

2 Stand der Wissenschaft

2.1 Gültigkeit und Einschränkungen des kontinuumsmechanischen Ansatzes auf mikrofluidischen Skalen

Für eine fundierte mathematische Beschreibung der Strömungsvorgänge in einem mikrofluidischen System stellt sich die Frage, ob der sonst für Makrosysteme (Kanalweiten $> 1000 \mu\text{m}$) gültige kontinuumsmechanische Modellierungsansatz, üblicherweise unter Anwendung der Navier-Stokes-Gleichungen, auch bei Mikroströmungen mit geometrischen Skalen zwischen $1 - 1000 \mu\text{m}$ uneingeschränkt anwendbar ist [52].

Auf mikroskopischer Ebene bestehen Gase und Flüssigkeiten aus *diskreten*, beweglichen Molekülen. Gasmoleküle befinden sich in permanenter stochastischer freier Bewegung und wechselwirken durch Kollisionen sowohl untereinander als auch mit ihren Berandungsgebieten (Festkörper). Moleküle in Flüssigkeiten hingegen sind in einem beweglichen, nicht-starren Gitterverband eingebunden. Sie befinden sich in einem permanenten Kollisionszustand, in dem sie untereinander und mit dem umgebenden Festkörper durch intermolekulare Kräfte interagieren. Im Folgenden soll dargestellt werden, inwieweit der klassische Kontinuumsansatz für Gase und Flüssigkeiten auf mikrofluidische Systeme übertragen werden kann und wo seine Grenzen liegen.

2.1.1 Kontinuumsansatz

Die Modellvorstellung eines Kontinuums ignoriert die Betrachtungsweise diskreter Moleküle auf mikroskopischer Ebene und basiert auf der Annahme eines den Raum homogen und lückenlos ausfüllenden, d.h. kontinuierlichen Mediums. Hierzu werden Moleküle in materiellen Punkten (Fluidteilchen) zusammengefasst, wobei eine unendliche Zahl dieser materiellen Punkte das Kontinuum bildet. Die Ermittlung makroskopischer Größen (z.B. Druck, Dichte, Geschwindigkeit und Temperatur) erfolgt durch Mittelung der mikroskopischen Größen aller im Fluidteilchen zusammengefassten Moleküle. Im Rahmen der Kontinuumshypothese werden diese makroskopischen Größen als stetige Funktionen des Ortes und der Zeit betrachtet

und können somit in Form partieller Differentialgleichungen, z. B. durch die Navier-Stokes-Gleichungen beschrieben werden. Die Gültigkeit der Kontinuumsannahme ist nur dann gewährleistet, wenn sich in den zu materiellen Punkten zusammengefassten (kleinen) Kontrollvolumina hinreichend viele Moleküle befinden, so dass der makroskopische Mittelwert aus den mikroskopischen Größen nicht mehr von den stochastischen Fluktuationen einzelner Moleküle abhängt [62].

Die Beurteilung der Anwendbarkeit des Kontinuumsansatzes in der Mikrofluidik erfordert deswegen eine genauere Betrachtung der physikalischen Eigenschaften von Gasen und Flüssigkeiten.

2.1.2 Gase

Die Annahme einer Kontinuumsströmung bei Gasen setzt voraus, dass die mittlere freie Weglänge λ der Gasmoleküle deutlich kleiner als die hierzu in Relation stehende makroskopische Längenskala L ist. Da der mittlere Molekülabstand bei Gasen unter Normbedingungen (273,15 K; 1,013 bar) in der Größenordnung von mehr als zehn effektiven Moleküldurchmessern liegt (siehe [135]), existieren nur schwache molekulare Wechselwirkungen zwischen den Gasmolekülen. Die mittlere freie Weglänge der Gasmoleküle, für die sich aus der kinetischen Gastheorie über die Maxwell-Boltzmann-Verteilung [62] nach [65] der Zusammenhang

$$\lambda = \frac{1}{4 \cdot \sqrt{2} \cdot \pi \cdot r_{\text{eff}}^2 \cdot n_V} \quad 2.1.1$$

ergibt, ist im Allgemeinen deutlich größer als der mittlere Molekülabstand. Die Teilchendichte

$$n_V = \frac{n}{V} \cdot N_A \quad 2.1.2$$

gibt die Anzahl der in einem Volumen vorhandenen Gasmoleküle an. Der effektive Molekülradius r_{eff} folgt aus dem Kovolumen b der van der waalschen Zustandsgleichung für reale Gase [144]

$$\left(p + \frac{a}{V_m^2}\right) \cdot (V_m - b) = R \cdot T \quad 2.1.3$$

und berücksichtigt das Wechselwirkungsvolumen der Molekülkräfte. Das Kovolumen b entspricht nach [66] etwa dem vierfachen Eigenvolumen von N_A Molekülen. Ausgehend von dieser Annahme ist es möglich, über die Beziehung

$$b = 4 \cdot N_A \cdot V_{\text{Molekül}} = 4 \cdot N_A \cdot \frac{4}{3} \pi \cdot r_{\text{eff}}^3 \quad 2.1.4$$

den effektiven Moleküldurchmesser

$$r_{\text{eff}} = \sqrt[3]{\frac{3 \cdot b}{16 \cdot \pi \cdot N_A}} \text{ zu berechnen.} \quad 2.1.5$$

Nach Reid [120] kann das Kovolumen b über

$$b = \frac{R \cdot T_c}{8 \cdot p_c} \text{ ermittelt werden.} \quad 2.1.6$$

Hierbei sind p_c und T_c der kritische Druck bzw. die kritische Temperatur des jeweiligen Gases. In Tabelle 2.1 sind exemplarisch die Kovolumina dreier technisch relevanter Gase sowie die sich bei Standardbedingungen ergebenden mittleren freien Weglängen aufgeführt.

Gas	$b \left[\frac{\text{m}^3}{\text{mol}} \right],$	$r_{\text{eff}} \left[10^{-9} \text{m} \right]$	$\lambda \left[10^{-9} \text{m} \right],$ ($T=273,15\text{K},$ $p = 101.325 \text{ Pa}$)
H ₂	$2,661 \cdot 10^{-5}$	13,8	118
Luft	$6,389 \cdot 10^{-5}$	18,5 [29]	61
C ₄ H ₁₀	$12,5 \cdot 10^{-5}$	23,1	42

Tabelle 2.1: Kovolumina, effektive Molekülradien, mittlere freie Weglängen dreier Gase

Eine Darstellung der mittleren freien Weglänge als Funktion des Drucks und der Temperatur kann aus den Gleichungen 2.1.1, 2.1.2 sowie dem idealen Gasgesetz

$$p \cdot V = n \cdot R \cdot T. \quad 2.1.7$$

abgeleitet werden, so dass gilt:

$$\lambda = \frac{R \cdot T}{4 \cdot \sqrt{2} \cdot \pi \cdot r_{\text{eff}}^2 \cdot p \cdot N_A}. \quad 2.1.8$$

Aus Gleichung 2.1.8 kann entnommen werden, dass niedrige Drücke und hohe Temperaturen sich in Form einer Erhöhung der mittleren freien Weglänge auswirken. Weiterhin ist ersichtlich, dass unter identischen thermodynamischen Bedingungen bei Gasen mit kleineren Molekülen größere mittlere freie Weglängen vorherrschen (siehe Abbildung 2.2). Nach [124] ist es für Gase möglich, mit Hilfe der Knudsen-Zahl die Gültigkeit des Kontinuumsansatzes zu bewerten. Die Knudsen-Zahl

$$\text{Kn} = \frac{\lambda}{L}, \quad 2.1.9$$

bildet hierbei das Verhältnis aus der mittleren freien Weglänge und einer charakteristischen geometrischen Größe (z.B. dem hydraulischen Durchmesser d_h). Abbildung 2.1 zeigt anhand einer Knudsen-Skala die Gültigkeitsbereiche verschiedener Modelle. Nachgewiesen ist, dass für $\text{Kn} \leq 10^{-3}$ eine uneingeschränkte Gültigkeit des Kontinuumsansatzes unter Anwendbarkeit der stokeschen Haftbedingung zu erwarten ist [124].

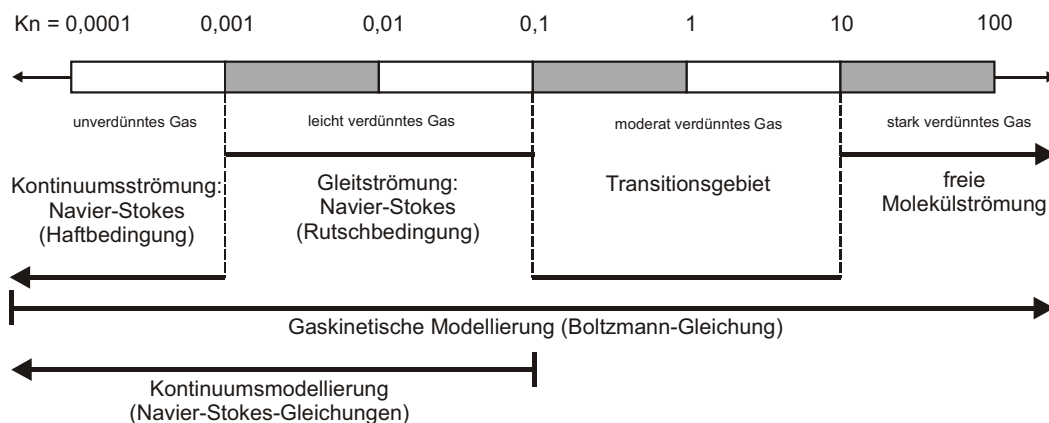


Abbildung 2.1 Gültigkeitsbereich der Kontinuumsmodellierung bei Gasen

In Abbildung 2.2 sind für die in Tabelle 2.1 dargestellten Gase unter Annahmen einer charakteristischen Länge $L=50\mu\text{m}$, die mittlere freie Weglänge λ und die Knudsen-Zahl in Abhängigkeit vom Absolutdruck und der Temperatur dargestellt. Zonen, in denen die Annahme einer Kontinuumsströmung nicht mehr vollständig gilt ($\text{Kn} \geq 10^{-3}$), sind dunkel markiert.

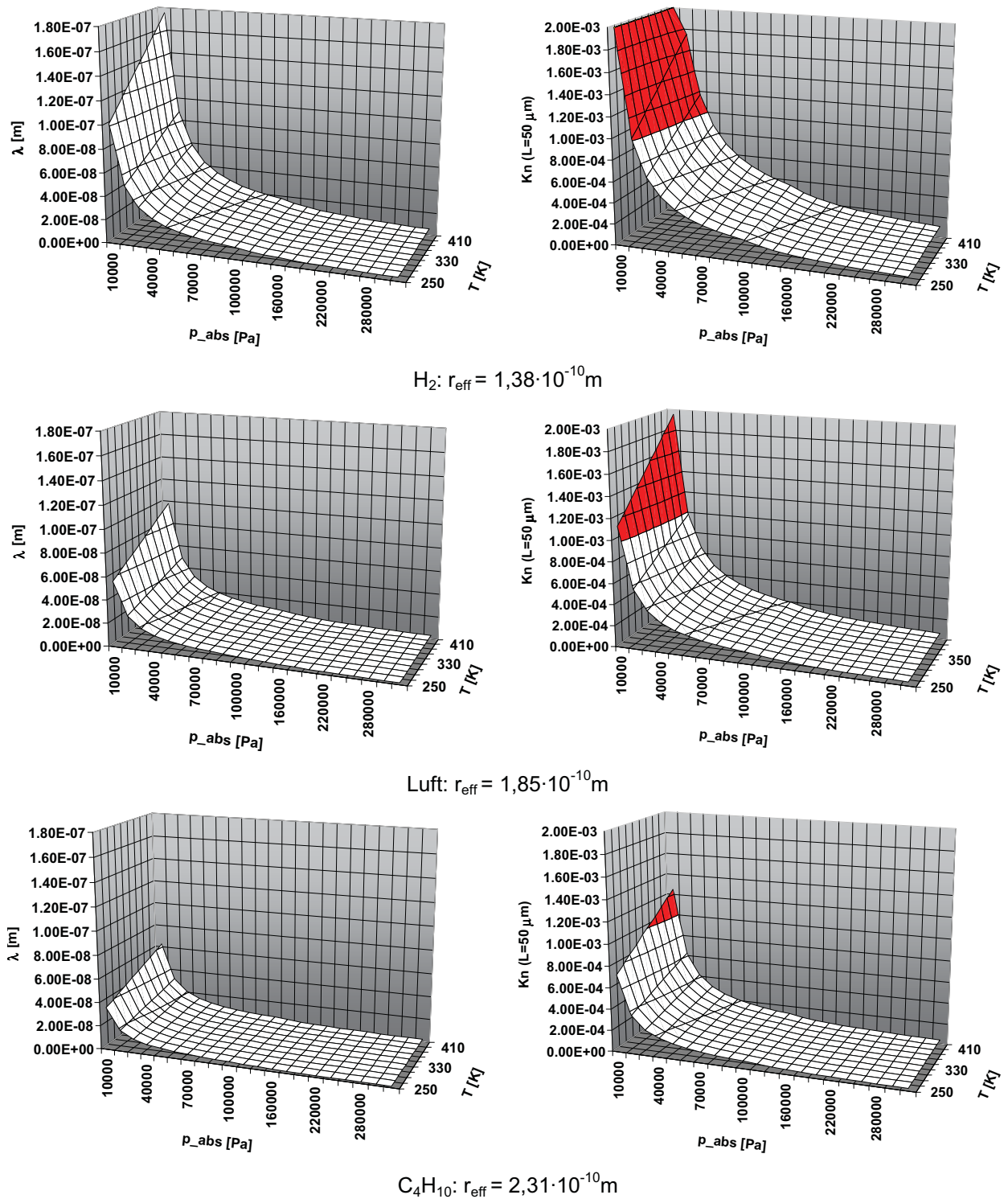


Abbildung 2.2: Mittlere freie Weglänge und $\text{Kn} (L=50\mu\text{m})$ in Abhängigkeit von Temperatur und Druck (oben: H_2 , mittig: Luft, unten: C_4H_{10})