



Рисунок 30 – Задача об адсорбции на поверхность микросферы, движущейся относительно потока жидкости; зависимость поверхностной концентрации свободных сайтов связывания от времени при скорости течения $U = 0.1\text{мм}/\text{с}$ (**слева**) и $U = 1\text{мм}/\text{с}$ (**справа**); линейные участки экстраполированы (**пунктир**), для них подписаны уравнения вида $y = ax + b$

4. Материалы и методы

В данной работе использовалось программное обеспечение COMSOL Multiphysics™ версии 5.6. Для расчёта диффузии был использован интерфейс Transport of Diluted Spices. Для расчёта конвекции — Transport of Diluted Spices и Laminar Flow. Для расчёта адсорбции — Transport of Diluted Spices и Surface Reactions.

Для расчётов была использована виртуальная машина на 12 ядер процессора и 16 Gb оперативной памяти.

5. Результаты

В данной работе средствами COMSOL Multiphysics™ были получены модели конвекции-диффузии-адсорбции для микроканала с плоской стенкой, по которому проходит раствор с целевым маркером, и для микросфер, находящихся в растворе с целевым маркером.

Для модели адсорбции на плоскую поверхность микроканала были рассмотрены случаи, когда канал имеет бесконечную высоту и профиль скорости течения определяется величиной скорости течения в глубине раствора, и случай, когда канал имеет конечную высоту, а профиль скорости течения определяется геометрией канала с точностью до множителя (средней или максимальной скорости течения в канале). Задача была рассмотрена в двух постановках: двумерной и одномерной, где вторую можно считать приближением первой. Для этого были использованы представления о диффузионном и вязкостном граничных слоях. Оказалось, что уменьшение толщины вязкосного слоя, связанное с уменьшением высоты канала не приводит к пропорциональному уменьше-

нию диффузионного слоя. В одномерной постановке были дополнительно рассмотрены влияние примеси на кинетику связывания целевого маркера и влияние неспецифического связывания на регистрируемый биосенсором сигнал.

Для модели адсорбции на поверхность микросфер были рассмотрены случаи, когда отсутствует течение жидкости относительно микросфер и когда скорость этого течения отлична от нуля. В отсутствие течения был проверен размер микросфер, а при наличии течения — скорость течения.

6. Выводы

В работе получены модели, позволяющие рассчитать массоперенос в канале микрофлюидного чипа с плоской стенкой и массоперенос из раствора на поверхность флуоресцентных микросфер.

Модель адсорбции на плоскую поверхность позволяет рассчитать влияние примеси на кинетику адсорбции целевого маркера, а также влияние неспецифической адсорбции на форму снимаемого сигнала биосенсора. Также возможен расчёт влияния скорости течения жидкости вдоль поверхности канала и высоты канала на скорость адсорбции.

Модель адсорбции на поверхность микросфер позволяет рассчитывать влияние скорости течения жидкости относительно микросфер и размера микросфер на время насыщения поверхности микросфер.

Данные модели лягут в основу дальнейших расчётов — как тех, которые позволяют уделешевить и ускорить проектирование микрофлюидных систем, т. к. создание компьютерной модели дешевле и быстрее, чем создание реального устройства, что существенно упрощает прототипирование; так и расчётов, связанных с решением обратных задач, что сделает возможным использование биосенсора для определения параметров, характеризующих взаимодействие исследуемых веществ.

7. Благодарности

Автор этой работы выражает благодарность своему научному руководителю Басманову Д. В. за чуткое и терпеливое руководство, своему старшему коллеге Прусакову К. А. за неоценимую помощь на всех этапах выполнения работы.