МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРОКИНЕТИЧЕСКОГО ПЕРЕНОСА В МИКРОЧИПОВЫХ УСТРОЙСТВАХ

Г. В. Лесневский, С. В. Петруша

ВВЕДЕНИЕ

В современном мире всё большую популярность приобретают жидкостные микроустройства (так называемые Lab-on-a-Chip – лаборатории-чипы), позволяющие быстро и эффективно осуществлять одновременно управление и анализ потоков жидких сред величиной в несколько пиколитров (10^{-12} л) в секунду [1]. Чрезвычайно важным их достоинством является возможность функционирования при очень малом объеме жидкости (несколько нанолитров). Однако малые размеры устройств и малые количества реагентов приводят к уменьшению числа молекул, доступных для анализа и детектирования. Помимо увеличения чувствительности детекторов альтернативой является использование различных методов повышения концентраций (обогащения) целевых компонент раствора.

Для жидкостного микрочипа, представляющего собой микроканал, соединяющий резервуары с раствором, было замечено, что наличие неоднородностей в канале (например, избирательной наномембраны или гальванически изолированной проводящей пластинки, так называемого биполярного электрода), к концам которого приложена разность потенциала, позволяет осуществить обогащение и разделение целевых компонент раствора, что облегчает их детекцию и дальнейшие манипуляции с ними [1]. Однако стоит отметить, что, во-первых, результирующие параметры микрочипа неочевидным образом зависят от параметров как неоднородностей, так и канала, а во-вторых, создание различных единичных микрочипов с варьируемыми параметрами электрода и канала является дорогим. Поэтому проблема моделирования процессов, происходящих внутри жидкостных микрочипов, является актуальной, так как она позволяет не только снизить экономические затраты при параметрическом изучении свойств прибора, но и получить информацию о процессах, происходящих внутри микрочипа.

В данной статье предлагается и исследуется модель физико-химических явлений, происходящих внутри микроканала, к которому приложено внешнее электрическое поле, при наличии в нем неоднородностей в виде биполярного электрода и наномембраны.

ОСНОВНЫЕ ФИЗИЧЕСКИЕ ЯВЛЕНИЯ

1. Электрокинетический перенос

Типичным элементом жидкостного микрочипа является микроканал, соединяющий резервуары с раствором электролита. Поперечные размеры микроканала обычно варьируются от сотен нанометров до десятков микрометров, в то время как его длина может достигать нескольких сантиметров.

При приложении внешнего электрического поля, в растворе возникнет упорядоченное движение ионизированных частиц – перенос носителей электрического заряда или электрический ток. На данный перенос будут также накладываться диффузионное перемещение частиц за счёт различия концентраций и перенос из-за макроскопического течения жидкости. Данный тип движения заряженных частиц и сопряжённый с ним перенос заряда называется электрокинетическим переносом (ЭОП).

Изменения концентрации ионов i-го типа описываются уравнением Нернста-Планка:

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} = \nabla\left[D_i \nabla n_i - \mathbf{v} n_i + \frac{D z_i e}{kT} n_i \left(\nabla\varphi + \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \right) \right], \tag{1}$$

где D_i – коэффициент диффузии, $\mathbf{v}$ – макроскопическая скорость жидкости, z_i – зарядовое число, k – постоянная Больцмана, T – температура, φ – электрический потенциал, $\mathbf{A}$ – векторный потенциал.

В правой части уравнения (1) можно выделить три слагаемых, каждое из которых описывает одну из компонент переноса: электрический поток, диффузионный поток и ЭОП.

Для описания электрического поля в данной системе применяется уравнение Пуассона:

$$\Delta\varphi = -\frac{\rho}{\varepsilon\varepsilon_0}, \tag{2}$$

где ρ – суммарная плотность зарядов в данной точке, ε_0 – электрическая постоянная, ε – диэлектрическая проницаемость жидкости.

Полученная система из уравнений (1) и (2) называется системой уравнений Пуассона-Нернста-Планка и полностью описывает явления электрокинетического переноса при заданном распределении макроскопической скорости, определяемым уравнением Навье-Стокса, с учётом сил электростатического взаимодействия [2]. Однако стоит отметить, что геометрия прямого микроканала и явления, происходящие вблизи стенки микроканала, позволяют получить решение для макроскопического потока жидкости, не решая непосредственно уравнения Навье-Стокса.

2. Двойной электрический слой и электроосмотический поток

Неодинаковое взаимодействие вещества стенок микроканала с разными ионами раствора приводит к появлению электрического заряда стенки, что в свою очередь приводит к перераспределению зарядов раствора так, чтобы экранировать заряд стенки от остального раствора, то есть к появлению так называемого двойного электрического слоя (ДЭС) [3].

При наличии внешнего электрического поля вдоль стенки канала подвижный слой ионов ДЭС придёт в движение из-за взаимодействия своего заряда с электростатическим полем. При этом он будет увлекать за собой жидкость, находящуюся внутри канала, и приводить к генерации ЭОП. Характерная особенность ЭОП – практически постоянный профиль скорости вдоль ширины канала.

Таким образом, наличие ДЭС можно заменить граничными условиями отсутствия потока внутрь стенки канала, касательности напряженности электрического поля, а также постоянным профилем макроскопической скорости жидкости.

3. Наномембрана

Наномембрана расположена поперёк канала и ввиду своих свойств обладает как зарядовой избирательностью, так и избирательностью по размеру частиц. В простейшем случае можно ограничиться заданием мембраны наличием постоянного потока частиц одного сорта и полным отсутствием потока частиц другого.

4. Биполярный электрод

При приложении внешнего поля к микроканалу-часть электрического тока будет проходить через биполярный электрод за счёт явлений электролиза вблизи торцов, причем один из них играет роль анода, другой – катода. Таким образом, для упрощения описания реакции на торцах электрода можно заменить условием постоянства потока частиц через поверхность.

Как можно видеть, с данного момента постановка задач с полупроницаемой наномембраной и биполярным электродом становится идентичной и отличается только граничными условиями.

ЧИСЛЕННАЯ СХЕМА

Будем искать стационарное решение системы уравнений. Для этого воспользуемся методом релаксации, суть которого заключается в добавлении в уравнения равное при точном решении нулю слагаемое и последующей заменой дифференциальных операторов разностными [4–5]. Для того чтобы проверить точность решения системы уравнений Нернста-Планка и Пуассона была выбрана тестовая задача, имеющая аналитическое решение – уравнение Пуассона-Больцмана. Постановка задачи следующая: найти значения концентраций ионов, и потенциал в области между двумя параллельными плоскостями, на которых значения концентраций и потенциал фиксированы.

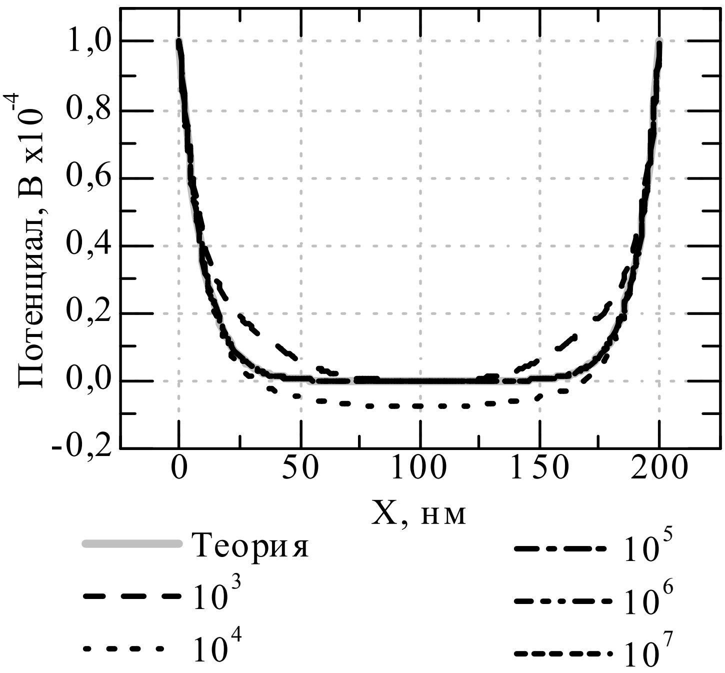

Рис. 1. График распределения потенциала от координаты

Для такой задачи можно получить аналитическое решение в предположении, что концентрации ионов не сильно отличаются от равновесных. На графике на рис. 1 представлены теоретические значения потенциала и концентраций ионов и значения, полученные используя разностную схему при разном числе итераций. Как можно видеть, уже при числе итераций равном 10^5 численное решение практически совпадает с аналитическим. Таким образом, можно сделать вывод, что реализованная численная схема достаточно точно решает тестовую задачу и стоит надеяться, что она не потеряет своей точности и при решении других задач.

Литература

1. *Hlushkou D., Perdue R., Dhopeshwarkar R, et al.* Electric field gradient focusing in microchannels with embedded bipolar electrode // Lab on a Chip, 2009, 9, 1903–1913
2. *Ландау Л Д., Лифшиц Е. М.*, Теоретическая физика: Т. 6. Гидродинамика / М.: Наука, 1986.
3. *Савицкая Т. А.*Коллоидная химия: строение двойного электрического слоя / БГУ, 2011.
4. *Самарский А. А.* Введение в численные методы. СПб.: Лань, 2005.
5. *Турчак Л. И., Плотников П. В.* Основы численных методов. М.: Физматлит, 2003.