

Tero Tuovinen

**Mikrojärjestelmien virtausdynamiikka numeerisen
mallintamisen näkökulmasta**

Tietotekniikan
pro gradu - tutkielma
15. heinäkuuta 2005

Jyväskylän yliopisto

Tietotekniikan laitos

Jyväskylä

Tekijä: Tero Tuovinen

Yhteystiedot: tttuovin@cc.jyu.fi

Työn nimi: Mikrojärjestelmien virtausdynamiikka numeerisen mallintamisen näkökulmasta

Title in English: Numerical modeling of microfluiding systems

Työ: Tietotekniikan pro gradu - tutkielma

Sivumäärä: 116

Tiivistelmä: Tässä tutkielmassa tarkastellaan mikrojärjestelmien virtausdynamiikkaa ja sen numeerista mallintamista. Tutkielmassa tutustutaan virtausdynamiikan perusyhtälöihin. Lisäksi tarkastellaan mikrojärjestelmien elektrokineettisten voimien mallinnusta. Elektrokineettisistä voimista tarkastellaan elektro-osmoosia, elektroforeesia ja di-elektroforeesia. Tutkielmassa on mallinnettu neljää erilaista mikrovirtausatilannetta; näistä yksi on laminaarinen Navier-Stokesin virtaus, kahdessa mallissa tutkitaan elektro-osmoosin aiheuttamaa virtausta ja viimeinen malli on di-elektroforeesin avulla toteutetun partikkeliloukun malli. Mallinnuksessa on käytetty FemLab 3.1-ohjelmaa.

English abstract: In this thesis we study a microsystems fluid dynamics and its numerical modeling. We study how Navier-Stokes equations, Euler's equation and Stokes flow works. We also study a microsystems electro kinetic forces and its behavior. In electrokinetic's, we study electro-osmosis, electro-phoresis and di-electrophoresis. We modeled four different micro flows. One is Navier-Stokes flow, two are driven by electro-osmotic phenomena and last is di-electrophoretic trap for particle capturing. Models are implemented using FemLab 3.1 software.

Avainsanat: Di-elektroforeesi, Elektrokineetiikka, Elektro-osmoosi, Elektroforeesi, Eulerin yhtälöt, FemLab, Jatkuvuusteoria, MEMS, Mikrojärjestelmät, Mikrovirtausmallinnus, Navier-Stokes yhtälöt, Äärellisten elementtien menetelmä.

Keywords: Di-electrophoresis, Electrokinetics, Electro-osmosis, Electrophoresis, Euler's equations, FemLab, Continuum theory, MEMS, Microsystems, Microfluiding modelling, Navier-Stokes equations, Finite element method.

Esipuhe

Tämän tutkielman tekeminen ja aiheeseen tutustuminen on aloitettu joulukuussa 2004. Koska pohjatietoni aiheesta olivat olemattomat eli en ole lukenut fysiikkaa, tutustunut matemaattiseen mallinnukseen tai käyttänyt Femlab ohjelmaa, tutkielmaan on koottu kaikki se mitä olen näistä asioista oppinut seitsemän kuukauden aikana. Ehkä juuri se, että aihe tuntui tästä syystä mielestäni erittäin haastavalta ja se, että aihe vain kasvatti mielenkiintoani tutkimuksen edetessä, auttoi minua saamaan tutkielman lopullisesti valmiiksi.

Tutkielma suunniteltiin jo lähtökohtaisesti aihealueeltaan hieman normaalia pro gradu -tutkielmaa laajemmaksi. Tarkoitus oli, että tutkielmalla voisi perehdyttää tulevia opiskelijoita aiheeseen. Tämä näkyy tutkielmassa mm. siinä, ettei aiheita ole käsitelty hyvin syvällisesti vaan on yritetty luoda kokonaiskuva aihealueeseen.

Tahdon kiittää niitä ihmisiä, jotka auttoivat minua tutkielman eri vaiheissa. Kiitokset Sakari Lukkariselle, Pekka Neittaanmäelle, Timo Tiihoselle ja Markus Inkeriselle ohjauksesta ja asiantuntevista neuvoista. Lisäksi tahdon kiittää Antti Saastamoista sekä isääni Arvo Tuovista tutkielman läpilukemisesta ja kommentteista.

Kiitokset tuesta kuuluu myös muulle kotiväelle Nurmekseen. Tiedätte olevanne aina merkittävässä osassa elämäni. Suurin kiitos kuuluu kuitenkin vaimolleni Tanjalle sekä tyttärelleni Ronjalle. Te todellakin jaksoitte kuunnella minua alusta loppuun asti.

Tero Tuovinen

Sisältö

Kuvat	1
Taulukot	2
1 Johdanto	6
2 Mikrojärjestelmät	8
2.1 Toteutettuja mikrojärjestelmiä	8
2.2 Mikrojärjestelmien edut ja ongelmat	9
2.3 Paketointi	11
2.4 Tuotantomenetelmät	12
3 Mikrojärjestelmien virtausdynamiikka	13
3.1 Säilymis- ja materiaalilait	13
3.2 Mittakaavan vaikutukset	18
3.3 Navier-Stokesin yhtälöt	22
3.4 Mikrovirtausmallinnuksessa käytettävät dimensiottomat luvut . . .	24
3.5 Navier-Stokesin yhtälöt kokoonpuristumattomalle virtaukselle . . .	26
3.6 Eulerin yhtälöt	27
3.7 Stokesin virtaus	28
3.8 Muut menetelmät	28
3.9 Alku- ja reunaehtojen määrittelemine	29
4 Mikrovirtauksen elektrokinetiikka	33
4.1 Sähköinen kaksoiskerros	33
4.2 Elektro-osmoosi	34
4.3 Elektroforeesi	36
4.4 Di-elektroforeesi	38
5 Numeerinen mallintaminen	40
5.1 Numeerisen mallintamisen perusteet	40

5.2	Numeerinen virheanalyysi	40
5.3	Äärellisten elementtien menetelmä	41
6	Mikrovirtausmallinnus FemLab-ohjelmalla	45
6.1	Navier-Stokesin yhtälöiden mallinnus kanavassa	45
6.2	Elektro-osmoottisen virtausvoiman mallinnus kanavassa	53
6.3	Elektro-osmoottisen sekoittajan mallinnus kanavassa	59
6.4	Di-elektroforeettinen loukku	63
6.5	Analysointi	74
7	Yhteenveto	76
Liitteet		
A	Navier-Stokesin kokoonpuristumattoman virtauksen FemLab parametrit.	77
B	Osmoottisen virtauksen FemLab parametrit	79
C	Osmoottisen sekoittajan FemLab parametrit	84
D	Di-elektroforeettisen loukun FemLab parametrit	88
E	Videoiden ja mallien tiedostonimet	92
F	Ratkaisuihin kulunut aika	93
G	Mallinnuskoneen tiedot	94
H	Lisätietoja lähteistä	95
	Lähteet	98
	Sanasto	104

Kuvat

2.1	Mustesuihkutulostimen kirjoituspään toiminta	9
2.2	Kolmiakselinen kiihtyvyyssanturi	10
2.3	Kiihtyvyyssanturin toiminta mallinnettuna FemLab-ohjelmalla	10
4.1	Sähköinen kaksoiskerros	34
6.1	Kaavakuva virtauksen geometriasta	46
6.2	Kaavakuva mallin elementtiverkosta	47
6.3	Virtauksen solukohtaiset Reynoldsin luvut.	48
6.4	Virtauksen muoto nuolimallin avulla.	48
6.5	Poiseullen virtauksen muoto.	48
6.6	Virtauksen nopeuskentät	49
6.7	Virtauksen pyörteisyyskentät	50
6.8	Virtauksen 3D mallin geometria	51
6.9	Virtauksen 3D mallin elementtiverkko.	52
6.10	Virtauksen 3D mallin nopeuskentät	52
6.11	Osmoottisen virtauksen geometria	54
6.12	Osmoottisen virtauksen nopeuskentät $t=0.125$	55
6.13	Osmoottisen virtauksen nopeuskentät $t=0.075$	55
6.14	Kymmenen kertaa suuremman kanavan nopeuskentät $t=0.075$	56
6.15	Osmoottisen virtauksen potentiaalientät $t = 0.075$	57
6.16	Osmoottisen virtauksen 3D geometria	57
6.17	Osmoottisen virtauksen 3D geometria elementtiverkko.	58
6.18	Osmoottisen virtauksen 3D nopeuskentät	58
6.19	Osmoottisen sekoittajan geometria	59
6.20	Osmoottisen sekoittajan elementtiverkko	60
6.21	Osmoottisen sekoittajan potentiaalientät $t=0$	61
6.22	Osmoottisen sekoittajan nopeuskentät $t=0.125$	61
6.23	Osmoottisen sekoittajan nopeuskenttä $t=0.025$	62
6.24	Osmoottisen sekoittajan nopeuskentät $t = 0.075$	62

6.25	Di-elektroforeettisen loukun virtauskammio	64
6.26	Di-elektroforeettinen loukku	64
6.27	Di-elektroforeesin geometria 2-D	65
6.28	Di-elektroforeettisen loukun geometria 3-D	65
6.29	Di-elektroforeettisen loukun elementtiverkko	66
6.30	Poiseullen parabolinen sisäänvirtaus	67
6.31	Elektroforeettisen loukun potentiaal kentät.	68
6.32	Virtauksen nollakenttä partikkelille, jonka halkaisija on $4.2 \mu m$	69
6.33	Virtauksen nollakenttä partikkelille, jonka halkaisija on $8.2 \mu m$	69
6.34	Virtauksen nollakenttä partikkelille, jonka halkaisija on $9.7 \mu m$	70
6.35	Virtauksen nollakenttä partikkelille, jonka halkaisija on $14.2 \mu m$	70
6.36	Virtauksen nollakenttä partikkelille, jonka halkaisija on $19.5 \mu m$	71
6.37	Virtauksen nopeus on $0.55 \frac{mm}{s}$	72
6.38	Virtauksen nopeus on $1.1 \frac{mm}{s}$	72
6.39	Virtauksen nopeus on $2.2 \frac{mm}{s}$	73
6.40	Virtauksen nopeus on $4.4 \frac{mm}{s}$	73

Taulukot

3.1	Voimien skaalaus kertoimet	19
3.2	Knudsenin luvun vaikutus mallinnusmenetelmään.	29

Merkintöjä

$\frac{\partial}{\partial t}$	=	Osittaisderivaatta muuttujan t suhteen
$\frac{D}{Dt}$	=	Materiaaliderivaatta, $\frac{D}{Dt}f = \frac{\partial f}{\partial t} + v \cdot \nabla f$
∇u	=	Gradientti u :sta
$\nabla \cdot u$	=	Divergenssi u :sta
$\int f(x)dx$	=	Funktion f integraali x :n suhteen
\int_{Ω}	=	Integraali yli alueen Ω
$\sum_{k=1}^n$	=	Summa 1:stä n :nään
$V \times W$	=	Ristitulo vektoreille tai matriiseilla V ja W
E_{model}	=	Matemaattisen mallin virhe
E_{app}	=	Arviointivirhe
E_{comp}	=	Laskennassa tuleva virhe
E_{total}	=	Kokonaisvirhe
$\Re\{K\}$	=	Reaaliosa Classius-Mossotin kertoimesta
a	=	Kiihtyvyys (<i>Accerate</i>)
c_v	=	Lämpövakio
c_{∞}	=	Ionin molaariväkevyys
d	=	Kanavan halkaisija (<i>Channel diameter</i>), tai
d	=	Stokesin halkaisija partikkelille (<i>Stokes diameter of the particle</i>)
D	=	Etäisyys (<i>Distance</i>)
e	=	Sisäinen energia
\mathbf{E}	=	Sähkökentän voima (<i>Electric field force</i>)
\mathbf{F}	=	Voima (<i>Force</i>)
F_{dep}	=	Di-elektroforeettinen voima
F_D	=	Stokesin virtausvoima
F	=	Faradayn vakio
g	=	Putomiskiihtyvyys
\mathbf{g}	=	Putoamiskiihtyvyys vektori
h	=	Korkeus (<i>Height</i>) tai sisäiset lämmönlähteet

J	=	Virtatiheys (<i>Current density</i>)
k	=	Boltzmannin vakio ($1.38 \cdot 10^{-23} \frac{J}{K}$)
K	=	Clausius-Mossotti kerroin (<i>Clausius-mossotti factor</i>) tai
K	=	Elementti
Kn	=	Knudsenin luku (<i>Knudsen number</i>)
l	=	Pituus (<i>Length</i>)
L	=	Ominaispituus (<i>Characteristic dimension</i>) tai
L	=	Liu'un vakiopituus
m	=	Massa (<i>Mass</i>)
M	=	Jäykkyydsmatriisi
Ma	=	Machin luku (<i>Mach number</i>)
\mathbf{n}	=	Pinnan yksikkönormaalivektori
n	=	Hiukkastiheys
p	=	Paine (<i>Pressure</i>)
q	=	Lämmönvirtaus reunan läpi tai
q	=	Kokonaismolekyylijännitys (<i>total molecule charge</i>)
r	=	Säde
R_i	=	Rajapinnan kaarevuuden säde
Re	=	Reynoldsin luku (<i>Reynolds number</i>)
S	=	Skaalauskerroin Trimmerin notaatiossa
t	=	Aika (<i>Time</i>)
T	=	Lämpötila (<i>Temperature</i>)
\mathbf{u}	=	Virtauksen nopeus (<i>Flow velocity</i>)
U	=	Ominaisnopeus (<i>Characteristic velocity</i>)
$\mathbf{U}_{\text{sound}}$	=	Lokaali äänennopeus
V	=	Tilavuus (<i>Volume</i>) tai jännite
V^T	=	Matriisin V transpoosi (<i>Transpose</i>)
w	=	Leveys (<i>Width</i>), tai testifunktio
W	=	Työ (<i>Work</i>)

x	= Paikkamuuttuja (vektori n-ulottuvuudessa, jos $n > 1$)
z	= Ionin valenssiluku (<i>Valence number of ions</i>)
α	= Partikkelin polarisoitumiskyky
γ	= Kaasuvakio
δ	= Kroneckerin delta
Δ	= Muutos
ε	= Eristevakio, permittiivisyys (<i>Permittivity</i>) tai
ε	= Venymätensori
ζ	= Zeta-potentiaali
ϑ	= Pintajännitys
κ	= Johtavuus (<i>Conductivity</i>)
λ	= Keskimääräinen vapaa matka (<i>Mean Free Path, MFP</i>)
λ_D	= Debyen pituus (<i>Debye length</i>)
μ	= Mikro, 1:1 000 000 (<i>Micro</i>)
ν	= Kinemaattinen viskositeetti (<i>Kinematic viscosity</i>)
ν_{dyn}	= Dynaaminen viskositeetti (<i>Dynamic fluid viscosity</i>)
ν_{sec}	= Toinen viskositeetti kerroin
ν_{eph}	= Elektroforeesin liikkuvuus (<i>electrophoretic mobility</i>)
ρ	= Tiheys (<i>Density</i>)
ρ_E	= Verkon varaustiheys
σ	= Molekyylin halkaisija (<i>Molecular diameter</i>)
τ	= Jännitystensori (<i>Stresstensor</i>)
ϕ	= Lokaali potentiaali tai kantafunktio
Ω	= Kappale tai alue
ω	= Sähkökentän kulmataajuus (<i>angular frequency of the electric field</i>)

— As soon as I mention this, people tell me about miniaturization, and how far it has progressed today. They tell me about electric motors that are the size of the nail on your small finger. And there is a device on the market, they tell me, by which you can write the Lord's Prayer on the head of a pin. But that's nothing; that's the most primitive, halting step in the direction I intend to discuss. It is a staggeringly small world that is below. In the year 2000, when they look back at this age, they will wonder why it was not until the year 1960 that anybody began seriously to move in this direction.— Richard P. Feynman, 1960. [Feynman 60]

1 Johdanto

Mikrojärjestelmä tarkoittaa järjestelmää, jonka toiminnallisuus tuotetaan käyttäen hyväksi ainakin yhtä mikromekaanisesti valmistettua komponenttia. Erotuksena mikroelektroniikkaan, järjestelmä sisältää myös mekaanista toiminnallisuutta. Tällä tarkoitetaan mm. painevaihtelua tai virtausta. Mikrovirtaus tarkoittaa mikrojärjestelmässä tapahtuvaa nesteen tai kaasun liikkumista.

Mikrojärjestelmien numeerinen mallintaminen eroaa makrojärjestelmien mallintamisesta usealla tavalla. Monet makromaailman keskeisistä ilmiöistä ovat mikromaailmassa merkityksettömiä kuten esimerkiksi gravitaatio ja inertia. Toisaalta taas vaikka pintajännityksellä ei ole havaittavaa merkitystä makromaailmassa, niin mikromaailmassa se näyttelee varsin suurta roolia.[Trimmer 89]

Tässä tutkielmassa käsitellään mikrojärjestelmien numeerista mallintamista mikrovirtausmallinnuksen näkökulmasta. Tutkielman teoriaosuudessa esitellään virtausmallinnuksen yleiset lähtökohdat sekä yhtälöt ja menetelmät. Tarkasteltavat kohteet on valittu mikrovirtauksien erityispiirteet huomioon ottaen. Tutkielman empiiriosuudessa mallinnetaan teoriaosuudessa esitellyillä menetelmillä neljä erilaista mikrovirtausta. Mallien simulointiin käytetään kaupallista FemLab 3.1-ohjelmaa.

Tutkielman aiheeksi on valittu mikrovirtausmallinnus, koska aihe on kiinnostava tällä hetkellä niin tieteen tekijöiden kuin teollisen tuotannon mielestä. Tämä johtuu siitä, että mikrojärjestelmien käyttö on kasvanut, mutta itse mikrovirtausmallinnusta on tutkittu Suomessa varsin vähän. Yritysmaailman kiinnostus mikrovirtaus-

mallinnukseen on todenteolla herännyt vasta parin viimeisen vuoden aikana¹.

Tutkielmassa perehdytään yksityiskohtaisesti mikrovirtauksiin, joille jatkuvuusteorian ehdot pätevät. Teoriassa mahdollisiin, mutta käytännössä harvinaisiin turbulenteihin mikrovirtauksiin ei tutkielmassa puututa. Myös kapilaari-ilmion tutkiminen elektrokineetiikan puolelta on sivuutettu.

Tutkielmassa valittiin simuloitavaksi neljää varsin yleistä mikrovirtaustilannetta. Simuloitavana on kokoonpuristumaton Navier-Stokesin virtaus, kaksi elektroosmoottista virtausta sekä elektroforeettinen loukku. Elektroforeettisen loukun simulaatiota käsitellään tutkielmassa muita malleja tarkemmin, koska vastaavaa ei ole aikaisemmin mallinnettu FemLab-ohjelman avulla. Mallia on tarkoitus käyttää esimerkkinä tulevissa FemLab-versioissa. Analysoinnissa tarkastellaan mallien ratkaisuun kulunutta aikaa, verrataan malleja suuremmaksi skaalattuihin vastaaviin malleihin ja arvioidaan di-elektroforeettisen mallin todenmukaisuutta.

Alan kirjallisuuden ja oppimateriaalin ohella lähteinä on käytetty erityisesti Jaana Sarajärven pro gradu -tutkielmaa "*Osittaisdifferentiaali yhtälöiden ratkaiseminen FemLab-ohjelmalla*" [Sarajärvi 04] syksyiltä 2004 sekä Anssi Pennasen pro gradu -tutkielmaa "*Algebrallisen monihilamenetelmän käyttö Stokesin yhtälöiden ratkaisemisessa*" [Pennanen 04] kesältä 2004.

Tutkielman rakenne on seuraava. Luvussa 2 tutustutaan mikrojärjestelmiin yleisellä tasolla ja esitellään lyhyesti mikrojärjestelmien tuotantoon soveltuvia menetelmiä. Luvussa 3 perehdytään mikrovirtausdynamiikan perusteisiin ja tarkastellaan osittaisdifferentiaaliyhtälöiden ratkaisemiseen tarvittavien alku- ja reunaehtojen määrittämistä mikrojärjestelmiä mallinnettaessa. Luvussa 4 perehdytään yksityiskohtaisesti mikrovirtausten elektrokineettisiin ilmiöihin ja niiden taustalla oleviin fysikaalisiin kaavoihin. Luvussa käsitellään aihetta tarkasti, koska tutkielman mallinnusosiossa keskitytään elektrokineettisten ilmiöiden mallintamiseen. Luvussa 5 kerrataan numeerisen mallinnuksen perusteita. Luvussa 6 tarkastellaan tutkielman teorian pohjalta kehitettyjä mikrovirtausmalleja.

¹CSC - Tieteellinen laskenta on tutkinut mikrovirtauksia noin vuoden ja Comsol Oy sai lokakuussa 2004 valmiiksi MEMS-modulin.

2 Mikrojärjestelmät

Määritelmä 2.1 (Mikrojärjestelmät).

Laite luetaan kuuluvoaksi mikrojärjestelmäksi silloin, kun sen toiminnallisuus tuotetaan käyttäen hyväksi ainakin yhtä mikromekaanisesti valmistettua komponenttia.

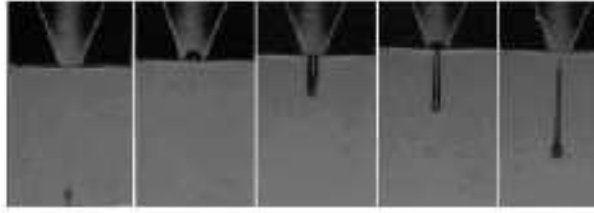
Mikromekaanisella valmistustavalla tarkoitetaan luvussa 2.4 esiteltäviä menetelmiä. Mikrojärjestelmien yleisenä lähtökohtana on laitteen miniatyyrisointi eli koko laite yritetään valmistaa mahdollisimman pieneksi. Täydellistä määritelmää mikrojärjestelmälle ei kuitenkaan ole olemassa. Mikrojärjestelmiä kutsutaan myös vaihtelevilla nimillä riippuen siitä, kummalla puolella Atlanttia sijaitaan. Pohjois-Amerikassa mikrojärjestelmistä käytetään usein nimeä *Mikroelectromechanical system (MEMS)*, kun taas Euroopassa sitä kutsutaan lyhyemmin nimellä *Microsystem*. Tutkielmassa nimeksi on valittu eurooppalaisen version suora suomenkielinen käännös eli mikrojärjestelmä. [Kallio 01]

Tässä luvussa tarkastellaan eräitä toteutettuja mikrojärjestelmiä, sekä perehdytään siihen kuinka mikrojärjestelmiä käytännössä valmistetaan. Luvussa pohditaan myös mikrojärjestelmien etuja ja haittoja vastaaviin makrojärjestelmiin verrattuna.

2.1 Toteutettuja mikrojärjestelmiä

Mikrojärjestelmien kehitys on ollut vilkasta viimeisen vuosikymmenen ajalla ja monet arkipäivän laitteet sisältävät nykyisin mikrojärjestelmillä toteutettua toiminnallisuutta. Tunnetuimpia menestystarinoita mikrojärjestelmien kehittämisessä on mustesuihkutulostimen kirjoituspää (ks. kuva 2.1).

Kirjoituspään ansiosta mustesuihkutulostimet pystyvät aiemmin mahdottomalta kuulostavaan tarkkuuteen ja tulostimiin voitiin lisätä sen ansiosta helposti värit. Tämä mahdollisti suurtarkkuuskuvien tulostamisen edullisilla kotikäyttöön suunnitelluilla tulostimilla ja markkinat kasvoivat räjähdysmäisesti. Vuonna 2001 maailmassa myytiin 600 miljoonaa mustesuihkutulostimen kirjoituspäätä [Grace 02]. Kirjoituspäässä yhdistyivät mikrojärjestelmän halvempi hinta ja parempi laatu toimi-



Kuva 2.1: Mustesuihkutulostimen kirjoituspään toiminta (vasemmalta oikealle). Mustepisaran koko $50 \mu\text{m}$. [Hayes 04]

vaksi kokonaisuudeksi, joka löytyy nykyisin melkein jokaiselta tietokoneen omistajalta.

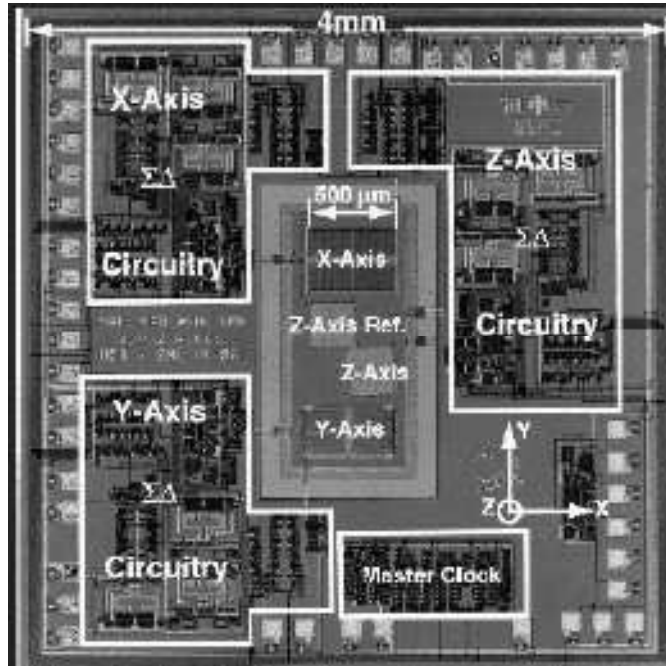
Toinen käytännön esimerkki yleisestä mikrojärjestelmästä on auton Airbag-turvatyynyn kiihtyvyyssanturi (ks. kuva 2.2 ja kuva 2.3). Kiihtyvyyssanturi on nykyisin käytössä lähes jokaisessa uudessa automallissa. Sitä voidaan käyttää myös mm. auton ohjattavuuden ja ajomukavuuden parantamisessa. Vuonna 2000 auton anturien maailmanlaajuiset markkinat olivat 6.17 miljardia US dollaria (900 miljoonaa kappaletta). Auton liikkumiseen ja tilaan vaikuttavien antureiden (kuten kiihtyvyyssanturien) osuus siitä oli 38 prosenttia (342 miljoonaa kappaletta) [Grace 04].

Mikrojärjestelmiä käytetään myös mm. paineantureina, elektrostaattisissa näyttöissä, gyroskooppeina, DNA-vahvistimina ja kaasusensoreina. Lisää käyttötarkoituksia kehitetään koko ajan. [Senturia 01]

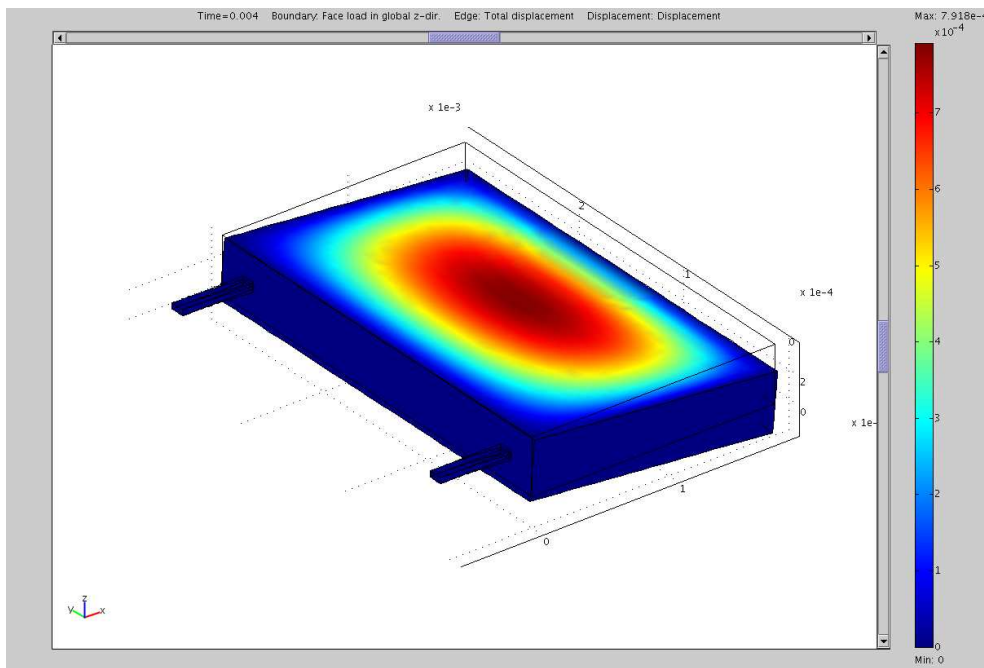
2.2 Mikrojärjestelmien edut ja ongelmat

Mikrojärjestelmillä on useita merkittäviä etuja verrattuna makrojärjestelmiin. Mikrojärjestelmiä voidaan valmistaa nykyisin massatuotantomenetelmillä. Koska niiden materiaalikustannukset ovat minimaaliset, yhden massatuotannolla valmistetun komponentin hinta laskee silloin lähelle nolaa². Usein komponentit ovat myös mittaustarkkuudeltaan hyvin kilpailukykyisiä vastaaviin makrojärjestelmiin verrattuna. Mikrojärjestelmällä ei katsota olevan vaikutusta mitattavaan ilmiöön ja näin

²Hinta ei juurikaan riipu siitä, mistä komponentista on kyse.



Kuva 2.2: Berkleyn yliopiston ja Sandian yhteistyössä kehittämä prototyyppi neliönmuotoisesta kolmiakselisesta kiihtyvyyssanturista [Lemkin 97].



Kuva 2.3: Kiihtyvyyssanturin toiminta mallinnettuna FemLab-ohjelmalla. [Com 04a, Veijola 99]

ollen mittaustulosta voidaan pitää paikallisena tarkkana arvona. Kun komponentit ovat halpoja ja pieniä niitä kannattaa myös varata järjestelmään useampia kuin vastaavia kalliita ja suuria komponentteja. Näin yhden komponentin rikkoontuminen ei vaaranna koko järjestelmän toimintaa.

Mikrojärjestelmien ongelmana on kallis suunnitteluvaihe, sillä niiden tekeminen ennen massatuotantoastetta on hidasta ja kallista käsityötä. Prototyypin valmistusta varten joudutaan hankkimaan kalliit erikoistyökalut ja -tilat. Matemaattista mallinnusta käytetään yleisesti nopeuttamaan komponentin kehitystä ennen prototyypivaihetta. Mikrojärjestelmissä kuitenkin matemaattinen mallintaminen on hankalampaa. Pääsääntöisesti makromaailman mallinnusmenetelmät eivät ota huomioon yksittäisten partikkelien aiheuttamia tapahtumia vaan mallintavat ilmiön sen perusteella, miten partikkelipopulaatio kokonaisuutena toimii. Mikromaailmassa tulee eteen kuitenkin useasti tilanteita, missä yksittäisten partikkelien toiminta voi vaikuttaa merkittävästi ilmiöön. Mallinnusmenetelmän tulee tällöin huomioida joukko uusia ilmiöitä, joista osa voi olla vähän tutkittuja tai kokonaan tuntemattomia. Matemaattisen mallintamisen perusteita tutkitaan enemmän luvussa 3.2.

2.3 Paketointi

Mikrojärjestelmien suunnitteleminen eroaa makrojärjestelmien suunnittelemisesta mm. siten, että mikrojärjestelmä **paketoidaan** osana valmistusprosessia. Paketoinnilla tarkoitetaan mikrokokoisen anturin tai muun laitteen istuttamista suurempaan kehikkoon. Herkkää komponenttia on näin huomattavasti helpompi käsitellä, eikä se mene niin helposti rikki. Mikroelektronikassa ei juurikaan tarvitse huomioida ympäröiviä olosuhteita tai mahdollisia kontaktipintoja. Mikrojärjestelmissä näiden kontaktipintojen huomioiminen on ehdottoman tärkeää, sillä usein järjestelmän tarkoituksena on nimenomaan muutoksien havainnoiminen ympäristöstä.

Mielenkiintoinen paketoinnin osa-alue, johon tässä tutkimuksessa ei tarkemmin perehdytä, on mikrojärjestelmän **paketoiminen ankariin olosuhteisiin** (*harsh environment*). Ankarilla olosuhteilla tarkoitetaan ympäristöä, jossa mikrojärjestelmä on

erityisen alttiina joillekin kuluttaville fysikaalisille ilmiöille. Ankarana ympäristönä voidaan pitää esimerkiksi avaruutta tai merenpohjaa. [Gad-el Hak 01, s.23.1–23.4]

2.4 Tuotantomenetelmät

Mikrojärjestelmien suosion lisääntymisen syy on kehittyneissä tuotantomenetelmissä. Osa mikrojärjestelmien tuottamiseen käytetyistä menetelmistä on peräisin mikroelektroniikkateollisuudesta, mutta esimerkiksi etsausta käytettiin jo 1400-luvulla haarniskojen koristelemiseen [Madou 97]. Nykyisten menetelmien tärkein ominaisuus on mahdollisuus tehokkaaseen massatuotantoon. Kallis suunnittelu sekä tuotantoprosessin kehittäminen saadaan kannattavaksi vasta, kun mikrojärjestelmiä pystytään valmistamaan paljon ja nopeasti.

Mikrojärjestelmien tuotantomenetelmien joukko on hyvin kirjava, eikä voida suoraan sanoa yleispätevää menetelmää kaikkiin tilanteisiin. Käytetyt menetelmät täytyy siis valita aina tapauskohtaisesti. Menetelmän valintaan vaikuttavat järjestelmässä käytetyt materiaalit, jo olemassa oleva tuotantoteknologia sekä olosuhteet, joihin järjestelmä on suunniteltu. Tunnetuja menetelmiä ovat litografiamenetelmät, etsausmenetelmät, LIGA-menetelmä, elektrolyyttinen kasvatus, pinnoitustekniikat, pintamikrotyöstö, kipinätyöstö, lastuavat mikrotyöstömenetelmät, lasertyöstö sekä vesisuihkuleikkaus. [Heino 03, Senturia 01, Gad-el Hak 01]

3 Mikrojärjestelmien virtausdynamikka

Virtausdynamikalla tarkoitetaan joko nesteen tai kaasun virtaamisen mallintamista. Useat makromaailman mallit ja menetelmät toimivat myös mikromaailmassa, mutta vain tietyin rajoituksin. Tämän luvun tarkoituksena on tutustuttaa lukija virtausdynamikan yleisimpiin käsitteisiin ja antaa käsitys siitä kuinka virtausdynamikka mallinnetaan mikrojärjestelmissä.

3.1 Säilymis- ja materiaalilait

Virtausdynamikassa käytettävät yhtälöt pystytään johtamaan **säilymis- ja materiaalilakien** avulla. Mikäli virtauksella on joitain erikoisominaisuuksia, kaikkia lakeja ei tarvitse laskennassa huomioida. Seuraavassa määritellään lyhyesti fysiikan säilymislait ja säännöt, jotka jokaisen materiaalilain on toteutettava. Säilymis- ja materiaalilait esitellään lähteen [Tiihonen 91, luku 1.2 ja 1.3] mukaisesti.

Kaikki säilymislait voidaan kirjoittaa yleisessä muodossaan yhtälön

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\int_{\Omega} \rho a \right) - \int_{\Omega} \rho b - \int_{\partial\Omega} c \cdot \mathbf{n} = 0 \quad (3.1)$$

avulla. Yhtälössä Ω on tarkasteltava alue, ρ on tiheys ja \mathbf{n} yksikkönormaali. Säilymislaki tarkoittaa toisin sanoen, että säilyvän suureen (a) muutos on yhtäsuuri kuin lähde-termin (b) ja vuotermin (c) summa.

Säilymislain yleinen muoto on tilanteelle, jossa Ω seuraa tietyn osajärjestelmän massapisteitä. Toisin sanoen jos materiaali virtaa, Ω siirtyy virtauksen mukana. Tällöin sekä lähde-termin, että vuotermin ovat nollija, koska materiaalia ei synny, eikä sitä tule järjestelmän ulkopuolelta. Massan säilymislaki voidaan kirjoittaa silloin muodossa

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega(t)} \rho d\Omega = 0. \quad (3.2)$$

missä ρ on aineen tiheys paikassa x ajanhetkellä t .

Yhtälössä voidaan muuttaa integroinnin ja derivoinnin järjestystä, joten saadaan yh-

tälö

$$\int_{\Omega(t)} \left(\frac{D\rho}{Dt} + \rho \nabla \cdot \mathbf{u} \right) d\Omega = 0, \quad (3.3)$$

missä \mathbf{u} on nopeusvektori. Koska yhtälö on voimassa kaikille alueilla $\Omega(t)$ voidaan määritellä materiaaliderivaatan avulla massan säilymlaki.

Määritelmä 3.1 (Massan säilymlaki).

Massan säilymlaki (jatkuvuusyhtälö) on,

$$\frac{D\rho}{Dt} + \rho \nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (3.4)$$

tai

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (3.5)$$

kun ρ on kappaleen tiheys. Massan säilymlakia tarvitaan mm. **Navier-Stokesin yhtälön** johtamisessa.

Kappaleen liikemäärä on *massa · nopeus*. Yleisessä muodossa liikemäärän säilymlaki voidaan esittää yhtälön

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\int_{\Omega(t)} \rho \mathbf{u} \right) d\Omega - \int_{\Omega(t)} \rho \mathbf{g} - \int_{\partial\Omega(t)} \boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{n} = 0 \quad (3.6)$$

avulla. Kappaleeseen kohdistuvat voimat voivat kohdistua siis joko massaan (\mathbf{g}) tai kappaleen pintaan ($\boldsymbol{\tau}$). Vaihtamalla integroinnin ja derivoinnin järjestystä ja soveltamalla saatua tulosta massan säilymlakiin saamme liikemäärän säilymlain tunnetussa muodossaan.

Määritelmä 3.2 (Liikemäärän säilymlaki).

Liikemäärän (impulssin) säilymlaki (Newtonin I laki) on,

$$\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} - \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} - \rho \mathbf{g} = 0. \quad (3.7)$$

missä ρ on tiheys, u on nopeus, $\boldsymbol{\tau}$ on jännitystensori ja \mathbf{g} on putoamiskiikkyvyys.

Liikemäärän säilymlakia tarvitaan mm. Navier-Stokesin yhtälöiden johtamisessa.

Määritelmä 3.3 (Hitausmomentin säilymlaki).

Hitausmomentin (*inertian*) säilymlaki on, että jännitystensorin on oltava symmetrinen, eli

$$\tau = \tau^T \quad (3.8)$$

Hitausmomentin säilymlaki takaa kiertovoimien tasapainon $\mathbf{F} \times \mathbf{x} = 0$.

Kokonaisenergia on

$$\int_{\Omega} \rho \left(e + \frac{1}{2} \mathbf{u} \cdot \mathbf{u} \right) d\Omega, \quad (3.9)$$

missä e on sisäenergia ja $\frac{1}{2} \mathbf{u} \cdot \mathbf{u}$ on liike-energia massayksikköä kohti. Energian muutoksen tulee olla tasapainossa sisäisten lämpölähteiden tuottaman energian ja tilavuusvoimien tekemän työn kanssa. Kappaleen reunalla tapahtuva lämpövuoto ja jännitysten tekemä työ vaikuttavat myös kokonaisenergian muutokseen. Energian säilymlaki voidaan johtaa yhtälöstä

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega(t)} \rho \left(e + \frac{1}{2} \mathbf{u} \cdot \mathbf{u} \right) d\Omega - \int_{\Omega(t)} \rho (h + \mathbf{g} \cdot \mathbf{u}) d\Omega - \int_{\partial\Omega(t)} (q + \tau \cdot \mathbf{u}) \cdot \mathbf{n} dS = 0 \quad (3.10)$$

Viemällä derivointi integraalin sisälle ja käyttämällä Gausin kaavaa reunaintegraaleille sekä järjestelemällä termit sopivasti energian säilymlaki saadaan tunnettuun muotoonsa.³

Määritelmä 3.4 (Energian säilymlaki).

Energian säilymlaki on, että kokonaisenergian muutos tulee olla tasapainossa ulkoa tulevan energian kanssa, joten

$$\underbrace{\rho \frac{De}{Dt}}_{\text{sisäinen muutos}} - \underbrace{\nabla \cdot q}_{\text{lämpövuoto}} - \underbrace{\tau : \nabla \mathbf{u}}_{\text{liikkeen lämpöteho}} - \underbrace{\rho h}_{\text{lämmönlähteet}} = 0, \quad (3.11)$$

³Yhtälö johdetaan mm. lähteessä [Hämäläinen 94].

missä e on sisäinen energia massayksikköä kohti, q on lämmönvirtaus reunan läpi ja h on sisäiset lämmönlähteet.

Määritelmä 3.5 (Einsteinin summaussopimus).

Einsteinin summaussopimus (Einstein summation convention):

$$\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = \sum_{i=1}^n a_i b_i = \sum a_i b_i = a_i b_i \quad (3.12)$$

[Nguyen 02]

Edellä esitetyt integraalimuotoiset säilymislait ovat voimassa kaikille mielivaltaisille osasysteemeille, mikäli laissa esiintyvät suureet voidaan olettaa jatkuviksi ja sileiksi (ns. jatkuvuusteoria (*continuum theory, continuum model*)). Säilymislait voidaan kirjoittaa myös pisteittäisessä muodossa. Kun sievennysten jälkeen otetaan käyttöön Einsteinin summaussopimus, lait saadaan muodossa

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_k} (\rho u_k) = 0 \quad (3.13)$$

$$\rho \left(\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_k \frac{\partial u_i}{\partial x_k} \right) = \frac{\partial \tau_{ki}}{\partial x_k} + \rho g_i \quad (3.14)$$

$$\rho \left(\frac{\partial e}{\partial t} + u_k \frac{\partial e}{\partial x_k} \right) = -\frac{\partial q_k}{\partial x_k} + \tau_{ki} \frac{\partial u_i}{\partial x_k} \quad (3.15)$$

missä ρ on nesteen tiheys, u_k on virtauksen nopeuskomponentti, τ_{ki} on toisen kertaluokan jännitystensori, g_i on $\frac{\text{voima}}{\text{massa}}$ eli melkein aina gravitaatio, e on sisäinen energia ja q_k on summa lämpövektoreista (säteily ja johtuminen). Aika (t) ja tilakoordinaatit (x_1, x_2, x_3) ovat riippumattomia tuntemattomia. [Gad-el Hak 01]

Vaikka tilavuusvoimat ja lämpölähde voitaisiin olettaa tunnetuiksi, pelkät säilymislait eivät riitä kuvaamaan massan- ja lämmönsiirtoa. Tuntemattomia muuttujia on 14 kappaletta ($\rho, u_1, u_2, u_3, \tau_{11}, \tau_{12}, \tau_{13}, \tau_{22}, \tau_{23}, \tau_{33}, e, q_1, q_2, q_3$) ja tunnettuja yhtälöitä kahdeksan (1+3+3+1). Suljetun järjestelmän saamiseksi tarvitaan materiaalilakeja

(*constitutive laws*), jotka antavat tarvittavat lisärelaatiot tuntemattomien muuttujien välille. [Hämäläinen 94, s.24]

Materiaalilait perustuvat usein kokeellisen tiedon pohjalta johdettuun hypoteesiin. Lain tulee kuitenkin täyttää tietyt ehdot. Arvauksen tulee olla **deterministinen** eli tulevaisuus ei saa vaikuttaa tarkasteltavaan hetkeen. Arvauksen tulee olla **lokaali** eli arvaus saa olla riippuvainen vain muuttujien ja niiden derivaattojen arvoista samassa pisteessä. Materiaalilain tulee olla **objektiivinen** eli se ei saa olla riippuvainen koordinaatistosta. Viimeisenä, materiaalilain tulee olla **termodynaamisesti hyväksyttävä** eli se ei saa olla ristiriidassa **Clausius-Duhem -epäyhtälön**⁴ kanssa. [Tiihonen 91]

Määritelmä 3.6 (Viskositeetti).

Kinemaattisella viskositeetillä ν tarkoitetaan nesteen aineosasten välistä kitkaa. Dynaaminen viskositeetti ν_{dyn} saadaan kertomalla kinemaattinen viskositeetti nesteen tiheydellä ρ mittauslämpötilassa T .

Määritelmä 3.7 (Ideaalinen neste).

Ideaalinen neste (ideal fluid, inviscid fluid) on neste, jonka kinemaattinen viskositeetti $\nu = 0$.

Esimerkkinä materiaalilakien relaatioista on newtonilaisen isotrooppisen ideaalikaasun tarvitsemat yhtälöt. Kun järjestelmästä halutaan suljettu, täytyy ideaalikaasun tapauksessa määritellä seuraavat yhtälöt:

$$\tau_{ki} = -p\delta_{ki} + \nu_{dyn} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_i} \right) + \nu_{sec} \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_j} \right) \delta_{ki} \quad (3.16)$$

$$q_i = -\kappa \frac{\partial T}{\partial x_i} + \text{heat flux due radiation} \quad (3.17)$$

$$de = c_v dT \quad (3.18)$$

$$p = \rho \frac{k}{m} T \quad (3.19)$$

⁴Epäyhtälö lyhyesti: entropia kasvaa. Termodynamiikan toinen pääsääntö.

Yhtälöissä ν_{dyn} ja ν_{sec} ovat viskositeettikertoimet, δ_{ki} on Kroneckerin delta, κ on lämmönjohtavuus, T on lämpökenttä, c_v lämpövakio, k on Boltzmanin vakio ja m on yksittäisen molekyylin massa. Yhtälöiden avulla voidaan nyt sulkea yhtälöryhmä ja ratkaista ideaalikaasun virtaus numeerisesti. [Gad-el Hak 01, 4-7]

3.2 Mittakaavan vaikutukset

Mittakaavan vaihtuminen makroskaalasta mikroskaalaan vaikuttaa merkittävästi mitattavien voimien suhteeseen. Makroskaalan hallitsevina voimina ovat gravitaatio ja massan hitaus (*inertia*). Kun tarkasteltavan kohteen koko pienenee mikrometrien luokkaan, gravitaation ja inertian merkitys vähenee. Sähköstaattiset voimat, sekä van der Waals -voimat sitä vastoin kasvattavat merkitystään. Syy tähän muutokseen on pinta-alan suhteellinen lisääntyminen tilavuuteen verrattuna. [Trimmer 89]

Kirjallisuudessa voimien skaalautuminen esitetään useasti niin sanotun Trimmerin notaation avulla [Trimmer 89]. Trimmerin notaatiolla tarkoitetaan vektorimerkintää voimien ja etäisyyksien välisestä suhteesta. Trimmerin notaatiossa skaalauskerrointa merkitään S :llä. Skaalauskerroin S voi kuvata esimerkiksi pallon halkaisijan tai kanavan leveyden muutosta. Kun S :n edustama dimensio on valittu, oletetaan, että järjestelmän kaikki muutkin dimensiot skaalautuvat samoin [Kallio 01, s. 42]. Tällä tarkoitetaan sitä, että järjestelmään vaikuttavat voimat skaalautuvat voimasta riippuen eri tavalla. Voimien skaalautuminen ilmoitetaan skaalauskerroimen potenssina.

Osoittautuu, että liikemäärän säilymislaista voidaan erotella neljä erilaista käyttäytymistä mittakaavan skaalautumisen suhteen. Tarkastelualueen pintaan kohdistuvat voimat skaalautuvat vaikutuspinta-alueen mukaan (S^2), jos vaikuttava voima on vakio (esimerkiksi ulkoinen paine tai sähkö- tai magneettikenttä). Jos pintavoima riippuu pinnan geometriasta (esimerkiksi pintajännitys, joka riippuu pinnanmuodosta) voima skaalautuu S^1 mukaan. Vastaavasti volyyminvoima (g) skaalautuu S^3 mukaan jos voimakenttä (gravitaatio, magneettikenttä) pysyy vakiona. Mikäli voima on toisen skaalautuvan osajärjestelmän aiheuttamaa (käytännössä osajärjestelmänä

S^1	Pintajännitys, sähköstaattinen voima
S^2	Paine, lihasvoima, sähköstaattisuus ja magneettisuus
S^3	Magneettisuus
S^4	Gravitaatio, magneettisuus

Taulukko 3.1: Voimien skaalauskerroimia. Magneettikentän skaalautuminen ei ole yksikäsitteistä, vaan riippuu virran voimakkuudesta. Gravitaatio skaalautuu S^4 mikäli massaa ei oleteta vakioksi.

gravitaatio, sähkö- tai magneettikenttä) skaalautuminen tapahtuu S^4 mukaan.

Tarkastellaan tilannetta, jossa järjestelmä pienenee sadasosaan (1 : 100) alkupe-
räisestä. Jos myös voima pienenee sadasosaan, merkitään että voima skaalautuu S^1 .
Jos voima sitä vastoin pienenee 1 : 10⁴, silloin se merkitään S^2 . Skaalauskerroimet
voidaan yhdistää Trimmerin notaation mukaan skaalausvektoriin

$$\mathbf{F} = \begin{bmatrix} S^1 \\ S^2 \\ S^3 \\ S^4 \end{bmatrix} \quad (3.20)$$

jolloin voima \mathbf{F} skaalautuu dimension pienetessä sadasosaan vektorin

$$\mathbf{F} = \begin{bmatrix} 1 : 100^1 \\ 1 : 100^2 \\ 1 : 100^3 \\ 1 : 100^4 \end{bmatrix} \quad (3.21)$$

mukaan. Vektoriin on valittu neljä komponenttia, koska liikemääräyhtälöissä on ole-
massa vain neljään luokkaan kuuluvia voimia, joilla on erilainen skaalautuvuus.
Trimmerin notaatiota voidaan tarvittaessa laajentaa useammankin komponentin ko-
koiseksi.

Trimmerin notaation avulla voidaan esimerkiksi laskea tilavuuden muutos mit-
takaavan muuttuessa. Pituus skaalautuu luonnollisesti S^1 mukaan. Pinta-alan skaa-

lauskerroin on tällöin S^2 ja tilavuuden S^3 . Skaalauskerroimen voi päätellä siitä, kuinka moneen termiin dimension muutos vaikuttaa. Pinta-ala lasketaan järjestelmän leveyden ja korkeuden avulla. Dimension muutos vaikuttaa yhtä aikaa siis molempiin termeihin. Samalla tavalla tilavuus V saadaan kaavasta

$$V = l \cdot w \cdot h \quad (3.22)$$

missä l on pituus, w on leveys ja h on korkeus. Dimension muutos vaikuttaa jokaiseen näistä termeistä ja koska jokainen termi on olennaisesti pituus, tilavuuden skaalauskerroin saadaan laskemalla termien skaalauskerroimet yhteen

$$S^1 + S^1 + S^1 = S^3. \quad (3.23)$$

Kun dimensio muuttuu sadasosaan alkuperäisestä ja koska tilavuuden skaalauskerroin on S^3 , jokainen tilavuuden termi pienenee sadasosaan alkuperäisestä ja kokonaistilavuus V on enää

$$VS^3 = V(1/100)^3 = 10^{-6}V \quad (3.24)$$

alkuperäisen esineen tilavuudesta. [Trimmer 89]

Trimmerin notaatiota voidaan käyttää esimerkiksi arvioitaessa työmäärän muutosta eri voimilla kun mittakaava skaalautuu. Työ lasketaan kaavasta

$$W = \mathbf{F} \cdot D \quad (3.25)$$

missä W on työ, \mathbf{F} on voima ja D on etäisyys [Freedman 00]. Kun sama yhtälö merkitään Trimmerin notaatiolla, saadaan arvio voimien vaikutuksesta seuraavasti:

$$W = \mathbf{F} \cdot D = \begin{bmatrix} S^1 \\ S^2 \\ S^3 \\ S^4 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} S^1 \\ S^1 \\ S^1 \\ S^1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} S^2 \\ S^3 \\ S^4 \\ S^5 \end{bmatrix}. \quad (3.26)$$

Etäisyyden skaalauskerroin on aina S^1 . Skaalauskerroimen ei aina tarvitse olla vakio, eikä sen tarvitse olla edes kokonaisluku tai positiivinen. Yhtälöstä 3.26 voidaan nähdä, että gravitaatiovoima⁵ S^3 yhdistettynä etäisyyteen S^1 vaikuttaa työhön skaalauskerroimella $S^3 \times S^1 = S^4$. Esineen mittakaavan muuttuessa tuhannesosaan alkuperäisestä (1 metri muuttuu 1 millimetriksi) esineen nostamiseen tarvittava energia muuttuu

$$(1/1000)^4 = 1/10^{12}. \quad (3.27)$$

Samalla mittakaavan muutoksella pintajännitysvoima S^1 skaalautuu $S^1 \times S^1 = S^2$ ja nostamiseen tarvittava energia muuttuu

$$(1/1000)^2 = 1/10^6 \quad (3.28)$$

osaan alkuperäisestä energiasta. [Trimmer 89]

Trimmerin notaation avulla voidaan arvioida esimerkiksi eri voimiin liittyviä aikaskaaloja. Jos kiihtyvyys on annettu, siirtymä riippuu ajasta

$$x = \frac{1}{2}at^2 \quad (3.29)$$

$$t = \sqrt{2} \cdot (x)^{0.5} \cdot (a)^{-0.5} \quad (3.30)$$

[Freedman 00] Yhtälö 3.29 ratkaistaan ensin ajan t mukaan, jolloin havaitaan ensimmäisen termin olevan vakio, jonka skaalauskerroin on aina S^0 . Toinen termi x on sijainti eli etäisyys, jonka skaalauskerroin on aiemman perusteella S^1 . Kolmas termi a on kiihtyvyys eli $\frac{F}{m} = \frac{\text{voima}}{\text{massa}}$. Massa skaalautuu aina tilavuuden mukaan S^3 , joten kiihtyvyyttä voidaan kuvata vektorilla

⁵Tässä esimerkissä oletetaan maan massa vakioksi ja sen takia se skaalautuu S^3 eikä S^4

$$a = \mathbf{F}/m = \begin{bmatrix} S^1 \\ S^2 \\ S^3 \\ S^4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} S^{-3} \\ S^{-3} \\ S^{-3} \\ S^{-3} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} S^{-2} \\ S^{-1} \\ S^0 \\ S^1 \end{bmatrix} \quad (3.31)$$

Yhtälö 3.29 voidaan muuttaa Trimmerin notaation muotoon

$$t = \begin{bmatrix} S^0 \\ S^0 \\ S^0 \\ S^0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} S^1 \\ S^1 \\ S^1 \\ S^1 \end{bmatrix}^{0.5} \begin{bmatrix} S^{-2} \\ S^{-1} \\ S^0 \\ S^1 \end{bmatrix}^{-0.5} = \begin{bmatrix} S^{1.5} \\ S^1 \\ S^{0.5} \\ S^0 \end{bmatrix}. \quad (3.32)$$

Yhtälö tarkoittaa sitä, että voiman skaalautuessa S^2 mukaan⁶, siirtymiseen kuluva aika skaalautuu S^1 mukaan eli esineen mittakaavan pienentyessä sadasosaan myös käytetty aika pienenee sadasosaan. Intuitiivisesti asia vaikuttaa selvältä: pienet esineet tuntuvat liikkuvan nopeasti verrattuna suuriin esineisiin⁷. [Trimmer 89]

Taulukossa 3.1 on esitetty eräiden tunnettujen voimien skaalautumiskertoimet. Pintajännityksellä olisi mikrojärjestelmiä ajatellen ihanteellinen skaalauskerroin S^1 , mutta se on hyvin vaikeasti kontrolloitavissa. Mikrojärjestelmissä käytetään sen takia usein ryhmän S^2 voimia. Huomioitavaa on, ettei magneettikentän skaalautuminen ole yksikäsitteistä, vaan riippuu suuresti virran voimakkuudesta. [Kallio 01]

3.3 Navier-Stokesin yhtälöt

Navier-Stokesin yhtälöt ovat virtausdynamiikan keskeisin mallinnusmenetelmä. Makromaailmassa Navier-Stokesin yhtälöt toimivat hyvin ja menetelmällä voidaan mallintaa myös suurin osa mikrovirtauksista. Tulee kuitenkin huomioida, että mikäli tutkittavan ongelman ulottuvuudet tulevat tarpeeksi pieneksi jatkuvuusteoria ei välttämättä päde ja Navier-Stokesin yhtälöt eivät mallinna virtausta oikein.

⁶eli tarkastellaan vektorien toisia alkioita

⁷atomit, luodit yms.

Navier-Stokesin yhtälöt johdetaan liikemäärän ja massan säilymislaeista. Säilymislakeja täydennetään materiaalilla joka sitoo jännityksen muodonmuutosnopeuteen. Kun virtaus oletetaan olevan newtonilainen, jännitystensori saadaan muodossa

$$\tau_{ij} = -p\delta_{ij} + 2\nu_{dyn}\varepsilon_{ij} - \frac{2}{3}\nu_{dyn}(\nabla \cdot \mathbf{u}\delta_{ij}), \quad i, j = 1, 2, 3 \quad (3.33)$$

missä p on paine, ν_{dyn} on dynaaminen viskositeetti, δ_{ij} on Kroneckerin delta ja ε on venymätensori, jonka komponentit ovat

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right). \quad (3.34)$$

Kun yhtälö kirjoitetaan muodossa

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\tau} = -\nabla p + \nabla \cdot (2\nu_{dyn}\boldsymbol{\varepsilon}) - \nabla \left(\frac{2}{3}\nu_{dyn}(\nabla \cdot \mathbf{u}) \right) \quad (3.35)$$

ja sijoitetaan liikemäärän säilymislakiin, voidaan johtaa yhtälöt Navier-Stokesin viskoosiselle kokoonpuristuvalla virtaukselle.

Määritelmä 3.8 (Navier-Stokesin yhtälöt viskoosiselle kokoonpuristuvalla virtaukselle).

Navier-Stokesin yhtälöt viskoosiselle kokoonpuristuvalla virtaukselle (Navier-Stokes equations for a viscous compressible fluid) ovat

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (3.36)$$

$$\rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \rho (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} + \nabla p - \nu_{dyn} \nabla^2 \mathbf{u} - (\nu_{sec} + \nu_{dyn}) \nabla (\nabla \cdot \mathbf{u}) = \mathbf{g}, \quad (3.37)$$

missä ρ on virtauksen tiheys, p on paine, ν_{dyn} on dynaaminen nesteen viskositeetin arvo, ν_{sec} on toinen viskositeettikerroin, \mathbf{u} on virtauksen nopeusvektori ja \mathbf{g} on putoamiskiihtyvyyksvektori.

Kuten havaitaan, Navier-Stokesin yhtälöt koostuvat neljästä yhteen kytketystä epälineaarista osittaisdifferentiaaliyhtälöstä, joissa on viisi tuntematonta muuttujaa eli paine ja tiheys sekä nopeus kolmeen eri suuntaan. Yhtälön tulee siis vielä lisäksi toteuttaa tiheisyhtälö, joka kytkee tiheyden ja paineen toisiinsa. Mikäli yhtälöissä halutaan huomioida vielä energian säilyminen, tulee esitellä vielä yksi yhtälö ja yksi tuntematon muuttuja eli lämpötila T . [Pelesko 03]

Matemaattisesti Navier-Stokesin yhtälöt ovat **epälineaarisia osittaisdifferentiaaliyhtälöitä**. Niiden numeerinen ratkaiseminen on raskasta, eikä yksikäsitteisen ratkaisun olemassaoloa voida taata yleisesti. Mikrovirtauksissa epälineaarisuus on pääsääntöisesti pientä, joten sopivin alku- ja reunaehdoin Navier-Stokesin yhtälöt ovat ratkeavia. Mikäli virtaava aine on riittävän tiheää, yhtälöt kuvaavat virtausta varsin hyvin.

3.4 Mikrovirtausmallinnuksessa käytettävät dimensiottomat luvut

Seuraavassa määritellään neljä virtausdynamikassa yleisesti käytettyä **dimensiotonta lukua** (*dimensionless numbers*). Näiden lukujen avulla voidaan arvioida eri malli vaihtoehtojen soveltuvuutta virtauksen mallinnukseen.

Määritelmä 3.9 (Reynoldsin luku).

Reynoldsin luku (Reynolds number, Re) kuvaa inertiaivoimien ja viskositeettivoimien suhteellisen merkityksellisyyttä, eli

$$Re = \frac{LU}{\nu}, \quad (3.38)$$

missä L on ongelman ominaispituus (characteristic dimension), U on virtauksen karakteristinen nopeus (characteristic velocity) ja ν on virtauksen kinemaattinen viskositeetti [Senturia 01].

Reynoldsin luku voidaan laskea myös perinteisellä tavalla määrittelemällä arvo kanavassa olevan virtauksen avulla [Reynolds 83]. Tällöin yhtälö tunnetaan muodossa

$$Re \equiv \frac{\rho U d}{\nu_{dyn}} = \frac{U d}{\nu}, \quad (3.39)$$

missä ρ on virtauksen tiheys, d on kanavan halkaisija, ν_{dyn} on virtauksen dynaaminen viskositeetti ja ν on virtauksen kinemaattinen viskositeetti [Weisstein 05c]. Mikäli $Re \ll 1$ viskositeettivoimat dominoivat mikrojärjestelmää ja hitausvoimat voidaan jättää huomioimatta⁸. Kun $Re < 1000$ virtaus on **pyörteetön** (*non-turbulent*) ja suuremmilla arvoilla virtaus on **pyörteinen** (*turbulent*). Mikrovirtauksen Reynoldsin numero on käytännössä aina tuhatta pienempi ja tämän takia pyörteisiin virtauksiin ei tutustuta tutkielman puitteissa.

Määritelmä 3.10 (Machin luku).

Machin luku (Mach number, Ma) ilmoittaa kohteen nopeuden suhteen äänennopeuteen eli

$$Ma \equiv \frac{\mathbf{u}}{\mathbf{u}_{\text{sound}}}, \quad (3.40)$$

missä \mathbf{u} on virtauksen nopeus ja $\mathbf{u}_{\text{sound}}$ on paikallinen äänennopeus. [Weisstein 05a] Paikallinen äänennopeus nesteessä on määritelty materiaalin tiheyden ja paineen välistä relatiosta. Jos $p = p(\rho)$, niin $\mathbf{u}_{\text{sound}} = \sqrt{-\frac{\partial p}{\partial \rho}}$.

Machin luku voidaan tulkita inertiaivoimien ja elastisuuden välisenä suhteena [Gad-el Hak 01].

Määritelmä 3.11 (Keskimääräinen vapaa matka).

Keskimääräinen vapaa matka, λ (Mean Free Path, MFP) tarkoittaa kaasuissa ja nesteissä sitä matkaa, joka molekyylin on keskimäärin kuljettava törmätäkseen toiseen molekyyliin, eli

$$\lambda = \frac{1}{\sqrt{2}\pi n \sigma^2} = \frac{kT}{\sqrt{2}\pi p \sigma^2}, \quad (3.41)$$

missä n on hiukkastiheys (molekyylien määrä yksikkötilavuudessa), σ molekyylin halkaisija, k on Boltzmannin vakio, p on paine ja T on lämpötila. [Gad-el Hak 01]

Varsin luonnollisesti keskimääräinen vapaa matka on kaasuissa huomattavasti suurempi kuin nesteissä. Tietoa keskimääräistä vapaasta matkasta käytetään mm.

Knudsenin luvun määrittämiseen.

⁸Yleisin tapaus mikrojärjestelmissä.

Määritelmä 3.12 (Knudsenin luku).

Knudsenin luku (Knudsen number, Kn) tarkoittaa keskimääräisen vapaan matkan ja ominaispituuden välistä suhdetta, eli

$$Kn = \frac{\lambda}{L} \quad (3.42)$$

missä λ on MFP ja L on ominaispituus.

Mikäli tarkoituksena on mallintaa kaasun liikettä, voidaan Knudsenin luvun avulla valita sopiva mallinnusmenetelmä. Knudsenin luku voidaan laskea myös nesteelle, mutta se ei kerro suoraan menetelmien soveltuvuudesta, joten muitakin tarkasteluja on suoritettava. Ominaispituudeksi voidaan valita jokin järjestelmän mitoista, mutta paremman arvion yleensä saa valitsemalla jonkin makroskooppisen yksikön (esimerkiksi tiheyden) skaalattu gradientti. [Gad-el Hak 01]

$$L = \frac{\rho}{|\frac{\partial \rho}{\partial y}|} \quad (3.43)$$

3.5 Navier-Stokesin yhtälöt kokoonpuristumattomalle virtaukselle

Mikäli virtausmallinnuksessa käytettävän nesteen tai kaasun tiheyden muutos on lähes olematonta, voidaan virtausta käsitellä **kokoonpuristumattomana** (*incompressible*). Tämä tarkoittaa käytännössä sitä, että vain nopeat kaasuvirtaukset ovat kokoonpuristuvia ja hitaat kaasuvirtaukset ($Ma < 0.3$) sekä suurin osa nestevirtauksista on kokoonpuristumattomia [White 99]. Kokoonpuristumattomuusoletus yksinkertaistaa huomattavasti Navier-Stokesin yhtälöä.

Määritelmä 3.13 (Navier-Stokesin yhtälöt kokoonpuristumattomalle virtaukselle).

Navier-Stokesin yhtälöt kokoonpuristumattomalle virtaukselle (Incompressible Navier-Stokes Equations) ovat

$$\nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (3.44)$$

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \nu \nabla^2 \mathbf{u}, \quad (3.45)$$

missä p on paine ja ν on virtauksen kinemaattinen viskositeetti.

Kokoonpuristumattomien virtausten mallinnusta on tutkittu hyvin paljon, koska suuri osa reaalimaailman käytännön sovellutuksista voidaan helposti luokitella kokoonpuristumattomiksi. Kappaleessa 6.1 tutkitaan ja mallinnetaan Navier-Stokesin virtaus kanavassa FemLab-ohjelmalla. Mallissa tarkastellaan virtausta eri kokoisissa geometrioissa liukumattomalla reunaehdolla mallinnettuna. Mallissa ρ on vakio ja tuntemattomia ovat \mathbf{u} sekä p . [Pelesko 03]

Yhtälöissä voidaan sisällyttää putoamiskiihtyvyyksvektori \mathbf{g} painetermiin. Tämä tarkoittaa sitä, että painetermiin huomioidaan hydrostaattinen paine. Putoamiskiihtyvyyksvektoria ei tällöin merkitä erikseen.

3.6 Eulerin yhtälöt

Eulerin yhtälöt ovat erikoistapaus Navier-Stokesin yhtälöistä. Eulerin yhtälöissä oletetaan, että virtaava neste on kitkatonta (eli viskositeetti on 0). Eulerin yhtälöillä voidaan myös mallintaa tilanteita, joissa virtauksen kinemaattinen viskositeetti on pieni muihin Navier-Stokesin termeihin nähden. Malli kärsii silloin hieman menetelmävirheestä, mutta laskenta nopeutuu merkittävästi.

Määritelmä 3.14 (Eulerin yhtälöt).

Eulerin yhtälöt (Eulers equations) ovat

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (3.46)$$

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \underbrace{\nu \nabla^2 \mathbf{u}}_0. \quad (3.47)$$

3.7 Stokesin virtaus

Mikrojärjestelmissä tulee eteen varsin usein tilanne, jossa virtauksen Reynoldsin luku on paljon ykköstä pienempi. Virtausta hallitsevat silloin viskositeettivoimat ja sitä kutsutaan Stokesin virtaukseksi tai hitaaksi viskoottiseksi virtaukseksi. Stokesin yhtälö johdetaan Navier-Stokesin yhtälöistä määrittelemällä hitausmomentti $\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}$ nolaksi. [Weisstein 05b, Pennanen 04, Senturia 01]

Määritelmä 3.15 (Stokesin virtaus).

Stokesin virtausyhtälöt (Stoke's Flow, Creeping Flow) ovat

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (3.48)$$

$$\frac{\nabla p}{\rho} - \nu \nabla^2 \mathbf{u} = 0, \quad (3.49)$$

missä p on paine ja ν on kinemaattinen viskositeetti.

3.8 Muut menetelmät

Jatkuvuusteoria toimii todennäköisesti, kun virtauksen molekyylit ovat suhteellisen tiiviisti pakattuna verrattuna virtauksen pituusskaalaukseen. Jos kuitenkin molekyylit ovat laajasti hajallaan pituusskaalaukseen verrattuna, jatkuvuusteorian toimiminen on vakavasti uhattuna. Kun pituusskaalaus on mikrometrien luokkaa, on aina syytä epäillä jatkuvuusteorian toimimista. Onneksi kuitenkin suuressa osassa mikrovirtauksia saavutetaan jatkuvuuteen vaadittava molekyylimäärä. Virtausta voidaan pitää selvästi jatkuvana esimerkiksi silloin, kun $10 \mu\text{m}$ kanavassa kulkee ainakin 30000 vesimolekyyliä. [Nguyen 02, s.16] Taulukosta 3.2 nähdään mikä menetelmä soveltuu parhaiten eri Knudsenin luvun arvoilla.

Mikäli tarkasteltava virtaus ei täytä jatkuvuusteoriaa, joudutaan turvautumaan muihin menetelmiin. Tunnetuimmat menetelmät, jotka toimivat jatkuvuusteorian kaaduttua eli kun ($Kn > 0.1$) ovat **Boltzmannin yhtälöt**, **Burnettin yhtälöt**, **DSMC**,

MD ja hila-Boltzmann menetelmällä (ks. taulukko 3.2). Menetelmiä kutsutaan yleisesti **menetelmiksi jatkuvuusteorian jälkeen** (*Methods beyond continuum theory*). Näitä menetelmiä ei kuitenkaan tarkastella enempää tämän tutkielman puitteissa.

Menetelmä	Knudsenin luvun arvo
Eulerin yhtälö	$Kn \rightarrow 0 (Re \rightarrow \infty)$
Navier-Stokes Ei-liukuvalla reunaehdolla	$Kn < 10^{-3}$ (Lähteessä [Bailey 04] 10^{-2})
Navier-Stokes liukuvalla reunaehdolla	$10^{-3} \leq Kn < 10^{-1}$
Stokesin yhtälöt	$Kn < 10^{-1} (Re \rightarrow 0)$
Brunettin yhtälö, Boltzmannin yhtälö	$10^{-1} \leq Kn < 10$
DSMC (Monte carlo)	$Kn \geq 10$
MD (Molecular Dynamics)	$Kn \geq 10$
Hila-Boltzmann menetelmä	$Kn \geq 10$

Taulukko 3.2: Knudsenin luvun vaikutus mallinnusmenetelmään [Pennanen 05] [Gad-el Hak 01].

3.9 Alku- ja reunaehtojen määrittäminen

Osittaisdifferentiaaliyhtälöt ratkaistaan määriteltyjen alku- ja reunaehtojen mukaan. Reunaehdot pitää määritellä kaikissa tapauksessa, mutta alkuehtoja tarvitaan vain ajastariippuvissa tapauksissa.

Määritelmä 3.16 (Alkuehto).

Alkuehto (initial condition) on tila, josta aikariippuvaisen osittaisdifferentiaaliyhtälön ratkaiseminen aloitetaan.

Määritelmä 3.17 (Reunaehto).

Reunaehto (boundary condition) on sääntö jokaiselle alueen Ω reunan pisteelle. [Saad 00, luku 2.1]

Virtausdynamiikassa reunaehdot asetetaan liikemäärän yhtälöä varten, kaksi ulotteisessa tapauksessa kaksi, kolmiulotteisessa kolme ehtoa. Yleisesti ottaen alkuehtojen määrittäminen on helpompaa kuin reunaehtojen. Jotta laskeminen konvergoi ja päädytään oikeaan lopputulokseen, alkuehdon tulee olla riittävän lähellä mallia kuvaavaa todellista virtaustilannetta (esim. vastaavan alueen kokoonpuristumaton virtaus voi olla hyvä alkuehto). Yksinkertaisissa tapauksissa alkuehto tarkoittaa virtauksen nopeus- ja painekenttien määrittelemistä jollakin ajanhetkellä (esim. $t = 0$).

Mikrovirtauksen reuna voidaan jakaa kolmeen osaan. Sisäänvirtausreunalla virtaavaa ainetta tulee järjestelmään ja ulosvirtausreunalla virtaava aine poistuu järjestelmästä. Muut reunat eivät päästä virtausta läpi, mutta vaikuttavat siihen, miten virtaus reunalla käyttäytyy. Sisäänvirtaus määritellään usein virtausnopeuden ja ulosvirtaus paineen avulla.

Mikrovirtauksen reunaehdot ovat joko **nestekiinteä** (*fluid-solid*) tai **nesteneste** (*fluid-fluid*) -tyyppisiä. Tämän tutkielman puitteissa tarkastellaan vain tapauksia, joissa reunaehto on neste-kiinteä -tyyppiä⁹. Usein myös käytetään reunaehtoja **läpäisemätön** (*no-penetration*) ja **liukumaton** (*no-slip*). Läpäisemätön reunaehto tarkoittaa sitä, ettei neste läpäise kiinteää pintaa. Tällöin virtauskentän normaalikomponentti seinää vasten täytyy olla 0. Liukumaton reunaehto tarkoittaa sitä, ettei neste liu'u pitkin seinää. Yhtälönä läpäisemätön reunaehto saadaan muodossa

$$\mathbf{u} \cdot \mathbf{n} = 0 \quad (3.50)$$

ja liukumaton reunaehto muodossa

$$\mathbf{u} \times \mathbf{n} = 0. \quad (3.51)$$

Yhdistämällä nämä kaksi ehtoa saadaan yleisesti tunnettu **liukumaton reunaehto**¹⁰ (*no-slip boundary condition*). Yhtälönä ehto yksinkertaistuu muotoon

⁹Neste-neste -tyypin reunaehdot ovat todella vaativia mallinnettavia.

¹⁰Sama nimi kahdella ehdolla

$$\mathbf{u} = 0. \quad (3.52)$$

Kun halutaan käyttää liukumatonta reunaehto virtauksen mallinnuksessa, tulee ottaa huomioon, ettei virtauksen nopeudessa tai lämpötilassa esiinny epäjatkuvuuskohtia. Tämä tarkoittaa sitä, että järjestelmän tulee olla termodynaamisesti tasapainossa. Käytännössä reunaehto on voimassa kun $Kn < 10^{-3}$, sillä suuremmilla Knudsenin luvun arvoilla partikkeleiden törmäysten määrä ei pysty ylläpitämään tasapainotilaa. [Gad-el Hak 01, s. 4–12]

Jos järjestelmän $Kn > 10^{-3}$ reunaehtona tulee käyttää tällöin liukuvaa reunaehto (*slip boundary condition, Linear Navier boundary condition*). Liukuvan reunaehdon käyttö eroaa liukumattomasta siinä, että tällöin huomioidaan reunansuuntainen nopeuskomponentti. Liukuva reunaehto voidaan kirjoittaa muodossa

$$\nu \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial n} + \frac{1}{L} (\mathbf{u}_{\text{fluid}} - \mathbf{u}_{\text{wall}}) = \mathbf{0} \quad (3.53)$$

missä \mathbf{u}_{wall} on virtauksen nopeus reunalla, $\mathbf{u}_{\text{fluid}}$ on virtauksen nopeus kaukana reunasta, L on liu'un vakioipituus ja $\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial n}$ on laskettu muodonmuutos nopeus (*strain rate*). Tärkeää on huomioida, että $\mathbf{u}_{\text{fluid}}$ on verrannollinen etäisyydestä reunaan. Yhtälöllä on epäjatkuvuuskohta etäisyyden ollessa 0. Yhtälö myös lähestyy liukumatonta reunaehto kun L lähestyy nollaa. [Gad-el Hak 01, Nguyen 02]

Neste-neste -rajapintaa tarkasteltaessa ongelmana on, ettei pintaa voida määrittellä *a priori*. Ongelmaa kutsutaan yleisesti **liikkuvan reunan** (*moving boundary*) tai **vapaan pinnan** (*free surface*) ongelmaksi. Tarkoituksena on yrittää löytää yhtälö

$$f(\mathbf{x}, t) = 0, \quad (3.54)$$

joka kuvaa kahden eri nesteen¹¹ välissä olevan rajan ajan hetkellä t . Myös liukumattoman reunaehdon on oltava voimassa, jotta momentin muutos rajapinnassa pysyy tasapainossa pintajännityksen kanssa.

Vapaan pinnan liukumattoman reunaehdon kaava tunnetaan muodossa

¹¹Nesteellä tarkoitetaan tässä myös ilmaa ja muita kaasuja.

$$(\tau^1 - \tau^2) \cdot \mathbf{n} = -\vartheta \left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right) \mathbf{n}, \quad (3.55)$$

missä τ^i tarkoittaa nesteen i jännitystensoria, ϑ on rajapinnan pintajännitys ja R_i on rajapinnan kaarevuuden säde. Mikäli virtaus on rauhallinen (ei turbulenti), kaava voidaan yksinkertaistaa Laplace-Youngin laiksi.

Määritelmä 3.18 (Laplace-Youngin laki).

Laplace-Youngin laki on

$$\Delta p = \vartheta \left(\frac{1}{R_2} + \frac{1}{R_1} \right). \quad (3.56)$$

missä ϑ on pintajännitys, R_n on rajapinnan kaarevuuden säde ja Δp on nesteiden paineiden erotus.

Laplace-Youngin laki tarkoittaa, että paineen muutos pinnan kaarevuudelle on verrannollista keskimääräiseen pinnan kaarevuuteen ja tällöin kerroin ϑ on yhtäsuuri kuin pintajännitys. [Pelesko 03, Delorme 01]

Vapaan pinnan ongelmassa rajapinnan sijainti ei ole tiedossa, joten joudutaan käyttämään uutta ehtoa sen määrittelemiseksi. **Kinemaattinen ehto** (*kinematic condition*) tarkoittaa sitä, että reunalta aloittanut neste pysyy reunalla. Ehto voidaan esittää muodossa

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{u}^i \cdot \nabla f = 0, \quad (3.57)$$

missä \mathbf{u}^i tarkoittaa i :nnessä nesteen nopeusvektoria. [Pelesko 03]

4 Mikrovirtauksen elektrokinetiikka

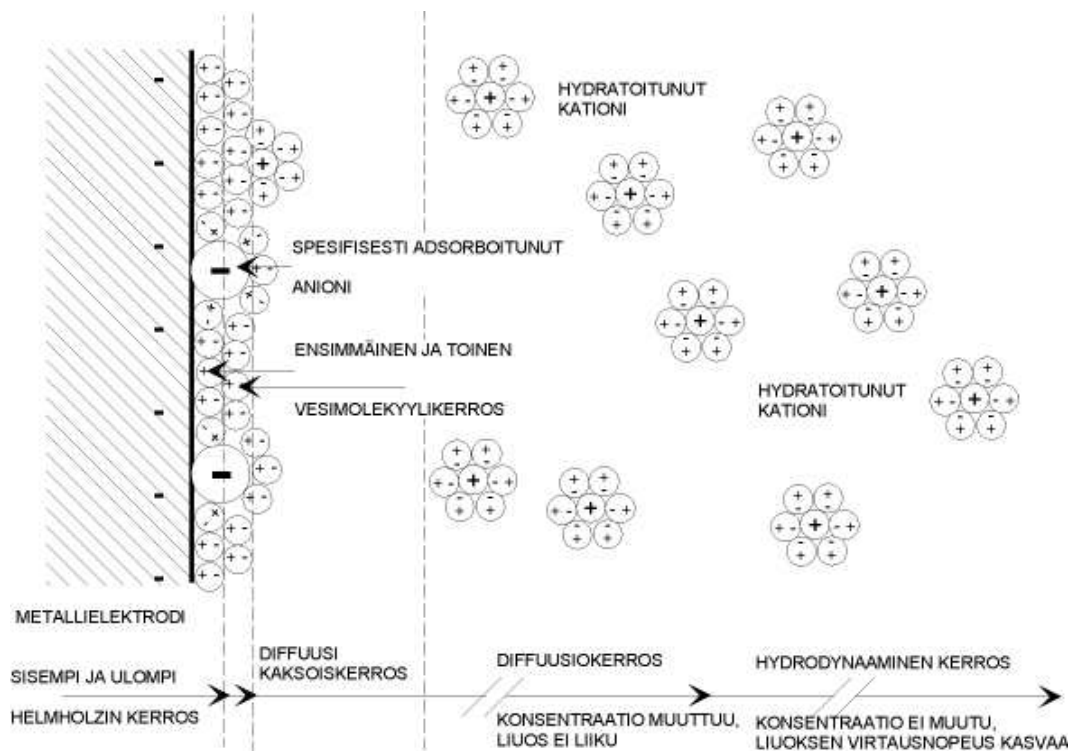
Elektrokinetiikka (*electrokinetics*) eli sähkökinetiikka on yleistermi, jolla kuvataan kiinteiden pintojen, ionisten liuosten ja makroskooppisten sähkökenttien vuorovaikutusta. Elektrokineettisiä voimia esiintyy, tarkoituksella tai ilman, joten mikrojärjestelmää mallintaessa täytyy ottaa huomioon elektrokineettisten voimien vaikutus virtauksen käyttäytymiseen. Elektrokineettisten voimien merkitys kasvaa kappaleen pinta-ala-tilavuus suhteen kasvaessa. Kun tarkoituksena on saada virtaus liikkeelle mikrokanavassa, elektrokineettiset voimat ovat usein käytännöllisempi vaihtoehto esimerkiksi paineen lisäämiseen verrattuna. [Pelesko 03, Gad-el Hak 01]

Elektrokineettiset voimat jaetaan **elektro-osmoosiin** (*electro-osmosis*), **elektroforeesiin** (*electrophoresis*) ja **di-elektroforeesiin** (*di-electro-phoresis*). Elektro-osmoosi ja elektroforeesi eroavat toisistaan sen perusteella, onko virtaus sähköisesti varautunut vai ei. Elektroforeesi ja di-elektroforeesi eroavat toisistaan polaarisuuden mukaan. [Gad-el Hak 01, s. 8-20]

Tämän luvun tarkoituksena on tutustuttaa lukija elektrokineettisiin voimiin, siihen miten ne vaikuttavat mikrovirtauksen käyttäytymiseen ja siihen kuinka voimat tulee huomioida virtausten numeerisessa mallinnuksessa. Mallit luvuissa 6.2, 6.3 ja 6.4 perustuvat tässä luvussa esitettyyn teoriaan.

4.1 Sähköinen kaksoiskerros

Suurin osa kiinteistä pinnoista saa pintajännitteen joutuessaan yhteyteen elektrolyytin kanssa. **Sähköinen kaksoiskerros** (*electrical double layer, EDL*) tarkoittaa tiukkaa, yhden ionin (1nm) paksuisen **Helmholtzin tason** (*Helmholtz plane*) ja hajanaisen, 1-10 nm paksuisen diffuusiokerroksen yhdistettä. Sähköisessä kaksoiskerrossa tapahtuvat ilmiöt ovat mielenkiintoisia mikrojärjestelmissä, koska dimension pienessä kaksoiskerroksen merkitys kasvaa. Sähköinen kaksoiskerros muodostuu siten, että kiinteän pinnan ja nesteen väliseen rajapintaan kerääntyy ylimääräisiä sähkövarauksia (ks. kuva 4.1). Esimerkiksi kun lasi upotetaan veteen, sen pinnalle muodostuu kemiallisen reaktion seurauksena negatiivinen pintajännite. [Gad-el Hak 01,



Kuva 4.1: Sähköinen kaksoiskerros.[Aromaa 01]

s. 8-20]

Helmholtzin taso koostuu sisemmästä ja ulommasta kerroksesta. Sisempään Helmholtzin kerrokseen kuuluu absorboituneita vesimolekyylejä sekä spesifisesti absorboituneita anioneita. Ulommassa kerroksessa on absorboituneita vesimolekyylejä, sekä elektrostaattisesti absorboituneita hydratoituneita kationeita. Diffuusiokerroksessa on enemmän joko kationeita tai anioneita, mutta etäisyyden kasvaessa kationeiden ja anioineiden määrä tasoittuu ja saavutetaan sähköneutraaltila. Mikrovirtauksessa tätä sähköistä kaksoiskerrosta voidaan käyttää nesteen kuljettavana voimana. [Aromaa 01]

4.2 Elektro-osmoosi

Osmoosi on diffuusiota puoliläpäisevän kalvon lävitse laimeammasta liuoksesta väkevämpään. Elektro-osmoosi toimii varauksellisesti neutraalien nesteiden yhteydessä. Nesteen sisällä ioniryhmät ovat järjestäytyneet sähköiseksi kaksoiskerrokseksi.

si. **Elektro-osmoottinen virtaus** (*electro-osmotic flow*) saadaan aikaiseksi kun virtauksen läpi johdetaan sähkökenttä. Tällöin neste lähellä reunaa alkaa liikkua ja saa aikaan virtauksen.

Kun elektro-osmoosi otetaan mallinnettaessa huomioon jatkuvuus- ja momenttiyhtälöt muuttuvat muotoon

$$\frac{\partial u_j}{\partial x_j} = 0 \quad (4.1)$$

$$\rho \left(\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} - \rho_E \mathbf{E} = 0 \quad (4.2)$$

missä ρ_E on verkon varaustiheys sähköisessä kaksoiskerroksessa, \mathbf{E} on virtausta liikuttava sähkökenttä. Jännitystensori τ on annettuna Stokesin viskositeetti lain mukaan, eli

$$\tau_{ij} = -p\delta_{ij} + \nu_{dyn} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right). \quad (4.3)$$

missä δ on Kroneckerin delta, ν_{dyn} on dynaaminen viskositeetti ja p on paine. [Gad-el Hak 01, s. 6–4]

Näistä yhtälöistä voidaan johtaa liikeyhtälö tasaiselle, matalan Reynoldsin luvun virtaukselle kanavassa. Yhtälö tunnetaan myös muodossa

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (4.4)$$

$$-\nabla p + \nu_{dyn} \nabla^2 \mathbf{u} + \rho_E \mathbf{E} = 0, \quad (4.5)$$

missä p on paine, ν_{dyn} on dynaaminen viskositeetti ja \mathbf{E} on virtausta liikuttava sähkökenttä.

Koska yhtälöt ovat lineaariset, sähkökentän aiheuttamaa virtausta voidaan tarkastella erikseen. Elektro-osmoottiset voimat rajoittuvat ohueen kaksoiskerrokseen, jolloin niiden vaikutus virtaukseen voidaan kuvata riittävällä tarkkuudella määrittelemällä tangentialinen virtausnopeus reunalla

$$\mathbf{u}_{\text{eof}} = \frac{\mathbf{E}}{\nu_{dyn}} \cdot \varepsilon \zeta \quad (4.6)$$

missä ε on eristevakio ja ζ on reunan zeta-potentiaali (eli verrannollisuuskerroin).

Yhtälöä 4.6 kutsutaan Helmholtz-Smoluchowskin yhtälöksi ja se voidaan johtaa ratkaisemalla elektro-osmoottisen voimien aiheuttaman virtauksen ohuessa rajakerroksessa.

Elektro-osmoosia käytetään mikrojärjestelmissä mm. osmoottisissa sekoittimissa ja osmoottisissa pumpuissa. Tutkimuksissa on havaittu mikrovirtauksen olevan vaikeasti sekoitettavissa perinteisillä (mekaanisilla) menetelmillä. Elektro-osmoosin avulla on mahdollista jännitettä muuttamalla vaihtaa kahden (tai useimman) mikrovirtauksen järjestystä kanavassa. Nopeasti ja riittävän usein toistettuna tämä aiheuttaa virtausten sekoittumisen toisiinsa. Elektro-osmoottisen sekoittimen yksinkertaistettu versio on mallinnettu kappaleessa 6.2.

4.3 Elektroforeesi

Määritelmä 4.1 (Elektroforeesi).

Elektroforeesi on varattujen partikkeleiden liikettä suhteessa ympäröivään liuottimeen ulkoisessa sähkökentässä.

Elektroforeesi on yleinen elektrokineetiikan ilmiö, jota käytetään mikrojärjestelmissä pintavarauksen määrittelyyn, sekä erotusmenetelmänä esimerkiksi dna-testeissä. Ulkoisessa sähkökentässä olevat positiiviset ionit kulkevat katodille ja negatiiviset anodille. Sama pätee myös varatuille kolloidisille partikkeleille. Käytännössä elektroforeesi yhdistetään varsin usein elektro-osmoosiin ja yhdessä näitä menetelmiä voidaan käyttää esimerkiksi näytteen ottamiseen virtauksesta. Menetelmää on käytetty paljon mm. lääketieteen puolella veren analysointiin. [Murtomäki 04]

Sähköisen kaksoiskerroksen sisempi kerros ns. **Sternin kerros** kulkee partikkelin mukana, kun diffuusikerros pyrkii kulkemaan päinvastaiseen suuntaan kuljettaen mukanaan liuotinmolekyylejä. Varauksellisia partikkeleita sisältävän liuoksen jouluessa sähkökenttään jokainen hiukkanen saavuttaa lopulta tietyn rajanopeuden. Seuraavassa tarkastellaan tämän rajanopeuden määrittelyä. [Murtomäki 04]

Määritelmä 4.2 (Debyen pituus elektrolyytissä).

Debyen pituus elektrolyytissä (Debye length of electrolyte) on

$$\lambda_D \equiv \left(\frac{\varepsilon k T}{2 z^2 F^2 c_\infty} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (4.7)$$

missä ε on eristevakio, k on Boltzmannin vakio, T on lämpötila, z on ionin valenssiluku, F on Faradayn vakio ja c_∞ on ionin molariväkevyys.

Elektroforeesilla on kaksi toisistaan poikkeavaa ilmenemismuotoa riippuen siitä, kuinka suuri varatun partikkelin ominaispituus (halkaisija) on ympäröivän elektrolyyttiliuoksen Debyen pituuteen verrattuna. **Varatun ionin elektroforeesilla** ominaispituus on huomattavasti pienempi kuin elektrolyytin Debyen pituus. Sitä vastoin **mikropallon elektroforeesissa** pallon halkaisija on huomattavasti Debyen pituutta suurempi.

Partikkelin liikkuvuus (nopeuden suhde sähkökenttään) saadaan kummallekin elektroforeesin muodolle erikseen. Jos $d \ll \lambda_D$ niin nopeus saadaan yhtälöstä

$$\mathbf{u} = \frac{q\mathbf{E}}{3\pi\nu_{dyn}d} \quad (d \ll \lambda_D), \quad (4.8)$$

missä q on kokonaismolekyylijännitys, d on Stokesin halkaisija partikkeleille ja ν_{dyn} nesteen dynaaminen viskositeetti. [Molho 98]

Suurella osalla kaasuja partikkeleiden halkaisijan suhde Debyen pituuteen on riittävä ($d \gg \lambda_D$), että tapausta voidaan tarkastella kuten sähköistä kaksoiskerrosta tasaisella pinnalla. Partikkelin nopeus palautuu tällöin negatiivisella merkillä varustettuun Helmholtz-Smoluchowskin -yhtälöön Yhdistämällä nämä kaksi edellä esitettyä yhtälöä saadaan määritelmä molekyylien liikkuvuudelle.

Määritelmä 4.3 (Elektroforeesin molekyylin liikkuvuus).

Elektroforeesin molekyylin liikkuvuus (electrophoretic mobility of the molecules) on

$$\nu_{eph} = \frac{q}{3\pi\nu_{dyn}d} \quad (d \ll \lambda_D) \quad (4.9)$$

tai

$$\nu_{eph} = \frac{\varepsilon\zeta}{\nu_{dyn}} \quad (d \gg \lambda_D) \quad (4.10)$$

missä ζ on zeta-potentiaali ja v_{eph} on elektroforeesin liikkuvuus. [Gad-el Hak 01, 6-25]

4.4 Di-elektroforeesi

Määritelmä 4.4 (Di-elektroforeesi).

Di-elektroforeesi (di-electrophoresis) on varauksettomien partikkeleiden lateraalista liikettä, joka johtuu epäyhtenäisen sähkökentän indusoimasta polarisaatiosta.

Di-elektroforeesi indusoi partikkeleiden liikettä sähkökentän intensiteetin gradientin suuntaan. Tämä ilmiö tapahtuu, kun kompleksisen suspensiohiukkasen eristevakio eroaa ympäröivästä nesteestä. Di-elektroforeesia käytetään makrohiukkasten ja solujen erottelamiseen sekä vangitsemiseen. [Nguyen 02, s.321]

Di-elektroforeettinen voima skaalautuu melkein S^3 mukaan ja näin ollen on merkittävä vain mikrometriä suurempien partikkeleiden kanssa. Di-elektroforeettisen partikkelin voima F_{dep} on

$$F_{dep} = \frac{1}{2}V\alpha\nabla(\mathbf{E} \cdot \mathbf{E}), \quad (4.11)$$

missä V on partikkelin tilavuus ja \mathbf{E} on sähkövektorikenttä. α on partikkelin polarisoitumiskyky ja saadaan yhtälöstä

$$\alpha = 3\varepsilon_m \Re\{K\}, \quad (4.12)$$

missä ε_m on väliaineen eristevakio (permittiivisyys) ja $\Re\{K\}$ on reaaliosa Clausius-Mossottin kertoimesta. [Meinhart 03]

Määritelmä 4.5 (Clausius-Mossotti).

Clausius-Mossotti kerroin (Clausius-Mossotti -factor) on

$$K = \frac{(\varepsilon_p - j\left(\frac{\kappa_p}{\omega_p}\right)) - (\varepsilon_m - j\left(\frac{\kappa_m}{\omega_m}\right))}{(\varepsilon_p - j\left(\frac{\kappa_p}{\omega_p}\right)) + 2(\varepsilon_m - j\left(\frac{\kappa_m}{\omega_m}\right))} \quad (4.13)$$

missä $j = \sqrt{-1}$, ε on eristevakio, κ on johtavuus ja ω on ulkoisen sähkökentän kulmataajuus. Alaindeksi m tarkoittaa virtaavaa nestettä ja p partikkelia.

$\Re\{K\}$ määrittelee di-elektroforeettisen voiman suunnan ja suuruusluokan. Kerroin on rajattu välille

$$-0.5 < \Re\{K\} < 1.0 \quad (4.14)$$

Yhdistämällä yhtälöt 4.11 ja 4.12 saadaan yhtälö partikkelin di-elektroforeettisille voimille, eli

$$F_{dep} = 2\pi\varepsilon_m r^3 \Re\{K\} \nabla \mathbf{E}^2, \quad (4.15)$$

missä r on partikkelin säde. [Meinhart 03]

Stokesin virtausvastus on

$$F_D = 6\pi\nu r \mathbf{u}. \quad (4.16)$$

Tasapainottamalla Stokesin virtausvastus di-elektroforeettinen voiman yhtälön

$$F_{dep} + F_D = 0 \quad (4.17)$$

kanssa, voidaan johtaa yhtälö partikkelin suhteelliselle nopeudelle nesteessä. Yhtälö saadaan muotoon

$$\mathbf{u}_p - \mathbf{u} = \frac{\varepsilon_m r^2 \Re\{K\} \nabla \mathbf{E}^2}{3\nu} \quad (4.18)$$

missä \mathbf{u}_p on partikkelin nopeus, \mathbf{u} on virtauksen nopeus, ε_m on nesteen permittiivisyys ja ν on nesteen viskositeetti.

Huomioitavaa on se että F_{dep} skaalautuu r^3 kun F_D skaalautuu r mukaan.

5 Numeerinen mallintaminen

Tässä luvussa perehdytään hieman numeerisen mallintamisen perusteisiin sekä virheen arviointiin. Luvussa tutustutaan lisäksi FemLab-ohjelmassa käytettyyn äärellisten elementtien menetelmään.

5.1 Numeerisen mallintamisen perusteet

Määritelmä 5.1 (Numeerinen mallintaminen).

Numeerinen mallintaminen tarkoittaa menetelmiä, joilla pystytään ratkaisemaan numeerisesti matemaattisia tehtäviä, joiden analyttinen ratkaiseminen on hankalaa tai mahdotonta.

Käytettäessä numeerista mallinnusta käyttäjän tulee hallita menetelmän matemaattiset ja fysikaaliset perusteet. Käyttäjällä pitää olla tieto siitä, millaisia tehtäviä menetelmällä oletetaan voitavan ratkaista halutulla tarkkuudella. Käyttäjän tulee pystyä myös analysoimaan saatujen tulosten järkevyyttä reaali maailman ilmiöihin verrattuna. [Mäkinen 99]

5.2 Numeerinen virheanalyysi

Aina kun käytetään numeerisia menetelmiä tulee tuloksia analysoitaessa huomioida mallituksen aikana syntyvä **kokonaisvirhe**.

Määritelmä 5.2 (Virhearviointi).

Kokonaisvirhe E_{total} on

$$E_{total} = E_{model} + E_{app} + E_{comp} \quad (5.1)$$

missä E_{model} on matemaattisen mallin menetelmävirhe, E_{app} on numeerisen menetelmän approksimaatiovirhe ja E_{comp} on laskennassa tuleva pyöristysvirhe.

Mallinnettavat ilmiöt ovat aina yksinkertaistuksia todellisista ilmiöistä. Matemaattisen mallin menetelmävirhe syntyy siitä, että matemaattinen malli vastaa vain

karkeasti sitä, mitä ilmiössä todella tapahtuu. Siitä huolimatta se antaa usein riittävän kuvan tapahtumien etenemisestä, jos virheen määrälle voidaan arvioida sopivat rajat. Approksimaatiovirheellä tarkoitetaan puolestaan sitä virhettä, joka syntyy korvattaessa matemaattinen malli numeerisella mallilla. Myös approksimaatiovirheelle voidaan määritellä rajat, jotka riippuvat käytettävästä menetelmästä ja mallinnuksesta.

Tietokone tekee pientä virhettä laskennan aikana. Tämä johtuu siitä, että päätymättömät desimaaliluvut joudutaan katkaisemaan sekä pyöristämään. Tästä johtuen erityisesti suurten skaalausten (esim. $a \ll b$, $a, b > 0$) yhteydessä lukujen laskutoimituksissa voidaan menettää pienemmän luvun merkittäviä desimaaleja (esim. luvun jakaminen jakajan ollessa lähellä nollaa). Usein tällä pyörityksellä ei ole suurta merkitystä yksittäisen laskun yhteydessä. Jos kuitenkin ohjelma on ohjelmoitu siten, että virheet pääsevät kertautumaan pyöritysvirhe kasvaa merkittäväksi. [Mäkinen 99]

5.3 Äärellisten elementtien menetelmä

Äärellisten elementtien menetelmä (*finite element method, FEM*) on yksi tapa ratkaista differentiaaliyhtälöitä numeerisesti. Elementtimenetelmää käytettäessä muutetaan jatkuvassa muodossa oleva tehtävä diskreettiin muotoon. Tämän seurauksena yhtälöryhmään jää äärellisen monta tuntematonta, jotka voidaan ratkaista numeerisesti.

Elementtimenetelmässä tarkasteltava alue jaetaan pienempiin osiin, elementteihin. Elementit peittävät tarkasteltavan alueen siten, että ne leikkaavat toisiaan vain reunaa pitkin tai solmun kohdassa. Alueen tulee myös peittyä kokonaan. Elementteiltä vaaditaan myös, että niiden pinta-ala on positiivinen.

Elementtiverkon parametrina käytetään usein yksittäisen elementin suurinta sallittua kokoa.

$$h = \max_{K \in T_h} \text{diam}(K), \quad (5.1)$$

missä $\text{diam}(K)$ tarkoittaa elementin K :n halkaisijaa [Pennanen 04]. Jokaisen ele-

mentin kärkipisteitä kutsutaan solmuiksi x_l ja kuhunkin solmuun liittyy yksi kantafunktio ϕ . Kantafunktiot voivat olla periaatteessa mitä tahansa lineaarisesti riippumattomia funktiota, mutta sopivasti valitsemalla ongelman ratkaisua voidaan nopeuttaa huomattavasti. [Tervo 03]

Äärellisten elementtien menetelmä perustuu niin kutsutun **variaationaaliongelman** ratkaisemiseen tai sen approksimointiin. Oletetaan, että tarkasteltava yhtälö on yksinkertainen toisen kertaluvun differentiaaliyhtälö

$$-v^{(2)}(x) + q(x)v(x) = f(x), 0 < x < 1 \quad (5.2)$$

$$v(0) = 0 \quad (5.3)$$

$$v(1) = 0 \quad (5.4)$$

ja oletetaan, että yhtälölle on olemassa ratkaisu $v \in X$, missä X on sopiva funktioavaruus. Ongelmaan etsitään approksimatiivista ratkaisua

$$v(x) \approx v_{\text{app}}(x) = \sum_{i=1}^N \alpha_i \phi_i, \quad (5.5)$$

missä α_i ovat tuntemattomia vakioita ja ϕ_i tunnettuja kantafunktioita.

Kirjoitetaan yhtälö 5.2 muodossa

$$\int_0^1 (-v'' + qv - f)w dx = 0, \forall w \in X \quad (5.6)$$

missä w on testifunktio.

Osittaisintegroidaan formaalisti

$$\int_0^1 (v'w' + quv) dx - \left[v'w \right]_0^1 = \int_0^1 f w dx, \forall w \in X. \quad (5.7)$$

Testifunktio $w(0) = w(1) = 0$, joten sijoitustermi häviää ja saadaan variaationaaliongelma

$$a(v, w) = F(w) \quad \forall w \in X \quad (5.8)$$

missä

$$a(v, w) = \int_0^1 (v'w' + qve)dx \quad (5.9)$$

ja

$$F(w) = \int_0^1 fwdx. \quad (5.10)$$

Yhtälöstä ratkaistaan haluttu v , joka on siis tietyssä mielessä alkuperäisen yhtälön ratkaisu. Yhtälöä 5.8 nimitetään yleisesti **variaatiomuodoksi** ja yhtälöä 5.9 bilineaarimuodoksi. [Tervo 03]

”Variaationaali-ongelma on ekvivalentti alkuperäisen differentiaali-ongelman kanssa. Tämä tarkoittaa, että tietyssä mielessä ratkaisufunktio $v(x)$ on alkuperäisen yhtälön ratkaisu, jos ja vain jos v on variaationaaliyhtälön ratkaisu ja kääntäen” [Tervo 03]. Variaationaali-ongelma saadaan tarkastelemalla yhtälön residuaalia ja vaaditaan, että sen tulee olla heikossa mielessä 0.

Ratkaisua v voidaan arvioida käyttäen hyväksi Galerkinin äärellisten elementtien approksimaatiota eli FEM-approksimaatiota (*Galerkin finite element approximation*) tai tulkita ongelma optimointiongelmana. Yleisessä muodossaan Galerkinin approksimaatio yhtälölle 5.8 on yhtälö

$$a(v_k, w_k) = F(w_k), \quad \forall w_k \in X_u, v_k \in X_n \quad (5.11)$$

missä X_u ja X_n ovat äärellisiä aliavaruuksia. Tarkempi kuvaus käytettävissä olevista arviointitekniikoista löytyy lähteestä [Tervo 03].

Oleellinen osa elementtimenetelmää on kantafunktion ϕ valinta. Kantafunktio valitaan siten, että se saa arvon 1 elementin siinä solmussa, johon se on kiinnitetty ja arvon 0 muissa solmuissa. Kantafunktio kannattaa usein valita paloittain lineaarisiksi. Tällöin tarkasteltavasta **jäykkymatriisista** M tulee harva, eli suuri osa matriisin M alkioista on nollija. Myös kantafunktion kantaja,

$$\overline{\{x | \phi_l(x) \neq 0\}}, \quad (5.12)$$

on pieni ja vain muutamien integraalien laskeminen on tarpeellista [Tervo 03].

Elementtimenetelmä voidaan tiivistää kokonaisuudessa seuraavaan heuristiseen algoritmiin:

1. Muodostetaan residuaali, kerrotaan se testifunktiolla ja integroidaan yli tarkastelualueen
2. Käytetään osittaisintegrointia ja huomioidaan reunaehdot
3. Generoidaan elementtiverkko ja sitä vastaavat kantafunktiot
4. Sijoitetaan elementtiarviot saatuun variaationaaliyhtälöön ja valitaan testifunktioiksi kantafunktiot
5. Muodostetaan jäykkyyismatriisi ja voimavektori
6. Ratkaistaan yhtälöryhmä

6 Mikrovirtausmallinnus FemLab-ohjelmalla

FemLab on Comsol Oy:n toteuttama monifysikaalinen mallinnusohjelma, joka käyttää mallinnukseen äärellisten elementtien menetelmää (*Finite Element Method*). Tutkielman empiirisenä osana esitellään erilaisten mikrovirtausten mallintamista FemLab-ohjelmalla.

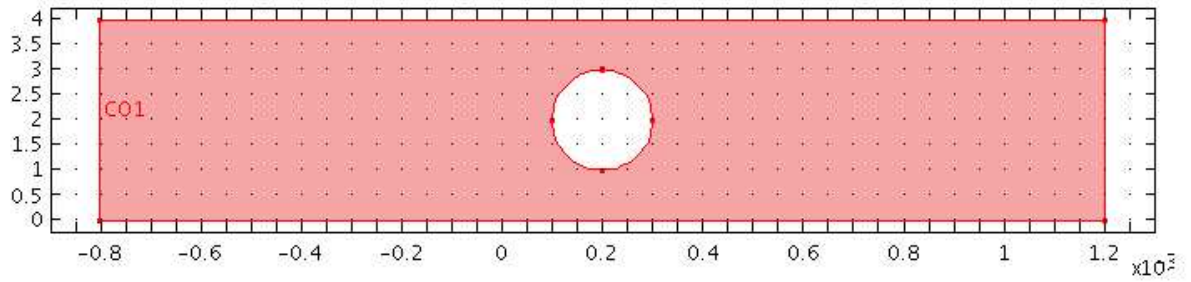
FemLab valittiin mallinnustyökaluksi, koska se on ns. matalan oppimiskynnyksen mallinnusohjelma. Muita vaihtoehtoisia mallinnustyökaluja olisivat olleet esimerkiksi **Elmer** [CSC 04] ja **CFDRC** [Corporation. 05]. Elmer on tutkimuskäyttöön ilmainen osittaisdifferentiaaliyhtälöiden ratkaisemiseen tarkoitettu ohjelma ja CFDRC on vastaava kaupallinen ohjelma.

FemLab-ohjelmaan on saatavilla erityisesti mikrojärjestelmien mallinnusta varten suunniteltu MEMS-moduuli. Tämän moduulin ja FemLabin perustyökalujen avulla seuraavissa luvuissa on mallinnettu neljä mikrovirtausta. Mallitiedostot ja niistä tehdyt videot on tallennettu tutkielmaan liitettylle CD:lle. Video havainnollistaa ilmiön käyttäytymisen huomattavasti pelkkiä kuvia paremmin. Videoiden ja mallien luettelo löytyy liitteestä E.

Äärellisten elementtien menetelmän perusteita on esitelty luvussa 5.3. Tietoa elementtimenetelmän tarkemmasta luotettavuusanalyysistä löytyy mm. lähteestä [Babuska 01]. Ohjeita FemLabin käyttöön ja sillä mallintamiseen löytyy lähteistä [Sarajärvi 04, Com 04c, Com 04b].

6.1 Navier-Stokesin yhtälöiden mallinnus kokoonpuristumattomalle virtaukselle kanavassa

Ensimmäisessä mallissa tarkastellaan yksinkertaista Navier-Stokesin virtausta kokoonpuristumattomalle nesteelle kanavassa. Malli on valittu, koska se on käytetyin mikrovirtausten mallinnusmenetelmä. Kaikki tutkielman mallit perustuvat Navier-Stokesin yhtälöihin ja sen takia on syytä tutustua virtauksen käyttäytymiseen yksinkertaisen mallin avulla. Mallin FemLab-parametrit ovat liitteessä A. Toteutetun mallin 2D ja 3D versiot löytyvät liitteenä olevalta cd:ltä (ks. liite E, Malli 1A ja Malli



Kuva 6.1: Kaavakuva tarkasteltavan virtauksen geometriasta.

1B).

Mallissa oletetaan, ettei lämpötila muutu. Viskositeetin oletetaan myös olevan lämpötilasta riippumaton. Mallissa käytetään seuraavia reunaehtoja.

Sisäänvirtaus (vasemmalla) $\mathbf{u} = \mathbf{u}_0$

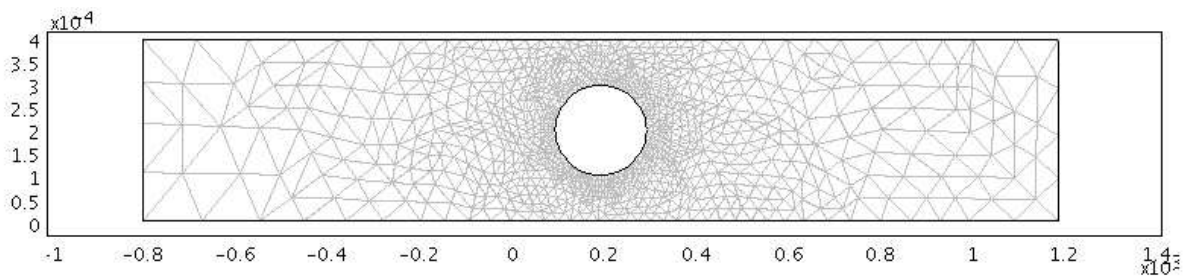
Ulosvirtaus (oikealla) $-p\mathbf{I} + \nu(\nabla\mathbf{u} + (\nabla\mathbf{u})^T)\mathbf{n} = -p_0\mathbf{n}$

Liukumaton (muut reunat) $\mathbf{u} = 0$

Mallin geometria on seuraavanlainen. Mallissa on nelikulmion muotoinen kanava. Kanavaan on sijoitettu ympyränmuotoinen este, jonka ympäri virtaus kiertää. Kanavan korkeus (halkaisija) L on 4×10^{-4} (m) ja leveys w on 0.002(m). Täsmälleen kanavan keskikohdassa on ympyrä, jonka säde r on 2×10^{-4} (m) (ks. kuva 6.1).

Mallinnusta varten elementtimenetelmässä pitää generoida valittuun geometriaan sopiva **elementtiverkko** (*mesh*). Liian harva verkko jättää tuloksen karkeaksi ja liian tiheä verkko moninkertaistaa laskenta-ajan ja muistin käytön. Kuvassa 6.2 nähdään, että elementtiverkko on valittu tiheäksi keskellä sijaitsevan ympyrän lähiympäristössä ja muualla verkko on harvempaa. Skaalattuina lukuarvoina tämä tarkoittaa sitä, että lähellä ympyrää verkon elementin maksimikoko saa olla 0.01 ja kauempana 0.05.

Kanavassa virtaa neste, jonka ominaisuudet vastaavat vettä. Nesteen dynaaminen viskositeetti ν_{dyn} on $1.0 \times 10^{-3} \frac{\text{kg}}{\text{s m}}$ ja tiheys ρ on $10^3 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$. Virtauksen nopeus on $1.0 \times 10^{-3} \frac{\text{m}}{\text{s}} = 1 \frac{\text{mm}}{\text{s}}$. Näiden tietojen perusteella voidaan laskea virtauksen Reynoldsin



Kuva 6.2: Kaavakuva tarkasteltavan mallin elementtiverkosta.

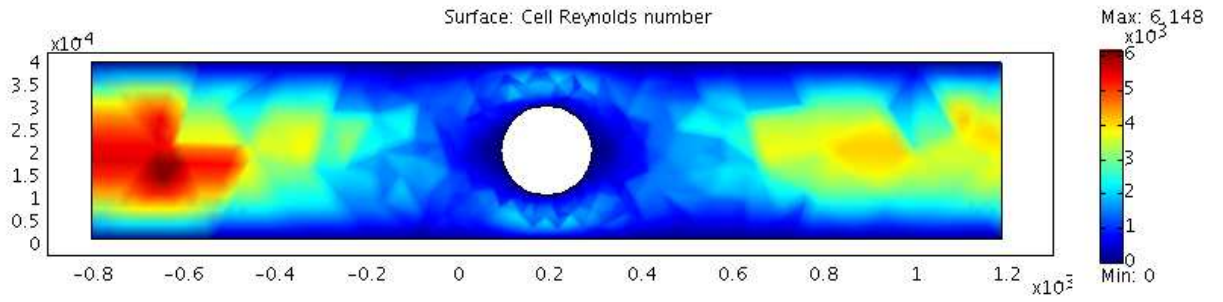
luku.

$$Re = \frac{\rho u L}{\nu_{dyn}} = \frac{1.0 \times 10^3 \left(\frac{\text{kg}}{\text{m}^3}\right) \cdot 1.0 \times 10^{-3} \left(\frac{\text{m}}{\text{s}}\right) \cdot 0.4 \times 10^{-2} (\text{m})}{1.0 \times 10^{-3} \left(\frac{\text{kg}}{\text{m s}}\right)} = 0.4 \times 10^1 = 4 \quad (6.1)$$

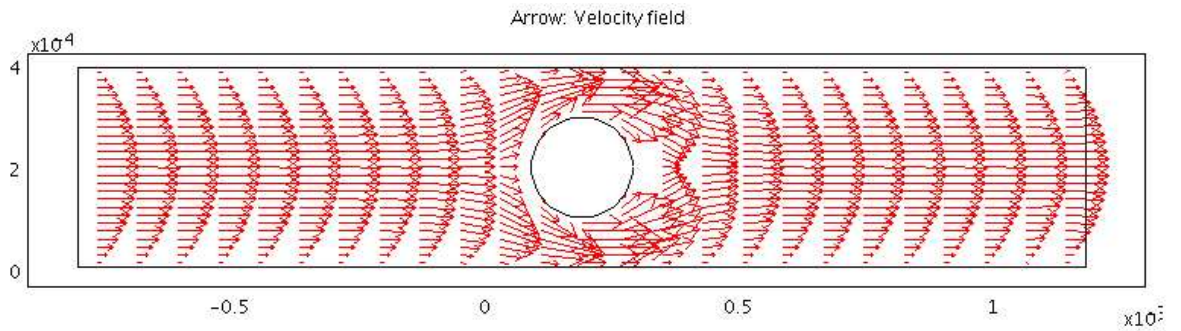
Reynoldsin luvusta voidaan havaita virtauksen hitausmomenttivoimien hallitsevan vain hieman viskositeettivoimia enemmän. Kuvaan 6.3 on mallinnettu virtauksen **solukohtainen Reynoldsin luku** (*Cell Reynolds number*). Koska todellinen Reynoldsin luku on epästabiili laskea ohjelmallisesti, voidaan äärellisten elementtien menetelmässä korvata se solukohtaisella arvolla. Solukohtainen Reynoldsin luku antaa karkean arvion siitä, kuinka hyvin numeerinen ratkaisu vastaa todellisuuden ilmiötä. Tulee kuitenkin huomata se, että Reynoldsin lukua käytetään useasti ennen mallinnusta sopivaa menetelmää valittaessa ja solukohtaista Reynoldsin lukua vasta mallinnuksen jälkeen mallin todenmukaisuuden arviointiin. Niiden lukuarvoja voidaan siis suoraan verrata toisiinsa.

Kun on tiedossa virtauksen Reynoldsin luku ja koska nesteinä on veden kaltainen aine oletetaan jatkuvuusteorian ehtojen olevan voimassa ja oletetaan, että Navier-Stokesin yhtälöt kokoonpuristumattomalle virtaukselle mallintavat virtauksen riittävällä tarkkuudella. Nämä oletukset eivät välttämättä pidä paikkaansa, koska nesteillä ei ole olemassa Knudsenin numeron kaltaista erottelijaa, joka takaisi jatkuvuusoletuksen olemassaolon.¹²

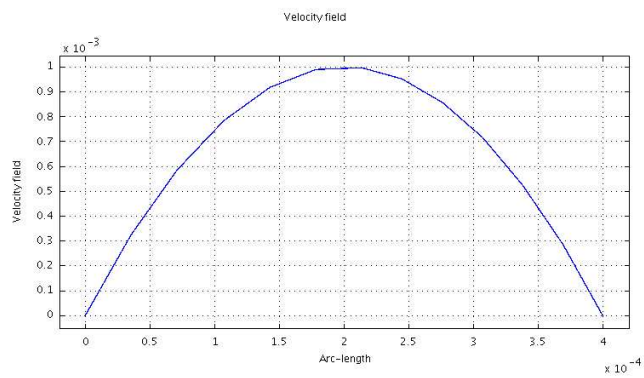
¹²Kirjallisuutta tutkimalla voidaan kuitenkin osoittaa oletusten pätevän.



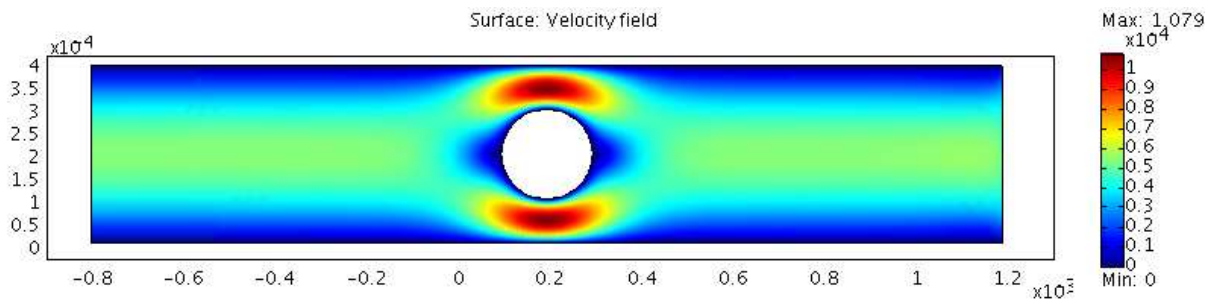
Kuva 6.3: Virtauksen solukohtaiset Reynoldsin luvut.



Kuva 6.4: Virtauksen muoto nuolimallin avulla.



Kuva 6.5: Poiseullen virtauksen muoto kanavan sisäänvirtausraunalla.



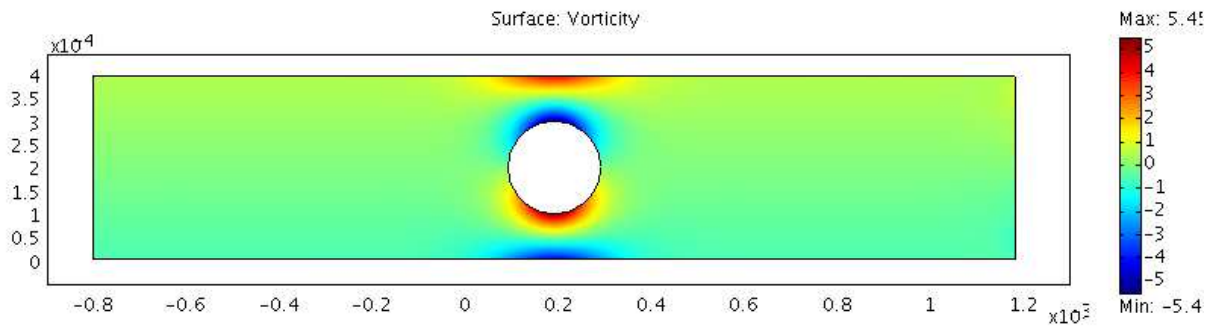
Kuva 6.6: Virtauksen nopeuskentät hetkeltä, jolloin nesteen sisäänvirtaus on suurinta.

Kuvassa 6.6 on mallinnettu virtauksen nopeuskenttä tasaisessa tilassa (*steady state*). Kuvasta havaitaan virtausnopeuden olevan voimakkainta silloin, kun kanava on kapeimmillaan. Kuvassa 6.4 virtauskentät on mallinnettu nuolten avulla. Nuolten pituus näyttää kuinka reunan kitka aiheuttaa virtaukseen parabolisen muodon. Tätä ilmiötä kutsutaan yleisesti **Poiseullen virtaukseksi** (*Poiseuille flow*) [Senturia 01]. Kuvassa 6.5 on esitetty Poiseullen virtauksen muoto reunalla 1. Videosta voidaan havainnoida virtauksen käyttäytymistä eri virtausnopeuksilla (ks. liite E, video 1A).

Kuvassa 6.7 mallinnetaan virtauksen pyörteisyyttä. Koska virtauksen Reynoldsin luku on alle 1000, virtaus ei ole turbulenti ja suurimmat pyörteisyysarvot saavutetaan oletetusti lähellä ympyrän muotoista estettä. Voidaan havaita ettei viskositeetin aiheuttama kitka reunaa vasten ole juurikaan merkittävä ja pyörteisyys kanavan reunassa on vain vähän voimakkaampaa kuin kanavan keskellä.

Navier-Stokesin virtausmallin 3D versio vastaa arvoiltaan 2D mallia¹³ muuten, mutta se on pursutettu (*extrude*) kanavan leveyden verran ylöspäin (ks. kuva 6.8). 3D-mallin elementtiverkko on esitetty kuvassa 6.9. Huomattavaa on, että verkkoelementtien määrä kasvaa rajusti ja tämä lisää ratkaisuun kuluva aikaa ja muistintarvetta merkittävästi. Näistä syistä johtuen 3D malleissa joudutaan usein käyttämään ei-suoria menetelmiä yhtälöryhmien ratkaisemiseen. FemLabissa vaihtoehtoina suoriksi menetelmiksi on **umfpack** ja **spooles**. Epäsuorista menetelmistä käyt-

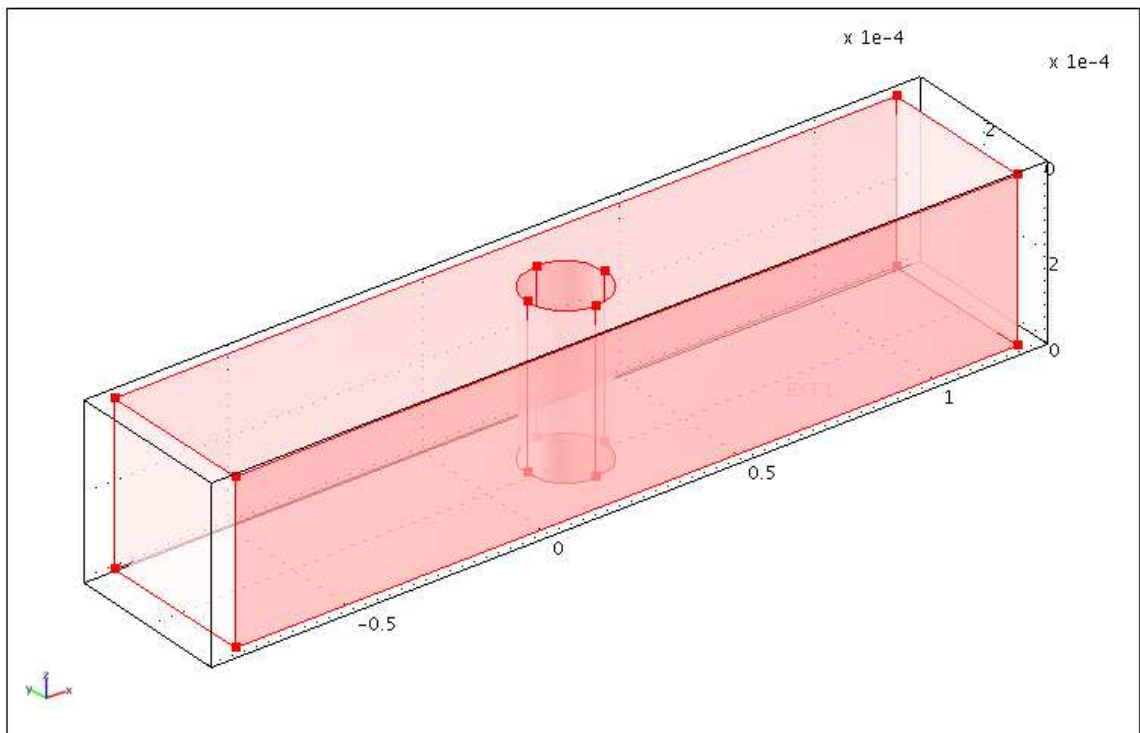
¹³Sisäänvirtaus vasemmalla, ulosvirtaus oikealla, loput reunat liukumattomia.



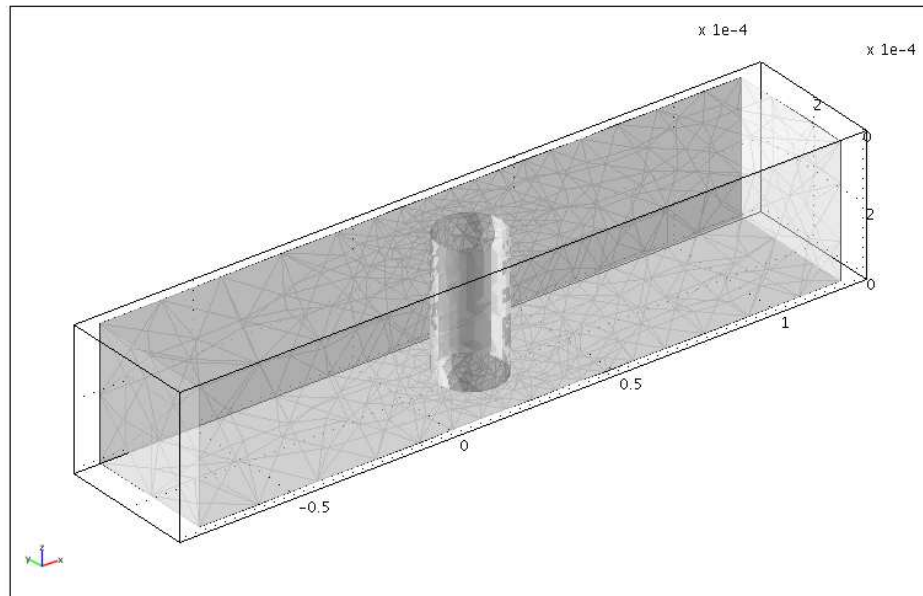
Kuva 6.7: Virtauksen pyörteisyyskentät.

tökelpoisin on **GMRES** ja jota ehdollistetaan (*preconditioner*) usein epätäydellisellä LU-menetelmällä. Tarkastettava 3D malli on ratkaistu käyttämällä viimeksi mainittuja menetelmiä.

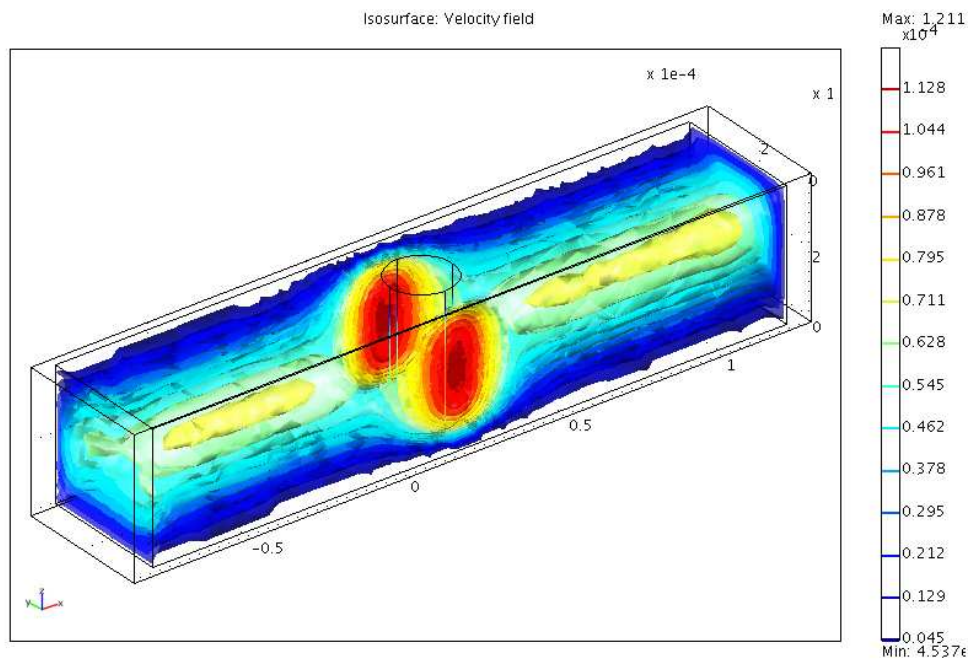
Kuvassa 6.10 on esitetty virtauksen nopeuskentät kerroskuvauksena. Virtausta on video liitteenä olevalla cd:llä (ks. liite E, video 1B).



Kuva 6.8: Virtauksen 3D mallin geometria.



Kuva 6.9: Virtauksen 3D mallin elementtiverkko.



Kuva 6.10: Virtauksen 3D mallin nopeuskentät kerroskuvauksen avulla ilmaistuna.

6.2 Elektro-osmoottisen virtausvoiman mallinnus kanavassa

Luvussa 4 käsiteltiin elektrokineettisten ilmiöiden vaikutusta mikrovirtauksessa. Jatkamme aiheen tutkimista osmoottisen virtausmallin avulla. Mallin perusteet löytyvät lähteestä [Com 04a] (kohdasta *electro-osmotic mixer*), sekä lähteestä [Nguyen 02, s.55]. Mallin FemLab-parametrit ovat liitteessä B. Toteutettu malli löytyy liitteenä olevalta CD:ltä (ks. liite E, malli A). Liitteenä olevalla CD:llä on myös kaksi videota (ks. liite E, videot 2A ja 2C). Video 2A kuvastaa kuinka virtauksen potentiaalikentät muuttuvat ajan edetessä. Video 2C näyttää miten tämä vaikuttaa virtauksen nopeuskenttiin.

Malli kuvastaa tilannetta, jossa mikrokanavaan (halkaisija $4.0 \times 10^{-6}\text{m}$) on sijoitettu kaksi kuparista elektrodia (ks. kuva 6.11). Elektrodien potentiaalit ovat vastakkaiset ja potentiaalien voimakkuuden avulla kontrolloidaan kanavassa liikkuvan nesteen virtausnopeutta (ks. kuva 6.12). Mallissa lasketaan ensin potentiaalien aiheuttama stationaarinen sähkökenttä, jota moduloidaan ajan suhteen sinillä. Tällöin sähkökentästä tulee oskilloiva ja se vastaa tarkasteltavaa tilannetta.

Sähkökentän reunaehtoyhtälöt ovat

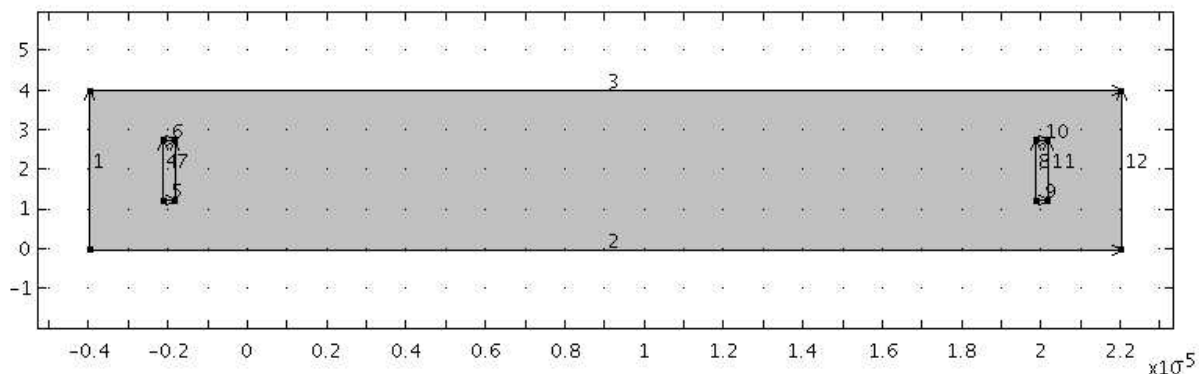
Potentiaali (elektrodien pitkät sivut)	$V = V_0$
Jatkuvuus (elektrodien lyhyet sivut)	$\mathbf{n} \cdot (\mathbf{J}_1 - \mathbf{J}_2) = 0$
Eristys (muut reunat)	$\mathbf{n} \cdot \mathbf{J} = 0$

Mallin virtaus perustuu Navier-Stokesin yhtälöihin kokoonpuristumattomalle virtaukselle (yhtälöt 3.44 ja 3.45). Virtauksen reunaehtoyhtälöt ovat

Sisävirtaus (vasemmalla, alhaalla, ylhäällä)	$\mathbf{u} = \mathbf{u}_0$
Ulosvirtaus (oikealla)	$-pI + \nu(\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T)\mathbf{n} = -p_0\mathbf{n}$
Liukumaton (elektrodit)	$\mathbf{u} = 0$

Oikealta sisään tulevaa virtauksen voimakkuus ilmaistaan parabolisen yhtälön

$$\mathbf{u} \cdot \mathbf{n} = v_{mean}6s(1 - s) \quad (6.2)$$



Kuva 6.11: Osmoottisen virtauksen geometria. Mittakaava on 10^{-5} .

avulla. Yhtälössä s tarkoittaa koordinaatteja, jotka menevät reunaa pitkin ja saavat arvot yhdestä nollaan. Ylhäältä ja alhaalta tuleva virtaus on tangentialista ja kuvastaa elektro-osmoottisen voiman aiheuttamaa virtausta. Virtaus saadaan Helmholtz-Smoluchowskin yhtälöstä

$$\mathbf{u}_x = - \left(\frac{\varepsilon \cdot \zeta}{\nu} \right) \mathbf{E}, \quad \mathbf{u}_y = 0 \quad (6.3)$$

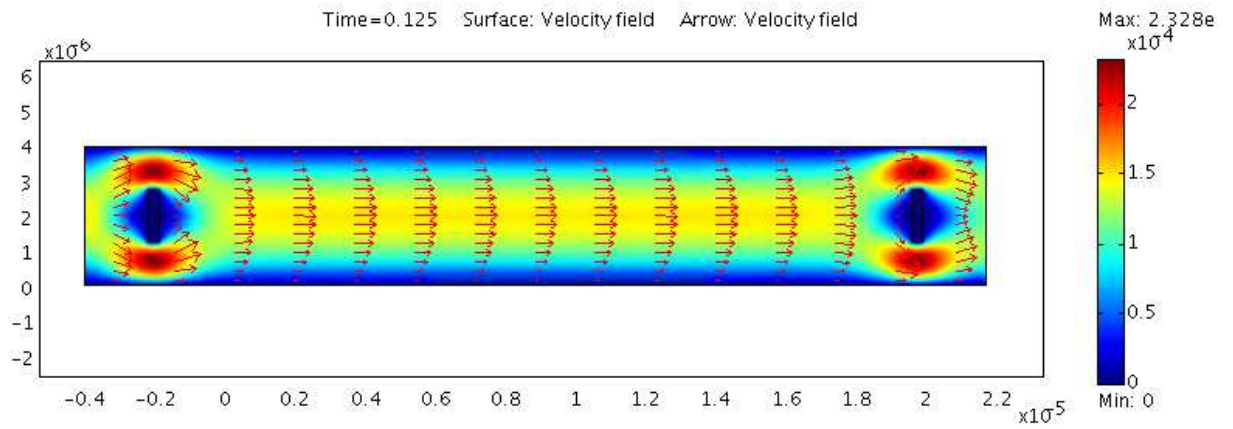
Potentiaalin ja sähkökentän välinen yhteys on

$$\mathbf{E} = -\nabla V \quad (6.4)$$

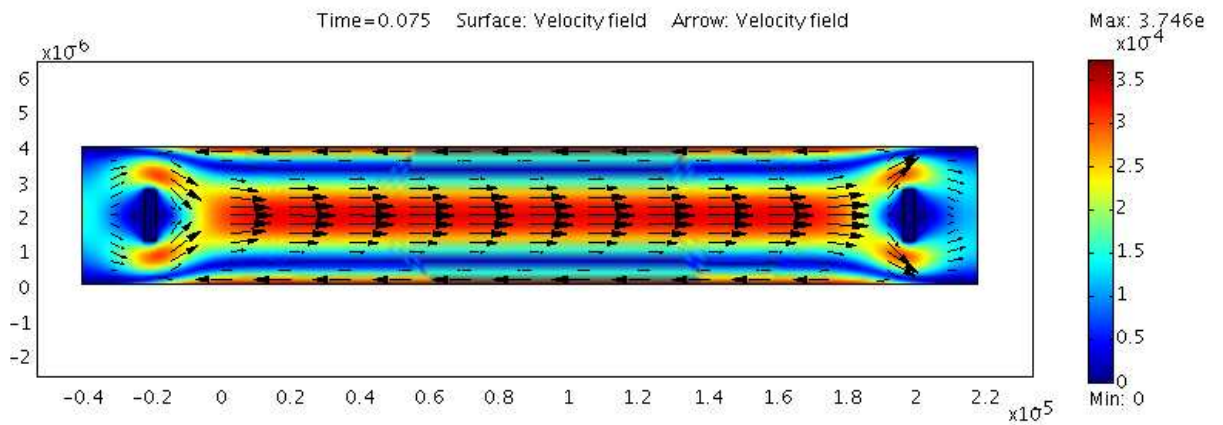
Loput reunaehdot ovat liitteessä B. Mallin yhtälöryhmien ratkaisemiseen käytetään suoraa umfpack-menetelmää.

Kuvasta 6.13 voidaan havaita sähköisen kaksoiskerroksen aiheuttama kaksisuuntainen virtaus silloin kun potentiaalitasoa elektrodeissa kasvatetaan. Reunalla virtaus menee kohti sen hetkistä negatiivista elektroodia ja keskellä oleva suurempi virtaus suuntaa kohti positiivista elektroodia. Kuvasta 6.14 voidaan havaita, ettei vastaavalla ilmiöllä ole juuri vaikutusta enää kymmenen kertaa suuremmassa kanavassa. Skaalauksessa virtauksen keskimääräinen nopeus on pidetty samana molemmissa malleissa ja vain geometriaa on muutettu.

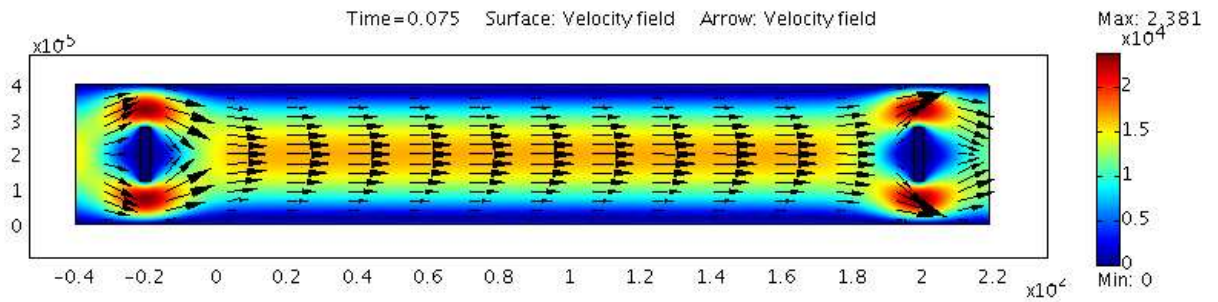
Kuvassa 6.15 on elektrodien aiheuttamat potentiaalitentät samalla ajanhetkellä kun sähköisen kaksoiskerroksen vaikutus on selvästi havaittavissa. Ulkoisia sähkö-



Kuva 6.12: Osmoottisen virtauksen nopeuskentät ajanhetkellä 0.125.



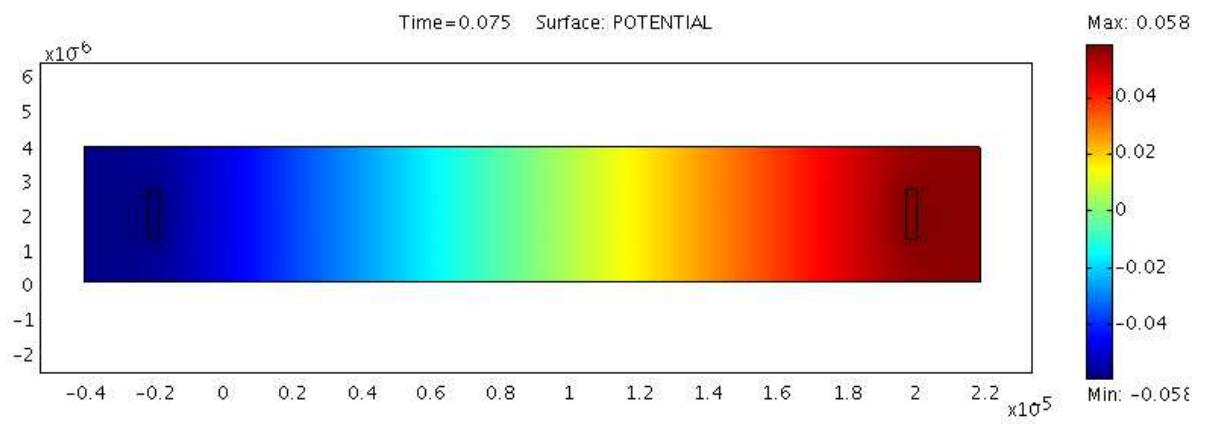
Kuva 6.13: Osmoottisen virtauksen nopeuskentät ajanhetkellä 0.075. Huomioitavaa on sähköisen kaksoiskerroksen selvä näkyminen potentiaalissa ollessa merkittävä.



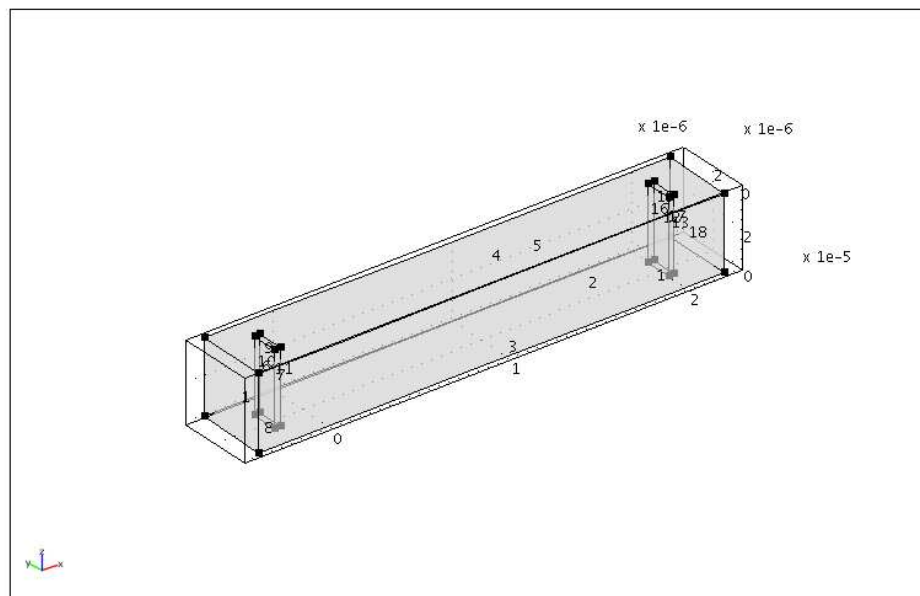
Kuva 6.14: Kymmenen kertaa suuremman kanavan osmoottisen virtauksen nopeuskentät ajanhetkellä 0.075. Sähköinen kaksoiskerros on menettänyt olennaisesti merkitystään ja kaikki virtausnuolet näyttävät ulosmenoa kohti.

kenttiä ei ole, eikä nesteen oleteta sisältävän konsentraatiogradientteja, jotka muuttaisivat sähkökentän koostumusta.

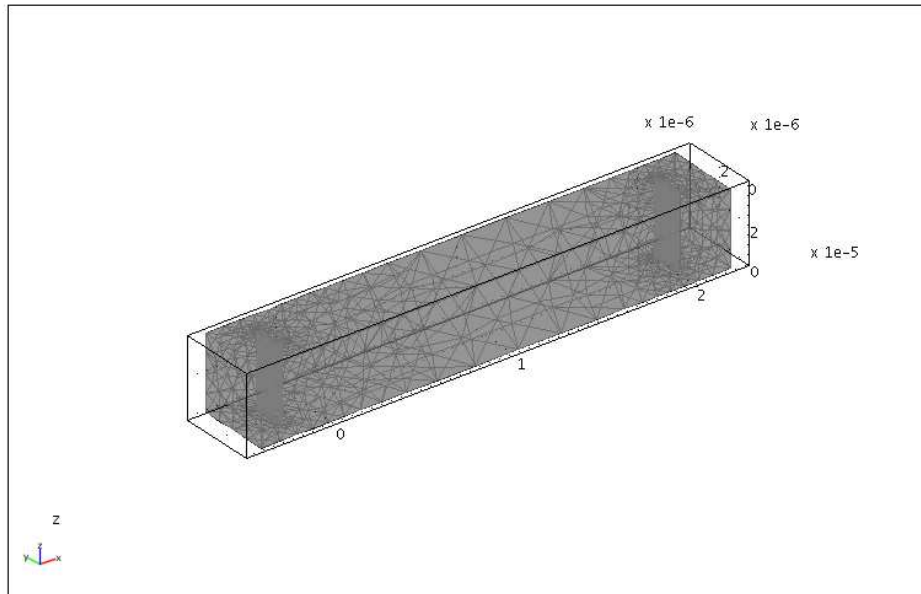
Elektro-osmoottinen virtaus on mallinnettu myös 3D malliksi. Mallin geometria on tehty samalla tavalla kuin luvun 6.1 3D mallin geometria. Virtausmallin 2D kaaviota on pursutettu kanavan leveyden verran z-akselin suuntaan (ks. kuva 6.16). Kuvassa 6.17 esitellään 3D mallin elementtiverkko. 3D mallin reunaehdot ovat samat kuin 2D mallissa lukuun ottamatta sitä, ettei ylä- ja alapinnalla ole elektroosmoottista voimaa. Tämä johtuu siitä, että ylä- ja alapinnan materiaali eroaa ominaisuuksiltaan seinien materiaalista. Elektro-osmoottisen virtauksen virtauskentät on mallinnettu kuvaan 6.18. Toisin kuin 2D mallissa, 3D mallin ratkaisussa on haettu tasaista tilaa (steady state). Virtauksen 3D malli ja video ovat liitteenä cd:llä (ks. liite E, malli 2B ja video 2B).



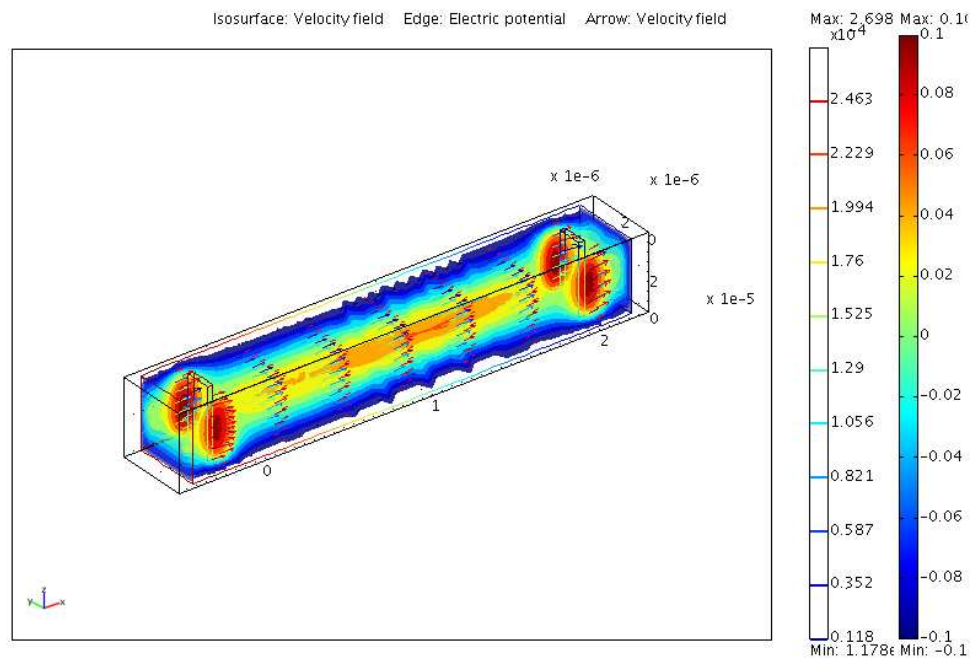
Kuva 6.15: Osmoottisen virtauksen potentiaalientät ajanhetkellä 0.075.



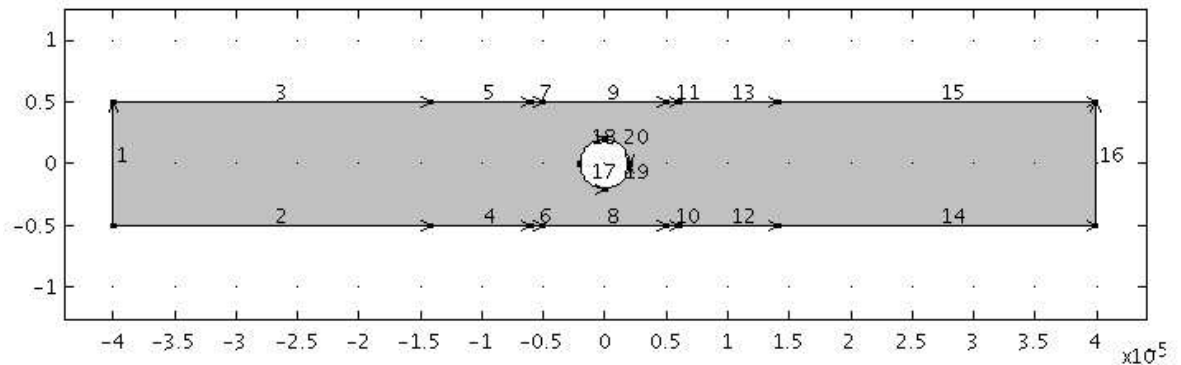
Kuva 6.16: Osmoottisen virtauksen 3D geometria



Kuva 6.17: Osmoottisen virtauksen 3D geometria elementtiverkko.



Kuva 6.18: Osmoottisen virtauksen 3D nopeuskentät



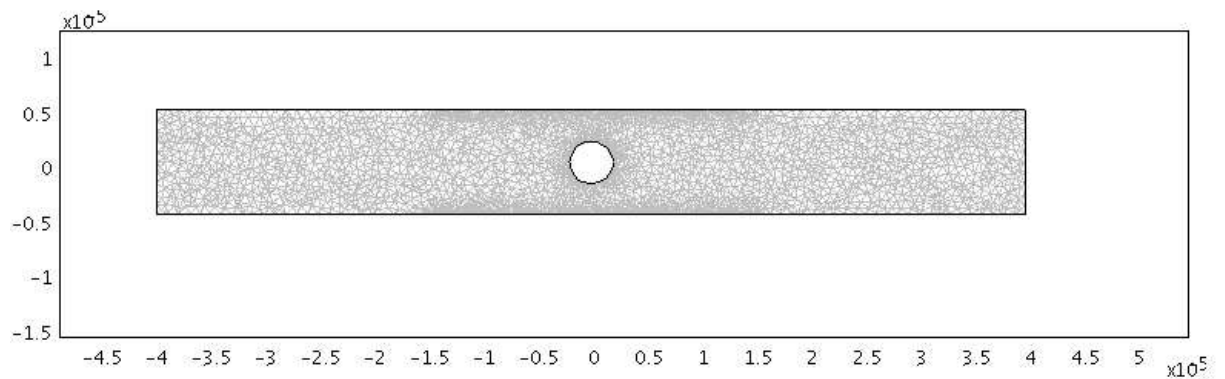
Kuva 6.19: Osmoottisen sekoittajan geometria. Mittakaava on 10^{-6} .

6.3 Elektro-osmoottisen sekoittajan mallinnus kanavassa

Osmoottisen sekoittajan tarkoituksena on sekoittaa kaksi kanavassa yhtä aikaa virtaavaa nestettä toisiinsa. Sekoittamisen on havaittu olevan hankalaa mekaanisilla toimenpiteillä, kuten esimerkiksi hammasrattailla. Osmoottisessa sekoittajassa toimenpide hoidetaan sähköpotentiaalien avulla. Virtaus reagoi tulevaan sähköärsykeeseen. Tarpeeksi usein ja nopeasti toistettuna se aiheuttaa virtausten kietoutumisen toisiinsa. Esiteltävä malli vastaa hyvin paljon kappaleen 6.2 mallia. Vaikka ratkaisu on hyvin samankaltainen ongelman lähtökohdat ovat aivan erilaiset. Mallin FemLab-parametrit ovat liitteessä C. Toteutettu malli löytyy liitteenä olevalta CD:ltä (ks. liite E, malli 3).

Mallin geometria koostuu suorakaiteen muotoisesta kanavasta, jonka keskipisteessä on ympyrän muotoinen este (ks. kuva 6.19). Estettä ympäröiville seinille on symmetrisesti sijoitettu elektrodit, joiden jännitettä ja taajuutta voidaan haluttaessa muuttaa. Elektrodien jännite vaihtelee $-0.1V$ ja $0.1V$ välillä. Kuten aikaisemmassakin mallissa, myös tässä lasketaan ensin stationaarisen sähkökentän arvot ja käytetään niitä sitten hyväksi ratkaistaessa Navier-Stokesin yhtälöt kokoonpuristumattomalle virtaukselle. Toisin sanoen sähkökenttä on muotoa

$$\mathbf{E}(t) = \sin(\omega t)\mathbf{E}_0, \quad (6.5)$$



Kuva 6.20: Osmoottisen sekoittajan elementtiverkko.

missä \mathbf{E}_0 on stationaarinen sähkökenttä. Mallin sähkökentän reunaehtoyhtälöt ovat

Potentiaali (elektrodit) $V = V_0$

Eristys (muut reunat) $\mathbf{n} \cdot \mathbf{J} = 0$

ja osmoottisen virtauksen reunaehtoyhtälöt ovat

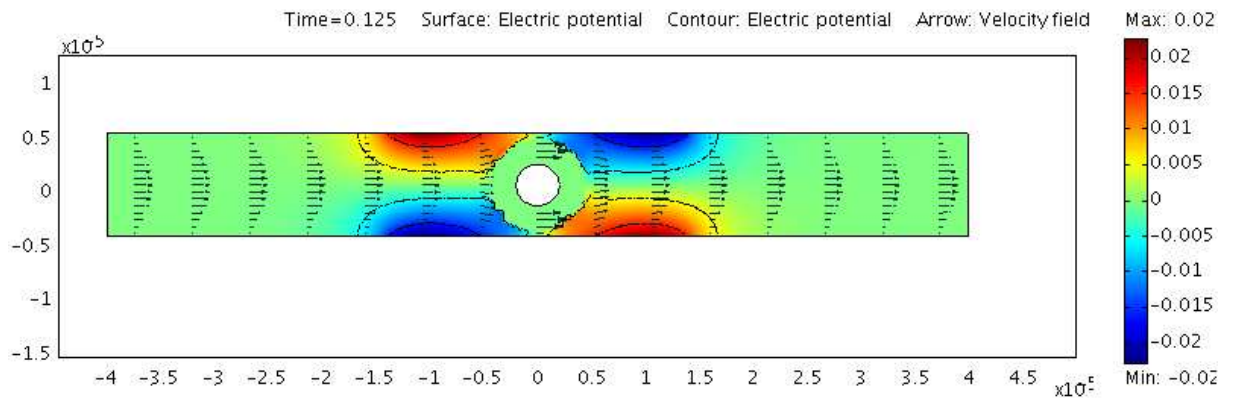
Sisävirtaus (vasemmalla, alhaalla, ylhäällä) $\mathbf{u} = \mathbf{u}_0$

Ulosvirtaus (oikealla) $-p\mathbf{I} + \nu(\nabla\mathbf{u} + (\nabla\mathbf{u})^T)\mathbf{n} = -p_0\mathbf{n}$

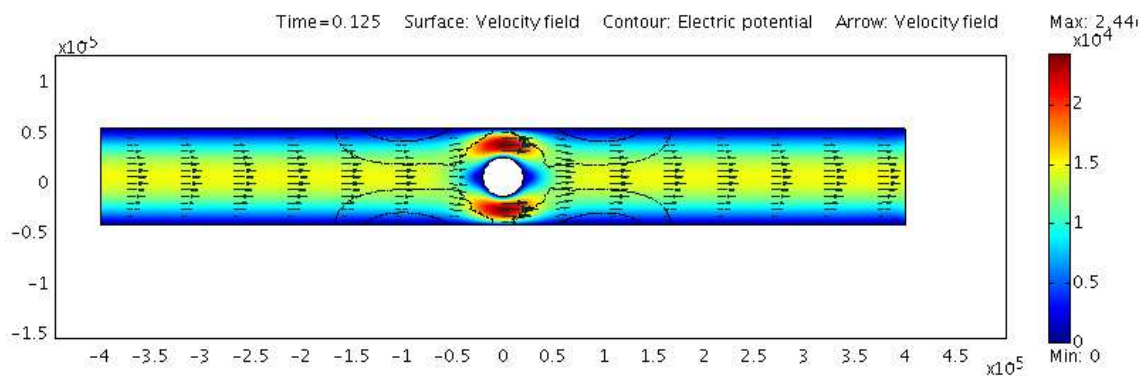
Liukumaton (elektrodit) $\mathbf{u} = 0$

Elektro-osmoottinen voima on saatu aikaiseksi samalla tavalla kuin edellisessä mallissa, eli lisäämällä ala- ja yläpinnalle yhtälön 6.3 mukainen sisäänvirtaus.

Malli on verkotettu siten, että lähellä keskiympyrää ja elektrodien luona elementtiverkko on hyvin tiivis. Muualla verkko harvenee hieman, mutta ei paljon. Verkossa on 5026 elementtiä (ks. kuva 6.20).

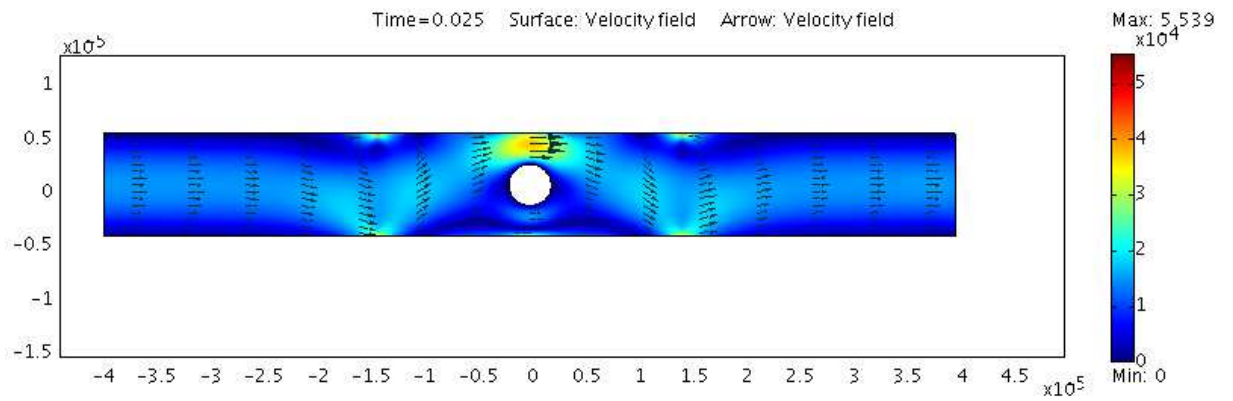


Kuva 6.21: Osmoottisen sekoittajan potentiaal kentät ajanhetkellä 0.

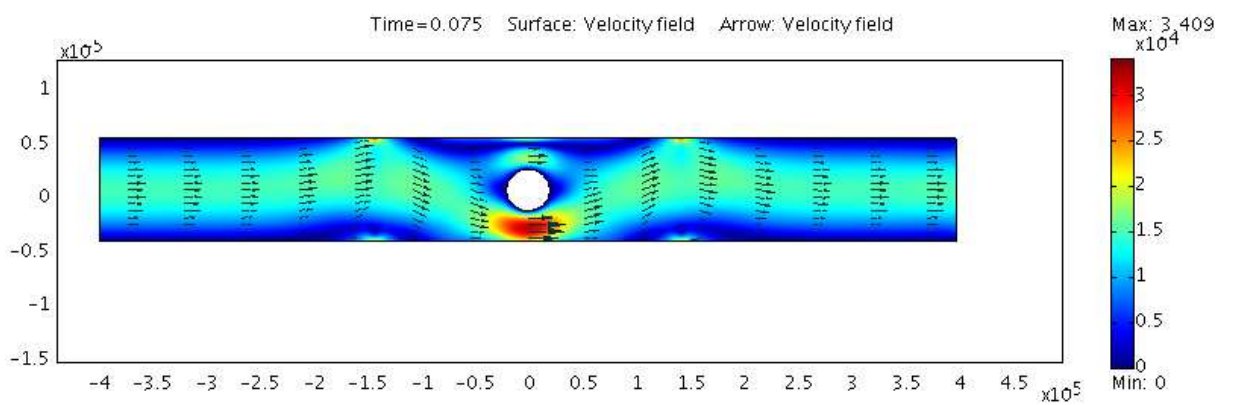


Kuva 6.22: Osmoottisen sekoittajan nopeuskenttä ajanhetkellä 0.125.

Kuvassa 6.21 tarkastellaan virtaukseen vaikuttavien elektrodien tekemää potentiaal kenttää ja potentiaalien voimakkuutta. Kuva on ajanhetkeltä, jolloin potentiaaliero on suurinta. Kuvassa 6.22 tarkastellaan virtauksen nopeuskenttiä ajanhetkellä 0. Kuvissa 6.23 ja 6.24 nopeuskentät ovat muuttuneet ajan edetessä. Virtauksen nopeuskentistä on video liitteenä olevalla cd:llä (ks. liite E, video 3).



Kuva 6.23: Osmoottisen sekoittajan nopeuskenttä ajanhetkellä 0.025.



Kuva 6.24: Osmoottisen sekoittajan nopeuskenttä ajanhetkellä 0.075

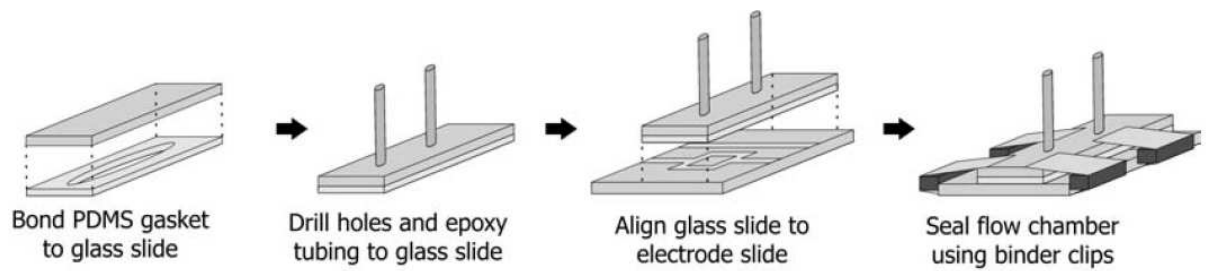
6.4 Di-elektroforeettinen loukku

Di-elektroforeettinen loukku tarkoittaa menetelmää, jossa partikkeli vangitaan di-elektroforeettisen voiman avulla elektrodin pinnalle. Tässä mallissa esitellään partikkeliin vaikuttavan di-elektroforeettisen voiman aikaan saama virtaus. Malli perustuu Carl Meinhartin artikkeliin *Measurement of AC electrokinetic flows* [Meinhart 03], sekä Adam Rosenthalin ja Joel Voldmanin artikkeliin *dielectro phoretic traps for single particle patterning* [Rosenthal 04]. Toteutettu malli löytyy liitteenä olevalta cd:ltä (ks. liite E, malli 4). Mallin FemLab-parametrit ovat liitteessä D.

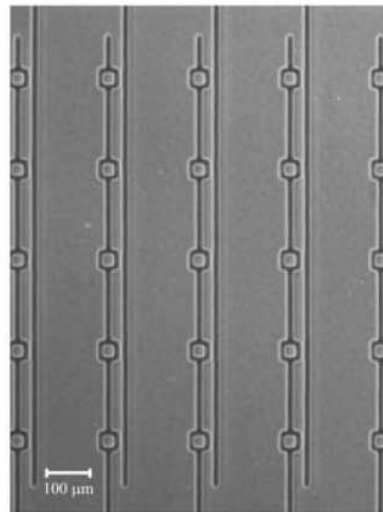
Tutkimuksessa Meinhart on mallintanut di-elektroforeettisen virtauksen ja verrannut saatua mallia kokeellisiin tuloksiin, jotka on mitattu μ -PIV menetelmällä. Menetelmällä voidaan mitata $1\ \mu\text{m}$ halkaisijaltaan olevia polystyreeni partikkeleiden liikettä vesi-sokeri liuoksessa. Kokeelliset mittaukset on tehty kahdelle erikoiselle partikkelille. Tutkimuksessa havaitaan elektrotermisten voimien esittävän suurta roolia partikkeleiden liikkeessä. [Meinhart 03]

Rosenthal ja Voldham ovat artikkelissaan tutkineet erikokoisten partikkelien vangitsemista tekemällä loukulla (ks. kuvat 6.25 ja 6.26). Tutkimuksessa loukkujen elektrodit tehdään kuvioimalla lasinen pinta kullalla. Toinen elektrodi on suora ja toisen keskellä on avonainen neliö (ks. kuva 6.26). Elektrodeista toisella on positiivinen potentiaali ja toisella negatiivinen. Elektrodilasien yläpuolella on $95\text{--}105\ \mu\text{m}$ korkea kammio, jossa virtaa veden kaltaista nestettä. Kattona järjestelmässä on $1\ \text{mm}$ paksuinen lasilevy, jonka läpi vangittuja partikkeleita voidaan tutkia. Tutkimuksessa esitellään kuinka loukku toimii erikokoisille partikkeleilla. Tarkasteltavina muutujina ovat myös virtauksen nopeus ja elektrodien potentiaali, kammion korkeus ja elektrodien välinen etäisyys. [Rosenthal 04]

Di-elektroforeettinen loukku on mallinnettu tässä tutkielmassa mukaillen Rosenthalin ja Voldhamin artikkelia. Loukun geometria vastaa heidän artikkelissa käyttämänsä geometriaa (ks. kuva 6.27). Kuvassa 6.28 esitetään mallin 3D-geometria, sekä numeroidaan reunat. Kuvassa 6.29 on esitetty partikkeliloukun elementtiverkko.

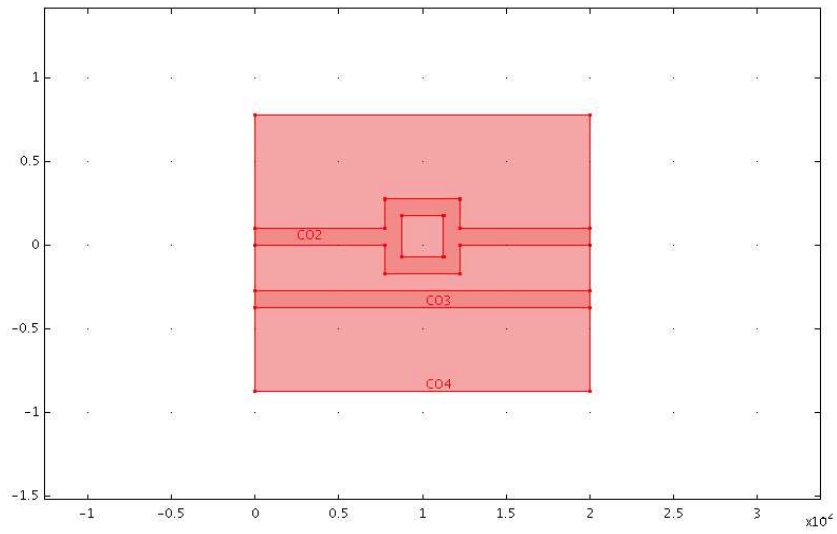


Kuva 6.25: Di-elektroforeettisen loukun virtauskammion valmistaminen [Rosenthal 04]

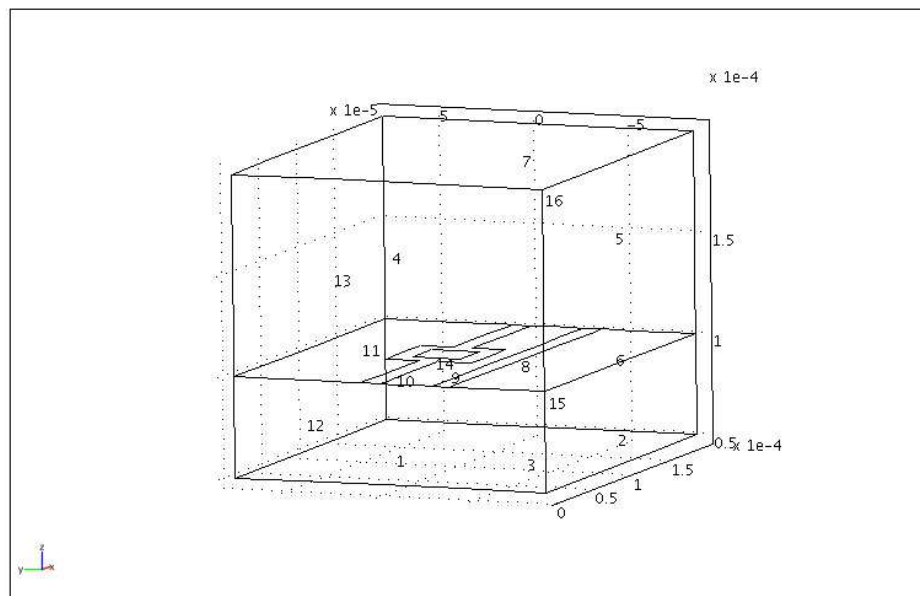


Kuva 6.26: Di-elektroforeettinen loukku [Rosenthal 04]

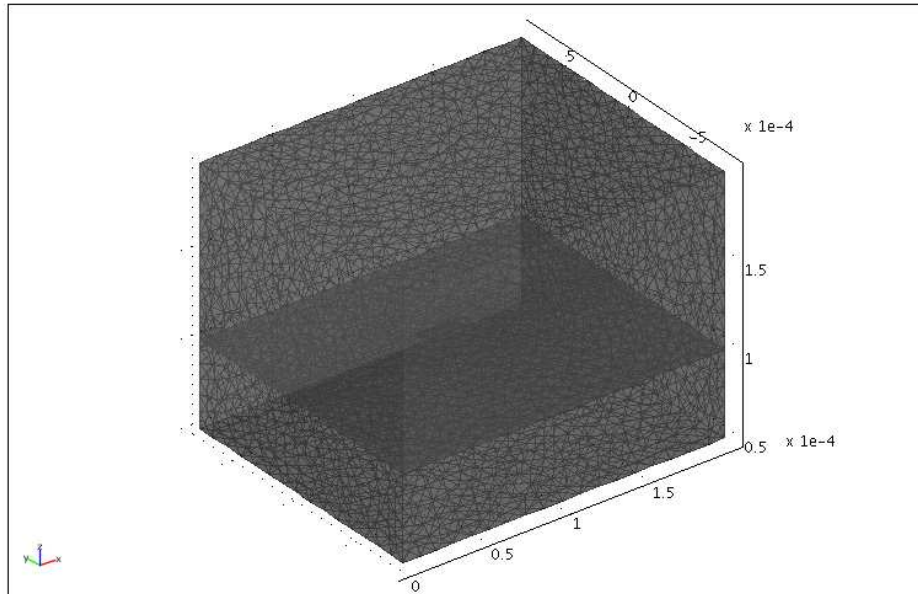
Partikkelin ja virtauksen ominaisuudet vastaavat myös artikkelin arvoja. Pohjamateriaalina loukussa on käytetty borosilikaattia lasin asemasta. Mallia ei ole myöskään katettu kuten artikkelissa. Suurin ero artikkelissa esitettävän tutkimuksen ja tässä tutkielmassa esitettävän mallin välillä on se, että artikkelissa tutkimuksessa tarkastellaan koko kammion kaikkien elektrodiloukkujen toimintaa. Tässä tutkielmassa keskitytään tarkastelemaan vain yhden loukun toimintaa ja tämä aiheuttaa muutoksen alueella vallitsevaan sähkökenttään. Malli ei siis aivan vastaa todellista tilannetta.



Kuva 6.27: Di-elektroforeesin geometria 2-D [Rosenthal 04].



Kuva 6.28: Di-elektroforeettisen loukun geometria ja reunat numeroituna.

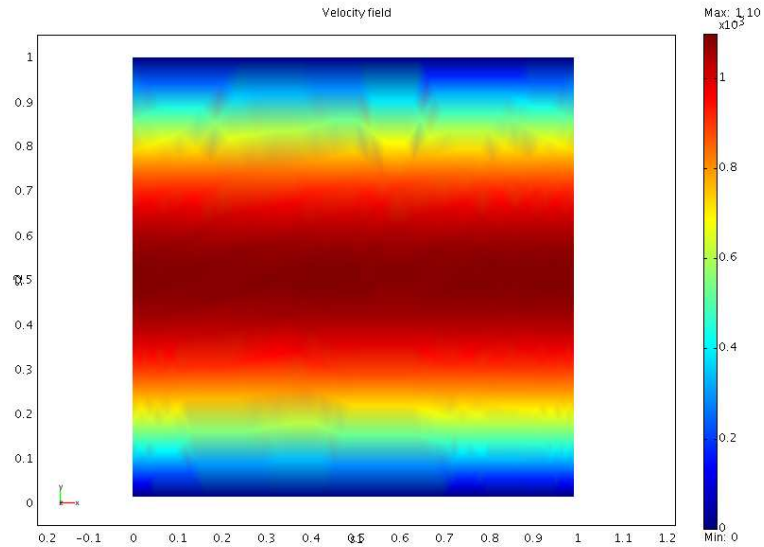


Kuva 6.29: Di-elektroforeettisen loukun elementtiverkko.

Mallin tarkoituksena on näyttää di-elektroforeettisen virtauksen (*dep-virtaus*) käyttäytyminen loukun läheisyydessä. Dep-voima vastustaa partikkelin liikkumista nesteen virtauksen mukana. Partikkeli jää siis paikalleen jos virtausvoimien summa on nolla. Koska virtaus on laminaarista, eikä kanavassa ole esteitä, voidaan nesteen virtaus jättää laskematta. Tällöin koko tarkastelualueella käytetään vakiovirtauskenttää, joka on parabolisen poiseullen sisäänvirtauksen mukainen. Virtaus kulkee poikittain elektrodien nähdessä, että ensin tulee neliöelektrodi ja sitten suoraelektrodi. Mallissa riittää tarkastella dep-virtauksen ja sisääntulo virtauksen summaa. Kun summa on nolla, partikkeli pysyy paikallaan.

Mallin reunaehtojen yhtälöt ovat

Potentiaali (elektrodeissa)	$V = V_0$
Jatkuvuus (kanavan pohjassa)	$\mathbf{n} \cdot (D_1 - D_2) = 0$
Symmetria (kanavan laidoilla)	$\mathbf{n} \cdot D = 0$
Maa (kanavan katossa)	$V = 0$

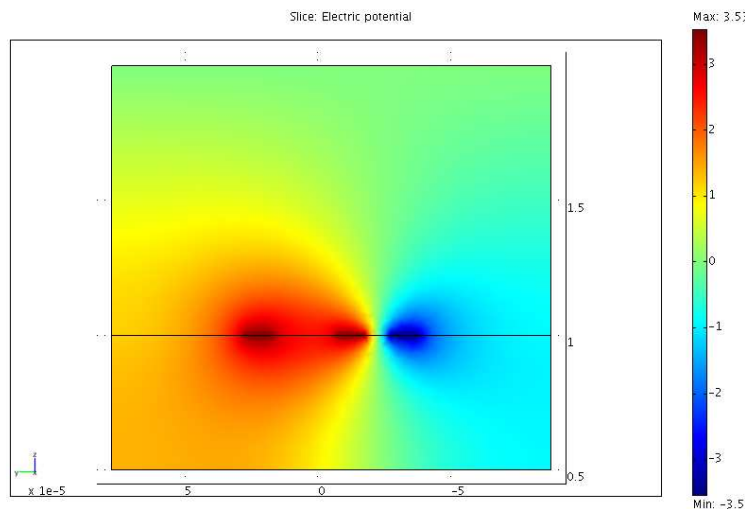


Kuva 6.30: Poisseulen parabelinen sisäänvirtaus. Ylhäällä ja alhaalla virtauksen vauhti on huomattavasti pienempi kuin keskellä kammiota. Koska oletetaan, että mallinnetaan satunnaista elektrodiparia, reunoihin on valittu symmetriasääntö, eikä virtaus kärsi tällöin reunan aiheuttamasta kitkasta.

Mallissa kammiossa virtaavan nesteen virtausnopeus määritellään vastaamaan lähelle artikkelissa annettuja arvoja. Artikkelissa virtausnopeus annetaan mikrolitroina minuutissa ja nopeudet ovat kymmenestä sataan. Koska artikkelin perusteella virtauskammio on 2 mm leveä ja $95 - 105 \mu\text{m}$ korkea, voidaan yhden loukun alueelle tulevan virtauksen voimakkuudeksi arvioida $0.55 \frac{\text{mm}}{\text{s}} - 5.5 \frac{\text{mm}}{\text{s}}$. Mallissa oletetaan, että sisään virtaava neste noudattaa Poiseullen virtauksen parabolista muotoa (ks. kuva 6.30).

Artikkelissa elektrodien potentiaali (V_{peak}) saa arvoja 1.08 V - 5.08 V yhden voltin välein. Mallissa jännitteen potentiaalihiippua ei vaihdella vaan arvo pysyy 5.0 V:ssa. Arvosta lasketaan V_{rms} -arvo kaavalla

$$V_{rms} = \frac{V_{peak}}{\sqrt{2}} = \frac{5.0V}{\sqrt{2}} = 3.535V. \quad (6.6)$$

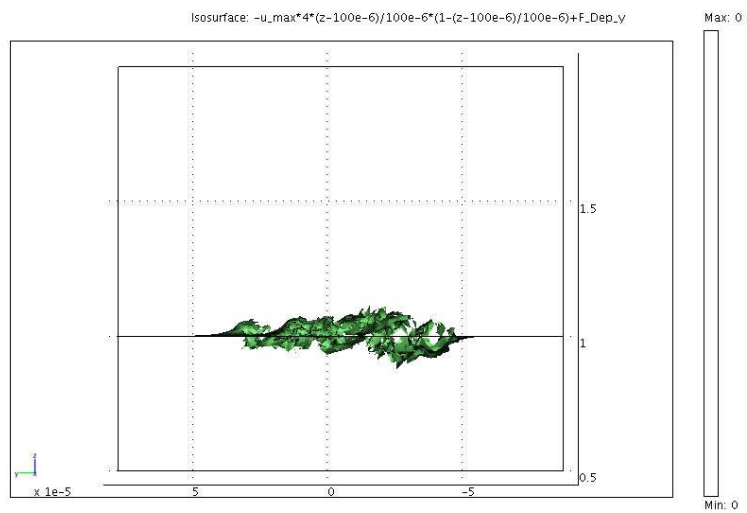


Kuva 6.31: Elektroforeettisen loukun potentiaalientät.

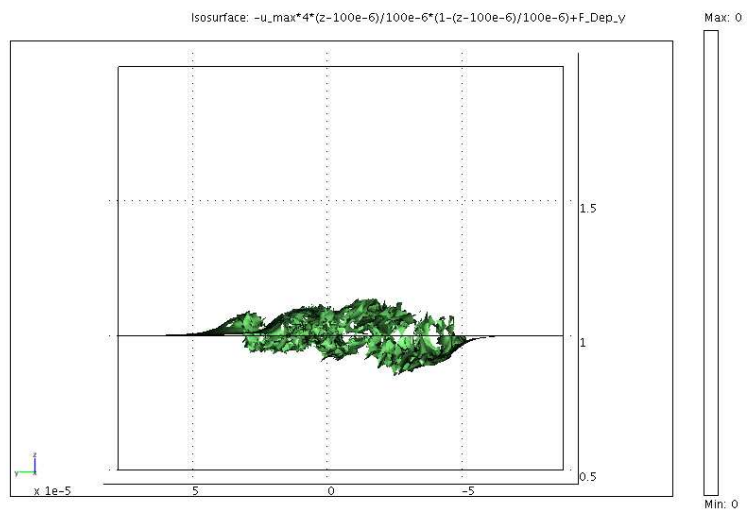
Jos potentiaalihiippua vaihdeltaisiin, Rosenthalin ja Voldhamin mukaan havaittaisiin sen aiheuttavan valikoituvuutta partikkelien koon suhteen. Lisää tietoa aiheesta löytyy [Rosenthal 04, s.14]. Elektrodienvaihtojännite on siniaaltoa, jonka taajuus on 5 Mhz. Kuvassa 6.31 esitetään loukun potentiaalientät.

Partikkelin koolla on suuri merkitys di-elektroforeettiseen virtaukseen. Artikkeleissa tutkitaan partikkeleita joiden halkaisija on $4.2 \mu m$, $8.2 \mu m$, $9.7 \mu m$, $14.2 \mu m$ ja $19.5 \mu m$. Kuvissa 6.32, 6.33, 6.34, 6.35 ja 6.36 esitetään vastaavien partikkelien virtausvoimien erotuksen nollataso. Kuvat ovat x-akselin suunnasta, siten että sisäänvirtaus on vasemmalta. Kuvista havaitaan, että mikäli partikkelin halkaisija kasvaa, partikkeliin vaikuttava y-suuntainen dep-virtaus ulottuu kauemmaksi. Kuvissa on käytetty suurinta tarkasteltavaa virtausnopeutta eli $100 \frac{\mu L}{min}$ ($5.5 \frac{mm}{s}$).

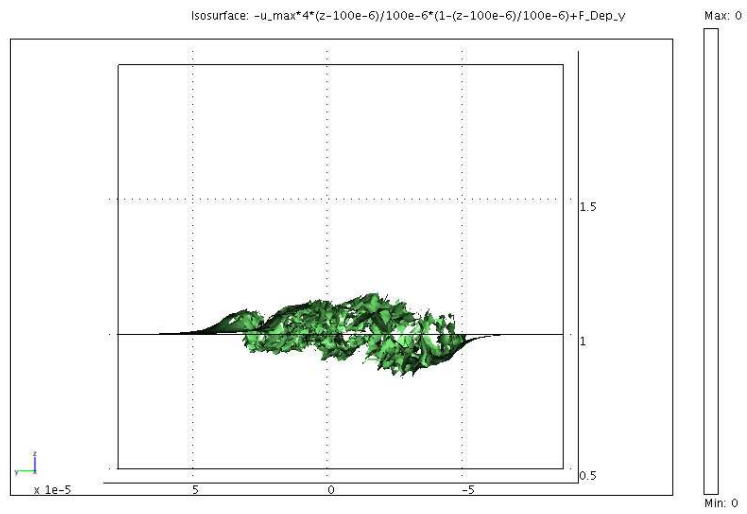
Partikkeliloukku on suunniteltu toimimaan siten, että ensin sisään virtaavan nesteen nopeus on hyvin pieni. Kun elektrodien potentiaalia nostetaan partikkelit hakeutuvat elektrodien luokse. Nostamalla virtauksen nopeutta voidaan ylimääräiset partikkelit huuhtoa pois loukusta ja tarkastella vain vangiksi jääneitä partikkeleita. Kuvissa 6.37, 6.38, 6.39, 6.40 ja 6.33 esitetään dep-virtauksen nollatason muutos $8.2 \mu m$ halkaisijan partikkelille. Kuvista havaitaan, että nostamalla virtausnopeutta



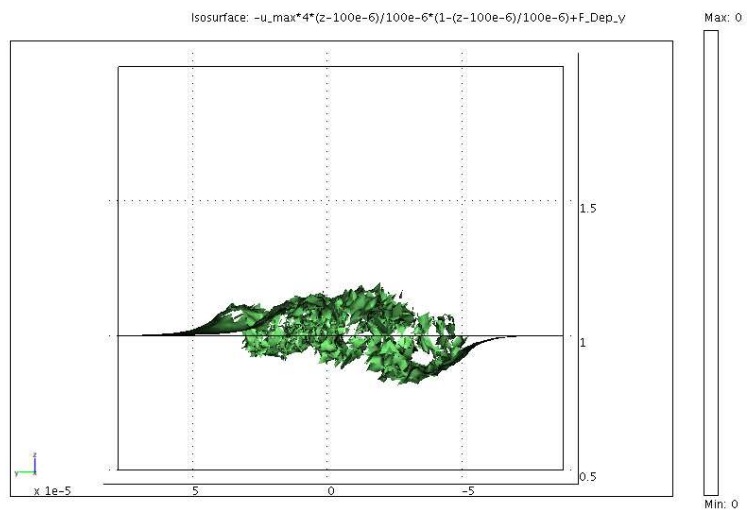
Kuva 6.32: Virtauksen nollakenttä partikkelille, jonka halkaisija on $4.2 \mu\text{m}$. Virtauksen nopeus on $5.5 \frac{\text{mm}}{\text{s}}$



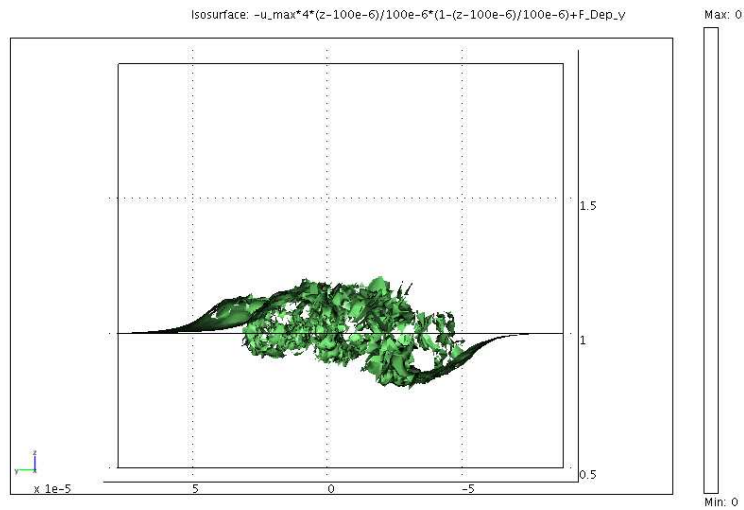
Kuva 6.33: Virtauksen nollakenttä partikkelille, jonka halkaisija on $8.2 \mu\text{m}$. Virtauksen nopeus on $5.5 \frac{\text{mm}}{\text{s}}$



Kuva 6.34: Virtauksen nollakenttä partikkelille, jonka halkaisija on $9.7 \mu\text{m}$. Virtauksen nopeus on $5.5 \frac{\text{mm}}{\text{s}}$



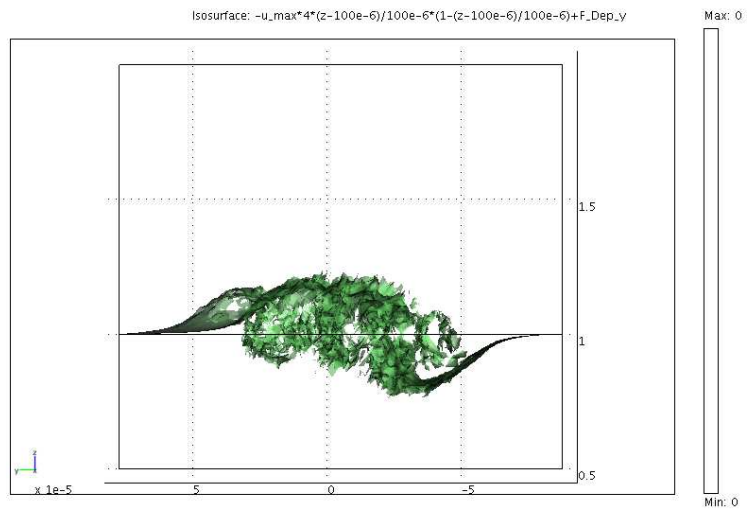
Kuva 6.35: Virtauksen nollakenttä partikkelille, jonka halkaisija on $14.2 \mu\text{m}$. Virtauksen nopeus on $5.5 \frac{\text{mm}}{\text{s}}$



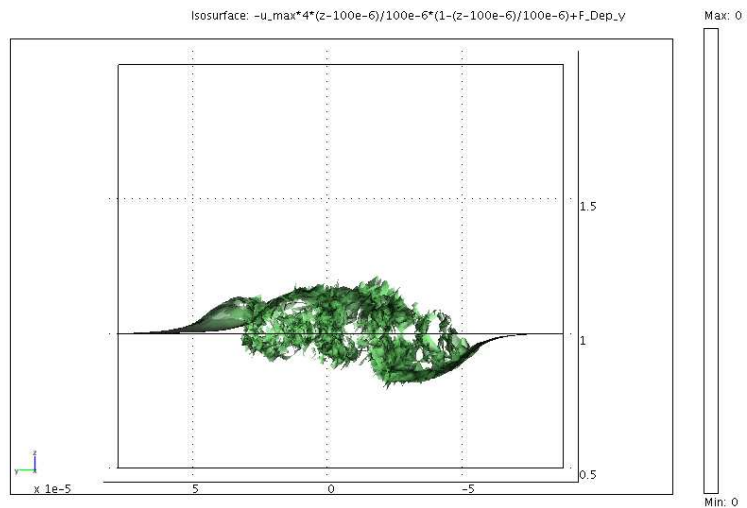
Kuva 6.36: Virtauksen nollakenttä partikkelille, jonka halkaisija on $19.5 \mu\text{m}$. Virtauksen nopeus on $5.5 \frac{\text{mm}}{\text{s}}$

dep-virtauksen vaikutus heikkenee. Loukussa vankina olevan partikkelin vankina pysyminen riippuu siis sekä sisäänvirtausnopeudesta, että partikkelin halkaisijasta.

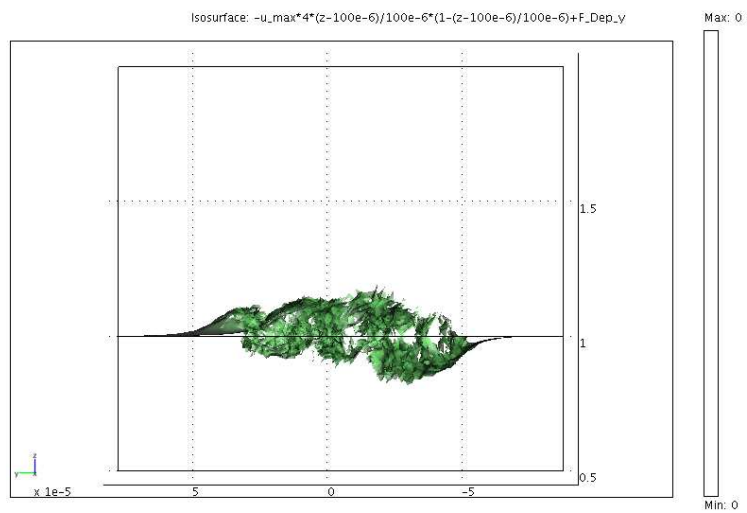
Di-elektroforeettisesta loukusta on liitteenä olevalla cd:llä kaksi videota (ks. liite E, videot 4A ja 4B). Molemmat videot esittävät dep-virtauksen nollatason muutosta sähkökentän muuttuessa. Videot eroavat toisistaan vain kameran katselukulman verran.



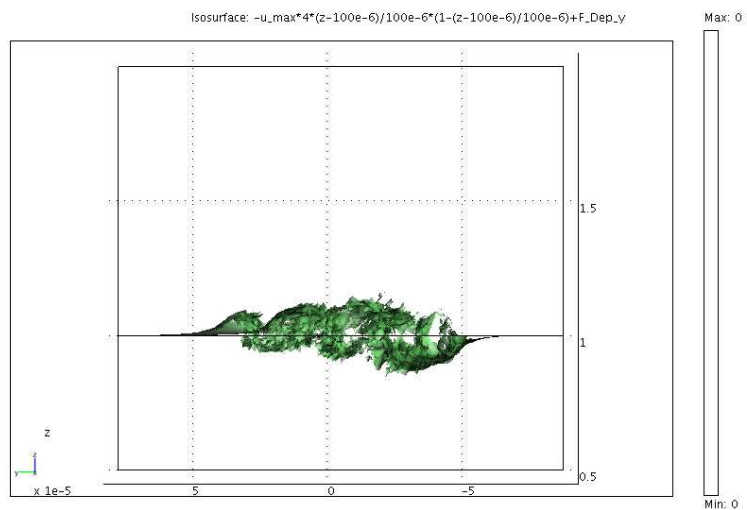
Kuva 6.37: Virtauksen nollakenttä partikkelille, jonka halkaisija on $8.2 \mu\text{m}$. Virtauksen nopeus on $0.55 \frac{\text{mm}}{\text{s}}$



Kuva 6.38: Virtauksen nollakenttä partikkelille, jonka halkaisija on $8.2 \mu\text{m}$. Virtauksen nopeus on $1.1 \frac{\text{mm}}{\text{s}}$



Kuva 6.39: Virtauksen nollakenttä partikkelille, jonka halkaisija on $8.2 \mu\text{m}$. Virtauksen nopeus on $2.2 \frac{\text{mm}}{\text{s}}$



Kuva 6.40: Virtauksen nollakenttä partikkelille, jonka halkaisija on $8.2 \mu\text{m}$. Virtauksen nopeus on $4.4 \frac{\text{mm}}{\text{s}}$

6.5 Analysointi

Tutkielmassa on mallinnettu neljä hyvin erilaista mikrovirtausta. Kaikissa mikrovirtauksissa perustana olivat Navier-Stokesin yhtälöt. Ehkä olennaisin huomio mikrovirtauksia mallinnettaessa on laskenta-ajan räjähdysmäinen kasvaminen siirryttäessä yksinkertaisista malleista hieman monimutkaisempiin. Liitteessä F esitetään näiden neljän mallin käyttämä laskenta-aika liitteen G mukaisella tietokoneella. Laskenta-ajoista nähdään, että kaikki tutkielmaan mukaan valitut mallit ratkesivat suhteellisen nopeasti. Kuitenkin moni tutkielman ulkopuolelle jätetty malli vaati laskenta-aikaa jopa 12 tuntia. Mukaan valittujen mallien yksi meriitti oli, että niissä laskenta-aikaan on yritetty vaikuttaa, joko tunnetut ilmiöt huomioiden (mallit 6.2 ja 6.3) tai minimoimalla tarkasteltavien ilmiöiden määrää (malli 6.4).

Ensimmäinen malli on tarkoitettu yksinkertaiseksi ja helpoksi perusmalliksi. Navier-Stokesin yhtälöitä tarvitaan melkein jokaisessa mikrovirtausmallissa. Malli on valittu siksi, että yksinkertaisen mallin kautta on aloittelevan helpompaa lähteä tutustumaan sekä ohjelmaan, että virtausmallinnukseen.

Toinen ja kolmas malli käyttävät samaa tekniikkaa eri ongelman ratkaisemiseen. Toisessa mallissa käytetään elektro-osmoosia virtausta vahventavana pumppuna ja kolmannessa elektro-osmoosin avulla sekoitetaan nestevirtaukset. Mallinnuksellisesti merkittävää näissä malleissa on se, että niissä lasketaan ensin sähkökenttä stationaarisesti ja sitten saatua tulosta käytetään Navier-Stokesin yhtälöiden ratkaisemiseen ajasta riippuvasti. Näin meneteltäessä säästetään huomattavasti laskenta-aikaa, eikä tuloksen tarkkuus kärsi yhtään.

Neljässä mallissa huomion arvoista on se, ettei mallia ole ennen toteutettu vastaavana FemLab ohjelmalla. Malli valittiin lähteen [Rosenthal 04] pohjalta, mutta mallinnus toteutettiin toisin kuin artikkelissa. Artikkelissa di-elektroforeesia tutkittiin lähinnä di-elektroforeettisten voimien sekä gravitaation, viskositeetti voimien ja nostovoimien kautta. Näin ajateltuna ongelmasta tulee laskennallisesti hyvin raskas, sillä se vaatii ainakin Navier-Stokesin yhtälöiden ratkaisemisen. Tutkielmaan mallin lähtökohdaksi valittiin partikkeliin vaikuttava virtausnopeus ja sen erotus

laminaarisesti virtavasta ympäröivästä nesteestä. Mallissa haluttiin tarkastella vain di-elektroforeettisen voiman muuttumista eri virtausnopeuksilla ja partikkeleiden halkaisijoilla, joten virtauskenttää ei tällöin tarvinnut laskea.

Dep-loukun elementtiverkko jouduttiin generoimaan muita malleja huomattavasti tiheämmäksi, jotta välttävä tulos saatiin aikaiseksi. Tästä huolimatta virtauskuvio jäi hieman karkeaksi ja mallin tulokset luultavasti heittävät jonkin verran kokeellisten tulosten arvosta.

Tutkielmaan valittiin sarja kuvia, jotka esittävät erikokoisten partikkeleiden virtauskentän nollatasoa eri nopeuksilla virtauksilla. Kuvasarjasta nähdään, että partikkelin koolla ja virtauksen voimakkuudella on vaikutusta vain muodostuvan kuvion pituus- tai korkeusskaalaukseen. Nollataso pysyy kuitenkin virtauskuviona hyvin samanlaisena kaikilla tutkituilla variaatioilla.

7 Yhteenveto

Tutkielmassa käsiteltiin mikrojärjestelmien virtausdynamiikan numeerista mallintamista. Aihetta tutkittiin tutustumalla ensin mikrojärjestelmiin yleisellä tasolla, jonka jälkeen käsiteltiin numeerisen mallintamisen yleisiä perusteita. Tämän jälkeen perehdyttiin yksityiskohtaisesti mikrovirtausdynamiikkaan, sekä mikrojärjestelmien elektrokinetiikkaan. Teorian pohjalta tutkielmaan mallinnettiin neljä erilaista mikrovirtausta. Malleista yksi on Navier-Stokesin virtaus, kaksi käsittelee elektro-osmoosia ja viimeinen on di-elektroforeettinen loukku. Mallien tiedostot ja videot ovat tutkielman liitteenä olevalla CD:llä.

A Navier-Stokesin kokoonpuristumattoman virtauksen FemLab parametrit.

Geometria 2D:

Suorakulmio	Leveys	2.0×10^{-3}	(m)
Suorakulmio	Korkeus	4.0×10^{-4}	(m)
Suorakulmio	Sijainti (SW)	$(0.8 \times 10^{-3}; 0.0)$	(m)
Ympyrä	Säde	0.1×10^{-3}	(m)
Ympyrä	Keskipiste	$(0.2 \times 10^{-3}; 0.2 \times 10^{-3})$	(m)

Geometria 3D:

2D malli pursutetaan (*extrude*) $4.0 \times 10^{-4}(m)$

Verkko:

Vapausasteet	7746
Reunaelementit	132
Elementit	1646
Heikoimman elementin laatu	0.5936

Ohjelmakohtaisia tietoja:

Moodi (tyyppi)	Incompressible Navier-Stokes
Moodi (nimi)	ns
Peruselementin tyyppi	Lagrange - P2 P1
Stressitensori	Total

Heikot vakiot	Off
Riippuvat muuttujat	u, v, p
Riippumattomat muuttujat	x, y, z
Muotofunktiot	$\text{shlag}(2, 'u'), \text{shlag}(2, 'v'), \text{shlag}(1, 'p')$

Pisteittäiset ehdot:

Pisteet	1-8
Paine (p_0)	0

Reunaehdot:

Reuna	2-3, 5-8	4	1
Tyyppi	Liukumaton	Ulosvirtaus / Paine	Sisään/Ulosvirtausnopeus
x-nopeus (u_0)	0	0	0.001
y-nopeus (v_0)	0	0	0
Paine (p_0)	0	0	0
Heikot vakiot	1	1	1

Alialue-ehdot:

Tiheys (ρ)	1000	$(\frac{kg}{m^3})$
Dynaaminen viskositeetti (η)	0.001	$(\frac{kg}{m \cdot s})$
Volyymin voima x-akseli (F_x)	0	
Volyymin voima y-akseli (F_y)	0	
Alialueen alustusarvo	1	
x-nopeus (u)	0	
y-nopeus (v)	0	
Paine (p)	0	

B Osmoottisen virtauksen FemLab parametrit

Vakiot:

Nimi	Yhtälö	Arvo	Yksikkö
V0	0.1	0.1	V
epsw	$80.2 \cdot 8.854 \cdot 10^{-12}$	$7.100908 \cdot 10^{-10}$	$\frac{as}{m}$
zet0	0.1	0.1	V
eta	0.001	0.001	$\frac{kg}{m \cdot s}$
rho	1000	1000	$\frac{kg}{m^3}$
omega	$2 \cdot \pi \cdot \text{freq}$	50.265482	$\frac{rad}{s}$
freq	8	8	$\frac{1}{s}$
t	0	0	s
U0	$1 \cdot 10^{-4}$	$1 \cdot 10^{-4}$	$\frac{m}{s}$

Geometria 2D:

Suorakulmio 1	Korkeus	$0.4 \times 10^{-5}(m)$
Suorakulmio 1	Leveys	$2.6 \times 10^{-5}(m)$
Suorakulmio 1	Sijainti (WS)	$(0; -0.4 \times 10^{-5})$
Suorakulmio 2	Korkeus	$0.15 \times 10^{-5}(m)$
Suorakulmio 2	Leveys	$0.3 \times 10^{-6}(m)$
Suorakulmio 2	Sijainti (WS)	$(-2.15 \times 10^{-6}); 1.25 \times 10^{-6}$
Suorakulmio 3	Korkeus	$0.15 \times 10^{-5}(m)$
Suorakulmio 3	Leveys	$0.3 \times 10^{-6}(m)$
Suorakulmio 3	Sijainti (WS)	$(-2.15 \times 10^{-6}); 1.985 \times 10^{-5}$

Geometria 3D:

2D malli pursutetaan (*extrude*) $0.4 \times 10^{-5}(m)$

Skalaariyhtälöt:

VTX $VTx \cdot \sin(\omega \cdot t)$
VTY $VTy \cdot \sin(\omega \cdot t)$
POTENTIAL $V \cdot \sin(\omega \cdot t)$

Verkko:

Vapausasteet 6692
Reunaelementtien määrä 68
Elementtien määrä 496
Heikoin elementin laatu 0.5136

Ohjelmakohtaisia tietoja (ns):

Moodi (Tyyppi) Incompressible Navier-Stokes
Moodi (Nimi) ns
Peruselementtityyppi Lagrange - P3 P2
Jännitetensori Total
Heikot vakiot Off
Riippuvat muuttujat u, v, p
Riippumattomat muuttujat x, y, z
Muotofunktiot shlag(3,'u'), shlag(3,'v'), shlag(2,'p')
Sisäreunat Aktiiviset

Pisteittäiset ehdot (ns):

Pisteet	1-12
Paine (p0)	0

Reunaehdot (ns):

Reuna	12	2-3	1
Tyyppi	Ulosvirtaus/Paine	Sisään/Ulos- virtausnopeus	Sisään/Ulos- virtausnopeus
x-nopeus (u0)	0	-(epsw*zet0/eta)*VTX	U0*6*s*(1-s)
y-nopeus (v0)	0	-(epsw*zet0/eta)*VTY	0
Paine (p0)	0	0	0

Alialue asetukset (ns):

Alialue	1	2-3
Muotofunktiot	shlag(3,'u')	shlag(3,'u')
	shlag(3,'v')	shlag(3,'v')
	shlag(2,'p')	shlag(2,'p')
	shlag(2,'V')	shlag(2,'V')
Tiheys (ρ)	rho	8700 (Kupari)
Dynaaminen viskositeetti (η)	eta	1

Ohjelmakohtaisia tietoja (dc):

Moodi (Tyyppi)	Conductive Media DC (MEMS Module)
Moodi (Nimi)	dc
Peruselementtityyppi	Lagrange - Quadratic

Heikot vakiot	Off
Riippuvat muuttujat	V
Riippumattomat muuttujat	x, y, z
Muotofunktiot	shlag(2,'V')
Sisäreunat	Aktiiviset

Pisteittäiset ehdot (dc):

Pisteet	1-12
Pisteittäinen jännitelähde (Qj0)	0

Reunaehdot (dc):

Reuna	1-3,12	4-7	8-11
Tyyppi	Insulaatio	Potentiaali	Potentiaali
Maksimijännite		V0	-V0

Alialue asetukset (dc):

Alialue	1	2,3
Muotofunktio	shlag(3,'u')	shlag(3,'u')
	shlag(3,'v')	shlag(3,'v')
	shlag(2,'p')	shlag(2,'p')
	shlag(2,'V')	shlag(2,'V')
Johtavuus (σ)	0.11845	5.998e7 (Kupari)

Materiaalitiedot: Kupari

Johtavuus (σ)	5.998e7
Lämmön johtavuus (k)	400
Suhteellinen läpäisevyys (μr)	1
Suhteellinen permittiivisyys (ϵr)	1
Tiheys (ρ)	8700
Lämpökapasiteetti (C)	385
Poisson'in arvo (ν)	0.35
Young'in modulo (E)	110e9

C Osmoottisen sekoittajan FemLab parametrit

Vakiot:

Nimi	Yhtälö	Arvo	Yksikkö
V0	0.1	0.1	V
epsw	$80.2 * 8.854 \times 10^{-12}$	7.100908×10^{-10}	$\frac{As}{m}$
zet0	0.1	0.1	V
eta	0.001	0.001	$\frac{kg}{m \cdot s}$
rho	1000	1000	$\frac{kg}{m^3}$
omega	$2 * pi * freq$	50.265482	$\frac{rad}{s}$
freq	8	8	$\frac{1}{s}$
t	0	0	s
U0	1.0×10^{-4}	1.0×10^{-4}	$\frac{m}{s}$

Geometria:

Suorakulmio	Leveys	$80 \times 10^{-6}(m)$
Suorakulmio	Korkeus	$10 \times 10^{-6}(m)$
Suorakulmio	Sijainti	(0, 0)
Ympyrä	Säde	$0.2 \times 10^{-5}(m)$
Ympyrä	Sijainti	0.0
Elektrodi 1	Sijainti	$(5.0 \times 10^{-6}, 5.0 \times 10^{-6})$
Elektrodi 1	Pituus	$1.0 \times 10^{-6}(m)$
Elektrodi 2	Sijainti	$(-5.0 \times 10^{-6}, 5.0 \times 10^{-6})$
Elektrodi 2	Pituus	$1.0 \times 10^{-6}(m)$
Elektrodi 3	Sijainti	$(5.0 \times 10^{-6}, -5.0 \times 10^{-6})$
Elektrodi 3	Pituus	$1.0 \times 10^{-6}(m)$
Elektrodi 4	Sijainti	$(-5.0 \times 10^{-6}, -5.0 \times 10^{-6})$
Elektrodi 4	Pituus	$1.0 \times 10^{-6}(m)$

Skalaariyhtälöt:

VTX	$VTx \cdot \sin(\omega \cdot t)$
VTY	$VTy \cdot \sin(\omega \cdot t)$

Verkko:

Vapausasteet	33964
Reunaelementtien määrä	370
Elementtien määrä	5026
Heikoin elementin laatu	0.4952

Ohjelmakohtaisia tietoja (ns):

Moodi (Tyyppi)	Incompressible Navier-Stokes
Moodi (Nimi)	ns
Peruselementtityyppi	Lagrange - P2 P1
Jännitetensori	Total
Heikot vakiot	Off
Riippuvat muuttujat	u, v, p
Riippumattomat muuttujat	x, y, z
Muotofunktiot	shlag(2,'u'), shlag(2,'v'), shlag(1,'p')

Reunaehdot (ns):

Reuna	16	2-15,17-20	1
Tyyppi	Ulosvirtaus/Paine	Sisään/Ulos- virtausnopeus	Sisään/Ulos- virtausnopeus
x-nopeus (u0)	0	$-(\text{epsw} \cdot \text{zet0} / \text{eta}) \cdot VTX$	$U0 \cdot 6 \cdot s \cdot (1-s)$

y-nopeus (v0)	0	$-(\text{epsw} \cdot \text{zet0} / \text{eta}) \cdot \text{VTY}$	0
Paine (p0)	0	0	0

Pisteittäiset ehdot (ns):

Pisteet	1-20
Paine (p0)	0

Alialue asetukset (ns):

Alialue	1
Muotofunktiot	shlag(2,'u')
	shlag(2,'v')
	shlag(1,'p')
	shlag(2,'V')
Tiheys (ρ)	rho
Dynaaminen viskoositeetti (η)	eta

Ohjelmakohtaisia tietoja (dc):

Moodi (Tyyppi)	Conductive Media DC (MEMS Module)
Moodi (Nimi)	dc
Peruselementtityyppi	Lagrange - Quadratic
Heikot vakiot	Off
Riippuvat muuttujat	V
Riippumattomat muuttujat	x, y, z
Muotofunktiot	shlag(2,'V')

Pisteittäiset ehdot (dc):

Pisteet	1-20
Pisteittäinen jännitelähde (Qj0)	0

Reunaehdot (dc):

Reuna	1-5,8,9,12-16	17-20	7,10	6,11
Tyyppi	Insulaatio	Maa	Potentiaali	Potentiaali
Maksimijännite			V0	-V0

Alialue asetukset (dc):

Alialue	1
Muotofunktio	shlag(2,'u')
	shlag(2,'v')
	shlag(1,'p')
	shlag(2,'V')
Johtavuus (σ)	sigmaw

D Di-elektroforeettisen loukun FemLab parametrit

Geometria 2-D:

Kanava

Suorakulmio	Leveys	200e-6 (m)
Suorakulmio	Korkeus	165e-6 (m)
Suorakulmio	Sijainti	SW (0,-87.5e-6)

Elektrodi 1

Suorakulmio	Leveys	200e-6 (m)
Suorakulmio	Korkeus	10e-6 (m)
Suorakulmio	Sijainti	SW (0,-37.5e-6)

Elektrodi 2

Suorakulmio	Leveys	200e-6 (m)
Suorakulmio	Korkeus	10e-6 (m)
Suorakulmio	Sijainti	SW (0,0)

Yhdiste:

Suorakulmio	Leveys	45e-6 (m)
Suorakulmio	Korkeus	45e-6 (m)
Suorakulmio	Sijainti	SW (77.5e-6,-17.5e-6)

Pois:

Suorakulmio	Leveys	25e-6 (m)
Suorakulmio	Korkeus	25e-6 (m)
Suorakulmio	Sijainti	SW (87.5e-6,-7.5e-6)

Geometria 3-D:

Pursuta (extrude) kanavaa 100 μ m ylös

Pursuta (extrude) kanavaa 50 μ m alas

Upota (embed) elektrodit 1 ja 2 geometriaan 2

Vakiot:

Nimi	Yhtälö	Arvo	Yksikkö
Vrms	$V_p/\sqrt{2}$	3.535534	V
u_max	55.0e-4	0.0055	$\frac{m}{s}$
rho_m	1000	1000	$\frac{kg}{m^3}$
eta_m	1.08e-3	0.00108	$\frac{kg}{m \cdot s}$
rho_p	1062	1062	$\frac{kg}{m^3}$
epsilon_p	2.5	2.5	
epsilon_m	80	80	
sigma_p	2e-4	2e-4	$\frac{1}{\Omega m}$
sigma_m	0.01	0.01	$\frac{1}{\Omega m}$
size_p	4.1e-6	4.1e-6	(m)
Vp	5.0	5	V
omega	$2 \cdot \pi \cdot 5E6$	3.141593e7	

Skalaariyhtälöt:

Nimi	Yhtälö
Clausius	$\frac{(\epsilon_{p_star} - \epsilon_{m_star})}{(\epsilon_{p_star} + 2 \cdot \epsilon_{m_star})}$
epsilon_p_star	$\epsilon_p + \sigma_p / (j \cdot \omega)$
epsilon_m_star	$\epsilon_m + \sigma_m / (j \cdot \omega)$
Rk	real(Clausius)
Udep_x	$2 \cdot (V_x \cdot V_{xx} + V_y \cdot V_{yx} + V_z \cdot V_{zx})$
Udep_y	$2 \cdot (V_x \cdot V_{xy} + V_y \cdot V_{yy} + V_z \cdot V_{zy})$
Udep_z	$2 \cdot (V_x \cdot V_{xz} + V_y \cdot V_{yz} + V_z \cdot V_{zz})$
U_Dep_x	$(1 / (3 \cdot \eta_m)) \cdot \text{size}_p \cdot \text{size}_p \cdot \epsilon_m \cdot \epsilon_{0_esm} \cdot Rk \cdot Udep_x$
U_Dep_y	$(1 / (3 \cdot \eta_m)) \cdot \text{size}_p \cdot \text{size}_p \cdot \epsilon_m \cdot \epsilon_{0_esm} \cdot Rk \cdot Udep_y$
U_Dep_z	$(1 / (3 \cdot \eta_m)) \cdot \text{size}_p \cdot \text{size}_p \cdot \epsilon_m \cdot \epsilon_{0_esm} \cdot Rk \cdot Udep_z$

Verkko:

Vapausasteet	105172
Reunaelementtien määrä	438
Elementtien määrä	7526
Heikoin elementin laatu	0.3106

Ohjelmakohtaisia tietoja (esm):

Moodi (Tyyppi)	Electrostatics (MEMS Module)
Moodi (Nimi)	esm
Peruselementtityyppi	Lagrange - Quadratic
Heikot vakiot	Off
Riippuvat muuttujat	V
Riippumattomat muuttujat	x,y,z
Muotofunktiot	shlag(2,'V')
Sisäreunat	Aktiiviset

Pisteittäiset ehdot (esm):

Pisteet	1-32
Pisteittäinen jännitelähde (Q0)	0

Reunaehdot (esm):

Reuna	1-5,12-13,15-16	7
Tyyppi	Nolla / sym- metria	Maa

Alialue asetukset (dc):

Alialue	1
Muotofunktiot	shlag(2,'V') sh- lag(2,'V')

Materiaalitiedot: Borosilicate

Lämmön johtavuus (k)	1.13
Suhteellinen permittiivisyys (ϵ_r)	4.8
Tiheys (ρ)	2230
Lämpökapasiteetti (C)	754
Poisson'in arvo (ν)	0.20
Young'in modulo (E)	63e9

E Videoiden ja mallien tiedostonimet

Malli 1A Incompressible_Navier_Stokes_flow_in_a_Channel.fl

Malli 1B Incompressible_Navier_Stokes_in_a_Channel_3D.fl

Malli 2A Electro_Osmotic_Flow_in_Channel.fl

Malli 2B Electro_Osmotic_Flow_in_Channel_3D.fl

Malli 3 Osmotic_Flow_Mixer.fl

Malli 4 Di_electro_phoretic_flow.fl

Video 1A Incompressible_Navier_Stokes_Flow_in_a_Channel.avi

Video 1B Incompressible_Navier_Stokes_Flow_in_a_Channel_3D.avi

Video 2A Osmotic_Flow_in_a_Microchannel_Potentials.avi

Video 2B Osmotic_flow_3D.avi

Video 2C Osmotic_flow_in_channel.avi

Video 3 Osmotic_flow.avi

Video 4A Dep-zero-field.avi

Video 4B Dep-zero-fields3D.avi

F Ratkaisuihin kulunut aika

Navier-Stokesin virtaus kanavassa 2D

Navier-Stokesin yhtälöt (Direct umfpackm, stat.) 3.024 s.

Navier-Stokesin virtaus kanavassa 3D

Navier-Stokesin yhtälöt (GMRES/Incomplete LU, stat.) 102.195 s.

Elektro-osmoottinen virtaus 2D

Navier-Stokesin yhtälöt ja DC (Direct umfpack, time-dep.) 37.96 s.

Elektro-osmoottinen virtaus 3D

DC (Direct umfpack, stat.) 7.82 s.

Navier-Stokesin yhtälöt (GMRES/Incomplete LU, stat.) 333.24 s.

Elektro-osmoottinen sekoittaja

DC (Direct umfpack, time-dep.) 7.708 s

Navier-Stokesin yhtälöt (Direct umfpack, time-dep.) 116.832 s.

Elektroforeettinen loukku

Elektrostatiikka (GMRES/Incomplete LU, stat.) 254.172 s.

G Mallinnuskoneen tiedot

model name	AMD Athlon(tm) XP 2500+
cpu MHz	1829.797
cache size	512 KB
Memory:	904696k/917504k
Motherboard	Msi: K7N2-L Nforce 2
Harddisk	80 Gb Maxtor
OS	Debian Linux (Woody)
Kernel	2.6.6
Swapmemory	1388 Mb
System CPU time	1-2%
Computing CPU time	98-99%

H Lisätietoja lähteistä

- [Aromaa 01] TieVie II -koulutus: Sähkökemiallisten mittausten esimerkikiansio. Todella hyvä lähde elektro-osmoosin ja elektroforesin perusteisiin.
- [Babuska 01] Perusteos FEM-menetelmästä sekä menetelmän luotettavuusarviointeja.
- [Bailey 04] Artikkelin Navier-Stokesin yhtälöiden luotettavuudesta virtausten mallinnuksessa.
- [CSC 04] Elmer on CSC:n julkaisema mallinnustyökalu.
- [Feynman 60] Maailmankuulu artikkeli, jossa Feynman esittelee tulevaisuuden vision mikro ja nano laitteista. Tästä kaikki sai alkunsa.
- [Freedman 00] Modernin fysiikan perusteos.
- [Gad-el Hak 01] Jykevä perusteos, jossa käsitellään sekä taustaa, perusteita, valmistustekniikoita, että sovellusalueita. Kirja on kasattu alan tunnetuimpien tutkijoiden artikkeleista ja siitä löytyy laajasti tietoa jokaiselta mikrojärjestelmien eri sektorilta.
- [Grace 02] Artikkelin autoissa olevien mikrojärjestelmien markkinoiden kehittymisestä.
- [Grace 04] Mikrojärjestelmien markkinatilanteen arviointiartikkeli vuodelta 2004.
- [Heino 03] Diplomityö mikrojärjestelmien koneistamisesta. Hyvä kuvaus eri tekniikoista ja niiden käyttämisestä mikrojärjestelmiä rakennettaessa.
- [Hämäläinen 94] Perusteet elementtimenetelmästä ja virtauslaskennasta hyvässä paketissa suomeksi. Aloittelijan kannattaa aloittaa tästä.

- [Kallio 01] Mikrosysteemitekniikan perusteet lyhyesti suomennettuna versiona. Erittäin hyvä kirja aloittaa mikrojärjestelmiin tutustuminen.
- [Madou 97] Kappale mikrojärjestelmän märkäetsauksesta.
- [Meinhart 03] Artikkelista löytyy Di-elektroforeesin perusteet ja sen pohjalta on mallinnettu viimeinen tutkielman malleista.
- [Molho 98] Elektroforeesin ja elektro-osmoosin teoriaa.
- [Murtomäki 04] Kurssin luentojen kalvoja.
- [Mäkinen 99] Numeeriset menetelmät -kurssin opetusmateriaali.
- [Nguyen 02] Mikrofluidistiikan perusteos. Etenee selkeästi johdannosta, fluidistiikan teoriaan ja valmistusmenetelmiin, jonka jälkeen käydään kappaleittain eri fluidistiikan osa-alueet läpi: venttiilit, pumput, sensorit ja filtrit. Asiat esitetty kirjassa erittäin johdonmukaisesti.
- [Nurmi 02] Suomen sivistyssanakirja termien virallisten suomennosten takia.
- [Pelesko 03] Kirja käsittelee mikromaailman ilmiöitä hyvin pintapuolisesti. Suunnattu erityisesti asiaan tutustuville lukijoille.
- [Pennanen 04] Pro gradu tutkielma, jossa käsitellään yksityiskohtaisesti stokesin virtausmallinnukset perusteet.
- [Pennanen 05] Esitelmäkalvot mikrovirtauksen perusteista.
- [Purmonen 04] Differentiaali- ja integraalilaskentaa 1 -kurssin oppikirja. Kirja sisältää matemaattiset määritelmät differentiaali- ja integraalilaskelle.
- [Reynolds 83] Artikkel, jossa Osbourne Reynolds esittelee perusteet Reynoldsin numerolle.
- [Rosenthal 04] Viimeisen mallin toinen peruslähde. Esittelee yksityiskohtaisesti n-DEP loukun ja siihen liittyviä kokeellisia tuloksia.

- [Saad 00] Kirja josta löytyy suurin osa FemLabin ratkaisumenetelmien algoritmeista (mm. GMRES ja incomplete LU).
- [Sarajärvi 04] Jyväskylän yliopiston tietotekniikan laitoksen aikaisempi julkaisu liittyen osittaisdifferentiaaliyhtälöihin ja FemLab-ohjelmaan.
- [Senturia 01] Oppilaitosten, yliopistojen yleisimmin maailmalla käyttämä MEMS-aiheinen oppikirja. Hieman sekava.
- [Tiihonen 91] Perusteet osittaisdifferentiaaliyhtälöiden ratkaisemiselle.
- [White 99] Virtausdynamiikan perusteos.

Lähteet

- [Aromaa 01] Jari Aromaa. *Sähköinen kaksoiskerros*. WWW: <http://www.hut.fi/~jaromaa/Tievie/Esimerkkikansio/Teoriaa/kaksois.htm>, 12 2001.
- [Babuska 01] Ivo Babuska & Theofanis Strouboulis. *The finite element method and its reliability*. Oxford University Press, inc., New York, 2001.
- [Bailey 04] Christine L. Bailey, Robert W. Barber & David R. Emerson. *Is it safe to use Navier-Stokes for gas microflows*. In *Eccomas 2004: Book of Abstracts*, volume 2, page 225, Jyväskylä, 7 2004. The European community on computational methods in applied sciences.
- [Com 04a] Comsol AB, Lauttasaarentie 52, FIN-00200 Helsinki. *Femlab Model library*, version 3.0 edition, 1 2004.
- [Com 04b] Comsol AB, Lauttasaarentie 52, FIN-00200 Helsinki. *FemLab Modelling guide*, version 3.0 edition, 1 2004.
- [Com 04c] Comsol AB, Lauttasaarentie 52, FIN-00200 Helsinki. *FemLab User's guide*, version 3.0 edition, 1 2004.
- [Corporation. 05] CFD Research Corporation. *CFDRC*. WWW: <http://www.cfdrc.com/>, 5 2005.
- [CSC 04] CSC. *Elmer - Finite Element Software for Multiphysical Problems*. WWW: <http://www.csc.fi/elmer/>, 8 2004.
- [Delorme 01] Bernard Delorme. *Scientific Documentation for the Tracker VA*. WWW: http://www.itconceptfr.com/BrochureTracker/Documentation_Tracker_VA.htm, 8 2001.
- [Feynman 60] R.P. Feynman. *There's Plenty room at the Bottom*. Caltech Engineering and Science, 1960.

- [Freedman 00] Roger A. Freedman & Hugh D. Young. University physics with modern physics. Addison Wesley Publishing Company, 10th edition, December 2000.
- [Gad-el Hak 01] Mohamed Gad-el Hak. The MEMS Handbook, volume 7 of *Handbook Series for Mechanical Engineering*. Virginia Commonwealth University, Richmond, USA, September 2001.
- [Grace 02] Roger H. Grace. *Application Opportunities Of MEMS/MST In The Automotive Market: The Great Migration From Electromechanical And Discrete Solutions*. WWW: <http://www.rgrace.com/Papers/auto2.html>, 9 2002.
- [Grace 04] Roger H. Grace. *Commercialization issues of MEMS/MST/micromachines an updated industry report card on the barriers to commercialization*. WWW: <http://www.rgrace.com/Papers/Reportcard.html>, 10 2004.
- [Hayes 04] Donald J. Hayes & Ting Chen. *Next generation optoelectronic components enabled by direct write microprinting technology*. WWW: http://www.microfab.com/about/papers/spie_oe_2004.pdf, 4 2004.
- [Heino 03] Harri Heino. Mikrotyöstötekniikat ja pienten yksityiskohtien suurnopeus koneistus. Master's thesis, Helsingin Teknillinen korkeakoulu, 2 2003.
- [Hämäläinen 94] Jari Hämäläinen & Jari Järvinen. Elementtimenetelmä virtauslaskennassa. CSC - Tieteellinen laskenta, Yliopistopaino, Jyväskylä, 1994.
- [Kallio 01] Pasi Kallio. Johdatus mikrosysteemitekniikkaan. Tampereen teknillinen korkeakoulu, 5 2001.

- [Karkela 04] Lea & al. Karkela. Maol-aulukot. Otava Kustannusosakeyhtiö, 2004.
- [Lemkin 97] M.A. Lemkin, B.E. Boser, D Auslander & J.H. Smith. *A 3-Axis Force Balanced Accelerometer Using a Single Proof-Mass*. volume 2, pages 1185–1188, Chicago, June 16-19 1997. International Conference on Solid-State Sensors and Actuators, Institute of Electrical and Electronics Engineers, IEEE. WWW: http://www.sandia.gov/mstc/technologies/micromachines/tech-info/bibliography/docs/4b2_01.pdf.
- [Madou 97] Marc J. Madou. Fundamentals of microfabrication, chapitre Wet bulk micromachining. CRC press, Boca Raton, 1997.
- [Meinhart 03] Carl Meinhart, Dazhi Wang & Kimberly Turner. *Measurement of AC Electrokinetic flows*. Biomedical microdevices, Kluwer academic publishers, vol. 5, no. 2, pages 139–145, 6 2003.
- [Molho 98] Joshua Molho & et al. *Fluid Transport Mechanism in microfluidic devices*. WWW: http://mems.stanford.edu/%7eaeah/publications/Molho_asme98.pdf, 1998.
- [Murtoimäki 04] Lasse Murtoimäki. *Fysikaalinen kemia II – Luentokalvot/Lecture notes*. WWW: <http://www.hut.fi/Units/PhysicalChemistry/op-luennot/Luento10.ppt>, 3 2004.
- [Mäkinen 99] Raino A.E. Mäkinen. Numeeriset menetelmät. Luentomoniste 1. Jyväskylän yliopistopaino, Jyväskylä, 1999.
- [Nguyen 02] Nam-Trung Nguyen & Steven T. Wereley. Fundamentals and applications of microfluidics (artech house microelectromechanical systems library). MEMS Series. Artech House Publishers, October 2002.

- [Nurmi 02] Timo Nurmi, Ilkka Rekiaro, Päivi Rekiaro & Timo Sorjanen. Gummerruksen suuri sivistyssanakirja. Gummerrus, Jyväskylä, 2002.
- [Pelesko 03] John A. Pelesko & David H. Bernstein. Modelling MEMS and NEMS. Chapman & Hall/CRC, N.W. Corporate Blvd., Boca Raton, Florida 33431, 2003.
- [Pennanen 04] Anssi Pennanen. Algebraalisen monihilamenetelmän käyttö Stokesin yhtälöiden ratkaisemisessa. Master's thesis, Jyväskylän yliopisto, Jyväskylä, 6 2004.
- [Pennanen 05] Jari Pennanen. *Microfluidics*. WWW: <http://www.ac.tut.fi/aci/courses/7606100/mat/pdf/06Pennanen.pdf>, 2 2005.
- [Purmonen 04] Veikko T. Purmonen. Differentiaali- ja integraalilastentaa usean reaaliuuttujan funktioille, volume 1 of *Luentomoniste*. Jyväskylän yliopisto matematiikan ja tilastotieteen laitos, Jyväskylä, 2004.
- [Reynolds 83] Osbourne Reynolds. *An experimental investigation of the circumstances which determine whether motion of water shall be direct or sinuous and of the law of resistance in parallel channels*. Philosophical Transactions of the Royal Society, 1883.
- [Rosenthal 04] Adam Rosenthal & Joel Voldman. *Dielectrophoretic Traps for single-particle patterning*. Biophys J. BioFAST, vol. doi:10.1529/biophysj.104.049684, page 36, 11 2004.
- [Saad 00] Yousef Saad. Iterative methods for sparse linear systems. Society for Industrial and Applied Mathematics, SIAM, Philadelphia, 2nd edition, January 2000. WWW: <http://www-users.cs.umn.edu/saad/books.html>.

- [Sarajärvi 04] Jaana Sarajärvi. Osittaisdifferentiaaliyhtälöiden ratkaiseminen femlab-ohjelmalla. Master's thesis, Jyväskylän yliopisto, Jyväskylä, 12 2004.
- [Senturia 01] Stephen D. Senturia. *Microsystem design*. Kluwer Academic Publishers, 1 2001.
- [Tervo 03] Jouko Tervo & Marko Vauhkonen. Elementtimenetelmän perusteita. Kuopion Yliopisto, soveltavan fysiikan laitos, 1 2003. WWW: <http://venda.uku.fi/studies/virtual/FEM/lectures/main.pdf>.
- [Tiihonen 91] Timo Tiihonen. *Matemaattinen mallintaminen*. Luentomoniste 16. Jyväskylän yliopisto, Jyväskylä, 1991.
- [Trimmer 89] William Trimmer. *Microrobots and Micromechanical Systems – Scaling of Micromechanical Devices*. *Sensors and Actuators*, vol. 19, no. 3, pages 267–287, 9 1989.
- [Veijola 99] Timo Veijola. *Equivalent Circuit Models for Micromechanical Inertial Sensors*. PhD thesis, Helsinki University of Technology, Espoo, Finland, 1 1999. WWW: <http://www.aplac.hut.fi/publications/ct-39/ct-39.pdf>.
- [Weisstein 05a] Eric W. Weisstein. *Mach Number*. WWW: <http://scienceworld.wolfram.com/physics/MachNumber.html>, 2005.
- [Weisstein 05b] Eric W. Weisstein. *Navier-Stokes Equation*. WWW: <http://scienceworld.wolfram.com/physics/Navier-StokesEquations.html>, 2005.

- [Weisstein 05c] Eric W. Weisstein. *Reynolds Number*. WWW:
[http://scienceworld.wolfram.com/physics/
ReynoldsNumber.html](http://scienceworld.wolfram.com/physics/ReynoldsNumber.html), 2005.
- [White 99] Frank M. White. Fluid mechanics. McGrae-Hill series in mechanical engineering. McGraw-Hill international editions, Boston, 4 edition, 1999.

Sanasto

a priori

Fil. edeltäkäsin, ennen kokemusta havaittu (vastakohta: a posteriori)

Absorbaatio

Imeytyminen

Airbag

Engl. turvatyyny, auton ohjauspyörään, kojelautaan, oviin tms. sijoitettu turvalaite, joka törmäystilanteessa täyttyy kaasulla ja suojaa kuljettajaa tai matkustajaa.

Alkuehto

Tila, josta osittaisdifferentiaali yhtälöä lähdetään ratkaisemaan.

Ankarat olosuhteet (*Harsh Environment*)

Olosuhde, jossa mikrojärjestelmä on erityisen suuresti ympäristön olosuhteiden vaikutussa, esim. avaruus, merenpohja, tyhjiö.

Boltzmannin vakio

$1.38 \times 10^{-23} \frac{J}{K}$ [Karkela 04]

Boltzmannin yhtälö (*Boltzman equation*)

Eräs virtausdynamiikan mallinnusmenetelmä kun Knudsenin numero on suurempi kuin 0.1.

Burnetin yhtälö (*Burnett equation*)

Eräs virtausdynamiikan mallinnusmenetelmä kun Knudsenin numero on suurempi kuin 0.1

Cauchy ehto

Keskeinen osittaisdifferentiaaliyhtälöiden reunaehto.

Determinismi

Näkemyks, jonka mukaan kaikki tapahtumat ovat luonnon lakien määräämiä
[Nurmi 02]

Dimensioton, (*dimensionless*)

Ulottuvuudeton, mitaton, (yksikötön)

Dirichletin ehto

Keskeinen osittaisdifferentiaaliyhtälöiden reunaehto.

DNA, (*deoksiribonukleinihappo*)

Kaikissa eläin- ja kasvisoluissa esiintyvä nukleiinihappo, josta geenit eli perintökäijät muodostuvat.

Dominoida

Hallita

DSMC (*Direct Simulation Monte Carlo*)

Eräs virtausdynamiikan mallinnusmenetelmä kun Knudsenin numero on suurempi kuin 0.1

Elastisuus

Kimmoisuus, joustavuus

Elektro-osmoosi (*Electro-osmosis*)

Elektrokineetinen virtaustyyppi.

Elektrodi

Sähkölaitteen osa, joka johtaa virtaa ei-metalliseen aineeseen tai siitä takaisin.

Elektroforeesi, (*Electrophoresis*)

Biok, sähköerottelu.

Elektrokinetiikka (*Electro kinetics*)

Fys. yleistermi jolla kuvataan erilaisten sähkökenttien vuorovaikutusta.

Elektrolyytti

Sähköä johtavia aineita, joissa virtaa kuljettavat ionit.

Elektrolyyttinen kasvatus

Mikrotyöstömenetelmä

Elementtimenetelmä (*Finite Element Method*)

Mallinnusmenetelmä, jossa haluttu geometria pilkotaan tiheämmäksi verkoksi. Jokaiselle verkon alkiolla lasketaan tarvittavat tulokset ja yleensä saadut tulokset interpoloidaan siistiksi ratkaisuksi.

Entropia (*Entropy*)

Hajaantumisaste, haje.

Epälineaarinen

Korkeamman asteen (kuin ensimmäisen) yhtälö

Epästabiili

Epävaka, epävakava, horjuva, epävarma, pysymätön, epätasainen.

Etsaus

Metallin syövyttäminen kuvan painamiseksi paperille

Eulerin yhtälö (*Euler's equation*)

Navier-stokesin yhtälöiden yksinkertaisin erikoistapaus ideaaliselle nesteelle/kaasulle.

FemLab

Comsol Oy:n tekemä mallinnustyökalu, joka käyttää FEM-menetelmää osittaisdifferentiaaliyhtälöiden ratkaisemiseen.

Foreesi

Pintaan kiinnittyvä liikkuminen.

Frekvenssi (*Frequency*)

Taajuus

Gravitaatio

Fys. painovoima.

Gyroskooppi

Hyrrälaite, hyrrään perustuva mittauslaite

Helmholzin taso (*Helmholtz plane*)

Sähköisen kaksoiskerroksen yksi komponentti.

Hila-Boltzman -menetelmä

Eräs virtausdynamiikan mallinnusmenetelmä kun Knudsenin numero on suurempi kuin 0.1

Ideaalinen neste (*Ideal fluid, inviscid fluid*)

Neste, jonka kinemaattinen viskositeetti on 0 eli neste on kitkaton.

Impulssi

Yllyke, sykäys, heräte, pulssi.

Inertia

Fys. aineen pyrkimys säilyttää lepotilansa tai nopeutensa muuttumattomana, hitaus.

Insulaatio

Eistäminen, eristys.

Jatkuvuusteoria (*continuum theory, continuum model*)

Differentiaaliyhtälön kaikkien riippuvien muuttujien derivaatat ovat olemassa ja ne ovat järkeviä.

Keskimääräinen vapaa matka (*Mean Free Path*)

Molekyylin keskimäärin taivallettava matka törmäykseen.

Kiihtyvyyssanturi (*Accelerometer*)

Laite, jolla voidaan mitata auton tai muun kappaleen kiihtyvyyttä.

Kinemaattinen ehto (*kinematic condition*)

Virtauksen ehto, joka määrää reunalta aloittavan partikkelin pysymään reunalla.

Kipinätyöstö

Mikrotyöstömenetelmä

Knudsenin luku

Fys. suure joka määrittää vapaan matkan ja ominaispituuden välisen suhteen.

Kokoonpuristumaton Navier-Stokes (*Incompressible Navier-Stokes*)

Navier-Stokesin yhtälöiden erikoistapaus tilanteissa, joissa virtauksen Machin numero on alle 0.3.

Laminaarinen

Fys. (virtaus) pyörteetön, vastakohta: Turbulentti

Lasertyöstö

Mikrotyöstömenetelmä

Lateraalinen

Reunalla, sivulla oleva, ulompi, sivu-, laita-, reuna-

Leikkausjännitys, (*shear stress*)

Fys. voiman F tangentti materiaalin pinnalle jaettuna alueen A pinta-alalla [Freedman 00].

LIGA

Litografia menetelmä jolla voidaan tuottaa mikroskaalan komponentteja.

Litografiamenetelmä

Mikrotyöstömenetelmä, LIGA

Liukumaton reunaehto (*no-slip boundary condition*)

Navier-Stokesin yhtälöissä useasti käytössä oleva reunaehto joka kieltää seinän läpäisemisen ja seinää pitkin liukumisen.

Lokalisaatio

Paikantaminen, paikantuminen, sijainti.

Machin luku (*Mach number*)

Fys. suure joka määrittelee äänennopeuden suhteen kohteen nopeuteen. [Freedman 00]

Makro (*macro*)

(yhdyssanoissa) suuri, laaja; pitkä (vastakohta: mikro)

MD (*Molecular Dynamics*)

Eräs virtausdynamiikan mallinnusmenetelmä kun Knudsenin numero on suurempi kuin 0.1.

MEMS (*Microelectromechanical system, microsystem*)

Järjestelmä, jonka toiminnallisuus perustuu mikrometrin kokoiseen elementtiin.

Mikro (*micro*)

Miljoonasosa (vastakohta: makro).

Mikroelektroniikka

Erittäin pienten elektronisten rakenneosien ja laitteiden, etenkin puolijohdekomponenttien, suunnittelu ja valmistus

Miniatyrisointi

Pientää, rakentaa pienikokoiseksi

Navier-Stokesin yhtälöt, (*Navier-Stokes equations*)

Virtausdynamiikan keskeisin mallinnusmenetelmä. Navier-Stokesin yhtälöt ovat epälineaarisia osittaisdifferentiaaliyhtälöitä.

Neumannin ehto

Keskeinen osittaisdifferentiaaliyhtälöiden reunaehto.

Osmoosi

Nesteen siirtyminen puoliläpäisevän kalvon läpi liuoksesta väkevämpään.

Pinnoitustekniikat

Mikrotyöstömenetelmä

Pintamikrotyöstö

Mikrotyöstömenetelmä

Poiseullen virtaus, (*Poiseulle flow*)

Yksinkertainen fysikaalinen malli virtauksen muodon etenemiselle kanavassa.

Prototyyppi

Malli; koekappale, Auton prototyyppi kokeiluauto, ennen sarjavalmistuksen aloittamista rakennetuista versioista.

Reunaehto

Osittaisdifferentiaaliyhtälön ehto jokaiselle joukon Ω pisteelle.

Reynoldsin luku (*Reynolds number, Re*)

Fys. suure joka määrittää inertiavoimien ja viskositeettivoimien suhteen.

Ryömivä virtaus (*Creeping flow*)

ks. Stokesin virtaus.

Sähköinen kaksoiskerros (*electrical double layer*)

Helmholtzin tason ja diffuusiokerroksen yhdiste neste-kiinteä rajapinnassa.

Sähkökinetiikka (*Electro kinetics*)

ks. Elektrokinetiikka.

Sternin kerros, (*Stern layer*)

Sähköisen kaksoiskerroksen sisempi kerros.

Stokesin virtaus (*Stoke's flow, Creeping flow*)

Virtaus, jonka Reynoldsin numero on paljon pienempi kuin 1.

Tasaantunut tilanne, (*Steady state*)

Tila, jossa virtaus ei enää vaihtelee satunnaisesti vaan on tasaantunut.

Termodynaaminen

Fys., kem. fysiikan ja fysikaalisen kemian osa, joka tutkii lämpötilan muutosten vaikutusta luonnonilmiöihin.

Trimmerin notaatio (*Trimmer notation*)

Skaalauksessa käytetty merkintä, jonka avulla voidaan arvioida voimien vaikutusta kohteeseen mittakaavan muuttuessa.

Turbulentti

Fys., ilmat. pyörteinen, vastakohta: Laminaarinen

Valenssiluku, (*Valence number*)

kem. atomiarvo, arvoisuusluku

van der Waals voimat

Van der Waals-voimat toimivat kaikkien molekyylien välillä ja ne johtuvat hetkellisistä dipoleista, jotka aiheutuvat elektronien liikkeestä molekyylessä. Dipoli-dipolivoimat johtuvat toistensa naapureina olevien poolisten molekyylien vastakkaismerkkisten päiden välisistä vetovoimista. Van der Waals-voimat ovat pääasialliset molekyylien väliset voimat useimmissa molekyyleistä koostuvissa aineissa.

Vapaan pinnan ongelma

Liikkuvan reunan osittaisdifferentiaaliongelma. Reunaehto ei voida määritellä *a priori*.

Variaationaaliongelma

Ongelma, joka on vastaava alkuperäisen ongelman kanssa, mutta myös jossain mielessä erilainen.

Vesisuihkuleikkaus

Mikrotyöstömenetelmä

Virtausdynamiikka

Fys. virtauksen voimasuhteita ja kappaleiden liikkeitä tutkiva mekaniikan haara