تاثیر تغییرهای ترشوندگی یک سطح جامد بر روی جریان سیال داخل قطره چسبان حامل میکروذره‌های آبگریز

مجید احمدلوی داراب*+، ناصر اسدزاده، کسری محمدزاده عباچی
دانشکده مهندسی شیمی و نفت، دانشگاه تبریز، تبریز، ایران

چکیده: استفاده از میکروذره‌ها در داخل قطره‌های حامل، از اهمیت گسترده‌ای در زمینه کنترل فرایندهای کاربردی چندمرحله‌ای زیستی و صنعتی از جمله درتشخیص بیماری‌ها و جداسازی‌های سلولی با استفاده از غشا برخوردار می‌باشد. در این مقاله به بررسی ساختارجریان داخل قطره دارای میکروذره‌های آبگریز با استفاده از روش شبیه‌سازی MDPD پرداخته شده است. قطره در هنگام بارگیری، انتقال و رهاسازی یک میکروذره آبگریز درمجاورت یک سطح جامد که دارای گرادیان ترشوندگی خطی می‌باشد قرار دارد. ساختار جریان به تفصیل در بازه‌های زمانی گوناگون و مهم از جمله لحظه‌ای که قطره با میکروذره تماس پیدا می‌کند، زمانی که قطره شروع به حمل میکروذره می‌کند، زمانی که قطره میکروذره را انتقال می‌دهد و نهایتا لحظه‌ای که قطره میکروذره را رها می‌کند، مورد بررسی قرار گرفت. نتیجه‌ها نشان دادند که با توجه به حضور میکروذره، ساختار و شکل جریان به طور چشمگیری با حالتی که درون قطره هیچ میکروذره‌ای وجود ندارد، متفاوت می‌باشد. نکته مهم دیگر این است که در حضور میکروذره، سرعت قطره به صورت غیر یکنواخت می‌باشد. اصطکاک بین میکروذره و سطح، نه تنها حرکت قطره را به تعویق می‌اندازد، بلکه ممکن است باعث جدایش میکروذره از قطره شود. این پدیده به علت این واقعیت است که با افزایش نیروی اصطکاکی، اگرچه نیروهای عامل و تقویت کننده حرکت موثر بر میکروذره داخل قطره نیز افزایش می‌یابد اما این مقدار با توجه به نیروهای جاذبه چسبندگی قطره محدود می‌شود. بنابراین زمانی که نیروی مورد نیاز برای حرکت قطره از بیش‌ترین نیروی تأمین شده توسط نیروهای جاذبه چسبندگی قطره افزایش می‌یابد، پدیده رهایش و جدایی میکروذره و قطره رخ می‌دهد. همچنین نتیجه‌گیری شد که سرعت بحرانی بیش‌تر از ریخت‌شناسی قطره تحت تأثیر نیروهای چسبندگی داخل قطره می‌باشد.

واژگان کلیدی: میکروذره آبگریز؛ ریز قطره؛ ترشوندگی؛ ریخت‌شناسی؛ نیروی اصطکاکی؛ رهایش

KEYWORDS: *Hydrophobic Microparticle; Droplet; Wettability; Morphology; Frictional force; Deliverance*

مقدمه

میکروماده منتقل شونده از جمله سلول‌ها، میکروذره‌ها و نانوذره‌ها، داخل یک قطره حامل می‌توانند به صورت گسترده در تشخیص بیماری‌ها، جداسازی سلولی و میکرو سیالات دیجیتالی کاربرد داشته باشند. این زمینه به قدری دارای اهمیت می‌باشد که فرایندهای چند مرحله‌ای برای حمل میکروذره توسط قطره، انتقال و رهایش آن امروزه به طور گسترده‌ای مورد توجه واقع شده است

* عهده‌دار مکاتبات
+Email: mahmadlouydarab@tabrizu.ac.ir

[۱]. برای مثال در دو دهه اخیر افزایش چشمگیری در محبوبیت و پیشرفت در زمینه بررسی قطره‌ها در تکنولوژی میکروذره‌ها صورت گرفته [۳،۲] که در علوم زیستی [۴]، شیمی [۵] و دارویی [۶] تا حدودی عملیاتی شده است. نانوکره‌ها و میکروکره‌ها در داخل قطره‌ها به صورت سوبسترا یا زیرلایه‌های متحرک برای به دام انداختن پادتن‌ها یا DNA به کار می‌روند. از این ویژگی‌های ذکر شده، در فرایندهای دارویی و زیستی چندمرحله‌ای و چندکاره نیز استفاده می‌شود. همچنین این مواد در جابه‌جایی آنتی‌ژن (پادتن) مورد نظر، نشانه‌گذاری سلول‌ها یا پروتئین‌های مورد نظر برای شناسایی بهتر و تولید ساختارهایی که طی اختلاط سیال به‌طور خودبه خود متراکم می‌شوند، کاربرد دارند [۱۳–۷]. با توجه به این که سطح ویژه زیادی برای لخته‌سازی شیمیایی و همچنین بازیابی آسان‌تر مورد نیاز می‌باشد، در نتیجه با استفاده از تغییرهایی همچون پوشش‌دهی، این میکروکره‌ها به سطح مخصوص مطلوب برای رسوب پروتئین‌ها و سلول‌های مورد نظر، دست می‌یابند. در نتیجه پروتئین‌ها یا سلول‌ها می‌توانند با دستکاری میکروذره‌ها، کنترل شوند. بنابراین دستکاری میکروذره‌ها در مکانیزم‌های برداشت، جابه‌جایی و رهایش میکروذره‌ها و در نتیجه در کنترل فرایندهای زیستی و شیمیایی چندمرحله‌ای نقش بسزایی دارند. اما هنوز مشکل اصلی دستکاری میکروذره‌ها به‌وسیله قطره‌های بی‌شکل، فقدان بازده و دقت می‌باشد. با این حال با استفاده از مواد مغناطیسی می‌توان کنترل میکروذره‌ها را بهبود بخشید [۱۶–۱۴]. اما در عین حال این روش هزینه‌بر بوده و پیچیدگی طراحی‌های تجربی را به‌طور گسترده‌ای افزایش می‌دهد.

گزارش های علمی بسیار کمی در مورد دستکاری میکروذره‌ها در منابع موجود می‌باشد. در مرتبط‌ترین پژوهش انجام شده یک دستگاه آزمایشگاهی توسط *ژائو* و *چو*[۱] برای بررسی بازده میکروذره‌های آبدوست و آبگریز در مجاورت قطره‌های متحرک که توسط الکتریسیته بر روی دی الکتریک به روش EWOD[۲] دستکاری شده‌اند، طراحی شده است [۱۷]. در مطالعه‌های دیگر بازده‌های نمونه‌ها و مواد گوناگون دیگر از جمله میکروب‌ها و گرده‌ها [۱۸] و همچنین در مجاورت سطوح گوناگون، مورد بررسی قرار گرفته است [۱۹]. از الکتروفورسیس[۳] علاوه بر نمونه‌گیری میکروذره‌ها، برای تغلیظ و جداسازی میکروذره‌های گوناگون الکتریکی از یک قطره اصلی به دو قطره فرعی نیز استفاده می‌شود [۲۰]. متاسفانه داده‌های موجود در منابع، براساس رفتار طبیعی گروهی از میکروذره‌ها گردآوری شده است. برای مثال یکی از روش‌های سنتی برای بررسی جریان سیال داخل قطره، بررسی تصویرهای قطره با استفاده از سرعت‌سنج می‌باشد، که امروزه به‌دلیل استفاده مقدارهای زیادی ماده فلوروسنت برای آشکارسازی تصویرها با استفاده از دوربین‌های پرسرعت برای بررسی قطره و سیالی که داخل آن‌ها قرار دارد، چندان کاربرد نداشته و منسوخ شده است [۲۳–۲۱]. اما با توجه به اندازه قابل مقایسه میکروذره‌های مورد نظر، دنبال کردن میکروذره‌ها نسبت به خود میکروذره مورد نظر تاثیر بیش‌تری بر جریان سیال دارد، در صورتی که هدف مطلوب بررسی تاثیر میکروذره بر جریان سیال می‌باشد. بنابراین با توجه به محدودیت‌های فنی موجود، بررسی دقیق و جزئی ساختار جریان و همچنین فیزیک مسئله در قطره بی پایه که دارای میکروذره‌ها می‌باشد، تاکنون به درستی انجام نگرفته است.

با پیشرفت سریع روش‌های عددی و همچنین سیر نزولی قیمت منابع کامپیوتری، شبیه‌سازی عددی به یکی از مهم‌ترین روش‌ها برای اعتبارسنجی مدل‌های تحلیلی، تجزیه و تحلیل نتیجه‌های آزمایشگاهی، امکان‌سنجی طراحی و همچنین تعیین مقدارهای پارامترهایی که در اندازه‌های میکرو و ماکرو برای سیالات به روش‌های آزمایشگاهی یا قابل اندازه‌گیری نیستند و یا بسیار گران می‌باشند، تبدیل شده است [۲۴].

دستکاری قطره‌ها و دینامیک سیالات در سامانه میکروسیالات دیجیتالی (DMF)[۴] به روش MDPD[۵] انجام می‌گیرد [۳۲–۲۵]، که یک روش عددی برای بررسی دینامیک ذره‌های چند تکه با در نظر گرفتن ترم اتلاف می‌باشد. این روش نوع پیشرفته روش DPD[۶] هست که برای بررسی دینامیک ذره‌ها و همچنین سطح مشترک مایع بخار استفاده می‌شود. DPD مشابه روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی (MD)[۷] می‌باشد با این تفاوت که قابلیت بالاتری را برای بررسی پدیده‌های فیزیکی در گام دمایی، مکانی و مراتب بالاتر نسبت به روش MD دارد. DPD برای پدیده‌های تصادفی از جمله حرکت براونی جامدها و سیالات این توانایی را دارد که حرکت ذکر شده را تبدیل به عدد و رقم کرده و بشمارد. تاثیر حرکت براونی بر روی دینامیک میکروذره در مطالعه‌های لی[۸] مورد بررسی

(۱) Zhao and Cho
(۲) Electrowetting-on-dielectric
(۳) Electrophoresis
(۴) Digital microfluidics
(۵) Many-body dissipative particle dynamics
(۶) Dissipative particle dynamics
(۷) Molecular dynamics
(۸) Li

قرار گرفته است [۲۹]. برتری این روش، سهولت بررسی اثر متقابل ذره، تحت پتانسیل دافعه‌ای ملایم می‌باشد و نشان داده شده است که DPD می‌تواند به عنوان مدل مزوسکوپیک دینامیک مولکولی نیز استفاده شود [۳۰]. همچنین این روش در بررسی جداسازی فازی در مخلوط‌های مایع دوتایی غیرقابل اختلاط [۳۳-۳۱]، تغییر شکل قطره‌ها و جدایی در جریان برشی [۳۴]، قطره‌های روی سطوح تحت نفوذ یا تأثیر جریان برشی [۳۵] مورد استفاده قرار گرفته است. در مسائل مربوط به مایع تک جزئی، روش DPD به‌دلیل دارابودن پتانسیل دافعه‌ای ملایم به تنهایی نمی‌تواند تنش روی سطح را تکثیر کند، فدر نتیجه دارای یک محدودیت مبنایی می‌باشد. این پتانسیل غالباً منجر به حل نمودن معادلهٔ حالت فشار- دانیسته درجهٔ دوم می‌شود [۳۶]. *راو*[۱] و *همکارانش* توانستند روش MDPD را برای محاسبه برخی از مشخصه‌های سیالات واقعی مثلا کشش سطحی، ضریب نفوذپذیری و ویسکوزیته استفاده کنند. روش آن‌ها برای آب و هیدروکربن‌ها از قبیل هپتان قابلیت استفاده را دارد [۳۷]. اخیرا یک مدل برای میکروذره‌های جامد بر مبنای روش MDPD ارایه شده که به بررسی برهمکنش بین قطره‌ها، میکروذره‌ها و لایه‌های سوبسترا می‌پردازد [۳۹،۳۸،۳۳]. در مدل مذکور، میکروذره‌های آبدوست قطره‌ها را احاطه می‌کنند در حالی که میکروذره‌های آبگریز در تماس با زیرلایه‌ها و سوبستراها می‌باشند و برای جابه‌جایی و انتقال راحت‌تر کنترل می‌شوند. روش MDPD برای کاربرد در اندازه‌های ماکرو، توسط *فرنکل*[۲] ارایه شده و شامل یک ترم مربوط به نیروی جاذبه می‌باشد [۴۰]. رویکرد مشابهی توسط *نوگنت*[۳] و *پوش*[۴] در روش هیدرودینامیک ذره‌های صاف[۵] (SPH) معرفی شده است [۴۱].

قابلیت استفاده از روش MDPD برای سیالات چندفازی به‌طور گسترده توسط *وارن*[۶] و *تروفیمو*[۷] بررسی شده است [۴۳،۴۲]. روش MDPD همچنین می‌تواند برای مطالعهٔ دینامیک سطح آزاد روی سطوح جامد، برای نمونه فیزیک میکروسکوپی اُفت یا لغزش مورد استفاده قرار گیرد. با این حال تمرکز پژوهش‌های گذشته اغلب روی ویژگی‌های توده‌ای و بالک یعنی رابطه فشار- دانسیته بوده است [۴۲].

متاسفانه تاکنون اطلاعات دقیقی در مورد فیزیک و الگوی جریان سیال داخل قطره در دسترس نمی‌باشد. اگر چه در مطالعه پیشین به بررسی رفتار یک میکروذره داخل یک قطره چسبان[۸] پرداخته شد [۳۳]، آما هدف اصلی ما دستکاری ویژگی‌های سطحی میکروذره‌ها آبگریز به منظور درک کامل الگوی جریان سیال و متعاقبا بهبود پارامترهای فیزیکی مرتبط در داخل قطره حامل میکروذره آبگریز می‌باشد. برای رسیدن به این هدف، از روش MDPD با تغییر ضریب تنش سطحی σ استفاده خواهد شد. به‌علاوه سعی خواهد شد یک معیار مناسب برای میکروذره حمل شونده توسط قطره یافت شود. این نتیجه‌ها می‌توانند برای سامانه‌ای که به صورت DMF طراحی شده مفید باشد، بدین‌صورت که دیگر برای دستکاری میکروذره‌ها نیازی به نیروهای مغناطیسی خارجی و یا ساختارهای پیچیده مغناطیسی نباشد. نهایتا تاثیر اندازه قطره بر روی رهایش میکروذره به‌طور دقیق و با جزئیات بررسی خواهد شد.

بخش نظری

روش عددی و مرحله‌ها محاسبه‌های

همان‌گونه که اشاره شد، برای مدل‌سازی حرکت یک قطره دارای میکروذره از روش MDPD استفاده شده است. این روش برای ذره‌های درشت دانه استفاده می‌شود و سامانه را به صورت دسته‌ای از ذره‌ها در نظر گرفته و مدل‌سازی می‌کند. حرکت این دانه‌ها از قانون دوم نیوتن که به فرم $\frac{d\vec{r}_i}{dt} = \vec{v}_i$ نوشته می‌شود پیروی می‌کند. این معادله را می‌توان به شکل معادله (۱) نیز نوشت:

$$m_i \frac{dv_i}{dt} = \vec{f}_i = \sum_{i \neq j} \left(\vec{F}_{ij}{}^{C} + \vec{F}_{ij}{}^{D} + \vec{F}_{ij}{}^{R} \right) \qquad (۱)$$

که در آن $\vec{f}_i$, $\vec{v}_i$, $\vec{r}_{ij}$ نشانگر مشخصه‌های ذره i ام به ترتیب برای مختصات، سرعت و نیروی وارد بر ذره می‌باشند. همچنین $\vec{F}_{ij}{}^{C}$, $\vec{F}_{ij}{}^{D}$, $\vec{F}_{ij}{}^{R}$ مولفه‌های نیرو می‌باشند که به‌ترتیب نیروی بقایی، اتلافی و نیروی تصادفی نامیده می‌شوند [۴۴،۲۵].

$$\vec{F}_{ij}{}^{C} = A_{ij}\omega_C(r_{ij}) + B_{ij}\left(\bar{\rho}_i + \bar{\rho}_j\right)\omega_d(r_{ij}) \qquad (۲)$$

$$\vec{F}_{ij}{}^{D} = -\gamma\omega_D(r_{ij})\left(\vec{e}_{ij} \cdot \vec{v}_{ij}\right)\vec{e}_{ij} \quad \vec{F}_{ij}{}^{R} = \varphi\omega_R(r_{ij})\theta_{ij}(\delta_t)^{-1/2}\vec{e}_{ij} \qquad (۳)$$

$$r_{ij} = \left|\vec{r}_{ij}\right|, \vec{r}_{ij} = \vec{r}_i - \vec{r}_j, \vec{e}_{ij} = \vec{r}_i / \left|\vec{r}_{ij}\right|, \vec{v}_{ij} = \vec{v}_i - \vec{v}_j$$

نیروی بقایی شامل هر دو ترم دافعه و جاذبه می‌باشد. A_{ij} و B_{ij} به‌ترتیب نمایانگر ترم‌های جاذبه و دافعه می‌باشند. همچنین ω_d و ω_C توابع وزنی ترم‌های جاذبه و دافعه هستند که به صورت زیر تعریف می‌شوند:

(۱) Rao
(۲) Frenkel
(۳) Nugent
(۴) Posch
(۵) Smooth particle hydrodynamics
(۶) Warren
(۷) Trofimov
(۸) Sessile droplet

جدول ۱ - پارامترهای مورد استفاده در شبیه‌سازی‌های MDPD که همگی دارای واحد DPD هستند [۳۳].

پارامترها	نماد	مقدار
دانسیته سیال	ρ	۶/۰۰
شعاع قطع نیروهای جاذبه	r_C	۱/۰۰
شعاع قطع نیروهای دافعه	r_d	۰/۷۵
دامنه نیروهای رندم و تصادفی	φ	۶/۰۰
جاذبه بین مایع-مایع	A_{ll}	-۴۰/۰۰
دافعه بین مایع-مایع	$B_{ll}=B_{lw}$	۲۵/۰۰
گام زمانی	Δt	۰/۰۱

$$\omega_C(r_{ij}) = \begin{cases} 1 - {r_{ij}}/{r_C}, & (r < r_C) \\ 0, & (r \geq r_C) \end{cases} \quad , \quad \omega_d(r_{ij}) = \begin{cases} 1 - {r_{ij}}/{r_d}, & (r < r_d) \\ 0, & (r \geq r_d) \end{cases} \tag{۴}$$

که $r_d = 0.75\, r_C$ بوده و ترم نیروی جاذبه مستقل از دانسیته می‌باشد، در صورتی که مولفه دافعه تابع میانگین وزنی دانسیته ذره‌ها هست و دانسیته هر ذره به صورت زیر تعریف می‌شود [۲۵]:

$$\bar{\rho}_i = \sum_{i \neq j} 15/(2\pi r_{ij}^3)(1 - {r_{ij}}/{r_d})^2 \tag{۵}$$

برای نیروهای رندم و اتلافی $\vec{F}_{ij}{}^{D}, \vec{F}_{ij}{}^{R}$، ω_R , ω_D توابع وزنی آن‌ها هستند. γ و φ نیز به‌ترتیب دامنه نیروهای اتلافی و رندم و θ_{ij} نیز عدد گاوسی با واریانس واحد و میانگین صفر می‌باشد [۴۵]:

$$\omega_D(r) = [\omega_R(r)]^2, \varphi^2 = 2\gamma k_B T \tag{۶}$$

k_B ثابت بولتزمن و T دمای سامانه هست و توابع وزنی متداول استفاده شده به صورت زیر می‌باشند [۴۴]:

$$\omega_D(r) = [\omega_R(r)]^2 = [\omega_C(r)]^2 \tag{۷}$$

پیوستگی دمایی معادله‌های MDPD با استفاده از الگوریتم سرعت اصلاح شده ورلت[۱] بررسی می‌شود[۴۴]. پارامترهای این روش با استفاده از مطالعه‌های پیشین [۲۹،۲۸] و جدول ۱ به‌دست می‌آیند [۳۳].

لازم به توضیح این که برای بررسی میکروذره‌های جامد با استفاده از روش MDPD در مطالعه‌های پیشین یک مدل طراحی شد [۳۳]. به‌طور خلاصه، در مدل پیشنهاد شده پیشین، میکروذره جامد مورد استفاده به صورت یک کره سخت و صلب توخالی همراه ۶۱۲ ذره جامد بر روی سطح آن می‌باشد [۴۸،۳۳-۴۶]. شرایط مرزی سطح میکروکره به صورت بازتابی و انعکاسی در نظر گرفته شده تا از نفوذ ذره‌ها مایع به داخل میکروذره صرف نظر شود. لایه فعال و سوبسترا به صورت الاستیک و میکروذره به صورت صلب فرض می‌شود [۴۹]. میکروذره به‌دلیل وجود نیروهای چسبندگی به دیواره می‌چسبد. این نیرو به دلیل اضافه شدن نیروهای وارد بر میکروذره از طرف سوبسترا ایجاد شده و در نظر گرفته شده است. این نیروی چسبندگی توسط نیروی نرمال موازنه می‌شود که این نیروی نرمال تابعی از الاستیسیته دندانه سوبسترا d_{in} می‌باشد که به صورت زیر از معادله (۸) به‌دست می‌آید:

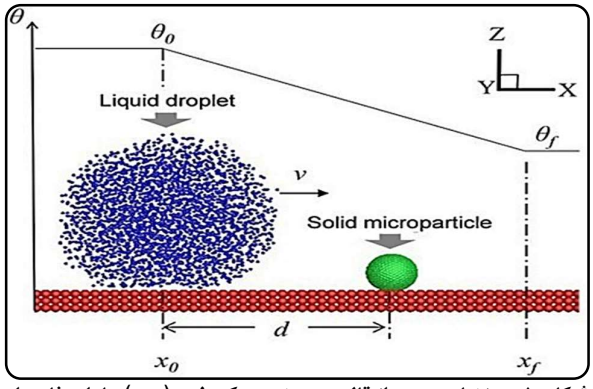
$$F_{normal} = \frac{4}{3} R_s^{1/2} d_{in}^{3/2} \tag{۸}$$

که در معادله فوق، F_{normal} نیروی عمود برسطح یا نرمال، E مودول الاستیکی سوبسترا و R_s شعاع میکروذره جامد می‌باشد. به‌دلیل تماس سوبسترای جامد و میکروذره، اصطکاک جنبشی و اصطکاک چرخشی نیز در نظر گرفته شده است. این دو نیرو با جمع نیروی نرمال و ضریب اصطکاک استاتیکی f_s و ضریب اصطکاکی چرخشی f_r تخمین زده شده و به‌دست می‌آیند. حرکت یک میکروذره که به صورت کره سخت در نظر گرفته شده را می‌توان به دو نوع به‌طور کامل مستقل از هم تفکیک کرد؛ انتقالی و چرخشی، که این نیروها با استفاده از نیرو و تنش کل وارده به صورت مستقل از یکدیگر قابل محاسبه‌اند [۵۱،۵۰].

مدل هندسی ایجاد شده

محیط شبیه‌سازی یک ناحیه سه بعدی به اندازه‌های ۱۵۰ (x) در ۷۰ (y) در ۲۰ (z) واحد در مقیاس DPD می‌باشند. که اندازه واحدها در هر سه راستا یکسان است. نقطه مبدا در مرکز ناحیه و سطح دیواره در ۱۰ = z تعیین شده است. زمانی که یک قطره بر روی سوبسترای جامد قرار می‌گیرد، به‌دلیل گرادیان ترشوندگی، نیروی مویینگی ایجاد می‌شود که به‌دلیل زاویه تماس موجود بین قطره و دیواره بوده و باعث حرکت قطره می‌شود [۵۵-۵۲]. گرادیان ترشوندگی سوبسترا با استفاده از تنظیم پارامتر جاذبه A_{jw} بین قطره و سوبسترا، به‌دست می‌آید. بدین‌صورت ویژگی‌های ترشوندگی سوبسترا یا زاویه تماس θ، می‌تواند از آبگریز $\theta > 90°$ به آبدوست $\theta < 90°$ تبدیل شود. فرمولی که زاویه تماسی θ را به پارامتر جاذبه A_{iw} مرتبط می‌کند، در پژوهش پیش مورد بررسی قرار گرفت [۳۳]. در مطالعه کنونی از همان فرمول گفته شده با استفاده از پارامترهای MDPD برای گرادیان ترشوندگی خطی مطلوب برای جامدی که در مجاورت سوبسترا می‌باشد، در جهت محور x، استفاده شده است. فرمول اشاره شده در معادله (۹) ارایه شده است:

(۱) Velocity-Verlet algorithm



شکل ۱ - نشان‌دهنده انتقال و رهش میکروذره (سبز) با استفاده از یک قطره (آبی) به‌دلیل گرادیان ترشوندگی بر روی لایه و سوبسترای (قرمز) می‌باشد. زاویه تماس بین قطره و سوبسترا به صورت خطی در امتداد محور x از θ_0 تا θ_f تغییر می‌کند و مسیر حرکت قطره را مشخص می‌کند.

$$A_{lw}=\begin{cases}-8.77 & x<x_0\\ -1.21-\sqrt{57.08+3.30\times\frac{\theta_0-\theta_f}{(x_0-x_f)}(x-x_0)} & x_0\le x\le x_f\\ -21.71 & x>x_f\end{cases} \quad (۹)$$

که در این معادله، x_0 و x_f به ترتیب موقعیت‌های ابتدایی (انتهای آبگریز) و موقعیت انتهایی (انتهای آبدوست) با گرادیان ترشوندگی هستند و در شکل ۱ نشان داده شده‌اند. θ_f و θ_0 به ترتیب زاویه تماس انتهای آبگریز و انتهای آبدوست و d فاصله ابتدایی بین مرکز قطره و میکروذره‌ها می‌باشد. سوبسترا از سه لایه شامل ذره‌های جامد سخت که بر روی لایه بالایی آن شرط مرزی بازتابی اعمال شده است تشکیل شده است. در امتداد x و y هم شرط مرزی تناوبی اعمال می‌شود. مقدارهای پارامترهای مورد نیاز برای مدل‌سازی و همچنین گرادیان ترشوندگی مورد نیاز از جدول ۲ به‌دست می‌آیند.

پارامترهای جاذبه و دافعه بین میکروذره‌ها و مایع‌ها به ترتیب با A_{ls} و B_{ls} نمایش داده و طوری انتخاب می‌شوند تا میکروذره از نوع آبگریز شود [۵۶]. همچنین از پژوهش پیشین این نتیجه به‌دست آمد که اصکاک چرخشی در برابر اصکاک انتقالی ناچیز بوده و قابل صرف نظر می‌باشد، در نتیجه در مطالعه کنونی، اصطکاک چرخشی ثابت فرض شده و مورد بررسی قرار نمی‌گیرد.

دو پارامتر دیگر مورد نیاز که طی شبیه‌سازی تغییر می‌کنند، شامل شعاع قطره R_l و ضریب اصطکاک استاتیکی f_s می‌باشد. برای بررسی و بحث بهتر در مورد نتیجه‌ها، از پارامترهای بدون بعد استفاده می‌شود [۳۳]. طول سامانه MDPD مورد نظر با ۱۰ میکرومتر که در مطالعه فعلی شعاع میکروذره جامد است، بی‌بعد می‌شود.

جدول ۲ - پارامترهای مورد استفاده برای مدل‌سازی میکروذره و گرادیان ترشوندگی. پارامترها دارای واحد DPD هستند [۳۳].

پارامترها	نماد	مقدار
نقطه شروع ناحیه گرادیان ترشوندگی	x_0	-۴۰/۰
نقطه پایان ناحیه گرادیان ترشوندگی	x_f	۴۰/۰
جاذبه بین میکروذره و دیواره	A_{sw}	-۱/۰
دافعه بین قطره و میکروذره	B_{ls}	۳/۰
جاذبه بین قطره و میکروذره	A_{ls}	-۱۵/۰
شعاع میکروذره	R_s	۱/۰
زاویه تماس در انتهای آبگریز	θ_0	۱۵۰/۰
زاویه تماس در انتهای آبدوست	θ_f	۴۰/۰
ضریب اصطکاک چرخشی	f_r	۰/۸
فاصله ابتدایی بین قطره و میکروذره	D	۱۰/۰

برای تبدیل آن‌ها از مقیاس DPD به اندازه‌های واقعی، واحد جرم نیز $۱/۶۷ \times ۱۰^{-۱۳}$ کیلوگرم، دانسیته مایع ۱۰۰۰ کیلوگرم بر متر مکعب، واحد زمانی ۴/۱۵ میکروثانیه، تنش سطحی ۷/۵۳ اینچ در سامانه MDPD و همچنین تنش سطحی بین مایع- بخار ۰/۰۷۳ نیوتن بر متر می‌باشد. تمام پارامترهای این مقاله با واحد طول، جرم و زمان بی‌بعد شده و نتیجه‌ها نیز با واحدهای کاهیده[۱] ارایه شده‌اند. باتوجه به شعاع بسیار ناچیز قطره، از نیروهای گرانشی در این پژوهش صرف نظر شده است.

نتیجه‌ها و بحث

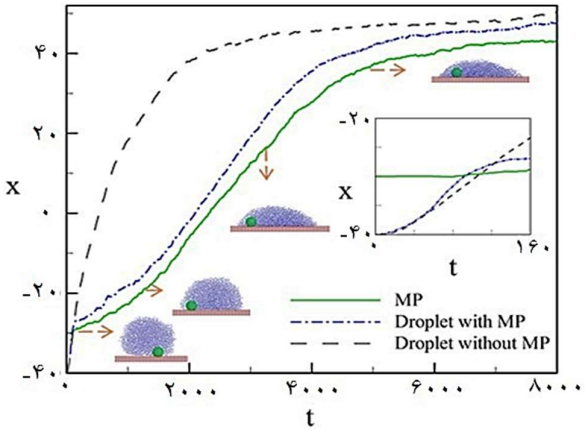
نتیجه‌ها

برای درک و فهم بهتر از این که اساسا چه برهمکنشی بین قطره چسبان و میکروذره‌ها صورت می‌گیرد، ابتدا بایستی به درک درستی از انتقال و رهایش رخ داده بین میکروذره‌های آبگریز و قطره‌های چسبان دست یافت و این کار به کمک مدلی که پیش‌تر درباره آن توضیح داده شد، انجام داده می‌شود. همان‌گونه که گفته شد، قطره و میکروذره مورد مطالعه در این تحقیق، به ترتیب دارای شعاع ۱ و ۵ واحد DPD می‌باشند. ضریب اصطکاک ایستایی نیز f_s=۰/۲ بوده و سایر پارامترها نیز در جدول ۱ و ۲ گردآوری شده است.

در بررسی و تحلیل نتیجه‌ها، در گام اول بر روی آنالیز موقعیت قطره در طول فرایند انتقال و جابه‌جایی تمرکز و سپس تلاش شده است که ساختار جریان را هنگامی که قطره‌ها، میکروذره‌ها را با خود حمل می‌کنند، به‌دست آورده و بررسی شوند.

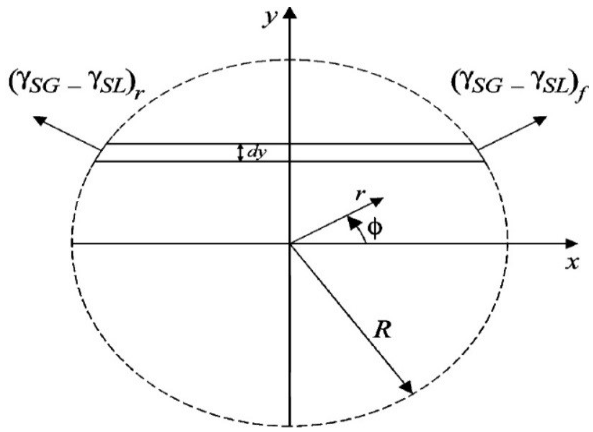
(۱) Reduced units

یک تاریخچه زمانی از حرکت میکروذره و مرکز قطره در شکل ۲ نشان داده شده است. برای انجام مقایسه، در همان شکل ۲، مسیر حرکت مرکز قطره در حالی که دارای میکروذره نیست، نیز رسم شده است. همان‌گونه که در شکل ۲ نشان داده شده است، تحت شرایط ایجاد شده، میکروذره توسط قطره در جهت محور x حمل و منتقل می‌شود که این عمل با توجه به گرادیان و تغییر در میزان ترشوندگی لایه‌های سطح جامد (سوبسترا) صورت گرفته است. منحنی مسیر حرکت میکروذره از دو بخش شامل یک قسمت مقعر و سپس یک قسمت محدب تشکیل یافته شده است، که این بدان معناست که میکروذره در ابتدا شتاب مثبت را تجربه کرده و سرعت می‌گیرد و سپس شتاب منفی گرفته و از سرعتش کاسته می‌شود. باتوجه به کوچک بودن سطح مقطع در برهمکنش بین فاز مایع و جامد، نیروهای ویسکوز بین قطره و لایه‌های جامد، اتلاف کمی دارند و همین مسئله سبب آغاز شتاب‌گیری و افزایش سرعت شده است. موضوع دیگری که شتاب‌گیری را تسریع می‌کند، بالا بودن گرادیان ترشوندگی و رطوبت است که باعث تحریک و افزایش نیروی محرکه می‌شود. اما در ادامه پس از گذشتن از نقطه x= ۴۰ و t= ۴۸۰۰ سرعت میکروذره کاهش پیدا کرده و به صفر میل می‌کند که دلیل آن گرادیان رطوبت سطح تماس می‌باشد که سبب کاهش نیروی محرکه می‌شود. این کاهش نیروی محرکه و از طرف دیگر گسترش و پخش قطره، در کنار هم باعث افزایش نیروهای اتلاف‌کننده ویسکوز شده و در نتیجه کاهش سرعت رخ می‌دهد. تصویرهای لحظه‌ای از ریخت‌شناسی قطره و همچنین موقعیت نسبی قطره و میکروذره در چهار زمان گوناگون یعنی t= ۴۸۰۰ و t= ۳۲۰۰، t= ۱۴۰۰، t= ۸۰ ثانیه در شکل ۲ آورده شده است. همان‌گونه که به روشنی مشخص است، در آغاز و ابتدای فرایند، قطره، میکروذره را از خود عبور داده و زمانی که میکروذره از آن گذشته و عبور کرد آن را می‌کشد. این مسئله بدین دلیل است که نیروهای اصطکاک بین میکروذره و سطح صاف جامد، بسیار بیش‌تر از نیروهای اصطکاک بین میکروذره و قطره می‌باشد. قابل توجه هست که در فرایند انتقال، میکروذره نزدیک به انتها و قسمت دم شکل قطره می‌ماند. بنابراین اگر به مسیر حرکت میکروذره توجه کنید، همواره مقداری پایین‌تر از مسیر مرکز قطره است. به‌علاوه باتوجه به حضور و وجود میکروذره، یک مقاومت مضاعف بوجود آمده است، که این مقاومت باعث می‌شود قطره از سرعت حرکت پایین‌تری برخوردار باشند (نسبت به حالتی که میکروذره وجود ندارد). علاوه بر این به خاطر دلیلی مشابه، یعنی وجود میکروذره، مسافت نهایی طی شده توسط قطره نیز کاهش می‌یابد.



شکل ۲ - مقایسه تاریخچه زمانی حرکت مرکز میکروذره (خط و نقطه چین) و مرکز قطره (خط کامل و ممتد) و مسیر حرکت قطره تحت شرایط پیشین بدون حضور میکروذره (خط چین). ضمیمه سمت راست نیز نشان‌دهنده یک نمای بزرگ شده این مسیر حرکت از t= ۰ تا t= ۱۶۰ می‌باشد.

همان‌گونه که در بخش ضمیمه شده شکل ۲ مشاهده می‌شود (یک نمای بزرگ شده از t= ۰ تا t= ۱۶۰)، هنگامی‌که حرکت قطره آغاز می‌شود، یک پدیده جالب نیز رخ می‌دهد. مسیر نقطه خط چین، نشان‌دهنده حرکت قطره پیش از تماس با میکروذره می‌باشد. بنابراین این مسیر تقریبا در ابتدا منطبق بر مسیر حرکت قطره بدون میکروذره است که به صورت خط چین رسم شده است. هنگامی که مرکز قطره از نقطه x= −۳۵ می‌گذرد، نسبت به حالت بدون میکروذره سریع‌تر حرکت می‌کند که علت این مسئله، بالا بودن نیروهای جاذبه بین قطره و میکروذره می‌باشد. هر چند که در این حالت هنوز میکروذره به علت مقاومت موجود بین لایه‌ها و میکروذره، در حالت سکون قرار دارد. سرانجام هنگامی که مرکز قطره از مرکز میکروذره عبور می‌کند، سرعت قطره به شدت کاهش پیدا کرده و میکروذره به آرامی، شروع به حرکت می‌کند. نتیجه‌های ارایه شده در شکل ۲ دارای مطابقت خوبی با داده‌های گزارش شده در مراجع می‌باشد [۳۳]. برای بررسی بیش‌تر و انجام آنالیزهای کمی، سرعت قطره در موقعیت‌های گوناگون را بر اساس روشی که *لی* ارایه و توسعه داده و حالت شبه ساکن را در انتهای فرایند تداعی می‌کند، مورد بررسی قرار گرفت [۲۹]. در روش ارایه شده توسط *لی*، به قطره نیرو وارد می‌شود تا با یک سرعت ثابت و بدون تغییر شکل حرکت کند و به‌طور همزمان گرادیان رطوبت و ترشوندگی اعمال شده، قطره را هنگامی که در حال حرکت است، روی یک مقدار مشخص ثابت نگه می‌دارد. با استفاده از این روش، سرعت‌های ثابت قطره در مکان‌های ۵ ، ۱۵، ۵− و ۱۵− = x

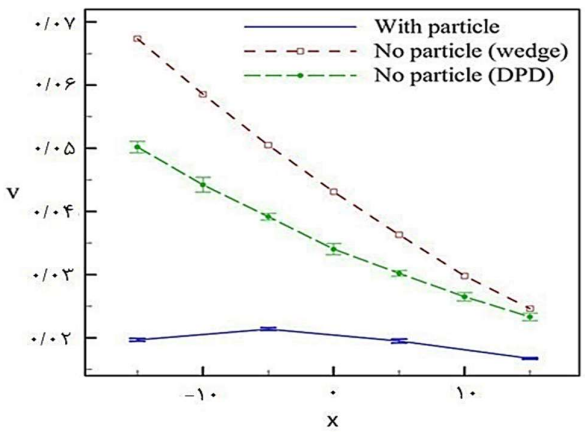


شکل ۳ – نشان‌دهنده تصویر ردپای قطره بر روی سطح جامد می‌باشد که به صورت کروی بوده و تصویر دو بعدی آن، به صورت دایروی می‌باشد. γ_{SG} و γ_{SL} به ترتیب تنش‌های سطحی جامد-گاز و جامد-مایع می‌باشند.

به‌دست آمده و نتیجه‌ها در شکل ۴ ارایه شده‌اند. همچنین مشاهده شد که سرعت قطره پس از آن که میکروذره را برداشته و حمل کرد، ابتدا مقداری افزایش و سپس کاهش می‌یابد که این موضوع آنالیزهای کیفی انجام گرفته در شکل ۲ را تایید می‌کند. علاوه بر این در شکل ۴، خط چین، سرعت قطره را در حضور میکروذره نشان می‌دهد. همان‌گونه که پیش‌تر نیز اشاره شد، سرعت قطره نسبت به حالتی که میکروذره حضور ندارد، کم‌تر است و این پدیده به خاطر وجود نیروهای اصطکاکی بین میکروذره و سطح جامد لایه‌ها می‌باشد. همچنین شکل ۴ نشان می‌دهد که سرعت قطره در حالتی که میکروذره حضور ندارد، به‌طور یکنواختی در ناحیه مورد بررسی، کاهش یافته است. اما زمانی که میکروذره وجود دارد، سرعت قطره به صورت منحنی‌وار تغییر می‌کند.

مقایسه نتیجه‌ها با مراجع

قابلیت استفاده و همچنین نتیجه‌های به‌دست آمده از روش MDPD در برخی از فرایندها، پیش‌تر مورد بررسی قرار گرفته است [۲۹]. اما در پژوهش حاضر هم نتیجه‌های به‌دست آمده با داده‌های موجود در مراجع مقایسه گردید. برای انجام مقایسه، در ابتدا، سرعت قطره در حالتی که میکروذره حضور ندارد در موقعیت‌های گوناگون با استفاده از روش و تئوری تقریب‌زنی Wedge به‌دست آمد [۴۷]. در روش Wedge، قطره به چند برش عمودی تقسیم می‌شود. حرکت یک برش عمودی با عرض دیفرانسیلی dy از قطره کروی که در



شکل ۴ - روند تغییرهای سرعت میکروقطره در نقاط گوناگون در طول مسیر حرکت که دارای تغییرهای ترشوندگی می‌باشد. خط ممتد و یکپارچه نشان‌دهنده نتیجه‌های به‌دست آمده از شبیه‌سازی عددی (پژوهش کنونی) برای میکروقطره دارای میکروذره آبگریز می‌باشد (مقدار کمینه و بیشینه خطا برابر است با: ۰/۵ و ۱٪). خط نقطه‌چین بلند با دایره‌های توپر نشان‌دهنده نتیجه‌های شبیه‌سازی عددی برای سرعت میکروقطره بدون میکروذره (مقدار کمینه و بیشینه خطا برابر است با: ۲ و ۵٪) می‌باشد. خط چین دارای مربع‌های توخالی نیز نشان‌دهنده نتیجه‌های تقریبی و تخمینی wedge برای میکروقطره بدون میکروذره می‌باشد.

موقعیت y قرار داشته و ارتفاعش از مرکز قطره تا خط تماس افزایش می‌یابد، توسط مدل Wedge بررسی شده است. شماتیکی از شکل ردپای قطره بر روی سطح جامد در شکل ۳ نمایش داده شده است. سرعت متوسط قطره که مقدار آن برابر با U است با استفاده از معادله (۱۰) به‌دست می‌آید [۴۷].

$$U = \frac{\sigma.R.\theta_e^2}{3.\mu.\ln(\varepsilon)}\frac{d\theta_e}{dx} \qquad (۱۰)$$

که در آن، ε نشان‌دهنده طول لغزش[۱]، μ ویسکوزیته میکروقطره، σ تنش سطحی، R شعاع میکروقطره و θ_e زاویه تماس تعادلی بین میکروقطره و سوبسترا می‌باشد. در شکل ۴ خط‌چین قرمز دارای مربع‌های توخالی، نشان می‌دهد که، نتیجه‌های تئوری wedge همواره بیش‌تر از نتیجه‌های شبیه‌سازی عددی پژوهش کنونی می‌باشند، اما با افزایش x یا کاهش θ_e، این اختلاف کاهش پیدا می‌کند. تفاوت بین نتیجه‌های کنونی و تئوری تقریب زنی wedge به سه دلیل منطقی می‌باشد؛ اول آن که روش تقریب زنی wedge بر اساس یک راه حل عددی کامل بنا نشده است و طبق نظر *سابرامانیان* و همچنین *احمدلوی داراب* و *فنگ*، یک روش و راه حل درست باید بتواند مقاومت بالاتر که سبب کاهش سرعت می‌شود را

(۱) Slip length

پیش‌بینی کند [۵۸،۵۷]. دلیل دوم آن که در روش تقریب‌زنی wedge این چنین فرض شده است که شکل میکروقطره‌ها به صورت کروی می‌باشد و تصویر ردپای آن‌ها بر روی سوبسترا نیز دایروی شکل در نظر گرفته شده است، در حالی که در شبیه‌سازی، شکل میکروقطره تحت تاثیر عامل‌ها هیدرودینامیکی است و تصویر آن نیز در جهت محور y، پهن‌تر از شکل آن در راستای محور x می‌باشد، چون گرادیان ترشوندگی در راستای محور x ها کم است. دلیل سوم هم این که، تئوری wedge بر این اساس ایجاد و گسترش یافته است که زاویه تماس را کوچک در نظر گرفته و از تقریب‌های کوچک استفاده می‌کند. بنابراین در زاویه‌های تماس کوچک‌تر، نتیجه‌های تقریب wedge به نتیجه‌های شبیه‌سازی نزدیک‌تر هستند. نکته دیگر وجود مقداری خطا در نتیجه‌های گزارش شده با استفاده از روش DPD می‌باشد که در نظر گرفتن نیروهای تصادفی براونی باعث بروز این مقدار خطا می‌شود.

ساختار جریان

برای بررسی بیش‌تر، برهمکنش بین میکروذره و میکروقطره چسبان و ساختار جریان سیال موجود در داخل میکروقطره‌ای که دارای میکروذره است مورد مطالعه قرار گرفت. به‌همین منظور روش تحلیل شبه ساکن مورد استفاده قرار گرفت، تا در مکان‌های مشخص سرعت‌های محلی که از نظر استاتیکی ثابت هستند، به‌دست آید [۲۹]. در این روش محاسبه‌ها داخل سلول‌های مکعبی شکل تقسیم شده و سرعت‌های موضعی سیال در هر سلول از روش میانگین‌گیری از داده‌های نمونه به‌دست می آید. این امر با در نظر گرفتن تعداد مطلوب و کافی از نمونه‌ها انجام می‌گیرد تا نوسانات و خطاهای آماری حذف شوند یا به حداقل برسند. این روش برای پیش‌بینی ساختار جریان در داخل میکروقطره چسبان در سه مرحله گوناگون مورد استفاده قرار گرفته است:

الف) هنگامی که میکروقطره میکروذره را در بر گرفته یا احاطه می‌کند.

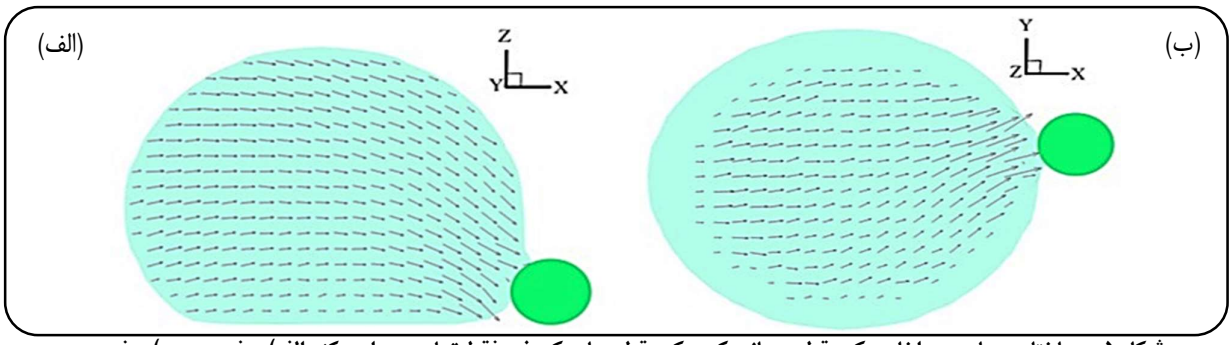
ب) هنگامی که میکروذره منتقل یا حمل می‌شود.

ج)هنگامی که میکروذره رها می‌شود.

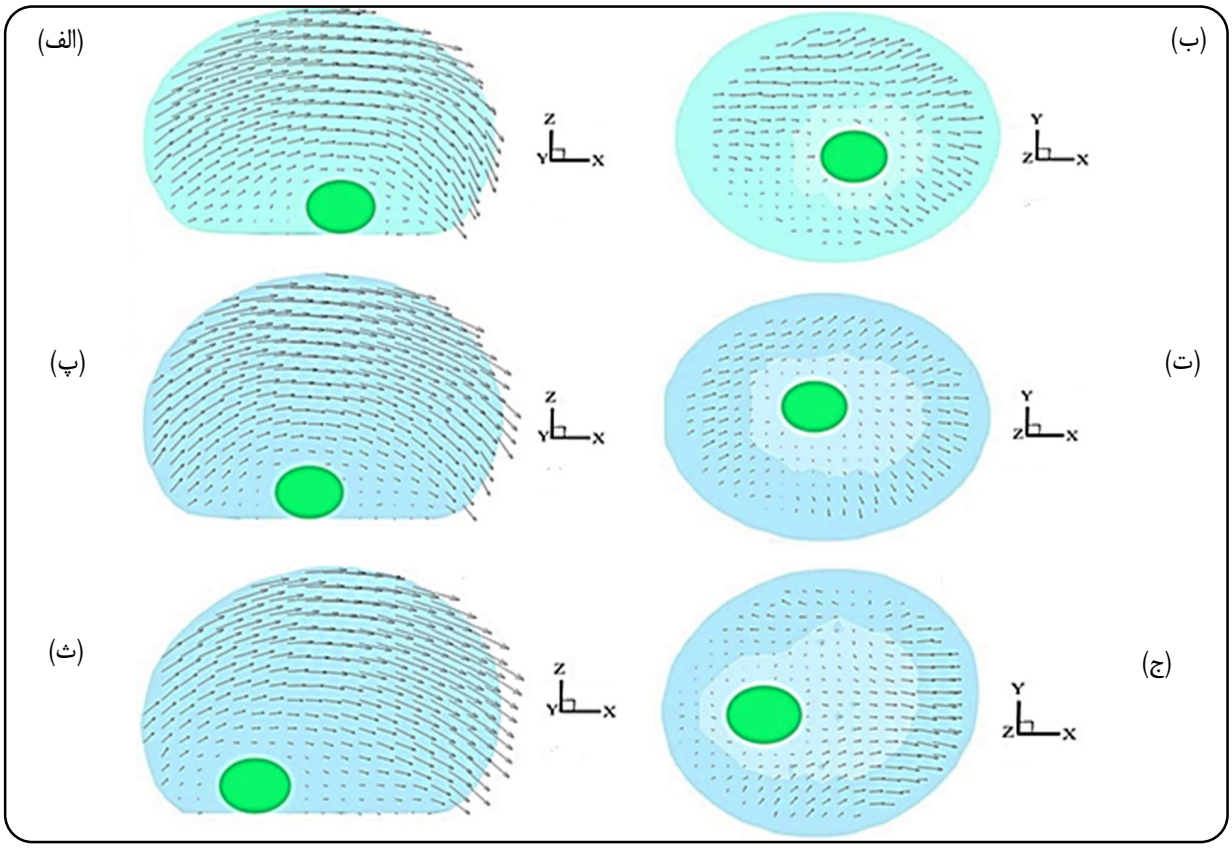
الف) هنگامی که میکروقطره میکروذره را در بر گرفته یا احاطه می‌کند

ساختار جریان در داخل میکروقطره هنگامی که قطره با میکروذره تماس پیدا کرده در دو موقعیت گوناگون یعنی z= −۹ و y=۰ در شکل ۵ نمایش داده شده است. همان‌گونه که *لی* در مورد یک تک قطره چسبان پیش‌بینی کرده بود، در حالت کلی ساختار جریان در تمامی قسمت‌های میکروقطره مشابه است. در ناحیه‌ای که تماس بین میکروقطره و میکروذره برقرار شده است، فاز مایع سریع‌تر به سمت جلو حرکت می‌کند و این به خاطر جذب دوطرفه و متقابل بین آن‌هاست که در شکل ۵–ب نشان داده شده است. همچنین حرکت سریع‌تر میکروقطره پس از نقطه x= −۳۵ را که در شکل ۲ آمده است توجیه می‌کند. لازم به ذکر است که میکروقطره نه تنها در جهت محور x به‌دلیل گرادیان رطوبت و ترشوندگی حرکت می‌کند، بلکه مقدار کمی انحراف به سمت محور y از خود نشان می‌دهد که به علت عامل‌ها و اثرهای رندوم مانند به کارگیری فرمولاسیون MDPD بدون داشتن یک نیرو محرکه مناسب و کارامد است. بنابراین میکروقطره و میکروذره در راستای محور تقارن خود و محور y یکدیگر را قطع نکرده و ارتباط پیدا نمی‌کنند. هنگامی‌که میکروذره به‌طور کامل در داخل میکروقطره غوطه‌ور شد، برای یک بازه زمانی کوتاه همچنان در همان موقعیت ابتدایی خود باقی می‌ماند که در شکل ۲ مسیر منحنی‌وار آن ترسیم شده است.

ساختار جریان در داخل قطره برای سه لحظه گوناگون پیش از آن که میکروذره حرکت کند، به‌ترتیب در شکل ۶ آمده و این حالت را هم در امتداد y هم در امتداد z میکروذره نشان می‌دهد. با توجه به بالا بودن مقدار نیروی اتلاف‌کننده ویسکوزیته، سرعت مایع در اطراف میکروذره تا حدودی کم‌تر از مقدار سرعت آن در قسمت بالایی میکروقطره می‌باشد. این کاهش و تفاوت در مقدار سرعت به‌دلیل وجود میکروذره نیست. تاثیر نیروهای اتلاف‌کننده ویسکوزیته در شکل‌های ۶–ب، ۶–ت و ۶–ج به روشنی مشاهده می‌شود. اگر شکل‌های ۶–ب، ۶–ت را در نظر بگیریم، مشاهده می‌شود که میکروقطره مقداری در جهت y منحرف شده است که به علت اثرهای رندوم فرمولاسیون MDPD است. باتوجه به این که هیچ نیروی محرکه چشمگیری در جهت y توسط گرادیان رطوبت و ترشوندگی وجود ندارد، بنابراین مقدار این انحراف کم است. از آن جایی که حرکت میکروقطره در جهت محور x سریع‌تر از میکروذره است، قطره تلاش می‌کند تا میکروذره را پشت سر بگذارد. بنابراین میکروذره عقب مانده و همان‌گونه که نشان داده شده است، به قسمت انتهایی و دم شکل قطره می‌رسد. در این لحظه حرکت فاز مایع در قسمت عقبی میکروذره آهسته‌تر از میزان حرکت آن در جلوی میکروذره در جهت محور x هاست. به‌دلیل نیروهای چسبندگی و نیروهای سطحی قطره، قسمت دم شکل قطره، بخش تحت تنش خود را به پیش می‌کشد و این موضوع سبب وجود بردارهای سرعت به سمت قسمت دم شکل قطره می‌شود که



شکل ۵ - ساختار جریان در داخل میکرو قطره زمانی که میکرو قطره با میکروذره فقط تماس پیدا می‌کند الف) صفحه y، ب) صفحه x.

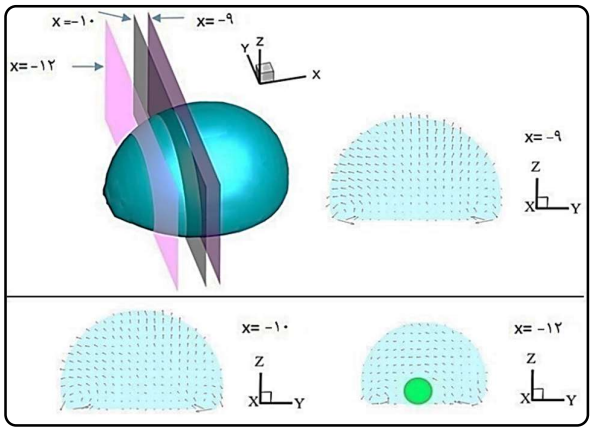


شکل ۶ - ساختار جریان داخل میکروقطره الف، پ، ث) صفحه‌های y و ب، ت، ج) صفحه‌های z در سه لحظه متوالی از زمانی که میکروقطره میکروذره را احاطه کرده و سپس میکروذره را از موقعیت اولیه آن، جابه جا می‌کند.

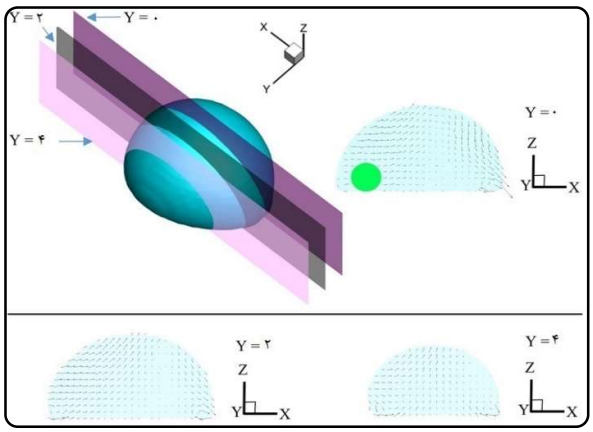
در شکل ۶–ج رسم شده است. به‌دلیل وجود این برهمکنش‌ها و حضور میکروذره‌ها، قطره به صورت بیضی شکل در می‌آید.

ب) میکروقطره، میکروذره را حمل می‌کند

زمانی که میکروذره توسط میکروقطره کشیده یا بلند می‌شود، این میکروذره توسط میکروقطره به قسمت انتهایی آبدوست سوبسترای جامد حمل می‌شود. بردارهای سرعت درون میکروقطره در سه صفحه x، y و z زمانی که میکروذره در میانه راه به یک موقعیت مشخص مانند $x=-۲۰$ جابه جا می‌شود، در شکل‌های ۷، ۸ و ۹ نمایش داده شده‌اند. همان‌گونه که نشان داده شده است، شکل قطره مانند یک نیم تخم مرغ است. این شکل با شکل قطره که حاوی میکروذره نیست و به شکل نیم دایره می‌باشد،



شکل ۷ – بردارهای سرعت جریان سیال در داخل قطره در مقدارهای گوناگون x (روی صفحه‌ها ۹- =x، ۱۰- =x، ۱۲- =x) زمانی که میکروذره، توسط قطره، جابه جا می‌شود. موقعیت میکروذره با یک دایره در موقعیت ۱۲- =x نشان داده می‌شود.



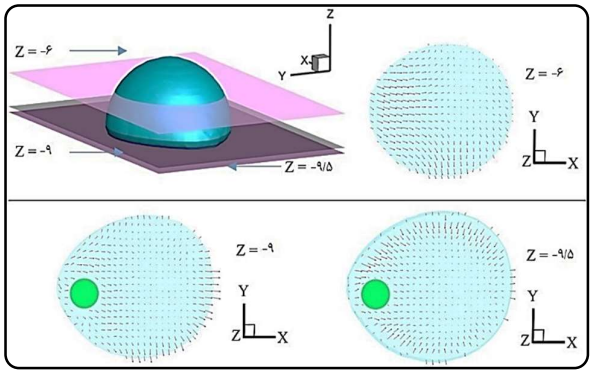
شکل ۸ – بردارهای سرعت جریان سیال در داخل قطره در مقدارهای گوناگون y (روی صفحه‌های ۰ =y، ۲=y، ۴ =y) زمانی که میکروذره، توسط قطره، جابه جا می‌شود. موقعیت میکروذره با یک دایره در موقعیت ۰ =y نشان داده می‌شود.

متفاوت است و دلیل آن نیز این واقعیت است که با وجود میکروذره و اثرهای آن، دنباله قطره در مقایسه با قسمت پیش‌رو آن نازک‌تر و باریک‌تر می‌باشد. در کل با وجود میکروذره در داخل قطره، در مجاورت خطوط تماس سه فازی، یک بازه جریان چرخشی سه فازی در حین فرایند حمل ذره ایجاد می‌شود. بازه جریان چرخشی توسط بردارهای سرعتی که به سمت داخل و خارج می‌باشند، در شکل ۹ و روی صفحه‌های ۹- =z و ۹/۵- =z نشان داده شده است. لازم به ذکر است که داخل کل قطره جریان چرخشی بزرگی وجود ندارد. به‌دلیل این که میکروذره در دنباله قطره می‌ماند، جریان در این نقطه قوی است. مایع پشت میکروذره، آن را به سمت جلو هل می‌دهد تا با هم حرکت کنند. این ساختار جریان با حالتی که میکروذره داخل قطره وجود ندارد، به کلی متفاوت است. همچنین در حالتی که داخل قطره میکروذره وجود دارد، سرعت آن نسبت به حالت بدون میکروذره، کم‌تر است. در مورد بعدی اینطور به نظر می‌رسد که قطره به جلو می‌خزد و ذره را با خود می‌کشد.

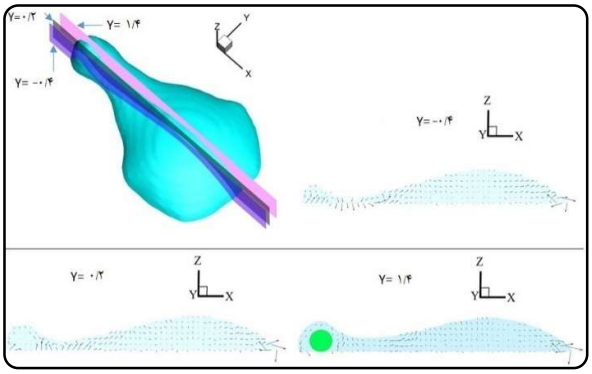
ج) قطره میکروذره را رها می‌کند

همان‌گونه که بحث شد، وجود یک میکروذره، حرکت قطره را به دلیل وجود اصطکاک میان میکروذره و سوبسترا و بروز تغییر اساسی در ساختار جریان در درون قطره، کم می‌کند. *لین و همکاران* دریافتند اگر اصطکاک میان میکروذره و سوبسترا بیش‌تر شود، منجر به افتادن میکروذره از داخل قطره می‌شود [۳۳]. در ادامه تحلیلی برای روشن کردن فیزیک مسئله و معیارهای وقوع رهایش قطره، ارایه می‌شود. در تحقیق کنونی محاسبه‌ها برای قطره با شعاع ۵ و میکروذره با شعاع ۱ که دارای ضریب‌ها اصطکاک ۰/۲ ، ۰/۴، ۰/۸ و ۱/۶ با سطح جامد است انجام شده‌اند. پارامترهای دیگر مورد استفاده از جدول‌های ۱ و ۲ به‌دست می‌آیند. نتیجه‌ها برای تاریخچه زمانی و همچنین موقعیت ذره با استفاده از ضریب‌های اصطکاک ایستایی گوناگون در شکل ۱۰ نشان داده شده است. در مواردی با ضریب اصطکاک ۰/۲، ۰/۴ و ۰/۸، میکروذره به سمت آبگریز جامد سوبسترا (۴۰ =x) که دارای گرادیان رطوبت‌پذیری و ترشوندگی بالاتری است، حمل می‌شود. اما برای ضریب اصطکاک ایستایی زمان زیادی برای حمل میکروذره لازم است. ولی اگر ضریب اصطکاک تا ۱/۶ افزایش یابد، دیگر ذره به سمت میانی آبدوست نمی‌تواند حمل شود. در میانه راه انتقال (۲۰-=x) میکروذره از قطره جدا شده و با مقدار کمی مایع در آن قسمت می‌ماند. این رهایش میکروذره در موقعیتی اتفاق می‌افتد که شیب مشاهده شده در خط مسیر آن بیشینه باشد، که به عنوان سرعت بحرانی تعریف می‌شود. اینطور به نظر می‌رسد که رهایش میکروذره یا شکست قطره، به سرعت بحرانی قطره ارتباط دارد. قطره فقط می‌تواند میکروذره را با سرعتی کم‌تر از این مقدار سرعت بحرانی حمل کند.

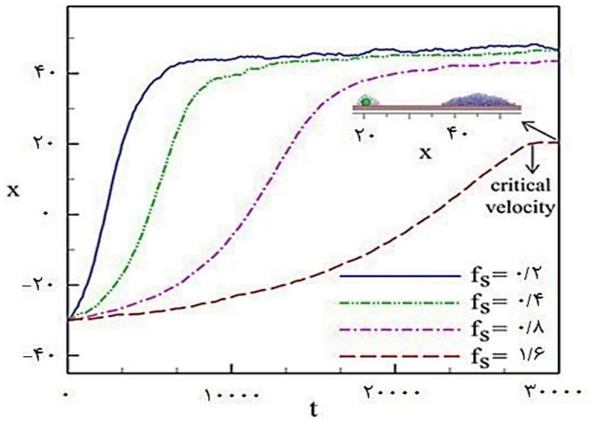
برای درک بهتر، ساختار جریان در داخل قطره درست پیش از رخ دادن رهایش با جزئیات بیش‌تر آنالیز شده است. بردارهای سرعت درصفحه‌های y و z به ترتیب در شکل‌های ۱۱ و ۱۲ نمایش داده شده‌اند. نتیجه مستقیم رقابت میان نیروهای اصطکاک موجود میان میکروذره و سوبسترا، نیروهای اتلاف‌کننده ویسکوز میان سطح میکروذره جامد و قطره، نیروهای محرکه تولید شده توسط گرادیان



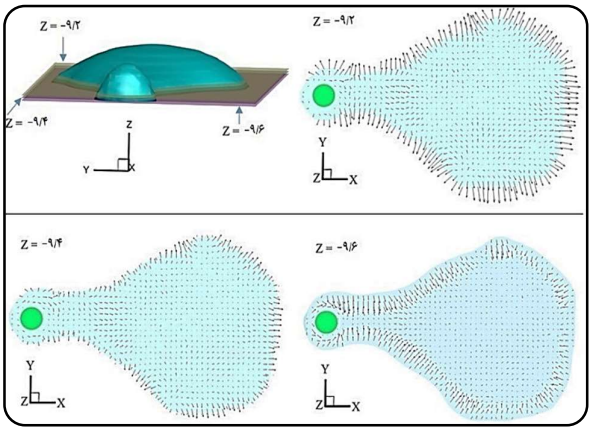
شکل ۹ – بردارهای سرعت جریان سیال در داخل قطره در مقدارهای گوناگون z (روی صفحه‌های z= -۶، z= -۹، z= -۹/۵) زمانی که میکروذره، توسط قطره، جابه جا می‌شود. موقعیت میکروذره با یک دایره در موقعیت (z= -۹/۵ ،z= -۹) نشان داده می‌شود.



شکل ۱۱ – بردارهای سرعت جریان سیال در داخل قطره در مقدارهای گوناگون y (روی صفحه‌های y= -۰/ ۴، y=۰/۲، y= ۱/۴) زمانی که میکروذره، توسط قطره رها می‌شود. موقعیت میکروذره با یک دایره در موقعیت (y=۱/۴) نمایش داده می‌شود.



شکل ۱۰ – تاریخچه حرکت میکروذره در جهت محور x ها با استفاده از ضریب‌های اصطکاکی گوناگون. ضمیمه نشان‌دهنده موقعیت میکروذره و قطره در زمان t= ۳۰۰۰۰ و ضریب اصطکاکی fs= ۱/۶ می‌باشد.



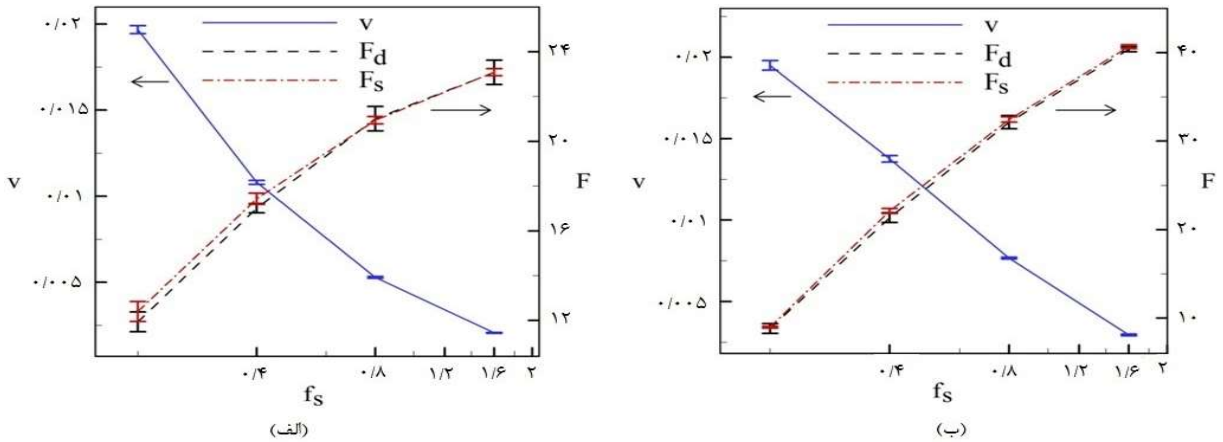
شکل ۱۲ – سرعت جریان سیال در داخل قطره در مقدارهای گوناگون z (روی صفحه‌های z= -۹/۲، z= -۹/۴، z= -۹/۶) زمانی که میکروذره، توسط قطره رها می‌شود. موقعیت میکروذره با یک دایره نشان داده می‌شود.

ترشوندگی روی سوبسترا، جداشدن دنباله انتهایی قطره می‌باشند که در شکل‌های ۱۱ و ۱۲ نشان داده شده است. میکروذره تلاش می‌کند که مقداری مایع نگه دارد و این پل مایع[۱]، قسمت دنباله را به قسمت پیش‌رونده متصل می‌کند. زمانی که هنوز نیروی محرکه در دسترس است و قطره به سمت جلو در جهت محور x روی سوبسترا جابه جا می‌شود، پل مایع شکسته شده و قسمتی از آن با سرعتی نسبتا بیش‌تر به سمت جلو جابه جا می‌شود. این موضوع به خاطر نیروهای فصل مشترک علی‌الخصوص نیروی چسبندگی قطره می‌باشد. قسمت باقی‌مانده پل مایع به سمت عقب و میکروذره حرکت کرده تا آن را در بر بگیرد. مشابه قسمت حمل و جابه جایی، همچنان یک حرکت چرخشی در مجاورت خط تماس سه بعدی[۲] و سه فازی وجود دارد. لازم به ذکر است که هر چقدر قطره بیش‌تر در روی سوبسترا پخش شود، مقداری از مایع خود را به دلیل شکافته شدن از دست می‌دهد، در نتیجه سرعت آن در مقایسه با فرایند حمل و جابه‌جایی، کم‌تر می‌شود. زمانی که میکروذره رها می‌شود قطره تغییر شکل داده و در بیش‌تر مواقع شکل نیم‌کره به خود می‌گیرد.

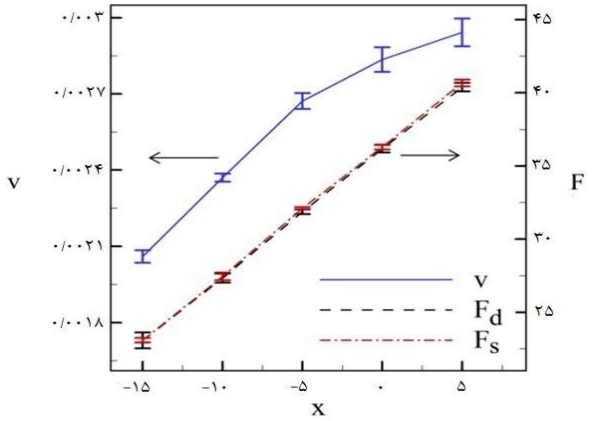
پس از بررسی ساختار جریان داخل قطره، برای فهم بهتر پدید آمدن رهایش میکروذره، یک تحلیل کمی برای نیروهای اعمال شده روی میکروذره انجام می‌شود. بدین منظور نیروی محرکه (F_d) توسط قطره و نیروی اصطکاک سوبسترا (F_s) بر روی میکروذره در موقعیت‌های

(۱) Liquid meniscus

(۲) 3D contact line



شکل ۱۳ – نشان‌دهنده نیروی محرکه قطره (F_d) بر میکروذره، نیروی اصطکاکی (F_s) از لایه یا سوبسترا بر میکروذره، و همچنین سرعت میکروذره (v) با استفاده از ضریب‌های اصطکاکی گوناگون در الف) x=-۵، ب) x= ۱۵



شکل ۱۴ – نشان‌دهنده نیروی محرکه قطره (F_d) بر میکروذره، نیروی اصطکاکی (F_s) از لایه یا سوبسترا بر میکروذره، و همچنین سرعت میکروذره (v) با استفاده از ضریب اصطکاکی ۱/۶ در موقعیت‌های گوناگون x= -۱۵ تا x= ۵

گوناگون مسیر برای ضریب‌های اصطکاکی گوناگون (f_s) محاسبه می‌شود. همچنین یک روش شبه ایستا برای نمونه‌گیری و میانگین‌گیری نیروهای مربوطه و سرعت ذره به کار گرفته شد. نتیجه‌ها برای نیروها و سرعت‌ها در مکان‌های x=-۵ و x=۵ با استفاده از ضریب‌های گوناگون اصطکاک ایستایی در شکل ۱۳ نشان داده شده است. F_d و F_s همواره به هم نزدیک هستند. زمانی که f_s افزایش یابد، نیروی اصطکاک نیز افزایش یافته که در نتیجه آن نیروی محرکه بیش‌تری برای تداوم حرکت مورد نیاز خواهد بود. در f_s های بالا، سرعت قطره و میکروذره به‌طور طبیعی به خاطر اصطکاک زیاد کاهش می‌یابد.

همچنین سرعت میکروذره و نیروها در موقعیت‌های گوناگون به ازای f_s= ۱/۶ در شکل ۱۴ نمایش داده شده‌اند. نقاط از x =-۱۵ تا x = ۵ نمونه‌گیری شده‌اند. پیش از وقوع رهایش همان‌گونه که شکل ۱۴ نشان می‌دهد، F_d و F_s با افزایش سرعت، افزایش می‌یابند. همچنین یک رابطه مثبتی میان سرعت و نیروهای حول مسیر جابه‌جایی میکروذره وجود دارد. همان‌گونه که قبلا هم ذکر شد، نیروی محرکه برای جابه جایی قطره چسبان توسط گرادیان ترشوندگی روی سوبسترا که همیشه به اندازه کافی برای جلو بردن قطره قوی است، تامین می‌شود. اگرچه که نیروی محرکه بر روی میکروذره به‌دلیل برهمکنش میان میکروذره و قطره است، ولی توسط نیروهای چسبندگی محدود می‌شوند. بنابراین زمانی که نیروی محرکه مورد نیاز به افزایش خود ادامه می‌دهد و در آخر فراتر از مقدار بیشینه می‌شود، میکروذره نمی‌تواند قدم به قدم پیش برود، در نتیجه به همراه مقداری مایع رها می‌شود.

برای اثبات این فرضیه، محاسبه‌های بیش‌تری با استفاده از شش قطره و با شعاع‌های ۵، ۶، ۷، ۸، ۹، ۱۰ و f_s= ۱/۶ انجام شد و نتیجه‌ها برای محل‌های رهایش برای قطره‌ها با اندازه‌های گوناگون در جدول ۳ آورده شده است. زمانی که اندازه قطره افزایش می‌یابد، رهایش ذره در مکان‌های نزدیک نواحی آبگریز (نزدیک به نقطه شروع حرکت قطره روی سوبسترا) اتفاق می‌افتد و برای رهایش میکروذره، در مسافت کم‌تری به سرعت بحرانی می‌رسد. لازم به ذکر است که روش‌های آماری نیمه ساکن نمی‌توانند برای اندازه‌گیری سرعت بحرانی و بیش‌ترین نیروی محرکه قطره به طور دقیق کاربرد داشته باشند، زیرا با روش آماری MDPD نمی‌توان

جدول ۳ - موقعیت و سرعت بحرانی برای رهایش میکروذره از قطره‌ها دارای اندازه‌های گوناگون، تمامی اندازه‌ها در واحد DPD می‌باشند.

شعاع قطره‌ها	موقعیت (x)	سرعت بحرانی (10^{-13})
۵	۲۰/ ۴۲± ۰/۰۱	۴/ ۲۱± ۰/۰۲
۶	۷/ ۳۲± ۰/۰۱	۴/ ۲۷± ۰/۰۲
۷	-۰/ ۱۱± ۰/۰۱	۴/ ۳۵± ۰/۰۲
۸	-۹/ ۷۱± ۰/۰۱	۴/ ۴۶± ۰/۰۴
۹	-۱۷/ ۱۰± ۰/۰۱	۴/ ۷۰± ۰/۰۶
۱۰	-۲۴/ ۵۷± ۰/۰۱	۴/ ۹۶± ۰/۰۶

به‌طور دقیق مکان را پیش از لحظه رهایش مشخص کرد. به جای این روش می‌توان با استفاده از بررسی مسیر میکروذره و تقریب مناسب، سرعت بحرانی را تخمین زد. بدین منظور از تقریب مرتبه دوم و درون‌یابی مرتبه دوم سرعت بحرانی پیش از رهایش به‌دست آمد. پنج مرحله تکرار برای قطره‌ها با سایزهای گوناگون انجام گرفت که نتیجه‌ها در جدول ۳ آورده شده‌اند. در پایان مشاهده گردید که با دو برابر کردن شعاع که به معنای هشت برابر شدن حجم است، سرعت بحرانی ۱۸ درصد افزایش می‌یابد. بنابراین، این مقدار اختلاف در سرعت بحرانی که به‌دلیل افزایش سطح مشترک مایع بخار ایجاد شده، در برابر تغییر حجم بسیار ناچیز است. این موضوع بیانگر این واقعیت هست که سرعت بحرانی برای رهایش به‌وسیله نیروی چسبندگی که ارتباط چندانی با ریخت‌شناسی قطره ندارد محدود می‌شود.

نتیجه‌گیری

در این مطالعه عددی، فیزیک انتقال و رهایش یک میکروذره آبگریز توسط یک قطره با روش شبیه‌سازی MDPD مورد بررسی قرار گرفت. به محض این که میکروذره به قطره چسبید، به‌دلیل وجود نیروهای جاذبه طبیعی بین میکروذره و سیال که آن هم به‌دلیل مقاومت سوبسترا حفظ می‌شود، قطره شروع به حرکت کرده و این حرکت آرام آرام شتاب می‌گیرد. قطره میکروذره را احاطه می‌کند تا از آن عبور کند. سپس سرعت قطره به‌طرز چشم‌گیری کاهش پیدا می‌کند تا بتواند میکروذره را حمل کند. افزایش سرعت میکروذره و کاهش سرعت قطره باعث می‌شود تا در یک زمان خاص این دو سرعت با هم برابر شوند. سپس قطره میکروذره را جابه جا می‌کند. ساختار جریان داخل قطره در هنگام فرایند انتقال و جابه‌جایی به‌طرز چشم‌گیری با زمانی که میکروذره‌ای در داخل قطره وجود ندارد، متفاوت است. در این حالت، دیگر حرکات انتقالی و چرخشی داخل قطره رخ نمی‌دهد. در عوض قطره به صورت خزشی و آرام رو به جلو حرکت کرده و میکروذره نیز به خاطر برایند نیروهای اصطکاکی، اتلاف‌کننده ویسکوز و گرادیان ترشوندگی، در قسمت عقب می‌ماند. نکته مهم‌تر، تغییرهای غیر یکنواخت سرعت قطره در مجاورت میکروذره می‌باشد. اصطکاک بین میکروذره و سیال نه تنها می‌تواند مانع حرکت قطره شود، بلکه ممکن است باعث رهایش میکروذره از قطره نیز بشود. در صورتی که نیروهای اصطکاکی بسیار قوی باشند، میکروذره پیش از رسیدن به انتهای آبگریز ممکن است در میانه راه از قطره جدا شود. افزایش نیروی اصطکاکی باعث افزایش نیروی محرکه می‌شود که تنها توسط قطره این افزایش ممکن می‌باشد. اگر چه این نیروی محرکه توسط نیروی چسبندگی محدود می‌شود ولی چنان چه مقدار این نیرو بیش‌تر از بیش‌ترین نیرو شود، پدیده رهایش میکروذره از قطره اتفاق می‌افتد. سرعت بحرانی، دقیقا سرعت پیش از رخ دادن رهایش می‌باشد که با استفاده از روش ردیابی مثبت یا دنبال کردن خطوط سیال به‌دست می‌آید. با افزایش شعاع قطره از ۵ به ۱۰، سرعت بحرانی حدود ۱۸ درصد افزایش می‌یابد. بدین معنا که با افزایش دو برابری شعاع و هشت برابری حجم، سرعت بحرانی تنها ۱۸ درصد افزایش یافته که مقدار کمی است، در نهایت، نتیجه می‌گیریم که ریخت‌شناسی قطره و گرادیان ترشوندگی تاثیر زیادی بر سرعت بحرانی نداشته و تنها نیروهای چسبندگی بر روی سرعت بحرانی موثر می‌باشند.

امیدواریم پژوهش‌ها و مطالعه‌های انجام شده نه تنها به فهم بهتر و اساسی‌تر پدیده پیچیده جریان سیال داخل قطره دارای میکروذره‌ها آبگریز شود، بلکه نتیجه‌های به‌دست آمده باعث طراحی بهینه‌تر و بهتر تجهیزات و فرایندهای با تکنولوژی بالا از قبیل ریزسیال شناسی دیجیتال، انتقال عامل‌های دارویی، پلتفرم‌های سامانه آزمایشگاه روی تراشه، خودتمییزشوندگی و موارد مشابه در این زمینه نیز بشود.

قدردانی و تشکر

این مقاله مستخرج از طرح پژوهشی خاتمه یافته از محل اعتبارات پژوهشی دانشگاه تبریز می‌باشد. تاریخ تصویب طرح ۱۳۹۷/۱۲/۱۹ می‌باشد.

فهرست نمادها

مختصات ذره i ام	$\vec{r}_{ij}$
سرعت ذره i ام	$\vec{v}_i$
نیروی ذره i ام	$\vec{f}_i$

زاویه تماس تعادلی بین میکروقطره و سوبسترا	θ_e	ترم نیروی جاذبه مستقل از دانسیته	r_d
ترم مربوط نیروی جاذبه	B_{ij}	دامنه نیروی اتلافی	φ
ترم مربوط به نیروی دافعه	A_{ij}	دامنه نیروی رندوم	γ
ثابت بولتزمن	k_B	عدد گوسی با واریانس واحد و میانگین صفر	θ_{ij}
نقطه شروع انتهای آبگریز	x_0	فاصله ابتدایی بین مرکز قطره و میکروذره‌ها	d
زاویه تماس در نقطه شروع انتهای آبگریز	θ_0	نقطه پایانی انتهای آبدوست	x_f
طول لغزش	ε	زاویه تماس درنقطه پایانی انتهای آبدوست	θ_f
تنش سطحی	σ	ویسکوزیته قطره	μ
مولفه بقایی نیرو	$\vec{F}_{ij}^{\,R}$	شعاع قطره	R
مولفه تصادفی نیرو	$\vec{F}_{ij}^{\,C}$	مولفه اتلافی نیرو	$\vec{F}_{ij}^{\,D}$
تابع وزنی نیروی جاذبه	ω_c		
تابع وزنی نیروی دافعه	ω_d		

تاریخ دریافت: ۱۴۰۰/۰۲/۱۴ ؛ تاریخ پذیرش: ۱۴۰۰/۰۵/۰۱

مراجع

[1] Squires T.M., Quake S.R., Microfluidics: Fluid Physics at the Nanoliter Scale, *Reviews of modern physics,* **77(3)**: 977 (2005).

[2] Whitesides G.M., The Origins and the Future of Microfluidics, *Nature,* **442(7101):** 368-373 (2006).

[۳] آزادی‌تبار م.، برزگر ف.، غضنفری م.ح.، آنالیز پروفایل قطره نامتقارن روی سطوح افقی، شیب‌دار و دارای انحنا با استفاده از پردازش تصویر، *نشریه علمی علوم و فناوری رنگ*، **(۱)۱۳:** ۹ تا ۲۳ (۱۳۹۸).

[4] Sackmann E.K., Fulton A.L., Beebe D.J., The Present and Future Role of Microfluidics in Biomedical Research, *Nature,* **507(7491):** 181-189 (2014).

[5] Elvira K.S., i Solvas X.C., Wootton R.C., The Past, Present and Potential for Microfluidic Reactor Technology in Chemical Synthesis, *Nature chemistry,* **5(11):** 905-915 (2013).

[6] Neuži P., Giselbrecht S., Länge K., Huang T.J., Manz A., Revisiting Lab-on-a-Chip Technology for Drug Discovery, *Nature reviews Drug discovery,* **11(8):** 620-632 (2012).

[7] Kruis F.E., Fissan H., Peled A., Synthesis of Nanoparticles in the Gas Phase for Electronic, Optical and Magnetic Applications—a Review, *Journal of Aerosol Science,* **29(5):** 511-535 (1998).

[8] Kawaguchi H., Functional Polymer Microspheres, *Progress in Polymer Science,* **25(8):** 1171-1210 (2000).

[9] Sista R.S., Eckhardt A.E., Srinivasan V., Pollack M.G., Palanki S., Pamula V.K., Heterogeneous Immunoassays using Magnetic Beads on a Digital Microfluidic Platform, *Lab on a Chip,* **8(12):** 2188-2196 (2008).

[10] Shah G.J., Veale J.L., Korin Y., Reed E.F., Gritsch H.A., Specific Binding and Magnetic Concentration of CD8+ T-Lymphocytes on Electrowetting-on-Dielectric Platform, *Biomicrofluidics,* **4(4):** 044106 (2010).

[11] Ng A.H., Choi K., Luoma R.P., Robinson J.M., Wheeler A.R., Digital Microfluidic Magnetic Separation for Particle-Based Immunoassays, *Analytical chemistry,* **84(20):** 8805-8812 (2012).

[12] Witters D., Knez K., Ceyssens F., Puers R., Lammertyn J., Digital Microfluidics-Enabled Single-Molecule Detection by Printing and Sealing Single Magnetic Beads in Femtoliter Droplets, *Lab on a Chip,* **13(11):** 2047-2054 (2013).

[13] Vergauwe N., Vermeir S., Wacker J.B., Ceyssens F., Cornaglia M., Puers R., Gijs M.A., Lammertyn J., Witters D., A Highly Efficient Extraction Protocol for Magnetic Particles on a Digital Microfluidic Chip, *Sensors and Actuators B: Chemical,* **196:** 282-291 (2014).

[14] Gijs M.A., Magnetic Bead Handling on-Chip: New Opportunities for Analytical Applications, *Microfluidics and Nanofluidics,* **1(1):** 22-40 (2004).

[15] Gijs M.A., Lacharme F., Lehmann U., Microfluidic Applications of Magnetic Particles for Biological Analysis and Catalysis, *Chemical reviews,* **110(3):** 1518-1563 (2009).

[16] van Reenen A., de Jong A.M., den Toonder J.M., Prins M.W., Integrated Lab-on-Chip Biosensing Systems based on Magnetic Particle Actuation–a Comprehensive Review, *Lab on a Chip,* **14(12):** 1966-1986 (2014).

[17] Zhao Y., Cho S.K., Microparticle Sampling by Electrowetting-Actuated Droplet Sweeping, *Lab on a Chip,* **6(1):** 137-144 (2006).

[18] Tan M.K., Friend J.R., Yeo L.Y., Microparticle Collection and Concentration Via a Miniature Surface Acoustic Wave Device, *Lab on a Chip,* **7(5):** 618-625 (2007).

[19] Jönsson-Niedziółka M., Lapierre F., Coffinier Y., Parry S., Zoueshtiagh F., Foat T., Thomy V., Boukherroub R., EWOD Driven Cleaning of Bioparticles on Hydrophobic and Superhydrophobic Surfaces, *Lab on a Chip,* **11(3):** 490-496 (2011).

[20] Cho S.K., Zhao Y., Concentration and Binary Separation of Micro Particles for Droplet-Based Digital Microfluidics, *Lab on a Chip,* **7(4):** 490-498 (2007).

[21] Kinoshita H., Kaneda, S.; Fujii, T.; Oshima, M., Three-Dimensional Measurement and Visualization of Internal Flow of a Moving Droplet Using Confocal Micro-PIV. *Lab on a Chip,* **7(3):** 338-346 (2007).

[22] Lu, H.-W., Bottausci F., Fowler J.D., Bertozzi A.L., Meinhart C., A Study of EWOD-Driven Droplets by PIV Investigation, *Lab on a Chip,* **8(3):** 456-461 (2008).

[23] Ma S., Sherwood J.M., Huck W.T., Balabani S., On the Flow Topology Inside Droplets Moving in Rectangular Microchannels, *Lab on a Chip,* **14(18):** 3611-3620 (2014).

[24] Author A., Simulation Tools for Lab on a Chip Research: Advantages, Challenges, and Thoughts for the Future, *Lab on a Chip,* **8(9):** 1424-1431 (2008).

[25] Warren P., Vapor-Liquid Coexistence in Many-Body Dissipative Particle Dynamics, *Physical Review E,* **68(6):** 066702 (2003).

[26] Liu M., Meakin P., Huang, H., Dissipative Particle Dynamics with Attractive and Repulsive Particle-Particle Interactions, *Physics of Fluids,* **18(1):** 017101 (2006).

[27] Tiwari A., Abraham J., Dissipative-Particle-Dynamics Model for Two-Phase Flows, *Physical Review E,* **74(5):** 056701 (2006).

[28] Cupelli C., Henrich B., Glatzel T., Zengerle R., Moseler M., Santer M., Dynamic Capillary Wetting Studied with Dissipative Particle Dynamics, *New Journal of Physics,* **10(4):** 043009 (2008).

[29] Li Z., Hu G.-H., Wang Z.-L., Ma Y.-B., Zhou Z.-W., Three Dimensional Flow Structures in a Moving Droplet on Substrate: A Dissipative Particle Dynamics Study, *Physics of Fluids,* **25(7):** 072103 (2013).

[30] Wang Y., Chen S., Numerical Study on Droplet Sliding Across Micropillars, *Langmuir,* **31(16):** 4673-4677 (2015).

[31] Pal S., Lan C., Li Z., Hirleman E.D., Ma Y., Symmetry Boundary Condition in Dissipative Particle Dynamics, *Journal of Computational Physics,* **292:** 287-299 (2015).

[32] Ahmadlouydarab M., Lan C., Das A.K., Ma Y., Coalescence of Sessile Microdroplets Subject to a Wettability Gradient on a Solid Surface, *Physical Review E,* **94(3):** 033112 (2016).

[33] Lan C., Pal S., Li Z., Ma Y., Numerical Simulations of the Digital Microfluidic Manipulation of Single Microparticles, *Langmuir,* **31(35):** 9636-9645 (2015).

[34] Clark A.T., Lal M., Ruddock J.N., Warren P.B., Mesoscopic Simulation of Drops in Gravitational and Shear Fields, *Langmuir*, **16:** 6342 (2000).

[35] Jones J.L., Lal M., Ruddock J.N., Spenley N., Dynamics of a Drop at a Liquid/Solid Interface in Simple Shear Fields: A Mesoscopic Simulation Study, *Faraday Discuss*, **112:** 129 (1999).

[36] Louis A.A., Bolhuis P.G., Hansen J.P., Mean-Field Fluid Behavior of the Gaussian Core Model, *Physical Review E,* **62:** 7961 (2000).

[37] Rao Q., Xia Y., Li J., McConnell J., Sutherland J., Li Z., A Modified Many-Body Dissipative Particle Dynamics Model for Mesoscopic Fluid Simulation: Methodology, Calibration, and Application for Hydrocarbon and Water, *Molecular Simulation*, **47:** 363-375 (2021).

[38] Hemeda A.A., Pal S., Mishra A., Torabi M., Ahmadlouydarab M., Li Z., Palko J., Ma Y., Effect of Wetting and Dewetting Dynamics on Atomic Force Microscopy Measurements, *Langmuir*, **35:** 13301-13310 (2019).

[39] Ahmadlouydarab M., Hemeda A.A., Ma Y., Six Stages of Microdroplet Detachment from Microscale Fibers, *Langmuir*, **34:** 198-204 (2018).

[40] Pagonabarraga I., Frenkel D., Dissipative Particle Dynamics for Interacting Systems, *J. Chem. Phys.*, **115:** 5015 (2001).

[41] Nugent S., Posch H.A., Liquid Drops and Surface Tension with Smoothed Particle Applied Mechanics, *Phys. Rev. E*, **62:** 4968 (2000).

[42] Warren P.B., Vapor-Liquid Coexistence in Many-Body Dissipative Particle Dynamics, *Phys. Rev. E*, **68:** 066702 (2003).

[43] Trofimov Y., Nies E.L.F., Michels M.A.J., Constant-Pressure Simulations with Dissipative Particle Dynamics, *J. Chem. Phys.*, **123:** 144102 (2005).

[44] Groot R.D., Warren P.B., Dissipative Particle Dynamics: Bridging the Gap between Atomistic and Mesoscopic Simulation, *Journal of Chemical Physics,* **107(11):** 4423-4435 (1997).

[45] Espanol P., Warren P., Statistical Mechanics of Dissipative Particle Dynamics, *EPL (Europhysics Letters),* **30(4):** 191-196 (1995).

[46] Fan H., Striolo A., Nanoparticle Effects on the Water-Oil Interfacial Tension, *Physical Review E,* **6(5):** 051610 (2012).

[47] Luu X.-C., Yu J., Striolo A., Nanoparticles Adsorbed at the Water/Oil Interface: Coverage and Composition Effects on Structure and Diffusion, *Langmuir,* **29(24):** 7221-7228 (2013).

[48] Hardin R.H., Sloane N.J.A., Smith W.D., *Tables of Spherical Codes with Icosahedral Symmetry, Published Electronically at* http://NeilSloane.com/icosahedral.codes/.

[49] Johnson K., Kendall K., Roberts A., Surface Energy and the Contact of Elastic Solids, *Proceedings of the royal society of London. A. mathematical and physical sciences,* **324(1558):** 301-313 (1971).

[50] Kim J.M., Phillips R.J., Dissipative Particle Dynamics Simulation of Flow around Spheres and Cylinders at Finite Reynolds Numbers, *Chemical engineering science,* **59(20):** 4155-4168 (2004).

[51] Chen S., Phan-Thien N., Khoo B.C., Fan X.J., Flow around Spheres by Dissipative Particle Dynamics, *Physics of Fluids,* **18(10):** 103605 (2006).

[52] Yao X., Bai H., Ju J., Zhou D., Li J., Zhang H., Yang B., Jiang L., Running Droplet of Interfacial Chemical Reaction Flow, *Soft Matter,* **8(22):** 5988-5991 (2012).

[53] Bliznyuk O., Seddon J.R., Veligura V., Kooij E.S., Zandvliet H.J., Poelsema B., Directional Liquid Spreading Over Chemically Defined Radial Wettability Gradients, *ACS applied materials & interfaces,* **4(8):** 4141-4148 (2012).

[54] Xu X., Qian T., Droplet Motion in One-Component Fluids on Solid Substrates with Wettability Gradients, *Physical Review E,* **85(5):** 051601 (2012).

[55] Moumen N., Subramanian R.S., McLaughlin J.B., Experiments on the Motion of Drops on a Horizontal Solid Surface Due to a Wettability Gradient. *Langmuir,* **22(6):** 2682-2690 (2006).

[56] Visser D., Hoefsloot H., Iedema P., Comprehensive Boundary Method for Solid Walls in Dissipative Particle Dynamics, *Journal of Computational Physics,* **205(2):** 626-639 (2005).

[57] Subramanian R.S., Moumen N., McLaughlin J.B., Motion of a Drop on a Solid Surface Due to a Wettability Gradient, *Langmuir,* **21(25):** 11844-11849 (2005).

[58] Ahmadlouydarab M., Feng J.J., Motion and Coalescence of Sessile Drops Driven by Substrate Wetting Gradient and External Flow, *Journal of Fluid Mechanics,* **746:** 214-235 (2014).