

Analyse und Optimierung von Tropfvorgängen zur Dosierung flüssiger Medikamente

Von der Fakultät Konstruktions-, Produktions- und Fahrzeugtechnik
der Universität Stuttgart
zur Erlangung der Würde eines Doktor-Ingenieurs (Dr.-Ing.) genehmigte
Abhandlung

von

Sebastian Hummel

aus Böblingen

Hauptberichter:	Prof. Dr.-Ing. Hermann Sandmaier
Mitberichter:	Prof. Dr. rer. nat. habil. Peter P. Pott

Tag der mündlichen Prüfung: 29. Juni 2020

Institut für Mikrointegration der Universität Stuttgart

2020

ZUSAMMENFASSUNG

Flüssige Medikamente sind u.a. aufgrund ihrer schnellen Wirkung und individuellen Dosierbarkeit ein wichtiger Bestandteil des wachsenden Arzneimittelmarktes in Deutschland. Innerhalb dieser Gruppe der flüssigen Medikamente sind Tropfendosiersysteme, insbesondere Senkrechttropfer (vertikale Ausrichtung bei der Tropfenabgabe), v.a. bei der Eigenmedikation von Patienten sehr weit verbreitet und stehen daher im Fokus dieser Arbeit. Bei der Anwendung von Tropfendosiersystemen kommt es auch heute noch häufig zu unerwünschten Fehlfunktionen, wie z.B. einem zu schnellen bzw. zu langsamen Tropfen oder einem Verstopfen des Systems. In Kombination mit der fehlenden Literatur zur Funktionsweise und Berechnung solcher Systeme weisen diese Fehlfunktionen einen deutlichen Bedarf zur näheren Analyse von Tropfendosiersystemen aus, dem im Rahmen dieser Arbeit begegnet werden soll.

Um ein besseres Verständnis für die Tropfendosierung flüssiger Medikamente zu erhalten, werden in der vorliegenden Arbeit zunächst Tropfprozesse im Allgemeinen, d.h. an geometrisch vergleichsweise einfachen Glaskapillaren, betrachtet. Dabei wird unter Berücksichtigung von Mess- und Simulationsergebnissen die Impulsbilanz eines einzelnen Tropfens aufgestellt und mithilfe einer geeigneten Modellierung ein neuer, einfacher Ansatz zur Berechnung von Tropfen hergeleitet und verifiziert.

Aufgrund der im Vergleich zu Glaskapillaren deutlich komplexeren Geometrie wird außerdem eine detaillierte Analyse der Funktionsweise von Senkrechttropfern präsentiert; dabei zeigt sich u.a. der Einfluss des Zusammenspiels zwischen Tropfen- und Blasenbildung auf den Dosiervorgang. Die Anwendung des hergeleiteten Berechnungsmodells für Tropfen liefert darüber hinaus eine vergleichsweise einfache Möglichkeit zur Auslegung von Tropfendosiersystemen mit deren Hilfe der Auslegungsprozess nachvollziehbarer und reproduzierbarer gestaltet werden kann.

Aufbauend auf den vorangegangenen Untersuchungen werden im letzten Abschnitt der Arbeit Ursachen für die Fehlfunktionen von Senkrechttropfern und Konzepte zur Optimierung der Tropfendosierung flüssiger Medikamente vorgestellt. Diese Konzepte umfassen dabei sowohl organisatorische Ansätze, wie z.B. eine Verbesserung der Patienteninformation, als auch technische Konzepte zur Optimierung des Funktionsprinzips der Senkrechttropfer.

ABSTRACT

Due to its fast effect and the possibility of individual dosing, liquid medicine is an important part of the growing pharmaceutical market in Germany. Within this group of liquid medicines, droplet dosing devices, especially vertical droppers (vertical alignment during the dripping process), are widespread in the self-medication of patients and therefore in focus of this work. However, while using these systems, unwanted malfunctions, for example too fast or too slow droplet formation times as well as plugging of the system, are still common today. In combination with the lack of literature on the functionality and calculation of such systems, these malfunctions clearly indicate the necessity for a more detailed analysis of droplet dosing systems, which should be addressed within this work.

In order to obtain a better understanding of the droplet formation process of liquid medicines, dripping processes at geometrical comparatively simple glass capillaries, are investigated. Taking into account measurement and simulation results, the momentum balance of a single droplet can be established and with the help of a suitable modelling a new, easy approach for the calculation of hanging and detaching droplets is derived and verified.

Compared to glass capillaries, vertical droppers have a more complex geometry. Therefore a detailed analysis of the functionality of these systems, which shows the correlation between the droplet formation and the bubble formation as well as the influence of these two processes on the dosage itself, is performed. In addition, the use of the derived calculation model for droplets provides a comparatively easy approach for the design of droplet dosing systems which leads to a more comprehensible and reproducible design process.

Based on the previous investigations, causes for the malfunction of vertical droppers and concepts for the optimization of these droplet dosing devices for liquid medicine are presented in the last section of this thesis. These concepts include both organizational approaches, for example an improvement of the information of the user, as well as technical concepts to optimize the functional principle of vertical droppers.

Inhaltsverzeichnis

Abbildungsverzeichnis	IV
Tabellenverzeichnis	VII
Abkürzungsverzeichnis	VIII
1 Einleitung	1
1.1 Tropfendosiersysteme in der Medizintechnik	1
1.1.1 Darreichungsformen von Medikamenten	1
1.1.2 Tropfendosierung von flüssigen Medikamenten	2
1.1.3 Arten von Tropfendosiersystemen	4
1.1.4 Anwendung von Tropfendosiersystemen im Alltag	5
1.2 Aufgabenstellung	6
1.3 Aufbau und Rahmenbedingungen der Arbeit	7
2 Theoretische Grundlagen	9
2.1 (Mikro-) Fluidik	9
2.1.1 Fluide und deren Eigenschaften	10
2.1.2 Das Gesetz von Boyle-Mariotte	11
2.1.3 Kapillarströmung und Einlaufdruckverlust	12
2.1.4 Die Young-Laplace-Gleichung	15
2.1.5 Grundlagen der Navier-Stokes- und Kontinuitätsgleichung	16
2.2 Tropfenberechnung	18
2.2.1 Kraftwirkung zwischen Tropfen und Kapillare	18
2.2.2 Tropfenablösung: Abschätzung des maximalen Tropfenvolumens . . .	21
2.2.3 Tropfenablösung: Berücksichtigung des Tropfenwachstums	23
2.3 Blasenberechnung	28
2.4 Simulation	30
2.4.1 Grundlagen	30

2.4.2	OpenFOAM	32
2.4.3	Solver interFoam	34
3	Versuchsaufbau zur Messung von Tropfvorgängen	37
3.1	Messaufbau nach Haub	37
3.2	Messaufbau nach Wolf	40
3.3	Messaufbau nach Hummel	41
3.4	Vergleich der Messsysteme	43
4	Tropfenberechnung an Kapillarsystemen	45
4.1	Tropfenbildung	45
4.1.1	Kräfte / Impulsänderungen am Tropfen	47
4.1.2	Volumenstrom durch die Kapillare	50
4.2	Tropfenberechnung	52
4.2.1	Tropfenwachstum (Phase 1 & Phase 2)	52
4.2.2	Einschnürung und Abriss (Phase 3)	56
4.2.3	Zusammenfassung der Tropfenberechnung	57
4.2.4	Alternative Ansätze zur Tropfenmodellierung	58
4.3	Verifikation des Berechnungsansatzes	60
4.3.1	Methodik	60
4.3.2	Tropfenvolumen und Tropfenbildungszeit (am Bsp. LW-T08)	62
4.3.3	Fehlerabschätzung (am Bsp. LW-T08)	63
4.3.4	Ergebnisse weiterer Untersuchungen	69
4.4	Einflussgrößen zur Variation der Tropfenbildung	71
4.5	Zusammenfassung	72
5	Berechnung medizinischer Senkrechttropfer	73
5.1	Geometrie und Material	73
5.2	Funktionsweise von Senkrechttropfern	75
5.2.1	Allgemeine Beschreibung des Austropfens und der Blasenbildung	75
5.2.2	Grundlegende Tropfbedingung für Senkrechttropfer	79
5.3	Berechnung von Tropfendosiersystemen	82
5.3.1	Volumenstrom durch den Tropfkanal	82
5.3.2	Berechnung der Tropfeneigenschaften	84
5.4	Verifikation des Berechnungsansatzes	87
5.4.1	Methodik	87
5.4.2	Tropfenvolumen und Tropfenbildungszeit (am Bsp. LW-0,6-S2)	89

5.4.3	Fehlerabschätzung (am Bsp. LW-0,6-S2)	91
5.4.4	Ergebnisse weiterer Untersuchungen	95
5.5	Einflussgrößen zur Variation der Tropfenbildung	97
5.5.1	Einflussgrößen	98
5.5.2	Auslegung von Senkrechttropfern	101
5.6	Zusammenfassung	102
6	Optimierung medizinischer Senkrechttropfer	104
6.1	Probleme mit bzw. Schwachstellen von Senkrechttropfern in der Praxis	104
6.2	Patente	108
6.3	Hilfsmittel zur Tropfendosierung	110
6.4	Optimierungsansätze	111
6.4.1	Grundlegende Konzepte	111
6.4.2	Optimierung des Luftrohres an Senkrechttropfern	112
6.4.3	Dosierung mit festgestelltem Volumen	120
6.5	Zusammenfassung	123
7	Zusammenfassung und Ausblick	124
	Literaturverzeichnis	129
A	Tropfenberechnung an Kapillarsystemen	140
A.1	Untersuchungen an weiteren Glaskapillarsystemen	140
A.1.1	LW-T07	142
A.1.2	Eth-T07	143
A.1.3	Gly-T04	144
B	Berechnung medizinischer Senkrechttropfer	145
B.1	Abmessungen der verwendeten Senkrechttropfer	145
B.2	Marktrecherche zum Material von Senkrechttropfern	146
B.3	Untersuchungen an weiteren Tropfendosiersystemen	147
B.3.1	LW-1,0-S2	149
B.3.2	Eth-0,6-S2	150
B.3.3	Gly-2,0-S2	151
C	Optimierung medizinischer Tropfendosiersysteme	152
C.1	Übersicht über Patente zum Senkrechttropfer	152

Abbildungsverzeichnis

1.1	Arten von Tropfendosiersystemen	4
1.2	Schematische Darstellung eines Tropfsystems aus einer Glaskapillare mit dar- überliegendem Fluid-Reservoir	8
2.1	Skizze zur Verdeutlichung der Funktion $r(x)$	13
2.2	Entwicklung des Einlaufdruck-Koeffizienten K bei einer Reynoldszahl von $Re = 500$ (Bsp.) über der normierten Strömungsgröße $\frac{Z}{Re}$ nach Schmidt & Zeldin	14
2.3	Skizze zur Veranschaulichung der Young-Laplace-Gleichung	15
2.4	Kraftwirkung aufgrund der Oberflächenspannung am hängenden Tropfen	19
2.5	Zusammensetzung des Drucks in einem hängenden Tropfen	24
2.6	Skizze der Kräfte, die an einer Blase angreifen	29
2.7	Ordnerstruktur von OpenFOAM bei Verwendung des Solvers interFoam	33
3.1	Messaufbau nach Haub	38
3.2	Bildaufbereitung im Messaufbau nach Haub	38
3.3	Messaufbau nach Wolf	40
3.4	Bildaufbereitung in den Messaufbauten nach Wolf und Hummel	41
3.5	Messaufbau nach Hummel	42
4.1	Phasen und Zustände während der Bildung eines Tropfens	46
4.2	Schematische Darstellung des Freischneidens eines Tropfens	48
4.3	Wichtige Größen der Tropfsysteme mit Glaskapillaren	50
4.4	Parameter eines hängenden Tropfens	53
4.5	Tropfenmodellierung aufbauend auf der Pendant Drop Methode	54
4.6	Visualisierung der Zeit zwischen zwei Zuständen	55
4.7	Zeitliche Entwicklung des Winkels γ (qualitative Darstellung)	55
4.8	Tropfenmodellierung mithilfe einer Funktion aus Kreis und Ellipse	58
4.9	Weitere Ansätze zur Tropfenmodellierung mithilfe einer Funktion	59

4.10 Veranschaulichung der Simulation eines Tropfens unmittelbar vor dem Tropfenabriss	61
4.11 Tropfenvolumen am Glaskapillarsystem LW-T08	62
4.12 Tropfenbildungszeit am Glaskapillarsystem LW-T08	63
4.13 Fehlerabschätzung am Glaskapillarsystem LW-T08 - Tropfenvolumen	68
4.14 Fehlerabschätzung am Glaskapillarsystem LW-T08 - Tropfenbildungszeit	68
4.15 Hochziehen und Einschnürung am Glaskapillarsystem Eth-T07	70
5.1 Geometrie eines Senkrechttropfers angelehnt an den POMPL 0,6 S2	74
5.2 Struktur von Etylen (Monomer) und Polyethylen (Polymer)	75
5.3 Experimentell ermittelte Tropfen- und Blasenbildungszeit, aufgetragen über dem Aufnahmezeitpunkt, beim Austropfen einer 50 ml - Flasche durch den Tropfer POMPL 0,6 S2 (basierend auf einem Video von Müller)	76
5.4 Ausgetropfte Masse bzw. Massenstrom (experimentell ermittelt), aufgetragen über dem Aufnahmezeitpunkt, des Tropfers POMPL 0,6 S2 in einer 50 ml - Flasche (basierend auf einem Video von Müller)	78
5.5 Durchbruch des Luftrohres	79
5.6 Abtropfbedingung (statischer Grenzfall, d.h. kein Fluss durch die Kapillare)	80
5.7 Skizze zur Zuordnung der einzelnen Werte bei der Berechnung der Einlaufdruckkoeffizienten K_k	83
5.8 Tropfen am Senkrechttropfer	84
5.9 Tropfensimulation am Senkrechttropfer	88
5.10 Tropfenvolumen am Tropfsystem POMPL 0,6 S2 (LW-0,6-S2) bei unterschiedlichen Flaschengrößen	90
5.11 Tropfenbildungszeiten am Tropfsystem POMPL 0,6 S2 (LW-0,6-S2) bei unterschiedlichen Flaschengrößen	90
5.12 Fehlerabschätzung am Tropfendosiersystem LW-0,6-S2 - Tropfenvolumen	94
5.13 Fehlerabschätzung am Tropfendosiersystem LW-0,6-S2 - Tropfenbildungszeit	94
5.14 Entwicklung des Volumenstroms bei der Bildung eines einzelnen Tropfens am Bsp. Gly-2,0-S2 (Füllvolumen: 10 ml)	97
5.15 Einfluss einzelner geometrischer Größen auf die Tropfenbildung	99
5.16 Einfluss einzelner Stoffwerte auf die Tropfenbildung	100
5.17 Beispiel zur Auslegung eines Senkrechttropfers (für Wasser bei 25 °C)	102
6.1 Produktionsrückstände an der Luft-Auslass-Öffnung (Radius $r_L = 1,0$ mm) von Senkrechttropfern	106
6.2 Schematische Darstellung der Kräfte auf Flüssigkeit im Luftrohr	107

6.3	Schematische Darstellung der Wirkung der Kontaktwinkelhysterese auf eine Blase in der Flüssigkeit im Luftrohr	108
6.4	Erste Patente zu Tropfeinsätzen bzw. Senkrechttropfern	108
6.5	Patentierte Ansätze zur Optimierung von Senkrechttropfern	109
6.6	Hilfsmittel zur Unterstützung der Dosierung flüssiger Medikamente (angelehnt an Mehlhorn)	110
6.7	3D-gedruckter Senkrechttropfer	113
6.8	CAD-Skizzen von Senkrechttropfern mit redundanten Belüftungssystemen . . .	114
6.9	Tropfaufsatz des Medikaments Novaminsulfon Lichtenstein mit zwei Öffnungen am Luftrohr	115
6.10	Blasenausrichtung in T-förmigen Kanälen	116
6.11	Auslegung des T-förmigen Luftrohres	117
6.12	CAD-Skizze und Realisierung eines Senkrechttropfers mit T-förmigem Kanal im Luftrohr	118
6.13	Vergleich des Antropfverhaltens zwischen Referenz und optimiertem Ansatz (Anzahl der Antropfvorgänge > 170, zwei Operatoren)	119
6.14	Optimierung mithilfe eines definierten Auffangbehälters	121
6.15	Verbindung zwischen Tropfer und Oberfläche der Flüssigkeit	122
A.1	Untersuchungen am Glaskapillarsystem LW-T07	142
A.2	Untersuchungen am Glaskapillarsystem Eth-T07	143
A.3	Untersuchungen am Glaskapillarsystem Gly-T04	144
B.1	Untersuchungen am Tropfendosiersystem LW-1,0-S2	149
B.2	Untersuchungen am Tropfendosiersystem Eth-0,6-S2	150
B.3	Untersuchungen am Tropfendosiersystem Gly-2,0-S2	151

Tabellenverzeichnis

2.1	Ausgewählte Stoffgrößen relevanter Fluide bei 25 °C	11
5.1	Annahmen zur Abschätzung des maximalen und minimalen Volumenstroms $\dot{V}_{\max}$ und $\dot{V}_{\min}$ durch den Tropfkanal eines Senkrechttropfers	85
5.2	Variation der Stoffgrößen zur Bestimmung der Einflüsse auf die Tropfenbildung	98
6.1	Abmessungen des T-förmigen Luftrohres im 3D-gedruckten Prototyp	118
6.2	Vergleich der Tropfenbildung zwischen Referenz und optimiertem Ansatz bei Verwendung einer 50 ml - Flasche (Anzahl der berücksichtigten Tropfen > 4000)	119
7.1	Wichtige Merkmale der einzelnen Messaufbauten	125
A.1	Untersuchungen an (weiteren) Glaskapillarsystemen	140
B.1	Wichtige Abmessungen der verwendeten Senkrechttropfer (POMPL direkt e.K.)	145
B.2	Marktrecherche zum Material von Senkrechttropfern	146
B.3	Untersuchungen an weiteren Tropfendosiersystemen (50 ml - Flasche)	147
C.1	Patente zum Thema Senkrechttropfer	152

Abkürzungsverzeichnis

Abkürzungen

Abkürzung	Erklärung
C++	Programmiersprache
CAD	Computer Aided Design; dt: computerunterstützte Konstruktion
CFD	Computational Fluid Dynamics; dt.: numerische Strömungsberechnung
CHIC	Channel in Channel
CRC	Chemical Rubber Company
CSI	Camera Serial Interface
DAPI	Deutsches Arzneimittelprüfinstitut e.V.
EA	Einschnürung und Abriss
fps	frames per second; dt.: Bilder pro Sekunde
GNU	„freie Software“
GUI	Graphical User Interface; dt.: grafische Benutzeroberfläche
HD	High Definition; dt.: hochauflösend
LED	Light-Emitting Diode; dt.: Leuchtdiode
OpenFOAM	Open Field Operation and Manipulation
PE	Polyethylen
PE-HD	Polyethylen hoher Dichte; eng.: high density
PE-LD	Polyethylen geringer Dichte; eng.: low density
PP	Polypropylen
SD-Karte	Secure Digital Memory Card (Speicherkarte)
Std.Abw.	Standardabweichung
TW	Tropfenwachstum

Formelzeichen

Formelzeichen	Einheit	Erklärung
A	m^2	Fläche
A_x	m^2	Fläche in Bezug auf eine Größe x
a	$\frac{\text{m}}{\text{s}^2}$	Beschleunigung
a_j	-	Eigenwerte nach Sparrow et al.
a_{Kap}	m	Kapillarkonstante
B	-	Hilfsgröße zur Berechnung der Einlaufdruck-Koeffizienten nach Sparrow et al.
Bo	-	Bond-Zahl
D / d	m	(Außen- / Innen-) Durchmesser
d_{Blase}	m	Blasendurchmesser
F	$\text{N}; \frac{\text{kg m}}{\text{s}^2}$	Kraft
F_g	N	Gewichtskraft
F_p	N	Druckkraft
F_{sf}	N	Kraft aufgrund der Oberflächenspannung
F_v	N	Impulsänderung aufgrund einströmender Flüssigkeit
f	$\frac{\text{N}}{\text{m}^3}$	Kraftdichte
f_{Rayleigh}	-	Korrekturfaktor zur Tropfenberechnung
$f_{\text{HarkinsBrown}}$	-	Korrekturfaktor zur Tropfenberechnung
f_{Chesters}	-	Korrekturfaktor zur Tropfenberechnung
g	$\frac{\text{N}}{\text{kg}}, \frac{\text{m}}{\text{s}^2}$	Erdbeschleunigung
H / h	m	Höhe
I	$\text{N s}; \frac{\text{kg m}}{\text{s}}$	Impuls
i	-	Laufvariable für verschiedene quasi-statische Zustände eines Tropfens
K	-	Einlaufdruck-Koeffizient
k	-	Laufvariable für die verschiedenen Bereiche des Tropfkanals eines Senkrechtropfers

Formelzeichen	Einheit	Erklärung
L / l	m	Länge
L_e	m	Einlaufstrecke
m	kg	Masse
$\dot{m}$	$\frac{\text{kg}}{\text{s}}$	Massenstrom
O	m^2	Oberfläche
p	Pa; $\frac{\text{N}}{\text{m}^2}$	Druck
p_{hyd}	Pa	hydrostatischer Druck einer Flüssigkeitssäule
R / r	m	(Außen- bzw. Krümmungs- / Innen-) Radius
r_{Blase}	m	Blasenradius
R_{fl}	$\frac{\text{kg}}{\text{m}^4 \text{ s}}$	fluidischer Widerstand
Re	-	Reynolds-Zahl
S	-	Gestalt eines Tropfens nach Harkins & Brown
s	-	Bogenlänge zur Parametrisierung des Tropfens
T	°C	Temperatur
t	s	Zeit
V	m^3	Volumen
$\dot{V}$	$\frac{\text{m}^3}{\text{s}}$	Volumenstrom
$v / \bar{v}$	$\frac{\text{m}}{\text{s}}$	(Strömungs-) Geschwindigkeit / mittlere Geschw.
W	J; N m	Arbeit / Energie
γ	°	Winkel zwischen Kapillare und Tropfen
η	Pa s; $\frac{\text{kg}}{\text{m s}}$	dynamische Viskosität
Θ	°	Kontaktwinkel
ν	$\frac{\text{m}^2}{\text{s}}$	kinematische Viskosität
ρ	$\frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$	Dichte
σ	$\frac{\text{N}}{\text{m}}, \frac{\text{kg}}{\text{s}^2}$	Oberflächenspannung
Δx		Differenz zwischen zwei Zuständen der Größe x
∂		Differentialoperator
∇		Nabla-Operator, Gradient $\left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right)$
∇^2		Laplace-Operator $\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right)$

Kapitel 1

Einleitung

1.1 Tropfendosiersysteme in der Medizintechnik

1.1.1 Darreichungsformen von Medikamenten

Zur Vorbeugung und Behandlung von Krankheiten sowie zur täglichen Unterstützung unseres Lebens sind Medikamente, Nahrungsergänzungsmittel und andere Präparate nicht mehr wegzudenken. Dies zeigt sich u.a. am kontinuierlichen Wachstum des Apothekenmarktes in Deutschland: Wurden 2014 noch 47,9 Mrd. € an den Verkaufsschaltern der Apotheken umgesetzt, waren es im Jahr 2018 bereits 55,8 Mrd. €; allein vom Jahr 2017 auf das Jahr 2018 konnte ein Wachstum von 4,2 % verzeichnet werden. Im Jahr 2018 wurden insgesamt knapp 1,5 Mrd. Packungen an Medikamenten in verschiedensten Darreichungsformen verkauft; davon entfällt ca. die Hälfte auf rezeptfreie Arzneimittel. Zusätzlich dazu sind im Jahr 2018 weitere 700 Mio. Packungen an nicht apothekenpflichtigen Gesundheitsmitteln verkauft worden. Umgerechnet auf ca. 27 Packungen Medikamente und Gesundheitsmittel pro Kopf im Jahr 2018 veranschaulichen diese Zahlen die Relevanz von Medikamenten in unserem täglichen Leben [1].

Medikamente bzw. Arzneimittel kommen in einer Vielzahl verschiedener Formen vor, die sich je nach Krankheit bzw. angestrebter Wirkung in ihrem physikalischen Aufbau sowie dem Anwendungsort am bzw. im menschlichen Körper unterscheiden. Allen Darreichungsformen gemein ist dabei die Tatsache, dass der Wirkstoff zur richtigen Zeit an den richtigen Ort gebracht werden muss, um eine optimale Wirkung zu erzielen [2]. Grundsätzlich unterscheidet man im Bereich der Eigenmedikation des Patienten zwischen festen Formen, wie z.B. Tabletten, Kapseln oder Dragees, zur Einnahme in den Körper, und flüssigen Formen, wie z.B. Säften, Sirupe oder Tropfen, zur Einnahme in den Körper oder zur äußeren Anwendung. Weiterhin gibt es Arzneimittel in Form von Cremes, Salben oder Pflastern zur äußeren Anwendung, z.B. auf der

Haut, und in Form von Aerosolen, Spritzen und Tees [2, 3, 4]. Am weitesten verbreitet sind feste Formen, insbesondere Tabletten und Kapseln zum Einnehmen, da sich diese durch eine einfache Herstellung und Handhabung, lange Haltbarkeit und eine fest eingestellte Portionierung auszeichnen [2].

Ebenfalls weit verbreitet sind Medikamente in flüssiger Form [4]. Darunter fallen neben Säften und Tropfen zur oralen Einnahme auch Tropfen und Sprays zur Anwendung an definierten Stellen, wie z.B. den Augen oder Ohren, sowie Spritzen zur Injektion von Wirkstoffen direkt in Blutbahnen oder Muskel- bzw. Fettgewebe [3]. Der Fokus soll im Folgenden auf flüssigen Medikamenten zur peroralen Einnahme liegen. Der Vorteil dieser Medikamente liegt v.a. in ihrer schnellen Wirkung, da der Wirkstoff bereits in gelöster Form in den menschlichen Körper gelangt [3, 5, 6]. Im Gegensatz zu Tabletten sind flüssige Medikamente einfacher zu schlucken und somit auch für Kinder und Menschen mit Schluckbeschwerden geeignet [2, 6, 7]. Weiterhin sind flüssige Medikamente für Patienten jeden Alters geeignet, da sie i.d.R. gesüßt bzw. aromatisiert sind [5, 6] und aufgrund ihrer Form individuell, d.h. an Alter und Gewicht des Patienten angepasst, dosiert werden können [6, 7]. Aus dem Vorteil der individuellen Dosierbarkeit ergibt sich aber auch der wesentliche Nachteil flüssiger Arzneimittel: Die Dosierung erfolgt mithilfe von Messbechern oder -löffeln sowie durch das Zählen von Tropfen und ist somit oftmals ungenau [7]. Unterstrichen wird dies u.a. durch umfangreiche Studien von Goldman & Scolnic [8], Herrmanns-Clausen et al. [9], Li et al. [10] und Yin et al. [11, 12, 13], in denen die Genauigkeit bzw. Fehleranfälligkeit der Dosierung flüssiger Medikamente durch Eltern für ihre Kinder betrachtet worden ist: Es hat sich gezeigt, dass abhängig von der jeweiligen Studie bzw. Methodik bei mindestens 40 % der beobachteten Eltern Fehldosierungen der Medikamente auftreten. Ursachen dafür sind z.B. die Krümmung der Oberflächen aufgrund der Oberflächenspannung (Ablesefehler) bei der Verwendung von Messbechern [7] oder die fehlerhafte Auslegung oder Anwendung von Tropfendosiersystemen. Außerdem ist bei flüssigen Medikamenten immer darauf zu achten, dass diese Alkohol enthalten können und somit nicht für alle Patientengruppen geeignet sind [3, 6].

1.1.2 Tropfendosierung von flüssigen Medikamenten

Nachdem im vorangegangenen Abschnitt der Apothekenmarkt in Deutschland allgemein sowie flüssige Medikamente zur peroralen Einnahme im Speziellen besprochen worden sind, soll im Folgenden der Fokus auf diejenigen flüssigen Medikamente gerichtet werden, die mithilfe von Tropfendosiersystemen abgegeben werden.

Die gesetzlichen Anforderungen hinsichtlich Tropfverhalten und Genauigkeit die ein solches Tropfendosiersystem erfüllen muss, werden gemäß §55 des Arzneimittelgesetzes im Arznei-

buch geregelt. „Das Arzneibuch ist eine vom Bundesinstitut für Arzneimittel und Medizinprodukte im Einvernehmen mit dem Paul-Ehrlich-Institut und dem Bundesamt für Verbraucherschutz und Lebensmittelsicherheit bekannt gemachte Sammlung anerkannter pharmazeutischer Regeln über die Qualität, Prüfung, Lagerung, Abgabe und Bezeichnung von Arzneimitteln und den bei ihrer Herstellung verwendeten Stoffen“ [14]. Für Tropfendosiersysteme schreibt das Arzneibuch folgendes vor [15, 16]:

- Die Tropfgeschwindigkeit darf zwei Tropfen pro Sekunde nicht überschreiten, d.h. die Tropfenbildungszeit darf 500 ms pro Tropfen nicht unterschreiten.
- Die Masse einer medikamentenabhängigen Einzeldosis darf maximal um $\pm 10\%$ vom Mittelwert aus zehn Einzeldosen abweichen.
- Der Mittelwert der Tropfenmasse aus 10 Einzeldosen darf maximal um $\pm 15\%$ von der Angabe des Medikamenten-Herstellers zur Tropfenmasse abweichen.

Auf dem deutschen Apothekenmarkt wird insgesamt eine Vielzahl von Medikamenten mit Tropfendosiersystemen vertrieben. Dabei handelt es sich zum einen um rezeptfreie Medikamente, z.B. für den Einsatz bei Erkältungskrankheiten (z.B. Meditonsin) oder Husten (z.B. MUCOSOLVAN, AmbroHEXAL), Magen-Darm-Erkrankungen (z.B. Iberogast, sab simplex) sowie Allergien (z.B. Fenistil). Diese Medikamente sind oftmals auf pflanzlicher Basis aufgebaut und / oder fallen in die Gruppe der homöopathischen Medikamente. Außerdem sind sie allgemein bekannt und weit verbreitet. Zum anderen kommen Tropfendosiersysteme aber auch bei verschreibungspflichtigen Arzneimitteln zur Schmerzlinderung, wie z.B. Novaminsulfon / Metamizol-Natrium, zum Einsatz: Aus Daten des „Deutschen Arzneiprüfungsinstitut e.V. (DAPI)“ geht hervor, dass im Jahr 2016 in Deutschland über 7 Mio. Packungen von Präparaten mit diesem Wirkstoff als Tropfen zulasten der gesetzlichen Krankenkassen abgerechnet worden sind [17, 18].

Das breite Spektrum an Medikamenten, welches in Kombination mit Tropfendosiersystemen am Markt erhältlich ist, führt auch zu einer breiten Streuung der potenziellen Nebenwirkungen und Konsequenzen von Fehldosierungen. Auf der einen Seite stehen Arzneimittel wie z.B. sab simplex, bei denen weder Nebenwirkungen noch Folgen von Überdosierungen bekannt sind [19]. Demgegenüber stehen Medikamente wie z.B. Novaminsulfon / Metamizol-Natrium mit Nebenwirkungen von Hautausschlag und Blasenbildung auf der Haut über eine Verringerung der weißen Blutkörperchen und ein Absenken des Blutdrucks bis hin zu Asthmaanfällen, akuten Verschlechterungen der Nierenfunktion und plötzlichem Kreislaufversagen [20]. Eine Überdosierung kann hier das Risiko des Auftretens von Nebenwirkungen deutlich steigern sowie eine Vergiftung zur Folge haben; Unterdosierungen dagegen können zu einem Scheitern

der Therapie führen [11, 21]. Ein weiteres Beispiel für die potenziellen Gefahren einer Überdosierung liefert der Wirkstoff Metoclopramid, welcher die Blut-Hirn-Schranke überwinden und v.a. bei Kindern und Personen unter 30 Jahren zu Bewegungsstörungen und Störungen der Herz-Kreislauf-Funktion führen kann [22].

1.1.3 Arten von Tropfendosiersystemen

Die im Rahmen des vorangegangenen Abschnitts beschriebenen Folgen von Fehl- und Überdosierung zeigen, wie wichtig eine exakte Dosierung von Medikamenten ist. Um eine solche gewährleisten zu können ist eine gute Kenntnis des verwendeten Dosiersystems erforderlich. Im Rahmen der Beschäftigung mit Tropfendosiersystemen ist es daher unerlässlich, einen Blick auf die zwei verschiedenen grundlegenden Ausführungen zu werfen: Den Senkrecht- oder auch Zentraltropfer und den Rand- bzw. Waagrechtropfer.

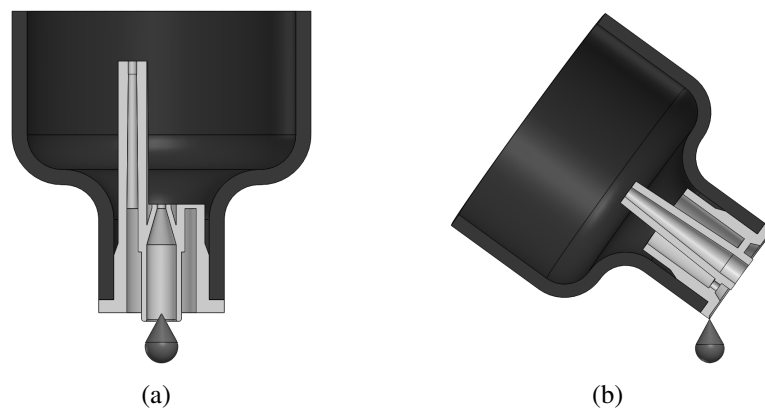


Abbildung 1.1: Arten von Tropfendosiersystemen (angelehnt an [23]): (a) Senkrechtropfer; (b) Randtropfer

Beim Senkrechtropfer (vgl. Abbildung 1.1 (a)) handelt es sich um ein System mit mittig angeordnetem Tropfkanal und exzentrisch angeordnetem Luftrohr, das für eine optimale Dosierung, wie der Name bereits sagt, senkrecht gehalten werden muss. Wird das Tropfendosiersystem schräg gehalten verringert sich die Fläche, von der sich der Tropfen löst und damit die abgegebene Dosis um bis zu 25 % [24, 25]. Bei der Verwendung von Senkrechtropfern können prinzipiell Schwierigkeiten beim Antropfen des Systems auftreten. In diesem Fall befindet sich i.d.R. Flüssigkeit im Luftrohr [5, 6, 7, 24, 25] oder Luft im Tropfkanal [6]. In beiden Fällen kann das System meist durch leichtes Klopfen auf den Flaschenboden zum Tropfen gebracht werden. Dabei ist jedoch darauf zu achten, dass nicht zu stark geklopft wird, um Fehldosierungen aufgrund der Impulse, die durch das Klopfen in das System eingebracht werden, zu vermeiden [5, 6, 7, 24, 25]. Das Ausblasen der Flüssigkeit im Luftrohr mit dem Mund ist aufgrund der Gefahr der Keimübertragung zu unterlassen [6].

Ein Randtropfer (vgl. Abbildung 1.1 (b)) dagegen besteht aus einem mittig angeordneten Rohr, durch das Luft aus der Umgebung in die Flasche strömen kann, und mindestens einer Öffnung, die um das zentrale Rohr herum angeordnet ist. Durch diese Öffnung strömt Flüssigkeit aus der Flasche in den Randbereich des Tropfers und kann von dort abtropfen. Dazu ist der Tropfer, im Gegensatz zum Senkrechttropfer, schräg zu halten. Beim Randtropfer ist darauf zu achten, ob dieser eine Vorzugsrichtung, die z.B. durch einen Pfeil oder eine Ablaufrinne gekennzeichnet sein kann, besitzt oder in einer beliebigen Richtung schräg gehalten werden kann [6]. Aufgrund der unterschiedlichen Definitionen von „schräg halten“ eines jeden Anwenders weist der Tropfprozess des Randtropfers im Vergleich zum Senkrechttropfer eine deutlich höhere Varianz auf, was dazu führt, dass Randtropfer für eine exakte Dosierung nicht geeignet sind [7, 15]. Weiterhin tropfen Randtropfer i.d.R leicht an; ein Klopfen wie beim Senkrechttropfer ist hier nicht erforderlich [6].

1.1.4 Anwendung von Tropfendosiersystemen im Alltag

In den vorangegangenen Abschnitten sind Tropfendosiersysteme als weit verbreitete Methode zur Dosierung flüssiger Medikamente sowie die grundlegenden Unterschiede im Aufbau solcher Systeme und die damit verbundenen Unterschiede in der Handhabung vorgestellt worden. In der Praxis ist der Unterschied zwischen Rand- und Senkrechttropfer jedoch nur gut einem Viertel der Anwender bekannt [4, 24]. In Kombination mit den oftmals fehlenden Hinweisen zur richtigen Handhabung [15, 24, 26] führt dies in vielen Fällen zu einer Fehlbenutzung der Systeme und somit zu Funktionsstörungen und Ungenauigkeiten in der Dosierung. Funktionsstörungen der Systeme führen unabhängig davon, ob ein Anwender gesund oder durch seine Krankheit (z.B. Kopfschmerzen) bereits eingeschränkt bzw. geschwächt ist, zu Reaktionen wie z.B. dem Schütteln der Flasche oder starkem Klopfen auf den Flaschenboden, wenn das Tropfsystem beispielsweise nicht oder zu langsam tropft [15]. Tropft ein System zu schnell neigen Anwender, insbesondere Senioren, dazu, die Flasche schräg zu halten, um die Tropfgeschwindigkeit zu reduzieren [24, 25, 27], was bei den weit verbreiteten Senkrechttropfern wiederum einen Fehler in der Dosierung mit sich bringt [24, 25].

Ein weiteres Problem bei der Verwendung von flüssigen Arzneimitteln in Tropfenform ist die Verwendung von Generika, d.h. von nachgeahmten Medikamenten nach Auslauf des Patentschutzes des Originals. Aufgrund unterschiedlicher Hilfsstoffe in den Medikamenten oder durch die Verwendung variierender Tropfendosiersysteme kann es trotz einer identischen Wirkstoffkonzentration zu Unterschieden im Tropfprozess, z.B. bei der Tropfenmasse, kommen. Bekommt der Anwender in der Apotheke nun aufgrund von Rabattverträgen seiner Krankenkasse ein günstigeres „Nachahmer-Medikament“ und hält sich weiter an die vom Arzt verordnete Tropfenzahl können Fehldosierungen auftreten [6, 22, 28].

Untersuchungen von am Markt erhältlichen Medikamenten mit Tropfendosiersystemen haben außerdem gezeigt, dass eine Vielzahl von Medikamenten den Anforderungen des Arzneibuchs (vgl. Abschnitt 1.1.2) nicht oder nur teilweise entsprechen. Eifler-Bollen & Hensel haben z.B. in zwei Teilstudien 23 [15] bzw. 35 [29] Medikamente mit unterschiedlichen Tropfaufsätzen untersucht und herausgefunden, dass lediglich acht von 23 bzw. sechs von 35 Tropfendosiersystemen die Anforderungen des Arzneibuchs bzgl. der Dosiergenauigkeit erfüllen. Die vom Arzneibuch vorgegebene maximale Tropfgeschwindigkeit von zwei Tropfen pro Sekunde haben in beiden Fällen lediglich 57 % und das Kriterium der Gleichförmigkeit der Tropfen 61 % bzw. 37 % der Medikamente erfüllt. Angelehnt an die Versuche von Eifler-Bollen & Hensel hat Blaser acht weit verbreitete Medikamente unter Laborbedingungen untersucht [30]. Die Anforderungen hinsichtlich der Dosiergenauigkeit und der Tropfgeschwindigkeit sind dabei jeweils von 50 % der Medikamente eingehalten worden; eine Gesetzeskonformität bzgl. aller vom Arzneibuch vorgegebenen Kriterien konnte lediglich zwei der acht Medikamente bescheinigt werden.

Zusammenfassend lässt sich sagen, dass neben dem Anwender und der Verwendung von Generika auch die Auslegung von Tropfendosiersystemen als Fehlerquelle bei der Dosierung in Betracht gezogen werden muss. Berücksichtigt man zudem die in Abschnitt 1.1.2 vorgestellten Nebenwirkungen bzw. Folgen von Fehldosierungen zeigt sich ein deutlicher Handlungsbedarf im Umgang mit flüssigen Medikamenten, die in Tropfenform dosiert werden. In einem ersten Schritt muss dabei die Information des Anwenders über den Umgang mit Tropfendosiersystemen verbessert werden [31]. Im zweiten Schritt ist es erforderlich die Auslegung von Tropfendosiersystemen zu verbessern, die gemäß einem Interview mit einem Produktmanager eines Herstellers von Tropfaufsätzen auch heute noch mithilfe von Erfahrungswerten und durch (einfaches) Ausprobieren erfolgt [30]. Ein Beitrag dazu soll im Rahmen dieser Arbeit geleistet werden.

1.2 Aufgabenstellung

„People generally, and medical men especially, speak of a drop of liquid as if it were some definite quantity, whereas [...] its weight varies not only with the diameter of the tube in which it is formed, but also with the density, temperature, and chemical composition of the liquid.“ (T. Tate, 1864) [32]

Obwohl Tropfen bereits seit über 150 Jahren in der Medizin genutzt und erforscht werden, werden moderne Tropfsysteme zur Dosierung flüssiger Medikamente z.T. immer noch mangelhaft ausgelegt und können so ihr volles Potenzial nicht entfalten. Beim Anwender sorgt dies zum einen für Unmut und Verärgerung über schlecht bzw. nicht funktionierende Systeme. Zum an-

deren stellen nicht einwandfrei funktionierende Dosiersysteme für Arzneimittel aber auch eine erhebliche Gefahr für die Gesundheit der Patienten dar.

Im Rahmen dieser Arbeit sollen daher Tropfendosiersysteme analysiert sowie ein Ansatz zur einfachen Abschätzung von Tropfprozessen erarbeitet werden. Mit dem Ziel, die Nutzung von Tropfendosiersystemen für den Anwender genauer, einfacher und sicherer zu gestalten, ergeben sich für die vorliegende Arbeit folgende Kernpunkte:

- Analyse und Berechnung von Tropfprozessen im Allgemeinen: Um ein grundlegendes Verständnis von Tropfvorgängen zu erlangen, werden zunächst Tropfen an geometrisch vergleichsweise einfachen Glaskapillaren betrachtet. Aus den daraus gewonnen Erkenntnissen soll ein neuer, einfacher Ansatz zur Berechnung von Tropfen abgeleitet werden.
- Analyse und Berechnung von Tropfprozessen an medizinischen Tropfendosiersystemen: Der allgemeine Berechnungsansatz soll auf den Spezialfall der Tropfendosiersysteme adaptiert werden und somit einen Ansatz zur mathematischen Auslegung solcher Systeme liefern. Um dies zu ermöglichen müssen zunächst die auftretenden Tropfprozesse analysiert und verstanden werden.
- Optimierung von medizinischen Tropfendosiersystemen: Basierend auf den gewonnen Erkenntnissen sollen Einflussfaktoren auf bzw. Fehlerquellen von (existierenden) Tropfendosiersystemen identifiziert und darauf aufbauend neue Ansätze zur Optimierung der Tropfendosierung erarbeitet werden.

Im Rahmen dieser Arbeit wird dabei der Fokus auf Senkrechtropfer gelegt, da sich diese insgesamt besser für eine exakte Dosierung eignen und daher eher auch in Kombination mit kritischen Medikamenten zum Einsatz kommen.

1.3 Aufbau und Rahmenbedingungen der Arbeit

Entsprechend der Aufgabenstellung gliedert sich der Hauptteil der Arbeit in drei Abschnitte: In Kapitel 4 wird ein neuer, einfacher Ansatz zur Berechnung von Tropfen an geometrisch vergleichsweise einfachen Kapillaren aus Glas hergeleitet und mithilfe von Messungen und numerischen Simulationen verifiziert. Kapitel 5 enthält neben einer ausführlichen Beschreibung der Geometrie und Funktionsweise von Senkrechtropfern die Adaption und Verifikation des in Kapitel 4 hergeleiteten Berechnungsansatzes auf Tropfendosiersysteme und liefert so einen neuen und verhältnismäßig einfachen Ansatz zur mathematischen Abschätzung der Tropfvorgänge an Senkrechtropfern und somit zur Auslegung von Senkrechtropfern. Abschließend folgt in Kapitel 6 die Optimierung medizinischer Senkrechtropfer. Dabei wird zunächst auf die Proble-

me im praktischen Einsatz der Systeme eingegangen, anschließend werden bereits existierende und im Rahmen dieser Arbeit neu erarbeitete Optimierungsansätze vorgestellt.

Dem Hauptteil der Arbeit vorangestellt sind neben der Einleitung (Kapitel 1) Abschnitte zu den theoretischen Grundlagen (Kapitel 2) und den im Rahmen der Arbeit verwendeten Messaufbauten (Kapitel 3). Abgeschlossen wird die Arbeit mit einer Zusammenfassung und einem Ausblick auf zukünftige Forschungs- und Entwicklungspotenziale auf dem Gebiet der Tropfendosierung (Kapitel 7).

Im Rahmen dieser Arbeit werden Systeme betrachtet, bei denen der Flüssigkeitsbehälter vollständig oberhalb der Kapillare angeordnet ist. Die betrachteten Systeme sind dabei entweder nach oben hin geöffnet (Glaskapillarsysteme, vgl. Kapitel 4) oder mit einem Luftrohr ausgestattet (Senkrechttropfer, vgl. Kapitel 5), um ein ausreichendes Nachströmen von Luft zu ermöglichen. Es wird kein externer Druck bzw. kein externes Druckprofil aufgebracht, wie dies z.B. bei Tintenstrahldruckern der Fall ist. Weiterhin wird vorausgesetzt, dass die betrachteten Kapillaren benetzendes (hydrophiles) Verhalten aufweisen, um ein ungestörtes Einfließen der Flüssigkeit in die Kapillaren zu ermöglichen. Der Volumenstrom durch die Kapillare hängt also im Wesentlichen von den Druckverhältnissen im betrachteten System ab. Eine schematische Darstellung der untersuchten Tropfsysteme ist in Abbildung 1.2 gegeben.

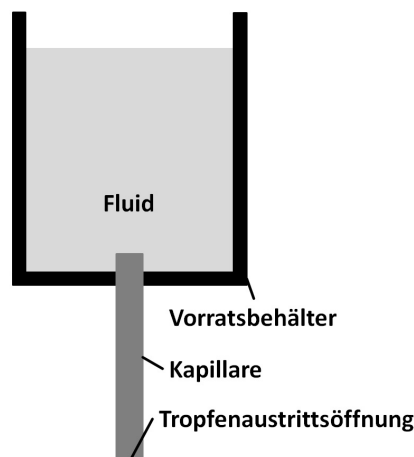


Abbildung 1.2: Schematische Darstellung eines Tropfsystems aus einer Glaskapillare mit darüberliegendem Fluid-Reservoir

Bei der Herleitung des neuen Berechnungsansatzes für hängende bzw. sich von Kapillaren ablösende Tropfen liegt der Fokus v.a. auf der Berechnung des Tropfenvolumens und der Tropfenbildungszeit, da diese Parameter bzgl. der gesetzeskonformen Auslegung von Tropfendosiersystemen entscheidend sind. Eine exakte Berechnung der Tropfengestalt und deren Veränderung im Laufe des Tropfenbildungsprozesses ist nicht erforderlich.

Kapitel 2

Theoretische Grundlagen

Nachdem in Kapitel 1 die Motivation für die Anfertigung dieser Arbeit und die Ziele, die zu erreichen sind, dargelegt worden sind, sollen in diesem Kapitel die Grundlagen erörtert werden, welche zum Verständnis der Arbeit hilfreich bzw. notwendig sind. Dabei wird sowohl auf einfache physikalische Grundlagen wie die (mikro-) fluidischen und thermodynamischen Grundgleichungen, die im Rahmen dieser Arbeit verwendet werden, eingegangen, als auch die Navier-Stokes-Gleichungen sowie die Kontinuitätsgleichung als Grundlage numerischer Strömungsberechnungen kurz vorgestellt. Bevor das Kapitel mit einer Einführung zum Thema Simulation abgeschlossen wird, werden in Abschnitt 2.2 bekannte Ansätze zur Berechnung von hängenden und fallenden Tropfen zusammengefasst und es wird diskutiert, inwiefern diese für die beschriebene Aufgabenstellung geeignet sind.

2.1 (Mikro-) Fluidik

Da es sich sowohl bei den zu betrachtenden Glaskapillaren als auch bei den Tropfendosiersystemen für Medikamente um Systeme handelt, deren relevante Abmessungen im Mikrometer-Bereich liegen, soll im Folgenden kurz auf die Mikrofluidik als Teilgebiet der Strömungslehre eingegangen werden. Eine wesentliche Besonderheit der Mikrofluidik ist dabei, dass von laminaren Strömungen ausgegangen werden kann. Für diese Strömung ist die dimensionslose Reynolds-Zahl, d.h. das Verhältnis zwischen Trägheits- und Reibungskräften, kleiner als 2300 [33]. Die Reynolds-Zahl für zylindrische Rohre lässt sich wie folgt aus der Dichte ρ , der mittleren Strömungsgeschwindigkeit $\bar{v}$, dem Rohrrinnendurchmesser d und der dynamischen Viskosität η berechnen [33].

$$Re = \frac{\rho \bar{v} d}{\eta} \quad (2.1)$$

Die Reynolds-Zahlen der im Rahmen dieser Arbeit betrachteten Senkrechttropfer liegen in der Größenordnung $Re \leq 400$ (vgl. Gleichung (5.1)).

2.1.1 Fluide und deren Eigenschaften

Unter dem Begriff Fluid fassen Böckh [34], Dobrinski [35], Hering [36] und Truckenbrodt [37] sowohl Flüssigkeiten als auch Gase zusammen, die sich im Wesentlichen dadurch auszeichnen, dass sie ihre Form verändern können und sich der Form des Behältnisses, das zur Aufbewahrung genutzt wird, anpassen. Der Unterschied zwischen Flüssigkeiten und Gasen basiert im Wesentlichen auf dem Abstand der einzelnen Teilchen: Während sich in Flüssigkeiten die einzelnen noch recht dicht beieinander befinden und anziehende Kräfte aufeinander auswirken, befinden sich die einzelnen Teilchen in Gasen weit auseinander. Daraus folgt, dass Gase kompressibel und Flüssigkeiten näherungsweise inkompressibel sowie tropfbar sind. Weiterhin füllt ein Gas i.d.R. den kompletten verfügbaren Raum aus, wohingegen sich eine Flüssigkeit entsprechend der Schwerkraft im Behälter orientiert und eine freie Oberfläche bildet. Die drei wichtigsten Stoffgrößen, die im Rahmen dieser Arbeit betrachtet werden, sind die Dichte, die Viskosität und die Oberflächenspannung.

Bei der Dichte ρ handelt es sich um den Quotienten der Masse m und des Volumens V , das ein Fluid einnimmt ($\rho = \frac{m}{V}$; Einheit: $\frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$).

Die Viskosität ist ein Maß für die Reibung im Fluid. Dabei wird sowohl die Reibung zwischen den einzelnen Schichten des Fluids als auch die Reibung an Oberflächen und Kanalwänden berücksichtigt. Grundsätzlich unterscheidet man die dynamische Viskosität η (Einheit: Pa s bzw. $\frac{\text{kg}}{\text{ms}}$) und die kinematische Viskosität ν (Einheit: $\frac{\text{m}^2}{\text{s}}$), welche sich als Quotient aus der dynamischen Viskosität η und der Dichte ρ berechnen lässt ($\nu = \frac{\eta}{\rho}$).

Die dritte wichtige Größe zur Charakterisierung der verwendeten Fluide ist die Oberflächenspannung σ . Diese entsteht aufgrund unterschiedlich großer Anziehungskräfte auf Flüssigkeitsteilchen an einer Grenzfläche und kann aus dem Quotienten der Änderung der Oberflächenenergie dW und der damit verbundenen Oberflächenänderung dO ($\sigma = \frac{dW}{dO}$; Einheit: $\frac{\text{N}}{\text{m}}$ bzw. $\frac{\text{kg}}{\text{s}^2}$) berechnet werden. Berücksichtigt man im Rahmen dieser Grenzflächenbetrachtung noch den Berührungspunkt der Fluide mit der festen Wand, müssen deren Anziehungskräfte mit berücksichtigt werden und es tritt benetzendes (hydrophiles) oder nicht-benetzendes (hydrophobes) Verhalten auf. Die Spezifikation dieses Verhaltens erfolgt dabei über den Kontaktwinkel Θ : Dieser ist bei benetzendem Verhalten kleiner als 90° und bei nicht-benetzendem Verhalten größer als 90° .

Allgemein ist zu beachten, dass alle drei Größen u.a. temperaturabhängig sind.

Weiterführende Information zu Fluiden können z.B. in [34, 35, 36, 37] nachgelesen werden.

Als tropfende Fluide werden im Rahmen dieser Arbeit neben Wasser auch Ethanol und Glycerin verwendet; alle drei Flüssigkeiten weisen in Kombination mit Borsilikatglas ein benetzendes Verhalten auf, wie es auch bei medizinischen Tropfflaschen und den zugehörigen Medikamenten beobachtet werden kann. Die benötigten Stoffwerte werden aus dem „CRC Handbook of

Chemistry and Physics (97th Edition)“ [38] und dem Buch „Physical Properties of Glycerine and its Solutions“ [39] entnommen und sind in Tabelle 2.1 für eine Temperatur von 25 °C beispielhaft wiedergegeben.

Eigenschaft Einheit	Dichte ρ kg/m ³	dyn. Viskosität η 10 ⁻³ kg/(ms)	Oberflächenspannung σ 10 ⁻³ kg/s ²
Wasser	997,05	0,890	72,06
Ethanol	785,03	1,074	21,91
Glycerin	1258,02	920,737	62,24
Luft	1,161	0,0185	-

Tabelle 2.1: Ausgewählte Stoffgrößen relevanter Fluide bei 25 °C [38, 39]

Bei genauerer Betrachtung der einzelnen Stoffwerte zeigt sich die bereits angesprochene Temperaturabhängigkeit der Flüssigkeitseigenschaften: Für alle drei Fluide schwanken die Stoffwerte zwischen 20 °C und 30 °C, d.h. im Bereich der üblichen Raumtemperatur, bereits um bis zu 10 %. Um Abweichungen zwischen Messungen und Berechnungen aufgrund fehlerhafter Stoffwerte zu vermeiden, ist daher im Rahmen dieser Arbeit bei Messungen die Temperatur aufgezeichnet worden. Die in den Berechnungen verwendeten Stoffwerte konnten damit entsprechend der Temperatur bei der zu vergleichenden Messung angepasst werden. Die Stoffwerte bei einer bestimmten Temperatur sind dabei über Interpolation aus den nächstliegenden gegebenen Literatur-Werten errechnet worden (lineare Interpolation zwischen zwei Punkten für Oberflächenspannung und Dichte, exponentieller Interpolationsansatz nach [40] mit drei Punkten für die Viskosität); der durch die Interpolation entstehende Fehler ist, im Gegensatz zum Fehler aus einer ungenauen Berücksichtigung der Temperatur, vernachlässigbar.

2.1.2 Das Gesetz von Boyle-Mariotte

Beim Gesetz von Boyle-Mariotte handelt es sich um eine vereinfachte Form der thermischen Zustandsgleichung idealer Gase, welches von R. Boyle und E. Mariotte im 17. Jahrhundert unabhängig voneinander im Zuge ihrer jeweiligen Experimente entdeckt worden ist. Es besagt, dass in einem geschlossenen, isothermen System das Produkt aus Druck p und Volumen V eines Gases konstant ist [35, 36, 41]; kurz:

$$p V = \text{konst.} \quad (2.2)$$

2.1.3 Kapillarströmung und Einlaufdruckverlust

Die Strömung durch eine zylindrische Kapillare kann im einfachsten Fall mit dem Gesetz von Hagen-Poiseuille beschrieben werden. Dieses Gesetz dient nach Junge [33] und Sutura & Skalakov [42] zur Berechnung von Volumenströmen $\dot{V}$ in zylindrischen Rohren der Länge l und des Innenradius r . Die Strömung wird dabei durch eine Druckdifferenz Δp zwischen den beiden Öffnungen der Kapillare bzw. des Rohres angetrieben und folgt den Gesetzen der Laminarität, d.h. es bildet sich ein parabolisches Geschwindigkeitsprofil aus. Das Gesetz von Hagen-Poiseuille wird grundsätzlich aus der Reibungskraft im Rohr und der antreibenden Druckkraft hergeleitet [43] und kann mithilfe der dynamischen Viskosität η dargestellt werden:

$$\dot{V} = \frac{\pi r^4 \Delta p}{8 \eta l} \quad (2.3)$$

Angelehnt an die Netzwerktheorie [44], bei der analog zur Berechnung elektrischer Stromkreise eine Berechnung fluidischer Systeme mithilfe des Ansatzes

$$\Delta p = R_{\text{fl}} \dot{V} \quad (2.4)$$

erfolgt, ergibt sich aus Gleichung (2.3) der fluidische Widerstand für eine zylindrische Kapillare:

$$R_{\text{fl}} = \frac{8 \eta l}{\pi r^4} \quad (2.5)$$

Die mittlere Strömungsgeschwindigkeit lässt sich mithilfe des Volumenstroms $\dot{V}$ und der durchströmten Fläche A wie folgt berechnen:

$$\bar{v} = \frac{\dot{V}}{A} \quad (2.6)$$

In Abbildung 1.1 ist zu erkennen, dass bei Tropfaufsätzen für medizinische Tropfflaschen nicht nur zylindrische Rohre auftreten, sondern auch Abschnitte mit kontinuierlicher Querschnittserweiterung betrachtet werden müssen. Diese Kanalgeometrien sind in der Strömungslehre als Diffusoren bekannt und dienen hauptsächlich dazu, Bewegungsenergie der Strömung in Druck, d.h. in potenzielle Energie, umzuwandeln [41]. Bei sprunghaften Übergängen kommt es dabei zu nicht vernachlässigbaren Verlusten aufgrund von Strömungsablösungen und Verwirbelungen an der Sprungkante. Diese Verluste lassen sich bei turbulenten Strömungen nach Böckh & Saumweber [34], Böswirth & Bschorer [45] und Sigloch [41] mithilfe von kontinuierlichen Querschnittsänderungen mit Öffnungswinkeln von maximal 10° [45] reduzieren bzw. vermeiden. Bei den im Rahmen dieser Arbeit betrachteten Tropfaufsätzen (Senkrechttropfer)

treten im Gegensatz zur genannten Literatur nur laminare Strömungen ($Re \leq 400$, vgl. Gleichung (5.1)) über kontinuierliche Querschnittsänderungen mit Öffnungswinkeln, die die von Böswirth & Bschorer genannten 10° kaum überschreiten, auf. Zusätzliche Verluste aufgrund von Strömungsablösungen und Verwirbelungen können daher vernachlässigt werden. Zur Berechnung des fluidischen Widerstandes aufgrund der Viskosität η (dynamisch) bzw. ν (kinematisch) in einem Rohr mit konstanter Querschnittsänderung wird der Ansatz in Gleichung (2.5) für zylindrische Kapillaren in infinitesimal dünne Scheiben der Dicke dx mit dem Radius

$$r(x) = \frac{r_{\text{out}} - r_{\text{in}}}{l} x + r_{\text{in}} \quad (2.7)$$

in Abhängigkeit des Ortes x zerlegt; dabei ist r_{in} der Radius am Diffusoreingang, r_{out} der Radius am Diffusorausgang und l die Länge des Diffusors auf der sich der Ort x befindet (vgl. Abbildung 2.1).

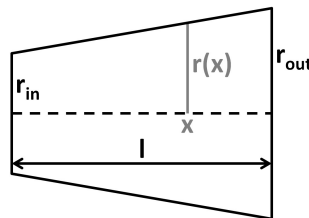


Abbildung 2.1: Skizze zur Verdeutlichung der Funktion $r(x)$

Durch Addition der Widerstände $dR_{\text{fl,Diffusor}}$ unter Berücksichtigung von Gleichung (2.7) ergibt sich der fluidische Widerstand des Diffusors:

$$R_{\text{fl,Diffusor}} = \int_0^l dR_{\text{fl,Diffusor}} dx = \int_0^l \frac{8 \eta}{\pi r(x)^4} dx = -\frac{8 \eta}{3 \pi (r_{\text{out}} - r_{\text{in}})} l (r_{\text{out}}^{-3} - r_{\text{in}}^{-3}) \quad (2.8)$$

Neben den fluidischen Widerständen die sich aufgrund der viskosen Reibung der Strömung ergeben, müssen im Fall der hier betrachteten Kapillar- bzw. Tropfendosiersysteme auch Einlaufdruckverluste betrachtet werden. Dabei handelt es sich um Verluste die sich beim Einströmen eines Fluids in eine Kapillare aufgrund der Ausbildung des Strömungsprofils ergeben; Einlaufdruckverluste erhöhen also den Widerstand gegen das Durchströmen einer Kapillare. Das Thema Einlaufdruckverlust wird im Rahmen der Dissertation von M. Stange [46] ausführlich behandelt und soll daher an dieser Stelle nur kurz wiedergegeben werden.

Eine wichtige (Hilfs-) Größe bei der Betrachtung der Einlaufeffekte ist die Einlaufstrecke L_e . Diese gibt an, wie weit ein Fluid in einer gegebenen Kapillare strömen muss, bis das Strömungsprofil vollständig aufgebaut ist. Stange leitet dabei mit Bezug auf Seyer & Catania [47] (zitiert aus [46]) und White [48] den Ansatz

$$L_e = 0,06 Re d \quad (2.9)$$

ab; dabei ist Re die Reynoldszahl (vgl. Gleichung (2.1)) der betrachteten Strömung und $d = 2r$ der Kapillardurchmesser. Bei der Berechnung des Einlaufdruckverlustes muss unterschieden werden, ob die Kapillare lang genug ist, um eine vollständige Strömungsbildung zu ermöglichen ($l \geq L_e$). Ist dies der Fall, lässt sich der Einlaufdruckverlust verhältnismäßig einfach mit dem Ansatz von Schmidt & Zeldin [49] bestimmen und stellt eine Erweiterung der Gleichung (2.4) dar. Für den Druckverlust Δp einer Kapillarströmung zwischen zwei Punkten ergibt sich daraus

$$\Delta p = R_{fl} \dot{V} + K \frac{\rho \bar{v}^2}{2} \quad (2.10)$$

mit der mittleren Strömungsgeschwindigkeit $\bar{v}$ und dem Einlaufdruck-Koeffizienten K . Gleichung (2.10) veranschaulicht den Beitrag des Einlaufdruckverlustes zur Erhöhung des Widerstandes gegen das Durchströmen der Kapillare.

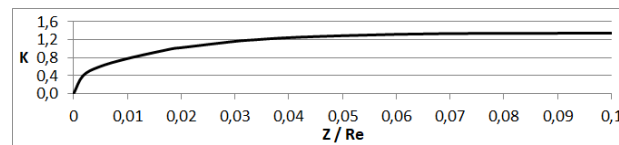


Abbildung 2.2: Entwicklung des Einlaufdruck-Koeffizienten K bei einer Reynoldszahl von $Re = 500$ (Bsp.) über der normierten Strömungsgröße $\frac{Z}{Re}$ nach Schmidt & Zeldin [49]

Abbildung 2.2 zeigt exemplarisch die Entwicklung des Einlaufdruck-Koeffizienten K nach Schmidt & Zeldin [49] über der normierten strömungs- bzw. kapillarbeschreibenden Größe $\frac{Z}{Re}$; Z ist dabei der entdimensionalisierte axiale Abstand vom Rohreingang:

$$\frac{Z}{Re} = \frac{l}{2r Re} = \frac{\pi \eta l}{4 \rho \dot{V}} \quad (2.11)$$

Für den Fall, dass die Kapillarlänge kürzer als die theoretisch benötigte Einlaufstrecke L_e ist ($l < L_e$), wird in [46] der Ansatz von Sparrow et al. [50] vorgestellt bzw. genutzt. Hierbei wird der Einlaufdruck-Koeffizient K in Abhängigkeit der zu berücksichtigenden Spezifikation der Strömung

$$B = \frac{l \nu}{r^2 \bar{v}} = \frac{\pi \eta l}{\dot{m}} \quad (2.12)$$

mit der kinematischen Viskosität ν , der dynamischen Viskosität η und dem Massenstrom $\dot{m}$ durch die Kapillare, abhängig von der Länge l und unabhängig vom Radius der durchströmten Kapillare berechnet:

$$K(l) = \frac{4}{3} + \sum_{j=1}^{\infty} \frac{8}{a_j^2} (e^{-a_j^2 B} - 3) e^{-a_j^2 B} \quad (2.13)$$

In Gleichung (2.13) entsprechen die Werte a_j den Eigenwerten der von Sparrow et al. gelösten Impulsgleichung zur Herleitung des präsentierten Ansatzes; diese Eigenwerte sind in [50] aufgeführt. Im Vergleich zum Ansatz nach Schmidt & Zeldin ist dieser Ansatz zwar mit etwas höherem Rechenaufwand verbunden, folgt aber der tatsächlichen Entwicklung der Einlaufdruckkoeffizienten, wie er in Abbildung 2.2 dargestellt ist.

2.1.4 Die Young-Laplace-Gleichung

Die Young-Laplace-Gleichung (vgl. [51]) ist eine nach Thomas Young (1773-1829) und Pierre-Simon Laplace (1749-1827) benannte Gleichung zur Beschreibung von gekrümmten Flüssigkeitsgrenzflächen. Sie beruht darauf, dass Flüssigkeiten aufgrund der Oberflächenspannung grundsätzlich die geringste Oberfläche bei maximalem Volumen anstreben, da dies den energetisch günstigsten Zustand darstellt. Liegt eine gekrümmte Fläche vor, dann zeigt dies an, dass eine Druckdifferenz Δp über die Grenzfläche hinweg existiert. Die Krümmung der Fläche lässt sich über die beiden Krümmungsradien R_1 und R_2 beschreiben; diese stehen dabei senkrecht aufeinander und liegen immer in einer Ebene mit dem Normalenvektor am betrachteten Oberflächenpunkt (vgl. Abbildung 2.3).

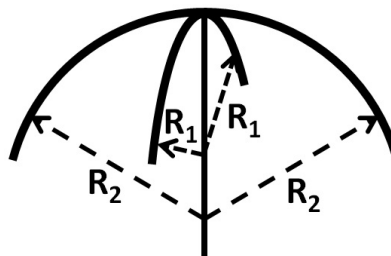


Abbildung 2.3: Skizze zur Veranschaulichung der Young-Laplace-Gleichung

Die Druckdifferenz, auch als Laplace-Druck bezeichnet, ergibt sich aus der Gleichung

$$\Delta p = \sigma \left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right) \quad (2.14)$$

und es wird deutlich, „dass der Krümmungsdruck umso größer ist, je kleiner die Krümmungsradien R_1 und R_2 sind [...]“ [52].

Für eine Kugel mit Radius $R_1 = R_2 = R$ gilt:

$$\Delta p = \frac{2\sigma}{R} \quad (2.15)$$

2.1.5 Grundlagen der Navier-Stokes- und Kontinuitätsgleichung

Unter dem Begriff der Navier-Stokes-Gleichungen (benannt nach Claude Louis Marie Henri Navier (1785-1836) und Sir George Gabriel Stokes (1819-1903)) werden nach Lecheler [53] bei räumlichen Betrachtungen i.d.R. die Impulserhaltungsgleichungen der drei Koordinatenachsen, d.h. der x-, y- und z-Achse (kartesische Koordinaten), verstanden; zusammen mit der Massenerhaltungsgleichung (Kontinuitätsgleichung) beschreiben die Navier-Stokes-Gleichungen die Bewegung von zähen, isotropen Flüssigkeiten in fluidischen Systemen. Die Gleichungen bilden ein umfangreiches Differentialgleichungssystem, welches nur in einfachen Fällen analytisch gelöst werden kann; in allen anderen Fällen sind numerische Strömungsberechnungen erforderlich (vgl. Abschnitt 2.4). Zur Lösung des Gleichungssystems werden zum einen die verwendeten Stoffwerte, wie z.B. die Dichte ρ oder die dynamische Viskosität η , und zum anderen Randbedingungen benötigt. Diese Randbedingungen übergeben den Gleichungen dabei alle Informationen bzgl. der zugrundeliegenden Geometrie und behandeln damit die Fragen der Zu- und Abströmung an den Grenzen des Strömungsfeldes sowie des Verhaltens der Strömung entlang fester Wände. Allgemein lässt sich die Navier-Stokes-Gleichung, angelehnt an Truckenbrodt [37], folgendermaßen darstellen:

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} \right) = -\nabla p + \eta \nabla^2 \mathbf{v} + \mathbf{f} \quad (2.16)$$

Daraus abgeleitet lässt sich die Navier-Stokes-Gleichungen in x-, y- und z-Richtung (kartesische Koordinaten) bzw. in r-, ϕ - und z-Richtung (Zylinderkoordinaten) und die Kontinuitätsgleichung für kompressible Fluide wie folgt darstellen [37]:

Kartesische Koordinaten:

$$\rho \left(\frac{\partial v_x}{\partial t} + v_x \frac{\partial v_x}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_x}{\partial y} + v_z \frac{\partial v_x}{\partial z} \right) = -\frac{\partial p}{\partial x} + \eta \left(\frac{\partial^2 v_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v_x}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v_x}{\partial z^2} \right) + f_x \quad (2.17)$$

$$\rho \left(\frac{\partial v_y}{\partial t} + v_x \frac{\partial v_y}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_y}{\partial y} + v_z \frac{\partial v_y}{\partial z} \right) = -\frac{\partial p}{\partial y} + \eta \left(\frac{\partial^2 v_y}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v_y}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v_y}{\partial z^2} \right) + f_y \quad (2.18)$$

$$\rho \left(\frac{\partial v_z}{\partial t} + v_x \frac{\partial v_z}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_z}{\partial y} + v_z \frac{\partial v_z}{\partial z} \right) = -\frac{\partial p}{\partial z} + \eta \left(\frac{\partial^2 v_z}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v_z}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v_z}{\partial z^2} \right) + f_z \quad (2.19)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho v_x)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v_y)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho v_z)}{\partial z} = 0 \quad (2.20)$$

Zylinderkoordinaten:

$$\begin{aligned} & \rho \left(\frac{\partial v_r}{\partial t} + v_r \frac{\partial v_r}{\partial r} + \frac{v_\varphi}{r} \frac{\partial v_r}{\partial \varphi} + v_z \frac{\partial v_r}{\partial z} - \frac{v_\varphi^2}{r} \right) = \\ & -\frac{\partial p}{\partial r} + \eta \left(\frac{\partial^2 v_r}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial v_r}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 v_r}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2 v_r}{\partial z^2} - \frac{v_r}{r^2} - \frac{2}{r^2} \frac{\partial v_\varphi}{\partial \varphi} \right) + f_r \end{aligned} \quad (2.21)$$

$$\begin{aligned} & \rho \left(\frac{\partial v_\varphi}{\partial t} + v_r \frac{\partial v_\varphi}{\partial r} + \frac{v_\varphi}{r} \frac{\partial v_\varphi}{\partial \varphi} + v_z \frac{\partial v_\varphi}{\partial z} - \frac{v_r v_\varphi}{r} \right) = \\ & -\frac{1}{r} \frac{\partial p}{\partial \varphi} + \eta \left(\frac{\partial^2 v_\varphi}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial v_\varphi}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \cdot \frac{\partial^2 v_\varphi}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2 v_\varphi}{\partial z^2} - \frac{v_\varphi}{r^2} - \frac{2}{r^2} \frac{\partial v_r}{\partial \varphi} \right) + f_\varphi \end{aligned} \quad (2.22)$$

$$\begin{aligned} & \rho \left(\frac{\partial v_z}{\partial t} + v_r \frac{\partial v_z}{\partial r} + \frac{v_\varphi}{r} \frac{\partial v_z}{\partial \varphi} + v_z \frac{\partial v_z}{\partial z} \right) = \\ & -\frac{\partial p}{\partial z} + \eta \left(\frac{\partial^2 v_z}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial v_z}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 v_z}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2 v_z}{\partial z^2} \right) + f_z \end{aligned} \quad (2.23)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial(\rho r v_r)}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial(\rho v_\varphi)}{\partial \varphi} + \frac{\partial(\rho v_z)}{\partial z} = 0 \quad (2.24)$$

Die Herleitung der Kontinuitätsgleichung erfolgt nach Lecheler [53] und Truckenbrodt [37] aus der Massenerhaltung im betrachteten System. Dazu wird für ein Volumenelement ΔV eine Massenbilanz mit den Zu- und Abflüssen aller Raumrichtungen aufgestellt und unter der Voraussetzung ausgewertet, dass im Volumenelement keine Masse erzeugt oder vernichtet wird. Aus diesen Überlegungen heraus folgen die Gleichungen (2.20) und (2.24) für kompressible Fluide. Für den Spezialfall der inkompressiblen Fluide, wie er im Rahmen dieser Arbeit betrachtet werden soll, gilt $\rho = \text{konstant}$, d.h. $\frac{\partial \rho}{\partial t} = 0$. Da die Dichte ρ als Konstante vor die Ableitungen gezogen werden kann, vereinfacht sich Gleichung (2.20) zu

$$\frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} + \frac{\partial v_z}{\partial z} = 0 \quad (2.25)$$

und Gleichung (2.24) zu

$$\frac{1}{r} \frac{\partial(r v_r)}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial v_\varphi}{\partial \varphi} + \frac{\partial v_z}{\partial z} = 0. \quad (2.26)$$

Die Herleitung der Navier-Stokes-Gleichungen erfolgt nach Lecheler [53] ähnlich wie die Herleitung der Kontinuitätsgleichung: Man bildet die Impulsbilanz für ein Volumenelement ΔV , in der bereits die von außen angreifenden Kräfte und Drücke berücksichtigt sind, und leitet daraus

die benötigten Impulserhaltungsgleichungen ab. Truckenbrodt [37] dagegen betrachtet die beiden Seiten der Gleichung getrennt: Die linke Seite der Navier-Stokes-Gleichungen beschreibt die Kraftdichte, d.h. die Kraft pro Volumen, die sich aus der Beschleunigung a des betrachteten (infinitesimalen) Fluidvolumens ergibt. Dazu bildet er das totale Differenzial der Geschwindigkeit $v(x, y, z, t)$ und erhält dadurch die Änderung der Geschwindigkeit über der Zeit: Zum einen die Beschleunigung aufgrund der Ortsänderung und zum anderen die Beschleunigung aufgrund der Änderung des betrachteten Zeitpunktes; die Beschleunigung wird mit der Dichte ρ zur Kraftdichte multipliziert. Auf der rechten Seite der Navier-Stokes-Gleichungen werden die Kraftdichten der von außen einwirkenden Kräfte berücksichtigt. Es handelt sich dabei im Wesentlichen um die Druckkraft aus dem anliegenden Druck p der Strömung, die Reibungskraft, welche aufgrund der Viskosität η des Fluids entgegen der Bewegungsänderung wirkt, und die Volumenkräfte f , z.B. die Gewichtskraft.

Ein tieferes Einsteigen in die Herleitung der behandelten Gleichungen soll an dieser Stelle nicht erfolgen. Für Interessierte ist hier die bereits genannte Literatur [37, 53] zu empfehlen. Einen sehr anschaulichen Überblick über die Thematik liefern außerdem Prof. Roger Rangel von der University of California in Irvine (USA) in seiner Vorlesung „Introduction to Fluid Mechanics“ [54] und Prof. Andreas Malcherek von der Universität der Bundeswehr in München in der Vorlesung „Hydromechanik“ [55].

2.2 Tropfenberechnung

Neben den allgemeinen (mikro-) fluidischen Grundlagen, wie sie im vorangegangenen Abschnitt 2.1 vorgestellt worden sind, ist die Literatur zum Thema Tropfenberechnung für die Einordnung und das weitere Verständnis der Arbeit hilfreich. Zum einen sollen an dieser Stelle Ansätze vorgestellt werden, von denen der älteste bereits über 150 Jahre alt ist, zum anderen sollen diese Ansätze hinsichtlich ihrer Adaptierbarkeit auf Tropfendosiersysteme, wie sie im Rahmen dieser Arbeit untersucht werden sollen, bewertet werden. Literatur speziell zur Berechnung von Tropfendosiersystemen konnte im Rahmen der durchgeführten Recherchen und studentischen Arbeiten [4, 17, 30, 56, 57] nicht ausgemacht werden.

2.2.1 Kraftwirkung zwischen Tropfen und Kapillare

Eine wesentliche Grundlage der betrachteten Systeme ist die Tatsache, dass sich das Fluid-Reservoir über der Kapillare, an der sich der Tropfen bildet, befindet (vgl. Abschnitt 1.3). Dadurch wirkt bei der Bildung eines einzelnen Tropfens ein nahezu konstanter Druck (hydrostatischer Druck der Flüssigkeitssäule) auf den Tropfen. Einem kontinuierlichen Strom durch

die Kapillare bzw. aus der Kapillare aufgrund dieses anliegenden Drucks wirkt neben der Viskosität im Rohr die Oberflächenspannung des Fluides am Tropfenauslass des Rohrs entgegen. Dies führt letztendlich zu einer Krümmung der Fluidoberfläche am Tropfenauslass, d.h. zu einer Tropfenbildung. Der dadurch resultierende Drucksprung zwischen Tropfen und Umgebungsluft lässt sich mithilfe der Young-Laplace-Gleichung (Gleichung (2.14)) berechnen.

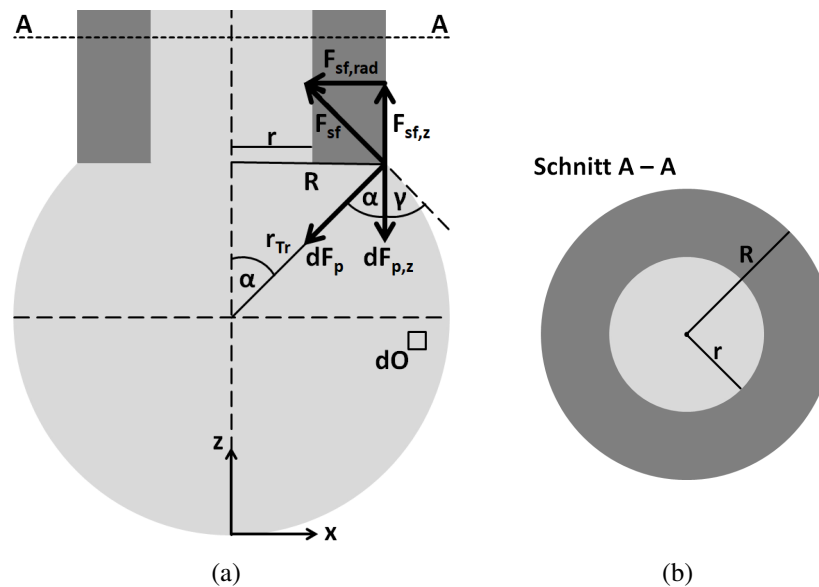


Abbildung 2.4: Kraftwirkung aufgrund der Oberflächenspannung am hängenden Tropfen: (a) Kräfte am statisch hängenden Tropfen; (b) Schnitt durch die Kapillare

Abbildung 2.4 (a) zeigt schematisch einen statisch hängenden, kugelförmigen Tropfen an der Unterseite einer Kapillare; der Ursprung des Koordinatensystems befindet sich dabei (und im weiteren Verlauf der Arbeit) an der Unterseite, d.h. im Scheitel des Tropfens. In diesem Zustand gilt zwischen dem Winkel γ (zwischen Tropfenaußenseite und Kapillaraußenmantel) und dem Kontaktwinkel Θ (zwischen Fluid und Kapillarmaterial) die Beziehung

$$\gamma < \Theta \quad (2.27)$$

und zwischen den Winkeln α und γ die Beziehung

$$\gamma = 90^\circ - \alpha. \quad (2.28)$$

Erreicht γ den Kontaktwinkel Θ ($\gamma = \Theta$), ist der geometrische Stopp, den die Außenkante der Kapillare darstellt, überwunden und der Tropfen kann sich bei weiter nachströmendem Fluid theoretisch an der Kapillare hochziehen; dieser Fall soll hier allerdings nicht betrachtet werden (vgl. Gleichung (2.27)).

An jedem Flächenelement dO der Tropfenoberfläche lässt sich mithilfe des über die Young-Laplace-Gleichung berechneten Drucksprungs Δp eine Kraftkomponente

$$dF_p = \Delta p \, dO = \frac{2\sigma}{r_{Tr}} \, dO \quad (2.29)$$

senkrecht zur Tropfenoberfläche berechnen, die durch die Oberflächenspannung σ als Reaktion auf den anliegenden Druck aufgebracht wird; r_{Tr} gibt den Tropfenradius wieder.

Damit der Tropfen statisch an der Kapillare hängen kann, muss die Oberflächenspannung der Kraftkomponente

$$dF_{p,z} = dF_p \cos(\alpha) \quad (2.30)$$

mit der die Druckkraft am Berührungspunkt von Tropfen und Kapillare nach unten wirkt, entgegenwirken ($dF_{p,z} = dF_{sf,z}$). Unter Verwendung des Oberflächenintegrals einer Kugel [58]

$$dO = r_{Tr}^2 \sin(\alpha) \, d\alpha \, d\beta \quad (2.31)$$

mit dem Rotationswinkel β um die vertikale z -Achse ergibt sich durch Einsetzen von Gleichung (2.29) in Gleichung (2.30):

$$dF_{p,z} = \frac{2\sigma}{r_{Tr}} r_{Tr}^2 \sin(\alpha) \, d\alpha \, d\beta \cos(\alpha) \quad (2.32)$$

Die Integration über die komplette Tropfenoberfläche mithilfe der Integration um die vertikale z -Achse im Zentrum von Tropfen und Kapillare

$$\int_0^{2\pi} d\beta = 2\pi \quad (2.33)$$

und dem Integral (vgl. [58])

$$\int_{\alpha}^{\pi} \sin(ax) \cos(ax) \, dx = \frac{\sin^2(ax)}{2a} \quad (2.34)$$

liefert die Kraft $F_{sf,z}$, mit der die Kapillare den Tropfen hält:

$$F_{sf,z} = F_{p,z} = 2\sigma r_{Tr} \cdot 2\pi \int_{\alpha}^{\pi} \sin(\alpha) \cos(\alpha) \, d\alpha \quad (2.35)$$

$$F_{sf,z} = F_{p,z} = 2\pi\sigma r_{Tr} \sin^2(\alpha) \quad (2.36)$$

$$F_{sf,z} = F_{p,z} = 2\pi\sigma R \sin(\alpha) \quad (2.37)$$

Unter Berücksichtigung der Beziehung in Gleichung (2.28) ergibt sich weiterhin

$$F_{\text{sf},z} = F_{\text{p},z} = 2 \pi \sigma R \cos(\gamma); \quad (2.38)$$

die radialen Komponenten $F_{\text{sf},\text{rad}}$ (vgl. Abbildung 2.4) kompensieren sich über den Umfang der Kapillare und haben somit keinen Einfluss auf die Tropfenbildung.

Gleichung (2.37) bzw. (2.38) entspricht der in der Literatur (vgl. z.B. [52, 59]) angegebenen Haltekraft aufgrund der Oberflächenspannung an einer runden Kapillare bzw. der Kraft

$$F = \Delta p A_R = \frac{2 \sigma}{r_{\text{Tr}}} \pi R^2 = 2 \pi \sigma R \sin(\alpha) = 2 \pi \sigma R \cos(\gamma)$$

mit der der Druck im kugelförmigen Tropfen auf die Kreisfläche mit dem Radius R wirkt.

Durch den vorgestellten Ansatz wird gezeigt, dass der im Tropfen herrschende Druck aufgrund des Widerstandes der Oberflächenspannung gegen den hydrostatischen Druck zustande kommt.

2.2.2 Tropfenablösung: Abschätzung des maximalen Tropfenvolumens

Mit dem Thema Tropfen, und welche Auswirkungen diese auf einen Dosiervorgang haben, hat sich Tate [32] bereits im Jahr 1864 beschäftigt (vgl. Abschnitt 1.2). Er beschreibt die Abrissbedingung für einen hängenden Tropfen aus dem Gleichgewicht der Adhäsionskräfte zwischen Flüssigkeit und Kapillare mit Radius R , d.h. der Haltekraft (vgl. Gleichung (2.38) mit $\gamma = 0^\circ$)

$$F_{\text{sf}} = 2 \pi R \sigma \quad (2.39)$$

aufgrund der Oberflächenspannung σ , und der Gewichtskraft

$$F_g = m_{\text{Tr}} g = \rho V_{\text{Tr}} g \quad (2.40)$$

des Tropfens, wobei m_{Tr} die Masse und V_{Tr} das Volumen des Tropfens, g die Erdbeschleunigung und ρ die Dichte des Fluids darstellt. Aus diesem Gleichgewicht lässt sich ein kritisches Tropfenvolumen ableiten, das hier V_{Tate} genannt werden soll. Durch die weitere Volumenzunahme überwiegt die Gewichtskraft und der Tropfen mit dem Volumen V_{Tate} reißt ab.

$$V_{\text{Tate}} = \frac{2 \pi R \sigma}{\rho g} \quad (2.41)$$

Aus seinen Experimenten schlussfolgerte Tate, dass das Tropfenvolumen proportional zum Radius R der Kapillare ist und dass die chemische Zusammensetzung der tropfenden Flüssigkeit, unabhängig von der Dichte, einen nicht zu vernachlässigenden Einfluss auf das Tropfenvolu-

men hat; aus heutiger Sicht müssen hier v.a. die Viskosität und die Oberflächenspannung der Flüssigkeit berücksichtigt werden.

Lord Rayleigh [60] veröffentlichte 1899 weitere Experimente zu Tate's Ansatz. Nach Rayleigh's Meinung berücksichtigt Tate weder, dass ein Teil des Tropfens beim Einschnürungs- und Abrissvorgang an der Kapillare verbleibt, noch die Krümmung des Tropfens und die dadurch entstehenden Druckverhältnisse. Er ändert Gleichung (2.41) daher unter Verwendung einer Korrekturfunktion f_{Rayleigh} , abhängig von der Oberflächenspannung σ , der Erdbeschleunigung g , der Dichte ρ und dem Radius R zu

$$V_{\text{Rayleigh}} = \frac{R \sigma}{\rho g} f_{\text{Rayleigh}}(\sigma, g, \rho, R). \quad (2.42)$$

Die von Rayleigh durchgeführten Experimente mit Glas- und Metallkapillaren haben für Wasser einen Korrekturfaktor f_{Rayleigh} von 3,8 ergeben; dieser Faktor liegt etwas über den von Tate [32] verwendeten 2π .

1919 haben sich auch Harkins & Brown [61] im Rahmen ihrer Untersuchungen zur Bestimmung der Oberflächenspannung von Fluiden mit der Größe von Tropfen auseinandergesetzt. Ihr Ansatz basiert ebenfalls auf dem Ansatz von Tate [32] und Gleichung (2.41) wird um einen Korrekturfaktor $f_{\text{HarkinsBrown}}$, abhängig von der Gestalt S des Tropfens, ergänzt:

$$V_{\text{HarkinsBrown}} = \frac{2 \pi R \sigma}{\rho g} f_{\text{HarkinsBrown}}(S) \quad (2.43)$$

Für ihren Korrekturfaktor $f_{\text{HarkinsBrown}}$ haben Harkins & Brown in Experimenten für unterschiedliche Fluide Kurven aufgenommen, so dass dieser für beliebige geometrische Bedingungen S , dargestellt durch den Radius R und das Volumen V bzw. durch den Radius R und die Kapillarkonstante (vgl. [51])

$$a_{\text{Kap}} = \sqrt{\frac{2 \sigma}{\rho g}} \quad (2.44)$$

abgelesen werden kann. Mit der Anwendung dieser Erweiterung beschäftigen sich z.B. Vinet et al. [62].

Rao et al. [63] betrachten ergänzend zum statischen Tropfenwachstum nach Harkins & Brown auch die Volumenzunahme des Tropfens während der Einschnürung: Ausgehend von den am abreißen Tropfen angreifenden Kräften stellen sie die Bewegungsgleichung für den Tropfen auf und leiten daraus dessen Geschwindigkeit ab. Erreicht diese Geschwindigkeit die Geschwindigkeit des nachströmenden Tropfens, strömt keine weitere Flüssigkeit mehr in den sich ablösenden Tropfen und das maximale Volumen ist erreicht.

Einen weiteren einfachen Ansatz zur Berechnung der maximalen Größe von hängenden Tropfen beschreibt Wozniak 2003 [59]. Er bezieht sich auf ein Gleichgewicht zwischen Kapillar- und Gewichtskraft sowie die Messungen von Harkins & Brown 1919 [61] und erhält daraus die Gleichung für den maximalen Tropfenradius r_{Wozniak} abhängig von der Bond-Zahl Bo (Verhältnis zwischen Gewichtskraft und Kapillarkraft [59]).

$$r_{\text{Wozniak}} = 1,6 \sqrt[3]{Bo} \quad (2.45)$$

$$Bo = \frac{4 \rho g R^2}{\sigma} \quad (2.46)$$

Zusammenfassend lässt sich an dieser Stelle festhalten, dass bereits viele einfache Ansätze zur Berechnung der Volumina von Tropfen, die sich von einer Kapillare lösen, existieren. Nahezu alle Ansätze (außer Rao et al. [63]) haben dabei gemeinsam, dass von sehr hohen Zeiten ausgegangen wird, in denen sich die Tropfen bilden können: In den Experimenten von Tate werden 40 Sekunden pro Tropfen beschrieben [32], bei Rayleigh 50 Sekunden pro Tropfen [60] und bei Harkins & Brown liegt die Zeit für einen Tropfen z.T. sogar über einer Minute [61]; Wozniak schreibt von einem „geringen [...] Volumenstrom“ [59]. Diese Tropf-Intervalle stehen im Gegensatz zu den zu untersuchenden Tropfendosiersystemen für flüssige Medikamente, bei denen der zeitliche Abstand zwischen zwei aufeinanderfolgenden Tropfen i.d.R. unter einer Sekunde liegt. Ursache für diese Differenz ist die Tatsache, dass in [32, 59, 60, 61] die maximal mögliche Tropfengröße ermittelt werden soll und dabei die Einströmgeschwindigkeit in den Tropfen so gering wie möglich gehalten worden ist (statische Messung). Die Tatsache, dass sich die Tropfengröße unter schneller nachströmendem Fluid verändert, wird zwar in [61] bereits erwähnt und von Neumann & Seeliger [64] experimentell nachgewiesen, allerdings lediglich im Ansatz von Rao et al. [63] berücksichtigt. Aufgrund dieser Diskrepanz sowie dem fehlenden Bezug zur Tropfenbildungszeit sind die bisher vorgestellten Ansätze zur Berechnung der Tropfengröße trotz ihrer hervorzuhebenden Einfachheit nicht an den zu untersuchenden Systemen anwendbar.

Im folgenden sollen daher weitere Ansätze zum Thema Tropfenberechnung vorgestellt werden, in denen das Thema Tropfenentwicklung abhängig von definierten Zuständen bzw. einer bestimmten Zeit sowie von definierten Einströmbedingungen betrachtet wird.

2.2.3 Tropfenablösung: Berücksichtigung des Tropfenwachstums

Ein grundlegender Ansatz zur Abschätzung der Kontur eines Tropfens stammt von Bashforth & Adams [65] aus dem Jahr 1883 und basiert auf dem Effekt, dass sich die Krümmung an der Tropfenoberfläche gemäß der Young-Laplace-Gleichung (vgl. Abschnitt 2.1.4) immer entspre-

chend dem lokal herrschenden Druck im Tropfen einstellt. Die Form des Tropfens ergibt sich somit aus der Abschätzung der Druckverhältnisse im Tropfen unter Berücksichtigung der lokalen Krümmung sowie des hydrostatischen Drucks, also abhängig von der Höhe z , für den statischen Fall zu:

$$\frac{2\sigma}{r_{\text{Tr}}} - \rho g z = \sigma \left(\frac{1}{R_1(z)} + \frac{1}{R_2(z)} \right) \quad (2.47)$$

Die in Gleichung (2.47) verwendeten geometrischen Größen sind in Abbildung 2.5 dargestellt; r_{Tr} ist dabei der Radius im Scheitel des Tropfens, z die Höhe über dem Scheitel bzw. der Tropfenunterseite und $R_1(z)$ bzw. $R_2(z)$ die lokalen Krümmungsradien der Tropfenoberfläche gemäß der Young-Laplace-Gleichung. Weiterhin ist σ die Oberflächenspannung und ρ die Dichte des Fluids sowie g die Erdbeschleunigung.

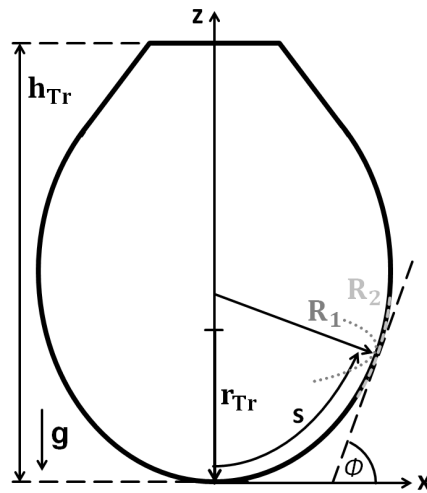


Abbildung 2.5: Zusammensetzung des Drucks in einem hängenden Tropfen

Aufbauend auf Gleichung (2.47) haben Andreas et al. [66] die Pendant Drop Methode zur Bestimmung der Oberflächenspannung aus der Kontur eines hängenden Tropfens im Gleichgewicht abgeleitet. Diese Berechnung der Tropfenkontur findet in modernen, computergestützten Ansätzen, wie sie z.B. in [67] und [68] vorgestellt oder in [69] zusammengefasst werden, mithilfe der Bogenlänge s der Tropfenkontur und des Winkels ϕ (vgl. Abbildung 2.5) statt. Dabei ergibt sich das Differentialgleichungssystem [69]

$$\begin{aligned} \frac{d\phi}{ds} &= -\frac{\sin(\phi)}{x} + \frac{2}{r_{\text{Tr}}} - \frac{\rho g z}{\sigma} \\ \frac{dx}{ds} &= \cos(\phi) \\ \frac{dz}{ds} &= \sin(\phi) \end{aligned} \quad (2.48)$$

abhängig vom Scheitelradius r_{Tr} des Tropfens. Aufgrund der Festlegung des Ursprungs des Koordinatensystems im Scheitel des Tropfens (vgl. Abbildung 2.5) ergibt sich die Anfangsbedingungen zur Lösung des Systems für einen bestimmten Radius r_{Tr} d.h. für einen bestimmten Zustand [69]:

$$x(s = 0) = z(s = 0) = \phi(s = 0) = 0. \quad (2.49)$$

Aufbauend auf dem Ansatz der Pendant Drop Methode leitet Chesters 1977 [70] aus der Young-Laplace-Gleichung (Gleichung (2.14)) und den hydrostatischen Druckverhältnissen im Tropfen die Differentialgleichung

$$\frac{\frac{d^2y}{dx^2}}{\left(1 + \left(\frac{dy}{dx}\right)^2\right)^{\frac{3}{2}}} + \frac{\frac{1}{x} \frac{dy}{dx}}{\left(1 + \left(\frac{dy}{dx}\right)^2\right)^{\frac{1}{2}}} = \frac{2}{r_{Tr}} - \frac{\rho g y}{\sigma} \quad (2.50)$$

her, mit dem Scheitel des Tropfens als Koordinatenursprung (vgl. Abbildung 2.5), dem Tropfenradius als x- und der Tropfenhöhe als y-Achse. Durch lösen der Gleichung erhält Chesters abhängig von den Randbedingungen mehrere Gleichungen, die jeweils verschiedene Bereiche der Tropfenkontur abbilden. Diese Lösungen beziehen sich dabei auf einen Gestaltfaktor β , der sich wiederum aus Materialparametern und dem Krümmungsradius des Tropfens r_{Tr} zusammensetzt. Durch Kombination der einzelnen Lösungen kann das rotationssymmetrische Profil des Tropfens gezeichnet werden; ein solches Profil ist u.a. in [70] einsehbar. Auf Chesters geht außerdem ein weiterer Kräfteansatz, angelehnt an Tate [32], zurück. Im Rahmen dieses Ansatzes wird analog zu Gleichung (2.43) ein Korrekturfaktor f_{Chesters} , der sich aus dem Gestaltfaktor β berechnet, verwendet, um das Volumen des Tropfens zu bestimmen.

Der Vorteil des Ansatzes nach Chesters liegt darin, dass ein real existierender und vermessener Tropfen mit dem Krümmungsradius r_{Tr} mathematisch erfasst und relativ einfach mit den Lösungen der Differentialgleichung in einem Schaubild abgebildet werden kann. Im Bezug auf die Aufgabe, das Volumen eines Tropfens aus einer bestimmten Geometrie vorhersagen zu können, wird dies jedoch schnell zum Nachteil, denn im Ansatz von Chesters ist zunächst keine direkte Kopplung des Tropfvorgangs an die Geometrie enthalten, d.h. die Berechnung der Tropfengeometrie erfolgt in sich geschlossen; diese Kopplung wird erst nachträglich über einen angenäherten Gestaltfaktor β_0 eingefügt. Weiterhin beziehen sich die Gleichungen analog zur Modellierung mithilfe der Pendant Drop Methode lediglich auf die Darstellung der Geometrie zu einem bestimmten Zeitpunkt bzw. in einem bestimmten Zustand, eine direkte Erfassung der Zeit, die ein Tropfen zum Bilden und Ablösen benötigt, findet also nicht statt.

Weitere Ansätze mithilfe der am Tropfen angreifenden Kräfte liefern z.B. Heertjes et al. [71] und Scheele & Meister [72]. Dabei wird neben der Haltekraft aufgrund der Oberflächenspannung F_{sf} und der Gewichtskraft F_g u.a. die Trägheitskraft aufgrund der Tropfenbewegung F_D und die Kraftwirkung der in den Tropfen einströmenden Flüssigkeit F_v zur Berechnung der Tropfenbildung innerhalb einer anderen Flüssigkeit berücksichtigt. Die durchschnittliche Genauigkeit dieser Ansätze liegt bei 15 % [71] bzw. 11 % [72].

Den wahrscheinlich umfangreichsten, aber auch aufwendigsten Ansatz zur Berechnung von Tropfen liefern Eggers & Dupont [73]. Ausgehend von der eindimensionalen Navier-Stokes-Gleichung in Zylinderkoordinaten (vgl. Gleichung (2.23)) und der Kontinuitätsgleichung in Zylinderkoordinaten (vgl. Gleichung (2.24)) wird hier je eine Differentialgleichung für die Geschwindigkeit v im Tropfen (Gleichung (2.51)) sowie den Ort h in Radialrichtung (Gleichung (2.52)), abhängig von der Position in z -Richtung, abgeleitet. Als Randbedingungen zur Lösung der Navier-Stokes- und Kontinuitätsgleichung werden die Kräftebilanzen in normaler und tangentialer Richtung am Tropfen herangezogen; außerdem wird die Dichte ρ als konstant angenommen und die Koordinate φ wird aufgrund der Rotationssymmetrie zu Null gesetzt.

$$\rho \frac{\partial v}{\partial t} = -\rho v \frac{\partial v}{\partial z} - \frac{\partial p}{\partial z} + 3 \eta \frac{h^2 \frac{\partial v}{\partial z}}{h^2} - \rho g \quad \text{mit} \quad p = \sigma \left(\frac{1}{h \left(1 + \frac{\partial h^2}{\partial z} \right)^{\frac{1}{2}}} - \frac{\frac{\partial^2 h}{\partial z^2}}{\left(1 + \frac{\partial h^2}{\partial z} \right)^{\frac{3}{2}}} \right) \quad (2.51)$$

$$\frac{\partial h}{\partial t} = -v \frac{\partial h}{\partial z} - \frac{1}{2} \frac{\partial v}{\partial z} h \quad (2.52)$$

Diese Gleichungen werden von Eggers & Dupont in ein numerisches Berechnungsschema überführt und mit der Aufnahme eines sich ablösenden Tropfens von Peregrine [74] verglichen; das Ergebnis dieses Vergleichs ist in [73] dargestellt. Der Vergleich der realen Aufnahme mit den numerisch berechneten Tropfenkonturen zu unterschiedlichen Zeitpunkten liefert dabei eine sehr gute Übereinstimmung.

Prinzipiell ist der Ansatz von Eggers & Dupont sehr genau und ermöglicht eine vollständige und präzise Simulation der Tropfenbildung bis hin zum Abriss. Insgesamt ist der Ansatz aber auch sehr umfangreich und für Nicht-Mathematiker schwer nachvollziehbar. Die Anwendung dieses Ansatzes zur Berechnung von Tropfendosiersystemen ist prinzipiell vorstellbar, auch wenn die Randbedingungen aufgrund der veränderlichen Radien im Tropfkanal eines Senkrechttropfers schwierig zu bestimmen sind. Wie bereits beschrieben, ist der Ansatz allerdings mit einer sehr hohen Komplexität verbunden und geht weit über das hinaus, was zur Analyse der Tropfendosiersysteme erforderliche ist, nämlich die Bestimmung des Tropfenvolumens und die Bestimmung der Tropfenbildungszeit.

In einem Artikel aus dem Jahr 1997 geht Eggers [75] erneut auf die Tropfenbildung ein. Neben der Wiederholung und Erweiterung der Ansätze aus [73] beschreibt er hier auch die Herleitung

einer Zeitskala aus der Oberflächenspannung σ , der Dichte ρ und dem Radius eines Strömungszylinders R_{Zylinder} , mit der die Größenordnung der Dauer des Einschnürvorgangs, ausgehend von einem zylindrischen Zustand des Strahls oder Tropfenhalses, abgeschätzt werden kann. Diese Abschätzung lässt sich mit dem π -Theorem von Buckingham [37] bestätigen.

$$t_{\text{Einschnuerung-Eggers}} \propto \sqrt{\frac{R_{\text{Zylinder}}^3 \rho}{\sigma}} \quad (2.53)$$

Weitergehende bzw. genauere Betrachtungen zum Thema Tropfenablösung mithilfe von Differentialgleichungen könne u.a. bei Schulkes [76] nachgelesen werden.

Eine weitere Gleichung zur Berechnung von Tropf- bzw. Strahlzerfallsprozessen haben Clanet & Lasheras 1999 [77] vorgestellt. Abgeleitet aus einer von Taylor 1959 [78] veröffentlichten Bewegungsgleichung beschreiben sie mit

$$\frac{d}{dt} \left(m \frac{dz}{dt} \right) = -m g + 2 \pi R \sigma - \rho A_{\text{Strahl}} v_0 (v + v_0) \quad (2.54)$$

die Bewegung einer Flüssigkeit unterhalb einer Auslassöffnung, mit dem Ziel, eine kritische Weber-Zahl (Verhältnis zwischen Trägheitskraft und Oberflächenspannung [77]) für den Übergang vom direkten Abtropfen hin zur Strahlbildung und -aufteilung zu berechnen. In der Differentialgleichung ist m die Masse des Tropfens, A_{Strahl} der Strahlquerschnitt, v_0 die Einstömgeschwindigkeit in den Tropfen und r bzw. R der Innen- bzw. Außenradius der Kapillare. Durch Einsetzen der entsprechenden Randbedingungen und Lösung der Gleichung folgt aus Gleichung (2.54):

$$z(t) = -\frac{g}{6} t^2 + \left(\sqrt{\frac{2 \sigma R}{\rho r^2}} - v_0 \right) t \quad (2.55)$$

Weiterhin haben sich Clanet & Lasheras mit der von Eggers [75] theoretisch hergeleiteten Zeitskala für die Einschnürung eines Tropfens (vgl. Gleichung (2.53)) befasst. Sie haben den Ansatz experimentell untersucht und für die von ihnen genutzten Fluide die individuelle Gleichung

$$t_{\text{EA-ClanetLasheras}} = 3,07 \sqrt{\frac{r_{\text{Zylinder}}^3 \rho}{\sigma}} \quad (2.56)$$

mit dem experimentellen Korrekturfaktor 3,07 erhalten.

Insgesamt weist der von Clanet & Lasheras vorgestellte Ansatz einige Vorteile auf, insbesondere die relativ einfache Gleichung (2.55) zur Bestimmung der Tropfenposition. Bei genauerer Betrachtung wird hier allerdings die Tatsache problematisch, dass es sich um einen Ansatz zur Berechnung des Übergangs von einem Tropfvorgang hin zu einem Strahlzerfallsprozess

handelt, da der Tropfen vereinfacht als Zylinder modelliert wird. Es stehen also v.a. die Einschnürung und die Fortbewegung des Tropfens im Vordergrund, was eine Adaption auf die zu untersuchenden Tropfprozesse erschwert.

Neben den vorgestellten Ansätzen existieren natürlich noch Weitere, die sich mit dem sehr umfangreichen Thema Tropfen beschäftigen; exemplarisch soll an dieser Stelle auf die Veröffentlichungen von Davidson & Cooper-White [79] sowie Zhang [80] verwiesen werden. Diese Ansätze beschäftigen sich dabei jedoch hauptsächlich mit der numerischen Berechnung von Tropfen und deren Optimierung und sollen daher an dieser Stelle nicht weiter verfolgt werden.

Zusammenfassend lässt sich zum Thema Tropfenberechnung sagen, dass bereits eine Vielzahl an einfachen Ansätzen zur Abschätzung der Tropfengröße [32, 59, 60, 61] existiert, allerdings betrachten diese den Tropfenbildungsprozess als idealisiert langsam, um so auf die maximale Größe eines Tropfens zu schließen. In der Realität hängt nach [64] die Tropfengröße aber auch von den Einströmbedingungen ab, da z.B. bei höheren Einströmgeschwindigkeiten auch während des Einschnürungsprozesses noch Fluid in den Tropfen nachlaufen kann. Dies muss im Rahmen der folgenden Berechnungen berücksichtigt werden; einen Ansatz dazu liefern z.B. Rao et al. [63].

Die neueren Ansätze sind entweder zu komplex und würden weit über die hier gesteckten Ziele hinausgehen, auch wenn sie von den betrachteten Schwerpunkten her zur Erreichung der Ziele geeignet wären [73], oder die Modellierung der Tropfen passt nicht zu den hier zugrundeliegenden Annahmen [77]. Die Pendant Drop Methode [65, 66, 67, 68, 69] sowie der Ansatz von Chesters [70] wären bei einer Reduktion der Tropfenberechnung auf den statischen Fall prinzipiell anwendbar; bei letzterem ist das betrachtete System allerdings, wie bereits beschrieben, relativ komplex, über die Betrachtung des Tropfenkrümmungsradius in sich geschlossen und enthält viele Näherungen, inklusive der Anbindung des Tropfens an die Kapillargeometrie.

Keiner der vorgestellten Ansätze liefert also die hier geforderte, einfache Möglichkeit zur zeitabhängigen Berechnung des Tropfenvolumens und der Zeit zwischen zwei Tropfen, wie sie zur Untersuchung von medizinischen Tropfendosiersystemen benötigt wird.

2.3 Blasenberechnung

Zur Analyse und mathematischen Modellierung der Tropfendosiersysteme für flüssige Medikamente muss neben den Flüssigkeitsströmungen durch den Tropfaufsatz aus der Flasche auch das Nachströmen der Luft in die Flasche und die damit verbundene Blasenbildung an der Oberseite des Luftrohrs berücksichtigt werden. Einen guten Überblick über die Berechnung von Blasen

liefern z.B. Bals [81] und Clift et al. [82]. Bals beschreibt im Artikel „Grundlagen der Blasenbildung an Einzelporen und Lochplatten“ [81], ausgehend vom grundlegenden Kräftegleichgewicht für die Blasenablösung aus haltender Grenzflächenkraft und ablösender Auftriebskraft, welche weiteren Kräfte berücksichtigt werden müssen und wie diese in den Ansätzen verschiedener Autoren Berücksichtigung finden. Beispielhaft sollen an dieser Stelle zwei Ansätze näher vorgestellt werden.

Kumar & Kuloor beschreiben in ihrer Arbeit [83] die Verwendung von Blasen und Tropfen als einfachste Methode zur Erzeugung von Grenzflächen und die Faktoren, die diesen Blasen- bzw. Tropfenbildungsprozess beeinflussen. Wichtige Einflussgrößen bei der Bildung von Blasen sind dabei z.B. die Düse (Durchmesser, Länge), aus der die Blase ausströmt und die Tiefe, in der sich die Düse unter der Flüssigkeitsoberfläche befindet. Neben diesen geometrischen Faktoren spielt auch der Volumenstrom des blasenbildenden Gases eine wichtige Rolle. Aber auch die Strömung in der Flüssigkeit, in der die Blase gebildet wird, muss berücksichtigt werden, da diese ebenfalls Kräfte auf die Blase ausübt. Weiterhin spielen sowohl die Stoffeigenschaften der beteiligten Fluide (Gas, Flüssigkeit), wie z.B. die Viskosität η bzw. ν und die Dichte ρ , als auch die Interaktion der beiden Fluide, welche z.B. durch die Oberflächenspannung σ quantifiziert werden kann, eine wichtige Rolle. Zur Berechnung der Blasengröße beschreiben Kumar & Kuloor verschiedene Ansätze, u.a. abhängig davon, ob die Blasenbildung durch einen konstanten Druck im blasenbildenden Gas oder einen konstanten Gas-Volumenstrom angetrieben wird. Die vorgestellten Ansätze sind zweistufig und setzen sich aus dem Blasenvolumen im Kräftegleichgewicht und dem Blasenwachstum während der Ablösephase zusammen. Nach [81] und [83] können diese Ansätze nur iterativ gelöst werden und führen somit zu einem vergleichsweise hohen Rechenaufwand.

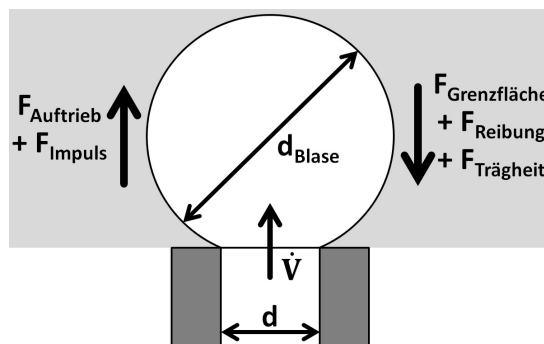


Abbildung 2.6: Skizze der Kräfte, die an einer Blase angreifen (angelehnt an [84])

Einen analytisch lösbaren Ansatz basierend auf den an der kugelförmigen Blase angreifenden Kräften inklusive der Berücksichtigung von Stoffdaten beschreiben Gaddis & Vogelpohl [84]. Sie berücksichtigen darin die Auftriebskraft, die Impulskraft, die Grenzflächenkraft, die Rei-

bungskraft und die Trägheitskraft (vgl. Abbildung 2.6); eine evtl. auftretende Druckkraft wird aufgrund der geringen Einflüsse auf das Ergebnis vernachlässigt.

Aufgrund der großen Dichte-Unterschiede zwischen Luft und Flüssigkeit (z.B. Wasser) wird die Dichte von Luft im Gleichgewicht ebenfalls vernachlässigt und es ergibt sich die Gleichung

$$8 \pi \rho g d_{\text{Blase}}^5 = 48 \pi^2 \sigma d d_{\text{Blase}}^2 + 648 \pi \eta \dot{V} d_{\text{Blase}} + 270 \rho \dot{V}^2 \quad (2.57)$$

mit dem zu berechnenden Blasendurchmesser d_{Blase} , dem Düsendurchmesser d und dem Gas-Volumenstrom $\dot{V}$. Durch die Betrachtung von Spezialfällen der Blasenbildung, wie z.B. dem rein von der Oberflächenspannung abhängigen Blasendurchmesser ($\dot{V} \approx 0$), leiten Gaddis & Vogelpohl aus dem Kräftegleichgewicht den vereinfachten Ansatz

$$d_{\text{Blase}} = \left[\left(\frac{6 d \sigma}{\rho g} \right)^{\frac{4}{3}} + \left(\frac{81 \nu \dot{V}}{\pi g} \right) + \left(\frac{135 \dot{V}^2}{4 \pi^2 g} \right)^{\frac{4}{5}} \right]^{\frac{1}{4}} \quad (2.58)$$

ab, der eine direkte Bestimmung der Blasengröße d_{Blase} ermöglicht und gemäß der in [84] präsentierten Messungen lediglich um $\pm 2 \%$ von der Lösung von Gleichung (2.57) abweicht. Aufgrund der einfachen Anwendung und hohen Genauigkeit soll der Ansatz in Gleichung (2.58) im Rahmen dieser Arbeit Anwendung finden.

2.4 Simulation

Neben den bereits vorgestellten fluidischen (und mathematischen) Grundlagen soll im Rahmen dieser Arbeit auch eine numerische Betrachtung der zu untersuchenden Tropfvorgänge erfolgen. Ziel ist es, ein besseres Verständnis für die ablaufenden Vorgänge zu erhalten, ohne eine Vielzahl von Messungen durchführen zu müssen bzw. um die durchgeführten Messungen zu bestätigen. Im Folgenden sollen daher kurz die Grundlagen der Simulation und das hier verwendete Programm OpenFOAM vorgestellt werden.

2.4.1 Grundlagen

Im Rahmen einer vollständigen mathematischen Untersuchung von Strömungsvorgängen ist es notwendig, die in Abschnitt 2.1.5 vorgestellten Differentialgleichungen (Navier-Stokes-Gleichungen, Kontinuitätsgleichungen) zu lösen. Die Lösung dieser Gleichungen ist dabei jedoch sehr komplex und nur für einfachste Anwendungsfälle analytisch möglich, weshalb an dieser Stelle numerische Berechnungen im Rahmen von Simulationen eingesetzt werden, um Aussagen über das Verhalten eines Systems zu erhalten. Die Anzahl der durchzuführenden Versuche,

welche mitunter sehr aufwendig sein können, reduziert sich damit auf ein Minimum; es müssen nur noch die Versuche durchgeführt werden, welche zur Validierung der Simulation erforderlich sind [53].

Grundsätzlich besteht der Ablauf einer numerischen Simulation aus drei zentralen Schritten: dem Pre-Processing, der Lösung des Problems und dem Post-Processing [85]. Unter Pre-Processing versteht man alles, was zur Vorbereitung der eigentlichen Berechnung dient, d.h. das Erzeugen der Geometrie (2D oder 3D), die Generierung des Rechennetzes (räumlich Diskretisierung) und die Definition der Materialeigenschaften und Randbedingungen, die zur Berechnung benötigt werden. Anschließend folgt die tatsächliche numerisch Strömungsberechnung (CFD, engl.: Computational Fluid Dynamics): Hier werden mittels eines sogenannten Solvers (dt.: Löser) die Gleichungen, ausgehend von den Randbedingungen, für definierte Zeitschritte (zeitliche Diskretisierung) gelöst. Die Auswertung der Simulationsergebnisse, d.h. die Visualisierung, die Ausgabe von Zahlenwerten oder auch die Erstellung von Graphen und Diagrammen erfolgt zum Abschluss im Post-Processing [53, 85].

Bei der bereits erwähnten zeitlichen und räumlichen Diskretisierung handelt es sich um eine Umwandlung der partiellen Differentiale der Strömungsgleichungen in endliche Differenzen. Dabei wird aus den räumlichen Ableitungen ein festes Rechennetz (Vermaschung), welches z.B. im dreidimensionalen Fall aus einer Vielzahl von Volumenelementen besteht, erzeugt und die zeitlichen Ableitungen werden zu festen Zeitintervallen. Somit ist es möglich die Strömungsgleichungen für jeden einzelnen räumlichen und zeitlichen Punkt zu lösen und daraus ein Ergebnis für das gesamte System abzuleiten. Man unterscheidet folgende Diskretisierungsmöglichkeiten, die jedoch alle ineinander überführt werden können [53]:

- Finite-Differenzen-Diskretisierung: Die Stützstellen zur Lösung der Gleichungen liegen hier auf den Ecken der Volumenelemente; die Gleichungen werden in einer Differential-schreibweise dargestellt.
- Finite-Volumen-Diskretisierung: Hier liegen die Stützstellen entweder im Inneren oder ebenfalls auf den Ecken der Volumenelemente; die Gleichungen werden als Integrale dargestellt und durch Summen angenähert. Sie eignet sich besonders gut zur numerischen Berechnung von Unstetigkeiten, wie z.B. Stößen.
- Finite-Elemente-Methode: Dieser Ansatz wird im Wesentlichen von Mathematikern bevorzugt und beschreibt die zu lösenden Differentiale mit einfachen Funktionsgleichungen.

Im Vergleich der drei Verfahren stellt die Finite-Volumen-Methode einen guten Kompromiss zwischen Flexibilität und Genauigkeit dar. Die Flexibilität beruht dabei auf der Möglichkeit der Verwendung von unstrukturierten Rechennetzen, welche z.B. aus Tetraedern oder Prismen bestehen können und nicht zwingend ein regelmäßiges Muster oder eine Form der Symmetrie

aufweisen müssen. U.a. aufgrund dieser Vorteile kommt die Finite-Volumen-Diskretisierung heute in den meisten CFD-Programmen zum Einsatz [53].

Weiterführende Informationen und einen sehr guten Überblick über die Grundlagen von Mehrphasen-Simulationen im Rahmen der Mikrofluidik und deren Umsetzung im Zuge verschiedenster Simulations-Programme liefert Wörner [86].

2.4.2 OpenFOAM

OpenFOAM (Open Field Operation And Manipulation) ist eine C++-basierte CFD-Software, welche gemäß der „GNU General Public Licence“ lizenziert ist. Dieses Lizenzierungsmodell erlaubt es jedem Nutzer die Software kostenfrei zu nutzen, zu verbreiten, zu verändern und zu verbessern [87]. Heute existieren mehrere Versionen von OpenFOAM, die alle auf dem kommerziellen Programm FOAM basieren, welches 2004 unter der „GNU General Public Licence“ freigegeben worden ist [87]. Die drei bedeutendsten Varianten die daraus bis heute (Stand: 03.12.2019) abgeleitet worden sind, sind die OpenFOAM-Variante der OpenFOAM Foundation Ltd. (CFD Direct Ltd.; aktuellste Version: 7), die OpenFOAM-Variante der OpenCFD Ltd. (ESI Group; aktuellste Version: v1906) und foam-extend der Wikki Ltd. (aktuellste Version: 4.0), wobei zu beachten ist, dass Optimierungen in einer Variante i.d.R. nach einiger Zeit auch in den anderen Varianten implementiert werden. Aus diesen drei Varianten ist die OpenFOAM-Version der OpenFOAM Foundation die heute am häufigsten installierte Version und wird in Form der Version 4.0 auch im Rahmen dieser Arbeit verwendet [88].

Die Entscheidung für OpenFOAM ist dabei im Wesentlichen unter dem Aspekt getroffen worden, dass hier die Einsicht in bzw. der Zugriff auf jede hinterlegte Gleichung des Programm-Codes möglich ist, was ein besseres Verständnis der ablaufenden Rechenprozesse sowie eine gezieltere Beeinflussung der Simulation bis hin zu Änderungen im Programm-Code ermöglicht. Bei kommerziellen Programmen, wie z.B. COMSOL [89], mit definierten Eingabemasken ist dies (leider) nicht möglich, auch wenn diese Programme dafür meist mit einem geringeren Einarbeitungsaufwand verbunden sind. Bei der Nutzung von OpenFOAM empfiehlt sich weiterhin die Verwendung von Linux-Betriebssystemen, da diese ebenfalls Freeware sind und somit ebenso wie OpenFOAM eine höhere Flexibilität ermöglichen; im Rahmen dieser Arbeit kommt Ubuntu 16.04 LTS [90] zum Einsatz.

OpenFOAM übernimmt die in Abschnitt 2.4.1 angesprochene numerische Strömungssimulation. Dazu müssen sämtliche Parameter im Rahmen einer definierten Ordnerstruktur abgespeichert werden, auf die der Solver beim Lösen des Problems zum jeweils notwendigen Zeitpunkt zugreift. Diese Ordnerstruktur ist in Abbildung 2.7 dargestellt.

Im Ordner „system“ werden alle Parameter hinterlegt, die direkt mit der Durchführung der

Berechnung in Verbindung stehen. In der Datei „controlDict“ kann der Nutzer sämtliche grundlegenden Parameter übergeben, wie z.B. den verwendeten Solver. Außerdem wird hier der zeitliche Rahmen der Simulation, d.h. sowohl die Zeitdauer über die simuliert wird als auch die Größe der einzelnen Zeitschritte, die berechnet bzw. ausgegeben werden, festgelegt. In der Datei „fvSchemes“ werden die numerischen Verfahren beschrieben, d.h. wie z.B. eine bestimmte Ableitung oder ein bestimmtes Integral bearbeitet werden soll; unter „fvSolution“ folgen weitere solver-spezifische Einstellungen. Im Rahmen von Zweiphasenströmungen, wie sie in dieser Arbeit vorkommen, wird außerdem die Anfangsverteilung der einzelnen Phasen festgelegt (Datei „setFieldsDict“). Der Ordner „constant“ enthält, wie der Name bereits andeutet, alle Informationen, die im Laufe der Simulationsdurchführung konstant bleiben. Dazu zählen u.a. die Geometrie bzw. das Simulationsnetz auf dem die Berechnung durchgeführt wird (Ordner „polyMesh“), aber auch Materialparameter, wie z.B. die Dichte oder Viskosität (Datei „transportProperties“), und Konstanten, wie die Erdbeschleunigung (Datei „g“). In den „time directories“ dagegen werden alle Randbedingungen hinterlegt, die sich im Laufe der Simulation ändern, bzw. über die die Simulation Aussagen liefern soll. Streng genommen handelt es sich daher bei den „time directories“ nicht um einen einzelnen Ordner, sondern es wird für jeden ausgegebenen Zeitschritt ein eigener Ordner angelegt, der z.B. Informationen zu Geschwindigkeits- (Datei „U“) oder Druckverteilungen (Datei „p“) enthält. Im Ordner „0“ werden dem Solver an dieser Stelle die Anfangs- und Randbedingungen der Simulation übergeben. Durch Aufruf der geeigneten Befehle im Terminal kann die Simulation gestartet werden [85].

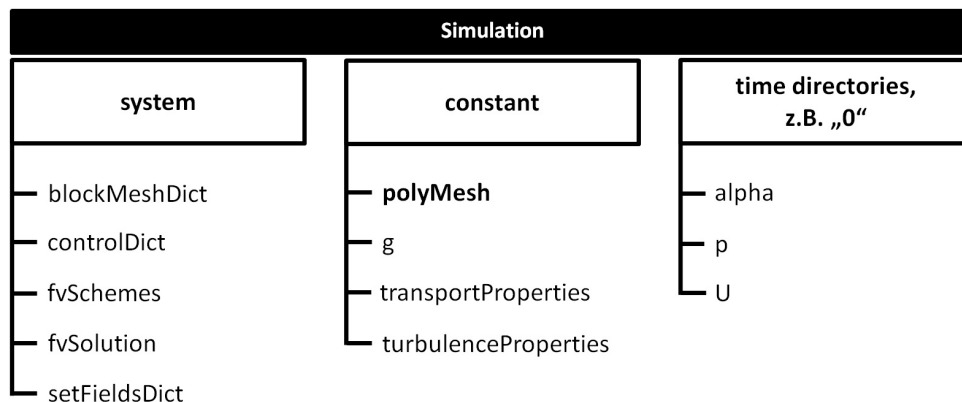


Abbildung 2.7: Ordnerstruktur von OpenFOAM bei Verwendung des Solvers interFoam

Im Rahmen dieser Arbeit kommt beim Pre-Processing das OpenFOAM-Tool blockMesh zum Einsatz. Dabei handelt es sich, wie bei OpenFOAM selbst, um einen textbasierten Ansatz, bei dem im File „blockMeshDict“ alle Eck- und Hilfspunkte einer Geometrie aufgelistet werden. Anschließend werden im selben File die Kanten zwischen den Punkten sowie die Blöcke inklusive der Flächen, die aus den Punkten abgeleitet werden können, gebildet und das zugehörige Rechennetz spezifiziert [85].

Zur Erzeugung der Geometrie und des Rechnernetzes (Pre-Processing) und zur Auswertung bzw. Visualisierung der Ergebnisse (Post-Processing) sind bei OpenFOAM aber z.T. auch zusätzliche Anwendungen erforderlich. Das Pre-Processing kann daher neben den OpenFOAM-eigenen Möglichkeiten z.B. auch mithilfe des Programms Salome [91] durchgeführt werden. Das Post-Processing erfolgt mit ParaView [92]. ParaView ist ein Programm, das speziell auf die Analyse und Visualisierung von Daten zugeschnitten ist. Neben einfachen grafischen Darstellungen der Simulationsergebnisse ermöglicht ParaView auch das Filtern bestimmter Informationen aus der Gesamtheit der Daten sowohl bzgl. einzelner Parameter als auch bzgl. definierter geometrischer Orte und die graphische Darstellung in Form von Diagrammen, Schaubildern oder Videos.

2.4.3 Solver interFoam

Nachdem in den vorangegangenen beiden Abschnitten zuerst die Grundlagen der Simulation und anschließend das Simulationsprogramm OpenFOAM im Allgemeinen vorgestellt worden sind, soll an dieser Stelle ein Blick auf den im Rahmen dieser Arbeit verwendeten Solver geworfen werden. Grundsätzlich bietet OpenFOAM eine Vielzahl verschiedener Solver, z.B. für kompressible und inkompressible Strömungen, für partikelbelastete Strömungen, für Wärmetransport- und Verbrennungsprozesse aber auch für elektromagnetische Berechnungen oder zur Analyse mechanischer Spannungen [85]. Für Zwei- bzw. Mehrphasenströmungen, wie sie hier in Form von Tropfprozessen untersucht werden sollen, existiert wiederum eine große Anzahl an Solvern; diese sind u.a. im OpenFOAM-Benutzerhandbuch [85] aufgelistet und beschrieben.

Im Rahmen dieser Arbeit findet der Solver „interFoam“ Anwendung. Bei diesem Solver handelt es sich um einen Standard-Solver für Zweiphasenströmungen, welcher u.a. im bekannten Beispiel „damBreak“ eingesetzt wird. Der Solver ist dabei für inkompressible, unmischbare newtonsche Fluide gedacht, die unter isothermen Bedingungen miteinander interagieren [85] und ist hier deshalb anwendbar, da Gase bei sehr kleinen Strömungsgeschwindigkeiten im Vergleich zur Schallgeschwindigkeit als inkompressibel betrachtet werden können [93]; diese Bedingung ist bei den im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten Simulationen erfüllt. Weiterhin wird der Luft in den hier verwendeten Simulationsmodellen (vgl. Abschnitt 4.3.1 und 5.4.1) ausreichend Möglichkeiten zum Entweichen bzw. Nachströmen gegeben, weshalb keine Kompression auftreten kann. Der Solver weist nach Deshpande et al. [94] eine konsistente Beschreibung von Druck und Oberflächenspannung sowie eine exzellente Massenerhaltung auf. Neben seiner guten Eignung für Strömungen, die von Trägheits-Effekten geprägt werden, eignet sich der Solver daher auch zur Berechnung von Strömungen, die von der Oberflächenspannung dominiert werden; für die im Rahmen dieser Arbeit betrachteten Tropfen ist dies unerlässlich. Lediglich bei

der Berechnung von Krümmungen können laut Deshpande et al. leichte Abweichungen von maximal 10 % zu den analytisch berechneten Werten auftreten, was allerdings im Rahmen der für die Tropfendosierung geforderten Genauigkeiten (vgl. Abschnitt 1.1.2) im tolerierbaren Rahmen liegt.

Der Solver interFoam verwendet die Volume-of-Fluid-Methode (VOF-Methode). Dabei handelt es sich um ein von Hirt & Nichols 1981 [95] veröffentlichtes Verfahren zur Beschreibung von Phasengrenzflächen bei Zweiphasenströmungen. In diesem Modell wird jeder Zelle ein Phasen-Wert zwischen Null und einem festen Einheitswert, z.B. Eins, zugewiesen. Zellen, die nur ein Fluid enthalten, haben abhängig von diesem Fluid entweder den Wert Null oder den Wert Eins. Liegen in einer Zelle beide Phasen vor, dann liegt der Phasen-Wert der Zelle, abhängig von den Volumenanteilen, zwischen den beiden Extremwerten und die Zelle enthält eine Grenzfläche. Diese kann über den Wert und die Veränderung der Werte im Zusammenhang mit den Nachbarzellen angenähert werden. Der Vorteil dieser Methode ist, dass wie für Geschwindigkeit und Druck auch, nur ein Wert pro Zelle gespeichert werden muss, was den Rechen- und Speicheraufwand im Vergleich zu anderen Verfahren deutlich reduziert.

interFoam basiert, wie die meisten Solver für Strömungsprobleme, auf der in Gleichung (2.16) vorgestellten Navier-Stokes-Gleichung. Diese wird um einen künstlichen Kompressions-Term ergänzt, um die Stabilität und Genauigkeit der numerischen Berechnung zu steigern [86] und eine schärfere Phasen-Grenzfläche zu erzielen [94, 96]. Diese Ergänzung der Navier-Stokes-Gleichung wird von Berberović et al. [96] ausführlich beschrieben und soll hier kurz zusammengefasst werden:

- Die auf der Viskosität basierende Reibung wird ausgehend vom viskosen Spannungstensor um den Term $(\nabla v) \cdot \nabla \eta$ ergänzt. Der in interFoam implementierte Reibungsterm lautet also $\eta \nabla^2 v + (\nabla v) \cdot \nabla \eta$. Bei der Implementierung der Navier-Stokes-Gleichung wird dieser Reibungs-Term außerdem auf die linke Seite der Gleichung verschoben.
- Der Druck-Term wird ergänzt durch eine hydrostatische Komponente ρg abhängig vom Ort x . Dadurch ergibt sich für den Druck: $p_d = p - \rho g \cdot x$
- Um die Oberflächenspannung zu berücksichtigen muss Gleichung (2.16) außerdem um die Oberflächenkraftdichte f_σ ergänzt werden; f_σ berechnet sich aus der Oberflächenspannung, der Krümmung der Oberfläche und dem Phasen-Wert der betrachteten Zelle.

Daraus ergibt sich die im Solver interFoam implementierte Gleichung:

$$\rho \frac{\partial v}{\partial t} + \rho v \nabla v - \eta \nabla^2 v - (\nabla v) \cdot \nabla \eta = -\nabla p_d - g \cdot x \nabla \rho + f_\sigma \quad (2.59)$$

Die tatsächliche Umsetzung dieser Gleichung im Programm-Code des Solvers kann bei Damian [97] nachgelesen werden; dieser bezieht sich in seiner Arbeit direkt auf den vorgestellten

Ansatz von Berberović et al. [96].

Nachdem nun die fluidischen und simulationstechnischen Grundlagen der Arbeit gelegt worden sind, soll dieses Wissen in den nächsten Kapiteln bei der Herleitung eines Ansatzes zur Berechnung von Tropfen bzw. zur Verifikation dieses Ansatzes eingesetzt werden. Im folgenden Kapitel werden dafür zunächst die Messaufbauten, die im Rahmen dieser Arbeit zum Einsatz gekommen sind, vorgestellt und gegeneinander abgegrenzt.

Kapitel 3

Versuchsaufbau zur Messung von Tropfvorgängen

Neben der grundlegenden Theorie zur Tropfenbildung, wie sie im vorangegangenen Kapitel vorgestellt worden ist, ist für die Analyse und Optimierung der Tropfenbildung die Vermessung tatsächlicher Tropfvorgänge von entscheidender Bedeutung. Im Rahmen dieses Kapitels sollen dazu drei Messsysteme vorgestellt werden, welche zur Verifikation der in den folgenden Abschnitten vorgestellten Berechnungsansätze verwendet worden sind. Die drei Messsysteme sind im Wesentlichen im Rahmen von studentischen Arbeiten [98, 99, 100] am Lehrstuhl Mikrosystemtechnik der Universität Stuttgart entwickelt und aufgebaut worden und bestehen jeweils aus einer (optischen) Detektionseinheit und einer Rechen- bzw. Auswerteeinheit (Computer). Alle Messsysteme sind weiterhin mit einer entsprechend abgestimmten Mess- und Auswertesoftware inklusive Benutzeroberfläche (engl.: graphical user interface; kurz: GUI) ausgestattet und nutzen die freie Bildverarbeitungsbibliothek OpenCV [101] zur Aufbereitung und Auswertung der gewonnenen Kamerabilder. Im Gegensatz zu existierenden Ansätzen zur optischen Analyse von Tropfen [74, 102], bei denen der Fokus auf der möglichst exakten Auflösung des Tropfenbildungsvorgangs liegt, wird der Fokus hier auf die Evaluation von Tropfenvolumen und Tropfenbildungszeit gelegt, was insgesamt zu einer Reduktion der erforderlichen Komplexität der Aufbauten führt.

3.1 Messaufbau nach Haub

Der erste Messaufbau basiert auf der Arbeit von Michael Haub [98] und besteht grundsätzlich aus einer optischen Achse, auf der Kamera, Objektiv, Tropfsystem, Diffusor und Beleuchtung angeordnet sind. Zur Verarbeitung und Auswertung der mit der Kamera gewonnenen Daten wird ein Raspberry Pi Einplatinencomputer (Model 3) verwendet. Dieser ist mit ei-

nem 1,2 GHz 64 bit quad-core Prozessor, einem GB Arbeitsspeicher, diversen Anschlüssen und einem SD-Karten-Slot zur Bereitstellung von Speicherkapazität (für Betriebssystem und Daten) ausgestattet. Über den CSI Camera Port des Raspberry Pi wird das zugehörige Kamera-Modul (Version 2), welches mit einem Chip von Sony (IMX219) mit einer Auflösung von maximal 8 Megapixeln ausgerüstet ist, angeschlossen. Bei einer Reduktion der Auflösung auf 640×480 Pixel können laut Hersteller Videos mit 90 Bildern pro Sekunde (engl.: frames per second; kurz: fps) aufgenommen werden; Untersuchungen haben gezeigt, dass bei dieser Auflösung sogar bis zu 120 fps erreicht werden können [98]. Zur Einstellung des gewünschten Objektabstandes im Messaufbau in Kombination mit einer geeigneten Vergrößerung wird die Kamera um eine Makrolinse (12x) ergänzt [98]. Die Beleuchtung des zu vermessenden Objekts erfolgt im Durchlicht mithilfe einer LED mit einer Leistung von einem Watt, einem Abstrahlwinkel von 10° sowie einem Lichtstrom von 66 Lumen in Kombination mit einem Diffusor zur Homogenisierung des Beleuchtungssports. Eine CAD-Skizze sowie ein Foto des vollständigen Messaufbaus ist in Abbildung 3.1 dargestellt.

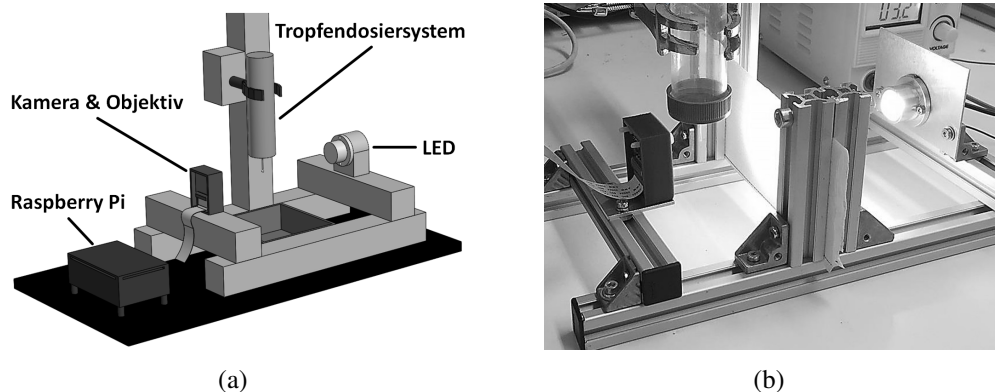


Abbildung 3.1: Messaufbau nach Haub [98]: (a) CAD-Skizze; (b) Realisierter Aufbau

Die Software des Messaufbaus ist in der Programmiersprache Python [103] geschrieben und umfasst sowohl die Bildaufbereitung als auch die Auswertung des aufbereiteten Bildes. Die wichtigsten Schritte der Bildaufbereitung sind in Abbildung 3.2 dargestellt.

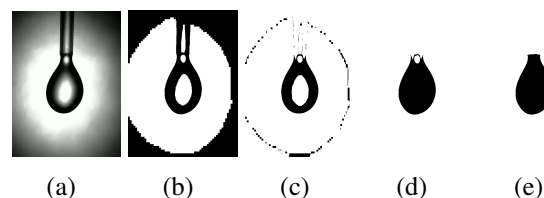


Abbildung 3.2: Bildaufbereitung im Messaufbau nach Haub [98]: (a) Graustufenbild; (b) Binärbild; (c) Binärbild abzüglich der Kapillare; (d) Reduziertes und korrigiertes Binärbild; (e) Bild des isolierten Tropfens

Ausgehend vom Graustufenbild der Kamera (Abbildung 3.2 (a)) findet zunächst eine Binarisierung des Bildes mithilfe eines Schwellwertes statt. Dabei werden Pixel mit einem Grauwert unterhalb der Binärschwelle in schwarze und Pixel mit einem Grauwert oberhalb der Binärschwelle in weiße Pixel umgewandelt (Abbildung 3.2 (b)). Um den Tropfen frei zu stellen müssen im nächsten Schritt die Kapillare sowie die schwarzen Pixel außerhalb des Beleuchtungssports vom Tropfen segmentiert werden. Dazu werden mehrere aufeinanderfolgende Bilder miteinander verglichen, die unveränderlichen Punkte, z.B. die Kapillare, identifiziert und von den ursprünglichen Bildern abgezogen. Dabei ergibt sich Abbildung 3.2 (c) welche mithilfe der OpenCV-Funktion „findContours“ in Abbildung 3.2 (d) umgewandelt werden kann. Wie in Abbildung 3.2 (c) und (d) zu sehen ist, wird bei der Segmentierung auch ein Teil des Tropfens am Berührungspunkt von Kapillare und Tropfen entfernt. Durch das Schließen der dadurch entstandenen konvexen Geometrien (OpenCV: „convexHull“) und das Füllen der Konturen (OpenCV: „drawContours“) erhält man das Bild eines isolierten Tropfens (Abbildung 3.2 (e)) und die Bildaufbereitung ist abgeschlossen [98]. Anschließend können aus Abbildung 3.2 (e) und abhängig davon, ob ein Tropfen an der Kapillare wächst, sich einschnürt, oder bereits abgerissen ist, u.a. das Tropfenvolumen, die Tropfenlänge und -breite sowie verschiedene Radien berechnet werden [98].

Insgesamt bietet der Messaufbau nach Haub einen einfachen, kostengünstigen und mithilfe der übersichtlichen GUI leicht zu bedienenden Ansatz zur Untersuchung und Vermessung von Tropfen an bzw. aus Glaskapillarsystemen. Aufgrund des einachsigen optischen Aufbaus ist die Ausrichtung der Kapillare jedoch mit großer Sorgfalt vorzunehmen, um ein Verkippen und somit Messfehler entlang der optischen Achse zu reduzieren bzw. zu vermeiden. Aufgrund der verhältnismäßig langen Dauer der Auswertung der aufgenommenen Videos ist die Anwendbarkeit des Aufbaus bei längerfristigen Messungen eingeschränkt. Weiterhin eignet sich der Aufbau nach Haub lediglich zur Analyse von Glaskapillarsystemen, da der hier verwendete optische Aufbau auf kleinere Tropfen ausgelegt ist; die verwendeten Glaskapillaren weisen einen deutlich kleineren Durchmesser als die in Kapitel 5 zu untersuchenden Senkrechttropfer und somit kleinere Tropfen auf. Tropfen aus Senkrechttropfern sind bei der gewählten Optik zu groß, um beim Abriss vollständig vom gegebenen optischen Aufbau erfasst zu werden. Erweiterungen bzw. Anpassungen des Messaufbaus hin zur Vermessung von Tropfen an Senkrechttropfern sollen daher in den folgenden beiden Abschnitten vorgestellt werden.

3.2 Messaufbau nach Wolf

Die erste Erweiterung des Messaufbaus nach Haub ist im Messaufbau nach Wolf [99] realisiert. Dabei werden grundsätzlich dieselben Komponenten verwendet wie im Aufbau nach Haub. Im Unterschied zu diesem werden jedoch zwei optische Achsen, die in einem Winkel von 90° zueinander und mit dem aufzunehmenden Objekt im Schnittpunkt angeordnet sind, verwendet. Die Auswertung wird von zwei Raspberry Pi Einplatinencomputern durchgeführt, wobei beide mit jeweils einem Raspberry Pi Kamera-Modul verbunden sind. Eine separate Linse bzw. ein Objektiv kommt nicht zum Einsatz; es wird das Standard-Objektiv des Kamera-Moduls verwendet. Die beiden Einplatinencomputer sind über ein Netzkabel miteinander gekoppelt und im Master-Slave-Prinzip verschaltet. Im hier vorliegenden Fall bedeutet dies, dass die Interaktion mit dem Nutzer ausschließlich über den Master-Pi abgewickelt und von diesem aus die Messung und Auswertung auf dem Slave-Pi gesteuert wird. Die Beleuchtung erfolgt im Gegensatz zum Messaufbau nach Haub mit einem LED-Modul mit einer Leistung von 1,15 Watt bei einem Öffnungswinkel von 45° und einem Lichtstrom von 140 Lumen. Dies führt zu einer Vergrößerung des Beleuchtungspots auf dem Diffusor, was aufgrund der größeren aufzunehmenden Tropfen erforderlich ist. Gleichzeitig treten nur unwesentliche Änderungen in der Länge der optischen Achse und somit im gesamten Aufbau [99] auf. Der Messaufbau nach Wolf ist in Abbildung 3.3 als CAD-Skizze sowie im realisierten Zustand dargestellt.

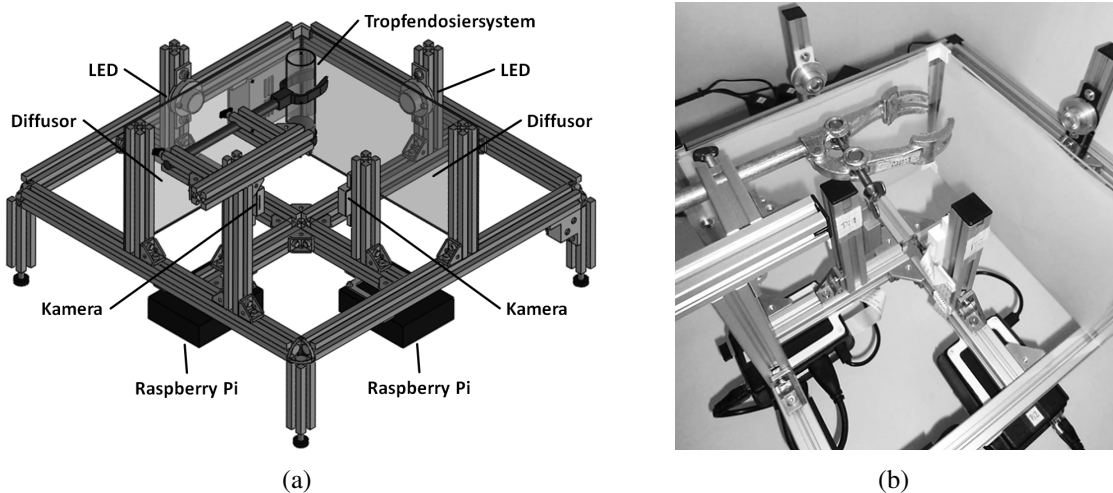


Abbildung 3.3: Messaufbau nach Wolf [99]: (a) CAD-Skizze; (b) Realisierter Aufbau

Die Software des Messaufbaus nach Wolf erweitert die bestehende Software inklusive der GUI nach Haub auf zwei parallel arbeitende Kameras und ist ebenfalls in Python [103] geschrieben. Die Bildaufbereitung erfolgt nach dem gleichen Prinzip, wobei manche Schritte mit dem Ziel der Beschleunigung der Bildverarbeitung angepasst worden sind. Der Ablauf der Bildverarbeitung nach Hummel und Wolf ist in Abbildung 3.4 dargestellt.

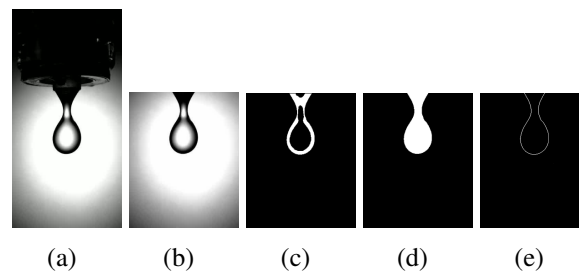


Abbildung 3.4: Bildaufbereitung in den Messaufbauten nach Wolf und Hummel [99, 100]: (a) Graustufenbild; (b) reduziertes Graustufenbild; (c) Binärbild; (d) Onlydrop; (e) Konturbild

Ausgehend vom Graustufenbild (Abbildung 3.4 (a)) wird wahlweise durch manuelles oder automatisiertes Festlegen der Kapillare und Reduktion des betrachteten Bildausschnitts um den von der Kapillare eingenommenen Teil (Abbildung 3.4 (b)) der Rechenaufwand deutlich reduziert. Weiterhin ist kein Auffüllen der konvexen Strukturen, die sich bei Haub aus der Subtraktion der Kapillare ergeben, erforderlich. Nach einem Zwischenschritt zur Schärfung des Bildes wird durch adaptive Schwellwertbildung ein invertiertes Binärbild erzeugt (Abbildung 3.4 (c)) und der Tropfen wird durch Auffüllen der Kontur vervollständigt (Abbildung 3.4 (d)). Mit Hilfe der OpenCV-Funktion „findContours“ kann abschließend die Kontur des Tropfens (Abbildung 3.4 (e)) ermittelt und für die Auswertung der Bilder bereitgestellt werden [99, 100]. Ausgewertet wird beim Aufbau nach Wolf im Wesentlichen das Tropfenvolumen [99].

Aufgrund der Aufwandsreduktion bei der Aufbereitung und Auswertung der Bilder sowie durch die Reduktion von Schleifen im Python-Code und durch die Parallelisierung von Prozessen erfolgt die Bildaufbereitung und Auswertung bei Wolf deutlich schneller als bei Haub. Dies führt v.a. zu mehr Komfort bei der Anwendung des Systems. Aufgrund der zwei, sich im Winkel von 90° schneidenden optischen Achsen ist eine exakt senkrechte Ausrichtung der Kapillare möglich. Ähnlich wie der Messaufbau nach Haub ist der Aufbau nach Wolf verhältnismäßig einfach in der Handhabung und aufgrund der verwendeten Komponenten kostengünstig. Entsprechend der Auslegung des optischen Systems ist der Aufbau allerdings nicht zur Vermessung von kleinen Tropfen an Glaskapillaren geeignet.

3.3 Messaufbau nach Hummel

Eine zweite Erweiterung des Messaufbaus nach Haub ist im Messaufbau nach Hummel [100] umgesetzt und in Abbildung 3.5 als CAD-Modell und realisierter Aufbau dargestellt. Dieser Messaufbau behält den einachsigen Aufbau nach Haub bei und optimiert die Komponenten, die auf dieser einen optischen Achse eingesetzt werden. Zur Aufnahme des Tropfprozesses

kommt die Industriekamera UI-3130CP-C-HQ Rev. 2 der Firma IDS mit einer Framerate von 575 fps bei einer Auflösung von 800 x 600 Pixeln zum Einsatz. Durch Reduktion des betrachteten Bildbereichs bzw. der Anzahl der abzutastenden Bildpunkte kann die erreichte Framerate auf über 1000 fps erhöht werden. Ergänzt wird die Kamera durch das Objektiv HF16HA-1B von Fujifilm mit einer Brennweite von 16 mm sowie Möglichkeiten zur Einstellung des Fokus und der Blende abhängig vom betrachteten Objekt. Zur Beleuchtung wird das gleiche LED-Modul genutzt wie im Messaufbau nach Wolf (1,15 W, 45° Abstrahlwinkel, 140 lm). Ergänzt wird das optische Messsystem durch die Analysewaage NBL254i von Adam Equipment. Diese hat eine Auflösung von 0,0001 g bei einer Standardabweichung von 0,0002 g. Durch die Verwendung der Waage wird ein zweites, redundantes Messsystem implementiert, mit dem die optischen Messungen der anderen Messsysteme validiert werden können. Zur Auswertung der von Kamera und Waage gelieferten Daten wird ein Desktop-PC eingesetzt, was zwar in Kombination mit Industriekamera und Waage zu deutlich höheren Kosten führt, aber auch eine deutliche Leistungssteigerung im Hinblick auf die Bildaufbereitung und -auswertung mit sich bringt [100].

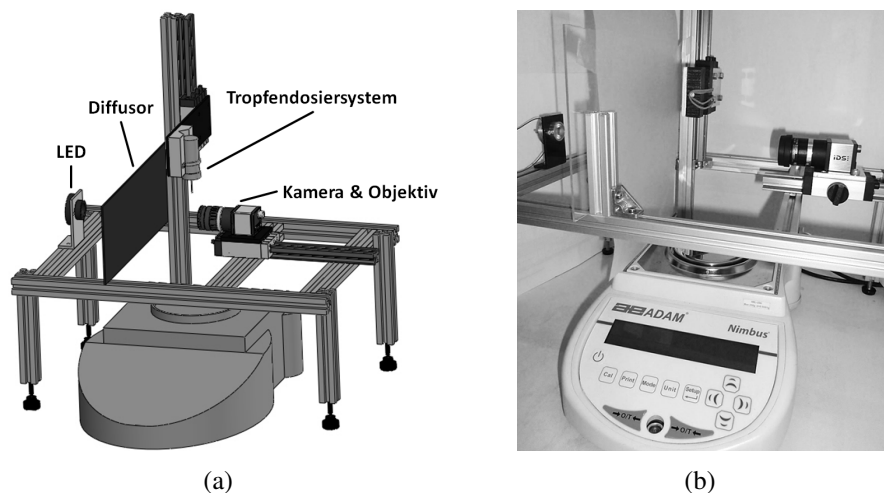


Abbildung 3.5: Messaufbau nach Hummel [100]: (a) CAD-Skizze; (b) Realisierter Aufbau

Aufgrund der vorhandenen Schnittstellen und Softwarepakete von Industriekamera und Waage ist die Software im Gegensatz zu den anderen beiden Aufbauten in der Programmiersprache C++ (z.B. [104, 105]) realisiert worden; inklusive einer an die Anforderungen der Industriekamera angepassten GUI. Da OpenCV sowohl für Python als auch für C++ verfügbar ist, erfolgt die Bildaufbereitung wie im vorangegangenen Abschnitt bzw. in Abbildung 3.4 vorgestellt. Neben der Kamera kann über die Software auch die Waage ausgelesen werden. Bei langsamen Tropfvorgängen, d.h. wenn die Waage ausreichend Zeit hat, sich nach dem Abriss eines Tropfens einzuschwingen, können hier ebenfalls einzelne Tropfen bzgl. ihrer Masse vermessen werden. Bei schnelleren Tropfvorgängen wird die mittlere Masse eines Tropfens aus der Gesamtmasse

aller aufgenommenen Tropfen und der optisch gezählten Tropfenanzahl bestimmt [100].

Grundsätzlich ermöglicht die GUI, wie auch schon bei den Messaufbauten nach Haub und Wolf, eine einfache Bedienung des Systems. Aufgrund der Einstellbarkeit von Fokus und Blende an der optischen Einheit sowie der Verfahrbarkeit der optischen Einheit entlang der optischen Achse erfordert der Messaufbau nach Hummel vor jeder Messung eine probenspezifische Kalibrierung und weist somit eine hohe Flexibilität hinsichtlich der messbaren Tropfengrößen auf. Die hohe Anzahl an Einstellmöglichkeiten (Fokus, Blende, Schwellwert zur Binärbildzeugung, ...) sowie die probenspezifische Kalibrierung führen jedoch auch zu einer Erhöhung der Fehlermöglichkeiten und somit zu einer Verringerung der Reproduzierbarkeit der optischen Messungen.

3.4 Vergleich der Messsysteme

Die in den vorangegangenen drei Abschnitten beschriebenen Systeme zur Vermessung von Tropfen unterscheiden sich hinsichtlich Hardware, Software sowie ihrer Eignung zur Vermessung bestimmter Tropfen. Gemeinsam ist allen drei Systemen die Bildaufbereitung mithilfe von OpenCV [101] bis hin zum Bild eines isolierten Tropfens. Dessen Volumen wird mithilfe der Gleichung [58]

$$V = \pi \int_a^b (f(x)^2) dx \quad (3.1)$$

durch Rotation der Kontur um die zentrale vertikale Achse des Tropfens berechnet. Die Berechnung der Tropfenbildungszeit erfolgt jeweils über die Anzahl der Bilder bis zum Tropfenabriss verrechnet mit der Framerate des jeweiligen Aufbaus bzw. der jeweiligen Kamera.

Im direkten Vergleich der Messaufbauten (vgl. auch [106]) nach Wolf und Hummel mithilfe des Zentraltrophers POMPL 0,6 S2 (vgl. Kapitel 5 bzw. Anhang B.1) hat sich gezeigt, dass die Messungen der Präzisionswaage im Aufbau nach Hummel die geringsten Standardabweichungen aufweisen [100]. Die optischen Messungen an beiden Aufbauten weisen maximale Abweichungen vom Mittelwert der Tropfenmasse von $\pm 6 \%$ auf [99, 100]. Erklärt werden können diese Unterschiede damit, dass bei der Messung des Tropfengewichts ein Mittelwert über mehrere Tropfen herangezogen wird, wohingegen die optische Messung jeden einzelnen Tropfen erfasst; aufgrund der „Individualität“ jedes Tropfens, hervorgerufen durch Schwingungen sowie Stauchungen, kommt es hier jedoch zu vergleichsweise stärkeren Abweichungen zwischen einzelnen Tropfen. In der Summe liefern beide Messaufbauten vergleichbare Ergebnisse über zwei verschiedene Messprinzipien und können somit zur Vermessung von Tropfen sowie hinsichtlich der Beurteilung der Gesetzeskonformität gemäß Abschnitt 1.1.2 als geeignet betrachtet werden.

Vergleicht man weiterhin die Messaufbauten nach Haub und Wolf so unterscheiden sich diese für die einzelnen optischen Achsen im Wesentlichen in der Verarbeitung des Graustufenbildes, da durch die Verwendung der Makrolinse im Aufbau nach Haub die Tropfen aus Glaskapillaren in einer ausreichenden Größe auf den Sensor des Kamera-Moduls abgebildet werden. Diese entspricht in etwa der Abbildungsgröße, die Tropfen bei der Verwendung des Messaufbaus nach Wolf auf dem Sensor einnehmen. Im direkten Vergleich beider Aufbauten mithilfe einer Kalibrierkugel ergeben sich Abweichungen von $\pm 3 \%$ im Vergleich zum Kugelvolumen [99]. Damit ist der Messaufbau nach Haub ebenfalls zur Untersuchung von Tropfvorgängen geeignet.

In der Zusammenfassung ergibt sich, dass alle drei vorgestellten Ansätze eine ausreichend genaue Tropfenvermessung an unterschiedlichen Tropfsystemen ermöglichen, weshalb sie im Rahmen dieser Arbeit entsprechend ihrer jeweiligen Vorteile eingesetzt worden sind.

Detailliertere Informationen zum Aufbau, der Bildverarbeitung und zur Berechnung der einzelnen Messgrößen der jeweiligen Messaufbauten können den Arbeiten von Haub [98], Wolf [99] und Hummel [100] entnommen werden.

Kapitel 4

Tropfenberechnung an Kapillarsystemen

In den beiden vorangegangenen Kapiteln sind sowohl die theoretischen als auch die technischen Grundlagen zur Analyse von Tropfvorgängen vorgestellt worden. Im Rahmen dieses Kapitels wird nun ein neuer, vergleichsweise einfacher Ansatz zur Berechnung von Tropfen an senkrechten Kapillaren hergeleitet und verifiziert. Aufgrund ihres in der Regel benetzenden (hydrophilen) Verhaltens und ihrer einfachen Geometrie werden dazu Glaskapillaren mit Innenradius r , Außenradius R sowie der Länge l betrachtet, bevor im nächsten Kapitel die Übertragung des neuen Berechnungsansatzes auf Senkrechtropfer erfolgt.

Im Rahmen der nachfolgend hergeleiteten Tropfenberechnung wird grundsätzlich ein quasistatisches Verhalten des Tropfens angenommen, d.h. es wird angenommen, dass sich der Tropfen zu jedem betrachteten Zustand (außer bei der Einschnürung / dem Abriss) im Gleichgewicht (hier: in Ruhe) befindet. Effekte, die sich aufgrund von Strömungsvorgängen im Tropfen bzw. in den Tropfen hinein ergeben, werden (zunächst) vernachlässigt; die im Rahmen der Verifikation des Berechnungsansatzes durchgeführte Fehlerabschätzung (vgl. Abschnitt 4.3.3) bestätigt die Zulässigkeit dieser Vereinfachung.

Weiterhin liegt der Fokus im Folgenden auf der Abschätzung des Volumens eines einzelnen Tropfens sowie der Zeit zwischen zwei sich ablösenden Tropfen. Die Vorgänge zur Bildung des ersten Tropfens nach dem Drehen des Tropfendosiersystems unterscheiden sich jedoch nicht wesentlich; es ist lediglich zu beachten, dass die Tropfenbildung hier ausgehend von einer nicht gefüllten Kapillare startet.

4.1 Tropfenbildung

Bevor im Folgenden die Herleitung der Berechnung von Tropfenvolumen und Tropfenbildungszeit detailliert aufgezeigt wird, werden im Rahmen dieses Abschnitts die grundlegenden Ansätze

ze und Gleichungen aufgestellt. Durchgeführte Beobachtungen von Tropfenbildungsprozessen an Glaskapillaren haben grundsätzlich gezeigt, dass sich das Wachstum des Tropfens, ausgehend vom Abriss des vorhergehenden Tropfens, in drei Phasen unterteilen lässt; diese Phasen sind in Abbildung 4.1 über der Zeit t dargestellt.

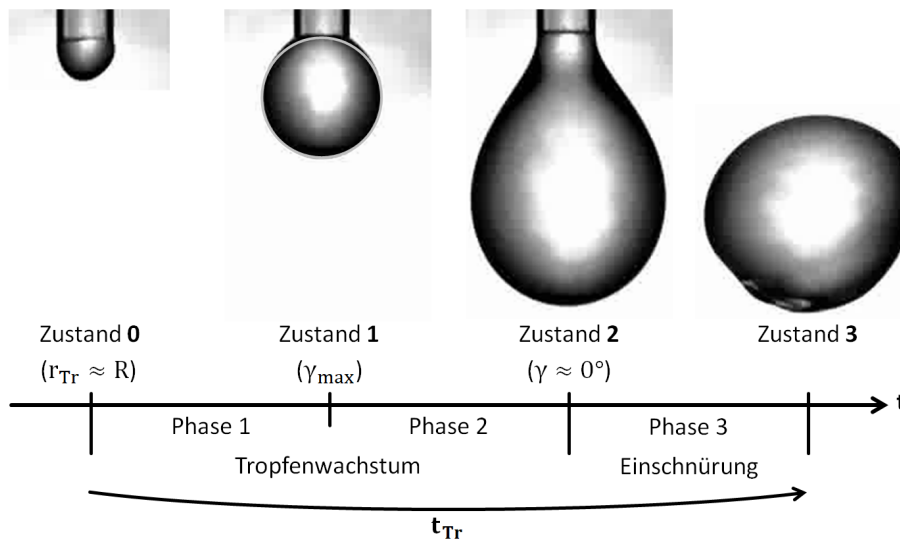


Abbildung 4.1: Phasen und Zustände während der Bildung eines Tropfens

In der ersten Phase wächst der Tropfen nahezu kugelförmig an der Unterseite der Kapillare bis im **Zustand 1** der maximale Winkel $\gamma = \gamma_{max}$ zwischen Tropfen und Kapillaraußenwand (Außenradius R) erreicht ist. Abbildung 4.1 zeigt einen solchen Tropfen im **Zustand 1**: Zur Visualisierung der annähernden Kugelform ist dem Tropfen ein Kreis überlagert; Abweichungen von der Kugelform treten v.a. in der oberen Hälfte in Form einer leichten Streckung des Tropfens aufgrund der Schwerkraft auf.

In Phase 2 wächst der Tropfen, wie in Phase 1, aufgrund des einströmenden Fluids weiter. Allerdings erfolgt dieses Wachstum nicht weiter in Form einer Kugel: In der zweiten Phase längt sich der Tropfen nach unten aus und bildet die typische Birnenform eines hängenden Tropfens bis sich im **Zustand 2**, am Ende der zweiten Phase, ein zylinderförmiger Übergang von der Kapillare zum Tropfen eingestellt hat.

In der dritten Phase des Abtropfprozesses schnürt sich der Tropfen am Hals ein und löst sich von der Kapillare; dieser Vorgang läuft im Vergleich zu den ersten beiden Phasen sehr schnell ab. Nach dem Abtropfen bleibt ein kleiner, halbkugelförmiger Tropfen (**Zustand 0**) an der Kapillare zurück (vgl. auch [63]) und der Tropfenbildungsprozess beginnt erneut.

Allgemein betrachtet lässt sich die Tropfenbildung über die Volumenzunahme des Tropfens aufgrund der einströmenden Flüssigkeit sowie die Strömung der Flüssigkeit durch die Kapillare (entlang der geschlossenen Wände vom Einlass zum Auslass) beschreiben. Grundsätzlich wird im betrachteten System also weder Masse gebildet noch vernichtet (Massenerhaltung), d.h. das

System erfüllt die in den Gleichungen (2.20) bzw. (2.24) vorgestellte Kontinuitätsgleichung. Auf die Ansätze zur Volumen- und Strömungsberechnung soll im Folgenden näher eingegangen werden.

4.1.1 Kräfte / Impulsänderungen am Tropfen

Zur grundlegenden Charakterisierung des Abtropfvorganges an einer zylindrischen Kapillare müssen die auf den Tropfen wirkenden Kräfte bzw. Impulsänderungen betrachtet werden, da diese für die Tropfenbildung verantwortlich sind und die benötigten Informationen zum Bewegungszustand des Tropfens liefern. Um den Tropfen berechnen zu können, d.h. um die Impulsgleichung für diesen aufzustellen, ist es notwendig, eine klare Systemgrenze zu ziehen und den Tropfen isoliert zu betrachten. Um dies zu realisieren soll an dieser Stelle das Freischneiden Anwendung finden:

Beim Freischneiden wird ein Körper von seinen geometrischen Bindungen, d.h. von seinen Lager- bzw. Aufhängungspunkten gelöst [107, 108]. Dabei gilt zum einen das Schnittprinzip, welches besagt, dass sich nach dem Freischneiden jeder Teil des Systems, unter Berücksichtigung aller an ihm angreifenden Kräfte, im Gleichgewicht befindet, wenn sich das Ausgangssystem im Gleichgewicht befunden hat [109]. Zum anderen gilt das Erstarrungsprinzip, das es ermöglicht, „verformbare Körper, die sich im Gleichgewicht befinden, wie erstarrte Körper zu behandeln, also mit den Methoden der Stereo-Statik zu berechnen“ [109]. Entsprechend dieser beiden Prinzipien kann ein quasi-statischer Tropfen zu einem definierten Zeitpunkt t_i als starrer Körper im Gleichgewicht betrachtet und das Freischneiden zur Ermittlung der auf den Tropfen wirkenden Kräfte herangezogen werden. Um das freigeschnittene System, hier den Tropfen, untersuchen zu können müssen alle auf diesen Körper einwirkenden Kräfte und Momente berücksichtigt werden [108], d.h. sowohl eingeprägte Kräfte, wie z.B. die Gewichtskraft, als auch Schnittkräfte, welche die Wirkung repräsentieren, die die weggeschnittenen Teile auf das betrachtete System ausüben [110].

In Abbildung 4.2 sind die Schnittlinie (Abbildung 4.2 (a)), entlang derer der Tropfen freigeschnitten werden soll, sowie alle Kräfte bzw. Impulsänderungen (Abbildung 4.2 (b)), die entlang dieser Schnittlinie auf den quasi-statischen Tropfen einwirken, (schematisch) dargestellt; der Tropfen wird dabei gemäß dem Erstarrungsprinzip zum betrachteten Zeitpunkt als starrer Körper angesehen. Bei der Gewichtskraft F_g handelt es sich um eine äußere eingeprägte Kraft deren Ursache im Schwerfeld der Erde liegt; bei der resultierenden Kraft in z-Richtung aufgrund der Oberflächenspannung $F_{sf,z}$, der Druckkraft F_p und der Impulsänderung aufgrund des einströmenden Fluids F_v handelt es sich dagegen um Schnittkräfte, die erst aufgrund der gewählten Schnittlinie berücksichtigt werden müssen. Grundsätzlich wird im Zuge der quasi-statischen Betrachtung, bei der die Trägheitskräfte vernachlässigt werden, davon ausgegangen,

dass zu jedem Zeitpunkt (außer beim Tropfenabriss) eine ausgeglichene Impuls- bzw. Kräftebilanz

$$\frac{dI}{dt} = F_{sf,z} - F_g - F_p - F_v = 0 \quad (4.1)$$

am Tropfen herrscht, d.h. dass der Tropfen zum betrachteten Zeitpunkt seinen Bewegungszustand nicht ändert und sich in Ruhe befindet.¹

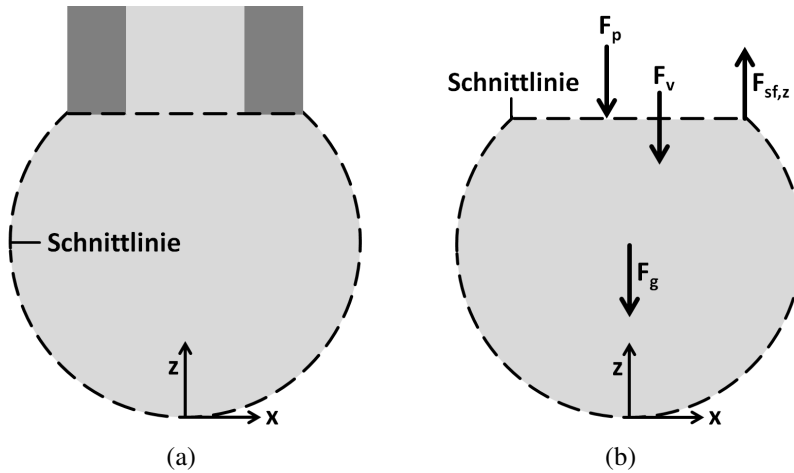


Abbildung 4.2: Schematische Darstellung des Freischneidens eines Tropfens: (a) Freischnitt; (b) Kräfte bzw. Impulsänderungen in z-Richtung

Nach oben, d.h. in positive z-Richtung wirkt, wie in Abschnitt 2.2.1 bereits beschrieben, die Kraft $F_{sf,z}$ aufgrund der Oberflächenspannung σ (vgl. Gleichung (2.38)) abhängig davon, welchen Winkel γ Tropfen und Kapillarwand bilden (vgl. Abbildung 2.4 (a)).

Nach unten, d.h. in negative z-Richtung, wirkt u.a. die Gewichtskraft F_g entsprechend Gleichung (2.40).

Zur Aufrechterhaltung der ebenen Fläche an der Tropfenoberseite muss im Rahmen des Freischnitts (vgl. Abbildung 4.2 (b)) außerdem die Druckkraft

$$F_p = p_{Tr,oben} A_R \quad (4.2)$$

als Antwort auf den Druck an der Oberseite des Tropfens $p_{Tr,oben} = p(h_{Tr})$ (vgl. Abbildung 2.5) berücksichtigt werden. Diese Kraft wird durch die Flüssigkeitssäule über dem Tropfen sowie die Kapillare aufgebracht und muss demnach, angelehnt an Nemchinsky [111] und Zhang & Basaran [112], auf die (ebene) Fläche

$$A_R = \pi R^2, \quad (4.3)$$

¹Zur besseren Unterscheidung vom Druck p wird in Gleichung (4.1) und im weiteren Verlauf der vorliegenden Arbeit das Formelzeichen I für den Impuls verwendet.

(vgl. Abbildung 2.4 (b)) bezogen werden. Zur Berechnung des Drucks $p_{\text{Tr,oben}}$ an der Oberseite des Tropfens ist zu beachten, dass sich die Krümmung an der Tropfenoberfläche gemäß der Young-Laplace-Gleichung (vgl. Abschnitt 2.1.4) immer entsprechend dem lokal herrschenden Druck im Tropfen einstellt; daher ist der hydrostatische Druck im Tropfen, abhängig von der Höhe z , zu berücksichtigen (vgl. Abschnitt 2.2.3). Für den Druck $p_{\text{Tr,oben}}$ ergibt sich daher mithilfe von Gleichung (2.47):

$$p_{\text{Tr,oben}} = \frac{2 \sigma}{r_{\text{Tr}}} - \rho g h_{\text{Tr}} \quad (4.4)$$

Aus Gleichung (2.47) bzw. (4.4) folgt außerdem, dass ideal kugelförmige Tropfen aufgrund der Änderung des Drucks im Tropfen entlang der vertikalen Tropfenachse (z -Achse) in der Realität nicht existieren können; bis zu einer gewissen Tropfengröße können Tropfen aber in guter Näherung als kugelförmig betrachtet werden (vgl. Abbildung 4.1, Zustand 1).

Neben den beiden statischen Kräften F_g und F_p führt der, mit der Geschwindigkeit $\bar{v}$ (vgl. Gleichung (2.6)) durch die Querschnittsfläche im Inneren des Rohres

$$A_r = \pi r^2, \quad (4.5)$$

(vgl. Abbildung 2.4 (b)) in den Tropfen einströmende Fluid-Massenstrom $\dot{m}$ bzw. Fluid-Volumenstrom $\dot{V}$ zu einer Impulsänderung. Diese Impulsänderung des einströmenden Fluides soll hier als F_v bezeichnet werden und berechnet sich wie folgt (vgl. z.B. [33, 34, 41, 45]):

$$F_v = \dot{m} \bar{v} = \rho \dot{V} \bar{v} = \rho \frac{\dot{V}^2}{A_r} \quad (4.6)$$

Einsetzen der Gleichungen (2.38), (2.40), (4.2), (4.4) und (4.6) in Gleichung (4.1) liefert die allgemeine Impuls- bzw. Kräftebilanz am Tropfen in der Höhe $z = h_{\text{Tr}}$:

$$2 \pi R \sigma \cos(\gamma) = \rho g V_{\text{Tr}} + \rho \frac{\dot{V}^2}{A_r} + \left(\frac{2 \sigma}{r_{\text{Tr}}} - \rho g h_{\text{Tr}} \right) A_R \quad (4.7)$$

Aufgrund der quasi-statischen Betrachtung der Tropfenbildung durch Vernachlässigung von volumenstromabhängigen Termen im Rahmen dieser Arbeit vereinfacht sich Gleichung (4.7) zu

$$2 \pi R \sigma \cos(\gamma) = \rho g V_{\text{Tr}} + \left(\frac{2 \sigma}{r_{\text{Tr}}} - \rho g h_{\text{Tr}} \right) A_R; \quad (4.8)$$

der vernachlässigte Term F_v (vgl. Gleichung (4.6)) wird im Rahmen einer Fehlerabschätzung (vgl. Abschnitt 4.3.3) wieder aufgegriffen.

4.1.2 Volumenstrom durch die Kapillare

Neben den Kräften bzw. Impulsänderungen die auf den Tropfen wirken, wird der Volumenstrom $\dot{V}$ durch die senkrechte Kapillare in den Tropfen zur Analyse der Tropfendosierung, insbesondere zur Berechnung der Tropfenbildungszeit, benötigt. Im Folgenden wird daher ein Ansatz zur Berechnung dieses Volumenstroms, aufbauend auf der Berechnung der Kapillarströmung von Sparrow et al. [50], vorgestellt; Abbildung 4.3 veranschaulicht die dafür relevanten Größen der betrachteten Tropfsysteme mit Glaskapillaren.

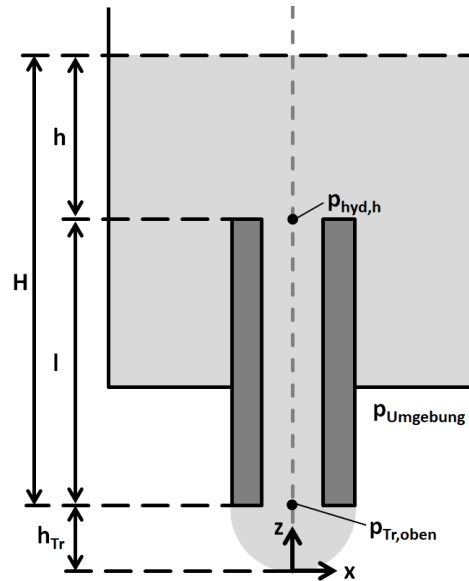


Abbildung 4.3: Wichtige Größen der Tropfsysteme mit Glaskapillaren

Der Volumenstrom entlang der Kapillarachse (z-Achse) durch eine senkrechte, zylindrische Kapillare ergibt sich grundsätzlich aus den im System herrschenden Drücken (vgl. Abschnitt 2.1.3); berechnet wird er mithilfe der Navier-Stokes-Gleichung in z-Richtung (vgl. Gleichung (2.16) bzw. (2.23)). Für den hier betrachteten Fall einer stationären, Druck getriebenen, reibungsbehafteten Strömung im Schwerfeld der Erde vereinfacht sich diese, ausgehend von [50] und ergänzt um die Kraftdichte der Gewichtskraft, zu

$$\rho v_z \frac{dv_z}{dz} = -\frac{dp}{dz} + \eta \nabla^2 v_z - \rho g; \quad (4.9)$$

dabei ist v_z die Geschwindigkeit in z-Richtung, ρ die Dichte und η die dynamische Viskosität des Fluids sowie g die Erdbeschleunigung. Gleichung (4.9) beinhaltet folgende Komponenten der Strömungsberechnung:

- Änderungen in der Strömung, wie sie z.B. durch die Ausbildung des Strömungsprofils am Eingang der Kapillare auftreten, werden durch die konvektive Beschleunigung auf der linken Seite repräsentiert; aus diesem Term folgt der Einlaufdruckverlust.

- Der erste und der dritte Term auf der rechten Seite der Gleichung beschreiben die Drücke, welche die Strömung durch die senkrechte Kapillare antreiben.
- Der zweite Term auf der rechten Seite beschreibt den Widerstand, den die Flüssigkeit aufgrund der Reibung / Viskosität beim Durchströmen der Kapillare erfährt.

Die lokale Beschleunigung $\frac{dv_z}{dt}$ kann aufgrund der stationären Strömungssituation vernachlässigt werden. Die somit vernachlässigten Induktivitäten müssen im Rahmen der Fehlerabschätzung in Abschnitt 4.3.3 berücksichtigt werden.

Die Berechnung des Volumenstroms durch die Kapillare ergibt sich nach der Umformung von Gleichung (4.9) analog zu [50] in zwei Schritten: Zunächst erfolgt die Integration von Gleichung (4.9) über die (innere) Querschnittsfläche der Kapillare A_r (vgl. Abbildung 2.4 (b) und Gleichung (4.5)); dabei erhält man

$$A_r \left(-\frac{dp}{dz} - \rho g \right) = \rho \int_{A_r} (v \cdot \nabla v_z) dA_r - \eta \int_{A_r} \nabla^2 v_z dA_r. \quad (4.10)$$

Nach Division durch A_r folgt anschließend die Integration von Gleichung (4.10) über die Kapillarlänge l ; für die linke Seite gilt dabei

$$\int_{z=h_{Tr}+l}^{z=h_{Tr}} \left(-\frac{dp}{dz} - \rho g \right) dz = p(h_{Tr}) - p(h_{Tr}+l) + \rho g l = \Delta p + \rho g l. \quad (4.11)$$

Die Integration der rechten Seite von Gleichung (4.10) kann direkt von Sparrow et al. [50] übernommen werden und es ergibt sich

$$\Delta p + \rho g l = \frac{1}{2} \rho \bar{v}^2 \left(\frac{16 \eta l}{\rho \bar{v} r^2} + K \right). \quad (4.12)$$

zur Beschreibung der Strömung in zylindrischen Kapillaren; $\bar{v}$ ist dabei die mittlere Geschwindigkeit in der Kapillare. Mithilfe der Gleichungen (2.5) und (2.6) folgt daraus die um den Term $\rho g l$ erweiterte Gleichung (2.10):

$$\Delta p + \rho g l = \frac{8 \eta l}{\pi r^4} \dot{V} + K \frac{\rho \dot{V}^2}{2 A_r^2} \quad (4.13)$$

Unter Berücksichtigung der relevanten Größen des Tropfsystems in Abbildung 4.3 ergibt sich darüber hinaus der zur Lösung von Gleichung (4.13) benötigte Druckunterschied

$$\Delta p = p_{hyd,h} - p_{Tr,oben} \quad (4.14)$$

zwischen Kapillareinlass und -austritt, der hydrostatische Druck

$$p_{\text{hyd,h}} = \rho g h \quad (4.15)$$

aufgrund der Flüssigkeitssäule über der Kapillare und der hydrostatische Druck

$$p_{\text{hyd,l}} = \rho g l \quad (4.16)$$

entlang der senkrechten Kapillare; der Druck $p_{\text{Tr,oben}}$ am Kapillaraustritt berechnet sich entsprechend Gleichung (4.4). Damit, mit dem Zusammenhang (vgl. Abbildung 4.3)

$$p_{\text{hyd,h}} + p_{\text{hyd,l}} = \rho g (h + l) = \rho g H \quad (4.17)$$

sowie der Definition des fluidischen Widerstandes in Gleichung (2.5) ergibt sich aus Gleichung (4.13)

$$\rho g H = R_{\text{fl}} \dot{V} + K \frac{\rho \dot{V}^2}{2 A_{\text{r}}^2} + p_{\text{Tr,oben}} \quad (4.18)$$

zur Berechnung des Volumenstroms durch die Kapillare in den quasi-statischen Tropfen; K ist dabei der Einlaufdruck-Koeffizient (vgl. Abschnitt 2.1.3) zur Quantifizierung des Einlaufdruckverlustes (für Glaskapillaren ($l \geq L_{\text{e}}$; $Re \approx 100$): $K = 1,397$ [49]).

4.2 Tropfenberechnung

Im vorangegangenen Abschnitt ist bereits die Unterteilung der Tropfenbildung in verschiedene Phasen vorgestellt worden. Nachfolgend sollen aufbauend auf diesen Phasen das Tropfenwachstum (Phase 1 & Phase 2) sowie die Einschnürung bzw. der Abriss des Tropfens (Phase 3) separat betrachtet und anschließend zu einem Ansatz zur Berechnung von Tropfenvolumen und Tropfenbildungszeit kombiniert werden.

4.2.1 Tropfenwachstum (Phase 1 & Phase 2)

In Phase 1 bildet sich der Tropfen ausgehend von der Halbkugelform bis zum Erreichen des maximalen Winkels $\gamma = \gamma_{\text{max}}$ (Zustand **1**) näherungsweise kugelförmig aus (vgl. Abbildung 4.1); die Einschränkungen dieser Vereinfachung sind in Abbildung 4.1 zu erkennen. Phase 2 der Tropfenbildung umfasst die Entwicklung des Tropfens ausgehend vom Zustand **1** bis hin zum Zustand **2** (vgl. Abbildung 4.1). Im Zustand **2** weist der hängende Tropfen die typische Birnenform mit zylinderförmigem Übergang von der Kapillare zum Tropfen, inklusive einer konkaven Krümmung des Tropfenhalses „in den Tropfen hinein“, auf. Dieser Zustand charakterisiert den

theoretisch letzten möglichen stabilen Zustand des hängenden Tropfens an der Kapillare.

Ziel der Berechnungen in diesem Abschnitt ist die Bestimmung des Volumens des birnenförmigen Tropfens V_{Tr} am Ende von Phase 2, d.h. im Zustand **2**, sowie der Zeit t , die ausgehend vom halbkugelförmigen Tropfen (Zustand **0**) für das Tropfenwachstum benötigt wird.

Diese Berechnung der relevanten Parameter eines Tropfens (Volumen V_{Tr} , Scheitelradius r_{Tr} , Höhe h_{Tr} , Winkel γ zwischen Kapillare und Tropfen, Volumenstrom $\dot{V}$; vgl. Abbildung 4.4) in einem beliebigen quasi-statischen Zustand i während der Wachstumsphase erfolgt mithilfe der in den vorangegangenen Abschnitten erarbeiteten Kräfte- (4.8) und Volumenstrom- (4.18) Gleichung sowie den Gleichungen (2.5) für R_{fl} , (4.3) für A_R , (4.4) für $p_{Tr,oben}$ und (4.5) für A_r .

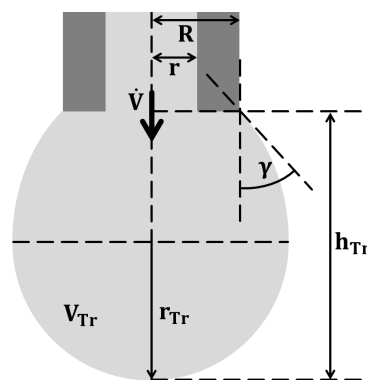


Abbildung 4.4: Parameter eines hängenden Tropfens

Zur Berechnung der genannten Tropfenparameter ist weiterhin eine geeignete Modellierung der Form des Tropfens notwendig. Dafür soll im Folgenden für die einzelnen quasi-statischen Zustände i die zu Beginn von Abschnitt 2.2.3 vorgestellte Pendant Drop Methode Anwendung finden, da hier ein direkter Zusammenhang zwischen den in Gleichung (4.8) berücksichtigten Kräften und der Druckverteilung im Tropfen gemäß Gleichung (2.47) besteht [66]; dieser Zusammenhang lässt sich auch mithilfe der Navier-Stokes-Gleichung (vgl. Abschnitt 2.1.5) herleiten.

Mathematisch erfolgt die Modellierung durch Lösung des Differentialgleichungssystems (2.48), ausgehend von der Anfangsbedingung (2.49), und mithilfe eines geeigneten computergestützten Berechnungsprogramms (hier: Scilab). Die verschiedenen quasi-statischen Zustände i , die während der Wachstumsphase durchlaufen werden, werden dabei durch die Variation (Zunahme) des Scheitelradius des Tropfens $r_{Tr,i}$ abgebildet (vgl. Abbildung 4.5 (a)). Ausgehend vom Startpunkt des Tropfenwachstums bei einem halbkugelförmigen Tropfen (Zustand **0**) ergibt sich für diese Variation von $r_{Tr,i}$ die Anfangsbedingung

$$r_{Tr,0} = R \quad (4.19)$$

mit dem Außenradius R der Kapillare. Die Randbedingung zur Ermittlung der Tropfenhöhe $h_{Tr,i}$

aus der Lösung des Gleichungssystems (2.48) ergibt sich für $r_{Tr,i} \geq R$ und $h_{Tr,i} \geq R$ aus dem Berührungspunkt der Kapillaraußenkante (Radius R) mit der Tropfenkontur (vgl. Abbildung 4.5 (b)):

$$z(x = R) = h_{Tr,i}. \quad (4.20)$$

Aus der Randbedingung ergibt sich auch das Abbruchkriterium der Variation des Scheitelradius $r_{Tr,i}$: Ist der gewählte Radius $r_{Tr,i}$ zu groß, kann Gleichung (4.20) in Kombination mit dem Kapillaraußenradius R nicht mehr erfüllt werden; eine physikalisch sinnvolle Lösung ist somit nicht möglich.

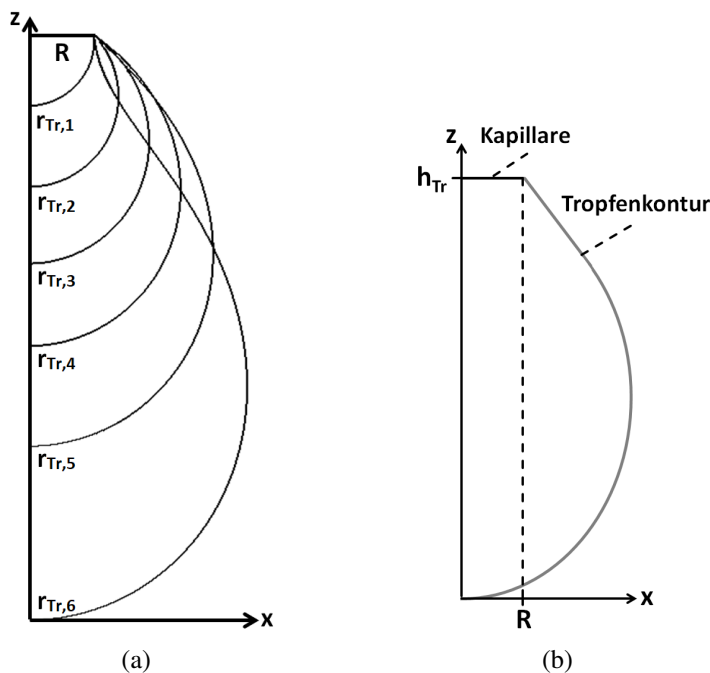


Abbildung 4.5: Tropfenmodellierung aufbauend auf der Pendant Drop Methode (vgl. Abschnitt 2.2.3): (a) Variation $r_{Tr,i}$ ($r_{Tr,1} = R < r_{Tr,2} < r_{Tr,3} < r_{Tr,4} < r_{Tr,5} < r_{Tr,6} = r_{Tr,max}$); (b) Randbedingung $h_{Tr,i}$

Zusammenfassend folgt somit für die Berechnung der relevanten Parameter eines quasi-statisch hängenden Tropfens in einem beliebigen Zustand i mit definiertem Radius $r_{Tr,i}$:

- Die Tropfenhöhe $h_{Tr,i}$ und der Winkel γ_i zwischen Tropfen und Kapillare ergeben sich aus der Tropfenmodellierung (Gleichungssystem (2.48)).
- Das Tropfenvolumen $V_{Tr,i}$ ergibt sich unter Berücksichtigung von $r_{Tr,i}$, $h_{Tr,i}$ und γ_i aus Gleichung (4.8) oder durch Rotation (Integration, vgl. Gleichung (3.1)) der modellierten Tropfenkontur um die z -Achse (größerer Rechenaufwand).
- Der Volumenstrom $\dot{V}_i$ ergibt sich unter Berücksichtigung von $r_{Tr,i}$, $h_{Tr,i}$ und γ_i aus Gleichung (4.18).

Die Berechnung der Tropfenbildungszeit t_i bis zu einem bestimmten Zustand i der Wachstumsphase ergibt sich durch Aufsummieren der einzelnen Zeiten Δt_i zwischen den einzelnen quasi-statischen Zuständen $(i-1, i)$. Die Zeit Δt_i ergibt sich dabei aus der Definition des Volumenstroms

$$\dot{V} = \frac{dV}{dt} \quad \text{bzw.} \quad V = \int_{t_{i-1}}^{t_i} \dot{V} dt \quad (4.21)$$

des in den Tropfen einströmenden Fluids sowie Abbildung 4.6 zu

$$\Delta t_i = \frac{\Delta V_{Tr}}{\dot{V}} = \frac{V_{Tr,i} - V_{Tr,i-1}}{\dot{V}_i}. \quad (4.22)$$

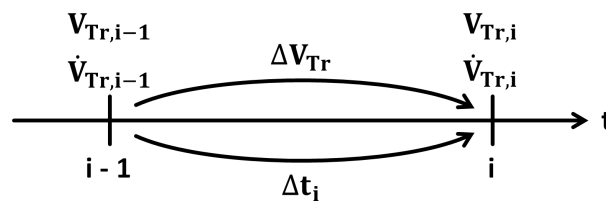


Abbildung 4.6: Visualisierung der Zeit zwischen zwei Zuständen

Der durch die Verwendung des Volumenstroms $\dot{V}_i$ ($\dot{V}_{i-1} \neq \dot{V}_i$) in Gleichung (4.22) gemachte Fehler muss im Rahmen der nachfolgenden Fehlerabschätzung (vgl. Abschnitt 4.3.3) berücksichtigt werden. Grundsätzlich ist der Fehler umso kleiner, je näher die Zustände $(i-1, i)$ beieinander liegen, d.h. je höher die Auflösung der Berechnung des Tropfenwachstums ist.

Durch Kombination der einzelnen Parameter eines Tropfens in einem bestimmten Zustand i mit der Zeit t_i , die bis zum Erreichen dieses Zustandes verstreicht, ergibt sich die Möglichkeit, die zeitliche Entwicklung der einzelnen Größen zu analysieren.

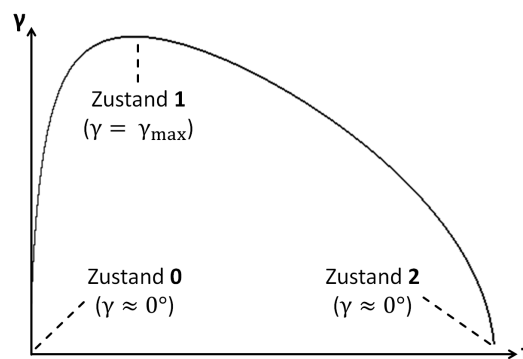


Abbildung 4.7: Zeitliche Entwicklung des Winkels γ (qualitative Darstellung)

In Abbildung 4.7 ist exemplarisch die qualitative zeitliche Entwicklung des Winkels γ (vgl. Abbildung 4.4) aufgetragen; weiterhin sind die einzelnen Zustände der Tropfenbildung entsprechend Abbildung 4.1 hervorgehoben:

- Zustand **0** markiert den Beginn der Tropfenbildung ausgehend vom halbkugelförmigen Tropfen ($\gamma \approx 0^\circ$).
- Zustand **1** markiert das Ende der ersten Phase der Tropfenbildung, in der der Tropfen bis zum maximalen Winkel $\gamma_{\max}$ nahezu kugelförmig an der Unterseite der Kapillare wächst.
- Zustand **2** markiert das Ende der zweiten Phase, in der sich der Tropfen ausgehend vom maximalen Winkel $\gamma_{\max}$ nach unten auslängt bis eine Birnenform mit zylinderförmigem Übergang zwischen Kapillare und Tropfen ($\gamma \approx 0^\circ$) erreicht ist.

Falls gewünscht, können diese Eigenschaften für eine detailliertere Analyse des Tropfenbildungsprozesses bzw. für eine genauere Unterteilung der Tropfenbildung in die zu Beginn von Abschnitt 4.1 vorgestellten Phasen verwendet werden.

Neben den zeitlichen Entwicklungen der einzelnen Parameter lässt sich aber auch das Volumen des birnenförmigen Tropfens V_{Tr} am Ende des Tropfenwachstums (Zustand **2**) sowie die Zeit t , die ausgehend vom halbkugelförmigen Tropfen (Zustand **0**) für das Tropfenwachstum benötigt wird, berechnen. Diese Größen sind relevant für die in Abschnitt 4.2.3 folgende Berechnung von Tropfenvolumen und Tropfenbildungszeit unter Berücksichtigung der Einschnürungs- und Abrissvorgänge und werden im Folgenden mit $V_{\text{Tr,TW}}$ und t_{TW} bezeichnet; der Volumenstrom am Ende der Wachstumsphase wird durch $\dot{V}_{\text{TW}}$ repräsentiert.

4.2.2 Einschnürung und Abriss (Phase 3)

Ausgehend vom zylinderförmigen Übergang von der Kapillare in den Tropfen am Ende des Tropfenwachstums (Phase 2) findet in Phase 3 die Einschnürung gemäß der Rayleigh-Instabilität [113] und der Abriss des Tropfens statt. Die Einschnürung wird dabei initiiert von einem minimalen Impuls in die negative z -Richtung, d.h. nach unten, und der konkaven Krümmung der Oberfläche; beide Faktoren weist der Tropfen direkt im Anschluss an das Ende der Wachstumsphase auf. Die Krümmung nach innen führt zu einer Verringerung des Querschnitts am Tropfenhals und damit zu einer Beschleunigung des Tropfenabriss; hat die Einschnürung einmal begonnen, kann sie demnach nicht mehr gestoppt werden. Nach dem Abriss verbleibt ein halbkugelförmiger Tropfen an der Kapillare (Zustand **0**; vgl. Abbildung 4.1 sowie [63]).

Darauf aufbauend, dass die Geometrieänderung in Phase 3 fast ausschließlich auf der Einschnürung basiert und sich der Tropfenradius r_{Tr} sowie die Tropfenhöhe h_{Tr} im Vergleich zum Ende der Wachstumsphase kaum ändern, kann angenommen werden, dass der Volumenstrom konstant bleibt:

$$\dot{V}_{\text{EA}} \approx \dot{V}_{\text{TW}} \quad (4.23)$$

Der Fehler, der im Rahmen dieser Annahme gemacht wird, lässt sich mithilfe einer detaillierten Analyse aufgenommener Tropfenbildungsvorgänge abschätzen (vgl. Fehlerabschätzung in Abschnitt 4.3.3).

Zur Berechnung der Parameter des Tropfens während der Einschnürung bzw. des Abrisses wird außerdem angenommen, dass kein weiteres Wachstum des sich ablösenden Tropfens mehr stattfindet. Demnach wird die aus der Kapillare in den Tropfenhals strömende Flüssigkeit ausschließlich zur Bildung des halbkugelförmigen Tropfens nach dem Tropfenabriss verwendet und die während Einschnürung und Abriss verstreichende Zeit t_{EA} ergibt sich aus dem Volumen $V_{Tr}(r_{Tr} = R)$ eines Tropfens im Zustand **0** (vgl. Bedingung in Gleichung (4.19)) sowie dem entsprechenden Volumenstrom $\dot{V}_{EA}$:

$$t_{EA} = \frac{V_{Tr}(r_{Tr} = R)}{\dot{V}_{EA}} \quad (4.24)$$

Der Fehler durch die Vernachlässigung des weiteren Tropfenwachstums des sich ablösenden Tropfens muss ebenfalls in der Fehlerabschätzung in Abschnitt 4.3.3 berücksichtigt werden. Die Abschätzung des Fehlers erfolgt angelehnt an Rao et al. [63] (vgl. Abschnitt 2.2.2): Ausgehend von den am abreißen Tropfen angreifenden Kräften wird analog zu Gleichung (4.1) die Bewegungsgleichung für den Tropfen aufgestellt; im Unterschied zum Ansatz in Gleichung (4.1) tritt beim Ablösen des Tropfens allerdings eine Beschleunigung nach unten auf. Erreicht die Geschwindigkeit des Tropfens die Geschwindigkeit des nachströmenden Tropfens gelangt keine weitere Flüssigkeit mehr in den sich ablösenden Tropfen und das maximale Volumen ist erreicht.

4.2.3 Zusammenfassung der Tropfenberechnung

Zusammenfassend lässt sich aus Tropfenwachstum und Einschnürung bzw. Abriss die Zeit zwischen zwei aufeinanderfolgenden Tropfen

$$t_{Tr} = t_{TW} + t_{EA} \quad (4.25)$$

als Summe der Zeiten der einzelnen Phasen berechnen. Die Tropfenbildung startet dabei mit einem halbkugelförmigen Tropfen, welcher nach dem Ablösen des vorangegangenen Tropfens an der Kapillare hängt und endet mit dem Ablösen des Tropfens von der Kapillare und einem neuen halbkugelförmigen Tropfen an der Kapillarunterseite.

Bei der Berechnung des Volumens ist zu beachten, dass in Abschnitt 4.2.2 angenommen wird, dass während der Einschnürung kein weiteres Wachstum des sich ablösenden Tropfens mehr stattfindet und die aus der Kapillare in den Tropfenhals strömende Flüssigkeit ausschließlich zur

Bildung des halbkugelförmigen Tropfens nach dem Tropfenabriss verwendet wird. Damit entspricht das Volumen des sich ablösenden Tropfens dem Volumen am Ende der Wachstumsphase:

$$V_{Tr} = V_{TW} \quad (4.26)$$

Abschließend kann aus dem Tropfenvolumen und der Zeit zwischen zwei aufeinanderfolgenden Tropfen der durchschnittliche Volumenstrom über die komplette Tropfenbildungsdauer berechnet werden:

$$\dot{V}_{Tr} = \frac{V_{Tr}}{t_{Tr}} \quad (4.27)$$

4.2.4 Alternative Ansätze zur Tropfenmodellierung

Neben der in Abschnitt 2.2.3 bzw. 4.2.1 vorgestellten Modellierung des Tropfens mithilfe der Pendant Drop Methode, d.h. mithilfe der Druckverteilung im Tropfen, gibt es noch weitere Möglichkeiten der Tropfenmodellierung, die im Wesentlichen auf der Abbildung der Tropfenkontur mithilfe einer Funktion $f(x)$ und der Rotation dieser Kontur (Integration, vgl. Gleichung (3.1)) um die vertikale Tropfenachse basieren. Im Folgenden sollen daher drei in dieser Arbeit hergeleitete Ansätze vorgestellt werden, die zwar für die Verwendung im Rahmen dieser Arbeit nicht geeignet waren, in anderen Fällen, abhängig von den gegebenen Randbedingungen und Umwelteinflüssen, aber eventuell herangezogen werden können. Ursache für die Nicht-Verwendung im Rahmen dieser Arbeit waren zum einen die fehlerhafte Abbildung der Tropfengeometrie aber auch die Unlösbarkeit der entstandenen Gleichungssysteme aufgrund fehlender Randbedingungen.

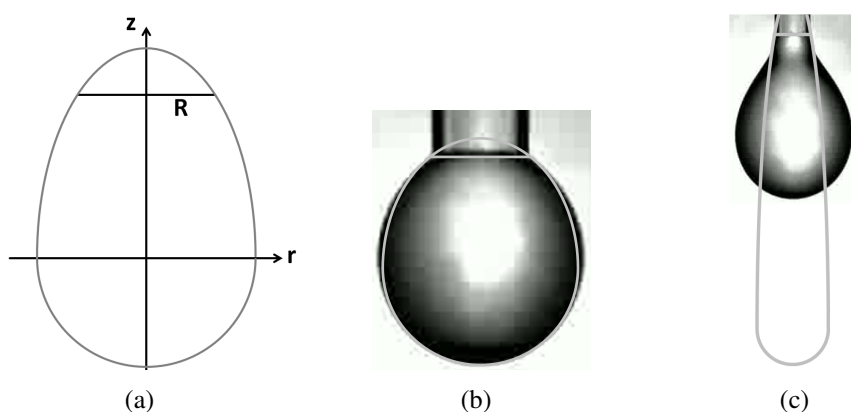


Abbildung 4.8: Tropfenmodellierung mithilfe einer Funktion aus Kreis und Ellipse: (a) Modellierung; (b) Vergleich mit Zustand 1; (c) Vergleich mit Zustand 2

Bei allen Ansätzen zur Tropfenmodellierung mithilfe einer Funktion empfiehlt sich die Modellierung der unteren Tropfenhälfte mithilfe eines Kreises oder einer Ellipse; bei der Wahl einer

Ellipse ist jedoch zu beachten, dass aufgrund zweier unterschiedlicher Halbachsen zwei Radien festgelegt werden müssen. Das Koordinatensystem zur Beschreibung der Funktion befindet sich hier, im Gegensatz zum Rest der vorliegenden Arbeit, im Zentrum des Kreises; der Berührungspunkt mit der Kapillare (Außenradius R) lässt sich analog zu Gleichung (4.20) über den Schnittpunkt bestimmen bzw. berechnen (vgl. Abbildung 4.8 (a) und 4.9).

Im einfachsten Fall lässt sich der obere Teil des Tropfens mithilfe einer Ellipse modellieren (vgl. Abbildung 4.8 (a)). Dieser Ansatz enthält prinzipiell eine geringe Anzahl zu bestimmender Parameter und kommt demnach mit einer geringen Anzahl an Randbedingungen aus. Die Überprüfung des Ansatzes mit den im Rahmen dieses Kapitels betrachteten Tropfprozessen ist in Abbildung 4.8 (b) und (c) mithilfe der überlagerten grauen Linien (berechnete Tropfenkontur) dargestellt: Da die Übereinstimmung im Zustand **1** ($\gamma = \gamma_{\max}$) entsprechend Abbildung 4.8 (b) gut ist, kann der Ansatz zur Modellierung bis zum Zustand **1** eingesetzt werden. Für das weitere Wachstum des Tropfens weist die Modellierung aber aufgrund der Modellierung des Winkels offensichtliche Mängel auf und ist somit für die Modellierung von Zustand **2** (vgl. Abbildung 4.8 (c)) nicht einsetzbar.

Eine detailliertere Abbildung des oberen Teils des Tropfens, insbesondere des birnenförmigen Tropfens, ist, z.B. mithilfe eines Polynoms 3. Grades denkbar und in Abbildung 4.9 (a) skizziert. Weiterhin stellt die Verwendung einer zweiten Ellipse eine Möglichkeit zur Detaillierung dar (vgl. Abbildung 4.9 (b)). Im Vergleich zur Modellierung mit einer Ellipse erhöht sich aber in beiden Fällen die Anzahl der zur Definition benötigten Parameter und somit die Anzahl der benötigten Randbedingungen. Eine Anwendung wird damit erschwert, was im Rahmen dieser Arbeit zum Ausschluss der Ansätze aufgrund der Unlösbarkeit der Gleichungssysteme geführt hat.

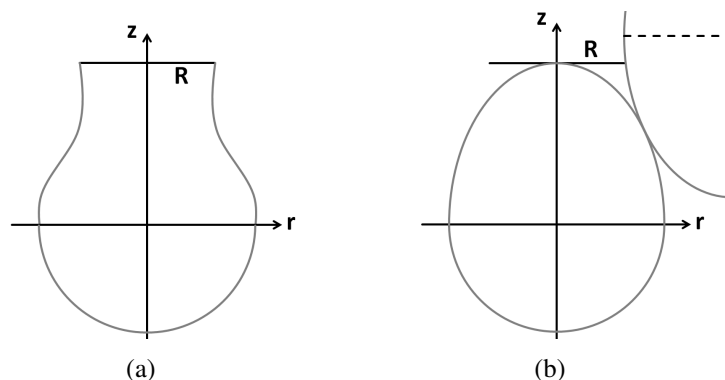


Abbildung 4.9: Weitere Ansätze zur Tropfenmodellierung mithilfe einer Funktion: (a) Tropfenmodellierung aus einem Kreis und einem Polynoms 3. Grades; (b) Tropfenmodellierung aus einem Kreis und zwei Ellipsen

4.3 Verifikation des Berechnungsansatzes

Zur Verifikation des vorgestellten Berechnungsansatzes wurden sowohl Messreihen an realen Tropfendosiersystemen mit einer Borsilikatglas-Kapillare als auch numerische Simulationen ausgewählter Systeme durchgeführt. Im Folgenden sollen die Ergebnisse einer Messreihe exemplarisch vorgestellt werden. Dabei werden zunächst die Tropfenbildungszeit und das Tropfenvolumen im Allgemeinen betrachtet, da diese beiden Größen gemäß der gesetzlichen Vorgaben (vgl. Abschnitt 1.1.2) für die Dosierung flüssiger Arzneimittel entscheidend sind. Anschließend wird im Rahmen einer Fehlerabschätzung die Qualität des hergeleiteten Berechnungsansatzes detaillierter analysiert und der Einfluss einzelner Annahmen und Vereinfachungen quantifiziert. Den Abschluss des Abschnitts bildet eine Zusammenfassung der Ergebnisse weiterer Untersuchungen.

4.3.1 Methodik

Im Rahmen der durchgeführten Messreihen wurde zum einen deionisiertes und entgastes Wasser als Testmedium herangezogen, da der Großteil der heute am Markt erhältlichen Medikamente auf Wasser basiert; zur Entgasung wurde das Wasser im Exsikkator einem Unterdruck ausgesetzt, bis sich keine Blasen mehr gebildet haben. Daneben sind Ethanol und Glycerin zum Einsatz gekommen: Beide Medien dienen hinsichtlich ihrer z.T. stark von Wasser abweichenden Stoffwerte (vgl. Tabelle 2.1) als „Extrembeispiele“ zur Verifikation der Berechnung. In der Realität kommen v.a. gemischte Formen vor, i.d.R. mit eher geringem Alkoholgehalt im Bezug auf den Wasseranteil. Bei allen drei Fluiden handelt es sich um Reinstoffe, weshalb sich ihre Stoffeigenschaften nicht abhängig von eventuellen Schwankungen im Mischungsverhältnis ändern. Dies führt zu einer höheren Reproduzierbarkeit der durchgeführten Untersuchungen. Weiterhin ist an dieser Stelle zu erwähnen, dass im Rahmen dieser Arbeit immer von ideal reinen Fluiden ausgegangen wird, d.h. es wird angenommen, dass keine Gase oder andere Fremdstoffe im Fluid gelöst sind.

Die Vermessung der Tropfen ist am Messaufbau nach Haub (vgl. Abschnitt 3.1) durchgeführt worden, da dieser vom grundlegenden Aufbau der Optik am besten für Glaskapillaren geeignet ist. Die verwendeten Glaskapillaren wurden dabei senkrecht im Deckel eines Zentrifugen-Röhrchens verbaut und anschließend senkrecht im Messaufbau eingespannt (vgl. Abbildung 3.1). Die Messungen wurden mit unterschiedlichen Füllhöhen durchgeführt, dabei erfolgten pro Füllhöhe mindestens drei Messungen mit jeweils mindestens acht Tropfen, um eine ausreichende Aussagefähigkeit der durchgeführten Messungen zu gewährleisten. Im Zuge der Messungen ist weiterhin die Temperatur dokumentiert worden, um diese im Rahmen der Auswertung, d.h. bei

der Berechnung mithilfe des hergeleiteten Ansatzes sowie der numerischen Simulation berücksichtigen zu können. Zur Auswertung der Messdaten wurde das Programm Excel eingesetzt. Die numerische Simulation wurde, wie bereits in Abschnitt 2.4 beschrieben, mit dem freien Simulationsprogramm OpenFOAM durchgeführt. Zur Festlegung und Lösung der für die auftretende Zweiphasenströmung notwendigen Differentialgleichungen ist der Solver interFoam eingesetzt worden. Zur Steigerung der Genauigkeit der Simulation erfolgte der Aufbau der Geometrie sowie die Vermaschung, d.h. die räumliche Diskretisierung, zweidimensional mithilfe des OpenFOAM-eigenen Tools blockMesh. Dabei wurde ein 1° breites Stück der rotationssymmetrischen Geometrie modelliert und in ca. 800.000 Zellen unterteilt; hochgerechnet auf das dreidimensionale Modell bedeutet dies die räumliche Diskretisierung mit ca. 290 Mio. Zellen. Als Input-Größe ist der Simulation der Volumenstrom, abgeleitet aus den gemessenen bzw. berechneten Werten an einer bestimmten Füllhöhe, übergeben worden; die Stoffwerte wurden jeweils an die Temperatur der Messung angepasst. Abbildung 4.10 zeigt exemplarisch den Vergleich eines realen, mit dem Messaufbau nach Haub aufgenommenen und eines simulierten Tropfens; ein genauerer Vergleich der Bilder wurde u.a. in [114] vorgestellt.

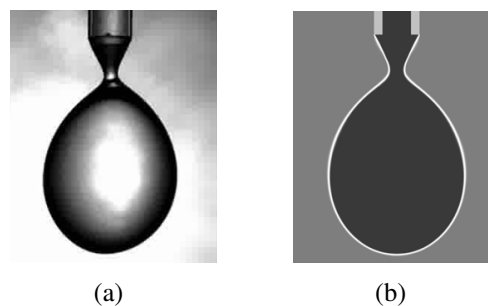


Abbildung 4.10: Veranschaulichung der Simulation eines Tropfens unmittelbar vor dem Tropfenabriss [114]: (a) Tropfen, aufgenommen mit dem Messaufbau nach Haub; (b) Simulation

Grundsätzlich ist zu erwarten, dass die numerische Simulation sehr genaue, d.h. realitätsnahe, Ergebnisse liefert. Ursache dafür ist zum einen die Verwendung der Navier-Stokes-Gleichungen (vgl. Gleichung (2.59)), da diese sowohl Trägheitskräfte mithilfe der lokalen und konvektiven Beschleunigung des Fluids als auch die Größen Druckkraft, Reibung (Viskosität) und Gewichtskraft zur Beeinflussung der Strömung berücksichtigt. Zum anderen ergibt sich die Genauigkeit der numerischen Simulation durch die Modellierung der Tropfengeometrie mithilfe einer zeitlichen und räumlichen Diskretisierung, die es u.a. erlaubt, lokale Unterschiede im Fluid abzubilden. Eine exakte Übereinstimmung mit den gemessenen Werten ist aber auch mithilfe numerischer Simulationen nicht zu erwarten, da diesen zum einen ein konstanter mittlerer Volumenstrom in den Tropfen zugrunde liegt und zum anderen die betrachteten Gleichungen über ein iteratives Vorgehen gelöst werden; es ist also immer ein Kompromiss zwischen der gewünschten Genauigkeit der Ergebnisse und einem vertretbaren Rechenaufwand einzugehen.

Die Ergebnisse (Tropfenbildungszeit, Tropfenvolumen) sowie Trendlinien zur Visualisierung der Entwicklung der Werte von Rechnung (schwarze Quadrate, durchgezogene Linie), Messung (dunkelgraue Rauten, gestrichelte Linie) und, falls vorhanden, Simulation (hellgraue Dreiecke, gepunktete Linie) werden im folgenden Abschnitt sowie in Anhang A.1, aufgetragen über der Füllhöhe über der Kapillarunterseite, vorgestellt und kommentiert. Die im Rahmen der Messergebnisse angegebenen Fehlerbalken stellen die Standardabweichung der Messung von Tropfenbildungszeit bzw. Tropfenvolumen dar. Sind keine Fehlerbalken angegeben, ist die Standardabweichung zu klein, um mit der gewählten Auflösung der Achse dargestellt werden zu können.

4.3.2 Tropfenvolumen und Tropfenbildungszeit (am Bsp. LW-T08)

Zur detaillierten Verifikation der Berechnung mittels des hergeleiteten Ansatzes sollen im Folgenden exemplarisch die Ergebnisse aus Messungen mit entgastem und deionisiertem Wasser am Glaskapillarsystem LW-T08 (Innenradius: $r = 220 \mu\text{m}$, Außenradius: $R = 440 \mu\text{m}$, Länge: $l = 20 \text{ mm}$) vorgestellt werden; die Messungen werden außerdem um Simulationsergebnisse ergänzt. Dieser Vergleich ist in den Abbildungen 4.11 und 4.12 visualisiert.

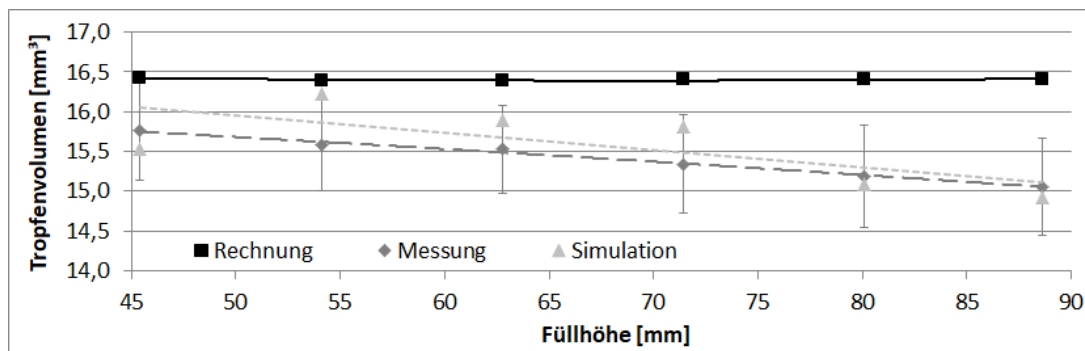


Abbildung 4.11: Tropfenvolumen am Glaskapillarsystem LW-T08

Die Betrachtung der Tropfenvolumina in Abbildung 4.11 zeigt bei einer Standardabweichung von maximal $0,6 \text{ mm}^3$ eine Abweichung zwischen Rechnung und Messung von maximal $\pm 8,2 \%$. Grundsätzlich sind die berechneten Werte dabei größer als die gemessenen und die Abweichung nimmt hin zu größeren Füllhöhen zu; die Ursachen für diese Abweichungen werden in der anschließenden Fehlerabschätzung (vgl. Abschnitt 4.3.3) vorgestellt und quantifiziert. Die Simulationsergebnisse weisen im Vergleich zur Berechnung eine Abweichung von maximal $\pm 9,1 \%$ und im Vergleich zu den Messwerten eine Abweichung von maximal $\pm 4,2 \%$ auf und stimmen somit besser mit den Messwerten überein, was sich mithilfe der Genauigkeit der numerischen Berechnung aufgrund der Verwendung der vollständigen Navier-Stokes-Gleichungen (vgl. Gleichung (2.59)) sowie der zeitlichen und räumlichen Diskretisierung begründen lässt.

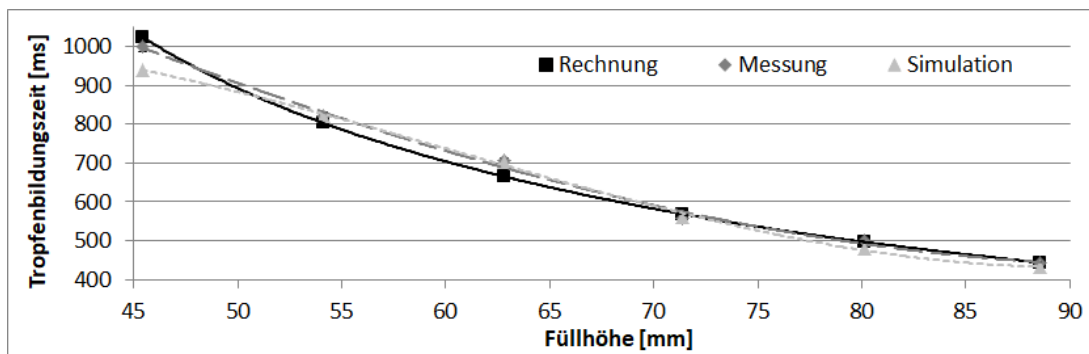


Abbildung 4.12: Tropfenbildungszeit am Glaskapillarsystem LW-T08

Abbildung 4.12 zeigt ebenfalls eine gute Übereinstimmung von Rechnung, Messung und numerischer Simulation hinsichtlich der Tropfenbildungszeit. Die maximalen Abweichungen betragen dabei $\pm 6,1 \%$ zwischen Rechnung und Messung bzw. $\pm 8,2 \%$ zwischen Rechnung und Simulation; die Standardabweichung der Messung beträgt maximal 13,6 ms. Weiterhin ist zu erkennen, dass die Ergebnisse der numerischen Simulationen aufgrund der verwendeten Gleichungen erneut tendenziell, aber nicht zwingend, besser mit den gemessenen Werten übereinstimmen; dies unterstreicht die Genauigkeit der in Abschnitt 4.2 hergeleiteten Berechnung.

4.3.3 Fehlerabschätzung (am Bsp. LW-T08)

Die Bewertung des Einflusses einzelner Annahmen auf den Gesamtfehler erfolgt, wie die Vorstellung der Messergebnisse im vorangegangenen Abschnitt, exemplarisch mithilfe der Messungen am Glaskapillarsystem LW-T08 (Innenradius: $r = 220 \mu\text{m}$, Außenradius: $R = 440 \mu\text{m}$, Länge: $l = 20 \text{ mm}$); dabei werden der Messpunkt bei minimaler Füllhöhe ($H = 45,4 \text{ mm}$; $T = 24,6 \text{ }^\circ\text{C}$) bzw. minimalem Volumenstrom und der Messpunkt bei maximaler Füllhöhe ($H = 88,6 \text{ mm}$; $T = 25,4 \text{ }^\circ\text{C}$) bzw. maximalem Volumenstrom detaillierter betrachtet. Dazu werden im Folgenden zunächst die einzelnen Vereinfachungen aufgegriffen und die Ansätze zur Quantifizierung der auftretenden Ungenauigkeiten vorgestellt. Im Rahmen dieser Untersuchungen werden grundsätzlich immer die maximal möglichen Fehler abgeschätzt, d.h. insgesamt wird ein Bereich erarbeitet, innerhalb dessen der tatsächliche Wert liegt. Anschließend erfolgt der Vergleich der Fehler mit den entsprechenden Messwerten und damit die Bewertung des hergeleiteten Berechnungsansatzes.

Die erste zu berücksichtigende Abweichung ergibt sich aus der Vernachlässigung der Kraftwirkung des in den Tropfen einströmenden Fluids F_v aufgrund der quasi-statischen Tropfenberechnung mithilfe von Gleichung (4.8). Die Abschätzung des Fehlers erfolgt durch Berücksichtigung der volumenstromabhängigen Komponenten aus Abschnitt 4.1.1. Grundsätzlich ergibt

sich dabei, dass die Vernachlässigung von F_v aufgrund der Wirkrichtung entlang der negativen z-Achse (vgl. Abbildung 4.2 bzw. Gleichung (4.7)) zu größeren Tropfen führt. Diese Erhöhung des berechneten Volumens, d.h. der Fehler, der durch die Vernachlässigung gemacht wird, errechnet sich angelehnt an Gleichung (4.7) (bzw. (2.38) und (4.6)):

$$\Delta V_{F_v} = \frac{F_v}{\rho g} = \frac{\dot{V}^2}{\pi g r^2} \quad (4.28)$$

Die Gleichungen (4.6) und (4.28) zeigen weiterhin, dass eine Zunahme des Volumenstroms $\dot{V}$ zu größeren Werten für die Kraft F_v und somit zu einer stärkeren Ausprägung des Fehlers führt. Damit ergibt sich z.B. für das Tropfsystem LW-T08 der maximale Fehler bei maximaler Füllhöhe ($H = 88,6$ mm); die Abschätzung des Fehlers am Ende des Tropfenwachstums (Zustand 2: $V_{Tr} = 16,41$ mm³, $\dot{V} = 37,01$ $\frac{\text{mm}^3}{\text{s}}$) mithilfe von Gleichung (4.28) liefert $\Delta V_{F_v} = 1,04$ mm³ bzw. 6,3 %.

Neben der Erhöhung des Tropfenvolumens führt die Vernachlässigung der Kraft F_v zu einer Erhöhung der Tropfenbildungszeit in vergleichbarem Umfang. Ursache dafür ist, dass aus einem in der Rechnung konstanten Volumenstrom und einem sich ändernden Volumen auch eine Änderung der Tropfenbildungszeit resultiert.

Aufgrund der quasi-statischen Betrachtung der einzelnen Zustände der Tropfenbildung werden weiterhin die zeitabhängigen Induktivitäten und Kapazitäten im Rahmen der Volumenstromberechnung (vgl. Abschnitt 4.1.2) vernachlässigt. Da sich in der Kapillare keine fluidischen Speicherelemente (z.B. Blasen) befinden, entsteht durch die Vernachlässigung der Kapazitäten kein zusätzlicher Fehler.

Die Vernachlässigung der Induktivitäten L_{fl} dagegen führt grundsätzlich zu einer Reduktion des Druckverlusts über die Kapillare und damit zu einer Erhöhung des Volumenstroms $\dot{V}$ sowie einer Reduktion der Tropfenbildungszeit t_{Tr} . Die Berechnung des Druckverlusts über eine Induktivität erfolgt für zylindrische Kapillaren mithilfe der folgenden Gleichung [44]:

$$\Delta p_L = L_{fl} \frac{d\dot{m}}{dt} = \frac{l}{A_r} \frac{d\dot{m}}{dt} = \frac{l}{\pi r^2} \rho \frac{d\dot{V}}{dt} \quad (4.29)$$

Die Abschätzung von $\frac{d\dot{V}}{dt}$ erfolgt im Rahmen dieser Arbeit unter Berücksichtigung der mittleren Volumenstromänderung:

$$\frac{d\dot{V}}{dt} = \frac{\Delta \dot{V}}{\Delta t} = \frac{\dot{V}_{\text{Zustand 2}} - \dot{V}_{\text{Zustand 0}}}{t_{Tr}} \quad (4.30)$$

Die Abschätzung des Fehlers ergibt sich aus dem Vergleich mit dem Druckverlust über den fluidischen Widerstand R_{fl} (vgl. Gleichung (2.4) und (2.5)); für das Tropfsystem LW-T08 ergibt

sich somit z.B. ein maximaler Volumenstromfehler von 1,31 % ($H = 45,4$ mm, $\dot{V}_{\text{Zustand 0}} = 6,14 \frac{\text{mm}^3}{\text{s}}$, $\dot{V}_{\text{Zustand 2}} = 18,94 \frac{\text{mm}^3}{\text{s}}$, $t_{\text{Tr}} = 1024,05$ ms, R_{fl} mit $\dot{V}_{\text{Zustand 0}}$)

Das Tropfenvolumen wird von der Vernachlässigung der Induktivitäten nicht beeinflusst.

Neben der Vernachlässigung der Induktivitäten führt auch die Berechnung der Zeit zwischen zwei quasi-statischen Zuständen (i-1, i) entsprechend Gleichung (4.22) bzw. Abbildung 4.6 zu Abweichungen bei der Berechnung der Tropfenbildungszeit t_{Tr} . Grund dafür ist die Verwendung des Volumenstroms $\dot{V}_i$ in Gleichung (4.22) in Kombination mit $\dot{V}_{i-1} \neq \dot{V}_i$. Grundsätzlich ist der Fehler umso kleiner, je näher die einzelnen Zustände (i-1, i) beieinander liegen, d.h. je höher die Auflösung der Berechnung des Tropfenwachstums ist; die im Rahmen dieser Arbeit verwendeten Auflösungen führen zu Fehlern ≤ 1 %. Die Abschätzung des maximalen, während der Tropfenberechnung auftretenden Fehlers erfolgt durch Verwendung von $\dot{V}_{i-1}$ in Gleichung (4.22) und Vergleich der Ergebnisse für die Tropfenbildungszeit; für das Tropfsystem LW-T08 liefert dieser Vergleich eine maximale Abweichung der Tropfenbildungszeit von $\pm 0,06$ % ($H = 45,4$ mm).

Das berechnete Tropfenvolumen wird nicht beeinflusst.

Ebenfalls von der Auflösung der Berechnung des Tropfenwachstums abhängig ist der Fehler, der sich aufgrund von Abweichungen des berechneten Winkels γ im Zustand **2** von den erwarteten 0° ergibt (vgl. Abbildung 4.1); im Rahmen dieser Arbeit sind die Auflösungen so gewählt, dass sich Fehler ≤ 1 % ergeben. $\gamma \neq 0^\circ$ führt zu einer Reduktion der haltenden Kraft $F_{\text{sf,z}}$ (vgl. Gleichung (2.38)) und damit entsprechend Gleichung (4.8) zu einer Reduktion des berechneten Tropfenvolumens V_{Tr} . Die Abschätzung der auftretenden Abweichungen folgt direkt aus den Ergebnissen des berechneten Winkels γ im Zustand **2** und dem Vergleich von $\cos(\gamma)$ zum $\cos(0^\circ) = 1$; für das Tropfsystem LW-T08 ($H = 45,4$ mm) ergibt sich ein maximaler Winkel von $1,17^\circ$ und somit eine maximale Abweichung des Tropfenvolumens von 0,02 %.

Neben der Reduktion des Tropfenvolumens durch $\gamma \neq 0^\circ$ anstatt $\gamma = 0^\circ$ führt die Abweichung des Winkels γ analog zur Fehlerabschätzung aufgrund der Vernachlässigung der Kraftwirkung des in den Tropfen einströmenden Fluids F_v zu einer Reduktion der Tropfenbildungszeit.

Eine weitere zu berücksichtigende Annahme ergibt sich aus der Abschätzung des Volumenstroms während der Einschnürungs- bzw. Abrissphase gemäß Gleichung (4.23). Zur Beurteilung der Abweichungen aufgrund dieser Annahme ist zum einen der Anteil der Einschnürung an der gesamten Tropfenbildungszeit t_{Tr} und zum anderen die Änderung des Volumenstroms während der Einschnürung relevant. Der Anteil der Einschnürung an der Tropfenbildungszeit lässt sich direkt aus der Tropfenberechnung ermitteln und beläuft sich z.B. am Glaskapillarsystem LW-T08 auf maximal 1,2 % ($H = 88,6$ mm, $t_{\text{EA}} = 5,27$ ms, $t_{\text{Tr}} = 443,34$ ms). Die

Änderung (Zunahme) des Volumenstroms ergibt sich aus den durchgeführten Messungen und beträgt ca. 15,0 %; eine individuelle Ermittlung des Wertes für jede einzelne Messung ist insbesondere bei sehr kurzen Tropfenbildungszeiten aufgrund der begrenzten Zeitauflösung der verwendeten Messaufbauten nicht möglich, weshalb der angegebene Wert an dieser Stelle zur Beurteilung aller Messungen herangezogen wird. Die Abweichung der Einschnürungszeit t_{EA} ergibt sich mithilfe von Gleichung (4.24) zu 13,0 % ($\frac{1}{1,15} = 0,870 \rightarrow 13,0 \%$). Der Fehler im Rahmen der Berechnung der Tropfenbildungszeit t_{Tr} ergibt sich daraus durch Multiplikation des Anteils der Einschnürung mit der Abweichung der Einschnürungszeit und beläuft sich für das Glaskapillarsystem LW-T08 z.B. auf maximal 0,2 % ($H = 88,6 \text{ mm}$).

Das berechnete Tropfenvolumen wird nicht beeinflusst.

Neben der Abschätzung des Volumenstroms wird in der Einschnürungs- bzw. Abrissphase angenommen, dass keine weitere Flüssigkeit in den Tropfen einströmt (vgl. Abschnitt 4.2.2). Die Abschätzung des damit gemachten Fehlers erfolgt angelehnt an Rao et al. [63] (vgl. Abschnitt 2.2.2) und folgt der Grundidee, dass solange Flüssigkeit in den Tropfen einströmen kann, bis dessen Geschwindigkeit größer ist als die Wachstumsgeschwindigkeit des verbleibenden, halbkugelförmigen Tropfens. Grundsätzlich ergibt sich dabei, dass die Vernachlässigung der Einströmung zu kleineren Tropfenbildungszeiten und Tropfenvolumina führt.

Zur Abschätzung der während der Einschnürung zunehmenden Tropfenbildungszeit wird, angelehnt an [63], ausgehend von den am abreißen Tropfen angreifenden Kräften (vgl. Gleichung (4.1)) die Bewegungsgleichung

$$\rho V_{Tr} \frac{dv}{dt} = \rho g \dot{V}_{EA} t \quad (4.31)$$

für den Tropfen aufgestellt; die linke Seite ist dabei der Beschleunigungsterm unter Annahme eines nahezu konstanten Tropfenvolumens V_{Tr} (vgl. [63]) und die rechte Seite die beschleunigende Gewichtskraft aufgrund der Volumenzunahme während der Einschnürung. Die Geschwindigkeit des Tropfens ergibt sich durch Integration von Gleichung (4.31). Die Zeit

$$t = \sqrt{\frac{V_{Tr,TW}}{g \pi R^2}}, \quad (4.32)$$

während der noch Flüssigkeit in den Tropfen strömt, folgt durch Gleichsetzen mit der Wachstumsgeschwindigkeit des verbleibenden, halbkugelförmigen Tropfens; diese entspricht nach Rao et al. [63] der halben Einströmgeschwindigkeit in den Tropfen, bezogen auf den Tropfen- bzw. Kapillarradius R :

$$v = 0,5 \frac{\dot{V}_{EA}}{\pi R^2} \quad (4.33)$$

Für das Beispiel des Glaskapillarsystems LW-T08 ergibt sich die maximale Abweichung bei minimaler Tropfenbildungszeit $t_{Tr} = 443,34 \text{ ms}$ ($H = 88,6 \text{ mm}$, $V_{Tr,TW} = 16,41 \text{ mm}^3$, $\dot{V}_{EA} = 39,45 \frac{\text{mm}^3}{\text{s}}$). Dabei beträgt die Reduktion der Einschnürungszeit durch Vernachlässigung des weiteren Tropfenwachstums gemäß Gleichung (4.32) $52,44 \text{ ms}$ bzw. $11,8 \%$. Aufgrund des in der Rechnung konstanten Volumenstroms ergibt sich für das Tropfenvolumen ebenfalls eine maximale Abweichung von $11,8 \%$.

Der letzte zu berücksichtigende Fehler ergibt sich aus der Temperaturabhängigkeit der fluidischen Stoffgrößen (vgl. Abschnitt 2.1.1). Wie in Abschnitt 4.3.1 beschrieben, wurde im Rahmen der Messungen die Temperatur dokumentiert, um diese im Rahmen der Auswertung, d.h. bei der Berechnung mithilfe des hergeleiteten Ansatzes sowie der numerischen Simulation berücksichtigen zu können. Die Messung der Temperatur erfolgte dabei mit einer Genauigkeit von $\pm 0,2 \text{ K}$. Die daraus resultierenden Abweichungen lassen sich durch Variation der Temperatur bzw. Stoffgrößen im Berechnungsansatz und Vergleich mit den berechneten Werten ermitteln. Für das Beispiel des Tropfsystems LW-T08 belaufen sich diese Abweichungen auf maximal $\pm 0,3 \%$ für das Tropfenvolumen und $\pm 0,7 \%$ für die Tropfenbildungszeit ($H = 88,6 \text{ mm}$).

Die Abbildungen 4.13 und 4.14 für das Tropfenvolumen und die Tropfenbildungszeit zeigen die Ergebnisse der oben beschriebenen und am Beispiel LW-T08 abgeschätzten Abweichungen der einzelnen Vereinfachungen. Zur Einordnung der Fehler ist dabei für jeden betrachteten Messpunkt zunächst die Mess-Toleranz, bestehend aus der Standardabweichung der Messung (in Abbildung 4.13 und 4.14 kurz „Std.Abw.“) sowie der Messgenauigkeit des Messaufbaus nach Haub entsprechend Abschnitt 3.4, als Referenz angegeben. Weiterhin sind für die betrachteten Füllhöhen der Fehler durch die Vernachlässigung der Kraftwirkung des in den Tropfen einströmenden Fluids F_v („Berücksichtigung F_v “), der Fehler durch die Vernachlässigung des Tropfenwachstums in der Einschnürungs- bzw. Abriss-Phase („Wachstum Phase 3“) sowie sonstige Fehler aufgetragen. Unter „Sonstige Fehler“ werden zur übersichtlicheren Darstellung mehrere kleine Fehler zusammengefasst; die genaue Zusammensetzung wird im Folgenden für Tropfenvolumen und Tropfenbildungszeit separat vorgestellt. „Rechnung“ und „Messung“ repräsentieren analog zu Abschnitt 4.3.2 den mithilfe des hergeleiteten Ansatzes (vgl. Abschnitt 4.2) berechneten Wert und den Mittelwert der durchgeführten Messungen.

Abbildung 4.13 zeigt die Auswirkung der einzelnen Vereinfachungen auf das berechnete Tropfenvolumen im Vergleich zu den Mess-Toleranzen. Dabei ist an dieser Stelle zu beachten, dass neben der Standardabweichung der Messung („Std.Abw.“) und der Messgenauigkeit auch mögliche Fehler aufgrund des einachsigen optischen Aufbaus des Messaufbaus nach Haub und einem damit möglichen Verkippen der Kapillare entlang der optischen Achse zu berücksichtigen

sind (vgl. Abschnitt 3.1). Diese Abweichungen werden mit „Kapillarausrichtung“ bezeichnet und belaufen sich auf maximal $\pm 6\%$.

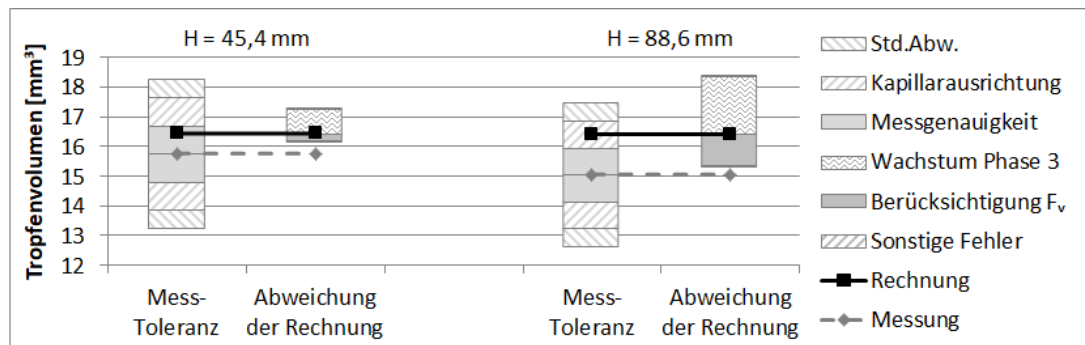


Abbildung 4.13: Fehlerabschätzung am Glaskapillarsystem LW-T08 - Tropfenvolumen

Unter „Sonstige Fehler“ werden in Abbildung 4.13 zur übersichtlicheren Darstellung die folgenden Fehler zusammengefasst:

- Abweichung des berechneten Winkels im Zustand **2** von den erwarteten 0°
- Ungenauigkeiten bei der Messung der Fluid-Temperatur

Die maximalen Fehler durch Vernachlässigung der Kraftwirkung des in den Tropfen einströmenden Fluids F_v („Berücksichtigung F_v “) sowie durch die Vernachlässigung des Tropfenwachstums in der Einschnürungs- bzw. Abriss-Phase („Wachstum Phase 3“) stellen in Abbildung 4.13 und somit im Rahmen der Volumenberechnung die größten Abweichungen dar; dabei ist insbesondere die Volumenstromabhängigkeit bzw. die Zunahme der Abweichung bei zunehmendem Volumenstrom zu erkennen.

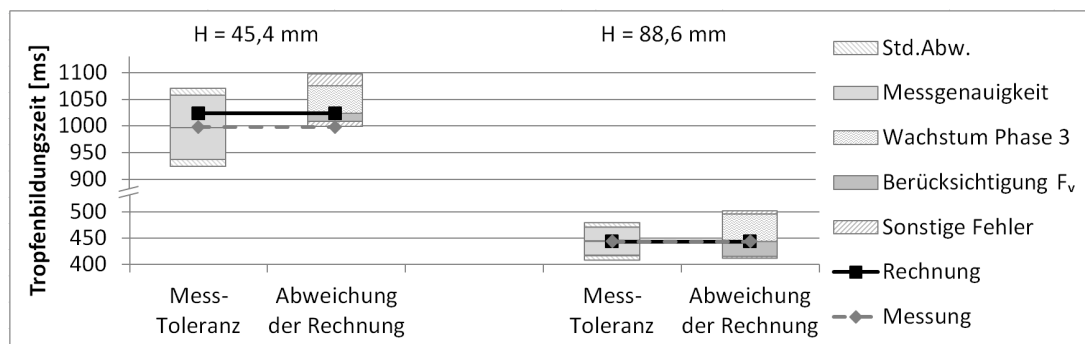


Abbildung 4.14: Fehlerabschätzung am Glaskapillarsystem LW-T08 - Tropfenbildungszeit

Abbildung 4.14 zeigt die Auswirkung der einzelnen Vereinfachungen auf die berechnete Tropfenbildungszeit. Hinsichtlich der Mess-Toleranzen ist an dieser Stelle zu beachten, dass sich eine Verkipfung der Kapillare entlang der optischen Achse lediglich bei der Betrachtung des

Tropfenvolumens, nicht aber bei der Betrachtung der Tropfenbildungszeit, auswirkt und demnach in Abbildung 4.14 nicht berücksichtigt werden muss.

In Abbildung 4.14 sind analog zu Abbildung 4.13 die sonstigen Fehler aufgetragen, allerdings werden diese um die folgenden Fehler, welche sich ausschließlich auf die Berechnung des Volumenstroms auswirken, ergänzt:

- Fehler durch Vernachlässigung der Induktivitäten
- Abweichungen in der Berechnung der Zeit zwischen zwei quasi-statischen Zuständen
- Fehler durch die Abschätzung des Volumenstroms während der Einschnürung

Die Fehler durch Vernachlässigung der Kraftwirkung des in den Tropfen einströmenden Fluids F_v („Berücksichtigung F_v “) sowie durch die Vernachlässigung des Tropfenwachstums in der Einschnürungs- bzw. Abriss-Phase („Wachstum Phase 3“) stellen in Abbildung 4.14 ebenfalls die dominanten Einflüsse dar. Eine genauere Betrachtung zeigt im Rahmen der Fehlerabschätzung aber lediglich in den Balken „Berücksichtigung F_v “ ein volumenstromabhängiges Verhalten. Die Balken „Wachstum Phase 3“ sind entsprechend Gleichung (4.32) unabhängig vom Volumenstrom; die Volumenstromabhängigkeit des Tropfenvolumens (vgl. Abbildung 4.13) ergibt sich aus dem variierenden Volumenstrom aufgrund der unterschiedlichen Füllhöhen H .

Alles in allem betrachtet ergibt sich aus der Fehlerabschätzung in den Abbildungen 4.13 und 4.14 eine gute Übereinstimmung der berechneten und gemessenen Werte. Über die vorgestellten Ergebnisse hinaus sind im Rahmen dieser Arbeit weitere Untersuchungen zur Verifikation des in Abschnitt 4.2 vorgestellten Ansatzes durchgeführt worden; Ergebnisse dieser Untersuchungen werden im Folgenden zusammengefasst.

4.3.4 Ergebnisse weiterer Untersuchungen

Neben der in den vorangegangenen beiden Abschnitten vorgestellten Messreihe sind im Rahmen dieser Arbeit, wie zu Beginn des Abschnitts 4.3 bereits erwähnt, noch weitere Untersuchungen an unterschiedlichen Kapillaren und mit unterschiedlichen Fluiden (Wasser, Ethanol, Glycerin) durchgeführt worden. Grafiken zu den Ergebnissen dieser Untersuchungen sind in Anhang A.1 entsprechend den Schaubildern in den vorangegangenen Abschnitten aufbereitet. Im Folgenden sollen die Ergebnisse kurz zusammengefasst werden.

Weitere Messungen mit Wasser und längeren Kapillaren (vgl. Anhang A.1.1) liefern grundsätzlich zu Abschnitt 4.3.2 und 4.3.3 vergleichbare Ergebnisse.

Messungen mit Ethanol (vgl. Anhang A.1.2) dienen der Überprüfung des Berechnungsansatzes hinsichtlich der Verwendbarkeit bei geringen Oberflächenspannungen (vgl. Tabelle 2.1). Die Ergebnisse zeigen, dass die Tropfen aufgrund einer geringeren Oberflächenspannung und der damit verbundenen geringeren Haltekraft $F_{sf,z}$ (vgl. Gleichung (2.38)) an der Kapillare ein geringeres Abriss-Volumen ausbilden. Weiterhin zeigt sich eine Abweichung der Tropfenbildungszeiten um bis zu 13,5 % hin zu kleineren berechneten Werten. Ursache dafür ist das im Rahmen der Messreihe aufgetretene „Hochziehen“ von Ethanol an der Kapillaraußenwand aufgrund eines geringen Kontaktwinkels. In der Regel läuft dieses „Hochziehen“ nicht symmetrisch zur Rotationsachse der Kapillare ab (vgl. Abbildung 4.15), was zu einer Vergrößerung der Berührungslinie zwischen Flüssigkeit und Kapillare und somit zu einer temporären Zunahme der haltenden Kraft $F_{sf,z}$ aufgrund der Oberflächenspannung, einem späteren Ablösen des Tropfens sowie einer (leichten) Erhöhung des Tropfenvolumens führt. Weiterhin reduziert sich durch das „Hochziehen“ die Tropfenhöhe h_{Tr} , was zu einer Reduktion des Volumenstroms in den Tropfen und somit ebenfalls zu einem Anstieg der Tropfenbildungszeit führt. Da es sich bei diesem Effekt jedoch um einen Sonderfall handelt, der im Rahmen der Analyse von Senkrechttropfern aus geometrischen Gründen nicht auftritt, wurde im Rahmen dieser Arbeit aus Zeitgründen keine detailliertere Untersuchung des Effekts vorgenommen.

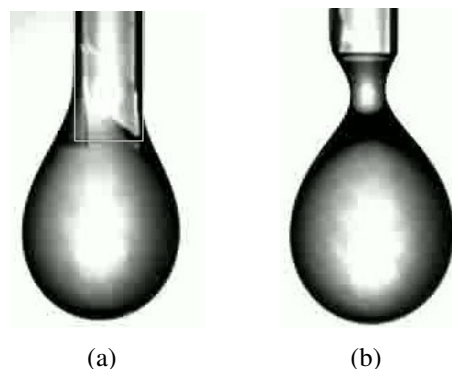


Abbildung 4.15: Hochziehen und Einschnürung am Glaskapillarsystem Eth-T07: (a) Asymmetrisches Hochziehen; (b) Einschnürung des selben Tropfens

Messungen mit Glycerin (vgl. Anhang A.1.3) dienen der Überprüfung des Berechnungsansatzes hinsichtlich der Verwendbarkeit bei Fluiden mit erhöhter Viskosität (vgl. Tabelle 2.1). Die Ergebnisse zeigen, dass es bei der Verwendung von Glycerin, wie entsprechend dem Gesetz von Hagen-Poiseuille (vgl. Gleichung (2.3)) erwartet, zu einer deutlichen Erhöhung der Tropfenbildungszeit kommt; die Ergebnisse der Messreihe bestätigen mit maximalen Abweichungen zwischen Rechnung und Messung von $\pm 2,4$ % für das Tropfenvolumen und $\pm 7,7$ % für die Tropfenbildungszeit aber grundsätzlich die Anwendbarkeit des vorgestellten Berechnungsansatzes unter den genannten Rahmenbedingungen.

Alles in allem bestätigen die vorgestellten Mess- und Simulationsergebnisse die Berechnung von Tropfenvolumen und Tropfenbildungszeit mithilfe des in Abschnitt 4.2 vorgestellten Berechnungsansatzes und qualifizieren diesen somit für eine weitere Verwendung im Rahmen der Berechnung von Senkrechttropfern.

4.4 Einflussgrößen zur Variation der Tropfenbildung

Neben der Berechnung von Tropfenbildungszeit t_{Tr} , Tropfenvolumen V_{Tr} und mittlerem Volumenstrom $\dot{V}_{Tr}$ für einen bestimmten Anwendungsfall erlaubt der in Abschnitt 4.2 vorgestellte Ansatz auch die Untersuchung der Einflüsse der Geometrie des Tropfsystems sowie der Stoffgrößen des tropfenden Fluids auf das Tropfverhalten. Untersuchungen dieser Art sind v.a. für die zielorientierte Auslegung von Tropfsystemen relevant (vgl. Abschnitt 5.5.2), liefern aber auch an dieser Stelle bereits wertvolle Erkenntnisse zum besseren Verständnis von Tropfvorgängen:

- Der Innenradius r und die Länge l der Kapillare sowie die Viskosität η des Fluids haben kaum Einfluss auf das Volumen des Tropfens, insbesondere r und η beeinflussen aber stark den Volumenstrom und somit die Tropfenbildungszeit. Dabei führt eine Reduktion des Radius r und eine Zunahme der Länge l sowie der Viskosität η entsprechend dem Gesetz von Hagen-Poiseuille (vgl. Gleichung (2.3)) zu einer Reduktion des Volumenstroms.
- Die Zunahme des Kapillaraußenradius R , von dem sich der Tropfen ablöst, führt zu einer Zunahme des Tropfenvolumens bei gleichzeitiger Reduktion des maximalen Winkels γ zwischen Tropfen und Kapillare, d.h. die Auswölbung des Tropfens über die Kapillarbrenite hinaus nimmt ab. Weiterhin nimmt die Tropfenbildungszeit aufgrund der zusätzlich benötigten Flüssigkeit zu.
- Die Zunahme der Oberflächenspannung σ führt ebenfalls zu einer Zunahme des Tropfenvolumens bei gleichzeitiger Erhöhung der Tropfenbildungszeit sowie zu einer leichten Zunahme des maximalen Winkels γ . Ursache dafür ist der Zusammenhang zwischen der haltenden Kraft $F_{sf,z}$ und der Oberflächenspannung σ entsprechend Gleichung (2.38).
- Eine Zunahme der Dichte ρ führt zu einer Reduktion von Tropfenvolumen und Tropfenbildungszeit. Hauptursache dafür ist die damit verbundene Zunahme der Gewichtskraft F_g (vgl. Gleichung (2.40)).

4.5 Zusammenfassung

Im Rahmen des ersten Teils dieses Kapitels sind basierend auf den am Tropfen angreifenden Kräften bzw. Impulsänderungen (Gewichtskraft F_g , Kraft aufgrund der Oberflächenspannung $F_{sf,z}$, Druckkraft F_p , Impulsänderung aufgrund des einströmenden Fluids F_v) sowie den im Tropfsystem herrschenden Drücken Gleichungen zur allgemeinen Beschreibung des System-Verhaltens hergeleitet worden.

Im zweiten Abschnitt sind diese Gleichungen gemeinsam mit der Modellierung des Tropfens unter Verwendung der Pendant Drop Methode und der Annahme eines quasi-statischen Verhaltens auf Tropfsysteme mit Glaskapillaren angewendet worden. Damit ergibt sich ein neuer, vergleichsweise einfacher Ansatz zur Berechnung von Tropfenvolumen und Tropfenbildungszeit, d.h. zur Berechnung der für eine Tropfendosierung relevanten Größen. Die Tropfenbildung ist dabei grundsätzlich in die zwei Abschnitte „Tropfenwachstum“ (Entwicklung des Tropfens von einer Halbkugelform hin zur Birnenform) und „Einschnürung und Abriss“ unterteilt.

Im dritten Teil des Kapitels ist der hergeleitete Berechnungsansatz mithilfe von Messungen an unterschiedlichen Kapillaren und Fluiden sowie numerischen Simulationen verifiziert worden. Der exemplarische Vergleich mit einer Messreihe liefert maximale Abweichungen zwischen Rechnung und Messung von $\pm 8,2 \%$ für das Tropfenvolumen und $\pm 6,1 \%$ für die Tropfenbildungszeit. Weiterhin wurden die eben genannten Abweichungen anhand einer Fehlerabschätzung den einzelnen Annahmen bzw. Vereinfachungen, die während der Herleitung des Berechnungsansatzes gemacht worden sind, zugeordnet. Dabei hat sich insbesondere gezeigt, dass die Genauigkeit der Berechnung vom Volumenstrom abhängig ist: Bei größeren Strömen in den Tropfen ergeben sich größere Abweichungen.

Kapitel 5

Berechnung medizinischer Senkrechttropfer

Im vorhergehenden Kapitel sind Tropfsysteme aus Glaskapillaren untersucht und berechnet worden. Diese weisen mit den drei relevanten Größen Innenradius r , Außenradius R und Länge l nur wenige geometrische Einflussfaktoren auf das Tropfverhalten auf. Im Vergleich dazu sind Senkrechttropfer, wie sie bereits in Abschnitt 1.1, insbesondere in Abbildung 1.1 (a), vorgestellt worden sind, deutlich komplexer. Im folgenden sollen daher zunächst die Geometrie und die daraus resultierenden Besonderheiten von Tropfvorgängen dargestellt und erläutert werden. Anschließend wird der Berechnungsansatz aus Abschnitt 4.2 auf Senkrechttropfer übertragen und mithilfe von Messungen und Simulationen verifiziert.

5.1 Geometrie und Material

Grundlegend für das Verständnis eines jeden technischen Systems ist die Betrachtung und das Verständnis des geometrischen Aufbaus. Im Gegensatz zu den im vorangegangenen Kapitel untersuchten, geometrisch einfachen Glaskapillaren weisen Senkrechttropfer eine Vielzahl verschiedener Abmessungen auf. Diese sind im Rahmen der schematischen Darstellung eines solchen Tropfers in Abbildung 5.1 (a) skizziert und werden im Folgenden kurz benannt bzw. erklärt:

- Radien r_1, r_2, r_3, r_4 [m] an verschiedenen Stellen des Tropfkanals
- (kleinster) Luftrohrinnenradius r_L [m] am Blasenauslass
- Radius R [m], von dem sich der Tropfen ablöst; im Folgenden auch Abtropfradius genannt (konstruktiv vorgesehene Kante zwischen r_3 und r_4 , vgl. Abbildung 5.1 (b))

- Länge der Abschnitte des Tropfkanals l_1, l_2, l_3 [m]
- Länge des verengten Luftrohres l_L [m]
- Länge des Tropfaufsatzes L_1 bzw. L_2 [m]

Die wichtigsten Abmessungen der im Rahmen dieser Arbeit eingesetzten Tropfaufsätze sind in Anhang B.1 aufgeführt.

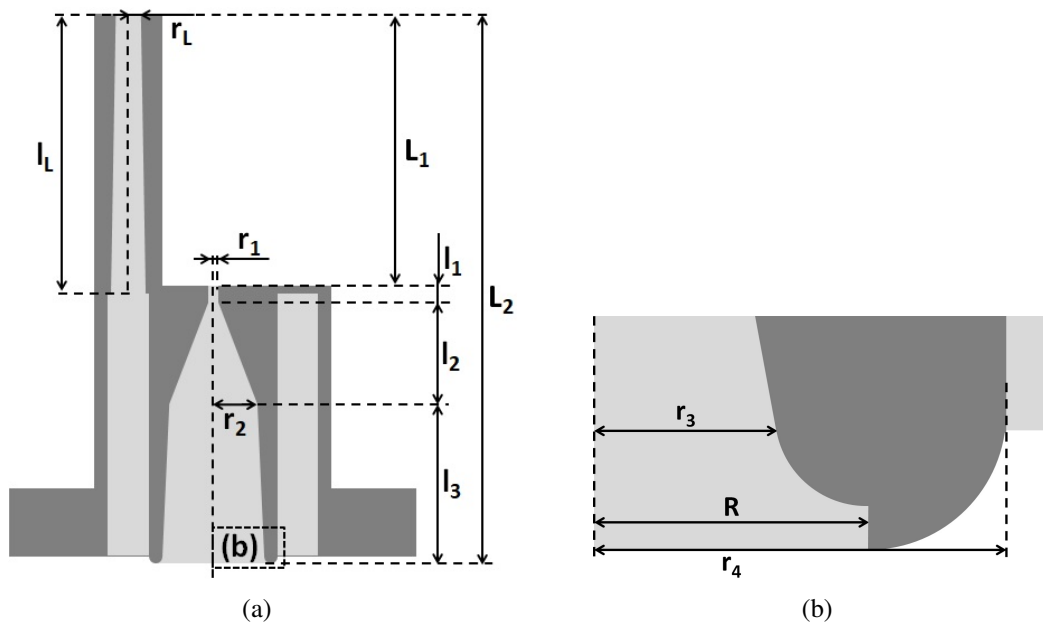


Abbildung 5.1: Geometrie eines Senkrechttropfers angelehnt an den POMPL 0,6 S2: (a) Senkrechttropfer; (b) Abtropfradius R

Grundsätzlich gelten beim Senkrechttropfer dieselben theoretischen Grundlagen bzgl. der Tropfenbildung wie für die bereits vorgestellten Tropfvorgänge. Aufgrund der Belüftung des ansonsten dichten Systems aus Tropfaufsatz und Flasche über ein im Tropfsystem integriertes Luftrohr und der Variation des Durchmessers des Tropfkanals liegt allerdings eine deutlich komplexere Geometrie des Tropfaufsatzes vor. Dies führt wiederum zu einem komplexeren Tropfenbildungsverhalten, welches in den folgenden Abschnitten besprochen werden soll.

Tropfendosiersysteme wie der in Abbildung 5.1 (a) skizzierte POMPL 0,6 S2 bestehen entsprechend den Ergebnissen einer Marktrecherche (vgl. Anhang B.2) i.d.R. aus Polyethylen (PE); von manchen Herstellern bzw. Händlern wird dies noch genauer zu Polyethylen geringer Dichte (PE-LD) spezifiziert. Bei PE handelt es sich nach Kaiser [115] um den aktuell wichtigsten Standardkunststoff mit der größten Produktionsmenge. Prinzipiell wären aber auch andere Materialien denkbar, vorausgesetzt das gewählte Material ist hydrophil.

PE ist ein teilkristalliner Thermoplast [115, 116], der durch Polymerisation aus dem Monomer Ethylen gebildet wird (vgl. Abbildung 5.2). Die Eigenschaften ändern sich abhängig von der bei der Polymerisation erzielten Anordnung der Polymere. Man unterscheidet PE mit langgestreckten Ketten, was zu einer besseren Ordnung der Moleküle [117] und damit zu einem höheren Kristallisationsgrad von 60 - 80 % sowie einer Dichte zwischen 0,94 und 0,965 g/cm³ [116] führt. Diese Art wird als Polyethylen hoher Dichte (PE-HD) bezeichnet und in einer mithilfe von Katalysatoren initiierten Niederdruckpolymerisation hergestellt [115]. PE-LD dagegen weist stark verzweigte Polymere und damit größere Hohlräume im Material auf [117]. Dadurch erreicht der Kunststoff insgesamt einen geringeren Kristallisationsgrad von 40 - 50 % und eine Dichte zwischen 0,915 und 0,94 g/cm³. Hergestellt wird PE-LD in einer radikalischen Hochdruckpolymerisation [115].

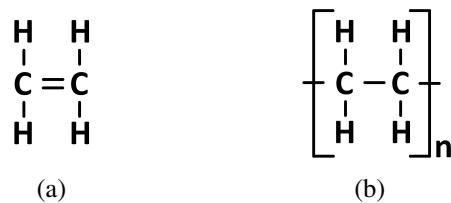


Abbildung 5.2: Struktur von (a) Etylen (Monomer) und (b) Polyethylen (Polymer) [115, 116]

Die Eigenschaften von PE lassen sich mithilfe von Variationen in der Prozessführung sowie durch die Zugabe von Zusatzstoffen in einem weiten Bereich einstellen (detailliertere Informationen können z.B. bei Kaiser [115] nachgelesen werden). Allgemein weist PE eine geringe Dichte, eine hohe Zähigkeit und Dehnbarkeit und eine Temperaturbeständigkeit von -50 °C bis +90 °C auf; chemisch zeichnet es sich durch eine geringe Wasseraufnahme sowie eine hohe Beständigkeit gegen Säuren, Laugen, Salzlösungen, Wasser, Alkohole und Öle aus [116]. Aufgrund seiner vielfältigen Eigenschaften wird PE in vielen Bereichen eingesetzt: PE-HD kommt z.B. bei Kästen, Fässern, Kanistern, Mülltonnen oder Rohren zum Einsatz; PE-LD im Rahmen von Folien und elektrischen Isolationen, aber auch bei Flaschen, Tuben und Transportbehältern [116].

5.2 Funktionsweise von Senkrechtstropfern

5.2.1 Allgemeine Beschreibung des Austropfens und der Blasenbildung

Neben der in Abschnitt 4.1 betrachteten Tropfenbildung ist für die Funktion der Tropfendosiersysteme mit Senkrechtstropfern bei untergetauchtem Luftrohr die Blasenbildung von entscheidender Bedeutung. Es kann näherungsweise davon ausgegangen werden, dass der Luftvolumenstrom in die Flasche hinein dem Flüssigkeitsvolumenstrom aus der Flasche hinaus entspricht.

Zur detaillierten Untersuchung des Blasenbildungsprozesses sind mithilfe einer Kamera mit einer Auflösung von acht Megapixeln (iPhone 6: 1080p HD Videoaufnahme, Zeitlupenvideo bis 60 fps, Autofokus) Videos von austropfenden Tropfflaschen aufgenommen worden: In Abbildung 5.3 ist exemplarisch für diese Analysen die Tropfen- und Blasenbildungszeit beim Austropfen von Wasser aus einer 50 ml - Tropfflasche mit dem Senkrechttropfer 0,6 S2 der Firma POMPL direkt e.K., aufgetragen über dem aktuellen Aufnahmezeitpunkt (Beginn des Tropfvorgangs bei 0 s), dargestellt.

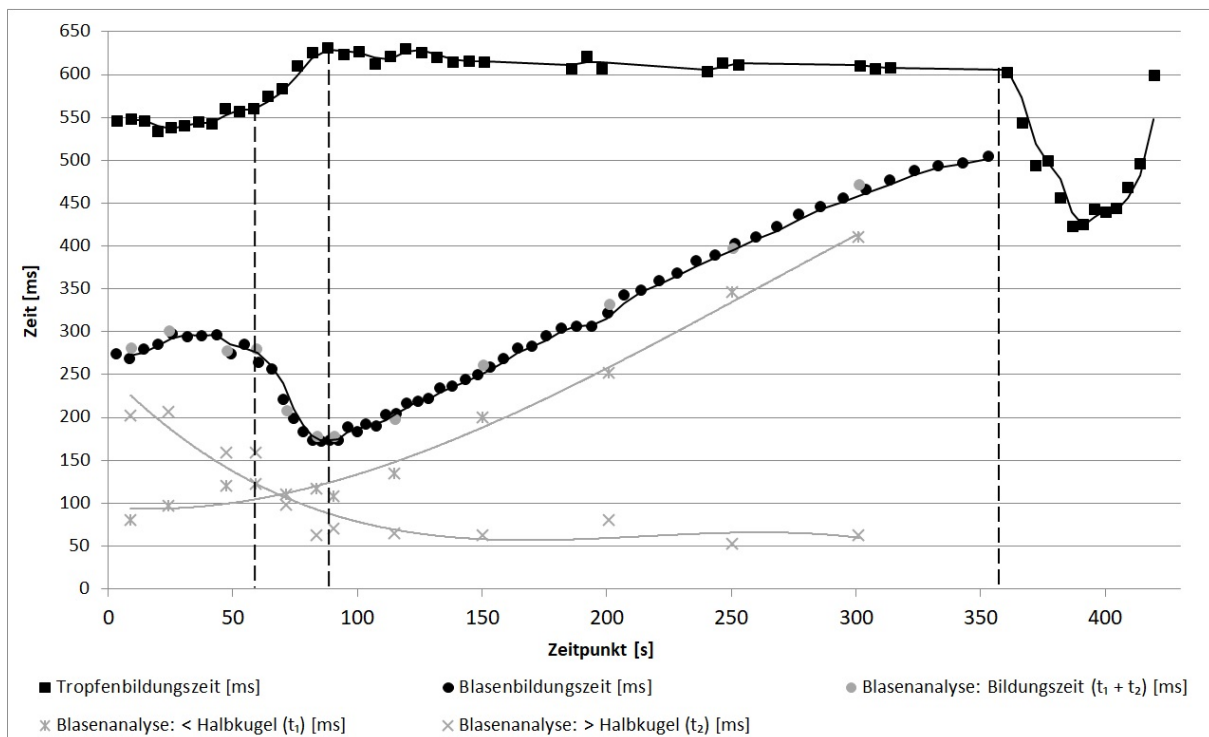


Abbildung 5.3: Experimentell ermittelte Tropfen- und Blasenbildungszeit, aufgetragen über dem Aufnahmezeitpunkt, beim Austropfen einer 50 ml - Flasche durch den Tropfer POMPL 0,6 S2 (basierend auf einem Video von Müller [57])

In Abbildung 5.3 sind zwei Änderungen in den Kurven deutlich erkennbar: Zum einen zwischen ca. 60 s und 85 s Aufnahmezeit sowie ab ca. 360 s Aufnahmezeit. Letztere lässt sich über den Durchbruch des Luftrohres durch die Flüssigkeitsoberfläche erklären und soll später in diesem Abschnitt besprochen werden.

Die Veränderung in den Kurven für Tropfen- und Blasenbildungszeit zwischen ca. 60 s und 85 s Aufnahmezeit lässt sich mit der Änderung des Blasenbildungsmechanismus erklären. Grundsätzlich lässt sich die Blasenbildung dabei in zwei Abschnitte t_1 und t_2 unterteilen, deren Einfluss sich abhängig vom Luftvolumen in der Flasche ändert.

Im Bereich zwischen Aufnahmebeginn und dem Zeitpunkt bei ca. 60 s ist das Luftvolumen in

der Flasche noch so klein, dass das mit der Blase eingebrachte Luftvolumen ausreicht, um den aufgrund der ausströmenden Flüssigkeit auftretenden Unterdruck in der Flasche auszugleichen. Im Zuge dieses Ausströmens ist gemäß dem Gesetz von Boyle-Mariotte $p V = \text{konst.}$ (vgl. Abschnitt 2.1.2) der benötigte Unterdruck an der kritischen Schwelle einer halbkugelförmigen Blase (kleinster Radius, hier r_L , führt gemäß der Young-Laplace-Gleichung zum größten Druck) schnell erreicht, weshalb die Kurve „Blasenanalyse: < Halbkugel (t_1) [ms]“ in Abbildung 5.3 geringere Werte annimmt. Im weiteren Verlauf der Blasenbildung steigt das Blasenvolumen ausgehend von der halbkugelförmigen Blase an, was zu einer Abnahme des Luftvolumens in der Flasche, d.h. einem Ausgleich des Unterdrucks in der Tropfflasche und somit zu einem langsameren Blasenwachstum bis hin zum Abriss führt; dieser Sachverhalt lässt sich in der Kurve „Blasenanalyse: > Halbkugel (t_2) [ms]“ in Abbildung 5.3 erkennen.

Mit zunehmendem Luftvolumen in der Flasche ändert sich dieses Verhalten, was durch den Schnittpunkt der Kurven t_1 und t_2 in Abbildung 5.3 sichtbar wird; ein Ansatz zur mathematischen Abschätzung dieses Schnittpunktes wird in [118] vorgestellt. Das in Form der Blase in die Flasche einströmende Luftvolumen reicht hier nicht mehr aus, um den Unterdruck vollständig auszugleichen und führt daher zu sehr geringen Zeiten t_2 ; kurz gesagt: Nach dem Erreichen der halbkugelförmigen Blase und dem Überwinden dieser Schwelle „bläst“ sich die Blase „schlagartig“ auf und reißt ab. Die Blasenbildungszeit im Gesamten nimmt ab diesem Schnittpunkt zu, da t_1 mit zunehmendem Luftvolumen in der Flasche immer größer wird: Gemäß $p V = \text{konst.}$ muss bei einem größeren Luftvolumen in der Flasche mehr Flüssigkeit aus der Flasche ausströmen (dadurch kommt es zur Vergrößerung des Luftvolumens in der Flasche), um den Unterdruck in der Flasche zu generieren, der erforderlich ist, um die Schwelle der halbkugelförmigen Blase zu überwinden.

Zusammenfassend lässt sich also feststellen, dass die bei der Verwendung von Senkrechttropfern auftretende Änderung im Blasenbildungsverhalten abhängig vom Luftvolumen in der Flasche (und dem darin herrschenden Druck) ist.

Die beschriebenen Veränderungen bei der Blasenbildung führen darüber hinaus zu einer Variation des Massenstroms, wie in Abbildung 5.4 zu sehen ist. Ursache dafür ist, dass der Unterdruck in der Tropfflasche, welcher über die Blasenbildung definiert wird, auch den Ausfluss des tropfenden Fluids hemmt und somit den Massenstrom beeinflusst. Aus den Messungen und Berechnungen an Glaskapillarsystemen ist bekannt, dass eine (moderate) Änderung des Volumenstroms nur geringe Auswirkungen auf die tatsächliche Tropfengröße hat (vgl. Abbildung 4.11). Übernimmt man diese Erkenntnis hier, erhält man durch Division der konstanten Tropfenmasse durch den Massenstrom ($\frac{m_{Tr}}{\dot{m}}$) die Tropfenbildungszeit abhängig vom Blasenbildungsmechanismus und somit den Zusammenhang zwischen Blasenbildung, Massenstrom und Tropfenbildung in den Abbildungen 5.3 und 5.4. Multipliziert man den Massenstrom mit der

Blasenbildungszeit ($\dot{m} t_{\text{Blase}}$) zeigt sich, dass die Blasengröße v.a. nach der Änderung des Blasenbildungsmechanismus zunimmt.

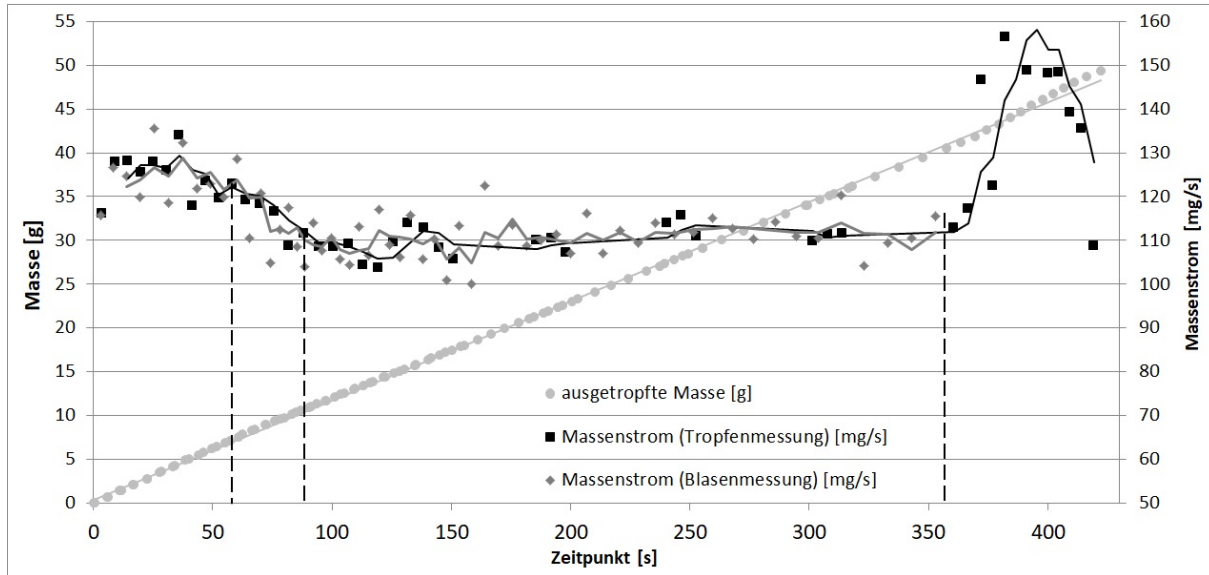


Abbildung 5.4: Ausgetropfte Masse bzw. Massenstrom (experimentell ermittelt), aufgetragen über dem Aufnahmezeitpunkt, des Tropfers POMPL 0,6 S2 in einer 50 ml - Flasche (basierend auf einem Video von Müller [57])

Mithilfe des aus Abbildung 5.4 ablesbaren maximalen Massenstroms von ca. $\dot{m}_{\text{Abb. 5.4}} = 160 \frac{\text{mg}}{\text{s}}$ und dem Nennradius des verwendeten Zentraltropfers POMPL 0,6 S2 $r_{\text{POMPL-0,6-S2}} = 0,3 \text{ mm}$ lässt sich die maximale Reynoldszahl (vgl. Gleichung (2.1)) der Strömung durch den Tropfaufsatz, basierend auf den gezeigten Messergebnissen, abschätzen:

$$Re = \frac{\rho v d}{\eta} = \frac{\rho \dot{V} 2 r}{\eta \pi r^2} = \frac{2 \dot{m}}{\eta \pi r} = \frac{2 \dot{m}_{\text{Abb. 5.4}}}{\eta \pi r_{\text{POMPL-0,6-S2}}} = 381,5 \quad (5.1)$$

Es liegt, wie bisher bereits angenommen, eine laminare Strömung vor.

Die Änderung in der Kurve der Tropfenbildungszeit in Abbildung 5.3 bzw. beim Massenstrom in Abbildung 5.4 ab ca. 360 s Aufnahmezeit lässt sich, wie bereits erwähnt, mit dem Durchbruch des Luftrohres durch die Flüssigkeitsoberfläche erklären. Im regulären Tropfprozess (vor 360 s Aufnahmezeit) herrscht in der Tropfflasche ein Unterdruck im Vergleich zur Umgebung, der zum einen dafür sorgt, dass Blasen in die Flasche gezogen werden und zum anderen den Ausfluss der Flüssigkeit hemmt. Der Zustand kurz vor dem Durchbruch, d.h. wenn sich gerade noch Blasen oberhalb des Luftrohres ausbilden können, ist in Abbildung 5.5 (a) schematisch dargestellt.

Mit dem Durchbruch des Luftrohres durch die Flüssigkeitsoberfläche bzw. mit der Ausbildung einer dauerhaften Verbindung zwischen dem Luftvolumen in der Flasche und der Umgebung

findet ein Druckausgleich statt. Dieser Zustand ist in Abbildung 5.5 (b) dargestellt. Aufgrund des nun ausgeglichenen Drucks bzw. aufgrund des nun fehlenden Unterdrucks in der Flasche, der den Massenstrom hemmt, kommt es zu einer Zunahme des Massenstroms (vgl. Abbildung 5.4) bzw. zu einer Reduktion der Tropfenbildungszeit (vgl. Abbildung 5.3). Da der Durchbruch in der Praxis allerdings nicht ideal verläuft sondern mit der Bildung weniger großer Blasen, die für längere Zeit am Luftrohr angelagert sind, einhergeht, findet keine ideale Änderung des Verhaltens statt, vielmehr ist eine (leichte) Aufweichung des Übergangs in den Abbildungen 5.3 und 5.4 zu erkennen.

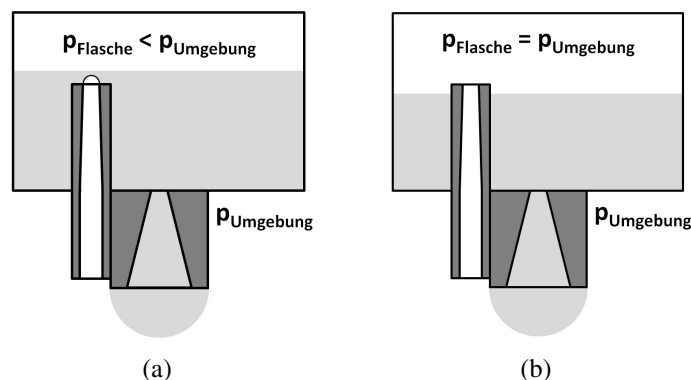


Abbildung 5.5: Durchbruch des Luftrohres: (a) untergetauchtes Luftrohr; (b) offenes Luftrohr

Mit dem Durchbruch des Luftrohres entsteht ein System, welches sich wie die Glaskapillarsysteme in Kapitel 4 verhält. Der antreibende Druck der Strömung der Flüssigkeit durch die Kapillare setzt sich nur noch aus dem hydrostatischen Druck über dem Tropfen und dem Druck im Tropfen zusammen. Da mit weiter fortschreitendem Tropfvorgang die Füllhöhe in der Flasche und somit auch der hydrostatische Druck über dem Tropfen abnimmt, nimmt der Massenstrom ebenfalls wieder ab.

5.2.2 Grundlegende Tropfbedingung für Senkrechttropfer

In Abschnitt 4.1.2 bzw. Abschnitt 5.2.1 ist bereits wiederholt die Bedeutung der Druckverhältnisse in Tropfendosiersystemen im Allgemeinen sowie in medizinischen Tropfflaschen mit Senkrechttropfern erwähnt worden. Bevor ab dem folgenden Abschnitt 5.3 detaillierter auf die Volumenstrom- und Tropfenberechnung eingegangen wird, sollen diese Druckverhältnisse, die grundsätzlich in einem funktionierenden Tropfendosiersystem herrschen müssen, im statischen Grenzfall (d.h. ohne Fluss durch die Kapillare) analysiert werden. Abbildung 5.6 (a) zeigt diesbezüglich die Zusammenhänge zwischen der Geometrie des Senkrechttropfers und den Drücken im System; darauf aufbauend können die Ersatzschaltbilder für Blase und Tropfen in Abbildung 5.6 (b) und (c) abgeleitet werden. Um im Rahmen der Analyse der Drucksituation insbe-

sondere die Extremsituationen zu berücksichtigen, die eine fehlerfreie Funktion einschränken können, werden für Tropfen und Blase jeweils halbkugelförmige Zustände betrachtet, da diese gemäß der Young-Laplace-Gleichung (vgl. Abschnitt 2.1.4) mit dem höchsten Druck im Tropfen bzw. in der Blase verbunden sind und somit Schwellen darstellen, die für eine fehlerfreie Funktion immer wieder überwunden werden müssen.

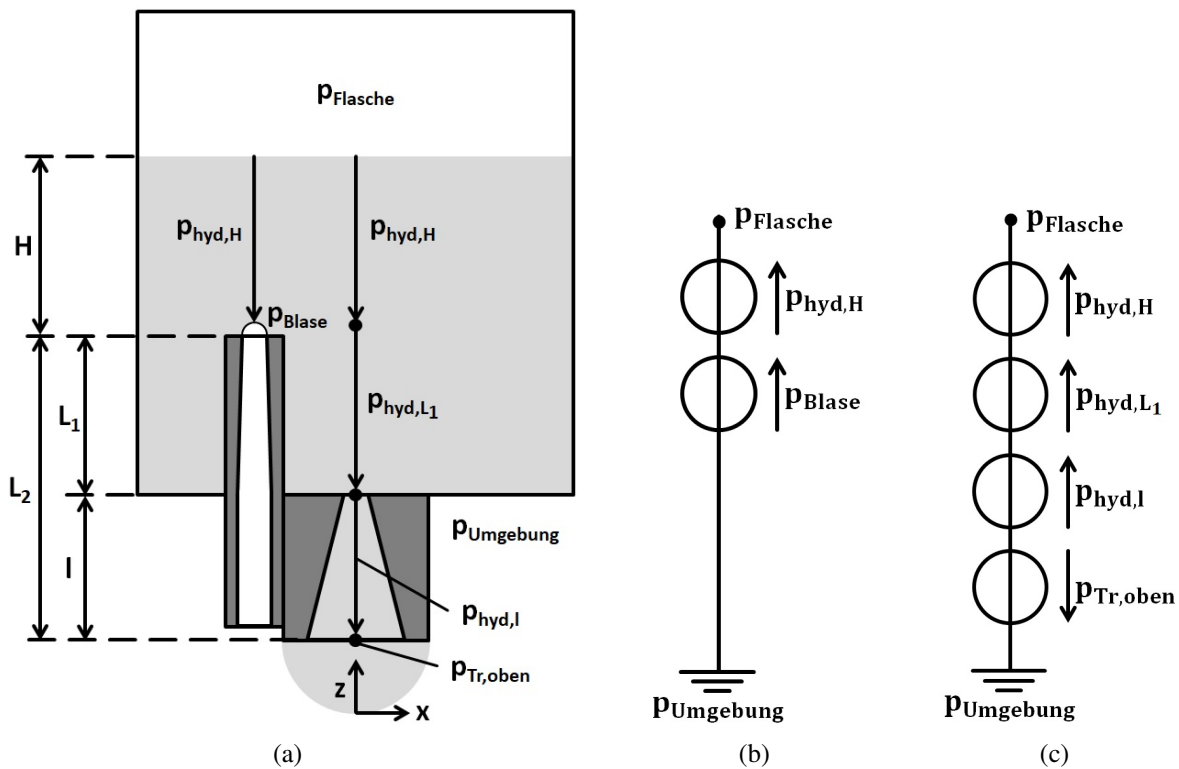


Abbildung 5.6: Abtropfbedingung (statischer Grenzfall, d.h. kein Fluss durch die Kapillare): (a) statische Drucksituation; (b) Drücke an der Blase; (c) Drücke am Tropfen

Das Druckgleichgewicht für eine halbkugelförmige Blase am Auslass des Luftrohres ergibt sich abgeleitet aus dem Ersatzschaltbild für die Blase und die darüber liegende Flüssigkeit in Abbildung 5.6 (b):

$$p_{\text{Flasche}} + p_{\text{hyd,H}} + p_{\text{Blase}} = p_{\text{Umgebung}} \quad (5.2)$$

Dieses Gleichgewicht ist der Grenzfall bei dem eine Blase gerade nicht mehr in die Flasche gelangen kann. Durch Umformung ergibt sich daraus die Bedingung

$$p_{\text{hyd,H}} + p_{\text{Blase}} < p_{\text{Umgebung}} - p_{\text{Flasche}}, \quad (5.3)$$

die erfüllt werden muss, um das Einströmen einer Blase und somit den Tropfvorgang zu ermöglichen: Gleichung (5.3) sagt, dass der Unterdruck $p_{\text{Umgebung}} - p_{\text{Flasche}}$ in der Flasche ausreichen muss, um den hydrostatischen Druck $p_{\text{hyd,H}}$ zu kompensieren, d.h. das Fluid am Auslaufen durch

das Luftrohr zu hindern und gleichzeitig eine Blase mit dem Druck p_{Blase} in das Fluid hinein zu ziehen. Dabei muss die Druckschwelle der halbkugelförmigen Blase (kleinster Radius, daher gemäß der Young-Laplace-Gleichung (2.14) der größte Druck in der Blase) überwunden werden.

Aus dem Ersatzschaltbild in Abbildung 5.6 (c) für den Tropfen und die darüber liegende Flüssigkeit lässt sich weiterhin das Gleichgewicht eines halbkugelförmigen Tropfens an der Unterseite des Tropfkanals ableiten:

$$p_{\text{Flasche}} + p_{\text{hyd,H}} + p_{\text{hyd,L}_1} + p_{\text{hyd,l}} - p_{\text{Tr,oben}} = p_{\text{Umgebung}} \quad (5.4)$$

Im Gegensatz zum Blasengleichgewicht in Gleichung (5.2) ist hier zu beachten, dass der Druck $p_{\text{Tr,oben}}$ im Tropfen zwar ebenfalls von der Oberflächenspannung des Fluids aufgebracht wird, aber entgegen dem hydrostatischen Druck $p_{\text{hyd,H}} + p_{\text{hyd,L}_1} + p_{\text{hyd,l}}$ wirkt; daher ist ein anderes Vorzeichen erforderlich. Durch Umformen folgt aus dem Tropfengleichgewicht die Bedingung

$$p_{\text{hyd,H}} + p_{\text{hyd,L}_1} + p_{\text{hyd,l}} - p_{\text{Tr,oben}} > p_{\text{Umgebung}} - p_{\text{Flasche}}. \quad (5.5)$$

Gleichung (5.5) besagt, dass der hydrostatische Druck $p_{\text{hyd,H}} + p_{\text{hyd,L}_1} + p_{\text{hyd,l}}$ an der Öffnung des Fluidkanals ausreichend groß sein muss, um einen Tropfen gegen den Unterdruck $p_{\text{Umgebung}} - p_{\text{Flasche}}$ in der Flasche auszustoßen und dabei noch den erforderlichen Druck $p_{\text{Tr,oben}}$ zur Überwindung der Schwelle des halbkugelförmigen Tropfens aufbringen zu können.

Der Vergleich von Gleichung (5.3) und Gleichung (5.5) liefert unter Berücksichtigung von

$$p_{\text{hyd,L}_1} + p_{\text{hyd,l}} = \rho g (L_1 + l) = \rho g L_2 = p_{\text{hyd,L}_2}. \quad (5.6)$$

sowie $p_{\text{Flasche}} < p_{\text{Umgebung}}$ und $H \gg r_L$ die Mindestanforderung

$$p_{\text{hyd,L}_1} + p_{\text{hyd,l}} - p_{\text{Tr,oben}} = p_{\text{hyd,L}_2} - p_{\text{Tr,oben}} > p_{\text{Blase}} \quad (5.7)$$

für die Funktion eines Senkrechttropfers mit einem definierten Fluid. Berücksichtigt man die Tatsache, dass die Tropfen- bzw. Blasengröße wiederum vom Tropfen- bzw. Blasenauslass und der Druck $p_{\text{hyd,L}_2}$ von der Länge L_2 des Tropfers sowie der Dichte ρ des tropfenden Fluids abhängt, ergibt sich, dass sich die Frage, ob ein Tropfsystem mit einem Fluid tropft oder nicht, ausschließlich über die Geometrie des Tropfers und das tropfende Medium mit seinen Fluidparametern ρ , σ und η beantworten lässt; die Größe der Flasche spielt theoretisch keine Rolle, da sich der hydrostatische Druck $p_{\text{hyd,H}}$ in erster Näherung herauskürzt.

5.3 Berechnung von Tropfendosiersystemen

Die Berechnung des Tropfenvolumens und der Tropfenbildungszeit erfolgt entsprechend dem in Kapitel 4 für Glaskapillarsysteme hergeleiteten Ansatz und soll daher an dieser Stelle lediglich angepasst werden. Grundsätzlich wird der Tropfen dabei weiterhin als quasi-statisch betrachtet. Die am Tropfen angreifenden Kräfte und die daraus resultierende Impulsgleichung (4.8) gelten unverändert; die Volumenstromberechnung muss aufgrund der geänderten Geometrie am Senkrechttropfer (variierender Durchmesser des Tropfkanals, Luftrohr) ergänzt werden.

5.3.1 Volumenstrom durch den Tropfkanal

Die Berechnung des Volumenstroms durch den Tropfkanal des Senkrechttropfers erfolgt aufbauend auf der Volumenstromberechnung an Glaskapillarsystemen in Gleichung (4.18). Entsprechend dem vorangegangenen Abschnitt wird diese Strömung durch den hydrostatischen Druck entlang der Länge L_2 angetrieben. Weiterhin muss die Blasenbildung berücksichtigt werden: Der erforderliche Druck zur Bildung einer Blase wird ebenfalls vom hydrostatischen Druck p_{hyd,L_2} aufgebracht und führt somit analog zum Druck im Tropfen zu einer Reduktion von p_{hyd,L_2} ; mathematisch wird der Druck in der Blase p_{Blase} zum Druck im Tropfen $p_{\text{Tr,oben}}$ addiert (vgl. Gleichung (5.7)).

Da sich bei Senkrechttropfern der Querschnitt des Tropfkanals über die Länge des Tropfkanals ändert, ist im Vergleich zum Tropfsystem mit Glaskapillare (vgl. Abschnitt 4.1.2) eine abschnittsweise Berechnung des Strömungswiderstands notwendig. Hierzu soll der Einlaufdruckverlust über den Ansatz von Sparrow [50] (vgl. Abschnitt 2.1.3 und 4.1.2) berechnet werden, da dieser eine stufenweise Berechnung der Einlaufdruck-Koeffizienten K in Abhängigkeit der Länge l und des Volumenstroms $\dot{V}$ ermöglicht. Unter Verwendung dieses Ansatzes und Gleichung (2.12) lassen sich ausgehend vom Eingang des Tropfkanals (vgl. Abbildung 5.7) für die Längen l_1 , $l_1 + l_2$ und $l_1 + l_2 + l_3$ $B(\dot{V})$ -Werte berechnen, welche im Folgenden mit B_1 (für l_1), B_2 (für $l_1 + l_2$) und B_3 (für $l_1 + l_2 + l_3$) bezeichnet werden. Daraus ergeben sich mit Gleichung (2.13) für die einzelnen durchströmten Längen die Einlaufdruck-Koeffizienten $K_{B_1}(\dot{V})$, $K_{B_2}(\dot{V})$ und $K_{B_3}(\dot{V})$. Der Einlaufdruck-Koeffizient $K_k(\dot{V})$, der für einen bestimmten Abschnitt l_k des Tropfkanals benötigt wird, ergibt sich nun aus der Differenz der $K_{B_k}(\dot{V})$ -Werte; für den Abschnitt l_1 zu

$$K_1(\dot{V}) = K_{B_1}(\dot{V}) - 0 = K_{B_1}(\dot{V}), \quad (5.8)$$

für den Abschnitt l_2 zu

$$K_2(\dot{V}) = K_{B_2}(\dot{V}) - K_{B_1}(\dot{V}) \quad (5.9)$$

und für den Abschnitt l_3 zu

$$K_3(\dot{V}) = K_{B_3}(\dot{V}) - K_{B_2}(\dot{V}). \quad (5.10)$$

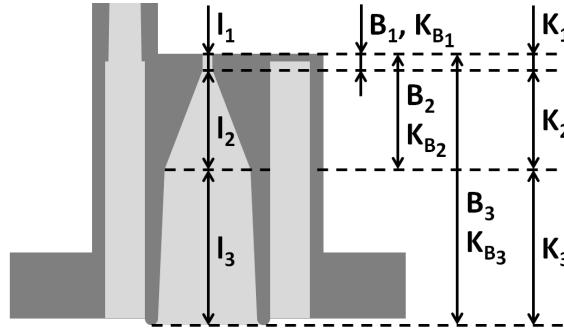


Abbildung 5.7: Skizze zur Zuordnung der einzelnen Werte bei der Berechnung der Einlaufdruck-Koeffizienten K_k

Die Berechnung des Einlaufdruck-Koeffizienten K_L des Luftrohres erfolgt analog, kann hier aber aufgrund der geringen Dichte von Luft im Vergleich zu den betrachteten Flüssigkeiten (vgl. Tabelle 2.1) vernachlässigt werden.

Ausgehend von Gleichung (4.18) ergibt sich mit den berechneten Einlaufdruck-Koeffizienten $K_k(\dot{V})$, den geometrieabhängigen fluidischen Widerständen der einzelnen Abschnitte $R_{fl,k}$, die mithilfe der Gleichungen (2.5) und (2.8) berechnet werden können, sowie den Gleichungen (2.10) für den Druckverlust einer Kapillarströmung, (4.5) für die Fläche A_r und (5.6) für den antreibenden hydrostatischen Druck entlang der Länge L_2 des Tropfers der folgende Ansatz zur Bestimmung des Volumenstroms durch die drei Abschnitte k des Tropfkanals:

$$\rho g L_2 = \sum_{k=1}^3 \left(R_{fl,k} \dot{V} + K_k(\dot{V}) \frac{\rho \dot{V}^2}{2 \pi^2 r_{lk}^4} \right) + p_{Tr,oben} + p_{Blase} \quad (5.11)$$

Unter Berücksichtigung des Drucks $p_{Tr,oben}$ an der Tropfenoberseite, berechnet mithilfe von Gleichung (4.4), sowie des Drucks p_{Blase} in der Blase, berechnet mithilfe der Young-Laplace-Gleichung (2.15), ergibt sich daraus:

$$\rho g L_2 = \sum_{k=1}^3 \left(R_{fl,k} \dot{V} + K_k(\dot{V}) \frac{\rho \dot{V}^2}{2 \pi^2 r_{lk}^4} \right) + \left(\frac{2 \sigma}{r_{Tr}} - \rho g h_{Tr} \right) + \frac{2 \sigma}{r_{Blase}} \quad (5.12)$$

In den Gleichungen (5.11) und (5.12) ist ρ jeweils die Dichte des tropfenden Fluids und g die Erdbeschleunigung.

5.3.2 Berechnung der Tropfeneigenschaften

Die Berechnung der Tropfeneigenschaften erfolgt analog zu Abschnitt 4.2 mithilfe der Gleichungen (4.8) und (5.12) und kann grundsätzlich in drei Phasen unterteilt werden (vgl. Abschnitt 4.1). In Phase 1 wird das annähernd kugelförmige Wachstum des Tropfens, ausgehend von einem halbkugelförmigen Tropfen beschrieben. Phase 2 betrachtet bei Glaskapillarsystemen die Auslängung des Tropfens nach unten; dabei verändert sich die Form des Tropfens weg von der Kugelform hin zu einer birnenähnlichen Form. Phase 3 beschreibt die Einschnürung sowie den Abriss des Tropfens.

Tropfenwachstum (Phase 1 & Phase 2)

Aufbauend auf Abschnitt 4.2.1 behandelt dieser Abschnitt das Tropfenwachstum vom halbkugelförmigen Tropfen (Zustand 0) direkt im Anschluss an den Tropfenabriss bis zum Beginn der Einschnürung des Tropfens im Übergang zur Einschnürungs- bzw. Abriss-Phase (Zustand 2). Ziel ist die Berechnung des Volumens des Tropfens V_{Tr} am Ende der Phase sowie der Zeit t zum Durchlaufen der Phase.

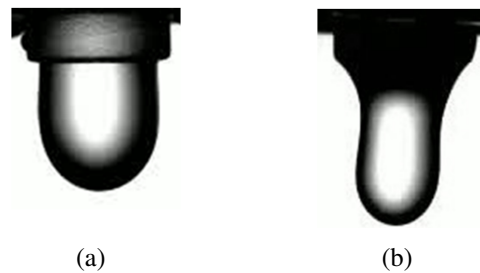


Abbildung 5.8: Tropfen am Senkrechttropfer: (a) Wasser; (b) Ethanol

Im Gegensatz zu den betrachteten Glaskapillaren tritt bei medizinischen Senkrechttropfern, wie in Abschnitt 4.4 bereits angedeutet, aufgrund des (sehr) großen Abtropfradius R (vgl. Abbildung 5.1) keine nennenswerte Auswölbung über den Kapillarrand hinaus auf ($\gamma \approx 0^\circ$) und die Tropfen nehmen über große Teile ihrer Bildung eine Zylinderform an (vgl. Abbildung 5.8 (a)).

Die Modellierung des Tropfens an der Kapillare erfolgt wie in Abschnitt 4.2.1 mithilfe des Gleichungssystems (2.48) in Kombination mit der Variation des Scheitelradius $r_{Tr,i}$ des Tropfens zur Abbildung der während der Wachstumsphase durchlaufenen quasi-statischen Zustände i ; für den Schnittpunkt der Kapillare mit der Tropfenkontur zur Bestimmung der Höhe $h_{Tr,i}$ des Tropfens gilt weiterhin der Ansatz in Gleichung (4.20) sowie die Bedingung $h_{Tr,i} \geq R$. Lediglich bei der Implementierung des Ansatzes in einem geeigneten Berechnungsprogramm (hier: Scilab) sind aufgrund der im Vergleich zu den verwendeten Glaskapillaren großen Abtropfradien R beim Senkrechttropfer folgende Besonderheiten zu beachten:

- Aufgrund des Einflusses der Schwerkraft und der daraus resultierenden Streckung des Tropfens kann der Scheitelradius $r_{Tr,i}$ abhängig vom Zustand i größer ($r_{Tr,i} \geq R$) und kleiner ($r_{Tr,i} \leq R$) als der Abtropfradius R sein; die Anfangsbedingung (4.19) gilt demnach an dieser Stelle nicht mehr.
- Bei tropfenden Flüssigkeiten mit geringer Oberflächenspannung (z.B. Ethanol) gilt ausschließlich $r_{Tr,i} \leq R$; ein Beispiel eines solchen Tropfens ist in Abbildung 5.8 (b) dargestellt.

Für die Berechnung des Volumenstroms $\dot{V}$ mithilfe von Gleichung (5.12) können keine allgemein, d.h. für jeden Tropfen, gültigen Annahmen getroffen werden. Ursache dafür ist die im Vergleich zur Tropfenbildung variierende Blasenbildung (vgl. Abschnitt 5.2.1): Da sich die Blasenbildungszeit abhängig vom Füllvolumen in der Flasche ändert, die Tropfenbildungszeit aber näherungsweise konstant ist variiert sowohl die Anzahl der Blasen als auch deren Ablösungszeitpunkt während der Tropfenbildung, was wiederum die Berechnung des Volumenstroms unter Berücksichtigung des Drucks in der Blase (vgl. Gleichung (5.12)) beeinflusst. Daher soll an dieser Stelle aus den bekannten Größen ein konstanter maximal möglicher Volumenstrom $\dot{V}_{\max}$ und ein konstanter minimal möglicher Volumenstrom $\dot{V}_{\min}$ berechnet werden. Der reale Volumenstrom liegt dann innerhalb des Bereichs zwischen $\dot{V}_{\max}$ und $\dot{V}_{\min}$; dieser Bereich wird im Folgenden als Lösungsbereich bezeichnet. Zur Abschätzung des maximalen Volumenstroms $\dot{V}_{\max}$ sind grundsätzlich die maximale Blasengröße r_{Blase} und entsprechend Abbildung 5.1 (a) die größeren Radien zur Bestimmung des Einlaufdruckverlustes in den konischen Bereichen l_2 und l_3 zu berücksichtigen; für die Abschätzung des minimalen Volumenstroms $\dot{V}_{\min}$ sind entsprechend die minimale Blasengröße r_{Blase} und die kleineren Radien zur Bestimmung des Einlaufdruckverlustes in den Bereichen l_2 und l_3 heranzuziehen. Damit ergeben sich die in Tabelle 5.1 zusammengefassten Größen; einsetzen der Größen in Gleichung (5.12) ermöglicht die Volumenstromberechnung. Durch die Abschätzung des Volumenstroms mithilfe eines Lösungsbereichs wird theoretisch kein Fehler gemacht, allerdings ist eine exakte Berechnung des Volumenstroms und somit der Tropfenbildungszeit nicht möglich.

	$\dot{V}_{\max}$	$\dot{V}_{\min}$
r_{Blase}	Gleichung (2.58)	r_L
r_{l_2}	r_2	r_1
r_{l_3}	r_3	r_2

Tabelle 5.1: Annahmen zur Abschätzung des maximalen und minimalen Volumenstroms $\dot{V}_{\max}$ und $\dot{V}_{\min}$ durch den Tropfkanal eines Senkrechttropfers

Analog zu Abschnitt 4.2.1 folgt somit für die Berechnung der relevanten Parameter eines quasi-statischen hängenden Tropfens in einem beliebigen Zustand i mit definiertem Radius $r_{Tr,i}$:

- Die Tropfenhöhe $h_{Tr,i}$ (und der Winkel γ_i) ergeben sich aus der Tropfenmodellierung (Gleichungssystem (2.48)).
- Das Tropfenvolumen $V_{Tr,i}$ ergibt sich unter Berücksichtigung von $r_{Tr,i}$, $h_{Tr,i}$ und γ_i aus Gleichung (4.8) oder durch Rotation (Integration, vgl. Gleichung (3.1)) der modellierten Tropfenkontur um die z-Achse (größerer Rechenaufwand).
- Der maximale bzw. minimale Volumenstrom $\dot{V}_i$ ergibt sich unter Berücksichtigung von $r_{Tr,i}$, $h_{Tr,i}$, γ_i sowie Tabelle 5.1 aus Gleichung (5.12).
- Die Tropfenbildungszeit t_i bis zu einem bestimmten Zustand i der Wachstumsphase ergibt sich durch Aufsummieren der einzelnen Zeiten Δt_i (vgl. Gleichung (4.22)) zwischen den einzelnen quasi-statischen Zuständen ($i-1$, i). Der durch die Verwendung des Volumenstroms $\dot{V}_i$ gemachte Fehler wird im Rahmen der nachfolgenden Fehlerabschätzung (vgl. Abschnitt 5.4.3) berücksichtigt.

Die Kombination der einzelnen Parameter eines Tropfens in einem bestimmten Zustand i mit der Zeit t_i , die bis zum Erreichen dieses Zustandes verstreicht, bietet analog zu Abbildung 4.7 die Möglichkeit, die zeitliche Entwicklung der einzelnen Größen zu analysieren. Darüber hinaus lässt sich das Volumen des Tropfens V_{Tr} am Ende des Tropfenwachstums (Zustand **2**) sowie die Zeit t , die ausgehend vom halbkugelförmigen Tropfen (Zustand **0**) für das Tropfenwachstum benötigt wird, berechnen. Diese Größen sind relevant für die folgende Berechnung von Tropfenvolumen und Tropfenbildungszeit unter Berücksichtigung der Einschnürungs- und Abrissvorgänge und werden mit $V_{Tr,TW}$ und $t_{TW,max}$ bzw. $t_{TW,min}$, abhängig vom verwendeten Volumenstrom, bezeichnet; der Volumenstrom am Ende der Wachstumsphase wird durch $\dot{V}_{TW,max}$ bzw. $\dot{V}_{TW,min}$ repräsentiert (vgl. Abschnitt 4.2.1).

Einschnürung und Abriss (Phase 3)

Die Berechnung der Einschnürung folgt grundsätzlich dem Ansatz in Abschnitt 4.2.2. Dabei wird analog zur Tropfenberechnung an Glaskapillaren der maximale bzw. minimale Volumenstrom $\dot{V}_{TW,max}$ bzw. $\dot{V}_{TW,min}$ herangezogen und es ergibt sich die Zeit $t_{EA,max}$ bzw. $t_{EA,min}$ vom Einschnürungsbeginn bis zum Tropfenabriss. Der Fehler, der im Rahmen der Verwendung von $\dot{V}_{TW,max}$ bzw. $\dot{V}_{TW,min}$ gemacht wird, lässt sich auch an dieser Stelle durch die detaillierte Analyse aufgenommener Tropfenbildungsvorgänge abschätzen (vgl. Fehlerabschätzung in Abschnitt 5.4.3).

Der Fehler durch die Vernachlässigung des weiteren Tropfenwachstums des sich ablösenden Tropfens wird ebenfalls analog zu Abschnitt 4.2.2, angelehnt an Rao et al. [63] (vgl. Abschnitt 2.2.2), in der Fehlerabschätzung (vgl. Abschnitt 5.4.3) berücksichtigt.

Berechnung des Tropfens

Die Berechnung des gesamten Tropfenvolumens bzw. der Tropfenbildungszeit erfolgt ebenfalls analog zu den Glaskapillarsystemen (vgl. Abschnitt 4.2.3) und wird im Folgenden nochmal kurz wiederholt:

$$t_{\text{Tr}} = t_{\text{TW}} + t_{\text{EA}}$$

$$V_{\text{Tr}} = V_{\text{TW}}$$

5.4 Verifikation des Berechnungsansatzes

Die Verifikation des neuen Ansatzes zur Berechnung des Tropfverhaltens bei Senkrechttropfern erfolgt angelehnt an die Verifikation des allgemeinen Ansatzes zur Tropfenberechnung (vgl. Abschnitt 4.3), d.h. es werden sowohl Ergebnisse aus Messungen an exemplarischen Tropfendosiersystemen als auch aus numerischen Simulationen vorgestellt. Dabei werden erneut zuerst die Tropfenbildungsdauer und das Tropfenvolumen an einem Beispiel betrachtet. Anschließend werden die im Rahmen der Tropfenberechnung getroffenen Annahmen und Vereinfachungen quantifiziert und deren Anteil am Gesamtfehler abgeschätzt. Zum Abschluss erfolgt analog zu Abschnitt 4.3 die Zusammenfassung weiterer Messreihen.

5.4.1 Methodik

Im Rahmen der im Folgenden vorgestellten Untersuchungen wurden analog zu Abschnitt 4.3 Wasser, Ethanol und Glycerin verwendet. Deionisiertes und entgastes Wasser repräsentiert dabei den Hauptbestandteil der meisten Medikamente; zur Entgasung wurde das Wasser im Exsikkator einem Unterdruck ausgesetzt, bis sich keine Blasen mehr gebildet haben. Ethanol und Glycerin dienen aufgrund ihrer im Vergleich zu Wasser deutlich reduzierten Oberflächenspannung (Ethanol) bzw. deutlich erhöhten Viskosität (Glycerin) zur Überprüfung von „Extremfällen“.

Aufgrund des optischen Aufbaus konnte der Messaufbau nach Haub an dieser Stelle nicht weiter eingesetzt werden. Daher ist auf den Messaufbau nach Wolf (vgl. Abschnitt 3.2), der eine vergleichbar hohen Reproduzierbarkeit aufweist, zurückgegriffen worden. Hier ist die Optik auf die Vermessung größerer Tropfen, wie sie im Rahmen von Tropfprozessen an Senkrechttropfern entstehen, angepasst. Grundsätzlich wurden die Tropfsysteme, d.h. Senkrechttropfer und Flasche, im Schnittpunkt der beiden optischen Achsen eingespannt und senkrecht ausgerichtet. Wie bereits bei der Verifikation der Tropfsysteme mit Glaskapillaren wurde das Tropfverhalten bei verschiedenen Füllhöhen über der Tropfkanalunterseite, hier angegeben durch definierte

Flüssigkeitsvolumina in der Flasche, untersucht. Es sind erneut drei Messungen pro Füllvolumen mit mindestens acht Tropfen pro Messung durchgeführt worden; die Temperatur wurde ebenfalls dokumentiert. Im Gegensatz zu den Tropfsystemen mit Glaskapillaren sind außerdem unterschiedliche Flaschengrößen, die in der Praxis mit Senkrechtstropfern vertrieben werden, berücksichtigt worden; gemäß Abschnitt 5.2.2 sind hier aber keine gravierenden Unterschiede zu erwarten.

Zur Unterstützung der optischen Messungen wurde mit dem Messaufbau nach Hummel (vgl. Abschnitt 3.3) die durchschnittliche Tropfenmasse ermittelt. Dazu ist eine vollständig gefüllte Tropfflasche eingespannt und der Tropfprozess bis zum Stillstand bei vollständig entleerter Flasche beobachtet worden. Die Masse der gesamten ausgetropften Flüssigkeit wurde dabei über die Waage erfasst und mit der Tropfenanzahl, welche mithilfe der optischen Auswertung am Messaufbau bestimmt werden kann, zur durchschnittlichen Tropfenmasse verrechnet. Optische Vermessungen des Tropfens sind mit dem Messaufbau nach Hummel nicht durchgeführt worden, da dieser gemäß Abschnitt 3.3 im Vergleich zum Messaufbau nach Wolf eine geringere Reproduzierbarkeit aufweist.

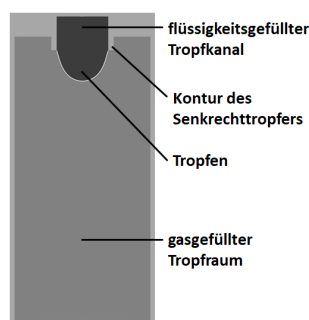


Abbildung 5.9: Tropfensimulation am Senkrechtstropfer

Zur Unterstützung der Messergebnisse wurden mit dem freien Simulationsprogramm OpenFOAM (vgl. Abschnitt 2.4) und dem dazugehörigen Solver interFoam numerische Simulationen durchgeführt. Die räumliche Diskretisierung erfolgte hier, analog zu Abschnitt 4.3, zweidimensional und liefert für ein 1° breites, rotationssymmetrisches Stück ca. eine Mio. Zellen; hochgerechnet auf das dreidimensionale Modell bedeutet dies die räumliche Diskretisierung mit ca. 360 Mio. Zellen. Um eine zweidimensionale Simulation mithilfe des OpenFOAM-Tools blockMesh erzeugen zu können, war eine Vereinfachung der Geometrie notwendig: Um eine homogene räumliche Diskretisierung zu erhalten, mussten Schrägen und Rundungen entfernt werden (vgl. Abbildung 5.9). Dies ist möglich, da die entscheidenden Parameter durch den Abtropfradius R sowie den Volumenstrom $\dot{V}$ (abgeleitet aus den durchschnittlich gemessenen bzw. berechneten Werten an einer Tropfer-Flüssigkeits-Kombination) gegeben sind; die Vereinfachung muss im Rahmen der Beurteilung der Simulationsergebnisse in den folgenden Abschnitten berücksichtigt werden.

Bzgl. der Genauigkeit der numerischen Simulation ist aufgrund der Verwendung der Navier-Stokes-Gleichungen (vgl. Gleichung (2.59)) und der zeitlichen und räumlichen Diskretisierung eine gute Übereinstimmung mit den Messergebnissen zu erwarten. Eine exakte Übereinstimmung mit den gemessenen Werten ist aber auch mithilfe numerischer Simulationen nicht möglich, da diese die zugrundeliegenden Gleichungen über ein iteratives Vorgehen lösen; daher ist immer ein Kompromiss zwischen der gewünschten Genauigkeit der Ergebnisse und einem vertretbaren Rechenaufwand einzugehen. Weiterhin wird, wie oben beschrieben, im Rahmen der hier durchgeführten Simulationen ein aus den Messergebnissen abgeleiteter, konstanter Volumenstrom als Input-Größe verwendet sowie eine Vereinfachung der komplexen Geometrie vorgenommen.

In den folgenden Abschnitten werden die Ergebnisse (Tropfenvolumen, Tropfenbildungszeit) über dem verbleibenden Füllvolumen der Flüssigkeit in der Flasche aufgetragen. Aufgrund der quasi-statischen Tropfenberechnung ergibt sich dabei ein in erster Näherung konstantes, d.h. von der Füllhöhe unabhängiges Volumen V_{Tr} der einzelnen Tropfen. Bzgl. der Tropfenbildungszeit liefert die Berechnung unter Verwendung des neuen Berechnungsansatzes aufgrund der Abschätzung eines maximal möglichen und eines minimal möglichen Volumenstroms einen konstanten Lösungsbereich (vgl. Tabelle 5.1). Die Ergebnisse, die sich bei der Verwendung von $\dot{V}_{max}$ bzw. $\dot{V}_{min}$ ergeben, sind als schwarze Linien dargestellt; die mithilfe des mittleren Volumenstroms berechneten Ergebnisse sind zur besseren Anschauung als gepunktete schwarze Linie ebenfalls visualisiert. Mess- und Simulationsergebnisse werden in grau dargestellt: Die Ergebnisse der für bestimmte Füllvolumina durchgeführten optischen Messungen mit dem Messaufbau nach Wolf werden von dunkelgrauen Quadraten (bzw. Kreisen oder Kreuzen; die Fehlerbalken repräsentieren die jeweilige Standardabweichung) repräsentiert; die Simulationsergebnisse sind hellgrau (gestrichelte Linie) dargestellt.

Grundsätzlich ist aufgrund der Annahmen und Vereinfachungen, die während der Herleitung der vorgestellten Tropfenberechnung getroffen worden sind, zu erwarten, dass die Messwerte innerhalb des Lösungsbereichs der berechneten Werte liegen.

5.4.2 Tropfenvolumen und Tropfenbildungszeit (am Bsp. LW-0,6-S2)

Im Folgenden sollen die Ergebnisse der Messreihen am Senkrechttropfer 0,6 S2 der Firma POMPL direkt e.K. vorgestellt werden. Die Zahl „0,6“ steht dabei für den Durchmesser d_1 [mm] durch den das tropfende Fluid in den Tropfkanal eintritt (vgl. Abbildung 5.1 (a) mit $d_1 = 2 r_1$); weitere Abmessungen werden in Anhang B.1 aufgeführt. Die Messungen sind mit deionisiertem und entgastem Wasser in Kombination mit unterschiedlichen Flaschen mit einem Nennvolumen von 30 ml, 50 ml und 100 ml durchgeführt worden.

Die in den Abbildungen 5.10 und 5.11 dargestellten Messergebnisse zeigen grundsätzlich eine gute Übereinstimmung der Messungen aller drei Flaschengrößen und bestätigen somit die in Abschnitt 5.2.2 angestellten theoretischen Überlegungen zur Unabhängigkeit der Tropfenbildung an Senkrechttropfern von der Flaschengröße. Kleinere Unterschiede zwischen verschiedenen Flaschenvolumina treten lediglich aufgrund der variierenden Verhältnisse von Flaschenradius zu Flaschenhöhe und der damit leicht veränderten Druckverhältnisse bzw. Tropfenbildungsmechanismen (vgl. Abschnitt 5.2.1) auf.

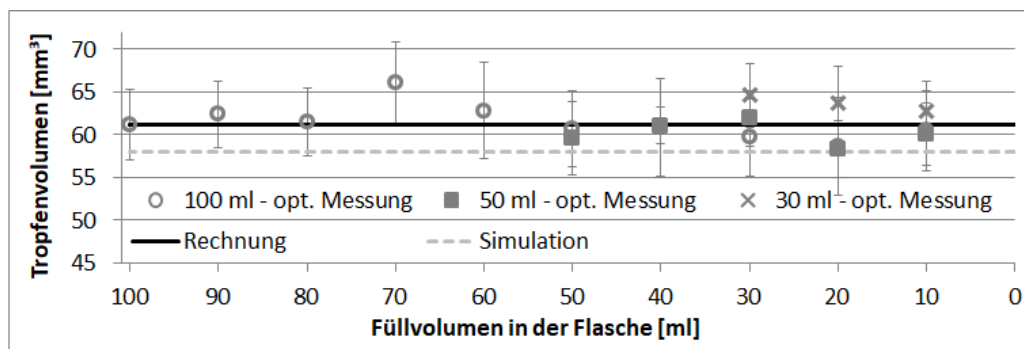


Abbildung 5.10: Tropfenvolumen am Tropfsystem POMPL 0,6 S2 (LW-0,6-S2) bei unterschiedlichen Flaschengrößen

Abbildung 5.10 zeigt den Vergleich zwischen berechnetem, gemessenem und simuliertem Tropfenvolumen. Prinzipiell lässt sich eine gute Übereinstimmung der optisch gemessenen mit den berechneten Tropfenvolumina erkennen. Die Abweichungen betragen dabei maximal $\pm 5,7\%$ für die 30 ml - Flasche, $\pm 4,6\%$ für die 50 ml - Flasche und $\pm 8,1\%$ für die 100 ml - Flasche; die maximalen Standardabweichungen der Messungen betragen $4,3\text{ mm}^3$, $4,2\text{ mm}^3$ und $5,7\text{ mm}^3$. Weiterhin weißt die mithilfe des Messaufbaus nach Hummel durchgeführte Gewichtsmessung eine Abweichung von $\pm 2,0\%$ und die numerische Simulation eine Abweichung von $\pm 5,3\%$, bezogen auf die mithilfe des hergeleiteten Ansatzes (vgl. Abschnitt 5.3) berechneten Volumina, auf.

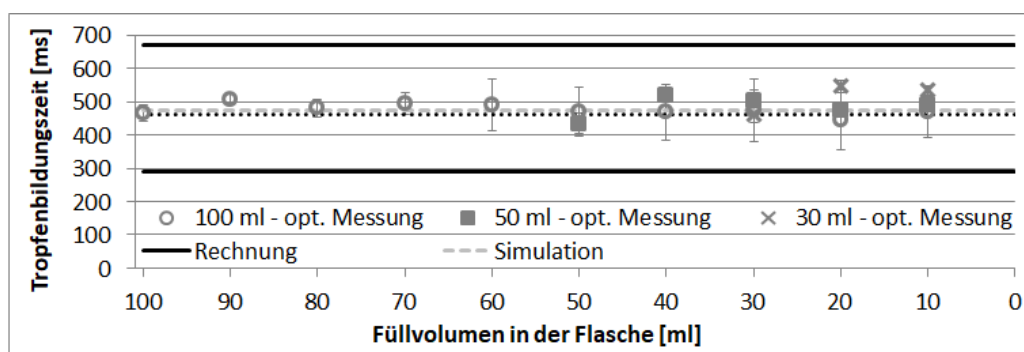


Abbildung 5.11: Tropfenbildungszeiten am Tropfsystem POMPL 0,6 S2 (LW-0,6-S2) bei unterschiedlichen Flaschengrößen

Hinsichtlich der Tropfenbildungszeit lässt sich in Abbildung 5.11 ebenfalls eine gute Übereinstimmung der Messergebnisse mit den berechneten bzw. numerisch simulierten Werten erkennen: Alle Messwerte sowie die Ergebnisse der numerischen Simulation liegen wie erwartet innerhalb des berechneten Lösungsbereiches. Die maximalen Standardabweichungen der Messungen betragen dabei 23,6 ms für die 30 ml - Flasche, 31,4 ms für die 50 ml - Flasche und 94,1 ms für die 100 ml - Flasche.

Sowohl bei der Betrachtung der Abbildungen 5.10 und 5.11 als auch bei der Analyse der beschriebenen Abweichungen fällt der Ausreißer im Tropfenvolumen bei der Messung mit der 100 ml - Flasche sowie die größere Standardabweichung der Messungen an der 100 ml - Flasche auf. Weitere Untersuchungen des Tropfprozesses haben gezeigt, dass hier die Tropfen- und Blasenbildung bei einem Füllvolumen von ca. 70 ml kurzzeitig synchron abläuft. Dabei lösen sich Tropfen und Blase gleichzeitig ab, was zu einem Auftreten des größten Unterdrucks (halbkugelförmige Blase kurz vor dem schlagartigen Abriss) in der Flasche kurz vor dem Tropfenabriss und somit zu kleineren Volumenströmen bzw. größeren Tropfenvolumina führt. Ein Zusammenhang zur Erhöhung der Standardabweichung ist ebenfalls wahrscheinlich: Für geringere Füllvolumina ist die Blasenbildungszeit größer als die Tropfenbildungszeit, was dazu führt, dass nicht jeder Tropfen durch die Strömungen einer Blasenablösung beeinflusst wird. Für genauere Aussagen wären jedoch noch weitere Untersuchungen notwendig, die aufgrund der Fokussierung auf grundlegende Aspekte der Tropfendosierung mit Senkrechttropfern im Rahmen dieser Arbeit nicht durchgeführt werden konnten.

5.4.3 Fehlerabschätzung (am Bsp. LW-0,6-S2)

Die Quantifizierung des Einflusses einzelner Annahmen auf den Gesamtfehler erfolgt, analog zu Abschnitt 4.3.3, exemplarisch mithilfe der Messungen am Tropfendosiersystemsystem LW-0,6-S2 (Abmessungen in Anhang B.1, $T = 25,0\text{ °C}$). Dabei werden grundsätzlich immer die maximal möglichen Fehler abgeschätzt, d.h. es wird ein Bereich erarbeitet, innerhalb dessen der tatsächliche Wert liegt. Für die einzelnen Annahmen bzw. Vereinfachungen ergeben sich damit die folgenden Abweichungen bzw. Fehler:

- Vernachlässigung der Kraftwirkung des in den Tropfen einströmenden Fluids F_v :

Der maximale Fehler (Zunahme) durch Vernachlässigung von F_v am Ende des Tropfenwachstums (Zustand 2: $V_{Tr} = 61,11\text{ mm}^3$) ergibt sich mithilfe von Gleichung (4.28) unter Verwendung des maximal möglichen Volumenstroms $\dot{V}_{TW,max} = 221,23\frac{\text{mm}^3}{\text{s}}$ zu $\Delta V_{F_v} = 0,55\text{ mm}^3$ bzw. 0,9 %. Die Tropfenbildungszeit erhöht sich durch die Vernachlässigung der Kraft F_v in vergleichbarem Umfang.

- Vernachlässigung der zeitabhängigen Induktivitäten aufgrund der quasi-statischen Betrachtung der Tropfenbildung:

Der Vergleich des Druckverlusts aufgrund der Induktivität (vgl. Gleichung (4.29)) mit dem Druckverlust über den fluidischen Widerstand R_{fl} (vgl. Gleichung (2.4) und (2.5)) ergibt im relevanten Abschnitt l_1 (Radius r_1 , vgl. Abbildung 5.1 (a)) des Tropfendosiersystems LW-0,6-S2 eine maximale Reduktion der Tropfenbildungszeit von 0,09 % ($\dot{V}_{\text{Zustand 0, min}} = 78,23 \frac{\text{mm}^3}{\text{s}}$, $\dot{V}_{\text{Zustand 2, min}} = 98,21 \frac{\text{mm}^3}{\text{s}}$, $t_{\text{Tr,max}} = 670,16 \text{ ms}$, R_{fl} mit $\dot{V}_{\text{Zustand 0}}$). Das Tropfenvolumen wird von der Vernachlässigung der Induktivitäten nicht beeinflusst.

- Abweichungen bei der Berechnung der Zeit zwischen zwei quasi-statischen Zuständen (i-1, i) entsprechend Gleichung (4.22) bzw. Abbildung 4.6:

Die Abschätzung des maximalen Fehlers durch Verwendung von $\dot{V}_{i-1}$ in Gleichung (4.22) und Vergleich der Ergebnisse für die Tropfenbildungszeit liefert für das Tropfendosiersystem LW-0,6-S2 eine maximale Abweichung der Tropfenbildungszeit von $\pm 0,03 \%$. Das Tropfenvolumen wird nicht beeinflusst.

- Fehler aufgrund der Abweichungen des berechneten Winkels γ im Zustand **2** von den erwarteten 0° :

Die Abschätzung der auftretenden Abweichungen aus den Ergebnissen des berechneten Winkels γ im Zustand **2** und der Vergleich von $\cos(\gamma)$ zum $\cos(0^\circ) = 1$ ergibt einen minimalen Winkel von $1,22^\circ$ und somit eine maximale Abweichung (Reduktion) des Tropfenvolumens von 0,02 %. Die Tropfenbildungszeit reduziert sich im gleichen Maß.

- Abschätzung des Volumenstroms während der Einschnürungs- bzw. Abrissphase gemäß Gleichung (4.23):

Der mithilfe der Tropfenberechnung ermittelte Anteil der Einschnürung an der Tropfenbildungszeit nimmt im Vergleich zu den Glaskapillarsystemen in Kapitel 4 aufgrund der deutlich größeren Abtropfradien R deutlich zu und beläuft sich am Tropfendosiersystem LW-0,6-S2 auf 27,2 % ($t_{\text{EA,min}} = 78,68 \text{ ms}$, $t_{\text{Tr,min}} = 289,65 \text{ ms}$). Der Fehler (Erhöhung) im Rahmen der Berechnung der Tropfenbildungszeit t_{Tr} ergibt sich damit zu 3,1 %. Das Tropfenvolumen wird nicht beeinflusst.

- Vernachlässigung der Flüssigkeit, die während der Einschnürung in den Tropfen strömt:

Die Reduktion der Einschnürungszeit durch Vernachlässigung des weiteren Tropfenwachstums gemäß Gleichung (4.32) beträgt 23,44 ms ($V_{\text{Tr,TW}} = 61,11 \text{ mm}^3$). Bezogen auf die minimale Tropfenbildungszeit $t_{\text{Tr}} = 289,65 \text{ ms}$ ($\dot{V}_{\text{EA,max}} = 221,23 \frac{\text{mm}^3}{\text{s}}$) ergibt sich somit eine maximale Abweichung (Reduktion) der Rechnung von 8,1 %. Aufgrund des in der

Rechnung konstanten Volumenstroms ergibt sich für das Tropfenvolumen ebenfalls eine maximale Abweichung von 8,1 %.

- Fehler aufgrund der Ungenauigkeit der Temperaturmessung und der Temperaturabhängigkeit der fluidischen Stoffgrößen (vgl. Abschnitt 2.1.1):

Die aufgrund der Messungenauigkeit von $\pm 0,2$ K möglichen Abweichungen ergeben sich durch Variation der Temperatur bzw. Stoffgrößen im Berechnungsansatz zu maximal $\pm 1,1$ % für das Tropfenvolumen und $\pm 0,8$ % für die Tropfenbildungszeit.

Neben den bereits bekannten Abweichungen ist im Rahmen der Betrachtung von Senkrechttropfern der Fehler aufgrund der Verwendung der analytischen Blasenberechnung nach Gaddis & Vogelpohl [84] (vgl. Gleichung (2.58)) zu berücksichtigen. Entsprechend Tabelle 5.1 hat diese Ungenauigkeit in der Blasenberechnung dabei nur Auswirkungen auf den maximal möglichen Volumenstrom $\dot{V}_{\max}$ und somit auf die minimale Tropfenbildungszeit $t_{\text{Tr,min}}$ (das berechnete Tropfenvolumen wird nicht beeinflusst). Die Abschätzung der auftretenden Abweichung erfolgt durch Variation der Blasengröße um ± 2 % [84] im Berechnungsansatz und den Vergleich der berechneten Werte; für das Tropfendosiersystem LW-0,6-S2 ergeben sich damit Abweichungen von maximal $\pm 0,5$ %.

Die Ergebnisse der Fehlerabschätzungen sind in den Abbildungen 5.12 und 5.13 für das Tropfenvolumen und die Tropfenbildungszeit dargestellt. Zur Einordnung der Fehler ist dabei für jeden betrachteten Messpunkt zunächst die Mess-Toleranz, bestehend aus der Standardabweichung der Messung („Std.Abw.“), der Messgenauigkeit des Messaufbaus nach Wolf entsprechend Abschnitt 3.4 sowie der Streuung der einzelnen Messwerte („Messwerte“), als Referenz angegeben. Weiterhin sind der Fehler durch die Vernachlässigung der Kraftwirkung des in den Tropfen einströmenden Fluids F_v („Berücksichtigung F_v “), der Fehler durch die Vernachlässigung des Tropfenwachstums in der Einschnürungs- bzw. Abriss-Phase („Wachstum Phase 3“) sowie sonstige Fehler aufgetragen. „Rechnung“ und „Messung“ repräsentieren analog zu Abschnitt 5.4.2 den berechneten Wert und den Mittelwert der durchgeführten Messungen.

Abbildung 5.12 zeigt die Auswirkung der einzelnen Vereinfachungen auf das berechnete Tropfenvolumen im Vergleich zu den Mess-Toleranzen. Hinsichtlich der Mess-Toleranzen ist an dieser Stelle zu beachten, dass im Gegensatz zu Abschnitt 4.3.3 aufgrund des zweiachsigen Messaufbaus nach Wolf (vgl. Abschnitt 3.2) kein Fehler aufgrund der „Kapillarausrichtung“ berücksichtigt werden muss.

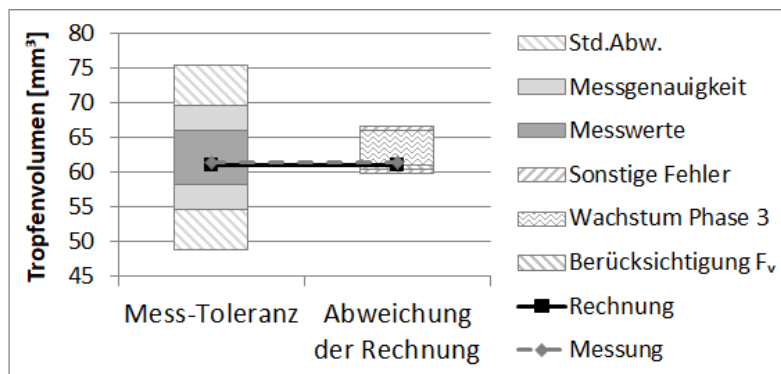


Abbildung 5.12: Fehlerabschätzung am Tropfendosiersystem LW-0,6-S2 - Tropfenvolumen

Die in Abbildung 5.12 aufgetragenen sonstigen Fehler ergeben sich analog zu Abschnitt 4.3.3 und umfassen die folgenden Ungenauigkeiten:

- Abweichung des berechneten Winkels am Ende des Tropfenwachstums
- Ungenauigkeiten bei der Messung der Fluid-Temperatur

Abbildung 5.12 zeigt weiterhin, dass der Fehler durch die Vernachlässigung der Kraftwirkung des in den Tropfen einströmenden Fluids F_v („Berücksichtigung F_v “) im Vergleich zum Fehler durch die Vernachlässigung des Tropfenwachstums in der Einschnürungs- bzw. Abriss-Phase („Wachstum Phase 3“) vergleichsweise klein ist; die Fehler belaufen sich auf 0,9 % bzw. 8,1 %. Ursache dafür ist v.a. die längere Einschnürungszeit aufgrund des im Vergleich zu Glaskapillaren sehr großen Abtropfradius R .

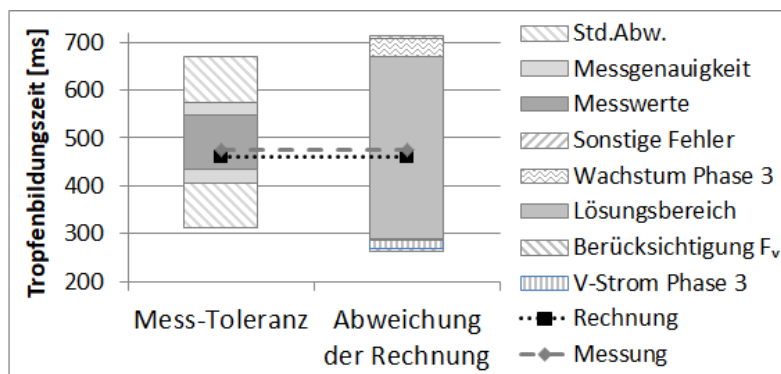


Abbildung 5.13: Fehlerabschätzung am Tropfendosiersystem LW-0,6-S2 - Tropfenbildungszeit

Abbildung 5.13 zeigt die Auswirkung der einzelnen Vereinfachungen auf die berechnete Tropfenbildungszeit. Neben dem Balken „Lösungsbereich“, der den Bereich zwischen maximaler und minimaler berechneter Tropfenbildungszeit visualisiert (vgl. Abbildung 5.11), sind dabei grundsätzlich die selben Fehler aufgetragen wie in Abbildung 5.12 bzw. oben beschrieben; die

sonstigen Fehler sind allerdings um die folgenden Fehler, die sich ausschließlich auf den Volumenstrom auswirken, ergänzt:

- Fehler durch Vernachlässigung der Induktivitäten
- Abweichungen in der Berechnung der Zeit zwischen zwei quasi-statischen Zuständen
- Ungenauigkeiten durch die analytische Blasenberechnung nach Gaddis & Vogelpohl [84]

Im Gegensatz zu Abschnitt 4.3.3 ist außerdem der Fehler durch die Abschätzung des Volumenstroms während der Einschnürung zu groß, um im Rahmen der sonstigen Fehler berücksichtigt zu werden und somit im Balken „V-Strom Phase 3“ separat aufgeführt. Ursache dafür ist ebenfalls der im Vergleich zu Glaskapillaren größere Abtropfradius R und die damit verbundene größere Zeit $t_{EA,max}$ bzw. $t_{EA,min}$; der ermittelte Fehler beläuft sich auf maximal 3,1 %.

Die Fehler durch Vernachlässigung der Kraftwirkung des in den Tropfen einströmenden Fluids F_v („Berücksichtigung F_v “) sowie durch die Vernachlässigung des Tropfenwachstums in der Einschnürungs- bzw. Abriss-Phase („Wachstum Phase 3“) nehmen im Vergleich zum berechneten Lösungsbereich eine untergeordnete Rolle ein und belaufen sich entsprechend der beschriebenen Fehlerabschätzungen ebenfalls auf maximal 0,9 % bzw. 8,1 %; die dominante Rolle des Lösungsbereichs resultiert aus dem großen Unterschied zwischen den verwendeten Blasenradien zur Berechnung des maximal und minimal möglichen Volumenstroms $\dot{V}_{max}$ bzw. $\dot{V}_{min}$ (vgl. Tabelle 5.1).

Alles in allem betrachtet ergibt sich aus der Fehlerabschätzung in den Abbildungen 5.12 und 5.13 eine gute Übereinstimmung der berechneten und gemessenen Werte.

Analog zu Abschnitt 4.3.3 sind im Rahmen dieser Arbeit weitere Untersuchungen zur Verifikation des in Abschnitt 5.3.2 vorgestellten Ansatzes durchgeführt worden; die Ergebnisse dieser Untersuchungen werden im Folgenden zusammengefasst.

5.4.4 Ergebnisse weiterer Untersuchungen

Neben den in den vergangenen beiden Abschnitten vorgestellten Messreihen sind im Rahmen dieser Arbeit, analog zu Abschnitt 4.3, weitere Untersuchungen an unterschiedlichen Senkrechttropfern und mit unterschiedlichen Fluiden (Wasser, Ethanol, Glycerin) durchgeführt worden; als Standardflasche wurde dafür die 50 ml - Flasche festgelegt. Grafiken zu den Ergebnissen dieser Untersuchungen sind in Anhang B.3 entsprechend den Schaubildern in den vorangegangenen Abschnitten aufbereitet. Im Folgenden sollen die Ergebnisse kurz zusammengefasst werden.

Neben dem Tropfer POMPL 0,6 S2, ist der Tropfer POMPL 1,0 S2, der sich durch einen größeren Einströmdurchmesser von $d_1 = 2 r_1 = 1,0 \text{ mm}$ vom bisher betrachteten Modell unterscheidet, evaluiert worden (vgl. Anhang B.3.1). Gemäß der durch das Gesetz von Hagen-Poiseuille (vgl. Gleichung (2.3)) gegebenen Grundlagen zur Strömung in Kapillaren tritt dabei ein größerer Volumenstrom und somit eine kürzere Tropfenbildungszeit von ca. 200 ms auf.

Die Ergebnisse der Messreihe zeigen grundsätzlich eine Verschiebung des berechneten Tropfenvolumens und der berechneten Tropfenbildungszeit hin zu kleineren Werten, die aber prinzipiell entsprechend der aufgestellten Fehlerabschätzung im erwarteten Bereich liegen. Eine weitere, nur schlecht quantifizierbare Fehlerquelle sind Schwingungen aufgrund des „Zurückschnappens“ der nach dem Abriss des vorangegangenen Tropfens am Senkrechttropfer verbleibenden Flüssigkeit; diese Schwingungen gewinnen dabei v.a. bei hohen Volumenströmen und kurzen Tropfenbildungszeiten an Bedeutung, da das Abklingen der Schwingungen nahezu die komplette Tropfenbildungszeit andauert. Mögliche Ursachen der Volumenstromreduktion aufgrund der Schwingungen sind variierende Drucksituationen im Tropfen aufgrund der permanenten Gestaltänderung sowie verstärkt auftretende Impulse nach oben aufgrund des „Zurückschnappens“ der Flüssigkeit nach dem Abriss. Für eine detaillierte Analyse der Vorgänge und deren Auswirkungen wären noch weitere Untersuchungen notwendig, die aufgrund der Fokussierung auf grundlegende Aspekte der Tropfendosierung mit Senkrechttropfern im Rahmen dieser Arbeit nicht durchgeführt werden konnten.

Messungen mit Ethanol (vgl. Anhang B.3.2) dienen analog zu Abschnitt 4.3.4 der Überprüfung des Berechnungsansatzes hinsichtlich der Verwendbarkeit bei geringen Oberflächenspannungen (vgl. Tabelle 2.1) und liefern, wie bereits aus Abbildung 5.8 (b) bekannt, kleinere Tropfen und damit kürzere Tropfenbildungszeiten. Grundsätzlich liefert der Vergleich zwischen hergeleitetem Berechnungsansatz, Messung und numerischer Simulation eine gute Übereinstimmung. Die auftretenden Abweichungen resultieren im Wesentlichen aus einer stärkeren Ausprägung der Änderung im Blasenbildungsverhalten (vgl. Abschnitt 5.2.1) aufgrund der reduzierten Oberflächenspannung sowie den auftretenden Schwingungen im Tropfen nach dem Abriss des vorangegangenen Tropfens. Eine Berücksichtigung dieser Effekte wäre nur unter erheblichen Steigerungen der Komplexität des Ansatzes möglich.

Die Messungen mit Glycerin (vgl. Anhang B.3.3) dienen analog zu Abschnitt 4.3.4 der Überprüfung des Berechnungsansatzes hinsichtlich der Verwendbarkeit bei Fluiden mit hoher Viskosität (vgl. Tabelle 2.1) und damit gemäß dem Gesetz von Hagen-Poiseuille (vgl. Gleichung (2.3)) bei geringeren Volumenströmen. Die Ergebnisse zeigen insbesondere bei der Berechnung der Tropfenbildungszeit sehr gute Übereinstimmungen. Im Gegensatz dazu werden die Tropfenvolumina tendenziell zu gering abgeschätzt. Diese Verschiebung folgt bei genauerer Analyse der

Messwerte aus einer Erhöhung des Volumenstroms bei der Einschnürung des Tropfens (vgl. Abbildung 5.14): Gemäß der Young-Laplace-Gleichung (vgl. Abschnitt 2.1.4) führt die konkave Krümmung des Tropfenhalses „in den Tropfen hinein“ zu einer Reduktion des Drucks im Tropfenhals und somit zu einem höheren Volumenstrom. Daraus resultiert letztendlich ein höheres Volumen bei gleicher Tropfenbildungszeit. Theoretisch tritt dieser Effekt auch bei anderen vorgestellten Messungen auf, kann aber aufgrund der im Vergleich zu Glycerin sehr geringen Tropfenbildungszeiten nicht nachgewiesen und somit vernachlässigt werden.

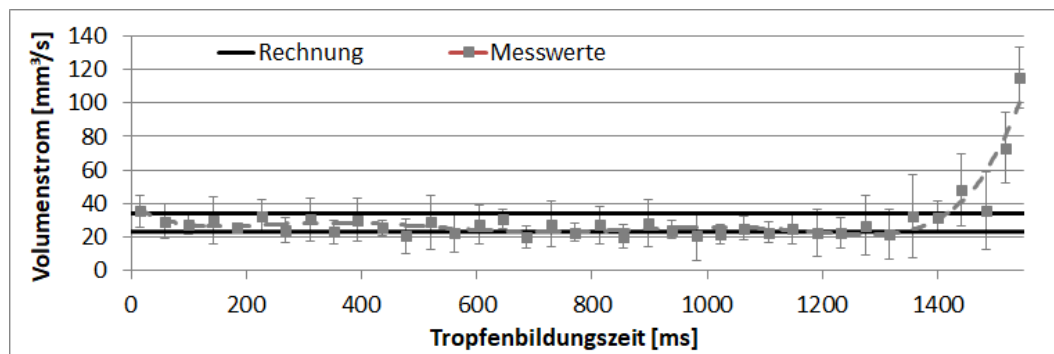


Abbildung 5.14: Entwicklung des Volumenstroms bei der Bildung eines einzelnen Tropfens am Bsp. Gly-2,0-S2 (Füllvolumen: 10 ml); die dargestellten Messwerte sind dabei aufgrund der erreichten Auflösungsgrenzen des Messaufbaus nach Wolf und der damit verbundenen Schwankungen aus jeweils 5 Messpunkten gemittelt (die Fehlerbalken repräsentieren die Standardabweichung)

Alles in allem behandeln die beschriebenen Messreihen v.a. die Extremfälle hoher Volumenströme, geringer Oberflächenspannungen und hoher Viskositäten sowie die damit einhergehenden Besonderheiten und bestätigen grundsätzlich die Berechnung von Tropfenvolumen und Tropfenbildungszeit mithilfe des in Abschnitt 5.3 vorgestellten Berechnungsansatzes. Damit kann der vorgestellte Berechnungsansatz als verifiziert betrachtet werden und ist somit zur Verwendung im Rahmen der Berechnung von Senkrechttropfern qualifiziert.

5.5 Einflussgrößen zur Variation der Tropfenbildung

Wie in Abschnitt 4.4 bereits erwähnt, erlaubt der vorgestellte Ansatz neben der Berechnung von Tropfenvolumen und Tropfenbildungszeit in einem speziellen Anwendungsfall auch die allgemeine Untersuchung der Einflüsse der Geometrie des Tropfsystems sowie der Stoffgrößen des tropfenden Fluids auf das Tropfverhalten. Untersuchungen dieser Art sind v.a. für die zielorientierte Auslegung von Tropfsystemen relevant und sollen daher im Folgenden vorgestellt werden.

5.5.1 Einflussgrößen

Die Untersuchung der Einflussgrößen auf das Tropfverhalten eines Senkrechttropfers erfolgt unter Verwendung des vorgestellten Berechnungsansatzes. Ausgehend von der Geometrie des Tropfsystems LW-0,6-S2 (vgl. Anhang B.1) und unter Verwendung der Stoffwerte von Wasser bei 25 °C (diese Konfiguration wird im Folgenden als „Referenz“ bezeichnet) ergibt sich der Einfluss einer geometrischen Größe (vgl. Abbildung 5.1) durch Variation dieser Größe um $\pm 20\%$ im Vergleich zur Referenz und Vergleich der berechneten Tropfenvolumina und Tropfenbildungszeiten mit den Ergebnissen für die Referenz. Die anderen Größen werden dabei konstant gehalten; die Variation einzelner Längen führt aber jeweils zu einer Variation der Gesamtlänge L_2 . Darüber hinaus wird der Einfluss einzelner Stoffgrößen durch Variation jeweils einer Stoffgröße gemäß Tabelle 5.2 ermittelt; die Geometrie wird hierbei nicht verändert.

Eigenschaft Einheit	Dichte ρ kg/m ³	dyn. Viskosität η 10 ⁻³ kg/(ms)	Oberflächenspannung σ 10 ⁻³ kg/s ²
maximal	1250	50	80
Wasser (25 °C) [38]	997,05	0,890	72,06
minimal	800	0,5	20

Tabelle 5.2: Variation der Stoffgrößen zur Bestimmung der Einflüsse auf die Tropfenbildung

Beispiel:

- Referenz:
Geometrie analog zum Tropfsystem LW-0,6-S2, Stoffwerte von Wasser bei 25 °C
- Einflusses des Abtropfradius R :
Variation von R um $\pm 20\%$ (alle anderen Größen bleiben unverändert) und Berechnung des jeweiligen Tropfenvolumens und der jeweiligen Tropfenbildungszeit; diese werden anschließend mit den Berechnungsergebnissen unter Verwendung der Referenz verglichen.
- Einflusses der Viskosität η :
Variation von η entsprechend der Extremwerte in Tabelle 5.2 (alle anderen Größen bleiben unverändert) und Berechnung des jeweiligen Tropfenvolumens und der jeweiligen Tropfenbildungszeit; diese werden anschließend mit den Berechnungsergebnissen unter Verwendung der Referenz verglichen.

Die Ergebnisse dieser Variationen sind in den Abbildungen 5.15 und 5.16 zusammengefasst: In den Abbildungen stellen die horizontalen schwarzen Linien das Berechnungsergebnis unter Verwendung der Referenz und die vertikalen Fehlerbalken die maximale Änderung von Tropfenvolumen bzw. Tropfenbildungszeit bei Variation der auf der x-Achse genannten Größe dar;

der graue Bereich in den Abbildungen 5.15 (b) und 5.16 (b) repräsentiert den errechneten Lösungsbereich der Referenz.

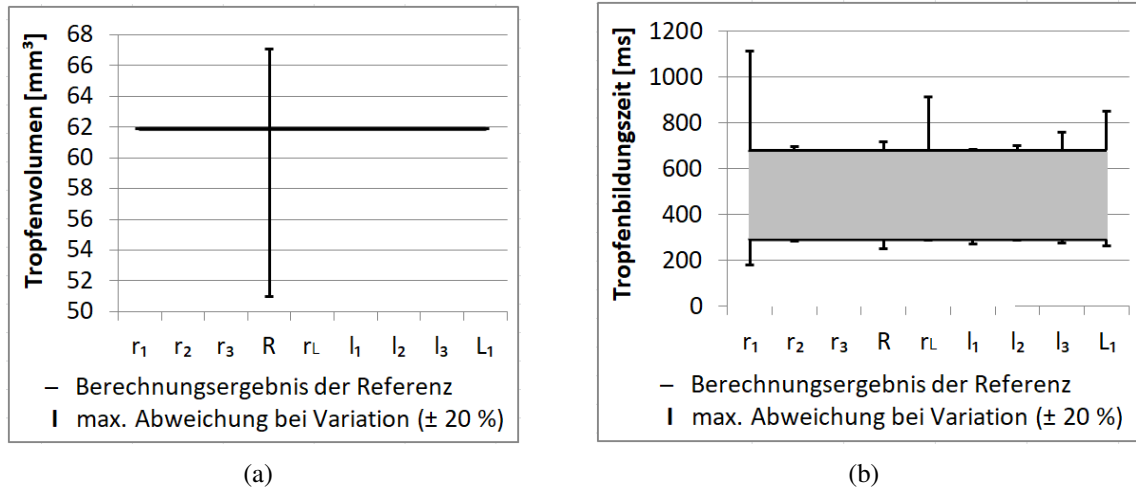


Abbildung 5.15: Einfluss einzelner geometrischer Größen auf die Tropfenbildung: (a) Tropfenvolumen; (b) Tropfenbildungszeit

Abbildung 5.15 (a) zeigt, dass lediglich die Variation des Abtropfradius R , von dem sich der Tropfen löst, zu einer Variation des Tropfenvolumens führt. Dabei führt die Zunahme von R zu einer Zunahme des Tropfenvolumens und der Tropfenbildungszeit; Ursache für die Zunahme des Tropfenvolumens ist die Zunahme der Haltekraft $F_{\text{sf},z}$ (vgl. Gleichung (2.38)) und Ursache für die Zunahme der Tropfenbildungszeit ist v.a. die zusätzlich benötigte Flüssigkeit.

Die Tropfenbildungszeit hängt außerdem wesentlich vom kleinsten Radius der Tropfkapillare r_1 und dem Radius des Luftrohres r_L ab (vgl. Abbildung 5.1 (a)), da diese den fluidischen Widerstand der Tropfkapillare bzw. die Blasengröße (und damit den Druckverlust durch die Blasenbildung) definieren und somit entscheidend für die Festlegung des Volumenstroms durch die Kapillare sind (vgl. Gleichung (5.12) mit Tabelle 5.1). Eine Reduktion von r_1 um 20 % führt dabei z.B. zu einem Anstieg der mittleren Tropfenbildungszeit von 71,7 %, die Reduktion von r_L liefert einen Anstieg um 22,5 %. Die weiteren Radien r_2 und r_3 können dagegen hinsichtlich ihres direkten Einflusses auf die Tropfenbildung vernachlässigt werden.

Die Variation der verschiedenen Längen ergibt insbesondere dann einen Einfluss auf die Tropfenbildungszeit, wenn der antreibende hydrostatische Druck p_{hyd,L_2} der Strömung, d.h. die Länge L_2 , variiert wird: Am einfachsten ist dies durch Variation der größeren Längen l_3 und L_1 möglich. Soll die Tropfenbildungszeit durch Variation von l_1 beeinflusst werden ist eine deutlich stärkere Variation erforderlich: Eine Verdopplung von l_1 führt beispielsweise zu einer Reduktion der mittleren Tropfenbildungszeit von 11,6 %. Eine weitere Option zur Variation der Tropfenbildungszeit über die Länge ergibt sich aus der Änderung des Verhältnisses zwischen Tropfkanallänge $l_1 + l_2 + l_3$ und L_1 bei konstanter Gesamtlänge L_2 ; eine Verdopplung von l_1

führt hier zu einer Reduktion der mittleren Tropfenbildungszeit von 13,5 %

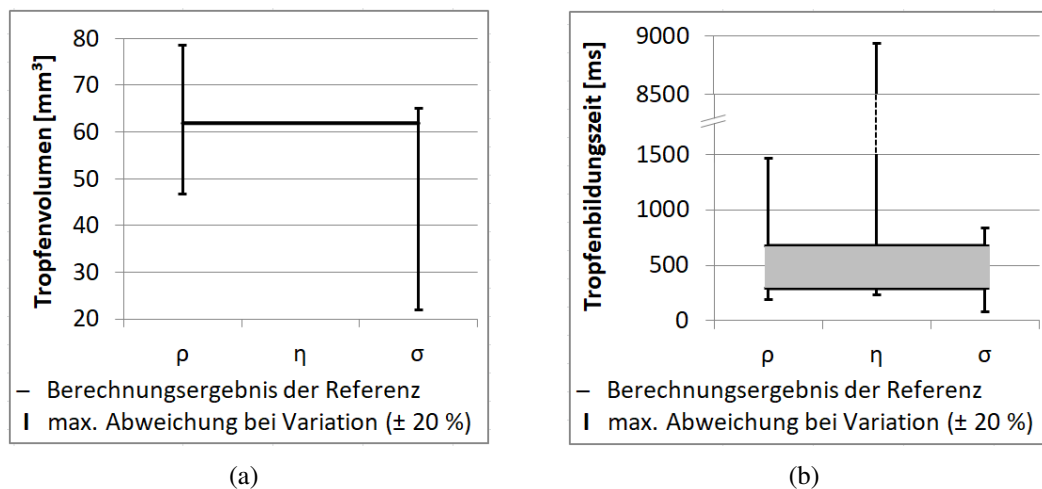


Abbildung 5.16: Einfluss einzelner Stoffwerte auf die Tropfenbildung: (a) Tropfenvolumen; (b) Tropfenbildungszeit

Die Variation einzelner Stoffeigenschaften in Abbildung 5.16 zeigt, dass die Variation der Dichte ρ des tropfenden Mediums vergleichbare Auswirkungen auf Tropfenbildungszeit und Tropfenvolumen hat: Eine geringere Dichte ermöglicht aufgrund der damit verbundenen Änderung der Gewichtskraft (vgl. Gleichung (2.40)) größere Tropfenvolumen bei gleichzeitig erhöhter Tropfenbildungszeit. Die Abbildung zeigt weiterhin, dass der Einfluss der Viskosität η auf das Tropfenvolumen vernachlässigbar ist, wohingegen der Einfluss auf die Tropfenbildungszeit, insbesondere bei einer Erhöhung, entsprechend dem Einfluss auf den Volumenstrom gemäß dem Gesetz von Hagen-Poiseuille (vgl. Gleichung (2.3)), sehr stark ausgeprägt ist. Im Gegensatz dazu ist der Einfluss der Oberflächenspannung σ auf die Tropfenbildungszeit vergleichsweise gering, wohingegen der Einfluss auf das Tropfenvolumen stark ausgeprägt ist. Abbildung 5.16 (a) legt diesbezüglich nahe, dass die Variation der Oberflächenspannung v.a. zu einer Reduktion des Tropfenvolumens führt. Dies ist aber v.a. der Tatsache geschuldet, dass der maximale physikalisch sinnvolle Wert nahe beim Referenzwert von Wasser (25 °C) liegt (vgl. Tabelle 5.2). Daraus folgt, dass die Reduktion der Oberflächenspannung zu kleineren Tropfen führt, was sich v.a. über die damit einhergehende Reduktion der Haltekraft $F_{\text{sf,z}}$ erklären lässt.

Die Kombination der in den Abbildungen 5.15 und 5.16 dargestellten Ergebnisse, d.h. die Variation der geometrischen Größen unter Verwendung maximaler bzw. minimaler Stoffgrößen als Referenz, liefert grundsätzlich zu Abbildung 5.15 vergleichbare Ergebnisse, sodass die relevanten geometrischen Einflussgrößen auf die Tropfenbildung unabhängig vom tropfenden Fluid folgendermaßen zusammengefasst werden können:

- Der Abtropfradius R ist maßgebend für das Tropfenvolumen.

- Die Radien R , r_1 und r_L sowie die Gesamtlänge des Senkrechtstropfers L_2 bestimmen die sich einstellende Tropfenbildungszeit; eine gezielte Beeinflussung ist durch eine Variation von r_1 aber am genauesten möglich.

5.5.2 Auslegung von Senkrechtstropfern

Im vorangegangenen Abschnitt sind die wesentlichen Einflüsse auf die Tropfenbildung bei erfüllter Tropfbedingung (5.7) analysiert und daraus die geometrischen Größen zur Variation der Tropfenbildung unabhängig vom tropfenden Fluid ermittelt worden. Darauf aufbauend ist es möglich, abhängig vom gegebenen Fluid und den gestellten Anforderungen an den Tropfprozess, Design-Empfehlungen zur Auslegung von Senkrechtstropfern abzuleiten: Aufgrund des dominierenden Einflusses des Abtropfradius R auf das Tropfenvolumen ist zunächst dieser in Abhängigkeit vom gewünschten Tropfenvolumen festzulegen. Anschließend kann durch die gezielte Variation der weiteren genannten Größen (r_1 , r_L , L_2 , $\frac{l_1+l_2+l_3}{L_1}$) der Volumenstrom an die gestellten Anforderungen bzgl. der Tropfenbildungszeit angepasst werden. Zur Vereinfachung der Auslegung empfiehlt sich an dieser Stelle jedoch die Reduktion der Variation auf den Radius r_1 , da dieser gemäß dem vorangegangenen Abschnitt den größten Einfluss auf die Tropfenbildungszeit hat; die übrigen geometrischen Größen können dabei konstant gehalten werden und die Auslegung von Senkrechtstropfern reduziert sich auf zwei seriell zu durchlaufende Schritte.

Ein Ansatz zur Realisierung dieser Auslegung ist in Abbildung 5.17 dargestellt: Für ein definiertes Fluid (hier: Wasser bei 25 °C) ist sowohl das Tropfenvolumen (schwarz) abhängig vom Radius R als auch die Tropfenbildungszeit (grau) für verschiedene Radien r_1 abgebildet. Zur Festlegung der geeigneten geometrischen Größen ist nun zunächst der Radius R in Abhängigkeit vom gewünschten Tropfenvolumen und anschließend der Radius r_1 abhängig von R und der gewünschten Tropfenbildungszeit festzulegen. Nachteil dieser vergleichsweise einfachen Methode ist, dass für jedes Fluid (und jede Temperatur) ein eigenes Diagramm erforderlich ist. Allgemein gültiger (aber auch aufwendiger in der Realisierung) wäre die Umsetzung der Auslegung mithilfe des in Abschnitt 5.3 vorgestellten Berechnungsansatzes im Rahmen einer Software.

Beispiel zur Auslegung eines Senkrechtstropfers mithilfe von Abbildung 5.17:

Anforderungen:

- Tropfenvolumen: 60 mm³
- Tropfenbildungszeit: 900 ms = 0,9 s

Grafische Auslegung:

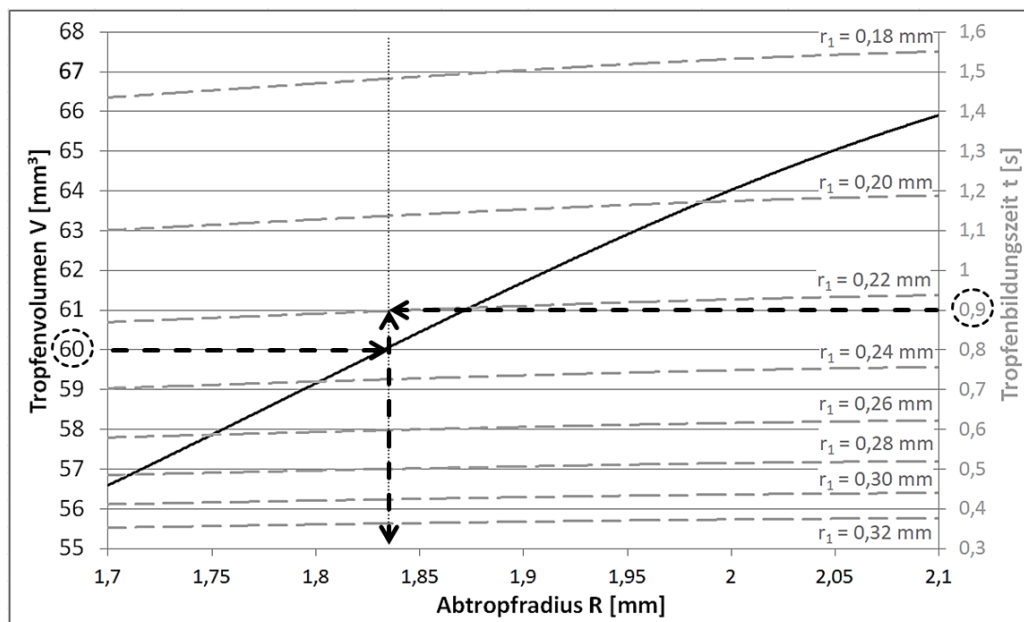


Abbildung 5.17: Beispiel zur Auslegung eines Senkrechtropfers (für Wasser bei 25 °C)

Ergebnis:

1. Abtropfradius R , ausgehend vom geforderten Tropfenvolumen: $R = 1,84 \text{ mm}$
2. Tropfkanal-Radius r_1 , ausgehend vom Abtropfradius R und der geforderten Tropfenbildungszeit: $r_1 = 0,22 \text{ mm}$

5.6 Zusammenfassung

Im Rahmen dieses Kapitels ist der neu hergeleitete Ansatz zur Berechnung des Tropfenvolumens und der Tropfenbildungszeit aus Kapitel 4 auf Senkrechtropfer zur Dosierung flüssiger Medikamente übertragen und verifiziert worden. Tropfenvolumen und Tropfenbildungszeit waren dabei gemäß den Anforderungen des Europäischen Arzneibuchs die entscheidenden Größen zur Charakterisierung der Tropfendosierung flüssiger Medikamente (vgl. Abschnitt 1.1.2 bzw. [15, 16]).

Im ersten Abschnitt dieses Kapitels ist zunächst der geometrische Aufbau eines Senkrechtropfers kurz erklärt und gegenüber der vergleichsweise einfachen Geometrie einer Glaskapillare abgegrenzt worden. Anschließend erfolgte eine allgemeine Beschreibung des Tropfprozesses an Senkrechtropfern. Darin wurde u.a. aufgezeigt, welche Rolle die Blasenbildung im gesamten System aus Senkrechtropfer und Flasche spielt und wie sich diese auf die Druckverhältnisse

innerhalb der Tropfflasche auswirkt: Während der Blasenbildung stellt sich abhängig vom Luftvolumen in der Flasche ein mit der aktuellen Blasengröße variierender Unterdruck ein. Dieser wird vom austropfenden Fluid erzeugt und sorgt dafür, dass Blasen zum Volumen- bzw. Druckausgleich in die Flasche gezogen werden; in Abschnitt 5.2.2 ist daraus eine allgemeine, ausschließlich von der Geometrie des Tropfers (Tropfkanal, Luftrohr) und den Eigenschaften der Fluide, v.a. der Oberflächenspannung, abhängige Bedingung (vgl. Gleichung (5.7)) abgeleitet worden; diese muss erfüllt sein, damit ein Senkrechttropfer überhaupt Tropfen abgeben kann.

In Abschnitt 5.3 ist ausgehend vom allgemeinen Ansatz zur Berechnung von Tropfen aus Abschnitt 4.2 ein Ansatz zur Berechnung von Tropfvorgängen an Senkrechttropfern abgeleitet worden. Im Rahmen dieser Übertragung musste v.a. die Volumenstromberechnung angepasst werden; Grund dafür war zum einen die komplexere Geometrie des Tropfkanals gegenüber Glaskapillaren und zum anderen die Blasenbildung am Luftrohr. Die am Tropfen angreifenden Kräfte sowie die Modellierung des Tropfens mithilfe der Pendant Drop Methode gelten unverändert.

Im vierten Teil des Kapitels ist der übertragene Berechnungsansatz mithilfe von Messungen an unterschiedlichen Tropfsystemen und Fluiden sowie mithilfe von numerischen Simulationen verifiziert worden. Dazu ist der Berechnungsansatz zum einen exemplarisch mit Messreihen an den Messaufbauten nach Wolf und Hummel sowie numerischen Simulationen verglichen worden; die Abweichungen zwischen Rechnung und Messung betragen maximal $\pm 8,1 \%$ für das Tropfenvolumen und $\pm 18,4 \%$ bezogen auf die Tropfenbildungszeit, berechnet aus dem mittleren Volumenstrom $\dot{V}$. Zum anderen wurden die eben genannten Abweichungen anhand einer Fehlerabschätzung den einzelnen Annahmen bzw. Vereinfachungen, die während der Herleitung des Berechnungsansatzes gemacht worden sind, zugeordnet. Abschließend sind die Ergebnisse weiterer Messreihen kurz zusammengefasst und dabei auftretende Besonderheiten (z.B. Schwingungen des Tropfens) diskutiert worden.

Abgeschlossen wird das Kapitel durch die Analyse des Einflusses der einzelnen geometrischen und stofflichen Größen auf die Tropfenbildung sowie die Identifikation der wichtigsten Einflussgrößen: Dabei hat sich gezeigt, dass das Tropfenvolumen im Wesentlichen durch den Abtropfradius R und die Tropfenbildungszeit durch den Radius r_1 bestimmt wird. Aufbauend auf diesen Erkenntnissen ist der angestrebte Ansatz zur Auslegung von Senkrechttropfern bei Verwendung mit einem definierten Fluid vorgestellt und anhand eines einfachen Beispiels veranschaulicht worden.

Kapitel 6

Optimierung medizinischer Senkrechttropfer

Im Rahmen des vorangegangenen Kapitels sind die Funktionsweise sowie die damit verbundenen Besonderheiten beim Tropfen- und Blasenbildungsprozess in medizinischen Senkrechttropfern besprochen worden. Darauf aufbauend ist der in Kapitel 4 hergeleitete, verhältnismäßig einfache Ansatz zur Tropfenberechnung auf die Berechnung solcher Systeme adaptiert und anhand von Messungen und Simulationen verifiziert worden. Abschließend wurden aus dem Berechnungsansatz die Einflussgrößen auf die Tropfenbildung ermittelt bzw. quantifiziert und mithilfe der relevanten Größen R und r_1 ein Ansatz zur Auslegung von Tropfendosiersystemen abgeleitet. Im Folgenden werden die gewonnen Erkenntnisse auf den praktischen Einsatz von Tropfendosiersystemen übertragen und ausgehend von den Problemen, die die Verwendung solcher Systeme mit sich bringt, existierende und neue Ansätze zur Optimierung vorgestellt.

6.1 Probleme mit bzw. Schwachstellen von Senkrechttropfern in der Praxis

In Kapitel 1, insbesondere in Abschnitt 1.1.4, sind bereits der Einsatz von Tropfendosiersystemen im Alltag sowie die dabei auftretenden Ungenauigkeiten vorgestellt worden. Im Folgenden sollen darauf aufbauend die häufigsten Fehlerursachen beim Umgang mit solchen Systemen abgeleitet bzw. zusammengefasst werden; eine ausführliche Fehleranalyse kann bei Beißbarth [56] nachgelesen werden.

Eines der grundlegendsten Probleme beim Umgang mit Tropfendosiersystemen für flüssige Medikamente ist die fehlerhafte Handhabung der Systeme. Für eine korrekte Handhabung ist es erforderlich, den Unterschied zwischen Senkrecht- und Randtropfer zu kennen (vgl. Ab-

schnitt 1.1.3); in der Praxis ist dieser Unterschied jedoch nur ca. einem Viertel der Anwender bekannt [4, 24] und kann zu Fehldosierungen von bis zu 25 % führen, wenn z.B. ein Senkrechttropfer schräg gehalten wird [24, 25]. Weiterhin können sich bei unsachgemäßer Lagerung, z.B. bei falschen Temperaturen, unter Einwirkung von Licht oder UV-Strahlung oder durch Erschütterungen, die Stoffeigenschaften und Zusammensetzungen der Medikamente (und Tropfer) verändern (Alterungserscheinungen) [30, 56]. Hauptursache für die fehlerhafte Handhabung ist die mangelhafte Information des Nutzers bzw. Kennzeichnung der Dosiersysteme in Form von mangelhaften Packungsbeilagen und fehlenden Hinweisen auf den Flaschen [15, 24, 26]. Verstärkt wird dieser Effekt oftmals noch durch die Verwendung von Generika (vgl. Abschnitt 1.1.4), die eventuell anders gehandhabt werden müssen als das Originalmedikament. Dazu kommen weiterhin der oft schlechte körperliche Zustand, der die Einnahme von Medikamenten erfordert, sowie die damit verbundene Unachtsamkeit und Ungeduld der Anwender.

Ein weiteres zentrales Problem bei der Verwendung von Senkrechttropfern ist deren Auslegung. Diese umfasst neben der Konstruktion und Materialauswahl v.a. die Einstellung der gewünschten Tropfengröße und -bildungszeit unter Berücksichtigung der fluidischen Stoffgrößen (Dichte, Viskosität, Oberflächenspannung) der zu dosierenden Medikamente sowie der Flaschengröße [56]. Gemäß einem Interview mit einem Produktmanager eines Herstellers von Tropfendosiersystemen, welches im Rahmen der Arbeit von Blaser [30] durchgeführt worden ist, sowie weiterer Rücksprachen mit Herstellern im Rahmen der Studienarbeiten von Bartnik-Thumm [17] und Blaser [30], werden Tropfendosiersysteme auch heute noch mithilfe von Erfahrungswerten und durch (einfaches) Ausprobieren ausgelegt. Dazu müssen i.d.R. mehrere hundert Tropfer vorrätig gehalten werden, um alle Fluide dosieren zu können [119]. Bei dieser Art der Auslegung kommt es oftmals zu Fehlern, die sich im einfachsten Fall in der Nichteinhaltung der Vorgaben des Arzneibuchs [15, 29, 30] zeigen. Weiterhin kann es aber z.B. auch zur Bildung zusätzlicher Tropfen am Rand eines (korrekt gehaltenen) Senkrechttropfers kommen [119]; die Ursache dafür ist Flüssigkeit, die durch das Luftrohr ausläuft. Unglücklicherweise werden auch bekannte fehlerhafte Systeme oft nicht korrigiert, da Änderungen immer mit kostenintensiven und langwierigen Zulassungsprozessen einhergehen [4, 30].

Neben Fehlern in Konstruktion und Auslegung der Systeme haben Fehler bzw. Ungenauigkeiten in der Produktion, z.B. Toleranzen oder Schwankungen in der Oberflächenqualität, erheblichen Einfluss auf das Tropfverhalten [56]. In Abschnitt 5.2 wird der große Einfluss der Blasenbildung auf das Tropfenbildungsverhalten und somit die exakte Dosierung der Medikamente beschrieben. Ändert sich diese Blasenbildung z.B. aufgrund von Abweichungen zwischen unterschiedlichen Produktions-Chargen gleicher Tropfaufsätze, können Änderungen im Dosiervorgang auf-

treten. Weiterhin wurden im Rahmen der Voruntersuchungen zu den in Abschnitt 5.4 vorgestellten Messungen Produktionsrückstände an den Luft-Auslass-Öffnungen der Senkrechttropfer (vgl. Abbildung 6.1) festgestellt, die ebenfalls zu einer nicht-prognostizierbaren Veränderung der Blasenbildung führen.

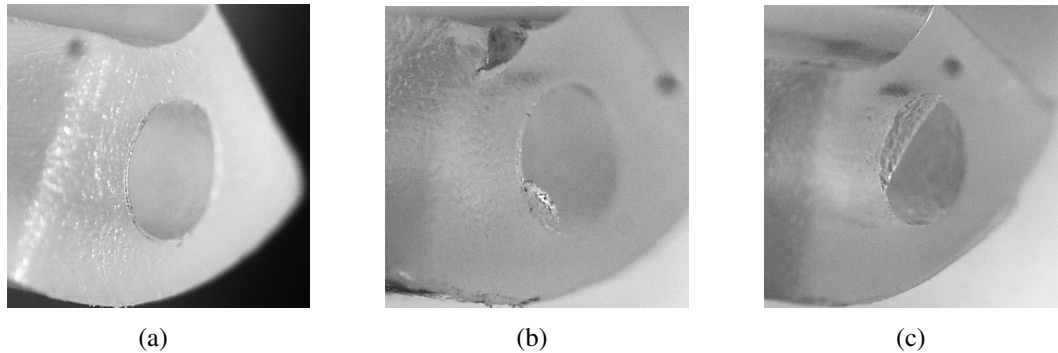


Abbildung 6.1: Produktionsrückstände an der Luft-Auslass-Öffnung (Radius $r_L = 1,0$ mm) von Senkrechttropfern: (a) keine Rückstände; (b) geringe Rückstände; (c) große Rückstände

Selbst wenn das Dosiersystem korrekt ausgelegt und produziert sowie dem Anwender die korrekte Nutzung seines Dosiersystems bekannt ist, kann es aufgrund technischer Einschränkungen des Konzepts der Senkrechttropfer zu Problemen und Fehlern kommen. Aufgrund von Flüssigkeit im Luftrohr [5, 6, 7, 24, 25] oder Luft im Tropfkanal [6] (beide Effekte konnten auch im Rahmen der eigenen Untersuchungen festgestellt werden) und den damit einhergehenden Änderungen der Drucksituation im Tropfsystem, kann es bei Senkrechttropfern prinzipiell zu Schwierigkeiten beim Antropfen kommen. In beiden Fällen ist es dem System manchmal nicht möglich den Tropfprozess zu beginnen und Tropfen / Blasen im Luftrohr bzw. Tropfkanal müssen durch leichtes Klopfen auf den Flaschenboden gelöst werden. Dabei ist darauf zu achten, dass nicht zu stark geklopft wird, um Fehldosierungen aufgrund der Impulse, die durch das Klopfen in das System eingebracht werden, zu vermeiden [5, 6, 7, 24, 25]. Setzt sich im flüssigkeitsgefüllten Luftrohr zusätzlich noch eine Blase fest (eigene Beobachtungen) ist ein Antropfen des Systems auch mit Klopfen nahezu nicht erreichbar.

Das Problem der Verstopfung des Luftrohrs durch Flüssigkeit und eine oder mehrere Blasen tritt i.d.R. beim Drehen der Flasche in die senkrechte Tropfposition auf. Dabei läuft Flüssigkeit sowohl in den Tropfkanal als auch in das Luftrohr bis der Unterdruck, der dadurch in der Flasche entsteht, den Fluss stoppt. Im Normalfall überwiegt in diesem Zustand der antreibende hydrostatische Druck der Strömung durch den Tropfkanal gegenüber dem Druck im Luftrohr und der Fluss setzt sich ausschließlich im Tropfkanal fort. Dadurch sinkt der Druck im Luftvolumen in der Flasche weiter und führt dazu, dass die Flüssigkeit wieder aus dem Luftrohr in die Flasche gezogen wird und die Blasenbildung einsetzen kann. Stellt sich jedoch ein Gleichgewicht zwischen der Flüssigkeit im Tropfkanal und der im Luftrohr ein (z.B. aufgrund von

Oberflächeneffekten), ist die grundlegende Tropfbedingung (5.7) nicht mehr erfüllt und es tritt der angesprochene Effekt der Verstopfung des Luftrohres auf: Im Luftrohr selbst hat sich dabei ein Gleichgewicht zwischen der nach oben wirkenden Kraft F_{oben} aufgrund des Unterdrucks im Luftvolumen in der Flasche und der Summe der nach unten wirkenden Kräfte F_{unten} (Schwerkraft, Kraft aufgrund des Kapillareffektes) eingestellt (vgl. Abbildung 6.2 (a)). Durch leichtes Klopfen auf den Flaschenboden lässt sich nun v.a. die Strömung durch den Tropfkanal bzw. ein Tropfenabriss erzwingen. Dies führt wiederum zu einem Absinken des Drucks in der Flasche und somit zu einer Überwindung des Kräfte-Gleichgewichts im Luftrohr: Die Kraft nach oben aufgrund des Unterdrucks überwiegt, die Flüssigkeit kann mit der Geschwindigkeit v aus dem Luftrohr zurück in die Flasche strömen und die Blasenbildung kann einsetzen (vgl. Abbildung 6.2 (b)).

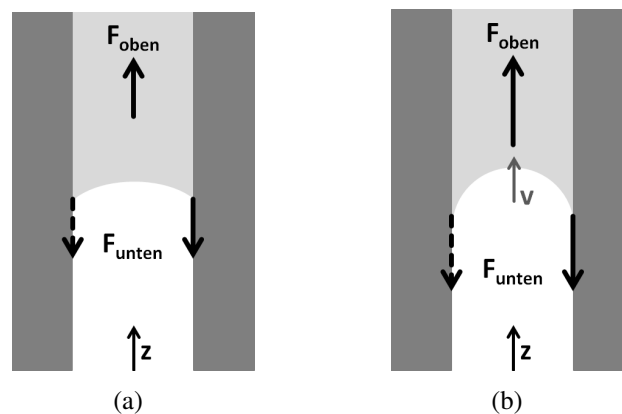


Abbildung 6.2: Schematische Darstellung der Kräfte auf Flüssigkeit im Luftrohr: (a) Gleichgewicht; (b) Bewegung

In zwei Fällen reicht jedoch auch leichtes Klopfen auf den Flaschenboden nicht mehr aus (Vorsicht: Durch starkes Klopfen oder Schütteln kommt es zu Fehldosierungen!):

1. Die Flüssigkeit ist so weit in das Luftrohr eingeströmt, dass die Tropfbedingung in Gleichung (5.7) auch durch Klopfen nicht mehr erfüllt werden kann. Ist die Flüssigkeit außerdem bereits wieder aus der Unterseite des Luftrohres ausgeströmt, kann dies zur Ausbildung einer komplexen Tropfer-Flüssigkeits-Luft-Grenzfläche mit dadurch verstärkten Oberflächen-Effekten führen, die eine Bewegung der Flüssigkeit zurück durch das Luftrohr verhindern.
2. Befindet sich in der Flüssigkeit im Luftrohr eine Blase (vgl. Abbildung 6.3 (a)) wirkt diese aufgrund der Kontaktwinkelhysterese [44] und der damit einhergehenden Veränderung der Krümmungsradien (vgl. Abbildung 6.3 (b)) wie ein Widerstand und reduziert damit den antreibenden Druck, der zur Bewegung der Flüssigkeit nach oben aus dem Luftrohr hinaus anliegt.



Abbildung 6.3: Schematische Darstellung der Wirkung der Kontaktwinkelhysterese auf eine Blase in der Flüssigkeit im Luftrohr: (a) Blase; (b) Verformte Blase

6.2 Patente

Die Entwicklungsgeschichte des Senkrechtropfers, wie wir ihn heute kennen und wie er im Rahmen dieser Arbeit untersucht wird, beginnt in den 1950-er Jahren mit Patenten von Hans Heinlein und Herbert Brüne. Heinlein [120] beschreibt dabei zunächst allgemein den in Abbildung 6.4 (a) dargestellten Tropfeinsatz mit einem Vorsprung (Nr. 2) zur Tropfenbildung, einer Bohrung (Nr. 7) für den Flüssigkeitsaustritt und dem Rohrstück (Nr. 6) zur Belüftung. Ziel der Entwicklung war die einfache und kostengünstige Herstellung sowie die definierte Tropfenbildung am Vorsprung (Nr. 2).

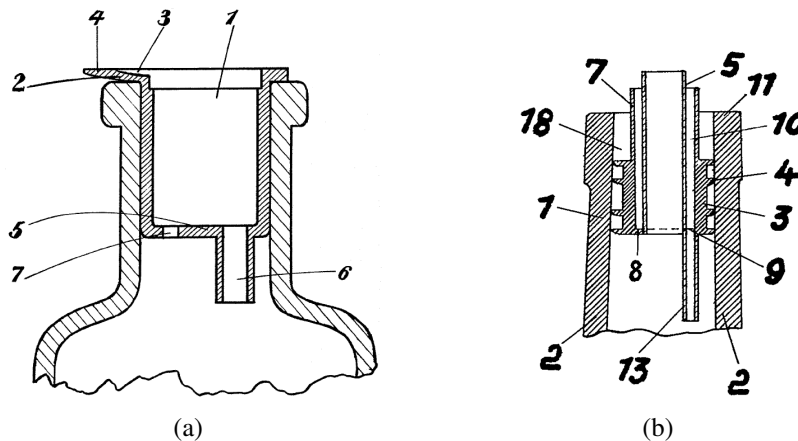


Abbildung 6.4: Erste Patente zu Tropfeinsätzen bzw. Senkrechtropfern (a) Tropfeinsatz nach Heinlein [120]; (b) Senkrechtropfer nach Brüne [121]

Das erste Patent auf einen den heutigen Senkrechtropfern ähnlichen Tropfeinsatz (vgl. Abbildung 6.4 (b)) wurde 1952 von Herbert Brüne angemeldet und beschreibt den Senkrechtropfer mit getrenntem Flüssigkeitsaustritts- (Nr. 5) und Lufteintrittsrohr (Nr. 13), sowie einem zentrisch angeordneten Abtropfring.

Aufbauend auf den beiden beschriebenen Tropfeinsätzen nach Heinlein und Brüne sind von einer Vielzahl von Anmeldern abgeänderte Varianten des Senkrechtstropfers zum Patent angemeldet bzw. genehmigt worden. Diese Änderungen umfassen dabei z.B. Rippen [122] bzw. ringförmig angeordnete Stufen [123] im Tropfenauslass mit dem Ziel der Homogenisierung der Tropfengröße oder Variationen der Geometrie des Tropfkanals [124] bzw. der Tropfenauslassgeometrie [125] zur Einstellung der Tropfengröße bei unterschiedlichen Medien. Eine kurze Übersicht über relevante und interessante Patente zum Thema Senkrechtstropfer kann in Anhang C.1 eingesehen, eine ausführliche Übersicht kann z.B. über das Deutsche Patent- und Markenamt (DPMA) [126] recherchiert werden.

Konkrete Ansätze zur Optimierung von Senkrechtstropfern beschreiben außerdem die Patente „Mehrbereichs-Tropfer“ [119] sowie „Behälterverschluss mit Tropfvorrichtung“ [127]; beide Varianten sind in Abbildung 6.5 dargestellt.

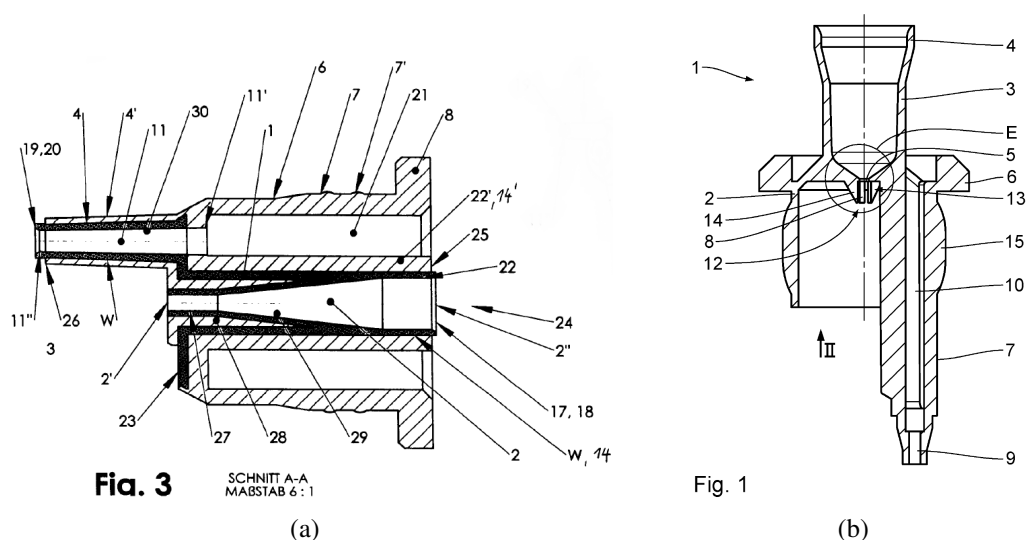


Abbildung 6.5: Patentierte Ansätze zur Optimierung von Senkrechtstropfern: (a) Tropfer aus zwei Materialien nach Ahrens [119]; (b) Tropfeinsatz der Heinlein Plastik-Technik GmbH [127]

In Abbildung 6.5 (a) ist ein Tropfer aus zwei unterschiedlichen Materialien (Herstellung im Mehrkomponenten-Spritzguss) mit einem hydrophilen Innenteil (Nr. 1) und einem hydrophoben Außenteil (Nr. 6) dargestellt. Ziel der Erfindung ist das Sicherstellen des hydrophilen Verhaltens innerhalb des Tropfkanals (Nr. 14) und damit die Gewährleistung des Tropfprozesses, der gemäß den Angaben der Erfinder bei hydrophoben Materialien nicht uneingeschränkt gewährleistet werden kann [119]. Dies deckt sich prinzipiell mit den im Rahmen dieser Arbeit vorausgesetzten Rahmenbedingungen (vgl. Abschnitt 1.3) und angestellten Überlegungen; die durchgeführten Untersuchungen und Messungen haben aber keine Hinweise auf hydrophobes Verhalten bei den beschafften Senkrechtstropfern geliefert.

Abbildung 6.5 (b) beschreibt einen Tropfer (Nr. 1), bei dem mithilfe von Rippen- bzw. Ramentelementen (Nr. 8 / 12 / 14) um den Eingang zum Tropfkanal Feststoffe aus der Flüssigkeit gefiltert werden. Dadurch wird vermieden, dass Feststoffe, wie sie im Rahmen von Ausfällungen aus flüssigen Medikamenten bei der Verwendung von Tropfendosiersystemen durchaus vorkommen können, in den Tropfkanal (Nr. 3) gelangen und diesen verstopfen.

Aus den hier sowie in Anhang C.1 vorgestellten Patenten zeigt sich, dass im Laufe der letzten 70 Jahre eine Vielzahl von Ideen zur Optimierung von Tropfendosiersystemen entstanden und in Form von Patenten umgesetzt worden sind. Betrachtet man im Vergleich dazu die Senkrechtropfer, die heute mit flüssigen Medikamenten vertrieben werden (vgl. z.B. [30]), stellt man jedoch fest, dass kaum ein Ansatz tatsächlich realisiert worden ist. Weiterhin bietet keiner der Ansätze eine technisch und / oder wirtschaftlich überzeugende Lösung des u.a. in Abschnitt 6.1 vorgestellten Problems der Verstopfung von Luftrohr und Tropfkanal durch eingeströmte Flüssigkeit, Blasen und Tropfen. Optimierungsansätze hierzu sollen daher im Anschluss an die Vorstellung von Hilfsmitteln zur Dosierung präsentiert werden.

6.3 Hilfsmittel zur Tropfendosierung

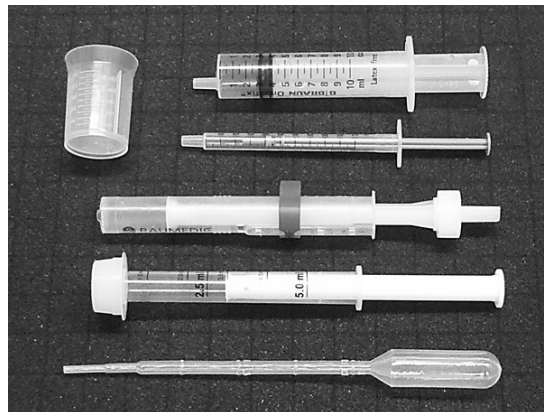


Abbildung 6.6: Hilfsmittel zur Unterstützung der Dosierung flüssiger Medikamente (angelehnt an Mehlhorn [7])

Tropfsysteme zur Dosierung von Flüssigkeiten sind, wie bereits erwähnt, ein sehr weit verbreitetes Hilfsmittel zur Dosierung flüssiger Medikamente. Dennoch bringt das Hilfsmittel Senkrechtropfer, wie in Abschnitt 6.1 beschrieben, immer noch einige Probleme mit sich, weshalb teilweise weitere Hilfsmittel zu Unterstützung der Dosierung angeboten werden (vgl. Abbildung 6.6). Nach Mehlhorn [7] gibt es diesbezüglich z.B. die Möglichkeit, die abgezählten Tropfen anstatt auf einem einfachen Löffel in einem Messlöffel bzw. -becher mit geeigneter Skala zu sammeln und somit die Dosierung über das abgegebene Volumen zu kontrollieren

bzw. durchzuführen. Bei diesem Ansatz kommt es jedoch wiederum zu Ablesefehlern und somit Ungenauigkeiten bei der Dosierung aufgrund der Krümmung der Oberfläche der Flüssigkeit (vgl. Abschnitt 1.1.1). Weiterhin besteht die Möglichkeit, mithilfe von Pipettenmonturen oder Dosierspritzen zu dosieren. Diese sind ebenfalls mit einer geeigneten Skala zur Dosierung über das Volumen ausgestattet und ersetzen den Tropfaufsatz entweder vollständig oder werden in Kombination mit diesem eingesetzt. Dabei wird die Spritze auf oder in das Tropfloch des Tropfaufsatzes gesetzt, anschließend werden Flasche und Spritze kopfüber gehalten und das gewünschte Volumen aus der Flasche gezogen. Nachteil dieser Verfahren bzw. Systeme ist v.a. der im Vergleich zu Senkrechttropfern hohe Preis.

6.4 Optimierungsansätze

In den Abschnitten 6.1 bis 6.3 sind sowohl Probleme, als auch erste Ansätze der Optimierung bzw. Unterstützung von Tropfendosiersystemen vorgestellt worden. Im Folgenden sollen darauf aufbauende Ansätze zur Optimierung der Dosierung mithilfe von Senkrechttropfern abgeleitet werden.

6.4.1 Grundlegende Konzepte

Eines der zentralen Probleme bei der Verwendung von Tropfendosiersystemen im Alltag ist die fehlerhafte Handhabung der Dosiersysteme durch den Anwender bzw. Patienten. Die Vermeidung dieses Problems lässt sich verhältnismäßig einfach mithilfe einer besseren Kommunikation der richtigen Handhabung gegenüber dem Nutzer realisieren. Dies umfasst sowohl eine ausführliche Information beim Kauf des Medikaments (z.B. in der Apotheke) einschließlich der notwendigen Hinweise zur Verwendung von Generika als auch die Kennzeichnung der richtigen Handhabung am Medikament selbst; dabei sollte sowohl auf bild- und textbasierte Hinweise auf der Verpackung und im Beipackzettel als auch auf aussagekräftige Piktogramme auf der Flasche des Dosiersystems selbst zurückgegriffen werden.

Neben der Information der Nutzer muss die Auslegung von Tropfendosiersystemen optimiert werden. Dabei ist es v.a. wichtig, dass die Senkrechttropfer zukünftig nicht nur aufgrund von Erfahrungswerten und durch (einfaches) Ausprobieren einem Medikament bzw. einer Flüssigkeit zugeordnet werden. Ein wichtiger Schritt in diese Richtung wird durch den neuen, in Kapitel 5 vorgestellten Berechnungsansatzes gemacht: Mithilfe dieses Ansatzes und der daraus abgeleiteten Einflussgrößen und Design-Empfehlungen (vgl. Abschnitt 5.5) kann das Tropfverhalten beliebiger Flüssigkeits-Tropfer-Kombination prognostiziert und somit die Funktionsfähigkeit der Tropfendosiersysteme im praktischen Einsatz sichergestellt werden.

Um die Funktion des Tropfendosiersystems entsprechend dem Funktionsprinzip des Senkrechtstropfers (vgl. Abschnitt 5.2) reproduzierbar gewährleisten zu können ist es außerdem erforderlich, den Herstellungsprozess dahingehend anzupassen bzw. zu optimieren, dass alle produzierten Tropfer eines Typs hinsichtlich Geometrie und Material gleich sind. Grate und Produktionsrückstände, wie sie in Abbildung 6.1 dargestellt sind, können z.B. durch eine Optimierung des Spritzgussprozesses oder eine anschließende kurze Wärmebehandlung der hergestellten Tropfer vermieden werden.

Abgesehen von der Auslegung des Tropfsystems unter Zuhilfenahme des vorgestellten Berechnungsansatzes handelt es sich bei den bisher vorgestellten Punkten um relativ einfach umzusetzende Ansätze, die v.a. zu einem besseren und reproduzierbareren Umgang mit Tropfendosiersystemen führen. Mithilfe des Berechnungsansatzes ist eine Auslegung von Tropfendosiersystemen mit Senkrechtstropfern abhängig von den gestellten Anforderungen möglich. Darüber hinaus werden in Abschnitt 6.1 Probleme hinsichtlich der Verstopfung von Luftrohr und Tropfkanal, die auf der heutigen Umsetzung des Prinzips des Senkrechtstropfers selbst basieren, angesprochen; dabei ist v.a. die vollständige Verstopfung des Luftrohres durch Flüssigkeit und eine oder mehrere Blasen kritisch. Im folgenden Abschnitt sollen daher detailliertere Ansätze zur Vermeidung dieser Einschränkung vorgestellt werden; Grundlage dafür ist die Arbeit von Würtenberger [128].

6.4.2 Optimierung des Luftrohres an Senkrechtstropfern

Zur Vermeidung der vollständigen Verstopfung des Luftrohres durch Flüssigkeit und Blasen ist die Gestaltung des Luftrohres von entscheidender Bedeutung. Für die Auslegung von Tropfendosiersystemen ist gemäß den Berechnungsansätzen in Kapitel 5 jedoch lediglich der Radius r_L relevant. Der Einfluss der Form des Luftrohres auf Tropfenvolumen und Tropfenbildungszeit ist dagegen vernachlässigbar, was eine Variation der Form zur Vermeidung der vollständigen Verstopfung ohne Beeinflussung des Tropfverhaltens erlaubt.

Die Öffnung des Luftrohres definiert im Wesentlichen die Kraft, mit der die Blase aufgrund der Oberflächenspannung am Luftrohr haftet. Diese Kraft ist dabei vom kleinsten auftretenden Radius der Blase abhängig. Grundsätzlich sind eine Vielzahl von Formen denkbar, an denen sich die Blase bildet. Bei all diesen Formen muss jedoch beachtet werden, dass die Blase immer den Zustand geringster Energie (kleine Oberfläche, großes Volumen) anstrebt, d.h. eine Blase wird immer Rundungen und nie scharfe Kanten aufweisen. Berücksichtigt man dies, ergibt sich, dass alle Öffnungen mit Ecken, z.B. Öffnungen mit dreieckiger oder quadratischer Form, ausgehend von den Kanten, runde Blasen ausbilden; lediglich die Vorhersage des Blasenradius wird er-

schwert. Da in der Praxis v.a. eine berechenbare und verlässlich reproduzierbare Blasenbildung wichtig ist, die sich bei einer Änderung der äußeren Einflüsse nicht ändert, sollen im Rahmen der folgenden Überlegungen ausschließlich runde Öffnungen des Luftrohrs berücksichtigt werden.

Untersuchungen haben außerdem gezeigt, dass beim Drehen des Tropfendosiersystems in die Tropfposition sowie beim Tropfvorgang selbst immer etwas Flüssigkeit in das Luftrohr einströmt (vgl. Abschnitt 6.1). Genauere Analysen von Würtenberger [128] haben diesbezüglich ergeben, dass bei der Gestaltung des Luftrohres eine konische Form ohne Winkel und Kanten auszuwählen ist. Die zulaufende Form führt dazu, dass auch bei in das Luftrohr eingeströmter Flüssigkeit die Tropfbedingung aus Gleichung (5.7) erfüllt werden kann: Durch das Eindringen der Flüssigkeit reduziert sich zwar die effektiv genutzte Länge L_2 , durch die konische Form steigt aber auch der Radius der Luft-Flüssigkeits-Grenzfläche im Luftrohr, was zu einer Reduktion von p_{Blase} führt. Abrupte Winkel und Kanten im Luftrohr ermöglichen außerdem die Ausbildung komplexer und damit stabiler Grenzflächen und somit die Einlagerung von Flüssigkeit im Luftrohr; die Vermeidung von Kanten sollte also angestrebt werden.

Zur Erprobung neuer Design-Konzepte sind diese im 3D-Drucker Titan 1 der Firma Kudo3D Inc. nach dem Prinzip der Stereolithografie gedruckt worden (Auflösung in x- / y-Richtung: $50\text{ }\mu\text{m}$; Schichtdicke: $100\text{ }\mu\text{m}$); als Druckmedium ist das Harz Deep Black der Firma Fun To Do zum Einsatz gekommen [128]. Ein gedruckter Tropfer ist exemplarisch in Abbildung 6.7 dargestellt.



Abbildung 6.7: 3D-gedruckter Senkrechtstropfer, Abmessung analog zu LW-0,6-S2 (vgl. Anhang B.1)

Senkrechtstropfer mit redundantem Belüftungssystem

Eine erste Option zur Vermeidung der Verstopfung des Luftrohrs (vgl. Abschnitt 6.1) ist die Verwendung mehrerer identischer Luftrohre (vgl. Abbildung 6.8 (a)) bzw. Luftrohr-Öffnungen (vgl. Abbildung 6.8 (b)). Ziel dabei ist es, ein redundantes System zu schaffen: Wenn ein Luftrohr bzw. eine Öffnung durch Flüssigkeit und Blasen verstopft ist, kann ein anderes für die

benötigte Belüftung sorgen.

Theoretisch tritt bei der Verwendung redundanter Belüftungssysteme keine Änderung der grundlegenden Tropfbedingung für Senkrechtropfer aus Abschnitt 5.2.2 (Gleichung (5.7)) auf, da der Druck im Luftvolumen der Flasche konstant ist und auf alle Blasen an den jeweiligen Luftrohren gleich wirkt. Im theoretisch idealen Fall kommt es an allen Luftrohren zu einer synchronen Blasenbildung und damit zu einer Erhöhung des Lufteintrags in die Flasche während der Blasenausbildung; dadurch ist der Ausgleich des Unterdrucks in der Flasche auch noch bei größeren Luftvolumina in der Flasche möglich. Gemäß den Ausführungen in Abschnitt 5.2.1 kommt es somit zu einer Verschiebung der Änderung im Blasenbildungsmechanismus hin zu einem größeren Luftvolumen in der Flasche.

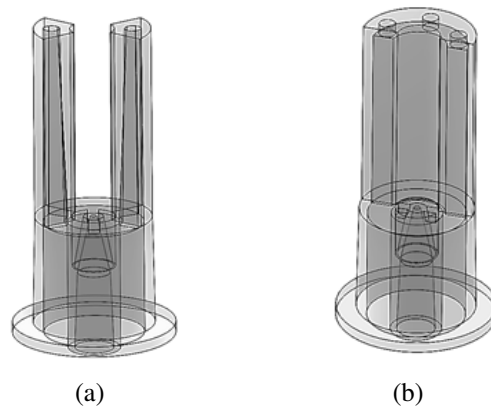


Abbildung 6.8: CAD-Skizzen von Senkrechtropfern mit redundanten Belüftungssystemen [128]: (a) Mehrere Luftrohre; (b) Luftrohr mit mehreren Öffnungen

In der Realität ist es jedoch so, dass aufgrund von Fertigungstoleranzen keine identischen Belüftungsrohre bzw. Öffnungen an einem Tropfer hergestellt werden können. In diesem Fall muss die Blase, die an der größten Öffnung der Luftrohre gebildet wird, gemäß der Young-Laplace-Gleichung (vgl. Gleichung (2.14)) die geringste Druckschwelle überwinden. Ist diese Schwelle überwunden, wächst die Blase und der Druck im Luftvolumen in der Flasche nimmt zu. Dadurch werden jedoch die Blasen an den kleineren Öffnungsradien die für sie kritische Druckschwelle nie überschreiten. In der Praxis findet die Blasenbildung also lediglich an einem Luftrohr bzw. einer Öffnung statt. Eine Verbesserung bzgl. des Problems der Verstopfung kann trotzdem erreicht werden: Durch mehrere Luftrohre, in die beim Kippen Flüssigkeit einströmt, erreicht der Unterdruck im System schneller das benötigte Niveau und es ist mit einer Verbesserung beim automatischen Antropfen der Systeme zu rechnen.

Einfache Ansätze in diese Richtung sind bereits am Markt vorhanden und zeigen prinzipiell die Realisierbarkeit solcher Systeme. Eingesetzt wird ein solcher Senkrechtropfer z.B. im Me-

dikament Novaminsulfon Lichtenstein (vgl. Abbildung 6.9): Das Luftrohr des Tropfaufsatzes ist mit zwei runden Öffnungen und einer entsprechenden Breite ausgestattet. Die zwei Öffnungen des Luftrohres verhalten sich dabei vergleichbar zu zwei getrennten Luftrohren; der Nachteil gegenüber getrennten Luftrohren ist jedoch, dass bei einer Verstopfung des Luftrohres selbst an beiden Öffnungen keine Blasenbildung mehr möglich ist. Gemäß den Untersuchungen von Blaser [30] weist das Tropfendosiersystem ein reproduzierbares und gesetzeskonformes Verhalten auf.



Abbildung 6.9: Tropfaufsatz des Medikaments Novaminsulfon Lichtenstein mit zwei Öffnungen am Luftrohr ($L_2 = 29,7$ mm, $r_L = 0,45$ mm [30]): (a) Tropfaufsatz; (b) Detaillansicht

Aufbauend auf den vorgestellten theoretischen Grundlagen wurden verschiedene Luftrohr-Varianten entworfen, am 3D-Drucker realisiert und erprobt [128]. Dabei hat sich gezeigt, dass Senkrechtstropfer mit getrennten Luftrohren (vgl. Abbildung 6.8 (a)) nicht dazu geeignet sind, einen zuverlässigen Tropfprozess zu realisieren. Ursache dafür ist, dass theoretisch ein Luftrohr ausreicht und somit das zweite Luftrohr in vielen Fällen (abhängig von den genauen Abmessungen der Luftrohr-Öffnungen und der Lage der Öffnungen in der Flasche) als weiterer Tropfkanal fungiert, was zu einem unkontrollierten Ausfluss der Flüssigkeit führt. Belüftungssysteme mit einem Luftrohr und mehreren Öffnungen (vgl. Abbildung 6.8 (b)) dagegen sind, wie bereits das Beispiel des Medikaments Novaminsulfon Lichtenstein zeigt, grundsätzlich funktionsfähig. Bei der Konstruktion weiterer Ansätze unter Berücksichtigung aller Einflussfaktoren wie z.B. Form, Länge und Durchmesser des Luftrohres oder Länge, Durchmesser und Winkel der Öffnungen des Luftrohres, hat sich jedoch gezeigt, dass hier eine Vielzahl an Gestaltungsmöglichkeiten existieren. Aus den durchgeführten Untersuchungen hat sich weiterhin ergeben, dass eine genaue Abstimmung der tatsächlichen Geometrie auf die zu tropfende Flüssigkeit notwendig ist: Der Tropfaufsatz des Medikaments Novaminsulfon Lichtenstein arbeitet mit dem Medikament z.B. einwandfrei; mit Wasser dagegen konnte kein funktionsfähiger Tropfprozess realisiert werden.

Zusammenfassend ergibt sich, dass eine redundante Auslegung des Belüftungssystems sowohl prinzipiell möglich als auch in der Praxis bereits realisiert ist. Allerdings hat sich gezeigt, dass

die Auslegung solcher Systeme mit erheblichem Mehraufwand im Vergleich zur Auslegung von Systemen mit einem Luftrohr verbunden ist; dieser Aufwand übersteigt den zeitlichen Rahmen dieser Arbeit und lohnt sich nur in speziellen Fällen, wie z.B. beim verschreibungspflichtigen Schmerzmittel Novaminsulfon.

Trennung von Flüssigkeit und Blasen im Luftrohr

Ein weiterer Ansatz zur Vermeidung von Verstopfungen aufgrund von Flüssigkeit und Blasen im Luftrohr basiert auf der Trennung von Flüssigkeit und Blase innerhalb des Luftrohres. Das Ziel ist, der Flüssigkeit auch bei festsitzenden Blasen einen definierten und immer verfügbaren Weg zu geben, um nach dem Drehen, d.h. beim Antropfen des Systems, aus dem Luftrohr in die Flasche zurückströmen zu können. Die Öffnung des Luftrohrs wird dabei wiederum rund ausgeführt, um eine berechenbare und reproduzierbare Blasenbildung zu gewährleisten. Insgesamt reicht damit ein einzelnes Luftrohr weiterhin aus. Anders als bei dem im vorangegangenen Abschnitt vorgestellten Ansatz sind keine größeren Änderungen in der Konstruktion und im Fertigungsprozess notwendig. Lediglich bei Verstopfungen, die sich aufgrund eines Gleichgewichts der in das Luftrohr eingeströmten Flüssigkeit und dem Druck im Luftvolumen in der Flasche ergeben, schafft die Verwendung alternativer Luftrohr-Querschnitte keine Abhilfe; diese Funktionsstörungen lassen sich aber wie bisher durch leichtes Klopfen auf den Flaschenboden beheben. Zur Realisierung stehen mit dem StarTube-Konzept [129] und der Verwendung T-förmiger Kanäle [130, 131, 132] prinzipiell zwei Möglichkeiten zur Verfügung. Qualitative Untersuchungen an gedruckten Prototypen haben jedoch gezeigt, dass der StarTube-Ansatz aufgrund zu geringer realisierbarer Abmessungen in der Praxis zu Unterbrechungen und Abbrüchen des Tropfvorgangs führt [128], weshalb an dieser Stelle nur die Verwendung T-förmiger Kanäle vorgestellt werden soll.

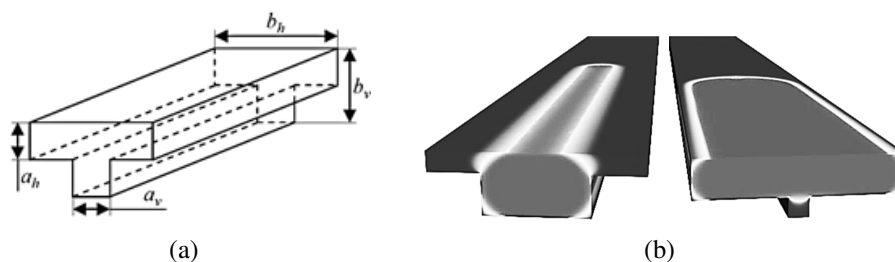


Abbildung 6.10: Blasenausrichtung in T-förmigen Kanälen: (a) Kanal-Geometrie; (b) Blasenausrichtung

Das Konzept zur Verwendung T-Förmiger Kanäle (auch CHIC (Channel in Channel)-Prinzip genannt) basiert auf einem von Kohnle et al. [130] und Litterst et al. [131, 132] vorgestellten Prinzip. Dieses Prinzip nutzt das Bestreben von Blasen und Tropfen, einen Zustand möglichst geringer Energie einzunehmen, d.h. einen Zustand maximalen Volumens bei minimal möglicher

Oberfläche. In Kombination mit einem T-förmigen Kanal führt dieser Effekt dazu, dass sich eine Blase in einem flüssigkeitsgefüllten Kanal bei geeigneter Auslegung entweder in horizontaler oder in vertikaler Richtung, abhängig vom Volumen-Oberflächen-Verhältnis, ausbreitet und somit einen Teil des T-förmigen Kanalquerschnitts frei lässt. Über diese freien Querschnitte kann weiterhin Flüssigkeit durch den Kanal strömen.

In welchem Teil des Kanals sich die Blase genau befindet oder ob die Blase den Kanal vollständig blockiert hängt nach [132] v.a. davon ab, welche Oberfläche O die Blase des Volumens V_{Blase} in Abhängigkeit von der Kanalgeometrie (vgl. Abbildung 6.10 (a)) und dem Kontaktwinkel Θ zwischen Flüssigkeit und Kapillarwand ausbildet; grundsätzlich wird immer ein Minimum angestrebt. Für die Oberfläche bei vertikaler Blasenausrichtung (vgl. Abbildung 6.10 (b) - links) gilt

$$O_v = 2 \cdot a_v \cdot b_v + 2 \cdot \frac{V_{\text{Blase}}}{a_v \cdot b_v} \cdot (a_h + (a_v + b_v - a_h) \cdot \cos(\Theta)), \quad (6.1)$$

bei horizontaler Blasenausrichtung (vgl. Abbildung 6.10 (b) - rechts)

$$O_h = 2 \cdot a_h \cdot b_h + 2 \cdot \frac{V_{\text{Blase}}}{a_h \cdot b_h} \cdot (a_v + (a_h + b_h - a_v) \cdot \cos(\Theta)) \quad (6.2)$$

und bei einer verstopfende Einlagerung der Blase

$$O_c = 2 \cdot (a_v \cdot b_v + a_h \cdot b_h - a_v \cdot a_h) + 2 \cdot \frac{V_{\text{Blase}} \cdot (b_v + b_h)}{a_v \cdot b_v + a_h \cdot b_h - a_v \cdot a_h} \cdot \cos(\Theta). \quad (6.3)$$

Der Aufbau eines Senkrechttropfers mit T-förmigem Luftrohr erfolgte mittels 3D-Druck. Als Ausgangssituation hat dazu der Senkrechttropfer POMPL 0,6 S2 gedient, da sich dieser, wie in Abschnitt 5.4.2 bereits gezeigt, gut für eine Tropfenbildung mit Wasser eignet. Auf den äußeren Abmessungen (b_h, b_v) dieses Tropfers und dem Kontaktwinkels $\Theta = 65^\circ$ [128] zwischen Flüssigkeit und gedrucktem Material aufbauend, sind durch Gleichsetzen der Gleichungen (6.1) und (6.3) bzw. (6.2) und (6.3) aus [132] und Auflösen nach der Kanalgeometrie die in Abbildung 6.11 dargestellten Grenzen zwischen den einzelnen Möglichkeiten der Blasenausrichtung errechnet worden.

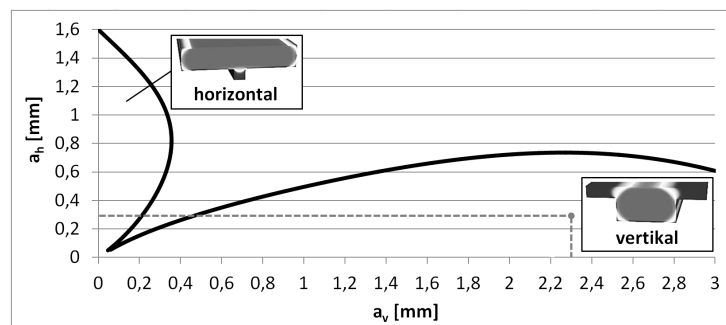


Abbildung 6.11: Auslegung des T-förmigen Luftrohres

Ausgehend von Abbildung 6.11 lassen sich verschiedene Kombinationen ermitteln, die zu einer horizontalen oder vertikalen Blaseneinlagerung führen. Die gestrichelten grauen Linien in Abbildung 6.11 zeigen exemplarisch die Bestimmung der Abmessungen, die zu einer vertikalen Blaseneinlagerung führen und im Rahmen dieser Arbeit Anwendung gefunden haben; die genauen Abmessungen sind in Tabelle 6.1 zusammengefasst. CAD-Skizzen des neuen Senkrechttropfers sowie die Realisierung des T-förmigen Luftrohres mittels 3D-Druck sind in Abbildung 6.12 dargestellt.

Parameter	[mm]	Parameter	[mm]
a_v	2,3	a_h	0,3
b_v	1,6	b_h	4,0

Tabelle 6.1: Abmessungen des T-förmigen Luftrohres im 3D-gedruckten Prototyp

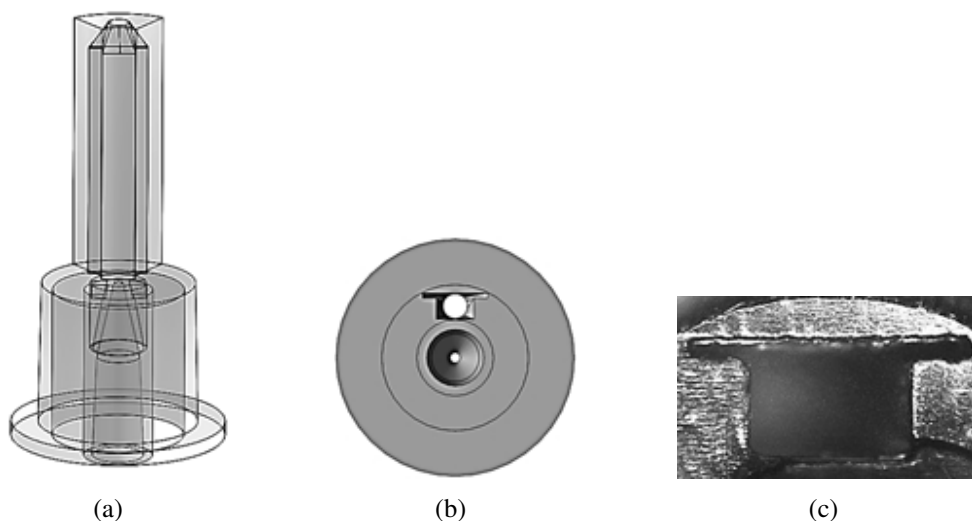


Abbildung 6.12: CAD-Skizze und Realisierung eines Senkrechttropfers mit T-förmigem Kanal im Luftrohr [128]: (a) CAD-Skizze (transparent); (b) CAD-Skizze des Abtropfbereichs; (c) Im 3D-Druck realisierter, T-förmiger Kanal

Zur Beurteilung der Funktion des optimierten Ansatzes (im Folgenden als „Optimierung“ bezeichnet) wird dieser mit dem Tropfer POMPL 0,6 S2 verglichen, da dieser die gleichen äußeren Abmessungen (vgl. Anhang B.1) aufweist und damit theoretisch ein vergleichbares Tropfverhalten zeigt; das Luftrohr ist bei diesem Senkrechttropfer ausgehend von einem Ringsegment zur runden Luftrohr-Öffnung hin zulaufend ausgeführt. Um die Vergleichbarkeit bzgl. der Material- und Oberflächeneigenschaften zu gewährleisten, ist dieser Tropfer (im Folgenden als „Referenz“ bezeichnet) ebenfalls gedruckt worden. Der Vergleich erfolgt hinsichtlich der für die Medikamentendosierung relevanten Größen Tropfenbildung und Antropfverhalten.

Die Analyse der Tropfenbildung im Allgemeinen, d.h. der Tropfenmasse und Tropfenbildungszeit, erfolgt mithilfe einer Messung am Messaufbau nach Hummel (vgl. Abschnitt 3.3). Dazu ist, wie bereits zur Verifikation des Berechnungsansatzes an Senkrechttropfern (vgl. Abschnitt 5.4), eine vollständig gefüllte 50 ml - Flasche eingespannt und der Tropfprozess bis zum Stillstand bei vollständig entleerter Flasche aufgenommen worden. Über die Waage, die Anzahl der Bilder, die Framerate und die Anzahl der erfassten Tropfen können die Tropfenmasse und die Tropfenbildungszeit bestimmt werden [128]; die Ergebnisse sind in Tabelle 6.2 aufgelistet.

	Tropfenmasse	Std.Abw.	Tropfenbildungszeit	Std.Abw.
Einheit	[mg]	[mg]	[ms]	[ms]
Referenz	67,76	1,3198	528,11	33,8143
Optimierung	68,03	1,8784	553,36	35,8381

Tabelle 6.2: Vergleich der Tropfenbildung zwischen Referenz und optimiertem Ansatz bei Verwendung einer 50 ml - Flasche (Anzahl der berücksichtigten Tropfen > 4000) [128]

Tabelle 6.2 zeigt, dass sich das Tropfverhalten bei der Verwendung eines T-förmigen Luftrohres unter Beibehaltung der äußeren Abmessungen im Vergleich zur Referenz nicht bzw. innerhalb der ermittelten Standardabweichungen ändert. Die Verwendung von T-förmigen Kanälen im Luftrohr ist daher prinzipiell möglich, ohne bereits existierende Dosiersysteme neu Auslegen zu müssen.

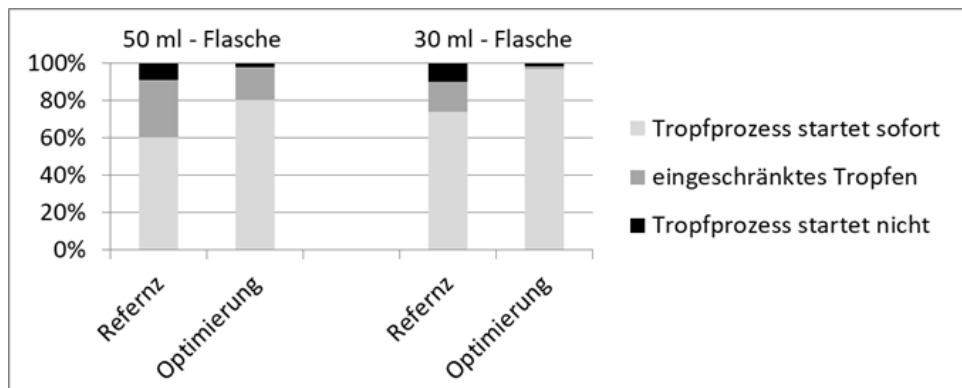


Abbildung 6.13: Vergleich des Antropfverhaltens zwischen Referenz und optimiertem Ansatz (Anzahl der Antropfvorgänge > 170, zwei Operatoren) [128]

Für den Einsatz von Tropfendosiersystemen in der Praxis ist weiterhin das Antropfverhalten und die mit der Drehung der Flasche in die Tropfposition einhergehende Verstopfung durch Flüssigkeit und Blasen im Luftrohr entscheidend. Zur Beurteilung der Optimierung der Belüftung von Senkrechttropfern sind daher Antropfversuche durchgeführt worden [128]. Diese waren dabei angelehnt an die Nutzung von Tropfendosiersystemen in der Praxis: Der Nutzer dreht

die Flasche in Tropfposition, zählt die gewünschte Menge an Tropfen ab und dreht das Tropfsystem wieder zurück in die Ausgangsposition. Die Ergebnisse dieser Antropfversuche sind in Abbildung 6.13 zusammengefasst; unter „eingeschränktem Tropfen“ ist z.B. der verzögerte Start des Tropfprozesses durch Klopfen auf den Flaschenboden oder ein temporäres Stocken des Tropfprozesses, z.B. aufgrund kleinerer Verstopfungen, zu verstehen. In Abbildung 6.13 ist zu erkennen, dass sich das Antropfverhalten für beide Flaschengrößen unter Verwendung des T-förmigen Kanals im Luftrohr verbessert: Sowohl die Fälle mit eingeschränktem Tropfen als auch die Fälle, in denen ein Antropfen nicht möglich ist, nehmen deutlich ab.

Zusammenfassend lässt sich über die Verwendung von T-förmigen Kanälen im Luftrohr also feststellen, dass diese zu einer deutlichen Reduktion der Verstopfung desselben durch Flüssigkeit und / oder Blasen beitragen und damit den für die Dosierung von Medikamenten relevanten Antropfprozess verbessern. Da sich unter Beibehaltung der äußeren Geometrien die Tropfenmasse sowie die Tropfenbildungszeit gemäß den Ansätzen in Kapitel 5 nicht ändert, können Senkrechtstropfer, die auf dem neuen Prinzip basieren, theoretisch ohne aufwendige Neu-Auslegung der Senkrechtstropfer-Flüssigkeits-Flaschen-Kombination eingesetzt werden. In der Praxis muss noch eine Anpassung des neuen Prinzips an den massenproduktionstauglichen Spritzgussprozess, mit dem Tropfendosiersysteme in der Regel hergestellt werden, erfolgen.

6.4.3 Dosierung mit festgestelltem Volumen

Ein weiterer Ansatz zur Optimierung der Dosierung flüssiger Medikamente ist die Dosierung in ein abgeschlossenes, fest eingestelltes Volumen. Die Einstellung des Volumens kann dabei z.B. direkt beim Apotheker erfolgen, was das Risiko einer Fehldosierung durch den Anwender deutlich reduziert. Erste allgemeine Ansätze dazu hat u.a. Faßnacht [133] präsentiert; im Folgenden wird aufbauend auf dieser Grundidee ein Ansatz zur Optimierung von Senkrechtstropfern vorgestellt.

Grundidee: Tropfenbildung in einer Kappe

Zur Vermeidung von Fehldosierungen durch eine fehlerhafte Auslegung des Senkrechtstropfers, falsches Abzählen der Tropfen oder Schütteln kann das Tropfendosiersystem um einen Auffangbehälter mit definiertem Dosiervolumen ergänzt werden. Im einfachsten Fall handelt es sich dabei um eine Kappe (vgl. Abbildung 6.14 (a)), in die das Tropfendosiersystem eingestellt wird (Flasche mit Medikament und Senkrechtstropfer, vgl. Abbildung 6.14 (b)); grundsätzlich sind aber auch geschraubte oder auf ein individuelles Dosiervolumen einstellbare Konstruktionen (z.B. mithilfe von Anschlägen oder Rasten) denkbar. Der Tropfprozess findet dann innerhalb der Kappe statt und stoppt automatisch, wenn diese vollständig, d.h. bis zum Tropfer,

gefüllt ist. Nach dem Entnehmen des Tropfendosiersystems aus der Kappe bleibt die dosierte Flüssigkeit in der Kappe zurück (vgl. Abbildung 6.14 (c)); das dosierte Volumen ergibt sich dabei aus den Abmessungen bzw. dem Leervolumen in der Kappe. Weiterhin ermöglicht eine nicht-benetzende (hydrophobe) Ausgestaltung der Kappen-Innenseite sowie der Unterseite des Senkrechttropfers ein vollständiges Entleeren des dosierten Volumens.

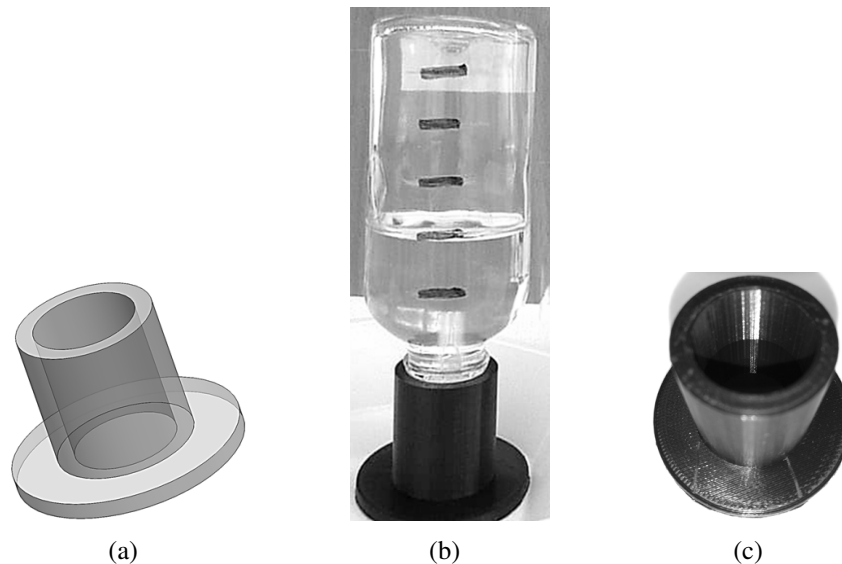


Abbildung 6.14: Optimierung mithilfe eines definierten Auffangbehälters (Innenradius $r = 9$ mm, Höhe $H = 28$ mm): (a) CAD-Skizze der Kappe (transparent); (b) Tropfsystem mit 3D-gedruckter Kappe; (c) 3D-gedruckte Kappe (gefüllt)

Zur Auslegung des Dosiervorgangs kann mithilfe der in Abschnitt 5.3 und 5.5 vorgestellten Tropfenberechnung und Einflussgrößen das Tropfverhalten abgeschätzt werden. Dabei ist grundsätzlich darauf zu achten, ein „langames“ Dosiersystem, d.h. eine hohe Tropfenbildungszeit, zu erreichen, um zu vermeiden, dass sich während der Entnahme des Tropfendosiersystems aus der Kappe weitere Tropfen ablösen und damit die Dosierung verfälschen. Grundsätzlich ergibt sich ein solches „langames“ Dosiersystem z.B. durch die Kombination eines kleinen Tropfkanal-Radius r_1 und einer hohen Viskosität η des tropfenden Fluids; ein Beispiel dafür ist die Verwendung des Senkrechttropfers POMPL 0,6 S2 (vgl. Anhang B.1) in Kombination mit Glycerin (25 °C, vgl. Tabelle 2.1). Aufbauend auf dem Dosiervolumen (z.B. 3 ml), dem Tropfenvolumen (z.B. 37,66 mm³) sowie der Tropfenbildungszeit (z.B. 29,46 - 45,55 s) lässt sich außerdem die Dosierzeit (z.B. 39,15 - 60,53 min) prognostizieren. Der Fehler, falls sich beim Entnehmen der Tropfflasche aus der Kappe doch ein Tropfen löst, lässt sich ebenfalls aus dem Dosiervolumen und dem Tropfenvolumen abschätzen und beträgt im Beispiel 1,3 %.

Die durchgeführten Messungen (gemessene Dosierzeit: 47,18 - 50,80 min) mit dem in Abbildung 6.14 (b) abgebildeten Aufbau bestätigen grundsätzlich die angestellten Überlegungen: Die

Dosierung mithilfe einer Kappe ermöglicht die Abgabe eines voreingestellten Volumens und liefert somit eine Erhöhung der Dosiergenauigkeit bei der Eigenmedikation mit flüssigen Medikamenten; der Ansatz zur Berechnung von Tropfvorgängen kann dabei zur Abschätzung des Dosierverhaltens herangezogen werden. Weitere Vorteile sind die intuitive und einfache Handhabung, die einfache und kostengünstige Herstellung der Kappe sowie deren Wiederverwendbarkeit. Die einzige prinzipielle Änderung zu bestehenden Systemen resultiert aus der hohen Tropfenbildungszeit und der damit einhergehenden hohen Dosierzeit (einige Minuten bis wenige Stunden); da Medikamente aber i.d.R. maximal fünf mal täglich einzunehmen sind, stellt dies in der Anwendung kein Problem dar.

Anmerkungen / Besonderheiten

Bei genauerer Analyse der durchgeführten Untersuchungen hat sich gezeigt, dass es sich beim Füllen des Auffangbehälters nicht, wie oben angenommen, um einen reinen Tropfprozess handelt: Mit steigender Flüssigkeit in der Kappe treffen wachsende Tropfen auf die Oberfläche der Flüssigkeit, werden von der Kapillare „abgezogen“ und erreichen so nicht mehr ihre volle Größe. Mit dem weiteren Anstieg der Flüssigkeit bildet sich außerdem eine dauerhafte Verbindung zwischen Tropfer und Flüssigkeit aus (vgl. Abbildung 6.15), d.h. es findet keine Tropfenbildung mehr statt.

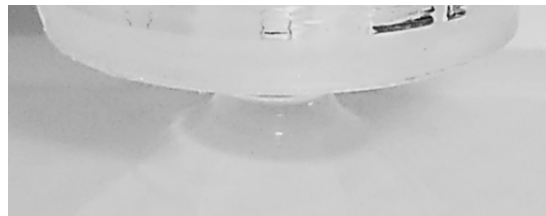


Abbildung 6.15: Verbindung zwischen Tropfer und Oberfläche der Flüssigkeit

Die Berücksichtigung dieser Effekte bzw. Zustände erhöht die Komplexität des vorgestellten Optimierungsansatzes und eine theoretisch exakte Berechnung ist demnach nur schwer möglich; der Aufwand zur Anpassung des existierenden Ansatzes übersteigt dabei den zeitlichen Rahmen dieser Arbeit.

Alles in allem liefert die Optimierung von Senkrechtstropfern mit einfachen Kappen aber gute Ergebnisse: Der Ansatz ermöglicht eine Erhöhung der Dosiergenauigkeit, ist sowohl theoretisch als auch praktisch einfach und kostengünstig zu realisieren, mithilfe des Berechnungsansatzes für Senkrechtstropfer aus Abschnitt 5.3 in guter Näherung abschätzbar und somit für einen weiteren Einsatz in der Praxis heranzuziehen.

6.5 Zusammenfassung

Im Rahmen dieses Kapitels sind aufbauend auf Abschnitt 1.1.4 die hauptsächlichen Fehlerursachen bei der Nutzung von Senkrechttropfern vorgestellt worden. Diese Ursachen reichen von der fehlerhaften Handhabung durch den Nutzer (aufgrund mangelhafter Information) über Auslegung und Produktion der Tropfaufsätze bis hin zur Verstopfung des Luftrohres aufgrund der heute üblichen Realisierung des Prinzips des Senkrechttropfers. Weiterhin sind ausgehend von der ersten Erwähnung in den 1950-er Jahren die mithilfe von Patenten geschützten Weiterentwicklungen und Optimierungen der Tropfendosierungen vorgestellt worden; von diesen Optimierungen sind jedoch die Wenigsten heute realisiert bzw. schaffen Abhilfe bei den genannten Problemen. Zusätzlich zu den patentierten Optimierungsansätzen sind in Abschnitt 6.3 weitere Hilfsmittel zur Vereinfachung der Nutzung von Senkrechttropfern vorgestellt worden. Im Anschluss an die Vorstellung existierender Konzepte sind in Abschnitt 6.4 Optimierungsansätze zur Behebung der beschriebenen Fehler vorgestellt worden. Darunter fallen sowohl grundlegende Konzepte wie die Verbesserung der Kommunikation gegenüber den Nutzern der Tropfendosiersysteme (Information, Kennzeichnung) und die Verbesserung der Auslegung über den in Kapitel 5 vorgestellten Ansatz. Darüber hinaus wurden mit dem Konzept eines redundanten Belüftungssystems und der realisierten und erprobten Verwendung von T-förmigen Kanälen (Trennung von Flüssigkeit und Blasen im Luftrohr) neue Ansätze zur Lösung der Verstopfungsproblematik sowie mit dem Einsatz eines Auffangbehälters zur definierten Volumeneinstellung ein einfaches und kostengünstiges Hilfsmittel zur Tropfendosierung präsentiert.

Kapitel 7

Zusammenfassung und Ausblick

Auf dem stark wachsenden Medikamentenmarkt in Deutschland spielen neben Tabletten v.a. flüssige Medikamente eine entscheidende Rolle. Diese zeichnen sich dabei im Wesentlichen durch ihre individuelle Dosierbarkeit und die einfache Einnahme (z.B. bei Schluckbeschwerden) aus. Um flüssige Medikament in der Praxis zu dosieren, werden u.a. Tropfendosiersysteme eingesetzt; dabei unterscheidet man Senkrecht- und Randtropfer. Beide Varianten sind, genau wie andere Hilfsmittel zur Dosierung flüssiger Medikamente, auch heute noch mit vergleichsweise großen Ungenauigkeiten und Problemen bei der Dosierung verbunden. Da der Senkrechtropfer prinzipiell die größere Genauigkeit verspricht, ist dieser im Rahmen der vorliegenden Arbeit detaillierter untersucht worden.

Weiterhin hat sich im Rahmen der durchgeführten Recherchen gezeigt, dass in der Literatur kein einfacher und trotzdem ausreichend genauer Ansatz zur Berechnung der zu untersuchenden Tropfprozesse existiert: Zwar gibt es eine Vielzahl an Ansätzen zur Abschätzung von Tropfengrößen [32, 59, 60, 61]; allerdings beziehen sich diese alle auf sehr langsame Tropfenbildungsvorgänge. Die detaillierteren Ansätze [65, 66, 67, 68, 69, 70, 73, 77] zeichnen sich zwar durch eine hohe Genauigkeit, aber auch durch eine höhere Komplexität aus.

Darauf aufbauend erfolgte im Rahmen der vorliegenden Arbeit die Untersuchung von Tropfprozessen an Senkrechttropfern, insbesondere die Untersuchungen von Tropfenbildungszeit und -volumen. Diese unterteilt sich dabei in die folgenden drei Kernpunkte:

- Analyse und Berechnung von Tropfprozessen im Allgemeinen: Um ein grundlegendes Verständnis von Tropfvorgängen zu erlangen, wurden zunächst Tropfen an geometrisch vergleichsweise einfachen Glaskapillaren betrachtet. Aus den daraus gewonnen Erkenntnissen ist ein neuer, einfacher Ansatz zur Berechnung von Tropfen abgeleitet worden.
- Analyse und Berechnung von Tropfprozessen an medizinischen Tropfendosiersystemen: Der hergeleitete, allgemeine Berechnungsansatz ist auf den Spezialfall der Senkrechttropfer adaptiert worden und liefert somit einen Ansatz zur rechnerischen Auslegung solcher

Systeme. Voraussetzung für die Übertragung des Ansatzes war eine detaillierte Analyse der auftretenden Tropfprozesse.

- Optimierung von medizinischen Tropfendosiersystemen: Basierend auf den gewonnen Erkenntnissen sind Fehlerquellen von existierenden Tropfendosiersystemen identifiziert worden. Darauf aufbauend wurden neue Ansätze zur Optimierung von Tropfaufsätzen erarbeitet.

Grundvoraussetzung für die Analyse von Tropfprozessen und insbesondere für die Verifikation der hergeleiteten Berechnungsansätze ist eine optische Untersuchung. Dazu wurden in Kapitel 3 drei Messaufbauten vorgestellt, die abhängig von den zu betrachtenden Tropfen eingesetzt worden sind. Die Auswertung der Messungen erfolgte dabei jeweils mit der im Messaufbau integrierten Software; diese basiert auf der freien Bildverarbeitungsbibliothek OpenCV. In Tabelle 7.1 sind die wichtigsten Merkmale der einzelnen Aufbauten kurz zusammengefasst.

Messaufbau	Haub [98]	Wolf [99]	Hummel [100]
Kamera	Raspberry Pi Kamera V2	Raspberry Pi Kamera V2	IDS-Industriekamera
Auflösung [Pixel]	640 x 480	640 x 480	800 x 600
Framerate [fps]	120	120	575 (erweiterbar: >1000)
Beleuchtung: LED	1 W, 66 Lumen, 10°	1,15 W, 140 Lumen, 45°	1,15 W, 140 Lumen, 45°
Rechner	Raspberry Pi 3	Raspberry Pi 3	Desktop PC
Betriebssystem	Linux	Linux	Windows
Programmiersprache	Python	Python	C++
Besonderheit	-	2 optische Achsen	Präzisionswaage

Tabelle 7.1: Wichtige Merkmale der einzelnen Messaufbauten

Entsprechend der drei Kernpunkte gliedert sich der Hauptteil der Arbeit in drei Abschnitte: Im ersten Teil (vgl. Kapitel 4) ist der neue, allgemeine Ansatz zur Berechnung von Tropfen an geometrisch verhältnismäßig einfachen Kapillaren aus Glas hergeleitet worden. Dabei wurde grundsätzlich angenommen, dass sich der Tropfen zu jedem Zeitpunkt in Ruhe befindet (quasi-statisches Betrachtung). Weiterhin wurde der Tropfen entsprechend der geltenden Regeln freigeschnitten und die am Tropfen angreifenden Kräfte bzw. Impulsänderungen (Gewichtskraft F_g , Kraft aufgrund der Oberflächenspannung $F_{sf,z}$, Druckkraft F_p , Impulsänderung aufgrund des einströmenden Fluids F_v) gegeneinander aufgetragen. In Kombination mit den im System herrschenden Drücken sowie der Modellierung des hängenden Tropfens mithilfe der Pendant Drop

Methode ergab sich daraus ein zweigeteilter Ansatz (Tropfenwachstum, Einschnürung und Abriss) zur Vorhersage von Tropfenvolumen und Tropfenbildungszeit abhängig von der Geometrie der Kapillare sowie den Eigenschaften der tropfenden Flüssigkeit.

Die Verifikation des neuen Berechnungsansatzes erfolgte mithilfe von Messungen am Messaufbau nach Haub und numerischen Simulationen mithilfe des Programms OpenFOAM. Dabei hat sich gezeigt, dass das Tropfenvolumen bei der Verwendung von Wasser, welches den Hauptbestandteil der meisten Medikamente darstellt, auf $\pm 8,2 \%$ genau vorhergesagt werden kann. Weiterhin können Tropfenbildungszeiten mit einer maximalen Abweichung von $\pm 6,1 \%$ berechnet werden. Entsprechend dem europäischen Arzneibuch (vgl. Abschnitt 1.1.2; [15, 16]) liefert der neue Ansatz also ausreichend genaue Werte und kann somit zur gesetzeskonformen Auslegung von Tropfendosiersystemen herangezogen werden.

Kapitel 5 beschreibt den zweiten Kernpunkt der Arbeit: Die Übertragung des neuen Berechnungsansatzes auf Senkrechttropfer. Dabei war v.a. die im Vergleich zu Glaskapillaren deutlich komplexere Geometrie mit Tropf- und Luftrohr zu berücksichtigen, da diese die Funktionsweise der Dosiersysteme bestimmt: Aus dem Zusammenspiel zwischen Blasenbildung, Luftvolumen in der Flasche und Tropfenbildung konnte eine notwendige Druckbedingung (Gleichung (5.7)) hergeleitet werden, die für die Funktion eines Senkrechttropfers erfüllt sein muss. Weiterhin musste das Luftrohr und die daran stattfindende Blasenbildung im Rahmen der Berechnung des Volumenstroms in den Tropfen berücksichtigt werden; das Kräftegleichgewicht am Tropfen sowie die Modellierung desselben gelten unverändert zum allgemeinen Fall in Kapitel 4.

Die Verifikation erfolgte erneut mithilfe von Messungen (an den Messaufbauten nach Wolf und Hummel) und numerischen Simulationen (OpenFOAM). Dabei hat sich gezeigt, dass das Tropfenvolumen bei der Verwendung von Wasser auf $\pm 8,1 \%$ genau vorhergesagt werden kann. Weiterhin liegt die Tropfenbildungszeit innerhalb des abgeschätzten Lösungsbereich; die maximale Abweichung von der mittleren Tropfenbildungszeit beträgt $\pm 18,4 \%$. Darüber hinaus wurden die eben genannten Abweichungen anhand einer Fehlerabschätzung den einzelnen Annahmen bzw. Vereinfachungen während der Herleitung des Berechnungsansatzes zugeordnet sowie die Ergebnisse weiterer Messreihen kurz zusammengefasst und dabei aufgetretene Besonderheiten diskutiert.

Alles in allem ist in diesem Abschnitt also der angestrebte neue Ansatz zur Abschätzung des Tropfenbildungsverhaltens an medizinisch genutzten Senkrechttropfern hergeleitet und verifiziert worden. Abgeschlossen wurde das Kapitel durch die Analyse und Identifikation der wichtigsten Einflussgrößen auf das Tropfverhalten. Aufbauend auf diesen Erkenntnissen konnte in Abschnitt 5.5.2 ein Ansatz zur Auslegung von Senkrechttropfern bei Verwendung mit einem definierten Fluid vorgestellt werden.

Aufbauend auf den Erkenntnissen die bei der Herleitung und mithilfe des neuen Berechnungsansatzes gewonnen werden konnten, wurde in Kapitel 6 mit der Optimierung medizinischer Senkrechttropfer der letzte Kernpunkt der Arbeit vorgestellt. Im Folgenden werden dazu zunächst die wichtigsten Ursachen für Fehlfunktionen zusammengefasst, wobei für die letzten beiden Fehler im Rahmen dieser Arbeit Ansätze zur Optimierung präsentiert werden:

- Fehlerhafte Handhabung aufgrund mangelhafter Information der Nutzer
- Produktionsungenauigkeiten / -fehler
- Mangelhafte Auslegung der Systeme
- Verstopfung des Luftrohres durch Flüssigkeit und Blasen

Mit der vorliegenden Arbeit wird zum einen ein Ansatz zur Verbesserung der Auslegung präsentiert: Die Verwendung des in Kapitel 5 vorgestellten und im vorangegangenen Abschnitt zusammengefassten Berechnungsansatzes ermöglicht eine mathematisch und physikalisch fundierte Abschätzung von Tropfenbildungszeit und Tropfenvolumen und resultiert in Abschnitt 5.5.2, wie bereits erwähnt, in einem Ansatz zur Auslegung von Senkrechttropfer-Flüssigkeits-Kombinationen; aktuell erfolgt diese Auslegung v.a. basierend auf Erfahrungswerten und durch (einfaches) ausprobieren. Der neue Berechnungsansatz ermöglicht die Vorhersage des Tropfverhaltens einer potentiellen Kombination und führt so neben der Steigerung der Genauigkeit der Auslegung und somit der Dosierung zu einer Reduktion der Kosten aufgrund der Reduktion der durchzuführenden Versuche und damit des zu investierenden Aufwands.

Zum anderen wurden in Abschnitt 6.4.2 zwei Ansätze zur Vermeidung der Verstopfung des Luftrohres durch eindringende Flüssigkeit und Blasen vorgestellt. Im ersten Ansatz, wird aufbauend auf den zu erwartenden positiven Effekten bei der Verwendung mehrerer Luftrohre bzw. Luftrohr-Öffnungen und den aus der Praxis bekannten Vorteilen das Konzept redundanter Luftrohre bzw. Luftrohr-Öffnungen präsentiert. Ein weiterer Ansatz zur Vermeidung der Verstopfung des Luftrohres durch Flüssigkeit und Blasen bzw. zur sicheren Gewährleistung des Rückflusses der Flüssigkeit an einer Blase vorbei in die Flasche hinein ist die Verwendung von T-förmigen Kanälen zur Trennung von Flüssigkeit und Blasen im Luftrohr [130, 131, 132]. Der T-förmige Querschnitt führt abhängig von den gewählten Abmessungen und der Größe der Blase dazu, dass sich die Blase entweder horizontal, vertikal oder verstopfend festsetzt; bei geeigneter Auslegung des Kanals wird also nie der komplette Querschnitt blockiert. Dies macht ein Abströmen der in das Luftrohr eingetretenen Flüssigkeit zurück in die Flasche möglich und stellt somit die Funktionsfähigkeit des Tropfendosiersystems sicher. Die Verifikation dieses Optimierungsansatzes erfolgte mithilfe von 3D-gedruckten Senkrechttropfern: Dabei hat sich weiterhin gezeigt, dass die Verwendung T-förmiger Kanäle im Luftrohr unter Beibehaltung der äußeren Abmessungen keine Auswirkung auf Tropfenvolumen und Tropfenbildungszeit hat.

Neben den Ansätzen zur Verbesserung existierender Senkrechtstropfer wurde in Abschnitt 6.4.3 eine Dosierkappe zur Ergänzung dieser Systeme vorgestellt. Vorteil bzw. Ziel eines solchen Hilfsmittels ist die fest einstellbare Dosierung eines exakten Volumens sowie die damit verbundene Erhöhung der Dosiergenauigkeit. Die Auslegung der Dosierkappe sowie die Berechnung der Dosierszeit kann in guter Näherung mithilfe des hergeleiteten Berechnungsansatzes in Kombination mit der Geometrie der Dosierkappe durchgeführt werden.

Zusammenfassend lässt sich sagen, dass die Ergebnisse der bei der Erstellung dieser Arbeit angestellten Untersuchungen deutliches Optimierungspotenzial bei der Verwendung von Tropfendosiersystemen für flüssige Medikamente aufzeigen. Ein erster Schritt in Richtung der Verwendung optimierter Senkrechtstropfer-Flüssigkeits-Kombinationen resultiert aus der Verwendung eines geeigneten mathematischen Ansatzes zur Auslegung, wie er hier, gemeinsam mit Ansätzen zur Optimierung des Luftrohres und einer Kappe zur festen Einstellung des Dosiervolumens, vorgestellt worden ist.

Zukünftige Untersuchungen sollten diesen Berechnungsansatz aufgreifen und weiterentwickeln. Dabei wäre zum einen die Umsetzung des Ansatzes in eine Auslegungssoftware für Tropfendosiersysteme interessant. Zum anderen sollten die Berechnungen und Untersuchungen auf weitere Flaschenvolumina und -formen, auf schräg gehaltene Senkrechtstropfer, auf Randtropfer sowie um die Berücksichtigung bisher vernachlässigter Effekte (z.B. Schwingungen) ausgeweitet werden, um sowohl Tropfendosiersysteme im Allgemeinen besser auslegen als auch Fehler quantitativ abschätzen zu können.

Weiterhin sollte die Verwendung von T-förmigen Kanälen in Luftrohren von Senkrechtstropfern sowie der Einsatz von Dosierkappen weiter erforscht bzw. verifiziert werden. Neben weiteren Messungen an Prototypen mit unterschiedlichen Flüssigkeiten ist dabei auch die Übertragung der Herstellung auf den massenproduktionstauglichen Spritzgussprozess in Angriff zu nehmen.

Literaturverzeichnis

- [1] Bundesverband der Arzneimittel-Hersteller e.V. Der Arzneimittelmarkt in Deutschland 2018. Homepage. <https://www.bah-bonn.de/de/publikationen/zahlen-fakten/> (24.09.2018).
- [2] Bayer AG. Galenik - Chemie der Medikamente. Homepage, 2011. <https://www.research.bayer.de/de/unterrichtsmaterialien-galenik.aspx> (13.07.2018).
- [3] aponet.de. Arzneiformen: von Aerosol bis Zäpfchen. Homepage, 2018. <https://www.aponet.de/wissen/arzneimitteldatenbank/arzneimittel/arzneiformen.html> (13.07.2018).
- [4] Atakilti Bereket. Gesetzliche und Regulatorische Anforderungen für flüssige Dosiersysteme in der Europäischen Union. Studienarbeit am Lehrstuhl Mikrosystemtechnik, Universität Stuttgart, 2017.
- [5] aponet.de. Arzneimittel: die richtige Handhabung. Homepage, 2018. <https://www.aponet.de/wissen/arzneimitteldatenbank/arzneimittel/arzneimittel-richtig-anwenden.html> (13.07.2018).
- [6] HEXAL AG. Arzneimittel richtig anwenden. Homepage, 2008. <https://docplayer.org/44630101-Arzneimittel-richtig-anwenden.html> (13.07.2018).
- [7] Andreas Mehlhorn. Wenn Tropfen nicht gleich Tropfen ist. *PTA-Forum online*, 8, 2014. <https://ptaforum.pharmazeutische-zeitung.de/index.php?id=4713> (13.07.2018).
- [8] Ran D Goldman and Dennis Scolnik. Underdosing of acetaminophen by parents and emergency department utilization. *Pediatric Emergency Care*, 20(2):89–93, 2004.
- [9] Maren Hermanns-Clausen, Wolfgang Weinmann, Volker Auwärter, Nerea Ferreirós, Rainer Trittler, Christoph Müller, Andreas Pahl, Andrea Superti-Furga, and Roland Hentschel. Drug dosing error with drops—severe clinical course of codeine intoxication in twins. *European Journal of Pediatrics*, 168(7):819, 2009.

- [10] Siu Fai Li, Britt Lacher, and Ellen F Crain. Acetaminophen and ibuprofen dosing by parents. *Pediatric Emergency Care*, 16(6):394–397, 2000.
- [11] H Shonna Yin, Benard P Dreyer, Hannah A Moreira, Linda van Schaick, Luis Rodriguez, Susanne Boettger, and Alan L Mendelsohn. Liquid medication dosing errors in children: role of provider counseling strategies. *Academic Pediatrics*, 14(3):262–270, 2014.
- [12] H Shonna Yin, Benard P Dreyer, Donna C Ugboaja, Dayana C Sanchez, Ian M Paul, Hannah A Moreira, Luis Rodriguez, and Alan L Mendelsohn. Unit of measurement used and parent medication dosing errors. *Pediatrics*, pages 354–361, 2014.
- [13] H Shonna Yin, Ruth M Parker, Lee M Sanders, Benard P Dreyer, Alan L Mendelsohn, Stacy Bailey, Deesha A Patel, Jessica J Jimenez, Kwang-Youn A Kim, Kara Jacobson, et al. Liquid medication errors and dosing tools: a randomized controlled experiment. *Pediatrics*, 2016.
- [14] Bundesministerium der Justiz und für Verbraucherschutz. Gesetz über den Verkehr mit Arzneimitteln (Arzneimittelgesetz - AMG). Homepage, 2017. https://www.gesetze-im-internet.de/amg_1976/ (16.07.2018).
- [15] R Eifler-Bollen and A Hensel. Flüssige Phytopharmaka lassen sich oft nicht genau dosieren. *Pharmazeutische Zeitung online*, 30, 2000. https://www.pharmazeutische-zeitung.de/index.php?id=pharm1_30_2000 (13.07.2018).
- [16] Europäische Arzneibuch-Kommission. *Europäisches Arzneibuch (Ph. Eur.)*. Deutscher Apotheker Verlag, 8 edition, 2014.
- [17] Julia Bartnik-Thumm. Analyse und Optimierung medizinischer Tropfflaschen. Studienarbeit am Lehrstuhl Mikrosystemtechnik, Universität Stuttgart, 2017.
- [18] Deutsches Arzneiprüfungsinstitut e.V. (DAPI). TOP 50 Fertigarzneimittel mit der Darreichungsform 'Tropfen', die in Deutschland im Jahr 2016 zulasten der GKV [...] abgegeben wurden. Bereitstellung von Daten auf Anfrage von Julia Bartnik-Thumm [17], 2017. <http://www.dapi.de/> (11.10.2019).
- [19] Pfizer Pharma PFE GmbH. sab simplex. Arzneimittelinformation, 2018.
- [20] 1 A Pharma GmbH. Novaminsulfon. Arzneimittelinformation, 2010.
- [21] Lea Wolz. Verwirrende Dosierungs-Angaben gefährden Kinder. *stern*, 2010. <https://www.stern.de/gesundheit/studie-zu-medikamenten-verwirrende-dosierungs-angaben-gefaehrden-kinder-3040602.html> (13.07.2018).

- [22] Constanze Schäfer. Kritische Arzneiformen im Zeitalter der Rabattverträge. *Deutsche Apotheker Zeitung*, 40, 2012. <https://www.deutsche-apotheker-zeitung.de/daz-az/2012/daz-40-2012/kritische-arzneiform-im-zeitalter-der-rabattvertraege> (13.07.2018).
- [23] Sensoplast Packmitteltechnik GmbH. Dosieren und Applizieren. Homepage, 2009 – 2016. <http://www.sensoplast.de> (13.07.2018).
- [24] Celine Müller. Richtige Anwendung von Arzneitropfen: Die Flasche senkrecht oder schräg halten? *PTAheute*, 2018. <https://www.ptaheute.de/news/artikel/richtige-anwendung-von-arzneitropfen-die-flasche-senkrecht-oder-schraeg-halten/> (13.07.2018).
- [25] Celine Müller. Tropfen richtig tropfen? *DAZ.online*, 2018. <https://www.deutsche-apotheker-zeitung.de/news/artikel/2018/01/18/tropfen-richtig-tropfen/chapter:all> (13.07.2018).
- [26] R Borchers, K Suter, C Hilker, and H Plagge. Untersuchung der Tropf- und Dosiergenauigkeit von flüssigen Oralia im klinischen Alltag. *Kongress GSASA-pharma Suisse in Interlaken*, 2011. https://www.unispital-basel.ch/fileadmin/unispitalbaselch/Bereiche/Querschnittsfunktionen/Spital-Pharmazie/Poster_GSASA_Tropfprojekt.pdf (13.07.2018).
- [27] W Kircher. Pharmazeutische Anwendungshilfen in der Gerontopharmakologie. *Der Internist*, 54(1):110–117, 2013.
- [28] Lutz Bergmann. Die Risiken und Nebenwirkungen bei Generika. *Welt*, 2012. <https://www.welt.de/finanzen/article109417093/Die-Risiken-und-Nebenwirkungen-bei-Generika.html> (13.07.2018).
- [29] R Eifler-Bollen and A Hensel. Auch pflanzliche Kardiaka oft nicht genau zu dosieren. *Pharmazeutische Zeitung online*, 49, 2000. https://www.pharmazeutische-zeitung.de/index.php?id=pharm5_49_2000 (13.07.2018).
- [30] Leonie Blaser. Analyse und Optimierung von in der Praxis eingesetzten Tropfendosiersystemen für flüssige Medikamente. Studienarbeit am Lehrstuhl Mikrosystemtechnik, Universität Stuttgart, 2018.
- [31] D Brown, JL Ford, AJ Nunn, and PH Rowe. An assessment of dose-uniformity of samples delivered from paediatric oral droppers. *Journal of Clinical Pharmacy and Therapeutics*, 29(6):521–529, 2004.

- [32] T Tate. On the magnitude of a drop of liquid formed under different circumstances. *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, 27(181):176–180, 1864.
- [33] Gerd Junge. *Einführung in die technische Strömungslehre*. Carl Hanser Verlag GmbH & Co. KG, 2015.
- [34] Peter Böckh and Christian Saumweber. *Fluidmechanik: Einführendes Lehrbuch*. Springer Vieweg, 2013.
- [35] Paul Dobrinski, Gunter Krakau, and Anselm Vogel. *Physik für Ingenieure*. Vieweg + Teubner, 2010.
- [36] Ekbert Hering, Rolf Martin, and Martin Stohrer. *Physik für Ingenieure*. Springer, 2007.
- [37] Erich A Truckenbrodt. *Fluidmechanik: Band 1: Grundlagen und elementare Strömungsvorgänge dichtebeständiger Fluide*. Springer, 1996.
- [38] William M Haynes. *CRC Handbook of Chemistry and Physics*. CRC Press / Taylor & Francis, Boca Raton, FL., 97 edition, 2014. (Internet Version 2017).
- [39] Glycerine Producers’ Association et al. *Physical properties of glycerine and its solutions*. Glycerine Producers’ Association, 1963.
- [40] Friedrich Kohlrausch. *Praktische Physik: Band 1*. Teubner, 1996.
- [41] Herbert Sigloch. *Technische Fluidmechanik*, volume 7. Springer, 2009.
- [42] Salvatore P Sutera and Richard Skalak. The history of poiseuille’s law. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 25(1):1–20, 1993.
- [43] H E Siekmann and P U Thamsen. *Strömungslehre für den Maschinenbau: Technik und Beispiele*. Springer, 2009.
- [44] Nam-Trung Nguyen. *Mikrofluidik: Entwurf, Herstellung und Charakterisierung*. Teubner, 2004.
- [45] Leopold Böswirth and Sabine Bschorer. *Technische Strömungslehre*. Springer Vieweg, 2014.
- [46] Michael Stange. *Dynamik von Kapillarströmungen in zylindrischen Rohren*. Cuvillier Verlag, 2004.

- [47] FA Seyer and PJ Catania. Laminar and turbulent entry flow of polymer solutions. *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, 50(1):31–36, 1972.
- [48] Frank M White. *Fluid Mechanics (7th Edition)*. McGraw-Hill, 2011.
- [49] FW Schmidt and B Zeldin. Laminar flows in inlet sections of tubes and ducts. *AIChE Journal*, 15(4):612–614, 1969.
- [50] EM Sparrow, SH Lin, and TS Lundgren. Flow development in the hydrodynamic entrance region of tubes and ducts. *The Physics of Fluids*, 7(3):338–347, 1964.
- [51] Hans-Jürgen Butt, Karlheinz Graf, and Michael Kappl. *Physics and chemistry of interfaces*. John Wiley & Sons, 2006.
- [52] Günter Jakob Lauth and Jürgen Kowalczyk. *Einführung in die Physik und Chemie der Grenzflächen und Kolloide*. Springer Spektrum, 2016.
- [53] Stefan Lecheler. *Numerische Strömungsberechnung: Schneller Einstieg durch anschauliche Beispiele mit ANSYS 15.0*. Springer Vieweg, 2014.
- [54] Roger H. Rangel. University of California in Irvine / USA - Class: Introduction to Fluid Mechanics (MAE 130 A). Homepage, 2014. <http://www.faculty.sites.uci.edu/rangel/classes>; <https://www.youtube.com/playlist?list=PLVEA9JIiyOh0l8AwGxsaYrp5o7uUl-0JK> (15.03.2017).
- [55] Andreas Malcherek. Universität der Bundeswehr in München - Vorlesung: Hydromechanik. Homepage, 2015. <https://www.unibw.de/ifw/HYDRO/Lehre>; <https://www.youtube.com/playlist?list=PLeJINT9hA2PwyyZKrQMcxMauZcHZBi5Rm> (15.03.2017).
- [56] Skrollan Reißbarth. Optimierung von Tropfendosiersystemen. Studienarbeit am Lehrstuhl Mikrosystemtechnik, Universität Stuttgart, 2018.
- [57] Pia Müller. Analyse der Einflussfaktoren auf medizinische Tropfflaschen. Studienarbeit am Lehrstuhl Mikrosystemtechnik, Universität Stuttgart, 2018.
- [58] Lothar Papula. *Mathematische Formelsammlung für Ingenieure und Naturwissenschaftler*. Springer Vieweg, 2017.
- [59] Günter Wozniak. *Zerstäubungstechnik: Prinzipien, Verfahren, Geräte*. Springer, 2003.

- [60] J W Strutt Lord Rayleigh. Investigations in Capillarity: The size of drops. The liberation of gas from supersaturated solutions. Colliding jets. The tension of contaminated water-surfaces. *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, 48(293):321–337, 1899.
- [61] William D Harkins and FE Brown. The determination of surface tension (free surface energy), and the weight of falling drops: The surface tension of water and benzene by the capillary height method. *Journal of the American Chemical Society*, 41(4):499–524, 1919.
- [62] B Vinet, JP Garandet, and L Cortella. Surface tension measurements of refractory liquid metals by the pendant drop method under ultrahigh vacuum conditions: Extension and comments on Tate's law. *Journal of Applied Physics*, 73(8):3830–3834, 1993.
- [63] EVL Narasinga Rao, R Kumar, and NR Kuloor. Drop formation studies in liquid—liquid systems. *Chemical Engineering Science*, 21(10):867–880, 1966.
- [64] H Neumann and R Seeliger. Über die Abhängigkeit der Größe von Flüssigkeitstropfen von der Bildungsgeschwindigkeit. *Zeitschrift für Physik*, 114(9-10):571–578, 1939.
- [65] Francis Bashforth and John Couch Adams. *An attempt to test the theories of capillary action: by comparing the theoretical and measured forms of drops of fluid*. Cambridge University Press, 1883.
- [66] JM Andreas, EA Hauser, and WB Tucker. Boundary tension by pendant drops. *The Journal of Physical Chemistry*, 42(8):1001–1019, 1938.
- [67] Nicolas J Alvarez, Lynn M Walker, and Shelley L Anna. A non-gradient based algorithm for the determination of surface tension from a pendant drop: Application to low bond number drop shapes. *Journal of Colloid and Interface Science*, 333(2):557–562, 2009.
- [68] Joseph D Berry, Michael J Neeson, Raymond R Dagastine, Derek YC Chan, and Rico F Tabor. Measurement of surface and interfacial tension using pendant drop tensiometry. *Journal of Colloid and Interface Science*, 454:226–237, 2015.
- [69] DataPhysics Instruments GmbH. Pendant Drop Methode - Optische Bestimmung der Ober-/Grenzflächenspannung. Homepage. <https://www.dataphysics-instruments.com/de/wissen/grenzflaechen-verstehen/pendant-drop-methode/> (29.08.2019).

- [70] A. K. Chesters. An analytical solution for the profile and volume of a small drop or bubble symmetrical about a vertical axis. *Journal of Fluid Mechanics*, 81(4):609–624, 1977.
- [71] PM Heertjes, LH De Nie, and HJ De Vries. Drop formation in liquid—liquid systems—i prediction of drop volumes at moderate speed of formation. *Chemical Engineering Science*, 26(3):441–449, 1971.
- [72] George F Scheele and Bernard J Meister. Drop formation at low velocities in liquid-liquid systems: Part i. prediction of drop volume. *AIChE journal*, 14(1):9–15, 1968.
- [73] Jens Eggers and Todd F. Dupont. Drop formation in a one-dimensional approximation of the navier–stokes equation. *Journal of Fluid Mechanics*, 262:205–221, 1994.
- [74] DH Peregrine, G Shoker, and A Symon. The bifurcation of liquid bridges. *Journal of Fluid Mechanics*, 212:25–39, 1990.
- [75] J. Eggers. Tropfenbildung. *Physik Journal*, 53(5):431–434, 1997.
- [76] RMSM Schulkes. The evolution and bifurcation of a pendant drop. *Journal of Fluid Mechanics*, 278:83–100, 1994.
- [77] Christophe Clanet and Juan C. Lasheras. Transition from dripping to jetting. *Journal of Fluid Mechanics*, 383:307–326, 1999.
- [78] Geoffrey Taylor. The dynamics of thin sheets of fluid. III. Disintegration of fluid sheets. *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 253(1274):313–321, 1959.
- [79] Malcolm R Davidson and Justin J Cooper-White. Pendant drop formation of shear-thinning and yield stress fluids. *Applied Mathematical Modelling*, 30(11):1392–1405, 2006.
- [80] Xiaoguang Zhang. Dynamics of growth and breakup of viscous pendant drops into air. *Journal of Colloid and Interface Science*, 212(1):107–122, 1999.
- [81] Andrea Bals. Grundlagen der Blasenbildung an Einzelporen und Lochplatten. *Chemie Ingenieur Technik*, 74(3):337–344, 2002.
- [82] Roland Clift, John R Grace, and Martin E Weber. *Bubbles, drops, and particles*. Courier Corporation, 2005.

- [83] R Kumar and NR Kuloor. The formation of bubbles and drops. *Advances in Chemical Engineering*, 8:255–368, 1970.
- [84] ES Gaddis and A Vogelpohl. Bubble formation in quiescent liquids under constant flow conditions. *Chemical Engineering Science*, 41(1):97–105, 1986.
- [85] Christopher J Greenshields. *OpenFOAM 4.0 User Guide*, 2016.
- [86] Martin Wörner. Numerical modeling of multiphase flows in microfluidics and micro process engineering: a review of methods and applications. *Microfluidics and Nanofluidics*, 12(6):841–886, 2012.
- [87] CFD Direct Ltd. OpenFOAM. Homepage, 2015–2017. <https://www.cfd.direct/openfoam> (13.03.2017).
- [88] Bernhard Gschaider. Unofficial OpenFOAM wiki. Homepage, 2018. <https://www.openfoamwiki.net> (31.08.2018).
- [89] COMSOL Inc. COMSOL Multiphysics. Homepage, 2018. <https://www.comsol.de/> (06.12.2018).
- [90] Canonical Ltd. Ubuntu. Homepage, 2019. <https://www.ubuntu.com> (15.01.2019).
- [91] OPEN CASCADE. Salome - The Open Source Integration Platform for Numerical Simulations. Homepage, 2005 – 2017. <http://www.salome-platform.org> (13.03.2017).
- [92] Kitware. ParaView. Homepage. <http://www.paraview.org> (13.03.2017).
- [93] Bruno Kistner. Modellierung und numerische Simulation der Nachlaufstruktur von Turbomaschinen am Beispiel einer Axialturbinenstufe. Dissertation im Fachbereich Maschinenbau, Technische Universität Darmstadt, 2000.
- [94] Suraj S Deshpande, Lakshman Anumolu, and Mario F Trujillo. Evaluating the performance of the two-phase flow solver interfoam. *Computational Science & Discovery*, 5(1):014016, 2012.
- [95] C.W Hirt and B.D Nichols. Volume of Fluid (VOF) Method for the Dynamics of Free Boundaries. *Journal of Computational Physics*, 39(1):201 – 225, 1981.
- [96] Edin Berberović, Nils P van Hinsberg, Suad Jakirlić, Ilia V Roisman, and Cameron Tropea. Drop impact onto a liquid layer of finite thickness: Dynamics of the cavity evolution. *Physical Review E*, 79(3):036306, 2009.

- [97] S Márquez Damian. Description and utilization of interfoam multiphase solver. Technical report, International Center for Computational Methods in Engineering, 2012. <http://infotech.unl.edu.ar/upload/3be0e16065026527477b4b948c4caa7523c8ea52.pdf> (02.10.2018).
- [98] Michael Haub. Entwicklung eines Messstandes zur optischen Analyse von Tropfenkonturen und Bewegungen mit Hilfe von industrieller Bildverarbeitung. Masterarbeit am Lehrstuhl Mikrosystemtechnik, Universität Stuttgart, 2017.
- [99] Philip Wolf. Optimierung eines Messstandes zur optischen Tropfenanalyse unter Verwendung zweier RaspberryPis und synchronisierter Kameras. Studienarbeit am Lehrstuhl Mikrosystemtechnik, Universität Stuttgart, 2018.
- [100] Ferdinand Hummel. Optimierung eines optischen Messstandes zur Tropfenanalyse. Studienarbeit am Lehrstuhl Mikrosystemtechnik, Universität Stuttgart, 2018.
- [101] OpenCV team. OpenCV. Homepage, 2018. <https://opencv.org/> (19.07.2018).
- [102] XD Shi, Michael P Brenner, and Sidney R Nagel. A cascade of structure in a drop falling from a faucet. *Science*, 265(5169):219–222, 1994.
- [103] Python Software Foundation. Python. Homepage, 2001 – 2018. <https://www.python.org/> (19.07.2018).
- [104] Dieter Duschl. *Softwareentwicklung mit C++: Einführung mit Visual Studio*. Springer Vieweg, 2017.
- [105] Gerd Küveler and Dietrich Schwoch. *C/C++ für Studium und Beruf*. Springer Vieweg, 2017.
- [106] Sebastian Hummel, Michael Haub, Martin Bogner, and Hermann Sandmaier. Characterisation of hanging and detaching droplets using optical measurement setups. *Journal of Physics: Conference Series*, 1319(1):012002, 2019.
- [107] Dietmar Gross, Werner Hauger, Jörg Schröder, and Wolfgang A Wall. *Technische Mechanik I - Statik*. Springer Vieweg, 2016.
- [108] Hans Albert Richard and Manuela Sander. *Technische Mechanik. Statik: Lehrbuch mit Praxisbeispielen, Klausuraufgaben und Lösungen*. Vieweg + Teubner, 2010.
- [109] Kurt Magnus and Hans Heinrich Müller. *Grundlagen der technischen Mechanik*, volume 7. Springer Fachmedien Wiesbaden GmbH, 2005.

- [110] Jürgen Dankert and Helga Dankert. *Technische Mechanik: Statik, Festigkeitslehre, Kinetik/Kinetik*. Springer Vieweg, 2013.
- [111] Valerian A Nemchinsky. Size and shape of the liquid droplet at the molten tip of an arc electrode. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 27(7):1433, 1994.
- [112] Xiaoguang Zhang and Osman A Basaran. An experimental study of dynamics of drop formation. *Physics of Fluids*, 7(6):1184–1203, 1995.
- [113] J W Strutt Lord Rayleigh. On the instability of jets. *Proceedings of the London Mathematical Society*, 10(4), 1878.
- [114] Sebastian Hummel, Martin Bogner, Michael Haub, Joachim Sägebarth, and Hermann Sandmaier. Analytical Calculation of Falling Droplets from Cylindrical Capillaries. *MD-PI Proceedings*, 1(4):284, 2017.
- [115] Wolfgang Kaiser. *Kunststoffchemie für Ingenieure: von der Synthese bis zur Anwendung*. Carl Hanser Verlag GmbH & Co. KG, 2015.
- [116] Otto Schwarz, Friedrich Wolfhard Ebeling, Harald Huberth, Harald Schirber, and Norbert Schlör. *Kunststoffkunde: Aufbau, Eigenschaften, Verarbeitung, Anwendungen der Thermoplaste, Duroplaste und Elastomere*. Vogel Buchverlag, 2007.
- [117] Wolfgang Weißbach, Michael Dahms, and Christoph Jaroschek. *Werkstoffe und ihre Anwendungen*. Springer, 2018.
- [118] Sebastian Hummel, Michael Haub, Martin Bogner, and Hermann Sandmaier. Bubble Formation in Droplet Dosing Devices for Liquid Medicine. *MDPI Proceedings*, 2(13):747, 2018.
- [119] Elvira Ahrens, Hans-Joachim Ahrens, Janet Ahrens, and Stephan Ahrens. Mehrbereichs-Tropfer. Patent DE 10 2009 016 788 A1. Anmeldung: 07.04.2009.
- [120] Hans Heinlein. Tropfeinsatz. Patent DE 09 17 563 B. Ausgabedatum: 06.09.1954.
- [121] Herbert Brüne. Aus einem Materialstück bestehender Tropf- und/oder Gießeinsatz. Patent DE 10 19 195 A. Anmeldung: 03.07.1952.
- [122] Hans Heinlein. Vorrichtung zur Tropfenweise Abgabe von Flüssigkeiten. Patent DE 29 49 262 A1. Anmeldung: 07.12.1979.
- [123] Hans Heinlein. Vorrichtung zur Tropfenweise Abgabe von Flüssigkeiten. Patent DE 31 32 510 A1. Anmeldung: 18.08.1981.

- [124] pheneo GmbH. Tropfer zum Abgeben von Tropfen eines Fluids, Tropfer-Kappe-System und Behältnis mit einem solchen Tropfer oder Tropfer-Kappe-System. Patent DE 10 2014 001 247 A1. Erfinder: Essler, M., Habibi-Naini, S.; Anmeldung: 03.02.2014.
- [125] Aptar Radolfzell GmbH. Tropfenspender. Patent DE 10 2012 214 426 B3. Erfinder: Wochele, M., Greiner-Perth, F.; Anmeldung: 14.08.2012.
- [126] Deutsches Patent- und Markenamt. DEPATISnet (Patentrecherche). Homepage, 2019. <https://www.dpma.de/recherche/depatisnet/index.html> (04.10.2019).
- [127] Heinlein Plastik Technik GmbH. Behälterverschluss mit Tropfvorrichtung. Patent DE 10 2015 205 339 B3. Anmeldung: 24.03.2015.
- [128] Felicia Würtenberger. Optimierung der Belüftung von Tropfendosiersystemen mittels 3D-Druck. Studienarbeit am Lehrstuhl Mikrosystemtechnik, Universität Stuttgart, 2019.
- [129] Tobias Metz, Wolfgang Streule, Roland Zengerle, and Peter Koltay. Startube: a tube with reduced contact line for minimized gas bubble resistance. *Langmuir*, 24(17):9204–9206, 2008.
- [130] J. Kohnle, G. Waibel, R. Cernosa, M. Storz, H. Ernst, H. Sandmaier, T. Strobel, and R. Zengerle. A unique solution for preventing clogging of flow channels by gas bubbles. In *Technical Digest. MEMS 2002 IEEE International Conference. Fifteenth IEEE International Conference on Micro Electro Mechanical Systems (Cat. No.02CH37266)*, pages 77–80, Jan 2002.
- [131] C Litterst, J Kohnle, H Ernst, S Messner, H Sandmaier, R Zengerle, and P Koltay. Improved gas bubble mobility in CHIC-type flow channels. *ACTUATOR. Messe Bremen, Germany*, pages 541–544, 2004.
- [132] C Litterst, T Metz, R Zengerle, and P Koltay. Static and dynamic behaviour of gas bubbles in t-shaped non-clogging micro-channels. *Microfluidics and Nanofluidics*, 5(6):775–784, 2008.
- [133] Malte Guid Faßnacht. Optimierung der Medikamentendosierung. Studienarbeit am Lehrstuhl Mikrosystemtechnik, Universität Stuttgart, 2016.

Anhang A

Tropfenberechnung an Kapillarsystemen

A.1 Untersuchungen an weiteren Glaskapillarsystemen

	LW-T08	LW-T07	Eth-T07	Gly-T04
Außenradius R [μm]	440	440	440	700
Innenradius r [μm]	220	220	220	460
Länge l [μm]	20	32	32	20
tropfendes Fluid	Wasser	Wasser	Ethanol	Glycerin
Tropfenvolumen				
Standardabweichung Messung [mm^3]	0,6	0,6	0,9	0,5
Abweichung Rechnung - Messung [%]	7,4	7,8	6,3	2,4
Tropfenbildungszeit				
Standardabweichung Messung [ms]	13,6	16,2	6,8	420
Abweichung Rechnung - Messung [%]	6,1	3,0	13,5	7,7

Tabelle A.1: Untersuchungen an (weiteren) Glaskapillarsystemen

Anmerkungen zu den Messungen mit Ethanol und Glycerin:

Ethanol (Eth-T07):

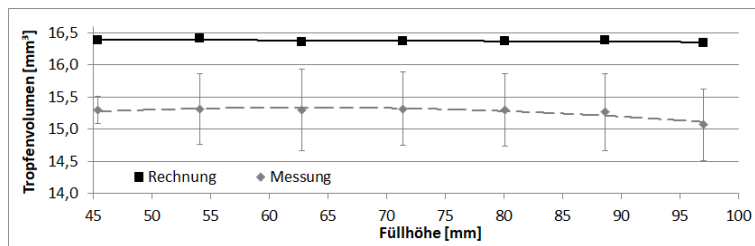
- Überprüfung des Berechnungsansatzes hinsichtlich der Verwendbarkeit bei im Vergleich zu Wasser stark reduzierten Oberflächenspannungen (vgl. Tabelle 2.1). Die Ergebnisse zeigen, dass die Tropfen aufgrund der geringeren Oberflächenspannung und der damit verbundenen geringeren Haltekraft $F_{\text{sf},z}$ (vgl. Gleichung (2.38)) an der Kapillare ein geringeres Volumen ausbilden.

- Ethanol kann sich aufgrund des geringen Kontaktwinkels an der Kapillaraußenwand „hochziehen“. In der Regel läuft dies nicht symmetrisch zur Rotationsachse der Kapillare ab (vgl. Abbildung 4.15), was zu einer Vergrößerung der Berührungslinie zwischen Flüssigkeit und Kapillare und somit zu einer Zunahme der haltenden Kraft $F_{sf,z}$ aufgrund der Oberflächenspannung, einem späteren Ablösen des Tropfens sowie einer (leichten) Erhöhung des Tropfenvolumens führt. Weiterhin reduziert sich durch das „Hochziehen“ die Tropfenhöhe h_{Tr} , was zu einer Reduktion des Volumenstroms in den Tropfen und somit ebenfalls zu einem Anstieg der Tropfenbildungszeit führt. Dieser Effekt ist als „Hochziehen“ in Abbildung A.2 (c) und (d) berücksichtigt.

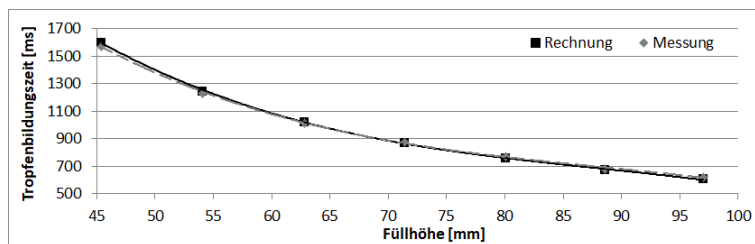
Glycerin (Gly-T04):

- Überprüfung des Berechnungsansatzes hinsichtlich der Verwendbarkeit bei im Vergleich zu Wasser stark erhöhter Viskosität (vgl. Tabelle 2.1). Die Ergebnisse zeigen, dass es, wie entsprechend dem Gesetz von Hagen-Poiseuille (vgl. Gleichung (2.3)) erwartet, zu einer deutlichen Erhöhung der Tropfenbildungszeit kommt.
- Die Abbildungen A.3 (b) und (d) zeigen eine zunehmende Abweichung zwischen berechneten und gemessenen Werten bei abnehmender Füllhöhe bzw. bei abnehmendem Volumenstrom $\dot{V}$; eine möglich Ursache dafür sind Ungenauigkeiten bei der Abschätzung des Volumenstroms in der Einschnürungs- und Abrissphase bei sehr kleinen Volumenströmen. Aufgrund der für Medikamente viel zu hohen Tropfenbildungszeiten wurde im Rahmen dieser Arbeit jedoch auf eine detaillierte Untersuchung des Effekts verzichtet.
- Aufgrund der im Vergleich zu Wasser und Ethanol relativ hohen Tropfenbildungszeit von deutlich über 10 s und der aus technischen Gründen notwendigen Aufnahmezeitbegrenzung im Messaufbau nach Haub von 15 s konnte dieser mit dem System Gly-T04 nicht sinnvoll eingesetzt werden. Die vorgestellten Ergebnisse basieren daher auf einem vereinfachten Messaufbau nach Hummel: Der Tropfprozess wurde mithilfe einer Kamera aufgenommen und die Tropfenmassen (und damit das Tropfenvolumen) über eine Waage (KERN EG420-3NM) mit einer Auflösung von 0,001 g bestimmt.
- Eine numerische Simulation ist aufgrund der langen Tropfenbildungszeit und der daraus resultierenden Simulationsdauer von mehreren Monaten im zeitlichen Rahmen dieser Arbeit nicht möglich gewesen.

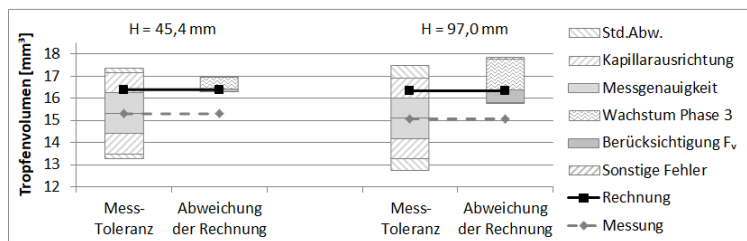
A.1.1 LW-T07



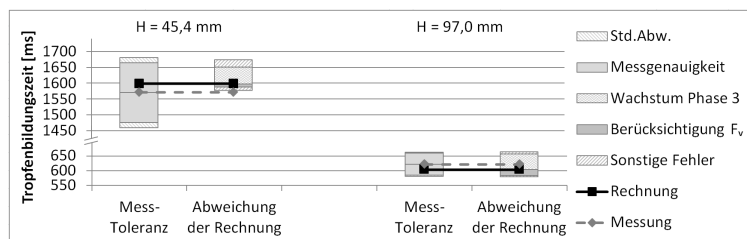
(a)



(b)



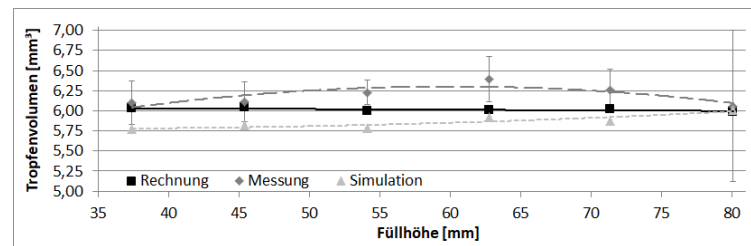
(c)



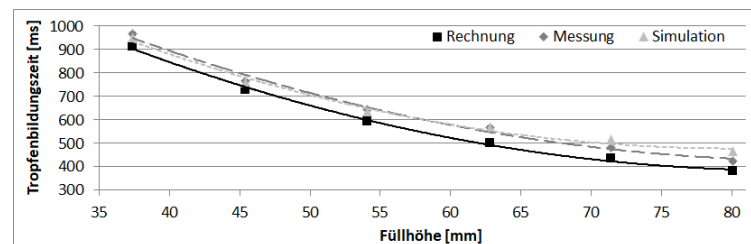
(d)

Abbildung A.1: Untersuchungen am Glaskapillarsystem LW-T07: (a) Tropfen volumen; (b) Tropfenbildungszeit; (c) Fehlerabschätzung Tropfen volumen; (d) Fehlerabschätzung Tropfenbildungszeit

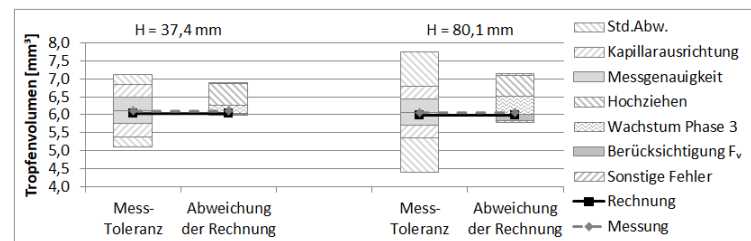
A.1.2 Eth-T07



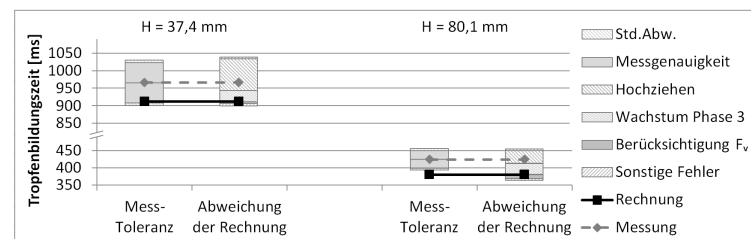
(a)



(b)



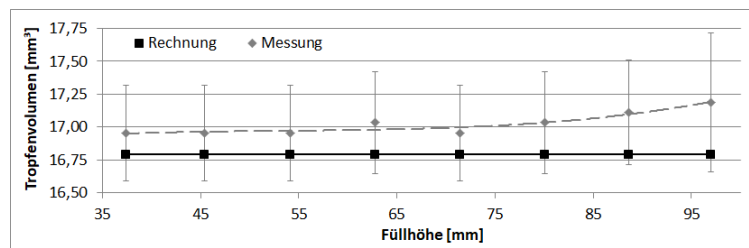
(c)



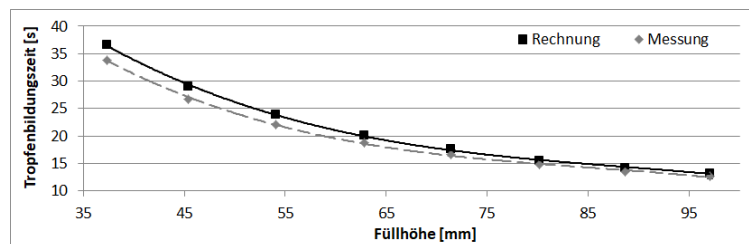
(d)

Abbildung A.2: Untersuchungen am Glaskapillarsystem Eth-T07: (a) Tropfenvolumen; (b) Tropfenbildungszeit; (c) Fehlerabschätzung Tropfenvolumen; (d) Fehlerabschätzung Tropfenbildungszeit

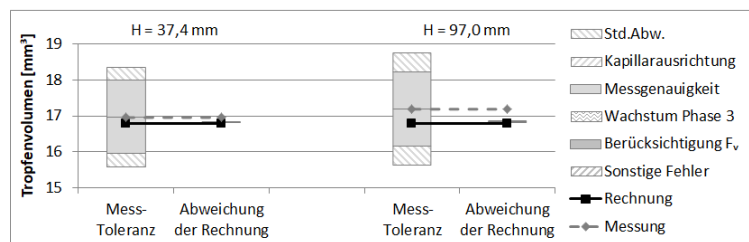
A.1.3 Gly-T04



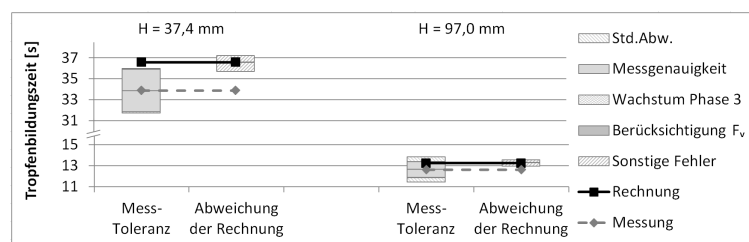
(a)



(b)



(c)



(d)

Abbildung A.3: Untersuchungen am Glaskapillarsystem Gly-T04: (a) Tropfen volumen; (b) Tropfenbildungszeit; (c) Fehlerabschätzung Tropfen volumen; (d) Fehlerabschätzung Tropfenbildungszeit

Anhang B

Berechnung medizinischer Senkrechttropfer

B.1 Abmessungen der verwendeten Senkrechttropfer

Gemäß Abbildung 5.1 (a) weist ein Senkrechttropfer eine Vielzahl verschiedener Abmessungen, die sowohl für das Tropfverhalten als auch für den Einbau in eine Flasche relevant sind, auf. In der folgenden Tabelle sind die wichtigsten Abmessungen der im Rahmen von Abschnitt 5.4 verwendeten Tropfer aufgelistet.

Tropfer Kennz.	0,6 S2 LW-0,6-S2	0,6 S2 Eth-0,6-S2	1,0 S2 LW-1,0-S2	2,0 S2 Gly-2,0-S2
r_1	0,29	0,29	0,48	1,00
r_2	1,28	1,28	1,21	1,53
r_3	1,70	1,70	1,70	1,70
r_L	0,90	1,00	0,90	0,80
R	1,90	1,90	1,90	1,90
l_1	0,35	0,35	0,32	0,00
l_2	4,65	4,65	3,53	6,44
l_3	9,10	9,10	10,25	7,66
L_1	16,50	16,50	16,60	16,60
L_2	30,60	30,60	30,70	30,70

Tabelle B.1: Wichtige Abmessungen der verwendeten Senkrechttropfer der Firma POMPL direkt e.K. (eigene Messungen, alle Angaben in mm)

B.2 Marktrecherche zum Material von Senkrechttropfern

In der folgenden Tabelle sind Hersteller und Händler von Tropfendosiersystemen aufgelistet, die auf ihrer Homepage Angaben zum Material der von ihnen vertriebenen Produkte machen (Stand: 24.09.2019). Weitere Hersteller wie z.B. die „Heinlein Plastik-Technik GmbH“ oder die „Packland GmbH“, die ebenfalls Senkrechttropfer vertreiben, stellen auf ihrer Homepage keine Angaben zum Material bereit und werden deshalb in der Tabelle nicht aufgeführt.

Anbieter / Händler (Firma)	Material
Jordan Gamma Medizintechnik GmbH	PE
MIRON Violetglass BV	PE-LD
PACKSYS GmbH	PE
POMPL direkt e.K.	PE
Sensoplast Packmittel GmbH	PE-LD
Gesellschaft für Tier-, heilpraktikerbedarf mbH	PE
UNICOM INTERNATIONAL LTD.	PP
WEPA APOTHEKENBEDARF GmbH & Co KG	PE

Tabelle B.2: Marktrecherche zum Material von Senkrechttropfern

B.3 Untersuchungen an weiteren Tropfendosiersystemen

	LW-1,0-S2	Eth-0,6-S2	Gly-2,0-S2
tropfendes Fluid	Wasser	Ethanol	Glycerin
Tropfenvolumen			
Standardabweichung Messung [mm ³]	5,9	4,3	1,0
Abweichung Rechnung - Messung (Mittelwert) [%]	12,9	9,0	23,8
Tropfenbildungszeit			
Standardabweichung Messung [ms]	22,9	59,7	126,0

Tabelle B.3: Untersuchungen an weiteren Tropfendosiersystemen (50 ml - Flasche)

Anmerkungen zu den Messungen:

Wasser (LW-1,0-S2):

- Überprüfung des Berechnungsansatzes bei der Verwendung eines größeren Einströmdurchmesser von $d_1 = 2 \text{ mm}$: Gemäß dem Gesetz von Hagen-Poiseuille (vgl. Gleichung (2.3)) tritt dabei ein größerer Volumenstrom und somit eine kürzere Tropfenbildungszeit auf.
- Die Ergebnisse der Messreihe zeigen aufgrund von Schwingungen der nach dem Abriss des vorangegangenen Tropfens am Senkrechttropfer verbleibenden Flüssigkeit eine Verschiebung des berechneten Tropfenvolumens und der berechneten Tropfenbildungszeit hin zu kleineren Werten. Mögliche Ursachen der Volumenstromreduktion aufgrund der Schwingungen sind z.B. variierende Drucksituationen im Tropfen und verstärkt auftretende Impulse nach oben aufgrund des „Zurückschnappens“ der Flüssigkeit nach dem Abriss.
- Im Rahmen der numerischen Simulation tritt dieser Fehler nicht auf, da hier zum einen der gemessene Volumenstrom als Input-Größe verwendet wird und die Schwingungen zum anderen durch die verwendeten Gleichungen und Diskretisierungen abgebildet werden können.
- Die mithilfe des Messaufbaus nach Hummel durchgeführte Gewichtsmessung liefert eine Abweichung von 10,7 %.

Ethanol (Eth-0,6-S2):

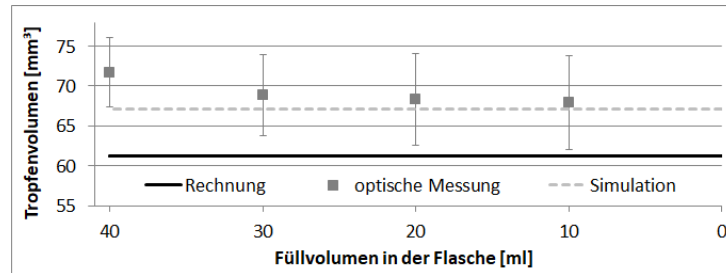
- Überprüfung des Berechnungsansatzes hinsichtlich der Verwendbarkeit bei geringen Oberflächenspannungen (vgl. Tabelle 2.1): Wie bereits aus Abschnitt 4.3.4, Abbildung 5.8 (b) und Anhang A.1 bekannt, ergeben sich kleinere Tropfen und damit kürzere Tropfenbildungszeiten.
- Analog zur Messreihe am Tropfsystem LW-1,0-S2 führen u.a. Schwingungen der nach dem Abriss des vorangegangenen Tropfens am Senkrechttropfer verbleibenden Flüssigkeit zu Abweichungen der berechneten Werte.
- Die Tropfenbildungszeit in Abbildung B.2 (b) entspricht qualitativ dem in Abbildung 5.3 für Wasser dargestellten und erklärten Verlauf. Aufgrund der variierenden Stoffwerte (vgl. Tabelle 2.1) ist die Veränderung aufgrund der Änderung im Blasenbildungsprozess aber hin zu kleineren Füllvolumina (zwischen 20 ml und 30 ml) in der Flasche verschoben und die Änderung in der Tropfenbildungszeit ist, prozentual auf die Tropfenbildungszeit bezogen, stärker ausgeprägt.
- Die numerisch Simulation wurde mit einem zu den Messungen bei einem Füllvolumen von 30 ml bzw. 40 ml bzw. 50 ml vergleichbaren Volumenstrom durchgeführt und zeigt eine gute Übereinstimmung mit den zugehörigen Messwerten.
- Die mithilfe des Messaufbaus nach Hummel durchgeführte Gewichtsmessung liefert eine Abweichung von 3,4 %.

Glycerin (Gly-2,0-S2):

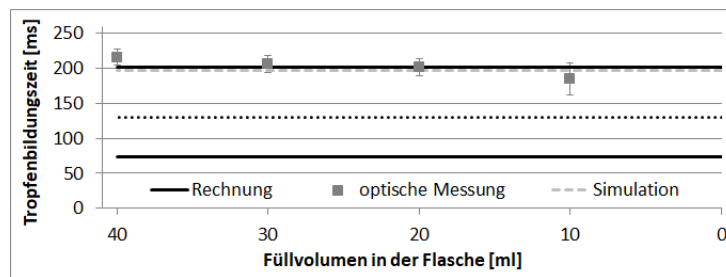
- Überprüfung des Berechnungsansatzes hinsichtlich der Verwendbarkeit bei Fluiden mit hoher Viskosität (vgl. Tabelle 2.1) und damit gemäß dem Gesetz von Hagen-Poiseuille (vgl. Gleichung (2.3)) bei geringeren Volumenströmen und somit großen Tropfenbildungszeiten.
- Die Ergebnisse zeigen insbesondere bei der Berechnung der Tropfenbildungszeit sehr gute Übereinstimmungen.
- Die Tropfenvolumina werden entsprechend Abbildung B.3 (a) zu gering abgeschätzt. Ursache dafür ist bei genauerer Analyse der Messwerte eine Erhöhung des Volumenstroms bei der Einschnürung des Tropfens (vgl. Abbildung 5.14) aufgrund der Reduktion des Drucks im Tropfenhals gemäß der Young-Laplace-Gleichung (vgl. Abschnitt 2.1.4). Daraus resultiert letztendlich ein höheres Volumen bei gleicher Tropfenbildungszeit. Der Fehler wird in Abbildung B.3 (c) unter „Wachstum Phase 3“ berücksichtigt.

- Die mithilfe des Messaufbaus nach Hummel durchgeführte Gewichtsmessung liefert eine Abweichung von 24,4 %.

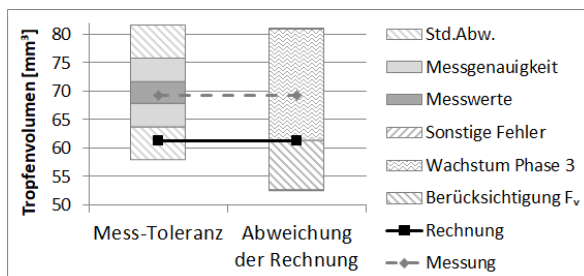
B.3.1 LW-1,0-S2



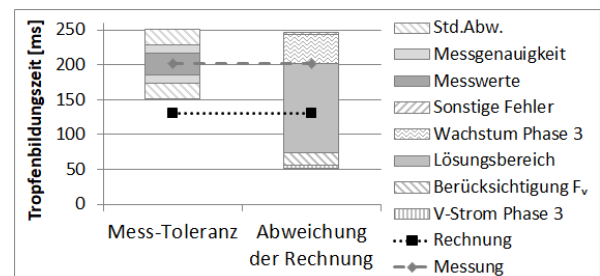
(a)



(b)



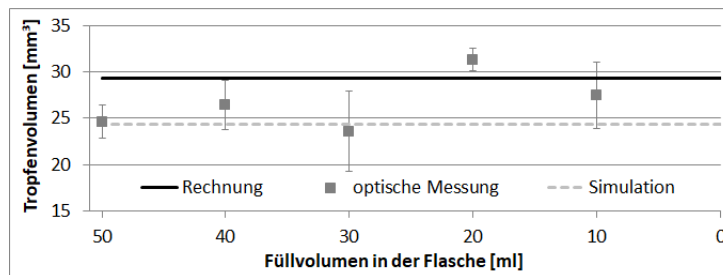
(c)



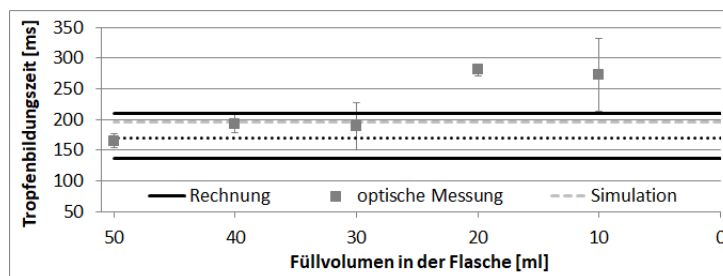
(d)

Abbildung B.1: Untersuchungen am Tropfendosiersystem LW-1,0-S2: (a) Tropfenvolumen; (b) Tropfenbildungszeit; (c) Fehlerabschätzung Tropfenvolumen; (d) Fehlerabschätzung Tropfenbildungszeit

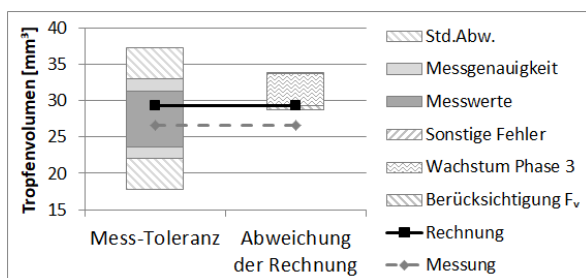
B.3.2 Eth-0,6-S2



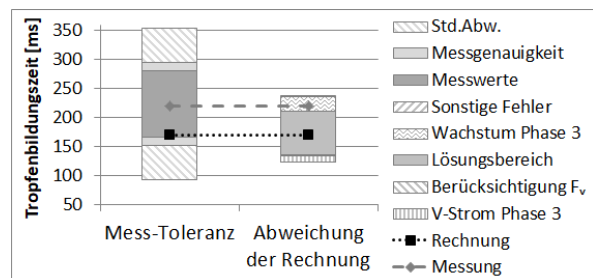
(a)



(b)



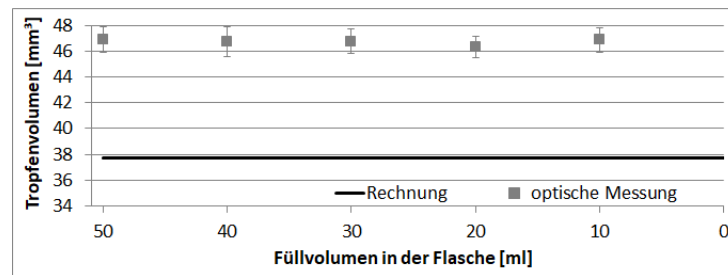
(c)



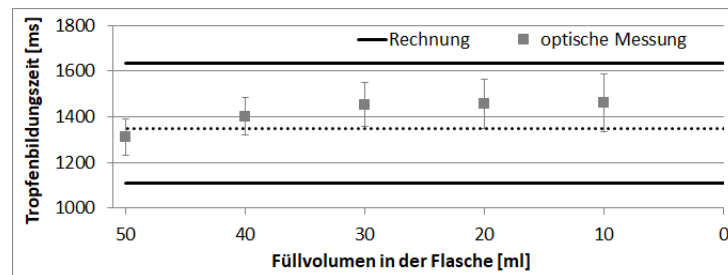
(d)

Abbildung B.2: Untersuchungen am Tropfendosiersystem Eth-0,6-S2: (a) Tropfenvolumen; (b) Tropfenbildungszeit; (c) Fehlerabschätzung Tropfenvolumen; (d) Fehlerabschätzung Tropfenbildungszeit

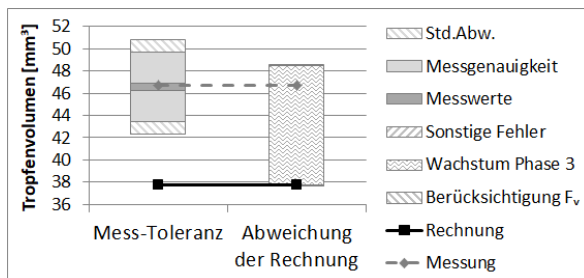
B.3.3 Gly-2,0-S2



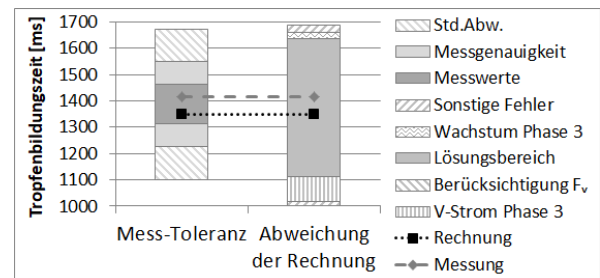
(a)



(b)



(c)



(d)

Abbildung B.3: Untersuchungen am Tropfendosiersystem Gly-2,0-S2: (a) Tropfenvolumen; (b) Tropfenbildungszeit; (c) Fehlerabschätzung Tropfenvolumen; (d) Fehlerabschätzung Tropfenbildungszeit

Anhang C

Optimierung medizinischer Tropfendosiersysteme

C.1 Übersicht über Patente zum Senkrechttropfer

Patent	Inhaber	Anmeldung	Titel
DE 16 36 263 U	Theo Metten	12.04.1950	Tropfeinsatz
DE 09 17 563 B	Hans Heinlein	vor 1954	Tropfeinsatz
DE 10 19 195 B	Herbert Brüne	03.07.1954	Aus einem Materialstück bestehender Tropf- und/oder Gießeinsatz
DE 11 51 193 B	Herbert Brüne	30.12.1954	Tropfeinsatz
DE 18 63 110 U	Hans Pahl	23.06.1962	Tropfeinsatz
DE 29 49 262 A1	Hans Heinlein	07.12.1979	Vorrichtung zur Tropfenweise Abgabe von Flüssigkeiten
DE 31 32 510 A1	Hans Heinlein	18.08.1981	Vorrichtung zur Tropfenweise Abgabe von Flüssigkeiten
DE 10 2009 016 788 A1	E./H.-J./J./S. Ahrens	07.04.2009	Mehrbereichs-Tropfer
DE 10 2012 214 426 B3	Aptar Radolfzell GmbH	14.08.2012	Tropfenspender
DE 10 2014 001 247 A1	pheneo GmbH	03.02.2014	Tropfer zum Abgeben von tropfen eines Fluids
DE 10 2015 205 339 B3	Heinlein Plastik-Technik GmbH	24.03.2015	Behälterverschluss mit Tropfvorrichtung

Tabelle C.1: Patente zum Thema Senkrechttropfer