

ОРИГИНАЛЬНЫЕ СТАТЬИ

УДК 543.544 + 543.545 + 543.08

© А. В. Солдаткин

О КОМПЬЮТЕРНОМ МОДЕЛИРОВАНИИ
МИКРОФЛЮИДНЫХ СИСТЕМ

В работе приведены результаты расчета струйной модели микрофлюидной системы осесимметричной и плоской геометрии. Проанализировано влияние способа ввода пробы, тепловыделения и наличия частиц на микрогидродинамику потока.

Список обозначений

d — диаметр капилляра;
 u_G — скорость (Гельмгольца—Смолуховского) частиц пробы ($u_G = \varepsilon_0 \cdot \varepsilon \cdot \zeta \cdot E / \mu$);
 ε_0 — электрическая постоянная;
 ε — диэлектрическая проницаемость буфера;
 ζ — электрокинетический потенциал;
 E — напряженность электрического поля;
 μ — динамическая вязкость буфера;
 φ — потенциал внешнего электрического поля;
 L — длина капилляра;
 D — коэффициент диффузии;
 ρ — плотность буфера;
 T — температура буфера и пробы;
 R — газовая постоянная;
 u, v — продольная и поперечная компоненты скорости пробы;
 x, y — продольная и поперечная координаты;
 q — заряд;
 γ_1 — плотность заряда;
 C — концентрации пробы;
 c_p — теплоемкость при постоянном давлении;
 G — массовый расход пробы;
 a — коэффициент температуропроводности;
 ν — кинематическая вязкость, $\nu = \mu / \rho$;
 β — коэффициент теплового расширения смеси;
 $Pr = \nu / a$ — число Прандтля;
 $Sc = \nu / D$ — число Шмидта;
 $Gr = \beta g \Delta T d^3 / \nu^2$ — число Грасгофа;
 $Re = u \cdot d / \nu$ — число Рейнольдса;
 τ — касательное напряжение в потоке;
 p — давление в потоке;
 δ — толщина микроструи;
 $\Delta T = T - T_\infty$ — разность температуры смеси в капилляре и температуры стенки капилляра.

ВВЕДЕНИЕ

В развитие работ [1, 2] в данной статье приводятся результаты моделирования микрофлюидной

системы осесимметричной и плоской геометрии. Распространенная на практике процедура ввода пробы (стекинг) посредством электрического поля формирует струйное течение на входе в капилляр, и возникает необходимость анализа струйных потоков в микрофлюидных системах.

Микрофлюидные системы с выпуском представляют интерес при изучении электрокинетических течений в сложных геометрических конфигурациях с различными граничными условиями. В этой статье представлен анализ влияния инерционных эффектов и реологии в электрокинетических течениях. В стандартных приложениях микрочипов поле электрокинетического потока можно разделить на внутреннюю область, где доминируют вязкие и электростатические силы, и внешнюю область, где доминируют силы инерции и силы давления. Эти две области разделяются условиями для скорости скольжения, которые определяются уравнением Гельмгольца—Смолуховского. Справедливость этого предположения исследуется посредством анализа поля скоростей в двумерных течениях в канале с движением за счет давления и импульсным запуском электрического поля. Определены условия аналогии между полем скоростей и электрическим полем: однородный поверхностный заряд, малые числа Рейнольдса и Струхала, однородные свойства жидкости, нулевой перепад давления между входом и выходом.

Электрокинетика представляет собой движение жидкости относительно фиксированной заряженной сплошной поверхности. Это движение происходит в том случае, когда электрическое поле прилагается к электрическому двойному слою, который спонтанно образуется при взаимодействии жидкости и поверхности при их контакте. Толщина этого двойного слоя определяется противоположно направленными силами электростатического притяжения и тепловой диффузии, а также реологией смеси и некоторыми другими факторами и имеет значение порядка длины Дебая. При разработке микрофлюидных техноло-

гий целесообразно использовать электрокинетический механизм в качестве метода контроля жидкостей в чипах микрофлюидных систем. Электрокинетическая подача смеси в чипах широко используется при электрофоретическом и хроматографическом разделении и в других "микрочиповых лабораториях", имея существенные преимущества по сравнению с автономными капиллярными системами, включая возможность мультипликации сетевых канальных потоков и уменьшения времени анализа.

В связи с обозначенным преимуществом чипов весьма актуален анализ процедуры ввода пробы (стекинг) и учет реологии смеси, что является необходимым при анализе биологических жидкостей.

В различных исследованиях относительно теории электроосмотических потоков были проанализированы эффекты инерции потока, градиентов давления, неоднородность ζ -потенциала в микрофлюидных каналах.

ФОРМУЛИРОВКА ПРОБЛЕМЫ

Анализ работ, посвященных течению в микрофлюидных системах показывает, что инерционные силы играют немаловажную роль. Процедура ввода пробы (стекинг) в микрочиповый крест несомненно носит струйный характер [3]. Струевидная форма пробы формируется посредством электрических сил в поперечном сечении перпендикулярно направлению ее ввода. Учет электрических сил микрофлюидных систем в уравнении движения можно осуществить двояким путем [4]. Первый — разбиение на две зоны области течения: в первой, прилегающей к стенке капилляра, пренебрежимо малы силы инерции и имеет место баланс сил давления, вязкости и электрических сил; во второй, вдали от стенки, силы инерции сравнимы с остальными, число Рейнольдса порядка единицы и более, а электрические силы стремятся к нулю на оси капилляра. Второй путь — более целесообразен при компьютерном моделировании микрофлюидных систем: моделирование электрических сил во всем профиле течения в капилляре. Помимо этого, в компьютерной модели учитывается тепловыделение при течении пробы с буфером в капилляре — наличием архимедовых сил в уравнении движения; наличие частиц (необходимое условие возникновения электрофореза) моделируется отрицательной архимедовой силой.

В данной статье в продолжение работ [1, 2] описывается компьютерное моделирование течения в микроканале с учетом электрических сил.

УРАВНЕНИЯ КОМПЬЮТЕРНОЙ МОДЕЛИ

Уравнения компьютерной модели микрофлюидной системы имеют вид:

$$\begin{aligned} \rho \cdot u \cdot \frac{\partial u}{\partial x} + \rho \cdot v \cdot \frac{\partial u}{\partial y} &= \\ &= \frac{\partial p}{\partial x} + \frac{1}{y^i} \cdot \frac{\partial}{\partial y} (y^i \cdot \frac{\partial \tau}{\partial y}) + F_q + F_A, \\ \rho \cdot \frac{\partial (y^i \cdot u)}{\partial x} + \rho \cdot \frac{\partial (y^i \cdot v)}{\partial y} &= 0, \\ F_q = q \cdot E, \quad F_A = \beta \cdot g \cdot \Delta T, \\ \rho \cdot c_p \cdot u \cdot \frac{\partial \Delta T}{\partial x} + \rho \cdot c_p \cdot v \cdot \frac{\partial \Delta T}{\partial y} &= \\ &= \frac{a}{y^i} \cdot \frac{\partial}{\partial y} (y^i \cdot \frac{\partial \Delta T}{\partial y}), \\ \rho \cdot u \cdot \frac{\partial C}{\partial x} + \rho \cdot v \cdot \frac{\partial C}{\partial y} &= \frac{D}{y^i} \cdot \frac{\partial}{\partial y} (y^i \cdot \frac{\partial C}{\partial y}), \end{aligned} \quad (1)$$

$i = 0$ — плоская геометрия; $i = 1$ — осесимметричный случай.

Рассматривается течение пассивной смеси пробы с буфером или течение смеси с незначительной скоростью химической реакции.

Следует заметить, что трансформация уравнений Навье—Стокса в уравнения пограничного слоя обусловлена тем, что длина капилляра много больше его характерного поперечного размера, т. е. продольный масштаб много больше поперечного. Можно показать, что в этом случае вторые производные от скорости, избыточной температуры и концентрации пробы по продольной координате малы по сравнению со второй производной по поперечной координате: по терминологии Сантьяго Х. [4] — во второй зоне, вдали от стенки капилляра.

Граничные условия:

$$\begin{aligned} u = u_G, \quad C = 0, \quad \Delta T = 0 \quad \text{для } y \rightarrow \infty; \\ \frac{\partial u}{\partial y} = 0, \quad \frac{\partial C}{\partial y} = 0, \quad \frac{\partial \Delta T}{\partial y} = 0 \quad \text{для } y = 0. \end{aligned} \quad (2)$$

Начальные условия:

$$\begin{aligned} x = 0, \\ u = u_0, \quad C = 0 \quad \text{для } |y| \leq d; \\ u = 0, \quad C = 0 \quad \text{для } |y| > d. \end{aligned} \quad (3)$$

Интегральные соотношения для рассматриваемой системы имеют следующий вид.

Для импульса:

$$\rho \cdot \int_0^\infty u^2 \cdot y \cdot dy = \int_0^\infty (F_q + F_A) \cdot y \cdot dy;$$

для массового расхода:

$$\rho \cdot \int_0^\infty u \cdot C \cdot y \cdot dy = \text{const} = G_0.$$

Наличие инвариантов струйного течения позволяет получить численное решение задачи (1) при автоматическом контроле счета.

Введем замену переменных:

$$\xi = x, \quad \eta = \left[2 \int C \cdot u \cdot y \cdot dy \right]^{1/2}.$$

Запишем уравнение переноса импульса в новых переменных (2-я зона):

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial \xi} = & (C^2 / \eta) \frac{\partial}{\partial \eta} (u y^2 \frac{\partial u}{\partial \eta}) + \\ & + (C / \eta^2) (1 - 1 / \text{Sc}) (u y^2 \frac{\partial u}{\partial \eta} \frac{\partial C}{\partial \eta}) + \\ & + (\text{Gr} / \text{Re}) \Delta T / u. \end{aligned} \quad (4)$$

Аналогично преобразуется уравнение конвективной диффузии и переноса избыточного теплосодержания:

$$\begin{aligned} \frac{\partial C}{\partial \xi} = & (C^2 / \text{Sc} \cdot \eta) \frac{\partial}{\partial \eta} (u y^2 \frac{\partial C}{\partial \eta}), \\ \frac{\partial \Delta T}{\partial \xi} = & (\Delta T^2 / \text{Pr} \cdot \eta) \frac{\partial}{\partial \eta} \left(u y^2 \frac{\partial \Delta T}{\partial \eta} \right). \end{aligned} \quad (5)$$

А поперечная компонента скорости v определяется из уравнения неразрывности:

$$\begin{aligned} v = & -u / y \int (1 / u^2) \frac{\partial}{\partial \eta} \left[C / \eta \left(u y^2 \frac{\partial u}{\partial \eta} \right) \right] d\eta - \\ & - (\text{Gr} / \text{Re}) (u / y) \int \left(\frac{\eta}{u^3} \right) d\eta, \end{aligned} \quad (6)$$

$$y = \left[2 \int \frac{\eta \cdot d\eta}{u \cdot C} \right]^{1/2}.$$

(Все величины безразмерны. В качестве масштаба скорости, температуры, концентрации выбраны их начальные значения на входе в капилляр, а в качестве масштаба длины — диаметр капилляра).

Начальные и граничные условия в новых переменных имеют вид:

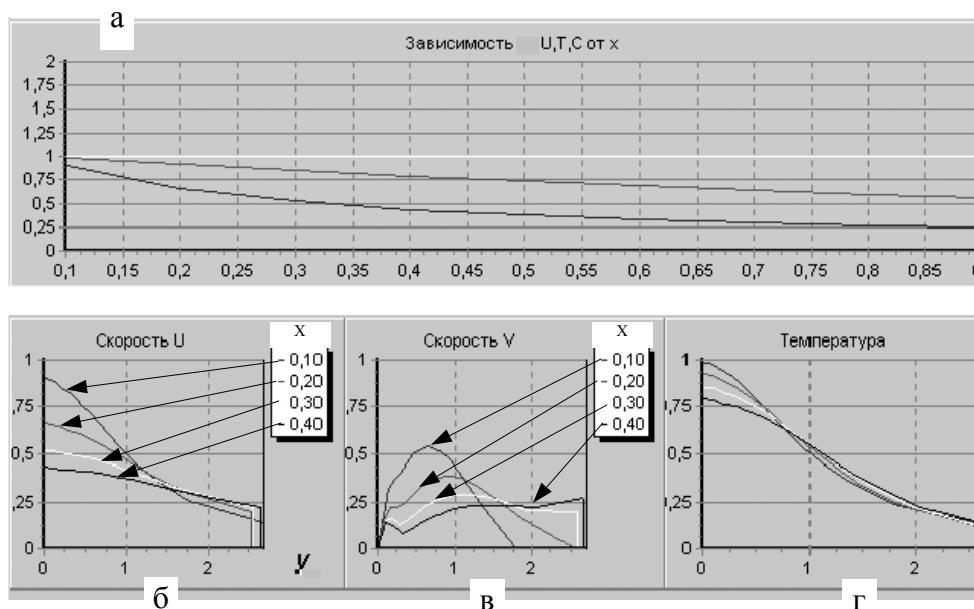


Рис. 1. Изменение продольной (U) и поперечной (V) компонент скорости смеси, избытка температуры (T) и концентрации пробы (C): а — вдоль оси капилляра; б, в, г — в поперечных сечениях (0.1, 0.2, 0.3, 0.4)

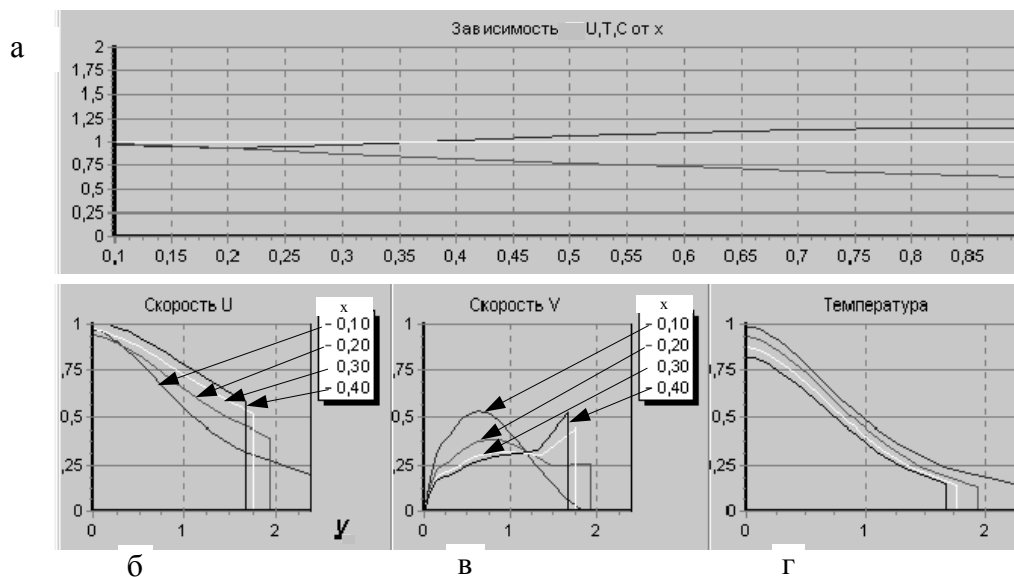


Рис. 2. Изменение продольной (U) и поперечной (V) компонент скорости смеси, избытка температуры (T) и концентрации пробы (C) при тепловыделении ($Gr/Re = 2$): а — вдоль оси капилляра; б, в, г — в поперечных сечениях 0.1, 0.2, 0.3, 0.4

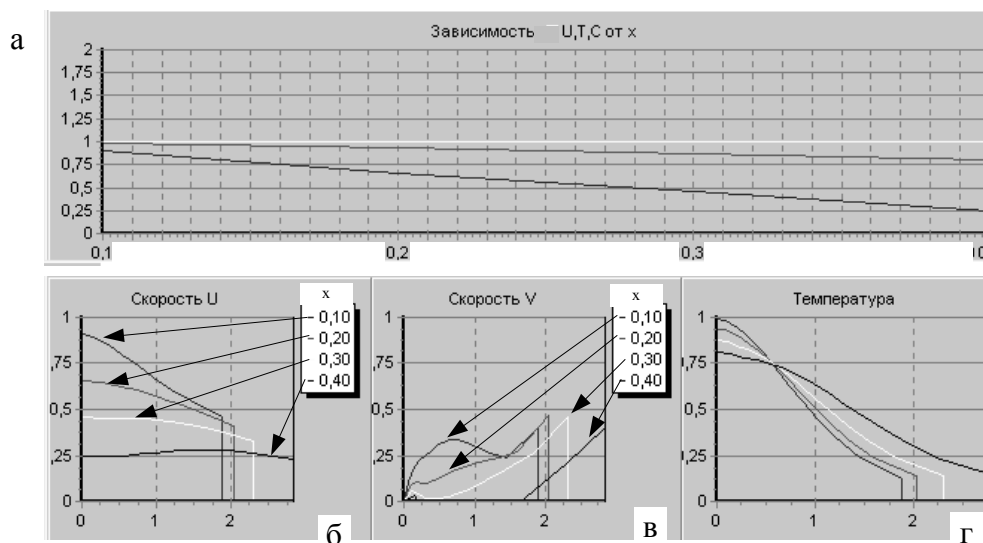


Рис. 3. Изменение продольной (U) и поперечной (V) компонент скорости смеси, избытка температуры (T) и концентрации пробы (C) при наличии частиц или с охлаждением ($Gr/Re = -0.5$): а — вдоль оси капилляра; б, в, г — в поперечных сечениях 0.1, 0.2, 0.3, 0.4

$$\begin{aligned}
 u=1, C=1, \Delta T=1: \quad 0 \leq \eta \leq 1, \quad \xi=0; \\
 u=0, C=0, \Delta T=0: \quad \eta=1, \quad \xi=0; \\
 \frac{\partial u}{\partial \eta} = \frac{\partial C}{\partial \eta} = \frac{\partial \Delta T}{\partial \eta} = 0 = v: \quad \eta=0; \quad \xi > 0; \\
 u=u_G, C=0, \Delta T=0: \quad \eta=1, \quad \xi > 0.
 \end{aligned} \quad (7)$$

Таким образом, решение задачи свелось к численному интегрированию уравнений (4–6)

с начальными и граничными условиями (7) в конечной полосе интегрирования по η от 0 до 1. Непосредственно численное интегрирование осуществляется методом прямых при равномерном разбиении полосы интегрирования ($\xi > 0, 0 \leq \eta \leq 1$) на P частей (P в расчетах варьировалось от 10 до 20).

На рис. 1–3 приведены результаты расчета полей продольной и поперечной компонент скоро-

сти, концентрации пробы, избыточной температуры в различных поперечных сечениях капилляра и вдоль его оси. Продольная скорость на границе 2-ой зоны (u_G) полагалась равной нулю.

При отсутствии тепловыделения и при его наличии профили продольной скорости, температуры и концентрации быстро становятся пологими и выходят на автомодельный режим (на расстоянии порядка 0.4 диаметра капилляра); при охлаждении ситуация принципиально иная: продольная скорость быстро уменьшается вдоль оси капилляра, а профили характерных величин "помнят" начальные значения. Кроме того, в этом случае вдоль оси вблизи входа в капилляр поперечная скорость имеет значительные градиенты, что приводит к генерации возмущений в потоке.

Другой характерный вариант расчета течения в микроканале приведен ниже для плоской геометрии (рис. 4, 5).

Следует отметить, что при компьютерном моделировании течения в микроканале использовалось выражение для функции тока в уравнении движения

$$\Psi = \cos h [kh (y - 1/2)] / \cos(kh/2),$$

Ψ — функция тока; k — величина, обратная длине Дебая; h — ширина канала.

Из рис. 4 видно, что наименьшие поперечные градиенты продольной скорости пробы при вводе в капилляр наблюдаются на расстоянии около 0.5–0.6 (равенство скоростей на оси капилляра и около его поверхности).

На рис. 5 показано изменение продольной компоненты скорости (U) вдоль оси микроканала. Следует отметить, что учет электрических сил приводит к характерной перестройке профиля серповидной формы примерно с расстояния порядка 0.6 от входа в микроканал. В данном случае профили становятся фрактальными (афиноподобными), т. е. осуществляется выход на автомодельный режим.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Анализ результатов компьютерного моделирования течения пробы с буфером с учетом ее ввода посредством электрического поля позволяет выбрать адекватную микрогидродинамическую модель и оптимальные области проведения концентрирования пробы и ее измерения.

Работа выполнена при поддержке грантов:

1. Научная программа Санкт-Петербургского научного центра РАН "Аналитические приборы на основе микрофлюидных технологий" (раздел 2, проект 2, 2003 г.);

2. Межведомственная научно-техническая программа "Вакцины нового поколения и диагно-

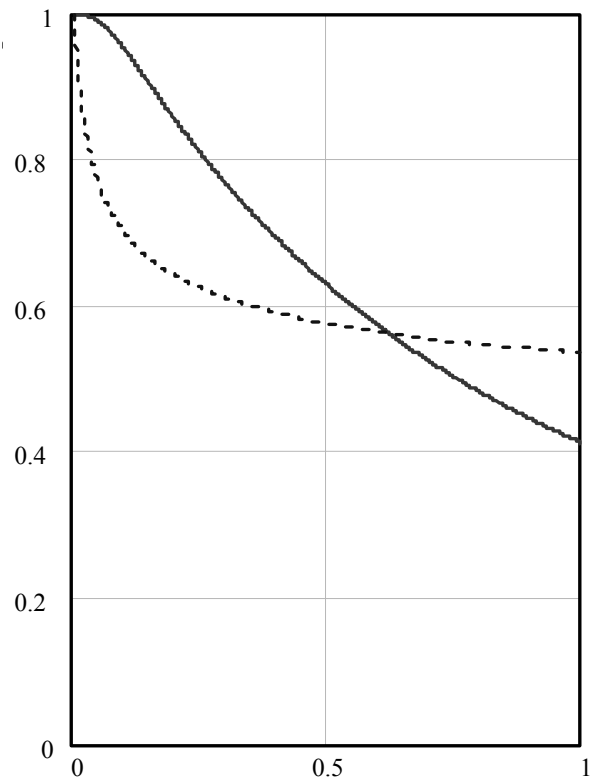


Рис. 4. Изменение продольной скорости смеси пробы с буфером вдоль оси микроканала.
— изменение скорости на оси микроканала,
— — — вблизи поверхности микроканала

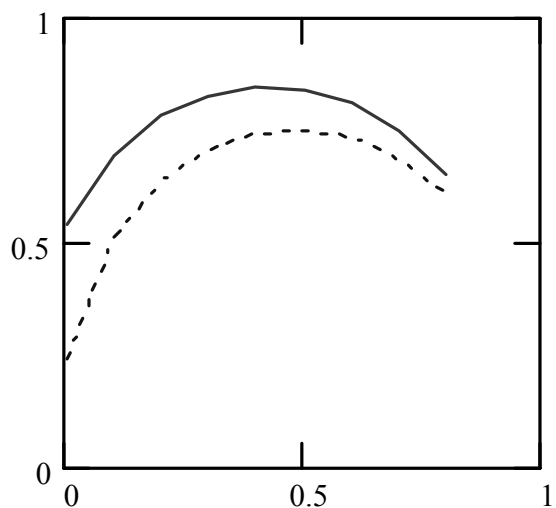


Рис. 5. Профили скорости смеси пробы с буфером вдоль оси микроканала на расстоянии
— 0.1,
— — — 0.4
от входа в микроканал

стические системы будущего. Новые принципы детекции и разработка на их основе приборов для автоматизации лабораторно-диагностических методов исследования" (ГК N43.269.11.0206, 2002–2006 гг.).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Солдаткин А.В. Микрогидродинамическое моделирование проточных аналитических систем // Научное приборостроение. 2003. Т. 13, № 1. С. 40–44.
2. Солдаткин А.В. Струйная модель микрореактора в микрофлюидных аналитических системах // Научное приборостроение. 2003. Т. 13, № 3. С. 56–61.

3. Santiago J.G. Electroosmotic flows in microchannels with finite inertial and pressures forces // Anal. Chem. 2001. V. 73. P. 2353–2365.
4. Bharadwaj R., Santiago J.G., Mohammadi B. Design and optimization of on-chip capillary electrophoresis // Electrophoresis. 2002. N 23. P. 2729–2744.

*Институт аналитического приборостроения РАН,
Санкт-Петербург*

Материал поступил в редакцию 27.10.2003.

ON THE COMPUTER SIMULATION OF MICROFLUIDIC SYSTEMS

A. V. Soldatkin

Institute for Analytical Instrumentation RAS, Saint-Petersburg

The paper presents the results of numeric calculations for a microfluidic flow system model in the axially-symmetric and plane geometry. The effect of the sample injection mode, heat release and particle content on the flow microhydrodynamics is considered.