

# 마이크로 유로에서 맥동유동에 의한 혼합촉진에 관한 수치해석

김서영\* · 리광훈\*\*

## A Numerical Simulation on Mixing Enhancement by Inlet Flow Pulsation in a Micro Conduit

Seo Young Kim\*, Gwang Hoon Rhee\*\*

Key Words: 미소유체역학(Micro-fluidics), 혼합(Mixing), 바이오칩(Biochip), 맥동유동(Pulsating flow)

### Abstract

A numerical study has been conducted to investigate the effect of an inlet flow pulsation on mixing of two solutions with different concentrations in a micro conduit. We treat an unsteady, incompressible and two-dimensional flow through a micro conduit by adopting the momentum equations with the electrostatic force due to streaming current and the concentration equation. The feasibility of the inlet flow pulsation to enhance the mixing process inside the micro conduit is carefully examined by varying the inlet pulsation frequency. When a low-frequency pulsation is induced at the inlet, the interface between two solutions with different concentrations becomes wavy, which results in mixing enhancement. As the pulsation frequency increases, the waviness of the interface becomes meager, and the concentration gradients at the interface approach the value for the non-pulsating steady flow.

	기호설명	St	스트라울수, $f H/V_i$
		t	무차원시간
A	맥동진폭 [m/s]	X, Y	무차원좌표
D	분자확산계수 [ $m^2/s$ ]	U, V	무차원속도
e	기초전하 [ $1.602 \times 10^{-19} C$ ]	C	무차원농도
f	맥동주파수 [Hz]	P	무차원압력
W	입구채널 폭 [m]		
L	마이크로 채널 길이 [m]	그리스문자	
H	마이크로 채널 높이 [m]	$\epsilon$	전해질의 유전상수
$n_0$	전해질의 총 이온농도 [ $m^{-3}$ ]	$\epsilon_0$	진공유전율 ( $8.85 \times 10^{-12} C/Vm$ )
$k_B$	Boltzmann 상수 [ $1.38 \times 10^{-23} J K^{-1}$ ]	$\kappa$	Debye 두께의 역수 [m-1]
Re	레이놀즈수, $V_i H/\nu$	$\phi_H - \phi_L$	외부 인가 전위차 [V]
Sc	슈미트수, $\nu/D$	$\rho_e$	전하밀도 [ $C m^{-3}$ ]
		$\Psi$	전기전위 [V]

\* KIST

\*\* Uni. of Seoul

v	점성계수 [m <sup>2</sup> /s]
c	제타 전위 [V]
o	전해질용액의 이온가

## 1. 서론

최근에 Lab-on-a-chip (LOC), 마이크로 combustor 및 마이크로 cooler의 개발과 관련하여 마이크로 유로 내의 Microfluidics 연구가 활발하다. 특히 biochip과 같은 마이크로 유로내에서는 다양한 시료와 완충액 또는 반응액의 혼합이 필수적이다. 그러나 마이크로 유로내의 레이놀즈수는 1이하의 매우 느린 점성유동 (creeping flow)으로 Taylor dispersion이 낮아 유체의 혼합이 매우 작다. 더구나 마이크로 유로를 통과하는 생체분자(biomolecule)의 물질확산계수(mass diffusion coefficient)는  $0.2 - 11 \times 10^7 \text{ cm}^2/\text{sec}$ 로 매우 낮아 단순한 분자확산 만에 의한 유체혼합은 반응을 위한 긴 유로를 필요로 하게 된다. 따라서 마이크로 유로내에서 충분한 유체혼합을 달성하기 위한 다양한 마이크로 유로구조에 대한 연구가 진행되고 있다 [1].

본 연구에서는 DNA chip, Protein chip 및 LOC의 개발에 있어서 필수적으로 요구되는 유체의 혼합을 촉진하기 위한 시도로 마이크로 채널의 입구유동에 맥동을 인가했을 경우의 유체혼합현상을 파악하기 위한 수치 해석을 수행하였다. 마이크로 유로에서의 낮은 Reynolds수 유동으로 인해 채널 벽면의 정전기적 작용을 포함한 운동량 방정식이 고려되었다 [2].

## 2. 해석모델 및 수치해석 방법

### 2.1 지배방정식 및 경계조건

Fig. 1은 본 연구에서 고려된 마이크로 채널로서 입구는 T형 junction으로 위와 아래에서 각각 시료와 반응 수용액이 유입되는 것을 나타내고 있다. 유입된 시료와 반응액은 후류로 흐르면서 두 수용액사이에 물질전달이 일어나 균일한 농도의 수용액이 된다. 마이크로 채널의 높이는  $H$ 이며, 유로 내부 유동은 2차원 비압축성 유동이며, 물성치는 일정하다고 가정하였다.

마이크로 채널에서는 채널벽이 전해질 수용액과 접촉할 때 벽면이 전하를 띄게 된다 [2-5]. 정전기적 작용으로 동전하 이온(co-ion)과 상대이온(counter-ion)이 전하를 띤 벽을 따라 전기이중층(EDL)을 형성하

며 재 분포하게 된다. 정전기학 이론에 따라 전위분포는 다음과 같은 프와송 방정식을 따른다.

$$\nabla^2 \Phi = -\frac{\rho_e}{\epsilon \epsilon_0} \quad (1)$$

여기서  $\epsilon$ 는 전해질의 유전상수,  $\rho_e$ 는 전하밀도 [ $\text{C m}^{-3}$ ],  $\epsilon_0$ 는 진공유전율 [ $8.854 \times 10^{-12} \text{ C V}^{-1} \text{ m}^{-1}$ ]이다. 식(1)에서 전위  $\Phi$  [V]는 다음과 같이 두 전위의 합으로 표현될 수 있다 [5].

$$\Phi = \phi + \psi \quad (2)$$

$\phi$ 는 외부 인가전기장에 의한 전위이며  $\psi$ 는 채널 벽면전하에 의한 정전기적 전위를 나타낸다. 따라서 식 (1)은 다음과 같이 두개의 분리된 방정식으로 표현될 수 있다.

$$\nabla^2 \phi = 0 \quad (3)$$

$$\nabla^2 \psi = -\frac{\rho_e}{\epsilon \epsilon_0} \quad (4)$$

마이크로 채널을 흐르는 1:1 전해질 수용액의 이온농도가 Boltzmann 분포를 따른다고 가정하면 위의 전하밀도  $\rho_e$ 는 다음과 같이 표현된다.

$$\rho_e = \sigma e (n^+ - n^-) = -2\sigma e n_0 \sinh\left(\frac{\sigma e \psi}{k_b T}\right) \quad (5)$$

이 때  $\sigma$ 는 전해질용액의 이온가,  $e$ 는 기초전하 [ $1.602 \times 10^{-19} \text{ C}$ ],  $n_0$ 는 전해질의 총 이온농도 [ $\text{m}^{-3}$ ],  $k_b$ 는 Boltzmann 상수 [ $1.38 \times 10^{-23} \text{ J K}^{-1}$ ]이다. 식(3)-(5)을 정리하여 무차원 변수  $\bar{\phi} = (\phi - \phi_L)/(\phi_H - \phi_L)$ ,  $\bar{\psi} = \sigma e \psi / (k_b T)$ 를 도입한 방정식은 다음과 같다.

$$\nabla^2 \bar{\phi} = 0 \quad (6)$$

$$\nabla^2 \bar{\psi} = (\kappa H)^2 \sinh(\bar{\psi}) \quad (7)$$

$H$ 는 채널의 높이, 무차원변수  $\kappa$  [ $\text{m}^{-1}$ ]는 Debye-Huckel 변수로 1:1 전해질의 경우에  $\kappa = (2n_0 \sigma^2 e^2 / \epsilon \epsilon_0 k_b T)^{1/2}$ 이며, 마이크로 채널에서 EDL 두께의 역수를 나타낸다.

따라서 마이크로 채널에서 벽면의 정전기력 영향과 맥동유동의 영향을 해석하기 위한 무차원 비정상 운동량방정식과 물질전달 방정식은 단위길이당 전기장강도를  $\vec{E} = -\nabla \phi$ 라 하면 다음과 같다.

$$\nabla \cdot \vec{V} = 0 \quad (8)$$

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \vec{V} \cdot \nabla U = -\nabla P + \frac{1}{Re} \nabla^2 U + C_1 \frac{\partial \bar{\phi}}{\partial X} \sinh(\bar{\psi}) - C_2 \Xi \quad (9)$$

$$\frac{\partial V}{\partial t} + \vec{V} \cdot \nabla V = -\nabla P + \frac{1}{Re} \nabla^2 V + C_1 \frac{\partial \bar{\phi}}{\partial Y} \sinh(\bar{\psi}) \quad (10)$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \vec{V} \cdot \nabla C = \frac{1}{Re \cdot Sc} \nabla^2 C \quad (11)$$

여기서, 계수  $C_1 = \sigma en_o (\phi_H - \phi_L) / (\rho V_i^2 / 2)$ ,  $C_2 = 4H \sigma e_2 n_o^2 / (\rho \lambda V_i)$ 이다. 식 (9)에서 우변 마지막 항은 마이크로 채널을 흐르는 유동에 의해 발생하는 streaming current와 이에 반대방향인 conduction current의 평형식으로부터 얻어지는 무차원 유도전기장을 의미한다 [2].

$$\Xi = \sinh(\bar{\psi}) \int_0^1 U \sinh(\bar{\psi}) dY \quad (12)$$

식 (11)에서,  $Re$ 는 레이놀즈수이며,  $Sc$ 는 슈미트수이다.

채널 벽에서의 속도 경계조건은 점착조건을 사용하였으며, 입구에서는 Fig. 1에 도시한 바와 같이 위 아래 입구에서 채널내로 동일한 위상의 맥동유동이 유입된다. 이때  $A$ 는 맥동진폭,  $St$ 는 Strouhal수를 나타낸다  $St = fH / V_i$ . 출구에서는 완전발달조건이 사용되었다. 정전기장에 대한 경계조건은 채널벽에서는 무차원 zeta potential로 정의된다  $Z = \sigma e \zeta / (k_B T)$ . 입구와 출구에서는 노이만 조건이 주어졌다. 외부인 가 전기장의 경우에 입구에서는  $\phi = \phi_H$ , 출구에서는  $\phi = \phi_L$ 으로 하였다. 농도장의 경우 위쪽 입구에서는 시료(sample)가 유입되고 아래쪽 입구에서는 농도가 낮은 수용액이 유입되는 조건을 주었다.

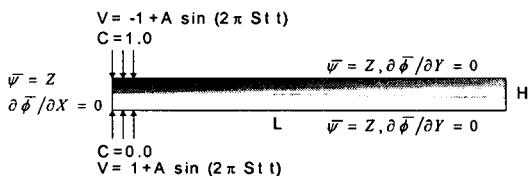


Fig. 1 Schema of a T-junction microchannel.

## 2.2 수치해법

지배방정식들을 풀기 위해 잘 알려진 Patankar의

SIMPLER algorithm을 사용하였다 [6]. 식(9)와 (10)의 대류항은 비균일 격자계에 QUICK scheme을 적용하였고 확산항은 중앙차분법(central differencing)을 사용하였으며, 최종적으로 얻어진 대수방정식은 TDMA (tridiagonal matrix algorithm)를 사용하여 해를 구하였다.

마이크로 채널의 축방향 길이는  $L = 10 H$ 로 하였고  $150 \times 50$ 개의 격자점을 사용하였다. X축으로는 입구 영역에, Y축으로는 벽면과 두 수용액의 경계면이 위치하는 중심부근에 격자가 밀집되도록 하였다.

## 3. 결과 및 토의

본 연구에서는 silica glass로 가공된  $H=10 \mu m$ 의 마이크로 채널에서  $25^\circ C$ 의 온도에서 NaCl 수용액과 시료의 혼합을 고려한다.  $\kappa H = 10$ ,  $Z = -1$ , 외부 인가 전위차가 없는 경우로 가정하여  $C_1 = 0$ ,  $C_2 = 100$ 으로 고정하였다. 본 연구에서 레이놀즈수는 마이크로 유로내의 낮은 유속을 고려하여  $Re = 1$ , 맥동 속도진폭은  $A = 0.5$ 로 고정하였고, 맥동주파수  $St = fH / V_i$ 는  $0.2 \sim 10$ 의 범위에서 변화시켰다. 슈미트수는 DNA molecule의 물질 확산계수를 고려하여  $Sc = 64000$ 으로 고정하였다. 대표적인 Biomolecule의 확산계수는 표 1에 나타내었다.

표 1 Mass diffusion coefficients for biomolecules

Biomolecule	Mass diffusion coefficient $D$ (cm <sup>2</sup> /sec)
Bovine serum albumin	$6.7 \times 10^{-7}$
Ovalbumin	$7.1 \times 10^{-7}$
Lysozyme	$11.5 \times 10^{-7}$
TMV	$0.4 \times 10^{-7}$
DNA	$0.2 \times 10^{-7}$

Fig. 2는 마이크로 채널에서 정상상태의 완전발달 속도분포에 미치는 streaming current에 의한 전기장 효과를 나타낸다. Streaming current에 의한 전기장의 효과는  $10 \mu m$  폭의 마이크로 채널의 최고속도를 약 8 % 감소시키고 있음을 알 수 있다. 그러므로 마이크로 채널에서 유도전기장의 효과는 뚜렷하다고 할 수

있다. 그러나 현재 사용되고 있는 biochip 마이크로 채널의 폭이 100  $\mu\text{m}$  정도로 크고 매우 느린 유속 ( $U < 1 \text{ mm/s}$ )임을 감안할 때 streaming current에 의한 전기장효과는 무시할 수 있는 수준으로 판단된다.

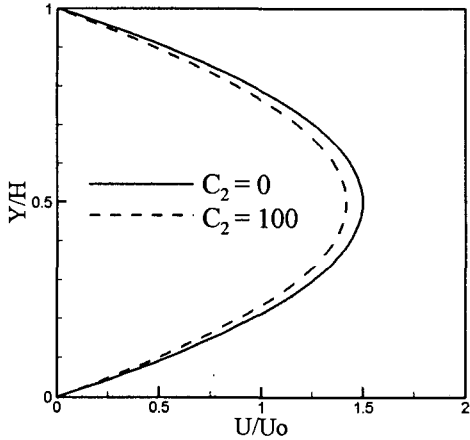


Fig. 2 Effect of the streaming current on the fully developed velocity profile.

Fig. 3은 입구 맥동유동에 의해 야기되는 streakline의 시간변화를 나타낸다. 맥동주파수가 매우 낮은 경우( $St = 0.2$ )에 T형 마이크로 채널의 상하 입구에서 유입되는 유동은 중앙 경계부근에서 파동형태의 매우

강한 굴곡을 갖는 경계면을 형성한다. 맥동 주파수가 증가하면 경계면의 굴곡은 약화되며 Fig. 3(c)와 같이 맥동주파수가 더욱 증가하면 비 맥동 정상상태 유동의 경우와 동일한 유동형태를 보이게 된다. 흥미로운 사실은 맥동주파수가 낮은 경우에 경계면이 파동형태로 강하게 왜곡되어 후류로 전파되는 현상이 입구맥동유동에 의해 발생하는 와류의 작용은 아니라는 것이다. 이는 Fig. 4(a)의 한주기 동안의 유선변화에서 알 수 있는 바와 같이 맥동주파수가 낮은 경우에도 마이크로 채널입구 근처의 직 후류 영역에서 이미 측 방향으로 평행한 유동이 이루어져 공간상에서 파동형태의 변화를 보이지 않는다는 사실로부터 이해할 수 있다. 따라서 streakline에서 관찰되는 경계면의 파동형태의 왜곡은 맥동유동에 의한 형성된 와류에 의한 것이 아님이 명확하다. 오히려 입구에서 유입된 유체입자가 느린 맥동주파수로 인해 충분한 시간동안 중앙 경계면을 넘어 반대편으로 이동하고, 다시 경계면이 원래의 위치로 이동하는 위상에서 반대편으로 진입하였던 유체입자는 후류로 진행되는 일련의 과정을 통해 시간 주기적으로 변화하는 파동형태의 streakline 경계면을 형성하게 되는 것이다. 따라서 유체입자가 중앙경계면을 지나 반대편으로 이동할 충분한 시간이 없는 고주파 맥동의 경우에는 Fig. 3(c)에서 볼 수 있듯이 비맥동 정상상태와 같이 평행한 유동형태를 나타내게 되는 것이다.

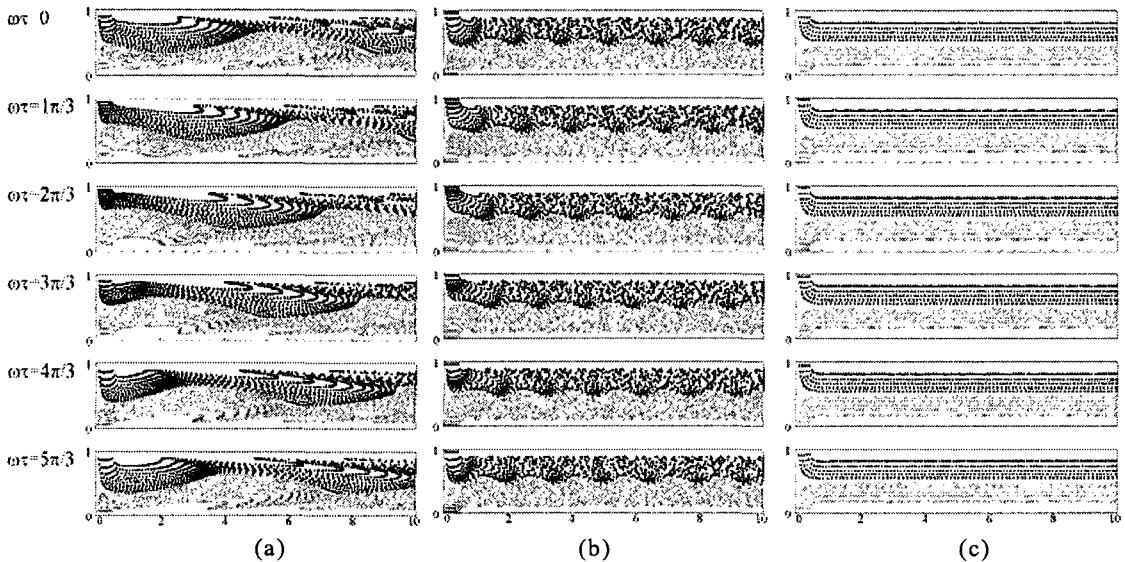


Fig. 3 Time-periodic variation of streaklines according to the inlet flow pulsation. (a)  $St = 0.2$ ; (b)  $St = 1$ ; (c)  $St = 10$ .

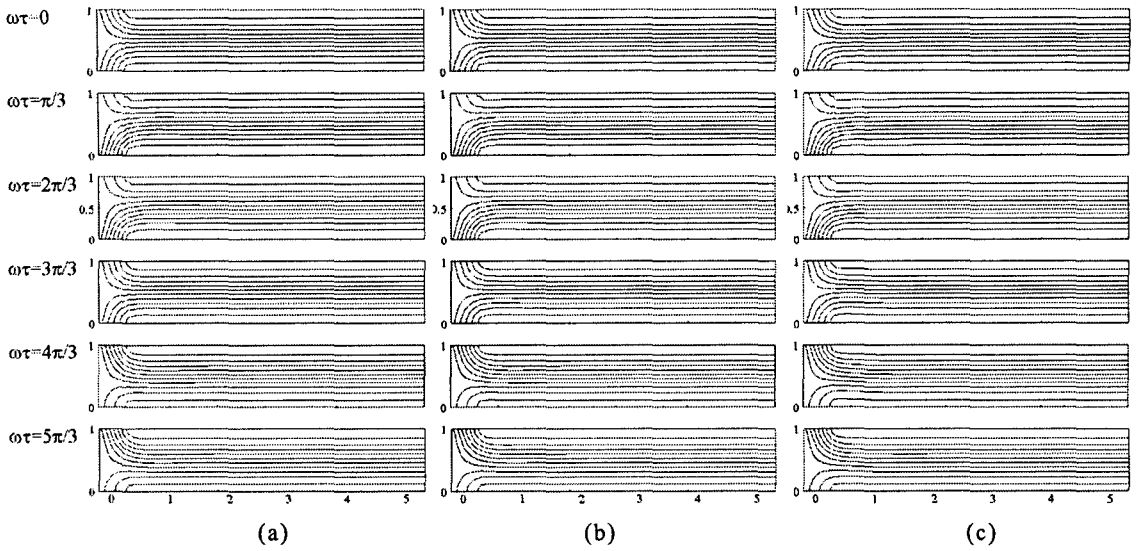


Fig. 4 Time-periodic variation of streamlines according to the inlet flow pulsation. (a)  $St = 0.2$ ; (b)  $St = 1$ ; (c)  $St = 10$ .

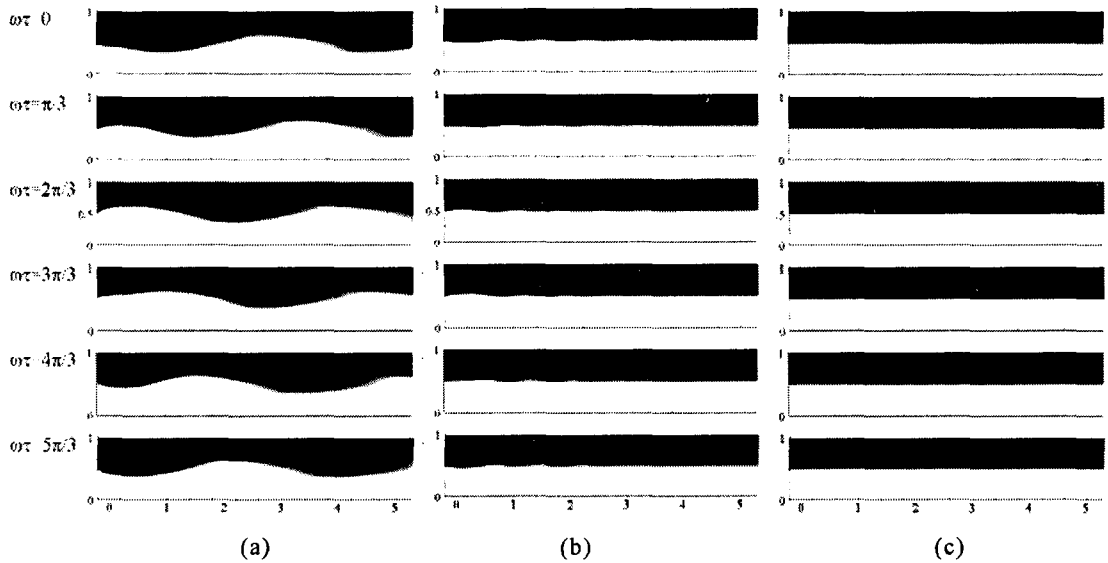


Fig. 5 Time-periodic variation of concentration according to the inlet flow pulsation. (a)  $St = 0.2$ ; (b)  $St = 1$ ; (c)  $St = 10$ .

이러한 맥동유동의 효과에 의해 나타나는 농도장의 한주기 변화를 Fig. 5에 도시하였다. 주파수가 낮은 맥동유동의 경우에 농도가 다른 두 수용액의 경계는 위에서 언급한 메커니즘에 의해 파동형태의 강한 왜곡을 보이며 주파수가 증가할수록 이러한 경계면의

왜곡은 사라진다. 따라서 저주파수 맥동유동에 의한 농도장 혼합촉진의 가능성을 예상할 수 있다.

마이크로 채널 출구에서의 농도장 분포를 Fig. 6에 나타내었다. 농도가 다른 두 수용액이 T형 마이크로 채널로 유입될 때 입구 맥동가진 없는 정상상태

의 경우 두 수용액의 농도는 낮은 물질 확산도(mass diffusivity)에 의해  $Y = 0.5$ 의 경계면 근처에서 급격한 변화를 보인다. 그러나 저주파수의 맥동유동이 입구에서 유입되면 농도가 다른 두 수용액사이의 경계면이 확장되면서 혼합을 촉진한다 (Fig. 5(a) 참조). 이 결과 중심 경계 부근에서의 농도변화는 상대적으로 완만해진다. 맥동주파수가 증가하면 경계면의 왜곡 현상이 감소하면서 비맥동 정상상태의 결과에 수렴함을 보이고 있다.

Fig. 7은 마이크로 채널의 입구부터 유동방향의 중심선을 따라 나타낸 수직 농도구배를 도시한다. 수직 농도구배가 감소하면 농도가 다른 두 수용액이 경계면에서 혼합이 활성화되었음을 의미하는 것으로 농도구배의 감소비는 물질확산도의 증가비와 비례한다. T형 마이크로 채널 입구의 직 후류부터 채널을 따라 농도구배는 급격히 감소한다. 맥동유동에 의해 농도구배는 비맥동 정상상태의 값에 비해 감소하며 채널의 후류에서 감소폭은 작다. 저주파의 맥동유동( $St < 1$ )이 유입되는 경우에는 마이크로 채널의 대부분의 영역에서 상당히 일정한 수직 농도구배를 나타내고 있다.

Fig. 8은 출구부근의 후류에서 주파수에 따른 경계면에서의 수직 농도구배를 나타내고 있다. 비정상 맥동유동에 비해 입구 맥동가진에 의해 농도구배는 감소하며 특히  $St < 0.2$ 인 경우에는 1/15이하로 농도구배가 감소한다. 즉 맥동유동에 의해 물질 확산도가 15배 이상 증가하여 혼합이 크게 촉진되었음을 나타내고 있다. 맥동주파수가  $St > 2$ 으로 증가하면 농도구배의 값은 비맥동 정상상태의 값에 수렴함을 보인다.

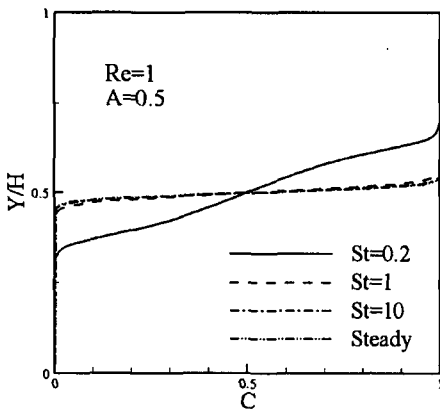


Fig. 6 Concentration profile at the exit.

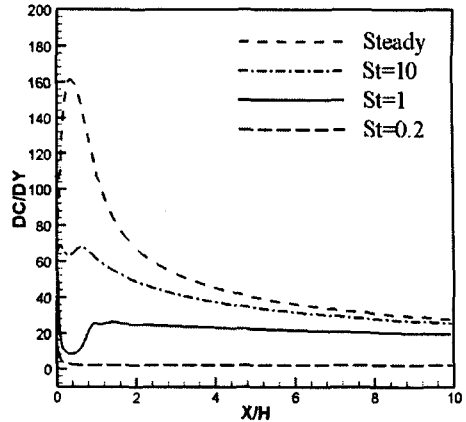


Fig. 7 Concentration gradients along the centerline of the microchannel.

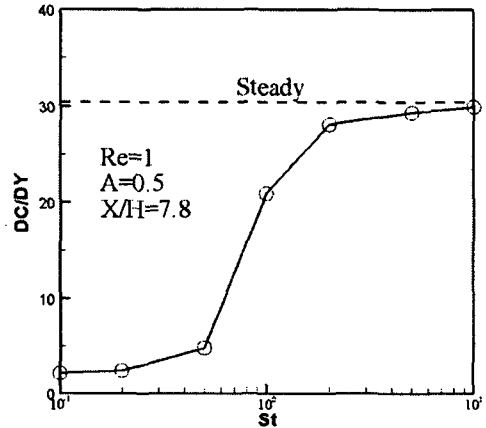


Fig. 8 Effect of Strouhal number on the concentration gradient at the center.

#### 4. 결론

마이크로 채널에서 농도가 다른 두 수용액의 혼합에 미치는 입구맥동유동의 영향을 수치해석을 통하여 분석하였다.

수치해석 결과, 맥동 속도진폭을 일정하게 고정된 경우 맥동주파수가 낮을 수록 농도구배는 완만해져 두 수용액의 혼합이 활성화됨을 보였다. 맥동주파수가  $St > 2$ 로 증가하면 비맥동 정상상태의 결과와 유사하였다. 저주파수의 맥동유동이 유입될 경우에는 T형 마이크로 채널의 상하에서 유입된 유체입자가 서로 반대편으로 이동할 충분한 시간을 확보할 수 있어

농도장은 공간 주기적으로 왜곡된 파동형태의 경계면을 형성하게 된다. 이러한 파동형태의 경계면은 와류의 형성에 기인하는 것은 아니어서 Taylor dispersion에 의한 큰 혼합촉진 효과는 거둘 수 없으나 경계면의 왜곡에 의한 혼합경계면적의 확장이라는 측면에서 혼합이 촉진됨을 알았다. 그러므로 마이크로 채널 내부의 점성유동영역에서는 채널의 기하학적 구조와 맥동유동의 주파수 및 진폭의 조합을 통한 두 수용액의 경계면 확장의 측면에서 혼합촉진 방안을 강구하는 것이 타당할 것으로 판단된다.

#### 후기

본 연구는 선문대 공조기술연구센터의 지원으로 수행되었으며 이에 감사드립니다.

#### 참고문헌

1. M. Yi and H. H. Bau, The kinematics of ben-induced mixing in micro-conduits, *Int. J. Heat Fluid Flow* 24 (2003), 645-656.
2. M.-S. Chun, S.-Y. Lee and S.-M. Yang, Estimation of zeta potential by electrokinetic analysis of ionic fluid flows through a divergent microchannel, *J. Colloid Interface Sci.* 266 (2003) 120-126.
3. G. Y. Tang, C. Yang, J. C. Chai and H. Q. Gong, Joule heating effect on electroosmotic flow and mass species transport in a microcapillary, *Int. J. Heat Mass Transfer* 47 (2004), 215-227.
4. S. Y. Ermakov, S. C. Jacobson and J. M. Ramsey, Computer simulations of electrokinetic transport in microfabricated channel structure, *Anal. Chem.* 70 (1998), 4494-4504.
5. G. M. Mala, D. Li and J. D. Dale, Heat transfer and fluid flow in microchannels, *Int. J. Heat Mass Transfer* 40 (1997), 3079-3088.
6. S. V. Patankar, *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*, McGraw-Hill, New York, 1980.

1. M. Yi and H. H. Bau, The kinematics of