

# Использование метода молекулярной динамики при моделировании процессов в микрофлюидных устройствах

А.Н. Агафонов<sup>1</sup>, А.В. Еремин<sup>1</sup>, К.И. Миланина<sup>1</sup>, В.М. Гаврилов<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Самарский национальный исследовательский университет им. академика С.П. Королева, Московское шоссе 34А, Самара, Россия, 443086

**Аннотация.** В работе рассмотрена возможность использования метода молекулярной динамики (МД) в составе многоуровневых моделей при описании процессов в микрофлюидных устройствах. Особое внимание уделено вопросам, связанным с использованием МД для описания процессов на границе газ-твёрдое тело.

## 1. Введение

Микрофлюидика (микрогидродинамика) – междисциплинарная наука, изучающая закономерности поведения жидкостей и газов, движущихся по узким каналам внутри герметичных миниатюрных устройств – микрочипов. В основе микрофлюидики – микрофлюидные модули, позволяющие управлять микро-, нано- и даже пиколитровыми объемами жидкостей. Это важно для таких операций, как подготовка проб, их транспортировка, смешивание, разделение, детектирование, дозирование и др. Преимущества микрофлюидных технологий заключаются и в том, что реакции проходят в закрытых системах, где исключена контаминация, а объемы реагентов минимальны. В результате можно выполнять в миниатюрном формате не только традиционные исследования, но и проводить анализы, которые ранее были нереализуемы. [1]

К ключевым особенностям микрофлюидных устройств можно отнести [2]:

1. Достаточно большие линейные размеры, препятствующие использованию методов, базирующихся на микроподходе.
2. Большое влияние поверхностных процессов на результат работы (увеличивающийся с уменьшением радиуса каналов).
3. Существенную неравновесность большинства процессов, что ограничивает использование методов, базирующихся на макроподходе.

Таким образом, при моделировании работы микрофлюидных устройств требуется учитывать несколько противоречивых требований, что делает практически невозможным моделирование в рамках одноуровневого подхода.

В данной работе предлагается использовать метод МД для моделирования процессов на микроуровне (в первую очередь на границе раздела газ-твёрдое тело), с целью получения исходных данных для моделей большего масштаба, в роли которых могут выступать как стохастические имитационные модели, так и системы дифференциальных уравнений, описывающих химические процессы и массоперенос. Пример такого рода модели ранее был рассмотрен авторами в работе [3].

## 2. Связь микро- и макроподходов

Макроскопические модели течения газов используют в качестве входных параметров кинетические коэффициенты (вязкости, теплопроводности, длины свободного пробега и др.). Для объемной составляющей течения эти параметры можно с достаточной точностью определить исходя из уравнений состояния и известных экспериментальных данных. Однако, при уменьшении геометрических размеров исследуемого канала, увеличивается доля приповерхностных течений, следовательно, возрастает значимость ошибок, связанных с неточностью задания граничных условий. Т.к. взаимодействие газовой фазы с материалом стенок в реальных физических системах осложнены такими явлениями, как физическая и химическая адсорбции, проникновение частиц газа в материал поверхности и возможное выбивание наночастиц поверхности, коэффициенты аккомодации [4,5] для таких систем априори неизвестны, но могут быть определены исходя из экспериментальных данных (что возможно только для ограниченного диапазона температур и давлений), или получены как результат имитационного моделирования системы на микроуровне.

## 3. Модель молекулярной динамики

В модели молекулярной динамики поведение ансамбля частиц вычисляется путем решения системы уравнений движения классической механики:

$$\frac{d^2 \vec{r}_i}{dt^2} = \frac{\vec{f}_i}{m_i}, \quad (1)$$

где

$$\vec{f}_i = -\vec{\nabla}U(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = \sum_{\substack{j=1..N \\ j \neq i}}^N \left( \frac{\vec{r}_{ij}}{|\vec{r}_{ij}|} F(|\vec{r}_{ij}|) \right), \quad \vec{r}_{ij} = \vec{r}_j - \vec{r}_i. \quad (2)$$

Наборы конфигураций, получаемые в ходе расчетов методом молекулярной динамики, распределены в соответствии с некоторой статистической функцией, например, отвечающей микроканоническому распределению [6].

Для реализации взаимодействия между частицами системы в данной работе используется потенциал парного взаимодействия Леннард-Джонса 6-12 (ПЛД):

$$U(r) = 4\varepsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right], \quad r = |\vec{r}_{ij}|, \quad (3)$$

где  $\varepsilon$  – глубина потенциальной ямы в равновесном состоянии,  $\sigma$  – характерный ван-дер-ваальсов диаметр молекулы,  $r$  – расстояние между центрами частиц [7,8].

При исследовании течения двухкомпонентной газовой смеси вблизи поверхности необходимо учитывать взаимодействия между разными типами частиц. Расчета коэффициентов ПЛД для такого рода взаимодействий рассчитывается по правилу Бергто-Лоренца[9].

$$\varepsilon_{AB} = \sqrt{\varepsilon_A \cdot \varepsilon_B}; \quad \sigma_{AB} = 0.5(\sigma_A + \sigma_B). \quad (4)$$

Здесь индексы А и В соответствуют различным типам частиц.

Параметры используемой в работе модели модели:

- взаимодействие по потенциалу Леннард-Джонса 6-12;
- кол-во частиц газа-носителя в модельной ячейке 8192;
- периодические граничные условия по осям X и Y (параллельным поверхности), упруго отражающая граница по оси Z.

Постановка эксперимента:

1. в зоне генерации тестовых частиц инициируется частица с заданными параметром энергии и углом падения  $\alpha$  (относительно нормали к поверхности);
2. происходит расчет траекторий движения всех частиц системы;
3. при достижении частицей области *адсорбированного состояния* начинается отсчет времени удержания (если частица попадает в данную область несколько раз, времена суммируются);
4. моделирование заканчивается по достижении тестовой частицей *верхней границы ячейки моделирования*;

5. поверхность задается набором сферических частиц связанных между собой и точками равновесия потенциалами упругого взаимодействия.

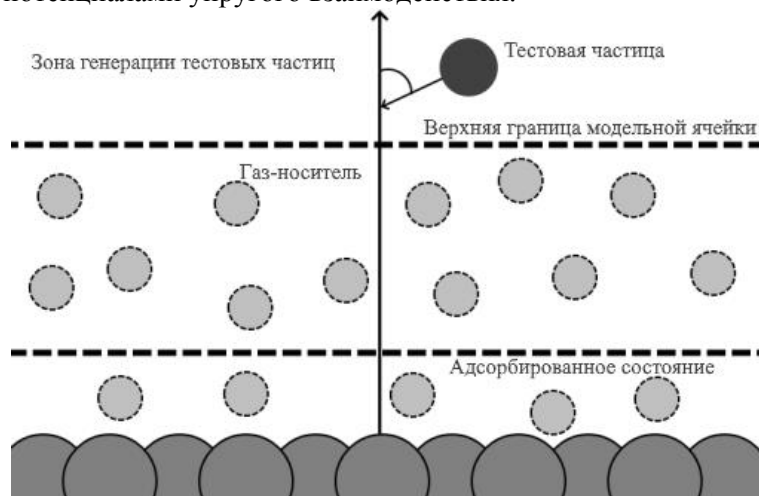


Рисунок 1. Схема модельной ячейки.

Обработка результатов:

- эксперимент проводится от  $10^2$  до  $10^5$  раз;
- строятся распределения выходных данных в зависимости от угла падения и начальной энергии частицы.

Выходные данные эксперимента: 1) время удержания (нахождения в адсорбированном состоянии); 2) время возврата частицы; 3) угол возврата (относительно нормали к поверхности); 4) итоговая энергия.

#### 4. Результаты моделирования

Одним из ключевых параметров для моделирования работы микрофлюидных устройств с помощью методов, базирующихся на макроподходе является среднее время удержания частиц в адсорбированном состоянии. На рисунке 2 приведен результат расчета данной величины в зависимости от угла падения частицы в приповерхностный слой.

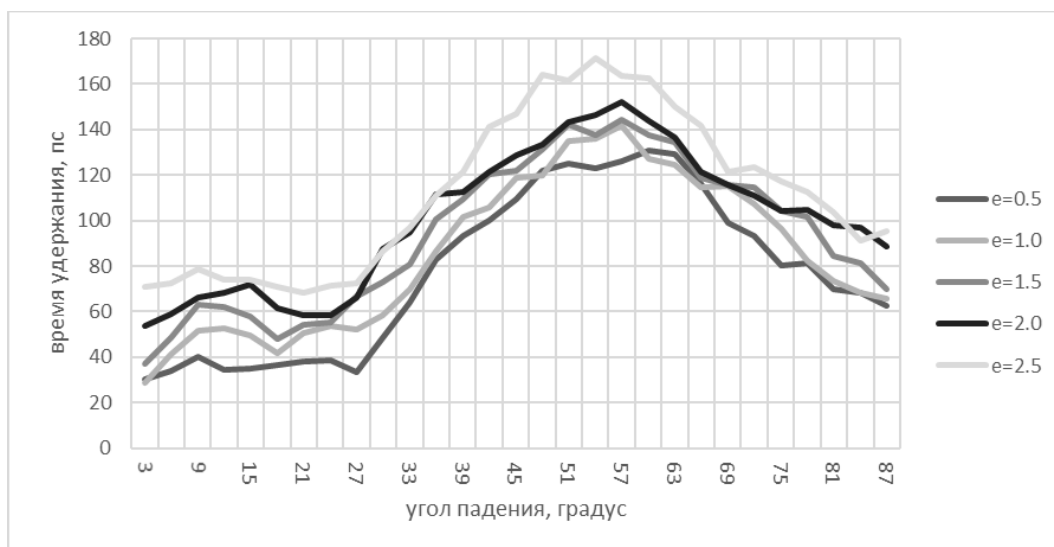


Рисунок 2. Пример зависимости среднего времени удержания частиц от угла падения.

Исходя из формы зависимости можно выделить диапазоны углов, при которых происходит преимущественно упругое отражение частиц.

В рамках рассмотренного подхода возможен расчет достаточно широкого круга параметров, например, коэффициентов аккомодации, являющихся исходными данными для моделей, базирующихся на макроподходе. Следует особо отметить возможность учета в рамках предложенного подхода влияния параметров топологии поверхности на наноуровне (в частности параметров нанопор), что в рамках макроподхода представляет значительную трудность.

## 5. Заключение

Предложен вариант использования метода молекулярной динамики для получения параметров макромоделей описывающих процессы в микрофлюидных системах. Показана возможность вычисления времени удержания частиц в адсорбированном состоянии в зависимости от параметров потока и наноструктуры поверхности.

## 6. Литература

- [1] [Electronic resource]. – Access mode: [http://www.j-analytics.ru/files/article\\_pdf/6/article\\_6128\\_791.pdf](http://www.j-analytics.ru/files/article_pdf/6/article_6128_791.pdf)
- [2] Григорьев, И.С. Физические величины: справочник / И.С. Григорьев, Е.З. Мейлихов – М.: Энергоатомиздат, 1991. – 1232 с.
- [3] Potienko, K.I. Study of the separation processes of gases in the microchannel based on the stochastic simulation / K.I. Potienko, A.N. Agafonov // Journal of Physics: Conference Series. – 2019. – Vol. 1368. – P. 2-11.
- [4] Брунауэр, С. Адсорбция газов и паров. Том 1. Физическая адсорбция – М.: ГИИЛ, 1948.
- [5] Абрамович, Г.Н. Прикладная газовая динамика. Ч. 1 – М.: Наука, 1991.
- [6] Vesely, F.J. Computational Physics. An Introduction – Plenum, New York, 1994.
- [7] Haile, J.M. Molecular dynamics simulations: elementary methods – New York: Wiley, 1992.
- [8] Ciccotti, G. Molecular-dynamics simulation of statistical-mechanical systems / G. Ciccotti, W.G. Hoover – Amsterdam: Elsevier, 1986.
- [9] Frenkel, D. Understanding molecular simulation: from algorithm to applications / D. Frenkel, B. Smit – San Diego: Academic Press, 2002.

# Using molecular dynamics model for studying processes in microfluidic devices

A.N. Agafonov<sup>1</sup>, A.V. Eremin<sup>1</sup>, K.I. Milanina<sup>1</sup>, V. M. Gavrilov<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Samara National Research University, Moskovskoe Shosse 34A, Samara, Russia, 443086

**Abstract.** The article considers the possibility of using the molecular dynamics (MD) technic as part of multi-level models for describing processes in microfluidic devices. Particular attention is paid to issues related to the use of MDs to describe processes at a gas-solid interface.