

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. Feynman¹

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-

¹“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), Испания (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 электронейтральности. 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. π -теорема. Простое доказательство теоремы Пифагора с помощью теории размерности. Параметры, определяющие класс явлений. Скелинг. Автомодельность 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 ∇ и операции с ним. Градиент, дивергенция и ротор как примеры применения ∇ . Более сложные комбинации с ∇ . Интегральное применение оператора ∇ : 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.