

# 줄 발열에 의한 온도기울기 농축을 위한 미세채널 형상 최적화

한태현<sup>†</sup> · 김선민<sup>\*</sup>

## A Geometric Optimization of a Microchannel for Temperature Gradient Focusing via Joule Heating

Taeheon Han and Sun-Min Kim

**Key Words :** Temperature Gradient Focusing(온도기울기 농축), Joule Heating(줄 발열), Geometric Optimization(형상 최적화)

### Abstract

A temperature gradient focusing (TGF) via Joule heating phenomenon was numerically studied. The governing transport equations are implemented into a quasi-1D numerical model to predict the resulting temperature, velocity, and concentration profiles along a microchannel of varying width under an applied electric field. The model is used to analyze the effects of varying certain geometrical parameters of a microchannel on the focusing performance of the device. We show the effects of varying width of the microchannel having a fixed length, and propose the optimal geometry of the device. This method can be easily implemented into lab-on-a-chip (LOC) applications where focusing is required based on its simple design.

### 1. 서 론

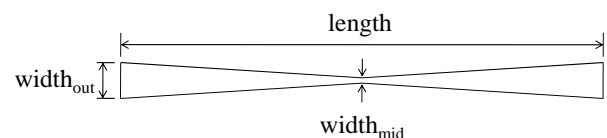
초기 시료의 농도가 장치의 검출 한계를 밀도는 농도를 가질 때, 검출 가능한 임계 농도를 초과하기 위해 시료의 농축이 요구된다.<sup>(1~5)</sup> 이러한 시료 농축을 위해 전기역학적(electrokinetic) 메커니즘을 이용하는 미세유체시스템은 다양한 방법으로 다년간 연구되고 개발되어 왔다.

줄 발열(Joule heating)에 의한 온도기울기 농축(temperature gradient focusing, TGF)은<sup>(6~9)</sup> 시료를 농축하기에 효과적이고 신뢰할 만한 방법이다. 온도기울기 농축은 채널 내에 온도 분포에 따라 전하를 띠는 분자의 전기이동(electrophoretic, EP,  $u_{EP}$ ) 속도에 대하여 유동 속도(bulk fluid,  $u_{bulk}$ )의 균형

을 통하여 분자를 농축시킨다. 완충액(buffer)은 온도 의존성(temperature-dependent) 이온 강도와 점도를 가지기 때문에, 시료는 온도 의존성 전기이동 속도를 가지게 되고, 이는 온도 기울기가 발생된 채널의 일정한 위치에 농축이 일어나게 한다.

폭이 변하는(variable-width) 형상을 가지는 미세채널(microchannel)을 따라 전기역학적 수송 현상(transport phenomena)을 기술하기 위해, 준 1 차원(quasi-1-dimensional) 지배 방정식을 제시한다. 이러한 수치적인 모델의 타당성을 증명하기 위해 실험과 비교하였다.

미세채널은 그림 1 과 같이 이전 연구<sup>(10)</sup>에서 사용되었던 폭이 변하는 형상을 가진다.



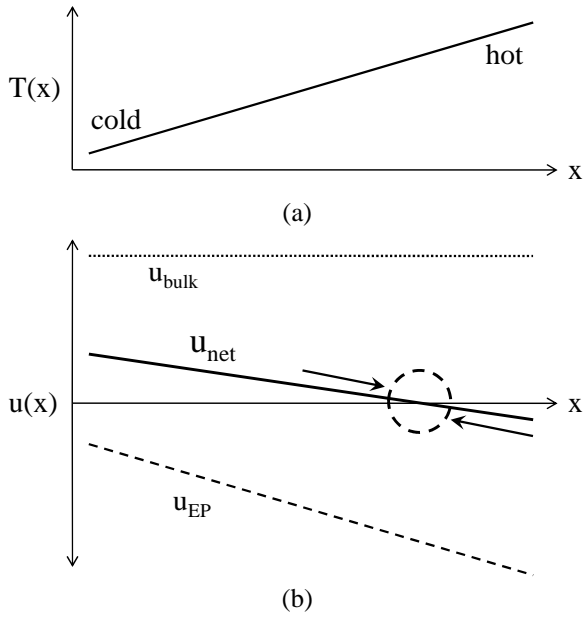
**Fig. 1** Geometrical profile of microchannel (length=16mm, width<sub>out</sub>=600 $\mu$ m, width<sub>mid</sub>=55 $\mu$ m, depth=18 $\mu$ m).

<sup>†</sup> 회원, 인하대학교 기계공학과

E-mail : typhoon@inhaian.net

TEL : (032)860-7328 FAX : (032)860-7328

<sup>\*</sup> 인하대학교 기계공학부



**Fig. 2** Schematic illustration of temperature gradient focusing in a microchannel. (a) Temperature distribution along the microchannel. (b) Velocity distribution along the microchannel. The average bulk velocity ( $u_{bulk}$ , dotted line) is constant. The electrophoretic velocity ( $u_{EP}$ , dashed line) is proportional to  $T(x)$ . The net velocity ( $u_{net}$ , solid line) is the sum of the bulk and electrophoretic velocities.

## 2. 수치해석 방법

전기삼투 유동(electroosmotic flow, EOF) 및 압력 구동 유동(pressure driven flow, PDF)으로 발생하는 유동 속도( $u_{bulk}$ )는 전기이동 속도( $u_{EP}$ )와 반대 방향이다. 대부분의 경우에서 전도성 완충액은 온도가 높아짐에 따라 점도가 낮아지고, 점도가 낮아짐에 따라  $u_{EP}$ 의 크기가 커진다. 따라서, 채널 내부의 길이 방향에 따른 온도 분포가 그림 2와 같을 때,  $u_{EP}$ 의 속도 분포는 채널의 길이 방향에 따라 그림 2(b)의 파선(dashed line)과 같고, 순 속도( $u_{net} = u_{bulk} + u_{EP}$ )는 실선(solid line)과 같다. 만약 순 속도( $u_{net}$ )가  $u_{net} = 0$ 이고  $\frac{\partial u_{net}}{\partial x} < 0$ 이라면, 그림 2(b)와 같이  $x$  축과 만나는 지점인 채널의 특정한 위치에서 농축이 발생하게 된다.

### 2.1 지배 방정식

유동 속도에 대한 질량 보존 방정식(mass conservation)

$$\frac{\partial}{\partial x}(u_{bulk}A) = 0 \quad (1)$$

유동 속도 방정식(equation of bulk fluid motion)

$$u_{bulk,i} = u_{eof,i} + u_{pdf,i}$$

$$u_{bulk,i} = \left( \frac{\varepsilon_0 \varepsilon_i(T) \zeta_i(T)}{\eta_i(T)} \right) \frac{d\phi_i}{dx} - \left( \frac{1}{32} \frac{d_{h,i}^2}{\eta_i(T)} \right) \frac{dP_i}{dx} \quad (2)$$

용질의 유효 분산 계수(effective dispersion coefficient)에 대한 근사식

$$D_{eff}(T) = D(T) \left[ 1 + \frac{Pe_h^2}{210} \right] \quad (3)$$

분자의 질량 확산율(mass diffusivity)에<sup>(11,12)</sup> 대한 근사식

$$D(T) = 0.025D_0(T - 25^\circ C) + D_0 \quad (4)$$

분자의 질량 수송 방정식(molecular mass transport equation)에 대하여 비활성 분자로 가정 하여, 반응율(reaction rate)을 0으로 설정

$$A_i \frac{\partial c_i}{\partial t} = - \frac{\partial}{\partial x}(A_i j_i) = \frac{\partial}{\partial x} \left( A_i D_{eff,i}(T) \frac{dc_i}{dx} \right) - \frac{\partial}{\partial x} (c_i A_i u_{bulk,i}) + \frac{\partial}{\partial x} \left( c_i A_i \mu_{ep,i}(T) \frac{\partial \phi_i}{\partial x} \right) \quad (5)$$

구형 단백질로 가정한 분자의 전기이동 유동성(electrophoretic mobility)

$$\mu_{ep} = \frac{q}{6\pi r \eta(T)} \quad (5)$$

정전기적(electrostatic) 조건에 대한 전류

$$I = \sigma(T)AE = -\sigma(T)A \frac{d\phi}{dx} \quad (6)$$

에너지 방정식(energy equation)

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho_i c_{p,i} A_i T_i) + u_{bulk} \cdot \frac{\partial}{\partial x} (\rho_i c_{p,i} A_i T_i) = \frac{\partial}{\partial x} \left( k_i A_i \frac{\partial T_i}{\partial x} \right) + \sigma_i A_i \left( \frac{\partial \phi_i}{\partial x} \right)^2 - \frac{2k_{sub} w_i}{l} (T_i - T_{sub}) \quad (7)$$

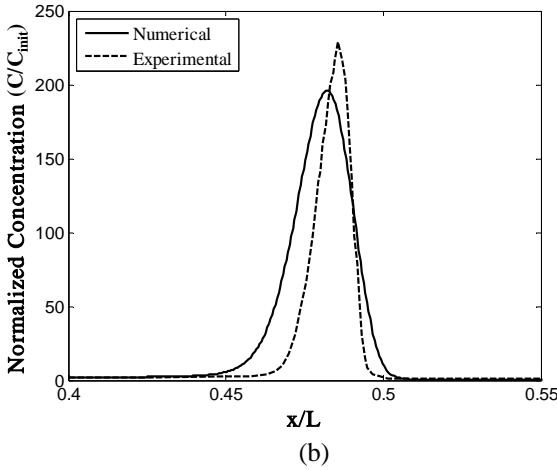
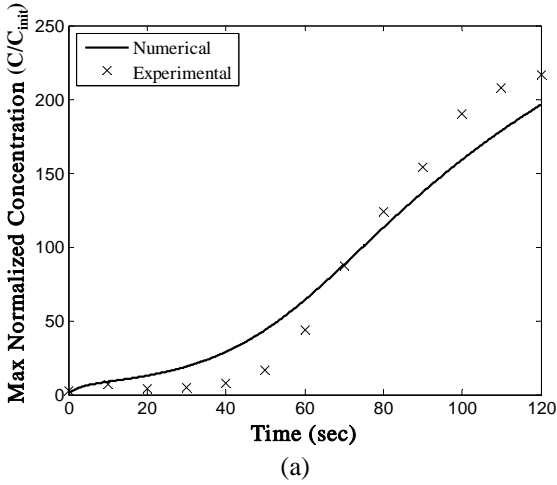
$$\frac{2k_{sub} w_i}{l} (T_i - T_{sub}) - h_\infty w_{sub} (T_{sub} - T_\infty) = \rho_{sub} c_{p,sub} w_{sub} d_{sub} \frac{\partial T_{sub}}{\partial t} \quad (8)$$

안정적인 수치 해석 결과를 얻기 위해 아래와 같은 시간 증분(time increment)을 적용하였다.

### 3. 결과

수치 모델은 농축 현상에서 채널 형상을 변화하는 효과를 연구하기 위해 사용된다. 그림 3(a)는 2 분 동안 1200V 에서 900mM Tris-Borate 에 0.1mM fluorescein-Na 의 수치적인 결과와 실험적인 결과에 대한 시료의 수송 거동을 나타낸다. 수치적 그리고 실험적인 결과는 비슷한 거동을 보이고, 따라서 수치적인 모델링은 타당함을 알 수 있다.

그림 3(b)는 시간이 2 분일 때 시료 농축 위치와 농축된 대역폭(band width)이 거의 동일한 결과를 보인다. 수치적인 결과와 실험적인 결과는 약간의 차이를 나타내는데, 이는 식 (3)와 (4)에서  $D_{eff}$  를

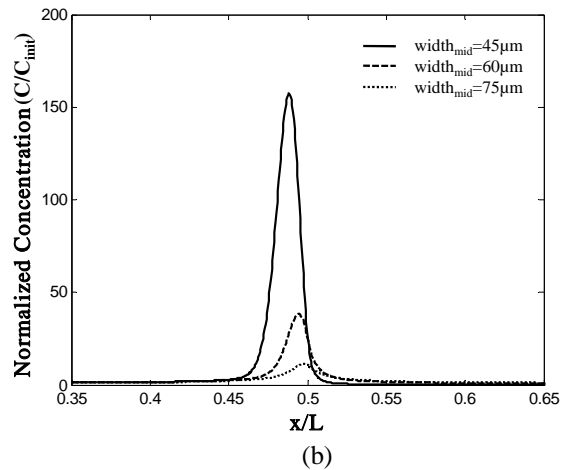
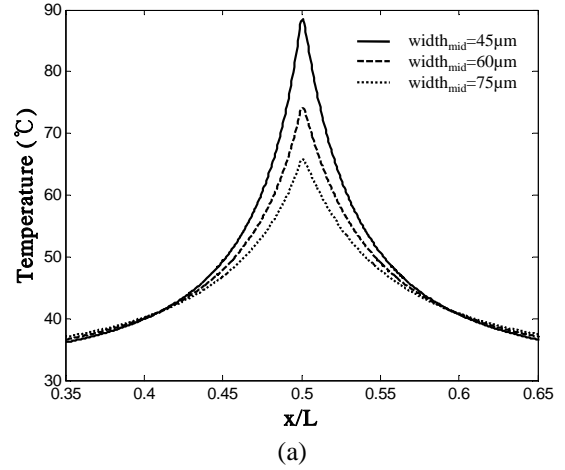


**Fig. 3** Comparison between experimental and numerically predicted concentration profiles. (a) Maximum normalized concentration vs. time. (b) Concentration profiles at  $t=2$  minutes. Using a dilute rhodamine-B in 900mM Tris-Borate solution. 1200V applied at  $x=0$ ,  $x=L$  grounded. Length=16mm,  $width_{out}=600\mu m$ ,  $width_{mid}=55\mu m$ , depth=18 $\mu m$

$$dt \leq \frac{N(dx)^2}{2D_{eff,max}} \quad (9)$$

#### 2.2 분석 재료

온도 의존성 유동성과 농축 분석을 위해 시료는 fluorescein-Na 을 사용하였다. 완충액(buffer)은 900nM Tris-Borate 완충액이 사용되었다. 시료는 0.1mM 의 농도로 완충액에 희석되었다. 수치 모델에서 사용되는 0.1mM fluorescein-Na 와 900mM Tris-Borate buffer 의 물리량은 이전 연구<sup>(13)</sup>와 같은 값을 사용하였다.



**Fig. 4** Resulting (a) temperature profiles and (b) normalized concentration profiles after 1 minute of focusing.  $width_{mid}=45\mu m$  (solid line),  $60\mu m$  (dashed line) and  $75\mu m$  (dotted line). 0.1mM fluorescein-Na in 900mM Tris-Borate buffer is simulated. The channel length (length=16mm), depth (depth=18 $\mu m$ ) and out width ( $width_{out}=600\mu m$ ) are the same for each case. 1200V is applied at  $x=0$  and  $x=L$  is grounded.

계산하는데 사용된 근사식 때문일 것이다.

그림 4는 1분 동안 같은 전압인 1200V에서 채널 중심의 폭( $w_{mid}$ )이 변함에 따라 온도와 농도 프로파일에 영향을 주는 결과를 보여준다. 채널의 중심 폭이 좁아지면, 이 지점을 통과하는 전류 밀도가 증가하게 된다. 따라서 시료의 온도는 증가되고 보다 큰  $\partial T/\partial x$ 가 발생된다. 또한, 온도 분포의 기울기가 크게 되면  $\partial u_{net}/\partial x$  곡선도 큰 기울기를 가지게 되며, 이러한 결과로 채널의 폭이 가장 좁은 곳에 대하여 높은 농도를 나타내게 된다.

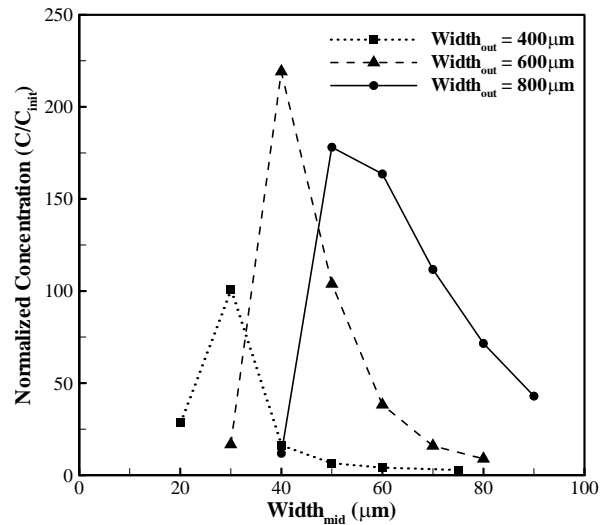
비록 폭이 좁은 채널의 중심으로 보다 높고 빠른 농축을 이룰 수 있을지라도, 좁은 채널의 중심은 넓은 채널의 중심보다 열 손실이 많이 발생하게 되고, 최후에는 시료의 과손과 용액의 비등(boiling)을 일으키는 보다 높은 위험을 내포할 수 있다. 그러므로, 안전한 시스템과 높은 농도를 얻기 위해서 상호 배척되는 조건들은 온도기울기 농축 시스템이 설계될 때 반드시 고려되어야 하는 사항이다.

5(a)는 1분 동안 1200V에서 900mM Tris-Borate에 0.1mM fluorescein-Na의 수치적인 시뮬레이션에 대한 시료의 농축 양상을 보여준다. 앞서 설명된 것처럼 채널의 좁은 중심 폭은 높은 농축을 보이는 반면에 높은 온도를 야기시키고 문제를 발생시킨다. 이에 순수한 물에서 비등이 발생하는 임계 온도인 100°C로 제한하여 결과를 산출하였다.

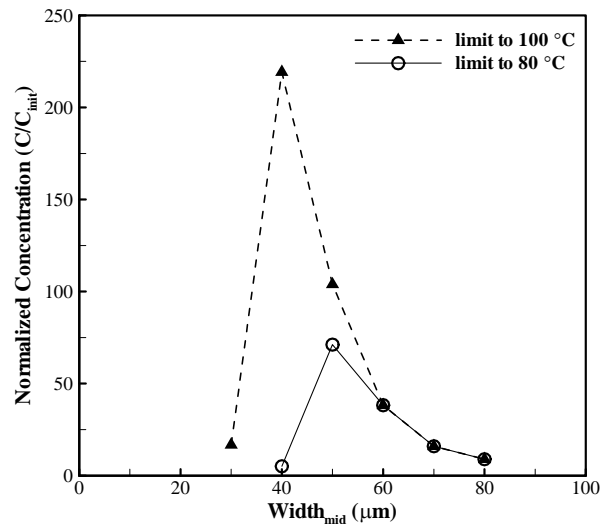
채널 바깥쪽에서 다른 폭을 가지는 각각의 선도에서 채널의 중심 폭이 넓은 형상에서 좁은 형상으로 변하면서 농축이 높아진다. 그러나, 채널 중심 폭이 어느 한계 이하로 좁아지게 되면 농축이 급격히 낮아졌다. 이는 시료 용액의 온도가 제한된 온도를 넘어가기 전에 계산을 중단했기 때문에 농축이 더 이상 진행되지 못했음을 나타낸다.

실제의 용액에서는 시료와 같은 불순물을 함유하고 있기 때문에 시료 용액의 비등하는 임계 온도는 더 낮아지고 채널의 중심 폭을 좁혀 온도기울기를 크게 만드는 것에 제한이 따를 것이다. 그림 5(b)는 임계 온도를 각각 100°C와 80°C로 제한하여 결과를 비교하였다. 모든 조건이 동일하고 채널의 중심 폭이 줄어들 때, 이러한 온도에 대한 제한으로 말미암아 각각의 선도들의 농축은 낮은 온도로 제한된 선도의 농축이 급격히 낮아지게 된다.

채널의 중심 폭이 50~60 $\mu\text{m}$  사이에서 온도가 80°C가 넘는 지점이 있기 때문에 80°C로 제한된



(a)



(b)

**Fig. 5** Resulting normalized concentration values vs. (a) middle width for the variation of outside width and (b) middle width for the limitation of temperature after 1 minute of focusing. 0.1mM fluorescein-Na in 900mM Tris-Borate buffer is simulated. The channel length (length=16mm) and depth (depth=18 $\mu\text{m}$ ) are the same for each case. 1200V is applied at  $x=0$  and  $x=L$  is grounded.

선도는 50 $\mu\text{m}$  이하의 중심 폭부터 낮은 농축을 보이게 된다. 다시 말하자면, 농축이 최대로 이루어지는 지점의 농도는 온도의 제한으로 낮아진다. 따라서, 농축이 효과적으로 나타나는 채널 중심 폭의 대역폭이 줄어들기 때문에, 채널 형상 설계에 제약이 뒤따른다.

#### 4. 결 론

본 연구에서는 이전에 연구되었던 온도기울기를 이용한 농축 실험에 대하여 수치적인 모델을 제시하고 그에 따른 모델의 타당성을 확인하였다. 보다 빠르고 높은 농축 효율을 얻기 위하여 여러 가지의 파라미터들 중에 미세채널의 폭(width)에 관련된 형상 파라미터만을 변수로하여 수치해석을 수행하였다.

채널 중심의 폭이 넓은 치수에서 좁은 치수로 변화할 때, 채널 중심부에서의 온도기울기의 크기가 커지게 되고, 따라서 높은 농축을 얻을 수 있었다. 이러한 높은 농축을 얻는 것에 반하여 채널 중심부에서 높은 온도가 발생하게 되고, 시료의 파손 및 용액의 비등과 같은 문제점이 발생하게 될 것이다. 따라서, 안전하게 높은 농도를 얻기 위해서는 채널 중심의 폭에 대한 설계 조건이 제한되게 된다.

채널 바깥의 폭에 따른 채널 중심의 폭 변화에 대한 농축 결과로 채널 폭에 대하여 최적의 형상 설계 조건이 있음을 알 수 있었다. 또한, 온도 제한에 따라 채널 폭에 대한 최적의 형상 설계 조건이 바뀔 수 있었다.

#### 후 기

이 논문은 2007년도 정부재원(교육인적자원부 학술연구조성사업비)으로 한국학술진흥재단의 지원을 받아 연구되었음(KRF-2007-331-D00064).

#### 참고문헌

(1) Khandurina, J., Jacobson, S. C., Waters, L. C., Foote, R. S. and Ramsey, J. M., 1999, "Microfabricated Porous Membrane Structure for Sample Concentration and Electrophoretic Analysis," *Anal. Chem.*, Vol. 71, No. 9, pp. 1815~1819.

(2) Hatch, A. V., Herr, A. E., Throckmorton, D. J., Brennan, J. S. and Singh, A. K., 2006, "Integrated Preconcentration SDS-PAGE of Proteins in Microchips Using Photopatterned Cross-Linked Polyacrylamide Gels," *Anal. Chem.*, Vol. 78, No. 14, pp. 4976~4984.

(3) Wang, Y. C., Stevens, A. L. and Han, J. Y., 2005, "Million-fold Preconcentration of Proteins and Peptides by Nanofluidic Filter," *Anal. Chem.*, Vol. 77, No. 14, pp. 4293~4299.

(4) Kim, S. M., Burns, M. A. and Hasselbrink, E. F., 2006, "Electrokinetic Protein Preconcentration Using a Simple Glass/Poly(dimethylsiloxane) Microfluidic Chip," *Anal. Chem.*, Vol. 78, No. 14, pp. 4779~4785.

(5) Yu, C., Davey, M. H., Svec, F. and Frechet, J. M. J., 2001, "Monolithic Porous Polymer for On-Chip Solid-Phase Extraction and Preconcentration Prepared by Photoinitiated in Situ Polymerization within a Microfluidic Device," *Anal. Chem.*, Vol. 73, No. 21, pp. 5088~5096.

(6) Ross, D. and Locascio, L. E., 2002, "Microfluidic Temperature Gradient Focusing," *Anal. Chem.*, Vol. 74, No. 11, pp. 2556~2564.

(7) Balss, K. M., Ross, D., Begley, H. C., Olsen, K. G. and Tarlov, M. J., 2004, "DNA Hybridization Assays Using Temperature Gradient Focusing and Peptide Nucleic Acids," *Anal. Chem.*, Vol. 126, No. 41, pp. 13474~13479.

(8) Balss, K. M., Vreeland, W. N., Phinney, K. W. and Ross, D., 2004, "Simultaneous Concentration and Separation of Enantiomers with Chiral Temperature Gradient Focusing," *Anal. Chem.*, Vol. 76, No. 24, pp. 7243~7249.

(9) Balss, K. M., Vreeland, W. N., Howell, P. B., Henry, A. C. and Ross, D., 2004, "Micellar Affinity Gradient Focusing; A New Method for Electrokinetic Focusing," *J. Am. Chem. Soc.*, Vol. 126, No. 7, pp. 1936~1937.

(10) Kim, S. M., Sommer, G. J., Burns, M. A., and Hasselbrink, E. F., 2006, "Low-Power Concentration and Separation Using Temperature Gradient Focusing via Joule Heating," *Anal. Chem.*, Vol. 78, No. 23, pp. 8028~8035.

(11) Tang, G. Y., Yan, D. G., Yang, C., Gong, H. Q., Chai, J. C. and Lam, Y. C., 2006, "Assessment of Joule Heating and its Effects on Electroosmotic Flow and Electrophoretic Transport of Solutes in Microfluidic Channels," *Electrophoresis*, Vol. 27, No. 3, pp. 628~639.

(12) Tang, G. Y., Yang, C., Gong, H. Q., Chai, J. C. and Lam, Y. C., 2006, "Numerical Simulation of Joule Heating Effect on Sample Band Transport in Capillary

Electrophoresis," *Anal. Chim. Acta*, Vol. 561, No. 1-2, pp. 138~149.

- (13) Sommer, G. J., Kim, S. M., Littrell, R. J. and Hasselbrink, E. F., 2007, "Theoretical and Numerical Analysis of Temperature Gradient Focusing via Joule Heating," *Lab Chip*, Vol. 7, No. 7, pp. 898~907.