

## 마이크로 채널에서 분산을 극소화 하는 제타 포텐셜

임재영, 김태원, 이원민, 박홍목\*  
서강대학교 화공생명공학과  
(hmpark@sogang.ac.kr\*)

### Optimization of zeta potential profile for low-dispersion flows in microchannel turns

J.Y. Lim, T.W. Kim, W.M. Lee H.M. Park\*  
Department of Chemical and Biomolecular Engineering, Sogang University  
(hmpark@sogang.ac.kr\*)

#### 서론

마이크로채널에서의 electrokinetic flow는 lab on a chip등에 많이 이용되는데 이는 생물학적인 종의 이동, 분리, 발견에 널리 적용된다. 이러한 장치에서 모세관에서의 전기이동은 샘플을 준비하는 과정에서 널리 사용되고 electroosmosis는 준비된 샘플을 이동시킬 때 주로 사용된다. 일반적으로, 채널이 길어질수록 분리 효율성을 향상시킬 수 있지만 lab on a chip같은 극소의 장치에서는 굴곡이 있는 채널을 필요로 하게 되며 이러한 굴곡은 분석될 밴드에 분산을 증가시킨다. 퍼짐현상은 분리 과정에서의 효율을 감소시키고, 밴드나 경계면의 통합이 요구되는 샘플 이동에 좋지 않은 영향을 미친다. 분산이나 밴드 퍼짐현상을 위한 주요 메커니즘은 확산, 운송유체의 속도구배의 변화율, 그리고 마이크로채널의 기하학 효과에 의해 이루어진다.

확산효과는  $Re$ 와  $Sc$ 에 대한  $Pe$ 의 값으로부터 추정되어진다. DNA나 단백질 같은 확산성이 작은 입자에 대해서  $Pe$ 는 매우 큰 값을 갖게된다. 따라서 확산에 의한 분산은 중요하지 않게 된다. Taylor dispersion이라고 불리는 속도구배의 변화율에 의해 야기된 입자의 분산은 속도구배가 보통 정상상태에서는 일정하기 때문에 electro-osmotic flow에서는 최소화된다. 그러므로 밴드 퍼짐현상에서 가장 주요한 요소는 때때로 racetrack effect라고 불리는 마이크로채널에서 굴곡에 의한 기하학적 효과로부터 발생한다.

Cubertson et al.은 굴곡이 있는 마이크로채널에서 racetrack effect를 연구하기 위한 대략적인 모델을 만들었다. 2차원채널에서의 굴곡으로 인한 밴드 퍼짐현상에 관한 세부적인 연구는 Griffiths와 Nilson에 의해 수행되었다. 그들은 굴곡에서 electroosmotic flow를 조사하기 위해 분석적이고 계산적인 방법을 적용했다. 그들은 속도장을 계산하기 위해 유체속도와 전기장 사이에서의 유사점을 이용하고 Laplace식 계산을 위해 inverted method를 이용하였다. 또한 분리효율을 감소시키는 밴드 퍼짐현상을 줄이기 위해서 채널은 다양한 형태로 만들어지기도 하였다.

입자의 효율적인 분산을 위해서는 굴곡에서의 밴드퍼짐현상을 감소시켜야 하는데 이를 위한 또 다른 방법은 제타 퍼텐셜을 수정하는 것이다. 제타 퍼텐셜은 UV excimer laser이나 external voltage control을 사용함으로써 수정되어질 수 있다.

#### 이론

본 연구에서는 racetrack effect에 의해 야기된 밴드퍼짐현상을 감소시키는 제타 퍼텐셜에 최적 분포를 결정하는 방법을 제안한다. 제안된 방법에서 racetrack effect를 제거한 요구되는 속도장을 먼저 결정하고 그 후에 요구된 속도장을 만드는 제타 퍼텐셜 분포가 conjugate gradient method에 기초한 최적화 테크닉을 사용하여 결정된다.

내부전위장  $\phi$ 를 위한 Poisson-Boltzmann식을 채택하면서 외부장  $\phi^*$ 에 의해 야기된 안정된 electroosmotic flow에 대한 무차원 지배 방정식은 아래와 같다.

$$\begin{aligned} \nabla^* \cdot \nabla^* \mathbf{v}^* &= -\nabla^* P^* + 2\delta \sinh(\alpha\phi^*) \nabla^* \phi^* \\ \nabla^* \cdot \mathbf{v}^* &= 0 \\ \nabla^{*2} \phi^* &= \beta \sinh(\alpha\phi^*) \end{aligned}$$

U자 모양에 대한 지배방정식은 physical domain (x,y)에서 square computational domain(X,Y)으로 방정식들을 변형한 후에 SIMPLE 알고리즘 [95]에 기초한 finite volume method에 의해 풀어졌다.

Poisson-Boltzmann식에 의해 계산되어진 해는  $\alpha$ 와  $\beta$ 가 큰 경우 해를 얻기가 쉽지 않게 된다. 그러나 전기이중층을 해결하기 위해 grid가 벽면에 밀집되어진 (80X50)grid 시스템을 사용하면 Newton-Raphson iteration은  $\alpha=5, \beta=10^6$ 까지 안정된 계산을 가능하게 한다.

electroosmotic flow의 프로파일은 Debye length에 의해 주어진 폭을 가진 전기이중층 밖에서는 거의 일정하기 때문에 속도장에서의 변화율에 의해 야기된 Taylor dispersion이 이 경우에는 매우 작다고 할 수 있다. 다른 한편 고려해야할 분석시료는 꽤 큰 분자량을 가진 유생분자인데 그것은 매우 작은 확산성이나 매우 큰  $Pe$ 를 야기한다. 그러므로 밴드 퍼짐현상에 가장 주요한 요소는 racetrack effect를 얼마나 효율적으로 제거하는가 하는 문제인데 racetrack effect를 없애는 간단한 방법은 입자의 체류시간이 채널 전체 폭에 대해 같게 하는 것이 가장 간편하다. 이러한 효과는 속도의 크기를 조절하여 얻을 수 있다.

**결과**

그림 1은  $10^4$ 개의 입자가 아래쪽 직선 채널 부분에 주입되었을 때  $\alpha=1.0, \beta=10^4, Pe=10^4, \zeta=1.0$ 인 경우의 몇몇 순간에 대해 입자의 퍼짐현상을 보여준다. 그림 1-b는 다른 조건들은 그림 1-a와 같지만  $\alpha$ 가 4.0이고  $\beta$ 가  $10^6$ 인 점에서 다르다. 그림 1은 상당한 racetrack effect가 있다는 것을 보여준다.

$(\alpha, \beta)=(1.0, 10^4)$  일 때 채널을 통해 입자가 이동할 때는 많은 시간을 필요로 하기 때문에 그 채널의 출구부분에서 입자의 매우 큰 분산을 야기한다. 다른 한편, 굴곡주위의 최적화 제타 퍼텐셜의 적용은 그림 2에서와 같이 분산을 급격하게 최소화한다. 최적화된  $\zeta_0$  프로파일이 적용되었을 때 입자가 어떻게 분산되는지에 대해 그림 2에 도시하였는데 그림2-a는  $(\alpha, \beta)=(1.0, 10^4)$ 의 경우이고, 그림 2-b는  $(\alpha, \beta)=(4.0, 10^6)$ 의 경우이다. 그림 2-a에서 출구부분의 벽 근처의 약한 분산은 축 상의 속도가 매우 작은 전기이중층에서 입자의 트랩핑에 의해 유발된다.

$(\alpha, \beta)=(4.0, 10^6)$  (cf. 그림 2-b)의 경우에, 속도가 더 빠르기 때문에 입자의 체류시간은 매우 짧고, 전기이중층의 두께는 훨씬 더 얇아서 입자 트랩핑의 영향을 적게 받는다. 결과적으로, 종의 형태는 출구부분에서도 잘 유지된다.

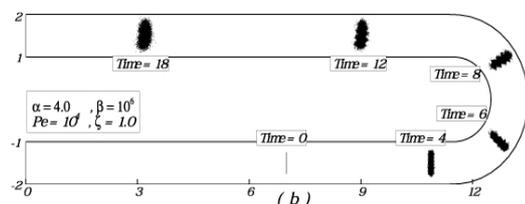
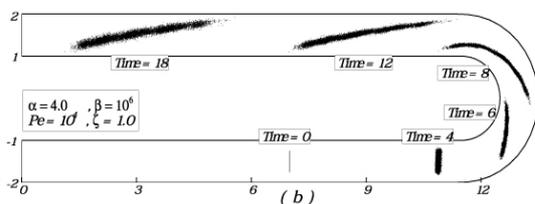
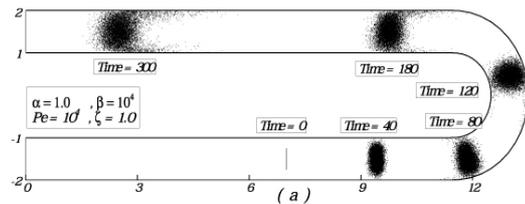
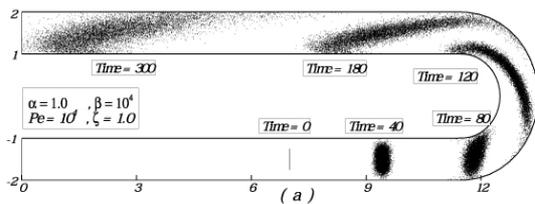


그림 1.  $\zeta=1.0$  일 때 U 채널에서 시간에 따른 종의 이동 형태

(a)  $\alpha=1.0, \beta=10^4$  (b)  $\alpha=4.0, \beta=10^6$ .

그림 2.  $\zeta=\zeta_{optimal}$  일 때 U 채널에서 시간에 따른 종의 이동 형태

(a)  $\alpha=1.0, \beta=10^4$  (b)  $\alpha=4.0, \beta=10^6$ .

마지막으로 고려해야 할 점은, 굴곡을 통과한 후에 분석된 피크의 normalized longitudinal dispersion  $(\sigma/a)^2$ 의 변동이다.  $\sigma^2$ 은 입자의 축에 따른 위치의 분산이고  $a$ 는 입구부분에서 입자 주 입구의 폭이다. 만약 우리가 racetrack effect 에 의해 야기된 분산만을 고려하고  $Pe$ 의 극한에 부합하는 Brownian random dispersion을 무시한다면, 수학적 계산으로부터 채널 벽에서  $\zeta=1.0$ 일 때  $(\alpha, \beta)=(4.0, 10^6)$ 에 대한  $(\sigma/a)^2$ 는 3.13이라는 것을 알 수 있다. 그림 3-a는  $\zeta=1.0$ 일 때  $(\alpha, \beta)=(4.0, 10^6)$ 에 대한  $Pe$ 와 normalized longitudinal dispersion의 관계를 보여준다.  $(\sigma/a)^2$ 은  $Pe$ 가 증가함에 따라 감소하여 수렴한다. 다른 한편, 그림 3-b는 최적화된 제타 프로파일을 적용할 때 normalized longitudinal dispersion이 급격히 감소한다는 것을 보여준다.  $\zeta=\zeta_{optimal}$ 에서의  $(\sigma/a)^2$ 값은  $\zeta=1.0$ 일 때 보다 두 자릿수 이하로 감소한다.

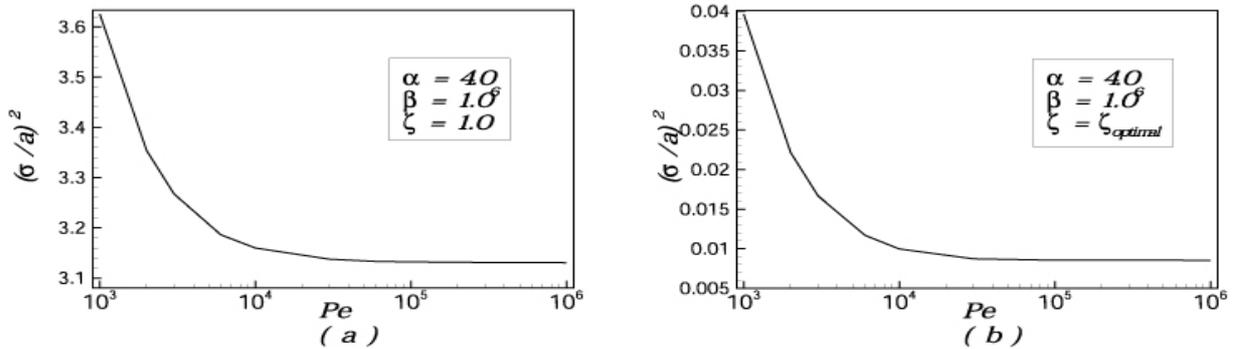


그림 3. the Peclet number  $Pe$ 에 대한 Normalized longitudinal dispersion  $(\sigma/a)^2$

(a)  $\zeta=1.0$ , (b)  $\zeta=\zeta_{optimal}$

## 결론

solute band의 굴곡에서 퍼짐 현상을 최소화하기 위해서 굴곡주위의 제타 퍼텐셜의 최적 프로파일을 결정할 방법을 고안하였다. 그 방법은 두 단계로 이루어진다. 그 첫 단계로 racetrack effect를 제거하는 것인데, racetrack effect를 제거하는 속도 프로파일은 simple geometric argument에 의해 알 수 있다. 다음으로 electroosmotic flow를 유도하기 위한 제타포텐셜 프로파일을 구하는 것인데 이는 adjoint variables를 이용하는 conjugate gradient method를 이용해 구할 수 있다. 이것은 동일한 제타 퍼텐셜을 가진 U 채널보다,  $\zeta_{optimal}$ 을 채택함으로써 두 자릿수 이상의 분산 감소 효과를 쉽게 달성 할 수 있다.

참고문헌

- A. Manz, N. Graber, H.M. Widmer, *Sensors Actuators B I*, 1990, 244-8.  
D.E. Erickson, D. Li, *Analytica Chimica Acta* 507, 2004, 11-26.  
J. Yang, D.Y. Kwok, *Analytica Chimica Acta* 507, 2004, 39-53.  
S. Das, S. Chakraborty, *Analytica Chimica Acta* 559, 2006, 15-24.  
R. F. Probstein, *Physiochemical Hydrodynamics*, Wiley, New York, 1994.  
C.T. Culbertson, S.C. Jacobson, J.M. Ramsey, *Anal Chem.* 70 ,1998, 3781-3789.  
S.K. Griffiths, R.H. Nilson, *Anal. Chem.* 71 ,1999, 5522-5529.  
S.K. Griffiths, R.H. Nilson, *Anal Chem.* 72 ,2000, 5473-5482.  
S.K. Griffiths, R.H. Nilson, *Anal. Chem.* 73 ,2001, 272-278.  
J. Molho, A. Herr, B.P. Mosier, J.G. Santiago, T.W. Kenny, R.A. Brennen, G.B. Gordon, B. Mohammadi, *Anal. Chem.* 73 ,2001, 1350-1360.  
D. Dutta, D.T. Leighton, *Anal. Chem.* 74 ,2002, 1007-1016.  
S.K. Griffiths, R.H. Nilson, *Anal Chem.* 74 ,2002, 2960-2967.  
T.J. Johnson, D. Ross, M. Gaitan, L.E. Locascio, *Anal Chem.* 73 ,2001, 3656-3661.  
C.S. Lee, W.C. Blanclard, C-T Wu, *Anal Chem.* 62 ,1990, 1550-1552.  
M.A. Hayes, *Anal. Chem.* 71 ,1999, 2793-2798.  
R.B.M. Schasboort, S. Schlautmann, J. Hendrikse, A. van der Berg *Science*, 286 ,1999, 942-945.  
J.S. Buch, P-C Wang, D.L. DeVoe, C.S. Lee, *Electrophoresis* 22 ,2001, 3902-3907.  
A. Kirsch, *An Introduction to the Mathematical Theory of Inverse Problems*, Springer, New York, 1996.  
M. Hanke, *Conjugate Gradient Type Methods for Ill-Posed problems*, Longman Scientific & Technology, New York. 1995.  
C. Yang, D. Li, *Colloid Surf. A.* 143 ,1998, 339-53.  
S. Patankar, *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*, Hemisphere, New York, 1980.  
Karim R. Shariff, NASA Ames Research Center, Personal Communication, December, 2006.