

## Курс лекций "ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ МИКРО-НАНОТЕЧЕНИЙ В ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПОЛЕ"

8 час(лекции)+ 8 часов (семинары)

Составитель: проф., д.ф.м.н. Е.А. Демехин, Физический факультет МГУ и Куб. гос. университет

*There's a plenty of room at the bottom:  
an invitation to enter a new field of physics*

R. Feynman<sup>1</sup>

### АННОТАЦИЯ

Появление и бурное развитие нанотехнологий привели к возникновению новых научных дисциплин, таких как микро- и нанофлюидика, в которых рассматривается течение жидкости в малых масштабах под действием различных внешних, в том числе - электрических сил. Результаты этих дисциплин важны для практических приложений и начинают широко применяться в нанотехнологиях и медицине. Велик и чисто теоретический интерес к этим проблемам. Микро- и нанофлюидика находится на стыке классической гидромеханики, электродинамики, коллоидной физики, электрохимии и неравновесной термодинамики, комбинация которых и порождает эту новую дисциплину. Математически задачи микрофлюидики описываются совместной системой уравнений Нернста-Планка-Пуассона и Навье-Стокса, как аналитическое, так и численное решение которых представляет существенные сложности. При переходе к малым масштабам оказывается недостаточным использовать классические представления о среде как о проводнике либо диэлектрике, и необходимо вводить понятия электролита и неравновесной термодинамики. Электрические эффекты в микромасштабах интенсивно изучались, начиная с работ Гельмгольца, однако проблема существенно усложняется при учете гидродинамики. В конечном итоге процессы микрофлюидики описываются уравнениями переноса ионов (три способа переноса - диффузия, конвекция и электромиграция), уравнением Пуассона для описания электрического поля и уравнениями гидродинамики, где в качестве массовых сил выступают кулоновские силы. Эта нелинейная система допускает исследование классическими методами теории бифуркации и устойчивости. Решения уравнений микрофлюидики допуска-

---

<sup>1</sup>“Там внизу много места: приглашение в новую физику” – выступление Ричарда Фейнмана на встрече Американского Физического Общества (APS meeting, 1959) о методах, которые впоследствии будут названы микро- и нанотехнологиями.

ют даже стохастизацию и переход к хаотическим аттракторам (микротурбулентность). Многие задачи микрофлюидики включают малые параметры, тонкие граничные слои (диффузионные, двойные электрические и др.), разные масштабы времени и пространственных переменных и поэтому допускают эффективное решение или упрощение асимптотическими методами. В конце каждой лекции в курсе предусмотрены упражнения для студентов. Кроме того, по ходу лекций обсуждаются нерешенные проблемы и возможные подходы к их решению. Решение наиболее сложных задач предполагает публикацию статей.

Курс рассчитан на студентов старших курсов мех-мата, физ-фака и хим-фака. Материал лекций изложен с учетом многих лет работы над проблемами в этой области в университетах США (Массачусетский технологический университет, Университет Нотр-Дам, Университет Западной Вирджинии), Англии (Университет Лидса), Испании (Мадрид Института Плуридисциплинар).

#### **Основная литература**

*Bruus H.* Theoretical microfluidics. Oxford University Press, 2008, 346 p.

*Probstein R. F.* Physicochemical hydrodynamics. Wiley-Interscience Publication, 1978. 590 p.

*Фейнман Р., Лейтон Р., Сэндс М.* Фейнмановские лекции по физике. М.: Мир, 1967, т. 5, т. 7.

#### **Дополнительная литература**

*Chang H-C, Yeo L. Y.* Electrokinetically driven microfluidics and nanofluidics. Cambridge University Press, 2010.

*Nguyen N. T., Wereley S. T.* Fundamentals and applications of microfluidics. Artech House, 2006, 520 p.

*Bird R. B., Armstrong R. C., Hassager O.* Dynamics of polymeric liquids. New York, Wiley, 1977.

*Y.-C. Chang, Demekhin E. A.* Complex wave dynamics on thin film. Elsevier, 2002.

## ПРОГРАММА КУРСА ЛЕКЦИИ

### **Лекция 1. Введение. (2 часа)**

*16 великих инженерных проблем 21 века. Откуда все началось?* Микрофлюидика и слом старых технологий. Характерные размеры микро- и нанообъектов. Микрофлюидика - наука на стыке дисциплин. Примеры практических применений микрофлюидики в медицине: адресная доставка лекарств, хим. анализы, медицинская диагностика, анализ ДНК. Некоторые другие приложения микрофлюидики: микронасосы, нанодиоды. Способы управления движением жидкости в малых масштабах. Финансирование научных программ микрофлюидики. Обзор курса и основной математический аппарат.

### **Лекции 2, 3. Основные феноменологические уравнения микрофлюидики. (4 часа)**

Границы гипотезы сплошности. Понятие элементарного объёма. Предположения о сплошности в микрофлюидике. Фундаментальные законы сохранения массы, импульса и энергии. Феноменологические соотношения Фика, Фурье и Ньютона. Учёт электромиграции в уравнении Фика. Уравнения движения: уравнения неразрывности, уравнения Навье-Стокса (связь тензора деформаций, скоростей деформации и тензора напряжений). Обобщение второго закона Ньютона на сплошные среды. Понятие неньютоновской (вязко-упругой) жидкости. Модели OLDROYD и FENE для полимеров. Уравнение Пуассона для электрического поля как предельный случай системы Максвелла. Когда должны учитываться магнитные поля? Замкнутая система уравнений Нернста-Планка-Пуассона-Навье-Стокса.

### **Лекция 4. Краевые условия задач микрофлюидики. (2 часа)**

Понятие проводника, диэлектрика и электролита и краевые условия для них. Модели двойного электрического слоя Гельмгольца, Гук-Чепмена и коррекция Штерна и Грэма. Электрокинетические явления. Условия на электроде. Гидродинамические условия непротекания, прилипания и проскальзывания на твердой стенке. Уточненное краевое условие для температуры. Условия на поверхности раздела фаз: кинематическое и динамические условия.

**Лекция 5. Поведение электролита около заряженных стенок (2 часа)** Система уравнений Нернста-Планка-Пуассона-Стокса в одномерном случае. Дзета-потенциал. Появление малого параметра - числа Дебая. Равновесие Доннана. Приближение Дебая и решение Гуи-Чепмена. Структура решения в пространстве. Концентрационная поляризация и экранирование электрического поля.

### **Лекция 6. Концентрационная поляризация около селективных поверхностей (2 часа)**

Концентрационная поляризация при наличии потока ионов к поверхности. Система уравнений Нернста-Планка-Пуассона-Стокса в одномерном случае. Гипотеза электронеутральности. Причина изменения концентрации электролита около селективной границы. Диффузионный слой, слой Нернста, полная толщина диффузионного слоя. Омические режимы. Предельный ток, явление запираания тока и его физическая причина. Подход Рубинштейна-Штильмана и уравнение Пенлеве. Разложение по малому параметру. Численное решение. Структура решения в пространстве и электрическая проводимость различных участков.

### **Лекция 7. Электрокинетическая неустойчивость (2 часа)**

Система уравнений Нернста-Планка-Пуассона-Стокса в двумерном случае. Физические механизмы сверхпредельного перехода: эффекты экзальтации (увеличение новых носителей тока) и конвекции Рэлея-Бенара (разрушение сопротивления диффузионного слоя). Электрокинетический механизм как сверхкритическая бифуркация. Скорость скольжения Рубинштейна-Зальцмана. Потеря устойчивости одномерного решения. Некорректность простого асимптотического решения задачи на устойчивость и необходимость регуляризации задачи. Потеря устойчивости вблизи модифицированных поверхностей.

### **Лекция 8. Межфазные границы в электрическом поле (2 часа)**

Капли и струи в электрическом поле. Конуса Тейлора. Инжектирование микро-и наноструй из конусов. Задача об устойчивости струи в электрическом поле. Движение пленок жидкости под действием внешних сил: эффекта Марангони и электрических полей.

## **СЕМИНАРЫ**

### **Занятие 1. Теория подобия и размерности (2 часа)**

Три вида законов в природе. Размерные и безразмерные величины. О формуле размерности. Структура функциональных связей между физическими величинами. Как и зачем приводить уравнения к безразмерному виду.  $\pi$ -теорема. Простое доказательство теоремы Пифагора с помощью теории размерности. Параметры, определяющие класс явлений. Скелинг. Автоподобность первого и второго рода.

### **Занятие 2. Математический анализ векторных полей (2 часа)**

Сведения из векторной алгебры. Скалярные и векторные поля. Градиент — вектор, порожденный скалярным полем. Оператор  $\nabla$  и операции с ним. Градиент, дивергенция и ротор как примеры применения  $\nabla$ . Более сложные комбинации с  $\nabla$ . Интегральное применение оператора  $\nabla$ : теоремы Остроградского-Гауса и Стокса. Уравнения математической физики в инвариантном векторном виде.

### **Занятие 3. Асимптотические методы (2 часа)**

Неизбежность применения асимптотических и специальных численных методов в микрофлюидике. Алгебраические уравнения: регулярные и сингулярные возмущения. Понятие малого параметра и сингулярных задач. Пограничные слои и метод сращиваемых асимптотических разложений. Пример Фридриха. Составное разложение. Метод многих масштабов. Быстрые и медленные переменные. Усреднение и медленный дрейф в высокочастотном поле.

### **Занятие 4. Задачи математической физики и корректность их постановки (2 часа)**

Классификация уравнений математической физики. Замыкание задачи добавлением начальных и краевых условий. Соответствие этих условий типу уравнения (условия Гурса). Корректность задач по Адамару. Примеры постановок и некорректности, возникающей по разным причинам. Можно ли регуляризовать некорректную задачу и в каком смысле?

### **Занятие 5. Основные идеи теории бифуркаций и устойчивости (2 часа)**

Понятия режима, его устойчивости и бифуркационных переходов. Неизбежность бифуркаций в микрофлюидике, примеры. Различные определения устойчивости, устойчивость по Ляпунову, плодотворность использования спектральной неустойчивости. К чему ведет каскад бифуркаций? Структурная неустойчивость.

### **Занятие 6. Простейшие задачи электрохимии и их решение (2 часа)**

Приведение системы уравнений Нернста-Планка-Пуассона-Навье-Стокса к безразмерному виду. Неоднозначность выбора базиса. Безразмерные параметры задачи. Малость чисел Рейнольдса, пренебрежение силами инерции - типичное приближение микрофлюидики. Два типичных размера - микро-наноразмер - длина Дебая и макро-размер - типичный геометрический размер. Условия на стенке: теоретические представления Гельмгольца, Гюе-Чепмена и Штерна о двойном электрическом слое. Решение системы Нернста-Планка-Пуассона в простейших случаях. Что делать, когда задача не решается аналитически?

### **Занятие 7. Простейшие задачи электрохимии и их решение (продолжение) (2 часа)**

Концентрационная поляризация при наличии потока ионов к поверхности. Система уравнений Нернста-Планка-Пуассона-Стокса в одномерном случае. Неоднородное поле и появление ненулевой кулоновской силы и движения жидкости. Приложение асимптотического метода многих масштабов. Понятие электроосмоса и электрофореза первого рода

(электрокинетические явления). Скорость скольжения Смолуховского и Рубинштейна-Зальцмана. Принцип микронасоса.

**Занятие 8. Простейшие задачи электрохимии и их решение (продолжение) (2 часа)**

Заряженные макромолекулы и частицы. Электрофорез первого рода. Формулы Дебая-Хюккеля и Гельмгольца-Смолуховского. Разделение частиц. Электрофорез второго рода ("сверхбыстрый" электрофорез. Возможность разделения белков по их размерам. "Турбулентность" на микрочастицах.