

# AKIŞKANLAR: MİKRO-AKIŞKANLAR MODELLEMESİNİN KUTSAL KÂSESİ\*

## LIQUIDS: THE HOLY GRAIL OF MICROFLUIDIC MODELING

Mohammed Gad-El-Hak

Virginia Commonwealth Üniversitesi, Richmond, Virginia

### ÖZET

Geleneksel akışkanlar mekaniği, belirli benzerlik parametrelerinin - en önemle Reynolds sayısı - eşlendirilmesi durumunda, sıvı ve gaz akışları arasında bir fark olmadığını söyler. Bu durum, nano ve mikrocihazlardaki akışlar için geçerli olabilir de olmayabilir de. Alışılmış sürekli ortam, Navier-Stokes modellemesi; mikrocihazlarda hem su hem de hava akışı için olağan olarak uygulanabilir. Hava ve su gibi yaygın akışkanlar için bile, bu modellemenin yeterince küçük ölçeklerde başarısız olacağı açıktır, fakat maddenin iki formu için bu başarısızlığın başlangıcı farklıdır. Aynı zamanda, kaymaz, yarı-dengeli Navier-Stokes sistemi artık uygulanabilir olmadığına ise gazlar ve sıvılar için alternatif modelleme şemaları değişik olmaktadır. Seyreltik gazlar için istatistiksel yöntemler uygulanmaktadır ve Boltzmann denklemi bu tarz yaklaşımların temelidir. Sıvı akışları için, maddenin yoğun doğası, gazların kinetik teorisinin kullanımını olanaksız kılmaktadır ve sayısal olarak kuvvetli olan moleküler dinamik benzetimler kökleri ilk prensiplere dayanan tek alternatiftir. Bu makale, mikroölçeklerde sıvı ve gaz aktarımı arasındaki farkları vurgulayarak yukarıda bahsi geçen konuları ve çok küçük cihazlarda sıvı akışına has fiziksel kavramları tartışmaktadır.

**Anahtar Kelimeler:** Sıvı taşınımı; Gaz taşınımı; Mikroakışkanlar; Mikromakineler; Nanomakineler; MEMS; NEMS

Bir an için sol bacağımda canlı bir şeyin yavaşça göğsümün üzerine doğru, oradan da neredeyse çeneme kadar ilerlediğini hissettim; gözümü eğebildiğim kadar aşağıya doğru eğip, bu şeyin, altı inç uzunluğunda bile olmayan, elinde bir ok ve yay, sırtında da ok kalıpları bir insanı yaratık olduğunu fark ettim. .... O an telleri kırıp, sol kolumu yere bağlayan kancaları çekip çıkartacak kadar şanslıydım; onu yüzüme doğru götürürken benim eğilmemi sağlayan yöntemi keşfettim ve aynı zamanda bana inanılmaz acı veren sert bir çekme ile beni saçımın alt kısmından sol tarafa bağlayan telleri bir miktar gevşettim, böylece başımı iki inç kadar çevirebildim. .... Bu kişiler en mükemmel matematikçilerdir ve mekanikteki bu mükemmeliyete öğrenmenin ünlü bir savunucusu olan imparatorun destek ve cesaretlendirmesiyle ulaşmışlardır. Prensin ağaç ya da başka ağır yükleri taşımak için tekerlekler üzerine kurulu bir takım makineleri vardır.

(“Gulliver’in Gezileri”nden – Lilliput’a Yolculuk, Jonathan Swift, 1726.)

Nevada çölünde bir deney sırasında işler fena halde ters gitti. Bir nanoparçacık yığını – mikro-robotlar– laboratuvarından kaçtı. Bu yığın kendi kendini devam ettiren ve üreyen niteliktedir. Akıllıdır ve deneyimlerden öğrenir. Bütün pratik amaçlar için, o bir canlıdır.

Bir avcı olarak programlanmıştır. Her geçen saat büyük bir hızla değişip, daha ölümcül nitelik kazanmaktadır.

Onu ortadan kaldırmaya yönelik her hamle başarısızlıkla sonuçlanmıştır.

Ve bizler artık birer avız.

(Michael Crichton’ın romanı “Av”dan, HarperCollins Publishers, 2002.)

### ABSTRACT

Traditional fluid mechanics edifies the indifference between liquid and gas flows as long as certain similarity parameters-most prominently the Reynolds number - are matched. This may or may not be the case for flows in nano- or microdevices. The customary continuum, Navier-Stokes modeling is ordinarily applicable for both air and water flowing in macrodevices. Even for common fluids such as air or water, such modeling is bound to fail at sufficiently small scales, but the onset for such failure is different for the two forms of matter. Moreover, when the no-slip, quasi-equilibrium Navier-Stokes system is no longer applicable, the alternative modeling schemes are different for gases and liquids. For dilute gases, statistical methods are applied and the Boltzmann equation is the cornerstone of such approaches. For liquid flows, the dense nature of the matter precludes the use of the kinetic theory of gases, and numerically intensive molecular dynamics simulations are the only alternative rooted in first principles. The present article discusses the above issues, emphasizing the differences between liquid and gas transport at the microscale and the physical phenomena unique to liquid flows in minute devices.

**Keywords:** Liquid transport; Gas transport; Microfluidics; Microdevices; Nanodevices; MEMS; NEMS

In a little time I felt something alive moving on my left leg, which advancing gently forward over my breast, came almost up to my chin; when bending my eyes downward as much as I could, I perceived it to be a human creature not six inches high, with a bow and arrow in his hands, and a quiver at his back. .... I had the fortune to break the strings, and wrench out the pegs that fastened my left arm to the ground; for, by lifting it up to my face, I discovered the methods they had taken to bind me, and at the same time with a violent pull, which gave me excessive pain, I a little loosened the strings that tied down my hair on the left side, so that I was just able to turn my head about two inches. .... These people are most excellent mathematicians, and arrived to a great perfection in mechanics by the countenance and encouragement of the emperor, who is a renowned patron of learning. This prince has several machines fixed on wheels, for the carriage of trees and other great weights.

(From “Gulliver’s Travels - A Voyage to Lilliput,” by Jonathan Swift, 1726.)

In the Nevada desert, an experiment has gone horribly wrong. A cloud of nanoparticles – micro- robots– has escaped from the laboratory. This cloud is self-sustaining and self-reproducing. It is intelligent and learns from experience. For all practical purposes, it is alive.

It has been programmed as a predator. It is evolving swiftly, becoming more deadly with each passing hour.

Every attempt to destroy it has failed.

And we are the prey.

(From Michael Crichton’s novel “Prey,” HarperCollins Publishers, 2002.)

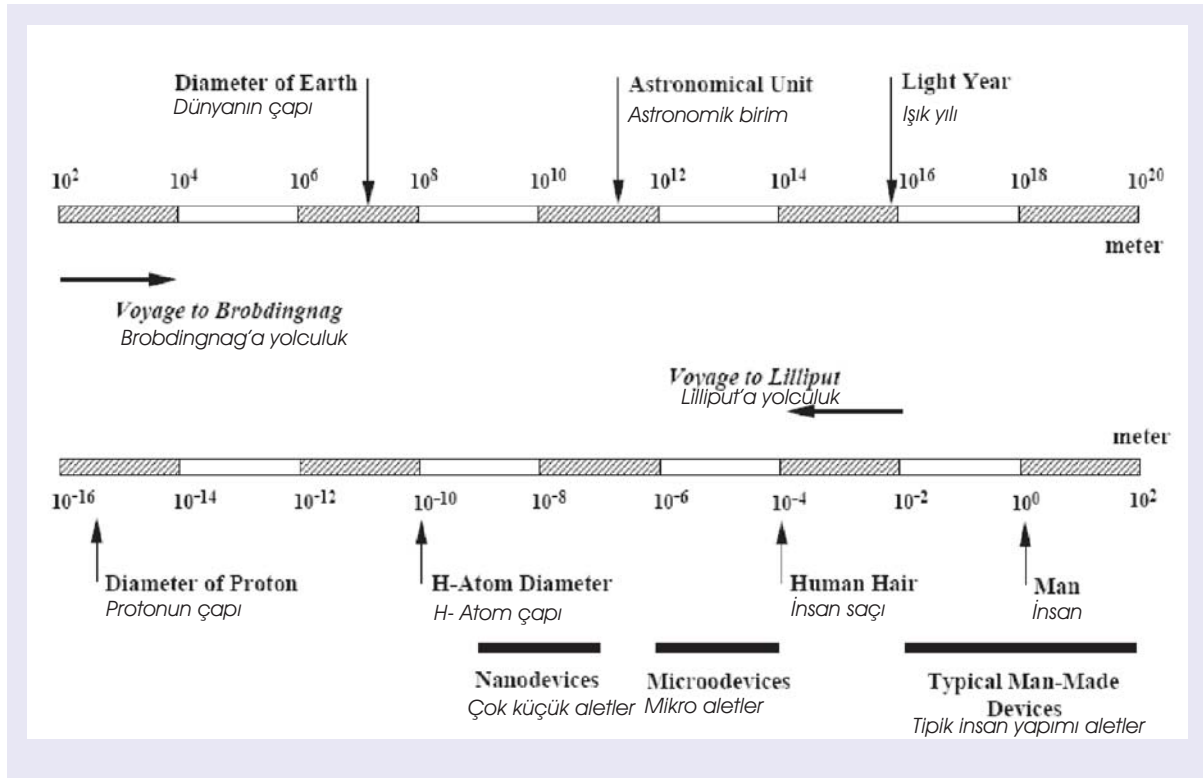
\* Tercüme : Emine MUTLU, M. Murat YALÇIN, Tuğba SARIÇAY

## 1. Giriş

**H**emen hemen 3 yüzyıl öncesinde yukarıda alıntı yapılan roman yazarları, şaşırtıcı, hatta bazen korkutucu bizden çok daha büyük ya da küçük canlıların var olabileceği olasılığını düşünmüşlerdi. 1959'da, fizikçi Richard Feynman kendilerini yapan kişilere oranla çok küçük makinaların üretimini hayal etmiştir. Alet yapımı, türümüzü dünya üzerindeki diğer bütün türlerden her zaman ayırmıştır. Aerodinamik olarak düzgün tahta zıpkınlar yaklaşık 400.000 yıl öncesinde eski insanlar tarafından yapılmıştı. İnsan, eşyaları Şekil 1'de gösterildiği gibi, kendi boyuna uygun, tipik olarak sınırları kendinden iki kat büyük ve iki kat küçük olan bir aralıkta inşa eder. Fakat, insanoğlu her zaman uzunluk ve zaman ölçeklerinin sınırlarını araştırmak, onlara ulaşmak ve kontrol etmek için büyük çaba sarfetmiştir. Gulliver'in Gezileri'nde, Lilliput'a ve Brobdingnag'a seyahatlerde Jonathan Swift, fiziksel büyüklüğün azaltılması ve artırılmasının sağladığı dikkate değer olasılıkları yansıtmıştır. Khufu Büyük Piramidi M.Ö. 2600 dolaylarında tamamlandığında orijinal olarak 147 m yüksekliğinde idi; bunun yanında 1931'de inşa edilen Empire State Binası, 1950'de bir televizyon anten direğinin eklenmesiyle 449 m yüksekliğe ulaştı. Spektrumun diğer bir ucunda ise, insan yapımı bir demir paranın çapı, 2 cm'den daha küçüktür. Saat yapımcıları onüçüncü yy'dan beri minyatürleştirme sanatıyla uğraşmışlardır. Onyedinci yy'da mikroskopun icadı mikropların, bitki ve hayvan hücrelerinin direkt olarak gözlemlenmesinin yolunu açmıştır. Yirminci yy'ın son yarısında, daha küçük şeyler insan tarafından yapılmıştı. 1947'de icat edilen, bugünün entegre devrelerindeki transistor, 45 nanometre uzunluğundaki bir kapağıya sahiptir ve araştırma laboratuvarlarında 10 nm'ye kadar yaklaşır (kaynak: International Technology Roadmap for Semiconductors <<http://public.itrs.net>>). Peki ya Richard Feynman [1]'in, 1959'da aktarılan efsanevi derste hayal ettiği mekanik parçaların - makinaların minyatürleştirilmesi ne durumdadır?

## 1. INTRODUCTION

**A**lmost three centuries apart, the imaginative novelists quoted above contemplated the astonishing, at times frightening possibilities of living beings much bigger or much smaller than us. In 1959, the physicist Richard Feynman envisioned the fabrication of machines minutely small as compared to their makers. Tool making has always differentiated our species from all others on Earth. Aerodynamically correct wooden spears were carved by archaic Homo sapiens close to 400,000 years ago. Man builds things consistent with his size, typically in the range of two orders of magnitude larger or smaller than himself, as indicated in Figure 1. But humans have always striven to explore, build and control the extremes of length and time scales. In the voyages to Lilliput and Brobdingnag of Gulliver's Travels, Jonathan Swift speculated on the remarkable possibilities which diminution or magnification of physical dimensions provides. The Great Pyramid of Khufu was originally 147 m high when completed around 2600 B.C., while the Empire State Building constructed in 1931 is presently—after the addition of a television antenna mast in 1950—449 m high. At the other end of the spectrum of man-made artifacts, a dime is slightly less than 2 cm in diameter. Watchmakers have practiced the art of miniaturization since the thirteenth century. The invention of the microscope in the seventeenth century opened the way for direct observation of microbes and plant and animal cells. Smaller things were man-made in the latter half of the twentieth century. The transistor—invented in 1947—in today's integrated circuits has a gate length of 45 nanometers, and approaches 10 nm in research laboratories (source: International Technology Roadmap for Semiconductors <<http://public.itrs.net>>). But what about the miniaturization of mechanical parts—machines envisioned by Richard Feynman [1] in a legendary lecture delivered in 1959?



**Şekil 1.** Metre cinsinden ölçüler. Küçük ölçek üst çizgide soldan sağa devam etmektedir. Referans [3]'den, izin alınarak çoğaltılmıştır.

**Figure 1.** The scale of things in meter. Lower scale continues in the upper bar from left to right. Reproduced with permission from reference [3].

Mikroelektromekanik sistemler (MEMS), 1 mm'den daha küçük fakat 1 mikrondan daha büyük karakteristik uzunluğa sahip olan, elektriksel ve mekanik bileşenleri birleştiren ve entegre devre toplu imalat teknolojileri kullanılarak üretilen cihazları ifade eder. MEMS, dünya çapında milyar dolarlık pazar potansiyeliyle, çok çeşitli endüstriyel ve tıbbi alanlarda artan sayıda uygulama alanı bulmaktadır. Otomobil hava yastıkları için ivmeölçerler, anahtarsız giriş sistemleri, yüksek-netlikteki optik ekranlar için yoğun mikroayna dizileri, tek bir atomu görüntülemek için tarayıcı elektron mikroskop uçları, elektronik devrelerin soğutulması için mikro-ısı-değiştiricileri, biyolojik hücreleri ayırtmak için reaktörler, kan analizi yapan cihazlar ve sonda uçları için basınç algılayıcıları, bugünkü kullanımı alanlarından sadece birkaçıdır. Mikrobolar kızıl ötesi detektörlerde, diyet lazerlerinde, minyatür gaz kromatograflarında ve yüksek-frekans akışkan kontrol sistemlerinde kullanılmaktadır. Mikropompalar, mürekkep püskürtmeli

Microelectromechanical systems (MEMS) refer to devices that have characteristic length of less than 1 mm but more than 1 micron, that combine electrical and mechanical components, and that are fabricated using integrated circuit batch-processing technologies. MEMS are finding increased applications in a variety of industrial and medical fields, with a potential worldwide market in the billions of dollars. Accelerometers for automobile airbags, keyless entry systems, dense arrays of micromirrors for high-definition optical displays, scanning electron microscope tips to image single atoms, micro-heat-exchangers for cooling of electronic circuits, reactors for separating biological cells, blood analyzers and pressure sensors for catheter tips are but a few of current usage. Microducts are used in infrared detectors, diode lasers, miniature gas chromatographs and high-frequency fluidic control

baskıda, çevre deneylerinde ve elektronik soğutmada kullanılır. Küçük pompaların potansiyel tıbbi uygulama alanları, çok küçük miktarlarda ilaçlamanın izlenmesi ve kontrollü aktarımı, kimyasalların nanolitre miktarlarında üretilmesi ve yapay pankreasların geliştirilmesini içerir. Uzun zamandır araştırılan yonga - laboratuvar, biyolojinin ve kimyanın otomasyonu açısından, hesaplamanın büyük-ölçekli otomasyonunu sağlayan entegre devrelerle aynı doğrultuda ümit vaat etmektedir [2].

MEMS cihazlarının hepsi sıvı akışını içermez, fakat bu araştırma içerenler üzerine olacaktır. Öncelikle kısaca gaz akışlarına değinilecektir fakat bu makalede asıl üzerinde durulacak konu sıvı akışlarıdır. Mikroborular, mikropompalar, mikrotürbinler, mikrovanalar, mikroyanma odaları, sentetik jetler ve yonga-laboratuvarlar, sıvı ve gaz akışını içeren küçük cihazlara örnektir. Boyut sınırlamasından dolayı bu makalede, sıvı akışları ve yüzey kavramları üzerinde önemle durarak, konuya genel olarak değinilecektir ve daha detaylı bilgi için okuyucu diğer çeşitli kaynaklara yönlendirilecektir [2-6].

## 2. Akışkanlar Mekaniği Konuları

Son on yılda mikroeletromekanik sistemlerin fabrikasyonunda ve kullanımındaki hızlı ilerleme, küçük cihazların imalatında ve işletiminde gerekli olan alışılmadık fiziki anlamamızdaki ilerleme ile örtüşmemektedir. Bu anlayışı sağlamak, geliştirilmiş MEMS cihazlarının tasarımı, en iyilenmesi, fabrikasyonu ve işletimi için oldukça önemlidir.

Küçük cihazlardaki akışkan akışı makroskopik makinelerdekinden farklıdır. MEMS-temelli boruların, lülelerin, valflerin, yatakların, türbomakinelerin, yanma odalarının, sentetik jetlerin vb işletimleri, daha büyük akış cihazları için rutin olarak ve başarılı bir şekilde uygulanan, sıvı-katı arayüzünde kaymama sınır şartının olduğu Navier-Stokes denklemleri gibi geleneksel akış modelleri ile her zaman tahmin edilemez. Birçok soru, mikrocihazlar için yapılan deney sonuçları, geleneksel akış modellemesi ile açıklanamadığı zaman ortaya

systems. Micropumps are used for ink jet printing, environmental testing and electronic cooling. Potential medical applications for small pumps include controlled delivery and monitoring of minute amount of medication, manufacturing of nanoliters of chemicals and development of artificial pancreas. The much sought-after lab-on-a-chip is promising to automate biology and chemistry to the same extent the integrated circuit has allowed large-scale automation of computation [2].

Not all MEMS devices involve fluid flows, but the present paper will focus on the ones that do. Gas flows will first be briefly discussed, but the emphasis of the paper will be on liquid flows. Microducts, micropumps, microturbines, microvalves, microcombustors, synthetic jets and lab-on-a-chip are examples of small devices involving the flow of liquids and gases. Because of size limitation, the present paper only touches on its broad subject matter, with particular emphasis on liquid flows and surface phenomena, and the reader is referred to several other sources for further details [2-6].

## 2. Fluid Mechanics Issues

The rapid progress in fabricating and utilizing microelectromechanical systems during the last decade has not been matched by corresponding advances in our understanding of the unconventional physics involved in the operation and manufacture of small devices. Providing such understanding is crucial to designing, optimizing, fabricating and operating improved MEMS devices.

Fluid flows in small devices differ from those in macroscopic machines. The operation of MEMS-based ducts, nozzles, valves, bearings, turbomachines, combustors, synthetic jets, etc., cannot always be predicted from conventional flow models such as the Navier-Stokes equations with no-slip boundary condition at a fluid-solid interface, as routinely and successfully applied for larger flow devices. Many questions have

çıkıştır. Uzun bir mikroboruda basınç basamağının sabit olmadığı gözlemlenmiş ve ölçülen debi geleneksel sürekli ortam akış modelinden hesaplanandan daha büyük çıkmıştır. Mikrokanallarda kayma akışı gözlenmiştir. Mikroyatakların yük kapasiteleri küçültülmüş ve mikromotorları hareket ettirmek için gerekli olan elektrik akımları olağanüstü yükselmiştir. Atmosfer koşullarında çalışan mikroışlenmiş ivmeölçerlerin dinamik tepkisinin aşırı sönümlü olduğu gözlenmiştir.

Bu heyecan verici yeni alanın gelişiminin ilk evrelerinde, amaç olabildiğince verimli MEMS cihazları yapmaktı. Mikroduyarlar birşeyler okuyordu ama birçok araştırmacı bunun tam olarak ne olduğunu biliyor görünmüyordu. Mikroyarıcılar hareket ediyorlardı, ama geleneksel modelleme bu hareketi tam olarak öngöremiyordu. MEMS teknolojisinde on yıllık eşi görülmemiş bir ilerlemenin ardından, belki de artık zaman ince hesaplama hazır olma, biraz yavaşlama ve ortaya çıkan birçok soruyu cevaplama zamanıdır. Bu uzun-dönem çalışmanın en büyük amacı, yararlı mikrocihazlar için rasyonel-tasarım kabiliyetini başarmak ve mikroduyarlar ile mikroyarıcılarının çalışmalarını mümkün olduğunca az deneysellikte tam olarak karakterize edebilmektir.

Mikrocihazlarda akışkan akışı ile ilgilenirken kişi, hangi modeli kullanması gerektiği, hangi sınır koşulunu uygulayacağı ve eldeki probleme çözümler üretmek için nasıl ilerlemesi gerektiğine dair sorularla yüz yüze gelir. Açık bir şekilde, küçük cihazlarda yüzey etkileri baskındır. Karakteristik uzunluğu 1 m olan bir makina için yüzey - hacim oranı  $1 \text{ m}^{-1}$  iken  $1 \mu\text{m}$  boyuta sahip olan bir MEMS cihazı için bu oran  $10^6 \text{ m}^{-1}$  olmaktadır. Küçük cihazın kütlelerine göre yüzey alanındaki milyon katlık artış, yüzey boyunca kütle, momentum ve enerji aktarımına büyük ölçüde etki eder. Mikrocihazların küçük uzunluk ölçeği sürekli ortam yaklaşımını tamamen geçersiz kılabilir. Kayma akışı, ısıl sürünme, seyrelme, viskoz yayılım, sıkıştırılabilirlik, moleküller arası kuvvetler ve diğer

been raised when the results of experiments with microdevices could not be explained via traditional flow modeling. The pressure gradient in a long microduct was observed to be non-constant and the measured flowrate was higher than that predicted from the conventional continuum flow model. Slip flow has been observed in microchannels. Load capacities of microbearings were diminished and electric currents needed to move micromotors were extraordinarily high. The dynamic response of micromachined accelerometers operating at atmospheric conditions was observed to be over-damped.

In the early stages of development of this exciting new field, the objective was to build MEMS devices as productively as possible. Microsensors were reading something, but not many researchers seemed to know exactly what. Microactuators were moving, but conventional modeling could not precisely predict their motion. After a decade of unprecedented progress in MEMS technology, perhaps the time is now ripe to take stock, slow down a bit and answer the many questions that arose. The ultimate aim of this long-term exercise is to achieve rational-design capability for useful microdevices and to be able to characterize definitively and with as little empiricism as possible the operations of microsensors and microactuators.

In dealing with fluid flow through microdevices, one is faced with the question of which model to use, which boundary condition to apply and how to proceed to obtain solutions to the problem at hand. Obviously surface effects dominate in small devices. The surface-to-volume ratio for a machine with a characteristic length of 1 m is  $1 \text{ m}^{-1}$ , while that for a MEMS device having a size of  $1 \mu\text{m}$  is  $10^6 \text{ m}^{-1}$ . The million-fold increase in surface area relative to the mass of the minute device substantially affects the transport of mass, momentum and energy through the surface. The small length scale of microdevices may invalidate the continuum approximation altogether.

alışılmadık etkiler; tercihen yalnızca kütle korunumu, Newton'un ikinci yasası ve enerjinin korunumu gibi ilk prensipler kullanılarak hesaba katılabilirler.

Bu makalede, sıvı akışlarını ve yüzey kavramlarını irdedeceğim. Konuyu bir perspektife oturtmak için, öncelikle kısaca mikrocihazlardaki gaz akışından bahsedilecektir. Sıvıların mikroakışkanlar mekaniği gazlarındakinden daha karmaşıktır. Sıvı molekülleri normal basınç ve sıcaklıklarda çok daha yakın konumdadırlar ve sıvı moleküller arasındaki çekici ya da kohesif potansiyel, katılar ile sıvılar arasında da olduğu gibi, akışın karakteristik uzunluğu yeterli oranda küçük olması durumunda etkin bir rol oynar. Geleneksel sürekli ortam modelinin doğru öngörüler veya songörüler vermekte başarısız olduğu durumlarda, pahalı moleküler dinamik benzetimler mikrocihazlardaki sıvı akışlarını mantıklı bir şekilde karakterize edecek mevcut tek birincil-prensip yaklaşımı olarak görünmektedir. Bu tip benzetimler, gerçekçi akış ölçüsü veya moleküllerin sayısı için henüz uygulanabilir değildirler. Sonuç olarak, sıvıların mikroakışkanlar mekaniği, gazlarınkine göre çok daha az gelişmiştir.

### 3. Akışkan Modellemesi

Bir akış alanını modellemenin temel olarak iki yolu vardır. Bunlar, ya -moleküllerin bir yığını olan- akışkan ya da maddenin sürekli ve sonsuz sayıda bölünebilen olarak kabul edildiği sürekli ortam yöntemleridir. Önceki modelleme kesin belirli metotlar ve olasılıklı olanlar olarak alt kısımlara ayrılırken, daha sonraki yaklaşımda hız, yoğunluk, basınç, vb uzayın ve zamanın her noktasında tanımlanmıştır ve kütle, enerji ve momentum korunumu, bir dizi doğrusal olmayan kısmi diferansiyel denkleme götürür (Euler, Navier-Stokes, Burnett, vs.). Akışkan modellemesinin sınıflandırılması Şekil 2'de şematik olarak gösterilmiştir.

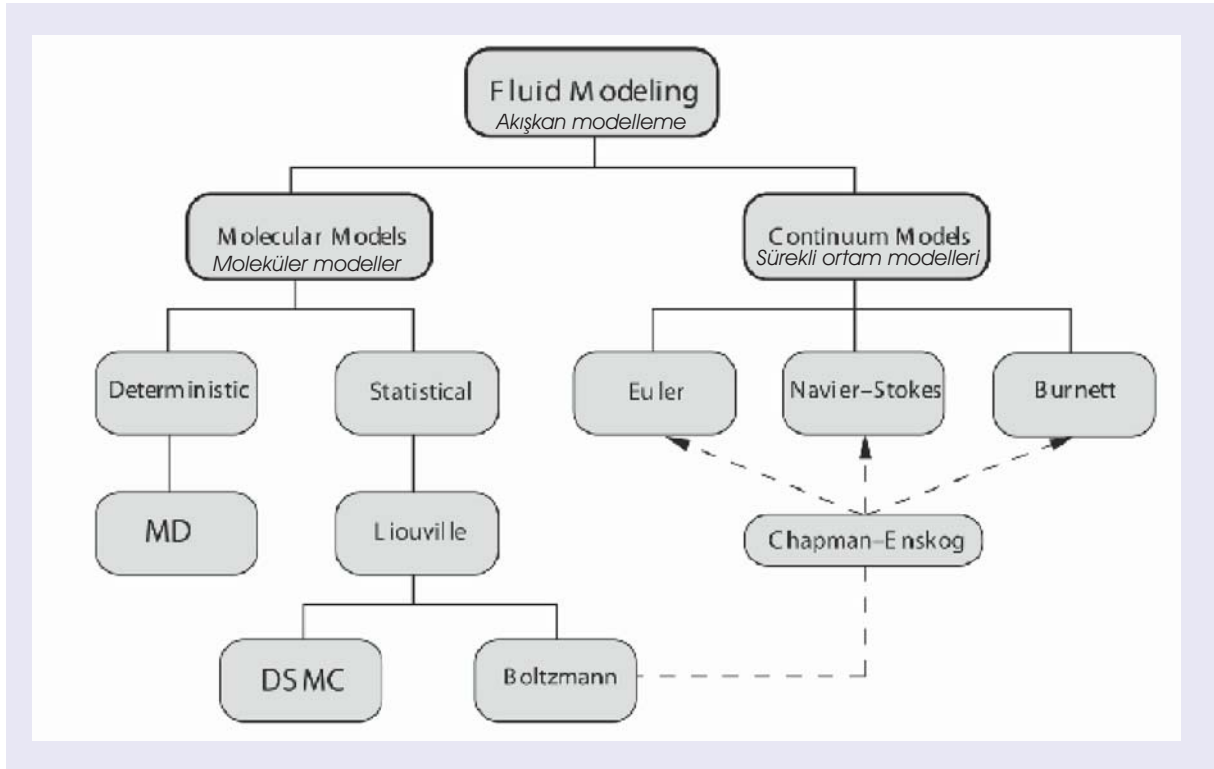
Geleneksel makrocihazlarda akışkan ve ısı akışları, alışılmış olarak kütle, momentum (Newton'un ikinci

Slip flow, thermal creep, rarefaction, viscous dissipation, compressibility, intermolecular forces and other unconventional effects may have to be taken into account, preferably using only first principles such as conservation of mass, Newton's second law, and conservation of energy.

In this paper, I shall discuss liquid flows and surface phenomena. To place the topic in perspective, gas flows in microdevices will first be discussed briefly. Microfluid mechanics of liquids is more complicated than that for gases. The liquid molecules are much more closely packed at normal pressures and temperatures, and the attractive or cohesive potential between the liquid molecules as well as between the liquid and solid ones plays a dominant role if the characteristic length of the flow is sufficiently small. In cases when the traditional continuum model fails to provide accurate predictions or postdictions, expensive molecular dynamics simulations seem to be the only first-principle approach available to rationally characterize liquid flows in microdevices. Such simulations are not yet feasible for realistic flow extent or number of molecules. As a consequence, the microfluid mechanics of liquids is much less developed than that for gases.

### 3. Fluid Modelinq

There are basically two ways of modeling a flowfield. Either as the fluid really is—a collection of molecules—or as a continuum where the matter is assumed continuous and indefinitely divisible. The former modeling is subdivided into deterministic methods and probabilistic ones, while in the latter approach the velocity, density, pressure, etc., are defined at every point in space and time, and conservation of mass, energy and momentum lead to a set of nonlinear partial differential equations (Euler, Navier-Stokes, Burnett, etc.). Fluid modeling classification is depicted schematically in Figure 2.



Şekil 2. Moleküler ve sürekli ortam akış modelleri. Referans [3]'den izin alınarak çoğaltılmıştır.

Figure 2. Molecular and continuum flow models. Reproduced with permission from reference [3].

yasası), ve enerjinin korunumu (termodinamiğin birinci yasası) denklemleri kullanılarak modellenir. Bunun yanı sıra, bütün süreçler termodinamiğin ikinci yasası ile sınırlandırılırlar. Bu prensipler tipik olarak, hız, sıcaklık, basınç gibi makroskopik büyüklükler sürekli ortam uzayına ve zamana bağlı olduğunda, kısmi diferansiyel alan denklemleri formunda ifade edilir. Geleneksel cihazlardaki akışkan - aktarım kavramını tarif etmek için ifade edilen ilk prensipler topluca Navier-Stokes denklemleri olarak adlandırılır, bunlar yeterli miktarda başlangıç ve sınır şartına maruz doğrusal olmayan kısmi diferansiyel denklemlerdir ve tipik olarak akışkan-katı arayüzünde kayma ve sıcaklık sıçraması içermeyen formdadır.

Navier-Stokes denklemlerinin geçerli olması için sağlanması gereken üç temel varsayım vardır:

- Kütle ve enerjinin ayrı ayrı korunduğunu, bir eylemsizlik çerçevesinde bütün kuvvetlerin toplamının, parçacıktaki momentum değişim oranına eşit

Fluid and heat flows in conventional macrodevices is traditionally modeled using the principles of conservation of mass, momentum (Newton's second law), and energy (first law of thermodynamics). Additionally, all processes are constrained by the second law of thermodynamics. Those principles are typically expressed in the form of partial differential field equations, where the macroscopic quantities of interest such as velocity, temperature, pressure, etc., depend on a continuum space and time. The first principles, as expressed to describe fluid-transport phenomena in conventional devices, are collectively called the Navier-Stokes equations, a system of nonlinear partial differential equations subject to a sufficient number of initial and boundary conditions, the latter is typically in the form of no velocity slip and no temperature jump at a fluid-solid interface.

There are three fundamental assumptions that must be satisfied in order for the Navier-Stokes equations to be valid:

olduğunu belirten mekaniğin Newtonyen çerçevesi geçerlidir.

- Uzay ve zamanın belirsiz bir şekilde bölünebilir sürekli ortam olduğunu kabul eden sürekli ortam yaklaşımı uygulanabilir.
- Gerilme ve gerinme oranı arasında ve ısı akışı ve sıcaklık basamağı arasında doğrusal ilişkiye izin veren termodinamik denge veya en azından sanki dengeli olduğu kabul edilir.

Akışkanın izotropik ve stres tensörünün de simetrik olduğu varsayımı, her zaman olmasada, yapılıdır. Yukarıda listelenen varsayımlardan herhangi birisinin ihlali, Navier-Stokes denklemleri geçersiz kılar, bu durumda alternatif modellemeye başvurulur. Sırasıyla bu üç varsayımın üzerinde ayrıntılı olarak duracağız.

**Newtonyen Çerçeve:** Ele alınan akış hareketleri görecesiz olarak kabul edilir, örneğin karakteristik hızları ışık hızının çok altındadır. Bu yüzden, kütle ve enerji birbirlerine dönüşmez ve dolayısıyla her biri ayrı olarak korunur. Atomik veya atomaltı parçacıklar veya uzunluk ölçeğinin ters tarafında olağan üstü büyük yıldız ve galaksiler ile uğraşmadıkça, Newtonyen çerçevesi mikroeletromekanik sistemleride içeren birçok mekanik problemi için mükemmel bir modelleme aracıdır. Kuantum ve göreceli mekanik açıkça görüldüğü gibi bu makalenin kapsamının dışındadır. Bu yüzden, Newtonyen kabulü, makalenin kalan kısmında artık değinmeyeceğimiz bir kabuldür.

**Sürekli ortam modeli:** Hem katı ve hem de akışkan mekaniğinde, sürekli ortam yaklaşımı bütün makroskopik bağımlı değişkenlerin uzaysal ve zamansal türevlerinin kabul edilebilir bir şekilde var olduğunu ifade eder. Başka bir deyişle, yoğunluk, hız, gerilme ve ısı akışı gibi yerel özellikler, her bir akışkan elemanında yeterli sayıda molekül olduğunu garanti etmek için, ancak makroskopik kaosa yol açmayacak şekilde, mikroskopik yapıya kıyasla yeterince büyük

- The Newtonian framework of mechanics - which specifies that mass and energy are conserved separately and that, in an inertial frame of reference, the sum of all forces is equal to the rate of change of momentum - is valid.
- The continuum approximation - which assumes that space and time are indefinitely divisible continuum - is applicable.
- Thermodynamic equilibrium or at least quasi-equilibrium - which permits linear relations between stress and rate of strain and between heat flux and temperature gradient - is assumed.

Fluid isotropy and stress tensor symmetry are also typically, albeit not always, assumed. Violation of any one of the three assumptions listed above invalidates the Navier-Stokes equations and alternative modeling is then called for. We elaborate on the three assumptions in turn.

**Newtonian framework:** The fluid motions under consideration are assumed non-relativistic, i.e. their characteristic velocities are far below the speed of light. Thus, mass and energy are not interchangeable and each is separately conserved. As long as we are not dealing with atomic or subatomic particles or, at the other extreme of length scale, with stars and galaxies, the Newtonian framework is an excellent modeling tool for most problems in mechanics including those dealing with microelectromechanical systems. Quantum and relativistic mechanics are clearly beyond the scope of the present paper. Therefore, the Newtonian assumption is one that we no longer have to revisit for the rest of this article.

**Continuum model:** In both solid and fluid mechanics, the continuum approximation implies that the spatial and temporal derivatives of all the macroscopic dependent variables exist in some reasonable sense. In other words, local properties such as density, velocity, stress and heat flux are defined as averages over elements sufficiently large compared



elemanlar üzerinden, ortalama olarak tanımlanır fakat bu özelliklerin tanımı için akışkan elemanın diferansiyel hesaplamasının kullanımına izin verecek mertebede, makroskopik ölçüğe kıyasla küçük olması gerekmektedir. Sürekli ortam yaklaşımı, hemen hemen her zaman sağlanır fakat istisnalar da yok değildir. Böylelikle, neticede elde edilen denklemler, seyrekleşmiş gazlar, moleküler uzaklığa oranla ince olan şok dalgaları ve mikro ve nano cihazlardaki bazı akışkanların örneklediği gibi, akışkan moleküllerinin arasındaki ortalama uzaklıktan çok fazla büyük olmayan uzamsal ölççekler ile olan akışlar istisnası dışındaki durumları geniş oranda kapsar. Daha sonra, bazı küçük cihazlar için sürekli ortam yaklaşımının başarısız olduğu belirli şartları tarif edeceğiz.

Sürekli ortam yaklaşımının, denklem sayısından daha fazla bilinmeyen olduğu belirsiz bir denklem setine yol açtığı vurgulanması gereklidir [7]. Kısmi diferansiyel denklemlerin çözülebilir son halini elde etmek için, gerilme ve gerinme arasında ve ısı akışı ile sıcaklık basamağı arasındaki ilişkilere ihtiyaç vardır. En azından sıkıştırılabilir akışlar için, yoğunluk ve iç enerjinin her birini basınç ve sıcaklık ile ilişkilendiren iki durum denkleminde de ihtiyaç vardır. Sürekli ortam yaklaşımının, bizi Navier-Stokes denklemlerine götürmesi gerektiği gerçeği, basılı belgelerde sık sık karıştırılan ince bir noktadır.

**Termodinamik denge:** Termodinamik denge, makroskopik niceliklerin değişken çevrelerine uyum sağlamak için yeteri kadar süreleri olduğu anlamına gelir. Hareket durumunda, tam termodinamik denge, her bir akışkan parçacığı momentum veya enerji verilmiş ya da alınmış sürekli bir hacime sahip olduğu için, mümkün değildir, bu yüzden akışkanlar mekaniğinde ve ısı transferinde sanki-denge durumundan bahsederiz. Termodinamiğin ikinci yasası denge durumuna geri dönmek için bir eğilim

with the microscopic structure in order to guarantee a sufficiently large number of molecules inside each fluid element and thus to effect molecular chaos, but small enough in comparison with the scale of the macroscopic phenomena to permit the use of differential calculus to describe those properties. The continuum approximation is almost always met, but exceptions do exist. The resulting equations therefore cover a very broad range of situations, the exception being flows with spatial scales that are not much larger than the mean distance between the fluid molecules, as for example in the case of rarefied gases, shock waves that are thin relative to the molecular distances, and some flows in micro- and nanodevices. We will describe later the precise conditions under which the continuum approximation fails for certain minute devices.

It should be emphasized that the continuum approximation in and by itself leads to an indeterminate set of equations, i.e. more unknowns than equations [7]. To close the resulting system of partial differential equations, relations between the stress and rate of strain and between the heat flux and temperature gradient are needed. At least for compressible flows, two equations of state, relating density and internal energy each to pressure and temperature, are also required. The fact that the continuum approximation does not necessarily lead to the Navier-Stokes equations is a subtle point that is often confused in the literature.

**Thermodynamic equilibrium:** Thermodynamic equilibrium implies that the macroscopic quantities have sufficient time to adjust to their changing surroundings. In motion, exact thermodynamic equilibrium is impossible as each fluid particle is continuously having volume, momentum or energy added or removed, and so in fluid dynamics and heat transfer we speak of quasi-equilibrium. The second law of thermodynamics imposes a tendency to revert to equilibrium state, and the defining

gösterir ve burada asıl tanımlanan konu akış miktarlarının yeterince hızlı uyum sağlayıp sağlayamadığıdır. Moleküler zaman ve uzunluk ölçüleri, makroskopik akış - ölçeklerine kıyasla çok küçük ise, tersinme oranı çok yüksek olacaktır. Bu, moleküler uzunluk ölçekleri ile kıyaslanabilir mesafelerde, özellikleri pek az değişen akışkan parçacıklarını dengelemek için, yeterince kısa sürede birçok moleküler çarpışma gerçekleşmesini garanti edecektir. Gazlar için moleküler çarpışma karakteristik uzunluğu, ortalama serbest yol  $L$ 'dir; bu bir molekülün diğeriyle çarpışmadan önce aldığı ortalama yolu ifade etmektedir. Diyelim ki  $L$ , akış uzunluk ölçüsünden bir mertebe daha küçük olduğunda; hız ve sıcaklık gibi makroskopik büyüklükler, moleküler mesafeler üzerinden neredeyse doğrusal basamaklara sahip olacaklardır ve dengeden ayrılma bu basamaklara bağlı olacaktır. Böylece, sanki-denge kabulü, gerilmenin gerinme oranı ile (Newtonyen akışkanlar) ve ısı akısının da sıcaklık basamağı ile (Fourier akışkanları) doğrusal olarak ilişkili olduğunu ifade eder. Bu konular Lighthill [8] tarafından çok ince olarak ortaya konulmuştur. Termodinamik denge ek olarak, kaymama ve sıcaklık sıçramasının olmaması sınır şartlarına götürür [8,9].

Sürekli ortam yaklaşımında olduğu gibi, sanki-dengeli yaklaşım, mikrocihazlarla ilgili bazı durumlarda ihlal edilebilir. Bu durumlarda, kaymama şartına veya Navier-Stokes denklemlerinin kendilerine bile alternatifler aranmalıdır. Artık sürekli ortam yaklaşımının veya sanki-denge kabulünün yapılabildiği şartları belirlemek için hazırız. En azından gazlar için her iki sorunun cevabı, özellikle yarım yüzyıl önce seyrekleşmiş gaz dinamiğinde yaygın olarak uygulanmış olan istatistiksel termodinamikten, iyi bilinmektedir. [9,10]. Bu nedenle sıvı akışları daha sonraya bırakıp, ilk olarak gaz akışlarını tartışacağız.

issue here is whether or not the flow quantities are adjusting fast enough. The reversion rate will be very high if the molecular time and length scales are very small as compared to the corresponding macroscopic flow-scales. This will guarantee that numerous molecular collisions will occur in sufficiently short time to equilibrate fluid particles whose properties vary little over distances comparable to the molecular length scales. For gases, the characteristic length for molecular collision is the mean free path,  $L$ , the average distance traveled by a molecule before colliding with another. When  $L$  is, say, one order of magnitude smaller than the flow length scale, macroscopic quantities such as velocity and temperature will have nearly linear gradients over molecular distances, and it is on these gradients alone that departure from equilibrium will depend. Therefore, the quasi-equilibrium assumption signifies that the stress is linearly related to the rate of strain (Newtonian fluids) and the heat flux is linearly related to the temperature gradient (Fourier fluids). These issues have been described quite eloquently by Lighthill [8]. Thermodynamic equilibrium additionally gives rise to the no-slip and no-temperature-jump boundary conditions [8,9].

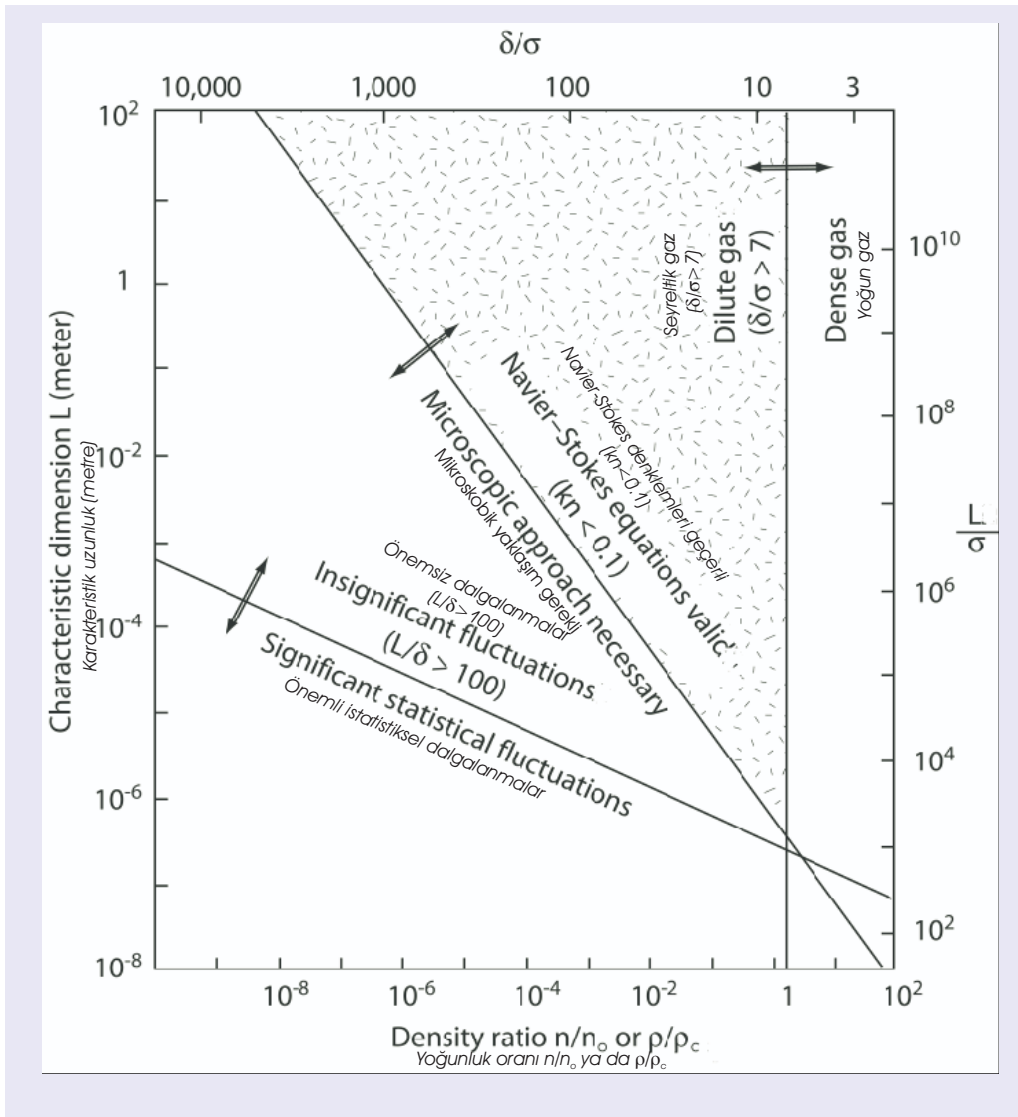
As is the case with the continuum approximation, the quasi-equilibrium assumption can be violated under certain circumstances relevant to microdevices. In these cases, alternatives to the no-slip condition or even to the Navier-Stokes equations themselves must be sought. We are now ready to quantify the conditions under which the continuum approximation or the quasi-equilibrium assumption can be made. For gases at least, the answer to both questions is well known from statistical thermodynamics particularly as was extensively applied to rarefied gas dynamics half a century ago [9,10]. For that reason we discuss gas flows first deferring the discussion of liquid flows to afterward.

#### 4. GAZ AKIŞLARI

Şekil 3'te tekrar oluşturulan iyi bilinen grafik, aradığımız cevabı açıkça göstermektedir. Bu grafikteki bütün ölçekler logaritmiktir. Altta apsis, referans bir yoğunlukla normalize edilmiş yoğunluğu,  $\rho/\rho_0$ , veya eşdeğer olarak normalize edilmiş yoğunluk sayısını (birim hacimdeki molekül sayısını)  $n/n_0$ , göstermektedir. Üstteki apsis, moleküler çap ile normalize edilmiş olan moleküller arasındaki mesafedir,  $\delta/\sigma$ . Görüldüğü gibi, yoğunluk oranı,  $\delta/\sigma$ 'nın küp kökü ile ters orantılıdır. Soldaki ordinat, metre cinsinden karakteristik akış boyutu  $L$ 'yi,

#### 4. GAS FLOWS

The well-known chart reproduced in Figure 3 clearly illustrates the answer we are seeking. All scales in this plot are logarithmic. The bottom abscissa represents the density normalized with a reference density,  $\rho/\rho_0$ , or equivalently the normalized number density (number of molecules per unit volume),  $n/n_0$ . The top abscissa is the average distance between molecules normalized with the molecular diameter,  $\delta/\sigma$ . Clearly, the density ratio is proportional to the inverse cube of  $\delta/\sigma$ . The left ordinate represents a characteristic flow dimension,  $L$ , in meter.



Şekil 3. Farklı akış modellerinin etkili limitleri. Referans [10]'dan izin alınarak çoğaltılmıştır.

Figure 3. Effective limits of different flow models. Reproduced with permission from reference [10].

ifade etmektedir. Bu ise, gradyenin mutlak değerine bölünmüş, yoğunluk gibi, bir karakteristik makroskopik özellikten hesaplanabilir. Sağ taraftaki ordinat, moleküler çap ile normalize edilmiş uzunluk ölçeğidir,  $L/\sigma$ . Şekil 3'teki grafik, moleküler çapı,  $\sigma = 4 \times 10^{-10}$  m olan bir gaz için oluşturulmuştur, ki bu çap rijit küreler olarak modellenmiş havayı çok yakın temsil etmektedir. Benzer grafikler diğer gazlar için de çizilebilir.

Şekil 3'teki dikey çizgi, seyreltilmiş gaz ile yoğun olan arasındaki sınırı göstermektedir. Seyreltilmiş gaz çizginin sol tarafındaki  $\delta/\sigma > 7$  olan bölgededir. Bu tip bir gaz için moleküller arası güçler hiçbir rol oynamaz ve moleküller zamanlarının büyük bölümünü, moleküllerin yönü ve hızının ani olarak değiştiği kısa çarpışmalar arasında geçirir. Bunun yanı sıra, ikiden fazla molekülün çarpışma olasılığı çok küçüktür. O halde sadece ikili çarpışmalardan söz edebiliriz ve konu seyreltik gazlar olduğunda güçlü kinetik teorisinin bütün basitleştirilmiş hallerinden yararlanılabilir. Standart şartlarda kuru hava,  $1.01 \times 10^5$  N/m<sup>2</sup>lik bir basınca, 288 K sıcaklığa, 1 yoğunluk oranına ve  $\delta/\sigma = 9$  oranına sahiptir. Bu yüzden standart hava neredeyse bir seyreltik ideal gazdır.

Şekil 3'teki hafifçe eğimli çizgi moleküler kaosu limitini ifade eder. Makroskopik nicelikleri hesaplamak için birçok molekül üzerinden ortalama alınırken,  $L/\delta > 100$  tarafında en az 100 molekül olduğu zaman veya başka bir deyişle ilgili en küçük akışkan hacminde en az 1 milyon molekül bulunduğu zaman, önemsiz istatistiksel dalgalanmalar oluşur. Bu yüzden, sürekli ortam yaklaşımı bu çizginin sadece üst kısmında geçerlidir. Moleküler kaos sınırlaması, makroskopik niceliklerin mikroskopik bilgi üzerinden hesaplanmasının doğruluğunu artırır. Aslında; üzerinden ortalamaların hesaplandığı hacmin, istatistiksel hataları azaltmak için yeterli sayıda moleküle sahip olması gerekir. Makroskopik akış özelliklerinin bir miktar molekül üzerinden ortalama olarak hesaplanması, 1 milyon molekül kullanılması durumunda %0.1, bin molekül kullanılması durumunda ise %3 olan ve böylece devam eden standart sapmalı istatistiksel dalgalanma ile sonuçlanacaktır.

This can be computed from a characteristic macroscopic property, such as density, divided by the absolute value of its gradient. The right ordinate is the length scale normalized with the molecular diameter,  $L/\sigma$ . The chart in Figure 3 depicts a gas having a molecular diameter of  $\sigma = 4 \times 10^{-10}$  m, which diameter very closely represents air modeled as rigid spheres. Similar charts can be drawn for other gases.

The vertical line inserted in Figure 3 represents the boundary between dilute gas and dense one. Dilute gas is to the left of this line where  $\delta/\sigma > 7$ . For such gas, intermolecular forces play no role and the molecules spend most of their time in free flight between brief collisions at which instances the molecules' direction and speed abruptly change. Additionally, the probability of more than two molecules colliding is minuscule. We then speak of only binary collisions, and all the simplifications of the powerful kinetic theory of gases can be invoked when dealing with dilute gases. Dry air at standard conditions has a pressure of  $1.01 \times 10^5$  N/m<sup>2</sup>, temperature of 288 K, density ratio of 1, and  $\delta/\sigma = 9$ . Standard air is therefore a dilute, ideal gas, but barely.

The gently sloped line in Figure 3 indicates the limit of molecular chaos. When averaging over many molecules to compute macroscopic quantities, insignificant statistical fluctuations occur when there is at least 100 molecules to the side  $L/\delta > 100$ , in other words when at least 1 million molecules reside inside the smallest macroscopic fluid volume of interest. Therefore, the continuum approximation is valid only on top of that line. The molecular chaos restriction improves the accuracy of computing the macroscopic quantities from the microscopic information. In essence, the volume over which averages are computed has to have sufficient number of molecules to reduce statistical errors. It can be shown that computing macroscopic flow properties by averaging over a number of molecules will result in statistical fluctuations with a standard deviation of approximately 0.1% if one million molecules are used, around 3% if one thousand molecules are used, and so on.

Şekil 3'teki dik çizgi, sanki-denge kabulünün geçerlilik sınırını ifade eder. Bu sınır, ortalama serbest yolun karakteristik makroskopik uzunluğa olan oranını gösteren Knudsen sayısı  $Kn \equiv L/L$  tarafından belirlenir. Navier-Stokes denklemleri sadece, kaymama şartının  $Kn < 0.001$  sınırını kesin gerektirmesine rağmen,  $Kn < 0.1$  olması durumunda (dik çizginin üzerinde) geçerlidir. Bu kesin sınıra karşılık gelen çizgi, Şekil 3'te görüldüğü üzere daha dik çizgiye paraleldir; fakat yukarı doğru iki onluk ötelenmiş durumdadır. Ortalama serbest yol  $n^{-1}$ 'te orantılıdır ve bu yüzden, logaritmik grafikte, sanki-denge çizgisinin eğimi, dolayısıyla moleküler kaos çizgisinden üç kat daha fazladır. Bu bilgilerin birçoğu Knudsen [11] tarafından gerçekleştirilen klasik deneyler sayesinde edinilmiştir. Bu deneyler, son zamanlarda U.S. Ulusal Standartlar ve Teknoloji Enstitüsünde Tison [12] tarafından büyük hassasiyetle tekrar edilmiştir ve Beskok ve diğerleri [13] tarafından rapor edilmiştir.

Bütün bunlar mikrocihazlarla nasıl ilgilidir? Yoğunluk azalırken, gaz yoğun olandan seyreltik hale değişir. Düşük-yoğunluklu bir gaz için boyut küçülürken, akış kayar bu da, Navier-Stokes denklemleri ve sürekli ortam yaklaşımlarının ikisinin birden başarısızlığı ile izlenir. Yoğun bir gaz için,  $L$  azalırken tersine bir gidişat gözlenir: ilk olarak sürekli ortam yaklaşımı düşer ve bunu sanki-denge kabulünün düşüşü takip eder. Açıkça, sürekli ortam yaklaşımı ve sanki-denge kabulü iki farklı şeydir. Şekil 3'te, kendine özgü limitleri tarif eden iki çizgi yalnızca tek bir noktada kesişir.

Somut bir örnek verecek olursak, 1 atm de hava için eğer  $L < 100$  mikron ise kayma meydana gelir, (gerilme)-(gerinme oranı) ilişkisi eğer  $L < 1$  mikron ise doğrusallığını yitirir ve  $L < 0.4$  mikron için sürekli ortam yaklaşımı başarısız olur.  $10^{-3}$  atm hava için,  $L < 100$  mm ise kayma oluşur, (gerilme) - (gerinme oranı) ilişkisi  $L < 1$  mm ise doğrusallığını yitirir ve sürekli ortam yaklaşımı  $L < 4$  mikron ise başarısız olur. Helyum gibi hafif gazlar bu limitlere önemli ölçüde büyük karakteristik uzunluklarda ulaşır. Bütün bu şartlar, mikro ve nanocihazların çalışma aralığı içerisinde. Böylece,

The steeper line in Figure 3 indicates the boundary of validity of the quasi-equilibrium assumption. This limit is governed by the Knudsen number,  $Kn \equiv L/L$ , which is the ratio of the mean free path to the characteristic macroscopic length. Navier-Stokes equations are valid only if  $Kn < 0.1$  (above the steeper line), although the no-slip condition demands the stricter limit of  $Kn < 0.001$ . The line corresponding to the stricter limit is parallel to the steeper line in Figure 3, but shifted upward by two decades. The mean free path is proportional to  $n^{-1}$ , and therefore the slope of the quasi-equilibrium line, in the logarithmic plot, is three times steeper than that of the molecular chaos line. Much of that has been known since the classical experiments conducted by Knudsen [11]. These experiments have been recently repeated with great precision at the U.S. National Institute of Standards and Technology by Tison [12] and reported by Beskok et al. [13].

How does all that relate to microdevices? As density is reduced, the gas changes from dense to dilute. As size shrinks for a low-density gas, the flow slips, followed by a failure of the Navier-Stokes equation, followed by a failure of the continuum approximation altogether. For a dense gas, a reverse trend is observed as  $L$  is reduced: the continuum approximation fails first followed by a failure of the quasi-equilibrium assumption. Clearly, the continuum approximation and the quasi-equilibrium assumption are two different things. The two lines in Figure 3 describing the two respective limits meet only at a single point.

To give a concrete example, for air at 1 atm, slip occurs if  $L < 100$  microns, (stress)-(rate of strain) relation becomes nonlinear if  $L < 1$  micron, and the continuum approximation fails altogether if  $L < 0.4$  micron. For air at  $10^{-3}$  atm, slip occurs if  $L < 100$  mm, (stress)-(rate of strain) relation becomes nonlinear if  $L < 1$  mm, and the continuum approximation fails if  $L < 4$  microns. Light gases such as Helium will reach those limits at considerably larger characteristic lengths. All of those

mikrocihazlarda aktarımın geleneksel denklemler kullanılarak modellenmemesi gereken durumlar vardır.

Hem gaz hem de sıvı akışları için ileriki adım, geleneksel modelleme başarısızlığa uğradığında ne yapılması gerektiğini çözmektir. En azından gazlar için, Knudsen sayısının 0.001 olan kritik limiti geçtiği durumlarda, hassas olarak kayma ve sıcaklık sıçraması miktarını veren birinci-temel denklemler vardır [3]. Burnett denklemleri gibi yüksek dereceden denklemler, Kn sayısının 0.1 değerini aşması durumunda, Navier-Stokes denklemlerinin yerine geçebilir. Son olarak, eğer sürekli ortam yaklaşımı tamamiyle başarısız olursa, akışkan gerçekte olduğu gibi bir molekül topluluğu olarak modellenebilir. Bu durumda kişi, moleküler dinamik benzetimler (sıvılar için), Boltzmann denklemi (seyreltik gazlar için) veya Monte Carlo doğrudan benzetimleri (yine seyreltik gazlar için) kullanabilir. Kendi sınırlamalarına maruz kalan moleküler-tabanlı modeller de; dengenin olmadığı, sürekli ortam durumları gibi daha yüksek dereceli momentum ve enerji denklemlerinin yerine kullanılabilir. Burada listelenen bütün stratejiler Şekil 2'de şematik olarak gösterilmiştir ve Karniadakis ve Beskok [6] ve Gad-el-Hak [5]'in kitaplarında ayrıntılarıyla anlatılmıştır.

## 5. Sıvı Akışlar

Sürekli ortam açısından, hem sıvılar hem de gazlar aynı hareket denklemlerine uyan akışkanlardır. Örneğin sıkıştırılmaz akışlar için, Reynolds sayısı, verilen bir geometri için akış alanının karakterini belirleyen esas boyutsuz parametredir. Örneğin su, havanınkinden sırasıyla 1000 ve 100 kat daha büyük yoğunluk ve viskoziteye sahiptir, fakat Reynolds sayısı ve geometri eşleştiğinde sıvı ve gaz akışlarının aynı olması gerekir.\* MEMS uygulamaları için, bununla beraber dengeli olmayan akış şartlarının olasılığını ve sonuçta ortaya

conditions are well within the operating ranges of micro- and nanodevices. Thus, there are circumstances when transport in microdevices should not be modeled using the traditional equations.

The next step for both gas and liquid flows is to figure out what to do if conventional modeling fails. For gases at least, there are first-principles equations that give the precise amount of slip or temperature jump to include in case the Knudsen number exceeds the critical limit of 0.001 [3]. Higher-order equations such as those of Burnett can replace the Navier-Stokes equations when Kn exceeds 0.1. Finally, if the continuum approximation fails altogether, the fluid can be modeled as it really is, a collection of molecules. There, one can use molecular dynamics simulations (for liquids), Boltzmann equation (for dilute gases), or direct simulations Monte Carlo (also for dilute gases). Subject to their own limitations, all the molecular-based models can also be used in lieu of higher-order momentum and energy equations, i.e. for non-equilibrium, continuum situations. All the strategies listed here are schematically depicted in Figure 2, and described in greater details in the books by Karniadakis and Beskok [6] and Gad-el-Hak [5].

## 5. Liquid Flows

From the continuum point of view, liquids and gases are both fluids obeying the same equations of motion. For incompressible flows, for example, the Reynolds number is the primary dimensionless parameter that determines the character of the flowfield for a given geometry. True, water, for example, has density and viscosity that are, respectively, three and two orders of magnitude higher than those for air, but if the Reynolds number and geometry are matched, liquid and gas flows should be identical.\* For MEMS applications, however, we anticipate the possibility of non-equilibrium

\* Sıvılara has kaviteasyon, serbest yüzey akışları v.b gibi kavramlar dışında.

\* Barring phenomena unique to liquids such as cavitation, free surface flows, etc.

çıkan Navier-Stokes denklemleri ile kaymama sınır şartının geçersizliğini tahmin ederiz. Bu gibi durumlar en iyi, moleküler yaklaşım kullanılarak araştırılabilir. Bu gazlar için bir önceki bölümde tartışılmıştı, bu bölümde aynı hususlar sıvılar için verilecektir. Genel olarak Newtonyen olmayan akışkanlar ve özellikle polimerler için basılı eserler uçsuz bucaksızdır (örneğin, Nadolink ve Haigh [14] tarafından yapılan kaynakça araştırması, sadece polimer sürtünme azaltılması üzerine 4900 referanstan bahsetmektedir) ve sıvı akışları için moleküler yaklaşım üzerine zengin bir bilgi kaynağı sağlar.

Katılar, sıvılar ve gazlar, sadece, yakınlık derecesi ve bileşen moleküllerinin hareket şiddeti bakımından ayrılırlar. Katılarda, moleküller birbirlerine çok yakın ve komşuları tarafından çevrelenerek sınırlandırılmış konumdadır [9]. Yalnızca nadiren bir katı molekülü yeni bir sete katılmak için komşularından ayrılır. Katı ısıtıldığı zaman, moleküler hareket daha şiddetli hale gelir ve küçük bir ısı genleşme meydana gelir. Ortam basıncına bağlı olarak belirli bir sıcaklıkta, moleküllerin yeterli şiddetteki hareketi, onların bir komşu setten diğerine serbest bir şekilde geçmelerini sağlar. Moleküller artık sınırlandırılmış değildir ancak, yine de hala sıkıca toplanmışlardır ve artık madde sıvı olarak ele alınır. Maddenin daha fazla ısıtılması sonuçta bütün molekülleri, karşılıklı çekim bağlarının kırılmasına izin vererek, serbest bırakır. Katılar ve sıvılardan farklı olarak, sonuçta ortaya çıkan gaz, mevcut her hacmi doldurmak amacıyla genişir.

Katıların tersine, sıvılar ve gazlar sürekli deformasyon olmadan sonlu kesme kuvvetine karşı koyamazlar; bu bir akışkan ortamın tanımıdır. Bir katının tersinir, elastik, statik

flow conditions and the consequent invalidity of the Navier-Stokes equations and the no-slip boundary conditions. Such circumstances can best be researched using the molecular approach. This was discussed for gases in the previous section, and the corresponding arguments for liquids will be given in the present section. The literature on non-Newtonian fluids in general and polymers in particular is vast (for example, the bibliographic survey by Nadolink and Haigh [14] cites over 4,900 references on polymer drag reduction alone) and provides a rich source of information on the molecular approach for liquid flows.

Solids, liquids and gases are distinguished merely by the degree of proximity and the intensity of motions of their constituent molecules. In solids, the molecules are packed closely and confined, each hemmed in by its neighbors [9]. Only rarely would one solid molecule slip from its neighbors to join a new set. As the solid is heated, molecular motion becomes more violent and a slight thermal expansion takes place. At a certain temperature that depends on ambient pressure, sufficiently intense motion of the molecules enables them to pass freely from one set of neighbors to another. The molecules are no longer confined but are nevertheless still closely packed, and the substance is now considered a liquid. Further heating of the matter eventually releases the molecules altogether, allowing them to break the bonds of their mutual attractions. Unlike solids and liquids, the resulting gas expands to fill any volume available to it.

Unlike solids, both liquids and gases cannot resist finite shear force without continuous deformation; that is the definition of a fluid medium. In contrast to the reversible, elastic, static deformation of a solid, the

deformasyonuna zıt olarak, kesme gerilmesinin sonucunda oluşan bir akışkanın sürekli deformasyonu sonuçta moleküllerin rastgele ısı hareketlerine dönüşen tersinmez bir iş ile sonuçlanır, bu da viskoz yayınımdır. Bir mikron küpte standart sıcaklık ve basınçta 25 milyon civarında hava molekülü bulunmaktadır. Aynı küp yaklaşık 34 milyar su molekülünü içerebilir. Bu yüzden sıvı akışları, gazların sürekli ortam olarak ele alınmadığı çok küçük cihazlarda bile sürekli ortamdır. Gaz örneğinde, moleküller arasındaki ortalama mesafe, moleküllerinin çapından bir merteye büyüktür, sıvılar için bu mesafe moleküler çapa yaklaşıp. Sonuç olarak sıvılar hemen hemen sıkıştırılmazdır. İzotermal sıkıştırılabilirlik katsayıları  $\alpha$  ve hacimsel genişleme katsayıları  $\beta$ , gazlarınkine kıyasla çok daha küçüktür. Su için örneğin, basınçtaki yüz kat artış hacimde % 0.5'den düşük azalmaya yol açar. Sıvılardaki ses hızları da gazlardakine oranla yüksektir, ve sonuç olarak, sıvı akışlarının çoğu sıkıştırılmazdır.\* Bu durumun kayda değer istisnaları ultra-yüksek frekans ses dalgası yayılımı ve kaviteasyon kavramıdır.

Sıvıların, kütle, momentum enerji aktarım mekanizmaları gazlarınkinden çok farklı olmalıdır. Seyreltilmiş gazlarda, moleküller arası kuvvetlerin bir etkisi yoktur ve moleküller zamanlarının çoğunu, moleküllerin yönü ve hızının aniden değiştiği kısa çarpışmalar arasındaki serbest uçuşlar ile harcarlar. Rasgele moleküler hareketler gaz aktarım süreçlerinden sorumludur. Sıvılarda, diğer taraftan,

continuous deformation of a fluid resulting from the application of a shear stress results in an irreversible work that eventually becomes random thermal motion of the molecules; that is viscous dissipation. There are around 25 million molecules of STP air in a one-micron cube. The same cube would contain around 34 billion molecules of water. So, liquid flows are continuum even in extremely small devices through which gases would not be considered continuum. The average distance between molecules in the gas example is one order of magnitude higher than the diameter of its molecules, while that for the liquid phase approaches the molecular diameter. As a result, liquids are almost incompressible. Their isothermal compressibility coefficient  $\alpha$  and bulk expansion coefficient  $\beta$  are much smaller compared to those for gases. For water, for example, a hundred-fold increase in pressure leads to less than 0.5% decrease in volume. Sound speeds through liquids are also high relative to those for gases, and as a result most liquid flows are incompressible.\* Notable exceptions to that are propagation of ultra-high-frequency sound waves and cavitation phenomena.

The mechanisms through which liquids transport mass, momentum and energy must be very different from those of gases. In dilute gases, intermolecular forces play no role and the molecules spend most of their time in free flight between brief collisions at which instances the molecules' direction and speed abruptly change. The random molecular motions are responsible for gaseous transport processes. In liquids, on the other hand, the molecules are closely packed though not

\* Bir akışkan ve bir akış arasında sıkıştırılabilir/sıkıştırılmaz olma ayrımı yapıldığına dikkat edelim. Örneğin sıkıştırılabilirliği fazla olan havanın akışı sıkıştırılabilir olabilir de olmayabilir de.

\* Note that we distinguish between a fluid and a flow being compressible/incompressible. For example, the flow of the highly compressible air can be either compressible or incompressible.



moleküller tek bir pozisyonda sabit olmayacak şekilde sıkıca toplanmışlardır. Esas olarak sıvı molekülleri her zaman çarpışma durumundadırlar. Kesme kuvvetinin uygulanması bir hız basamağı oluşturmak zorundadır, böylece moleküller bir diğerine göre görel olarak hareket eder, gerilme uygulandığı sürece bu *sonsuz* kadar bir döngü şeklindedir. Sıvılar için, rastgele moleküler hareketten dolayı momentum taşınımı, moleküller arası kuvvete kıyasla ihmal edilebilir. Sıvı molekülleri arasındaki gerilme, bazı molekülleri yeni moleküllerin kuvvet alanına getirerek esas komşularından ayrılmasına sebep olur. Kesme gerilmesi düzlemi boyunca, bütün moleküller arası kuvvetlerin toplamı ortalama olarak, uygulanan kesmeyi dengelemelidir. Durgun sıvılar sadece normal kuvveti iletir, fakat hız basamağı olduğunda, net moleküler arası kuvvet teğetsel bir bileşene sahip olacaktır.

Sıkıştırılmaz Navier-Stokes denklemleri çoğu durumda sıvı akışlarını tanımlar. Fakat Navier-Stokes denklemlerinin sıvı akışlarını tanımlamada başarısız olduğu şartlar nelerdir? Bir başka deyişle, bir cihaz ne kadar küçük olmak zorundadır ki sıvı akışı hissedilir bir şekilde kaymaya başlasın ve gerilme-gerilme ilişkisinin doğrusallığı bozulsun? İlk prensiplerden bu soruyu cevaplamak, mikroakış modellemesinin kutsal kâsesidir. Sıvılar, seyreltik gazları gibi iyi-geliştirilmiş moleküler temelli bir teoriye sahip değildir. Ortalama serbest yol kavramı sıvılar için pek kullanışlı değildir ve sıvı akışlarının yarı-denge durumuna girmelerinin başarısızlıkla sonuçlandığını şartlar çok iyi tanımlamamıştır. Sıvı akışları için, bize labirent boyunca rehberlik edecek bir Knudsen sayısı yoktur. İlk prensiplerden, kaymama şartının hangi şartlar altında hatalı olduğunu ya da (gerilme)-(gerilme)

fixed in one position. In essence, the liquid molecules are always in a collision state. Applying a shear force must create a velocity gradient so that the molecules move relative to one another, *ad infinitum* as long as the stress is applied. For liquids, momentum transport due to the random molecular motion is negligible compared to that due to the intermolecular forces. The straining between liquid molecules causes some to separate from their original neighbors, bringing them into the force field of new molecules. Across the plane of the shear stress, the sum of all intermolecular forces must, on the average, balance the imposed shear. Liquids at rest transmit only normal force, but when a velocity gradient occurs, the net intermolecular force will have a tangential component.

The incompressible Navier-Stokes equations describe liquid flows under most circumstances. But what are the conditions for which the no-slip Navier-Stokes equations fail to adequately describe liquid flows? In other words, how small does a device have to be before a particular liquid flow starts slipping perceptibly and for the stress-strain relation to become nonlinear? Answering this question from first principles is the holy grail of microfluidic modeling. Liquids do not have a well-advanced molecular-based theory as that for dilute gases. The concept of mean free path is not very useful for liquids and the condition under which a liquid flow fails to be in quasi-equilibrium state are not well defined. There is no Knudsen number for liquid flows to guide us through the maze. We do not know, from first principles, the condition under which the no-slip boundary condition becomes inaccurate, or the point at which the (stress)-(rate of strain) relation or the (heat flux)-(temperature gradient) relation fails to be linear. Certain empirical observations indicate that those

ilişkisinin veya (ısı akısı)-(sıcaklık basamağı) ilişkisinin hangi noktada doğrusal olmaktan çıktığını bilmiyoruz. Belirli deneysel gözlemler, doğru olarak kabul ettiğimiz bazı basit ilişkilerin, zaman zaman sıvı akışlarını modellemede başarısız olduklarını göstermektedir. Örneğin, akışbilimsel çalışmalarda [15], gerilme oranının yaklaşık olarak moleküler frekans-ölçeğini iki kat geçtiği durumda, Newtonian olmayan davranışın başladığı görülmüştür.

$$\dot{\gamma} = \frac{\partial u}{\partial y} \geq 2 \tau^{-1} \quad (1)$$

burada  $\tau$

$$\tau = \left[ \frac{m\sigma^2}{\epsilon} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (2)$$

ile verilen moleküler zaman ölçeği,  $m$ , moleküler kütle,  $\sigma$  ve  $\epsilon$  sırasıyla karakteristik uzunluk ve enerji ölçekleridir. Su gibi sıradan sıvılar için, bu zaman ölçeği oldukça küçüktür ve Newtonian olmayan davranışın başlangıcı için eşik kesme oranı olağanüstü yüksektir. Diğer taraftan, yüksek moleküler-ağırlıklı polimerler için,  $\sigma$  ve  $\epsilon$ 'nin her ikisi suyunkinden çok daha büyüktür ve doğrusal gerilme-gerilme ilişkisi gerçekçi kesme oranı değerlerinde bozulur.

Gaz akışlarında olduğu gibi, sıvı akışlarında ölçülebilir kaymanın oluşması için eşğin, doğrusal olmayan gerilme-gerilmenin ortaya çıkması için gerekli olandan (örneğin kanal yüksekliği açısından) daha büyük olması beklenir. Sıvının katı bir tabaka üzerinde yayıldığı zaman hareket eden temas çizgisi, Navier-Stokes çözümlerinde tekil veya gerçekçi olmayan davranıştan kaçınmak için, kayma akışına izin verilmesi gereken bir örnektir [16-19]. Kayma akışının kabul edilmesi gereken diğer örnekler, köşe akışları [20-21], ergimiş polimerin kılcal tüplerden ekstrüzyonunu [22-24] içerir. Polimer ekstrüzyonunda

simple relations that we take for granted occasionally fail to accurately model liquid flows. For example, it has been shown in rheological studies [15] that non-Newtonian behavior commences when the strain rate approximately exceeds twice the molecular frequency-scale

$$\dot{\gamma} = \frac{\partial u}{\partial y} \geq 2 \tau^{-1} \quad (1)$$

where the molecular time scale  $\tau$  is given by

$$\tau = \left[ \frac{m\sigma^2}{\epsilon} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (2)$$

where  $m$  is the molecular mass, and  $\sigma$  and  $\epsilon$  are respectively the characteristic length and energy scales for the molecules. For ordinary liquids such as water, this time scale is extremely small and the threshold shear rate for the onset of non-Newtonian behavior is therefore extraordinarily high. For high-molecular-weight polymers, on the other hand,  $m$  and  $\sigma$  are both many orders of magnitude higher than their respective values for water, and the linear stress-strain relation breaks down at realistic values of the shear rate.

As is the case for gas flows, the threshold for the occurrence of measurable slip in liquid flows is expected to be higher (in terms of, say, channel height) than that necessary for the occurrence of nonlinear stress-strain relation. The moving contact line when a liquid spreads on a solid substrate is an example where slip flow must be allowed to avoid singular or unrealistic behavior in the Navier-Stokes solutions [16-19]. Other examples where slip-flow must be admitted include corner flows [20,21] and extrusion of polymer melts from capillary tubes [22-24]. Wall slip in polymer extrusion is discussed extensively by Den [25]. The recent chapter

cidarda kayma, Den [25] tarafından detaylı olarak tartışılmıştır. Lauga, Brenner ve Stone [26] tarafından yakın tarihte yazılan bir bölüm, polar ve polar olmayan sıvılar kadar Newtonyen ve Newtonyen-olmayan akışkanlar için, kaymama sınır şartı anlaşılır bir şekilde sunulmaktadır. Bu yazarlar, konunun 19. yüzyıldaki köklerini izlemekte ve hem deneysel hem de analitik açıdan problemi araştırmaktadırlar.

Mikrocihazlardaki sıvı akışı için var olan deneysel sonuçlar birbirleriyle çelişmektedir. Bu tip deneylerin zorluğu ve mantıksal bir teorinin yokluğu göz önünde tutulursa bu durum şaşırtıcı değildir. [27-30] referansları ilgili basılı eserleri özetlemektedir. Küçük-uzunluk-ölçekli akışlar için, verileri analiz etmek için bir kavramsal yaklaşım, hesaplanan bir *görünür* viskozite,  $\mu_a$ , tanımlamaktır, öyle ki eğer bu viskozite geleneksel kaymama Navier-Stokes denklemlerinde gerçek akışkan viskozitesi,  $\mu$ , yerine kullanılırsa, sonuçlar deneysel gözlemlerle uyum içerisinde olabilecektir. Israelachvili [31] ve Gee ve diğerleri [32], filmin kalınlığının 10 moleküler tabakayı ( $\approx 5$  nm) geçmesi durumundaki ince film akışları için  $\mu_a = \mu$  olduğunu bulmuşlardır. Daha ince filmler için  $\mu_a$  moleküler tabaka sayısına bağlıdır ve  $\mu$ 'den  $10^5$  kat daha büyük olabilir. Chan ve Horn [33] un sonuçları bir şekilde farklıdır: görünür viskozite 50 nm den daha ince filmler için, akışkanın viskozitesinden sapar.

Kılcal kanallardan akan polar-sıvı akışlarında, Migun ve Prokhorenko [34], 1 mikrondan daha küçük çaptaki tüpler için  $\mu_a$  nın arttığını bildirmişlerdir. Buna karşılık Debye ve Cleland [35], ortalama gözenek büyüklüğü moleküler uzunluk ölçeğinden birkaç kat daha büyük olan gözenekli camdaki parafin akışı için  $\mu_a$ 'nın  $\mu$ 'den daha küçük olduğunu bildirmektedirler. Derinlikleri 0.5 - 50 mikron aralığında değişen mikrokanallardaki

by Lauga, Brenner and Stone [26] provides a comprehensive treatment of the no-slip boundary condition for Newtonian and non-Newtonian fluids as well as for polar and non-polar liquids. These authors trace the issue to its 19<sup>th</sup> century roots, and survey both the experimental and analytical aspects of the problem.

Existing experimental results of liquid flow in microdevices are contradictory. This is not surprising given the difficulty of such experiments and the lack of a guiding rational theory. References [27-30] summarize the relevant literature. For small-length-scale flows, a phenomenological approach for analyzing the data is to define an *apparent* viscosity  $\mu_a$  calculated so that if it were used in the traditional no-slip Navier-Stokes equations instead of the actual fluid viscosity  $\mu$ , the results would be in agreement with experimental observations. Israelachvili [31] and Gee et al. [32] found that  $\mu_a = \mu$  for thin-film flows as long as the film thickness exceeds 10 molecular layers ( $\approx 5$  nm). For thinner films,  $\mu_a$  depends on the number of molecular layers and can be as much as  $10^5$  times larger than  $\mu$ . Chan and Horn's results [33] are somewhat different: the apparent viscosity deviates from the fluid viscosity for films thinner than 50 nm.

In polar-liquid flows through capillaries, Migun and Prokhorenko [34] report that  $\mu_a$  increases for tubes smaller than 1 micron in diameter. In contrast, Debye and Cleland [35] report  $\mu_a$  smaller than  $\mu$  for paraffin flow in porous glass with average pore size several times larger than the molecular length scale. Experimenting with microchannels ranging in depths from 0.5 micron to 50 microns, Pfahler et al. [27] found that  $\mu_a$  is consistently smaller than  $\mu$  for both liquid (isopropyl

deneysel ve Pfahler ve diğerleri [27], mikrokanallarda hem sıvı (isopropil alkol; silikon yağı) ve hem de gaz (azot, helyum) akışları için  $\mu_a$ 'nın  $\mu$ 'den sürekli olarak küçük olduğunu bulmuşlardır. Sıvılarda, görünen viskozite, kanal derinliği azaldıkça azalmaktadır. Küçük kılcal borular kullanan diğer araştırmacılar,  $\mu_a$ 'nın  $\mu$  ile yaklaşık olarak aynı olduğunu bildirmektedir [36-41].

Daha yakın zamanda, Sharp [42] ve Sharp ve diğerleri [43], mikrokanallarda sıvı akışı düşünüldüğünde basılı eserlerdeki tutarsızlıklara rağmen, bu tip akışların makroölçek sürekli ortam teorisi ile iyi bir şekilde tahmin edildiğini iddia etmişlerdir. Ancak, 7. Bölümün sonunda da görüleceği üzere buna zıt bir durum oluşturulabilir ve bu zıtlık üzerine son karar henüz alınmış değildir.

Yukarıdaki zıt sonuçlar, kavramsal modellerin ilk prensip olanlarıyla değiştirilmeleri gerektiğine işaret eder. Sıvıların moleküler temelli teori eksikliği polimer topluluğu ve akışbilimciler tarafından yapılan geniş araştırmaya rağmen moleküler dinamik benzetimlerini (MD), ilk prensipler cephaneliğine en yakın silah olarak karşımıza çıkartmaktadır. MD benzetimleri, alışılmış sürekli ortam kabullerinin geçerliliğini kontrol etmeyi sağlayan eşsiz bir yaklaşım sunmaktadır. Ancak, daha önce de belirtildiği gibi, bu tip benzetimler aşırı küçük akış mertebeleri ile sınırlıdır. Koplik ve Banavar [21], moleküler dinamik benzetimlerin tarihi, prensipleri, uygulamaları ve sınırları üzerine yararlı bir ilk okuma kitabı sunmaktadır. Takip eden bölümde MD benzetimlerinin kısa bir tartışmasını sunmaktayız.

## 6. MOLEKÜLER DİNAMİK BENZETİMLER

Moleküler modeller, akışkanı sayısız farklı parçacıkların toplamı olarak tanıır: moleküller, atomlar, iyonlar ve elektronlar. Burada hedef, bütün zamanlarda

alcohol; silicone oil) and gas (nitrogen; helium) flows in microchannels. For liquids, the apparent viscosity decreases with decreasing channel depth. Other researchers using small capillaries report that  $\mu_a$  is about the same as  $\mu$  [36-41].

More recently, Sharp [42] and Sharp et al. [43] asserted that, despite the significant inconsistencies in the literature regarding liquid flows in microchannels, such flows are well predicted by macroscale continuum theory. A case can be made to the contrary, however, as will be seen at the end of Section 7, and the final verdict on this controversy is yet to come.

The above contradictory results point to the need for replacing phenomenological models by first-principles ones. The lack of molecular-based theory of liquids-despite extensive research by the rheology and polymer communities-leaves molecular dynamics simulations (MD) as the nearest weapon to first-principles arsenal. MD simulations offer a unique approach to checking the validity of the traditional continuum assumptions. However, as was pointed out earlier, such simulations are limited to exceedingly minute flow extent. Koplik and Banavar [21] offer a useful primer on the history, principles, applications and limitations of molecular dynamics simulations. We provide in the following section a brief discussion of MD simulations.

## 6. MOLECULAR DYNAMICS SIMULATIONS

The molecular models recognize the fluid as a myriad of discrete particles: molecules, atoms, ions and electrons. The goal here is to determine the position, velocity and state of all particles at all times. The molecular approach is either deterministic or

bütün parçacıkların durumunu, hızlarını ve pozisyonlarını hesaplamaktır. Moleküler yaklaşım ya hesaplanabilir ya da istatistikeldir (Şekil 2'ye başvurunuz), ve önceki en temel moleküler yaklaşımdır. Moleküllerin hareketi, klasik mekanik kanunları ile yönetilir, problemi büyük ölçüde karşılaştırma pahasına da olsa, özel durumlarda kuantum mekaniği kanunları da dikkate alınabilir. Modern moleküler dinamiği bilgisayar benzetimlerine Alder and Wainwright [44-46] önderlik etmiş, ve Ciccotti ve Hoover [47], Allen ve Tildesley [48], Haile [49], ve Koplik ve Banavar [21] tarafından gözden geçirilmiştir.

MD benzetimi uzayın bir bölgesinde bir N molekülük bir set ile başlar, her birine, sözkonusu sıcaklıktaki Boltzmann dağılımına karşılık gelen rastgele hızlar atanır. Partiküller arasındaki etkileşim, tipik olarak iki - cismin potansiyel enerjisi formunda tanımlanır ve moleküler pozisyonların zamandaki değişimi her bir molekül için Newton'un hareket denkleminin integrasyonu ile hesaplanır. MD, en temel denklem setine bağlı olduğundan, prensipte her akış büyüklüğü için ve parametrelerin her aralığında geçerlidir. Model prensipte açıktır ancak iki engel vardır: belirli bir akış ve katı kombinasyonları için, uygun ve düzgün bir potansiyel seçmek ve kabul edilebilir bir akış alanı boyutu benzetimi için, muazzam bilgisayar kaynakları gerekir. Moleküler dinamik benzetimlerin önemli bir avantajı, gerilme ile gerinme oranı arasındaki bağıntı ile ısı akışı ve sıcaklık basamağı arasındaki ilişki çözümünün bir parçası olarak ortaya çıkar. Diğer bir deyişle, akışkanın Newtonyen/Newtonyen olmayan veya Fourier/Fourier olmayan olup olmadığını varsaymamız gerekmemektedir. Aynı şekilde, katı cıvardaki momentum ve enerji kaymasının varlığı/yokluğu da çözümünün bir kısmı olarak ortaya çıkar. Bu nedenle

probabilistic (refer to Figure 2), and the former is the most fundamental of the molecular approaches. The motion of the molecules are governed by the laws of classical mechanics, although, at the expense of greatly complicating the problem, the laws of quantum mechanics can also be considered in special circumstances. The modern molecular dynamics computer simulations have been pioneered by Alder and Wainwright [44-46], and reviewed by Ciccotti and Hoover [47], Allen and Tildesley [48], Haile [49], and Koplik and Banavar [21].

The MD simulation begins with a set of N molecules in a region of space, each assigned a random velocity corresponding to a Boltzmann distribution at the temperature of interest. The interaction between the particles is prescribed typically in the form of a two-body potential energy and the time evolution of the molecular positions is determined by integrating Newton's equations of motion, one for each molecule. Because MD is based on the most basic set of equations, it is valid in principle for any flow extent and any range of parameters. The method is straightforward in principle but there are two hurdles: choosing a proper and convenient potential for particular fluid and solid combinations, and the colossal computer resources required to simulate a reasonable flowfield extent. A significant advantage of molecular dynamics simulations is that the relation between the stress and rate of strain as well as between the heat flux and temperature gradient comes out as part of the answer. In other words, whether the fluid is Newtonian/non-Newtonian or Fourier/non-Fourier does not have to be assumed. Likewise, the presence/absence of momentum or energy slip at a solid wall comes out as

termodinamik denge veya onun olmayışı konusu tartışmaya açıktır.

Titiz çalışanlara göre bir potansiyel seçme zorluğu çok rahatsız eden bir husustur. Uygun bir potansiyelin tercih edilmesini sağlayacak tamamiyle akılcı bir yöntem bulunmamaktadır. Moleküler dinamik benzetim usulünün bir parçası da uygun bir potansiyeli seçip, benzetim sonuçlarını deneyler ya da diğer analitik/sayısal sonuçlarla geçerli kılmaktır. Potansiyeli ve parametrelerini akıllıca seçerek, kişi esas olarak her arzu edilen sonuca ulaşabilir bu da MD yaklaşımının açıkça görülen bir zayıflığıdır. İki molekül arası yaygın kullanılan potansiyel, bir sonraki bölümümüzde de kullanacağımız ve daha geniş tartışacağımız, genellenmiş Lennard-Jones 6-12 potansiyelidir.

İkinci zorluk ve moleküler dinamik benzetimlerin en önemli sınırlaması dijital bilgisayarda gerçekçi olarak modellenebilecek molekül sayısı  $N$ 'dir. Belirli her molekül için, bir yörünge elemanının hesaplanması, potansiyel çarpışma partnerleri olarak diğer *bütün* moleküllerin de hesaba katılmasını gerektirdiğinden, MD yöntemi tarafından istenilen hesaplama miktarı,  $N^2$  'ye orantılıdır. Bilgisayar zamanından bir miktar kazanç, potansiyelin zayıf noktalarını, diyelim ki  $r_c = 2.5 \sigma$ 'da keserek (Şekil 4'e bakınız), ve akış kesilme noktasında gücün kolayca sıfıra geçişini sağlayacak şekilde potansiyeli doğrusal bir terim olan  $r$  ile değiştirilerek elde edilebilir. Sonuç olarak, ancak yakın moleküller çarpışma partnerleri olarak düşünülür ve  $N$  molekülleri için hesaplama zamanı artık  $N^2$  ile ölçeklendirilmez.

2000'li yılların başlarında, moleküler dinamik benzetimlerinde başarılan en üst nokta, birkaç saatlik CPU zamanı ile genel amaçlı süper bilgisayarlar 100000

part of the answer. The issue of thermodynamic equilibrium or lack thereof is therefore moot.

For purists, the difficulty of choosing a potential is a sticky one. There is no totally rational methodology by which a convenient potential can be favored. Part of the art of molecular dynamics simulations is to pick an appropriate potential and validate the simulation results with experiments or other analytical/computational results. By astutely choosing the potential and its parameters, one can essentially obtain any desired result; a clear weakness of the MD approach. A commonly used potential between two molecules is the generalized Lennard-Jones 6-12 potential, to be used in the following section and further discussed in the section following that.

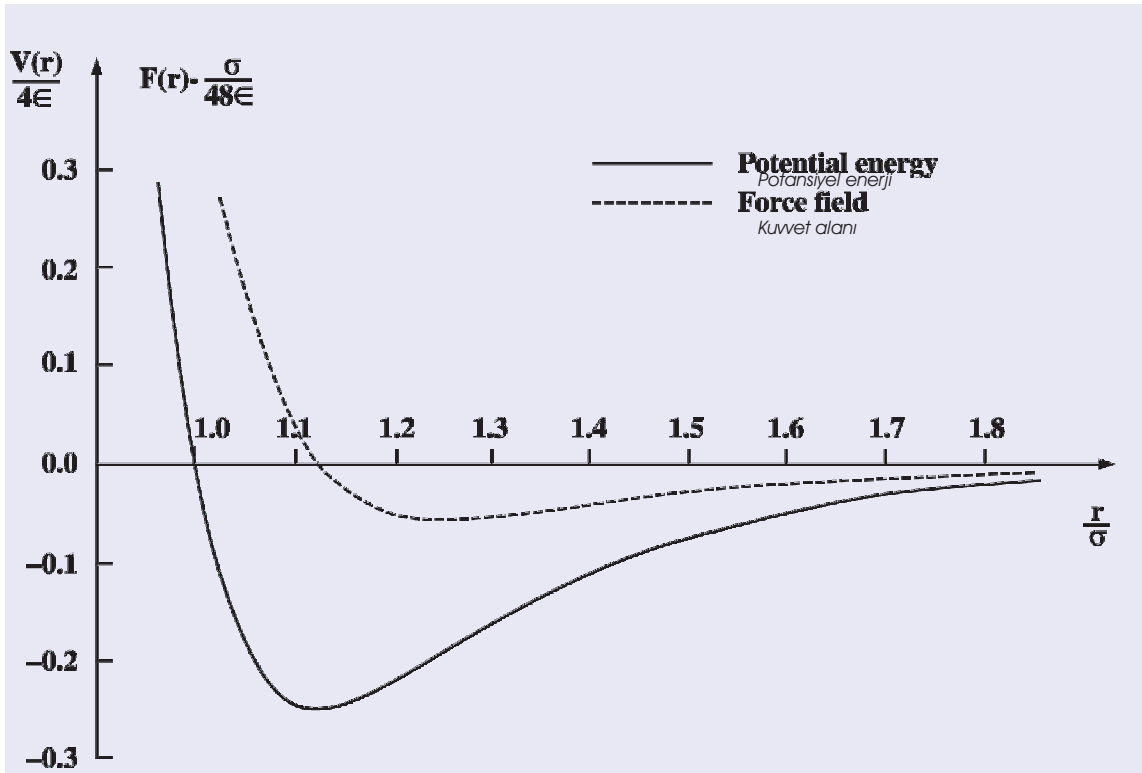
The second difficulty, and by far the most serious limitation of molecular dynamics simulations, is the number of molecules  $N$  that can realistically be modeled on a digital computer. Since the computation of an element of trajectory for any particular molecule requires consideration of *all* other molecules as potential collision partners, the amount of computation required by the MD method is proportional to  $N^2$ . Some saving in computer time can be achieved by cutting off the weak tail of the potential (see Figure 4) at, say,  $r_c = 2.5 \sigma$ , and shifting the potential by a linear term in  $r$  so that the force goes smoothly to zero at the cutoff. As a result, only nearby molecules are treated as potential collision partners, and the computation time for  $N$  molecules no longer scales with  $N^2$ .

The state of the art of molecular dynamics simulations in the early 2000s is such that with a few hours of CPU time, general-purpose supercomputers can handle around 100,000 molecules. At enormous

moleküllü ele alabilecek gibiydi. Yakın zamanda kat kat daha fazla sayıda molekülün çözüldüğü raporlansa da çok masraflı bir şekilde, mümkün olan paralel makina 10 milyon partikülü simüle edebilmektedir (MIT'den Nicolas G. Hadjiconstantinou; özel görüşme). Moleküler ölççeklerin aşırı küçülmesinden dolayı, 10 milyon şekil, basit moleküllerin sürekli ortam hareketinin başlaması için yeterli bir süre olan 0.001 ms civarında zaman aralıklarında, yaklaşık 0.06  $\mu\text{m}$  (600 Angstrom) doğrusal boyutta sıvı akış alanlarına dönüştürülür. Titreşim modlarını, polimer moleküllerinin tekrar oryantasyonunu ve koloidal partiküllerin çarpışmasını vb. içeren karmaşık molekül ara etkileşimleri için 1 s'lik gerçek zamanı simüle etmek, yüzlerce yıl olarak ölçülen gerçekçi olmayan CPU zamanını gerektirir.

MD benzetimleri, molekül ara etkileşimlerinin sık olmadığı seyreltik gazlar için oldukça yetersizdir.

expense, the fastest parallel machine available can simulate around 10 million particles, although more recent reports of an order-of-magnitude higher number of molecules have been made (MIT's Nicolas G. Hadjiconstantinou; private communication). Because of the extreme diminution of molecular scales, the 10 million figure translates into regions of liquid flow of about 0.06  $\mu\text{m}$  (600 Angstroms) in linear size, over time intervals of around 0.001 ms, enough for continuum behavior to set in for simple molecules. To simulate 1 s of real time for complex molecular interactions, e.g. including vibration modes, reorientation of polymer molecules, collision of colloidal particles, etc., requires unrealistic CPU time measured in hundreds of years.



**Şekil 4.** Tipik Lennard-Jones 6-12 potansiyeli ve ondan kaynaklanan moleküller arası kuvvet alanı. Açık olması adına potansiyel fonksiyonun sadece bir kısmı gösterilmiştir.

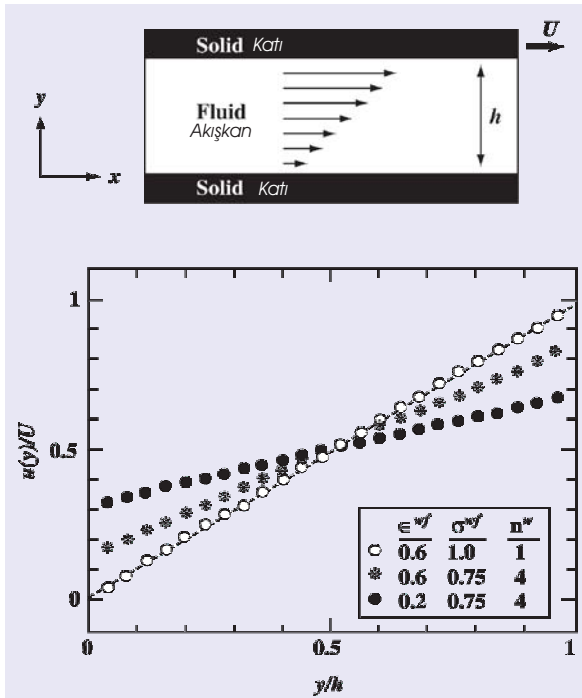
**Figure 4.** Typical Lennard-Jones 6-12 Potential and the intermolecular force field resulting from it. Only a small portion of the potential function is shown for clarity.

Benzetimler, daha ziyade yoğun gaz ve sıvılar için uygundur. Açıkçası, moleküler dinamik benzetimler, sürekli ortam yaklaşımı veya istatistiksel yöntemlerin ilk prensiplerden önemli akışkan miktarlarının hesaplanmasında yetersiz olduğu durumlar için ayrılırlar. Oldukça küçük bir cihazdaki sıvı akışı için kayma sınır koşulu, bundan sonraki bölümde de ele alınacağı gibi, bu tip bir durumu örneklemektedir.

### Tipik Bir MD Sonucu

Thompson ve Troian [50] kayma akış sınır şartının kesme oranına bağlılığını ölçmek için moleküler dinamik benzetimler sağlamışlardır. 1823'de [51], tanıtılan doğrusal Navier sınır şartını hatırlayınız,

$$\Delta u|_w = u_{\text{fluid}} - u_{\text{wall}} = L_s \left. \frac{\partial u}{\partial y} \right|_w \quad (3)$$



**Şekil 5.** Couette akış geometrisinde değişik arayüzey parametrelerindeki hız profilleri. Üç profilin üçü de  $U = \sigma \tau^{-1}$  ve  $h = 24.57 \sigma$  içindir. Kesik çizgi kaymama Couette akışı çözümüdür. Referans [50]'den, izin alınarak çoğaltılmıştır. **Figure 5.** Velocity profiles in a Couette flow geometry at different interfacial parameters. All three profiles are For  $U = \sigma \tau^{-1}$ , and  $h = 24.57 \sigma$ . The dashed line is the no-slip couette-flow solution. Reproduced with permission from reference [50].

MD simulations are highly inefficient for dilute gases where the molecular interactions are infrequent. The simulations are more suited for dense gases and liquids. Clearly, molecular dynamics simulations are reserved for situations where the continuum approach or the statistical methods are inadequate to compute from first principles important flow quantities. Slip boundary condition for a liquid flow in an extremely small device is such a case, as will be discussed in the following section.

### A Typical MD Result

Thompson and Troian [50] provide molecular dynamics simulations to quantify the slip-flow boundary condition dependence on shear rate. Recall the linear Navier boundary condition introduced in 1823, [51],

$$\Delta u|_w = u_{\text{fluid}} - u_{\text{wall}} = L_s \left. \frac{\partial u}{\partial y} \right|_w \quad (3)$$

where  $L_s$  is the constant slip length, and  $(\partial u / \partial y)|_w$  is the strain rate computed at the wall. The goal of Thompson and Troian's simulations was to determine the degree of slip at a solid-liquid interface as the interfacial parameters and the shear rate change. In their simulations, a simple liquid underwent planar shear in a Couette cell as shown in Figure 5. The typical cell measured  $12.51 \times 7.22 \times h$ , in units of molecular length scale  $\sigma$ , where the channel depth  $h$  varied in the range of  $16.71 \sigma - 24.5 \sigma$ , and the corresponding number of molecules simulated ranged from 1,152 to 1,728. The liquid is treated as an isothermal ensemble of spherical molecules. A shifted Lennard-Jones 6-12 potential is used to model intermolecular interactions, with energy and length scales  $\epsilon$  and  $\sigma$ , and cut-off distance  $r_c = 2.2 \sigma$ :



Burada  $L_s$  sabit kayma uzunluğu ve  $(\partial u / \partial y)|_w$  cidardaki gerinme oranıdır. Thompson ve Troian benzetimlerinin amacı, arayüz parametreleri ve kesme oranı değiştiğinde katı-sıvı arayüzündeki kaymanın derecesini belirlemektir. Benzetimlerinde, basit bir sıvı, Şekil 5'te gösterildiği gibi, Couette hücresinde düzlemsel kesmeye maruz kalmıştır. Tipik bir hücre, moleküler uzunluk ölçüsü  $\sigma$  biriminde  $12.51 \times 7.22 \times h$  olarak ölçülür, burada kanal derinliği,  $h$ ,  $16.71\sigma - 24.5\sigma$  aralığında değişir ve karşı gelen benzetimi yapılan molekülerin sayısı 1,152 ile 1,728 aralığındadır. Sıvı, küresel moleküllerin izotermal bir grubu olarak düşünülmektedir.

Moleküller arası etkileşimleri modellemek için, enerji ve uzunluk ölçüleri  $\epsilon$  ve  $\sigma$ , ve  $r_c = 2.2\sigma$  kırma mesafesi ile değiştirilmiş bir Lennard-Jones 6-12 potansiyeli kullanılır.

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

$r > r_c$  için kırılmış potansiyel sıfıra indirgenir.

Sıvı-katı etkileşimi de, enerji ve uzunluk ölçüleri  $\epsilon^{wf}$  ve  $\sigma^{wf}$  kırma mesafesi  $r_c$  ile birlikte, kırılmış Lennard-Jones potansiyeli ile modellenir. Akışkanın denge durumu, yoğunluk sayısı  $n = 0.81\sigma^{-3}$  ve sıcaklık  $T = 1.1 \epsilon / k$  ile karakterize edilen iyi tanımlanmış sıvı fazıdır, burada  $k$  Boltzmann sabitidir.

Thompson ve Troian'ın MD benzetimlerinden [50] elde edilen sürekli rejimdeki hız profilleri değişik arayüz parametreleri,  $\epsilon^{wf}$ ,  $\sigma^{wf}$  ve  $n^w$  için Şekil 5'te gösterilmiştir.  $\epsilon$ ,  $\sigma$  ve  $n$  akışkan parametrelerine karşılık gelen birimler cinsinden gösterilen bu parametreler sırasıyla, sıvı-katı eşleşmesinin dayanımını, arayüzün ısı pürüzlülüğünü ve sıvı-katı yoğunluklarının aynı ölçekte olabilirliklerini karakterize eder. Makroskopik hız

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

The truncated potential is set to zero for  $r > r_c$ .

The fluid-solid interaction is also modeled with a truncated Lennard-Jones potential, with energy and length scales  $\epsilon^{wf}$  and  $\sigma^{wf}$ , and cut-off distance  $r_c$ . The equilibrium state of the fluid is a well-defined liquid phase characterized by number density  $n = 0.81\sigma^{-3}$  and temperature  $T = 1.1 \epsilon / k$ , where  $k$  is the Boltzmann constant.

The steady state velocity profiles resulting from Thompson and Troian's MD simulations [50] are depicted in Figure 5 for different values of the interfacial parameters  $\epsilon^{wf}$ ,  $\sigma^{wf}$  and  $n^w$ . Those parameters, shown in units of the corresponding fluid parameters  $\epsilon$ ,  $\sigma$  and  $n$ , characterize, respectively, the strength of the liquid-solid coupling, the thermal roughness of the interface and the commensurability of wall and liquid densities. The macroscopic velocity profiles recover the expected flow behavior from continuum hydrodynamics with boundary conditions involving varying degrees of slip. Note that when slip exists, the shear rate  $\dot{\gamma}$  no longer equals  $U/h$ . The degree of slip increases (i.e. the amount of momentum transfer at the wall-fluid interface decreases) as the relative wall density  $n^w$  increases or the strength of the wall-fluid coupling  $\sigma^{wf}$  decreases; in other words when the relative surface energy corrugation of the wall decreases. Conversely, the corrugation is maximized when the wall and fluid densities are commensurate and the strength of the wall-fluid coupling is large. In this case, the liquid feels the corrugations in the surface energy of the solid owing to the atomic close-packing. Consequently, there is

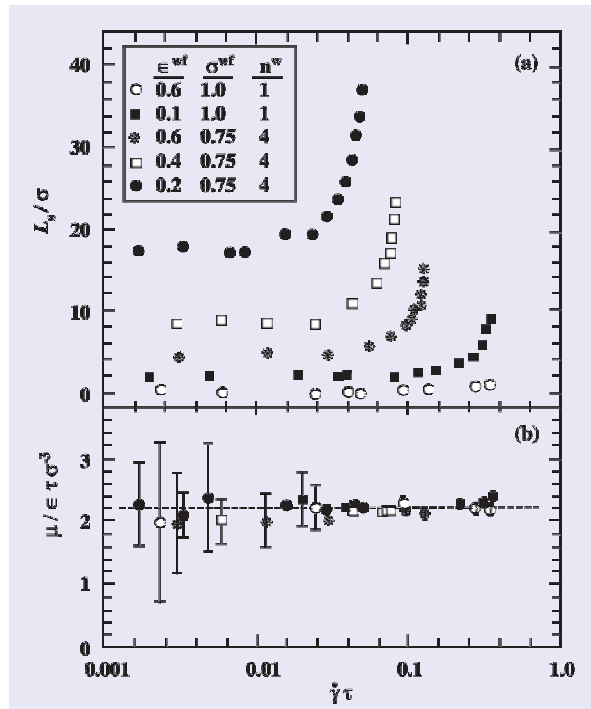
profilleri, kaymanın değişen derecelerini içeren sınır şartları ile sürekli ortam hidrodinamiğinden beklenen akış davranışını karşılar. Kayma olduğunda, kesme oranı  $\dot{\gamma}$ 'nin artık  $U/h$  ye eşit olmadığı not edilmelidir. Bağıl cidar yoğunluğu  $n^w$  artarken veya cidar-akışkan eşleşmesinin dayanımı  $\sigma^{wf}$  azalırken, diğer bir deyişle bağıl yüzey enerji dalgalanması azaldığında, kayma derecesi artar (örneğin, sıvı-katı arayüzünde momentum transfer miktarı azalır. Ters olarak, cidar ve akışkan yoğunlukları eş ölçekli ve cidar-akışkan eşleşmesinin dayanımı büyük olduğunda dalgalanma en büyük hale gelir. Bu durumda sıvı, atomik yakın dizilişten dolayı katının yüzey enerjisindeki dalgalanmaları hisseder. Sonuç olarak, verimli momentum transferi vardır ve kaymama şartı kabul görür ya da aşırı uç durumlarda 'yapışma' sınır şartı devreye girer.

Kayma uzunluğu  $L_s$  ve viskozite  $\mu$ 'deki değişimler, kesme oranının bir fonksiyonu olarak Şekil 6'nın (a) ve (b) kısmında arayüz parametrelerinin beş farklı seti için gösterilmiştir. Couette akışı için, kayma uzunluğu  $\Delta u|_w / \dot{\gamma} = (U/\dot{\gamma} - h)/2$  tanımından hesaplanır. Şekilde kayma uzunluğu, viskozite ve kesme oranı, uzunluk için  $\sigma$ , viskozite için  $\epsilon \tau \sigma^3$  ve zamanın tersi için  $\tau^{-1}$  ile moleküler ölçekler kullanılarak boyutsuzlaştırılır. Akışkanın viskozitesi bütün kesme oranlarında sabittir (Şekil 6b) ve bu Newtonyen davranışı işaret etmektedir. Daha önce de belirtildiği gibi,  $\dot{\gamma} \geq 2\tau^{-1}$  için Newtonyen olmayan davranış beklenir ki bu Thompson ve Troian'ın benzetimlerinde kullanılan kesme oranlarından çok daha yüksektir.

Düşük kesme oranlarında, kayma uzunluğu, Navier modeliyle tutarlılık gösterir, örneğin kesme oranından bağımsızdır. Seçilen arayüz parametreleri aralığı için, limit değeri  $L_s^0$ , 0 dan  $\sim 17\sigma$  ya değişir (Şekil 6a). Genelde kaymanın miktarı, azalan yüzey enerji dalgalanmaları ile artar. En ilginç, yüksek kesme

efficient momentum transfer and the no-slip condition applies, or in extreme cases, a 'stick' boundary condition takes hold.

Variations of the slip length  $L_s$  and viscosity  $\mu$  as functions of shear rate are shown in parts (a) and (b) of Figure 6, for five different sets of interfacial parameters. For Couette flow, the slip length is computed from its definition,  $\Delta u|_w / \dot{\gamma} = (U/\dot{\gamma} - h)/2$ . The slip length, viscosity and shear rate are normalized in the figure using the respective molecular scales for length  $\sigma$ , viscosity  $\epsilon \tau \sigma^3$ , and inverse time  $\tau^{-1}$ . The viscosity of the fluid is constant over the entire range of shear rates (Figure 6b), indicating Newtonian behavior. As indicated earlier, non-Newtonian behavior is expected for  $\dot{\gamma} \geq 2\tau^{-1}$ , well above the shear rates used in Thompson and Troian's simulations.



Şekil 6. Kesme oranının fonksiyonu olarak kayma uzunluğunun ve viskozitenin değişimi. Referans [50]den, izin alınarak çoğaltılmıştır.

Figure 6. Variation of slip length and viscosity as functions of shear rate. Reproduced with permission from reference [50].

oranlarında Navier koşulunun; kayma uzunluğu,  $\dot{\gamma}$  ile hızla arttığına bozulmasıdır. Kayma uzunluğun ayrılması için kritik kesme oranı değeri  $\dot{\gamma}_c$ , yüzey enerji dalgasının azalmasıyla birlikte azalır. Şaşırtıcı bir şekilde, sıvı hala Newtonyen olduğu halde, sınır şartı doğrusal değildir. Seyreltik gazlar için, doğrusal gerilme gerinme ilişkileri ile birlikte, doğrusal kayma şartı ve Navier-Stokes denklemlerinin her ikisi de Knudsen sayısında aynı yaklaşım düzeyinde geçerlidir. Başka bir deyişle, doğrusallıktan sapmanın,  $Kn = 0.1$ 'le aynı değerde gerçekleşmesi beklenir. Buna karşılık sıvılarda, kayma uzunluğunun doğrusal olmayan hale geldiği ve doğrusal gerilme gerinme ilişkisinin bozulduğu kesme oranından çok daha düşük olan kritik bir kesme oranında ıraksadığı görülmektedir. Üstelik sınır şartının doğrusallıktan sapması kademeli değildir daha çok ani ve etkilidir. Kesme kuvvetinin kritik değeri  $\dot{\gamma}_c$ , katının sıvıya artık momentum veremediği noktayı gösterir. Bu ise, farklı malzemeler karşısında kesilen aynı sıvı moleküllerinin değişen miktarda kayma gösterecekleri anlamına gelir.

Yukarıdaki sonuçlara dayanarak, Thompson ve Troian [50] bir katı-sıvı arayüzünde, evrensel bir sınır şartı önermişlerdir. Kayma uzunluğunu,  $L_s$ , kendi asimptotik sınır değeri  $L_s^0$  ile ve kesme oranını,  $\dot{\gamma}$ , kendi kritik değeri  $\dot{\gamma}_c$  ile ölçeklendirmek, Şekil 7'de görüldüğü üzere veriyi tek bir eğride toplar. Veri noktaları aşağıdaki ifade ile iyi bir şekilde tanımlanır.

$$L_s = L_s^0 \left[ 1 - \frac{\dot{\gamma}}{\dot{\gamma}_c} \right]^{-\frac{1}{2}} \quad (5)$$

Kritik kesme oranına yakın doğrusal olmayan davranış, sınır şartının cidardan makroskopik mesafelerde akış davranışına önemli derecede etki edebileceğini ileri sürmektedir. Polimerlerle yapılan deneyler bu gözlemi

At low shear rates, the slip length behavior is consistent with the Navier model, i.e. is independent of the shear rate. Its limiting value  $L_s^0$  ranges from 0 to  $\sim 17\sigma$  for the range of interfacial parameters chosen (Figure 6a). In general, the amount of slip increases with decreasing surface energy corrugation. Most interestingly, at high shear rates the Navier condition breaks down as the slip length increases rapidly with  $\dot{\gamma}$ . The critical shear-rate value for the slip length to diverge,  $\dot{\gamma}_c$ , decreases as the surface energy corrugation decreases. Surprisingly, the boundary condition is nonlinear even though the liquid is still Newtonian. In dilute gases, the linear slip condition and the Navier-Stokes equations, with their linear stress-strain relation, are both valid to the same order of approximation in Knudsen number. In other words, deviation from linearity is expected to take place at the same value of  $Kn=0.1$ . In liquids, in contrast, the slip length appears to become nonlinear and to diverge at a critical value of shear rate well below the shear rate at which the linear stress-strain relation fails. Moreover, the boundary condition deviation from linearity is not gradual but is rather catastrophic. The critical value of shear rate  $\dot{\gamma}_c$  signals the point at which the solid can no longer impart momentum to the liquid. This means that the same liquid molecules sheared against different substrates will experience varying amounts of slip and vice versa.

Based on the above results, Thompson and Troian [50] suggest a universal boundary condition at a solid-liquid interface. Scaling the slip length  $L_s$  by its asymptotic limiting value  $L_s^0$  and the shear rate  $\dot{\gamma}$  by its critical value  $\dot{\gamma}_c$ , collapses the data in the single curve shown in Figure 7. The data points are well described by the relation

$$L_s = L_s^0 \left[ 1 - \frac{\dot{\gamma}}{\dot{\gamma}_c} \right]^{-\frac{1}{2}} \quad (5)$$

doğrulamaktadır [52]. Kayma uzunluğundaki hızlı değişim,  $\dot{\gamma}_c$  'in çevresindeki akışlar için, yüzey üzerindeki küçük değişimlerin görünen sınır şartında büyük dalgalanmalara sebep olabileceğini ortaya koyar. Thompson ve Troian [50] Navier kayma şartının, aslında, doğrusal olmayan ve iraksak olan daha genellenmiş bir evrensel ilişkiden başka bir şey olmadığı sonucuna varmışlardır. Onların ilişkisi, yüksek gerinme oranına sahip bölgelere yaklaşırken değişik derecelerde kaymaya izin verdiğinden, yayılan temas çizgisinde ve köşe akışlarında gerilme tekilliğini azaltmak için bir mekanizma sağlar.

Yukarıdaki sonuçları fiziksel terimler cinsinden ifade etmek için,  $T=288$  K sıcaklığındaki suyu ele alalım. O halde Lennard-Jones potansiyelindeki enerji ölçeği  $\epsilon=3.62 \times 10^{-21}$  J'dir. Su için  $m=2.99 \times 10^{-26}$  kg,  $\sigma=2.89 \times 10^{-10}$  m ve standart sıcaklıkta  $n=3.35 \times 10^{28}$  molekül /m<sup>3</sup> dir. Böylece moleküler zaman ölçeği aşağıdaki şekilde hesaplanabilir.

$$\tau = \left[ m \sigma^2 / \epsilon \right]^{1/2} = 8.31 \times 10^{-13} \text{ s} \quad (6)$$

Şekil 7'de gösterilen üçüncü durum için (boş kareler),  $\dot{\gamma}_c \tau = 0.1$  ve kayma şartının iraksadığı kritik kesme oranı böylece  $\dot{\gamma}_c = 1.2 \times 10^{11} \text{ s}^{-1}$  olur. Böylesine büyük gerinme oranı\*\*, oldukça yüksek hızlara sahip çok küçük kanallarda bulunabilir. Öte yandan,  $17\sigma$  'lık ölçülebilir bir kayma (Şekil 6'da içi dolu daireler) elde etme koşulları ile mikrokannallarda karşılaşılması zor değildir: sıvınsından

The nonlinear behavior close to a critical shear rate suggests that the boundary condition can significantly affect flow behavior at macroscopic distances from the wall. Experiments with polymers confirm this observation [52]. The rapid change in the slip length suggests that for flows in the vicinity of  $\dot{\gamma}_c$ , small changes in surface properties can lead to large fluctuations in the apparent boundary condition. Thompson and Troian [50] conclude that the Navier slip condition is but the low-shear-rate limit of a more generalized universal relationship that is nonlinear and divergent. Their relation provides a mechanism for relieving the stress singularity in spreading contact lines and corner flows, as it naturally allows for varying degrees of slip on approach to regions of higher rate of strain.

To place the above results in physical terms, consider water\* at a temperature of  $T=288$  K. The energy scale in the Lennard-Jones potential is then  $\epsilon=3.62 \times 10^{-21}$  J. For water,  $m=2.99 \times 10^{-26}$  kg,  $\sigma=2.89 \times 10^{-10}$  m, and at standard temperature  $n=3.35 \times 10^{28}$  molecules/m<sup>3</sup>. The molecular time scale can thus be computed,

$$\tau = \left[ m \sigma^2 / \epsilon \right]^{1/2} = 8.31 \times 10^{-13} \text{ s} \quad (6)$$

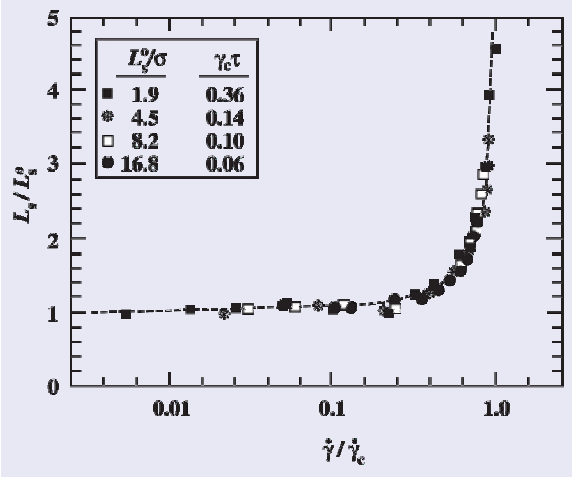
For the third case depicted in Figure 7 (the open squares),  $\dot{\gamma}_c \tau = 0.1$ , and the critical shear rate at which the slip condition diverges is thus  $\dot{\gamma}_c = 1.2 \times 10^{11} \text{ s}^{-1}$ . Such an enormous rate of strain\*\* may be found in extremely small devices having extremely high speeds. On the other hand, the conditions to achieve a measurable slip

\* Su molekülleri yönlü, kısa mesafe kovalent bağlar oluşturan kompleks moleküllerdir; bu nedenle moleküler etkileşimi tanımlamak için Lennard-Jones 'dan daha karmaşık bir potansiyeli gerektirmektedir. Ancak, burada tanımlanan nitel örnek için L-J potansiyelini kullanan Thompson ve Troian'ın [50] hesaba dayalı sonuçlarını kullanıyoruz.

\*\* Water molecules are complex ones, forming directional, short-range covalent bonds; thus requiring a more complex potential than the Lennard-Jones to describe the intermolecular interactions. For the purpose of the qualitative example described here, however, we use the computational results of Thompson and Troian [50] who employed the L-J potential.

\*\*\* Bununla beraber, yüksek moleküler ağırlığına sahip polimerler için  $\dot{\gamma}_c$  'in, burada su için geliştirilen değerden birçok büyüklük sırası daha küçük olabileceğini hatırlayınız.

\*\*\*\* Note however that  $\dot{\gamma}_c$  for high-molecular-weight polymers would be many orders of magnitude smaller than the value developed here for water.



**Şekil 7.** Kesme oranının fonksiyonu olarak kayma uzunluğunun evrensel ilişkisi. Referans [50]'den, izin alınarak çoğaltılmıştır.  
**Figure 7.** Universal relation of slip length as a function of shear rate. Reproduced with permission from reference [50].

dört kat daha büyük katı yoğunluğu ve katı-sıvı etkileşimi için sıvınınin beşte biri enerji ölççeği.

Kayma uzunluğunun sınırlayıcı değeri, kesme oranından bağımsızdır ve su için  $L_s^0 = 17 \sigma = 4.91 \times 10^{-9}$  m olarak hesaplanabilir. 100  $\mu\text{m}$  şaft çapına, 20000 rpm dönüş hızına sahip minimum açıklığı  $h=1$   $\mu\text{m}$  olan bir mikroyatak ele alalım. Bu durumda  $U = 0.1$  m/s ve kaymama kesme oranı  $U/h = 10^5 \text{ s}^{-1}$ 'dir. Henüz hesaplanan limit değerde kayma oluştuğu zaman, kesme oranı ve cidar kayma hızı aşağıdaki şekilde hesaplanır.

$$\dot{\gamma} = \frac{U}{h + 2 L_s^0} = 9.90 \times 10^4 \text{ s}^{-1} \quad (7)$$

$$\Delta u|_w = \dot{\gamma} L_s = 4.87 \times 10^{-4} \text{ m/s} \quad (8)$$

Navier kaymanın bir sonucu olarak, kesme oranı kaymama değerinden %1 oranında azaltılır ve cidarda kayma hızı U'nun yaklaşık %0.5'i kadardır, küçüktür fakat önemsiz değildir.

## 8. KARMA YÖNTEMLER

Hem sıvı ve hem de gaz akışları için, yeterli derecede küçük cihaz ölççeğinde, sürekli ortam ve sanki denge

of  $17\sigma$  (the solid circles in Figure 6) are not difficult to encounter in microdevices: density of solid four times that of liquid, and energy scale for wall-fluid interaction that is one fifth of energy scale for liquid.

The limiting value of slip length is independent of the shear rate and can be computed for water as  $L_s^0 = 17 \sigma = 4.91 \times 10^{-9}$  m. Consider a water microbearing having a shaft diameter of 100  $\mu\text{m}$  and rotation rate of 20,000 rpm and a minimum gap of  $h=1$   $\mu\text{m}$ . In this case,  $U=0.1$  m/s and the no-slip shear rate is  $U/h = 10^5 \text{ s}^{-1}$ . When slip occurs at the limiting value just computed, the shear rate and the wall slip-velocity are computed as follows

$$\dot{\gamma} = \frac{U}{h + 2 L_s^0} = 9.90 \times 10^4 \text{ s}^{-1} \quad (7)$$

$$\Delta u|_w = \dot{\gamma} L_s = 4.87 \times 10^{-4} \text{ m/s} \quad (8)$$

As a result of the Navier slip, the shear rate is reduced by 1% from its no-slip value, and the slip velocity at the wall is about 0.5% of U, small but not insignificant.

## 8. Hybrid Methods

At sufficiently small device scale for both liquid and gas flows, the continuum and the quasi-equilibrium hypotheses eventually fail or at least yield increasingly inaccurate results. This is true even for simple fluids such as air or water where non-equilibrium effects, e.g. velocity slip, temperature jump, non-Newtonian and non-Fourier behavior, are not ordinarily observed in macrodevices operating near room pressure and temperature. Because of widely different molecular spacings, the scale at which the traditional assumptions should no longer be made clearly differs for dilute gases and for dense gases and liquids.

hipotezleri sonunda başarısız olur veya en azından çoğunlukla yanlış sonuçlar verir. Bu ise, oda basıncında ve sıcaklığında çalışan makrocihazlarda sıradan bir şekilde; hız kayması, sıcaklık sıçraması, Newtonyen ve Fourier olmayan davranış gibi dengesizlik etkilerinin gözlenmediği hava ve su gibi basit akışkanlar için bile doğrudur. Çok değişik moleküler aralıklardan dolayı, artık üzerinde geleneksel kabullerin yapılmaması gereken ölçek çok açık bir şekilde seyreltik gazlar ile yoğun gazlar ve sıvılar için farklıdır.

Mikro/nano ölçeklerde güvenilir deneysel veri elde etmenin zorluğunu göz önünde bulundurarak, kaymama Navier-Stokes denklemlerinin, bu kabullerin, ele alınan akışın doğru bir şekilde modellenmesini sağlamada başarısız olduğu ölçeği belirlemek için, kullanılmaması gerekir, çünkü bu açıkça kısır döngüdür. Seyreltik gazların kinetik teorisi güçlü cevaplar sağlamaktadır ve bu bize ilk prensiplerden, kaymama kabulünün, doğrusal gerilme-gerinme ilişkisinin ve sürekli ortam hipotezinin artık geçerli olmadığı ölçekleri belirlememize olanak tanır. Bu üç kabulün, küçülen cihaz boyutlarında başarısız oldukları gibi, yoğunluk azaldığında ve yükseklik arttığında başarısız oldukları da dikkate alınmalıdır. Öte yandan, yoğun gazlar ve sıvılar için, ilk olarak Navier-Stokes sistemin kullanılabilir olup olmadığı sorusunu yanıtlamak, ikinci olarak ise daha doğru bir alternatif sunabilmek için kinetik teori gibi açık bir strateji bulunmamaktadır.

Moleküler dinamik bir benzetim, problem için bir ilk prensip çözümü sunar; fakat gerçek olmayacak derecede küçük yer ve zaman ölçekleri ile sınırlıdır. Örneğin, sabit O-H bağları ve H-O-H açıları ile saf suyun benzetimi için gerekli olan zaman adımı, tekrar çözülmesi için gereken frekans tarafından yazdırılır ve 2 fs mertebesindedir. Gerçek zamanın sadece 1  $\mu$ s sını

Noting the difficulty of obtaining reliable experimental data at the micro/nano scales, the no-slip Navier-Stokes equations themselves should not be used to determine the scale at which those assumptions fail to provide accurate modeling of the flow under consideration, as that is clearly a circular argument. The kinetic theory of dilute gases provides powerful answers, and enables us to determine from first principles the scales at which the no-slip assumption, the linear stress-rate of strain relation, and the continuum hypothesis are no longer valid. Note that those three assumptions fail at progressively smaller device size, much the same as they do fail at progressively lower density or higher altitude. For dense gases and liquids, on the other hand, no such straightforward strategy as the kinetic theory exists, first to answer the question of whether or not the Navier-Stokes system is usable, and second to provide a more accurate alternative.

A molecular dynamics simulation offers a first-principles solution to the problem, but is limited to unrealistically small spatial and temporal scales. For example, the time step needed to simulate pure water with fixed O-H bonds and H-O-H angles is dictated by the fastest frequency needed to be resolved and is of the order of 2 fs. To simulate a mere 1  $\mu$ s of real time, a whopping 500 million time steps are needed, requiring well above one year of CPU time. The physical phenomena investigated in a typical microdevice occur over a broad range of spatial and temporal scales. One way out of this conundrum is to use a hybrid method, where the expensive, high-resolution atomistic model is confined to flow regions in which it is needed, e.g. near strong flow gradients and fluid-solid interfaces,

simüle etmek için 500 milyon zaman adımına ihtiyaç vardır ve bu da 1 yılın çok üzerinde CPU zamanı gerektirir. Tipik bir mikrocihazda araştırılan fiziksel olaylar, geniş bir uzaysal ve zamansal ölççekler aralığında oluşur. Bu şaşırıcı ve zor probleminden bir çıkış yolu, pahalı ve yüksek-çözünürlüklü atomistik modelin kullanımının gerekli bölgelerle, örneğin büyük akış basamaklarının yakınında ve sıvı-katı arayüzünde, sınırlandırıldığı ve geri kalan hesaplama alanında da sürekli ortam modelinin kullanıldığı karma modeli kullanmaktır. Bu tip karma yöntemler, prensipte, katılarda [53-55], seyreltik gazlarda [56-64], ve sıvılarda [65-71] kullanılabilir. Ancak, bütün durumlarda zor olan, doğru eşleştirme metodunu seçmek ve atomistik ve sürekli ortam bölgeleri arasındaki arayüzü doğru bir şekilde eşleştirmektir. Eşleştirme, araştırılan belirli bir akış probleminin fiziğine bağlı olarak yapılır (sürekli ortam akışı, sıkıştırılabilir veya sıkıştırılmaz, sürekli veya geçici rejimde olsa bile) ve aşağı yukarı çözülmüş bir problem olarak ele alınır [69,70]. Diğer taraftan, sürekli ortamdan moleküler altalana bilgi aktarımı, yoğun gazlar ve sıvılar için henüz tatmin edici bir çözüme sahip olmayan çok daha zor bir problemidir. Bu, yoğun gazlar (veya sıvılar) için etkileşen moleküler durumu sürekli ortam bilgisinden, belirsizlik olmadan tanımlama ve yeniden yaratmadaki yetersizliğimizden kaynaklanmaktadır ki bu da dengesizlik dağılım özelliğinin aslında ilk birkaç anıdır (Nicolas G. Hadjiconstantinou; özel iletişim).

Seyreltik gazlar için, tercih edilen atomistik hesaplama, Monte Carlo doğrudan benzetimi (DSMC) adıyla bilinen Boltzmann denklem benzetim aracıdır [69]. Baker ve Hadjiconstantinou [72], sadece termodinamik dengeden sapmanın ele alınmasıyla, bilgisayar zamanından önemli bir kazanç sağlanabileceğini iddia etmektedirler. Bu ise özellikle, Boltzmann çarpışma integralini hesapladığı için

and the continuum model is used in the rest of the computational domain. Such hybrid methods can in principle be used in solids [53-55], dilute gases [56-64], and liquids [65-71]. In all cases, however, the challenge is to choose the correct coupling method and to properly match the interface between the atomistic and continuum regions. Coupling is done based on the physics of the particular flow problem investigated (whether the continuum flow is compressible or incompressible; steady or unsteady), and is considered more or less a solved problem [69,70]. On the other hand, passing information from the continuum to the molecular subdomain is a more subtle problem that at present has no satisfactory solution for dense gases and liquids. This is caused by our inability to unambiguously define and recreate the interacting molecular state for a dense gas (or a liquid) from knowledge of the continuum solution, which is essentially the first few moments of the non-equilibrium distribution function (Nicolas G. Hadjiconstantinou; private communication).

For dilute gases, the atomistic calculation of choice is the Boltzmann equation simulation tool known as the direct simulation Monte Carlo (DSMC) [69]. Baker and Hadjiconstantinou [72] assert that considerable saving in computational time can be achieved by considering only the deviation from thermodynamic equilibrium. This is particularly important in the low Mach number limit where DSMC is slow to converge as it computes the Boltzmann collision integral. In this Mach number limit, important for typical MEMS flows, the deviation from equilibrium is modest and quicker convergence of the statistical sampling of macroscopic observables such as flow

DMSC'nin yakınsamada yavaşladığı düşük Mach sayısı limitinde önemlidir. Tipik MEMS akışları için önemli olan bu Mach sayısı limitinde dengeden sapma makul bir orandadır ve akış hızı gibi makroskopik gözlenebilirlerin istatistiksel numunelerinin hızlı yakınsaması, Baker ve Hadjiconstantinou'nu varyans indirgeme tekniği ile elde edilir.

Sürekli ortam-DSMC karma metotları, yalnızca atomik hesaplamaların engelleyici maliyeti olmaksızın, mikroölçeklerde karmaşık olayların benzetimine izin verir. İki hesaplamasal rejim, uzayın her ikisinde geçerli olduğu kabul edilen bir bölgesi üzerinde eşleştirilir. Sıkıştırılabilir akışlar için, sürekli ortam ve atomistik zaman adımları kıyaslanabilir ve açık zaman integrasyonu bir sonlu-hacim tipi eşleştirme tekniği ile uygulanabilir. Wijesinghe ve diğerleri [70] tarafından önerilen uyarlanabilir ağ ve algoritma iyileştirme (AMAR) şeması, atomistik bir akışkan temsilinin bir sürekli ortam modeline eşleştirilmesi için akı temelli sağlam bir yöntem sunmaktadır. Algoritma, iyileştirmenin en iyi seviyesinde moleküler tanımlamayı getirerek, uyarlanabilir ağ iyileştirmesini genişletir. Bu ise, açık integrasyon moleküler zaman adımında engelleyici olduğundan; sıkıştırılmaz, seyreltik gaz akışları için genellikle mümkün değildir. Schwarz alternatif metodu olarak bilinen, bir alan ayrıştırması yaklaşımına dayalı örtülü bir metot, Wijesinghe ve Hadjiconstantinou [69] tarafından başarıyla gösterilmiştir. Bu birleştirme metodu, eşleştirmeyi sağlamak için akılar yerine durum değişkenlerini kullanır ve değişmez sürekli ortam hesaplamalarında, çok küçük atomistik zaman ve çok daha büyük Courant-Fredrich-Lewy (CFL) kararlılık zaman adımı arasında, zaman ölçeği eşleştirilmesinin bozulmasını sağlar. Sürekli duruma yakınsama, sürekli ortam ve atomistik altalanların sürekli durum çözümleri arasındaki iterasyon vasıtasıyla gerçekleşir. Moleküler

velocity is achieved by Baker and Hadjiconstantinou's variance reduction technique.

Continuum-DSMC hybrid methods allows the simulation of complex phenomena at the microscale without the prohibitive cost of a purely atomistic calculation. The two computational regimes are matched over a region of space where both are assumed to be valid. For compressible flows, the continuum and atomistic time steps are comparable, and explicit time integration with a finite-volume-type coupling technique is feasible. The adaptive mesh and algorithm refinement (AMAR) scheme proposed by Wijesinghe et al. [70] provides a robust flux-based method for coupling an atomistic fluid representation to a continuum model. The algorithm extends adaptive mesh refinement by introducing the molecular description at the finest level of refinement. This is not possible generally for incompressible, dilute gas flows, as explicit integration at the molecular time step becomes prohibitive. An implicit method, based on a domain decomposition approach known as the Schwarz alternating method, has been successfully demonstrated by Wijesinghe and Hadjiconstantinou [69]. This coupling method uses state variables instead of fluxes to achieve the matching, and provides time-scale decoupling between the very small atomistic time and the much larger Courant-Friedrich-Lewy (CFL) stability time step in the stiff continuum calculations. Convergence to the global problem steady state is reached via iteration between the steady state solutions of the continuum and atomistic subdomains. Imposition of the boundary conditions on the molecular simulations is accomplished by extending the molecular subdomain



benzetimlerde sınır şartlarının uygulanması; moleküler altalanın, sürekli ortam altalanında Navie-Stokes akış alanı tarafından parametrik hale getirilen Chapman-Enskog dağılımının kullanılması ile üretilen moleküllerin olduğu, bir depo bölgesine doğru genişletilmesi ile yapılır.

Yoğun gazlar ve sıvılar için, Navier-Stokes denklemleri akış yığnında ayrıklaştırılırken, moleküler dinamik benzetimler sabit veya hareketli duvarların çok yakınında kullanılır [70]. Daha önceden de bahsedildiği üzere, böyle karma benzetimlerde göze çarpan zorluk, bilginin sürekli ortamdan moleküler altalana aktarılmasıdır. Basitçe biz, sürekli ortam çözüm bilgisinden, sıvının etkileşen moleküler durumunu tekrar oluşturmayı ve belirsizlik olmadan tanımlamayı yapamıyoruz. Bu durumda, sezgisel yaklaşımlar elbette ki ilk-prensip stratejilerinin yerini almaktadır. Çok kısa zaman önce, Werder ve diğerleri [71] N-S denklemlerinin, bir sonlu hacim ayrıklaştırılmasının bir MD benzetimi ile birleştirilmesini önermiştir. Bu iki ifade, Shwartz alternatif yöntemi kullanılarak bir alan ayırma formülasyonunda birleştirilmiştir. Yöntem akıların doğrudan uygulanmasından kaçınır fakat örtüşme bölgesinde aktarma katsayılarının eşleştirilmesiyle akı sürekliliğini garanti eder. Periyodik olmayan hız sınır şartları, sürekli ortamdan atomistik alana; verimli bir sınır potansiyeline, tutarlı gövde kuvvetlerine, parçacak ekleme algoritmasına ve ayna gibi duvarlara dayanarak uygulanmıştır. Bu strateji iteratif olarak atomistik ve sürekli ortam alanlarında tutarlı sonuçlar bulmaktadır. Bir örtüşme bölgesi, durum (Dirichlet) sınır şartları formunda iki altalan arasındaki bilgi alışverişini sezgisel olarak kolaylaştırır. Başarılı Schwarz iterasyonlarında yakınsama; sürekli ortam ve atomistik altalanlardaki çözümlerle, örtüşme bölgesindekiler aynı olduğunda sağlanır. Werder ve diğerlerinin [71] ilginç tekniği, karbon nanotüpünün

through the artifice of a reservoir region in which molecules are generated using a Chapman-Enskog distribution that is parametrized by the Navier-Stokes flow field in the continuum subdomain.

For dense gases and liquids, molecular dynamics simulations are used in the very near proximity of rigid or compliant walls, while the Navier-Stokes equations are discretized in the bulk of the flow [70]. As mentioned earlier, the outstanding difficulty in such hybrid simulation is passing the information from the continuum to the molecular subdomain. We are simply unable to unambiguously define and recreate the liquid interacting molecular state from knowledge of the continuum solution. In that case, heuristic approaches inevitably replace first-principles strategies. Very recently, Werder et al. [71] proposed an MD simulation coupled to a finite volume discretization of the N-S equations. The two descriptions were combined in a domain decomposition formulation using the Schwarz alternating method. The method avoids direct imposition of fluxes but ensures flux continuity by matching the transport coefficients in the overlap region. Non-periodic velocity boundary conditions were imposed from the continuum to the atomistic domain based on an effective boundary potential, consistent body forces, particle insertion algorithm and specular walls. The strategy iteratively finds a consistent solution in the atomistic and continuum domains. An overlap region heuristically facilitates information exchange between the two subdomains in the form of state (Dirichlet) boundary conditions. Convergence is reached in successive Schwarz iterations when the solutions in the continuum and atomistic subdomains become identical in the overlap region. Werder et al.'s [71] novel technique was applied to the flow of liquid argon around a carbon nanotube and the

çevresindeki sıvı argon akışına uygulanmış ve ortaya çıkan akış alanının tamamen atomistik olan bir referans çözümümüyle uyuşmakta olduğu görülmüştür.

## 9. YÜZEY OLAYLARI

1 m karakteristik uzunluğa sahip bir makine için yüzey-hacim oranı  $1 \text{ m}^{-1}$  iken,  $1 \mu\text{m}$  ebadında bir MEMS aygıtında bu oran  $10^6 \text{ m}^{-1}$ 'dir. Küçük cihazın kütlesine göre yüzey alanındaki milyon katlık artış, yüzey boyunca kütle, momentum ve enerji aktarımına önemli ölçüde etki eder. Yüzey etkilerinin çok küçük cihazlarda baskın olduğu açıktır. MEMS akışlarındaki yüzey sınır şartlarından yukarıda bahsedilmiştir ve [26] ve [73] numaralı referanslarda atıf yapılan geniş literatürde tartışılmıştır. Mikrocihazlarda, sıvı-katı arayüzünde ölçülebilir kayma hızı ve sıcaklık sıçramasının mümkün olabileceği gösterilmiştir. Makromoleküllü polimerler gibi sıvılar minikanallarda bile kayabilirler (mm ölçek) [25]. Bu bölümde, MEMS'lere özgü büyük yüzey/hacim oranının diğer alt kollarını gösteriyoruz ve yüzey kuvvetlerine moleküler bir bakış açısı sağlıyoruz.

Mikrocihazlarda, hem ışınım hem de taşınım ısı kaybı/kazancı çok büyük yüzey/hacim oranı ile artırılır. Karakteristik uzunluğu  $L_s$  olan bir cihaz düşünelim. Taşınım ısı transfer oranını hesaplamak için ortalama kapasitans metodunu kullanmak, örneğin eğer Biot sayısı ( $\equiv h L_s / \kappa_s$ ;  $h$ , akışkanın ısı transfer katsayısını ve  $\kappa_s$ , katının termal iletkenliğini temsil etmektedir) 0.1'den küçük ise uygundur. Küçük  $L_s$ , küçük Biot sayısını ve katıda neredeyse düzgün dağılmış bir sıcaklık dağılımını ifade eder. Bu yaklaşım içerisinde, çevredeki akışkana olan ısı kaybı

$$\rho_s L_s^3 c_s \frac{dT}{dt} = -h L_s^2 (T_s - T_\infty) \quad (9)$$

şeklinde verilir, burada,  $\rho_s$  ve  $c_s$  sırasıyla katının

resulting flow field was found to agree with a fully atomistic reference solution.

## 9. SURFACE PHENOMENA

The surface-to-volume ratio for a machine with a characteristic length of 1 m is  $1 \text{ m}^{-1}$ , while that for a MEMS device having a size of  $1 \mu\text{m}$  is  $10^6 \text{ m}^{-1}$ . The million-fold increase in surface area relative to the mass of the minute device substantially affects the transport of mass, momentum and energy through the surface. Obviously surface effects dominate in small devices. The surface boundary conditions in MEMS flows have been discussed above and in the extensive literature cited in References [26] and [73]. In microdevices, it has been shown that it is possible to have measurable slip-velocity and temperature jump at a solid-fluid interface. Liquids such as macromolecule polymers would slip even in minichannels (mm scale) [25]. In this section, we illustrate other ramifications of the large surface-to-volume ratio unique to MEMS, and provide a molecular viewpoint to surface forces.

In microdevices, both radiative and convective heat loss/gain are enhanced by the huge surface-to-volume ratio. Consider a device having a characteristic length  $L_s$ . Use of the lumped capacitance method to compute the rate of convective heat transfer, for example, is justified if the Biot number ( $\equiv h L_s / \kappa_s$ , where  $h$  is the convective heat transfer coefficient of the fluid, and  $\kappa_s$  is the thermal conductivity of the solid) is less than 0.1. Small  $L_s$  implies small Biot number, and a nearly uniform temperature within the solid. Within this approximation, the rate at which heat is lost to the surrounding fluid is given by

$$\rho_s L_s^3 c_s \frac{dT}{dt} = -h L_s^2 (T_s - T_\infty) \quad (9)$$

yoğunluğu ve özgül ısıdır ve  $T_s$  katının (düzgün dağılmış) sıcaklığı,  $T_\infty$  çevredeki akışkanın sıcaklığıdır. Yukarıdaki denklemin çözümü anlamsızdır ve sıcak bir yüzeyin sıcaklığı, bir  $T_i$  başlangıç sıcaklığından üstel olarak azalır.

$$\frac{T_s(t) - T_\infty}{T_i - T_\infty} = \exp\left[-\frac{t}{\tau}\right] \quad (10)$$

burada zaman sabiti  $\tau$  aşağıdaki gibi verilir:

$$\tau = \frac{\rho_s L_s^3 c_s}{h L_s^2} \quad (11)$$

Küçük cihazlar için, katının soğuması için gereken zaman nispeten küçüktür. Açık olarak, yüzey-hacim oranındaki milyon katlık artış, ısı kaybında orantılı bir artış anlamına gelmektedir. Benzer ölçekleme tartışmaları kütle transferi için de yapılabilir.

Küçülen ölçeğin diğer bir etkisi, yüzey kuvvetlerinin öneminin artması ve gövde kuvvetlerinin öneminin azalmasıdır. Biyolojik çalışmalara dayanarak, Went [74] sınır uzunluk ölçeğinin yaklaşık 1 mm olduğu sonucuna varmıştır. Bunun altında, yüzey kuvvetleri, yerçekimi kuvvetlerinden daha baskındır. 10 mm kalınlığında bir kağıt düzgün bir yüzeye yerleştirildiğinde düşecektir, 0.1 mm kalınlığındaki bir kağıt ise yapışır. Deneyin! MEMS uygulamalarında yapışma çok büyük bir problemdir. Uzun, ince polisikon kirşler ve geniş, ince dişli sürücüler gibi bazı yapılar, kendi alt malzemelerine yapışma gibi bir eğilimine sahiptirler ve bu yüzden tasarlandıkları gibi çalışmada başarısız olurlar [75, 76].

Görelî hareketteki iki katı arasındaki geleneksel kuru sürtünme, genellikle hareket eden cihaz ağırlığının bir bileşeni olan normal güç ile orantılıdır. Sürtünme, temas-

where  $\rho_s$  and  $c_s$  are respectively the density and specific heat of the solid,  $T_s$  is its (uniform) temperature, and  $T_\infty$  is the ambient fluid temperature. Solution of the above equation is trivial, and the temperature of a hot surface drops exponentially with time from an initial temperature  $T_i$ ,

$$\frac{T_s(t) - T_\infty}{T_i - T_\infty} = \exp\left[-\frac{t}{\tau}\right] \quad (10)$$

where the time constant  $\tau$  is given by:

$$\tau = \frac{\rho_s L_s^3 c_s}{h L_s^2} \quad (11)$$

For small devices, the time it takes the solid to cool down is proportionally small. Clearly, the million-fold increase in surface-to-volume ratio implies a proportional increase in the rate at which heat escapes. Identical scaling arguments can be made regarding mass transfer.

Another effect of the diminished scale is the increased importance of surface forces and the waning importance of body forces. Based on biological studies, Went [74] concludes that the demarcation length scale is around 1 mm. Below that, surface forces dominate over gravitational forces. A 10-mm piece of paper will fall down when gently placed on a smooth, vertical wall, while a 0.1-mm piece will stick. Try it! Stiction is a major problem in MEMS applications. Certain structures such as long, thin polysilicon beams and large, thin comb drives have a propensity to stick to their substrates and thus fail to perform as designed [75,76].

Conventional dry friction between two solids in relative motion is proportional to the normal force which is usually a component of the moving device weight. The friction is

yüzey alanından bağımsızdır çünkü van der Waals çekim kuvvetleri makroskopik cihazın ağırlığına göre ihmal edilebilir. MEMS uygulamalarında, iki yüzey arasındaki moleküller arası çekim kuvvetleri önemlidir ve yapışma cihaz kütlesinden bağımsız, fakat yüzey alanı ile orantılıdır. İlk mikromotor-büyük elektrik akımı verilmesine rağmen-çalışmamıştır, ancak 100 mikron rotor ve malzeme arasındaki yüzey alanı, rotor yüzeyine küçük çukurlar oluşturularak, önemli ölçüde azaltıldığında çalışmıştır [77-79].

Bildiğim kadarıyla, mikroakışlar için araştırılmamış yüzey etkilerine son bir örnek, cidarla - sınırlandırılmış gaz akışlarında emilmiş tabakadır. Bir gazın boru içine aktığı zaman gaz moleküllerinin katı yüzeye van der Waals ve diğer çekim kuvvetleri tarafından çekildiği bilinen bir gerçektir [8, 80]. Gaz moleküllerinin potansiyel enerjisi yüzeye ulaştığı zaman düşer. Emilmiş tabaka, katının termal titreşimlerini paylaşır ve gaz molekülleri ancak enerjileri en düşük potansiyel enerjiyi geçtiği zaman kaçabilirler. Denge durumunda, katının en azından bir kısmı emilmiş gaz moleküllerinden oluşan bir monomoleküler tabaka ile kaplı olacaktır. Moleküler türler, önemli kısmi basınç ile birlikte – buhar basınçlarına oranla – yerel olarak iki veya daha fazla molekül kalınlığında katman oluşturabilirler. Örneğin STP altında, kuru hava ve su buharı karışımının akışını ele alalım. Suyun emilim enerjisi, azot ve oksijeninkinden çok daha büyüktür ve bu su moleküllerinin potansiyel enerji kapanından kaçmasını güçleştirir. Bu da emilmiş tabakadaki su moleküllerinin ömrünün hava moleküllerinden çok daha fazla olduğu (gerçekte 60,000 kat) anlamına gelir ve sonuç olarak, ince yüzey tabakası çoğunlukla

independent of the contact-surface area because the van der Waals cohesive forces are negligible relative to the weight of the macroscopic device. In MEMS applications, the cohesive intermolecular forces between two surfaces are significant and the stiction is independent of the device mass but is proportional to its surface area. The first micromotor did not move – despite large electric current through it–until the contact area between the 100-micron rotor and the substrate was reduced significantly by placing dimples on the rotor's surface [77-79].

One last example of surface effects that to my knowledge has not been investigated for microflows is the adsorbed layer in gaseous wall-bounded flows. It is well known [8,80] that when a gas flows in a duct, the gas molecules are attracted to the solid surface by the van der Waals and other forces of cohesion. The potential energy of the gas molecules drops on reaching the surface. The adsorbed layer partakes the thermal vibrations of the solid, and the gas molecules can only escape when their energy exceeds the potential energy minimum. In equilibrium, at least part of the solid would be covered by a monomolecular layer of adsorbed gas molecules. Molecular species with significant partial pressure – relative to their vapor pressure – may locally form layers two or more molecules thick. Consider, for example, the flow of a mixture of dry air and water vapor at STP. The energy of adsorption of water is much larger than that for nitrogen and oxygen, making it more difficult for water molecules to escape the potential energy trap. It follows that the life time of water molecules in the adsorbed layer significantly exceeds that for the air molecules (by 60,000 folds, in fact) and,

sudan oluşacaktır. Örneğin, çevre havadaki su buharının oranı 1: 1000 ise (çok düşük nemlilik seviyesi), emilen katmandaki suyun havaya oranı 60:1 olacaktır. Katı yüzeyin mikroskopik pürüzlülüğü, yeterince güçlü içbükey eğriliğe sahip kısımlar boyunca suyun kısmi yoğuşmasına sebep olur. Böylece, kuru olmayan hava akışlarına maruz yüzeyler esas olarak sıvı su yüzeyleridir. Birçok uygulamada, bu ince emilmiş tabaka, sıvı suyun yoğunluk ve viskozitesi havanınkinden çok çok büyük olmasına rağmen, akış dinamikleri üzerinde az etkiye sahiptir. Ancak MEMS uygulamalarında, tabakanın kalınlığı, karakteristik akış boyutunun önemsiz bir kısmı olmayabilir ve su tabakası gaz akışlarına ölçülebilir derecede bir etkiye sahip olabilir. Bu konuyu araştırmak için moleküler dinamik ve sürekli ortam benzetimlerinin karma yaklaşımları ya da MD-Monte Carlo benzetimleri kullanılabilir.

Majumdar ve Mezic'in [81,82], son zamanlarda, katı yüzeyler üzerindeki ince sıvı filmlerinin damlacıklarının kararlılığı ve kopması üzerine çalıştıklarına dikkat edilmelidir. Bir sıvı filminin serbest enerjisinin; van der Waals, elektrostatik, hidrasyon ve elastik gerinme etkileşimlerinden kaynaklanan, doğrusal olmayan hacimsel moleküller arası kuvvetler kadar, bir yüzey gerilmesi bileşeninden oluştuğunu belirtmişlerdir. Slika ve mika gibi hidrofilik yüzeyler üzerindeki su filmleri için, Majumdar ve Mezic [81] denge film kalınlığını, çevre-hava bağıl nemlerinin çok geniş aralığı için, yaklaşık 0.5 nm (2 monotabaka) olarak tahmin etmişlerdir. Ancak nemlilik %100' e yaklaştığı zaman denge kalınlığı keskince büyümektedir.

Majumdar ve Mezic'in [81, 82] sonuçları birçok

as a result, the thin surface layer would be mostly water. For example, if the proportion of water vapor in the ambient air is 1:1,000 (i.e. very low humidity level), the ratio of water to air in the adsorbed layer would be 60:1. Microscopic roughness of the solid surface causes partial condensation of the water along portions having sufficiently strong concave curvature. So, surfaces exposed to non-dry airflows are mainly liquid water surfaces. In most applications, this thin adsorbed layer has little effect on the flow dynamics, despite the fact that the density and viscosity of liquid water are far greater than those for air. In MEMS applications, however, the layer thickness may not be an insignificant portion of the characteristic flow dimension and the water layer may have a measurable effect on the gas flow. A hybrid approach of molecular dynamics and continuum flow simulations or MD-Monte Carlo simulations may be used to investigate this issue.

It should be noted that recently, Majumdar and Mezic [81,82] have studied the stability and rupture into droplets of thin liquid films on solid surfaces. They point out that the free energy of a liquid film consists of a surface tension component as well as highly nonlinear volumetric intermolecular forces resulting from van der Waals, electrostatic, hydration and elastic strain interactions. For water films on hydrophilic surfaces such as silica and mica, Majumdar and Mezic [81] estimate the equilibrium film thickness to be about 0.5 nm (2 monolayers) for a wide range of ambient-air relative humidities. The equilibrium thickness grows very sharply, however, as the relative humidity approaches 100%.

soruyu açığa çıkarır. Üzerinde hava akışı olduğunda su filmlerinin kararlılık karakteristikleri nelerdir? Bu su filmi, mikroboruda hava akışı için uyum katsayısını etkiler mi? Modern Winchester-tipi bir sabit diskte, dönen disk yüzeyinin 50 nm üzerinde bir okuma/yazma kafası gezinir. Kafa ve disk birlikte aralarındaki hava tabakası ile bir kayar yatak oluşturur. Emilmiş su tabakasının artık 'ince' olmadığı belirli bir günde bilgisayar performansı yüksek bağıl nemden ters olarak etkilenir miydi? Bir mikroboru suyu çekerse, katı cidarlar tarafından emilen su filmi, su akışının etkili viskozitesini etkiler mi? Elektrostatik kuvvetler neredeyse 1 mikron (Debye uzunluğu) kadar yayılabilirler ve bu uzunluğun çok fazla pH-bağımlı olduğu bilinir. Su akışı, yüzey ve sıvı kimyası tarafından etkilenir mi? Bu mikrokanallarda daha önceden bahsedilen sıvı akışlarının çelişen sonuçlarını açıklayabilir mi?

Yukarıdaki birkaç örnek küçük cihazlardaki yüzey etkilerinin önemini göstermektedir. Sürekli ortam bakış açısından, sıvı-katı arayüzündeki kuvvetler, yerdeğiştirme mesafesinin sıfıra yaklaşması eğilimine izin verildiğinde, akışkan içinde yerdeğiştiren bir paralel temel alan üzerine etki eden basınç ve viskoz kuvvetlerin limitleridir. Moleküler bakış açısından, bütün makroskopik yüzey kuvvetleri, büyük ölçüde moleküler arası kuvvetler ile ortaya çıkar, bu konu Israelachvili [83] nin tarafından yazılan kitapta ve bu kitaptaki referanslarda geniş olarak ele alınmıştır. Burada, moleküler bakış açısına kısa bir giriş yapacağız. Doğadaki 4 kuvvet; nötronlar, protonlar, elektronlar vb. arasındaki etkileşimi tanımlayan (1) güçlü ve (2) zayıf kuvvetler; (3) atomlar ve moleküller arasındaki elektromanyetik kuvvetler; ve (4) kütleler arası çekim kuvvetleridir. İlk iki kuvvetin hareket alanı yaklaşık  $10^{-5}$  nm

Majumdar and Mezić's results [81,82] open many questions. What are the stability characteristics of their water film in the presence of airflow above it? Would this water film affect the accommodation coefficient for microduct airflow? In a modern Winchester-type hard disk, the drive mechanism has a read/write head that floats 50 nm above the surface of the spinning platter. The head and platter together with the air layer in between form a slider bearing. Would the computer performance be affected adversely by the high relative humidity on a particular day when the adsorbed water film is no longer 'thin'? If a microduct hauls liquid water, would the water film adsorbed by the solid walls influence the effective viscosity of the water flow? Electrostatic forces can extend to almost 1 micron (the Debye length), and that length is known to be highly pH-dependent. Would the water flow be influenced by the surface and liquid chemistry? Would this explain the contradictory experimental results of liquid flows in microducts discussed earlier?

The few examples above illustrate the importance of surface effects in small devices. From the continuum viewpoint, forces at a solid-fluid interface are the limit of pressure and viscous forces acting on a parallel elementary area displaced into the fluid, when the displacement distance is allowed to tend to zero. From the molecular point of view, all macroscopic surface forces are ultimately traced to intermolecular forces, which subject is extensively covered in the book by Israelachvili [83] and references therein. Here we provide a very brief introduction to the molecular viewpoint. The four forces in nature are (1) the strong and (2) weak forces describing the interactions between neutrons, protons,

kadardır ve bu yüzden MEMS uygulamalarında her ikisi de bizleri fazla ilgilendirmez. Elektromanyetik kuvvetler atomlararası mesafeler mertebesindeki (0.1-0.2 nm) küçük mesafelere göre büyük olan uzaklıkta etkilidir. Kısa aralıktaki moleküllerarası kuvvetlerden, daha uzun aralıktaki etkiler –birkaç mertebe daha büyük– çıkabilir ve çıkar. Örneğin kılcal borularda sıvının yükselişi, kumaştan yağlı lekeyi çıkartmak için deterjan moleküllerinin hareketi, moleküler arası etkileşimin bir sonucudur. Yer çekim kuvvetleri mesafenin ikinci kuvveti ile azalır, moleküler arası kuvvetler daha hızlı, tipik olarak yedinci kuvveti ile azalır. Böylece, yıldızlar ve gezegenler gibi büyük cisimler astronomik mesafeler üzerinden çekim ile hala güçlü bir şekilde etkileşirlerken; moleküler arası mesafe birkaç moleküler çapı geçtiğinde, çekim kuvvetleri ihmal edilebilir.

Elektromanyetik kuvvetler, katı ve sıvılarda, atom ve molekülleri bir arada tutan bütün moleküller arası etkileşimlerin ve çekim kuvvetlerinin kaynağıdır. Bunlar şu şekilde sınıflandırılabilir: (1) Yükler arasındaki Coulomb kuvvetinden, yükler arasındaki etkileşimlerden, kalıcı çift kutuplardan, dört kutuplulardan vb. gelen tamamıyla elektrostatik kuvvetler; (2) hemen yakındaki yüklerin elektrik sahası ve kalıcı çift kutuplar vasıtasıyla atomlarda ve moleküllerde oluşan çift kutup momentlerinden gelen kutuplaşma kuvvetleri, (3) kovalent ya da kimyasal bağları oluşturan ve kısa mesafelerde birbirlerini çeken kuvvetleri dengeleyen itici düzenler ya da değişim etkileşimlerine neden olan kuantum mekanik kuvvetler. Kuantum mekaniğinin Hellmen-Feynman teoremi, elektron bulutlarının uzaysal dağılımı, Schrödinger denkleminin çözümüyle bir kere belirlendiğinde, bütün moleküller arası güçleri Coulomb kuvvetlerine indirgeyerek, moleküller

electrons, etc.; (3) the electromagnetic forces between atoms and molecules; and (4) gravitational forces between masses. The range of action of the first two forces is around  $10^5$  nm, and hence neither concerns us overly in MEMS applications. The electromagnetic forces are effective over a much larger though still small distance on the order of the inter-atomic separations (0.1-0.2 nm). Effects over longer range-several orders of magnitude longer-can and do rise from the short-range intermolecular forces. For example, the rise of liquid column in capillaries and the action of detergent molecules in removing oily dirt from fabric are the result of intermolecular interactions. Gravitational forces decay with the distance to second power, while intermolecular forces decay much quicker, typically with the seventh power. Cohesive forces are therefore negligible once the distance between molecules exceeds few molecular diameters, while massive bodies like stars and planets are still strongly interacting, via gravity, over astronomical distances.

Electromagnetic forces are the source of all intermolecular interactions and the cohesive forces holding atoms and molecules together in solids and liquids. They can be classified into (1) purely electrostatic arising from the Coulomb force between charges, interactions between charges, permanent dipoles, quadrupoles, etc.; (2) polarization forces arising from the dipole moments induced in atoms and molecules by the electric field of nearby charges and permanent dipoles; and (3) quantum mechanical forces that give rise to covalent or chemical bonding and to repulsive steric or exchange interactions that balance the attractive forces at very short distances. The Hellman-Feynman theorem of quantum mechanics states that once the spatial distribution of the electron clouds has been determined

arası güçler klasik elektrostatik temelinde hesaplanabileceğini ifade eder. Ancak moleküller arası kuvvetlerin, moleküllerin hepsinin nötr olması durumunda bile var olduğunu unutmayın. Schrödinger denkleminin genel atomlar ve moleküller için çözümleri elbette kolay değildir ve moleküller arası kuvvetleri temsil etmek için alternatif modellemeler aranmaktadır. İtici kuvvetler ya bir kuvvet ya da bir üstel potansiyel ile temsil edilirken, van der Waals çekim kuvvetleri mesafenin 1/6'ncı kuvveti ile değişen bir potansiyel ile temsil edilirler.

İki molekül arasında yaygın olarak kullanılan genelleştirilmiş Lennard-Jones (L-J 6-12) potansiyel çiffi

$$V_{ij}(r) = 4\epsilon \left[ c_{ij} \left( \frac{r}{\sigma} \right)^{-12} - d_{ij} \left( \frac{r}{\sigma} \right)^{-6} \right] \quad (12)$$

ile verilir, burada  $V_{ij}$ ,  $i$  ve  $j$  parçacıkları arasındaki potansiyel enerjisi;  $r$ , iki molekül arasındaki uzaklığı;  $\sigma$  ve  $\epsilon$  sırasıyla karakteristik enerji ve uzunluk ölçeklerini; ve  $c_{ij}$  ve  $d_{ij}$  söz konusu sıvı ve katı kombinasyonları için seçilen parametreleri temsil etmektedir. Denklemin sağ tarafındaki ilk terim güçlü itici kuvvettir ve iki molekül, moleküler uzunluk ölçeğine kıyasla çok yakın olduklarında hissedilir. Bu kısa aralıktaki itme, moleküllerin fiziksel uzayda üst üste gelmelerini önler. İkinci terim daha zayıf olan van der Waals çekim kuvvetleridir ve moleküller yeterli derecede yakın olduklarında ( $\sigma$  nın birkaç katı) başlar. Potansiyelin negatif kısmı, nötr, küresel olarak simetrik parçacıkların çekici kutuplaşma etkileşimini temsil eder. Potansiyelin itici kısmının kuvveti ampirik olarak bulunurken, bu terimle ilişkili olan 6. dereceden kuvvet, kuantum mekaniği değerlendirilmelerinden hesaplanabilir. Lennard-Jones

by solving the appropriate Schrödinger equation, intermolecular forces may be calculated on the basis of classical electrostatics, in effect reducing all intermolecular forces to Coulombic forces. Note however that intermolecular forces exist even when the molecules are totally neutral. Solutions of the Schrödinger equation for general atoms and molecules are not easy of course, and alternative modeling are sought to represent intermolecular forces. The van der Waals attractive forces are usually represented with a potential that varies as the inverse-sixth power of distance, while the repulsive forces are represented with either a power or an exponential potential.

A commonly used potential between two molecules is the generalized Lennard-Jones (L-J 6-12) pair potential given by

$$V_{ij}(r) = 4\epsilon \left[ c_{ij} \left( \frac{r}{\sigma} \right)^{-12} - d_{ij} \left( \frac{r}{\sigma} \right)^{-6} \right] \quad (12)$$

where  $V_{ij}$  is the potential energy between two particles  $i$  and  $j$ ,  $r$  is the distance between the two molecules,  $\sigma$  and  $\epsilon$  are respectively characteristic energy and length scales, and  $c_{ij}$  and  $d_{ij}$  are parameters to be chosen for the particular fluid and solid combinations under consideration. The first term in the right-hand side is the strong repulsive force that is felt when two molecules are at extremely close range comparable to the molecular length scale. That short-range repulsion prevents overlap of the molecules in physical space. The second term is the weaker, van der Waals attractive force that commences when the molecules are sufficiently close (several times  $\sigma$ ). That negative part of the potential represents the attractive polarization interaction of neutral, spherically symmetric particles. The power of 6



potansiyeli uzun mesafelerde sıfırdır,  $\sigma$ 'dan biraz büyük  $r$ 'de zayıf negatif doruğa ulaşır,  $r = \sigma$ , da sıfır olur,  $r \rightarrow 0$  ve iken sonsuzdur.

Bu potansiyelden elde edilen kuvvet alanı aşağıdaki şekilde verilir:

$$F_{ij}(r) = -\frac{\partial V_{ij}}{\partial r} = \frac{48\varepsilon}{\sigma} \left[ c_{ij} \left( \frac{r}{\sigma} \right)^{-13} - \frac{d_{ij}}{2} \left( \frac{r}{\sigma} \right)^{-7} \right] \quad (13)$$

Tipik bir L-J 6-12 potansiyeli ve kuvvet alanı daha önce Şekil 4'de  $c=d=1$  için gösterilmişti. Minimum potansiyel  $V_{min} = -\varepsilon$  denge durumuna (sıfır kuvvete) karşılık gelir ve  $r = 1.12 \sigma$ 'da ortaya çıkar. Çekici van der Waals'in minimum potansiyele katkısı  $-2\varepsilon$  iken itici enerji katkısı  $+\varepsilon$ 'dir. Bu yüzden ters 12. üs itici kuvvet terimi dengedeki bağ enerjisinin mukavemetini %50 azaltır.

L-J potansiyeli, moleküler dinamik benzetimlerinde, yoğun gaz veya sıvı molekülleri ile akışkan ve katı molekülleri arasındaki etkileşimi modellemek için yaygın olarak kullanılır. Daha önce de belirtildiği gibi, bu tip bir potansiyel, su gibi molekülleri yönlü kovalent bağlar oluşturan karmaşık maddeler için uygun değildir. Sonuç olarak su için olan MD benzetimleri çok daha karmaşıktır.

## 10. SONUÇ

Akışkan akışlarının klasik Navier-Stokes modeli, kaymama sınır şartı ile, yönetici parametrelerin sadece belirli bir aralığında çalışır. Bu model temel olarak üç şart talep eder: (1) Kuantum mekaniği veya bağıl mekanik değil, Newtonyen mekaniği kullanılır; (2) Akışkan sürekli ortamdır, bu tipik olarak, hissedilir makroskopik değişimlerin gerçekleştiği en küçük hacimde, genelde 1 milyondan fazla molekül olduğunda sağlanır. Bu makrocihazlardaki seyreltilmiş gaz akışları veya nanocihazlardaki STP hava akışları için

associated with this term is derivable from quantum mechanics considerations, while the power of the repulsive part of the potential is found empirically. The Lennard-Jones potential is zero at very large distances, has a weak negative peak at  $r$  slightly larger than  $\sigma$ , is zero at  $r = \sigma$ , and is infinite as  $r \rightarrow 0$ .

The force field resulting from this potential is given by

$$F_{ij}(r) = -\frac{\partial V_{ij}}{\partial r} = \frac{48\varepsilon}{\sigma} \left[ c_{ij} \left( \frac{r}{\sigma} \right)^{-13} - \frac{d_{ij}}{2} \left( \frac{r}{\sigma} \right)^{-7} \right] \quad (13)$$

A typical L-J 6-12 potential and force field were previously shown in Figure 4, for  $c=d=1$ . The minimum potential  $V_{min} = -\varepsilon$ , corresponds to the equilibrium position (zero force) and occurs at  $r = 1.12 \sigma$ . The attractive van der Waals contribution to the minimum potential is  $-2\varepsilon$ , while the repulsive energy contribution is  $+\varepsilon$ . Thus the inverse 12<sup>th</sup>-power repulsive force term decreases the strength of the binding energy at equilibrium by 50%.

The L-J potential is commonly used in molecular dynamics simulations to model intermolecular interactions between dense gas or liquid molecules and between fluid and solid molecules. As mentioned earlier, such potential is not accurate for complex substances such as water whose molecules form directional covalent bonds. As a result, MD simulations for water are much more involved.

## 10. Conclusion

The traditional NavierStokes model of fluid flows with no-slip boundary conditions works only for a certain range of the governing parameters. This model basically demands three conditions: (1) Newtonian mechanics, and not quantum or relativistic mechanics, applies; (2) The fluid is a continuum, which

ihlal edilebilen moleküler kaos sınırlamasıdır; ve (3) Akış termodinamik dengeden çok çok uzak değildir, bu ise akış değişimleri için en küçük zaman ölçeğine kıyasla küçük bir zaman periyodu süresince karşılaşılan yeterli sayıda molekül karşılaşması olduğunda sağlanır. Bu zaman periyodu esnasında ortalama molekül, en küçük akış uzunluk ölçeğine kıyasla daha küçük bir mesafede hareket etmiş olabilir.

Gazlar için, Knudsen sayısı seyrelme derecesini ve klasik akış modellerinin uygulanabilirliğini belirler.  $Kn \rightarrow 0$  iken, moleküler karşılaşmaların uzunluk ve zaman ölçekleri, akışkanınine kıyasla yok derecede daha küçüktür ve akışkanın her bir elemanının hız dağılımı, molekül akış alanı boyunca ilerlerken yerel makroskopik özelliklere uygun olan termodinamik denge durumuna hızlı bir şekilde uyum sağlar.

Sürekli ortam bakış açısından akış tersinir adyabatiktir ve ısı iletimi ve viskoz yayılım ve difüzyon, sürekli ortam korunum ilişkilerinden yok olur ve Euler hareket denklemlerini oluşturur. Küçük fakat sonlu  $Kn$ 'de, Navier-Stokes denklemleri; sanki dengeli, sürekli ortam akışlarını tanımlamaktadır.

$Kn > 0.001$  için kayma akışı dikkate alınmalıdır. Kayma sınır şartı, Knudsen sayısında ilk olarak doğrusaldır, daha sonra 0.1'in ötesinde bir  $Kn$  sayısı olduğunda doğrusal olmayan etkiler hakim olur. Aynı geçiş rejiminde, örneğin  $0.1 < Kn < 10$  için, –alan denklemlerini kapatmak için– gereken doğrusal gerilme-gerinme oranı ve ısı akısı-sıcaklık basamağı ilişkileri de çöker ve bu durumda alternatif sürekli ortam denklemleri (Burnett ya da yüksek dereceden denklemler) veya moleküler temelli modeller aranmalıdır.

Geçiş rejiminde, seyreltik gaz ve moleküler kaos kabullerinin sağlanması şartıyla, zor Boltzman denkleminde çözümler aranır, fakat Monte Carlo metotları gibi fiziksel benzetimler, Knudsen sayısının bu

is typically satisfied as there are usually more than 1 million molecules in the smallest volume in which appreciable macroscopic changes take place. This is the molecular chaos restriction, which can be violated for rarefied gas flows in macrodevices or for STP airflows in nanodevices; and (3) The flow is not too far from thermodynamic equilibrium, which is satisfied if there is sufficient number of molecular encounters during a time period small compared to the smallest time scale for flow changes. During this time period the average molecule would have moved a distance small compared to the smallest flow length scale.

For gases, the Knudsen number determines the degree of rarefaction and the applicability of traditional flow models. As  $Kn \rightarrow 0$ , the time and length scales of molecular encounters are vanishingly small compared to those for the flow, and the velocity distribution of each element of the fluid instantaneously adjusts to the equilibrium thermodynamic state appropriate to the local macroscopic properties as this molecule moves through the flowfield. From the continuum viewpoint, the flow is isentropic and heat conduction and viscous diffusion and dissipation vanish from the continuum conservation relations, leading to the Euler equations of motion. At small but finite  $Kn$ , the Navier-Stokes equations describe quasi-equilibrium, continuum flows.

Slip flow must be taken into account for  $Kn > 0.001$ . The slip boundary condition is at first linear in Knudsen number, then nonlinear effects take over beyond a Knudsen number of 0.1. At the same transition regime, i.e.  $0.1 < Kn < 10$ , the linear stress-rate of strain and heat flux-temperature gradient relations –needed to close the field equations– also break down, and alternative continuum equations (e.g. Burnett or higher-order equations) or molecular-based models must be

aralığında daha hazır bir şekilde çalıştırılabilir. Serbest-molekül akış rejiminde, örneğin  $Kn > 10$  için, doğrusal olmayan çarpışma integrali ihmal edilebilir ve Boltzmann denklemi büyük ölçüde basitleşir. Bu durumda basit geometriler için analitik çözümler olasıdır ve yüzey-yansıma özellikleri doğru bir şekilde modellendiği sürece, Boltzmann denkleminin sayısal integrasyonu, rastgele geometriler için kolay anlaşılırdır.

Gaz akışları, mikrocihazlarda, düşük Mach sayılarında bile genellikle sıkıştırılabilir. Viskoz etkiler, akışın sıkıştırılabilir gibi davranması için yeterli basınç düşümüne ve yoğunluk değişimlerine sebep olabilir. Uzun, sabit-alanlı bir mikrokanalda, bütün Knudsen sayısı rejimleriyle karşılaşılabılır ve seyrelme derecesi kanal boyunca artar. Basınç düşümü doğrusal değildir ve Mach sayısı, sadece boğulmuş-akış şartı dışında, akış yönünde artar.

Klasik Navier-Stokes denklemlerinin benzer sapma ve çöküşü sıvılarda da meydana gelir, fakat bu durum çok daha küçük cihaz ölçeklerinde gerçekleşir. Şu an var olan deneyler çelişkilidir ve durum gazlar ve sıvılar açısından seyreltik gazlar için olduğundan çok daha karmaşıktır. Sıvılar için bir kinetik teori yoktur ve ilk-prensip tahmin metotları nadirdir. Moleküler dinamik benzetimler kullanılabilir fakat bunlar çok küçük akış miktarları ile nadirdir. Yine de ölçülebilir kayma, mikrocihazlarda gerçekçi kayma oranlarında MD benzetimlerinden tahmin edilir. Karma atomistik-sürekli ortam yöntemleri, bilgisayarla hesaplama açısından karşılanabilir olarak, ilk-prensip çözümlerini sağlaması beklenmektedir. Çok fazla sayısal bilgi gerektirmesine rağmen, seyreltik gazlar için karma stratejilerin kullanımı

invoked. In the transition regime, provided that the dilute gas and molecular chaos assumptions hold, solutions to the difficult Boltzmann equation are sought, but physical simulations such as Monte Carlo methods are more readily executed in this range of Knudsen number. In the free-molecule flow regime, i.e.  $Kn > 10$ , the nonlinear collision integral is negligible and the Boltzmann equation is drastically simplified. Analytical solutions are possible in this case for simple geometries and numerical integration of the Boltzmann equation is straightforward for arbitrary geometries, provided that the surface-reflection characteristics are accurately modeled.

Gaseous flows are often compressible in microdevices even at low Mach numbers. Viscous effects can cause sufficient pressure drop and density changes for the flow to behave as compressible. In a long, constant-area microduct, all Knudsen number regimes may be encountered and the degree of rarefaction increases along the tube. The pressure drop is nonlinear and the Mach number increases downstream, limited only by choked-flow condition.

Similar deviation and breakdown of the traditional Navier-Stokes equations occur for liquids as well, but at considerably smaller device scale. Existing experiments are contradictory, and the situation for dense gases and liquids is more murky than that for dilute gases. There is no kinetic theory of liquids, and first-principles prediction methods are scarce. Molecular dynamics simulations can be used, but they are limited to extremely small flow extents. Nevertheless, measurable slip is predicted from MD simulations at realistic shear rates in microdevices. Hybrid atomistic-continuum methods hold promise to provide first-principles solutions while remaining computationally affordable. Though requiring considerable numerical erudition, the use of hybrid

mümkündür. Karma yöntemlerin, sıvı ve gaz akışları için kullanılabilmesi için daha fazla ilerleme gerekmektedir.

Geleneksel olmayan fiziğin büyük bölümü hala öğrenilmeyi, birçok heyecan verici mikrocihaz uygulamaları ise keşfedilmeyi beklemektedir. Yeni ortaya çıkmış olan nanobilim ve nanoteknoloji alanlarının geleceği parlaktır.

## KAYNAKÇA/REFERENCE

1. **R.P. Feynman**, "There's Plenty of Room at the Bottom," in *Miniaturization*, ed. H.D. Gilbert, pp. 282-296, New York: Reinhold Publishing, (1961).
2. **T.M. Squires, S.R. Quake**, "Microfluidics: fluid physics at the nanoliter scale". *Rev. Mod. Phys.* 77 (3), July (2005).
3. **M. Gad-el-Hak**, "The Fluid Mechanics of Microdevices-the Freeman Scholar Lecture". *J. Fluids Eng.* 121, 5-33 (1999).
4. **H.A. Stone, A.D. Stroock, A. Ajdari**, "Engineering Flows in Small Devices: Microfluidics Toward a Lab-on-a-Chip". *Annu. Rev. Fluid Mech.* 36, 381-411 (2004).
5. **M. Gad-el-Hak**, Editor, *The MEMS Handbook*, Second Edition, Volumes I-III, Boca Raton: CRC Press, (2005).
6. **G. Em Karniadakis**, A. Beskok, *Microflows: Fundamentals and Simulation*, New York: Springer-Verlag, (2002).
7. **G.K. Batchelor**, *An Introduction to Fluid Dynamics*, London: Cambridge University Press, (1967).
8. **M.J. Lighthill**, "Introduction. Real and Ideal Fluids," in *Laminar Boundary Layers*, ed. L. Rosenhead, pp. 1-45. Oxford: Clarendon Press, (1963).
9. **S. Chapman, T.G. Cowling**, *The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases*, third edition, London: Cambridge University Press, (1970).
10. **G.A. Bird**, *Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows*, Oxford: Clarendon Press, 1994.
11. **M. Knudsen**, "Die Gesetze der Molekularströmung und der inneren Reibungsströmung der Gase durch Röhren". *Annalen der Physik* 28, 75-130 (1909).
12. **S.A. Tison**, "Experimental Data and Theoretical Modeling of Gas Flows Through Metal Capillary Leaks". *Vacuum* 44, 1171-1175 (1993).
13. **A. Beskok, G.E. Karniadakis, W. Trimmer**, "Rarefaction and Compressibility Effects in Gas microflows". *J. Fluids Eng.* 118, 448-456 (1996).

strategies for dilute gases is within reach. Further development is needed for implementing hybrid methods for liquid and dense gas flows.

Much non-traditional physics is still to be learned and many exciting applications of microdevices are yet to be discovered. The future is bright for this emerging field of nanoscience and nanotechnology.

14. **R.H. Nadolink, W.W. Haigh**, "Bibliography on Skin Friction Reduction With Polymers and Other Boundary-Layer Additives". *Appl. Mech. Rev.* 48, 351-459 (1995).
15. **W. Loose, S. Hess**, "Rheology of Dense Fluids Via Nonequilibrium Molecular Hydrodynamics: Shear Thinning and ordering transition". *Rheologica Acta* 28, 91-101 (1989).
16. **E.B. Dussan, S.H. Davis**, "On the Motion of Fluid-Fluid Interface Along a Solid Surface". *J. Fluid Mech.* 65, 71-95 (1974).
17. **E.B. Dussan**, "The Moving Contact Line: The Slip Boundary Condition". *J. Fluid Mech.* 77, 665-684 (1976).
18. **E.B. Dussan**, "On the Spreading of Liquids on Solid Surfaces: Static and Dynamic Contact Lines". *Annu. Rev. Fluid Mech.* 11, 371-400 (1976).
19. **P.A. Thompson, M.O. Robbins**, "Simulations of Contact Line Motion: Slip and the Dynamic Contact Angle". *Phys. Rev. Lett.* 63, 766-769 (1989).
20. **H.K. Moffatt**, "Viscous and Resistive Eddies Near a Sharp Corner". *J. Fluid Mech.* 18, 1-18 (1964).
21. **J. Koplik, J.R. Banavar**, "Continuum Deductions From Molecular Hydrodynamics". *Annu. Rev. Fluid Mech.* 27, 257-292 (1995).
22. **J.R.A. Pearson, C.J.S. Petrie**, "On Melt Flow Instability of Extruded Polymers," in *Polymer Systems: Deformation and Flow*, eds. R.E. Wetton, R.W. Whorlow, pp. 163-187, London: Macmillan, (1968).
23. **S. Richardson**, "On the No-Slip Boundary Condition". *J. Fluid Mech.* 59, 707-719 (1973).
24. **M.M. Den**, "Issues in Viscoelastic Fluid Mechanics". *Annu. Rev. Fluid Mech.* 22, 13-34 (1990).
25. **M.M. Den**, "Extrusion Instabilities and Wall Slip". *Annu. Rev. Fluid Mech.* 33, 265-287 (2001).
26. **E. Lauga, M.P. Brenner, H.A. Stone**, "Microfluidics: the No-Slip Boundary Condition", in *Handbook of Experimental Fluid Dynamics*, eds. J. Foss, C. Tropea, A. Yarin, Chapter 15, New York: Springer, (2005).

27. **J. Pfahler, J. Harley, H.H. Bau, J.N. Zemel**, "Liquid Transport in Micron and Submicron Channels". *Sensors & Actuators* 21-23, 431-434 (1990).
28. **J. Pfahler, J. Harley, H.H. Bau, J.N. Zemel**, "Gas and Liquid Flow in Small Channels," in *Symp. on Micromechanical Systems, Sensors, and Actuators*, eds. D. Cho, R. Warrington, A. Pisano, H.H. Bau, C. Friedrich, J. Jara-Almonte, J. Liburdy, ASME DSC-Vol. 32, pp. 49-60, New York: ASME, (1991).
29. **J. Pfahler**, "Liquid Transport in Micron and Submicron Size Channels," Ph.D. Thesis, University of Pennsylvania, Philadelphia, Pennsylvania, 1992.
30. **H.H. Bau**, "Transport Processes Associated With Micro-Devices". *Thermal Sci. Eng.* 2, 172-178 (1994).
31. **J.N. Israelachvili**, "Measurement of the Viscosity of Liquids in Very Thin Films". *J. Colloid Interface Sci.* 110, 263-271 (1986).
32. **M.L. Gee, P.M. McGuiggan, J.N. Israelachvili, A.M. Homola**, "Liquid to Solidlike Transitions of Molecularly Thin Films Under Shear". *J. Chemical Phys.* 93, 1895-1906 (1990).
33. **D.Y.C. Chan, R.G. Horn**, "Drainage of Thin Liquid Films". *J. Chemical Phys.* 83, 5311-5324 (1985).
34. **N.P. Migun, P.P. Prokhorenko**, "Measurement of the Viscosity of Polar Liquids in Microcapillaries". *Colloid J. of the USSR* 49, 894-897 (1987).
35. **P. Debye, R.L. Cleland**, "Flow of Liquid Hydrocarbons in Porous Vycor". *J. Appl. Phys.* 30, 843-849 (1959).
36. **J.L. Anderson, J.A. Quinn**, "Ionic Mobility in Microcapillaries". *J. Chemical Phys.* 27, 1208-1209 (1972).
37. **D.B. Tuckermann, R.F.W. Pease**, "High-Performance Heat Sinking for VLSI". *IEEE Electron Device Lett.* EDL-2, 126-129 (1981).
38. **D.B. Tuckermann, R.F.W. Pease**, "Optimized Convective Cooling Using Micromachined Structures". *J. Electrochemical Soc.* 129, C98, March (1982).
39. **D.B. Tuckermann**, "Heat Transfer Microstructures for integrated circuits," Ph.D. Thesis, Stanford University, Palo Alto, California, (1984).
40. **M.G. Guvenc**, "V-Groove Capillary for low flow control and measurement," in *Micromachining and Micropackaging of Transducers*, eds. C.D. Fung, P.W. Cheung, W.H. Ko, D.G. Fleming, pp. 215-223, Amsterdam: Elsevier, (1985).
41. **S. Nakagawa, S. Shoji, M. Esashi**, "A Micro-Chemical Analyzing System Integrated on Silicon Chip," in *Proc. IEEE: Micro Electro Mechanical Systems*, Napa Valley, California, IEEE 90CH2832-4, New York: IEEE, (1990).
42. **K.V. Sharp**, "Experimental Investigation of Liquid and Particle-laden Flows in Microtubes," Ph.D. Thesis, University of Illinois at Urbana-Champaign, (2001).
43. **K.V. Sharp, R.J. Adrian, J.G. Santiago, J.I. Molho**, "Liquid Flow in Microchannels," in *The Handbook of MEMS*, vol. I, Second Edition, ed. M. Gad-el-Hak, Chapter 10, Boca Raton: CRC Press, (2005).
44. **B.J. Alder, T.E. Wainwright**, "Studies in Molecular Dynamics". *J. Chemical Phys.* 27, 1208-1209 (1957).
45. **B.J. Alder, T.E. Wainwright**, "Molecular Dynamics by Electronic Computers," in *Transport Processes in Statistical Mechanics*, ed. I. Prigogine, pp. 97-131, New York: Interscience, (1958).
46. **B.J. Alder, T.E. Wainwright**, "Decay of the Velocity Auto-Correlation function". *Phy. Rev. A* 1, 18-21 (1970).
47. **G. Ciccotti, W.G. Hoover, eds**, *Molecular Dynamics Simulation of Statistical Mechanics Systems*, Amsterdam: North Holland, (1986).
48. **M.P. Allen, D.J. Tildesley**, *Computer Simulation of Liquids*, Oxford: Clarendon Press, (1987).
49. **J.M. Haile**, *Molecular Dynamics Simulation: Elementary Methods*, New York: Wiley, (1993).
50. **P.A. Thompson, S.M. Troian**, "A General Boundary Condition For Liquid Flow at Solid Surfaces". *Nature* 389, 360-362 (1997).
51. **C.L.M.H. Navier**, "Mémoire Sur Les Lois du Mouvement Des Fluides". *Mémoires de l'Académie Royale des Sciences de l'Institute de France* 6, 389 (1823).
52. **B.T. Atwood, W.R. Schowalter**, "Measurements of Slip at the Wall During Flow of High-density Polyethylene Through a Rectangular Conduit". *Rheologica Acta* 28, 134-146 (1989).
53. **F.F. Abraham, J.Q. Broughton, N. Bernstein, E. Kaxiras**, "Spanning the Continuum to Quantum Length Scales in a Dynamic Simulation of Brittle Fracture". *Europhys. Lett.* 44, 783-787 (1998).
54. **V.B. Shenoy, R. Miller, E.B. Tadmor, D. Rodney, R. Phillips, M. Ortiz**, "An Adaptive Finite Element Approach to Atomic-Scale Mechanics-The Quasicontinuum Method". *J. Mech. Phys. Solids* 47, 611-642 (1999).

55. **R.E. Rudd, J.Q. Broughton**, "Concurrent Coupling of Length Scales in Solid State Systems". *Phys. Status Solidi B* 217, 251-291 (2000).
56. **D.C. Wadsworth, D.A. Erwin**, "One-Dimensional Hybrid Continuum/Particle Simulation Approach for Rarefied Hypersonic Flows", AIAA Paper Number 90-1690, (1990).
57. **D. Hash, H. Hassan**, "A Decoupled DSMC/Navier-Stokes Analysis of a Transitional Flow Experiment", AIAA Paper Number 96-353, (1996).
58. **J. Bourgat, P. Le Tallec, M. Tidriri**, "Coupling Boltzmann and Navier-Stokes Equations by Friction". *J. Comput. Phys.* 127, 227-245 (1996).
59. **B.J. Alder**, "Highly Discretized Dynamics". *Physica A* 240, 193-195 (1997).
60. **P. Le Tallec, F. Mallinger**, "Coupling Boltzmann and Navier-Stokes Equations by Half Fluxes". *J. Comput. Phys.* 136, 51-67 (1997).
61. **S. Tiwari, A. Klar**, "Coupling of the Boltzmann and Euler Equations With Adaptive Domain Decomposition procedure". *J. Comput. Phys.* 144, 710-726 (1998).
62. **A.L. Garcia, J. Bell, W.Y. Crutchfield, B.J. Alder**, "Adaptive Mesh and Algorithm Refinement using Direct Simulation Monte Carlo". *J. Comput. Phys.* 154, 134-155 (1999).
63. **O. Aktas, N.R. Aluru**, "A Combined Continuum/DSMC Technique for Multiscale Analysis of Microfluidic Filters". *J. Comput. Phys.* 178, 342-372 (2002).
64. **R. Roveda, D.B. Goldstein, P.L. Varghese**, "Hybrid Euler/direct Simulation Monte Carlo Calculation of Unsteady slit flow". *J. Spacecr. Rockets* 37, 753-760 (2000).
65. **S.T. O'Connell, P.A. Thompson**, "Molecular Dynamics-Continuum Hybrid Computations: a Tool for Studying Complex Fluid Flows". *Phys. Rev. E* 52, R5792-R5795 (1995).
66. **J. Li, D. Liao, S. Yip**, "Coupling Continuum to Molecular-Dynamics Simulation: Reflecting Particle Method and the Field Estimator". *Phys. Rev. E* 57, 7259-7267 (1998).
67. **N.G. Hadjiconstantinou**, "Hybrid Atomistic-Continuum Formulations and the Moving Contact-Line Problem". *J. Comput. Phys.* 154, 245-265 (1999).
68. **E.G. Flekkoy, G. Wagner, J. Feder**, "Hybrid Model for Combined Particle and Continuum Dynamics". *Europhys. Lett.* 52, 271-276 (2000).
69. **H.S. Wijesinghe, N.G. Hadjiconstantinou**, "Discussion of Hybrid Atomistic-continuum Methods for Multiscale Hydrodynamics". *Int. J. Multiscale Comput. Eng.* 2, 189-202 (2004).
70. **H.S. Wijesinghe, R.D. Hornung, A.L. Garcia, N.G. Hadjiconstantinou**, "Three-Dimensional Hybrid Continuum-Atomistic Simulations for Multiscale Hydrodynamics". *J. Fluids Eng.* 126, 768-777 (2004).
71. **T. Werder, J.H. Walther, P. Koumoutsakos**, "Hybrid Atomistic-Continuum Method for the Simulation of Dense Fluid flows". *J. Comput. Phys.* 205, 373-390 (2005).
72. **L.L. Baker, N.G. Hadjiconstantinou**, "Variance Reduction for Monte Carlo Solutions of the Boltzmann Equation". *Phys. Fluids*, to appear (2005).
73. **E. Lauga, H.A. Stone**, "Effective Slip in Pressure-Driven Stokes Flow". *J. Fluid Mech.* 489, 55-77 (2003).
74. **F.W. Went**, "The size of man". *American Scientist* 56, 400-413 (1968).
75. **W.C. Tang, T.-C. Nguyen, R.T. Howe**, "Laterally Driven Polysilicon Resonant Microstructures". *Sensors & Actuators* 20, 25-32 (1989).
76. **C. Mastrangelo, C.H. Hsu**, "A Simple Experimental Technique for the Measurement of the Work of Adhesion of Microstructures," in *Technical Digest IEEE Solid-State Sensors and Actuators Workshop*, pp. 208-212. New York: IEEE, (1992).
77. **L.-S. Fan, Y.-C. Tai, R.S. Muller**, "Integrated Movable Micromechanical Structures for Sensors and Actuators". *IEEE Transactions on Electronic Devices* 35, 724-730 (1988).
78. **L.-S. Fan, Y.-C. Tai, R.S. Muller**, "IC-processed Electrostatic Micromotors". *Sensors & Actuators* 20, 41-47 (1989).
79. **Y.-C. Tai, R.S. Muller**, "IC-processed Electrostatic Synchronous micromotors". *Sensors & Actuators* 20, 49-55 (1989).
80. **S. Brunauer**, *Physical Adsorption of Gases and Vapours*, London: Oxford University Press, (1944).
81. **A. Majumdar, I. Mezic**, "Stability Regimes of Thin Liquid Films". *Microscale Thermophys. Eng.* 2, 203-213 (1998).
82. **A. Majumdar, I. Mezic**, "Instability of Ultra-thin Water Films and the Mechanism of Droplet Formation on Hydrophilic Surfaces". *J. Heat Transfer* 121, 964-971 (1999).
83. **J.N. Israelachvili**, *Intermolecular and Surface Forces*, second edition, New York: Academic Press, (1991).