



Eğrisel Nano-Yüzeylerde Yüzey-Akışkan Etkileşimlerinin İncelenmesi

Program Kodu: 3501 (Kariyer)

Proje No: 213M549

**Proje Yürütücüsü:
Yrd. Doç. Dr. Ali DİNLER**

Bursiyer(ler):

İnci Okumuş (13,5 ay)
Alireza Setayesh Hagh (14,5 ay)
Ahmet Giray Kılılı (4 ay)
Zahide Yaşar (4 ay)

EKİM 2016
İSTANBUL

ÖNSÖZ

Türkiye Bilimsel ve Teknik Araştırma Kurumu (TÜBİTAK) tarafından 213M549'nolu proje kapsamında desteklenen bu proje kapsamındaki çalışmalar, İstanbul Medeniyet Üniversitesi Matematik Bölümü bünyesinde 15.03.2014 - 15.09.2016 tarihleri arasında gerçekleştirilmiştir. Yürütücü Yrd. Doç. Dr. Ali Dinler, proje ekibi adına sağladığı destekten dolayı TÜBİTAK'a teşekkür eder.

ÖZET

Bu projede, nano ölçekte eğrisel yüzeyler üzerinde gazlar için doğrudan benzetim Monte Carlo (direct simulation Monte Carlo (DSMC)) metodu kullanılarak; sıvılar için ise LAMMPS moleküler dinamik (MD) benzetim yaklaşımı kullanılarak akışkan-yüzey etkileşimleri araştırıldı. Öncelikle, küçük ölçekte iki silindir arasında bulunan gaz ile ısı iletim problemi ele alındı. Zamana bağlı sıcaklık sıçrama modellerinin çözümü için Heaviside operasyonel yöntemi de kullanıldı. Heaviside açılım teoremi genelleştirildi ve bu açılımın kullanılması için yarı analitik bir yöntem önerildi. Dışbükey yüzey ile ortam arasında ısı iletiminin azaldığı ve beklenmedik derecede yüksek bir sıcaklık sıçramasının varlığı görüldü. Bu durumun sebeplerini daha iyi anlamak için eğriliğin Kapitza uzunluğuna ve termal konaklama katsayısına olan etkisi araştırıldı. Dışbükey yüzey üzerinde oluşan S sınır tabakasının teorik temeli sorgulandı. Knudsen tabakasının dışbükey yüzey üzerinde genişlediği ilk defa ispatlandı. S sınır tabakasının tam kalınlığı, Knudsen tabakası kalınlığına bağlı olarak hesaplandı. Gaz ve sıvı davranışları kıyaslandı. Dahası, iki silindir arasındaki kabuk problemi çözülerek iç ve dışbükey yüzeylerin termal davranışı kıyaslandı. Önerilen zeta-disk yöntemi ile Boltzmann denkleminin analitik incelendi. Hem gaz hem sıvılar için eğriliğin iç ve dışbükey yüzeylerde termal sınır direncine ve sıcaklık sıçramasına olan ters etkisinin varlığını ilk defa ortaya koydu.

Projede, eğrisel mikro-kanalda taşınan küresel küçük parçacığın yüzeyine etki eden kuvvetler de incelendi. Dikdörtgensel kesitli eğrisel kanalda, parçacığa etki eden ataletsel kuvvetler, parçacıkları çaplarına göre kanal yanal düzleminde farklı noktalarda odaklayarak, parçacık ayrışımına olanak vermektedir. Eğrisel kanallarda parçacık ayrışımının mekanizmasının anlaşılması için sonlu elemanlar yöntemi ile geniş çaplı simülasyonlar yapıldı. Sonuçlar ışığında üstün parçacık ayrışımı için değişen eğriliğe ve en-boy oranına sahip dallardan oluşan kanal ağı yapısı önerildi. Üç boyutlu Dean akışına ait elde edilen analitik çözümler kullanılarak Murray kanuna alternatif bir optimum çatallanma kuralı da geliştirildi. Son olarak yüzey yükünün varlığında, konik şekilli nano-gözenek modellemesi yapıldı ve parçacık geçişi sonlu elemanlar yöntemi ile çözüldü.

Anahtar Kelimeler: Eğrisel yüzeyler, Doğrudan benzetim Monte Carlo yöntemi, Moleküler dinamik benzetim yöntemi, Heaviside operasyonel yöntemi, Isı iletimi, Termal sınır direnci, İkinci dereceden sıcaklık sıçrama modelleri, Gaz kinetik teori, Ataletsel odaklanma, Parçacık ayrışım ağları.

ABSTRACT

In this project, fluid-surface interactions is investigated over curved nano-surfaces using the direct simulation Monte Carlo (DSMC) method for gases and LAMMPS molecular dynamics (MD) software for liquids. The project initially investigated the transient heat conduction through a gas between two cylindrical surfaces in small scale. For the analytical investigation of the time-dependent temperature-jump model, the Heaviside operational method was employed. A generalization of the Heaviside expansion theorem and a semi-analytical procedure for using it were given. The amount of the temperature-jumps at curved surfaces was investigated in detail. Failure of the heat conduction at the convex fluid-solid interface was initially observed. To elucidate that the effects of curvature on the Kapitza length and the thermal accommodation coefficient were investigated. Formation of the S boundary layer at convex gas-solid interface was examined. The expansion of the Knudsen layer at the convex surface was proved. Exact thickness of the S layer was calculated. Gas and liquid behaviours over curved nano-surfaces were compared. The proposed zeta-disk technique for the analytical investigation of the Boltzmann equation revealed the opposing effect of curvature on the temperature jump and boundary thermal resistance for both gas- and liquid-solid interfaces.

Additionally, the project investigated the forces acting upon a spherical small-sized particle carried within curved micro-channels. Inertial forces focus particles on the lateral plane of the rectangular channel and this allows particle separation by size outperforming the straight design. In the light of conducted simulation results, an efficient particle separating network was proposed using curved branching with varying aspect ratios. The project also provided an optimum branching rule for the inertial particle separation alternative to the Murray's law. Additionally, in the existence of surface charge, a conic-shaped nanopore was modelled and the ion flow inside it was solved with the finite element method.

Keywords: Curved surfaces, Direct simulation Monte Carlo method, Molecular dynamics simulation, Heaviside operational method, Heat conduction, Boundary thermal resistance, Second-order temperature jump models, Gas kinetic theory, Inertial focusing, Particle separation networks.

ŞEKİL LİSTESİ

Şekil 2.1. CPU'lar üzerinde dört farklı problem için LAMMPS yazılımının MPI ile test sonuçları.	6
Şekil 2.2. Bizim test sonuçlarımızın http://LAMMPS.sandia.gov/bench.html sitesinden alınmış çözüm zamanları ile iki farklı problem üzerinde karşılaştırılması.	7
Şekil 3.1. Boyutsuz zamanlar $\tau = 0.01$, $\tau = 0.2$ ve steady-state durumda sıcaklık profilleri.	9
Şekil 3.2 İç silindir yüzeyinde sıcaklık sıçrama miktarının $\chi = R_2/R_1$ ile değişimi.	10
Şekil 3.3. Dış silindirde sıcaklık sıçrama miktarının $\chi = R_2/R_1$ ile değişimi.	10
Şekil 3.4. İçbükey ve dışbükey yüzey üzerinde sıcaklık sıçramasının incelendiği geometri.	11
Şekil 3.5. Kabuk geometrisinde sıcaklık ve mutlak değerce ısı akısı profili.	12
Şekil 3.6 Eğrilik ile dışbükey ve içbükey yüzeyde sıcaklık sıçramasının değişimi.	12
Şekil 3.7. Farklı Knudsen sayılarında dışbükey ve içbükey yüzeyde oluşan sıcaklık sıçramalarının farkı.	13
Şekil 4.1. Dönen silindir geometrisi ve silindir içindeki akışkan molekülleri.	14
Şekil 4.2. Dönen silindir dışında akışkan molekülleri.	14
Şekil 4.3. İki silindir arasındaki akışkan molekülleri	15
Şekil 4.4. İki silindir arasında nano-ölçekte Lennard-Jones akışkanının davranışının incelenmesi.	16
Şekil 4.5. Hız yön değiştirmesi.	17
Şekil 5.1. Langevin termostat ile elde edilmiş sonuçlar.	18
Şekil 5.2. Langevin ve NVT termostat ile elde edilmiş sonuçlar.	19
Şekil 5.3. Kesikli çizgiler içbükey ve düz çizgiler dışbükey için eğrilik ile sıcaklık sıçrama değerlerinin değişimini vermektedir.	20
Şekil 5.4. Moleküler dinamik (MD) simülasyon sıcaklık profilleri.	22
Şekil 5.5. Dışbükeyin yakınında indirgenmiş yoğunluk (ing. reduced density) profilleri.	23
Şekil 5.6. (a) Boyutsuz dışbükey eğriliğine ($\kappa\sigma$) göre boyutsuz sıcaklık sıçraması.	24
Şekil 5.7. Farklı indirgenmiş akışkan yoğunluklarda, Kapitza uzunluğunun eğrilik ile değişimi.	24
Şekil 5.8. $g(\zeta)$, $f_1(\zeta)$ ve $f_2(\zeta)$ metrikleri.	28
Şekil 5.9. (a) S sınır tabakasının kalınlığının Knudsen sınır tabakası kalınlığına oranının (δ_S/δ_{Kn}), R_1/δ_{Kn} ile değişimi. (b) Boyutsuz S sınır tabakası kalınlığının δ_S/λ , boyutsuz eğrilik $\lambda\kappa$ ile değişimi.	28

Şekil 5.10. S sınır tabaksının kalınlığı δ_s .	30
Şekil 6.1. Dean akışına ait kesitte hız alanı	32
Şekil 6.2. Comsol programı ile çözülmüş Dean akışına ait yanal hız vektör alanı.	33
Şekil 6.3. Analitik çözümde akış geometrisine göre değişken ve parametreler.	34
Şekil 6.4. Dean girdapları. (a) Sonlu elemanlar (Comsol Inc.) ile sayısal çözüm. (b) Analitik çözüm.	36
Şekil 6.5. Kare kesit alanlı eğrisel kanalda oluşan iki girdap.	37
Şekil 6.6. Ana akış yönündeki parçacık etrafındaki akış profili.	37
Şekil 6.7. (a) Simülasyonda bir kısmı kullanılan spiral kanal. (b) Kullanılan farklı en-boy oranları.	38
Şekil 6.8(a). Kanal modellemesi. (b). Çözüm için parçacık etrafında ağ yapısı.	39
Şekil 6.9. Simülasyon ve deney (Martel ve Toner, 2013) sonuçlarının kıyaslanması	40
Şekil 6.10. (a) Parçacığa etki eden net (resultant) kuvvet. Parçacık çapı $4\mu\text{m}$, en-boy oranı 1 ve kanal eğriliği $\delta = 0.0034$. $y/h = -1$ ve $y/h = 1$ sırasıyla iç ve dış duvardır. (b) Tepeden görülen odaklanma bandı ve parçacık dağılımı.	41
Şekil 6.11. (a) Parçacık çapı $4\mu\text{m}$, en-boy oranı 1 ve eğriliğin $\delta = 0.01$ olduğu durumda parçacığa etki eden net kuvvet. (b) Kanalda parçacık dağılımı	41
Şekil 6.12. Parçacık çapı $10\mu\text{m}$, en-boy oranı 1 ve eğriliğin $\delta = 0.0034$ olduğu durumda parçacığa etki eden net kuvvet ve kanalda parçacık odaklanması	42
Şekil 6.13. Parçacık çapı $10\mu\text{m}$, en-boy oranı 1 ve eğriliğin $\delta = 0.01$ olduğu durumda parçacığa etki eden net kuvvet ve kanalda parçacık odaklanması	43
Şekil 6.14. Parçacık çapı $15\mu\text{m}$, en-boy oranı 1 ve eğriliğin $\delta = 0.0034$ olduğu durumda parçacığa etki eden net kuvvet ve kanalda parçacık odaklanması	44
Şekil 6.15. Parçacık çapı $15\mu\text{m}$, en-boy oranı 1 ve eğriliğin $\delta = 0.01$ olduğu durumda parçacığa etki eden net kuvvet ve kanalda parçacık odaklan	45
Şekil 6.16. Parçacık çapı $4\mu\text{m}$, en-boy oranı 2 ve eğriliğin $\delta = 0.0034$ olduğu durumda parçacığa etki eden net kuvvet ve odaklanma	46
Şekil 6.17. Parçacık çapı $4\mu\text{m}$, en-boy oranı 2 ve eğriliğin $\delta = 0.01$ olduğu durumda parçacığa etki eden net kuvvet ve odaklanma	46
Şekil 6.18. Parçacık çapı $10\mu\text{m}$, en-boy oranı 2 ve eğriliğin $\delta = 0.0034$ olduğu durumda parçacığa etki eden net kuvvet ve odaklanma	47
Şekil 6.19. Parçacık çapı $10\mu\text{m}$, en-boy oranı 2 ve eğriliğin $\delta = 0.01$ olduğu durumda parçacığa etki eden net kuvvet ve odaklanma	47
Şekil 6.20. Parçacık çapı $15\mu\text{m}$, en-boy oranı 2 ve eğriliğin $\delta = 0.0034$ olduğu durumda parçacığa etki eden net kuvvet ve odaklanma	48
Şekil 6.21. Parçacık çapı $15\mu\text{m}$, en-boy oranı 2 ve eğriliğin $\delta = 0.01$ olduğu durumda parçacığa etki eden net kuvvet ve odaklanma	49

Şekil 6.22. Parçacık çapı 4µm, en-boy oranı 4 ve eğriliğin $\delta = 0.0034$ olduğu durumda parçacığa etki eden net kuvvet ve odaklanma	49
Şekil 6.23. Parçacık çapı 4µm, en-boy oranı 4 ve eğriliğin $\delta = 0.01$ olduğu durumda parçacığa etki eden net kuvvet ve odaklanma	49
Şekil 6.24. Parçacık çapı 10µm, en-boy oranı 4 ve eğriliğin $\delta = 0.0034$ olduğu durumda parçacığa etki eden net kuvvet ve odaklanma	50
Şekil 6.25. Parçacık çapı 10µm, en-boy oranı 4 ve eğriliğin $\delta = 0.01$ olduğu durumda parçacığa etki eden net kuvvet ve odaklanma	50
Şekil 6.26. Parçacık çapı 15µm, en-boy oranı 4 ve eğriliğin $\delta = 0.0034$ olduğu durumda parçacığa etki eden net kuvvet ve odaklanma	51
Şekil 6.27. Parçacık çapı 15µm, en-boy oranı 4 ve eğriliğin $\delta = 0.01$ olduğu durumda parçacığa etki eden net kuvvet ve odaklanma	51
Şekil 7.1. Eğrisel ve T-şekilli mikro-akışkan ağı	55
Şekil 7.2. T-şekilli ve yerine kullanılan eğrisel çatallanma.	55
Şekil 7.3. Kesit alan en-boy oranı α parametresine göre değişirken hidrolik direnç ($\text{kg m}^{-4}\text{s}^{-1}$).	56
Şekil 7.4. T-şekilli kanal ağına kıyasla eğrisel ağda hidrolik direnç azalması (%).	57
Şekil 7.5. Optimum alfa değerleri.	59
Şekil 8.1. Nano-gözenek simülasyon geometrisi ve parametreleri.	60
Şekil 8.2. Konik nano-gözeneğin ucunda elektrik alan büyüklükleri. Taban çapı (A)476nm, (B)640nm, (C) 704 nm, (D)852nm, (E)984nm. 1M KCl çözeltisi için uygulanan potansiyel 1000mV ve uç çapı 20 nm'dir.	61
Şekil 8.3. Konik nano-gözeneğin ucunda elektrik alan büyüklükleri. Taban çapı 831 nm, KCl çözeltisi 1M ve uç çapı 20 nm'dir. Uygulanan potansiyel (A) 400 mV, (B) 600 mV, (C) 800 mV, (D) 1000 mV	62
Şekil 8.4. Konik nano-gözeneğin ucunda elektrik alan büyüklükleri. Taban çapı 928nm, KCl çözeltisi 1M ve uç çapı 20 nm. Uygulanan potansiyel (A) 400 mV, (B) 600 mV, (C) 800 mV, (D) 1000 mV	63
Şekil 8.5. Konik nano-gözeneğin ucunda kesit alanda elektrik alan büyüklüğü. 1M KCl çözelti, uygulanan potansiyel 1000mV ve uç çapı 20 nm'dir	63

TABLO LİSTESİ

Tablo 5.1. MD simülasyonları elde edilen ortalama akışkan sıcaklıkları.	22
Tablo 5.2. Fiziksel değerler. $R_1 = 5\sigma$ ve van der Waals etki bölgesi 2.5σ .	23
Tablo 5.3. Zeta disk analizi için hesaplanan $P_n(\zeta)$ ve $Q_n(\zeta)$ polinomları.	27
Tablo 6.1. Ağ boyutu ve ağdan bağımsızlık testi.	39
Tablo 6.2. Odaklanma bantlarının yerleri.	52
Tablo 6.3. Yaklaşık bant genişlikleri.	53
Tablo 7.1. α 'ya göre ardışık kız dallanmalarına ait kesit en-boy oranı değerleri.	56

İÇİNDEKİLER

1. GİRİŞ	1
2. PROJEDE KULLANILAN SİMÜLASYON YÖNTEMLERİ İÇİN ÖN HAZIRLIK YAPILMASI	5
2.1. LAMMPS Performans Test Sonuçları	5
2.1.1. GPU'lar kullanılmadan sadece CPU çekirdekleri ile elde edilmiş test sonuçları	5
2.1.2. GPU'lar kullanılarak elde edilmiş test sonuçları	6
3. EĞRİSEL YÜZEYLERDE MİKRO/NANO GAZ AKIŞI	8
3.1. Heaviside Operatör Yöntemi ile Zamana Bağlı Durumda Mikro Eğrisel yüzeylerde Sıcaklık Sıçramasının İncelenmesi	8
3.2. Doğrudan Benzetim Monte Carlo (<i>ing.</i> Direct Simulation Monte Carlo (DSMC)) Yöntemi ile Mikro ve Nano Eğrisel Yüzeylerde Sıcaklık Sıçramasının İncelenmesi	11
4. MİKRO/NANO EĞRİSEL YÜZEYDE SIVI AKIŞI	14
4.1. Eğrisel Nano-Akış Geometrilerinin LAMMPS Paketi ile Oluşturulması	14
4.2. Kayma Sınır Koşulunun Modellenmesi ve Hız Yön Değiştirmesi	15
5. NANO EĞRİSEL YÜZEYLERDE ISI TRANSFERİ	18
5.1 Yüzey-Akışkan Arayüzünde Termal Sınır Direnci	20
5.2 Kinetik Teori ile Dışbükey Duvar-Gaz Arayüzünde Isı Transferinin İncelenmesi	25
6. EĞRİSEL MİKRO KANALLARDA ATALETSEL ODAKLANMA	31
6.1. Dean Akışı ve Dean Akışının Sonlu Elemanlar Yöntemi ile Sayısal Çözümü	32
6.2. Dean Akışının Asimptotik Yöntem ile Analitik Çözümü	34
6.3. Eğrisel Kanallarda Parçacık Ayırışımı	38
7. PARÇACIK AYRIŞIMI İÇİN OPTİMUM KANAL TASARIMI	55
7.1. Yeni Bir Çatallanma Kuralı	59
8. KANONİK ŞEKİLLİ NANO-GÖZENEKLERİN MODELLENMESİ	61
9. SONUÇLAR	65
10. ÖNERİLER	67
KAYNAKLAR	68

1. GİRİŞ

Bu proje kapsamındaki sonuçlar çeşitli çalışmalara konu olmuştur. Kısım 3.1’de verilen sonuçlar 29th Rarefied Gas Dynamics konferansında tam metin olarak sunuldu. Kısım 3.2’deki sonuçlar, moleküler dinamik simülasyonları ile “Curvature dependence of heat transfer at a fluid-solid interface” başlığı ile ve Kısım 5.1 ve 5.2’deki sonuçlar “Heat transfer at the convex side of the fluid-solid interface” başlığı ile gönderildi. Kısım 6’da verilen sonuçların bir kısmı ASME 14th International Conference on Nanochannels, Microchannels, and Minichannels konferansında tam metin olarak sunuldu. Proje raporunda verilen ayrıntılı hali ise, Kısım 7’de bulunan optimum çatallanma kuralı ile birlikte yazım aşamasındadır. Kısım 8’deki sonuçlar, International Porous and Powder Materials sempozyumunda özet metin olarak sunuldu ve geniş hali Electrochimica Acta dergisinde yayınlandı.

Projede öncelikle, İstanbul Medeniyet Üniversitesi’nde bulunan sunucuya proje için gerekli yazılımlar yüklendi. Grafik kartlarda hesaplama yapmak için CUDA kütüphanesi kuruldu. Sunucunun performansı CUDA kütüphanesi ile test edildi. Uzaktan erişim ayarları yapıldı. LAMMPS moleküler dinamik paketi kuruldu. Hazır örnekler test edildi. Sonuçların görselleştirilmesi için uygun paketler kuruldu. Kısım 2’de projede kullanılacak CUDA ve LAMMPS paketi ile yapılan test sonuçları karşılaştırmalı olarak verildi. DSMC ve ayrık hızlar metotları İMÜ’deki sunucuda çalışır hale getirildi.

Mikro/nano eğrisel yüzeylerde sıcaklık sıçraması sınır koşulu ile enerji denkleminin çözümünde, taşınım etkileri ihmal edilse bile zamana göre türev teriminin varlığında lineer kısmi türevli denklem çözülmelidir. Sıcaklık sıçrama sınır koşullarının karmaşık fonksiyonel yapısı bu denklemin çözümünde, değişkenlerine ayırma veya integral dönüşüm yaklaşımlarının kolayca uygulanmasına manidir. Kısım 3.1’de Heaviside operatör yöntemi (Goldstein, 1932; Carslaw ve Jaeger, 1963; Jeffres ve Jeffreys, 1999) matematiksel incelendi ve bu yöntemin zamana bağlı durumda kayma ve sıcaklık sıçrama sınır koşulları ile mikro/nano-akış denklemlerinin çözümünde kullanılması için bu yöntem analiz edildi. Bu yöntemin niye ve nasıl çalıştığı ve kullanılabilirliği bu projede ilk defa araştırıldı, yarı-analitik bir yöntem önerildi ve ikinci derece sıcaklık sıçrama sınır koşulu ile iki silindir arasındaki ısı iletim probleminin çözümünde kullanıldı. Sonuçlar Knudsen sayısı ve eğrilik ile durağan (*ing.* steady-state) duruma ulaşma süresinin arttığını gösterdi. Sonuçlar 29th Rarefied Gas Dynamics konferansında “Solving transient temperature-jump models over curved micro-surfaces” başlığı ile tam metin olarak yayınlandı (Dinler, 2014).

Kısım 3.2’de DSMC yöntemi (Bird, 1994; Oran vd., 1998; Dinler vd., 2013) ile eğrisel yüzeylerde gaz akışları için sıcak sıçrama miktarı incelendi. DSMC ile 60’a yakın farklı durum

için sonuçlar elde edildi. Kısım 3.2'deki önemli sonuçlar ilk defa bu raporda verildi. Yapılan çalışma dışbükey (konveks) yüzey üzerinde sıcaklık sıçramasının içbükey (konkav) yüzeye göre daha fazla olduğunu gösterdi. Eğriliğin sıcaklık sıçraması üzerinde ters etkisi olduğu görüldü. Ayrıca dışbükey ve içbükey yüzeyler arasındaki sıcaklık sıçrama farkının Knudsen sayısı ile azaldığı bulundu.

Kısım 4'de, nano eğrisel yüzeylerde sıvı davranışının incelenmesi için LAMMPS moleküler dinamik paketi kullanıldı. Proje kapsamında öncelikle LAMMPS simülasyon örnekleri incelendi. İçbükey ve dışbükey geometriler oluşturuldu. Daha sonra moleküler dinamik benzetim yaklaşımında nano-yüzeydeki molekül dizilişi ve ıslanabilirlik (*ing. wettability*) özelliği modellendi. Kısım 4.2'de, nano eğrisel yüzeylerde sıvı davranışı için LAMMPS paketi ile hız kayması (*ing. velocity slip*) ve hız yön değiştirmesi nano ölçekte incelendi.

Termal sınır direnci (TSD) (*ing. thermal boundary resistance*), farklı iki malzeme arasında ısı geçişi sırasında oluşan dirençtir. Bu direnç akışkan ile yüzey arasında da mevcuttur ki çok daha az araştırılmıştır. Kısım 5'de moleküler dinamik benzetim yöntemi ile nano eğrisel yüzeyde Lennard-Jones sıvıları için TSD davranışı incelendi. Sonuçlar yüzey eğriliğinin termal sınır direnci üzerinde ciddi etkileri olduğunu gösterdi. Yüzey ile akışkan arasındaki ısı geçişinin yüzey eğriliği ve yüzey şekli (içbükey/dışbükey) ile değiştirilebileceği sonucunu gösterdi. Sıvılarda yüzey eğriliği ile içbükey ve dışbükey yüzeyde oluşan sıcaklık sıçramalarının birbirine zıt şekilde değiştiği gösterildi. Yüzey eğriliği ile sıcaklık sıçraması içbükey yüzeyde azalırken dışbükey yüzeyde artmaktadır.

Kısım 5.2'de ise gaz kinetik teori ile eğrisel yüzeylerde ısı transferinde görülen ve Kısım 3.2'de gazlar için Kısım 5.1'de sıvılar için rapor edilen sıcaklık sıçrama ve termal direnç davranışlarının temeli araştırıldı. Önceki kısımlardaki sonuçlar, S sınır tabakasının literatürde önerildiği haliyle bulunan sıcaklık sıçraması miktarını açıklayamadığını gösterdi. Boltzmann (Bhatnagar-Gross-Krook (BGK)) denkleminin ayrıntılı analitik incelenmesine ihtiyaç vardır. Bu denklemin sayısal (örneğin DSMC, DVM ya da latıs Boltzmann yöntemiyle) çözümleri Knudsen ve S sınır tabaka kalınlıkları için kesin (analitik) bir ilişki vermemektedir. Bu denklemin incelemek için daha önce yapılan analizlerin (Sone, 2007) ışığında bu proje kapsamında ilk defa yüzey üzerinde ζ yarıçaplı bir zeta-disk analizi önerildi. Böylece Knudsen sınır tabakasının dışbükey yüzeylerde genişlediği ispatlandı. S sınır tabakasının da Knudsen sınır tabakası ile genişlediği gösterildi. Diğer deyişle, Knudsen tabakasının dışbükey yüzeyde daha kalın olduğunu ve Knudsen tabakasının kalınlığının artması ile S sınır tabakasının kalınlığının arttığını gösterdi. Dışbükey yüzeyin eğriliği arttıkça S sınır tabakasının Knudsen tabakası içindeki oranı da artmaktadır. Bu durum görülen yüksek sıcaklık sıçramasını açıklayabileceği sonucuna varıldı.

Kısım 6'da eğrisel kanallarda bir mikro-akışkan uygulaması olan ataletsel odaklanma (*ing. inertial focusing*) incelendi. Ataletsel odaklanma mikro-kanal içerisinde taşınan parçacıkların, parçacığın eğrisel yüzeyine etki eden hidrodinamik kuvvetlerin etkisi ile kanalın merkezinde dengeye gelmesi olarak tanımlanır. Bu davranışın son yıllarda birçok uygulaması ortaya çıkmıştır (Di Carlo, 2009; Karimi vd., 2013; Martel ve Toner, 2013). Eğrisel kanalda karşılıklı yüzeylerin birbirine göre simetrisi bozulmakta, iç yüzey dışbükey ve karşısındaki yüzey içbükey olmaktadır. Bu yüzey simetrisinin bozulması ataletsel odaklanma ve merkezkaç kuvveti ile beraber akışkana çok önemli bir özellik kazandırmaktadır. Bu özellik yanal yönde parçacıkların boyutlarına göre ayrılmasıdır (Martel ve Toner, 2014; Zhang vd., 2014). Böylece hücre ayrışımı mümkün olmakta, örneğin kanser hücrelerinin kandaki diğer hücrelerden ayrılması mümkün olmaktadır (Hou vd., 2013). Yanal düzlemde ayrışmanın mekanizmasının anlaşılması yeni uygulamalar için çok önemlidir (Martel ve Toner, 2014). Projede üç boyutta dikkörtgensel kesit alanlı mikro-kanallarda sıvı akışı Comsol yazılımı ile modellenip çözümler elde edildi. Bu akış asimptotik yöntemle analitik de incelendi ve parçacık etrafındaki hız alanı için analitik çözümler bulundu. Sonlu elemanlar yöntemi (Comsol Inc.) sayısal çözümü ile karşılaştırıldı. Sonuçlar Kısım 6.3'de verildi. Bu raporda verilen sonuçların ilk kısmı ASME 14th International Conference on Nanochannels, Microchannels, and Minichannels konferansında tam metin olarak sunuldu (Setayesh-Hagh ve Dinler, 2016).

Önceki kısımda, koşulan geniş çaplı ataletsel odaklanma sayısal deneylerinin sonucu, eğriliğin genelde odaklanma bandını daraltarak odaklanma kalitesini arttırdığı ve radyal yönde kanal eninin uzaması ile (en-boy oranının uzaması ile) ayrışmanın iyileşebileceği ilk defa gösterildi. Bu sonuç üzerine, farklı çaplı parçacıkları ayırtırmak için birbirini takip ederek dallanan, farklı eğrilik ve en-boy oranlarına sahip kızları olan netvörk yapısının verimli ayrışmayı sağlayabileceği ortaya çıktı. Literatürde çok çalışılmış spiral ve yilankavi geometrileri çözünürlükte (resolution) ve ayırtırma hızında (throughput) geçen böyle bir netvörk tasarlanabilir. Ancak bu geometrinin pratikte kullanılması çeşitli problemlere sahiptir. Bunlardan biri, hem eğriliğin ve hem de en-boy oranının hidrolik basıncı arttırması ve bunun cihaz güvenilirliğini bozmasıdır. Dahası T-şekilli netvörk yapıları için kullanılan dallanma formülü, Murray kanunu (Sherman, 1981), eğrisel çatallanma için geçerli değildir. Kısım 7.1'de, Kısım 6.2'de verilen analitik çözümler ile eğrisel netvörklerde parçacık ayrışımı için Murray kanuna alternatif bir çatallanma kuralı önerildi.

Yüzey yükünün olduğu nano-kanallarda iyonik akışın incelenmesi ayrıca bir araştırma konusudur. Gözenekli membranlardan parçacık geçişinin incelenmesinin, geçen hücre sayısının belirlenmesinde ve hücre tipinin tanınmasında; hatta DNA sekanslamada ciddi uygulamaları vardır (Booth vd., 2013; Han vd., 2008; Sexton vd., 2007; Kühnemund ve Nilsson, 2015). Bu sensörler direnç-atım (*ing. resistive-pulse*) sensör olarak isimlendirilir. Böyle

sensörlerin modellenmesinde Navier-Stokes, Poisson ve Nerst-Planck denklemlerinin kuple çözümü kullanılır. Kısım 8'de konik şekilli nano-gözenekler modellendi sonlu elemanlar yöntemi ile çözüldü. Taban çapı büyüdükçe nano-gözenekğin duvarlarında elektrik alan büyüklüğünün arttığı görüldü. Sonuçlar deney sonuçları ile de örtüştü. International Porous and Powder Materials sempozyumunda özet metin olarak sunuldu (Kaya vd., 2016a) ve geniş hali Electrochimica Acta dergisinde yayınlandı. (Kaya vd., 2016b).

2. PROJEDE KULLANILAN SİMÜLASYON YÖNTEMLERİ İÇİN ÖN HAZIRLIK YAPILMASI

Projede öncelikle, doğrudan benzetim Monte Carlo (*ing.* direct simulation Monte Carlo (DSMC)) ve ayrık hızlar yöntemi (*ing.* discrete velocity method (DVM)) için yazılmış kodların çalıştırılması amacıyla gerekli araçlar İstanbul Medeniyet Üniversitesi bünyesindeki sunucuya kuruldu. LAMMPS moleküler dinamik paketinin kurulumu gerçekleştirildi. OpenMP ve Open MPI paralel kütüphaneleri kuruldu ve test edildi. MPI performans testi, MPI paketinin ortak-bellek sisteminde gayet iyi sonuç verdiği ve dağıtık-bellek kütüphanelerinin ciddi bir gecikme oluşturmadığı yönünde ön sonuçlar verdi. Sunucuya, GPU ile hesaplama yapabilmek için, CUDA 5.5 kütüphanesi kuruldu. Sunucu CUDA ile testi edildi. Ek 1'de bandwidthTest, matrixMul ve matrixMulCUBLAS test örnekleri ile elde edilmiş komut satırı sonuçları verilmiştir.

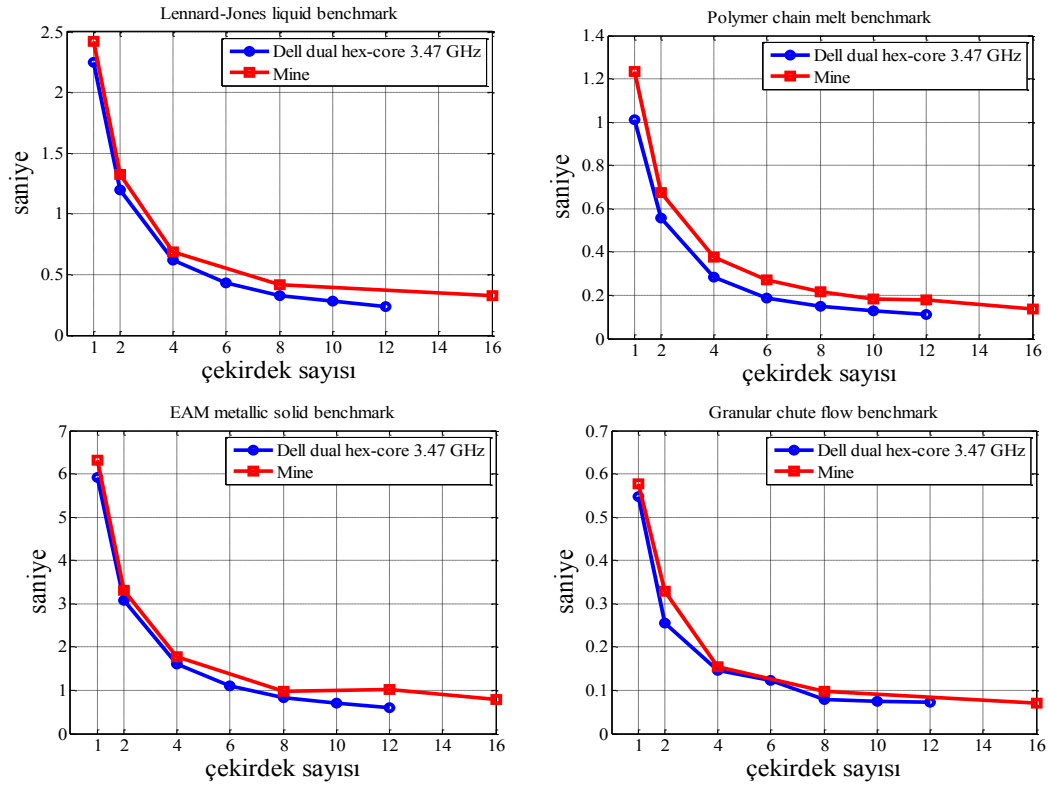
LAMMPS moleküler dinamik yazılımı, çift duyarlılıkla (*ing.* double precision) ve sm_35 özelliği ile Ek 2'de listelenmiş paketleri içerecek şekilde kuruldu. LAMMPS, OpenMPI kütüphanesi ve mpic++ derleyicisi kullanılarak, *make -j openmpi* komutu ile derlendi. Intel Math Kernel kütüphanesi ile de bağlandı. Hem GPU'lar kullanılmadan (Şekil 2.1) hem de GPU'lar ile (Şekil 2.2) sunucunun LAMMPS ile performans testleri yapıldı.

2.1. LAMMPS Performans Test Sonuçları

2.1.1. GPU'lar kullanılmadan sadece CPU çekirdekleri ile elde edilmiş test sonuçları

Bütün testler mpirun ile yapıldı. Karşılaştırmalar Ek 3'de verilen Dell Precision T7500 model masaüstü iş istasyonundan elde edilmiş sonuçlar ile karşılaştırıldı. Bu sunucuya ait test sonuçları <http://LAMMPS.sandia.gov/bench.html> sitesinden alındı. Bu projede kullanılan bölümümüzdeki sunucunun özellikleri de Ek 3'de verilmiştir. Test sonuçları, 16 çekirdekten daha fazla çekirdek seçildiğinde çekirdeklerin çift threat özelliği olmasına rağmen LAMMPS paketinin hızlanmadığını gösterdi.

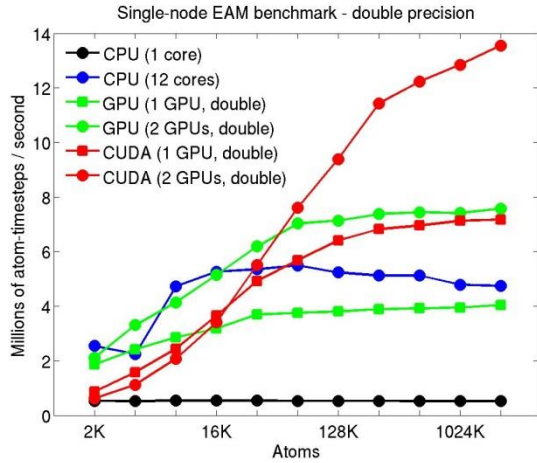
Şekil 2.1, iki farklı sistemden alınan zamanların birbirine yakın olduğunu göstermektedir. Tek çekirdek ile 16 çekirdek arasında Şekil 2.1'deki sonuçlara göre 5 ile 6 kat arası hızlanma görülmektedir. Bizim rack tipi sistemimiz 2.2 GHz çekirdeklere sahip olmasına rağmen Ek 3'de özellikleri verilen 3.47 GHz çekirdekli iş istasyonuna yakın zamanlarda işlem yapabilmektedir.



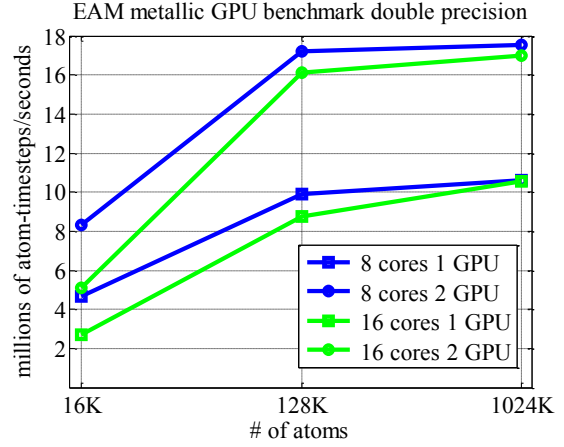
Şekil 2.1. CPU'lar üzerinde dört farklı problem için LAMMPS yazılımının MPI ile test sonuçları. Mavi renkteki eğri 12 çekirdekli Dell T500 iş istasyonundan elde edilmiş ve <http://LAMMPS.sandia.gov/bench.html> sitesinden alınmış çözüm zamanları, kırmızı renkli eğri ise bu projede elde edilmiş test zamanlarını göstermektedir.

2.1.2. GPU'lar kullanılarak elde edilmiş test sonuçları

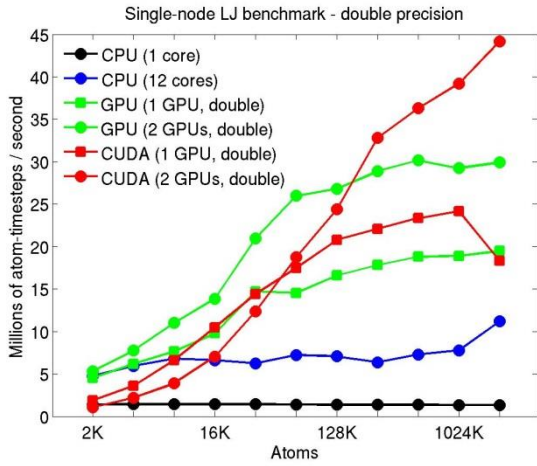
Sonuçlar GPU'ların beklenen performansı verdiğini göstermektedir. Dell T500 sistemine kıyasla K20 GPU kartlar ile üstün performans elde edilmiştir. Performans kıyaslamasında <http://LAMMPS.sandia.gov/bench.html> sitesindeki sonuçlar kullanılmıştır.



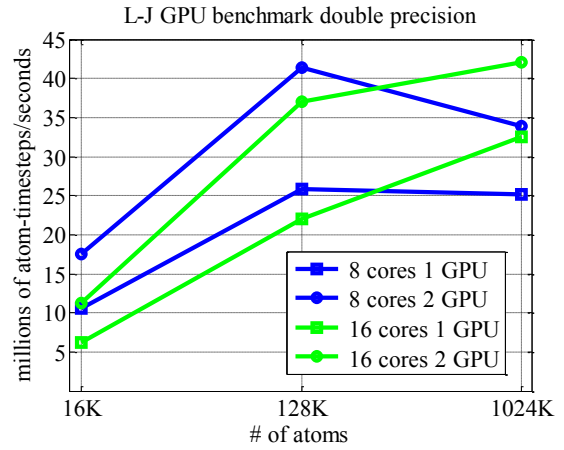
(a)



(b)



(c)



(d)

Şekil 2.2. Bizim test sonuçlarımızın <http://LAMMPS.sandia.gov/bench.html> sitesinden alınmış çözüm zamanları ile iki farklı problem üzerinde karşılaştırılması. LAMMPS GPU paketi kullanılarak testler yapılmıştır. Sol kolondaki şekiller ((a) ve (c)) <http://LAMMPS.sandia.gov/bench.html> sitesinden alınmıştır. Şekiller (b) ve (d) de, mavi renkli doğrular 8 çekirdek ile, yeşil renkli doğrular ise 16 çekirdek ile elde edilmiş sonuçları göstermektedir. (a) ve (c) şekillerindeki kırmızı renkli eğrilere ait LAMMPS USER-CUDA paketi sunucuya kurulmamıştır (Kırmızı eğriler).

Yukarıdaki Şekil 2.2'de, sağ ve sol şekillerde yeşil renkli eğriler karşılaştırılır. Sahip olduğumuz K20 GPU kartları ile daha iyi performans elde edildiği görülmektedir. LAMMPS GPU paketi ile tek GPU karttan çift GPU karta çıkıldığında 16 çekirdek ile %50'lik bir hızlanma görülürken 8 çekirdek ile yavaşlama görülmüştür. LAMMPS USER-CUDA paketinin kurulması ihtiyaca göre sonraya bırakılmıştır.

3. EĞRİSEL YÜZEYLERDE MİKRO/NANO GAZ AKIŞI

3.1. Heaviside Operatör Yöntemi ile Zamana Bağlı Durumda Mikro Eğrisel yüzeylerde Sıcaklık Sıçramasının İncelenmesi

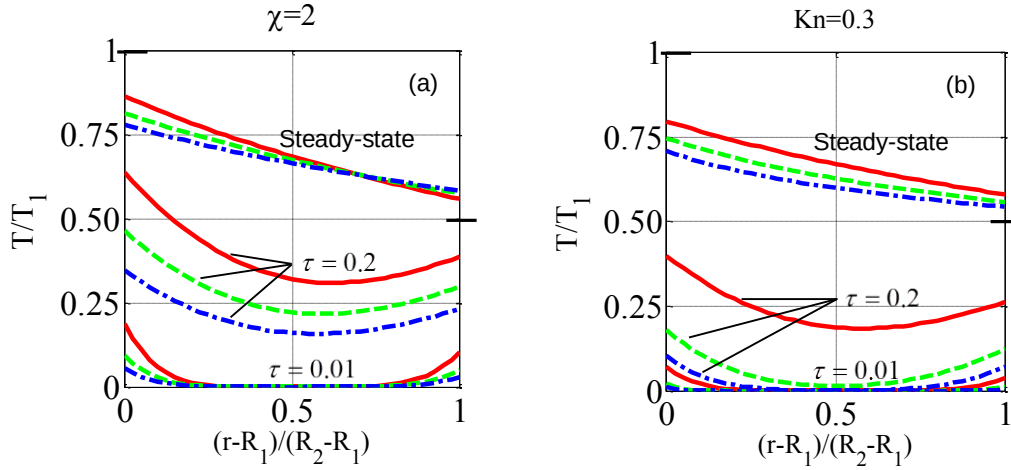
Birçok mikro-akışkan sistem sıcaklık gradyanları altında çalışır. Termoelastik aktüatörler ve hızölçer termal anemometreler gibi bazı sistemler ise ısı etkilerine bağlı olarak işlevini gerçekleştirir. Diğer bazı mikro-sistemler ise, yüksek yüzey-hacim oranları sebebiyle ısıtma ve soğutma işlemlerini iyileştirmek için kullanılır. Bütün bu sistemler çok farklı tasarımlara ve sıklıkla eğrisel geometride yüzeylere sahiptir. Dolayısıyla mikro/nano-ölçekte, yüzey eğriliğinin yüzey-akışkan arasındaki ısı iletimindeki rolünün daha iyi anlaşılması için yapılacak çalışmalar önemlidir.

Enerji denklemi, taşınım etkileri ihmal edilse bile zamana göre türev teriminin varlığında lineer kısmi türevli denklem halindedir. Sıcaklık sıçrama sınır koşullarının karmaşık fonksiyonel yapısı bu denklemin çözümünde, değişkenlerine ayırma veya integral dönüşüm yaklaşımlarının kolayca uygulanmasına manidir (Dinler, 2014). Bu projede, Heaviside operatör yöntemi (Goldstein, 1932; Carslaw ve Jaeger, 1963; Jeffres ve Jeffreys, 1999) matematiksel incelenmiş ve bu yöntemin zamana bağlı durumda kayma ve sıcaklık sıçrama sınır koşulları ile mikro/nano-akış denklemlerinin çözümünde kullanılması için bu yöntem analiz edilmiştir. Daha önce Goldstein (1932) çeşitli ısı iletim denklemlerinin sıcaklık sıçramasının yokluğunda Heaviside yöntemi ile çözmüştür. Carslaw ve Jaeger (1963) ve Jeffres ve Jeffreys (1999) Heaviside yöntemi ile ilgili kaynak olarak literatürde yer almaktadır. Bu yöntemin niye ve nasıl çalıştığı ve kullanılabilirliği bu projede araştırılmış, yarı-analitik bir yöntem önerilmiş ve ikinci derece sıcaklık sıçrama sınır koşulu ile iki silindir arasındaki ısı iletim probleminin çözümünde ilk defa kullanılmıştır. Aşağıdaki sonuçlar yazarın 29th Rarefied Gas Dynamics Konferansında sunduğu bildiriden alınmıştır (Dinler, 2014). Bildiriye AIP Conference Proceedings altında web'den ulaşılabildiğinden burada kısaca yer verilecektir.

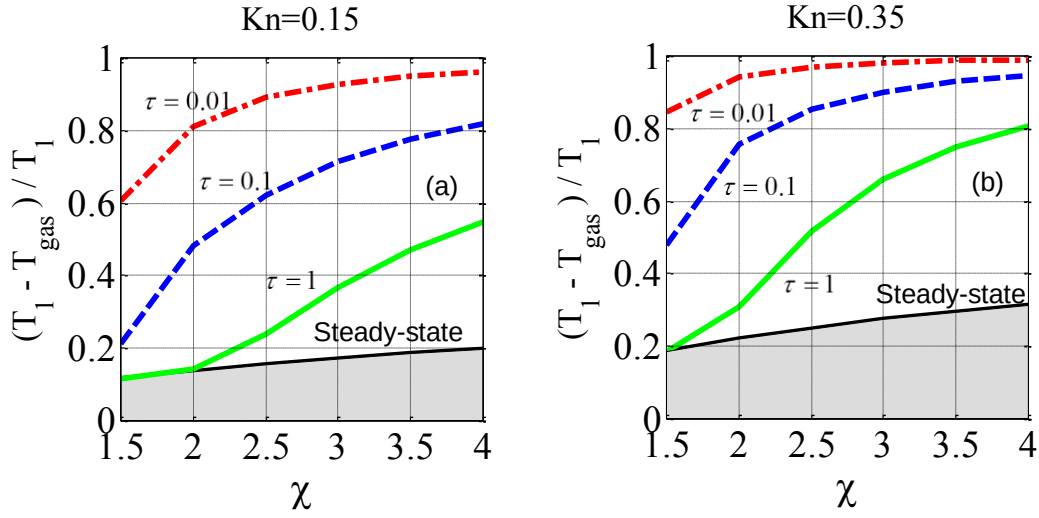
Şekil 3.1, iç içe iki silindir arasındaki sıcaklığın zamanla değişimini göstermektedir. Sonuçlar Heaviside operatör yöntemi ile elde edilmiştir. Aşağıdaki şekiller, silindir duvarlarında ciddi miktarda sıcaklık sıçramasının varlığını göstermekle beraber, Knudsen sayısı ve eğrilik ile steady-state duruma ulaşma süresinin arttığını göstermektedir. Şekil 3.1(a) ve 3.1(b) açıkça dışbükey (konveks) yüzey üzerinde sıcaklık sıçramasının içbükey (konkav) yüzeye göre daha fazla olduğunu göstermektedir.

Şekil 3.2(a) ve 3.3(a)'daki sonuçlar boyutsuz zaman $\tau=1$ için $\chi=2$ ve $Kn=0.15$ değerlerinde steady-state duruma hemen hemen ulaşıldığını göstermektedir. Diğer yandan,

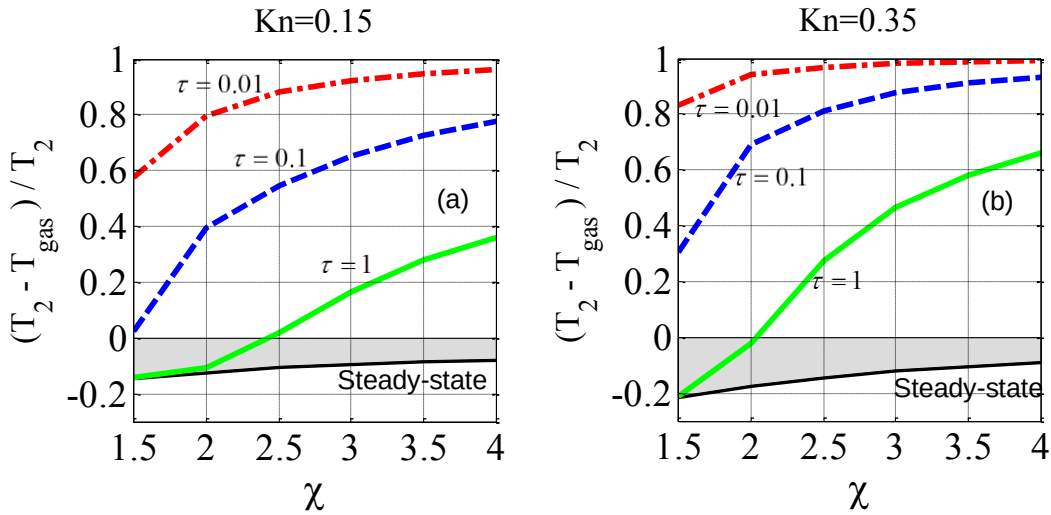
Şekil 3.2(b) ve 3.3(b)'de, $\chi=2$ ve $Kn=0.35$ değerlerinde, $\tau=1$ zamanında steady-state'e ulaşılmamıştır. Şekil 3.2 ve 3.3'deki sonuçlar sıcaklık sıçramasının dışbükey yüzeyde eğrilik ile arttığını diğer yandan içbükey yüzeyde eğrilik ile azaldığını da göstermektedir. Bu davranış eğriliğin hız kayması (*ing. velocity slip*) üzerindeki ters etkisine benzemektedir (Dinler vd., 2013).



Şekil 3.1. Boyutsuz zamanlar $\tau=0.01$, $\tau=0.2$ ve steady-state durumda sıcaklık profilleri. T_1 iç silindir sıcaklığı. Dış silindir yarıçapının iç silindir yarıçapına oranı $\chi=R_2/R_1$ ile gösterilmiştir. Şekil 3.1(a)'da kırmızı, yeşil ve mavi eğriler sırasıyla $Kn=0.15$, $Kn=0.25$ ve $Kn=0.35$ için çözümleri göstermektedir. Şekil 3.1(b)'de kırmızı, yeşil ve mavi eğriler sırasıyla $\chi=2$, $\chi=3$ ve $\chi=4$ için çözümleri gösterir. 1 ve 0.5'deki kısa siyah çizgiler makroskopik durumda (sıcaklık sıçramasının yokluğunda) sıcaklık profillerinin başlangıç ve bitiş yerlerini göstermektedir.



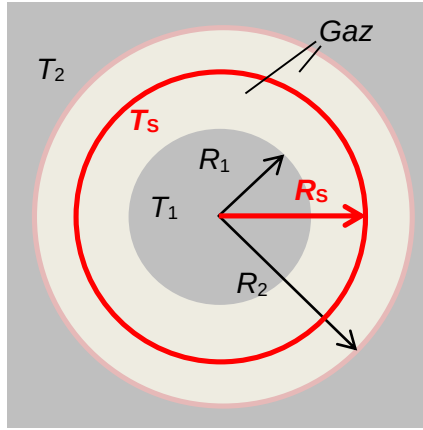
Şekil 3.2 İç silindir yüzeyinde sıcaklık sıçrama miktarının $\chi = R_2/R_1$ ile değişimi. Kırmızı, mavi ve yeşil eğriler sırasıyla $\tau = 0.01$, $\tau = 0.1$ ve $\tau = 1$ boyutsuz zamanlardaki çözümleri gösterir. Gölge bölge steady-state durumdaki sıcaklık sıçramasının χ 'e göre değişimini vurgulamaktadır. Hem iç ve hem dış silindirin eğriliği χ ile artar. T_1 iç silindirin yüzey sıcaklığı ve T_{gas} yüzeye komşu gaz kolonunun sıcaklığıdır. (a) $Kn = 0.15$, (b) $Kn = 0.35$.



Şekil 3.3. Dış silindirde sıcaklık sıçrama miktarının $\chi = R_2/R_1$ ile değişimi. T_2 dış silindir yüzeyinin sıcaklığı T_{gas} yüzeye komşu gaz kolonunun sıcaklığıdır. (a) $Kn = 0.15$, (b) $Kn = 0.35$. Daha fazla bilgi için Şekil 3.2'nin altyazısına bakınız.

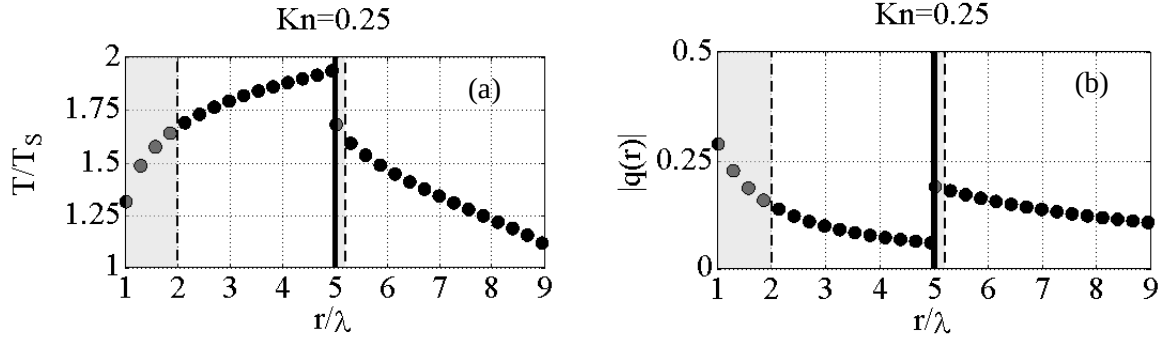
3.2. Doğrudan Benzetim Monte Carlo (*ing.* Direct Simulation Monte Carlo (DSMC)) Yöntemi ile Mikro ve Nano Eğrisel Yüzeylerde Sıcaklık Sıçramasının İncelenmesi

Bu kısımda DSMC yöntemi (Bird, 1994; Oran vd., 1998; Dinler vd., 2013) ile eğrisel yüzeylerde sıcak sıçrama miktarı incelenmiştir. DSMC yönteminin ayrıntıları Bird (1994) ve Oran (1998)'de bulunabilir. İç içe geçmiş iki silindirin ortasına silindirik bir kabuk yerleştirilmiştir. Bu kabuğun çok ince olduğu farz edilmiştir. Böylece kabuğun dışbükey ve içbükey yüzey alanı aynıdır. Aşağıdaki Şekil 3.4 problem geometrisini göstermektedir. İç ve dış silindir sıcaklıkları aynı alınmıştır ($T_1 = T_2$). Isıtılmış kabuğun içbükey ve dışbükey yüzey tarafında gerçekleşen sıcaklık sıçraması yüzey şeklinden kaynaklanmaktadır.



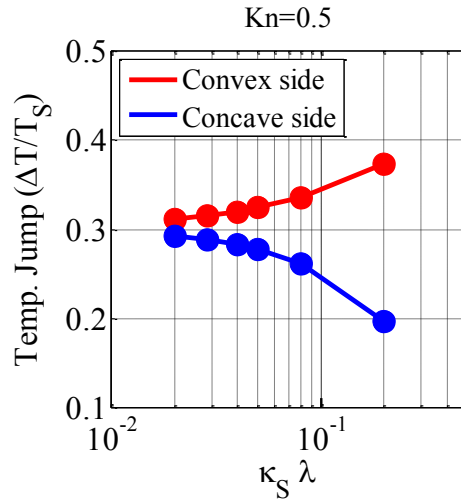
Şekil 3.4. İçbükey ve dışbükey yüzey üzerinde sıcaklık sıçramasının incelendiği geometri. İç ve dış silindirin ortasına silindirik bir kabuk (kırmızı renkli) yerleştirilmiştir. Silindirler ve kabuk hareketsiz olup kabuk sıcaklığı iç ve dış silindirin iki katıdır ($T_s = 2T_1 = 2T_2$).

DSMC yöntemi ile kabuğun iki tarafı ayrı ayrı simüle edilmiştir. Aşağıdaki sonuçlar 60'a yakın simülasyon ile elde edilmiştir. Şekil 3.5(a) kabuğun içbükey ve dışbükey yüzeyinde sıcaklık sıçramasını göstermektedir. Şekil 3.5(b) ise ısı akısını (heat flux) göstermektedir. Isı akısı her zaman pozitif alınmıştır. Knudsen sayısı 0.25 olarak seçilmiştir. Knudsen sayısı $Kn = \lambda / (R_2 - R_1)$ şeklinde tanımlıdır; burada λ gaz için ortalama-serbest-yol (hava için yaklaşık 60nm'dir), R_1 iç silindir yarıçapı ve R_2 dış silindir yarıçapıdır. Knudsen sayısı hesaplanırken kabuğun solunda ve sağında λ sabit alınmıştır. Kabuğun sağında ve solunda Knudsen sayısı aynıdır. Kabuk yarıçapı yaklaşık 300 nm'dir. Gölgeyi kısımlar S sınır tabakasının kalınlığını göstermektedir. Resimlerin ortasındaki kalın çizgi kabuğu göstermektedir. Sağ kısım kabuğun dışbükey ve sol kısım ise kabuğun içbükey yüzeyine karşı gelmektedir. Kabuk sıcaklığı iç ve dış silindir sıcaklığının iki katı olarak seçilmiştir.

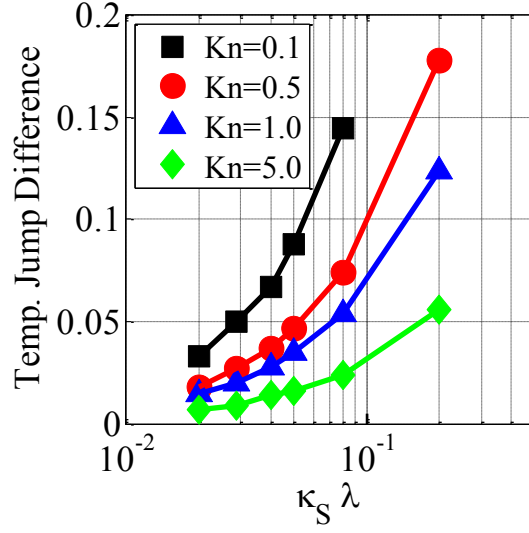


Şekil 3.5. Kabuk geometrisinde (Şekil 3.4) (a) sıcaklık profili (b) mutlak değerce ısı akısı profili. Şekillerin ortasındaki koyu renkli çizgi kabuğu ve gölgeli kısımlar dışbükey yüzeydeki S sınır tabakasının kalınlığını göstermektedir.

Şekil 3.6, Knudsen sayısı 0.5 için dışbükey ve içbükey yüzeyde sıcaklık sıçramasının eğrilik ile değişimini göstermektedir. Sonuçlar eğriliğin sıcaklık sıçraması üzerinde ters etkisi olduğunu göstermektedir. Şekil 3.7 dışbükey ve içbükey yüzeyler arasındaki sıcaklık sıçrama farkının Knudsen sayısı ile azaldığını göstermektedir.



Şekil 3.6 Eğrilik ile dışbükey ve içbükey yüzeyde sıcaklık sıçramasının değişimi. $\kappa_s \lambda$ kabuğun boyutsuz eğriliğidir.



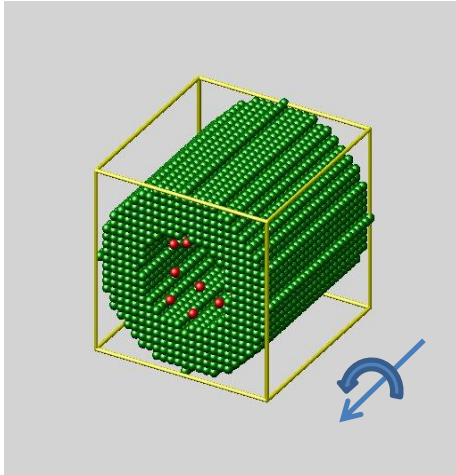
Şekil 3.7. Farklı Knudsen sayılarında dışbükey ve içbükey yüzeyde oluşan sıcaklık sıçramalarının farkı.

Sonuçlar dışbükey yüzeyde oluşan S sınır tabakasının tahmin edilen kalınlık olan λ^2 mertebesinde daha kalın olabileceğini göstermektedir. S sınır tabakasının teorik altyapısı ayrıntılı incelendiğinde (Sone, 2002; Sone, 2007), dışbükey yüzeyde önerilen S sınır tabakası (Sone, 1973) silindir eksen yönünde (genellikle silindirik koordinatlarda z yönü olarak gösterilir) yapılan asimptotik analizi esas alınarak teorik olarak bulunmuştur. Eğrilik yönünde (genellikle silindirik koordinatlarda θ yönü olarak gösterilir) maalesef integraller (Sone, 1973) garip (obscure) hale dönüşmekte ve analiz etmeyi çok zorlaştırmaktadır. Gerçekte dışbükey yüzey üzerinde S sınır tabakası daha kalın ve burada verilen sonuçlara göre de daha etkili olabilir.

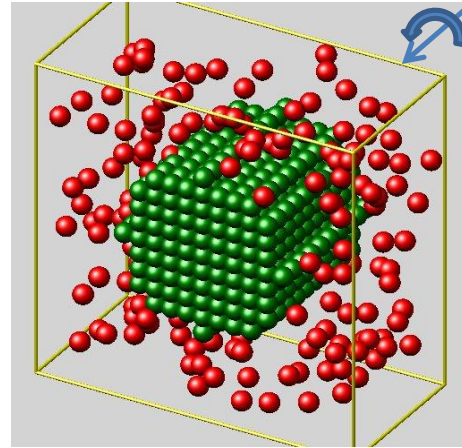
4. MİKRO/NANO EĞRİSEL YÜZEYDE SIVI AKIŞI

4.1. Eğrisel Nano-Akış Geometrilerinin LAMMPS Paketi ile Oluşturulması

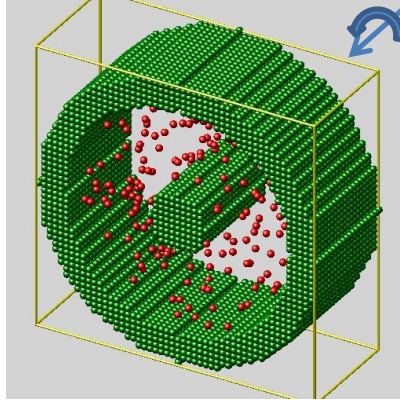
Bir mikro-akış davranışı olan hız yön değiştirmesi, iki silindir arasındaki Couette akışında, iç silindir dönerken dış silindirin durduğu durumda ortaya çıkar. Bu mikro-akış davranışı, gazın yüzeydeki teğet hızının dönen iç silindirden sabit duran dış silindire doğru beklenmedik şekilde artması ile oluşur. Bu beklenmedik mikro gaz akış davranışı, iki plaka arasındaki denk bir akışta ortaya çıkmadığından, bu davranışa mikro-akışlarda yüzey eğriliğinin neden olduğu düşünülmüştür (Tibbs vd., 1997). Aoki vd., (2003) Boltzmann denklemini sayısal çözerek, Yuhong vd. (2005), Guo vd. (2011), Dinler vd. (2012, 2014) DSMC ile hız yön değiştirmesini daha önce incelemiştir. Hız yön değiştirmesinin nasıl oluştuğunu ve bu davranışın mekanizmasını inceleyen bu çalışmalar, bu davranışın oluşması için, dış silindir yüzey konaklama katsayısının küçük olması gerektiğini göstermiştir (Yuhong vd., 2005; Dinler vd., 2012; Dinler vd., 2014). Ayrıca mikro/nano sıvı akışlarında da bu davranış araştırılmıştır (Jung, 2007; Kim, 2009). Üstelik bu davranışın sadece yüzey eğriliğinin etkileri ile açıklanamayacağını; iç silindir yüzeyinin dışbükey biçimli geometrisinin hız yön değiştirmesinin oluşumunda rol oynadığı gösterilmiştir (Dinler vd., 2013).



Şekil 4.1. Döner silindir geometrisi ve silindir içindeki akışkan molekülleri.



Şekil 4.2. Döner silindir dışında akışkan molekülleri.



Şekil 4.3. İki silindir arasındaki akışkan molekülleri.

Bu proje kapsamında, LAMMPS (<http://lammps.sandia.gov/>) moleküler dinamik simülasyon paketi ile eğrisel geometriler nano-ölçekte modellenmiştir. Aşağıdaki Şekiller 4.1-4.3 LAMMPS ile oluşturulmuş geometrileri göstermektedir. Bu geometriler “region” komutunu ile “union” ve “intersect” özellikleri kullanılarak oluşturulmuştur. Dönme sırasında, oluşan kuvvetlerden dolayı silindirlerin dönme ekseninden kaymaması için “fix recenter” komutu kullanılmıştır. Silindir dönüşü “fix move rotate” komutu ile sağlanmıştır. Silindirin yüzeyinin dönüş hızı “period” değeri ile ayarlanmıştır.

Moleküller arası etkileşim Lennard-Jones potansiyeli, V , ile modellenmiştir:

$$V(r) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{r}{\sigma} \right)^{-12} - \left(\frac{r}{\sigma} \right)^{-6} \right] \quad r < r_c \quad (4.1)$$

burada r etkileşim mesafesini, ε enerji ölçeğini, σ mesafe ölçeğini ve r_c etkileşim için gerekli uzaklık limitini göstermektedir.

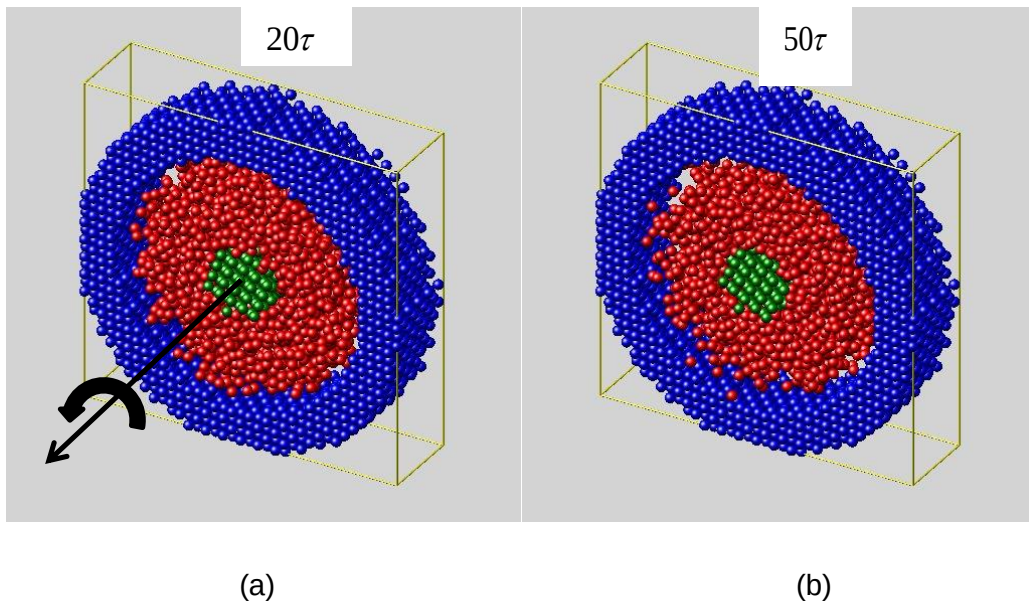
4.2. Kayma Sınır Koşulunun Modellenmesi ve Hız Yön Değiştirmesi

(4.1) ifadesi ile verilen Lennard-Jones (LJ) potansiyeli $\varepsilon = \alpha^2 \bar{\varepsilon}$ ve $\sigma = \alpha^{(-1/6)} \bar{\sigma}$ ve $r_c = 2.5 \bar{\sigma}$ parametreleri kullanılarak aşağıdaki biçimde yazılabilir:

$$V(r) = 4\bar{\varepsilon} \left[\left(\frac{r}{\bar{\sigma}} \right)^{-12} - \alpha \left(\frac{r}{\bar{\sigma}} \right)^{-6} \right] \quad r < 2.5 \bar{\sigma} \quad (4.2)$$

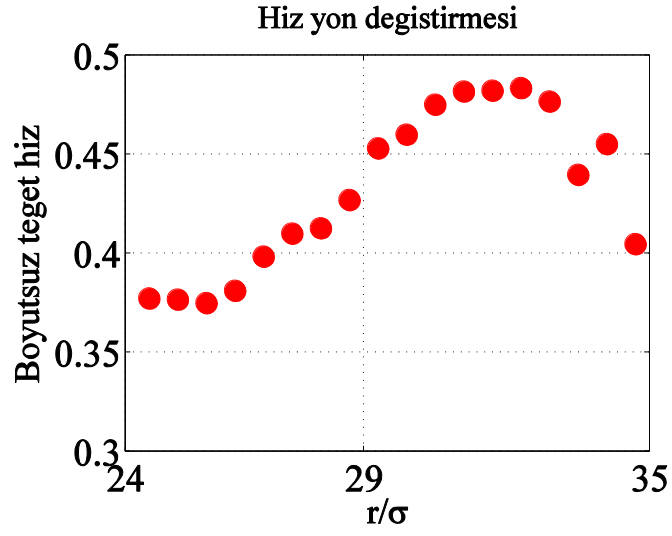
burada α ıslanabilirlik (*ing. wettability*) parametresi konaklama katsayısı olarak yorumlanabilir (Jung, 2007; Kim, 2009). Yüzey konaklama katsayısı 0 ile 1 arasında değer alır. $\alpha = 0$ için ayna (*ing. specular*) yansıma gerçekleşir. $\alpha = 1$ için ise tam difüzyon (*ing. fully diffusive*) yansıma gerçekleşir ve yüzeye paralel teğet hızda azalma olur (Maxwell, 1879). Yüzeyin daha az pürüzlü olması ile konaklama katsayısı 1 değerinden 0'a doğru küçülür.

Bu proje kapsamında elde edilen simülasyon sonuçlarında hız yön değiştirmesinin varlığını görebilmek için yüzey-akışkan arasındaki konaklama katsayısı dış silindirde $\alpha = 0$ ve iç silindirde $\alpha = 1$ alınmıştır. Akışkan moleküllerini kendi arasındaki çarpışmaları için ise LJ potansiyeli (4.1) kullanılmıştır. İç silindir yüzeyi için ise “fix wall/region” komutu kullanılmıştır. Şekil 4.4 ve Şekil 4.5, iç silindir dönerken ve dış silindir sabit iken elde edilmiş simülasyon görüntüsünü ve simülasyon sonucu oluşan hız profilini göstermektedir. İç silindir yarıçapı 4σ , dış silindir yarıçapı 15σ ve iç silindir açısal hızı $\omega = 0.1 \text{ rad}/\tau$ seçilmiştir. τ boyutsuz simülasyon zaman birimidir. Simülasyon zaman adımı $dt = 0.005\tau$ olarak alınmıştır.



Şekil 4.4. İki silindir arasında nano-ölçekte Lennard-Jones akışkanının davranışının incelenmesi. İç silindir saat yönünün tersine dönerken dış silindir sabit. (a) 20τ anında (b) 50τ anında.

Sonuçlar önceki çalışmalar ile uyushmaktadır (Jung, 2007; Kim, 2009). Hacim ortalı sayısal yoğunluk (*ing.* volume-average number density) değeri 0.4 olduğunda Lennard-Jones akışkanı için hız yön değiştirmesi gerçekleşmektedir (Şekil 4.5). Hareketli iç silindirden hareketsiz dış silindire doğru Argon gaz atomlarının hızlandığı görülmektedir. İç silindir yüzeyi difüzyon ($\alpha = 1$) ve dış silindir yüzeyi ayna ($\alpha = 0$) olarak alınmıştır.

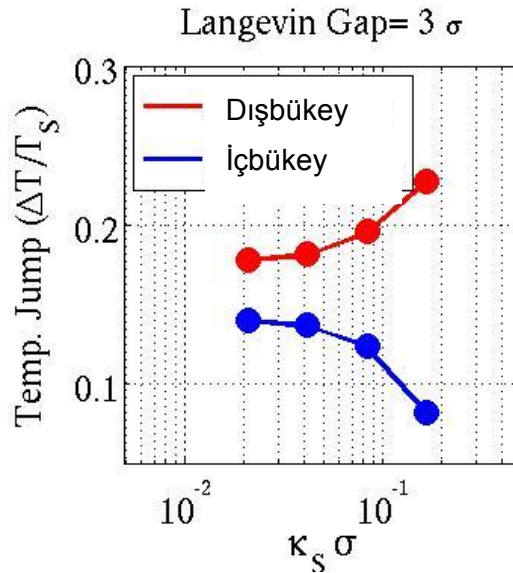


Şekil 4.5. Hız yön değıştirmesi. Moleküler dinamik simülasyon sonucu. 2 milyon zaman adımı (dt) ile son 1 milyon adımda örnekleme yapılarak elde edilmiş hız profilidir. Şekilde sol sınır iç silindir yüzeyi ve sağ sınır dış silindir yüzeyidir. (Simülasyon çerçevesinin sol alt köşesi merkez olarak alınmıştır, buna göre iç silindir yüzeyi 24σ dış silindir yüzeyi 35σ)

5. NANO EĞRİSEL YÜZEYLERDE ISI TRANSFERİ

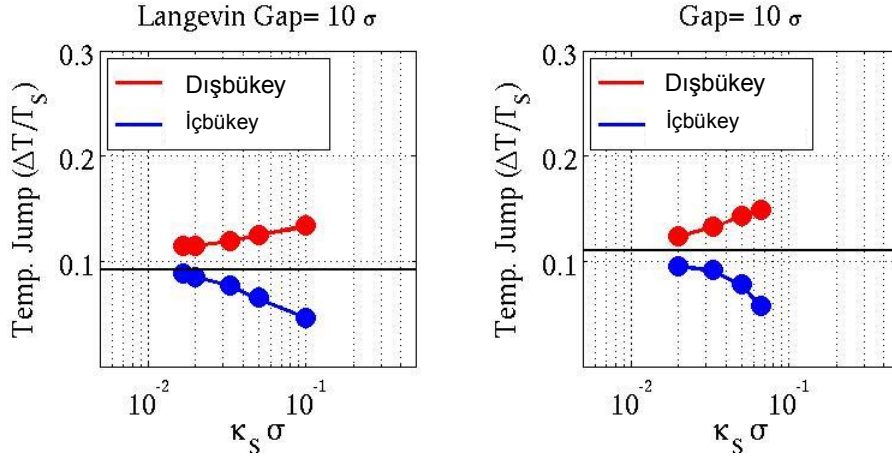
Önceki kısımlarda, LAMMPS moleküler dinamik paketi kuruldu, çeşitli testleri yapıldı. Devamında eğrisel geometriler LAMMPS içinde oluşturuldu ve hız ters dönmesi için simülasyonlar gerçekleştirildi. Bu kısımda ise eğrisel bir yüzey ile akışkan arasındaki arayüzeyde sıcaklık sıçraması ile duvar-akışkan arayüzünde termal sınır direncinin varlığı, büyüklüğü ve eğriliğin etkileri araştırıldı.

Termal Sınır Direnci (TSD) (*ing.* thermal boundary resistance), farklı iki malzeme arasında ısı geçişi sırasında oluşan dirençtir. Bu direnç akışkan ile yüzey arasında mevcuttur ki çok daha az araştırılmıştır. Mikrondan nano ölçekli kanallara doğru gidildikçe yüzeyin hacme oranı daha da büyür. Dolayısıyla böyle bir direncin büyüklüğünün belirlenmesi nano akışların davranışının anlaşılmasında kritiktir. TSD kendisini yüzey ile akışkan arasında belirgin bir sıcaklık farklılığının oluşması ile gösterir. Yüzeye yakın yerde kalıcı durumda (*ing.* steady-state) oluşan bu sıcaklık farkına sıcaklık sıçraması denir. TSD'nin belirli yüzey sıcaklıkları ve ölçekte belirlenmesinde moleküler dinamik simülasyonlarının aydınlatıcı ve yol gösterici sonuçlar verdiği bilinmektedir (Cahill vd., 2014). Bu konuda Cahill vd. (2014) derleme makaleden faydalanılabilir.



Şekil 5.1. Langevin termostat ile elde edilmiş sonuçlar. Sıvının bulunduğu kanal açıklık 3σ olarak seçilmiştir (yaklaşık 1 nanometreye karşılık gelir). $\kappa_s \sigma$ boyutsuz yüzey eğrilik değeridir ve x-ekseni boyunca artmaktadır. σ ise Lennard-Jones potansiyeli mesafe ölçek parametresidir.

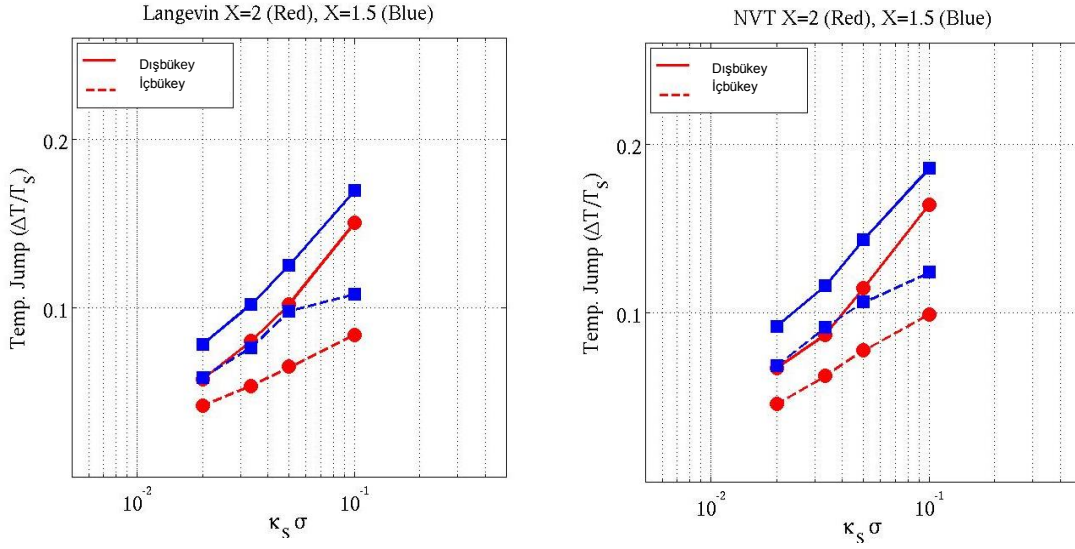
Bu proje kapsamında elde edilen sonuçlar ile yüzey eğriliğinin TSD üzerinde ciddi etkileri olduğunu göstermiştir. Yüzey ile akışkan arasındaki ısı geçişinin yüzey eğriliği ve yüzey şekli (içbükey/dışbükey) ile değiştirilebileceği sonucuna varılmıştır. Şekil 5.1, yüzey eğriliği ile içbükey ve dışbükey yüzeyde oluşan sıcaklık sıçramalarının birbirine zıt şekilde değiştiğini göstermektedir. Yüzey eğriliği ile sıcaklık sıçraması içbükey (*ing. convave*) yüzeyde azalırken dışbükey (*ing. convex*) yüzeyde artmaktadır.



Şekil 5.2. Langevin ve NVT termostat ile elde edilmiş sonuçlar. Sıvının bulunduğu açıklık 10σ olarak seçilmiştir. $\kappa_s \sigma$ boyutsuz yüzey eğrilik değeridir ve x-ekseni boyunca artmaktadır. σ ise Lennard-Jones potansiyeli mesafe ölçek parametresidir. Doğrusal siyah çizgi ise (eğrisel olmayan) düz yüzey için ölçülen sıcaklık sıçrama değerini göstermektedir.

Şekil 5.2, açıklık değerinin 10σ seçilmesi ile elde edilmiş yüzey eğriliğinin sıcaklık etkisine olan ters etkisini göstermektedir. Soldaki şekil Langevin termostat ve sağdaki şekil ise NVT termostat ile elde edilmiş sonuçları gösterir. NVT ile sıcaklık sıçraması daha fazla ölçülmüştür ancak iki termostat ile elde edilmiş sonuçları birbiri ile tutarlı ve ters etkinin varlığını açıkça ortaya koymaktadır.

Şekil 5.3, Langevin ve NVT termostatlar ile ölçülmüş eğrilik yarıçapı oranı $\chi=1.5$ ve $\chi=2$ için elde edilmiş sonuçları göstermektedir. Dışbükey yüzey üzerinde sıcaklık sıçraması daha yüksek oluşmakta ve eğrilik yarıçapı oranı χ ile artmaktadır. Dışbükey ve içbükey yüzeyler arasındaki sıcaklık sıçrama farkı da eğrilik ile artmaktadır.



Şekil 5.3. Kesikli çizgiler içbükey ve düz çizgiler dışbükey için eğrilik ile sıcaklık sıçrama değerlerinin değişimini vermektedir. Mavi renk $\chi=2$ ve $\chi=1.5$ için simülasyon sonuçlarını göstermektedir. Soldaki sonuçlar Langevin ve sağdaki sonuçlar NVT termostatu ile elde edilmiştir.

5.1 Yüzey-Akışkan Arayüzünde Termal Sınır Direnci

Bu kısımda dışbükey yüzeyler daha ayrıntılı incelendi. Farklı materyaller birbirine dokunduklarında aralarındaki ısı geçişi, yüzey yapısına, şekline ve materyal tipine göre etkilenmektedir. Küçük ölçekteki cihazlar ve onların katmanlı yüzeyleri için arayüzlerde ısı transferi önemli çalışma konusudur (Cahill vd., 2014; Xu, 2016). İki materyal arasında bir sıcaklık sıçraması, ΔT , olduğu bilinmektedir. Bu davranış arayüzde termal direnç (*ing.* interfacial thermal resistance) ya da Kapitza direnci olarak da adlandırılır (Kapitza, 1941). Kapitza direnci $R_K = \Delta T/J$ ile fomülüze edilir. Burada $J = -k \partial T / \partial n$ ısı akısı, k ısı iletkenliği ve n yüzeyden normal vektördür. Arayüzdeki ısı iletkenliğinin hesaplanması ve tahmin edilmesi için yaygın olarak iki model kullanılmaktadır. Bunlar acoustic mismatch model (AMM) ve diffuse mismatch model (DMM) (Swartz ve Pohl, 1989) olarak literatürde yer almaktadır. Bu iki model katı-katı arayüzleri için kullanılırken, katı-akışkan arayüzü için latis modeller (Young ve Maris, 1989; Pettersson ve Mahan, 1990; Neogi ve Mahan, 2016) modeller önerilmiştir. Nano arayüzlerde ısı iletkenliği ile ilgili çalışmalar ve bu modellerin doğrularının tespitinde moleküler dinamik simülasyonlar yaygın kullanılmaktadır (Ge vd., 2006; Xue vd., 2004; Vo ve Kim, 2015; Issa ve Mohamad, 2012). Bu çalışmaların çoğu düzlemsel yüzeyler için elde edilmiş sonuçları içermekte ve eğrisel yüzeyler için benzer çalışmalar çok kısıtlıdır.

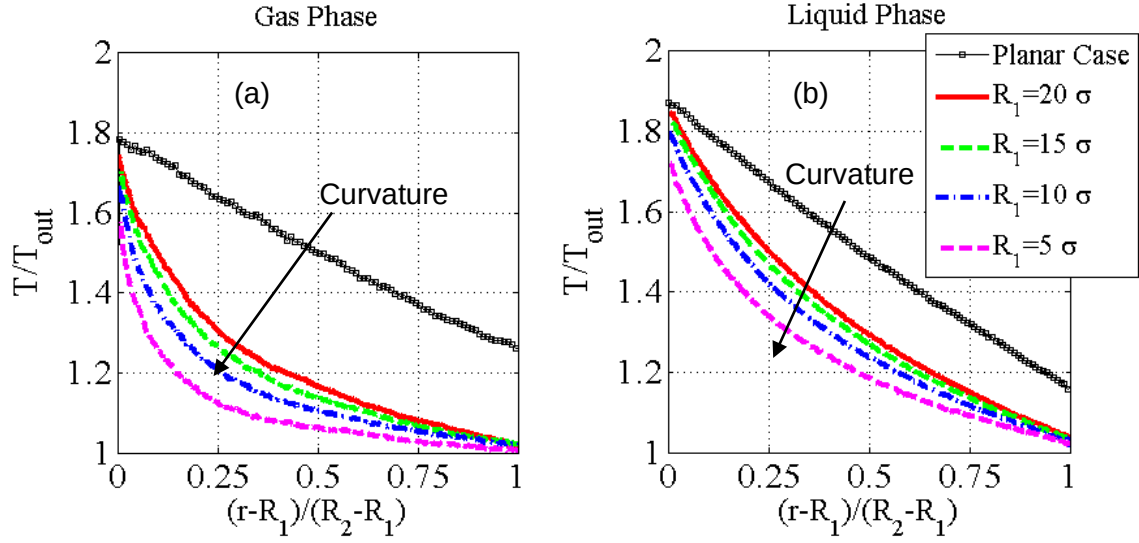
Diğer yandan, gaz kinetik teori kullanılarak, eğrisel yüzeylerde gaz-katı arasındaki ısı transferini belli seviyede incelemek mümkündür. Bu konuda, 1973 yılında Sone tarafından dışbükey yüzeylerde Knudsen tabakasının altında ince bir sınır tabakasının (S sınır tabakası) varlığı teorize edilmiştir. Ancak daha sonra bu çalışma Boltzmann denkleminin süreksiz çözümleri ve karakteristiklerin kesişimi ile ilişkilendirilmiş ve fiziksel olarak etkileri, etkilerin büyüklüğü, bu tabakanın tam kalınlığı ve oluşma mekanizması ise incelenmemiştir. Dahası S sınır tabakasının sıcaklık sıçramasına olan etkileri hala tam olarak anlaşılmamıştır. Esasında integro-diferansiyel bir denklemin süreksiz çözümlere sahip olması nadir olan bir durum değildir. Ancak bu süreksiz çözümün bir fiziksel ve etkili sınır tabakası ile ilişkilendirilmesi ve bu sınır tabakanın gerçekte varlığı yeterince irdelenmemiştir.

Bu kısımda yukarıda soruların cevapları aranmaya çalışıldı. Bunun için kinetik teoride daha önce olmayan bir teknik; zeta-disk analizi önerildi. S sınır tabakasının tam kalınlığı hesaplandı. Moleküler dinamik simülasyonları ile yapılan karşılaştırma ise S sınır tabakasının simülasyonlarda görülen sıcaklık sıçramasını açıklamak için fazla ince olduğu sonucunu ortaya koydu. Zeta-diski ile iki silindir arasındaki Boltzmann denkleminin analizi, Knudsen sınır tabakasını dışbükey yüzeylerde düz yüzeye göre daha kalın olduğunu kanıtladı. Bu durum oluşan yüksek Kapitza direncini de açıkladı.

Şekil 5.4 gaz ve sıvı fazdaki Argon için yapılan moleküler dinamik simülasyonlar sonuçlarını göstermektedir. Simülasyonlar iki silindir arasındaki argonun sıcaklık profilini vermektedir. İç (dışbükey) silindir yüzeyinin sıcaklığı dıştaki silindirin sıcaklığının iki katı seçilmiştir. Sonuçlar, oluşan belirgin ve yüksek sıcaklık sıçramasını ortaya koymaktadır. Eğrilik ok yönünde, iç silindir yarıçapının küçülmesi ile artmaktadır. Oluşan yüksek sıcaklık sıçraması, iki silindir arasındaki akışkanın ısınmasını engellemektedir. Tablo 5.1, makroskopik ölçekte beklenen akışkanın ortalama sıcaklığını ve buna karşılık farklı dışbükey yüzeyin eğriliklerinde bulunmuş ortalama sıcaklıkları vermektedir. Makroskopik durumda (sıcaklık sıçramasının yokluğunda), silindirik koordinatlarda ısı denkleminin çözümü ile ve iç silindir sıcaklığının dış silindir sıcaklığının iki katı olduğu durumda ($T_{in} = 2T_{out}$), ortalama akışkan sıcaklığı

$$\frac{T_{ave}}{T_{out}} = \frac{\chi - 2}{\chi - 1} + \frac{1}{\ln \chi} \quad (5.1)$$

olarak bulundu. Burada $\chi = R_2/R_1$, iç R_1 ve dış R_2 silindir yarıçaplarının oranıdır. Sonuçlar eğriliğin önemli etkilerini ortaya koymaktadır.



Şekil 5.4. Moleküler dinamik (MD) simülasyon sıcaklık profilleri. Şekil değişen iç silindir (dışbükey) yüzeyinin eğrilğine göre profilleri göstermektedir. (a) Gaz fazı $\rho^* = 0.5$ ve (b) Sıvı fazı $\rho^* = 0.84$. Ok yönünde eğrilik artmaktadır.

Tablo 5.1. MD simülasyonları elde edilen ortalama akışkan sıcaklıkları. Makroskopik durum sıcaklık sıçraması olmadığı durumdaki ortalama sıcaklığı göstermektedir.

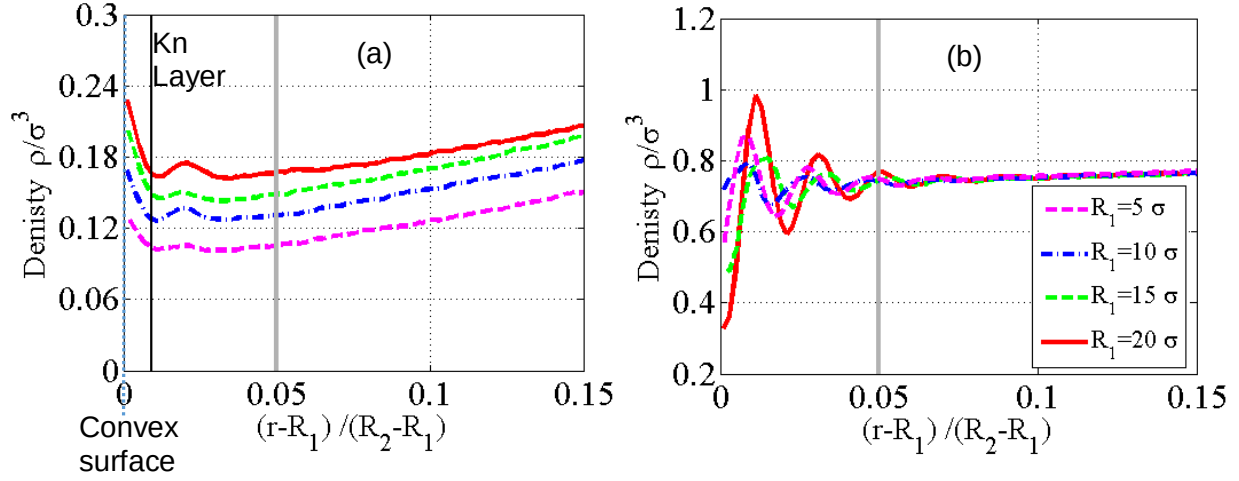
T_{ave}/T_{out}				
R_1	$\rho^* = 0.5$	$\rho^* = 0.77$	$\rho^* = 0.84$	Macroscopic Case
5σ	1.1014	1.2252	1.2344	1.31703
10σ	1.1541	1.2762	1.2864	1.35811
15σ	1.1899	1.3083	1.3187	1.38197
20σ	1.2312	1.3281	1.3391	1.39824

İki silindir arasındaki gaz için serbest yol (*ing.* mean free path) aşağıdaki formül ile hesaplandı:

$$\frac{\lambda}{\sigma} = \frac{3(R_2^2 - R_1^2)}{\sqrt{2}N_p} \quad (5.2)$$

burada N_p akışkan molekülü sayısıdır. Tablo 5.2, iki silindir arasındaki açıklık $R_2 - R_1 = 50\sigma$ ve iç silindir yarıçapı $R_1 = 5\sigma$ iken serbest yol, akışkan molekül sayısı, buna karşılık yoğunluk, Knudsen sayısı ve S sınır tabakası kalınlığını vermektedir. Burada S sınır tabakası kalınlığı,

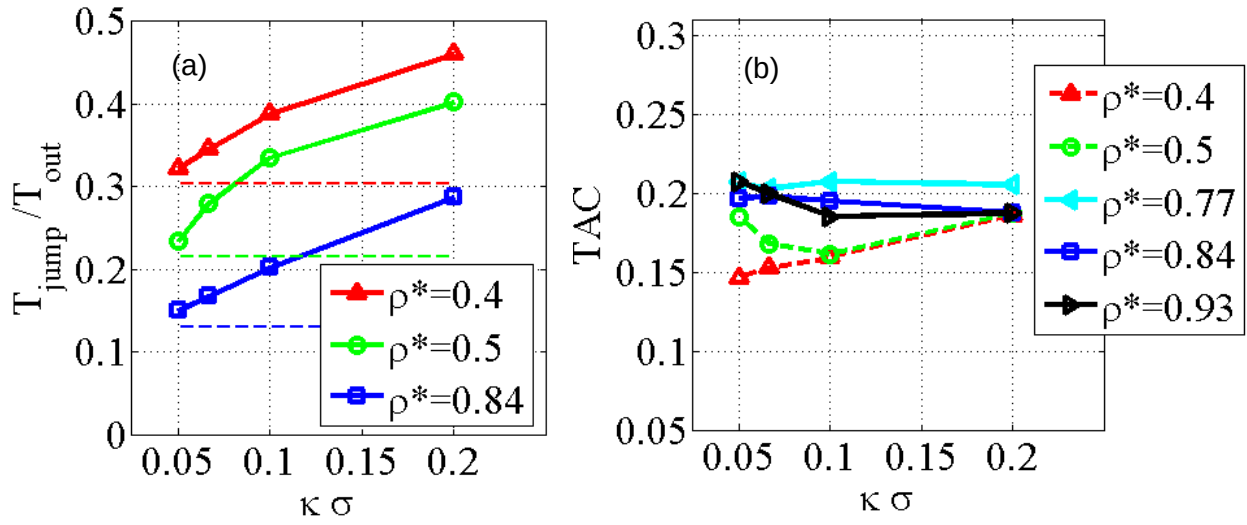
raporun devamında anlatılacak olan kinetik teori ile bulunan kalınlık formülü ile bulunmuştur. Tablo, S sınır tabakasının çok ince olduğunu göstermektedir. Serbest yol uzunluğu kadar olan Knudsen sınır tabakası kalınlığı ve moleküller arası etkileşimin olduğu van der Waals mesafesi (2.5σ) göz önüne alındığında, S sınır tabakasının Şekil 5.4’de elde edilmiş sıcaklık sıçraması büyüklüklerini açıklamasının zor olduğu sonucuna varılabilir.



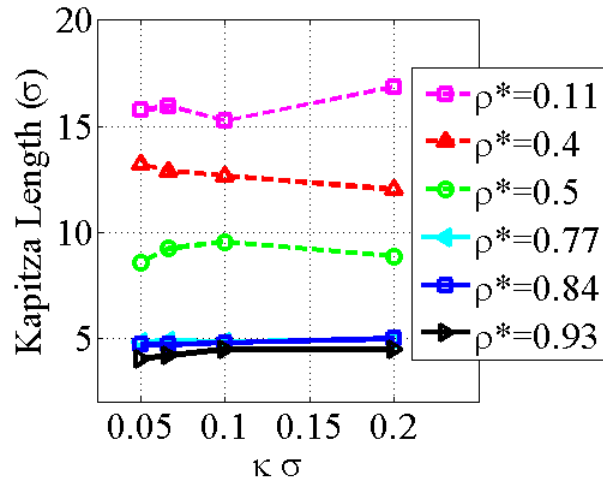
Şekil 5.5. Dışbükeyin yakınında indirgenmiş yoğunluk (*ing.* reduced density) profilleri. Düşey gri çizgi van der Waals sınır bölgesini göstermektedir. (a) $\rho^* = 0.5$ (gaz fazı) ve (b) $\rho^* = 0.84$ (sıvı fazı). Düşey siyah çizgi Knudsen sınır tabakasını göstermektedir.

Tablo 5.2. Fiziksel değerler. $R_1 = 5\sigma$ ve van der Waals etki bölgesi 2.5σ .

Number density ($\rho^* = N_p/V$)	Number of particles (N_p)	Mean free path (λ/σ)	Knudsen number (λ/R_1)	Convex layer thickness (δ_s/σ)
0.11	3229	1.9709	0.3942	0.3744
0.40	11150	0.5708	0.1142	0.0235
0.50	14084	0.4519	0.0904	0.0204
0.77	21764	0.2924	0.0585	0.0085
0.84	23586	0.2698	-	-
0.93	26227	0.2427	-	-



Şekil 5.6. (a) Boyutsuz dışbükey eğriliğine ($\kappa\sigma$) göre boyutsuz sıcaklık sıçraması. Yatay kesik çizgiler, düz duvarda gerçekleşen sıcaklık sıçramasını göstermektedir. (b) Farklı indirgenmiş akışkan yoğunluklarda, TAC değerinin eğrilik ile değişimi.



Şekil 5.7. Farklı indirgenmiş akışkan yoğunluklarda, Kapitza uzunluğunun eğrilik ile değişimi.

Şekil 5.5, iki silindir arasında hacim ortalamalı sayı yoğunlukları (*ing.* volume average number density), ρ/σ^3 , profillerini göstermektedir. Sonuçlar gaz $\rho/\sigma^3 = 0.5$ ve sıvı için $\rho/\sigma^3 = 0.84$ için elde edildi. Duvarın Lennard-Jones etkileşim mesafesi (2.5σ) grafiklerde çizildi. Duvara doğru büyüklüğü artan salınımlar, akışkan moleküllerinin yüzeyde

tabakalaşmasını göstermektedir. Dışbükey yüzeydeki tabakalaşma eğriliğın artması ile azalmaktadır. Şekil 5.6(a), sıcaklık sıçramasının dışbükey yüzeyde eğrilik ile arttığını açıkça göstermektedir. Ayrıca yoğunluğun azalması ile (Knudsen sayısının artması ile) sıcaklık sıçraması da artmaktadır. Elde edilen sonuçlar, küçük Knudsen sayılarına karşılık geldiği için sıcaklık sıçraması modelleri ile TAC (thermal accommodation coefficient) değeri tahmin edilebilir. Şekil 5.6(b) ikinci derece sıcaklık sıçrama modeli (Dinler, 2014) ile tahmin edilmiş TAC değerlerini göstermektedir. Sonuçlar TAC değerinin eğriliğın etkili bir fonksiyonu olmadığını göstermektedir. TAC değeri termal dirence aşağıdaki formül ile ilişkilendirilebilir (Liang vd., 2013):

$$R_T = \frac{(2 - \alpha_T)}{4\alpha_T k_B N} \quad (5.3)$$

burada α_T TAC değeri, k_B Boltzmann sabiti, $N = P/\sqrt{2\pi mk_B T}$ çarpışma miktarı (*ing. collision rate*); P basınç, T sıcaklık ve m atomik kütle. Kapitza mesafesi, $L_K = \Delta T/(\partial T/\partial r)$, ise moleküler dinamik sonuçları ile buradan hesaplandı. Şekil 5.7 ile verilen sonuçlar ışığında, Kapitza mesafesinin yine eğriliğın belirgin bir fonksiyonu olmadığı sonucuna ulaşıldı.

5.2 Kinetik Teori ile Dışbükey Duvar-Gaz Arayüzünde Isı Transferinin İncelenmesi

Bu kısımda önceki kısımda MD simülasyonlarında görülen yüksek sıcaklık sıçraması için kinetik teori ile bir açıklama getirilecektir. Önceki kısımdaki sonuçlar, S sınır tabakasının literatürde önerildiği haliyle bulunan sıcaklık sıçraması miktarını açıklayamadığını gösterdi. Boltzmann denklemi (Bhatnagar-Gross-Krook (BGK)) denklemi, iki silindir arasında yazılıp gerekli işlemler yapılırsa, aşağıdaki integral denklem takımı elde edilir (Sone ve Yamamoto, 1968; Sone, 2002):

$$\begin{aligned} \pi\omega(\mathbf{r}) = & \int_S \left[\bar{\omega}^* J_1 \left(\frac{|\mathbf{r} - \mathbf{R}_i|}{\lambda} \right) + \bar{\tau} \left[J_3 - \frac{3}{2} J_1 \right] \right] \frac{\cos \alpha_1 dS}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}_i|} + \\ & \frac{1}{\lambda} \iint_D \left[\omega(\mathbf{r}') J_0 \left(\frac{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}{\lambda} \right) + \tau(r') [J_2 - J_0] \right] \frac{dr'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \\ \frac{3}{2} \pi\tau(\mathbf{r}) = & \int_S \left[\bar{\omega}^* \left[J_3 \left(\frac{|\mathbf{r} - \mathbf{R}_i|}{\lambda} \right) - J_1 \right] + \bar{\tau} \left[J_5 - \frac{5}{2} J_3 + 2J_1 \right] \right] \frac{\cos \alpha_1 dS}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}_i|} + \\ & \frac{1}{\lambda} \iint_D \left[\omega(\mathbf{r}') \left[J_2 \left(\frac{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}{\lambda} \right) - J_0 \right] + \tau(r') \left[J_4 - 2J_2 + \frac{3}{2} J_0 \right] \right] \frac{dr'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \end{aligned} \quad (5.4)$$

burada λ serbest ortalama yol, $dS = \mathbf{R}_i d\theta$; α_1 , $\mathbf{R}_i$ ve $\mathbf{r} - \mathbf{R}_i$ vektörleri arasındaki açı. $\mathbf{r}'$ molekülün konum vektörüdür. $\mathbf{R}_i$, $i = 1, 2$ yarıçap vektörleri, sırasıyla iç ve dış silindirler için.

T_1 ve T_2 içi ve dış silindir yüzey sıcaklıkları. $\bar{\tau} = (T_1 - T_2)/T_2$ ise silindirler için boyutsuz sıcaklık farkı. Silindirler arasındaki açıklık yeterince geniş farz edilmiştir, öyle ki Knudsen tabakaları birbirine dokunmaz. Yüzeylerden uzakta, çizgisel integraller ihmal edilebilir. Ve yüzeylerden uzakta, akışkan bölgesinde, süreklilik (*ing. continuum*) denklemleri geçerlidir. Yukarıdaki denklemde J_n fonksiyonları Abramowitz fonksiyonlarıdır. J_n fonksiyonlarının argümanı açıkça gösterilmemiştir yukarıda, eğer bir önceki J_n fonksiyonun argümanı ile aynı ise. n'yinci dereceden Abramowitz fonksiyonu aşağıdaki gibi tanımlıdır:

$$J_n(t) = \int_0^\infty \xi^n \exp\left(-\xi^2 - \frac{t}{\xi}\right) d\xi. \quad (5.5)$$

(5.4) integral denklemlerini analitik çözmek mümkün değildir. Sayısal (örneğin DSMC, DVM ya da latis Boltzmann yöntemiyle) çözümleri ise Knudsen ve S sınır tabaka kalınlıkları için analitik bir ilişki veremez. Bu denklemi incelemek için daha önce yapılan analizlerin (Sone, 2007) ışığında bu proje kapsamında ilk defa yüzey üzerinde ζ yarıçaplı bir disk tanımlaması önerildi. Bu denklemlerdeki her $J_n(x)$ fonksiyonunun (5.4) denklemindeki hacim integraline katkısı aşağıdaki gibi yazılabilir:

$$I_n = \int_0^{\zeta'} \int_0^{2\pi} \psi(\mathbf{r}; x', \theta) J_n(x'/\lambda) d\theta dx' \quad (5.6)$$

burada ψ , $\mathbf{r}$ 'nin bir fonksiyonu ve kapalı olarak $x' = |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$ ve θ 'ya bağlıdır. (5.6) denklemindeki integral ζ' diski üzerinde tanımlıdır ve boyutsuz $\zeta = \zeta'/\lambda$ diskini zeta diski olarak isimlendirdik. Dışbükey yüzeyde (5.6) denklemini aşağıdaki şekilde parçalayabiliriz:

$$\lambda^{-1} I_n = \int_0^\zeta \int_0^{2\pi} \psi(\mathbf{r}; x', \theta) J_n(\xi) d\theta d\xi + \int_\zeta^{\zeta'} \int_0^{2\pi} \psi(\mathbf{r}; x', \theta) J_n(\xi) d\theta d\xi. \quad (5.7)$$

burada ilk terim zeta diski üzerindedir ve bu terimin (5.4) integral denklemine katkısı şu şekilde yazılır:

$$\tilde{I}_n = 2\pi\lambda P_n(\zeta) \psi(r) + \frac{\pi}{2} \lambda^3 Q_n(\zeta) \Delta\psi(r) + \dots \quad (5.8)$$

(5.7) denkleminin ilk integrali, ζ 'nın değişen değerleri için sayısal integre edilir ve interpolasyonu yapılırsa $P_n(\zeta)$ ve $Q_n(\zeta)$ fonksiyonları aşağıdaki gibi elde edilir. Tablo 5.3'de bulunan bu fonksiyonlar verildi.

Tablo 5.3. Zeta disk analizi için hesaplanan $P_n(\zeta)$ ve $Q_n(\zeta)$ polinomları.

$P_0(\zeta) = 0.26878 + 0.109791 \zeta - 0.0166555 \zeta^2 + 0.000804146 \zeta^3$
$P_1(\zeta) = 0.180719 + 0.119315 \zeta - 0.0176313 \zeta^2 + 0.000837256 \zeta^3$
$P_2(\zeta) = 0.159591 + 0.148433 \zeta - 0.0213737 \zeta^2 + 0.000998434 \zeta^3$
$P_3(\zeta) = 0.17063 + 0.206976 \zeta - 0.0290653 \zeta^2 + 0.0013362 \zeta^3$
$P_4(\zeta) = 0.211258 + 0.318157 \zeta - 0.0436143 \zeta^2 + 0.00197439 \zeta^3$
$Q_0(\zeta) = -0.155404 + 0.252829 \zeta - 0.0182955 \zeta^2 + 0.000432665 \zeta^3$
$Q_1(\zeta) = -0.234792 + 0.311555 \zeta - 0.0208308 \zeta^2 + 0.000461872 \zeta^3$
$Q_2(\zeta) = -0.363371 + 0.428021 \zeta - 0.0261185 \zeta^2 + 0.000532092 \zeta^3$
$Q_3(\zeta) = -0.593351 + 0.64457 \zeta - 0.035353 \zeta^2 + 0.000640494 \zeta^3$
$Q_4(\zeta) = -1.02716 + 1.05051 \zeta - 0.0507637 \zeta^2 + 0.000770743 \zeta^3$

(5.8) denklemi $P_n(\zeta)$ ve $Q_n(\zeta)$ polinomları ile (5.4) denkleminde yerine yazılır ve düzenlenirse (5.4) denklemi aşağıdaki forma gelir:

$$\begin{aligned} (\beta_1(\zeta) - 1)\omega + \gamma_1(\zeta)\Delta\omega + \beta_2(\zeta)\tau + \gamma_2(\zeta)\Delta\tau &= 0 \\ (\beta_3(\zeta) - 1)\tau + \gamma_3(\zeta)\Delta\tau + \beta_4(\zeta)\omega + \gamma_4(\zeta)\Delta\omega &= 0 \end{aligned} \quad (5.9)$$

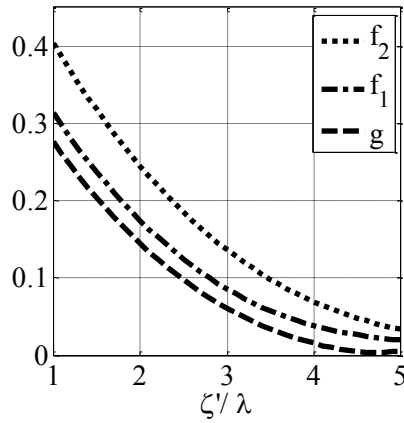
Bu denklem takımı $\zeta \rightarrow \infty$ için sürekli ortam denklem sistemine:

$$\begin{aligned} c_1\Delta\tau + c_2\Delta\omega &= 0 \\ c_2\Delta\tau + c_3\Delta\omega &= 0 \end{aligned} \quad (5.10)$$

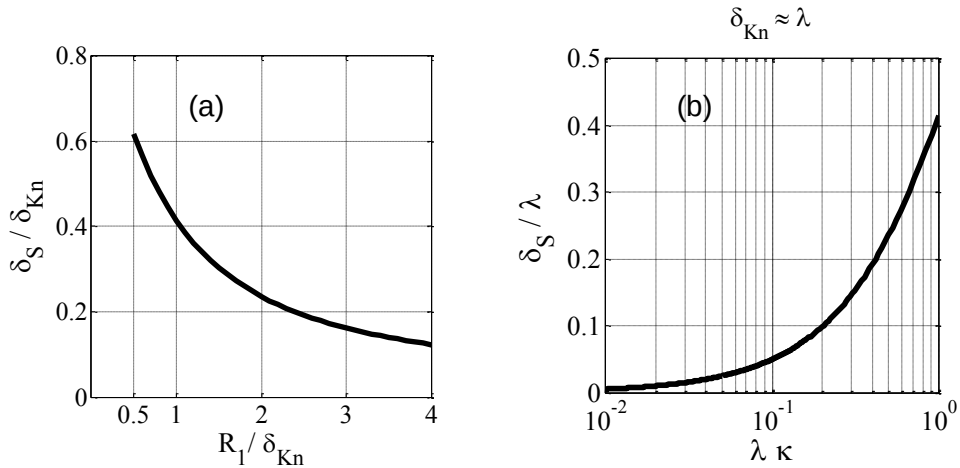
dönüşür. Burada c 'ler sabit katsayıdır. Ve bu sistem $\Delta\tau = 0$ ve $\Delta\omega = 0$ eşitliklerini gerektir. Bunlar duvar etkileri ve Knudsen sınır tabakası tamamıyla ihmal edilmesi ile elde edilen çözümlerdir. Şimdi, ζ 'ya bağlı olarak (5.9) denkleminin (5.10) denklemine ne kadar hızlı dönüştüğünü düz yüzeylere göre kıyaslayabiliriz. Bunun için aşağıdaki ölçü fonksiyonlarını tanımladık:

$$\begin{aligned} g(\zeta) &= \sqrt{\alpha(\zeta)^2 + \beta(\zeta)^2} \\ f_1(\zeta) &= \sqrt{(\beta_1(\zeta) - 1)^2 + \beta_2(\zeta)^2} \\ f_2(\zeta) &= \sqrt{(\beta_3(\zeta) - 1)^2 + \beta_4(\zeta)^2} \end{aligned} \quad (5.11)$$

Yukarıdaki (5.11) denklemindeki fonksiyonlar denklem (5.9)'deki sürekli ortam çözümünü elde etmek için küçük olmalıdır. $g(\zeta)$ düz yüzeye ait fonksiyondur. Şekli 5.8, bu fonksiyonların küçülmesini göstermektedir. Şekil 5.8 açıkça eğrisel yüzeylerin varlığında yüzeyden kaynaklanan nonlineer etkilerin akışkan bölgesine daha fazla penetre ettiğini göstermektedir. Ve sonuçlar Knudsen tabaksının dışbükey yüzeyde daha kalın olduğunu kanıtlamaktadır.



Şekil 5.8. $g(\zeta)$, $f_1(\zeta)$ ve $f_2(\zeta)$ metrikleri. f_1 ve f_2 , g 'ye göre daha yavaş azalmaktadır. Düz yüzeye kıyasla, sürekli ortam (*ing. continuum*) davranışı yüzeyden daha uzakta görülür.



Şekil 5.9. (a) S sınır tabakasının kalınlığının Knudsen sınır tabakası kalınlığına oranının (δ_S / δ_{Kn}) , R_1 / δ_{Kn} ile değişimi. (b) Boyutsuz S sınır tabakası kalınlığının δ_S / λ , boyutsuz eğrilik $\lambda \kappa$ ile değişimi. Şekil 5.9(b)'de Knudsen sınır tabakası kalınlığı $\delta_{Kn} = \lambda$ alındı. Dışbükey yüzeyin eğriliği $\kappa = 1/R_1$.

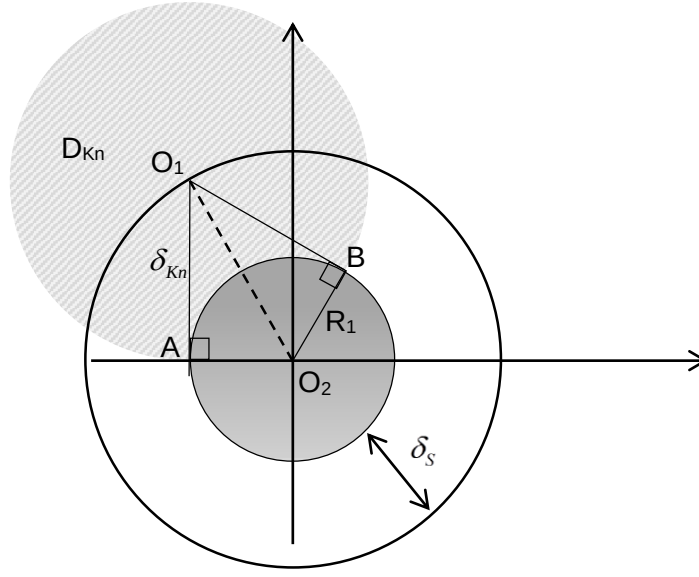
Knudsen sınır tabakasının dışbükey yüzeylerde genişlediği böylece gösterildi. Şimdi S sınır tabakasının da Knudsen sınır tabakası ile genişlediğini de göstereceğiz. S sınır tabakasının kalınlığı Şekil 5.10'da gösterildiği gibi tam olarak ilk defa hesaplandı. S sınır tabakasının kalınlığı, S sınır tabakasının varlığı ile akışkanın etkilendiği kalınlıktır. Şekil 5.10, D_{Kn} Knudsen diskini ve δ_{Kn} Knudsen sınır tabakasını göstermektedir. δ_S , S sınır tabakasını kalınlığıdır. Şekil 5.10'da O_2AO_1 ve O_2BO_1 üçgenleri dik üçgen ve $R_1 + \delta_S$ hipotenüstür. Buradan S sınır tabakası kalınlığı

$$\delta_S = \sqrt{\delta_{Kn}^2 + R_1^2} - R_1. \quad (5.12)$$

olarak bulundu. (5.12) ifadesi, δ_{Kn} 'ye göre seriye açılırsa

$$\frac{\delta_S}{\delta_{Kn}} = \frac{\delta_{Kn}}{2R_1} - \frac{\delta_{Kn}^3}{8R_1^3} + \frac{\delta_{Kn}^5}{16R_1^5} + O(\delta_{Kn}^7). \quad (5.13)$$

elde edilir. Dışbükey yüzeyin eğriliği ($\kappa = 1/R_1$) arttıkça δ_S/δ_{Kn} oranı büyür. Şekli 5.9, δ_S/δ_{Kn} 'nin R_1/δ_{Kn} ile değişimini ve δ_S/λ 'nin boyutsuz eğrilik $\lambda\kappa$ ile değişimini göstermektedir. Sonuçlar Knudsen tabakasının dışbükey yüzeyde daha kalın olduğunu ve Knudsen tabakasının kalınlığının artması ile S sınır tabakasının kalınlığının da arttığını gösterdi. Dışbükey yüzeyin eğriliği arttıkça ($R_1 \rightarrow 0$) S sınır tabakasının Knudsen tabakası içindeki oranı da atmaktadır ($\delta_S/\delta_{Kn} \rightarrow 1$). Bu durum görülen yüksek sıcaklık sıçramasını açıklayabilir.



Şekil 5.10. S sınır tabaksının kalınlığı δ_S . D_{Kn} Knudsen disk, O_1 merkezine sahip ve yüzeye A ve B noktalarında dokunur. $|O_2A| \perp |AO_1|$ ve $|O_1B| \perp |BO_2|$. Eğrilik yarıçapı R_1 . Kesikli çizgi $R_1 + \delta_S$ mesafesini gösterir.

6. EĞRİSEL MİKRO KANALLARDA ATALETSEL ODAKLANMA

Mikroakışkan pltaformlar parçacık/hücre izalasyonu ve ayrışımında anahtar teknoloji haline gelmektedir. Ataletsel odaklanma mikro-kanal içerisinde hareket eden sıvı içerisinde bulunan partiküllerin eğrisel yüzeyine etki eden hidrodinamik kuvvetlerin etkisi ile kanalın belli noktalarında sıralanması ve odaklanması olarak tanımlanabilir. Dikdörtgen kesit alanlı kanallar mikro-akışkan uygulamalarında en yaygın kullanılan ve nispeten güvenilir ölçülerde üretilen kanallardır. Mikro kanallarda ataletsel odaklanma (*ing. inertial focusing*) adı verilen davranışın dikdörtgensel kanallarda çok çeşitli uygulamaları son yıllarda ortaya çıkmıştır (Di Carlo, 2009; Karimi vd., 2013; Martel ve Toner, 2013). Ataletsel odaklanma akışkan davranışı ile ilgili olup sıvı içerisindeki parçacıklar, kanal merkezinden kanal duvarına olan mesafenin 2/5'i kadar duvardan uzakta toplanırlar. Bu durum parçacıkların (mesela hücre veya proteinlerin) yüzey ile etkileşime girmesini engelleyerek cihazların daha dayanıklı (*ing. robust*) çalışmasını sağlarken diğer taraftan cihazın elektrokinetik ya da kameralı ölçüm yapan kısmına parçacıkların kontrollü aktarılmasını sağlar.

Eğer kanal eğrisel ise karşılıklı yüzeylerin birbirine göre simetrisi bozulmakta, iç yüzey dışbükey ve karşısındaki yüzey içbükey olmaktadır. Bu yüzey simetrisinin bozulması ataletsel odaklanma ve merkezkaç kuvveti ile beraber akışkana çok önemli bir özellik kazandırmaktadır. Bu özellik yanal yönde *parçacıkların boyutlarına göre ayrılmasıdır* (Amini vd., 2014; Martel ve Toner, 2014; Zhang vd., 2014). Böylece hücre ayrışımı mümkün olmakta, örneğin kanser hücreleri kandaki farklı hücrelerden ayrılabilir. Bu amaçla Hou vd. (2013), Seo vd. (2007a, 2007b), Kuntaegowdanahalli vd. (2009), Bhagat vd. (2008) ve Jimenez vd. (2017) spiral kanalları incelenmiş ve spiralın merkezinden spiralın dışına doğru yönelen akışta boncukların izole edilebildiğini göstermiştir. Di Carlo vd. (2007) ve Zhang vd. (2014) ise yilankavi kanal şeklini incelemiş ve düz bir kanala göre küresel boncukların boylarına göre odaklanma noktalarının değiştiğini göstermiştir. Spiral kanallar çok çeşitli uygulamalara konu olmuştur. Hou vd. (2013) tümör hücrelerini, Hou vd. (2015) bakterileri, Warkiani vd. (2016) maya hücrelerini ve Schaap vd. (2016) algileri, spiral kanallarda ataletsel odaklanma ile %95' varan verimlilikle solüsyon içerisinde izole etmiştir. Warkiani vd. (2015) bu ayrışmayı 84 spiral kanal ile 500ml/dk seviyesinde başarmıştır ki alternatif tekniklere göre 10 ile 100 kat hızlı olduğu söylenebilir. Ataletsel odaklanma herhangi bir dış kuvvet (örneğin elektrik/manyetik alan) olmadan gerçekleştiği için daha basit bir düzenek ile yüksek hızda (throughput) ayrışmaya olanak sağlamaktadır. Ancak hem spiral hem de yilankavi kanallarda, beraber yüzen farklı çaplı parçacıkların farklı kanal çıkışlarına verimli yönlendirilebileceği öngörülse bile gösterilememiştir. Bu konu aktif çalışma konusudur. Odaklanma, kanal kesitinin en-boy

oranının ve eğriliğinin değişimine çok hassas bağlı olmakla birlikte akış hızı (Reynolds sayısı) ve parçacık boyutundaki değişim de odaklanma üzerine ciddi etkiler oluşturabilmektedir. Bu çok parametrelili hassas prosesin anlaşılması için bu projede küresel parçacığın üzerine yuvarlanırken etki eden net kuvvetler hesaplanmış ve kanal kesitinin en-boy oranının ve kanal eğriliğinin, parçacık çapının ve akış hızının odaklanma ve odaklanma noktalarının konumuna etkisi araştırılmıştır. Bildiğimiz kadarıyla bu çapta benzer bir çalışma daha önce yapılmamıştır.

Eğrisel üç boyutlu kanallarda merkezkaç kuvvetinden dolayı ana akışa dik yanıl düzlemde iki simetrik girdap oluşur. Bu akışa Dean akışı ve oluşan girdaplara Dean girdapları denir. Yanıl düzlemde ayrışmanın mekanizmasının anlaşılması için Dean akışının çözümü çok önemlidir. Bu kısımda öncelikle Dean akışı sonlu elemanlar (Comsol multiphysics Inc. ver. 4.4) yazılımı ile modellenip çözümler elde edilmiştir. Ancak daha iyi bir analiz için analitik çözümlerin önemi ortada olup hem parçacık ayrışma mekanizmasının anlaşılması hem de kanal dizayn parametrelerini bulmak için formüllerin ortaya konabilmesi kritiktir (Di Carlo, 2009; Martel ve Toner, 2013). Bu yönde, Dean akışı için daha önce bulunmuş analitik çözümler (Norouzi ve Biglari, 2013) tekrar edildi ve verilmemiş özel çözümler bulundu. Daha sonra parçacık içeren eğrisel kanallarda ataletsel odaklanma ayrıntılı incelendi. Parçacık içeren akışın simülasyonu zordur ve geometrinin büyüklüğü ve problemin zamana bağıllığı göz önüne alınınca çözüm çok uzun sürer. Bunun yerine istenen geometride, parçacık akış içerisinde taşınırken ki koşullar oluşturulup parçacık etrafındaki kuvvetler simüle edildi. Sonuçlar deney sonuçları ile uyduşt. Bu kapsamda bir çalışma ilk olma özelliğine de sahiptir. Elde edilen sonuçların bir kısmı ASME 14th International Conference on Nanochannels, Microchannels, and Minichannels konferansında sunuldu (Setayesh Hagh ve Dinler, 2016). Yazımı devam eden diğer sonuçlar ise bu raporda paylaşıldı.

6.1. Dean Akışı ve Dean Akışının Sonlu Elemanlar Yöntemi ile Sayısal Çözümü

Dean akışı, eğrisel üç boyutlu kanallarda oluşan bir akıştır. Dean akışı, Dean sayısının büyümesi ile etkisini gösterir. Dean sayısı, De , boyutsuz bir sayıdır:

$$De = \frac{U d}{\nu} \sqrt{\frac{D_h}{2R}}$$

ve şeklinde tanımlanır. Burada U akışkanın hızı, d kanal boyu, D_h hidrolik çap, R kanalın eğrilik yarıçapı, ν kinematik viskozitedir.

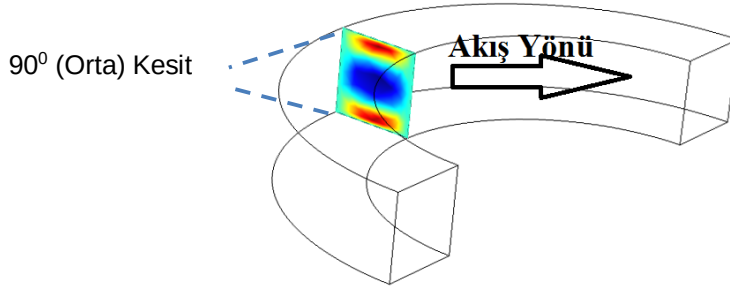
Hidrolik çap:

$$D_h = \frac{2hw}{h+w}$$

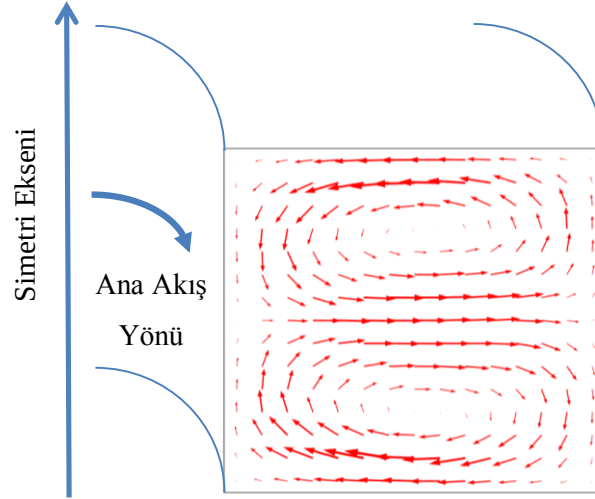
formülü ile hesaplanır. Burada w kanal genişliği ve h ise kanalın yüksekliğidir.

İkincil akış olarak da bilinen Dean akışı, kanaldaki akışkana etki eden merkezkaç kuvvetinden kaynaklanmaktadır. Merkezkaç kuvvetinin etkisiyle akışkan eğrilik merkezinden dışa doğru hareket eder. Bu hareket sonucunda kanal içerisinde simetrik iki girdap oluşur. Şekil 6.1 Comsol programı ile çizilmiş geometride çözülmüş yanal düzlemde oluşan ikincil akışı göstermektedir. Kanal yüksekliği ve genişliği 50 mikron, kanal eğrilik yarıçapı 75 mikron seçilmiştir.

Dean sayısı, Reynolds sayısına ve kanalın geometrik boyutlarına bağlıdır. Düz kanallarda Dean akışı oluşmaz. Reynolds sayısının ve eğriliğin artması ile Dean sayısı artar. Viskozite artırsa Dean sayısı azalır. Dean akışında akışkan üzerine etki eden merkezkaç kuvveti kanal içerisinde hız farklılığı oluşturmaktadır. Böylece akış yönüne dik ve yanal düzlemde ikincil bir akış meydana gelir. Şekil 6.2 oluşan hız vektörlerini ve simetrik girdapları göstermektedir.



Şekil 6.1. Dean akışına ait kesitte hız alanı. Mavi ve kırmızı renkler, zıt yönlerdeki yanal hızları göstermektedir. Mavi renk, hız vektörünün merkezkaç kuvveti yönünde olduğunu; kırmızı renk ise hız vektörünün dönme merkezine doğru olduğunu göstermektedir.



Şekil 6.2. Comsol programı ile çözülmüş Dean akışına ait yanal hız vektör alanı. Simetrik iki girdap açıkça gözükmemektedir. Dean akışı ile ilgili bazı bilgi ve Şekil 6.2 tarafımızdan ilgili vikipedi (http://tr.wikipedia.org/wiki/Dean_akışı) sayfasında paylaşılmıştır.

6.2. Dean Akışının Asimptotik Yöntem ile Analitik Çözümü

Bu kısımda Dean akışı için Yanase vd. (2005) ve Norouzi ve Biglari (2013) çalışmaları takip edilerek ve özel çözüm bulunarak analitik çözüm elde edildi. Aşağıda üç boyuttaki denklemler asimptotik yöntem ile çözülmüş ve elde edilen çözüm Comsol çözümü ile karşılaştırılmıştır. Ana akış yönünde momentum denklemi ve stream fonksiyon denklemi sırasıyla aşağıdaki gibi yazılabilir (Yanase vd., 2005; Norouzi ve Biglari, 2013):

$$\frac{\text{Re } B}{L} \left(\frac{\partial(w, \psi)}{\partial(x, y)} + \frac{\delta}{B} \frac{\partial \psi}{\partial y} w \right) = 4B + B^2 \nabla_2 w - \delta^2 w + B \delta \frac{\partial w}{\partial x}, \quad (6.1)$$

$$\begin{aligned} & \frac{B^2}{L} \left(\frac{\partial(\nabla_2 \psi, \psi)}{\partial(x, y)} \right) + \frac{2\delta B^3}{L} w \frac{\partial w}{\partial x} - \delta B \left(\frac{3}{L} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \frac{\partial \psi}{\partial y} + \frac{2}{L^3} \frac{\partial \psi}{\partial y} \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} - \frac{1}{L} \frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x \partial y} \right) + \frac{3\delta^2}{L} \frac{\partial \psi}{\partial y} \frac{\partial \psi}{\partial x} \\ & = \frac{1}{\text{Re}} \left(B^3 \nabla_2^2 \psi - 2\delta B^2 \frac{\partial}{\partial x} \nabla_2 \psi + \delta B \left(3\delta \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi - \frac{3\delta^2}{B} \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) \right) \end{aligned} \quad (6.2)$$

burada

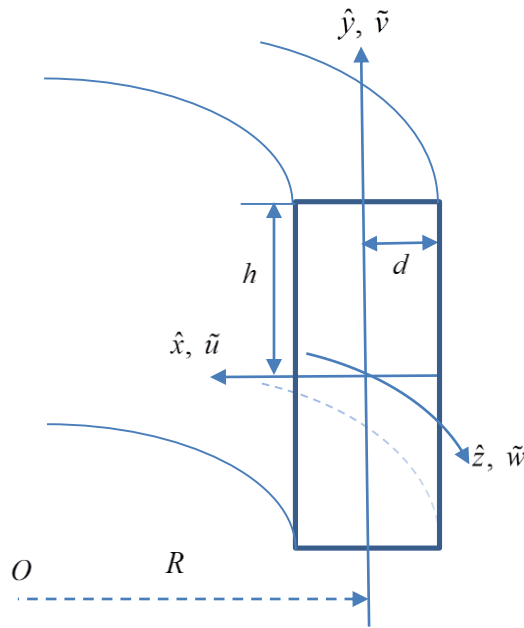
$$\nabla_2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{L^2} \frac{\partial}{\partial y^2} \text{ ve } \frac{\partial(f, g)}{\partial(x, y)} = \frac{\partial f}{\partial x} \frac{\partial g}{\partial y} - \frac{\partial f}{\partial y} \frac{\partial g}{\partial x}$$

dir.

Boyutsuz değişken ve parametreler ise şöyle tanımlanmıştır:

$$\begin{aligned}
 x &= \frac{\hat{x}}{d}, \quad y = \frac{\hat{y}}{d}, \quad z = \frac{\hat{z}}{d}, \quad \delta = \frac{d}{R}, \quad L = \frac{h}{d} \\
 u &= \frac{\tilde{u}}{w_{ref}}, \quad v = \frac{\tilde{v}}{w_{ref}}, \quad w = \frac{\tilde{w}}{w_{ref}}, \quad \psi = \frac{\tilde{\psi}}{L d w_{ref}}, \quad B = 1 + \delta x
 \end{aligned}
 \tag{6.3}$$

burada δ eğrilik oranı, R eğrilik yarıçapı, L aspect ratio, B kesit alanda her noktanın eğriliği, u ve v yanal hız vektörleri, w ana akış yönündeki hız vektörü, ψ stream fonksiyonudur. Aşağıdaki Şekil 6.3 akışa ait geometriyi ve parametrelerini göstermektedir



Şekil 6.3. Analitik çözümde akış geometrisine göre değişken ve parametreler.

Referans hız $w_{ref} = \frac{G d^2}{16\mu}$ olarak tanımlıdır, burada G basınç gradyanının mutlak değeri ve μ dinamik viskozitedir. Reynolds sayısı $Re = \frac{G d^3}{16\mu\nu}$; burada ν kinematik viskozitedir. Dean sayısı $De = Re\delta^{1/2}$ olarak tanımlanmıştır.

Yanal hızlar, sırasıyla x ve y yönlerinde stream fonksiyonu cinsinden:

$$u = \frac{1}{B} \frac{\partial \psi}{\partial y} \quad \text{ve} \quad v = -\frac{1}{B} \frac{\partial \psi}{\partial x}
 \tag{6.4}$$

şeklinde tanımlıdır.

Sınır koşulları ise

$$x = \pm 1 \text{ için } w = \psi = \frac{\partial \psi}{\partial x} = 0, \quad y = 1 \text{ için } w = \psi = \frac{\partial \psi}{\partial y} = 0 \quad \text{ve} \quad y = 0 \text{ için } \psi = \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} = 0
 \tag{6.5}$$

dir.

Analitik çözüm, eğrilik oranının (δ) pertürbasyon parametresi olarak kullanılması ile elde edilecektir. Buna göre w ve ψ hızları için aşağıdaki seriler kullanılabilir:

$$w = \sum_{n=0}^{\infty} w_n(x, y) \delta^n \text{ ve } \psi = \sum_{n=1}^{\infty} \psi_n(x, y) \delta^n \quad (6.6)$$

Bu seriler yukarıdaki (6.1) ve (6.2) denklemlerinde yerlerine konur ve terimler mertebelerine göre gruplanır. Sıfırıncı mertebeden (δ^0) başlayarak adım adım üst mertebelere doğru çözümler elde edilir. Sıfırıncı mertebeden çözüm düz kanal (eğrilik içermeyen) çözümdür.

Sıfırıncı mertebeden çözüm (δ^0) için (6.6) serileri (6.1) içine konarak terimler düzenlenirse elde edilen lineer kısmi türevli denklem değişkenlerine ayırma yöntemi ile çözülebilir. Elde edilen w_0 çözümü (Norouzi ve Biglari, 2013):

$$w_0(x, y) = \sum_{n=1,3,5,\dots}^{\infty} \frac{64L^2(-1)^{(n+1)/2}}{(n\pi)^3} \left(1 - \frac{\cosh \lambda_n x}{\cosh \lambda_n L}\right) \cosh \lambda_n y \quad (6.7)$$

burada özdeğerler $\lambda_n = \frac{n\pi}{2L}$, $n=1,3,5,\dots$ dir.

Birinci mertebeden çözüm (δ^1) için (6.6) ifadeleri (6.2) içine konarak elde edilen terimler düzenlenirse aşağıdaki kısmi türevli denklem

$$\frac{\partial^4 \psi_1}{\partial x^4} + \frac{1}{L^4} \frac{\partial^4 \psi_1}{\partial y^4} + \frac{2}{L^2} \frac{\partial^4 \psi_1}{\partial y^2 \partial x^2} = \text{Re} \frac{2}{L} w_0 \frac{\partial w_0}{\partial y} \quad (6.8)$$

elde edilir. Bu denklemdeki sağ taraf δ^0 -mertebeye y -yönündeki (ana akış yönü) w_0 hızı ve onun türevini içerir. $\cos \frac{n\pi y}{2}$ ve $\sin \frac{m\pi y}{2}$ içeren terimlerin çarpımından oluşan bu sağ taraf, dikkat edilirse sadece m ve n 'nin tek değerlerinden oluşur. Bu durumda trigonometrik özelliklerden faydalanılarak bütün sağ taraftaki y 'li terimler sinüs fonksiyonları tipinden yazılabilir. Bu durumdan faydalanılarak (6.8) denklemi için aşağıdaki formda bir çözüm önerilebilir:

$$\psi_1(x, y) = \sum_{m=1,2,3,\dots}^{\infty} \phi_m(x) \sin(m\pi y) \quad (6.9)$$

(6.9) serisi (m birer birer artmakta) yukarıdaki (6.8) kısmi türevli denklemde yerine yazılırsa (6.8) denklemi aşağıdaki dördüncü dereceden adi türevli bir denkleme dönüşür:

$$\phi_m^{(4)} - 2 \left(\frac{m\pi}{L} \right)^2 \phi_m^{(2)} + \left(\frac{m\pi}{L} \right)^4 \phi_m = \text{Re} \frac{2}{L} F_m(x) \quad (6.10)$$

burada $F_m(x)$, $w_0 \frac{\partial w_0}{\partial y}$ çarpımında $\sin(m\pi y)$ 'li terimin önündeki terimlerdir.

Homojen çözüm (6.10) denklemi için aşağıdaki gibi bulunabilir:

$$\phi_m^H = C_1 \cosh\left(\frac{m\pi x}{L}\right) + C_2 \sinh\left(\frac{m\pi x}{L}\right) + C_3 x \cosh\left(\frac{m\pi x}{L}\right) + C_4 x \sinh\left(\frac{m\pi x}{L}\right) \quad (6.11)$$

Dolayısıyla (6.8) denkleminin homojen çözümü (6.9)'dan

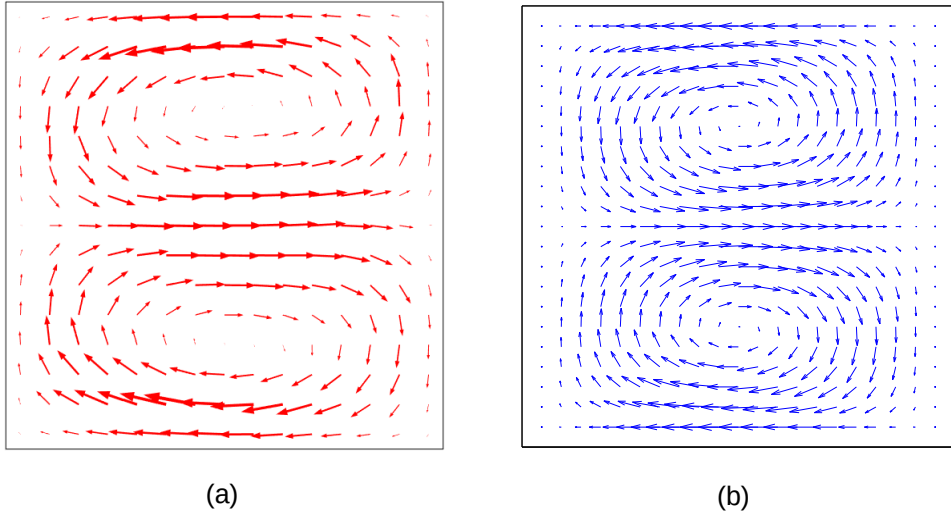
$$\psi_1^H(x, y) = \sum_{m=1,2,3,\dots}^{\infty} \phi_m^H(x) \sin(m\pi y) \quad (6.12)$$

şeklinde bulunmuş olur.

Özel Çözüm bulunması en fazla hesap gerektiren kısım olup buraya kadar esas alınan çalışmada (Norouzi ve Biglari, 2013) verilmemiştir. Özel çözüm olmadan akış davranışını görmek mümkün değildir. Aranılan çözüm (homojen+özel çözüm), $\psi_1(x, y)$, şöyle bulunabilir:

- I. $w_0 \frac{\partial w_0}{\partial y}$ çarpımı, w_0 çözümü (6.7)'nin N terimi alınarak hesaplanır. Trigonometrik özdeşlikler ile $\sin(m\pi y)$, ($m=1,2,3,\dots$) cinsinden $w_0 \frac{\partial w_0}{\partial y}$ çarpımı düzenlenir.
- II. Her $\sin(m\pi y)$ için bir $F_m(x)$ bulunur. Böylece $m=1,2,3,\dots,M$ için denklem (6.10) formunda M tane adi türevli denklem elde edilir.
- III. Bu M tane türevli denklem birbirinden bağımsız olarak $x=\pm 1$ için $\phi = \frac{\partial \phi}{\partial x} = 0$ sınır koşulları ile ayrı ayrı çözülür.
- IV. Böylece $\psi_1(x, y) = \sum_{m=1,2,3,\dots}^M \phi_m(x) \sin(m\pi y)$ ile birinci mertebeden $\psi_1(x, y)$ stream fonksiyonu bulunur.
- V. Daha sonra $u = \frac{1}{B} \frac{\partial \psi_1}{\partial y}$ ve $v = -\frac{1}{B} \frac{\partial \psi_1}{\partial x}$ ile yanal hızlar bulunur.

Aşağıdaki Şekil 6.4, analitik çözüm ile Comsol çözümünü göstermektedir. İki çözüm birbiriyle uyumlu olup aynı şekilde yanal düzlemde Dean girdaplarını göstermektedir.

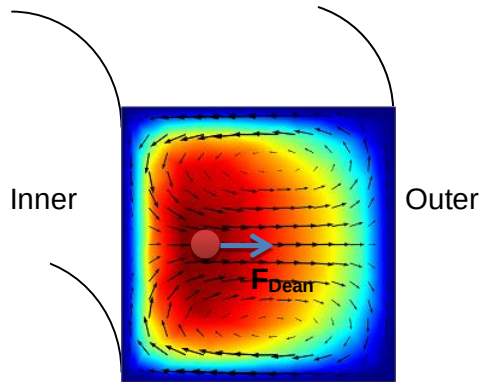


Şekil 6.4. Dean girdapları. En-boy oranı (aspect ratio) 1 ($L=1$) alındı. (a) Sonlu elemanlar (Comsol Inc.) ile sayısal çözüm. (b) Analitik çözüm. Analitik çözümde $N=5$ ($n=1,3,5,7,9$) ve $M=8$ alındı.

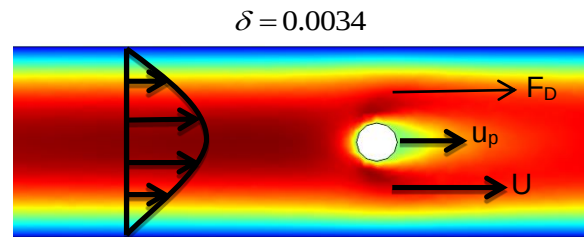
6.3. Eğrisel Kanallarda Parçacık Ayrışımı

Eğrisel mikro kanallarda akış, yanal düzlem üzerinde parçacıkları boyutlarına göre farklı noktalara odaklama özelliğine sahiptir. Bu odaklanma ataletsel odaklanmanın özel bir halidir. Düz kanallarda, akış içindeki parçacıklar boyutlarından bağımsız olarak belli noktalarda odaklandığı halde, eğrisel kanallarda merkez-kaç kuvvetinin varlığı ve eğrisel yüzeylerde oluşan kuvvetlerin etkisi ile parçacıkların boyutlarına göre farklı çıkışlara yönlendirilmesi mümkündür. Bu sebeple eğrisel geometriler; spiral (Seo vd., 2007a, 2007b; Kuntaegowdanahalli vd., 2009; Kemna vd., 2012; Bhagat vd., 2008; Wu vd., 2012; Yoon vd., 2009; Gossett ve Carlo, 2009; Oozeki vd., 2009) ve yilankavi (*ing.* serpentine) (Di Carlo vd., 2007, 2008; Gossett ve Carlo, 2009; Oakey vd., 2010; Zhang vd., 2014) kanal önemli çalışma konusudur. Yüksek hızda (high throughput) hücre ayrışımı için önemli uygulamalar da geliştirilmiştir (Hou vd., 2013; Wu vd., 2012; Lee vd., 2011b; Johnston vd., 2014). Ancak ayrışmanın mekanizması oldukça karışık olup parçacığa etki eden kuvvetler geometrinin değişimine oldukça hassastır. Bu kısımda kapsamında, eğriliğin akış içerisinde taşınan küresel parçacığa etkisi incelendi. Aşağıda verilen her grafik (6.10-6.27) 100'ün üzerinde simülasyon ile elde edilmiştir.

Eğrisel kanallarda yanal düzlem üzerinde simetrik iki Dean girdabı oluşur. Şekil 6.5(a) bu girdapları göstermektedir. Maviden kırmızı renge doğru akış hızı artmaktadır. Şekil 6.5(b) ise ana akış yönünde parçacığın etrafındaki hız dağılımını göstermektedir. $\delta = D_h/2r$ kanal eğriliğidir; r kanal eğrilik yarıçapı ve D_h hidrolik çaptır.

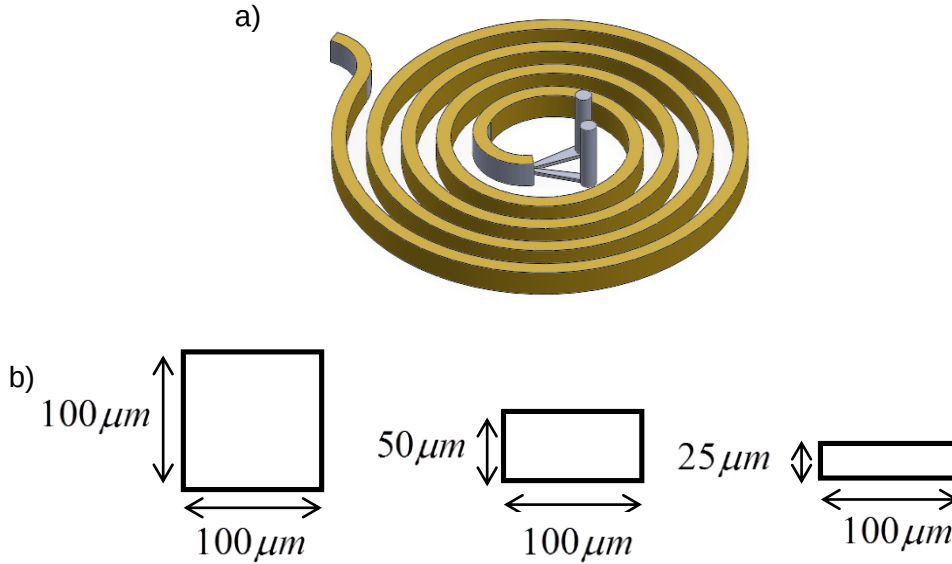


Şekil 6.5. Kare kesit alanlı eğrisel kanalda oluşan iki girdap. Maviden kırmızı renge doğru ana yöndeki hız büyüklüğü artmaktadır. Parçacığa etki eden Dean girdaplarından dolayı oluşan itme (*ing.* drag) kuvveti görülmektedir.



Şekil 6.6. Ana akış yönündeki parçacık etrafındaki akış profili. Kanal eğriliği $\delta = 0.0034$.

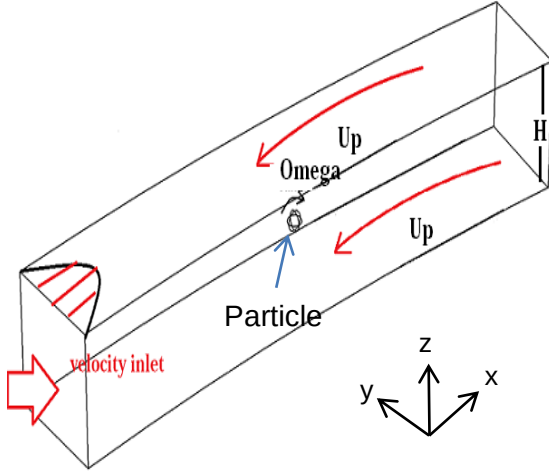
Şekil 6.7, ele alınan spiral geometriyi göstermektedir. Spiral kanalın kesit alanının en-boy oranı (aspect ratio) değişmektedir. Ancak kanal genişliği sabit $100\mu\text{m}$ 'dir. Akış girişte $900\mu\text{l}/\text{min}$ 'dir. Şekil 6.7(b) kullanılan farklı en-boy oranlarını göstermektedir. Bu oranlara karşılık gelen Reynolds sayıları ise sırasıyla 225, 300 ve 360'dır.



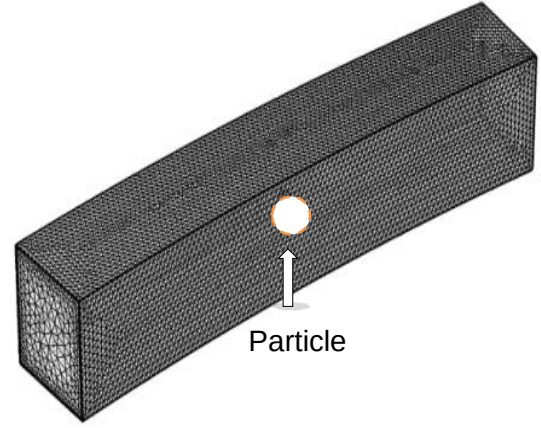
Şekil 6.7. (a) Simülasyonda bir kısmı kullanılan spiral kanal. (b) Kullanılan farklı en-boy oranları.

Atalet odaklanması ve parçacık ayrışım mekanizmasının anlaşılması için parçacık üzerine etki eden kuvvetler simüle edildi. Parçacığa etki eden tüm kuvvetler parçacık yüzeyindeki akışkan hız vektörlerinin büyüklüklerinin bir fonksiyonudur. Simülasyon için sonlu elemanlar yöntemi (Comsol Inc.) kullanıldı. Parçacık içeren bir akışı ve akışkan ile parçacığın hareket halindeki etkileşimini simüle etmek oldukça zordur. Onun yerine, sadece parçacığın üzerine etki eden kuvvetler benzer akış koşulları oluşturularak simüle edildi. Üç boyuttaki geometride yapılan simülasyonların eldeki deney sonuçları ile tutarlı olduğu gösterildi. Farklı boyuttaki parçacıklar için farklı en-boy ve kanal eğrilik değerlerinde yapılan simülasyonlar, eğriliğin ataletsel odaklanmayı iyileştirdiğini diğer yandan en-boy oranının ise ayrışımı iyileştirdiğini gösterdi.

Sayısal çözümlerde serbest dört yüzlü (*ing.* free tetrahedral) elemanlar kullanıldı ve parçacık etrafında sık sınır ağı oluşturularak parçacık etrafındaki kuvvetler hassas yakalandı. Simülasyonların doğruluğunu test etmek için farklı ağ sıklıkları ile çözümün değişimi de izlendi. Ağ özellikleri Tablo 6.1'de verilmiştir. Yapılan karşılaştırma sonucunda tüm simülasyonlarda fine ağ yapısı kullanıldı.



Şekil 6.8(a). Kanal modellemesi.

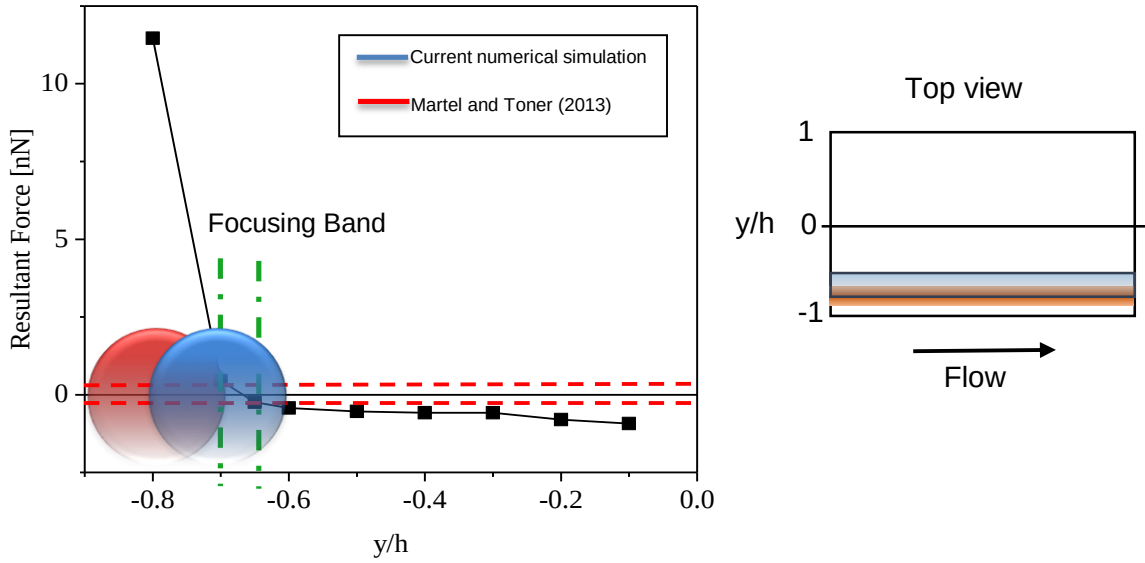


Şekil 6.8(b). Çözüm için parçacık etrafında ağ yapısı.

Tablo 6.1. Ağ boyutu ve ağdan bağımsızlık testi.

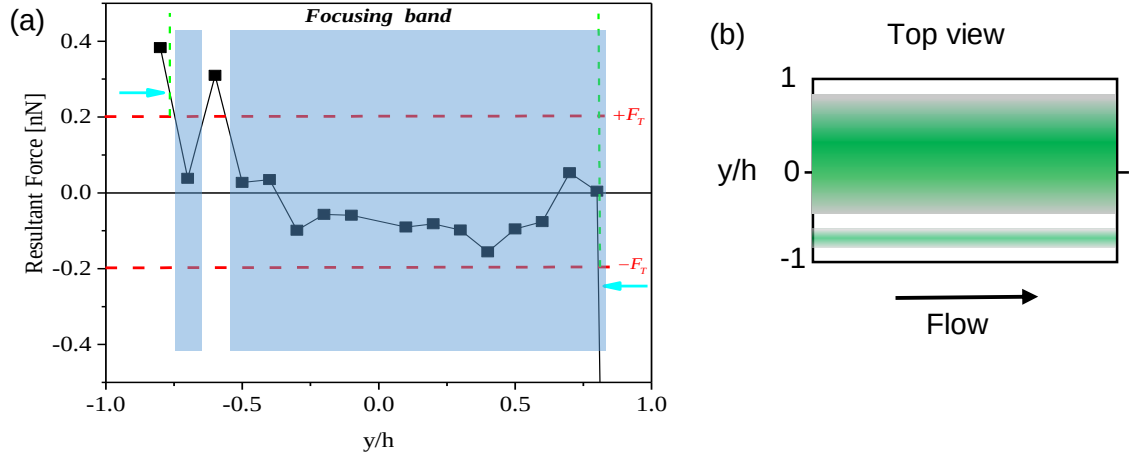
Mesh Type	Coarse	Normal	Fine	Finer
Number of Element	318833	400181	631644	1848294
Degree of Freedom	241134	281976	398454	1092429

Şekil 6.9, hesaplanan odaklanma bandı ile deneysel sonuçları (Martel ve Toner, 2013) Reynolds sayısı 300 ve $\delta = 0.01$ karşılaştırmaktadır. Odaklanma bandının merkezinde $5\mu m$ kadar bir fark görülmüştür. Bunun dönme açısındaki farktan ve deney sonuçlarının ortalama eğrilikte verilmesinden kaynaklandığı yorumlandı. Şekil 6.9(b) ise kanala tepeden bakış ile görülen odaklanmaları göstermektedir. Simülasyon tek bir odaklanma bandının varlığını, odaklanma bant genişliğini ve iç duvara yakın odaklanmanın yerini başarılı şekilde öngörmektedir.



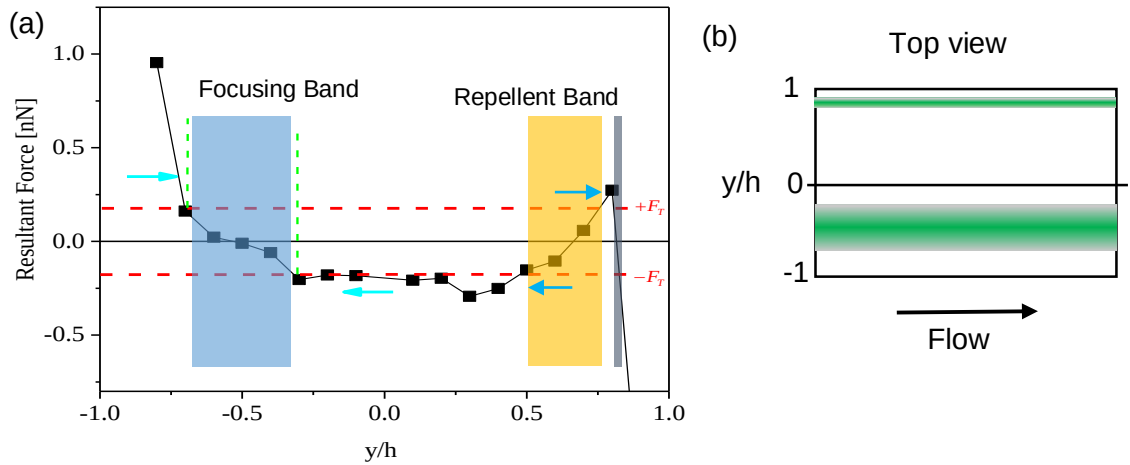
Şekil 6.9. Simülasyon ve deney (Martel ve Toner, 2013) sonuçlarının kıyaslanması. Parçacık çapı $9.9\mu m$. Kanal Reynolds sayısı 300. Mavi parçacık simülasyon sonucunu ve kırmızı parçacık deneyde görülen parçacığı göstermektedir. Parçacık çapı ve kanal boyutu ile gerçek oranlıdır. (0,0) noktası kanalın merkezini göstermektedir. Kanal genişliği $100\mu m$ 'dir. $y/h = -1$ iç duvar ve $y/h = 1$ dış duvarı göstermektedir. (b) Tepeden görülecek parçacık trenleri.

Odaklanma, parçacık üzerine etki eden net hidrodinamik kuvvetin sıfır olduğu ve torkun (dönme) sıfır olduğu yerde olur. Simülasyonda parçacık, yanal düzlem üzerinde radyal eksen üzerinde (kanal merkezinde) iç duvardan dış duvara doğru farklı noktalara yerleştirildi ve her nokta için ayrı hesaplama yapıldı. Simülasyonlarda öncelikle ana akış yönünde parçacığın hızı bulundu. Bunun için parçacığın değişen hızlarında bir seri simülasyonlar çalıştırıldı. İnterpolasyon yöntemi ile parçacığın hangi hızında drag kuvvetin nerede sıfır olduğu hesaplandı. Parçacık akış içinde bu hızda taşınmaktadır. Parçacığın bu hızında tekrar simülasyon çalıştırılarak kuvvetler hesaplandı. Parçacığın kanal kesitindeki değişen pozisyonları için yukarıdaki iki adım tekrar edildi. Daha önce düz kanalda yapılan benzer simülasyonlar (Di Carlo vd., 2009; Martel ve Toner, 2012), parçacığın hızının farklı pozisyonlarda değişmediği varsayımı ile yapılmıştı. Bu varsayımın doğru olmadığı görüldü. Bu çalışmada değişen hızlar ile parçacığa etki eden yanal düzlemdeki net kuvvet hesaplandı.



Şekil 6.10. (a) Parçacığa etki eden net (resultant) kuvvet. Parçacık çapı $4\mu\text{m}$, en-boy oranı 1 ve kanal eğriliği $\delta = 0.0034$. $y/h = -1$ ve $y/h = 1$ sırasıyla iç ve dış duvardır. (b) Tepeden görülen odaklanma bandı ve parçacık dağılımı.

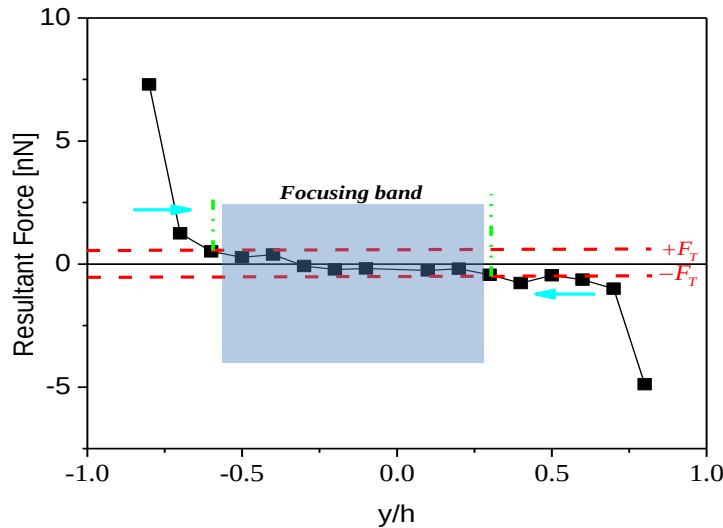
Parçacığın etrafında oluşan asimetric hız profili sebebiyle parçacık kendi etrafında döner. $10\mu\text{m}$ çaplı parçacığın, düz kanalda ve Reynolds sayısı 20 iken, odaklanma noktasında 1000 s^{-1} frekansta döndüğü rapor edilmiştir (Di Carlo vd., 2009). Simülasyon sonuçlarımız dönme frekansının duvarlara yakın parçacıklarda daha yüksek olduğunu gösterdi. Diğer yandan sonuçlarımız dönmenin odaklanma noktasını çok az miktarda duvara kaydırıldığını da gösterdi. Bu kayma küçük olduğundan dönme, odaklanma noktalarının ve odaklanma bant genişliğinin bulunmasında dikkate alınmadı.



Şekil 6.11. (a) Parçacık çapı $4\mu\text{m}$, en-boy oranı 1 ve eğriliğin $\delta = 0.01$ olduğu durumda parçacığa etki eden net kuvvet. (b) Kanalda parçacık dağılımı.

Odaklanma mekanizmasının anlaşılması için eşik kuvvet tanımlandı. Analizlerimiz parçacık üzerine etki eden net kuvvetin kararlı odaklanma için yetersiz olduğunu gösterdi. Parçacık-parçacık arası etkileşimlerin ve parçacığın Brownian hareketinin, parçacığı odaklanma noktasından çıkarmaması için parçacığın yeterince büyük iki ters yönlü kuvvet ile (biri duvar tarafından diğeri merkezden) sıkıştırılması gerektiği görüldü. Simülasyon sonuçları ve deneysel sonuçlar ışığında bu eşik kuvvetin parçacık çapına bağlı olduğu ve bizim hesaplamalı deneylerimiz için $4\mu\text{m}$, $10\mu\text{m}$ ve $15\mu\text{m}$ çaplı parçacıklar için sırasıyla eşik kuvvetlerin 0.2 nN , 0.5 nN ve 0.75 nN olduğu öngörüldü. Odaklanmayı gösteren net kuvvet şekillerinde, eşik kuvvet F_T ve kesikli çizgi ile gösterildi. $[-F_T, F_T]$ bandının içinde negatif eğim ile net kuvvetin sıfır olduğu durumlarda odaklanma olur. İnce bir odaklanma bandı (iyi bir odaklanma) olması için net kuvvet eğrisinin $[-F_T, F_T]$ aralığından mutlak değerce büyük negatif bir eğim ile geçmesi gereklidir.

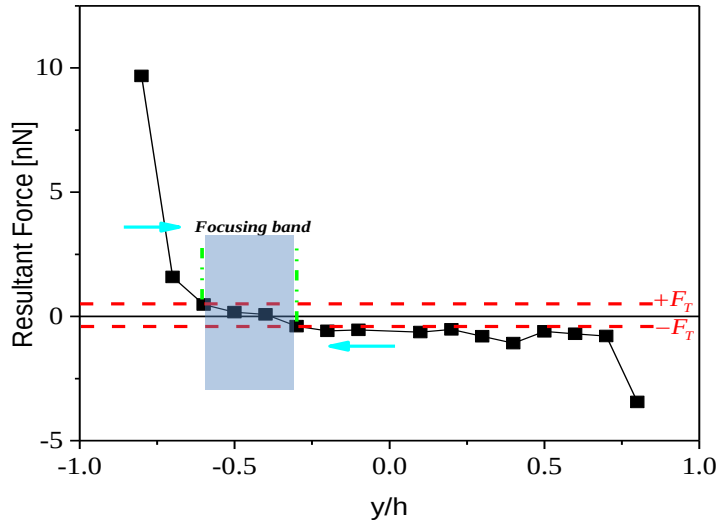
Diğer yandan şekillerde net kuvvetin işareti önemlidir. Şekillerde pozitif kuvvet soldan sağa doğru etki eden kuvveti gösterirken negatif kuvvet sağdan sola etki eden kuvveti göstermektedir. Duvara yakın noktalarda duvardan etki eden belirgin bir kaldırma kuvveti olduğundan şekiller her zaman pozitiften başlayıp negatifte bitmektedir. Düz kanalda uç noktalardaki ters yönlü kuvvetlerin aynı olması ve bir simetri gözlenirken eğrisel kanalda bu simetrinin olmadığı görüldü.



Şekil 6.12. Parçacık çapı $10\mu\text{m}$, en-boy oranı 1 ve eğriliğin $\delta = 0.0034$ olduğu durumda parçacığa etki eden net kuvvet ve kanalda parçacık odaklanması.

Şekil 6.10, $4\mu\text{m}$ çaplı parçacığa etki eden net kuvveti göstermektedir. Kesit alanın en boy oranı 1 ve kanal eğriliği ise $\delta = 0.0034$ 'dür. Parçacığa etki eden net kuvvet çoğunlukla eşik

kuvvetten küçük olduğu görüldü. Bu durumda parçacıklar mavi ile gösterilen biri dar biri geniş iki bantta taşınır. İki mavi bant arasında parçacığa iç duvardan merkeze doğru eşik kuvvetten daha büyük bir kuvvet etki ettiğinden bu beyaz bölgedeki parçacıklar geniş mavi banda doğru itilir. Bu durumda iki mavi bant arasında daha az parçacık konsantrasyonuna sahip bir bölge oluşur. Şekil 6.11, aynı parçacığa en boy oranı 1 ve kanal eğriliği $\delta = 0.01$ olduğu durumda etki eden net kuvveti göstermektedir. Öncelikle duvardan gelen kaldırma kuvvetinin büyüdüğü görülmektedir. Parçacıklar mavi renk ile gösterilen odaklanma bandına $y/h = -0.7$ noktasında girerler. Diğer yandan, dış duvara yakın bölgede, net kuvvet grafiği eşik kuvvet aralığını pozitif eğim ile kesmektedir. Bu durumda mavi renkli oklar ile gösterilen kuvvetler, bu bölgedeki parçacıkları süpürür ve nispeten parçacıkların az bulunduğu, grafikte sarı renk ile gösterilen bir bölge oluşturur. Dış duvara yakın $2\mu\text{m}$ genişliğinde ince mavi bir bant üzerinde de parçacıklar odaklanmaktadır. Burada şunu hatırlatmak gerekir ki odaklanma bantları parçacığın merkezinin durabileceği noktaları vermektedir.

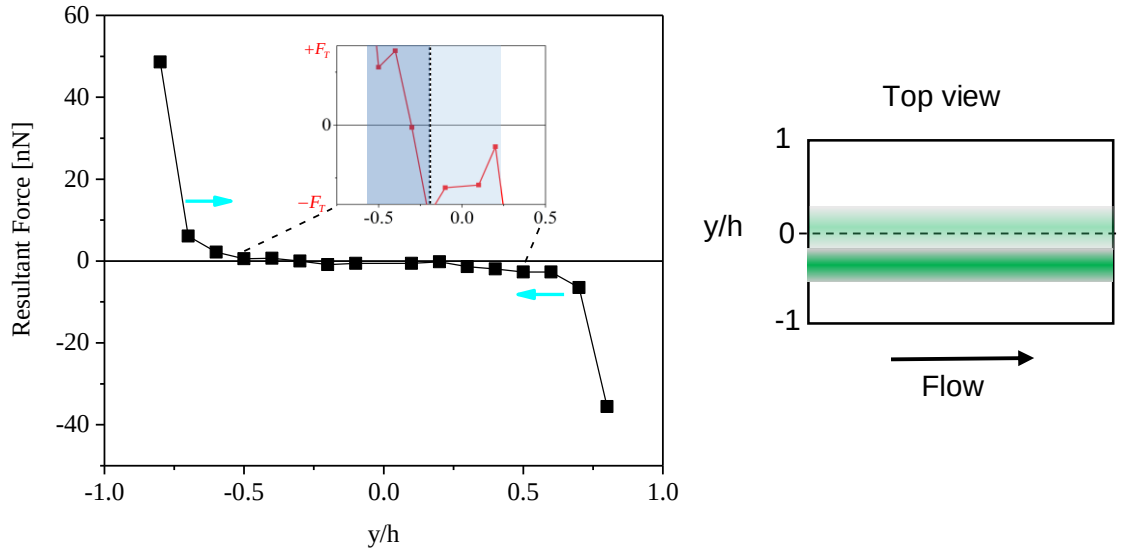


Şekil 6.13. Parçacık çapı $10\mu\text{m}$, en-boy oranı 1 ve eğriliğin $\delta = 0.01$ olduğu durumda parçacığa etki eden net kuvvet ve kanalda parçacık odaklanması.

Şekil 6.12, $10\mu\text{m}$ çaplı parçacığa etki eden net kuvveti göstermektedir. Kesit alanının en boy oranı 1 ve kanal eğriliği $\delta = 0.0034$ olarak seçildi. Geniş odaklanma bandının $y/h \cong -0.6$ ile $y/h \cong 0.2$ arasında olduğu görülmektedir. Şekil 6.13, aynı parçacığın, kanal kesit alanının en boy oranı 1 iken eğrilik 0.01 olduğundaki durumu göstermektedir. Parçacık $y/h = -0.6$ civarında mavi bantta odaklanmaktadır. Bant genişliği yaklaşık $15\mu\text{m}$ 'dir. Ayrıca sonuçlar, $4\mu\text{m}$

çaplı parçacığa göre, duvardan gelen kaldırma kuvvetlerinin büyüklüğünün arttığını göstermektedir.

Şekil 6.14, kesit alanın en boy oranı 1 ve kanal eğriliği $\delta = 0.0034$ iken $15\mu\text{m}$ çaplı parçacığa etki eden net kuvveti göstermektedir. Duvara yakın kısımlardaki büyük kaldırma kuvvetlerin parçacığı merkeze ittiği görüldü. Eşik kuvvet $15\mu\text{m}$ çaplı parçacık için 0.75nN olarak alındı. Odaklanma bandı $y/h \cong -0.5$ civarından başlayıp $y/h \cong 0.2$ 'ye kadar uzamaktadır. Eşik değer kuvveti ile sınırlanan gömülü küçük resme bakıldığında esas odaklanma bandı ve ona bitişik parçacıkların daha az konsantrasyonda bulunduğu bant görülmektedir. Tepeden görüş diyagramı ise bu iki bandı beraber göstermektedir. Şekil 6.15, $15\mu\text{m}$ çaplı parçacık için eğrilik 0.01 'e çıkarıldığında parçacığa etki eden net kuvveti göstermektedir. Odaklanma bandının daraldığı ve merkeze yakın bir noktada ($y/h \cong -0.02$) odaklanma görülmektedir. Birbirine zıt ve büyüklükleri eşik kuvvetten büyük iki kuvvet parçacığı sıkıştırmakta böylece net kuvveti gösteren eğri keskin bir eğimle eşik değer aralığını kesmektedir. Bu durum, dar bir odaklanma bandına ve nispeten kaliteli bir odaklanmaya sebep olmaktadır.



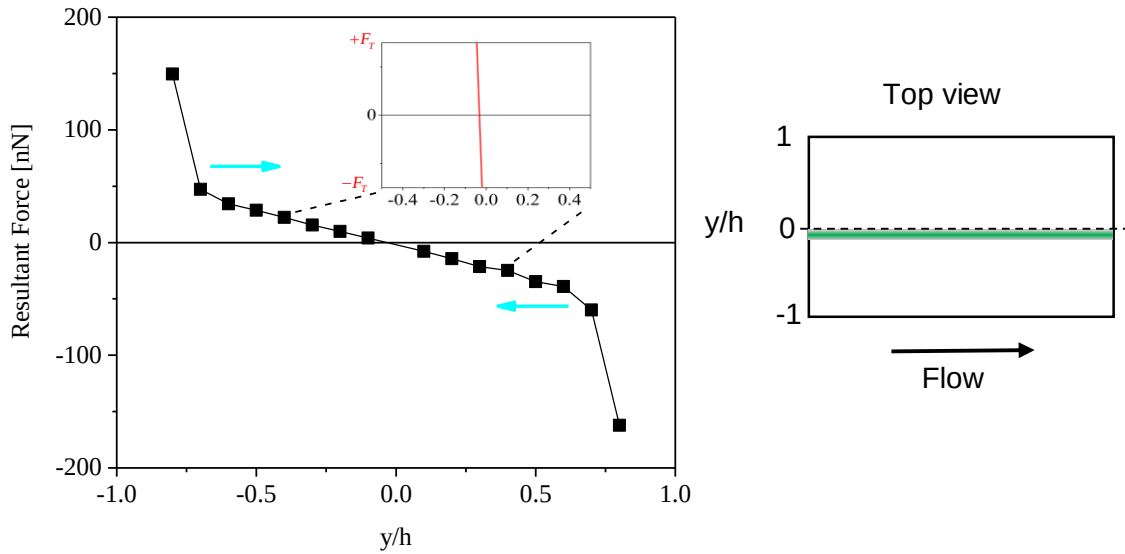
Şekil 6.14. Parçacık çapı $15\mu\text{m}$, en-boy oranı 1 ve eğriliğin $\delta = 0.0034$ olduğu durumda parçacığa etki eden net kuvvet ve kanalda parçacık odaklanması.

Şekil 6.16, $4\mu\text{m}$ çaplı parçacığa en-boy oranı 2 ve kanal eğriliği 0.0034 iken etki eden net kuvveti göstermektedir. Odaklanma bandı $y/h \cong -0.75$ başladı. Dengeleyen yeterince güçlü bir kuvvet olana kadar bant genişler ve şekilde görüldüğü gibi kanalın yarısını kaplayan

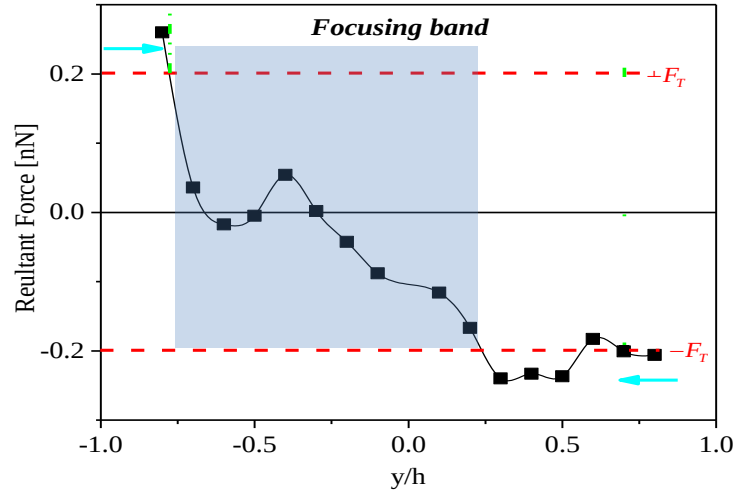
geniş bir odaklanma bandı ortaya çıkar. Şekil 6.17, eğrilik 0.01'e çıktığındaki durumu göstermektedir. Görüldüğü üzere duvara yakın iki dar odaklanma bandı oluşmaktadır.

Şekil 6.18 ise kesit en-boy oranı 2 ve eğrilik 0.0034 iken $10\mu\text{m}$ çaplı parçacığa etki eden net kuvveti gösterir. Geniş odaklanma bandı $y/h \cong -0.6$ ile $y/h \cong 0.2$ arasında oluştuğu görüldü. Odaklanma bant genişliği yaklaşık $40\mu\text{m}$ olarak hesaplandı. Şekil 6.19, eğriliğin 0.01'e çıktığı durumu göstermektedir. Bu duruma $y/h \cong -0.68$ noktasında kaliteli bir odaklanma oluşmaktadır.

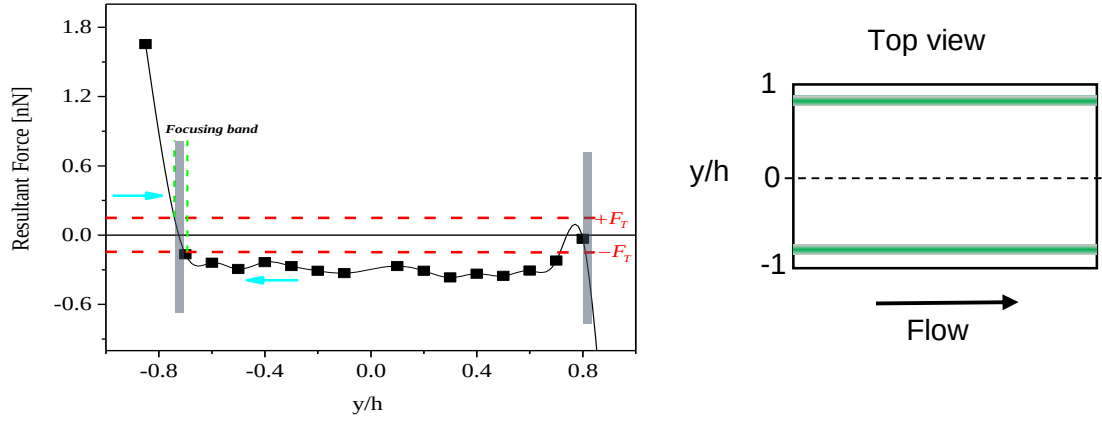
Şekil 6.20'de, en-boy oranı 2, eğrilik 0.0034'tür ve $15\mu\text{m}$ çaplı parçacığın odaklanmasını göstermektedir. Parçacığa etki eden kuvvetlerin büyüklüğü $4\mu\text{m}$ ve $10\mu\text{m}$ çaplı parçacıklara etki eden kuvvetlere göre daha büyük olduğu görüldü. Parçacıklar $y/h \cong -0.3$ ile $y/h \cong 0$ arasında $15\mu\text{m}$ genişliğinde bantta odaklanmaktadır. Eğriliğin 0.01'e çıkması ile parçacıklar $y/h = -0.5$ civarında daha dar ($\sim 10\mu\text{m}$) bantta odaklandığı Şekil 6.21'de görüldü. Şekil 6.22'de en-boy oranı 4'e çıktığında $4\mu\text{m}$ çaplı parçacık $y/h = -0.6$ civarında geniş bir bantta (yaklaşık $25\mu\text{m}$) odaklanmaktadır. Şekil 6.23'de eğrilik 0.01'e çıktığında ise $y/h = -0.75$ civarına dar bir bantta odaklanma oluşmaktadır.



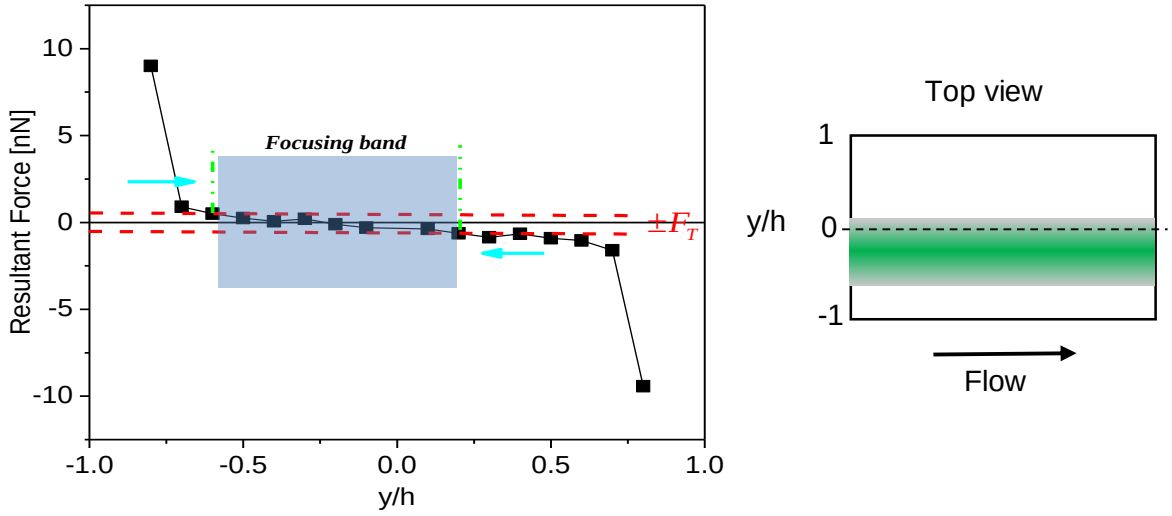
Şekil 6.15. Parçacık çapı $15\mu\text{m}$, en-boy oranı 1 ve eğriliğin $\delta = 0.01$ olduğu durumda parçacığa etki eden net kuvvet ve kanalda parçacık odaklanması.



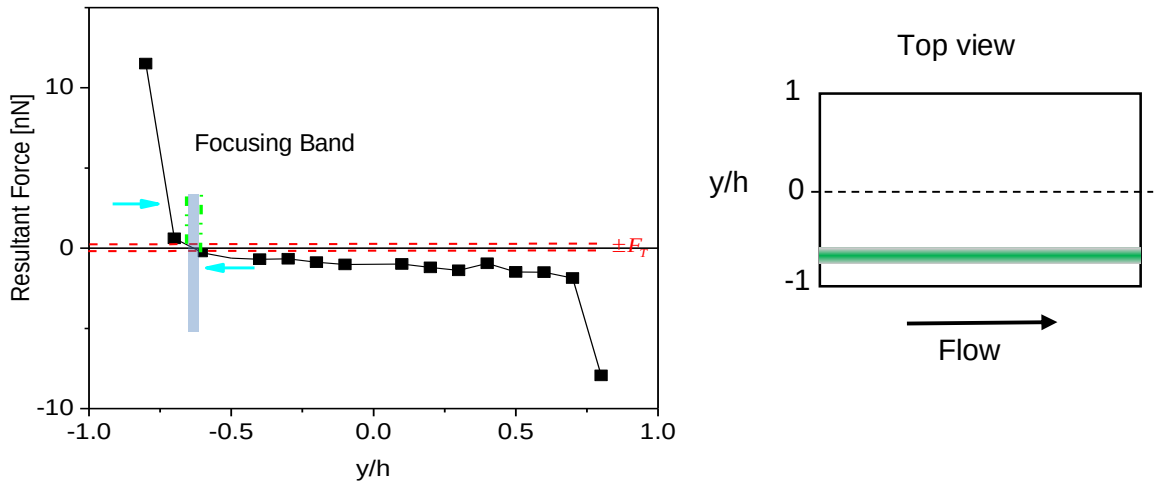
Şekil 6.16. Parçacık çapı $4\mu\text{m}$, en-boy oranı 2 ve eğriliğin $\delta = 0.0034$ olduğu durumda parçacığa etki eden net kuvvet ve odaklanma.



Şekil 6.17. Parçacık çapı $4\mu\text{m}$, en-boy oranı 2 ve eğriliğin $\delta = 0.01$ olduğu durumda parçacığa etki eden net kuvvet ve odaklanma.



Şekil 6.18. Parçacık çapı $10\mu\text{m}$, en-boy oranı 2 ve eğriliğin $\delta = 0.0034$ olduğu durumda parçacığa etki eden net kuvvet ve odaklanma.

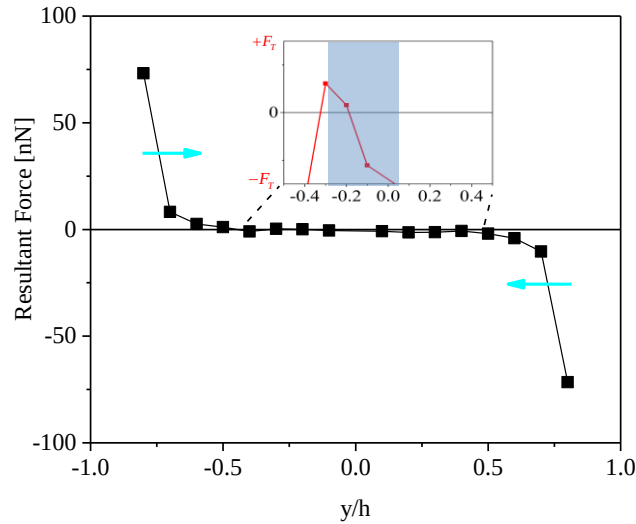


Şekil 6.19. Parçacık çapı $10\mu\text{m}$, en-boy oranı 2 ve eğriliğin $\delta = 0.01$ olduğu durumda parçacığa etki eden net kuvvet ve odaklanma.

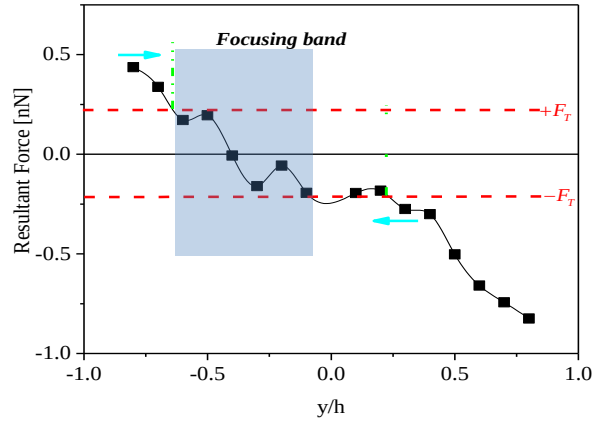
Şekil 6.24, en-boy oranı 4 iken $10\mu\text{m}$ çaplı parçacığa kanal eğriliği $\delta = 0.0034$ durumunda etki eden net kuvvetin büyüklüğünü ve yönünü göstermektedir. $y/h \cong -0.1$ ile $y/h \cong 0.2$ arasında biri yoğun diğeri az yoğun iki bantta parçacıkların toplanacağı görüldü. Üstten görünüş diyagramı çizildi. İki bant ve aralarındaki ayrışımın sebebi, parçacığa etki eden net kuvvetin eşik kuvvetten yeterince büyük olmaması ve bu noktalarda parçacıkları

süpürmemesidir. $y/h \cong 0.1$ civarında kuvvet tekrar eşik değerin üzerinde çıkar ve parçacıkları dış duvara doğru koyu mavi ile gösterilen banda ittirir. Diğer yandan Şekil 6.25, yüksek eğrilik durumunda, daha dar ve iç duvara yakın $y/h \cong -0.6$ ile $y/h \cong -0.2$ arasında bir odaklanma gösterdi.

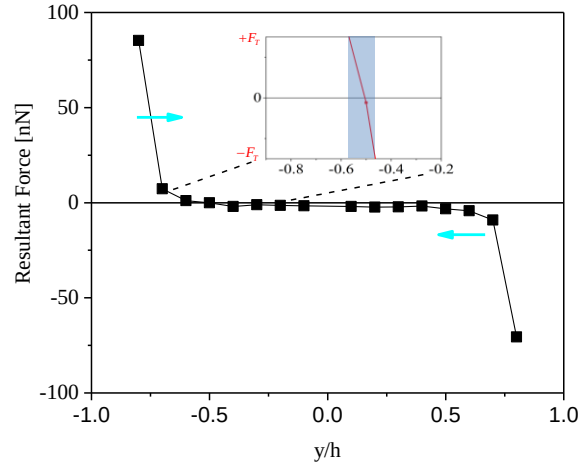
Şekil 6.26 ve Şekil 6.27 $15\mu\text{m}$ çaplı parçacığa en-boy oranı 4 iken düşük ve yüksek eğrilik değerlerinde etki net kuvveti göstermektedir. İç ve dış duvarlardan gelen kuvvetlerin 200nN civarına yükseldiği ve küçük parçacık grafiklerine kıyasla bu değerin büyük olduğu görüldü. Bu durum parçacıkları merkeze doğru itmektir. Etki eden net kuvvet eşik değer bandını merkeze yaklaştırmakta, parçacıklar odaklanma batına merkeze çok yakın bir yerde girmekte ve ters yönlü iki büyük kuvvet tarafından parçacıklar bu odaklanma noktasında sıkışmaktadır. Bu durumda dar bir odaklanma bandı oluşmaktadır. Hem düşük hem yüksek eğrilik durumlarında bu kanal şartlarında kaliteli dar odaklanma oluştuğu görüldü.



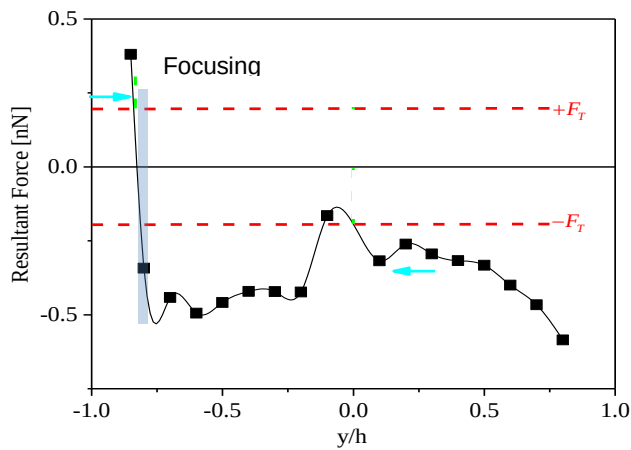
Şekil 6.20. Parçacık çapı $15\mu\text{m}$, en-boy oranı 2 ve eğriliğin $\delta = 0.0034$ olduğu durumda parçacığa etki eden net kuvvet ve odaklanma.



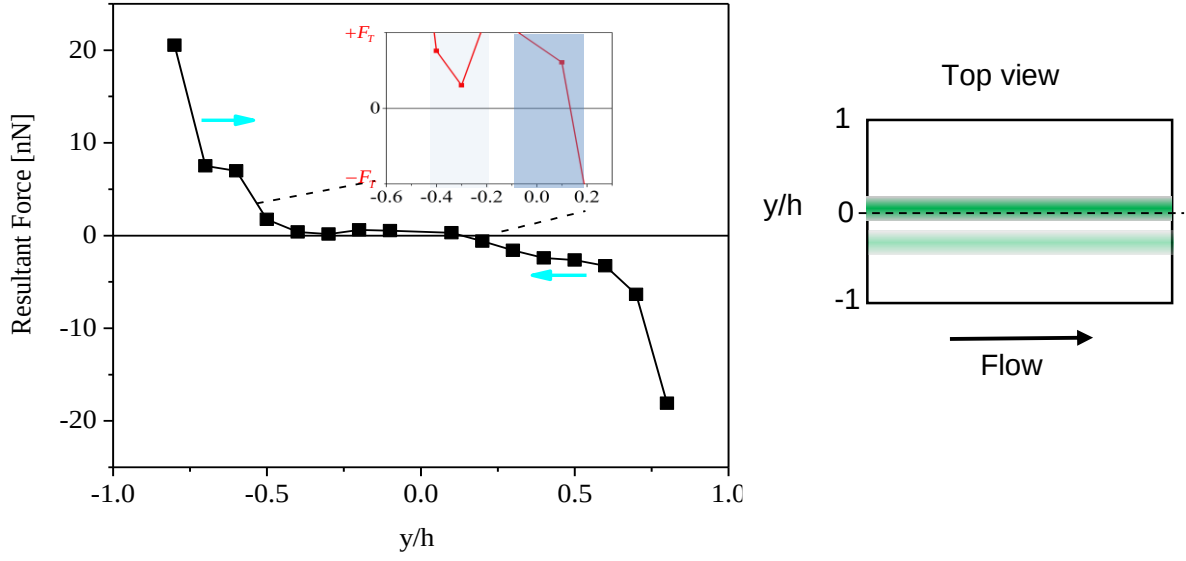
Şekil 6.21. Parçacık çapı $15\mu\text{m}$, en-boy oranı 2 ve eğriliğin $\delta = 0.01$ olduğu durumda parçacığa etki eden net kuvvet ve odaklanma.



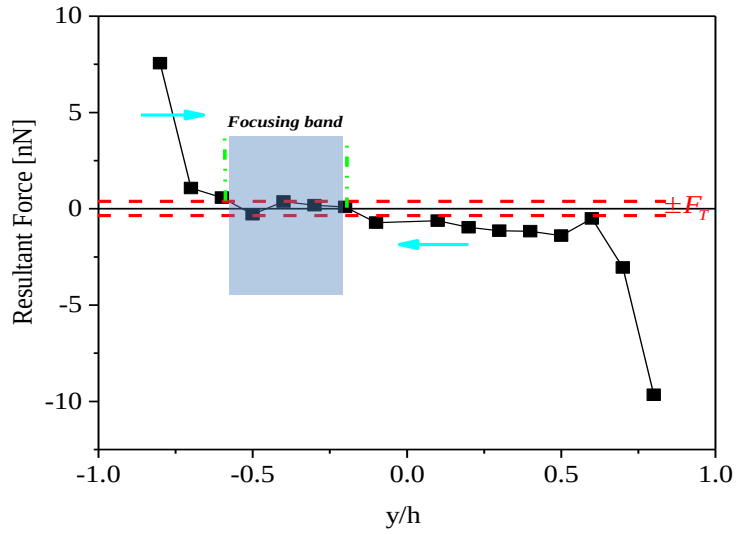
Şekil 6.22. Parçacık çapı $4\mu\text{m}$, en-boy oranı 4 ve eğriliğin $\delta = 0.0034$ olduğu durumda parçacığa etki eden net kuvvet ve odaklanma.



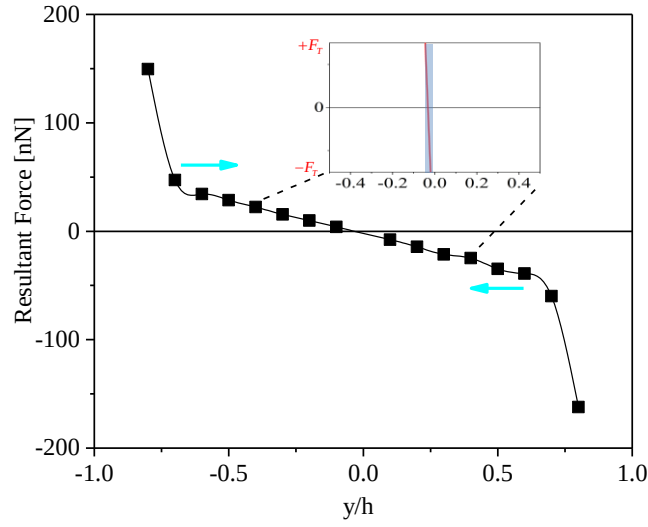
Şekil 6.23. Parçacık çapı $4\mu\text{m}$, en-boy oranı 4 ve eğriliğin $\delta = 0.01$ olduğu durumda parçacığa etki eden net kuvvet ve odaklanma.



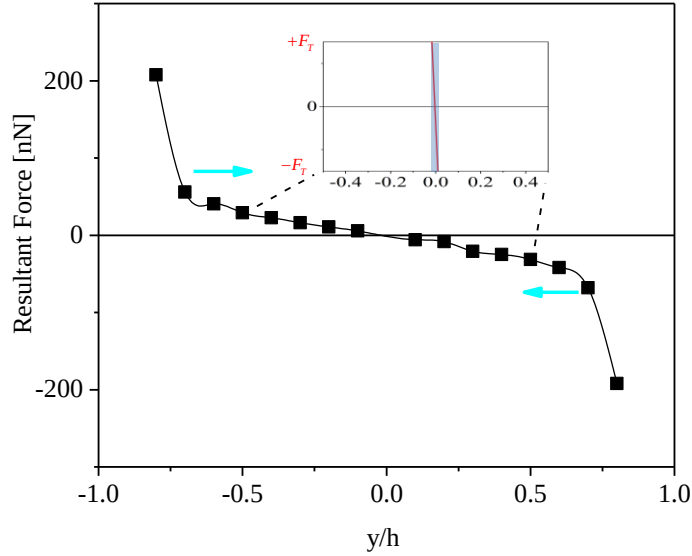
Şekil 6.24. Parçacık çapı $10\mu\text{m}$, en-boy oranı 4 ve eğriliğin $\delta = 0.0034$ olduğu durumda parçacığa etki eden net kuvvet ve odaklanma.



Şekil 6.25. Parçacık çapı $10\mu\text{m}$, en-boy oranı 4 ve eğriliğin $\delta = 0.01$ olduğu durumda parçacığa etki eden net kuvvet ve odaklanma.



Şekil 6.26. Parçacık çapı $15\mu\text{m}$, en-boy oranı 4 ve eğriliğin $\delta = 0.0034$ olduğu durumda parçacığa etki eden net kuvvet ve odaklanma.

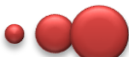


Şekil 6.27. Parçacık çapı $15\mu\text{m}$, en-boy oranı 4 ve eğriliğin $\delta = 0.01$ olduğu durumda parçacığa etki eden net kuvvet ve odaklanma.

Tablo 6.2, düşük $\delta = 0.0034$ ve yüksek $\delta = 0.01$ eğrilik durumlarında farklı çaplı parçacıkların odaklanmasını ve beraber taşındıklarında muhtemel ayrılımlarını göstermektedir. Diğer yandan Tablo 6.3 ise odaklanma kalitesini göstermektedir. Yeşil, sarı ve mavi renkler sırasıyla yüksek kaliteli (dar bantta) odaklanmadan düşük kaliteli (geniş bantta) odaklanmayı gösterir. Odaklanma bant genişliği parçacığın çapından küçükse yeşil, 1 ile 1.5 çap arasında ise sarı ve eğer 1.5 çaptan büyükse mavi renk ile gösterildi. Renklendirilmemiş kutular belirgin odaklanmanın olmadığı durumları göstermektedir. İki değer arasındaki “+”

işareti iki odaklanma bandını ve bu bantların genişliğini ayrı ayrı göstermek için kullanıldı. Reynolds sayısı en-boy oranı 1, 2, ve 4 için sırasıyla 225, 300 ve 360'dır. Dean sayısı, $De = Re\sqrt{\delta}$, yukarıdan aşağı doğru ($De=13.12$ 'den $De=36$ 'ya) artmaktadır. Sonuçlar, eğriliğin odaklanmayı iyileştirdiğini, en-boy oranının ayrışımı kolaylaştırdığını gösterdi.

Tablo 6.2. Odaklanma bantlarının yerleri. $\delta = 0.0034$ eğrilik düşük ve $\delta = 0.01$ eğrilik yüksek olarak isimlendirildi. Parçacık ayrışımı, farklı parçacıkların odaklanmaların birbirinden yeterince uzakta olması ile sağlanır.

AR	Curvature	Dia 4 μ m	Dia 10 μ m	Dia 15 μ m	Separation
1	Low	~All Domain	Wide strip - 0.3	Wide strip -0.3	NO
	High	-0.5 and 0.8	-0.4	Center of the channel	
2	Low	~Low half	Wide strip - 0.2	-0.1	NO
	High	-0.75 and 0.8	-0.68	-0.5	
4	Low	-0.5	-0.3 and 0.05	Center of the channel	
	High	-0.8	-0.4	Center of the channel	

Tablo 6.3. Yaklaşık bant genişlikleri. Odaklanma kalitesi iyiden kötüye doğru sırasıyla yeşil, sarı ve mavi olarak renklendirildi.

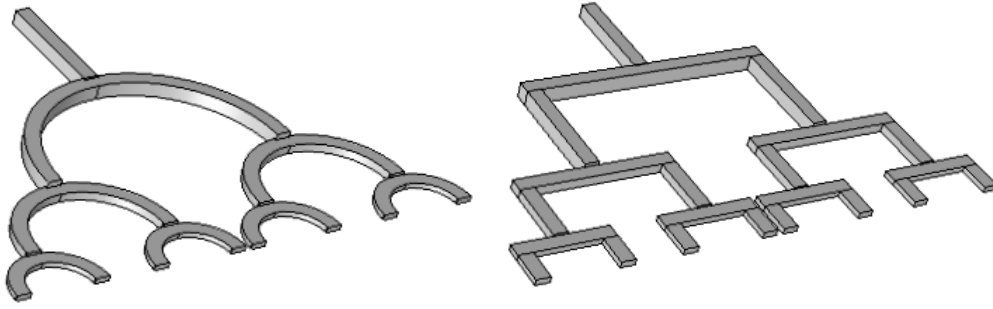
AR	Curvature	Dia 4 μ m	Dia 10 μ m	Dia 15 μ m
1	Low	(5 μ m) + 65 μ m	45 μ m	12.5 μ m + (15 μ m)
	High	20 μ m + 2 μ m	15 μ m	4 μ m
2	Low	50 μ m	40 μ m	15 μ m
	High	2.5 μ m + 2.5 μ m	2.5 μ m	10 μ m
4	Low	25 μ m	(10 μ m) + 15 μ m	3 μ m
	High	3 μ m	20 μ m	3 μ m

7. PARÇACIK AYRIŞIMI İÇİN OPTİMUM KANAL TASARIMI

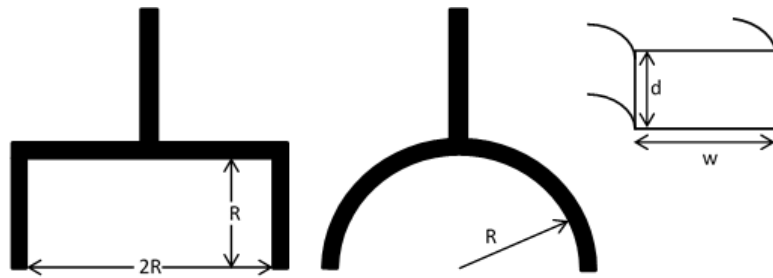
Önceki kısımda, koşulan geniş çaplı ataletsel odaklanma sayısal deneylerinin sonucu, eğriliğin genelde odaklanma bandını daraltarak odaklanma kalitesini arttırdığı ve radyal yönde kanal eninin uzaması ile (en-boy oranının uzaması ile) ayrışmanın iyileşebileceği ilk defa gösterildi. Bu sonuç üzerine, farklı çaplı parçacıkları ayırıştırmak için birbirini takip ederek dallanan, farklı eğrilik ve en-boy oranlarına sahip kızları olan netvörk yapısının verimli ayrışmayı sağlayabileceği ortaya çıktı. Literatürde çok çalışılmış spiral ve yilankavi geometrileri çözünürlükte (resolution) ve ayırıştırma hızında (throughput) geçen böyle bir netvörk tasarlanabilir. Ancak bu geometrinin pratikte kullanılması çeşitli problemlere sahiptir. Bunlardan biri, hem eğriliğin ve hem de en-boy oranının hidrolik basıncı arttırması ve bunun cihaz güvenilirliğini bozmasıdır. Bunu önlemek için T-şekilli netvörk yapıları için kullanıla dallanma formülü olan Murray kanunu, eğrisel çatallanma için geçerli değildir.

Dallanan düz kanal ağlarının optimum tasarımı için Murray kanunu (Sherman, 1981) son yıllarda mikro-akışkan kanal fabrikasyon tekniklerinin gelişimi ile ilgi çekmeye başlamıştır. Özellikle T-şekilli ve dikdörtgen kesit alanlı netvörkler için Razavi vd. (2014) ve Emerson vd. (2006) tarafından, bu kanalların Newtonyan olmayan sıvı içerdiği durumdaki dallanması Gilbert vd. (2007) ve Razavi ve Shirani (2013) tarafından çalışılmıştır. Farklı kesit alanlı ve T-şekilde çatallanan mikro-akışkan kanallarda optimum tasarım kuralları (Bahrami vd., 2006; Muzychka ve Edge, 2008; Damiri ve Bardaweel, 2015; Marsden vd., 2008; Wang vd., 2014) ve kan içeren durum (Gilbert vd., 2007; Kanaris vd., 2012) literatürde incelenmiştir.

Şekil 7.1, üç dallanmalı T-şekilli ve eğrisel şekilli netvörk geometrisini göstermektedir. Düz giriş kanalı 1.5mm'dir. İki geometride de netvörk uzunluğu 3.33mm'dir. Şekil 7.2 ise T şekilli netvörk yerine kullanılması önerilen ve eş yer kaplayan eğrisel geometriyi göstermektedir. İki geometrinin hidrolik direnç davranışı test edildi. İki geometri her yerde eşit kesit alanlara sahiptir. Kanal genişliği sabit ve $200\mu m$ tutuldu. Dikdörtgen kesitli T-şekilli ve eğrisel-şekilli mikro-akışkan kanalda çatallanmalar aşağıdaki Şekil 7.2'de gösterildiği gibi, her bir kızın yüksekliği R ve her bir kızın genişliği $2R$ alınarak birbirlerine denkleştirildi.



Şekil 7.1. Eğrisel ve T-şekilli mikro-akışkan ağı.



Şekil 7.2. T-şekilli ve yerine kullanılan eğrisel çatallanma. Simetrik T-şekilli ve eğrisel çatallanmalarda kesit alanlar eşittir.

Her bir ardışık kızın yarıçapı çıkışa doğru değişir ve

$$R_{i+1} = \frac{R_i}{\beta}, \quad (7.1)$$

ilişkisine göre azalır. Burada başlangıç yarıçap değeri ilk dallanmaya aittir ve kızların kesişmemesi için β parametresi bizim başlangıç testlerimizde $\beta = 1.65$ olarak sabit alındı. Ancak sonraki bölümlerde, eşit-direnç çatallanması formülünde, farklı β değerleri de kullanıldı. Düz girişin derinliği $200\mu\text{m}$ olmak üzere, kızların ardışık d_i derinlikleri:

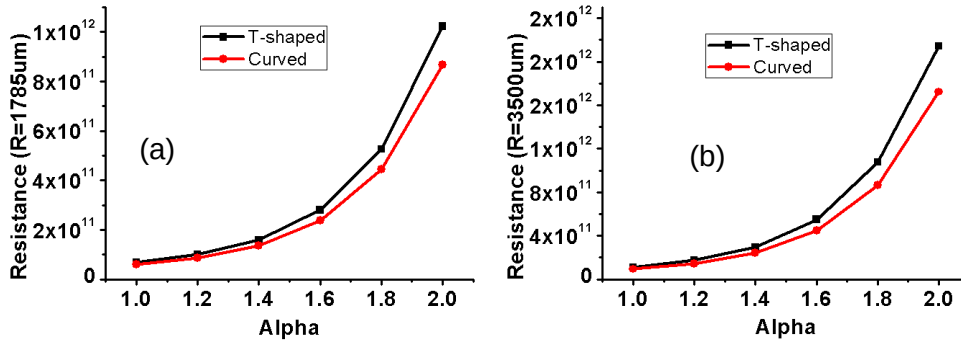
$$d_{i+1} = \frac{d_i}{\alpha}, \quad (7.2)$$

ile değişir. α parametresi sabit genişlikte en-boy oranı değişimini gösterir. Tablo 7.1, verilen bir α için sırasıyla birinci, ikinci ve üçüncü kızların en-boy oranı değerlerini verir. En-boy oranı $\alpha > 1$ için çıkışa doğru artar.

Tablo 7.1. α 'ya göre ardışık kız dallanmalarına ait kesit en-boy oranı değerleri.

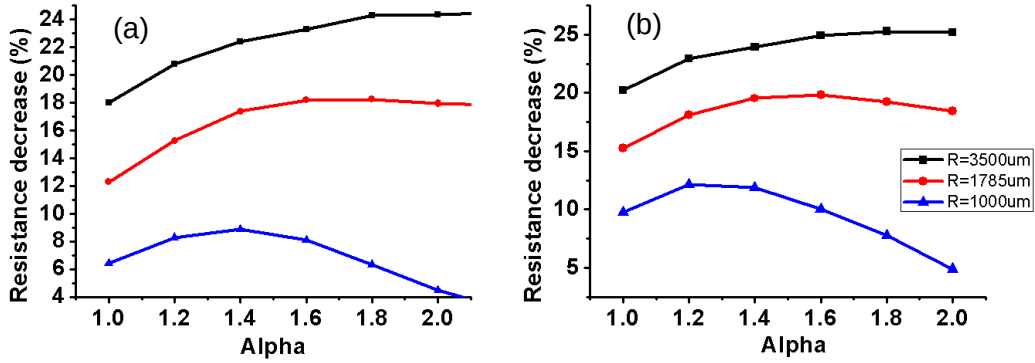
α	ε_1	ε_2	ε_3
$\alpha = 1$	1	1	1
$\alpha = 1.2$	1.2	1.44	1.73
$\alpha = 1.4$	1.4	1.96	2.74
$\alpha = 1.6$	1.6	2.56	4.1
$\alpha = 1.8$	1.8	3.24	5.83
$\alpha = 2$	2	4	8

Düz bir kanaldaki atalet etkileri etkili bir parçacık ayırma yol açmaz. Parçacıklar boyutlarına bakılmaksızın akış boyunca belirli yan pozisyonlarda odaklanır. Diğer taraftan, atalet odaklanması ile eğrisel kanallarda parçacık ayırma mümkündür. Genel olarak, eğrilik odaklanma bandını daraltarak odaklanmayı iyileştirirken en-boy oranı ise odaklanan bantları birbirinden izole ederek parçacık sıraları (trenleri) arasında yeterli boşluk yaratır. Ancak eğrilik bir ataletsel odaklanma sisteminde yüksek hidrolik direnç oluşturur ve büyük en-boy oranlarının kullanılmasını engeller.



Şekil 7.3. Kesit alan en-boy oranı α parametresine göre değişirken hidrolik direnç ($\text{kg m}^{-4}\text{s}^{-1}$). İlk çatallanma için yarıçap (a) $1785\mu\text{m}$ ve (b) $3500\mu\text{m}$.

Şekil 7.3, hidrolik direncin eğrisel çatallanmada daha düşük olduğunu ve bir önceki şekilde gösterildiği gibi eğrisel-şekilli dallanmanın T-şekilli dallanma ile yer değiştirmesi durumunda önemli direnç azalmasının olduğunu göstermektedir. Bunun nedeni iki geometri arasındaki sıvıyı kat ettiği toplam uzunluk ve eğrisel dallanmada 90 derecelik dirseklerin bulunmamasıdır. Ancak eğrilik, direnci arttırdığı için eğriliğin artmasıyla bu avantaj azalır.



Şekil 7.4. T-şekilli kanal ağına kıyasla eğrisel ağda hidrolik direnç azalması (%). Her netvörk için tek bir α parametresi seçildi. α parametresine göre (denklem (7.2)) takip eden kanalın en-boy oranı değişir. Tüm ana ve kızlar eşit genişliğe (200µm) sahiptir. Testler başlangıç yarıçapları $R=3500\mu\text{m}$, $R=1785\mu\text{m}$ ve $R=1000\mu\text{m}$ iken yapıldı. Girişte hacimsel akış miktarı (a) $5 \times 10^{-10} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$ ($30 \mu\text{l}/\text{min}$) ve (b) $15 \times 10^{-9} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$ ($900 \mu\text{l}/\text{min}$). T-şekilli çatallanma, eğrisel tasarım ile 7.2’de gösterildiği gibi değiştirildi.

Şekil 7.4, Şekil 7.2’de gösterildiği biçimde T-şekilli netvörk eğrisel netvörk ile yer değiştirildiğinde, hidrolik dirençteki değişikliği gösterir. Eğrisel şekilli netvörkün daha az dirence sahip olduğu ve daha yüksek en-boy oranlarının kullanılmasına izin verdiği görüldü. Direnç azalması, R_d , α parametresine bağlı olarak aşağıdaki formül ile hesaplandı:

$$R_d = \frac{R_T - R_C}{R_C} \times 100, \quad (7.3)$$

R_T ve R_C sırasıyla T-şekilli ve eğrisel netvörke ait dirençtir. Şekil 7.4, direnç azalmasının eğrilik artması ile düştüğü görüldü. α parametresinin artması ile dirençten kazanma azalmakta ancak yapılan testlerde (seçilen geometri ölçülerinde ve akış koşullarında) eğrisel netvörk avantajını korumaya devam etmektedir. Sonuçlar, akış miktarını $30 \mu\text{l}/\text{min}$ ’den $900 \mu\text{l}/\text{min}$ değerine çıkmasıyla direnç azalmasının arttığını gösterdi.

7.1. Yeni Bir Çatallanma Kuralı

Kısım 6.2'da eğrisel kanalda akışın üç boyutlu asimptotik çözümü verildi. Bu çözümü kullanarak, kanal için eğrilığe bağlı direnç formülü elde edilebilir. Uçlara uygulanan basınç farkı ΔP (Pa) ve volumetrik akış miktarı Q (m^3s^{-1}) ana yöndeki akış profilinin integrali olduğundan; $\Delta P = R_h Q$ eşitliğinden, hidrolik direnç R_h (Norouzi ve Biglari, 2013):

$$R_h = 12\mu L[wd^3(1 + \gamma(\varepsilon)\delta^2)(1 - \sum_{n, \text{odd}} \frac{192d}{\pi^5} \tanh(\pi \frac{w}{2d}))]^{-1}, \quad (7.4)$$

olarak bulunur.

Elektrik devrelerinde olduğu gibi paralel kanallardaki hidrolik dirençler için toplam direnç R_{Top} ,

$$\frac{1}{R_{Top}} = \frac{1}{R_{h1}} + \frac{1}{R_{h2}} \quad (7.5)$$

formülü ile bulunabilir. R_{h1} ve R_{h2} iki kız koldaki dirençlerdir. Bu çalışmada simetrik dallanma olduğundan $R_{h1} = R_{h2}$, ve buradan

$$\frac{2L_p}{(\varepsilon_p - 0.627 \tanh(1.571\varepsilon_p))(1 + \gamma_p(\varepsilon_p)\delta^2)} - \frac{\alpha^4 L_d}{(\alpha\varepsilon_p - 0.627 \tanh(1.571\alpha\varepsilon_p))(1 + \gamma_d(\alpha\varepsilon_p)\delta^2)} = 0, \quad (7.6)$$

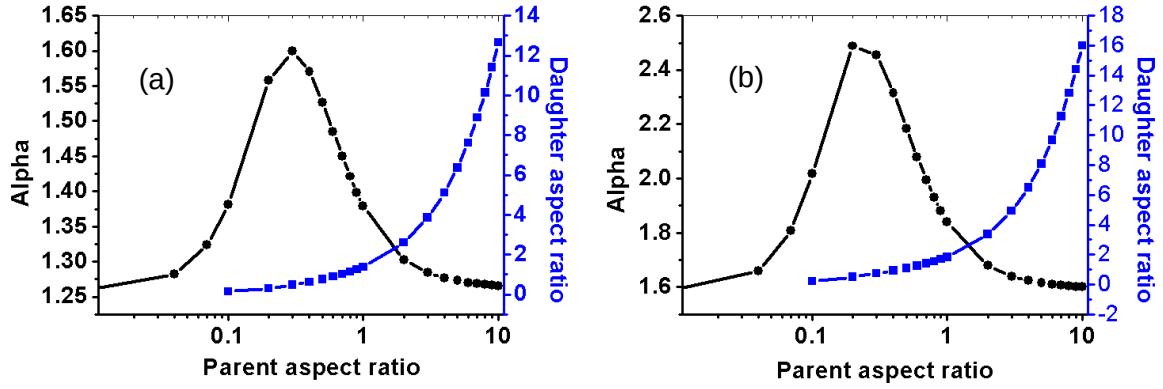
eşitliği bulundu. L_p ve L_d sırasıyla ana ve kız kanal uzunluklarıdır. $\varepsilon_p = w/d$ ana kanalın en-boy oranı. α parametresi, kız kanalın en-boy oranını, ε_d , aşağıdaki ilişki ile belirlemektedir:

$$\varepsilon_d = \alpha\varepsilon_p \quad (7.7)$$

$\delta = w/R$ kanal eğrilik oranı ve R kanal eğrilik yarıçapıdır. γ en-boy oranının bir fonksiyonu ve farklı Reynolds sayıları için

$$\begin{aligned} \gamma_0(\varepsilon) &= 0.0586101\varepsilon^2 - 0.373039\varepsilon - 0.0888998, \\ \gamma_{20}(\varepsilon) &= 0.0793756\varepsilon^2 - 0.517911\varepsilon - 0.269404, \\ \gamma_{40}(\varepsilon) &= 0.145552\varepsilon^2 - 0.989666\varepsilon - 0.439045, \\ \gamma_{60}(\varepsilon) &= 0.334893\varepsilon^2 - 2.26418\varepsilon - 0.507984, \\ \gamma_{100}(\varepsilon) &= 0.658862\varepsilon^2 - 4.75289\varepsilon - 0.520626, \end{aligned} \quad (7.8)$$

bulundu. γ fonksiyonlarının alt indisleri asimptotik çözüm Reynolds sayısını $Re^* = Re_C w / (2D_h)$ gösterir. Re_C kanal Reynolds sayısı ve D_h hidrolik çaptır. γ fonksiyonları negatif değerli fonksiyonlar olduğundan eğrilik ile direncin arttığı görülür. Çatallanmalar ile direncin artması kaçınılmazdır. Ancak verilen optimum (7.6) formülasyonu eklenen çatallanmanın toplam dirence giriş kanalı kadar direnç eklenmesini sağlayarak netvörkün toplam direncinin kontrol edilmesini sağlar.

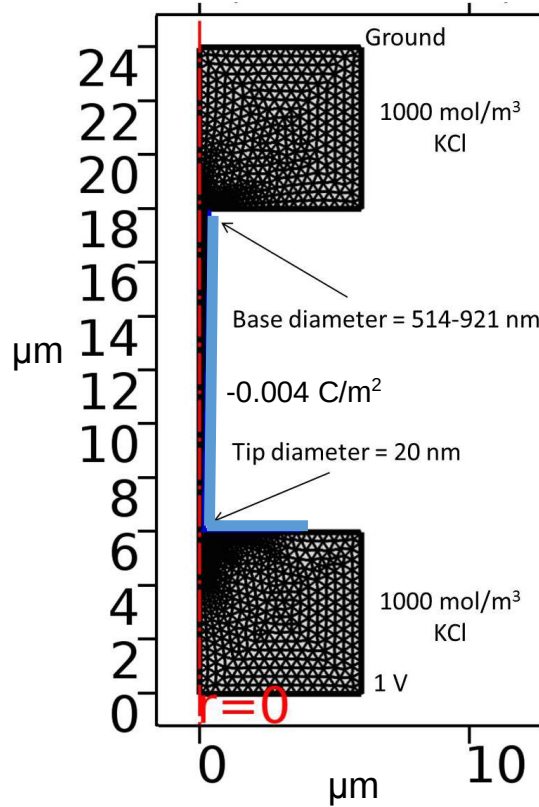


Şekil 7.5. Optimum alfa değerleri. Çatallanma kuralı (7.6) ile alfa değerleri elde edildi. Kız en-boy oranı denklem (7.7) ile bulundu. Beta değerleri denklem (7.1)'de (a) $\beta = 1$ ve (b) $\beta = 2$ alındı.

Şekil 7.5, önerilen dizayn kuralı (eşit-direnç seviyelerine sahip olma kuralı) ile elde edilmiş optimum α değerlerini ve onlara karşılık gelen kız en-boy oranlarını göstermektedir. Şekil 7.5(a), ardışık kızın yarıçapını hesaplar (7.1) denkleminde $\beta = 1$ değerini ve Şekil 7.5(b) $\beta = 2$ değerini kullandı. Dolayısıyla Şekil 7.5(b)'de eğrilik çıkışa doğru daha hızlı artmaktadır. Yukarıdaki verilen α değerleri ile her çatallanma kısmı giriş kanalıyla aynı dirence sahiptir.

8. KANONİK ŞEKLİ NANO-GÖZENEKLERİN MODELLENMESİ

Yüzey yükünün olduğu nano-kanallarda iyonik akışın incelenmesi ayrıca bir araştırma konusudur. Gözenekli membranlardan hücre geçişinin incelenmesinin, geçen hücre sayısının ölçülmesinde ve hücre tipinin tanınmasında; hatta DNA sekanslamada ciddi uygulamaları vardır (Booth vd., 2013; Han vd., 2008; Sexton vd., 2007; Kühnemund ve Nilsson, 2015). Bu sensörler direnç-atım (*ing.* resistive-pulse) sensör olarak isimlendirilir. Böyle sensörlerin modellenmesinde Poisson ve Nerst-Planck denklemlerinin sonlu elemanlar yöntemi ile kuple çözümü kullanılır. Bu kısımda, sonuçlar kısaca verilecek olup ayrıntılı hali Electrochimica Acta dergisinde yayınlanmıştır (Kaya vd., 2016b).



Şekil 8.1. Nano-gözenek simülasyon geometrisi ve parametreleri.

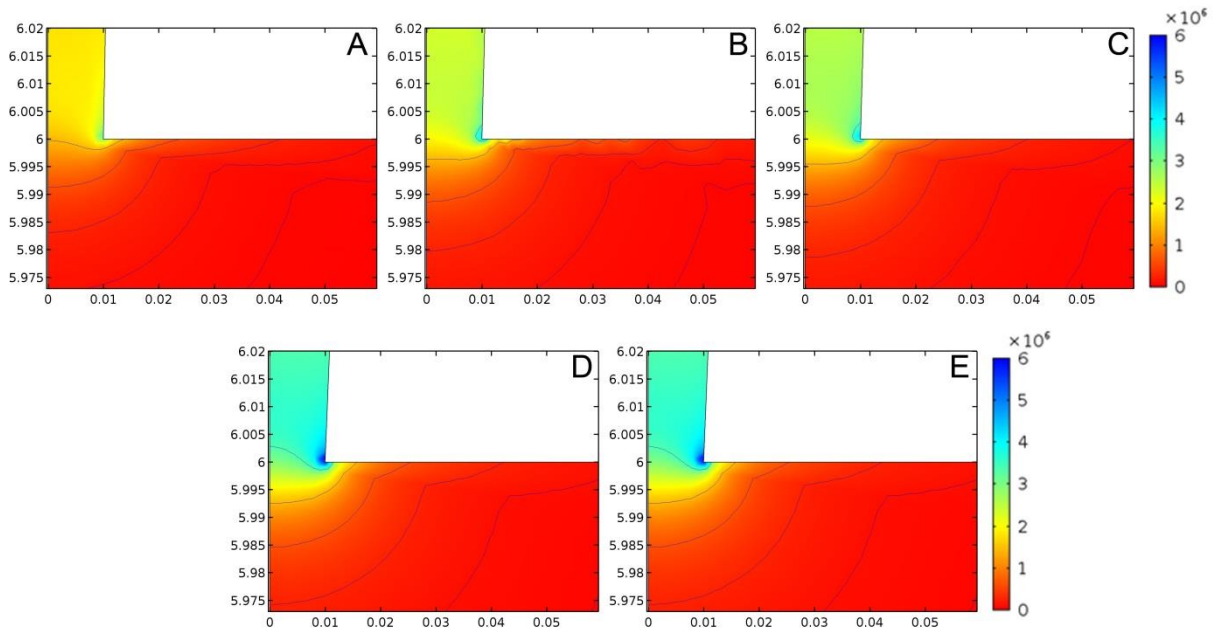
Şekil 8.1 Comsol yazılımında çizilen geometriyi göstermektedir. $r=0$ çizgisi dönme eksenidir. Manyetik alan ve konsantrasyon dağılımı bu eksene göre simetrik. Alt ve üst haznelerde başlangıçta KCl konsantrasyonu sabit ve 1000 mol/m^3 tür. Konik gözenek ucu 20 nm ve taban çapı 514 ile 921 nm arasında değişmektedir. Uç tarafından 1 V potansiyel

uygulandı ve taban tarafı toprak kabul edildi. Mavi ile gösterilen sınırlara (membran) yüzey yükü uygulandı. Elektro-osmotik akışın varlığı kabul edildi. Membran kalınlığı 12µm alındı.

Nano-gözenek içerisindeki elektrostatik potansiyel dağılımı $\varepsilon_0 \varepsilon_f \nabla^2 \phi = \rho_v$ denklemi ile bulundu. ε_0 vakum elektriksel geçirgenliği, ε_f akışkanın elektriksel geçirgenliği, ϕ elektrik potansiyeli ve ρ_v hacimsel yük yoğunluğudur. Gözenek içindeki elektrik potansiyel ile iyonik konsantrasyon değişimi arasındaki ilişki Nernst-Planck denklemi ile modellendi:

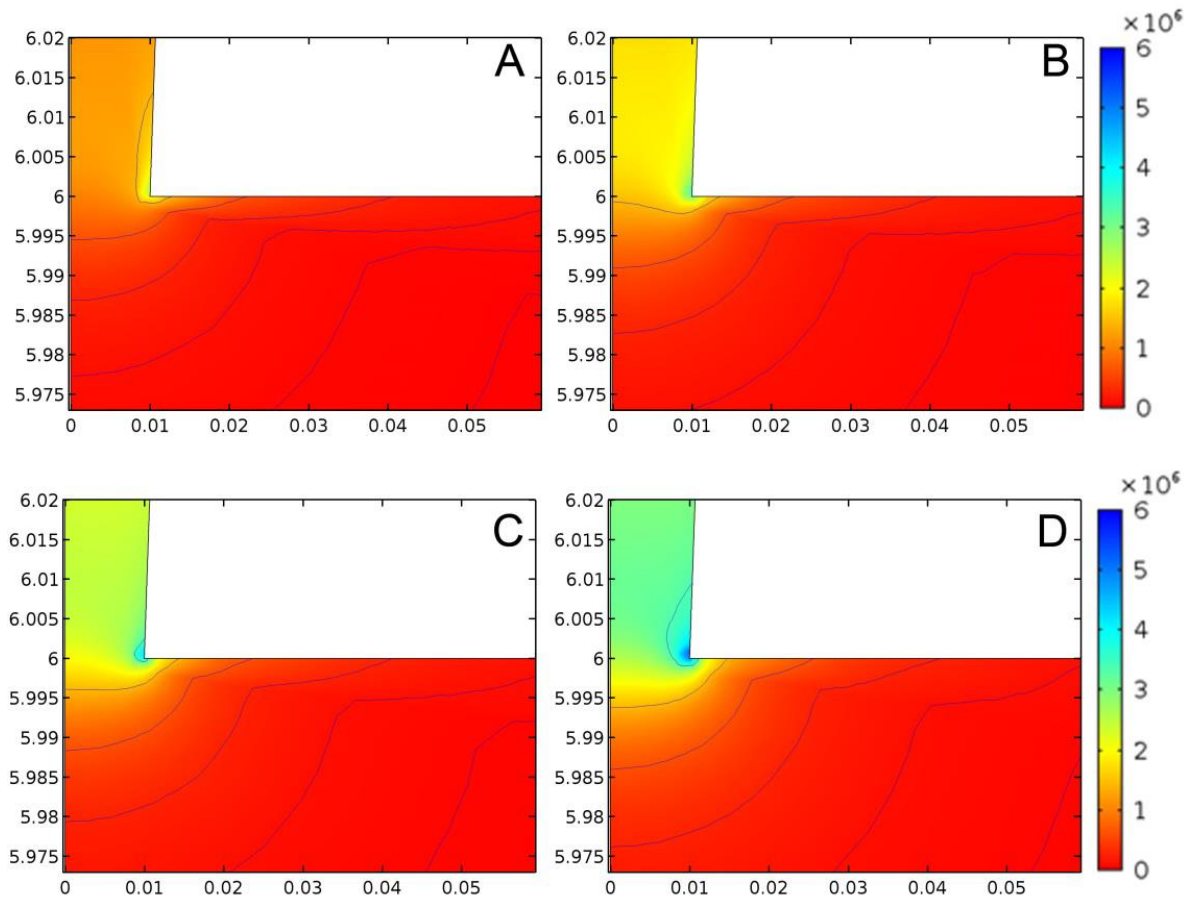
$$\nabla \cdot \left(-D_i \nabla c_i - z_i \frac{D_i}{RT} Fa \nabla \phi \right) = 0 \quad (8.1)$$

burada D_i sırasıyla potasyum ve klörür iyonlarının difüzyon sabitleri, c_i sırasıyla iki iyonun konsantrasyonu ve z_i valans değerleri (+1 ve -1); R gaz sabiti, $T=300K$ ortam sıcaklığı ve $Fa=96485$ C/mol Faraday sabitidir. Deneysel olarak kullanılmış yaklaşık gözenek taban çapları 514 nm, 625 nm, 683 nm, 815 nm ve 921 nm olarak alındı ve ayrı ayrı simüle edildi. Nano-gözenek duvarlarında ekstra sık ağ yapısı, sıklık parametresi (corner refinement parameter) 0.01 seçilerek kullanıldı. Sonuçlar 5141 bölge elemanı ve 717 sınır elemanı ile elde edildi. Hacimsel yük yoğunluğu $\rho_v, (z_1 c_1 + z_2 c_2) Fa$ C/m³ ile formüle edildi (Lan vd., 2011). Potasyum K⁺ ve klörür Cl⁻ iyonları için difüzyon sabitleri 1.957x10⁻⁹ ve 2.03x10⁻⁹ m²/s'dir.

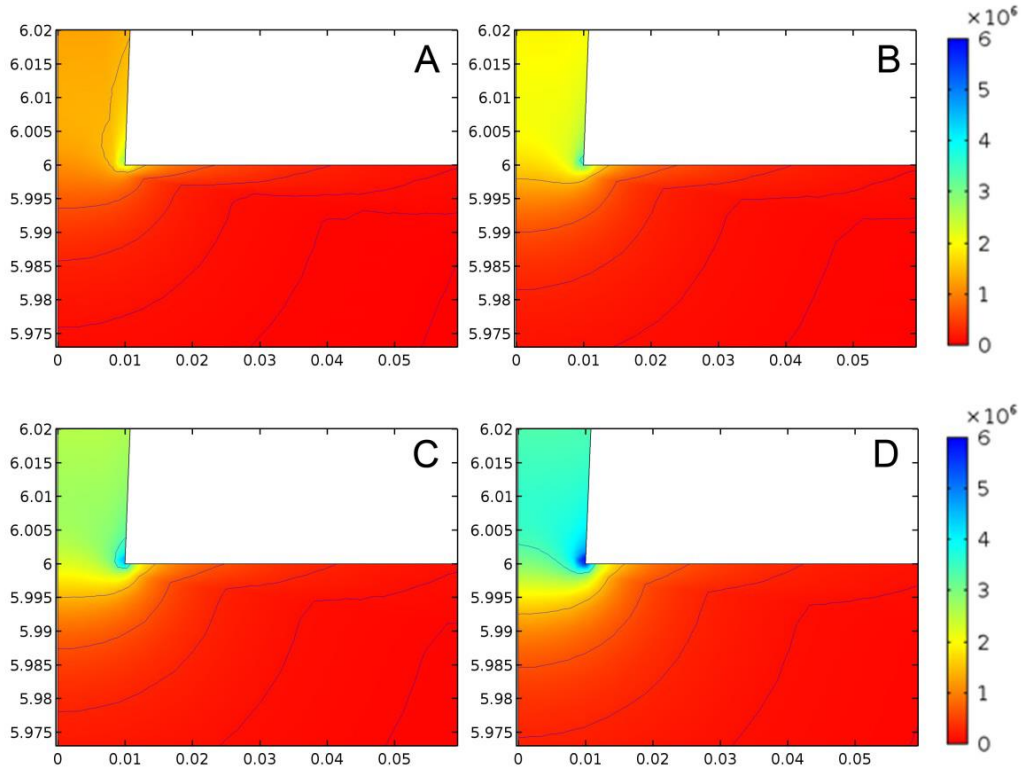


Şekil 8.2. Konik nano-gözenek ucunda elektrik alan büyüklükleri. Taban çapı (A)476nm, (B)640nm, (C) 704 nm, (D)852nm, (E)984nm. 1M KCl çözeltisi için uygulanan potansiyel 1000mV ve uç çapı 20 nm'dir.

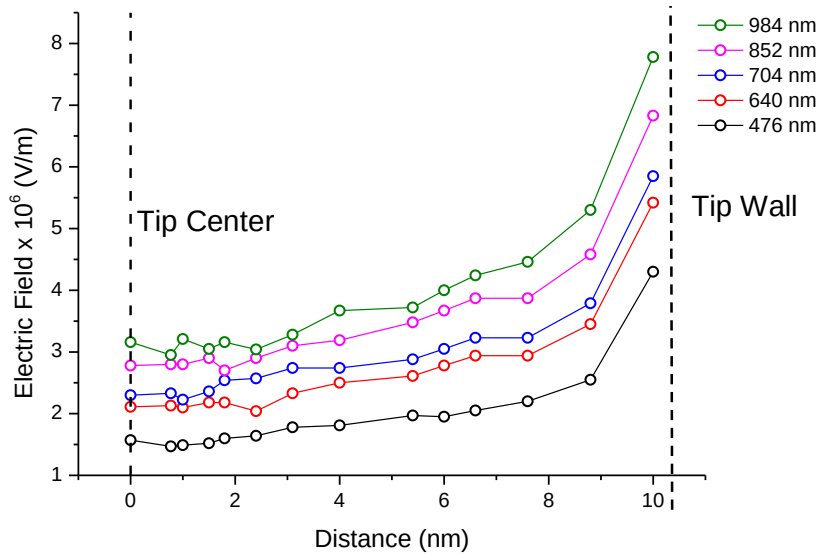
Şekil 8.2, konik nano-gözeneğin ucundaki elektrik alan büyüklüğü dağılımını göstermektedir. Taban çapı büyümesi ile uç kenarlarında elektrik alan artmaktadır. Şekil 8.3 ve 8.4 ise farklı potansiyeller uygulandığında aynı geometride fakat taban çapı 831nm ve 928nm iken nano-gözeneğin ucundaki elektrik alan büyüklüğünün dağılımını göstermektedir. Şekil 8.5, konik nano-gözeneğin ucundaki kesit alanda elektrik alan büyüklüğünü, 1M KCl çözelti, uygulanan potansiyel 1000mV ve uç çapı 20 nm olduğu durumda göstermektedir. Taban çapı büyüdükçe nano-gözeneğin duvarlarında elektrik alan büyüklüğünün arttığı görüldü. Sonuçlar deney sonuçları ile de örtüştü.



Şekil 8.3. Konik nano-gözeneğin ucunda elektrik alan büyüklükleri. Taban çapı 831 nm, KCl çözeltisi 1M ve uç çapı 20 nm'dir. Uygulanan potansiyel (A) 400 mV, (B) 600 mV, (C) 800 mV, (D) 1000 mV.



Şekil 8.4. Konik nano-gözeneğin ucunda elektrik alan büyüklükleri. Taban çapı 928nm, KCl çözeltisi 1M ve uç çapı 20 nm. Uygulanan potansiyel (A) 400 mV, (B) 600 mV, (C) 800 mV, (D) 1000 mV.



Şekil 8.5. Konik nano-gözeneğin ucunda kesit alanda elektrik alan büyüklüğü. 1M KCl çözelti, uygulanan potansiyel 1000mV ve uç çapı 20 nm'dir.

9. SONUÇLAR

Bu projede, zamana bağlı yüksek mertebeden sıcaklık sıçrama modellerinin çözümü için genelleştirilmiş Heaviside teoremini kullanarak yarı analitik bir yöntem uygulandı. Bu yöntem ile iki silindir arasındaki ısı iletim probleminin çözümünde kullanıldı. Sonuçlar Knudsen sayısı ve eğrilik ile durağan (*ing.* steady-state) duruma ulaşma süresinin arttığını gösterdi. Sonuçlar 29th Rarefied Gas Dynamics konferansında “Solving transient temperature-jump models over curved micro-surfaces” başlığı ile tam metin olarak yayınlandı (Dinler, 2014).

DSMC yöntemi ile eğrisel yüzeylerde gaz akışları için sıcak sıçrama miktarı incelendi. DSMC ile 60’a yakın farklı durum için sonuçlar elde edildi. Yapılan çalışma dışbükey (konveks) yüzey üzerinde sıcaklık sıçramasının içbükey (konkav) yüzeye göre daha fazla olduğunu gösterdi. Eğriliğin sıcaklık sıçraması üzerinde ters etkisi olduğu görüldü. Ayrıca dışbükey ve içbükey yüzeyler arasındaki sıcaklık sıçrama farkının Knudsen sayısı ile azaldığı bulundu. Sonuçların bir kısmı “Heat transfer at the convex fluid-solid interface” başlığı ile journal of applied physics dergisine gönderildi.

Nano eğrisel yüzeylerde sıvı davranışının incelenmesi için LAMMPS moleküler dinamik paketi kullanıldı. İçbükey ve dışbükey geometriler oluşturuldu. Daha sonra moleküler dinamik benzetim yaklaşımında nano-yüzeydeki molekül dizilişi ve ıslanabilirlik (*ing.* wettability) özelliği modellendi. Termal sınır direnci (TSD), farklı iki malzeme arasında ısı geçişi sırasında oluşan dirençtir. Bu direnç akışkan ile yüzey arasında da mevcuttur ki çok daha az araştırılmıştır. Moleküler dinamik benzetim yöntemi ile nano eğrisel yüzeyde Lennard-Jones sıvıları için TSD davranışı incelendi. Sonuçlar yüzey eğriliğinin termal sınır direnci üzerinde ciddi etkileri olduğunu gösterdi. Yüzey ile akışkan arasındaki ısı geçişinin yüzey eğriliği ve yüzey şekli (içbükey/dışbükey) ile değiştirilebileceği sonucunu gösterdi. Sıvılarda yüzey eğriliği ile içbükey ve dışbükey yüzeyde oluşan sıcaklık sıçramalarının birbirine zıt şekilde değiştiği gösterildi. Yüzey eğriliği ile sıcaklık sıçraması içbükey yüzeyde azalırken dışbükey yüzeyde artmaktadır. Bu sonuç ilk defa bu proje kapsamında gösterildi. Bu sonuçların bir kısmı “Curvature dependence of heat transfer at a fluid-solid interface” başlığı ile yazılmaktadır.

Gaz kinetik teori ile eğrisel yüzeylerde ısı transferinde görülen ve Kısım 3.2’de gazlar için Kısım 5.1’de sıvılar için rapor edilen sıcaklık sıçrama ve termal direnç davranışlarının temeli araştırıldı. Önceki kısımlardaki sonuçlar, S sınır tabakasının literatürde önerildiği haliyle bulunan sıcaklık sıçraması miktarını açıklayamadığını gösterdi. Boltzmann (Bhatnagar-Gross-Krook (BGK)) denkleminin ayrıntılı analitik incelenmesine ihtiyaç vardır. Bu denklemin sayısal (örneğin DSMC, DVM ya da latis Boltzmann yöntemiyle) çözümleri Knudsen ve S sınır tabaka kalınlıkları için kesin (analitik) bir ilişki vermemektedir. Bu denklemi incelemek için daha önce

yapılan analizlerin (Sone, 2007) ışığında bu proje kapsamında ilk defa yüzey üzerinde ζ yarıçaplı bir zeta-disk analizi önerildi. Böylece Knudsen sınır tabakasının dışbükey yüzeylerde genişlediği ispatlandı. S sınır tabakasının da Knudsen sınır tabakası ile genişlediği gösterildi. Diğer deyişle, Knudsen tabakasının dışbükey yüzeyde daha kalın olduğunu ve Knudsen tabakasının kalınlığının artması ile S sınır tabakasının kalınlığının arttığını gösterdi. Dışbükey yüzeyin eğriliği arttıkça S sınır tabakasının Knudsen tabakası içindeki oranı da atmaktadır. Bu durum görülen yüksek sıcaklık sıçramasını açıklayabileceği sonucuna varıldı. Sonuçların bir kısmı “Heat transfer at the convex fluid-solid interface” başlıklı makalede yer aldı.

Projede eğrisel kanallarda bir mikro-akışkan uygulaması olan ataletsel odaklanma (*ing. inertial focusing*) incelendi. Ataletsel odaklanma mikro-kanal içerisinde taşınan parçacıkların, parçacığın eğrisel yüzeyine etki eden hidrodinamik kuvvetlerin etkisi ile kanalın merkezinde dengeye gelmesi olarak tanımlanır. Eğrisel kanalda karşılıklı yüzeylerin birbirine göre simetrisi bozulmakta, iç yüzey dışbükey ve karşısındaki yüzey içbükey olmaktadır. Bu yüzey simetrisinin bozulması ataletsel odaklanma ve merkezkaç kuvveti ile beraber akışkana çok önemli bir özellik kazandırmaktadır. Bu özellik yanal yönde parçacıkların boyutlarına göre ayrılmasıdır. Böylece hücre ayrışımı mümkün olmakta, örneğin kanser hücrelerinin kandaki diğer hücrelerden ayrılması mümkün olmaktadır. Projede üç boyutta dikdörtgensel kesit alanlı mikro-kanallarda sıvı akışı Comsol yazılımı ile modellenip çözümler elde edildi. Bu akış asimptotik yöntemle analitik de incelendi ve parçacık etrafındaki hız alanı için analitik çözümler bulundu. Sonlu elemanlar yöntemi (Comsol Inc.) sayısal çözümü ile karşılaştırıldı. Bu sonuçların bir kısmı ASME 14th International Conference on Nanochannels, Microchannels, and Minichannels konferansında tam metin olarak sunuldu (Setayesh-Hagh ve Dinler, 2016).

Yüzey yükünün olduğu nano-kanallarda iyonik akışın incelenmesi ayrıca bir araştırma konusudur. Gözenekli membranlardan parçacık geçişinin incelenmesinin, geçen hücre sayısının belirlenmesinde ve hücre tipinin tanınmasında; hatta DNA sekanslamada ciddi uygulamaları vardır. Bu sensörler direnç-atım (*ing. resistive-pulse*) sensör olarak isimlendirilir. Böyle sensörlerin modellenmesinde Navier-Stokes, Poisson ve Nerst-Planck denklemlerinin kuple çözümü kullanılır. Projede konik şekilli nano-gözenekler modellendi sonlu elemanlar yöntemi ile çözüldü. Taban çapı büyüdükçe nano-gözeneklerin duvarlarında elektrik alan büyüklüğünün arttığı görüldü. Sonuçlar deney sonuçları ile de örtüştü. International Porous and Powder Materials sempozyumunda özet metin olarak sunuldu (Kaya vd., 2016a) ve geniş hali Electrochimica Acta dergisinde yayınlandı. (Kaya vd., 2016b).

10. ÖNERİLER

Micro/nano-yüzey ile ortam arasındaki (gaz/sıvı) ısı iletiminin miktarının belirlenmesi birçok mikro-cihazın tasarımında kritik öneme sahiptir. Akışkan ile yüzey arasındaki temas yüzeyinde, çok katmanlı yüzeylerde olduğu gibi, ısı iletiminde bir düşüş olur. Bu düşüşe temas direnci ya da sıcaklık sınır direnci denir. Bu direncin miktarı hem mikro hem de nano ölçekte ısıtma ve soğutma uygulamaları için önemlidir. Bu direncin tahmini için çeşitli teoriler mevcut olsa da (Cahill vd., 2014), bu projede ilk defa termal sınır direncinin yüzey şekline (dışbükey/içbükey) ve eğriliğine bağlılığı gösterildi. Lennard-Jones akışkanı ile yaptığımız testlere binaen bu proje sonuçları ışığında, metal yüzeyin (örneğin bakır, gümüş vb.) modellenip moleküler dinamik yaklaşım ile sıvı fazdaki argon ile simülasyonlar yapılmasının ve sıcaklık sınır direncinin eğrisel yüzeylerde ölçülmesinin yeni ve önemli sonuçlar ortaya koyacağı öngörülebilir. Böylece arayüzey iletkenliği, yüzey pürüzlerinin etkisi ve yüzeydeki atom dizilişinin temas direncine etkisi ayrıntılı araştırılabilir.

Projede koşulan geniş çaplı ataletsel odaklanma sayısal deneylerinin sonucu, eğriliğin genelde odaklanma bandını daraltarak odaklanma kalitesini arttırdığı ve radyal yönde kanal eninin uzaması ile (en-boy oranının uzaması ile) ayrışmanın iyileşebileceği ilk defa gösterildi. Bu sonuç üzerine, farklı çaplı parçacıkları ayırtırmak için birbirini takip ederek dallanan, farklı eğrilik ve en-boy oranlarına sahip kızları olan netvörk yapısının verimli ayrışmayı sağlayabileceği ortaya çıktı. Literatürde çok çalışılmış spiral ve yilankavi kanalları çözünürlükte (resolution) ve ayırtırma hızında (throughput) geçen böyle bir netvörk tasarlanabilir. Ancak bu geometrinin pratikte kullanılması çeşitli problemlere sahiptir. Bunlardan biri, hem eğriliğin hem de en-boy oranının hidrolik basıncı artırması ve bunun cihaz güvenilirliğini bozmasıdır. Bu hidrolik direnç probleminin çözümünde T-şekilli netvörk yapıları için kullanılan dallanma formülü, Murray kanunu (Sherman, 1981), eğrisel çatallanma için geçerli değildir. Kısım 7.1’de, Kısım 6.2’de verilen analitik çözümler ile eğrisel netvörklerde parçacık ayrışımı için Murray kanuna alternatif bir çatallanma kuralı önerildi. Böylece verimli ve üstün paraçacık ayrışımı kanal ağı dizayn edilmesi planlanmaktadır.

KAYNAKLAR

- Ahn, S.W., Lee, S.S., Lee, S.J. and Kim, J.M. 2015. "Microfluidic particle separator utilizing sheathless elasto-inertial focusing", *Chemical Engineering Science*, 126, 237-243.
- Amini, H., Lee, W., and Di Carlo, D. 2014. "Inertial microfluidic physics", *Lab on a Chip*, 14(15), 2739-2761.
- Asmolov, E. S. 1999. "The inertial lift on a spherical particle in a plane Poiseuille flow at large channel Reynolds number", *Journal of Fluid Mechanics*, 381, 63-87.
- Aoki, K., Yoshida, H. and Nakanishi, T. 2003. "Inverted velocity profile in the cylindrical Couette flow of a rarefied gas", *Phys. Rev. E*, 68: 016302.
- Bahrami, M., Yovanovich, M.M. and Culham, J.R. 2006. "Pressure drop of fully-developed, laminar flow in microchannels of arbitrary cross-section", *Journal of Fluids Engineering*, 128(5), 1036-1044.
- Bhagat, A. A. S., Kuntaegowdanahalli, S. S., & Papautsky, I. 2008. "Continuous particle separation in spiral microchannels using Dean flows and differential migration", *Lab on a Chip*, 8(11), 1906-1914.
- Bhagat, A. A. S., Kuntaegowdanahalli, S. S., Kaval, N., Seliskar, C. J., & Papautsky, I. 2010. "Inertial microfluidics for sheath-less high-throughput flow cytometry", *Biomedical microdevices*, 12(2), 187-195.
- Bhagat, A. A. S., Kuntaegowdanahalli, S. S., & Papautsky, I. 2009. "Inertial microfluidics for continuous particle filtration and extraction", *Microfluidics and nanofluidics*, 7(2), 217-226.
- Bird, G. A. 1994. *Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows*, Oxford Press.
- Booth, M. A., Vogel, R., Curran, J. M., Harbison, S. and Travas-Sejdic, J. 2013. "Detection of target-probe oligonucleotide hybridization using synthetic nanopore resistive pulse sensing", *Biosensors and Bioelectronics*, 45, pp.136-140.
- Cahill, D. G., Braun, P. V., Chen, G., Clarke, D. R., Fan, S., Goodson, K. E., ... & Maris, H. J. 2014. "Nanoscale thermal transport. II. 2003–2012", *Applied Physics Reviews*, 1(1), 011305.
- Carslaw H. S. and Jaeger J. C. 1963. *Operational Methods in Applied Mathematics*, New York, Dover Publications.

- Choi, S., Ku, T., Song, S., Choi, C. and Park, J. K., 2011. "Hydrophoretic high-throughput selection of platelets in physiological shear-stress range", *Lab on a Chip*, 11(3), 413-418.
- Cristofanilli, M., Budd, G. T., Ellis, M. J., Stopeck, A., Matera, J., Miller, M. C., ... & Hayes, D. F. 2004. "Circulating tumor cells, disease progression, and survival in metastatic breast cancer", *New England Journal of Medicine*, 351(8), 781-791.
- Damiri, H. S. and Bardaweel, H. K., 2015. "Numerical design and optimization of hydraulic resistance and wall shear stress inside pressure-driven microfluidic networks", *Lab on a Chip*, 15(21), 4187-4196.
- Daniele, M. A., Boyd, D. A., Mott, D. R. and Ligler, F. S., 2015. "3D hydrodynamic focusing microfluidics for emerging sensing Technologies", *Biosensors and Bioelectronics*, 67, 25-34.
- Di Carlo, D., Irimia, D., Tompkins, R. G., & Toner, M. 2007. "Continuous inertial focusing, ordering, and separation of particles in microchannels", *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 104(48), 18892-18897.
- Di Carlo, D., Edd, J. F., Irimia, D., Tompkins, R. G., & Toner, M. 2008. "Equilibrium separation and filtration of particles using differential inertial focusing", *Analytical chemistry*, 80(6), 2204-2211.
- Di Carlo, D., Edd, J. F., Humphry, K. J., Stone, H. A., & Toner, M. 2009. "Particle segregation and dynamics in confined flows" *Physical review letters*, 102(9), 094503.
- Dinler, A. 2014. "Solving transient temperature-jump models over curved micro-surfaces", In *Proceedings of the 29th International Symposium on Rarefied Gas Dynamics* (Vol. 1628, pp. 411-418). AIP Publishing.
- Dinler, A., Barber R. W., Emerson D. R. and Stefanov S.K. 2012. "Velocity Inversion and Predicting velocity slip on Curved surfaces", In the *Proceedings of 28th Rarefied Gas Dynamics Conference*, Zaragoza 9-13 July 2012.
- Dinler, A., Barber R. W., Emerson D. R., Stefanov S.K. and Orucoglu, K. 2013. "On the degree of boundary slip over nonplanar surfaces", *Microfluidics and Nanofluidics*, 1-10.
- Dinler, A., Oruçoğlu, K., & Barber, R. W. 2014. "Hız Yön Değiştirmesinin Langmuir Kayma Sınır Koşulu ile İncelenmesi", *Karaelmas Science & Engineering Journal*, 4(1).
- Eisenstein, M. (2006). "Cell sorting: divide and conquer", *Nature*, 441(7097), 1179-1185.

- Emerson, D. R., Cieřlicki, K., Gu, X. and Barber, R. W., 2006. "Biomimetic design of microfluidic manifolds based on a generalised Murray's law", *Lab on a Chip*, 6(3), 447-454.
- Forbes, T. P. and Forry, S.P., 2012. "Microfluidic magnetophoretic separations of immunomagnetically labeled rare mammalian cells", *Lab on a Chip*, 12(8), 1471-1479.
- Ge, Z., Cahill, D. G., & Braun, P. V. 2006. "Thermal conductance of hydrophilic and hydrophobic interfaces" *Physical review letters*, 96(18), 186101.
- Gilbert, R. J., Park, H., Rasponi, M., Redaelli, A., Gellman, B., Dasse, K. A. and Thorsen, T. 2007. "Computational and functional evaluation of a microfluidic blood flow device", *Asaio Journal*, 53(4), 447-455.
- Goldstein S. 1932. "Some Two-Dimensional Diffusion Problems with Circular Symmetry", *Proc. London Math. Soc.* 1, 51-88.
- Gossett, D. R., & Carlo, D. D. 2009. "Particle focusing mechanisms in curving confined flows", *Analytical chemistry*, 81(20), 8459-8465.
- Guan, G., Wu, L., Bhagat, A. A., Li, Z., Chen, P.C., Chao, S., Ong, C. J. and Han, J., 2013. "Spiral microchannel with rectangular and trapezoidal cross-sections for size based particle separation", *Scientific reports*, 3, 1475.
- Guo, Z., Shi, B. and Zheng, C. 2011. "Velocity inversion of micro cylindrical Couette flow: a lattice Boltzmann study", *Comput. Math. Appl.*, 61: 3519-3527.
- Han, A., Creus, M., Schürmann, G., Linder, V., Ward, T.R., de Rooij, N.F. and Staufer, U., 2008. "Label-free detection of single protein molecules and protein– protein interactions using synthetic nanopores" *Analytical chemistry*, 80(12), pp.4651-4658.
- Hansson, J., Karlsson, J. M., Haraldsson, T., Brismar, H., van der Wijngaart, W., & Russom, A. 2012. "Inertial microfluidics in parallel channels for high-throughput applications", *Lab on a Chip*, 12(22), 4644-4650.
- Hou, H. W., Warkiani, M. E., Khoo, B. L., Li, Z. R., Soo, R. A., Tan, D. S. W., and Lim, C. T. 2013. "Isolation and retrieval of circulating tumor cells using centrifugal forces", *Scientific reports*, 3, 1259.
- Hou, H. W., Bhattacharyya R. P., Hung D. T., Han J. 2015. "Direct detection and drug-resistance profiling of bacteremias using inertial microfluidics", *Lab Chip*, 15(10), 2297–2307.

- Huang, L. R., Cox, E. C., Austin, R. H. and Sturm, J. C., 2004. "Continuous particle separation through deterministic lateral displacement", *Science*, 304(5673), 987-990.
- Huh, D., Bahng, J. H., Ling, Y., Wei, H. H., Kripfgans, O. D., Fowlkes, J. B., Grotberg, J. B. and Takayama, S., 2007. "Gravity-driven microfluidic particle sorting device with hydrodynamic separation amplification", *Analytical chemistry*, 79(4), 1369-1376.
- Hur, S. C., Tse, H. T. K., & Di Carlo, D. 2010. "Sheathless inertial cell ordering for extreme throughput flow cytometry", *Lab on a Chip*, 10(3), 274-280.
- Issa, K. M., & Mohamad, A. A. 2012. "Lowering liquid-solid interfacial thermal resistance with nanopatterned surfaces", *Physical Review E*, 85(3), 031602.
- Jeffreys H. and Jeffreys B. 1999. *Methods of Mathematical Physics*, Cambridge, Cambridge University Press.
- Jimenez, M., Miller, B. and Bridle, H. L. 2017. "Efficient separation of small micro particles at high flowrates using spiral channels: application to waterborne pathogens", *Chemical Engineering Science*, 157, 247-254.
- Jimenez, M. and Bridle, H.L., 2015. "Angry pathogens, how to get rid of them: introducing microfluidics for waterborne pathogen separation to children", *Lab on a Chip*, 15(4), 947-957.
- Johnston, I. D., McDonnell, M. B., Tan, C. K. L., McCluskey, D. K., Davies, M. J., & Tracey, M. C. 2014. "Dean flow focusing and separation of small microspheres within a narrow size range", *Microfluidics and Nanofluidics*, 17(3), 509-518.
- Jung, Y. 2007. "Velocity inversion in nanochannel flow", *Phys. Rev. E*, 75: 051203.
- Kanaris, A. G., Anastasiou, A. D. and Paras, S. V. 2012. "Modeling the effect of blood viscosity on hemodynamic factors in a small bifurcated artery", *Chemical engineering science*, 71, 202-211.
- Kapitza, P. L. 1941. "Research of a mechanism of the heat transmission in Helium-II", *Zhurnal Eksperimentalnoi i Teoreticheskoi Fiziki*, 11, 1-31.
- Karimi, A., Yazdi, S., and Ardekani, A. M. 2013. "Hydrodynamic mechanisms of cell and particle trapping in microfluidics", *Biomicrofluidics*, 7(2), 021501.
- Kaya D., Dinler A., Kececi K. 2016a. "Fabrication of Track-etched Nanopore(s) and Effect of Its Geometry on Sensing Molecules", (Özet Kitabı) *International Porous and Powder Materials Symposium and Exhibition, İZMİR, TÜRKİYE*, 15-18 Eylül 2015, pp.137-137

- Kaya, D., Dinler, A., San, N. and Kececi, K., 2016b. "Effect of Pore Geometry on Resistive-Pulse Sensing of DNA Using Track-Etched PET Nanopore Membrane", *Electrochimica Acta*, 202, pp.157-165.
- Kemna, E. W., Schoeman, R. M., Wolbers, F., Vermes, I., Weitz, D. A., & van den Berg, A. 2012. "High-yield cell ordering and deterministic cell-in-droplet encapsulation using Dean flow in a curved microchannel", *Lab on a Chip*, 12(16), 2881-2887.
- Kim, S. 2009. "Slip velocity and velocity inversion in a cylindrical Couette flow", *Phys. Rev. E*, 79: 036312.
- Kralj, J. G., Lis, M. T., Schmidt, M. A. and Jensen, K. F. 2006. "Continuous dielectrophoretic size-based particle sorting", *Analytical chemistry*, 78(14), 5019-5025.
- Kuntaegowdanahalli, S. S., Bhagat, A. A. S., Kumar, G., & Papautsky, I. 2009. "Inertial microfluidics for continuous particle separation in spiral microchannels", *Lab on a Chip*, 9(20), 2973-2980.
- Kunstmann-Olsen, C., Hoyland, J. D., & Rubahn, H. G. 2012. "Influence of geometry on hydrodynamic focusing and long-range fluid behavior in PDMS microfluidic chips", *Microfluidics and nanofluidics*, 12(5), 795-803.
- Kühnemund, M. and Nilsson, M., 2015. "Digital quantification of rolling circle amplified single DNA molecules in a resistive pulse sensing nanopore", *Biosensors and Bioelectronics*, 67, pp.11-17.
- La, M., Park, S. J., Kim, H. W., Park, J. J., Ahn, K. T., Ryew, S. M. and Kim, D. S. 2013. "A centrifugal force-based serpentine micromixer (CSM) on a plastic lab-on-a-disk for biochemical assays", *Microfluidics and nanofluidics*, 15(1), 87-98.
- Lan, W. J., Holden, D. A., Liu, J. and White, H. S., 2011. "Pressure-driven nanoparticle transport across glass membranes containing a conical-shaped nanopore", *The Journal of Physical Chemistry C*, 115(38), 18445-18452.
- Lee, M. G., Choi, S., & Park, J. K. 2009. "Three-dimensional hydrodynamic focusing with a single sheath flow in a single-layer microfluidic device", *Lab on a Chip*, 9(21), 3155-3160.
- Lee, M. G., Choi, S., Kim, H. J., Lim, H. K., Kim, J. H., Huh, N., & Park, J. K. 2011a. "Inertial blood plasma separation in a contraction–expansion array microchannel", *Applied Physics Letters*, 98(25), 253702.

- Lee, W. C., Bhagat, A. A. S., Huang, S., Van Vliet, K. J., Han, J., & Lim, C. T. 2011b. "High-throughput cell cycle synchronization using inertial forces in spiral microchannels", *Lab on a chip*, 11(7), 1359-1367.
- Liang, Z., Evans, W., Desai, T., & Keblinski, P. 2013. "Improvement of heat transfer efficiency at solid-gas interfaces by self-assembled monolayers", *Applied Physics Letters*, 102(6), 061907.
- Lim, D. S., Shelby, J. P., Kuo, J. S., & Chiu, D. T. 2003. "Dynamic formation of ring-shaped patterns of colloidal particles in microfluidic systems", *Applied physics letters*, 83(6), 1145-1147.
- Marsden, A. L., Feinstein, J. A. and Taylor, C. A., 2008. "A computational framework for derivative-free optimization of cardiovascular geometries", *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 197(21), 1890-1905.
- Martel, J. M., & Toner, M. 2013. "Particle focusing in curved microfluidic channels", *Scientific Reports*, 3.
- Martel, J. M., & Toner, M. 2012. "Inertial focusing dynamics in spiral microchannels", *Physics of Fluids*, 24(3), 032001.
- Martel, J. M. and Toner, M. 2014. "Inertial Focusing in Microfluidics", *Annual review of biomedical engineering*, 16, 371-396.
- Maxwell, J. C. 1879. "On stresses in rarefied gases arising from inequalities of temperature", *Phil. Trans. R. Soc. London*, 170: 231-256.
- Muzychka, Y. S. and Edge, J., 2008. "Laminar non-Newtonian fluid flow in noncircular ducts and microchannels", *Journal of Fluids Engineering*, 130(11), 111201.
- McConnell, J., & Oakey, J. 2016. "Observed and predicted particle dynamics driven by inertial flows within high aspect ratio microfluidic channels", *Microfluidics and Nanofluidics*, 20(1), 1-5.
- Moon, H. S., Kwon, K., Kim, S. I., Han, H., Sohn, J., Lee, S., & Jung, H. I. 2011. "Continuous separation of breast cancer cells from blood samples using multi-orifice flow fractionation (MOFF) and dielectrophoresis (DEP)", *Lab on a Chip*, 11(6), 1118-1125.
- Neogi, S., & Mahan, G. D. 2016. "Lattice dynamics model calculation of Kapitza conductance at solid-fluid interfaces", *arXiv preprint arXiv:1601.02999*.
- Norouzi, M., and Biglari, N. 2013. "An analytical solution for Dean flow in curved ducts with rectangular cross section", *Physics of Fluids (1994-present)*, 25(5), 053602.

- Oakey, J., Applegate Jr, R. W., Arellano, E., Carlo, D. D., Graves, S. W., & Toner, M. 2010. "Particle focusing in staged inertial microfluidic devices for flow cytometry", *Analytical chemistry*, 82(9), 3862-3867.
- Oh, K.W., Lee, K., Ahn, B. and Furlani, E.P., 2012. "Design of pressure-driven microfluidic networks using electric circuit analogy", *Lab on a Chip*, 12(3), 515-545.
- Oozeki, N., Ookawara, S., Ogawa, K., Loeb, P., & Hessel, V. 2009. "Characterization of microseparator/classifier with a simple arc microchannel", *AIChE journal*, 55(1), 24-34.
- Oran, E. S., Oh, C. K. and Cybyk, B. Z. 1998. "Direct simulation Monte Carlo: Recent advances and applications", *Annual Review of Fluid Mechanic*, 30: 403-441.
- Park, J. S., Song, S. H., & Jung, H. I. 2009. "Continuous focusing of microparticles using inertial lift force and vorticity via multi-orifice microfluidic channels", *Lab on a Chip*, 9(7), 939-948.
- Petersson, F., Aberg, L., Swärd-Nilsson, A.M. and Laurell, T., 2007. "Free flow acoustophoresis: microfluidic-based mode of particle and cell separation", *Analytical chemistry*, 79(14), 5117-5123.
- Pettersson, S., & Mahan, G. D. 1990. "Theory of the thermal boundary resistance between dissimilar lattices", *Physical Review B*, 42(12), 7386.
- Razavi, M.S. and Shirani, E., 2013. "Development of a general method for designing microvascular networks using distribution of wall shear stress", *Journal of biomechanics*, 46(13), 2303-2309.
- Razavi, M. S., Shirani, E. and Salimpour, M. R., 2014. "Development of a general method for obtaining the geometry of microfluidic networks", *AIP Advances*, 4(1), 017109.
- Sajeesh, P., & Sen, A. K. 2014. "Particle separation and sorting in microfluidic devices: a review", *Microfluidics and nanofluidics*, 17(1), 1-52.
- Schaap A., Dumon J., Den Toonder J. 2016. "Sorting algal cells by morphology in spiral microchannels using inertial microfluidics", *Microfluidics and Nanofluidics*, 20(9),125.
- Segre, G., and Silberberg, A. 1961. "Radial particle displacements in Poiseuille flow of suspensions", *Nature* 189, 209 – 210.
- Seo, J., Lean, M. H., & Kole, A. 2007a. "Membrane-free microfiltration by asymmetric inertial migration", *Applied Physics Letters*, 91(3), 033901.
- Seo, J., Lean, M. H., & Kole, A. 2007b. "Membraneless microseparation by asymmetry in curvilinear laminar flows", *Journal of Chromatography A*,1162(2), 126-131.

- Setayesh-Hagh A. , Dinler A., 2016. "Investigation of the inertial focusing behavior in curved microfluidic channels for different aspect ratios", ASME 14th International Conference on Nanochannels, Microchannels, and Minichannels (ICNMM), Washington, ABD, 10-14 Temmuz 2016, vol.1, no.1, pp.1-9
- Sexton, L. T., Horne, L. P. and Martin, C. R., 2007. "Developing synthetic conical nanopores for biosensing applications", *Molecular BioSystems*, 3(10), pp.667-685.
- Sherman, T.F., 1981. "On connecting large vessels to small. The meaning of Murray's law", *The Journal of general physiology*, 78(4), 431-453.
- Sone, Y. 1973. "New kind of boundary layer over a convex solid boundary in a rarefied gas", *Physics of Fluids (1958-1988)*, 16(9), 1422-1424.
- Sone, Y. 2002. *Kinetic Theory and Fluid Dynamics*, Birkhauser, Boston.
- Sone, Y. 2007. *Molecular Gas Dynamics: Theory, Techniques, and Applications*, Birkhauser, Boston.
- Sone, Y., & Yamamoto, K. 1968. "Flow of rarefied gas through a circular pipe", *Physics of Fluids (1958-1988)*, 11(8), 1672-1678.
- Swartz, E. T., & Pohl, R. O. 1989. "Thermal boundary resistance", *Reviews of modern physics*, 61(3), 605.
- Tibbs, K. W., Baras, F. and Garcia, A. L. 1997. "Anomalous flow profile due to the curvature effect on slip-length", *Phys. Rev. E*, 56: 2282-2283.
- Toner, M., & Irimia, D. 2005. "Blood-on-a-chip", *Annual review of biomedical engineering*, 7, 77.
- Vo, T. Q., & Kim, B. 2015. "Interface thermal resistance between liquid water and various metallic surfaces" *International Journal of Precision Engineering and Manufacturing*, 16(7), 1341-1346.
- Wang, L., Fan, Y. and Luo, L., 2014. "Lattice Boltzmann method for shape optimization of fluid distribütör", *Computers & Fluids*, 94, 49-57.
- Wang, Y., Du, F., Pesch, G.R., Köser, J., Baune, M. and Thöming, J., 2016. "Microparticle trajectories in a high-throughput channel for contact-free fractionation by dielectrophoresis", *Chemical Engineering Science*, 153, 34-44.
- Warkiani, M. E., Khoo, B. L., Tan, D. S. W., Bhagat, A. A. S., Lim, W. T., Yap, Y. S., Lee, S. C., Soo, R. A., Han, J. and Lim, C. T., 2014. "An ultra-high-throughput spiral microfluidic biochip for the enrichment of circulating tumor cells", *Analyst*, 139(13), 3245-3255.

- Warkiani, M. E., Tay, A. K. P., Guan, G., Han, J. 2015. "Membrane-less microfiltration using inertial microfluidics", *Scientific reports*, 5, 11018.
- Warkiani, M. E., Khoo B. L., Wu L., Tay A. K. P., Bhagat A. A. S., Han J., Lim C. T. 2016. "Ultra-fast, label-free isolation of circulating tumor cells from blood using spiral microfluidics", *Nat Protoc*, 11(1),134–148.
- White, F., 2006. *Viscous fluid flow*. McGraw-Hill series in mechanical engineering.
- Wu, L., Guan, G., Hou, H. W., Bhagat, A. A. S., & Han, J. 2012. "Separation of leukocytes from blood using spiral channel with trapezoid cross-section", *Analytical chemistry*, 84(21), 9324-9331.
- Xu, Z. 2016. "Heat transport in low-dimensional materials: A review and perspective", *Theoretical and Applied Mechanics Letters*, 6(3), 113-121.
- Xuan, X., Zhu, J., & Church, C. 2010. "Particle focusing in microfluidic devices", *Microfluidics and nanofluidics*, 9(1), 1-16.
- Xue, L., Keblinski, P., Phillpot, S. R., Choi, S. S., & Eastman, J. A. 2004. "Effect of liquid layering at the liquid–solid interface on thermal transport", *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 47(19), 4277-4284.
- Yanase, S. R. N. M., Mondal, R. N., and Kaga, Y. 2005. "Numerical study of non-isothermal flow with convective heat transfer in a curved rectangular duct", *International Journal of Thermal Sciences*, 44(11), 1047-1060.
- Yao, L. S. and Berger, S. A., 1975. "Entry flow in a curved pipe", *Journal of Fluid Mechanics*, 67(01), 177-196.
- Yoon, D. H., Ha, J. B., Bahk, Y. K., Arakawa, T., Shoji, S., & Go, J. S. 2009. "Size-selective separation of micro beads by utilizing secondary flow in a curved rectangular microchannel", *Lab on a Chip*, 9(1), 87-90.
- Young, D. A., & Maris, H. J. 1989. "Lattice-dynamical calculation of the Kapitza resistance between fcc lattices", *Physical review B*, 40(6), 3685.
- Yuhong, S., Barber, R. W. and Emerson, D. R. 2005. "Inverted velocity profiles in rarefied cylindrical Couette gas flow and the impact of the accommodation coefficient", *Phys. Fluids*, 17: 047102.
- Zhang, X., Kim, A. S. and Garmire, D., 2013. "Particle-train dynamics in curved microfluidic channels at intermediate Reynolds numbers", *Chemical Engineering Science*, 98, 69-76.

- Zhang, J., Li, M., Li, W. H., & Alici, G. 2013. "Inertial focusing in a straight channel with asymmetrical expansion–contraction cavity arrays using two secondary flows", *Journal of Micromechanics and Microengineering*, 23(8), 085023.
- Zhang, J., Li, W., Li, M., Alici, G., & Nguyen, N. T. 2014. "Particle inertial focusing and its mechanism in a serpentine microchannel", *Microfluidics and Nanofluidics*, 17(2), 305-316.
- Zhou, J., & Papautsky, I. 2013. "Fundamentals of inertial focusing in microchannels", *Lab on a Chip*, 13(6), 1121-1132.

EK 1

```
# ./bandwidthTest
[CUDA Bandwidth Test] - Starting...

Device 0: Tesla K20m
Quick Mode

Host to Device Bandwidth, 1 Device(s)
PINNED Memory Transfers
Transfer Size (Bytes)    Bandwidth(MB/s)
33554432                5715.3

Device to Host Bandwidth, 1 Device(s)
PINNED Memory Transfers
Transfer Size (Bytes)    Bandwidth(MB/s)
33554432                6389.3

Device to Device Bandwidth, 1 Device(s)
PINNED Memory Transfers
Transfer Size (Bytes)    Bandwidth(MB/s)
33554432                143813.5
```

```
#!/matrixMul
[Matrix Multiply Using CUDA] - Starting...
GPU Device 0: "Tesla K20m" with compute capability 3.5

MatrixA(1600,1600), MatrixB(1600,1600)
Computing result using CUDA Kernel...
done
Performance= 258.77 GFlop/s, Time= 31.657 msec, Size= 8192000000 Ops,
WorkgroupSize= 1024 threads/block
```

```
# ./matrixMulCUBLAS
[Matrix Multiply CUBLAS] - Starting...
GPU Device 0: "Tesla K20m" with compute capability 3.5

MatrixA(1600,1600), MatrixB(1600,1600), MatrixC(1600,1600)
Computing result using CUBLAS...done.
Performance= 2302.81 GFlop/s, Time= 3.557 msec, Size= 8192000000 Ops
```


EK 2

# make package-status	Installed NO: package USER-ATC
Installed YES: package ASPHERE	Installed YES: package USER-AWPMO
Installed YES: package BODY	Installed YES: package USER-CG-CMM
Installed YES: package CLASS2	src/pair_cmm_common.cpp does not exist
Installed YES: package COLLOID	src/pair_cmm_common.h does not exist
Installed YES: package DIPOLE	Installed YES: package USER-COLVARS
Installed YES: package FLD	Installed NO: package USER-CUDA
Installed YES: package GPU	Installed YES: package USER-EFF
Installed YES: package GRANULAR	Installed YES: package USER-LB
Installed YES: package KIM	Installed YES: package USER-MISC
Installed YES: package KSPACE	Installed NO: package USER-OMP
Installed YES: package MANYBODY	Installed NO: package USER-MOLFILE
Installed YES: package MC	Installed NO: package USER-PHONON
Installed YES: package MEAM	Installed NO: package USER-REAXC
Installed YES: package MISC	Installed YES: package USER-SPH
Installed YES: package MOLECULE	
Installed YES: package OPT	
Installed YES: package PERI	

EK 3

Dell Precision T7500 desktop workstation running Red Hat linux

processor: dual hex-core 3.47 GHz Intel Xeons X5690

Intel compiler: icc -O (version 11.1)

GPUs: 2 Tesla C2075 GPU boards

Euler (İstanbul Medeniyet Üni.)

CPU	:	2.2GHz Intel Xeon E5-2660
Number of CPUs	:	2
Number of Cores	:	16
Number of Threads	:	32
RAM Memory	:	64 GB PC3L DDR3 1333 MHz
GPU	:	Tesla K20 NVIDIA
Number of GPU Cards	:	2
GPU Core Clock	:	706 MHz
Number of GPU Cores	:	4992
Single Precision floating point performance (peak) of one K20 Card	:	3.52 TFlops (Vendor Readings)
Double Precision floating point performance (peak) of one K20 Card	:	1.17 TFlops (Vendor Readings)
Operating System	:	CentOS 6.4

TÜBİTAK
PROJE ÖZET BİLGİ FORMU

Proje Yürütücüsü:	Yrd. Doç. Dr. ALİ DİNLER
Proje No:	213M549
Proje Başlığı:	Eğrisel Nano-Yüzeylerde Yüzey-Akışkan Etkileşimlerinin İncelenmesi
Proje Türü:	3501 - Kariyer
Proje Süresi:	30
Araştırmacılar:	
Danışmanlar:	
Projenin Yürütüldüğü Kuruluş ve Adresi:	İSTANBUL MEDENİYET Ü. FEN F. MATEMATİK B.
Projenin Başlangıç ve Bitiş Tarihleri:	15/03/2014 - 15/09/2016
Onaylanan Bütçe:	122113.0
Harcanan Bütçe:	98057.18

TÜBİTAK

Öz:	Mikro/nano ölçekte akışkan davranışı, makro ölçektekinden önemli ölçüde farklıdır. Yüzey alanının hacme oranı ölçek küçüldükçe büyür ve akışkan-yüzey etkileşimleri önem kazanır. Bu projede, nano ölçekte eğrisel yüzeyler üzerinde gazlar için doğrudan benzetim Monte Carlo (direct simulation Monte Carlo (DSMC)) metodu kullanılarak; sıvılar için ise LAMMPS moleküler dinamik (MD) benzetim yaklaşımı grafik işlemciler ile kullanılarak akışkan-yüzey etkileşimleri araştırıldı. Öncelikle, küçük ölçekte iki silindir arasında bulunan gaz ile ısı iletim problemi incelendi. Zamana bağlı sıcaklık sıçrama modellerinin çözümü bir boyutta bile kolay değildir. Bu sebeple, Heaviside operasyonel yöntemi kullanıldı. Heaviside açılım teoremi genelleştirildi ve bu açılımın kullanılması için yarı analitik bir yöntem önerildi. Gaz sıcaklığının zamanla ve silindirlerden uzaklaştıkça değişimi bulundu ve yüzeydeki sıcaklık sıçramasının büyüklüğü hesaplandı. Katmanlı micro/nano-yüzey ile ortam arasındaki ısı iletiminin miktarının belirlenmesi birçok mikro-cihazın tasarımında kritik öneme sahiptir. Bu sebeple projede, hız kayma miktarı ile beraber akışkan ile eğrisel nano-yüzeyler arasındaki ısı aktarımı özellikle incelendi. Dışbükey yüzey ile ortam arasında ısı iletiminin azaldığı ve beklenmedik derecede yüksek bir sıcaklık sıçramasının varlığı görüldü. Bu durumun sebeplerini daha iyi anlamak için moleküler dinamik benzetim yöntemi ile simülasyonlar yapıldı. Eğriliğin Kapitzza uzunluğuna ve termal konaklama katsayısına olan etkisi araştırıldı. Yüzey etkilerinin akışkan bölgesine nüfuzu gaz kinetik teori ile incelendi. Dışbükey yüzey üzerinde oluşan S sınır tabakasının teorik temeli sorgulandı. Knudsen tabakasının dışbükey yüzey üzerinde genişlediği ispatlandı. S sınır tabakasının tam kalınlığı, Knudsen tabakası kalınlığına bağlı olarak hesaplandı. Gaz ve sıvı davranışları kıyaslandı. Dahası, iki silindir arasındaki kabuk problemi çözülerek iç ve dışbükey yüzeylerin termal davranışı kıyaslandı. Önerilen zeta-disk yöntemi ile Boltzmann denkleminin analitik incelendi. Kabuk problemi için MD ve DSMC benzetim sonuçları elde edildi. Hem gaz hem sıvılar için eğriliğin iç ve dışbükey yüzeylerde termal sınır direncine ve sıcaklık sıçramasına olan ters etkisinin varlığını ortaya koydu. Projede, eğrisel mikro-kanalda taşınan küresel küçük parçacığın yüzeyine etki eden kuvvetler de incelendi. Dikdörtgen kesitli eğrisel kanalda, parçacığa etki eden ataletsel kuvvetler, parçacıkları çaplarına göre kanal yanal düzleminde farklı noktalarda odaklayarak, parçacık ayrışımına olanak vermektedir. Düz kanallarda ataletsel odaklanma görölse de verimli parçacık ayrışımı mümkün değildir. Eğrisel kanallarda parçacık ayrışımının mekanizmasının anlaşılması için sonlu elemanlar yöntemi ile geniş çaplı simülasyonlar yapıldı. Sonuçlar, genelde, eğriliğin odaklanmayı iyileştirdiğini, dikdörtgen kanal kesitinin en-boy oranının artmasının ise ayrışımı kolaylaştırdığını gösterdi. Bu önemli sonuç ışığında ataletsel odaklanma ile üstün parçacık ayrışımı için değişen eğriliğe ve en-boy oranına sahip dallardan oluşan kanal ağı yapısı önerildi. Üç boyutlu Dean akışına ait elde edilen analitik çözümler kullanılarak Murray kanuna alternatif bir optimum çatallanma kuralı da geliştirildi. Son olarak yüzey yükünün varlığında, konik şekilli nano-gözenek modellemesi yapıldı ve sonlu elemanlar yöntemi ile çözüldü.
Anahtar Kelimeler:	Eğrisel yüzeyler, Mikro/nano akışlar, Termal sınır direnci, DSMC, Moleküler dinamik benzetim
Fikri Ürün Bildirim Formu Sunuldu Mu?:	Hayır
Projeden Yapılan Yayınlar:	1- Solving Transient Temperature-Jump Models over Curved Micro-Surfaces (Bildiri - Uluslararası Bildiri - Sözlü Sunum), 2- Effect of Pore Geometry on Resistive-Pulse Sensing of DNA Using Track-Etched PET Nanopore Membrane (Makale - İndekli Makale), 3- Fabrication of Track-etched Nanopore(s) and Effect of Its Geometry on Sensing Molecules (Bildiri - Uluslararası Bildiri - Sözlü Sunum), 4- Investigation of the inertial focusing behavior in curved microfluidic channels for different aspect ratios (Bildiri - Uluslararası Bildiri - Sözlü Sunum),