



マイクロフルイディクスに おける動電効果

はじめに

COMSOL Multiphysicsはマルチフィジックス・シミュレーションと数値モデリング用の柔軟性に富むツールです。COMSOL Multiphysicsは方程式ベースで物理学を支配する非線形偏微分方程式(PDE)のシステムを1D、2D、3Dで解くことができます。化学工学モジュールにはマイクロフルイディクスやマイクロ流体の動電流体、輸送/反応プロセス用の定義済みアプリケーションインターフェースが用意されているので、特にプロセスや装置のモデリングに適しています。これらのアプリケーションによりクロマトグラフィー、イオンクロマトグラフィー、反応装置、攪拌槽、バイオチップ内の他の単位操作の装置やプロセスをマクロ/マイクロ規模でモデル化することができます。

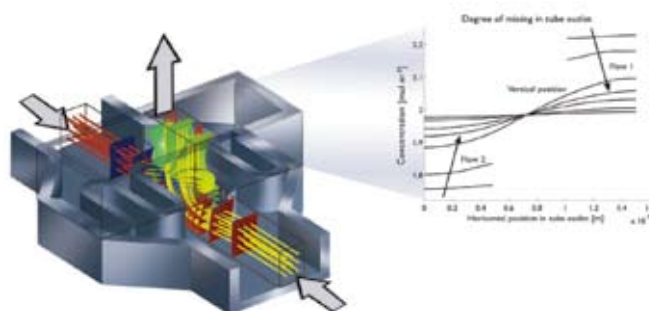
COMSOL Multiphysics環境

対話的な統合GUI環境で、マイクロフルイディクス分野のモデルを構築/計算/後処理することができます。COMSOL Multiphysicsと化学工学モジュールには、一般的なPDEモデリング環境だけでなく流動、熱/物質移動専用のアプリケーションインターフェースが用意されています。

物理現象、方程式、境界条件はGUIで直接定義することができます。柔軟な後処理ツールにより速度、圧力、電位、温度やモデル変数のあらゆる表現式に対する表面/等高線/スライス/流線のプロットを得ることができます。

主な特長

- バルク内と境界における動電流れの非線形効果をモデル化
- マイクロミキサーやマイクロ熱交換器の設計のための即使用可能なアプリケーションインターフェース
- バルク内と境界における毛細管効果と化学反応を考慮したモデル変数の任意な連成が可能
- MATLAB・Simulinkと互換



互いに入り込んだミキサー内の多層流によって2種類の溶液が混合されます。COMSOL Multiphysicsの後処理機能から、層流が拡散長を減少させ、その結果混合が改良されることが示されています。

バイオチップ内の輸送プロセス

ミニラボは、人間のDNA内の情報を効率的に分析します。これらラボオンチップ装置内の流体輸送の方法の1つに界面動電効果があります。

界面動電流れ

COMSOL Multiphysicsと化学工学モジュールは電気浸透と電気泳動を共に扱うことができます。以下にCOMSOL Multiphysicsで簡単に再現可能な最新モデル2つを示します。これらのモデルは化学工学モジュールのモデルライブラリに含まれています。

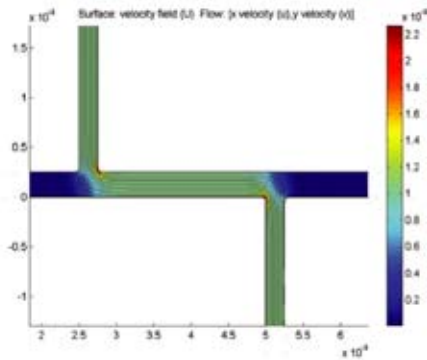
マイクロチャンネル内の電気浸透

電気浸透効果の一例として、電界にさらされた電解質充填のマイクロチャンネルシステムのモデルがあります。もとは流れ分布を研究するためにシェフィールド大学のJordan MacInnes博士によって作成されました。このモデルでは、流動のナビエ・ストークス方程式が境界条件で荷電バランスに連成されています。2重レイヤーの存在は、 z 電位で表され次の様な式となります。

$$\mathbf{u} = -\frac{\epsilon_w \zeta_0}{\eta} \nabla \phi$$

ここでは ϵ_w は水の誘電率を、 ζ_0 はチャンネル壁での z 電位、 η は流体の粘度、 ϕ は電位を表しています。COMSOL Multiphysicsではこの境界条件は固定ではないため、電位と電位勾配の関数とし任意の速度式を使用できます。

下図はチャンネルシステムの一部における流線と速度場を示します。シミュレーションは、約1mm/sの流速を得るために $1 \cdot 10^4$ V/m オーダーの電場が必要であることを示します。分極変化により流れ方向が瞬時に変化し、ミニラボでは種々の溶液を混合するのに利用します。



シリコンDNAマイクロチップ分岐内の流線と速度分布。プロットは、チャンネル断面が増大する領域で流速が減少することを示しています。電界が大きい角で速度は最大となります。

界面動電バルブ内の電気泳動

次に示されるモデルは、焦点調節、注入、分離の各段階におけるピンチ注入型三方弁を扱っています。

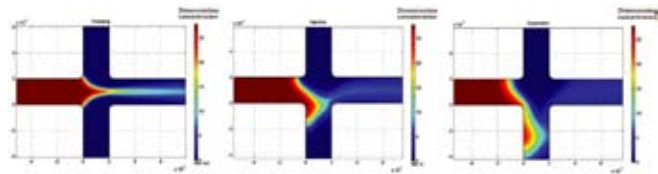
モデルは Ermakov 氏の研究を参考にしました。焦点調節は、試料と緩衝溶液(焦点チャンネルに試料を閉じ込める)の圧力駆動流れにより得られます。定常状態になると、圧力駆動流れはオフにされチャンネルに沿って電界が作用します。電界は焦点領域内の試料イオンを直角に曲げ注入チャンネルを通して焦点チャンネルに導きます。この場合の式は、ナビエ・ストークス方程式を、電界中の荷電イオンの輸送を表すネルンスト・プランク方程式とポアソン方程式に連成したものです。

化学工学モジュールで定義済みのネルンスト・プランク方程式は以下の通りです。

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot (-D \nabla c - z u_m F c \nabla \phi + c \mathbf{u}) = 0$$

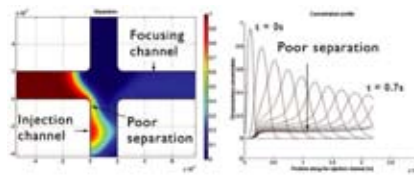
式内の z はイオンの荷電、 u_m は移動度、 c は濃度を表します。2種類の電界設定でモデルを試みました。

最初の設定では、電界は垂直なチャンネルに沿ってのみ作用しています。この場合、水平チャンネルからの試料の分離は



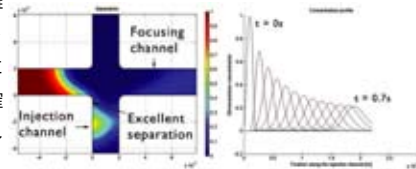
界面動電バルブ内の焦点調節、注入、分離の各段階。COMSOL Multiphysics モデルは電位設定による分離度の変化をシミュレートします。

十分ではありません。下図では、実際に試料が水平チャンネルから完全には分離していないことを示しています。第2の設定では、電界は水平チャンネルに沿って作用します。水平電場は試料を焦点領域から分離し、明確なピークを持つ優れた分離を達成する事ができました。



分離段階での濃度分布が分離の低さを示しています。また試料が注入チャンネルに沿って移動する際の異なる時間ステップにおける断面プロット(x-yグラフ)も示しています。

この場合、分離段階で試料はほぼ完全に分離されます。断面プロットは試料が注入チャンネルに沿って移動する際の明確に分離したピークを示します。



化学工学モジュールのマイクロフルイディクスモデリング

化学工学モジュールには、輸送反応プロセスを素早く効率的にモデリングして分析するための定義済みアプリケーションインターフェースが含まれています。

特定のシステムに応用させるために、定義済みの式を簡単に変更することができるので、生態系の輸送・反応プロセスの研究にも使用できます。モデル化されるシステムは、ゼブラフィッシュの胎児内の酸素輸送から人体の血管内の酸化窒素の輸送・反応まで広範囲にわたります。

即使用可能なアプリケーションと自由な方程式の定式化の組み合わせが、COMSOL Multiphysicsと化学工学モジュールをマイクロフルイディクス分野のモデリングのための完全なツールとしています。