불균일 표면전하를 지닌 미소채널 내에서의 혼합에 관한 수치 해석적 연구

송 경 석† · 이 도 형*

Numerical Analysis on Mixing in a Microchannel with Inhomogeneous Surface Charge

Kyungsuk Song, Dohyung Lee

Key Words : Electro-osmosis(전기 침투), Mixing(혼합), Microfluidics(미소유체역학), CFD (전산유체역학), Zeta Potential(제타 포텐셜)

Abstract

Electroosmotic flow induced by an applied electrostatic potential field in microchannel is analyzed in this study. The electroosmotic flow is an alternative to pressure driven flow in microchannels, but the usage has been limited to the simple cases. In this study, We analyze electroosmotic flow driven by inhomogeneous surface charge on the channel wall. The surface charge varies along a direction perpendicular to the electric field in order to generate the electroosmotic flow. A numerical results substantiate the highly efficient mixing performance. It is highly the beneficial to fabrication process since only straight microchannel rather than complex geometry is enough to yield efficient mixing.

기호설명

V_{eo} = 전기침투 유동속도(EOF Velocity)
V_{ep} = 전기영동 유동속도(Electrophoresis vel.)
ρ_e = 전하 밀도(Charge density)
μ = 점도(Viscosity)
P = 압력(Pressure)
E = 전기장의 강도(Electric field intensity)
Φ = 전기적 포텐셜(Electric potential)
ϕ = 외부 포텐셜(External applied potential)
ζ = 제타 포텐셜(Zeta potential)
n_0 = 이온 집중도(Ionic concentration)
z = 전하 용액의 균형도(Valance of charged buffer)
e = 전자 전하(Electron charge)
k = 볼츠만(Boltzmann) 상수
T = 온도(Temperature)
ε_0 = 유전율(Permittivity)

† 한양대학교 대학원 기계공학과
* 정회원, 한양대학교 기계공학부
E-mail : dohyung@hanyang.ac.kr
TEL : (031)400-5289 FAX : (031)406-5550

1. 서 론

최근 마이크로 시스템 내에서의 수치유동 해석은 생화학분야나 바이오 테크놀러지 분야에서 광범위하게 사용되고 있다. 구제적으로 이러한 해석 방법은 세포 내에서 비교적 분자의 크기가 큰 DNA 또는 단백질의 분류공정, 미소채널에서의 화학 반응, 또는 극소량(1~10nl)물질 부피량의 이동등에 적용되고 있다.

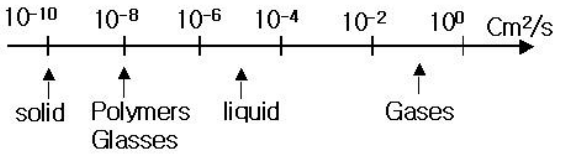


Fig. 1 Diffusion coefficient range

화학분석학이나 생화학 분야에서는 연구에 필요한 시약과 시험용액과 시료를 혼합하여 사용한다. 이 혼합 용액들은 화학반응을 가능하게 하기 위해 혼합하는데 마이크로 단위에서 이러한 혼합과정은 난류가 형성되거나 형상자체가 복잡할수록 혼합효과를 높일 수 있다. 그러나 마이크로 단위에서는 레이놀즈 수가 매우 작고 (Re<<1) 관성효과를 고려할 수 없기 때문에 혼합 효율을 높인다는 것은 매우 난해하다.[1]

혼합률(mixing rate)은 확산 유속(diffusion flux)에 의해 결정된다(Fig .1)[2] 확산유속 역시 형상이 복잡 할 때 효율이 극대화 될 수 있다.

하지만, 이와 같은 마이크로 채널에서의 혼합 효과를 극대화 하기 위한 형상설계 복잡화는 하는 것은 제조 공정상의 많은 시간과 비용을 초래하는 단점이 있다.

본 연구에서는 이러한 단점을 줄이기 위해 물리적인 형상이 아닌 다른 힘(force)과 에너지를 이용함으로써 마이크로 채널 내에서의 혼합 효율을 높이는 방법을 시도하였다. 보다 구체적으로 불균일 표면에서의 전기 침투 유동을 수치적으로 해석 하였다.

전기침투(electroosmosis)유동에 관한 문제는 Ajdari[3] 에 의해서 해석적으로 연구되었고 Stroock[4] 등에 의해 실험적으로 수행되었으며 최근에도 활발하게 연구가 진행중이다.

본 연구에서는 이러한 미소채널에서의 전기침투 유동의 이론적 배경을 고찰하여 복잡한 형상과 그에 따른 공정에서의 비용을 줄이는 목적으로 간단한 채널에서의 유동을 수치적으로 유동을 모사하여 혼합 효율을 극대화 할 수 있는 방법에 대해 연구하였다.

2. 이론적 배경

2.1 전기 침투 현상(Electroosmosis)

일반적으로 전기 침투 침투 현상은 정전(靜電)기장과 EDL(electrical double layer)의 상호작용에 의해 생기는 힘이다. 이 힘은 채널의 높이에 따라 불 균일 하며, 유체역학에서 말하는 완전발달유동(fully developed flow)과는 다른 개념이다. 또한 이 힘은 채널 벽 근처에서 크게 작용하고 채널의 중앙 지점에서는 그 크기가 무시할만하다.

전기 침투현상에서 채널 입·출구 사이의 압력차(pressure drop)가 주된 힘은 아니지만, 채널 전체에 걸쳐 작용한다. 채널에 작용하는 압력분포는 EDL 의 영향이 크다고 할 수 있다.

2.2 전기적 이중층(electrical double layer)

일반적인 경우에 마이크로 채널 벽은 표면 전하(surface charge)의 유무에 따라 특성화 된다. 즉, 채널 벽의 재질 또는 완충액(buffer)과 전하를 띤 물질사이의 흡착작용이 그것이다.

유체가 전해질이라면 용액 중에 분산되어 있는 입자는 입자표면의 극성기의 해리와 이온의 흡착에 의해 전기적으로 양극 또는 음극으로 대전 되어있다. 따라서 입자 주변에는 계면 전하를 중화하기 위해 과잉으로 존재하는 반대부호를 갖는 이온과 소량의 같은 부호를 갖는 이온이 확산적으로 분포하고 있으며, 계면으로부터 전기적인 포텐셜을 보이고 완만한 포텐셜 구배를 가지면서 서서히 감소하게 된다.

따라서 전하를 띤 표면에는 상대 이온이 흡착되어 상대적으로 움직이지 않은 층(stern layer)이 형성되고, 상대이온과 극성 액체 분자들이 이온 확산층(diffuse layer)을 형성한다. 이러한 현상을 전기적 이중층(electrical double layer, EDL)이라 한다.
Fig. 2 은 EDL(electrical double layer)의 구조를 나타내고 있다.[5]

2.3 제타 포텐셜(zeta potential)[6]

이와 같은 전기장에 의해 입자가 영동하는 동안에 이중층(EDL)에서 슬립(slip)현상이 발생한다.

고정층(stern layer)은 표면에 흡착되지만 이온확산층이 액상과 같이 움직이기 때문에 나타나는 현상으로 볼 수 있다. 이 경계면에서의 전기적 포텐셜을 제타 포텐셜 이라고 하며 제타 포텐셜은 전해액의 PH 와 농도에 의해 영향을 받는다.
식 (3)과 (4)는 제타 포텐셜에 대한 방정식을 나타내고 있다.

2.4 지배 방정식

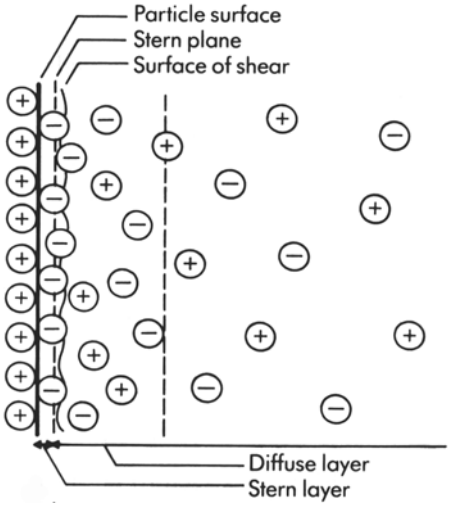


Fig. 2 Structure of electric double layer [7]

본 연구에 사용된 전기 침투 유동장에 관한 해는 비압축성 Navier-Stokes Equation 을 사용하였다.

$$\nabla \cdot V_{eo} = 0 \text{ (continuity)} \tag{1}$$

$$\frac{D(\rho V_{eo})}{Dt} = -\nabla P + \nabla \cdot \mu \nabla V_{eo} + \rho_e E \tag{2}$$

유동장에 포함된 전기장(electric field)은 전위방정식에(potential equation)에 의해 결정된다.
식 (2)는 채널내 유동이 완전 발달 유동임을 가정한 것으로 Navier-Stokes Equation 에서 관성(inertial term)이 무시되었다.

$$E = -\nabla \Phi \tag{3}$$

$$\rho_e = -\varepsilon \nabla^2 \Phi \tag{4}$$

여기서 전기적 포텐셜은 표면에서의 제타 포텐셜과 외부에서 작용하는 포텐셜로 다시 나타낼 수 있으며 관계식은 다음과 같다.

$$\Phi = \phi + \zeta \tag{5}$$

여기서 채널 벽에서의 제타 포텐셜로 인한 영향이 매우 작은 영역에 국한된다고 가정하면, 전위분포(charge distribution)는 다음과 같이 다시 쓸 수 있다.

$$\nabla^2 \phi = 0 \tag{6}$$

$$\rho_e = -\varepsilon \nabla^2 \zeta \tag{7}$$

또 제타 포텐셜에 대한 방정식은 Debye-Huckel 방법으로 근사화 될 수 있으며, 벽에서의 전위밀도는 제타 포텐셜에 대한 Poisson-Boltzmann 방정식으로 결정된다.[8]

$$\nabla^2 \zeta = \frac{2 n_0 z e}{\varepsilon \varepsilon_0} \sinh\left(\frac{ze}{kT}\zeta\right) \tag{8}$$

만약, $ze << kT$ 이라고 하면 식(8)은 더 단순화 될 수 있다.[9]

$$\nabla^2 \zeta = K^2 \zeta \tag{9}$$

여기서 K 는 Debye-Huckel 변수로서

$$K = (2 n_0 z^2 e^2 / \varepsilon \varepsilon_0 kT)^{1/2} \tag{9-a}$$

로 나타낸다.

식(2), (6), (9)는 식 (10)으로 유도되어, 전기장 내에서 전하를 띄는 물질의 이동은 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} + (V_{eo} + V_{ep}) \nabla c_i = D V^2 c_i \tag{10}$$

3. 수치 해법

본 연구에서는 미소 직선 채널에서의 mixing 효과를 확인하기 위해 $200\,\mu m \times 50\,\mu m$ 채널을 2 차원으로 설계 하였다.
채널 벽에서의 불 균일 전하로 발생되는 불규칙 제타 포텐셜이 외부 전기장에 영향을 주지 않는다는 가정을 하였으며, 채널의 치수와 비교해 볼 때 전기적 이중층(electrical double layer)은 무시할 만큼 작다고 가정하였다. 입구 영역과 출구 영역에 서로 다른 량의 외부 전하를 지니게 하고 채널 벽에서는 같은 양의 서로 다른 성질의 표면 전하를 지니게 하였으며, 비정상 기법으로 수치해석을 수행하였다.
Fig.3 는 EOF channel 의 개략도를 나타낸다. 그림에서와 같이 채널 표면에 국부적으로 같은 양의 반대 전하를 띠게 하였으며, 또한 채널 입구와 출구에서도 전기침투현상이 일어나도록 전위를 형성

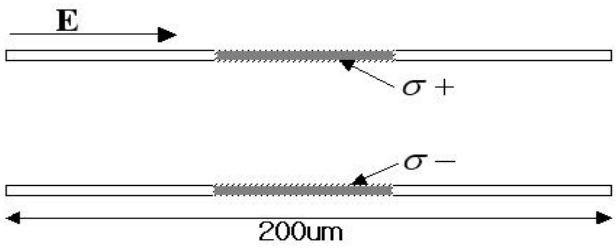


Fig. 3 Schematics of microchannel between surface

하게 하였다.

또, 전하의 분포가 지역적인 포텐셜 분포와 이에 의한 전기장(electric field)을 형성한다는 점으로 부터 유체의 흐름과 수직한 방향으로 경계조건을 설정하였다.

4. 결과 및 고찰

일반적으로 마이크로 단위에서의 혼합기(mixer) 설계시 요구 되는 사항은 다음과 같다.[2]

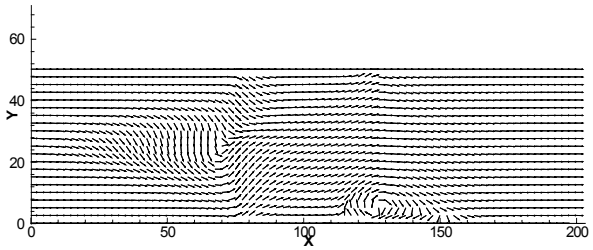
(a) 빠른 혼합시간(mixing time)
(b) 작은 장치 면적(small device area)
(c) 복잡한 계에서의 통합능(integration ability)

혼합시간은 혼합경로(mixing path)를 줄이고, 혼합면적을 늘이는 차원에서 줄일 수 있다. 그러나 입구에서의 높은 압력은 채널의 내구성에 상당한 영향을 끼치게 된다. 또한 작은 장치 면적과, 복잡한 시스템의 설계는 필수 설계상의 요건이다.

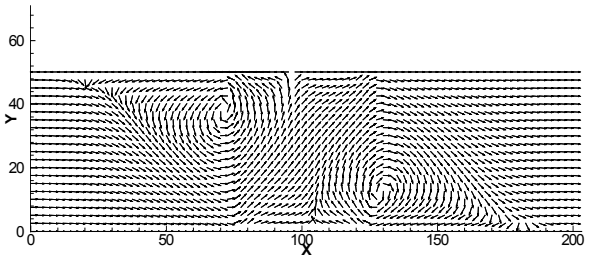
본 연구에서는 시간 간격을 0.1 로 하여 전기침투 유동과 함께 불균일 표면 근처에서 발생하는 유동 형태를 모사 하였다.
Fig. 4 는 각각의 Time step 에서의 속도벡터를 나타내며, Fig.5 는 1.1sec 일때의 유선을 나타낸다.
.

시간이 1.1sec 일때와 2.1sec 일때 순간적인 와류(vortex)가 채널 표면 근처에서 형성됨을 볼 수 있다. 이 같은 현상은 주기적인 시간 간격에 따라 발생하는 것으로 판단되며, 표면에서의 전하량에 따라 그 정도가 달라질 것으로 예측된다. 만약 채널의 길이가 길어진다면 상대전하를 가진 채널 표면을 주기적으로 배열하여 이와 같은 결과를 볼 수 있을 것 이라고 추측된다.
Fig. 6 는 1.2sec 일때와 2.0sec 일때의 와류강도(vorticity)를 나타낸다. 채널위치가 x=75 μm 인 근처점(Fig. 6a)에서와 x=125 μm (Fig. 6b)에서 와 류강도의 변동폭이 커지는 것을 볼 수 있다.

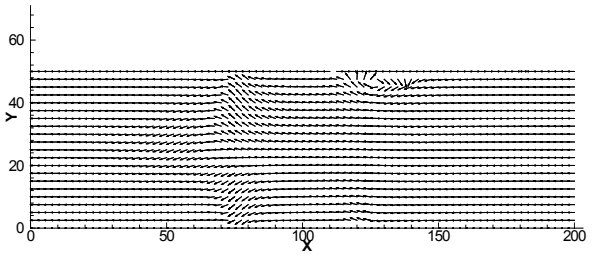
4.1 속도 벡터(distribution of velocity vector)



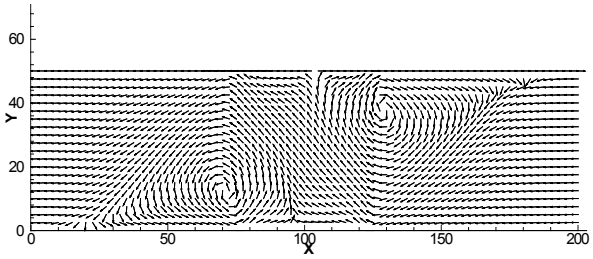
(a) time=0.2sec



(b) time=1.1sec



(c) time=1.9sec



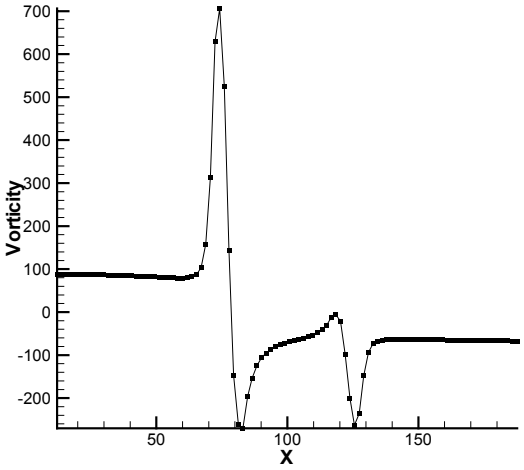
(d) time=2.1sec

Fig. 4 Velocity vector at each time step

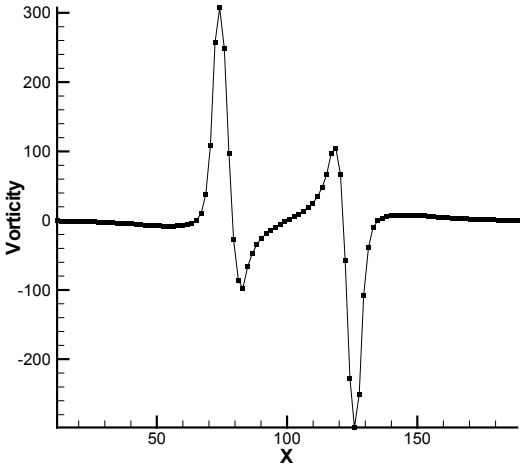
4.2 유선(Streamline)

Fig. 5 Streamline (time=1.1sec)

4.3 와류강도(Vorticity)



(a)Vorticity (time=1.1sec)



(a) Vorticity (time=2.0sec)

Fig. 6 Vorticity at each time step

이는 강한 와류가 형성될 수 있음을 보여주는 중요한 근거로 생각된다. 시간이 1.1sec 일때의 와류강도는 채널의 벽면, 즉 X 방향으로 거리가 75 μm 가 되는 채널 벽면과 82 μm 가 되는 벽면에서 각각 732, -286 로 가장 큰 변동폭을 보였다. 이 같은 현상은 채널 벽면의 전하를 가진 벽면의 위치가 75 μm ~125 μm 임을 감안할 때 전하를 지니지 않은 벽면과 전하를 지니는 부분이 서로 맞닿는 위치에서 와류(vortex)가 가장 많이 발생한다는 증거가 된다. Fig. 6b 는 시간이 2.0sec 일때의 와류강도를 나타낸다. X 방향으로 거리가 118 μm 가 되는 채널 벽면과 125 μm 가 되는 벽면에서 와류강도가 각각 104, -308 로서 변동폭이 가장 크게 나타났다. 이와 같이 전하의 유무에 따라 채널벽을 규칙 또는 불규칙적으로 배열하는 것은 본 연구에서 보이는 와류를 형성하는데 큰 도움이 될 것 이라고 사료된다.

5. 결 론

본 연구에서 모사 된 미소채널에서의 와류 및 혼합 효율은 기존의 복잡한 형상을 제작하여 혼합하는 방식과는 크게 다르다. 본 연구에서의 혼합방식은 비교적 간단한 형상을 가진 마이크로 채널 내에서도 유용하게 사용 될 수 있으며, 설계상의 많은 난점들도 해결 할 수 있을 것이다. 즉, 전하를 가지고 있는 표면 벽을 불규칙적 하게 배열하거나, 서로 상대전하를 지니게 함으로서 와류를 형성하는 것이다. 본 연구에서 사용된 기법은 마이크로 단위에서의 혼합 효율을 크게 증대 시킬 것이며, 이보다 더 미세한 나노 단위에서도 유용하게 적용될 수 있을 것이라고 사료된다.

6. Future Study

본 연구는 수치해석 결과에 대한 정량적 해석 및 이는 수치적인 해석이 더 많이 요구되며, 현재 연구중인 주제 이기 때문에 또 구체적인 수치결과와 이에 따른 결과, 설명이 부족한 실정이다. 또 직선 채널에서의 Aspect Ratio 의 변화에 따른 혼합효율을 연구하는 것도 요구된다.

참고문헌

(1) Abraham D. Stroock, Stephan K.W. Dertinger, Armand Ajdari, Igor Mezic, Howard A. Stone, George M. Whitesides., 2002, “Chaotic Mixer for Microchannels,” Science, 295, 647-651.
(2) Nam-Trung Nguyen, Steven T. Wereley., 2002, “Fundamentals and Applications of Microfluidics,” Artech House, 386-401
(3) A. Ajadari, 1995, “Electro-Osmosis on Inhomo-generously Charged Surface,” Physical Review Letters, The American Physical Society, Vol.75, No.4, 755-758.
(4) Abraham D. Stroock, Marcus Weck, Danial T. Chiu, Wilhelm T.S. Huck, Paul J.A. Kenis, Rustem F. Ismagilov, George M. Whitesides, 2000, Patterning “Electro-Osmotic Flow with Patterned Surface Charge,” Physical Review Letters, The American Physical Society, Vol.84, No.15, 3314-3317.
(5) Shaw, D. J. 1980, “Introduction to Colloid and Surface Chemistry,” 3rd edn. London: Butterworths
(6) Hunter, R. J., 1981, “Zeta Potential in Colloid Science : Principles and Applications,” Academic Press, New York.
(7) Ronald F. Probstein, 1994, “Physicochemical Hydrodynamics,” 2nd edn. John Willey & Sons, Inc.
(8) R. J. Yang, L. M. Fu, Y. C. Lin, 2001, “Electroosmotic Flow in Microchannels,” J. Colloid and Interface Science, Vol.239, 98-105.
(9) Prashanta Dutta, Ali Beskok, 2001, “Analytical Solution of Time Periodic Electroosmotic Flows : Analogies to Stokes’ Second Problem,” Anal. Chem., Vol.73, 5097-5102.