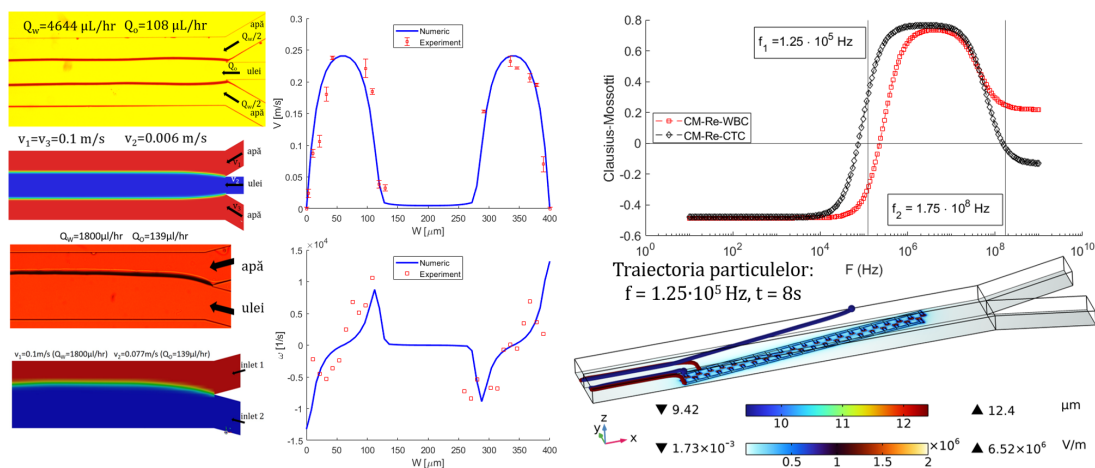
Președinte	Prof. Dr. Ing. Radu Porumb	de la	Universitatea Politehnică din București
Referent	C.S.I. Dr. Ing. Marioara Avram	de la	INCD pentru Microtehnologie - IMT București
Referent	Prof. Dr. Ing. Ilinca Năstase	de la	Universitatea Tehnică de Construcții București
Conducător	Prof. Dr. Ing. Corneliu Bălan	de la	Universitatea Politehnică din București
Referent	Prof. Dr. Ing. Diana Broboană	de la	Universitatea Politehnică din București

BUCUREȘTI

2023

Rezumat

Rezumat grafic



Teza contribuie la înțelegerea fenomenelor interfaciale ce au loc în dispozitive microfluidice la contactul dintre două lichide imiscibile, factorul care generează stabilitatea curgerii fiind aspectul dimensional redus al dispozitivelor. În acest sens, stabilitatea curgerii permite investigarea și modelarea suprafeței de separare dintre două fluide imiscibile în detaliu până la apariția instabilităților.

În prima parte a tezei s-au introdus aspectele teoretice fundamentale ce stau la baza curgerii fluidelor în microcanale. A fost prezentată metoda de calcul numeric în cazul curgerii multifazice, în lipsa difuziei dintre faze.

În a doua parte a tezei au fost prezentate metodele de fabricație a microcanalelor. A fost prezentat fluxul tehnologic utilizat pentru crearea dispozitivelor microfluidice utilizate în cadrul acestei teze.

A treia parte a tezei conține aplicațiile dezvoltate având la bază configurațiile microfluidice investigate. Aplicațiile pornesc de la studiul curgerii laminare, continuă cu investigații ale curgerilor cu fluide imiscibile și se finalizează cu investigații experimentale și numerice ale influenței câmpului exterior asupra interfeței de separare dintre două fluide imiscibile.

În ultima parte a tezei au fost prezentate metode pasive și active de separare a celulelor și particulelor în configurații microfluidice. În acest sens au fost create două dispozitive de tipul *Lab-on-a-chip* pentru a separa globule roșii de celule tumorale circulante în câmp electric alternativ folosind dielectroforeza.

Cuvinte cheie: microfluidică, curgeri interfaciale, interfață, CFD, microcanal Hele-Shaw, dielectroforeză.

Cuprins

Rezumat	1
Listă de lucrări	3
Rezumat extins	6
Introducere	6
Microfluidică	6
Scop și motivație	7
Aspecte teoretice	8
Metode experimentale	16
Aplicații	23
Analiză numerică a curgerii laminare într-o geometrie 2D	23
Influența nanostructurilor asupra curgerii laminare	25
Curgere multifazică într-o bifurcație-Y	26
Curgere multifazică într-un microcanal cu trifurcație	28
Dinamica fluidelor isovâscoase	30
Influența gravitației asupra ciclului de histerezis	31
Metode de separare a particulelor/celulelor	33
Dispozitiv dielectroforetic - numeric	34
Dispozitiv dielectroforetic - experimental	36
Concluzii și perspective	38
Principalele contribuții ale tezei	38
Perspective de cercetare	39
Bibliografie	41

Listă de lucrări

I. Articole ISI publicate în reviste internaționale și recenzate

- ROMJIST 2021 - Chiriac, E., Avram, M., & Bălan, C. (2021). Manipulation of particles using dielectrophoresis in a microchannel. *Rom. J. Inf. Sci. Technol*, 24, 213-221. IF: 0.852
- MICROMACHINES 2022 - Chiriac, E., Avram, M., & Balan, C. (2022). Investigation of Multiphase Flow in a Trifurcation Microchannel—A Benchmark Problem. *Micromachines*, 13(6), 974. IF: 3.523
- UPB 2022 - Chiriac, E., Avram, M., & Balan, C. (2022). Experimental and numerical investigation of hysteresis in multiphase flow in a microchannel. *U.P.B. Sci. Bull., Series A*, 84(3), 191-200. IF: 1.16
- Materials Today Communication - Burinaru, T. A., Adiaconiță, B., Avram, M., Preda, P., Enciu, A. M., Chiriac, E., Marculescu, C., Constantin, T. & Militaru, M. (2022). Electrochemical impedance spectroscopy based microfluidic biosensor for the detection of circulating tumor cells. *Materials Today Communications*, 32, 104016. IF: 3.662
- Micromachines 2022 - Tincu, B., Burinaru, T., Enciu, A. M., Preda, P., Chiriac, E., Marculescu, C., Avram, M. & Avram, A. (2022). Vertical Graphene-Based Biosensor for Tumor Cell Dielectric Signature Evaluation. *Micromachines*, 13(10), 1671. IF: 3.523

II. Publicații WOS proceedings și BDI

- ATEE 2019 - Chiriac, E., Broboana, D., Avram, M., & Balan, C. (2019, March). Comparative numerical study between OpenFOAM and ANSYS Fluent in a Y-junction microchannel. *In 2019 11th International Symposium on Advanced Topics in Electrical Engineering (ATEE)* (pp. 1-4). IEEE.
- CIEM 2019 - Chiriac, E., Avram, M., Broboana, D., & Balan, C. (2019, October). Interface Evolution in a Microchannel, an Experimental and Numerical Study. *In 2019 International Conference on ENERGY and ENVIRONMENT (CIEM)* (pp. 219-223). IEEE.
- CAS 2020 - Chiriac, E., Avram, M., & Bălan, C. (2020, October). Dielectrophoretic separation of Circulating Tumor Cells and Red Blood Cells in a microfluidic device. *In 2020 International Semiconductor Conference (CAS)* (pp. 211-214). IEEE.
- EENVIRO 2020 - Chiriac, E., Bratu, A. M., Avram, M., & Bălan, C. (2021, May). Alcohol jets investigations in a microchannel in a viscous outer medium. *In IOP Conference Series: Earth and Environmental Science* (Vol. 664, No. 1, p. 012056). IOP Publishing.
- ATEE 2021 - Chiriac, E., Bran, A. M., Voitincu, C., & Balan, C. (2021, March). Experimental validation of VOF method in microchannel flows. *In 2021 12th International Symposium on Advanced Topics in Electrical Engineering (ATEE)* (pp. 1-4). IEEE.

- CIEM 2021 Chiriac, E., Avram, M., & Balan, C. (2021, October). Transition from Threads to Droplets in a Microchannel for Liquids with No Viscosity Contrast. *In 2021 10th International Conference on ENERGY and ENVIRONMENT (CIEM)* (pp. 1-4). IEEE.
- CAS 2021 Chiriac, E., Adiaconiță, B., Pachi, C., Avram, M., & Bălan, C. (2021, October). MicroPIV on carbonic materials embedded in a microfluidic device. *In 2021 International Semiconductor Conference (CAS)* (pp. 169-172). IEEE.
- CAS 2022 Adiaconiță, B., Preda, P., Burinaru, T., Mărculescu, C., Avram, A., Crăciun, G., Chiriac, E., Avram, M. (2022, October). Electrochemical Biosensing Based on Graphene for Detection of the SARS-CoV-2 Nucleocapsid Protein. *In 2022 International Semiconductor Conference (CAS)*. IEEE.
- CAS 2022 Preda, P., Adiaconita, B., Craciun, G., Mihalache, I., Boldeiu, A., Brincoveanu, O., Maxim, M.-E., Chiriac, E., Avram, M., (2022, October). Chitosan-coated gold nanocomposites loading with cisplatin for potential use in cancer therapy. *In 2022 International Semiconductor Conference (CAS)*. IEEE.

III. Participare cu lucrări științifice la conferințe internaționale

- 11th International Symposium on Advanced Topics in Electrical Engineering (ATEE) 2019
- International Conference on ENERGY and ENVIRONMENT (CIEM) 2019
- International Semiconductor Conference (CAS) 2020
- Conference of the Sustainable Solutions for Energy and Environment (EENVIRO) 2020
- 12th International Symposium on Advanced Topics in Electrical Engineering (ATEE) 2021
- 10th International Conference on ENERGY and ENVIRONMENT (CIEM) 2021
- International Semiconductor Conference (CAS) 2021
- International Conference on Rheology 2022
- International Semiconductor Conference (CAS) 2022

IV. Membru în proiecte de cercetare

- Microfluidic platform for circulating tumour cells (CTCs) concentration through dielectrophoresis-magnetophoresis and analyzed via broadband dielectric spectroscopy and electrochemical impedance (PN-III-P1-1.2-PCCDI-2017-0214).
- 6. Innovative approaches in the treatment and control of patients infected with SARS-CoV-2 virus (PN-III-P2-2.1-SOL-2020-0061).
- Senzori magnetorezistivi optimizati pentru detecția pe cip a nanoparticulelor magnetice (PN-III-P2-2.1-PED-2019-3514).
- Combined CD36 immunoaffinity and nanostructure technology for metastatic tumor cells enrichment from blood (PN-III-P2-2.1-PED-2019-3141).
- Multi-disciplinary Use Cases for Convergent new Approaches to AI explainability (COFUND-CHIST ERA-MUCCA).

- Impedimetric biosensor based on vertical graphene, integrated with a microfluidic system for monitoring the plasma levels of anti-tumoral agents (PN-III-P2-2.1-PTE-2021-0444).
- Graphene based spintronic structures for sensing applications and signal processing (PN-III-P2-2.1-PED-2021-3112).
- Microsenzori electrochimici pentru detecția unor stupefiante: codeina și morfina, Contract C77/9D, cod SMIS 2014+ 105623.
- Platforme microfluidice pentru senzori biochimici cu aplicații în securitate societală, Contract C77/1C, cod SMIS 2014+ 105623.

Rezumat extins

Introducere

Se consideră un dispozitiv microfluidic cu o bifurcație, conectat la două pompe de presiune/debit prin care se introduc în dispozitiv două fluide newtoniene, incompresibile și imiscibile, cu proprietăți de material diferite, la presiuni/debite de intrare controlate diferite. Scopul procedurii experimentale este dezvoltarea unei interfețe de separare între cele două fluide. Poziția interfeței în microcanalul cu geometrie definită depinde de următorii factori: presiunile/debitele de intrare, proprietățile de material ale celor două fluide, proprietățile interfețelor și comportamentul fluidelor la peretele canalului. Studiul interfeței este un subiect central în microfluidică, numeroase aplicații având la bază curgerile multifazice asociate tranziției între diferite regimuri de curgere.

Lucrarea de față este dedicată studiului interfeței fluide într-un microcanal cu trei intrări și o ieșire, cu aplicații în dielectroforeză.

Microfluidică

Tendința globală de a miniaturiza elementele componente ale sistemelor dinamice a condus la dezvoltarea dispozitivelor de tipul *Lab-on-a-Chip* [53], *Organ-on-a-Chip* [3], dispozitive cu aplicații multidisciplinare ce încorporează elemente de fizică, chimie, biologie și inginerie. Majoritatea aplicațiilor necesită transportul fluidelor de lucru în configurații microfluidice. Transportul soluțiilor prin dispozitive microfluidice are loc în regimul de curgere laminar, geometria având o importanță semnificativă în dezvoltarea aplicațiilor.

În ultima perioadă, dispozitivele de tipul *Lab-on-a-Chip* și aplicațiile aferente sunt integrate proceduri asociate inteligenței artificiale. Aceasta ajută la procesarea volumelor mari de date rezultate în urma experimentelor. Inițial mașina de învățare este antrenată cu datele experimentale folosind un algoritm specific aplicației. Spre exemplu, algoritmul CNN (Rețele neuronale convoluționale) este folosit pe un spectru larg de aplicații, precum: izolarea celulelor, clasificarea celulelor și citometrie în flux și aplicații combinate [53]. După ce mașina de învățare este antrenată, aceasta poate analiza setul de date rezultate din experiment fără a mai fi necesară procesarea acestora.

În energetică, microfluidica se regăsește în mai multe aplicații [42]. În energia solară, dispozitivele microfluidice sunt folosite pentru fotocataliză [1] și fotosinteză [36]; de asemenea sunt înglobate în dispozitive pentru conversia energiei electrochimice, depozitarea celulelor de combustibil și baterii. În [29] a fost creată o celulă microfluidică de combustibil cu electrozi poroși pentru conversia energiei electrochimice. În [47] se prezintă un dispozitiv microfluidic cu celule galvanice (denumite baterii fluide, integrate direct în microcanalul de hârtie) ce pot aprinde un LED. În industria de petrol și gaze, microcanalele joacă un rol important prin studiul emulsiilor de ulei în apă. În [20] un dispozitiv de tipul *Lab-on-a-Chip* este folosit pentru a studia formarea emulsiilor și recuperarea uleiului greu. Schema de prezentare a principiului de funcționare precum și emulsiile rezultate sunt prezentate în Fig. 1 I. În [33] celula clasică presiune-volum-

temperatură este replicată în miniatură, într-un canal microfluidic cu serpentine și îngustări de secțiune, fiind folosită pentru a măsura dinamica fazelor fluide, Fig. 1 II. Microfluidica este în prezent aplicată pentru gestionarea carbonului astfel: în [28] este studiat transportul de CO_2 și dinamica formării sării iar în [44] s-a determinat punctul de rouă din CO_2 cu impurități.

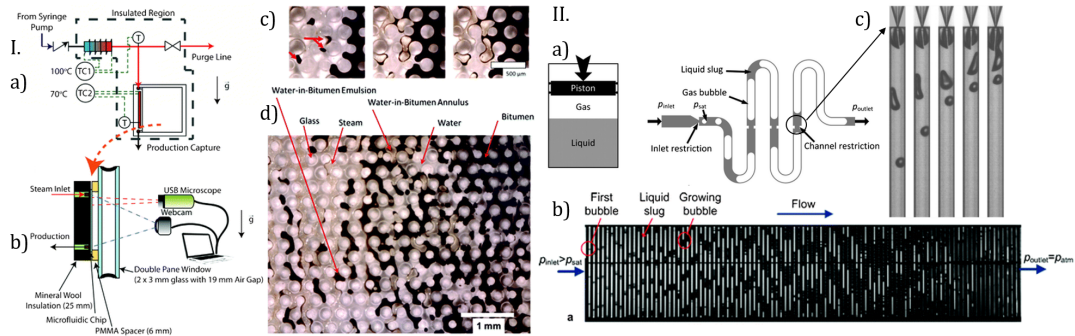


Figura 1: I. a) Reprezentare schematică sistemului de creare a emulsiilor de bitum în apă, b) Sistemul de achiziție, c) Detaliu al emulsiilor de bitum în apă, d) Imagine de ansamblu a întregului proces de SAGD (*Steam Assisted Gravity Drainage*), Retipărită cu permisiune din [20] ©(2013) Royal Society of Chemistry; II. a) Tehnicile convenționale de măsurare a dinamicii gazelor alcătuite dintr-un cilindru de înaltă presiune și piston și tehnica microfluidică utilizată pentru a măsura comportamentul fazelor, b) Formarea curgerii multifazice, c) Detaliu de la îngustarea de secțiune cu formarea bulelor ($p_{inlet} = 35 \text{ bar}$), Retipărită cu permisiune din [33] ©(2012) Royal Society of Chemistry.

Scop și motivație

În microfluidica aplicată majoritatea curgerilor sunt multifazice, ceea ce justifică studiul experimental și numeric al evoluției interfețelor în microcanale sub influența câmpurilor externe. Un obiectiv al acestei teze este de a stabili probleme de referință în microfluidică, așa numitele ”*benchmark problems*”, în cazul unor geometrii cu raport dimensional redus:

- un microcanal cu trei intrări și o ieșire, cu o adâncime de $h = 50 \mu\text{m}$ și o lățime a canalului principal de $W = 400 \mu\text{m}$;
- un microcanal cu bifurcație, cu un unghi de 30° între cele două ramuri, cu o adâncime de $h = 50 \mu\text{m}$ și o lățime a canalului principal de $W = 200 \mu\text{m}$.

Se urmărește validarea calitativă și cantitativă a simulărilor numerice, lucru ce permite extinderea studiilor numerice cu alte geometrii, configurații și fluide non-newtoniene. De asemenea este investigată influența nanostructurilor asupra curgerii. Acest lucru permite evaluarea proceselor tehnologice folosite în fabricarea dispozitivelor microfluidice.

Un alt obiectiv al studiului este de a investiga curgeri multifazice în vederea evaluării efectului câmpurilor externe asupra curgerii și asupra fenomenului de histerezis observat în dinamica curgerii.

Obiectivul aplicativ al tezei este dezvoltarea unor dispozitive de tipul *Lab-on-a-Chip* ce permit manipularea traiectoriei particulelor folosind forța dielectroforetică, în simulările numerice particulele sunt considerate că au o formă ideală sferică.

Aspecte teoretice

Sistemul de ecuații Navier-Stokes

Microfluidica este o ramură a mecanicii fluidelor în care curgerea are loc la scări spațiale reduse, de regulă de ordinul zecilor și sutelor de micrometri. Acest lucru se reflectă prin faptul că importanța forțelor inerțiale se reduce, curgerea fiind dominată de forțele de frecare vâscoase, forțele de presiune și forțele interfaciale (dacă este cazul). De asemenea, regimul de curgere este laminar, regimul turbulent fiind caracteristic numai geometriilor 3D cu schimbări de direcție extreme la unghiuri mici care facilitează amestecul între straturile de fluid [45].

Curgerea izotermă a unui fluid incompresibil și Newtonian (isovâcos) este descrisă de sistemul de ecuații Navier-Stokes, format din ecuația de conservare a impulsului (1) și ecuația de conservare a masei (2):

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} \right) = \rho \mathbf{b} - \nabla p + \eta \Delta \mathbf{v}, \quad (1)$$

$$\operatorname{div} \mathbf{v} = 0, \quad (2)$$

unde, \mathbf{v} este vectorul de viteză, ρ și η sunt proprietățile de material, densitate respectiv vâscozitate, \mathbf{b} este forța masică și p este presiunea. Necunoscutele sistemului sunt viteza \mathbf{v} și presiunea p .

Relațiile (1) și (2), completate cu condițiile la limită și inițiale corespunzătoare, sunt valabile pentru fluidul omogen și izotrop. De regulă, soluționarea ecuației Navier-Stokes se face numeric folosind codurile specializate CFD (*Computational Fluid Dynamics*) implementate în softuri comerciale ANSYS sau COMSOL, în programe cu acces liber OpenFOAM sau în softuri personalizate cu circuit închis [4].

Lucrarea de față are ca scop central studiul curgerilor vâscoase în microcanale, în prezența unei interfețe ce separă două fluide imiscibile, în absența difuziei. Modelul folosit consideră că ecuațiile (1) și (2) sunt valabile în întregul domeniu al curgerii ocupat de cele două fluide, funcțiile de material (densitatea și vâscozitatea) fiind particularizate pentru fiecare fluid în parte cu ajutorul unei funcții ce definește interfața. Astfel, în ecuația Navier-Stokes va apărea un termen suplimentar, o forță specifică ce acționează exclusiv pe interfață și depinde de tensiunea interfacială dintre cele două fluide.

Interfață fluidă; Metoda VOF

Ecuațiile Navier-Stokes (1) și (2) sunt ecuații cu derivate parțiale, neliniare, de ordinul II. Ele reprezintă forma locală (diferențială) a principiilor de conservare a masei și a impulsului, enunțate în formă integrală [6, 27].

Trecerea de la forma integrală la cea locală implică continuitatea funcțiilor necunoscute (viteza și presiunea) și a funcțiilor/constantelor de material (densitatea și vâscozitatea).

Dacă în domeniul curgerii se află două fluide imiscibile, omogene și incompresibile separate de o interfață, în ecuația Navier-Stokes va trebui să se introducă un termen suplimentar, o forță specifică ce acționează exclusiv pe interfață. În acest paragraf se prezintă procedura implementării forței specifice în ecuația de mișcare (1).

În Fig. 2 este prezentată interfața dintre două fluide imiscibile, unde S este suprafața ce este delimitată pe suprafața interfeței $f(\mathbf{x}, t) = 0$ de curba C , \mathbf{v}_s este viteza interfeței, r_1 și r_2 sunt razele de curbură la S , \mathbf{F}_c este forța de capilaritate, $\sigma [N/m]$ fiind tensiunea interfacială.

Formula lui Stokes este folosită pentru a transpune forța de capilaritate de pe curba C pe suprafața S .

$$\mathbf{F}_c := \oint_C \sigma \mathbf{n} \times d\mathbf{x} = \int_S (-\operatorname{grad} \sigma + \operatorname{div} \mathbf{n} \cdot \mathbf{n}) dA. \quad (3)$$

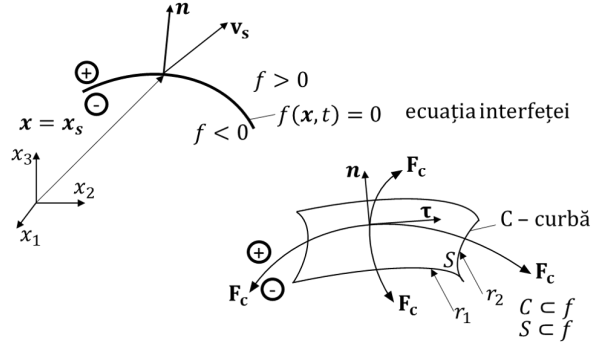


Figura 2: Interfața dintre două fluide imiscibile.

De remarcat că forța de capilaritate, respectiv tensiunea σ , poate varia numai pe direcția versorului τ tangent la suprafața f (la interfață), ceea ce implică $\text{grad } \sigma \cdot \mathbf{n} = 0$.

Următoarele notații sunt utilizate:

- $\text{grad } \sigma := \nabla \sigma$; $\text{div } \mathbf{n} := \nabla \cdot \mathbf{n}$,
- φ este saltul mărimii φ pe interfață, definit ca:

$$[(\varphi)] = \varphi^+ - \varphi^-, \quad (4)$$

- $H(f)$ este funcția Heaviside asociată interfeței, definită ca:

$$H(f) := \begin{cases} 1, & f > 0 \\ 0, & f \leq 0 \end{cases}, \quad (5)$$

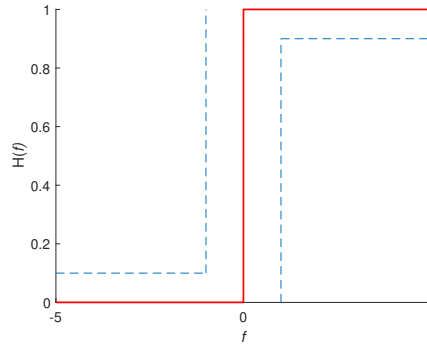


Figura 3: Reprezentarea grafică a funcției H.

- $\delta(f)$ este funcția Dirac (delta), definită ca:

$$\frac{dH}{df} := \delta(f), \quad (6)$$

- funcția delta asociată interfeței este definită ca:

$$\delta^s := \delta(f) |\nabla f| [1/m], \quad (7)$$

- normala la suprafața f este definită ca fiind:

$$\mathbf{n} = \frac{\text{grad } f}{|\text{grad } f|} = \frac{\nabla f}{|\nabla f|}, \quad (8)$$

- curbura suprafeței, este definită ca:

$$\kappa := \operatorname{div} \mathbf{n} = \nabla \cdot \mathbf{n}, \quad (9)$$

$$\kappa = \frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2}, \quad (10)$$

- din ecuația Young-Laplace, curbura medie a suprafeței, este:

$$\kappa^* = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right). \quad (11)$$

Admițând ipoteza că interfața f este o suprafață materială, rezultă condiția ca derivata ei materială să fie nulă:

$$\frac{df}{dt} = 0, \quad (12)$$

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v}_s \cdot \operatorname{grad} f = 0, [24]. \quad (13)$$

Tensiunea din fluid integrată pe suprafața S este definită ca:

$$\mathbf{F}_s = \int_S \mathbf{t} dA, \quad (14)$$

unde $\mathbf{t} = \mathbf{T}\mathbf{n} = -p\mathbf{n} + \mathbf{T}_E\mathbf{n}$, este tensiunea \mathbf{t} asociată tensorului tensiune Cauchy \mathbf{T} , $\mathbf{T} = \mathbf{T}^T$, $\mathbf{T} = -p\mathbf{I} + \mathbf{T}_E$, p este presiunea și \mathbf{T}_E este tensorul extra-tensiune ce depinde exclusiv de mișcare/deformație (numit tensorul extra-tensiune).

Pentru un fluid newtonian $\mathbf{T}_E = 2\eta_0\mathbf{D}$, unde $\eta_0 [Pa\ s]$ este vâscozitatea și \mathbf{D} este tensorul viteză de deformație specifică [6].

Pentru un fluid incompresibil, urma tensorului viteză de deformație specifică $\operatorname{tr} \mathbf{D} = 0$, echivalent cu $\operatorname{div} \mathbf{v} = 0 = \nabla \cdot \mathbf{v} = 0$.

Relația de echilibru pe suprafață este:

$$[\mathbf{F}_s] = \mathbf{F}_c, \quad (15)$$

ceea ce rezultă în:

$$\begin{cases} -[p] + \mathbf{n} \cdot [\mathbf{T}_E] \cdot \mathbf{n} = \sigma \operatorname{div} \mathbf{n} & (\text{ef. normale} - \text{Laplace}) \\ \mathbf{n} \cdot [\mathbf{T}_E] \cdot (\mathbf{I} - \mathbf{n} \times \mathbf{n}) = \operatorname{grad}_f \sigma & (\text{ef. tangențiale} - \text{Marangoni}), [24]. \end{cases} \quad (16)$$

În cazul în care $\sigma = ct$ și în ipoteza aderenței celor două fluide la interfață (considerată de grosime "0"):

$$\begin{cases} [\mathbf{v}] \cdot \mathbf{n} = 0 \\ [\mathbf{v}] \times \mathbf{n} = 0, \text{ cu } \mathbf{v}^+ = \mathbf{v}^- = \mathbf{v}_s. \end{cases} \quad (17)$$

Rezultă: $-[p] = \kappa\sigma$ cu $\Delta p := p^- - p^+$ se obține:

$$\Delta p = \sigma \left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right), \nabla_f \sigma = 0, \quad (18)$$

formula lui Laplace și saltul de eforturi tangențiale pe interfață fiind nul.

În aceste ipoteze, forța ce acționează pe suprafața interfeței se reduce la:

$$\mathbf{F}_c = \int_S \sigma \kappa \mathbf{n} dA, \quad (19)$$

unde $S \subset f$.

\mathbf{F}_c acționează exclusiv în punctele spațiale \mathbf{x}_s unde $f(\mathbf{x}_s, t) = 0$.

În cazul implementării unei metode numerice pentru calculul dinamicii unei interfețe fluide, ce separă două fluide newtoniene incompresibile, $f(\mathbf{x}, t) = 0$ s-a pus problema introducerii forței \mathbf{F}_c ca un termen suplimentar în ecuația Navier-Stokes, evident acesta acționând exclusiv numai pe interfață [22, 39, 37].

Termenii din ecuația Navier-Stokes sunt forțe specifice pe unitatea de volum $[N/m^3]$, deci \mathbf{F}_c va trebui reprezentată sub forma unei forțe volumice [5, 46, 8], respectiv:

$$\int_S \sigma \kappa \mathbf{n} dA = \int_{\mathcal{D}} \sigma \kappa \mathbf{n} \delta^s d\mathcal{D}, \quad (20)$$

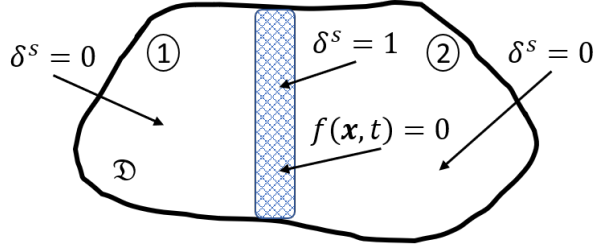


Figura 4: Variația funcției δ^s pe domeniul \mathcal{D} ocupat de fluidele 1 și 2. unde, δ^s este funcția delta asociată interfeței:

$$\delta^s = \begin{cases} 1 & \mathbf{x} = \mathbf{x}_s, \\ 0 & \mathbf{x} \neq \mathbf{x}_s, \end{cases} \quad (21)$$

definite de $f(\mathbf{x}_s, t) = 0$.

Se consideră că interfața separă două fluide cu proprietățile ρ_1, η_1 și ρ_2, η_2 , ce ocupă domeniul \mathcal{D} .

În această interpretare forma locală a ecuației de mișcare Navier-Stokes valabilă pe întreg domeniul \mathcal{D} , devine:

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} \right) = \rho \mathbf{b} - \nabla p + \eta \Delta \mathbf{v} + \sigma \kappa \mathbf{n} \delta^s, \quad (22)$$

unde

$$\begin{aligned} \rho &= \rho_1 H(f) + \rho_2 (1 - H(f)) \\ \eta &= \eta_1 H(f) + \eta_2 (1 - H(f)) \end{aligned} \quad (23)$$

Termenul din ecuația (22) ce acționează exclusiv pe interfață capătă forma:

$$\sigma \kappa \mathbf{n} \delta^s = \sigma \kappa \nabla H(f), \quad (24)$$

unde $H(f)$ este funcția Heaviside asociată interfeței (5) [37, 23].

Metoda VOF - implementare în ANSYS Fluent

Implementarea numerică a ecuației (22) folosind ecuația (24), implică o reprezentare continuă a funcției $H(f)$. În cazul metodei CSF (*Continuum Surface Force*), folosită și în metoda VOF (*Volum de Fluid*) [25, 2], $H(f) \cong \alpha$, unde α este fracția volumică a fluidului 1 într-un domeniu format din două fluide separate de o interfață.

Funcția Heaviside pe interfața $H(f)$ urmărește în timp interfața, deci $\frac{dH(f)}{dt} = 0$ [24]. Fracția volumică este reprezentată de fracția continuă $\alpha(\mathbf{x})$ care reprezintă o aproximație a funcției $H(f)$ în vecinătatea interfeței.

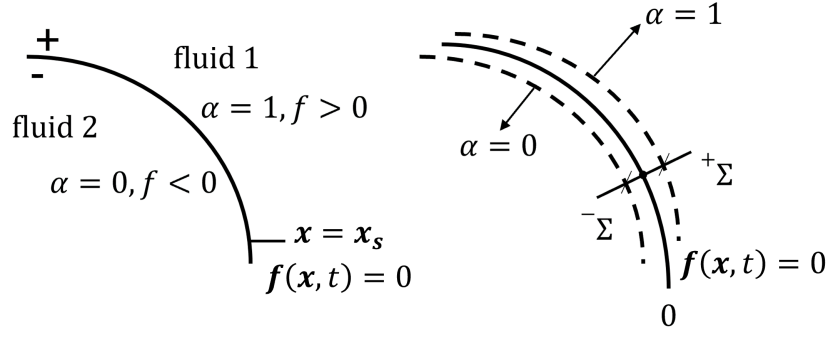


Figura 5: Reprezentarea fracției volumice la interfața de separare, unde 2Σ este grosimea interfeței, teoretic $\Sigma \rightarrow 0$.

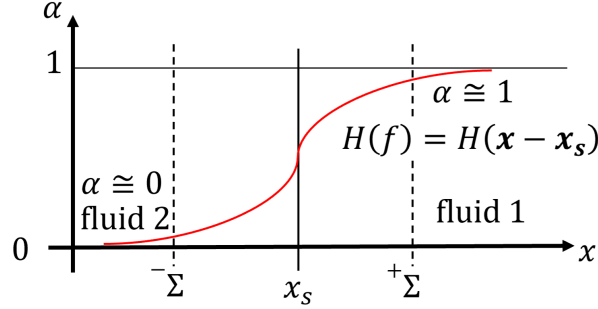


Figura 6: Variația fracției volumice.

Variația lui α în timp este practic identică cu variația interfeței în timp, deci $\alpha(\mathbf{x}, t)$ va avea derivata materială nulă:

$$\frac{d\alpha}{dt} = 0; \quad \frac{\partial\alpha}{\partial t} + \mathbf{v} \text{grad} \alpha = 0. \quad (25)$$

În Fig. 6 Σ definește vecinătatea spațială în jurul interfeței, practic grosimea interfeței, ce este direct asociată în cazul soluției numerice discretizării spațiale (*mesh-ului*) și a mărimii pasului de timp.

În consecință, în metoda VOF implementată în codul ANSYS Fluent, pentru un fluid incompresibil se rezolvă următoarele ecuații:

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0, \quad (26)$$

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} \right) = \rho \mathbf{b} - \nabla p + \eta \Delta \mathbf{v} + \mathbf{f}_c, \quad (27)$$

cu

$$\mathbf{f}_c = \beta \sigma \kappa \nabla \alpha, \quad \kappa = \nabla \cdot \frac{\nabla \alpha}{|\nabla \alpha|}, \quad \beta = \frac{2\rho}{\rho_1 + \rho_2}, \quad (28)$$

unde β este un coeficient de pondere folosit în schema ANSYS Fluent [2],

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} + \mathbf{v} \text{grad} \alpha = 0, \quad (29)$$

cu

$$\begin{aligned} \rho &= \rho_1 \alpha + \rho_2 (1 - \alpha) \\ \eta &= \eta_1 \alpha + \eta_2 (1 - \alpha) \end{aligned} \quad (30)$$

În sistemul format din ecuațiile (26), (27) și (29) toate forțele sunt forțe continue de spațiu și timp, necunoscutele fiind viteza \mathbf{v} , presiunea p și fracția volumică α .

Curgerea laminară omogenă

Utilizarea dispozitivelor microfluidice permite studiarea experimentală a diverselor fenomene hidrodinamice. Avantajul provine din faptul că se folosesc volume mici de fluide, iar straturile subțiri de fluid omogenizează rapid transferul de masă și de căldură [19], ceea ce determină distribuții de viteză, temperatură și de concentrație uniforme ce vor permite un control mai bun al întregului proces dinamic studiat.

O curgere laminară test ($Re = 7.08$) este investigată într-o trifurcație caracteristică pentru aplicațiile din microfluidică, Fig. 7. Dimensiunile caracteristice ale microcanalului sunt prezentate în Fig. 7. Canalul are o geometrie 3D cu o adâncime de $50\mu m$, discretizarea domeniului conținând 100,000 elemente. Proprietățile celor două meshuri sunt prezentate în Tab. 1.

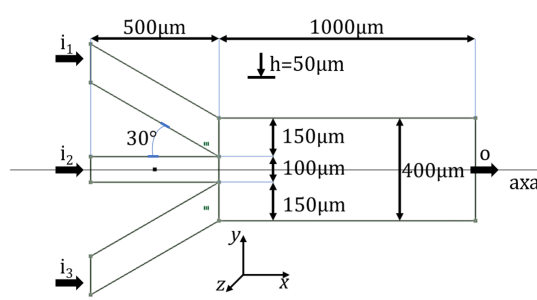


Figura 7: Canal microfluidic testat: trei intrări și o ieșire.

Simulările numerice (efectuate în regim nestaționar până la $t = 1 s$) sunt realizate cu două coduri numerice: ANSYS Fluent și COMSOL Multiphysics. Codurile ANSYS Fluent și COMSOL Multiphysics sunt coduri numerice comerciale specializate în simularea dinamicii fluidelor precum și combinarea mecanicii fluidelor cu electricitate sau magnetism. ANSYS Fluent este un cod ce folosește metoda volumelor finite, în timp ce COMSOL Multiphysics folosește metoda elementului finit.

Tabela 1: Proprietăți *mesh-uri* ANSYS Fluent și Comsol Multiphysics.

Proprietăți mesh					
Fluent	celule	fețe	noduri	Cal. min. ort.	Rap. max. dim.
	102635	318972	113960	0.86	10
Proprietăți mesh					
Comsol	elem.	Cal. min. elem.	Cal. med. elem.	Rap. vol. elem.	
	103942	0.1759	0.6827	0.002615	

Condițiile la limită impuse pentru această simulare sunt: viteză la cele trei intrări, presiune relativă zero la ieșire și condiția de aderență la pereții geometriei. Condiția inițială este reprezentată de valoarea vitezei la intrare, astfel pe intrările laterale, $V_1 = V_3 = 0.07 m/s$ iar pe intrarea centrală $V_2 = 0.09 m/s$. Fluidul de lucru este apa cu următoarele proprietăți de material la $25^\circ C$: $\rho = 1000 kg/m^3$ și $\eta = 1 mPas$.

În Fig. 8, sunt extrase din cele patru simulări distribuțiile de viteză și presiune pe axa microcanalului. Se observă o bună concordanță între distribuțiile obținute din ANSYS Fluent și COMSOL Multiphysics, atât pentru viteză cât și pentru presiune. Viteza medie ce rezultă din ambele coduri este $\approx 0.08 m/s$, iar numărul Reynolds aferent canalului principal este $Re = 7.08$. În continuare, vor fi folosite codurile comerciale, ANSYS Fluent pentru simularea dinamicii fluidelor imiscibile, iar COMSOL Multiphysics pentru simularea dielectrofizei în microcanele.

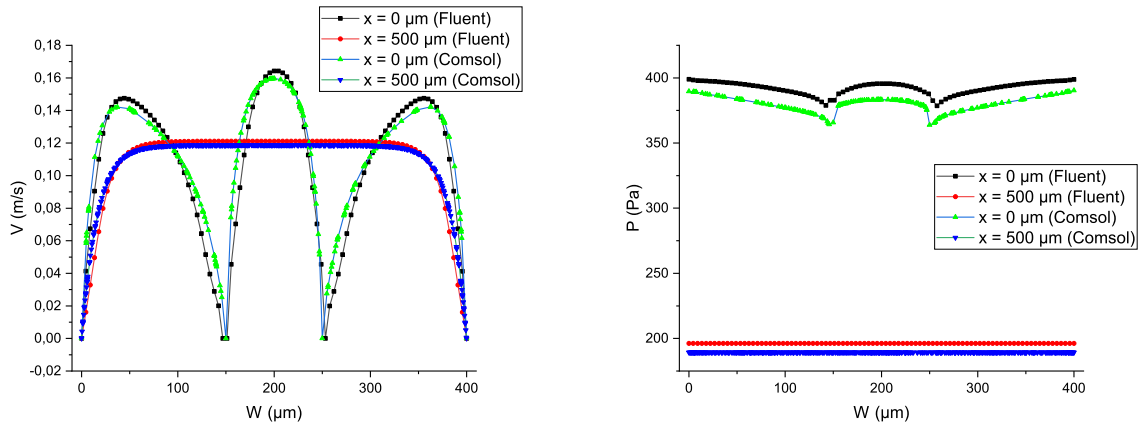


Figura 8: Distribuțiile de viteză și presiune pe planul median, la joncțiune $x = 0\mu m$ și la $x = 500\mu m$, cu un număr Reynolds $Re_1 = Re_3 = 5.02$ și $Re_2 = 5.97$.

Curgerea ulei-apă într-un canal plan

Cazul test plan este reprezentat de o curgere cu debit constant într-un microcanal drept, Fig. 9.

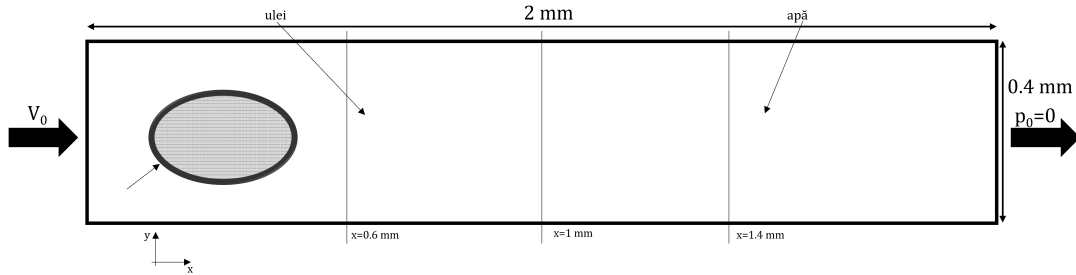


Figura 9: Canal microfluidic central discretizat și reprezentarea condițiilor inițiale și la limită.

Domeniul 2D este discretizat, iar rețeaua finală are $\approx 200,000$ de elemente. Condițiile la limită sunt reprezentate de: viteză la intrare constantă $V_0 = 0.01\text{m/s}$, presiune relativă $p_r = 0$ la ieșire și condiția de aderență la perete. Proprietățile de material ale fluidelor de lucru sunt prezentate în Tab. 2, iar tensiunea interfacială dintre cele două fluide are valoarea $\sigma = 25\text{mN/m}$.

Tabela 2: Proprietățile de material la 25°C .

Fluid	$\rho(\text{kg/m}^3)$	$\eta(\text{mPa} \cdot \text{s})$
apă deionizată	1000	1
ulei vegetal	925	55

Inițial canalul este umplut cu apă (aflată în repaus), uleiul fiind introdus la intrare cu viteza constantă V_0 . Folosind aceste date de intrare, programul soluționează sistemul de ecuații (26) - (30). Pentru o discretizare (*mesh*) dată a domeniului se obțin variațiile în timp și spațiu ale vitezei, presiunii și a fracției volumice α , care definește poziția și dinamica interfeței în canal.

Curgerea este laminară și nestaționară, modelul VOF folosit este implicit, interfața este setată ca fiind ascuțită (*sharp*), iar tensiunea interfacială dintre cele două fluide este modelată cu metoda Continuum Surface Force [5] vezi relațiile (26) - (30).

Reziduurile ecuațiilor sunt setate la 10^{-8} iar pasul de timp inițial este $\Delta t = 10^{-5} \text{ s}$. Pasul de timp se adaptează după fiecare pas de timp Δt sub condiția de stabilitate $CFL_{MAX} \leq 1$ (numărul Courant-Friedrichs-Lewy) și ajunge la valoarea $\Delta t = 9 \cdot 10^{-5} \text{ s}$. Numărul CFL este adimensional și se definește ca raportul dintre viteza la intrare, pasul de timp și cea mai mică lungime a unei laturi a *mesh*-ului:

$$CFL = \frac{V_0 \Delta t}{\Delta x} \leq CFL_{MAX}. \quad (31)$$

În Fig. 10 este prezentat conturul fazelor și vectorii de viteză, la $t = 0.1$ s. Din reprezentarea vectorilor de viteză se observă că în prezența interfeței de separare dintre cele două fluide, distribuția de viteze se aplatizează, fiind aproape identică cu cea impusă la intrare. Se confirmă astfel că interfața se deplasează practic cu o viteză constantă (cu excepția zonei din vecinătatea peretelui), curgerea fiind de tipul *plug flow*.

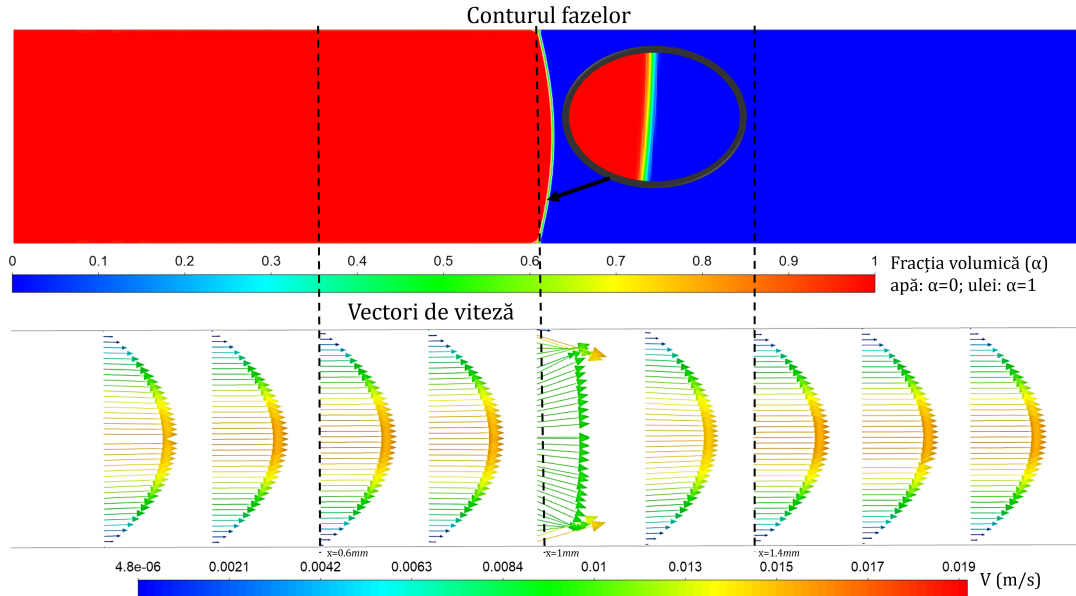


Figura 10: Conturul fazelor și vectorii de viteză la $t = 0.1$ s.

În Fig. 11 sunt prezentate reconstrucția interfeței și distribuțiile de viteză pe interfață $\alpha = 0.5$, la $x \approx 1$ mm, în faza de ulei, la $x = 0.6$ mm și în faza de apă, la $x = 1.6$ mm. Se observă faptul că la interfață curgerea este una de tipul *plug flow*, iar în cele două faze lichide distribuția de viteze este una parabolică, curgerea fiind complet dezvoltată.

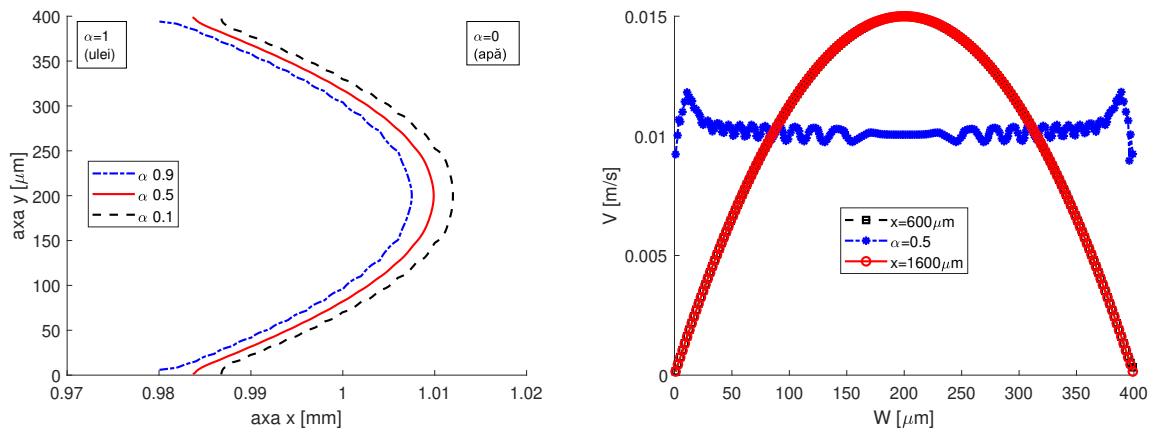


Figura 11: Reconstrucția interfeței pentru *mesh-ul* cu 200,000 elemente la $t = 0.1$ s. Distribuția de viteză pe axa-y, înainte de interfață la $x = 600\mu\text{m}$, pe interfață $x \approx 1000\mu\text{m}$, $\alpha = 0.5$ și după interfață la $x = 1600\mu\text{m}$, la $t = 0.1$ s.

Curgere multifazică în canalul 3D cu trifurcație

Curgerile multifazice în microcanale au aplicații în domenii unde este necesar amestecul dintre faze fluide, respectiv formarea picăturilor și a emulsiilor [34], [9].

Microcanalul din Fig. 7 a fost folosit pentru studiarea numerică a formării filmelor subțiri de fluide și interfeței, având un raport dimensional $h/w = 0.125$ (înălțime pe lățime), mișcarea fiind pseudo-plană de tipul Hele-Shaw.

Forma interfeței variază în funcție de condițiile de intrare, dar este constantă dacă raportul de viteză dintre ramura centrală și ramurile laterale ale microcanalului este menținut constant. În plus, forma interfeței depinde, de asemenea, de tipurile de fluide utilizate și de geometrie. Conturul fracției volumice este reprezentat în Fig. 12 pentru patru cazuri numerice, în care raportul vitezelor este crescut de la o simulare la cealaltă.

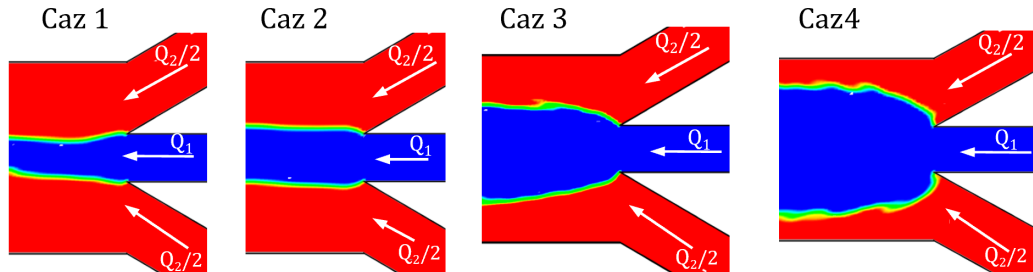


Figura 12: Conturul fracției volumice dintre cele două fluide imiscibile pentru următoarele rapoarte ale vitezelor: Cazul 1: $V_1/V_2 = 0.06$, Cazul 2: $V_1/V_2 = 0.12$, Cazul 3: $V_1/V_2 = 0.24$, Cazul 4: $V_1/V_2 = 0.8$, ©2019 IEEE [14].

Numere adimensionale

Numerele adimensionale folosite în microfluidică și analizate pe parcursul aceste teze sunt prezentate în Tabelul 3.

Tabela 3: Numere adimensionale caracteristice.

Nume	Simbol	Expresie matematică	Raport de forțe
Reynolds	Re	$Re = \frac{\rho V l}{\eta}$	inerție / vâscozitate
Weber	We	$We = \frac{\rho V^2 l}{\sigma}$	inerție / tensiune interfacială
Capilaritate	Ca	$Ca = \frac{\eta V}{\sigma}$	vâscozitate / tensiune interfacială
Bond	Bo	$Bo = \frac{\Delta \rho g l^2}{\sigma}$	gravitație / capilaritate
Ohnesorge	Oh	$Oh = \frac{\eta}{\sqrt{\rho \sigma l}}$	vâscozitate / inerție și tensiune interfacială

Metode experimentale

Tehnologia de fabricare a dispozitivelor microfluidice

În procesul de fabricare a unui microcanal prima etapă constă în alegerea substratului (materialul în care este fabricat microcanalul). Tipul materialului folosit pentru substrat poate varia în funcție de aplicația dorită și este prezentat în Fig. 13:

- sticlă și polimeri,
- suport metalic,
- semiconductori, materiale ceramice și compozite.

În ceea ce privește materialele polimerice, acestea oferă două avantaje importante pentru fabricarea dispozitivelor microfluidice : (i) accesul optic și (ii) flexibilitatea în proiectarea geometriei dorite. De asemenea, în comparație cu dispozitivele microfluidice produse în siliciu, costul de fabricație este redus semnificativ. Doi polimeri au fost studiați și cercetați intens în ultimii ani, pentru procesarea microcanalelor: PMMA (polimetilmetacrilat) și PDMS (polidimetilsiloxan).

Metodele de fabricare a microcanalelor folosind tehnologii mecanice și chimice sunt:

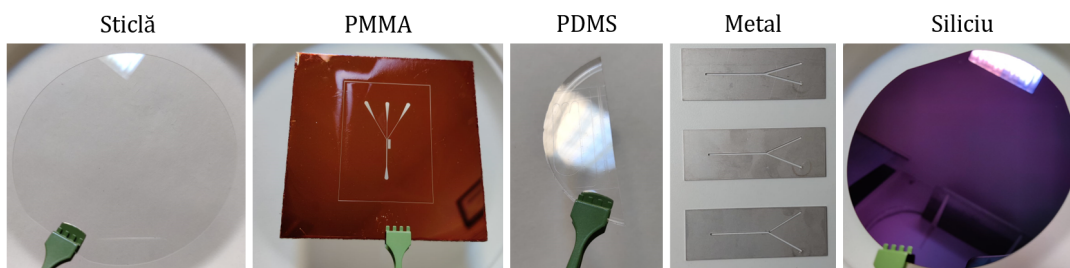


Figura 13: Material pentru substratul microcanalului.

- tăiere micromecanică;
- corodare uscată și umedă;
- gravură;
- ștanțare și imprimare;
- injectarea într-o matriță.

Metodele de fabricare a microcanalelor folosind tehnologii laser sunt:

- prelucrare cu laser UV;
- prelucrarea cu laser IR.

Fluxul tehnologic de fabricare a unui microcanal cu trifurcație

Dispozitivul microfluidic folosit în prezentele studii este creat folosind fotolitografia pe o plachetă de siliciu de 4 inci. În procesul fotolitografic este folosită o foto-mască, ce conține designul microcanalului. O foto-mască reprezintă un substrat de sticlă de 5 inci peste care este depus un strat de crom. Substratul de sticlă-crom este etalat cu un strat de fotorezist pozitiv. Foto-masca este obținută prin expunere directă a designului microcanalului folosind radiație cu lungimea de undă de 412 nanometri urmată de procesele chimice de dezvoltare, corodare și îndepărtare. Astfel design-ul microcanalului este obținut pe foto-masca în polaritatea dorită pentru a fi în acord cu procesele ulterioare ce implică transpunerea microcanalului într-o matriță PDMS. Componentele folosite în procesul de microfabricație sunt prezentate în Fig. 14.

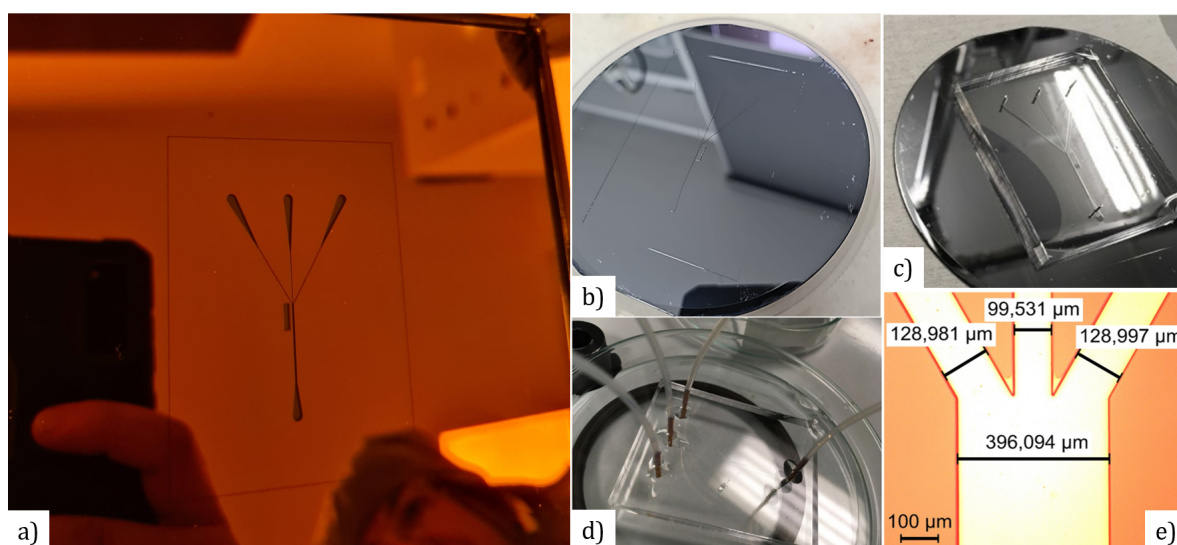


Figura 14: a) Mască fotolitografică, b) Matriță siliciu, c) PDMS pe matrița de siliciu, d) Canal microfluidic în PDMS sigilat cu sticlă și cu porturi atașate, e) Detaliu joncțiune microcanal.

În prima etapă, o plachetă de siliciu de 4 inci este curățată într-o baie de *piranha* (soluție de acid sulfuric și apă oxigenată în proporție de 3:1):



placheta fiind apoi spălată în apă deionizată. După aceste spălări urmează o fierbere în acetonă și una în alcool izopropilic. Toate aceste procedee de curățare sunt necesare pentru ca placheta să fie curată și pregătită pentru fotogravură.

După curățare, placheta este tratată termic în etuvă la temperatura de 130°C pentru o oră. Urmează un tratament în plasmă de ≈ 25 min ce curăță placheta de ultimele reziduuri și activează suprafața acesteia. Această activare a suprafeței este necesară pentru a ajuta fotorezistul să adere la suprafața plachetei.

Placheta este etalată cu fotorezist pozitiv HPR504 (SU8) prin centrifugare la 2500 rot/min pentru un minut. În acest fel fotorezistul a fost distribuit uniform pe întreaga suprafață a plachetei. Ulterior placheta este supusă la un tratament termic de 90°C pentru ca fotorezistul să polimerizeze.

Masca microcanalului a fost proiectată în programul CleWin 5 Fig. 14, iar acum este expusă pe placheta de siliciu. Masca este dezvoltată în sodă caustică, iar în acest fel se asigură faptul că fotorezistul a rămas doar în regiunile din afara microcanalului, ca un contur. După expunere și dezvoltare se realizează un tratament termic la 130°C pentru 30 min.

Placheta este corodată prin corodare uscată folosind DRIE (Deep Reactive Ion Etching). Corodarea uscată este anizotropă și în cazul de față se desfășoară pe adâncime. În cazul de față stratul de fotorezist este corodat, iar pe plachetă rămâne doar microcanalul cu trifurcație cu o adâncime de 50 μ m. Această adâncime este controlată de presiunea și debitul gazului SF₆. Reziduurile de fotorezist sunt curățate de pe plachetă cu o plasmă de O₂ dar și cu o ulterioară curățare în acetonă.

În cazul de față, polimerul folosit pentru turnare este PDMS-ul iar acesta este preparat după următoarea rețetă: se toarnă într-un recipient în proporție volumică de 10:1 baza elastomerului de siliciu și agentul de întărire după care amestecul este omogenizat timp de 5 minute. Kitul folosit a fost SYLGARD 184 (Sigma Aldrich, Chemie GmbH, Taufkirchen, Germania). Recipientul cu amestecul este pus la vidat timp o oră pentru a îndepărta bulele de aer.

În acest timp, placheta de siliciu cu matrița microcanalului este pusă la demulare. Acest pas este necesar deoarece acest demulant ajută dezlipirea PMDS-ul de pe matriță, astfel suprafața plachetei de siliciu este hidrofobizată.

Placheta este pusă pe un suport metalic și îngrădită cu un cilindru metalic, având grijă ca acesta să fie cât mai centrat pe plachetă, iar PDMS-ul se toarnă lent în cofraj pentru a evita formarea bulelor de aer. Ansamblul este pus în etuvă pentru un tratament termic la temperatura de 90°C pentru o oră. PDMS-ul este dezlipit de placheta de siliciu. PDMS-ul este găurit în locația porturilor microfluidice cu o pensă biomedicală ce are diametrul exterior de 1 mm.

PDMS-ul este lipit chimic (*chemical bonding*) în plasmă de O₂ de o plachetă de sticlă (pyrex). Această plachetă de sticlă va servi drept capac și astfel microcanalul a fost sigilat. Sunt create porturi microfluidice din tevi de cupru cu diametru exterior de 1 mm și lungime de 1 cm cărora li se atașează tubulatură microfluidică (fire cu diametrul interior de 1mm). Porturile sunt lipite pe PDMS cu adeziv epoxidic bicomponent rapid. Secțiunile de intrare și ieșire din microcana sunt evazate cu scopul de a evita blocarea microcanalului cu impurități.

Folosind acest flux tehnologic, reprezentat schematic în Fig. 15, se poate produce un microcanal care este în totalitate transparent din Fig. 14 d).

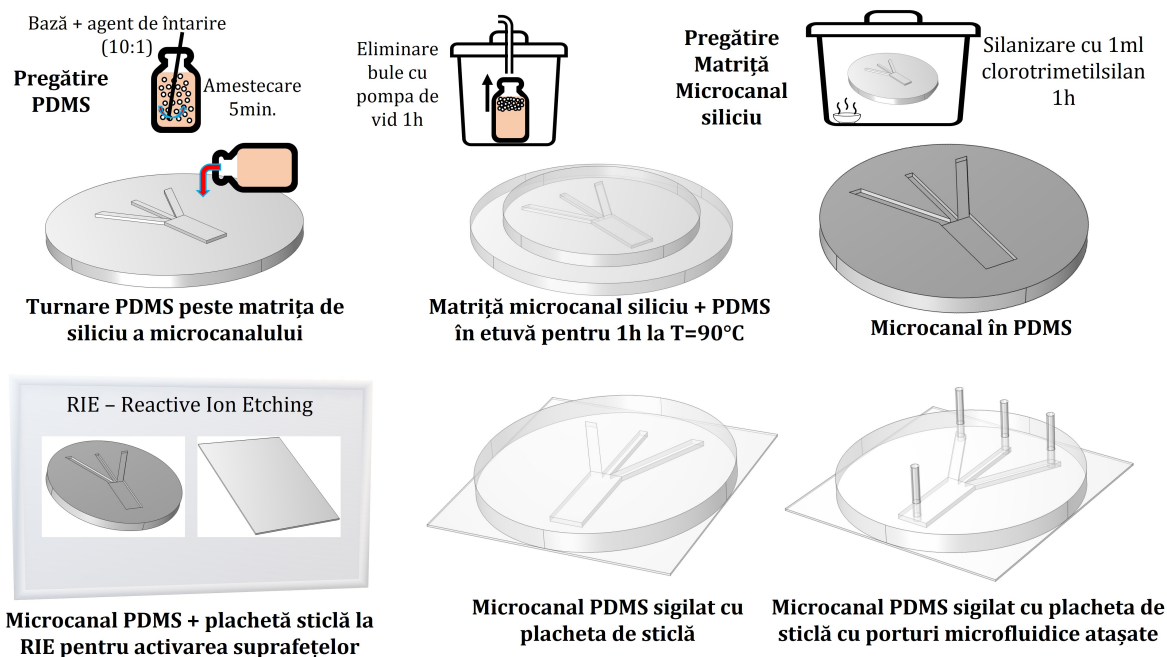


Figura 15: Flux tehnologic pentru fabricarea unui dispozitiv microfluidic din sticlă și PDMS.

Tehnici de vizualizare și analiză

Vizualizarea fenomenelor la interfața dintre două fluide imiscibile la scări spațiale reduse, necesită utilizarea unui microscop. Există mai multe metode pentru efectuarea vizualizărilor, dar pentru analiza curgerii este nevoie de un echipament specific. Astfel avem:

- microscopie optică
- microPIV

Instalația experimentală (A) din Fig. 16 este compusă dintr-un microscop inversat Leica, cu magnificație de 10x, 20x și 40x, 3 pompe de presiune Mitos P-Pump system Dolomite Center Ltd., ce pot fi controlate cu ajutorul unui software, o sursă de lumină, cameră CCD (alb-negru), microcanal și sistem microPIV pentru determinarea câmpului de viteze. Cu ajutorul acestei instalații experimentale se pot efectua atât vizualizări cât și măsurători experimentale.

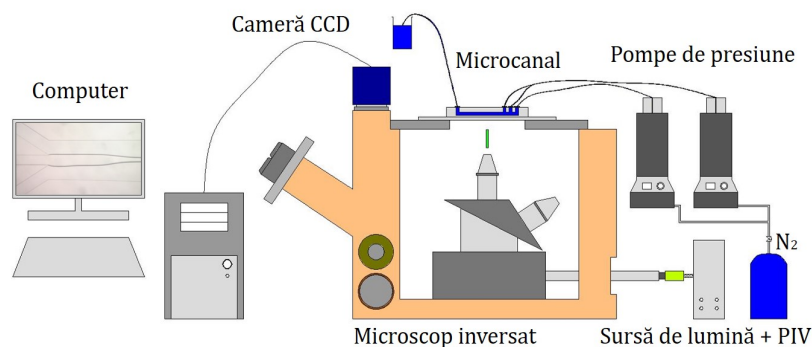


Figura 16: Schiță a montajului experimental utilizat pentru vizualizări și experimente microPIV (A), de la INCD pentru Microtehnologie, IMT-București, Romania.

Instalația experimentală (B) din Fig. 17 este compusă dintr-un microscop inversat Olympus CKX41, cu magnificație de 10x, 20x și 30x, pompă seringă și cameră CCD.

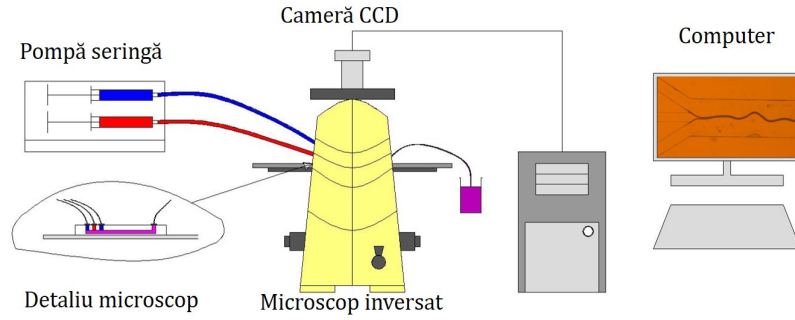


Figura 17: Schiță a montajului experimental utilizat pentru vizualizări (B) de la DHMHIM, Universitatea Politehnică din București, România.

Microscopie optică și micro-*Particle Image Velocimetry*

Utilizând cele două instalații experimentale descrise, în Fig. 18 s-au obținut următoarele vizualizări utilizând ca fluide lucru: ulei mineral și alcool izopropilic. Este realizată corespondența vizualizărilor cu datele de intrare între cele două sisteme de vizualizare folosite: a) sistemul presiune controlată (Fig. 18 a, vitezele în canal se pot măsura cu ajutorul sistemului microPIV); b) sistemul debit controlat (Fig. 18 b, viteza $V_2 = 0.086 m/s$, $V_1 \in [0.0022, 0.022] m/s$), prin menținerea constantă a debitului/presiunii pe canalele laterale și creșterea debitului/presiunii pe canalul central. De menționat este faptul că debitul pe un canal lateral este $Q_2/2$.

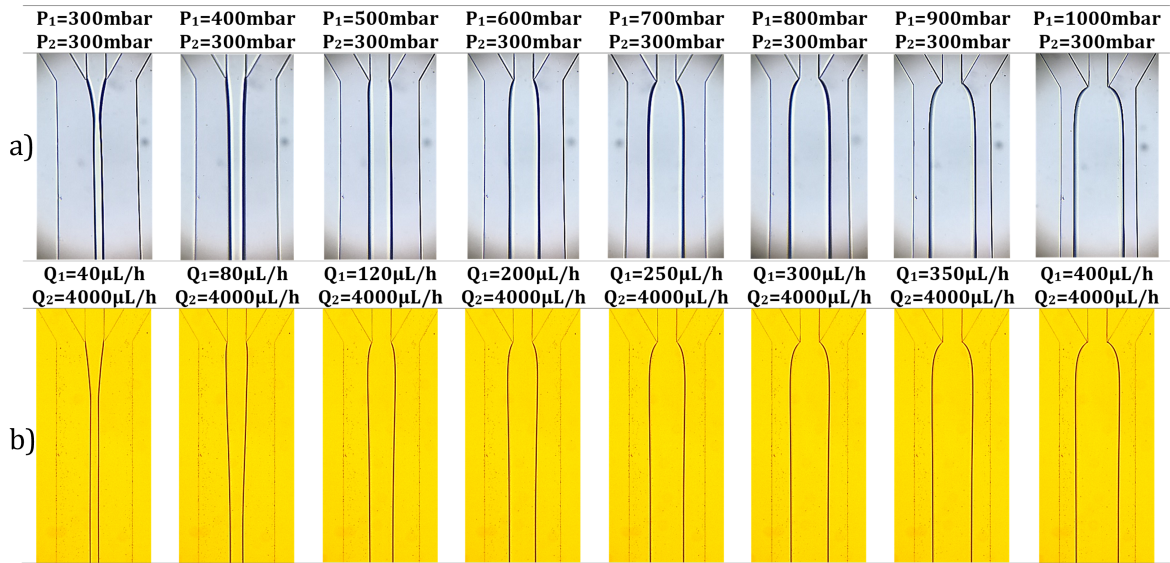


Figura 18: Vizualizări ale curgerii bifazice: a) Sistemul cu control în presiune, în care presiunea uleiului mineral pe canalul central (P_1) este crescută de la $300 mbar$ la $1000 mbar$ iar presiunea alcoolului izopropilic pe canalele laterale este constantă $P_2 = 300 mbar$; b) Sistemul cu control în debit, unde pe canalul central debitul uleiului mineral (Q_1) este crescut de la $40 \mu L/h$ la $400 \mu L/h$, iar pe canalele laterale debitul alcoolului izopropilic (Q_2) este constant $Q_2 = 4000 \mu L/h$.

Pe canalul cu trifurcație au fost realizate experimente folosind apă cu colorant roșu pe canalele laterale și apă cu colorant albastru pe canalul central. Următoarele debitele au fost impuse în experiment la intrare: $Q_1 = 2000 \mu L/h$, corespunzător vitezei din simulare $V_2 = 0.09 m/s$ și $Q_2 = 4000 \mu L/h$, corespunzător vitezelor $V_1 = V_3 = 0.07 m/s$. Astfel, spectrul curgerii aferent simulărilor numerice din Fig. 8 a fost obținut experimental în Fig. 19.

În Fig. 20, simularea numerică prezentată este validată cantitativ cu distribuția de viteză

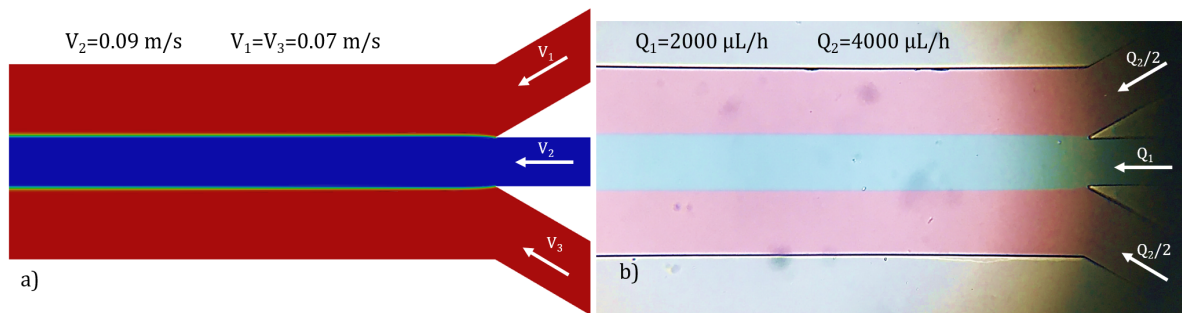


Figura 19: a) Simulare numerică a curgerii folosind metoda VOF în ANSYS Fluent; b) Vizualizare a curgerii laminare în canalul cu trifurcație (v. Fig. 8).

obținută cu sistemul microPIV. Se observă că în cazul curgerii laminare, distribuția vitezei este una logaritmică, distribuție ce este determinată de raportul dimensional redus al microcanalului. Diferențe între cele două distribuții de viteze apar în apropierea peretelui, unde particulele înregistrate nu se găsesc pe planul median. Ele sunt generate experimental, după cum se poate observa și din magnitudinea incertitudinilor de măsură.

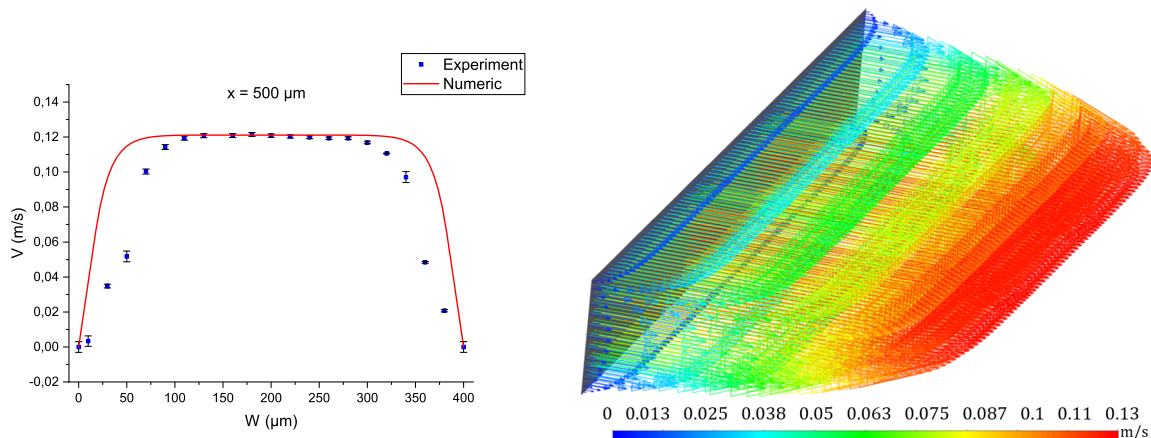


Figura 20: Validare cantitativă a simulării numerice cu distribuția de viteze pe planul median obținută cu sistemul microPIV la distanța de $500 \mu m$ de joncțiune și vectorii de viteză din simularea numerică.

Curgerea multifazică prezentată anterior în canalul cu trifurcație, este validată calitativ prin vizualizări experimentale directe ale curgerii la rapoartele de viteză impuse în simulare, Fig. 21. Se poate observa că rezultatele numerice obținute pentru evoluția interfeței în Fig. 12 sunt corelate cu vizualizările experimentale din Fig. 21. Vitezele folosite în cadrul experimentului sunt prezentate în Tab. 4.

Tabela 4: Conversia debitelor în viteze.

	Q	Q [$\mu L/h$]	Q [m^3/s]	V [m/s]	V_1/V_2
Q_1	Caz 1	116.28	$3.23 \cdot 10^{-11}$	0.006	0.06
	Caz 2	232.56	$6.46 \cdot 10^{-11}$	0.013	0.12
	Caz 3	465.12	$1.292 \cdot 10^{-10}$	0.026	0.24
	Caz 4	1550.4	$4.3 \cdot 10^{-10}$	0.086	0.8
$Q_2/2$		2500	$6.94 \cdot 10^{-10}$	0.108	-

Pentru o validare cantitativă se extrag și se compară în formă adimensională vitezele din cazul numeric cu raportul vitezelor $V_1/V_2 = 0.06$ și un caz experimental $P_1 = 400 mbar$, $P_2 = 600 mbar$ pe o linie normală la curgere în canalul principal ($W = 400 \mu m$) în Fig. 22. Pe axa verticală, viteza este normalizată cu viteza maximă obținută din experiment, respectiv simulare. Se observă o bună concordanță a rezultatelor experimentale cu soluția numerică.

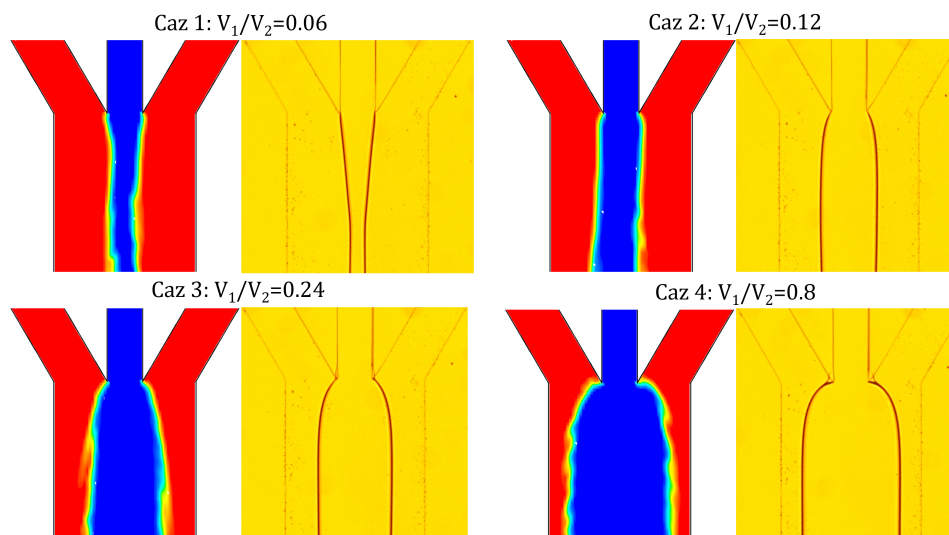


Figura 21: Rezultate numerice după timpul de 1 s vs. vizualizări experimentale pentru diferite valori ale raportului de viteză/debit la intrarea fluidelor în microcanalele trifurcăției. Este important de precizat că interfața numerică nu este stabilizată după 1 s (timpul fizic a fost limitat deoarece mărimea timpului de calcul necesar pentru convergența soluției este foarte mare, de ordinul zilelor pentru un caz).

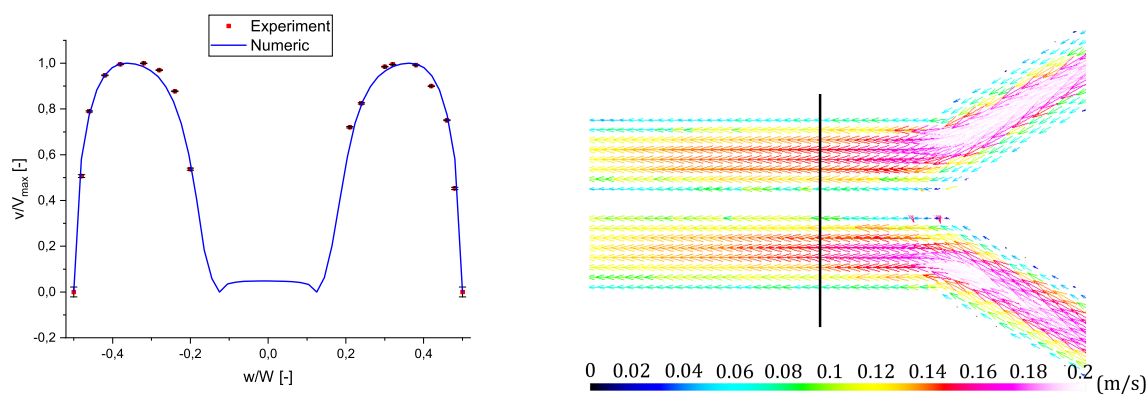


Figura 22: Compararea distribuției de viteze în formă adimensională pe o linie în microcanalul central, între cazul numeric cu raportul vitezelor $V_1/V_2 = 0.06$ și un caz experimental cu $P_1 = 400 \text{ mbar}$, $P_2 = 600 \text{ mbar}$.

Caracterizarea fluidelor folosite

În studiile experimentale sunt folosite o serie de lichide newtoniene:

- apă
- alcool izopropilic (IPA)
- alcool etilic (ETA)
- ulei vegetal
- ulei mineral
- soluții de apă cu glicerină

Proprietățile de material, densitatea și vâscozitatea, au fost determinate experimental. Densitatea a fost determinată cu metoda masă pe volum, iar vâscozitatea a fost determinată

cu un reometru rotațional într-un test standard de oscilație. Astfel, proprietățile fluidelor sunt prezentate în tabelul Tab. 5:

Tabela 5: Proprietățile de material la 25°C.

Fluid	Densitate [kg/m ³]	Vâscozitate [mPas]
apă	1000	1
alcool izopropilic	786	2.4
alcool etilic	789	1.8
ulei vegetal	925	55
ulei mineral	873	160
Soluție AG 1		
apă 21.86%	1209.9	55
glicerină 78.14%		
Soluție AG 2		
apă 12.5%	1231.3	160
glicerină 87.5%		

Tensiunea interfacială dintre diverse perechi de fluide folosite, a fost determinată cu Metoda Picăturii Suspendate [16], iar valorile acesteia sunt prezentate în Tab. 6.

Tabela 6: Tensiunea interfacială.

Fluide	Tensiune interfacială [mN/m]
apă	25
ulei vegetal	
alcool izopropilic	1.2
ulei mineral	
alcool etilic	4.6
ulei mineral	
ulei vegetal	25.82
soluție AG 1	
ulei mineral	28.46
soluție AG 2	

Aplicații

Acest capitol este dedicat studiilor experimentale și numerice ale interfeței în configurații microfluidice folosite curent în aplicații. Analizele sunt realizate cu precădere în geometria prezentată anterior, respectiv trifurcația din Fig. 7 (sau cu dimensiuni apropiate).

Analiză numerică a curgerii laminare într-o geometrie 2D

În studiul curent se utilizează varianta plană a geometriei cu trifurcație, vezi Fig. 7, caracterizată printr-un unghi între canalul central și cele laterale de 30°. Pentru acest studiu de caz, scopul este de a corela rezultatele obținute cu două coduri numerice OpenFOAM și ANSYS Fluent, când debitul masic are aceeași valoare pentru toate cele trei intrări.

Alegerea geometriei 2D este justificată nu numai datorită timpului redus de calcul, ci și faptului că aceste microcanale au un raport dimensional foarte mic ($h/w \ll 1$) ceea ce justifică aproximația mișcării plane.

În OpenFOAM, domeniul este discretizat folosind blockMesh și *mesh-ul* este caracterizat numai prin elemente hexaedrice cu un raport dimensional de 2.5. În ANSYS Fluent, pre-

procesorul Gambit a fost folosit pentru a discretiza domeniul și în Tab. 7 proprietățile celor două *mesh-uri* sunt prezentate.

Tabela 7: Proprietățile *mesh-ului*, [17] ©2019 IEEE.

Mesh	Noduri	Celule	Fețe
blockMesh	499354	234200	959276
Gambit	161882	157031	318912

Întrucât fluidul de lucru este newtonian, următoarele ipoteze sunt valide: fluidul este incompresibil, mișcarea este staționară și regimul de curgere este laminar. Ca atare, sistemul de ecuații Navier-Stokes (1) guvernează curgerea și este discretizat folosind Metoda Volumului Finit [26] peste domeniu împreună cu ecuația de continuitate (2). În ceea ce privește condițiile la limită, intrarea este stabilită ca viteza la intrare, la ieșire presiunea relativă este zero și pentru pereți condiția de aderență la perete.

Au fost studiate trei debite masice, iar numărul Reynolds corespunzător este: 0.1, 0.75 și 1, calculat cu formula din Tab.3. Fluidul de lucru este apa și proprietățile sale sunt: densitatea $\rho = 998.2 \text{ kg/m}^3$ și vâscozitatea dinamică $\eta_0 = 1.003 \text{ mPas}$. Deoarece orificiile de intrare din microcanal au dimensiuni diferite, pentru a avea același debit, vitezele inițiale impuse sunt: $v_A = v_C = 0.005 \text{ m/s}$ și $v_B = 0.0075 \text{ m/s}$. Debitul masic corespunzător este egal pentru toate cele trei microcanale secundare: $Q_A = Q_B = Q_C = 0.00074863 \text{ kg/s}$.

Primul parametru investigat este mărimea vitezei și, după cum se poate observa din Fig. 23, după intersecția celor trei canale secundare, profilul vitezei tinde rapid spre o distribuție parabolică așa cum este de așteptat atunci când regimul de curgere este laminar. Din acest motiv rezultatele sunt prezentate doar pe patru linii, deoarece în canalul principal după $100 \mu\text{m}$ distribuția vitezei tinde spre un profil parabolic. La compararea celor două coduri numerice rezultatele sunt într-o foarte bună concordanță și singura diferență între valori este în apropierea peretelui, deoarece din OpenFOAM, când se extrag datele, viteza este interpolată în punctele centrale ale celulei, ca atare, nu există valori în punctele *mesh-ului* care să fie returnate.

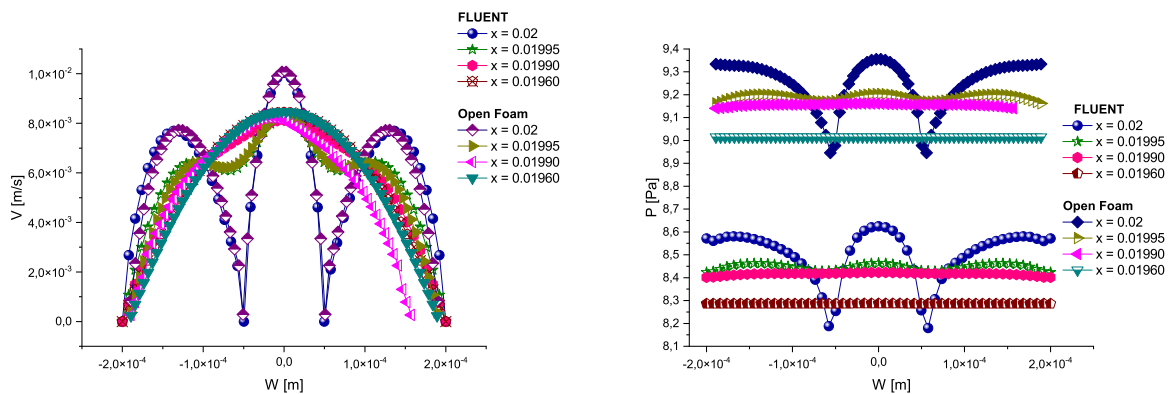


Figura 23: Compararea distribuției vitezei între ANSYS Fluent și OpenFOAM pe patru linii orizontale după joncțiune. Compararea distribuției presiunii pe patru linii orizontale după joncțiune, [17] ©2019 IEEE.

Principala diferență dintre cele două coduri numerice apare atunci când este analizată presiunea. După cum se poate observa din Fig. 23, chiar dacă distribuția presiunii pe liniile orizontale urmează aceeași alură, există o diferență în valorile acestora. Există mai multe motive pentru această nepotrivire a presiunii, cum ar fi cele două tipuri de algoritmi care realizează cuplarea presiune-viteză, dar singura modalitate de a asigura corectitudinea unui cod sau a altuia este prin validare experimentală.

Curgerea a fost analizată pe o axă de-a lungul microcanalului în Fig. 24. Viteza pe

axa microcanalului este caracterizată de două puncte de inflexiune și prezintă o scădere rapidă urmată de o creștere mică a magnitudinii sale după intersecția celor trei microcanale secundare. Acest lucru, la rândul său, se explică prin faptul că trei debite egale intră în microcanalul principal, ce are o secțiune mai mare, în același timp. Mai mult, presiunea variază pe toată axa microcanalului și poate fi împărțită în două funcții liniare, dar cu pante diferite. După cum se poate observa, efortul frecare la perete prezintă un maxim la intrarea în microcanalul principal și apoi scade asimptotic la valoarea specifică a WSS la perete de $0.06Pa$.

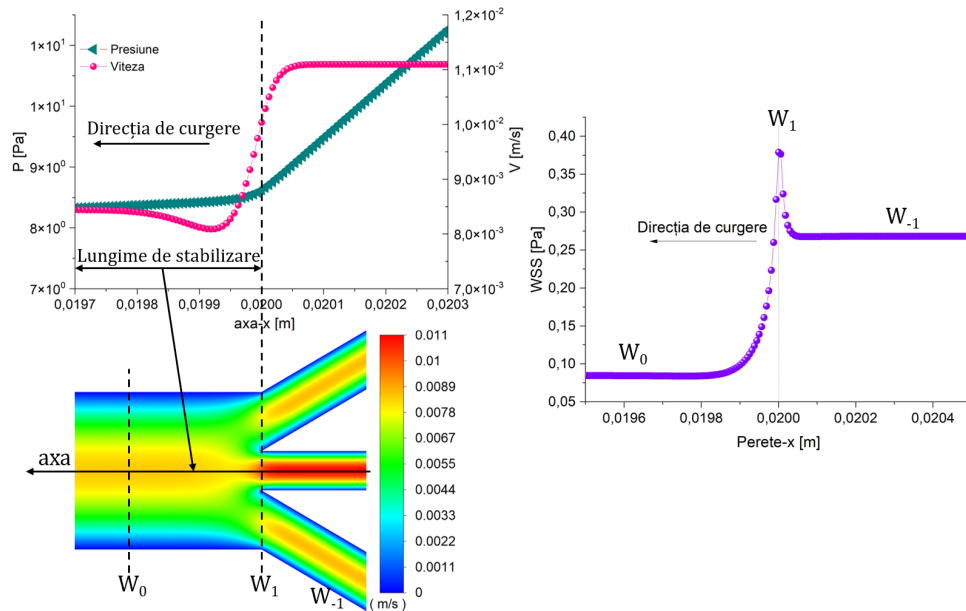


Figura 24: Variațiile mărimii presiunii și vitezei de-a lungul unei axe verticale în Fluent, Contururi ale mărimii vitezei - Fluent. Variația tensiunii de forfecare a peretelui pe peretele drept în Fluent cu localizarea a punctelor, [17] ©2019 IEEE.

Influența nanostructurilor asupra curgerii laminare

Nanomaterialele carbonice au atras atenția comunității științifice datorită proprietăților mecanice, optice și electrice remarcabile. Grafena monostrat-un singur strat de atomi de carbon aranjați într-o structură hexagonală, este probabil cel mai promițător material carbonic datorită proprietăților sale extraordinare inclusiv transparență ridicată, conductibilitate electrică bună, mobilitate electronică și flexibilitate. Atunci când nanomaterialele carbonice sunt integrate în microfluidică apar multiple avantaje [50]. Aceste avantaje se prezintă sub forma senzorilor: tranzistori cu efect de câmp cu canalul sursă drenă din grafenă [49], senzori optici [51] și biosenzor [32]. În acest studiu au fost create trei dispozitive microfluidice bazate pe grafenă.

Microcanalele sunt create pe o plachetă de siliciu prin fotogravură standard. Fotorezistul utilizat este AZ4562. Corodarea se realizează prin utilizarea DRIE (deep reactive ion etching) cu un proces Bosch. Adâncimea microcanalului este de $70 \mu m$ iar designul este prezentat în Fig. 25.

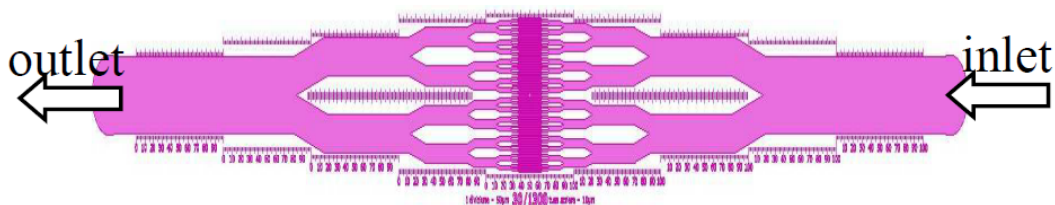


Figura 25: Design microcanal, [10] ©2021 IEEE.

Trei tipuri de materiale carbonice sunt încorporate în dispozitivele microfluidice: SLG (grafenă monostrat), NCG (grafit nanocristalin) și GNW (grafenă verticală); prin diferite me-

tode. SLG este transferat de pe substrat de Cu, în timp ce NCG și GNW sunt crescute direct în microcanal.

Cu microPIV a fost efectuat studiul pe cele trei microcanale folosind alcoolul izopropilic (IPA) ca fluid de lucru. Regiunea de interes pentru studiul microPIV este reprezentată de ramura de $120 \mu m$. Se neglijează influența bifurcației asupra profilului de viteză, măsurătorile se fac la distanța de $240 \mu m$ de bifurcație. Sunt impuse patru presiuni la intrare: 100 mbar, 200 mbar, 300 mbar și 400 mbar. Metoda folosită pentru corelarea vectorilor de viteză a fost *Average Correlation* (din 100 de imagini) cu o fereastră de interogare de 16×16 pixeli. Se face analiza incertitudinii în software-ul Dantec folosind metoda *Peak Height Ratio* (Charonko & Vlachos, 2013).

În Fig. 26 este prezentată distribuția vitezei pentru două cazuri. SLG are o înălțime de 0.3 nm și profilul de viteză are o distribuție parabolică în toate cazurile. NCG are o înălțime de $360\text{-}380 \text{ nm}$, iar influența sa asupra profilului de viteză este una semnificativă. Profilul nu mai are o distribuție parabolică dar, în acest caz, se aplatizează. GNW are o înălțime de 450 nm , iar la fel ca în cazul NCG are o influență mare asupra profilului de viteză. Așa cum era de așteptat în cazul vorticității, valorile mari se înregistrează aproape de pereți. O distribuție uniformă și coerentă pentru curgerea laminară este obținută pentru SLG în Fig. 26 B.

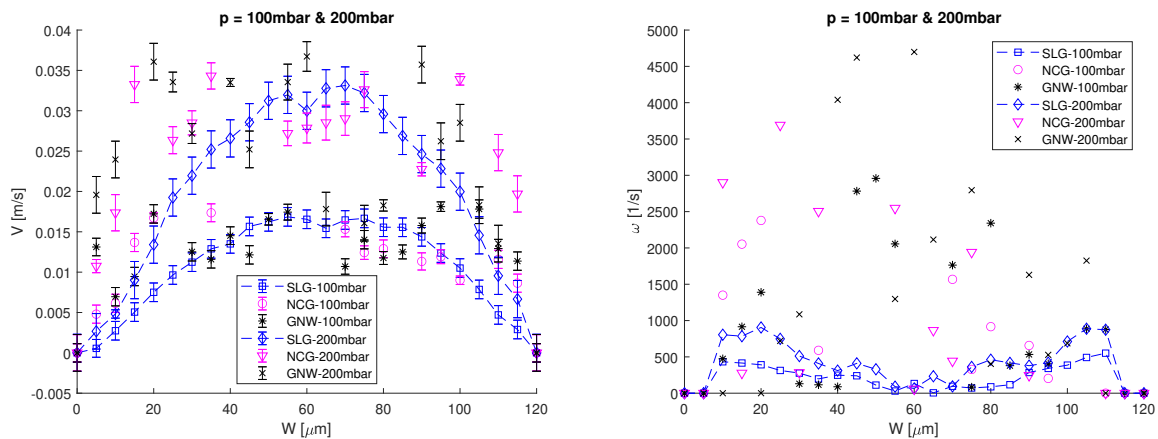


Figura 26: Distribuții de: A. Viteză; Presiunea la intrare de 100 și 200 mbar: SLG albastru (pătrate-100mbar, diamante-200mbar), NCG magenta (cercuri-100mbar, triunghiuri-200 mbar) și GNW negru (stea-100mbar, cruce-200mbar); B. Vorticitate; Presiunea la intrare de 100 și 200 mbar cu același cod al culorilor, [10] ©2021 IEEE.

În cazurile NCG și GNW, valori maxime sunt înregistrate pe toată lățimea microcanalului. În cazul SLG, magnitudinea vorticității scade semnificativ în mijlocul canalului, unde gradientul vitezei este scăzut. Această perspectivă de la distribuția vorticității evidențiază influența nanomaterialelor carbonice asupra câmpului de curgere.

Curgere multifazică într-o bifurcație-Y

Importanța curgerii multifazice constă în numeroase aplicații care variază de la corpul uman la natură și aplicații industriale. Chiar și fără a avea o schimbare a fazei, problemele de curgere multifazică necesită o atenție specială datorită formulării lor complexe.

Este investigată experimental și numeric evoluția interfeței dintre apă deionizată și ulei vegetal într-un dispozitiv microfluidic cu bifurcație Y, Fig. 27. Partea experimentală constă în vizualizări ale curgerii și măsurători microPIV. Scopul investigațiilor experimentale este de a valida calitativ și cantitativ simularea numerică prin folosirea aceluiași condiții de curgere.

Simularea numerică efectuată în acest studiu este realizată în codul comercial ANSYS Fluent. Metoda Volumului de Fluid a fost folosită pentru modelarea evoluției interfeței în

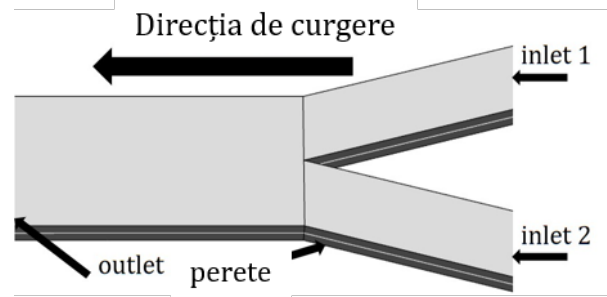
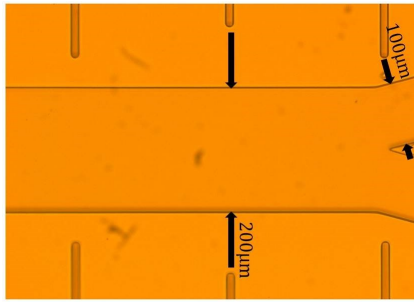


Figura 27: Dimensiuni caracteristice microcanalului PDMS în formă de Y, dispozitivul are o adâncime de $h=50\mu m$ și un unghi între ramuri de 30° ; Geometria microcanalului alături de condițiile limită: intrarea 1 – apă deionizată, intrarea 2 – ulei vegetal, [15] ©2021 IEEE.

interiorul microcanalului dintre uleiul vegetal și apa deionizată. Domeniul este reprezentat de microcanalul din Fig. 27. Domeniul este 3D și *mesh-ul* microcanalului cu bifurcație Y are 0.5 milioane de elemente, intrarea este impusă viteza fluidului, la ieșire – presiunea relativă (egală cu 0), iar pereții cu condiție de limită fără alunecare.

Pentru partea de vizualizare a curgerii se efectuează experimentul folosind configurația experimentală A. Debitul folosit în experiment sunt impuse drept condiții inițiale în simularea numerică. Trecerea de la debit la viteză se realizează prin utilizarea ecuației de continuitate și rezultatele sunt prezentate în Fig. 28.

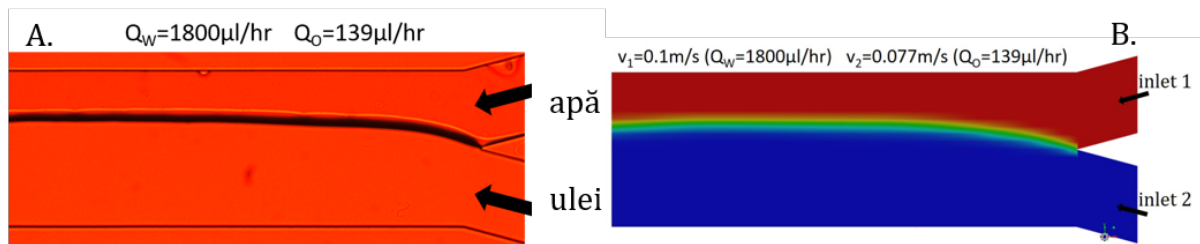


Figura 28: Validarea calitativă a simulării numerice: A) Vizualizări curgerii la debitele specifice B) Contururi de fază ale fracției de volum (apă roșie, ulei vegetal albastru), [15] ©2021 IEEE.

În Fig. 29 sunt afișate comparativ datele obținute din măsurătorile microPIV cu datele din simulări numerice pe o dreaptă perpendiculară pe microcanal plasată la $500\mu m$ distanță de joncțiunea Y. Profilul parabolic al distribuției de viteză a fost capturat în interiorul microcanalului atât în experiment cât și din simularea numerică, cu o ușoară diferență de 0.02 m/s în experiment.

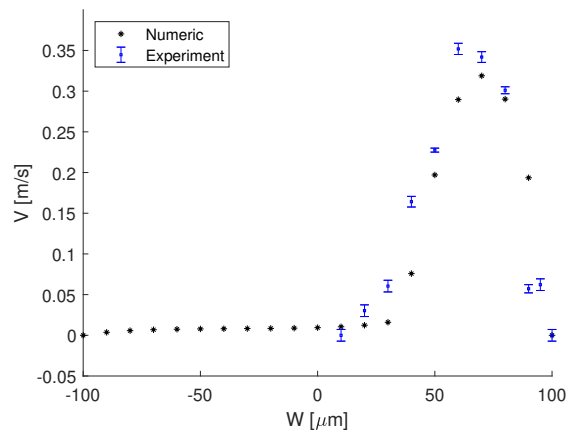


Figura 29: Validarea cantitativă a simulării numerice: Compararea distribuției vitezei, pe o linie normală la curgere plasată la $500\mu m$ de joncțiunea Y, între datele experimentale și cele numerice, [15] ©2021 IEEE.

Acest decalaj se poate datora timpului dintre două lasere impulsuri (Δt). Pentru un

$\Delta t = 40\mu s$, corelația a fost bună, cu 10 particule în interiorul unei ferestre de interogare. Având în vedere rezultatele din Fig. 29, Δt ar fi trebuit să fie puțin mai mare.

Curgere multifazică într-un microcanal cu trifurcație

În curgerea multifazică, validarea și verificarea câmpului de curgere precum și prezența interfețelor multiple în microcanal sunt subiecte de mare importanță în dinamica fluidelor computaționale. Când fluidele sunt imiscibile, există mai multe metode utilizate pentru modelarea interfeței. Pot fi urmate două direcții principale: metode de suprafață și metode de volum [43]. În general, în ambele metode, pentru formularea unui fluid este utilizată ecuația Navier–Stokes în care se adaugă un termen sursă pentru a lua în considerare efectele tensiunii superficiale, împreună cu o ecuație diferențială care trebuie să fie rezolvată la interfață.

În acest studiu sunt realizate două simulări numerice 3D VOF utilizând două formulări VOF, și anume explicită și implicită, pe o geometrie de referință, vezi Fig. 7. Simulările numerice sunt ulterior validate calitativ, prin compararea vizualizărilor curgerii cu contururile de fază și validate cantitativ, comparând distribuțiile de viteză și vorticitate obținute din simulări cu datele experimentale obținute din microPIV.

Condiția inițială pentru aceste simulări este valoarea vitezei la intrare. Pentru ramurile laterale ale microcanalului, $v_1 = v_3 = 0.1[m/s]$ iar pentru ramura centrală $v_2 = 0.006[m/s]$. În plus, pentru a scurta timpul de simulare, microcanalul este umplut cu apă deionizată, în timp ce a doua intrare este umplută cu ulei vegetal.

În Fig. 30, vectorii viteze sunt prezentați pornind de la un plan de $500\ \mu m$ distanță de joncțiune. Vectorii viteze sunt prezentați la o scară dublată pentru a arăta profilul parabolic al fazei apoase și influența acesteia asupra fazei uleioase. S-a observat un fenomen la interfață, datorită diferenței mari de mărime a vitezei dintre cele două faze, interfața acționează ca un perete în mișcare la care faza uleioasă aderă, rezultând astfel o curgere accelerată în apropierea interfeței pentru faza uleiului.

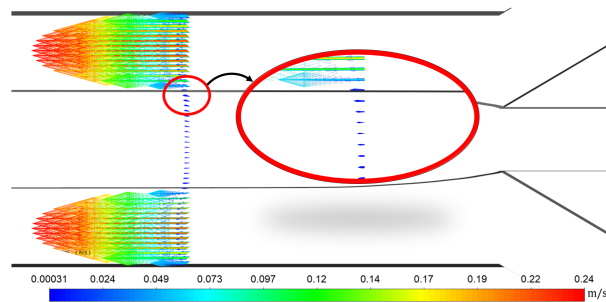


Figura 30: Creșterea vitezei în faza uleioasă în vecinătatea interfeței, [13] [licență CC BY 4.0](#).



Este realizată compararea dintre cele două simulări numerice, unde S0 este simularea VOF explicită efectuată pe *mesh-ul* #1 de 2.5M elemente, în timp ce S2 este simularea VOF implicită efectuată pe *mesh-ul* #2 de 1M elemente. În Fig. 31, conturul fazei este prezentat alături de spațierea *mesh-ului* pentru fiecare simulare și se poate observa că interfața din S0 este mai difuză decât interfața din S2, având în vedere diferența clară dintre cele două *mesh-uri*. Mai mult, o interfață difuză este legată de curenții falși generați la interfață [52], iar pentru VOF explicit, au fost generați mai mulți curenți falși. *Mesh-ul* folosit pentru S2 are mai multe elemente după joncțiune decât *mesh-ul* S0. Pentru a putea compara corect cele două simulări, este realizată o nouă simulare numerică utilizând metoda VOF explicită pe *mesh-ul* #1 - S1.

În Fig. 32 sunt prezentate distribuțiile vitezei și vorticității. Este prezentată evoluția distribuției vitezei pe planul median de la intrarea în canalul principal, $x = 0\ \mu m$ până la

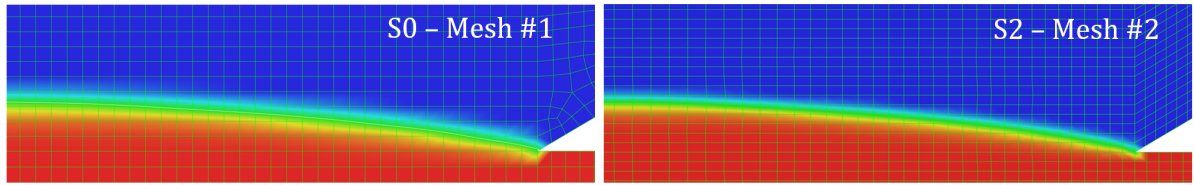


Figura 31: Detalii ale contururilor fazei interfeței; diferența dintre cele două simulări S0 și respectiv S2. Grosimea interfeței (ϕ) este diferența dintre fracțiile de volum, $\alpha = 0.1$ și $\alpha = 0.9$ și pentru S1 $\phi_{S1} = 19.3 \mu m$, în timp ce pentru S2, $\phi_{S2} = 12.8 \mu m$, [13] [licență CC BY 4.0](#).



$x = 500 \mu m$ distanță de joncțiune. La borna de $500 \mu m$ în canal, curgerea este complet dezvoltată iar viteza are o distribuție parabolică pentru faza apoasă.

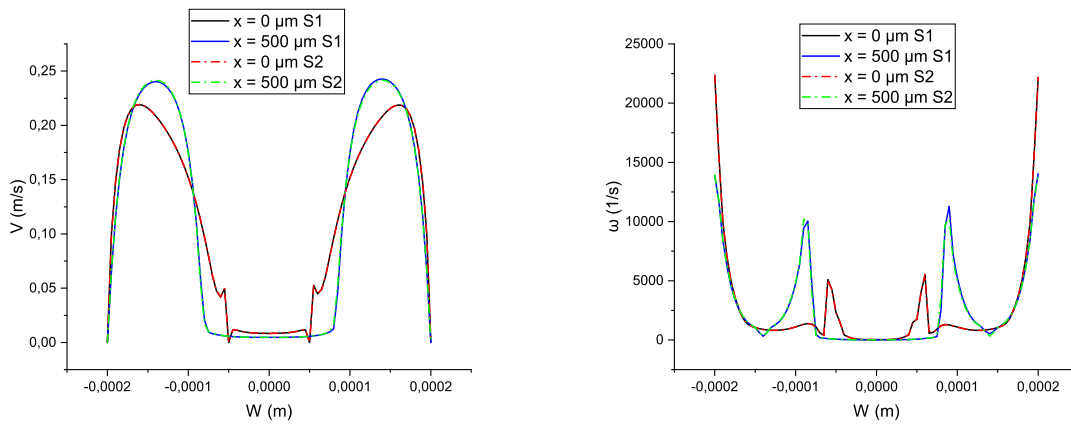


Figura 32: Distribuția vitezei și a vorticității pe două linii în interiorul canalelor, [13] [licență CC BY 4.0](#). Rezultatele simulărilor S1 și S2 sunt practic identice.

Folosind prima configurație experimentală, au fost validate calitativ simulările numerice cu vizualizări ale curgerii din Fig. 33. Trecerea de la viteza la debit se realizează folosind ecuația de continuitate.

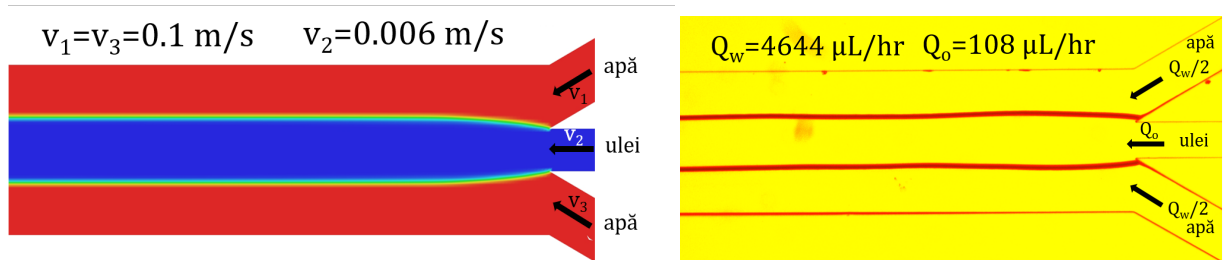


Figura 33: Interfețe experimentale: validarea calitativă a simulării numerice folosind vizualizarea curgerii. Debiturile de intrare în experimente corespund mărimii vitezelor medii impuse în simulările numerice, [13] [licență CC BY 4.0](#).

Validarea cantitativă a simulării numerice este prezentată în Fig. 34 și se realizează prin compararea distribuției vitezei și componenta z a vorticității pe o linie perpendiculară la câmpul de curgere, plasată la $500 \mu m$ de joncțiune. Din experimentele microPIV, distribuția vitezei obținută are un profil parabolic și se potrivește cu viteza obținută din simularea numerică. Analiza incertitudinii a fost efectuată folosind metoda disparității particulelor propusă de Sclacchitano et al. [40].

Componenta z a vorticității este $\omega_z = \partial V / \partial x - \partial U / \partial y$ (unde V este componenta *spanwise* și U este componenta *streamwise* a vectorului viteză \mathbf{v}) iar distribuția sa este afișată în Fig. 34 din dreapta. În comparație cu distribuția mărimii vorticității, aici, la interfețe, avem un

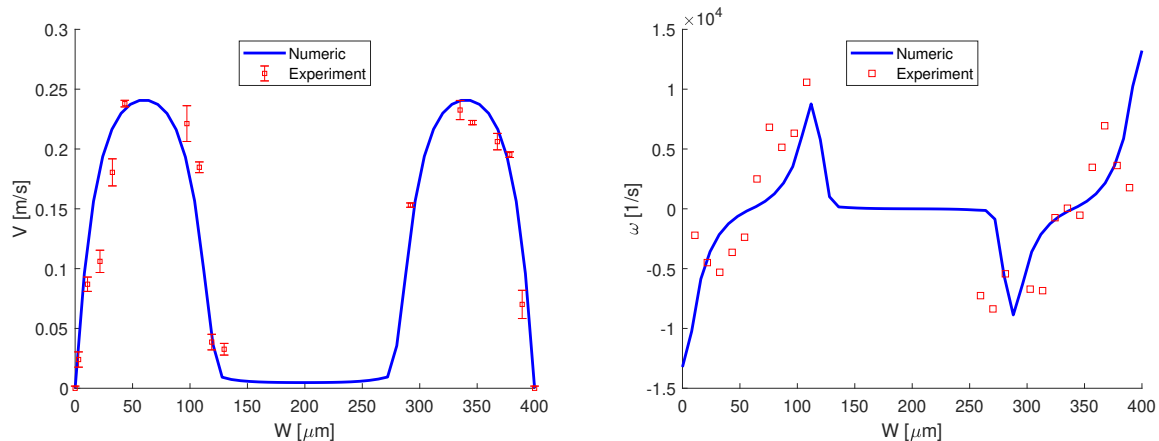


Figura 34: Validarea cantitativă a simulării numerice folosind distribuțiile de viteză și vorticitate, obținute din măsurătorile microPIV, [13] [licență CC BY 4.0](#). 

maxim urmat de un minim. Punctele de date obținute în urma experimentelor se potrivesc cu distribuția obținută din simularea numerică și, de asemenea, cu magnitudinea lor.

Dinamica fluidelor isovâscoase

Scopul acestui studiu este de a investiga evoluția interfeței atunci când avem un contrast de densitate între fluidele de lucru. Aceste fluide sunt un ulei vegetal și un amestec de apă și glicerină fără contrast de vâscozitate. În acest studiu se investighează trecerea de la regimul de jet la cel de picurare, Fig. 35.

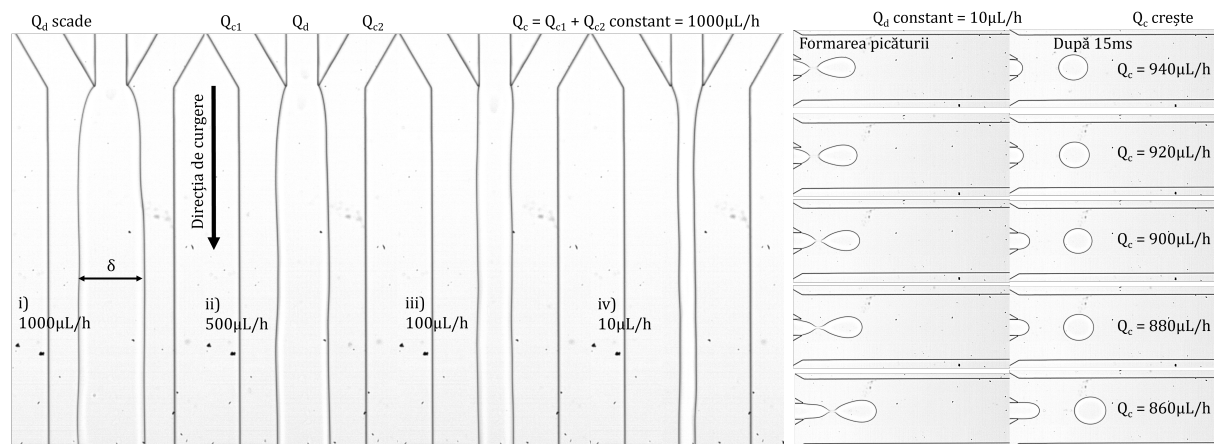


Figura 35: a) Prima parte a experimentului în care faza dispersată este constantă, $Q_c = 1000 \mu L/h$, în timp ce Q_d scade i) $1000 \mu L/h$, ii) $500 \mu L/h$, iii) $100 \mu L/h$ și iv) $10 \mu L/h$; Formarea picăturilor în interiorul microcanalului, cu un debit al fazei dispersate constant la $Q_d = 10 \mu L/h$, iar debitul fazei continue scăzând de la $940 \mu L/h$ la $860 \mu L/h$, [11] ©2021 IEEE.

Starea inițială de curgere constă în introducerea în microcanal a lichidelor la debitul $Q_c = Q_d = 1000 \mu L/h$. Deoarece este folosit un separator pentru ramurile laterale ale canalului, debitul poate fi însumat sub forma $Q_c = Q_{c1} + Q_{c2}$, ca atare pe fiecare ramură, la început se pornește cu $500 \mu L/h$. Se scade debitul fazei dispersate, începând de la $1000 \mu L/h$ cu $100 \mu L/h$ pe parcursul a cinci minute (timp suficient pentru ca interfața să se stabilizeze) până la $100 \mu L/h$. Din acest punct au fost investigate alte trei debite 50 , 25 și $10 \mu L/h$, după cum se poate observa în Fig.35. Coborârea sub această valoare a debitului este imposibilă din cauza constrângerilor impuse de pompă. Rezultatul utilizării acestui debit constă în curgeri separate, până la ieșirea din microcanal ($\approx 2cm$).

Formarea picăturilor și ruperea acestora din faza dispersată este prezentată în Fig. 35. Sunt prezentate cinci cazuri în care debitul fazei continue este redus de la $940 \mu\text{L}/\text{h}$ la $860 \mu\text{L}/\text{h}$. Pe al doilea set de imagini, picătura este prezentată la $t=15\text{ms}$ după rupere. Primul lucru care trebuie observat este faptul că punctul din geometrie în care are loc ruperea se îndepărtează de joncțiune pe măsură ce scade debitul fazei continue.

Lățimea filamentului δ a fost măsurată pentru fiecare debit al fazei dispersate, la 1 mm distanță de joncțiune, și s-a constatat o corelație cu numărul capilarității fazei dispersate:

$$\delta/w = Ca_d^{0.3}. \quad (33)$$

În Fig. 36, lățimea filamentului este adimensionalizată cu lățimea microcanalului ($w = 388\mu\text{m}$), iar raportul δ/w ca funcție de raportul debitelor urmează alura numărului capilarității $Ca_d^{0.3}$ în funcție de raportul debitelor.

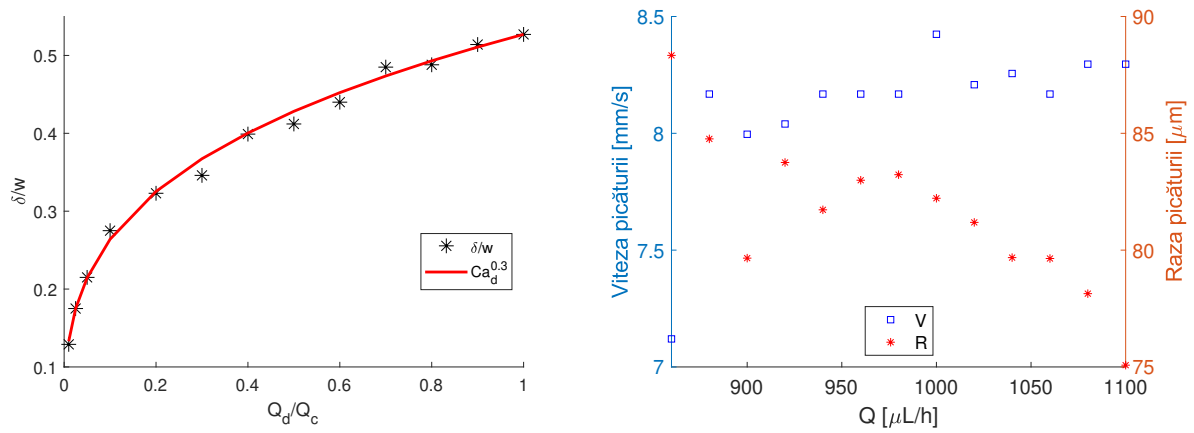


Figura 36: Corelația dintre lățimea filamentului, δ , și numărul capilarității fazei dispersate; Variația vitezei și razei picăturilor în funcție de Q_c , [11] ©2021 IEEE.

Viteza picăturilor are o mică variație în jurul valorii de 8 mm/s pentru aproape întreaga gamă Q_c (860 – $1100 \mu\text{L}/\text{h}$), după cum se poate observa în Fig. 36. Doar la valoarea $Q_c = 860\mu\text{L}/\text{h}$ viteza picăturilor scade la $\approx 7\text{mm}/\text{s}$. Cu toate acestea, în comparație cu viteza fazei dispersate ($V=0.55 \text{ mm}/\text{s}$), viteza picăturilor este, de fapt, crescută de faza de curgere continuă. Aceasta a fost măsurată cu ajutorul ImageJ pentru fiecare caz în același punct al geometriei între două cadre consecutive. Imaginile au fost achiziționate la 4000 de cadre pe secundă. Raza picăturilor are o variație inversă cu viteza de curgere.

Influența gravitației asupra ciclului de histerezis

Chiar dacă histerezisul este un fenomen specific magnetismului și electricității, acesta a fost raportat anterior în fluide [41], [31], [21]. Importanța acestui fenomen derivă din faptul că multe aplicații pot fi afectate de către acesta. De exemplu, atunci când se testează regimurile de curgere într-un microcanal, experimentele se prelungesc pe o perioadă lungă de timp, iar microcanalul este supus unui comportament de histerezis. În acest studiu a fost investigat, prin experimente și simulări numerice, fenomenul de histerezis în curgerea multifazică într-un microcanal folosind două lichide imiscibile cu tensiune interfacială scăzută între ele, ulei mineral și alcool izopropilic. A fost evaluată, de asemenea, influența gravitației asupra ciclului de histerezis și asupra câmpului de curgere.

Instalația experimentală este compusă din două microscop, unul obișnuit și unul inversat, pompe de presiune și un sistem de achiziție a imaginilor, iar o schemă a acestuia este prezentată în Fig. 37. Microcanalul din PDMS poate fi utilizat cu ambele microscop, în timp ce microcanalul din siliciu poate fi utilizat doar cu microscopul inversat.

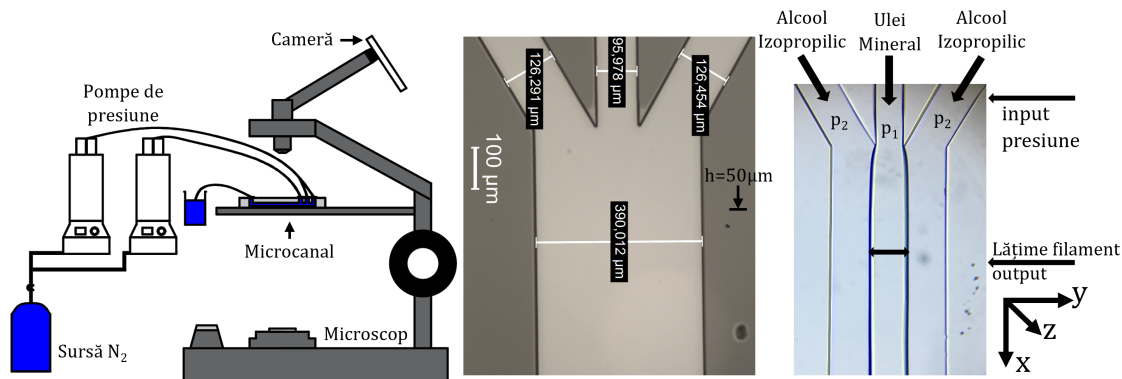


Figura 37: Proiectarea microcanalului, schema montajului experimental, dimensiunile caracteristice ale microcanalului PDMS și montajul histeresisului [12].

Prin confinarea geometriei se poate stabili curgerea fără apariția instabilităților [35], însă în cazul unui canal de tip Hele-Shaw cu dimensiuni reduse, acest lucru contribuie și mai mult la stabilizarea curgerii [7]. Acest fenomen are loc atunci când, pornind de la perechea inițială de presiuni de la intrările microcanalului, se menține constantă presiunea pe părțile laterale și se variază presiunea pe ramura centrală a canalului, astfel încât, la aceeași pereche de presiuni, se obține o lățime diferită a filamentului. Presiunea pe ramura centrală a microcanalului, p_1 , este variată în patru etape cu un pas de 20mbar : i) de la 600 la 700mbar ; ii) de la 600 la 800mbar ; iii) de la 600 la 900mbar și iv) de la 600 la 1000mbar .

În Fig. 38 și Fig. 39 sunt comparate cele trei cicluri de histeresis pentru cele patru etape, când presiunea maximă este de 700 , 800 , 900 și 1000mbar . În toate cazurile se observă influența gravitației. Există o mică diferență între grosimea inițială a filamentului atunci când $p_1 = p_2 = 600\text{mbar}$. Această diferență este întotdeauna prezentă, în special atunci când se trece de la un experiment la altul.

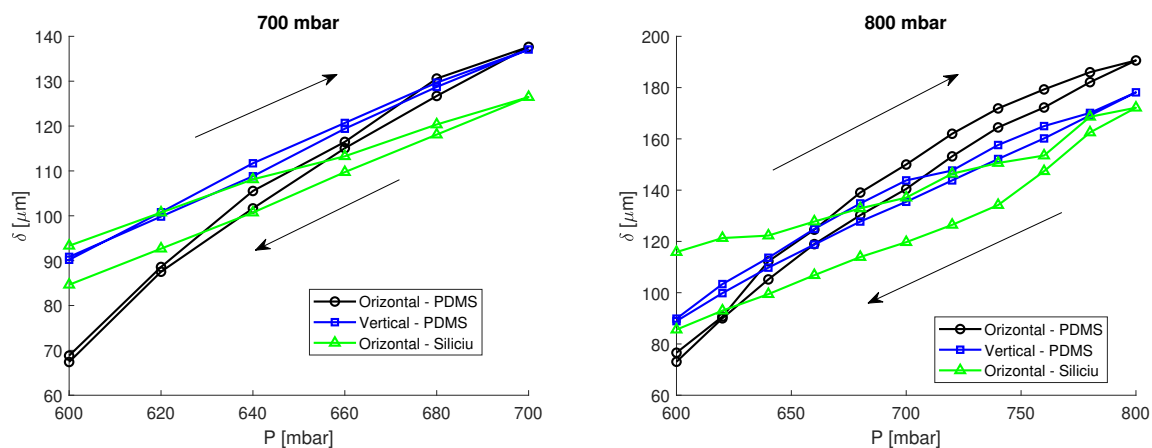


Figura 38: Stadiul ciclului de histeresis I. $600 - 700\text{mbar}$ & II. $600 - 800\text{mbar}$ [12].

Aria ciclului de histeresis a fost investigată pentru toate etapele și este prezentată în Fig. 40. Pentru primele două etape, suprafața obținută pentru microcanalul din siliciu este mult mai mare decât cea obținută pentru microcanalul din PDMS. Proprietățile de material joacă un rol important în acest caz. PDMS este un material elastic care se deformează la presiune ridicată. În acest caz, acesta atenuează variația de presiune din sistem. În opoziție se află siliciul, care este un material rigid, iar acesta transferă schimbarea de presiune direct în microcanal. În toate cazurile, suprafața de histeresis pentru microcanalul orizontal este mai mare decât cea obținută pentru canalul vertical, astfel încât gravitația reduce suprafața de histeresis care reprezintă energia disipată a sistemului.

Diferența dintre simulările numerice este obținută la distribuțiile de presiune, în Fig. 40.

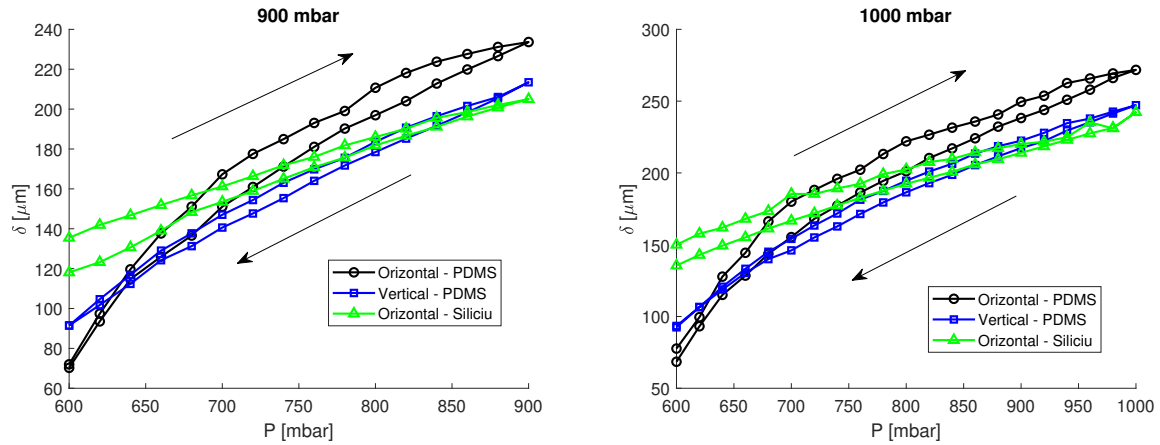


Figura 39: Etapa III a ciclului de histerzis. 600 - 900mbar & IV. 600 - 1000mbar [12].

Distribuțiile presiunii sunt afișate pe șase linii perpendiculare pe câmpul de curgere, pornind de la joncțiune, cu un pas de $100\mu m$. Pentru ambele distribuții de presiune, se înregistrează salturi de presiune la interfață, ceea ce înseamnă că interfața nu este dreaptă și are o curbură. Principala diferență apare în ceea ce privește magnitudinea presiunii, ceea ce înseamnă că este necesară o presiune mai mică pentru a curge în cazul microcanalului care este plasat vertical, deoarece se înregistrează o diferență de $\approx 40Pa$ între cele două distribuții.

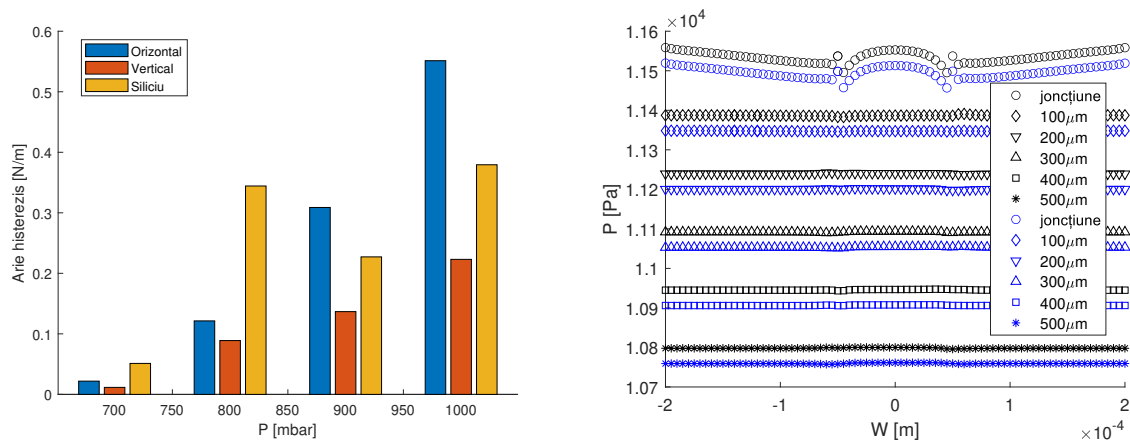


Figura 40: Comparația suprafeței ciclului de histerzis atunci când microcanalul este microfabricat din PDMS și siliciu; Distribuțiile presiunii pe liniile perpendiculare pe câmpul de curgere la $t = 1s$, canal orizontal negru, canal vertical albastru [12].

Metode de separare a particulelor/celulelor

Procesul de separare a particulelor are o importanță majoră în domeniul medical, chimic, biologic, alimentar și mediu. Regimul de curgere preponderent în dispozitivele microfluidice este regimul laminar. Acest fapt permite un control precis al curgerii și de asemenea o predictibilitate a acesteia.

Separarea particulelor în microcanale se poate realiza printr-o serie de metode: pasive, active și combinate [38]. Metodele pasive au la bază geometria microcanalului, controlul precis al debitului și interacțiunea dintre particule și geometrie fără a fi influențate de câmpuri externe. Metodele active utilizează câmpuri externe, de diferite tipuri, geometrii simple și au rezultate în general mai bune decât metodele pasive, doar că în acest caz complexitatea sistemului este mărită.

Dispozitiv dielectroforetic - numeric

Dielectroforeza este fenomenul care controlează mișcarea particulelor ca urmare a aplicării unui gradient de câmp electric, care induce un moment dipol asupra celulelor, care se datorează polarizabilității electrice a membranei celulare în timp ce se deplasează într-un mediu de suspensie. Celula este translocată în câmpul electric până când ajunge la un echilibru electrostatic. Această mișcare se datorează forței dielectroforetice (\mathbf{f}_{DEP}).

Forța dielectroforetică este descrisă ca produsul dintre partea reală a factorului Claussius-Mossotti, raza celulei, r , permitivitatea electrică a vidului, ε_0 , permitivitatea electrică a suspensiei, ε_m , și gradientul pătrat al câmpului electric, după cum urmează:

$$\mathbf{f}_{\text{DEP}} = 2\pi r^3 \varepsilon_0 \varepsilon_m \text{Re}[CM] \nabla |\mathbf{E}^2| \quad (34)$$

Factorul complex Claussius-Mossotti se calculează:

$$CM(\omega) = \frac{\varepsilon_p^* - \varepsilon_m^*}{\varepsilon_p^* + 2 \cdot \varepsilon_m^*} \quad (35)$$

unde, ω este frecvența unghiulară, ε_p^* și ε_m^* sunt permitivitățile complexe ale particulelor respectiv mediului, calculate:

$$\varepsilon_p^* = \varepsilon_p - j \frac{\sigma_p}{\omega}, \quad (36)$$

$$\varepsilon_m^* = \varepsilon_m - j \frac{\sigma_m}{\omega},$$

unde σ_p și σ_m sunt conductivitățile electrice ale particulei, respectiv mediului.

Simulările numerice au fost realizate în COMSOL Multiphysics [18]. Acestea sunt împărțite în trei etape: i) curgere laminară (pentru suspensie) – pentru a determina câmpurile de viteză și presiune; ii) curenți electrici (pentru electrozi) – pentru a stabili câmpul electric și iii) traiectoriile particulelor, care utilizează primele două etape ca soluții inițiale.

În ceea ce privește condițiile la limită pentru curgerea laminară, la intrare se impune viteza iar la ieșiri presiunea relativă este impusă la zero. Pereteții geometriei sunt setați cu condiția de aderență la perete, Fig. 41. .

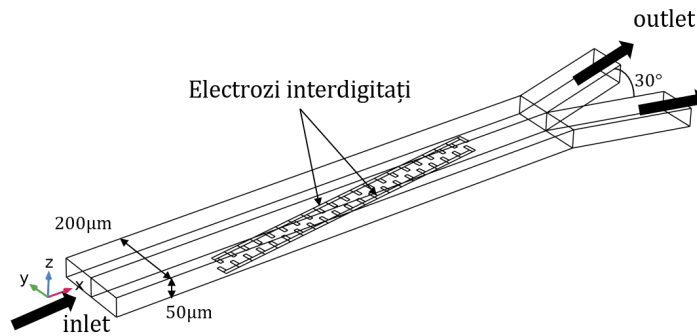


Figura 41: Design dispozitiv dielectroforetic și condiții la limită.

La intrare se impune viteza $V = 100 \mu\text{m}/\text{s}$, la cele două ieșiri se impune presiunea relativă zero iar pentru pereți, condiția de aderență la perete. Fluidul de lucru folosit este un amestec, specific pentru culturi celulare, dar care are aceleași proprietăți de material ca apa. Pentru partea de electricitate potențialul electric vârf-la-vârf impus este $V_{pp} = 10\text{V}$ și variază în intervalul $(-5 : +5\text{V})$, iar frecvența câmpului electric alternativ ia următoarele valori $f_1 = 1.25 \cdot 10^5 \text{Hz}$ și $f_2 = 1.75 \cdot 10^8 \text{Hz}$. Pentru partea de urmărire a traiectoriei particulelor sunt folosite proprietățile particulelor prezentate în [48].

În etapa de calculare a traiectoriilor particulelor, primele două module sunt încorporate ca soluții inițiale pentru a crea un mediu în care particulele pot fi eliberate, iar traiectoria lor manipulată. Cea de-a doua lege a lui Newton este cea care guvernează traiectoria unei particule:

$$m_p \frac{d\mathbf{v}}{dt} = \sum \mathbf{F}_{\text{ext}} = \mathbf{F}_{\text{DEP}} + \mathbf{F}_{\text{D}} \quad (37)$$

unde forțele exterioare care acționează asupra particulei sunt, în acest caz, forța de rezistență la înaintare și forța dielectroforetică.

În Fig. 42 sunt prezentate rezultatele obținute după prima etapă de calcul, în care viteza inițială impusă a fost de $100 \mu\text{m/s}$. În conturul vitezelor, viteza are o valoare maximă de $215 \mu\text{m/s}$ și aceasta este atinsă după bifurcație, când secțiunea se îngustează pe cele două ramuri ale bifurcației. Din conturul presiunilor, presiunea în întreg sistemul este una redusă, având o valoare maximă de 1.15 Pa.

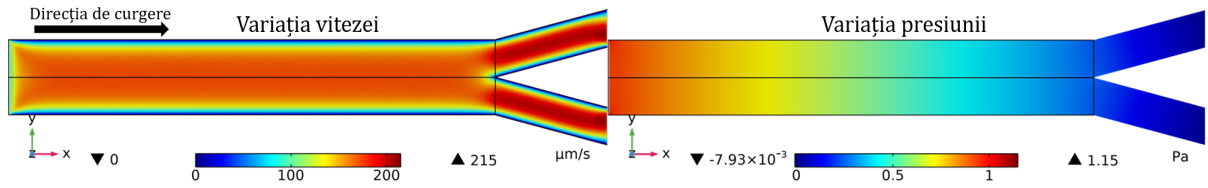


Figura 42: Conturul de viteză și presiune.

Rezultatele celei de-a doua etape sunt prezentate în Fig. 43 în care sunt obținute variația potențialului electric și variația câmpului electric în dispozitiv. Se obțin gradienti mari ai câmpului electric între cei doi electrozi interdigitati.

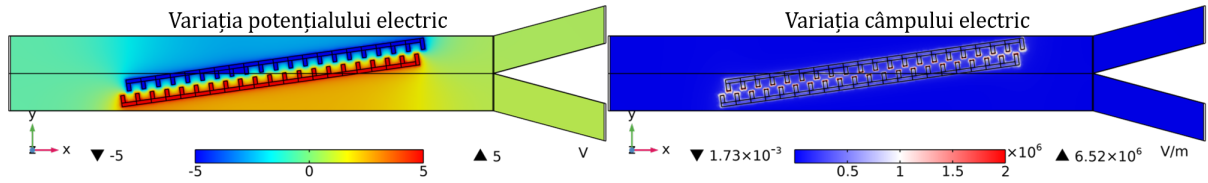


Figura 43: Variația potențialului electric și a câmpului electric.

Factorul Clausius-Mossotti a fost calculat folosind formula clasică. Prin compararea cu rezultatele din [48], cele două grafice au aceeași distribuție după 10^6Hz . Cele două distribuții sunt prezentate în Fig. 44

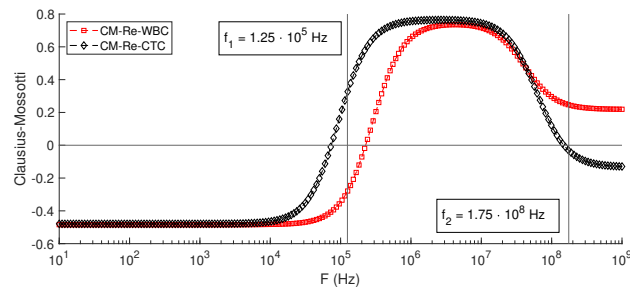


Figura 44: Partea reală a factorului Clausius-Mossotti pentru cele două tipuri de celule.

Rezultatele ultimei etape sunt prezentate în Fig. 45. Atunci când $f_1 = 1.25 \cdot 10^5 \text{Hz}$, celulele tumorale circulante sunt afectate de dielectroforeză pozitivă iar traiectoria lor este deviată către zona cu gradienti mari de câmp electric. În schimb globulele albe (WBC) sunt afectate de dielectroforeză negativă iar traiectoria acestora este deviată către zona din dispozitiv unde câmpul electric este minim. Atunci când $f_2 = 1.75 \cdot 10^8 \text{Hz}$ comportamentul celulelor este inversat. Astfel, CTC-urile sunt afectate de dielectroforeză negativă iar traiectoria lor este deviată către zona de câmp electric minim. WBC-urile sunt afectate de dielectroforeză pozitivă iar traiectoria lor este deviată către zone cu gradienti mari de câmp electric.

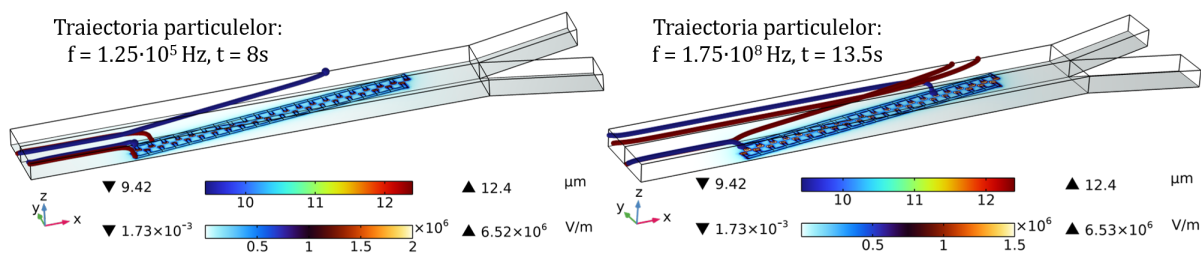


Figura 45: Traiectoriile particulelor pentru cele două simulări.

Dispozitiv dielectroforetic - experimental

Dispozitivul folosit în simulările numerice a fost microfabricat experimental. În primă fază sunt creați electrozii de aur pe placheta de sticlă prin depunerea unui strat de Cr/Au de 10/200 nm prin depunere cu fascicul de electroni, iar prin procedura de *lift-off* este îndepărtat aurul din jurul electrozilor. A doua etapă a constat în crearea canalului microfluidic în PDMS. Cea mai dificilă etapă în crearea acestui dispozitiv dielectroforetic a fost alinierea electrozilor de sticlă la canalul microfluidic. După aliniere, sub dispozitiv a fost lipită o placă de textolit ce conține două pad-uri pentru conectarea generatorului de semnal. Placheta de sticlă este conectată la placa de textolit prin două fire de aur de 25 μm . În final sunt atașate porturile microfluidice, iar dispozitivul final este prezentat în Fig. 46.

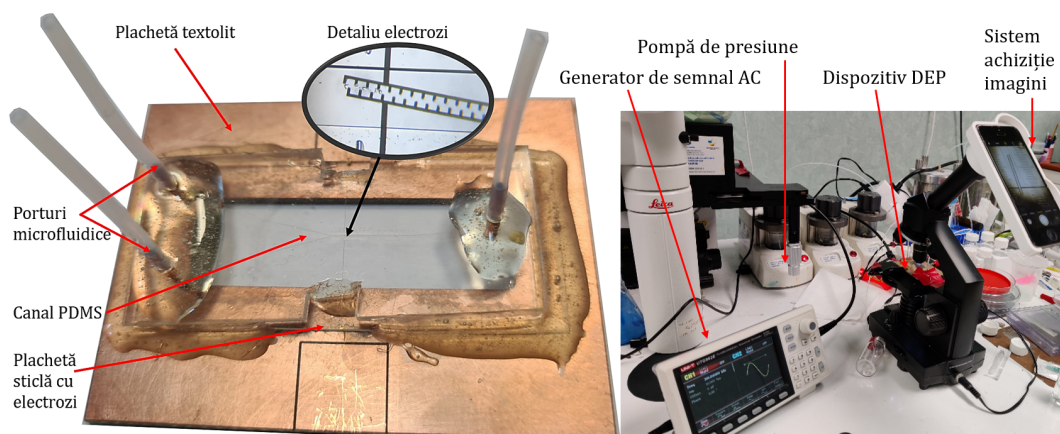


Figura 46: Dispozitiv dielectroforetic experimental.

În Fig. 47 sunt prezentate rezultatele experimentale obținute cu dispozitivul dielectroforetic. Fluidul de lucru a fost PBS-ul (*phosphate buffered saline*) și au fost testate trei tipuri de particule: particule din polistiren fluorescente, folosite pentru studii microPIV, globule roșii din sânge și sfere din sticlă goale pe interior. Particulele pentru microPIV au un diametru exterior de 1 μm și nu au prezentat nicio reacție la câmpul electric, indiferent de frecvența impusă. La frecvențe ridicate, începând cu 500 kHz globulele roșii erau atrase către electrozi atunci când acestea ajungeau în zona electrozilor, deplasându-se astfel în partea stângă a dispozitivului. Dacă viteza globulelor era una foarte mare, acestea treceau prin zona de câmp electric alternativ fără a fi afectate de acesta. În ultimul experiment, sferele de sticlă au avut același comportament ca particulele folosite în microPIV, nefiind afectate de prezența câmpului electric alternativ.

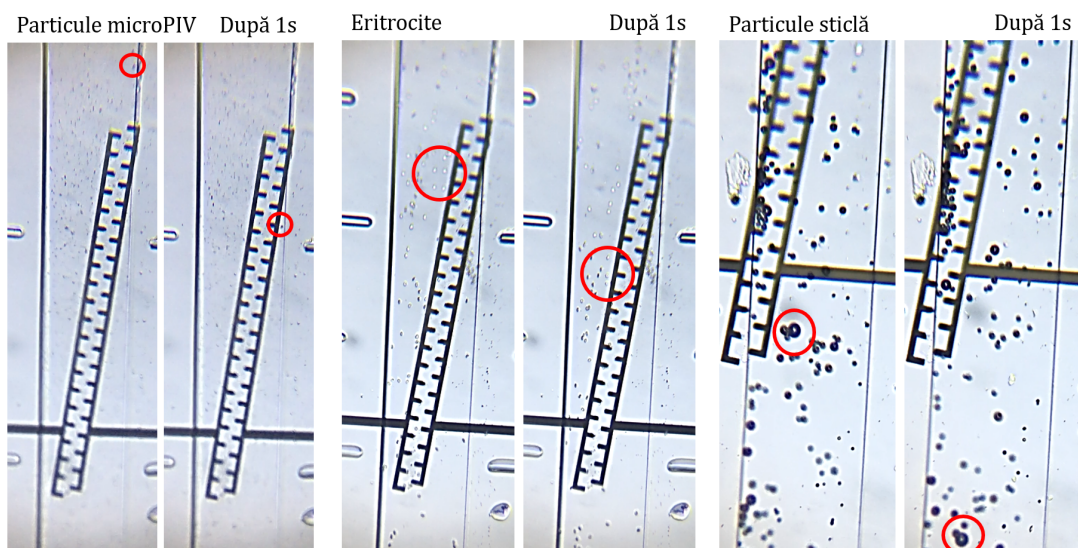


Figura 47: Experiment dielectroforeză cu dispozitivul cu bifurcație

Concluzii și perspective

Principalele contribuții ale tezei

Teza contribuie la înțelegerea fenomenelor interfaciale ce au loc în dispozitive microfluidice la contactul dintre două lichide imiscibile, factorul care generează stabilitatea curgerii fiind aspectul dimensional redus al dispozitivelor. În acest sens, stabilitatea curgerii permite investigarea și modelarea suprafeței de separare dintre două fluide imiscibile în detaliu până la apariția instabilităților.

În prima parte a tezei s-au introdus aspectele teoretice fundamentale ce stau la baza curgerii fluidelor în microcanale. A fost prezentată metoda de calcul numeric în cazul curgerii multifazice, în lipsa difuziei dintre faze.

În a doua parte a tezei au fost prezentate metodele de fabricație a microcanalelor. A fost prezentat fluxul tehnologic utilizat pentru crearea dispozitivelor microfluidice utilizate în cadrul acestei teze. Au fost prezentate instalațiile experimentale folosite pentru a studia dinamica curgerii prin vizualizări directe și măsurători de viteză folosind tehnica microPIV. Geometria propusă pentru studiu este o trifurcație 3D cu un raport între înălțime și lățime $h/w = 0.125$, cu $w = 400 \mu m$. Simulările numerice s-au realizat folosind metoda VOF implementată în codule numeric ANSYS Fluent.

A treia parte a tezei conține aplicațiile dezvoltate având la bază configurațiile microfluidice investigate. Aplicațiile pornesc de la studiul curgerii laminare, continuă cu investigații ale curgerilor cu fluide imiscibile și se finalizează cu investigații experimentale și numerice ale influenței câmpului exterior asupra interfeței de separare dintre două fluide imiscibile. În prima aplicație a fost investigată numeric curgerea atunci când pe cele trei intrări ale microcanalului valoarea numărului Reynolds a fost aceeași. Rezultatul cel mai important al acestui studiu este determinarea lungimii de stabilizare a curgerii în microcanalul principal. În a doua aplicație a fost investigată influența nanostructurilor asupra curgerii laminare, astfel rugozitatea crescută a pereților a indus variații puternice ale profilului de viteză și valori crescute ale vorticității.

Au fost create două aplicații de referință în microfluidică prin investigații numerice și experimentale ale curgerii multifazice și s-a oferit un răspuns la întrebarea centrală a acestei teze: “Ce se întâmplă la interfață?” prin validarea simulărilor numerice cu experimentele. Astfel, din distribuția efortului de frecare și a presiunii pe linia interfeței se observă că în momentul în care curbura interfeței este maximă (la distanța de $25 \mu m$ aval de joncțiune) valorile efortului de frecare sunt aproximativ de patru ori mai mari decât în aval (unde interfața este practic plană), saltul de presiune fiind maxim, proporțional cu valoarea tensiunii interfaciale.

În următoarele două aplicații a fost investigată experimental curgerea multifazică prin jeturi de alcool în ulei și fluide isovâscoase. În cazul jeturilor de alcool, raportul de vâscozitate, β , dintre faza continuă și faza dispersată este foarte ridicat ($\beta \approx 80$), astfel că la valori mari ale presiunii pe faza dispersată (jet) profilul de viteză este accelerat în proximitatea interfeței. În cazul fluidelor isovâscoase ($\beta \approx 1$), în regimul de jet s-a corelat lățimea jetului cu numărul capilarității fazei dispersate, iar în regimul de picurare raza picăturii scade odată cu scăderea

debitului fazei continue, sateliții ce s-au format ca urmare a procesului de rupere al picăturii gravitează în jurul picăturii până are loc coalescența.

Ultimele două aplicații sunt dedicate studiului influenței câmpului extern (gravitația) asupra curgerii multifazice și a poziției interfeței de separare dintre cele două fluide imiscibile în contact. Fenomenul de histerezis a fost investigat într-o manieră controlată, astfel că din experimente a reieșit faptul că aria ciclului de histerezis este redusă atunci când microcanalul este așezat în poziție verticală datorită efectului stabilizator al gravitației. În cazul în care raportul de vâscozitate a fost ridicat ($\beta \approx 80$), gravitația împreună cu vâscozitatea au dus la o lățime mai mică a fazei de ulei atunci când canalul se afla în poziție laterală cu faza de ulei jos (UJ). În momentul în care raportul de vâscozitate este unitar ($\beta \approx 1$), faza de ulei a înregistrat lățimea cea mai mică atunci când canalul se afla în poziție verticală. În acest caz gravitația și densitatea au avut un aport semnificativ asupra poziției interfeței.

În ultima parte a tezei au fost prezentate metode pasive și active de separare a celulelor și particulelor în configurații microfluidice. În acest sens au fost create două dispozitive de tipul *Lab-on-a-chip* pentru a separa globule roșii de celule tumorale circulante în câmp electric alternativ folosind dielectroforeza. Funcționalitatea dispozitivelor este demonstrată cu simulări numerice, particulele fiind direcționate către ieșirea corespunzătoare în funcție de semnul forței dielectroforetice ce este dat de factorul Clausius-Mossotti (factorul ce ia în considerare permitivitatea relativă a mediului și a particulelor, conductivitatea electrică a mediului și a particulelor și frecvența unghiulară).

Rezultate importante:

- perfecționarea procesului de fabricație al microcanalelor prin evazarea secțiunilor de intrare / ieșire și crearea microporturilor;
- determinarea eforturilor de frecare și a presiunilor la interfața de separare dintre două fluide prin modelarea interfeței folosind metoda VOF implementată în codul ANSYS Fluent;
- îmbunătățirea amestecului în dispozitive microfluidice prin depunerea/creșterea de nanostructuri în microcanale, observat prin distribuții ale vorticității;
- crearea a două aplicații de referință pentru curgerea fluidelor imiscibile în geometrii cu aspect dimensional redus, studiu comparativ: experimental-numeric;
- reducerea efectului de histerezis în curgerea multifazică în microcanal prin investigarea efectului de histerezis în manieră controlată și evaluarea influenței gravitației asupra acestuia;
- modificarea poziției interfeței de separare dintre două fluide imiscibile în dispozitive microfluidice folosind gravitația (prin modificarea poziției microcanalului față de planul orizontal);
- crearea a două dispozitive de tipul *Lab-on-a-chip* pentru separarea celulelor tumorale circulante de celulele sănătoase.

Perspective de cercetare

Fenomenele interfaciale au aplicații complexe astăzi, cu precădere în domeniul biotehologic și aplicații medicale. În aceste aplicații interfețele se dezvoltă de regulă între fluide vâsco-elastice a căror modelare numerică este dificilă. Studiile experimentale sunt astfel determinante pentru analiza fenomenelor, mai ales dacă în curgere sunt prezente și celule rigide sau deformabile.

Canalul cu trifurcație ce are un aspect dimensional redus, dar care are un raport de 1:4 între intrarea centrală ($100\ \mu m$) și canalul principal ($400\ \mu m$) este o geometrie reprezentativă pentru testarea fluidelor vâsco-elastice la scară micro, și verificare a stabilității interfeței în curgerile de tip contracție/extensie [30], respectiv în prezența celulelor.

Aceste studii se preconizează că se dezvoltă în cadrul laboratorului *Laboratory for Micro- and Nano- Fluidics- L10* de la Institutul Național de Cercetare Dezvoltare pentru Microtehnologie - IMT București.

Procedura de fabricație a microcanalelor influențează calitatea suprafeței pereților. Materialele nanocarbonice au devenit în ultima perioadă extrem de folosite în crearea dispozitivelor de tipul *Lab-on-a-chip*, datorită proprietăților electrice. Astfel, în funcție de aplicația dispozitivului, trebuie testată curgerea, după cum s-a demonstrat, chiar și o rugozitate a peretelui de 400 nm poate induce schimbări majore în curgere.

În ceea ce privește procedura de fabricație, de interes este și schimbarea procedurii de la fotogravură la tehnologii laser. De interes la aceste canale este faptul că pereții microcanalului vor fi exclusiv din același material (sticlă fotosensibilă), în acest mod fiind posibilă o comparație a influenței unghiului de contact asupra curgerii în comparație cu canalele din PDMS.

Un alt aspect de interes este reprezentat de raportul dimensional al microcanalului. Astfel este necesară fabricarea de dispozitive microfluidice cu aspect dimensional ridicat pentru a înțelege influența pe care o are confinarea asupra stabilității curgerii și a interfețelor.

Perspectivile de cercetare sunt următoarele:

- investigarea curgerii fluidelor vâsco-elastice în canalele cu raport dimensional redus;
- continuarea investigațiilor experimentale privind influența câmpurilor externe (cu precădere ale câmpurilor electromagnetice) asupra comportării celulelor în apropierea interfețelor fluide;
- schimbarea procedurii de fabricație, de la fotogravură la laser și compararea hidrodinamicii celor două canale;
- modificarea raportului dimensional al trifurcației și investigarea efectului acestuia asupra stabilității curgerii.

Bibliografie

- [1] S.S. Ahsan, A. Gumus, and D. Erickson. Redox mediated photocatalytic water-splitting in optofluidic microreactors. *Lab on a Chip*, 13(3):409–414, 2013.
- [2] ANSYS Inc. Ansys fluent theory guide, r2. https://ansyshelp.ansys.com/account/secured?returnurl=/Views/Secured/corp/v202/en/flu_th/flu_th.html, 2020. Accesat: 12/07/2022.
- [3] A.U.R. Aziz, C. Geng, M. Fu, X. Yu, K. Qin, and B. Liu. The role of microfluidics for organ on chip simulations. *Bioengineering*, 4(2):39, 2017.
- [4] M.P. Borthakur, S. Succi, F. Sterpone, F. Pérot, A. Diko, and S. Melchionna. In-silico analysis of airflow dynamics and particle transport within a human nasal cavity. *Journal of computational science*, 54:101411, 2021.
- [5] J. U. Brackbill, D. B. Kothe, and C. Zemach. A continuum method for modeling surface tension. *Journal of computational physics*, 100(2):335–354, 1992.
- [6] C. Bălan. *Lecții de mecanica fluidelor*. Ed. Tehnică, București, 2003.
- [7] I. Chakraborty, J. Ricouvier, P. Yazhgur, P. Tabeling, and A.M. Leshansky. Droplet generation at hele-shaw microfluidic t-junction. *Physics of Fluids*, 31(2):022010, 2019.
- [8] Y.-C. Chang, T.Y. Hou, B. Merriman, and S. Osher. A level set formulation of eulerian interface capturing methods for incompressible fluid flows. *Journal of computational Physics*, 124(2):449–464, 1996.
- [9] M. Chinaud, E.-P. Roumpea, and P. Angeli. Studies of plug formation in microchannel liquid–liquid flows using advanced particle image velocimetry techniques. *Experimental Thermal and Fluid Science*, 69:99–110, 2015.
- [10] E. Chiriac, B. Adiaconiță, C. Pachi, M. Avram, and C. Bălan. Micropiv on carbonic materials embedded in a microfluidic device. In *2021 International Semiconductor Conference (CAS)*, pages 169–172. IEEE, 2021.
- [11] E. Chiriac, M. Avram, and C. Balan. Transition from threads to droplets in a microchannel for liquids with no viscosity contrast. In *2021 10th International Conference on ENERGY and ENVIRONMENT (CIEM)*, pages 1–4. IEEE, 2021.
- [12] E. Chiriac, M. Avram, and C. Balan. Experimental and numerical investigation of hysteresis in multiphase flow in a microchannel. *UPB Scientific Bulletin, Series A: Applied Mathematics and Physics*, 84(3):191–200, 08 2022.
- [13] E. Chiriac, M. Avram, and C. Balan. Investigation of multiphase flow in a trifurcation microchannel—a benchmark problem. *Micromachines*, 13(6):974, 2022.
- [14] E. Chiriac, M. Avram, D. Broboana, and C. Balan. Interface evolution in a microchannel, an experimental and numerical study. In *2019 International Conference on ENERGY and ENVIRONMENT (CIEM)*, pages 219–223. IEEE, 2019.

- [15] E. Chiriac, A.M. Bran, C. Voitincu, and C. Balan. Experimental validation of vof method in micro-channel flows. In *2021 12th International Symposium on Advanced Topics in Electrical Engineering (ATEE)*, pages 1–4. IEEE, 2021.
- [16] E. Chiriac, A.M. Bratu, M. Avram, and C. Bălan. Alcohol jets investigations in a microchannel in a viscous outer medium. In *IOP Conference Series: Earth and Environmental Science*, volume 664, page 012056. IOP Publishing, 2021.
- [17] E. Chiriac, D. Broboana, M. Avram, and C. Balan. Comparative numerical study between openfoam and ansys fluent in a y-junction microchannel. In *2019 11th International Symposium on Advanced Topics in Electrical Engineering (ATEE)*, pages 1–4. IEEE, 2019.
- [18] Comsol. Comsol multiphysics reference manual. https://doc.comsol.com/5.5/doc/com.comsol.help.comsol/COMSOL_ReferenceManual.pdf, 2019. Accesat: 31/08/2022.
- [19] R. Daw and J. Finkelstein. Insight: Lab on a chip. *Nature*, 442(7101):367–418, 2006.
- [20] T.W. de Haas, H. Fadaei, U. Guerrero, and D. Sinton. Steam-on-a-chip for oil recovery: the role of alkaline additives in steam assisted gravity drainage. *Lab on a Chip*, 13(19):3832–3839, 2013.
- [21] Y. Gao, K. Wu, Z. Chen, T. Zhou, J. Li, D. Feng, Y. Gao, and W. Tian. Effect of wetting hysteresis on fluid flow in shale oil reservoirs. *Energy & Fuels*, 35(15):12075–12082, 2021.
- [22] A. Y. Gelfgat, A. L. Yarin, P. Z. Bar-Yoseph, M. D. Graham, and G. Bai. Numerical modeling of two-fluid taylor–couette flow with deformable capillary liquid–liquid interface. *Physics of Fluids*, 16(11):4066–4074, 2004.
- [23] J.-M. Ghidaglia. Capillary forces: A volume formulation. *European Journal of Mechanics-B/Fluids*, 59:86–89, 2016.
- [24] A. Hayen. Medical biostatistics (2nd edn). abhaya indrayan, chapman & hall/crc, boca raton, 2008. no. of pages: 824. price: \$99.95. isbn10 1584888873, isbn 13: 9781584888871, 2010.
- [25] C. W. Hirt and B. D. Nichols. Volume of fluid (vof) method for the dynamics of free boundaries. *Journal of computational physics*, 39(1):201–225, 1981.
- [26] T. Holzmann. *Mathematics, Numerics, Derivations and OpenFOAM®*. 11 2019.
- [27] D.Gh. Ionescu. *Introducere în mecanica fluidelor*. Ed. Tehnică, București, 2005.
- [28] M. Kim, A. Sell, and D. Sinton. Aquifer-on-a-chip: understanding pore-scale salt precipitation dynamics during co₂ sequestration. *Lab on a Chip*, 13(13):2508–2518, 2013.
- [29] E. Kjeang, R. Michel, D.A. Harrington, N. Djilali, and D. Sinton. A microfluidic fuel cell with flow-through porous electrodes. *Journal of the American Chemical Society*, 130(12):4000–4006, 2008.
- [30] H.-C. Lee. A nonlinear weighted least-squares finite element method for the carreau–yasuda non-newtonian model. *Journal of Mathematical Analysis and Applications*, 432(2):844–861, 2015.
- [31] H.-L. Li, H.-R. Liu, and H. Ding. A fully 3d simulation of fluid-structure interaction with dynamic wetting and contact angle hysteresis. *Journal of Computational Physics*, 420:109709, 2020.
- [32] S. Liu, Y. Fu, C. Xiong, Z. Liu, L. Zheng, and F. Yan. Detection of bisphenol a using dna-functionalized graphene field effect transistors integrated in microfluidic systems. *ACS applied materials & interfaces*, 10(28):23522–23528, 2018.
- [33] F. Mostowfi, S. Molla, and P. Tabeling. Determining phase diagrams of gas–liquid systems using a microfluidic pvt. *Lab on a Chip*, 12(21):4381–4387, 2012.
- [34] S.A. Nabavi, G.T. Vladisavljević, M.V. Bandulasena, O. Arjmandi-Tash, and V. Manović. Prediction and control of drop formation modes in microfluidic generation of double emulsions by single-step emulsification. *Journal of colloid and interface science*, 505:315–324, 2017.

- [35] C. Patrascu and C. Balan. The stabilizing effect of confinement on a liquid jet in a viscous outer fluid. *UPB Scientific Bulletin, Series A: Applied Mathematics and Physics*, 81:85–94, 01 2019.
- [36] S.C. Pierobon, M.D. Ooms, and D. Sinton. Evanescent cultivation of photosynthetic bacteria on thin waveguides. *Journal of Micromechanics and Microengineering*, 24(4):045017, 2014.
- [37] S. Popinet. Numerical models of surface tension. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 50:49–75, 2018.
- [38] P. Sajeesh and A. K. Sen. Particle separation and sorting in microfluidic devices: a review. *Microfluidics and nanofluidics*, 17(1):1–52, 2014.
- [39] R. Scardovelli and S. Zaleski. Direct numerical simulation of free-surface and interfacial flow. *Annual review of fluid mechanics*, 31(1):567–603, 1999.
- [40] A. Sciacchitano, B. Wieneke, and F. Scarano. Piv uncertainty quantification by image matching. *Measurement Science and Technology*, 24(4):045302, 2013.
- [41] Z. Shi, Y. Zhang, M. Liu, D.A.H. Hanaor, and Y. Gan. Dynamic contact angle hysteresis in liquid bridges. *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*, 555:365–371, 2018.
- [42] D. Sinton. Energy: the microfluidic frontier. *Lab on a Chip*, 14(17):3127–3134, 2014.
- [43] M. Sommerfeld. Numerical methods for dispersed multiphase flows. In *Particles in flows*, pages 327–396. Springer, 2017.
- [44] W. Song, H. Fadaei, and D. Sinton. Determination of dew point conditions for co2 with impurities using microfluidics. *Environmental science & technology*, 48(6):3567–3574, 2014.
- [45] H.A. Stone, A. D. Stroock, and A. Ajdari. Engineering flows in small devices. *Annual review of fluid mechanics*, 36(1):381–411, 2004.
- [46] M. Sussman, P. Smereka, and S. Osher. A level set approach for computing solutions to incompressible two-phase flow. *Journal of Computational physics*, 114(1):146–159, 1994.
- [47] N.K. Thom, K. Yeung, M.B. Pillion, and S.T. Phillips. “fluidic batteries” as low-cost sources of power in paper-based microfluidic devices. *Lab on a Chip*, 12(10):1768–1770, 2012.
- [48] V. Varmazyari, H. Habibiyani, H. Ghafoorifard, M. Ebrahimi, and S. Ghafouri-Fard. A dielectrophoresis-based microfluidic system having double-sided optimized 3d electrodes for label-free cancer cell separation with preserving cell viability. *Scientific reports*, 12(1):1–14, 2022.
- [49] Z. Wang, K. Yi, Q. Lin, L. Yang, X. Chen, H. Chen, Y. Liu, and D. Wei. Free radical sensors based on inner-cutting graphene field-effect transistors. *Nature communications*, 10(1):1–10, 2019.
- [50] S. Wu, X. Wang, Z. Li, S. Zhang, and F. Xing. Recent advances in the fabrication and application of graphene microfluidic sensors. *Micromachines*, 11(12):1059, 2020.
- [51] W. Xin, T. Wu, T. Zou, Y. Wang, W. Jiang, F. Xing, J. Yang, and C. Guo. Ultrasensitive optical detection of water pressure in microfluidics using smart reduced graphene oxide glass. *Frontiers in chemistry*, 7:395, 2019.
- [52] S. Zahedi, M. Kronbichler, and G. Kreiss. Spurious currents in finite element based level set methods for two-phase flow. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 69(9):1433–1456, 2012.
- [53] S. Zare Harofte, M. Soltani, S. Siavashy, and K. Raahemifar. Recent advances of utilizing artificial intelligence in lab on a chip for diagnosis and treatment. *Small*, page 2203169, 2022.