

〈 논문 〉

미소채널 내 전기역학 및 유전영동 현상 해석을 위한 수치 프로그램 개발 및 검증

권재성*, 맹주성**, 송시몬†

(2006년 8월 5일 접수, 2007년 2월 12일 심사완료)

Development and Validation of Numerical Program for Predicting Electrokinetic and Dielectrophoretic Phenomena in a Microchannel

Jae-Sung Kwon, Joo-Sung Maeng and Simon Song

Key Words : Microfluidic Chip(미세유동 칩), Sample Pretreatment(샘플 전처리), Electrokinesis(전기역학), Dielectrophoresis(유전영동), Monte-Carlo Simulation(몬테카로 시뮬레이션)

Abstract

Electrokinesis and dielectrophoresis are important transport phenomena produced by external electric field applied to a microchannel containing a conductive fluid. We developed a CFD code to predict electrokinetic and dielectrophoretic flows in a microchannel with a uniform circular post array. Using the code, we calculated particle velocities driven by electrokinesis and dielectrophoresis, and conducted Monte Carlo simulations to visualize the particle motions. The code was validated by comparing the results with those from previous studies in literature. At a low electric field, electrokinesis and diffusion is the dominant transport mechanism. At a moderate electric field, dielectrophoresis is balanced with electrokinesis and diffusion, resulting in flowing filaments of particles in the microchannels. However, dielectrophoresis overwhelms the flow at a high electric field and traps particles locally. These results provide useful insight for optimizing design parameters of a microfluidic chip for biochemical analysis, especially for development of on-chip sample pretreatment techniques using electrokinetic and dielectrophoretic effects.

기호설명

\vec{E}	: 전기장
K	: Clausius-Mossotti 인자
n	: 표면 수직 단위 벡터
r	: 반지름
\vec{u}	: 직교 좌표계 속도

$Re[]$: []의 실수 부분

그리스문자

ε	: 유전 상수 ($= \varepsilon_0 \varepsilon_r$)
ε_0	: 진공 유전율
ε_r	: 상대 유전율
ϕ	: 전위
η	: 점성 계수
λ_D	: Debye layer 의 두께
μ	: 입자의 이동도
ω	: 전기장의 진동수
ζ	: Zeta 전위

* 책임저자, 회원, 한양대학교 기계공학부

E-mail : simonsong@hanyang.ac.kr

TEL : (02)2220-0423 FAX : (02)2298-4634

** 회원, 한양대학교 기계기술연구소

*** 회원, 한양대학교 기계공학부

하점자

comb	: 전기 역학 및 유전 영동 결합
dep	: 유전 영동
ek	: 전기 역학
eo	: 전기 삼투
ep	: 전기 영동
f	: 유체
in	: 마이크로 채널의 입구
out	: 마이크로 채널의 출구
p	: 입자
w	: 마이크로 채널 벽

1. 서 론

BioMEMS는 반도체 공정의 미세 가공 기술을 응용하여 생명공학에 사용되는 일련의 분석 기능들을 칩 위에 집적하는 기술이다. 유전학자들은 최근 생물체의 계놈(genome)분석을 바탕으로 인간의 DNA 염기 서열을 완성하였지만, 이제는 DNA 염기 서열을 통해 수많은 유전자와 단백질의 기능을 밝혀야 하는 또 다른 과제를 안고 있다. 이를 해결하기 위해 공학자들은 칩 위에서 소량의 샘플로도 빠르고 정확하게 유전자를 분석할 수 있는 바이오 칩을 개발하였다. 바이오 칩은 유리, 실리콘 혹은 플라스틱 등의 재질로 된 작은 기판 위에서 유전자의 결합 및 단백질 분포, 반응 양상 등을 분석할 수 있는 생물학적 microchip이다.⁽¹⁾

바이오 칩은 크게 microarray chip과 microfluidic chip으로 나눌 수 있다. Microarray chip은 탐지기능이 있는 수백에서 수백 만개의 DNA나 단백질 등을 칩 위에 array형태로 배열한 다음, 분석 대상의 바이오 물질과 반응시켜 그 결합 양상을 관찰하는 칩을 말한다. 이와 다르게 microfluidic chip은 마이크로 채널에 소량의 샘플을 흘려 보내면서 일련의 분석 과정을 수행하는 칩으로서, 샘플을 주입하고 분석하는 모든 과정이 칩 위에서 자동화되어 이루어지는 Lab-on-a-Chip 혹은 μTAS(micro Total Analysis System) 등을 포함한다. 바이오 칩에 대한 연구 개발은 microarray chip으로부터 출발하여 현재는 microfluidic chip으로 확대되고 있다.

Microfluidic chip을 이용하여 샘플 분석과정을 자동화하려면 샘플 전처리(sample pretreatment) 기능이 칩 상에 집적되어야 한다. 샘플 전처리는 분석 및 측정에 불필요한 물질을 제거하고 복잡한 성분의 시료로부터 원하는 바이오 샘플을 겸출해 분석에 적합하게 처리하는 과정으로서,⁽²⁾ 정제(clean-

up), 농도 증폭(preconcentration), 혼합(mixing), 반응(reaction) 등을 포함한다. 샘플 전처리를 칩에서 수행하면 여러 가지 장점이 있다. 소량의 시료로도 분석이 가능하기 때문에 바이오 샘플의 소비가 줄어들고, 분석 시간이 단축되며, 분석 과정의 소형화 및 자동화가 용이해지고, 샘플의 오염 가능성이 낮아진다. 지난 10여 년간 separation, immunoassay, cell sorting 등과 같은 여러 샘플 분석 방법들이 칩 위에서 성공적으로 구현되었지만 샘플 전처리 과정은 아직 전통적인 방법대로 칩 밖에서 수행되고 있다.

샘플 전처리에 필요한 미세 유동 제어를 효과적으로 수행하기 위해 많은 연구들이 진행되어 왔다. 1990년대 초반 칩 위에서 모세관 전기 영동을 이용한 화합물의 분리가 성공적으로 수행된 이후,^(3,4) 분석 화학자들은 샘플 전처리 기능이 집적된 microfluidic chip을 개발하기 위해 소량의 바이오 물질을 수송, 제어하는 기술을 꾸준히 연구하였다. 그 중 최근에 주목 받고 있는 기술이 전기 역학(electrokinetics)과 유전 영동(dielectrophoresis)이다.

전기 역학^(5,6)은 19세기 Reuss가 다공성 점토(porous clay)내에서 이 현상을 발견한 이후로 꾸준히 연구되어 왔다. 전해질과 고체 벽면이 전기적 평형을 이루고 있는 Debye layer의 전위 분포와 전하의 이동 특성이 연구되었고,⁽⁷⁾ 채널 표면의 zeta 전위와 전기 역학적 흐름의 상관 관계가 실험적으로 규명되었다.⁽⁸⁾ 또한 외부 전기장이 인가된 칩 위에서, 입자의 크기에 따라 변화하는 유동 특성이 확인되었고,⁽⁹⁾ 입자의 전기 화학적 성질에 따른 전기 영동 및 전기 삼투의 변화가 실험적으로 연구되었다.⁽¹⁰⁾ 전기 역학은 아주 작은 공간 내에서 전기장의 인가만으로도 입자와 유체를 쉽게 수송 할 수 있기 때문에, DNA, RNA, 단백질, 세포 분해물, 박테리아, 바이러스 등의 바이오 입자들을 분석하기에 앞서 수행되는 샘플 전처리 과정에 응용되고 있다.

유전 영동⁽¹¹⁾은 1970년대 H. A. Pohl에 의해 본격적인 연구가 시작되었다. 이후 전기장의 세기 및 주파수의 크기에 따른 유전 영동적 힘(dielectrophoretic force)의 변화가 연구되었고,⁽¹²⁾ 전기장의 구배가 입자 분극화(polarization)에 미치는 효과가 규명되었다.⁽¹³⁾ 또한 입자의 크기에 따라 변화하는 유전 영동적 힘이 수치 해석과 실험을 통해 연구되었고,⁽¹⁴⁾ 이를 바탕으로 채널 내 입자의 유동을 효과적으로 제어할 수 있는 교류 전극의 형상 및 배열 형태가 연구되었다.⁽¹⁵⁾ 최근에는 교류 전기장

이 아닌 직류 전기장을 이용하여 마이크로 채널에서 유전 영동 현상을 유도하는 방법이 제안되었는데, Cummings와 Singh는 직류 전기장이 인가된 마이크로 채널에 post를 배열함으로써 전기장의 구배 및 유전 영동 현상을 발생시켰다.⁽¹⁶⁾ 이러한 연구 결과를 바탕으로 현재 유전 영동은 의학 분야에서 효소나 박테리아를 분리하기 위한 수단으로 응용되고 있다.^(17,18)

전기 역학 및 유전 영동을 이용한 기존 샘플 전처리 기술의 대부분은 연구자의 경험과 시행 착오에 의존하여 개발되어 왔다. 이는 생화학 분석에서 다루어지는 바이오 물질들의 전기 화학적 성질이 다양하고, 전기 역학 및 유전 영동 현상에 대한 해당 물질의 반응 역시 복잡하기 때문이다. 뿐만 아니라 유전 영동을 이용한 샘플 전처리 연구 성과가 전기 역학을 이용한 성과에 비해 상대적으로 부족하여 기술적인 노하우(Know-How)를 축적하지 못하고 있는 것도 그 이유라고 볼 수 있다. 만일 마이크로 채널에서 발생하는 다양한 전기 역학과 유전 영동을 수치적으로 예측하여 마이크로 채널의 형상을 최적화할 수 있다면, 생화학 물질에 대한 샘플 전처리 과정을 침 위에서 효과적으로 수행할 수 있을 뿐만 아니라 microfluidic chip의 기능도 향상시킬 수 있다.

본 연구의 목적은 마이크로 채널에서의 전기 역학 및 유전 영동 현상을 예측할 수 있는 해석 프로그램을 개발하고 검증하는데 있다. 이를 위해 타원형 편미분 방정식⁽¹⁹⁾과 전 경계 제어법(full boundary control method)에 의한 정렬 격자 생성,⁽²⁰⁾ Laplace방정식과 속도 및 전기장의 관계를 이용한 유동장 분포 계산,^(16,21) 그리고 입자의 유동 특성을 확인할 수 있는 Monte-Carlo simulation 등을 이용하였다. 본 연구에서 개발된 해석 프로그램은 post의 형상에 상관없이 격자 형성에서부터 Monte-Carlo simulation에 이르는 모든 계산 과정이 초기 입력값에 의해 자동으로 이루어지므로, 프로그램을 이용하는 사용자로 하여금 편리성을 제공한다. 또한 정렬 격자에서 비 선형항 계산시 발생 할 수 있는 mapping error를 최소화하기 위해 고등 차수 보간법 중의 하나인 bicubic interpolation⁽²²⁾을 사용하므로 보다 정확한 결과를 얻을 수 있다. 따라서 이 해석 프로그램은 마이크로 채널에서 발생하는 전기 역학과 유전 영동 현상을 예측하여, 샘플 전처리 기술을 향상시키는데 효과적으로 활용될 것이다. 본 논문에서는 개발된 해석 프로그램의 검증을 위하여 Cummings와 Singh⁽¹⁶⁾의 결과를

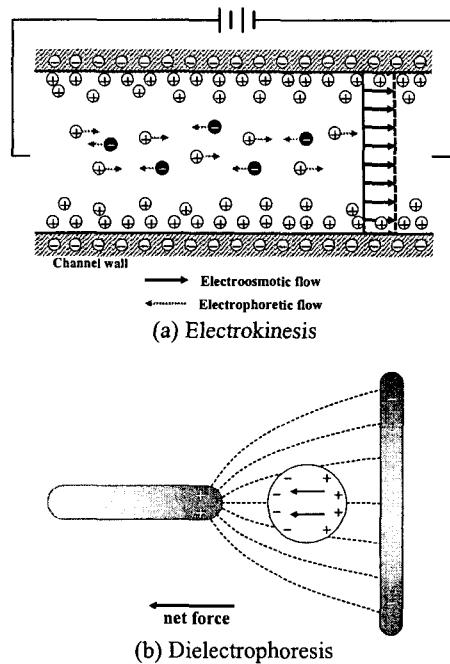


Fig. 1 Schematics of electrokinesis and dielectrophoresis

benchmarking하였다.

2. 배경 이론

2.1 전기 역학

전기 역학은 고체 표면과 접하고 있는 전해질 용액에 외부 전기장을 걸어 주었을 때 발생하는 입자와 유체의 이동 현상으로서 외부 전기장의 세기에 비례하는 특성을 가진다. 전기 역학은 외부 전기장에 의해 움직이는 이동 매체의 종류에 따라 전기 삼투(electroosmosis)와 전기 영동(electrophoresis)으로 구분되며, 각각의 원리는 Fig. 1(a)에 나타내었다. 전기 삼투는 마이크로 채널에 외부 전기장을 걸어 주었을 때 나타나는 고체 표면에 대한 유체의 상대적 움직임으로 정의된다. 채널 표면이 전해질과 맞닿게 되면 채널 표면에는 일반적으로 음전하가 분포하고, 전해질 용액 내에서는 음전하와 같은 크기의 양이온들이 유도된다. 이 양이온들은 채널 표면에 아주 얇은 층(Debye layer)을 형성하고, 외부에서 인가된 전기장에 의해 음극으로 이동한다. 이 때, 마이크로 채널 유동은 레이놀즈 수가 아주 낮기 때문에 이온의 이동과 함께 유체도 같이 움직이는데, 이를 전기 삼투라고

한다.

전기 삼투에 의해 발생되는 마이크로 채널 유동은 Fig. 1(a)에 보여진 것처럼 1차원 속도 분포를 가지며 경계조건은 slip condition으로 주어진다. 이는 속도 구배를 가지는 Debye layer의 두께($\sim 10\text{nm}$)가 마이크로 채널의 특성 길이에 비하여 현저히 얇아서 Debye layer안의 속도 구배를 무시할 수 있기 때문이다. 따라서 전기 삼투에 의한 속도 분포 관계식은 Helmholtz-Smoluchowski 관계식에 의해 식 (1)과 같이 표현된다.⁽⁵⁾

$$\vec{u}_{eo} = -\frac{\epsilon_f \zeta_w}{\eta_f} \vec{E} \quad (1)$$

즉, 전기 삼투에 의한 속도는 전기장에 비례하고 유체의 물성에 의해 결정된다.

전기 영동은 정지한 유체에 대한 전하를 띤 입자들의 상대 운동을 말한다. 전기 영동에 의해 발생하는 입자의 속도는 다소 복잡한 과정을 거쳐 수학적으로 결정되는데, 입자 표면의 Debye layer 두께(λ_D)와 입자 반지름(r_p)에 의해 구분되는 다음의 관계식으로부터 결정된다.⁽⁶⁾

$$\vec{u}_{ep} = \begin{cases} \frac{\epsilon_f \zeta_p}{\eta_f} \vec{E} & (\lambda_D \ll r_p) \\ \frac{2\epsilon_f \zeta_p}{3\eta_f} \vec{E} & (\lambda_D \gg r_p) \end{cases} \quad (2)$$

2.2 유전 영동

유전 영동은 유체 내 존재하는 분극화된 입자가 전기장의 구배에 의해 이동하는 현상으로서, 유전 영동에 의해 발생하는 입자의 속도는 식 (3)과 같이 표현된다.^(6,11,12) 여기서 분극(polarization)은 입자를 구성하는 양전하와 음전하가 외부 전기장에 의해 분리되는 현상을 의미한다.

$$\vec{u}_{dep} = \frac{r^2 \epsilon_f \operatorname{Re}[K(\omega)]}{3\eta_f} \nabla |E|^2 \quad (3)$$

Figure 1(b)는 유전 영동 현상의 발생 원리를 나타낸 그림이다. 전기장이 균일할 때는 분극화된 입자의 양쪽에 크기는 같고 방향은 반대인 정전기력이 작용하므로, 입자의 유동이 발생하지 않는다. 하지만 비균일 전기장에서는 정전기력의 크기가 서로 다르기 때문에 입자들은 전기장 구배를 따라

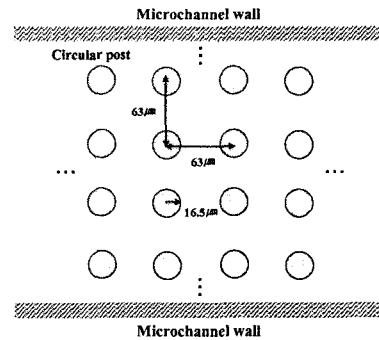


Fig. 2 The geometry of a microchannel containing circular posts

움직인다. 유전 영동은 입자와 유체의 유전율 혹은 전도율 차이에 의하여 양 유전 영동(positive dielectrophoresis)과 음 유전 영동(negative dielectrophoresis)으로 구분되는데, 입자의 유전율이 유체의 유전율보다 커서 입자가 전기장이 강한 쪽으로 움직일 때 양 유전 영동이라고 하고, 이와 반대로 유체의 유전율이 커서 유체가 전기장이 강한 쪽으로 움직일 때 음 유전 영동이라 한다.

3. 해석 프로그램의 개발

3.1 유동 형상

본 연구에서 선택한 유동 형상은 Fig. 2와 같이 원형 post가 일정한 간격으로 배열된 마이크로 채널이다. 원형 post는 외부 전기장이 인가된 마이크로 채널 내에서 전기장의 구배와 유전 영동 현상을 유도하기 위하여 배치되었다. 이 때 post는 63 μm간격의 정방형 형태로 배열되며, 마이크로 채널에 주입되는 입자는 직경 200nm의 Carboxylated latex nanosphere로 가정하였다. 또한 유체는 pH 7.7의 1 mM 완충 용액이며, 입자 간의 상호작용이 없도록 입자의 농도는 충분히 낮다고 가정하였다.

3.2 격자 생성

마이크로 채널 내의 전기 역학 및 유전 영동에 의한 입자 유동을 분석하기 위해 J. F. Thomson의 타원형 편미분 방정식⁽¹⁹⁾과 I. Choi가 제시한 전 경계 제어법(full boundary control method)⁽²⁰⁾을 이용하여 격자를 생성하여 그 결과를 Fig. 3에 나타내었다. 타원형 편미분 방정식을 이용한 격자 생성은 그 해의 해석적 특징으로 인하여 안정된 격자 분포를 얻게 해주고, 경계 부근에서의 직교성과 간격 제어를 용이하

게 할 수 있다는 장점을 가지고 있다. 또한 전 경계 제어법은 제어 함수의 값을 결정하는데 있어 무엇보다도 제어 함수가 임의의 큰 절대값을 가지지 않고 유계치(bounded value)를 갖게 해주므로 수치적 불안정성을 감소시켜 줄 뿐만 아니라 격자 생성 방정식의 자동화에 유용하다. 따라서 타원형 격자 방정식에 ADI법(Alternate Direct Implicit method)을 사용하여 대각 지배성을 확보하고 동시에 전 경계 제어법을 이용한 격자 제어로 격자 생성의 자동화를 달성하여 Fig. 3과 같이 마이크로 채널 내에 양질의 격자를 생성할 수 있었다.

3.3 지배 방정식 및 경계 조건

유동장과 전기장의 상관 관계는 마이크로 채널 내의 전하 및 유체 수송 현상을 예측하는데 있어 매우 중요하다. 채널 내의 전위 분포와 유동장을 수치 해석하기 위해 기존에는 전위 분포에 대한 Poisson방정식과 Navier-Stokes방정식을 연립하여 풀이하였는데,^(23,24) 이 방법은 수치 계산시 상당한 계산량을 요구한다. 이러한 문제를 극복하기 위해 Cummings 등은 전기장과 유동장을 분리하여 풀이하는 수학적 모델을 제시하였는데, 전위의 분포는 Laplace방정식[식 (4)]을 이용하고 유동장은 전기장과 유동장의 간단한 관계식[식 (5)]을 이용하여 계산하였다.⁽²¹⁾

$$\nabla^2\phi=0 \quad (\vec{E}=-\nabla\phi) \quad (4)$$

$$\vec{u}_p=\mu_{eo}\vec{E}-\mu_{ep}\vec{E}+\mu_{dep}\nabla(\vec{E}\cdot\vec{E}) \quad (5)$$

이 때 관계식 (5)에서의 각 인자들은 아래의 식 (6)~(8)로 정의된다.

$$\mu_{eo}=\frac{\epsilon_w\zeta_f}{\eta_f} \quad (6)$$

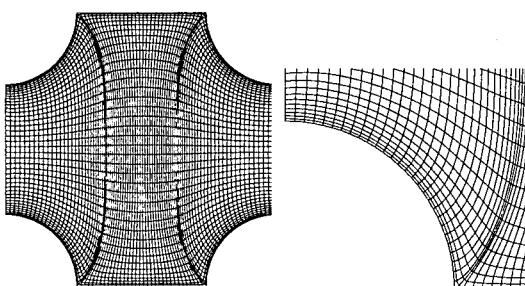


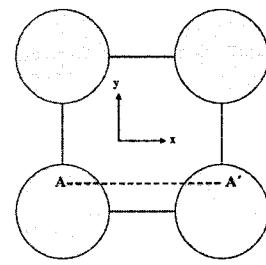
Fig. 3 Grid generation in a microchannel with circular posts array

$$\mu_{ep}=\frac{\epsilon_w\zeta_p}{\eta_f} \quad (7)$$

$$\mu_{dep}=\frac{r^2}{3\eta_f}\epsilon_f \operatorname{Re}[K(\omega)] \quad (8)$$

위 모델이 마이크로 채널 내 입자들의 유동을 수치 해석하는데 적용되기 위해서는, 몇 가지 전기 화학적 조건이 뒷받침 되어야 한다. 먼저 마이크로 채널에 인가된 외부 전기장의 세기가 일정하여야 하며, 채널에 존재하는 유체의 전기적 특성(net charge distribution)이 중성이어야 한다. 또한 Helmholtz-Smoluchowski 관계식[식 (1)]이 마이크로 채널 내의 유동장 해석을 위한 경계 조건으로 이용될 수 있도록 Debye layer의 두께가 채널의 특성 길이에 비하여 매우 얇아야 하며, 밀도와 점성 등의 유체 물성이 균일하여야 한다. 본 연구를 비롯하여 대부분의 공학적 마이크로 채널 유동은 위의 조건들을 만족한다.

지배 방정식을 이용하여 마이크로 채널 내의 입자 유동을 수치 해석하기 위해, 전위 분포를 지배



(a) A-A' measurement line

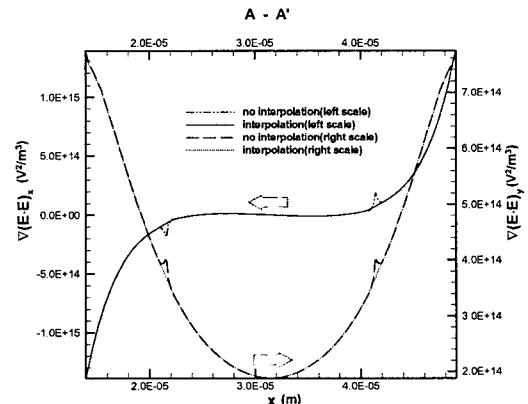


Fig. 4 Comparison between before and after executing bicubic interpolation

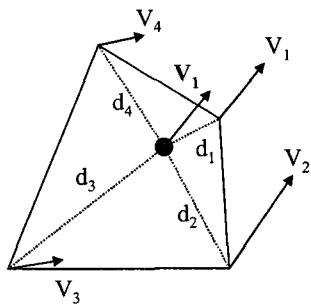


Fig. 5 Nearest neighbor scheme

하는 Laplace 방정식의 경계 조건[식 (9)~(11)]으로서 입구와 출구에서 전위의 크기가 일정하고 post 표면에 수직한 방향으로 전위의 구배가 없다는 사실을 이용하였다.

$$\text{at inlet} \quad \phi = \phi_{in} \quad (9)$$

$$\text{at outlet} \quad \phi = \phi_{out} \quad (10)$$

$$\text{at post surface (normal)} \quad \frac{\partial \phi}{\partial n} = 0 \quad (11)$$

수치 해석시 지배 방정식을 이산화하는 과정에서 발생되는 절단 오차(truncation error)와 격자 생성 과정에서 비롯되는 사상 오차(mapping error)는 정렬 격자에서 비 선형 항을 계산할 경우 심각하게 나타난다. 본 연구는 식 (5)에 포함되어 있는 비 선형 항의 오차를 줄이기 위해 bicubic interpolation⁽²²⁾을 사용하였으며, 그 결과를 Fig. 4에 나타내었다. Bicubic interpolation은 인접 격자점의 물리량과 그것의 미분값을 이용하여 특정 격자점의 물리량을 보간하는 방법으로, 고등 차수 보간법 중 가장 정확하다는 평가를 받고 있다.

3.4 Monte-Carlo Simulation

시간에 따라 변화하는 입자들의 위치와 운동 양상을 가시화하기 위해 Monte-Carlo simulation을 수행하였다. 외부 전기장이 인가된 마이크로 채널 내의 입자 유동은 전기 역학적 힘, 유전 영동적 힘, 입자의 확산 효과에 의해 지배를 받는다. 본 연구에서는 입자의 농도가 아주 낮다고 가정하였으므로 확산 효과는 확산 길이⁽⁶⁾와 무작위 방향을 통해 결정되고, 전기 역학적 힘과 유전 영동적 힘의 효과는 지배 방정식으로부터 얻는 유동장을 바탕으로 계산된다. 이 때, 인접 격자로부터 입자의 속도를 결정하는 방법에는 여러 가지가 있으나,

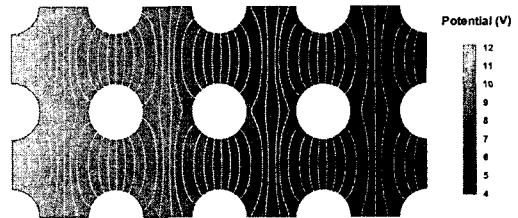


Fig. 6 The electric potential in a microchannel by external electric field (25V/mm)

본 논문에서는 Fig. 5에 나와 있는 최근접법(Nearest neighbor scheme)^(25,26)을 사용하였다. 최근접법은 입자와 각 인접 격자점간의 거리를 계산하여 가장 가까운 거리에 있는 격자점의 속도를 입자의 속도로 가정하는 방법이다.

4. 해석 프로그램의 검증 및 결과 분석

해석 프로그램의 검증(validation)을 위해 본 논문의 결과와 Cummings 와 Singh⁽¹⁶⁾의 결과를 비교하였으며, 전위 분포와 채널 내 유동장, 전기 역학 및 유전 영동 결합 전위 분포가 매우 유사함을 알 수 있었다. 또한 해석 프로그램을 이용하여 마이크로 채널 내 전기 역학 및 유전 영동 현상을 예측하여 전기장의 세기에 따라 변화하는 입자의 유동 특성을 파악할 수 있었다.

4.1 전위 분포

Figure 2와 같은 유동 형상에서는 외부에서 균일한 직류 전기장을 인가하여도 채널에 배열된 원형 post로 인해 전기장의 구배가 발생된다. 따라서 채널 내의 입자들은 전기 역학과 유전 영동의 영향을 동시에 받으며 두 영향의 상대적인 크기에 따라 그 유동 양상이 다르게 나타난다. 이를 살펴보기 위해 개발된 해석 프로그램을 이용하여 원형 post가 배열된 마이크로 채널의 전위 분포를 계산하였다. Figure 6은 외부 전기장의 세기가 25V/mm 일 때 나타나는 전위 분포이다. 채널 내의 등전위면은 직선이 아닌 곡선 형태로 나타나고, 유로 단면적이 넓은 공간보다 좁은 공간에서 그 변화가 더욱 두드러진다. 이는 원형 post에 의하여 마이크로 채널에 전위의 구배가 형성되었고, 좁은 공간의 전기장 세기가 넓은 공간보다 더 크다는 것을 의미한다. 만약 마이크로 채널 내에 post가 없다면 균일한 전기장이 형성되기 때문에, 채널 내 존재

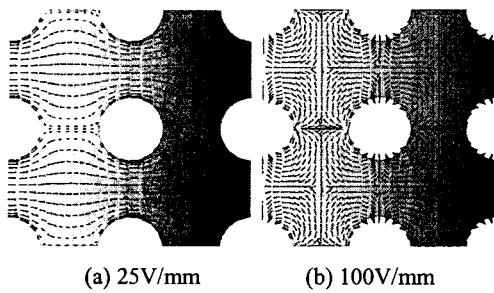


Fig. 7 The velocity vector plot of particles in a microchannel

하는 유체와 입자들은 전기 역학에 의해서만 이동할 것이다. 하지만 post로 인해 마이크로 채널의 유로 단면이 변화되고 그로부터 전기장의 구배가 발생하므로, 유체와 입자의 유동은 전기 역학뿐만 아니라 유전 영동에 의해서도 지배된다.

4.2 채널 내 입자 유동

전기 역학과 유전 영동에 의한 입자의 이동은 식 (5)로부터 결정된다. Figure 7(a)는 입자들이 균일하게 분포된 채널에 25V/mm의 외부 전기장을 인가하였을 때 나타나는 입자들의 속도 분포로서, 25V/mm와 같이 상대적으로 약한 전기장을 걸어 주었을 때는 전기장 구배의 효과가 미미하기 때문에 유전 영동 현상에 비해 전기 역학 현상이 두드러진다. 또한 유로 단면이 좁은 post 사이 공간에서 전기장의 세기가 상대적으로 강하기 때문에, 이 영역에서의 속도 벡터 크기가 더 크게 나타나고 있다. 따라서 전기 역학이 지배하는 경우, 입자들은 유체와 함께 포텐셜 유동처럼 채널 하류로 흘러간다.

마이크로 채널에 강한 전기장을 인가하였을 경우에는 유전 영동 현상이 두드러진다. Figure 7(b)는 마이크로 채널에 100V/mm의 전기장을 걸어 주었을 때 나타나는 입자의 속도 분포로서, 채널에 주입된 입자들의 유동 방향은 post의 양 옆을 향한다. 이는 채널에 주입된 입자의 유전율이 유체의 유전율보다 크고, 유로 단면이 좁은 post 사이 공간에서 전기장 구배의 효과가 상대적으로 강하게 나타나기 때문이다. 또한 식 (1)~(3)에서 알 수 있듯이 전기 역학에 의한 입자 속도는 전기장에 비례하지만, 유전 영동에 의한 입자 속도는 전기장의 제곱의 영향을 받으므로 전기장의 세기가 커질수록 유전 영동의 효과가 지배적으로 나타나게 된다. 따라서 유체는 전기 삼투에 의해 하류로 흘러 가지만 입자들은 유전 영동의 영향을 강하게 받아 유체의 흐름과는 다른 양상을 보이게 된다.

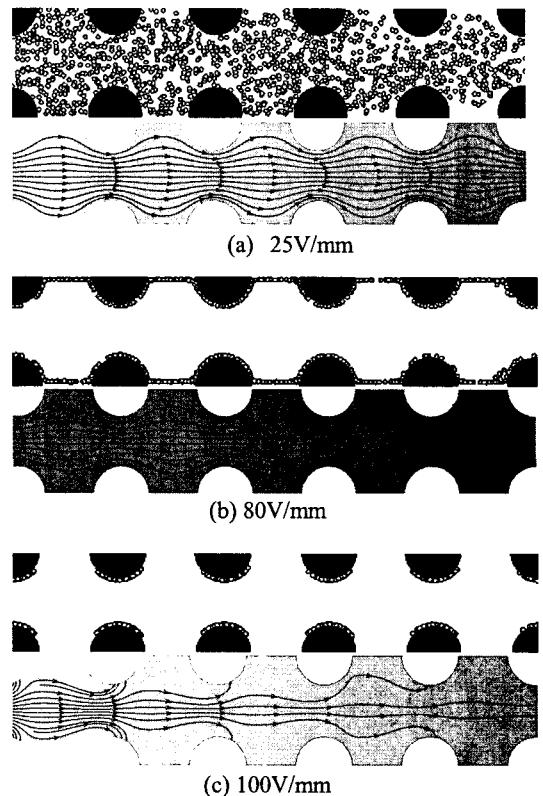


Fig. 8 The variation of particle flows and pathlines with respect to the applied field. Top figures in (a), (b), and (c) are obtained from MC simulation

위 결과에서 알 수 있듯이 전기 역학과 유전 영동의 영향은 전기장의 세기에 따라 다르게 나타나고, 이 두 현상에 의해 이동하는 입자들의 유동 방향 또한 달라진다. 전기장의 세기가 약할 때에는 입자들이 전기 역학적 힘에 의해 전기력선을 따라 채널 하류로 흐르는 반면, 전기장의 세기가 강할 때에는 입자들이 유전 영동적 힘에 의해 원형 post 표면 쪽으로 이끌린다. 따라서 전기장 세기의 변화만으로 입자들의 유동을 효과적으로 제어할 수 있음을 알 수 있고, 이를 샘플 전처리 과정에 이용하면 주어진 시료로부터 원하는 바이오 물질만을 효율적으로 분리하거나 추출할 수 있을 것으로 기대된다.

4.3 전기장의 세기에 따른 입자 유동 변화

전기장의 세기에 따른 채널 내 입자의 유동 변화를 살펴보기 위해 Monte-Carlo simulation을 수행하여, 그 결과를 마이크로 채널에 형성된 유적선의 분포와 함께 Fig. 8에 나타내었다. 전기장의 세기가 25V/mm [Fig. 8(a)]일 때는 입자들이 채널 내에 고르게 분포되

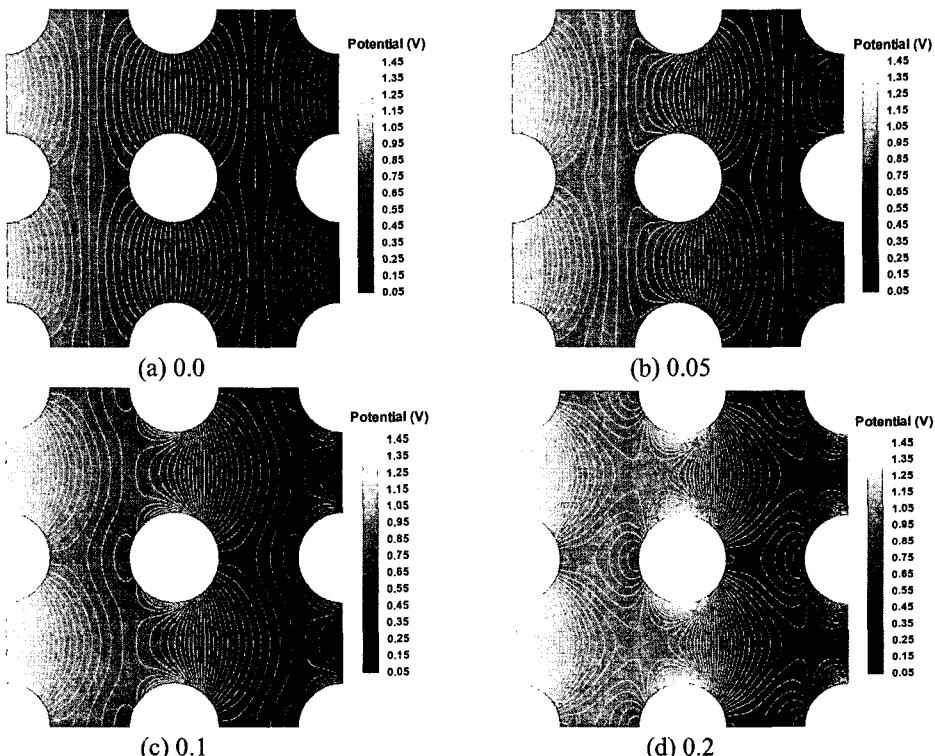


Fig. 9 Combined electrokinetic and dielectrophoretic potential fields. The number indicates the value of μ_{dep} / μ_{ek}

어 전기 역학에 의해 출구 방향으로 향하고 있다. 유적선의 분포도 수치해석 영역의 입구와 출구 쪽에서 큰 차이를 보이지 않는다. 유적선은 채널의 중앙 선을 중심으로 대칭적으로 분포하고, 그 변화가 post의 배열을 따라 규칙적이다. 하지만 전기장의 세기를 증가시켜 80V/mm로 하였을 경우, 유전 영동의 효과가 전기 역학 및 화산의 효과와 대등하게 되어 입자들이 Fig. 8(b)와 같이 원형 post를 잇는 중앙선을 따라 흐른다(streaming DEP).⁽¹⁶⁾ 이는 유적선의 분포에서 알 수 있듯이, 채널 중앙의 입자들이 하류로 이동하면서 유전 영동에 의해 post표면을 향하여 점진적으로 밀려나기 때문이다.

Figure 8(c)처럼 외부 전기장을의 세기를 100V/mm로 하였을 때에는 입자들이 유체와 함께 흘러가지 못하고 post표면에 포획되는 현상(trapping DEP)⁽¹⁶⁾이 일어난다. 이는 전기장의 세기가 강한 영역에서는 전기장 구배에 의한 유전 영동 현상이 입자의 유동을 지배하기 때문이다. 따라서 입자들은 채널 하류로 이동하지 못하고 유전 영동에 의해 post표면으로 이끌리게 되며, 이러한 사실은 유적선 분포에서도 확인된다.

4.4 전기 역학 및 유전 영동 결합 전위 분포

유전 영동의 영향이 지배적으로 나타날 때, 입자들이 post표면에 포획되는 위치는 전기 역학 및 유전 영동 결합 전위의 분포로부터 예상할 수 있으며, 이 때 결합 전위는 식 (12)과 같이 정의된다.⁽²⁷⁾

$$\phi_{comb} = \phi + \frac{\mu_{dep}}{\mu_{ek}} \nabla \phi \cdot \nabla \phi \quad (12)$$

전기 역학 및 유전 영동 결합 전위는 유전 영동을 일으키는 전기장 구배의 효과를 전위 값으로 환산하여 외부 전기장에 의해 형성된 전위 값에 더한 것으로서, 전기장의 세기에 따라 전기 역학과 유전 영동 현상의 상대적인 강도에 따른 전위 분포의 변화를 보여준다. 여기서 μ_{dep} / μ_{ek} 는 유전 영동과 전기 역학에 대한 입자 이동도의 비이며 차원을 가진다.

Figure 9는 원형 post가 배열된 채널에서 이동도의 비에 따라 변화하는 결합 전위의 분포를 나타낸 그림이다. 유전 영동 이동도(dielectrophoretic mobility)의 변화를 통해 결합 전위 분포 양상을

살펴볼 수 있도록 전기장의 세기와 전기 역학 이동도(electrokinetic mobility)를 각각 1 V/m 과 $1 \text{ m}^2/\text{V}\cdot\text{s}$ 로 고정하였다. 이동도의 비가 증가할수록, 즉 유전 영동 효과가 커질 수록, 결합 전위의 구배가 post표면에서 커짐을 알 수 있다. 특히 이동도 비가 0.2일 때 post의 양 옆 표면에서 동전위선이 폐곡선의 형태로 밀집해 있는데, 이 영역이 입자가 포획되는 곳이다. 이것은 Monte-Carlo simulation에서 살펴 보았던 입자들의 포획 위치와 유사하다. 이 결과들은 Cummings와 Singh⁽¹⁶⁾의 결과와 일치하며, 그로부터 개발된 해석 프로그램이 전기 역학과 유전 영동 현상을 잘 반영하고 있음을 알 수 있다.

5. 결 론

본 연구에서는 자동화된 격자 생성법^(19,20)과 Cummings 등⁽²¹⁾이 제시한 지배 방정식, Monte-Carlo simulation을 이용하여 마이크로 채널에서의 전기 역학과 유전 영동 현상을 예측할 수 있는 해석 프로그램을 자체 개발하였다. 타원형 편미분 방정식과 전 경계 제어법을 이용하여 양질의 격자를 생성하였고, bicubic interpolation을 통해 정렬 격자에서 비 선형항 계산시 발생하는 오차를 최소화하였다. 또한 본 연구에서 개발된 해석 프로그램을 검증하고자 원형 post가 배열된 마이크로 채널에서 전기 역학과 유전 영동에 의해 나타나는 입자의 유동을 분석하고, 이를 Monte-Carlo simulation을 통해 가시화하였다.

해석 프로그램의 검증을 위해 본 연구의 결과와 Cummings와 Singh의 연구 결과를 비교하여 일치함을 알 수 있었고, 마이크로 채널에서 나타나는 전기 역학 및 유전 영동의 특성을 파악할 수 있었다. 전기 역학과 유전 영동의 영향은 전기장 세기의 변화에 따라 현저히 다르게 나타났다. 전기 역학은 전기력선의 방향으로 유체와 입자를 수송하지만, 유전 영동은 전기장 구배의 방향으로 입자를 이동시킨다. 그리고 전기장 세기가 증가함에 따라 전기장 제곱의 영향을 받는 유전 영동 현상이 지배적으로 나타나며, 이로 인해 입자의 유동이 달라진다. 또한 Cummings 등의 주장대로 전기장 세기에 따라 3가지 형태의 입자 유동 현상(전기역학, 흐름 유전영동, 포획 유전영동)이 나타남을 확인하였다.

본 연구를 통해 얻은 전기 역학 및 유전 영동에 대한 이해와 수치 해석 프로그램을 바탕으로 칩

상에서 샘플 전처리를 효과적으로 수행하는 기술을 개발할 수 있을 것으로 예상된다. 또한 전기장 세기의 변화만으로 입자 유동을 제어할 수 있으므로 칩 상에서 유전율 다른 입자들을 쉽게 분리할 수 있을 뿐만 아니라, 최적 설계 기술을 바탕으로 이러한 목적에 부합하는 마이크로 채널 및 칩의 설계, 개발할 수 있을 것으로 기대된다.

후 기

이 연구는 한국과학재단 지정 최적설계신기술연구센터(iDOT)의 지원과 한국과학기술연구원의 미래원천연구사업(2E19570)의 지원에 의해 수행되었으며, 이에 관계자 분들께 감사드립니다.

참고문헌

- (1) Sanders, G. H. W. and Manz, A., 2000, "Chip-based Microsystems for Genomic and Proteomic Analysis," *Trends in Analytical Chemistry*, Vol. 19, No. 6, pp. 364~378.
- (2) Lichtenberg, J., deRooij, N. F. and Verpoorte, E., 2002, "Sample Pretreatment on Microfabricated Devices," *Talanta*, Vol. 56, pp. 233~266.
- (3) Jacobson, S. C., Hergenroder, R., Koutny, L. B. and Ramsey, M., 1994, "High-Speed Separations on a Microchip," *Analytical Chemistry*, Vol. 66, pp. 1114~1118.
- (4) Manz, A., Harrison, J., Verpoorte, E. M. J., Fettinger, J. C., Paulus, A., Ludi, H. and Widmer, H. M., 1992, "Planar Chips Technology for Miniaturization and Integration of Separation Techniques into Monitoring Systems," *Journal of Chromatography*, Vol. 593, pp. 253~258.
- (5) Li, D., 2004, *Electrokinetics in Microfluidics*, Elsiver Academic Press, London.
- (6) Probstein, R. F., 1994, *Physicochemical Hydrodynamics: An Introduction*, John Wiley & Cons. Inc, New York.
- (7) Aguijella, V., Belya, M. and Levadny, V., 1997, "A Perturbed Electric Double Layer Near a Soft Polar Interface," *Journal of Colloid and Interface Science*, Vol. 186, pp. 212~214.
- (8) Gu, Y. and Li, D., 2000, "The Zeta Potential of Glass Surface in Contact with Aqueous Solutions," *Journal of Colloid and Interface Science*, Vol. 226, pp. 328~339.
- (9) Green, N. G., Ramos, A. and Morgan, H., 2000, "Ac Electrokinetics: A Survey of Sub-micrometre Particle Dynamics," *Journal of Physics D: Applied Physics*, Vol. 33, pp. 632~641.
- (10) Ermolina, I. and Morgan, H., 2005, "The Electrokinetic Properties of Latex Particles: Comparison of Electrophoresis and Dielectrophoresis,"

- Journal of Colloid and Interface Science*, Vol. 285, pp. 419~428.
- (11) Pohl, H. A., 1978, *Dielectrophoresis: The Behavior of Neutral Matter in Nonuniform Electric Fields*, Cambridge University Press, London.
- (12) Jones, T. B., 1995, *Electromechanics of Particles*, Cambridge University Press, London.
- (13) Hughes, M. P., Pethig, R. and Wang, X.-B., 1996, "Dielectrophoretic Forces on Particles in Travelling Electric Fields," *Journal of Physics D: Applied Physics*, Vol. 29, pp. 474~482.
- (14) Green, N. G. and Morgan, H., 1997, "Dielectrophoretic Investigations of Sub-micrometre Latex Spheres," *Journal of Physics D: Applied Physics*, Vol. 30, pp. 2626~2633.
- (15) Wakizaka, Y., Hakoda, M. and Shiragami, N., 2004, "Effect of Electrode Geometry on Dielectrophoretic Separation of Cells," *Biochemical Engineering Journal*, Vol. 20, pp. 13~19.
- (16) Cummings, E. B. and Singh, A. K., 2003, "Dielectrophoresis in Microchips Containing Arrays of Insulating Posts: Theoretical and Experimental Results," *Analytical Chemistry*, Vol. 75, pp. 4724~4731.
- (17) Ikeda, I., Tsukahara, S. and Watarai, H., 2003, "Effects of Viability and Lectin Protein Binding on Dielectrophoretic Behavior of Single Yeast Cells," *Analytical Sciences*, Vol. 19, pp. 27~31.
- (18) Lapizco-Encinas, B. H., Simmons, B. A., Cummings, E. B. and Fintschenko, Y., 2004, "Dielectrophoretic Concentration and Separation of Live and Dead Bacteria in an Array of Insulators," *Analytical Chemistry*, Vol. 76, pp. 1571~1579.
- (19) Thomson, J. F., Thamess, F. C. and Mastin, C. W., 1974, "Automatic Numerical Generation of Body-fitted Curvilinear Coordinate System for Field Containing Any Number of Arbitrary Two-dimensional Bodies," *Journal of Computational Physics*, Vol. 59, pp. 151~163.
- (20) Choi, I. K. and Maeng, J. S., 1999, "Automated Body-Fitted Grid Generation Method with Application to Natural Convection Problem," *Trans. of the KSME(B)*, Vol. 23, No. 6, pp. 703~712.
- (21) Cummings, E. B., Griffiths, S. K., Nilson, R. H. and Paul, P. H., 2000, "Condition for Similitude between the Fluid Velocity and Electric Field in Electroosmotic Flow," *Analytical Chemistry*, Vol. 72, pp. 2526~2532.
- (22) Press, W. H., Teukolsky, S. A., Vetterling, W. T. and Flannery, B. P., 1992, *Numerical Recipes in C*, Cambridge University Press, New York.
- (23) Ermakov, S. V., Jacobson, S. C. and Ramsey, J. M., 1998, "Computer Simulations of Electrokinetic Transport in Microfabricated Channel Structures," *Analytical Chemistry*, Vol. 70, No. 21, pp. 4494~4504.
- (24) Morrison, F. A., 1970, "Electrophoresis of a Particle of Arbitrary Shape," *Journal of Colloid and Interface Science*, Vol. 34, No. 2, pp. 210~214.
- (25) Atramentov, A. and LaValle, S. M., 2002, "Efficient Nearest Neighbor Searching for Motion Planning," *IEEE International Conference on Robotics and Automation*, Vol. 1, pp. 632~637.
- (26) Prevost, M., Edwards, M. G. and Blunt, M. J., 2001, "Streamline Tracing on Curvilinear Structured and Unstructured Grids," *Proc. Society of Petroleum Engineers*.
- (27) Cummings, E. B. and Singh, A. K., 2000, "Dielectrophoretic Trapping without Embedded Electrodes," *Proc. of the SPIE Symposium on Micromachining and Microfabrication*, Vol. 4177, No. 29, pp. 164~173.