

**Forschungszentrum Karlsruhe**

in der Helmholtz-Gemeinschaft

Wissenschaftliche Berichte

FZKA 6863

**Simulation der Strömung und des Stofftransports  
in einem Mikro-Mäanderkanal**

D. P. J. Barz, P. Ehrhard

Institut für Kern- und Energietechnik  
Programm Mikrosystemtechnik

Forschungszentrum Karlsruhe GmbH, Karlsruhe  
2003

**Impressum der Print-Ausgabe:**

**Als Manuskript gedruckt  
Für diesen Bericht behalten wir uns alle Rechte vor**

**Forschungszentrum Karlsruhe GmbH  
Postfach 3640, 76021 Karlsruhe**

**Mitglied der Hermann von Helmholtz-Gemeinschaft  
Deutscher Forschungszentren (HGF)**

**ISSN 0947-8620**

## **Zusammenfassung**

Das Ziel dieser Arbeit ist die Untersuchung der Strömung und des Stofftransports in einem Mikro-Mäanderkanal. Der Antrieb basiert entweder auf Druckkräften oder auf elektroosmotischen Kräften. Dazu werden zweidimensionale, zeitabhängige Simulationen nach der Finite Elemente Methode durchgeführt. Mit Hilfe der Ergebnisse kann die Eignung der simulierten Geometrie als elektrophoretische Trenneinheit beurteilt werden. Die elektrische Grenzschicht wird asymptotisch an die numerisch behandelte Kernströmung angepasst. Der elektroosmotische Antrieb wird in vier Fällen, mittels zwei idealisierten und zwei realistischen elektrischen Feldern, variiert. Die verschiedenen Antriebe führen zu verschiedenen Geschwindigkeitsprofilen und dadurch zu verschiedenen Konzentrationsprofilen eines Probenpfropfens. Für die meisten elektroosmotischen Antriebe stellen sich komplexe Geschwindigkeitsprofile mit Rezirkulationsgebieten ein, welche die Dispersion des Probenpfropfens erhöhen. Ausgehend von den Simulationsergebnissen erscheint es sinnvoll, die Kanalgeometrie zu verbessern.

# Simulation of flow and mass transport in a meander micro-channel

## **Abstract**

The aim of this work is the investigation of the flow and mass transport in a meander microchannel caused by pressure and electroosmotic forces. Two-dimensional, time dependent Finite Element simulations were employed to obtain information about the suitability of the structure with regard to electrophoretic separation. Analytical solutions valid within the electrical double layers were asymptotically matched with the numerical solution for the bulk flow. The electroosmotic flow is realized for two idealized and two realistic electrical fields and the results are compared with the pressure-driven case. The different driving methods lead to different velocity profiles and thus to different concentration profiles of a sample plug. We find, that for the most of the electroosmotically-driven cases complex flow fields with recirculation regions are present. These recirculation regions increase dispersion of the sample plug. According to the simulation results, we conclude that an improvement of the channel geometry for this electroosmotically-driven device is needed.

# Inhaltsverzeichnis

|          |  |           |
|----------|--|-----------|
| <b>1</b> | <b>Einleitung</b>  | <b>1</b>  |
| <b>2</b> | <b>Elektroosmose</b>   | <b>3</b>  |
| 2.1      | Die elektrische Grenzschicht . . . . .                                 | 3         |
| 2.2      | Debye-Hückel-Theorie . . . . .   | 5         |
| <b>3</b> | <b>Der Mikro-Mäanderkanal</b>  | <b>9</b>  |
| 3.1      | Geometrie . . . . .  | 9         |
| 3.2      | Anforderungen an die Trenneinheit . . . . .                            | 10        |
| <b>4</b> | <b>Mathematische Formulierung der Strömung und des Stofftransports</b> | <b>12</b> |
| 4.1      | Erhaltungsgleichungen . . . . .  | 12        |
| 4.2      | Asymptotische Lösung . . . . .   | 13        |
| 4.3      | Anfangs- und Randbedingungen . . . . .                                 | 15        |
| 4.3.1    | Anfangsbedingungen . . . . .   | 15        |
| 4.3.2    | Randbedingungen . . . . .  | 16        |
| <b>5</b> | <b>Antriebsvariationen</b>   | <b>17</b> |
| <b>6</b> | <b>Simulationsergebnisse</b>   | <b>21</b> |
| 6.1      | Strömungsfeld . . . . .  | 21        |
| 6.1.1    | Strömungsfeld ohne Rezirkulationsgebiete . . . . .                     | 21        |
| 6.1.2    | Strömungsfeld mit Rezirkulationsgebieten . . . . .                     | 24        |
| 6.2      | Konzentrationsfeld . . . . .   | 27        |
| <b>7</b> | <b>Zusammenfassung und Ausblick</b>                                    | <b>30</b> |
| <b>8</b> | <b>Anhang</b>  | <b>33</b> |



# Kapitel 1

## Einleitung

In den zurückliegenden Dekaden waren es noch ausschließlich elektronische Bauteile, die immer mehr miniaturisiert wurden und damit die moderne Informationstechnologie möglich machten. Das Konzept der Verkleinerung und Integration von komplexen Systemen wird heutzutage aber auch auf mechanische und fluidmechanische Bauteile angewandt.

In den Biowissenschaften besteht ein enormer Bedarf an miniaturisierten Techniken. So erfordert beispielsweise die Sequenzierung (Entzifferung) eines Genoms eine grosse Anzahl von Analyseschritten und damit verbunden eine hohe Inanspruchnahme von Raum, Zeit und teuren Reaktionsmitteln. Durch Miniaturisierung und Automation wird versucht eine hohe Anzahl von Prozessen auf einer Einheit und auf engstem Raum zu implementieren. Die neuen Verfahren sollen sich durch eine Reduzierung des Probenvolumens auf Nano- und Pikoliter und durch deutlich verbesserte Trennleistungen, kürzere Analysezeiten und höhere Nachweissensitivitäten für einzelne Substanzen auszeichnen. Dies ist erst durch die Weiterentwicklung und Anwendung von herkömmlichen Fertigungsverfahren wie z.B. Fräsen, Prägen, Ätzen oder Lithographie auf den Mikromaßstab möglich geworden. Bei dem Konzept der totalen Analysensysteme ( $\mu$ TAS, Lab on chip) werden integrierte Mikrobaueteile, wie zum Beispiel Pumpen, Ventile, Trennsäulen und Detektoren idealerweise auf einem Bauteil angeordnet. Es müssen dann die verschiedensten Prozesse wie Fluidführung, Mischen, Trennen und Detektion verschiedener Spezies realisiert werden (Jakeway, S.C., de Mello, A.J. und Russel, E.L. (2000)).

Die elektrophoretische Auftrennung von Molekülen, mit anschließender optischer oder elektrochemischer Detektion der Spezies gehört zu den klassischen Methoden der Biotechnologie und ihre Miniaturisierung erscheint vielversprechend. Elektrophorese gilt besonders bei der Trennung biologischer Substanzen, wie beispielsweise Proteine oder Aminosäuren aber auch von ganzen Zellen als leistungsfähiges und schonendes Verfahren. Dabei wird die unterschiedliche Geschwindigkeit elektrisch geladener Moleküle im elektrischen Feld ausgenutzt, um den Trenneffekt zu erzielen. Diese Geschwindigkeit wird in erster Linie von der Stärke des Feldes und der elektrischen Mobilität der zu trennenden Teilchen beeinflusst (Grossman, P.D. und Colburn, J.C. (1992)). Die Elektrophorese wird oft als Gel-Elektrophorese betrieben. Durch Anlegen einer Spannung werden die elektrisch geladenen Moleküle durch ein Gel getrieben. Eine Problematik liegt in der inneren Morphologie des Gels. Makromoleküle, die besonders oft in der Biotechnologie vorkommen, passen kaum durch die Gele hindurch. Ein Ausweg besteht dann, die in einem Trägerfluid gelösten Makromoleküle in einem mikrostrukturiertem Kanalsystem auch ohne Elektrophorese-Gel zu trennen (Han, J. und Craighead, H.G. (2000)).

Durch das Anlegen eines elektrischen Feldes stellt sich ein weiterer physikalischer Effekt ein, die sogenannte Elektroosmose, welche erst im Mikrobereich bemerkenswerte Auswirkungen besitzt. Unter Elektroosmose versteht man die Bewegung eines Fluids relativ zu einer elektrisch geladenen festen Oberfläche. Dieser Effekt wird häufig zum Transport der Probe durch die Trennstrecke verwendet. In der vorliegenden Arbeit wird die Strömung und der Stofftransport in einer solchen mikrofluidischen Einheit numerisch simuliert. Hierzu werden die instationären, zweidimensionalen (ebenen) Erhaltungsgleichungen (Kontinuitätsgleichung, Navier-Stokes-Gleichungen, Stofftransportgleichung) mit Hilfe eines Finite-Elemente-Programms (*Fidap 8.6.2*) dimensionslos gelöst. Die Elektrophorese ist in unseren Berechnungen noch nicht berücksichtigt. Trotzdem können aus den Ergebnissen weitreichende Rückschlüsse auf die Leistungsfähigkeit der verwandten Geometrie bezüglich des Einsatzes als Elektrophoreseeinheit gezogen werden.

# Kapitel 2

## Elektroosmose

Bei Anlegen eines elektrischen Feldes an einem Strömungskanal bildet sich an der Grenzschicht Wand/Flüssigkeit ein physikalischer Effekt aus. Die Flüssigkeit wird in einer dünnen wandnahen Schicht beschleunigt. Ist der Kanal von geringen Abmessungen (im Bereich einiger  $100 \mu\text{m}$ ), so kann dieser Effekt zum Fördern von Flüssigkeiten (electroosmotic pumping) genutzt werden. In diesem Kapitel werden einige physikalische Grundlagen zum Verständniss des elektroosmotischen Effektes erläutert. So werden wir uns im folgenden mit der elektrischen Grenzschicht und der Debye-Hückel-Theorie befassen um dieses elektrokinetische Phänomen zu verstehen.

### 2.1 Die elektrische Grenzschicht

Die elektrostatische Kraftkomponente, welche die Flüssigkeit antreibt, ist die Folge eines von außen angelegten elektrischen Feldes und von elektrischen Ladungen, die an der Oberfläche der Wand vorliegen können. Diese bilden eine elektrische Grenzschicht, welche auch elektrische Doppelschicht (EDL) genannt wird. Kommt eine feste Oberfläche mit einer Flüssigkeit in Berührung, kann es durch Adsorption von Ionen, die beispielsweise auch in reinem Wasser vorhanden sind (Eigendissoziation), zu einer elektrischen Oberflächenladung des Festkörpers kommen. Je nach Konzentration in der umgebenden Lösung und deren Tendenz zur Adsorption auf der Oberfläche ergibt sich ein Oberflächenpotential  $\varphi_O$ . Dieses ist somit von der Konzentration der Ionen abhängig. Weitere Ursachen für Oberflächenladung können in Verunreinigungen, in der Gitterstruktur, in Gitterfehlern und in der Löslichkeit der festen Phase in der Flüssigkeit liegen. (Hunter, R.J. (1981))

Die Vorstellung vom Aufbau der Doppelschicht ist, dass es infolge der elektrischen Wechselwirkungen durch die Oberflächenladungen zu einer erhöhten Konzentration von entgegengesetzte Ladungsträgern (Gegenionen) im Bereich der Grenzfläche Festkörper/Flüssigkeit kommt. Das einfachste Modell der elektrischen Doppelschicht ist das sogenannte Helmholtzmodell. Bei dieser Modellvorstellung wird davon ausgegangen, dass die Gegenionen sich direkt an der Oberfläche des Festkörpers ansammeln (Helmholtz, H. (1879)). Der Potenzialabfall über die Schicht wird als linear angenommen. Andere Modelle sind die von Gouy, G.J. (1910) und Chapman, D.L. (1913). In diesen Modellen existiert die Vorstellung, dass sich die Gegenionen diffus im Raum verteilen und der Potenzialabfall durch eine exponentielle Funktion beschrieben werden kann. Keines der beiden Modelle beschreibt die elektrische Doppelschicht adäquat. Stern, O. (1924) kombinierte beide Modelle. Ein Teil der Gegenionen ist aufgrund der elektrischen Wechselwirkung fest an der Oberfläche des Festkörpers angeordnet und bildet die sogenannte Stern-Schicht mit dem zugehörigen Sternpotential  $\varphi_{Stern}$ . Darauf folgt eine Scherfläche mit beweglichen Molekülen. Die restlichen Gegenionen sind infolge der Wärmebewegung in einer Schicht dif-

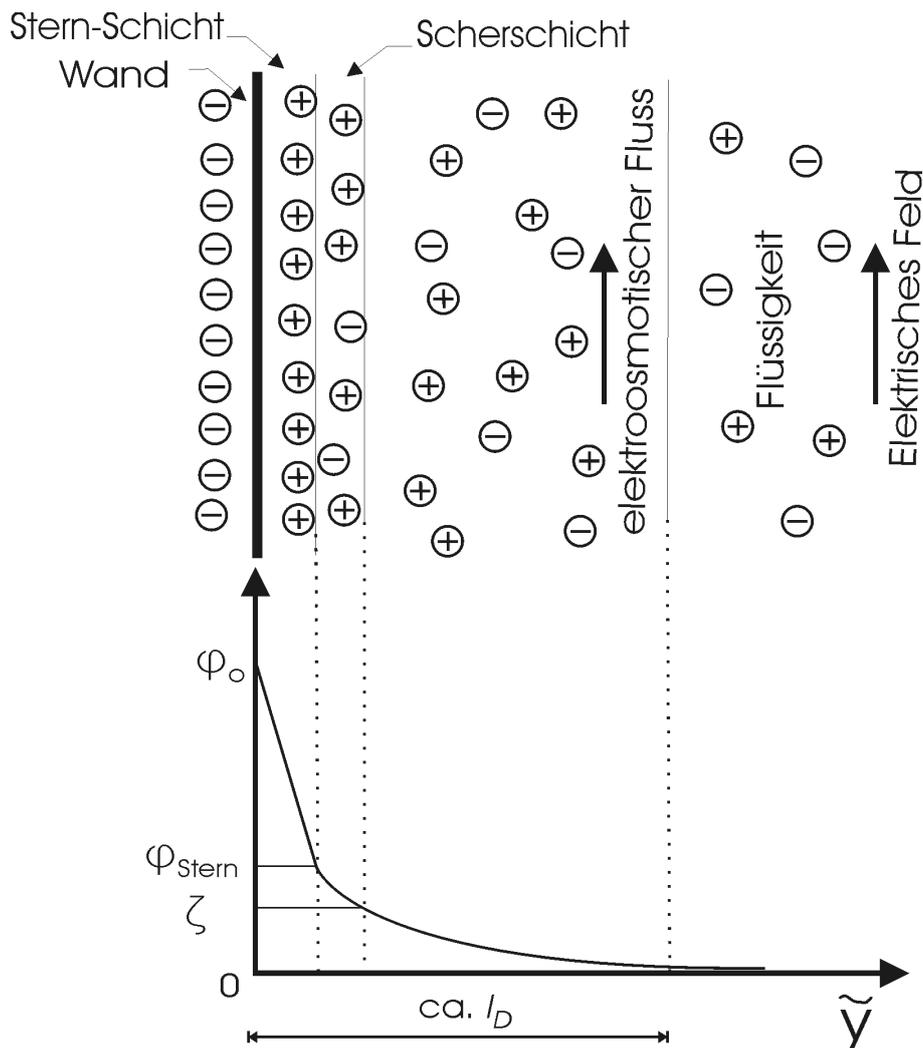


Abbildung 2.1: Elektrische Grenzschicht.

flüssigkeit verteilt, die entsprechend diffuse Schicht genannt wird. Das Potenzial, welches am Übergang Scherschicht/diffuse Schicht herrscht, bezeichnet man als  $\zeta$ -Potenzial. Die Konzentration der Gegenionen nimmt mit dem Abstand zur Oberfläche bis zur mittleren Konzentration in der Flüssigkeit ab. Die Konzentration der gleichsinnig geladenen Ionen steigt dementsprechend, so daß außerhalb der Grenzschicht elektrische Neutralität in der Flüssigkeit herrscht. Die Dicke der elektrischen Grenzschicht entspricht in etwa der Debye Länge  $l_D$ . Wird nun ein elektrisches Feld tangential zur Wand angelegt, erfahren die geladenen Moleküle in der Flüssigkeit eine Kraft, die sie je nach Ladung in oder gegen die Richtung des elektrischen Feldes antreibt. Da im Innern der Flüssigkeit im Mittel die Konzentrationen beider Ladungsträger gleich sind, herrscht dort keine Nettobewegung. Durch die größere Konzentration einer Spezies von Ladungsträgern in der diffusen Schicht ergibt sich hier jedoch eine Nettobewegung. Die Ionen sind in der Regel hydratisiert. Aufgrund der viskosen Wechselwirkungen mit dem umgebenden wässrigen Medium wird die ganze diffuse Schicht parallel zur Wand als elektroosmotischer Fluß gefördert.

## 2.2 Debye-Hückel-Theorie

Um den elektroosmotischen Fluss mathematisch erfassen zu können, müssen verschiedene Zusammenhänge formuliert werden. Wir benötigen z.B. die Dicke der Grenzschicht  $l_D$ . Zur quantitativen Behandlung der interionischen Wechselwirkung eignet sich allgemein die Poisson-Boltzmann-Gleichung, welche den Zusammenhang zwischen Potential  $\varphi$  und Ladungsdichte  $\rho_c$  beschreibt (Gouy, G.J. (1910) u. Chapman, D.L. (1913)),

$$\Delta\varphi = -\frac{\rho_c}{\varepsilon_r\varepsilon_0}. \quad (2.1)$$

Dabei entspricht  $\varepsilon_0$  der Dielektrizitätskonstante des Vakuums und  $\varepsilon_r$  der relativen Dielektrizitätszahl des Fluids. Die Ladungsdichte  $\rho_c$  ist gleich der Summe aller lokalen spezifischen Ionenkonzentrationen  $n_i$  multipliziert mit der Elementarladung  $e$  und der spezifischen Ladungszahl  $z_i$ , d.h.

$$\rho_c = \sum_i n_i z_i e. \quad (2.2)$$

Man geht davon aus, dass die Ladungsdichte das Ergebnis der Konkurrenz zweier Effekte ist, nämlich der elektrostatischen Anziehungskraft der gegensätzlich geladenen Ionen und der auseinandertreibenden Wirkung der Wärmebewegung. Dabei wird die Anordnung der Ionen überwiegend durch die Wärmebewegung bestimmt und deswegen kann eine Boltzmann Verteilung für die Ladungsdichte angesetzt werden. Es ist somit

$$\rho_c = e \sum_i n_{i\infty} z_i \exp\left(\frac{z_i e \varphi}{k_B T}\right). \quad (2.3)$$

Hierbei ist  $n_{i\infty}$  die globale spezifische Ionenkonzentration,  $k_B$  die Boltzmannkonstante und  $T$  die absolute Temperatur in Kelvin.

Gleichung (2.3) kann nun in Gleichung (2.1) eingesetzt werden und es entsteht eine nichtlineare Differentialgleichung 2. Ordnung., gemäß

$$\Delta\varphi = -\frac{e}{\varepsilon_r\varepsilon_0} \sum_i n_{i\infty} z_i \exp\left(\frac{z_i e \varphi}{k_B T}\right). \quad (2.4)$$

Unter der Annahme, daß die elektrostatische Energie zwischen den Ionen viel kleiner als die thermische Bewegungsenergie ist, d.h.  $z_i e \varphi / (k_B T) \ll 1$ , kann eine Linearisierung des Exponentialausdrucks durch eine Reihenentwicklung vorgenommen werden. Dieser Ansatz wird als Debye-Hückel-Theorie bezeichnet (Debye, P. und Hückel, E. (1923)). Da die elektrostatischen Kräfte quadratisch mit dem Abstand abfallen, kann diese Annahme für die Betrachtung von verdünnten Lösungen, bei denen die Ionen weit voneinander entfernt sind, vorgenommen werden. Unter Berücksichtigung der Elektroneutralität für das Innere der Flüssigkeit, d.h. für

$$\sum_i z_i n_{i\infty} = 0, \quad (2.5)$$

ergibt sich als linearisierte Poisson-Boltzmann-Gleichung

$$\Delta\varphi = \frac{e^2 \sum_i z_i^2 n_{i\infty}}{\varepsilon_0 \varepsilon_r k_B T} \varphi. \quad (2.6)$$

Die Koeffizienten werden zu der sogenannten Abschirmkonstanten  $\kappa$  zusammengefasst, gemäß

$$\kappa^2 = \frac{e^2 \sum_i z_i^2 n_{i\infty}}{\varepsilon_0 \varepsilon_r k_B T}. \quad (2.7)$$

$1/\kappa$  hat die Dimension einer Länge und ist ein Maß für die gesuchte Dicke der Grenzschicht  $l_D$ . Durch einige Umformungen und Einführung der Ionenstärke  $I$  erhält man einen Zusammenhang mit dem die Debye-Länge mittels leicht zu messender physikalischer Größen zu berechnen ist (Atkins, P.W. (1996)). Es gilt

$$l_D = \sqrt{\frac{\varepsilon_r \varepsilon_0 R T}{2 \rho F^2 I m^\ominus}}. \quad (2.8)$$

Hierbei ist  $R$  die universale Gaskonstante,  $\rho$  die Dichte der Flüssigkeit,  $F$  die Faradaysche Konstante und  $m^\ominus$  die Molalität der Lösung im Standardzustand. Die Ionenstärke  $I$  ist ein dimensionsloser Kennwert um die Auswirkungen der Molalitäten  $m_i$  aller Kationen- und Anionenarten in einer Lösung zu berücksichtigen. Es ist

$$I = \sum_i \frac{1}{2} (m_i / m^\ominus) z_i^2. \quad (2.9)$$

So erhält man beispielsweise aufgrund der Eigendissoziation des reinen Wassers eine Ionenstärke von

$$I_{H_2O} = \frac{1}{2} (m_{H^+} + m_{OH^-}) / m^\ominus = 10^{-pH},$$

da man bei kleinen Konzentrationen die Aktivitäten im pH-Wert den Molalitäten gleichsetzen kann. Bei einem pH-Wert von 7 und einer Temperatur von 298 K würde sich demzufolge eine Debye-Länge von ca. 1  $\mu\text{m}$  ergeben, welches in einem typischen Mikrokanal eine beträchtliche Abmessung ist.

Weiterhin benötigen wir eine mathematische Formulierung für die Ladungsverteilung im Fluid. Mit der Vereinfachung, dass das Potential  $\varphi$  nur von der wandnormalen Koordinate  $\tilde{y}$  abhängt, lässt sich eine allgemeine analytische Lösung für Gleichung (2.6) finden, gemäß

$$\varphi(\tilde{y}) = C_1 \exp\left(\frac{-\tilde{y}}{l_D}\right) + C_2 \exp\left(\frac{\tilde{y}}{l_D}\right). \quad (2.10)$$

Mit den Randbedingungen

$$\varphi(\tilde{y} \rightarrow \infty) = 0 \quad (2.11)$$

und dem Zusammenhang zwischen dem elektrischen Feld  $\vec{E}_{i,\tilde{y}}$ , welches normal zur Wand durch die Wandladungsdichte  $q_w$  induziert wird

$$|\vec{E}_{i,\tilde{y}}(\tilde{y} = 0)| = -\frac{d\varphi(\tilde{y} = 0)}{d\tilde{y}} = \frac{|q_w|}{\varepsilon_r \varepsilon_0}, \quad (2.12)$$

ergibt sich als Lösung

$$\varphi(\tilde{y}) = \frac{q_w l_D}{\varepsilon_r \varepsilon_0} \exp\left(\frac{-\tilde{y}}{l_D}\right). \quad (2.13)$$

Durch Differenzieren und Einsetzen von Gleichung (2.13) in Gleichung (2.1) erhalten wir als Näherungslösung für die Ladungsdichteverteilung deshalb

$$\rho_c(\tilde{y}) = \frac{q_w}{l_D} \exp\left(\frac{-\tilde{y}}{l_D}\right). \quad (2.14)$$

Befassen wir uns etwas näher mit der Anwendbarkeit der Formulierung. Bei unserer Vorstellung des Aufbaus der elektrischen Grenzschicht (vgl. Abbildung 2.1) beschreibt Gleichung (2.14) das exponentielle Verhalten der Ladungsdichte in der diffusen Schicht, nicht aber den linearen Zusammenhang in der Sternschicht. Eine weitere Schwierigkeit ergibt sich durch die Tatsache, dass die Wandladungsdichte  $q_w$  eines solchen Systems nicht experimentell bestimmbar ist.

Eine Lösungsmöglichkeit zu dieser Problematik ergibt sich durch den Ansatz die Ionen der Sternschicht gedanklich der Oberfläche des Festkörpers zu zuordnen. Sie sind fest adsorbiert und tragen daher nicht zum elektroosmotischen Effekt in der elektrischen Grenzschicht bei. Daher erscheint es sinnvoll eine scheinbare Wandladungsdichte  $q_{s,w} < q_w$  an der Scherfläche zu definieren. An diesem Ort herrscht das  $\zeta$ -Potential vor, welches experimentell durch Messung des Strömungspotenzials leicht bestimmbar ist (Müller, R.H. (1996)). Weiterhin nehmen wir an, dass die Dicke der Sternschicht nicht mehr als ein oder zwei Moleküldurchmesser ausmacht und damit im Vergleich zur Debye-Länge vernachlässigbar ist. Die scheinbare Wandladungsdichte kann mittels Gleichung (2.13) angenähert werden, gemäß

$$q_{s,w} = \frac{\zeta \varepsilon_r \varepsilon_0}{l_D}. \quad (2.15)$$

Letztendlich wird auch der Einfluss des äußeren, für die Elektroosmose nötigen, angelegten elektrischen Feldes auf die Ladungsdichteverteilung nicht berücksichtigt. Unter der Annahme, daß die Effekte des  $\zeta$ -Potenzials sich nur auf kurze Distanzen im Kanal auswirken, lässt sich die Unabhängigkeit zwischen Ladungsdichte und

äußeren elektrischen Feld ableiten (Deshpande, M., Ghaddar, C., Gilbert, J.R., John St., P.M., Woudenberg, T. und Connel, C. (1998)). Wie wir im weiteren sehen werden, genügen diese Betrachtungen der Grenzschicht und wir können uns der simulierten Geometrie und der mathematischen Formulierung des Rechengebietes zuwenden.

# Kapitel 3

## Der Mikro-Mäanderkanal

### 3.1 Geometrie

In der vorliegenden Arbeit untersuchen wir die Strömung und den Stofftransport in einer Geometrie, welche als Elektrophorese-Einheit in der Biotechnologie dienen soll. Insgesamt 96 solcher Kanalgeometrien sind auf einen Mikrofluidik-Chip mit einer Abmessung von ca.  $130 \times 90 \times 1,5 \text{ mm}$  implementiert. Wir beschäftigen uns im folgendem mit einer Elektrophorese-Einheit des Chips.

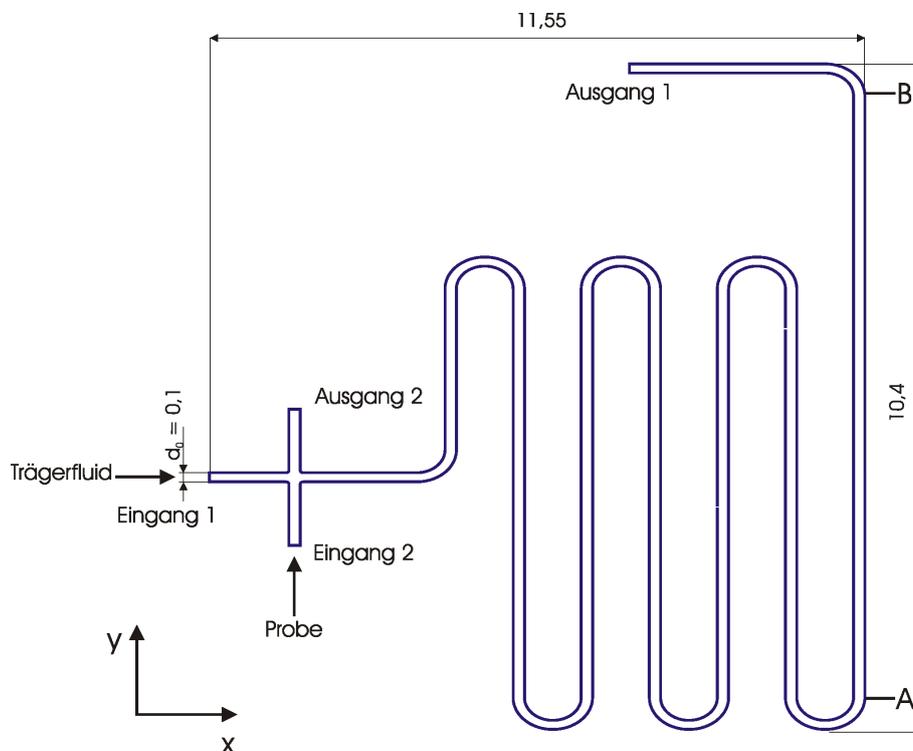


Abbildung 3.1: Mikro-Mäander-Kanal.

Abbildung 3.1 zeigt die zweidimensionale Geometrie. Sie besteht aus einer Kreuzung von Kanälen mit einer Kanalweite von  $100 \mu\text{m}$  und einer anschließenden mäanderförmigen Struktur. Die Hauptabmessungen betragen ca.  $10 \times 12 \text{ mm}$ . Der vertikale Kanal soll als Injektionskanal für die Probensubstanz dienen, während der horizontale Kanal zur Zuführung des Trägerfluids dient. Der sich an die Kreuzung anschließende mäanderförmige Kanal ist die Trennstrecke, in der die Auftrennung der Substanzen aufgrund der verschiedenen elektrophoretischen Mobilitäten erfolgt. Im ersten Prozessschritt wird in Eingang 2 die Probe injiziert. Das Probengemisch wird solange dem Injektionskanal zugeführt, bis der Kreuzungsbereich der Kanäle vollständig mit der Probe gefüllt ist. Danach wird ein elektrisches Feld so ange-

legt, dass das Trägerfluid durch Eingang 1 des horizontalen Kanals gefördert wird. Dadurch löst sich ein Propfen des Probengemischs aus der Kreuzung, welcher sich während des Transports durch die Trennstrecke in seine Substanzen auflösen soll. Am Ende des Kanals sollen die Substanzen so aufgetrennt sein, dass eine Detektion möglich ist.

## 3.2 Anforderungen an die Trenneinheit

Um eine möglichst gute Detektion vornehmen zu können, benötigt man eine scharfe Trennung des Propfens in seine Substanzen. Die entstehenden einzelnen Pfropfen, sogenannte Konzentrationspeaks, sollen von möglichst reiner Zusammensetzung bei hoher örtlicher Konzentration sein, damit ein gutes Meßsignal erreicht werden kann.

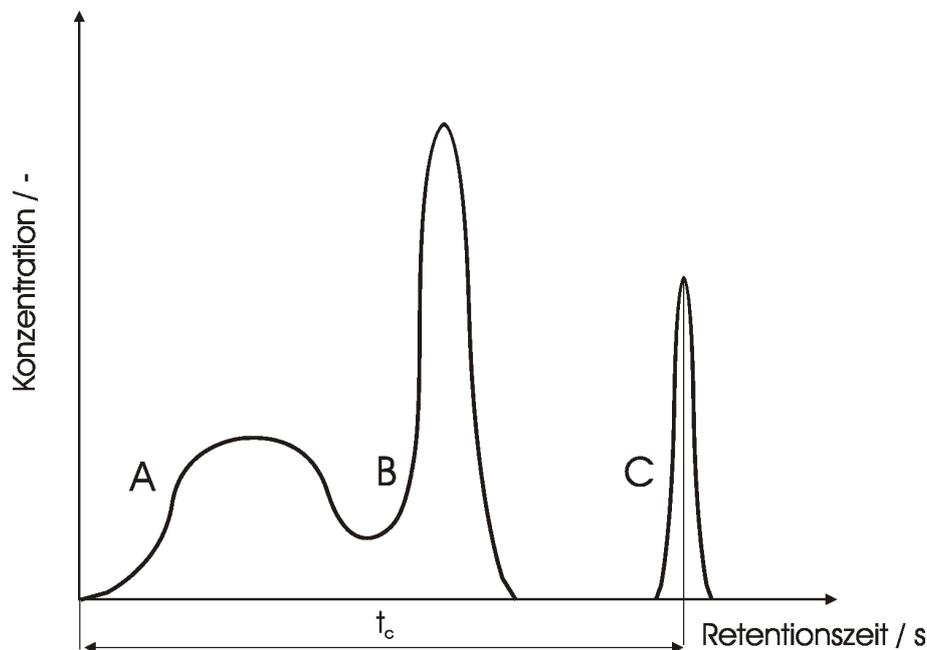


Abbildung 3.2: Schematisches Konzentrationsdiagramm über die Retentionszeit.

Abbildung 3.2 zeigt einen schematischen Konzentrationsverlauf über die Retentionszeit, welcher sich am Ausgang 1 dieser Trenneinheit einstellen sollte. In der Proben-substanz sind drei verschiedene Stoffe A, B und C vorhanden. Charakteristisch für die Stoffe ist ihre Retentionszeit, d.h. die Aufenthaltszeit in der Trennstrecke. Die Fläche des Peaks ist ein Maß für die Konzentration des Stoffes in der Probe. Der Peak der Substanz C zeigt ein ideales Profil. Die Retentionszeit unterscheidet sich wesentlich von den anderen Stoffen, so daß eine eindeutige Identifikation möglich ist. Weiterhin ist der Peak schmal. Dies weist darauf hin, dass nur Stoff C vorhanden und die lokale Konzentration hoch ist, was für ein gutes Meßsignal sorgt. Die beiden Peaks der Substanzen A und B zeigen weniger gute Konzentrationsprofile. Der Konzentrationspeak des Stoffes A ist stark dispergiert und besitzt eine Überschneidung mit dem Peak des Stoffes B. Durch die starke Dispersion können verschiedene

Substanzen mit verschiedenen Retentionszeiten im Peak vorhanden sein. Durch die Überschneidung kann nicht eindeutig ein Rückschluss auf die Konzentrationen der Stoffe in der Probe gezogen werden.

Die Unterschiede in der Retentionszeit werden durch die elektrophoretischen Mobilitäten bestimmt und sind in unseren Überlegungen noch nicht einbezogen. Wir haben aber festgestellt, dass die Dispersion der Pfropfen infolge des Transports bereits ein wichtiges Kriterium für gute und verifizierbare Meßergebnisse ist. Dieses ist ausschließlich vom Strömungsprofil des Trägerfluids in der Trennstrecke abhängig, welches sich durch den elektroosmotischen Fluss im Kanal einstellt. Wir können also im Vorfeld Aussagen zur Trennleistung einer solchen Elektrophorese-Einheit treffen ohne alle physikalischen Effekte im Modell zu berücksichtigen. Aus diesem Grund werden unsere Berechnungen sich zunächst nur auf die Strömung und die Dispersion einer Modellschubstanz in der Trennstrecke beschränken. Dabei wird der Antrieb des Trägerfluids variiert. Um eine Bewertung zu gewährleisten, wird jeweils das Konzentrationsprofil der Probenschubstanz zwischen den Punkten A und B (vgl. Abbildung 3.1), d.h. in der letzten vertikalen Kanaleinheit der Mäanderstruktur, verglichen.

# Kapitel 4

## Mathematische Formulierung der Strömung und des Stofftransports

Für die Simulationen der Mikrofluidikeinheit benötigen wir Erhaltungsgleichungen, welche das Problem vollständig beschreiben und in das FEM-Programm implementiert werden können. Im folgenden Kapitel werden wir die benötigten Gleichungen darstellen, eine Entdimensionierung vornehmen und die Anfangs- und Randbedingungen festlegen. Zur Herleitung der Erhaltungsgleichungen wird auf einschlägige Literatur (Oertel, H. (1995)) verwiesen.

### 4.1 Erhaltungsgleichungen

Wir betrachten das System als zweidimensional ( $x, y$ ) und instationär. Weiterhin wird die Flüssigkeit als inkompressibles Newtonsches Medium betrachtet. Damit ergibt sich aus der Massenerhaltung die Kontinuitätsgleichung

$$u_x + v_y = 0. \quad (4.1)$$

Darin sind  $u$  und  $v$  die horizontalen und vertikalen Geschwindigkeiten des Fluids. Der Index weist auf die Ableitung der Variablen nach der indizierten Größe hin.

Wir bringen Energie nur in Form eines äußeren elektrischen Feldes  $\vec{E}_a = (E_{a,x} E_{a,y})^T$  in unser System ein. Das Feld wird mittels Gleichspannung erzeugt und eine dielektrische Erwärmung kann sicherlich vernachlässigt werden. Weiterhin wird die viskose Dissipation außer Acht gelassen. Daher wird das System als isotherm betrachtet und eine Energiebilanz ist nicht erforderlich.

Zum Aufstellen der Impulsgleichung werden folgende Annahmen getroffen. Der Gravitationskraft wird keine Bedeutung zugemessen. Die elektrische Ladungsverteilung kann durch den in Kapitel 2 beschriebenen Zusammenhang (Gleichung (2.14)) angenähert werden. Demnach wird in der elektrischen Grenzschicht durch den Überschuss von Ladungsträgern ein inneres elektrische Feld  $\vec{E}_{i,\tilde{y}}$  normal zur Kanalwand induziert. Weiterhin wird durch den Transport der Ladungsträger mit der Strömung ein tangenciales elektrisches Feld  $\vec{E}_{i,\tilde{x}}$  induziert, welches aber vernachlässigt wird. Zum Einfluss des inneren elektrischen Feldes siehe Janssens-Maenhout, G. und Schulenberg, Th. (2003). Aufgrund der geringen elektrischen Ströme die im System auftreten, kann auch die Lorentzkraft vernachlässigt werden. Unter diesen Voraussetzungen ergibt sich für die Impulserhaltung

$$\varrho(u_t + uu_x + vu_y) = -p_x + \mu(u_{xx} + u_{yy}) + \rho_c(E_{i,x} + E_{a,x}), \quad (4.2)$$

$$\varrho(v_t + uv_x + vv_y) = -p_y + \mu(v_{xx} + v_{yy}) + \rho_c(E_{i,y} + E_{a,y}). \quad (4.3)$$

Darin ist  $p$  der Druck im Kanal und  $\mu$  die dynamische Viskosität des Fluids.

Um die Konzentration  $c$  der Modellsubstanz in unserem Kanal zu beschreiben, müssen wir zusätzlich noch auf eine Stofftransportgleichung zurückgreifen. Es gilt

$$c_t + uc_x + vc_y = D(c_{xx} + c_{yy}). \quad (4.4)$$

Der Diffusionskoeffizient  $D$  ist dabei ein Parameter des Systems. Damit ist unser System durch die Erhaltungsgleichungen (4.1 - 4.4) mathematisch formuliert.

## 4.2 Asymptotische Lösung

Bei der Implementation des in Kapitel 4.1 abgeleiteten Gleichungssystem (4.1 - 4.4) in einen CFD-Code ergeben sich einige Probleme bezüglich der Längenskalierung. Im Vergleich zur Weite des Mikrokanals ist die Dicke der Grenzschicht klein. Das Rechengitter in der Nähe der Wand muss deshalb stark verfeinert werden, um die elektrische Doppelschicht aufzulösen. Dadurch steigt der Aufwand der Berechnungen aber stark an. Zusätzlich ergeben sich durch verschiedene Größenordnungen der Variablen und Parameter Probleme bezüglich der Konvergenz und der Genauigkeit der Numerik.

Die Lösung der letztgenannten Problematik ist bekannt. Durch eine Entdimensionierung des Gleichungssystems (4.1 - 4.4) bringt man alle Variablen in eine gleiche Größenordnung. Dabei entstehen dimensionslose Kennzahlen, an denen der Einfluss der Größen beurteilt werden kann. Wir entdimensionieren die Größen  $x, y, u, v, c, t$  und  $p$  im folgendem mit den Skalen

$$\begin{aligned} X, Y &= \frac{x, y}{d_0}, & U, V &= \frac{u, v}{u_0}, & C &= \frac{c}{c_0}, \\ P &= \frac{pd_0}{u_0\mu}, & \tau &= \frac{tu_0}{d_0}. \end{aligned}$$

Hierin ist  $d_0$  die Breite des Kanals und  $u_0$  eine typische mittlere Geschwindigkeit im Mikrokanal. Im Hinblick auf die Annahme, daß sich eine schleichende Strömung einstellt und der Einfluß der Zähigkeitskräfte überwiegt, entdimensionieren wir den Druck mit einer viskosen Druckskala.

Zur Vermeidung einer zu komplexen Darstellung wechseln wir von dem globalen zu einem tangentialen und normalen Koordinatensystem an der Kanalwand  $(\tilde{x}, \tilde{y})$  mit

den dazugehörigen Geschwindigkeiten  $(\tilde{u}, \tilde{v})$ . Die Einführung der Skalen und der Ladungsdichte (Gleichung (2.14)) liefert dann das entdimensionierte Gleichungssystem

$$\tilde{U}_{\tilde{X}} + \tilde{V}_{\tilde{Y}} = 0, \quad (4.5)$$

$$Re(\tilde{U}_\tau + \tilde{U}\tilde{U}_{\tilde{X}} + \tilde{V}\tilde{U}_{\tilde{Y}}) = -P_{\tilde{X}} + (\tilde{U}_{\tilde{X}\tilde{X}} + \tilde{U}_{\tilde{Y}\tilde{Y}}) - \epsilon^{-2}\Pi_{\tilde{X}} \exp(-\tilde{Y}/\epsilon), \quad (4.6)$$

$$Re(\tilde{V}_\tau + \tilde{U}\tilde{V}_{\tilde{X}} + \tilde{V}\tilde{V}_{\tilde{Y}}) = -P_{\tilde{Y}} + (\tilde{V}_{\tilde{X}\tilde{X}} + \tilde{V}_{\tilde{Y}\tilde{Y}}) - \epsilon^{-2}\Pi_0 \exp(-2\tilde{Y}/\epsilon) - \epsilon^{-2}\Pi_{\tilde{Y}} \exp(-\tilde{Y}/\epsilon), \quad (4.7)$$

$$C_\tau + \tilde{U}C_{\tilde{X}} + \tilde{V}C_{\tilde{Y}} = \frac{1}{ReSc}(C_{\tilde{X}\tilde{X}} + C_{\tilde{Y}\tilde{Y}}). \quad (4.8)$$

Hierin tauchen die dimensionslosen Parameter

$$Re = \frac{d_0 u_0}{\nu}, \quad (4.9)$$

$$\epsilon = l_D/d_0, \quad (4.10)$$

$$\Pi_0 = \frac{q_{s,w}^2 l_D}{\epsilon_r \epsilon_0 \mu u_0}, \quad (4.11)$$

$$\begin{pmatrix} \Pi_{\tilde{X}} \\ \Pi_{\tilde{Y}} \end{pmatrix} = \frac{q_{s,w} l_D}{\mu u_0} \begin{pmatrix} E_{a,\tilde{x}} \\ E_{a,\tilde{y}} \end{pmatrix}, \quad (4.12)$$

$$Sc = \frac{\nu}{D} \quad (4.13)$$

auf.  $Re$  ist die Reynolds-Zahl, welche das Verhältnis von Trägheits- und viskosen Kräften darstellt.  $\epsilon$  gibt das Verhältnis aus Debye-Länge und Kanalweite wieder.  $\Pi_{\tilde{X}}, \Pi_{\tilde{Y}}$  sind Kennzahlen für das Verhältnis von elektrischen zu viskosen Kräften. Die Schmidt-Zahl  $Sc$  ist schließlich der Quotient aus kinematischer Viskosität und Diffusionskoeffizient. Das Produkt aus Reynolds-Zahl und Schmidt-Zahl ergibt die Peclet-Zahl

$$Pe = Re \cdot Sc \quad (4.14)$$

die im weiteren verwendet wird. Die Peclet-Zahl beschreibt das Verhältnis von advektivem zu diffusivem Stofftransport.

Nun ist zwar eine Lösung für die unterschiedlichen Grössenordnungen der Variablen gefunden aber die Problematik der Auflösung der Grenzschicht besteht weiterhin. Der Einfluss der elektrischen Doppelschicht auf die Strömung wird nur durch den exponentiellen Term in den Impulsgleichungen (4.6 - 4.7) wiedergegeben. An der Wand für  $\tilde{Y} \mapsto 0$  strebt der Term  $\exp(-\tilde{Y}/\epsilon)$  gegen Eins. Für wachsende  $\tilde{Y}$  fällt jedoch der exponentielle Term schnell auf Null ab. Dies bedeutet, dass wir im größten Teil des Kanals den elektrischen Term nicht berücksichtigen müssen. Es liegt dann nahe die Lösung aus zwei Teilen zusammensetzen. Dies wären zum einen die Kanalströmung unter Ausschluß der wandnahen Zone und zum anderen die wandnahe Strömung. Ehrhard P. und Meisel, I. (2002) geben eine angepasste asymptotische Lösung an. Für die Kanalströmungen ergeben sich die Erhaltungsgleichungen in globalen Koordinaten deshalb zu

$$U_X + V_Y = 0, \quad (4.15)$$

$$Re(U_\tau + UU_X + VU_Y) = -P_X + (U_{XX} + U_{YY}), \quad (4.16)$$

$$Re(V_\tau + UV_X + VV_Y) = -P_Y + (V_{XX} + V_{YY}), \quad (4.17)$$

$$C_\tau + UC_X + VC_Y = \frac{1}{Pe}(C_{XX} + C_{YY}). \quad (4.18)$$

Zum Lösen dieses Gleichungssystems läßt sich ohne Modifikationen eine beliebige kommerzielle CFD-Software nutzen. In dieser Arbeit wurde die Finite Elemente Software *Fidap* 8.6.2 verwendet.

Die wandnahe Lösung ergibt sich aus einem Gleichgewicht von elektrischen, viskosen und Druckkräften. Sie kann als analytische Näherungslösung angegeben werden (Ehrhard P. und Meisel, I. (2002)). Die Anpassung der Wandlösung an die Kernlösung liefert die modifizierten Randbedingungen

$$\tilde{U}_W = \frac{q_{s,w} l_D}{u_0 \mu} E_{a,\tilde{x}}, \quad (4.19)$$

$$\tilde{V}_W = 0 \quad (4.20)$$

für die Kernlösung.

## 4.3 Anfangs- und Randbedingungen

Für die numerische Berechnung müssen geeignete Anfangs- und Randbedingungen gefunden werden, um die mathematische Formulierung des Systems zu vervollständigen.

### 4.3.1 Anfangsbedingungen

Gegenstand der Simulationen ist der Transport des Trägerfluids durch den Mikrokanal unter verschiedenen Bedingungen. So wird der Antrieb durch einen angelegten Druckgradient oder ein elektrisches Feld durchgeführt. Um beide Arten von Antrieb in Bezug auf die Dispersion des Probepfropfens vergleichen zu können, ist es von großer Wichtigkeit für alle Fälle die gleichen Anfangsbedingungen zu definieren. Aus diesem Grund werden im Vorfeld Simulationen zur Injektion der Probensubstanz über einen bestimmten Zeitabschnitt durchgeführt. Dabei strömt die Probensubstanz mit einer Konzentration von  $C = 1$  durch den Eingang 2 in den Injektionskanal. Dazu wird ein parabolisches Strömungsprofil im Eingang 2 vorgeschrieben. Im Ausgang 2 wird eine eingelaufene Strömung angenommen, während im Eingang 1 und Ausgang 1 die normalen und tangentialen Geschwindigkeiten zu Null gesetzt werden. Die Strömung der Probensubstanz wird für eine Zeitspanne von  $\tau = 70$  vorgenommen. Die Kreuzung beider Kanäle ist dann vollständig mit der

Probensubstanz gefüllt. Die Konzentrationsverteilung im Rechengebiet wird als Anfangsbedingung für alle weiteren Simulationen, bei denen dann der Probepfropfen bis zum Abschnitt A-B gefördert wird, verwendet.

### **4.3.2 Randbedingungen**

An den Wänden des Mikrokanalsystems haben wir die kinematischen Randbedingungen (4.19 - 4.20), welche den elektroosmotischen Fluß widerspiegeln, und die Nichtdurchlässigkeit der Wände gewährleisten. Zusätzlich wird die Diffusion durch die Wand mit dem Verschwinden des Gradienten der Konzentration unterbunden. An Eingang 1 und Ausgang 1 wird jeweils eine eingelaufene Strömung angenommen. Die Konzentration der Probensubstanz im Eingang 1 wird zu Null gesetzt. Die normalen und tangentialen Geschwindigkeiten im Eingang 2 und im Ausgang 2 werden, außer zur Bestimmung der Anfangsbedingung, zu Null gesetzt.

# Kapitel 5

## Antriebsvariationen

Die Förderung des Probenträgerfluids durch die Mikro-Mäanderstruktur wird unter verschiedenen Voraussetzungen durchgeführt. Prinzipiell handelt es sich um den Antrieb durch ein Druckgefälle und um verschiedene Anordnungen elektrischer Felder. Das Anlegen eines externen elektrischen Potentials mündet in lokalen elektrischen Feldern, welche auch in der elektrischen Grenzschicht appliziert sind. Der in Bezug auf die Kanalwand tangentialer Anteil bewirkt den elektroosmotischen Antrieb. Dazu werden zwei idealisierte elektrische Feldverläufe angenommen. In zwei weiteren Fällen werden Elektroden im Simulationsgebiet angeordnet und das zugehörige elektrische Feld errechnet. Um eine Vergleichbarkeit der verschiedenen Fälle zu gewährleisten, werden die Feldstärken beziehungsweise Potentiale so gewählt, dass sich immer der gleiche Volumenstrom wie im druckgetriebenen Fall einstellt. Im folgendem werden die untersuchten Fälle kurz dargestellt.

### a) Druckgetriebener Antrieb

Im diesem Fall wird zwischen Eingang 1 und Ausgang 1 eine Druckdifferenz festgelegt. Durch das konstante Druckgefälle stellt sich im Mikrokanal ein dementsprechendes Strömungsprofil ein, welches das Trägerfluid vom Eingang 1 zum Ausgang 1 strömen lässt. In diesem Fall wird kein externes elektrisches Feld angebracht und an den Kanalwänden gilt die Haftbedingung.

### b) Idealisierendes horizontales elektrisches Feld

In diesem Fall wird angenommen, dass ein konstantes elektrisches Feld in horizontaler Richtung herrscht. An den Kanalwänden, die eine vertikale Ausrichtung besitzen, ist die tangentialer Feldstärke null. Dies gilt auch für den letzten horizontalen Kanalabschnitt, kurz vor Ausgang 1. Die Richtung des elektrischen Feldes ergibt sich aus der gewünschten Strömungsrichtung vom Eingang 1 zum Ausgang 1. Ein solches Feld würde sich bei einer Anordnung zweier Kondensatorplatten und bei gleichen dielektrischen Eigenschaften von Flüssigkeiten und Wandmaterial einstellen. Es wird ansonsten keine Druckdifferenz vorgegeben.

### c) Idealisierendes tangentialer elektrisches Feld

Hier wird die Annahme getroffen, dass an jeder Stelle des Kanals ein konstantes tangentialer elektrisches Feld herrscht. Die Richtung des tangentialen elektrischen Feldes ist stromabwärts von Eingang 1 zu Ausgang 1. Im letzten Abschnitt des Kanals, also dem Teilstück zwischen dem letzten Krümmer und Ausgang 1, gilt die Haftbedingung. Der Betrag des Feldes ist konstant und unabhängig von der Geometrie. Ein solches Feld würde man erhalten, wenn unterschiedliche Potentiale am Eingang 1 und Ausgang 1 angelegt würden und die relative Dielektrizitätszahl der Flüssigkeit sehr viel grösser als die des Wandmaterials wäre.

d) Realistisches elektrisches Feld zwischen zwei Kondensatorplatten

Bei diesem Fall wird die Annahme getroffen, dass das Rechengebiet links und rechts von 2 vertikalen Kondensatorplatten eingeschlossen ist. An die Kondensatorplatten wird eine Potenzialdifferenz angelegt und der Potenzialverlauf  $\varphi(X, Y)$  kann dann bestimmt werden. Wir nutzen dazu die Poisson-Boltzmann Gleichung in der Form:

$$(\varepsilon_r \varphi_X)_X + (\varepsilon_r \varphi_Y)_Y = 0. \quad (5.1)$$

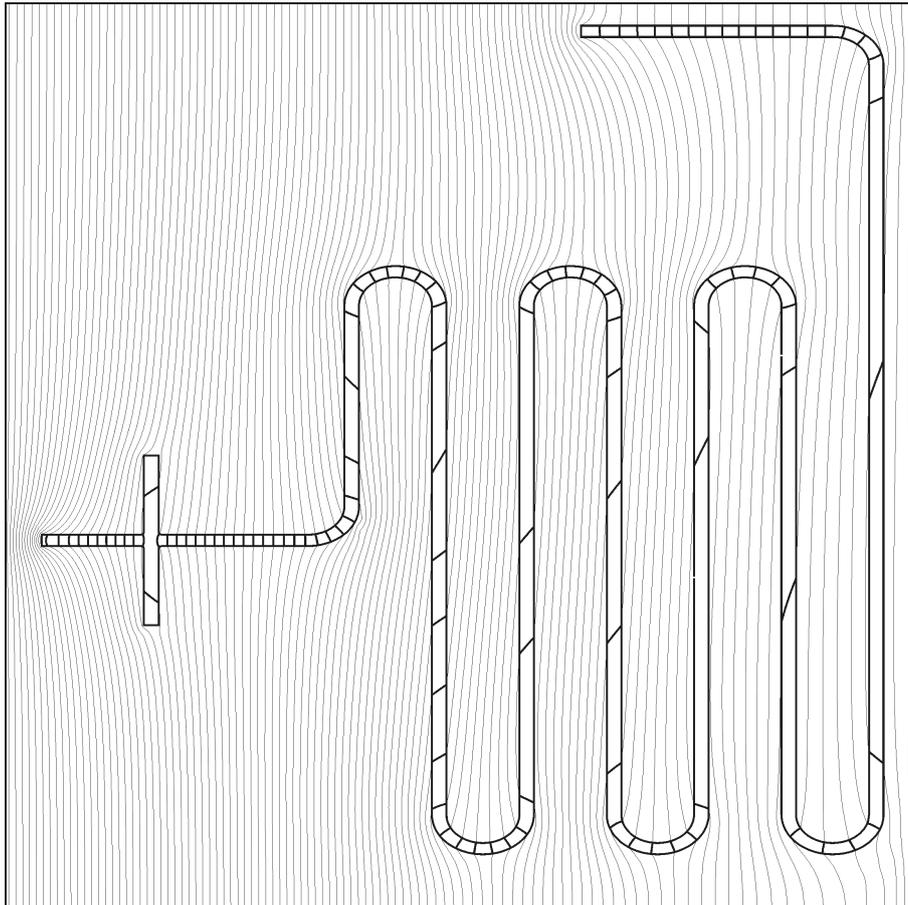


Abbildung 5.1: Isopotenziallinien für die Anordnung des Kanals zwischen zwei Kondensatorplatten.

Die elektrische Ladungsdichte  $\rho_c$  ist in diesem Fall zu Null gesetzt. Damit wird die Trennung äußeres elektrisches Feld und elektrische Grenzschicht aufrechterhalten. Streng genommen müssten die elektrischen Ladungen der elektrischen Grenzschicht zur Berechnung des Potenzialverlaufes einbezogen werden. Der angenommene Potenzialverlauf in der elektrischen Grenzschicht (Gleichung (2.13)) bewirkt ein elektrisches Feld in normaler Richtung zur Kanalwand. Aus den modifizierten Randbedingungen (Gleichungen (4.19 - 4.20)) ergibt sich jedoch, dass nur der tangentielle Anteil des elektrischen Felds einen elektroosmotischen Antrieb erzeugt. Dieser wird trotz der Vereinfachung richtig wieder gegeben. Die numerische Behandlung von

Gleichung (5.1) kann ebenfalls durch das verwendete FEM-Programm *Fidap* 8.6.2 vorgenommen werden. Als Randbedingung an den oberen und unteren Grenzen des Rechengebietes wird die Ableitung des Potentials  $\partial\varphi/\partial Y$  zu Null gesetzt. Abbildung 5.1 zeigt das Potenzialfeld in Form von Isopotenziallinien. Aus dem Potenzialfeld kann dann über den Zusammenhang

$$\vec{E}_a = -grad(\varphi) \quad (5.2)$$

die elektrische Feldstärke bestimmt werden. Wir erkennen, dass starke Gradienten in horizontaler Kanalrichtung existieren, während die Feldstärken in der vertikalen Richtung weitaus geringer sind. In den gekrümmten Kanalabschnitten liegen die Feldstärken zwischen denen der vertikal und horizontal ausgerichteten Kanalgeometrien.

#### e) Realistisches elektrisches Feld zwischen zwei Punktelektroden

Als letzte Variation werden zwei Punktelektroden in die Nähe von Eingang 1 und Ausgang 1 in den Chip implementiert.

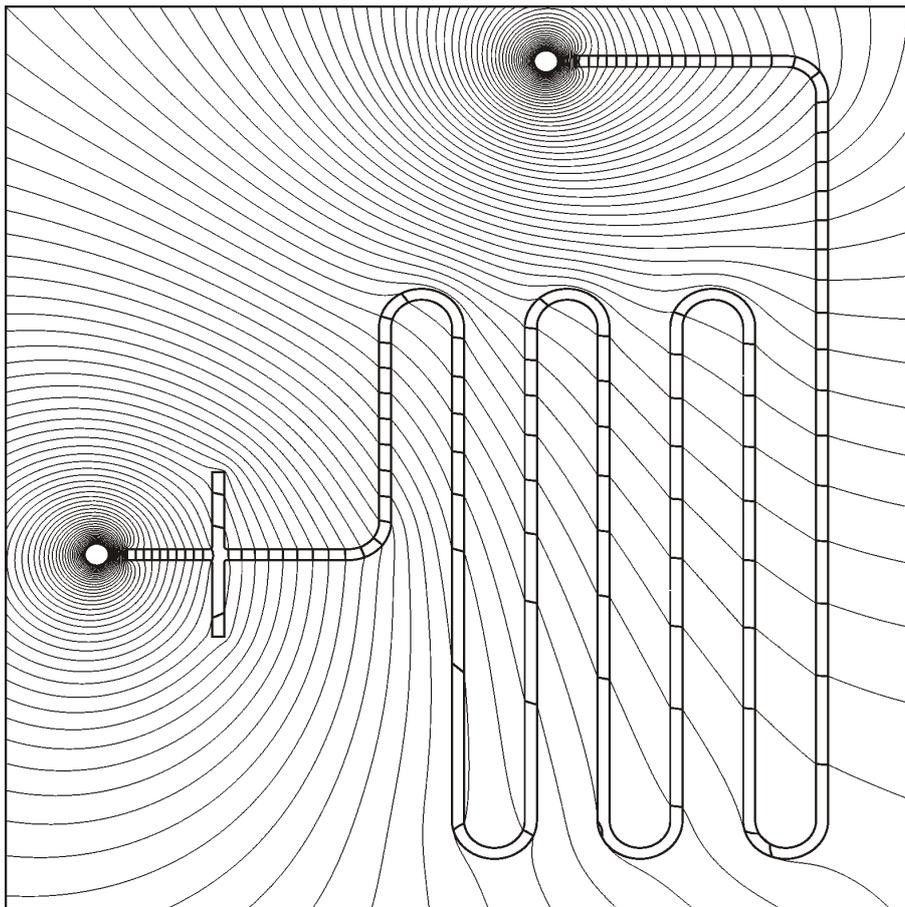


Abbildung 5.2: Isopotenziallinien für die Anordnung des Kanals mit zwei Punktelektroden.

An den Elektroden liegt jeweils ein unterschiedliches aber konstantes Potenzial an.

Die Kombination der Materialien (entsalztes Wasser, Kunststoff) mit den entsprechenden dielektrischen Eigenschaften entspricht Fall  $d$ . Als Randbedingungen an den Grenzen des Rechengebiets wird die analytische Lösung des zweipoligen Potenzialfeldes auf einer unendlichen Platte mit den dielektrischen Eigenschaften des Kunststoffs verwendet. Abbildung 5.2 zeigt die Ergebnisse der FEM-Berechnungen zum Potenzialfeld. Auch in diesem Fall bleibt festzustellen, dass sich im Kanal recht starke horizontale Gradienten des Potenzials einstellen, während die vertikalen Gradienten schwächer ausgeprägt sind. Im Gegensatz zu Fall  $d$  sind jedoch die schwächsten Gradienten in den Bögen zu finden.

# Kapitel 6

## Simulationsergebnisse

Im Folgendem werden die Ergebnisse der Simulationen vorgestellt. Dabei werden wir den Fokus zunächst auf das Strömungsfeld richten. Die Strömungen, die sich bei allen Variationen einstellen, lassen sich in Strömungen mit und ohne Rezirkulationsgebiete einteilen. Anschließend werden die Konzentrationsfelder dargestellt und verglichen.

### 6.1 Strömungsfeld

Die Strömungsfelder lassen sich prinzipiell in zwei Arten kategorisieren. Bei den Fällen *b*, *d* und *e* stellen sich Rezirkulationsgebiete ein, während bei den Fällen *a* und *c* diese nicht vorhanden sind. Da die Stromlinien für die Fälle in einer Kategorie sehr ähnlich sind, erscheint es sinnvoll nur jeweils einen Fall einer Kategorien zu besprechen. Wir werden im folgendem das stationäre Strömungsfeld in ausgesuchten Abschnitten des Mikrokanals für beide Kategorien betrachten und diskutieren.

#### 6.1.1 Strömungsfeld ohne Rezirkulationsgebiete

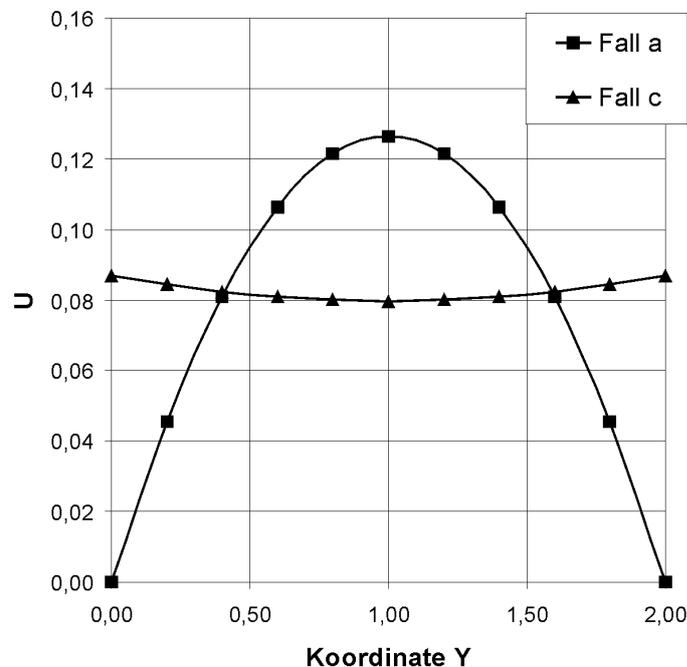


Abbildung 6.1: Stationäre tangentielle Geschwindigkeitsprofile für die Fälle *a* und *c*.

Wenden wir uns nun den stationären Strömungsprofilen des Trägerfluids zu, die sich

zwischen Eingang 1 (vgl. Abbildung 3.1) und der Kreuzung einstellen. Abbildung 6.1 zeigt die Profile für Fall *a*, bei dem ein Druckgradient zum Antrieb der Flüssigkeit angelegt ist und für Fall *c*, bei dem die tangentielle elektrische Feldstärke als konstant im Kanal angenommen ist. Für den Fall *a* stellt sich ein parabelförmiges Geschwindigkeitsprofil mit Haftbedingung an der Wand ein. Dies ist erwartungsgemäß aufgrund der kleinen Reynolds-Zahl  $Re \leq 1$  und dem damit verbundenen laminaren Charakter der Strömung. Die Geschwindigkeit im Falle *c* zeigt ein annähernd pfpfenförmiges Profil. Dabei wird die höchste Geschwindigkeit durch die kinematische Randbedingung an der Wand erreicht. Zur Mitte des Kanal vermindert sich die Geschwindigkeit geringfügig. Dies hängt mit dem letzten Abschnitt im Kanal vor Ausgang 1 zusammen, wo kein elektrisches Feld vorliegt und deshalb die Haftbedingung gilt.

Abbildung 6.2 zeigt die Stromlinien in der Kreuzung der Mikrofluidikeinheit für den Fall *a*, welche qualitativ auch für den Fall *c* ähnlich aussehen. Die Pfeile an den Grenzen des horizontalen Kanals zeigen die Strömungsrichtung an.

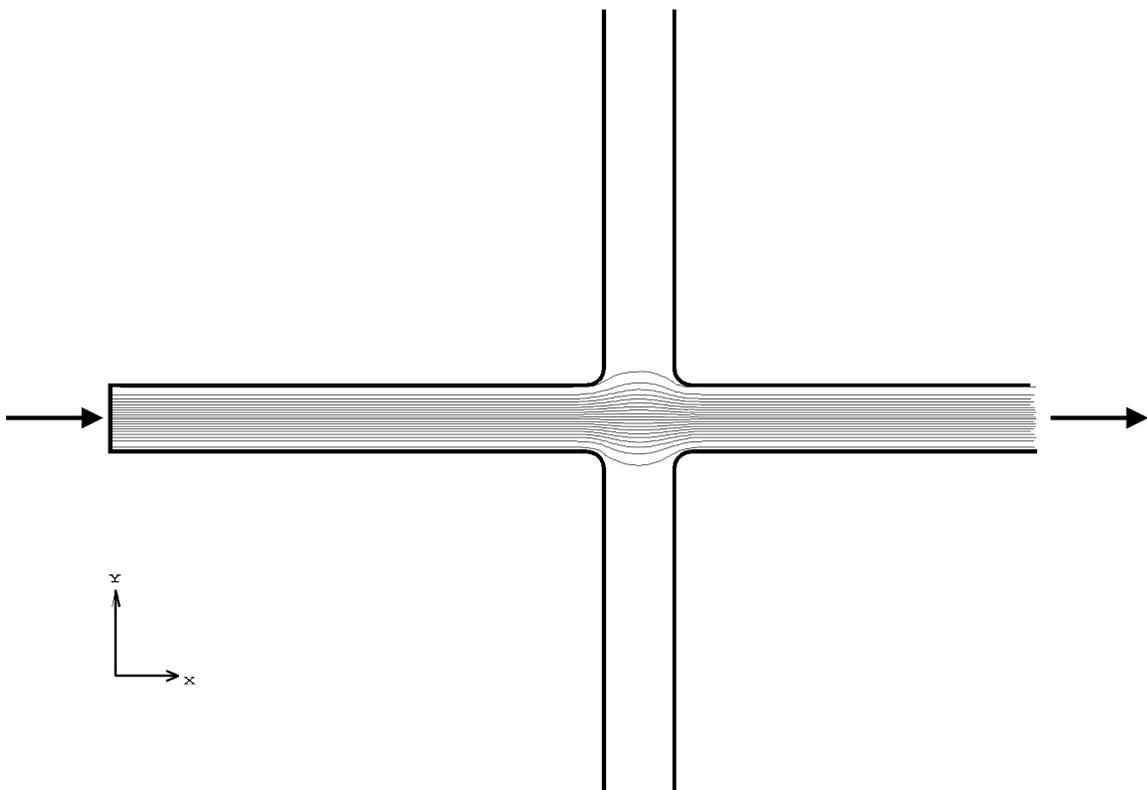


Abbildung 6.2: Stromlinien in der Kreuzung für den Fall *a*.

Der Verlauf der Stromlinien in den horizontalen Kanalteilen ist ausgesprochen geradlinig. Im Kreuzungsbereich weiten sich die Stromlinien auf. Die Strömung ist achsensymmetrisch, in den vertikalen Kanalteilen (Injektionskanal) ist kaum Fluidbewegung festzustellen.

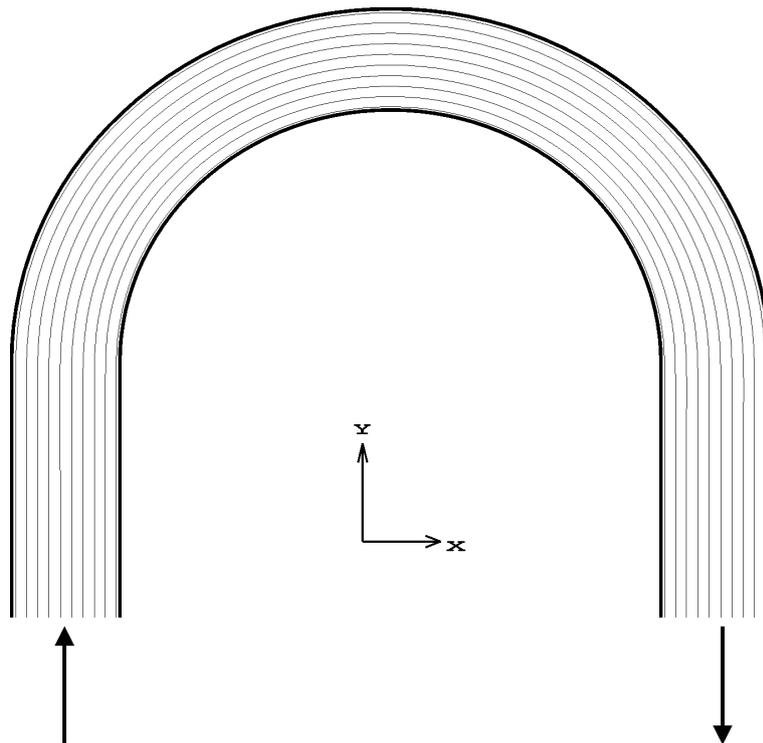


Abbildung 6.3: Stromlinien in einem Krümmer des Mikro-Mäanderkanals für den Fall  $a$ .

Der Verlauf der Stromlinien in einem Krümmer der Mäanderstruktur zeigt Abbildung 6.3. Wir erkennen an dem Verlauf der Stromlinien, dass im gesamten Bereich des Krümmers ein einfaches Geschwindigkeitsfeld ohne Rezirkulation vorherrscht. Gleiches gilt für den letzten Krümmer vor Ausgang 1, welcher in Abbildung 6.4 gezeigt ist. Zusammenfassend können wir feststellen, dass bei den Fällen  $a$  und  $c$  sich eine einfache Strömung in allen Bereichen des Kanals einstellt.

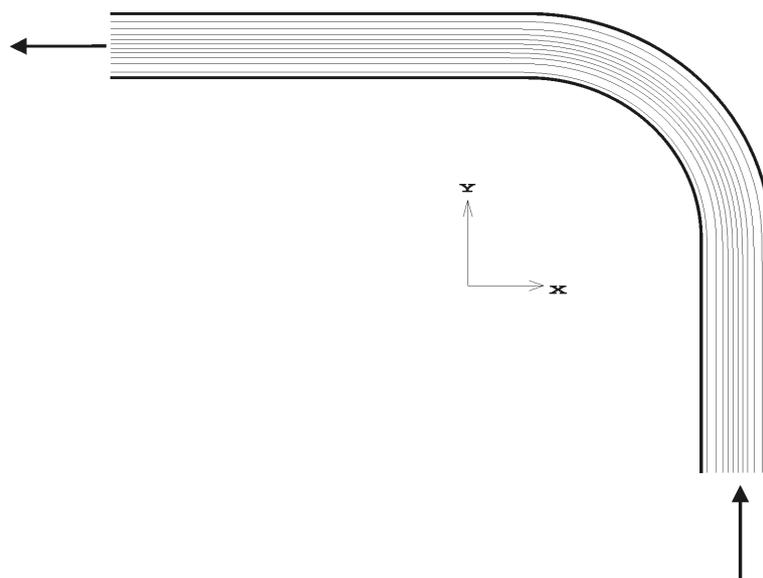


Abbildung 6.4: Stromlinien im Krümmer nahe Ausgang 1 für den Fall  $a$ .

Die Gründe hierfür sind in der Antriebsart zu finden. Bei Anlegen eines Druckgradienten und bei einem konstanten tangentialen elektrischen Feld stellt sich an jeder Stelle des Kanals ein ähnliches Geschwindigkeitsprofil ein.

### 6.1.2 Strömungsfeld mit Rezirkulationsgebieten

Abbildung 6.5 zeigt die tangentialen Geschwindigkeitsprofile in der Nähe von Eingang 1 für die Fälle *b*, *d* und *e*. Im Fall *b* herrscht ein konstantes elektrisches Feld in horizontaler Richtung. Die beiden anderen Geschwindigkeitsprofile ergeben sich aufgrund des elektrischen Felds zwischen zwei Kondensatorplatten (Fall *d*) und aufgrund des Felds zwischen zwei Punktelektroden (Fall *e*).

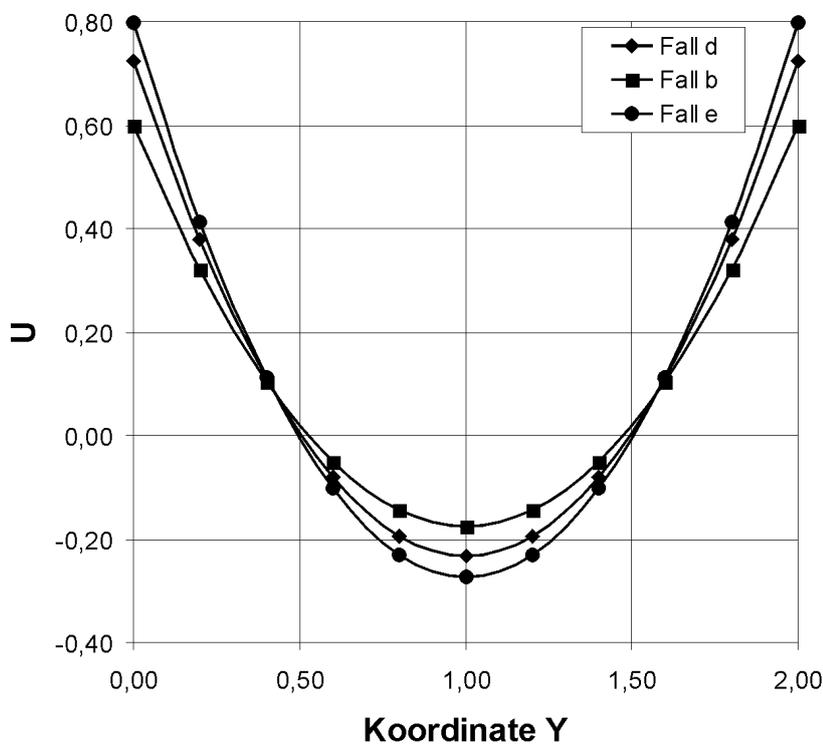


Abbildung 6.5: Stationäre tangentialen Geschwindigkeitsprofile für die Fälle *b*, *d* und *e*.

Diese Geschwindigkeitsprofile unterscheiden sich grundlegend von den Profilen der Fälle *a* und *c*. Alle Profile weisen eine Umkehr der tangentialen Geschwindigkeit im Bereich der Kanalmitte auf. Ausgehend von hohen Werten an der Wand fällt die Geschwindigkeit zur Kanalmitte ab, um in entgegengesetzter Richtung wieder anzuwachsen. Es stellen sich im Vergleich zu den Fällen *a* und *c* größere Maximalgeschwindigkeiten ein. Dies liegt an der Vorgabe eines konstanten Volumenstroms bei allen Fällen. Folglich muß das Integral der Geschwindigkeit über die Kanalbreite in allen Fällen den gleichen Wert aufweisen. Da ein Teil des Volumenstromes in negativer X-Richtung strömt, muss dies durch höhere Wandgeschwindigkeiten ausgeglichen werden.

Auch hier wird das Strömungsfeld exemplarisch an einem Beispiel besprochen. Die Stromlinien unterscheiden sich zwar hier stärker als bei den Fällen ohne Rezirkulationsgebiete, die Argumentation lässt sich aber qualitativ auf jeden Fall in dieser Kategorie übertragen.

Wir betrachten in Abbildung 6.6 die Stromlinien am Eingang 1 und im Kreuzungsbereich der Kanäle exemplarisch für den Fall *d*. Im Bereich des horizontalen Kanals ergibt sich ein Rezirkulationsgebiet, welches das Fluid in der Kanalmitte in negativer X-Richtung zum Eingang 1 herausschleibt. In Wandnähe hingegen bewegt sich das Fluid vom Eingang 1 in positiver X-Richtung. Die Pfeile in der Abbildung geben qualitativ die Flüsse im Kanal wieder.

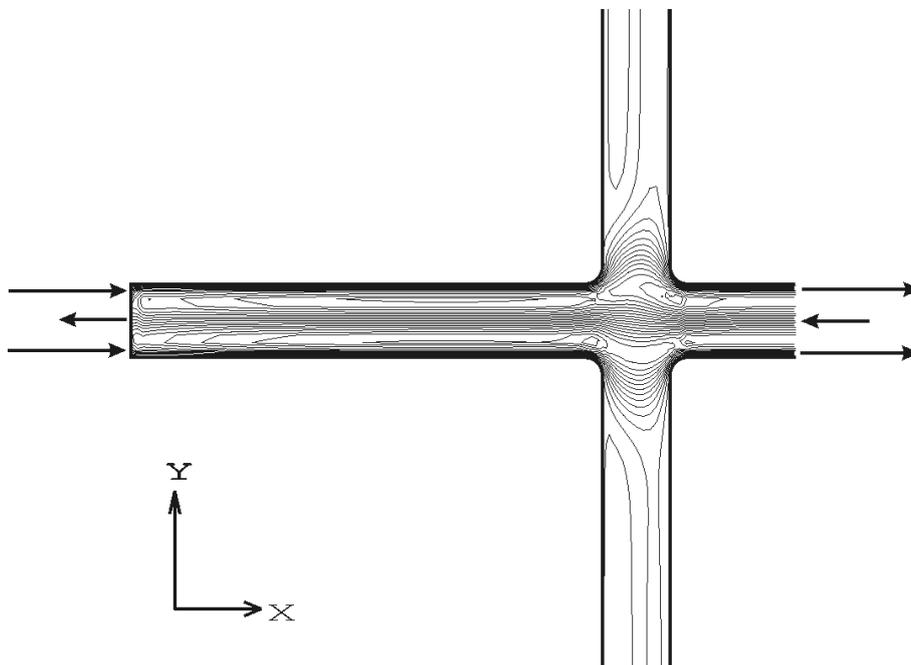


Abbildung 6.6: Stromlinien in der Kreuzung für den Fall *d*.

In dem vertikalen Injektionskanal sind nur geringe Geschwindigkeiten vorhanden. Die Strömung folgt dem Einfluß des elektrischen Feldes (vgl. Abbildung 5.1). In den horizontalen Kanalteilen existieren starke tangentielle Gradienten des Potentials und damit verknüpft, über die kinematische Randbedingung ein starker Antrieb der Flüssigkeit. In den vertikalen Kanalteilen ist die tangentielle elektrische Feldstärke schwach. Daher ist kaum Antrieb des Trägerfluids vorhanden. Weiterhin existieren Abschnitte mit tangentialen Feldstärken entgegengesetzt zur Strömungsrichtung. Durch diese uneinheitliche Förderung der Flüssigkeit im Kanal lässt sich die Entstehung der komplexen Strömung erklären.

Die Stromlinien in einem Krümmer des Mikro-Mäanderkanals zeigt Abbildung 6.7. Der Netto-Massenstrom im Kanal tritt im linken Abschnitt des Krümmers ein und verlässt den Krümmer wieder auf der rechten Seite. Im Ein- und Austrittsquerschnitt findet sich ein einfaches pfpfenähnliches Strömungsprofil mit relativ gerin-

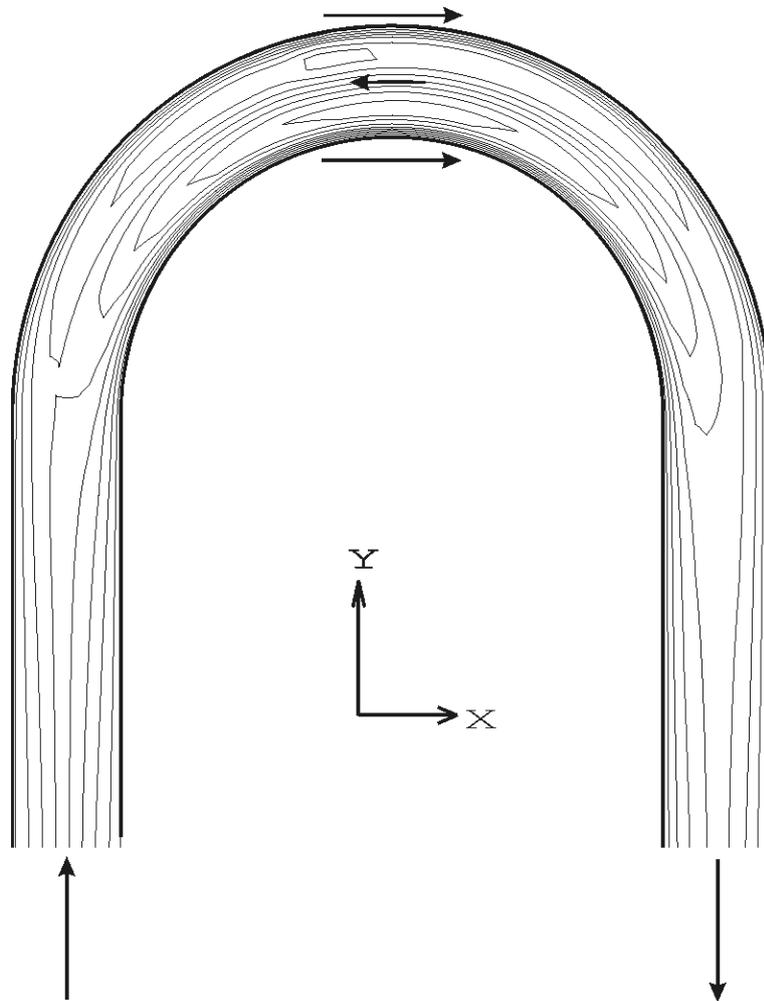


Abbildung 6.7: Stromlinien in einem Krümmern des Mikro-Mäanderkanals für den Fall *d*.

gen Geschwindigkeiten. Im oberen Abschnitt des Krümmers ergibt sich ein komplexes Strömungsprofil. Durch die starken Gradienten des elektrischen Potentials ergeben sich dort hohe Wandgeschwindigkeiten in Richtung des Netto-Massenstroms, während es in der Mitte des Kanals zur Rückströmung kommt.

Abbildung 6.8 zeigt den Verlauf der Stromlinien im letzten Krümmern vor Ausgangs 1. Der Netto-Massenstrom tritt in den unteren Teil des Krümmers ein und verläßt den Krümmern nach links. Überall kommt es an den Wänden zu einem, dem Netto-Massenstrom entgegengesetztem Fluss. Im linken horizontalen Teil und im gekrümmten Teil herrschen hohe Wandgeschwindigkeiten. Diese sind durch den Verlauf des elektrischen Feldes dem Netto-Massenstrom entgegengesetzt. Im vertikalen Teil sind die Wandgeschwindigkeiten zwar geringer aber auch in entgegengesetzter Richtung zum Netto-Massenstrom. Durch diese komplexen Geschwindigkeitsprofile stellen sich wiederum Rezirkulationen der Strömung insbesondere im Krümmern ein.

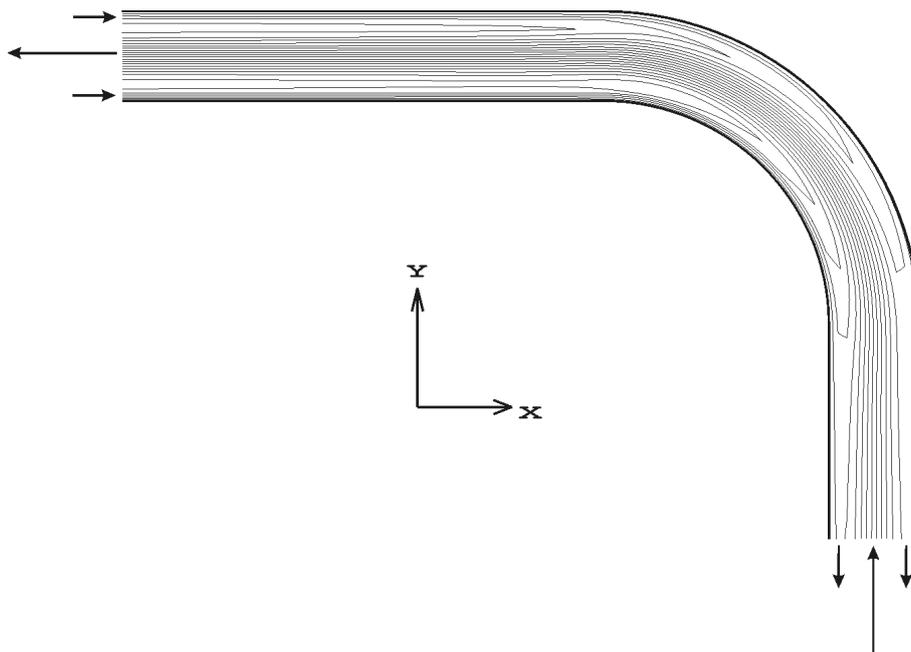


Abbildung 6.8: Stromlinien im Krümmer nahe des Ausgangs 1 für den Fall *d*.

## 6.2 Konzentrationsfeld

Ein weiteres wichtiges Ergebnis unserer zeitabhängigen Simulationen ist das Konzentrationsfeld. Wie schon in den vorherigen Kapiteln erläutert wurde, füllt sich zu Beginn einer Simulation der vertikale Injektionskanal mit einem Probenfluid. Durch Fördern des Trägerfluids löst sich ein Propfen des Probenfluids aus der Kanalkreuzung. Die zeitliche und örtliche Verteilung des Propfens in der Vergleichsstrecke A-B (vgl. Abbildung 3.1) erlaubt eine erste Aussage über die Dispersion in der Anordnung. Ziel ist es das elektrische Feld und damit den Antrieb des Trägerfluids so zu gestalten, dass eine minimale Dispersion erreicht wird. Um vergleichbare Ergebnisse zu erhalten, wird der Massenstrom bei allen untersuchten Fällen konstant gehalten. Weiterhin findet der Vergleich zur selben Zeit  $\tau = 8570$  statt. Die Simulationen werden bei zwei verschiedenen Peclet-Zahlen durchgeführt. Wir erinnern uns, daß die Peclet-Zahl das Verhältnis zwischen advektivem und diffusivem Stofftransport beschreibt. Dabei entspricht eine Peclet-Zahl von  $Pe = 1$  einem Diffusionskoeffizienten  $D = 10^{-7} \text{ m}^2/\text{s}$ . Bei Verwendung eines Diffusionskoeffizienten von  $D = 10^{-8} \text{ m}^2/\text{s}$  ergibt sich die Peclet-Zahl zu  $Pe = 10$ .

Abbildung 6.9 zeigt das in der Mitte des Kanals vorhandene Konzentrationsprofil zwischen den Punkten A und B zum Zeitpunkt  $\tau = 8570$  für die Fälle *a*, *b* und *c* und für eine Peclet-Zahl  $Pe = 1$ . Für alle Fälle stellen sich nahezu identische Konzentrationsprofile ein. Die Konzentrationsverteilung erscheint unabhängig von der Form der Strömung. Die Advektion spielt bei dieser Parameterwahl nur eine untergeordnete Rolle und folglich ist bei einer Peclet-Zahl von 1 der Transportmechanismus von der Diffusion bestimmt. Es bleibt festzuhalten, dass der Propfen sich über die

gesamte Vergleichsstrecke verteilt und damit die lokale Konzentration niedrig ist. Beides ist für eine nachfolgende Detektion als nachteilig anzusehen.

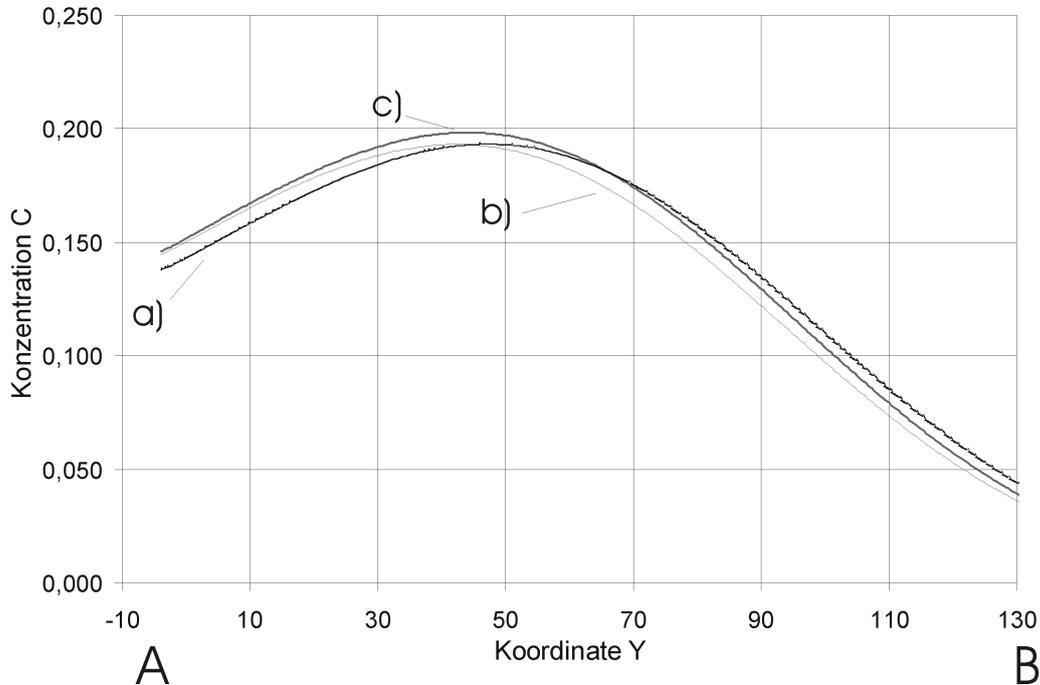


Abbildung 6.9: Konzentrationsprofile in der Kanalmitte im Abschnitt A-B zum Zeitpunkt  $\tau = 8570$  für  $Pe = 1$ .

Betrachtet man einschlägige physikalische Datensammlungen (Lide, D.R. (Editor) (1998–1999)), so stellt man fest, dass  $D = 10^{-7} m^2/s$  einen eher hohen Diffusionskoeffizienten wiedergibt. Typische Diffusionskoeffizienten in wässrigen Systemen sind in der Größenordnung von  $10^{-8} - 10^{-10} m^2/s$ . Aus diesem Grund führen wir weitere Simulationen für  $Pe = 10$  durch, was einem Diffusionskoeffizienten von  $D = 10^{-8} m^2/s$  entspricht. Hier ist zu erwarten, dass die Advektion eine größere Rolle spielt. Eine Simulation mit einer Peclet-Zahl  $Pe = 100$  wird nicht vorgenommen, da bei diesen Parametern das Rechenetz extrem verfeinert werden muss um eine sogenannte numerische Diffusion zu vermeiden.

Die Konzentrationsprofile für die Fälle  $a$ ,  $b$ ,  $c$ ,  $d$  und  $e$  zum Zeitpunkt  $\tau = 8570$  und bei einer Peclet-Zahl von  $Pe = 10$  zeigt Abbildung 6.10. Die geringste Dispersion des Propfens wird im Fall  $c$  erreicht. Dies ist nicht verwunderlich, da aufgrund der idealen Annahme eines konstanten tangentialen elektrischen Feldes sich ein pfropfenförmiges Geschwindigkeitsprofil einstellt. Das Maximum des Konzentrationspeaks ist 0.27. Alle anderen Fälle zeigen geringere lokale Konzentrationen und damit größere Dispersion. Im Falle  $a$ , bei dem der Antrieb durch eine angelegte Druckdifferenz stattfindet, beobachten wir einen Konzentrationspeak von ca. 0.18. In diesem Fall herrscht die Haftbedingung an der Wand und ein parabelförmiges Strömungsprofil stellt sich ein. Die vermehrte Dispersion lässt sich dann aufgrund der unterschiedlichen Strömungsgeschwindigkeiten über die Kanalbreite erklären.

Beim pfropfenförmigen Geschwindigkeitsprofil ist der tangentielle advective Stofftransport an jeder Stelle im Kanal gleich. Beim druckgetriebenen Antrieb herrschen im Innern des Kanals größere Geschwindigkeiten als in der Nähe der Wand. Der tangentielle advective Stofftransport ist daher ungleichmäßig über den Kanal, was letztendlich zu einer größeren Verzerrung des Propfen führt.

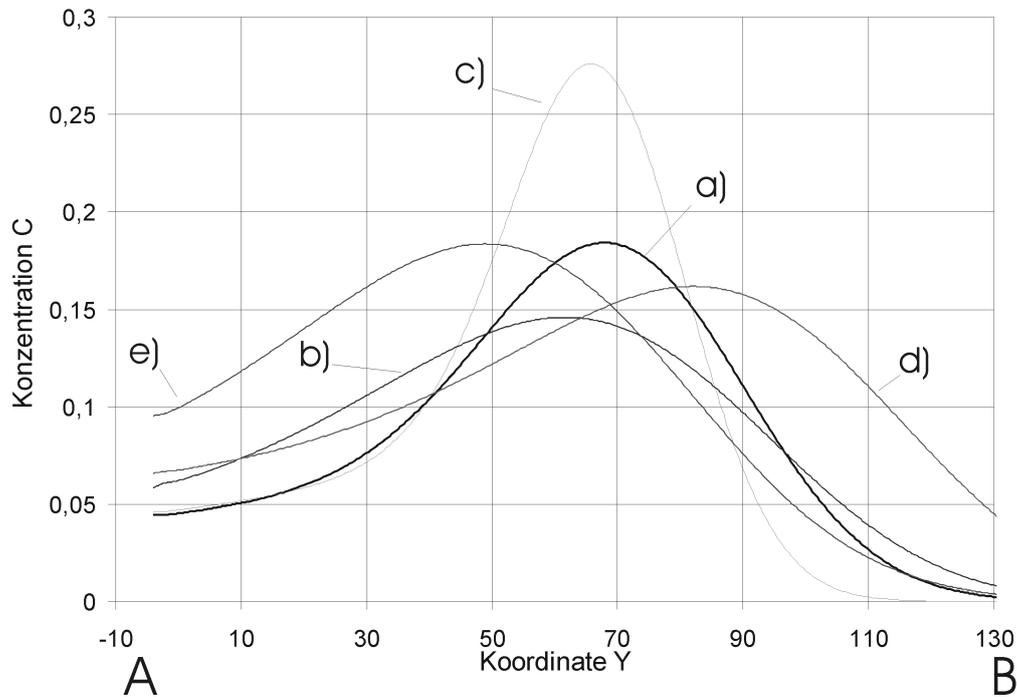


Abbildung 6.10: Konzentrationsprofile in der Kanalmitte im Abschnitt A-B zum Zeitpunkt  $\tau = 8570$  für  $Pe = 10$ .

Für den Fall *e*, bei dem zwei Punktelektroden am Eingang 1 und Ausgang 1 angebracht sind, stellt sich eine Peakhöhe von 0,18 ein. In diesem wie auch in den anderen Fällen existieren Rezirkulationsgebiete, welche für die größere Dispersion verantwortlich sind. Für die Annahme eines konstanten horizontal verlaufenden Feldes (Fall *b*) und für die Simulation des Feldes zwischen 2 Kondensatorplatten (Fall *d*) fällt der Konzentrationspeak noch schwächer aus. Im Fall *d* beträgt er 0,16 und im Fall *b* 0,14.

# Kapitel 7

## Zusammenfassung und Ausblick

Ziel dieser Arbeit ist die Untersuchung des Strömungsfeldes und des Stofftransports in einem Mikro-Mäanderkanal, der zur elektrophoretischen Auftrennung von Substanzen dienen soll. Als Antrieb des Trägerfluids werden zwei physikalische Effekte verwendet. Als Referenzfall dient das konventionelle Anlegen eines Druckgradienten, welcher das inkompressible Trägerfluid antreibt. Eine weitere Option ist die Applikation eines elektrischen Feldes. Dies führt zu einer Migration überschüssiger geladener Teilchen in einer wandnahen Schicht, der sogenannten Elektroosmose. Zu diesem Zwecke werden zweidimensionale, instationäre Berechnungen mittels der Finite-Elemente-Methode (FEM) durchgeführt. Dabei wird die wandnahe Schicht asymptotisch an die numerisch behandelte Kernströmung angepasst. Der elektroosmotische Antrieb wird in vier Fällen variiert. In zwei Fällen wird ein idealisiertes elektrisches Feld angenommen. In den anderen beiden Fällen werden realistische elektrische Felder bei unterschiedlicher Form und Anordnung der Elektroden errechnet. Es wird für alle Fälle das Konzentrationsprofil eines Probenfluids am Ausgang des Mikro-Mäanderkanals berechnet. Das physikalische Phänomen der Elektrophorese ist in unserem Modell noch nicht implementiert. Trotzdem kann aufgrund der Dispersion der Probe eine erste Aussage zur Eignung der Anordnung für eine Trennung abgeleitet werden.

Für die meisten Fälle mit elektroosmotischem Antrieb stellen sich komplexe Strömungen im Mikro-Mäanderkanal ein. Dies ist begründet durch das elektrische Feld. Es existieren Kanalabschnitte mit tangential starkem und tangential schwachem elektrischen Feld. Zusätzlich kommt es zu elektrischen Feldern, die eine Bewegung der Flüssigkeit entgegen der Hauptströmungsrichtung induzieren. Dies führt zu großen Unterschieden und zu gegensätzlichen Richtungen der wandnahen Strömung. Da der Massenstrom an jedem Ort gleich sein muss, kommt es zu Rezirkulationsgebieten. Diese Rezirkulationen vergrößern die Dispersion des Probenpfropfens. Dies ist kontraproduktiv zu einer gewünschten Trennung. Die lokalen Konzentrationen am Ende der Mikrofluidik-Einheit sollen möglichst groß und damit leicht detektierbar sein. Weiterhin sollte die Dispersion gering sein, um eine Überschneidung verschiedener Probesubstanzen zu verhindern.

Die Simulationen zeigen, dass sich die geringste Dispersion bei einem pfropfenförmigen Strömungsprofil einstellt. Dieses Profil wird nur bei der idealisierten Annahme eines konstanten tangentialen elektrischen Feldes (Fall *c*) entlang der Kanalwände erzielt. Dieser Fall ist nur zu erreichen, wenn die Dielektrizitätskonstante der Flüssigkeit  $\varepsilon_l$  um mehrere Größenordnungen größer als die des Wandmaterials  $\varepsilon_s$  ist.

---

Im druckgetriebenen Fall *a*, bei dem sich ein parabelförmiges Strömungsprofil einstellt, ist die Dispersion weitaus größer als im Fall *c*. Andererseits ist dies ein realistischer Fall, der leicht zu verwirklichen ist. Ungefähr das gleiche Konzentrationsmaximum ergibt sich bei der Anordnung zweier Punktelektroden (Fall *e*). Der Propfen ist jedoch verzerrter als im Fall *a*. Die idealisierte Annahme eines horizontal konstanten elektrischen Feldes (Fall *b*) und das Feld, welches zwischen zwei Kondensatorplatten erzeugt wird (Fall *d*), zeigen die größte Dispersion. Dies ist nicht verwunderlich, da bei diesen große Rezirkulationsgebiete im Strömungsfeld auftreten.

Es bleibt festzuhalten, daß Fall *c* das gewünschte Ergebnis erzielt, aber nicht zu verwirklichen ist. Die beiden leicht realisierbaren Fälle *d* und *e* ergeben bezüglich der Dispersion schlechtere Ergebnisse als der druckgetriebene Fall *a*. Die Folgerung bei dieser Geometrie auf den Einsatz eines elektrischen Feldes zu verzichten und den Antrieb ausschließlich durch einen Druckgradienten zu erzeugen ist irrig. Wir benötigen das elektrische Feld zur elektrophoretischen Auftrennung des Probengemisches. Dadurch ergeben sich zwei Lösungsansätze für die dargestellte Problematik. Zum Einen wäre es möglich eine Kombination von elektroosmotischem und druckgetriebenem Antrieb zu realisieren. Zum Anderen könnte die Geometrie optimiert werden. In der untersuchten Geometrie ist besonders der Abschnitt zwischen B und Ausgang 1 (vgl. Abbildung 3.1) unvorteilhaft. Bei elektroosmotischem Antrieb muss es hier zu relativ hohen, dem Massenstrom entgegengesetzten, Wandgeschwindigkeiten kommen. Dies sorgt für eine höhere Dispersion. Weiterhin wird es bei einer Mäanderform immer zu Abschnitten kommen, bei denen das tangential elektrische Feld sich stark ändert. Insofern ist auch die Mäanderform zu hinterfragen.

Im Weiteren sollen unsere zukünftigen Forschungsarbeiten um physikalische Modelle erweitert und verifiziert werden. Die Durchführung von aufwendigen dreidimensionalen Simulationen erlaubt beispielsweise präzisere Aussagen. Verschiedene Moleküle mit verschiedenen Ladungen und Strukturen werden sich unterschiedlich in elektrischen Feldern bewegen. Dazu muss ein Modell für die elektrophoretische Mobilität implementiert werden. Der Einfluss der geladenen Moleküle auf die elektrische Doppelschicht ist eine weitere offene Frage. Jede weitere Modellbildung kann nur in Verbindung mit experimentellen Verifikationen stattfinden. Deswegen sind Experimente durchzuführen, die unsere theoretischen Modelle überprüfen.

# Literatur

- Atkins, P.W.: 1996, *Physikalische Chemie*, Wiley-VCH Verlag, Weinheim.
- Chapman, D.L.: 1913, A contribution to the theory of electrocapillarity, *Phylos. Mag.* **25**, 475.
- Debye, P. und Hückel, E.: 1923, Zur Theorie der Elektrolyte. I. Gefrierpunktserniedrigung und verwandte Erscheinungen, *Physikalische Zeitschrift* **24**, 185–206.
- Deshpande, M., Ghaddar, C., Gilbert, J.R., John St., P.M., Woudenberg, T. und Connel, C.: 1998, Numerical framework for the modeling of electrokinetic flows, *SPIE* **3515**, 217–227.
- Ehrhard P. und Meisel, I.: 2002, Strömungs- und Transportprozesse in Mikrokanälen, *Technical Report FZKA 6680*, Forschungszentrum Karlsruhe.
- Gouy, G.J.: 1910, Sur la constitution de la charge électrique à la surface d'un électrolyte, *J. Phys. Radium* **9**, 457.
- Grossman, P.D. und Colburn, J.C.: 1992, *Capillary Electrophoresis : Theory and Practice*, Academic Press, San Diego.
- Han, J. und Craighead, H.G.: 2000, Separation of long DNA molecules in a microfabricated entropic trap array, *Science* **288**, 1026–1029.
- Helmholtz, H.: 1879, Studien über elektrische Grenzschichten, *Ann. Phys.* **7**, 337.
- Hunter, R.J.: 1981, *Zeta Potential in Colloid Science; Principles and Applications*, Academic Press.
- Jakeway, S.C., de Mello, A.J. und Russel, E.L.: 2000, Miniaturized total analysis systems for biological analysis, *Fresenius J. Anal. Chem.* **366**, 525–539.
- Janssens-Maenhout, G. und Schulenberg, Th.: 2003, An alternative description of the interfacial energy of a liquid in contact with a solid, *J. Colloid & Interface Sci.* **257**, 141–153.
- Lide, D.R. (Editor): 1998–1999, *Handbook of Chemistry and Physics*, CRC Press Inc., Boca Raton, London.
- Müller, R.H.: 1996, *Zetapotential und Partikelladung in der Laborpraxis*, Wissenschaftliche Verlagsgesellschaft, Stuttgart.
- Oertel, H.: 1995, *Strömungsmechanik*, Springer, Berlin.
- Stern, O.: 1924, Zur Theorie der elektrolytischen Doppelschicht, *Z. Elektrochemie* **30**, 508–516.

# Kapitel 8

## Anhang

### Konstanten

|                 |                                       |                               |
|-----------------|---------------------------------------|-------------------------------|
| $e$             | Elementarladung                       | $1,6022 \cdot 10^{-19} C$     |
| $F$             | Faradaysche Konstante                 | $96485 C/mol$                 |
| $k_B$           | Boltzmann-Konstante                   | $1,38 \cdot 10^{-23} J/K$     |
| $m^\ominus$     | Molalität im Standardzustand          | $1 mol/kg$                    |
| $N_A$           | Avogadrosche Zahl                     | $6,022 \cdot 10^{23} 1/mol$   |
| $R$             | universale Gaskonstante               | $8,314 J/(molK)$              |
| $\varepsilon_0$ | Dieelektrizitätskonstante des Vakuums | $8,854 \cdot 10^{-12} C/(Vm)$ |

### griechische Formelzeichen

|                   |  |          |
|-------------------|--|----------|
| $\epsilon$        | Verhältnis Grenzschicht zu Kanalweite        | -        |
| $\epsilon_l$      | relative Dielektrizitätszahl des Fluids      | -        |
| $\epsilon_r$      | relative Dielektrizitätszahl                 | -        |
| $\epsilon_s$      | relative Dielektrizitätszahl des Festkörpers | -        |
| $\zeta$           | Zetapotenzial                                | $mV$     |
| $\kappa$          | Abschirmkonstante                            | $1/m$    |
| $\mu$             | dynamische Viskosität                        | $Pas$    |
| $\nu$             | kinematische Viskosität                      | $m^2/s$  |
| $\Pi_0$           | dimensionsloser Paramter                     | -        |
| $\Pi_{\tilde{X}}$ | dimensionsloser Paramter                     | -        |
| $\Pi_{\tilde{Y}}$ | dimensionsloser Paramter                     | -        |
| $\rho$            | Dichte                                       | $kg/m^3$ |
| $\rho_c$          | elektrische Ladungsdichte                    | $C/m^3$  |
| $\tau$            | dimensionslose Zeit                          | -        |
| $\varphi$         | Potenzial                                    | $mV$     |
| $\varphi_O$       | Oberflächenpotenzial                         | $mV$     |
| $\varphi_{Stern}$ | Sternpotenzial                               | $mV$     |

## lateinische Formelzeichen

|                            |   |          |
|----------------------------|---|----------|
| $c$                        | Konzentration   | -        |
| $C$                        | dimensionslose Konzentration                            | -        |
| $d_0$                      | Kanalweite  | $m$      |
| $\vec{E}_a$                | angelegtes elektrisches Feld                            | $V/m$    |
| $\vec{E}_i$                | selbstinduziertes elektrisches Feld                     | $V/m$    |
| $D$                        | Diffusionskoeffizient                                   | $m^2/s$  |
| $I$                        | Ionenstärke   | -        |
| $l_D$                      | Debye-Länge   | $m$      |
| $m_i$                      | Molalität der Spezies $i$                               | $mol/kg$ |
| $n_i$                      | spez. Ionenkonzentration                                | -        |
| $n_{i\infty}$              | globale spez. Ionenkonzentration                        | -        |
| $p$                        | Druck   | $Pa$     |
| $P$                        | dimensionsloser Druck                                   | -        |
| $Pe$                       | Peclet-Zahl   | -        |
| $q_{s,w}$                  | scheinbare Wandladungsdichte                            | $C/m^2$  |
| $q_w$                      | Wandladungsdichte                                       | $C/m^2$  |
| $Re$                       | Reynolds-Zahl   | -        |
| $Sc$                       | Schmidt-Zahl  | -        |
| $T$                        | absolute Temperatur                                     | $K$      |
| $t$                        | Zeit  | $s$      |
| $u, v$                     | Geschwindigkeiten                                       | $m/s$    |
| $\tilde{u}, \tilde{v}$     | normale, tangentielle Geschwindigkeiten                 | $m/s$    |
| $u_0$                      | charakteristische Geschwindigkeit                       | $m/s$    |
| $U, V$                     | dimensionslose Geschwindigkeiten                        | -        |
| $\tilde{U}_W, \tilde{V}_W$ | tangentiale, normale Geschwindigkeiten an der Kanalwand | -        |
| $x, y$                     | kartesische Koordinaten                                 | $m$      |
| $\tilde{x}, \tilde{y}$     | tangentiale, normale Koordinaten an der Kanalwand       | $m$      |
| $X, Y$                     | dimensionslose kartesische Koordinaten                  | -        |
| $\tilde{X}, \tilde{Y}$     | dimensionslose tangentielle, normale Koordinaten        | -        |
| $z_i$                      | spezifische Ladungszahl eines Ions                      | -        |