Вестник ВГУИТ/ Proceedings of VSUET ISSN 2226-910X E-ISSN 2310-1202
DOI: http://doi.org/10.20914/2310-1202-2026-2-371-378 Оригинальная статья/Research article
УДК 004.942 Open Access Available online at vestnik-vsuet.ru

Моделирование процесса образования полимерных капель в микрофлюидном устройстве X-типа

Анастасия Ю. Рылькова [1] rylkovanas@mail.ru 0009-0008-5688-8017
Сергей В. Сорокин [1] sorokin.s.v@list.ru 0009-0009-6475-0816
Елена В. Гусева [1] guseva.e.v@muctr.ru 0000-0002-6835-4513

1 Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева, пл. Миусская, 9, г. Москва, 125047, Россия

Аннотация. В данной работе изучен процесс образования полимерных капель в микрофлюидном устройстве X-типа методом одностадийного эмульгирования двух несмешивающихся фаз, из эмульсии которых путем удаления остаточного растворителя на роторном испарителе формируются полимерные наночастицы. Было проведено математическое моделирование процесса образования полимерных капель в каналах микрофлюидного устройства X-типа с использованием метода конечных разностей или конечных объемов в пакете программ вычислительной гидродинамики ANSYS Fluent 16.1. Данный метод решает единый набор уравнений сохранения для обеих фаз, отслеживая объемную долю сплошной и дисперсной фаз во всей расчетной области. Приведено математическое описание гидродинамического режима потоков сплошной и дисперсной фаз внутри микрофлюидного устройства. Модель учитывает поверхностное натяжение на границе двух фаз и смачиваемость стенок каналов. Кроме того, изучен процесс формирования полимерных наночастиц из образованной в микрофлюидном устройстве эмульсии капель методом испарения органического растворителя. Приведены расчеты размера наночастиц с учетом размера капель и коэффициента агрегации *A*, учитывающего коалесценцию между получаемыми в микрофлюидном устройстве полимерными каплями. Было проведено сравнение результатов эксперимента и моделирования и установлена относительная ошибка вычисления модели. Приведены результаты расчета размера наночастиц при различных вариантах соотношения расхода потоков дисперсной и сплошной фаз. На основании вычислительного эксперимента были определены значения расходов сплошной и дисперсной фаз, соотношение которых приводит к образованию наночастиц с размером, лежащим внутри требуемого диапазона. Разработанная математическая модель позволяет прогнозировать образование полимерных капель и, в дальнейшем, наночастиц необходимого размера.

Ключевые слова: микрофлюидное устройство X-типа, полимерные капли, математическое моделирование, ANSYS Fluent, гидродинамика.

Modeling of the formation process of polymer droplets in an X-type microfluidic device

Anastasia Yu. Rylkova [1] rylkovanas@mail.ru 0009-0008-5688-8017
Sergei V. Sorokin [1] sorokin.s.v@list.ru 0009-0009-6475-0816
Elena V. Guseva [1] guseva.e.v@muctr.ru 0000-0002-6835-4513

1 Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Miusskaya square, 9 Moscow, 125047, Russia

Abstract. In this work, the process of formation of polymer droplets in an X-type microfluidic device was studied by the method of one-step emulsification of two immiscible phases, from the emulsion of which polymer nanoparticles are formed by removing the residual solvent on a rotary evaporator. Mathematical modeling of the formation of polymer droplets in the channels of an X-type microfluidic device was carried out using the finite difference or finite volume method in the computational fluid dynamics software package ANSYS Fluent 16.1. This method solves a single set of conservation equations for both phases, tracking the volume fraction of the continuous and dispersed phases throughout the computational domain. A mathematical description of the hydrodynamic regime of flows of continuous and dispersed phases inside a microfluidic device is given. The model takes into account the surface tension at the interface between two phases and the wettability of the channel walls. In addition, the process of formation of polymer nanoparticles from a droplet emulsion formed in a microfluidic device by evaporation of an organic solvent was studied. Calculations of the size of nanoparticles are presented taking into account the size of the droplets and the aggregation coefficient *A*, which takes into account the coalescence between the polymer droplets obtained in the microfluidic device. The results of experiment and simulation were compared and the relative calculation error of the model was established. The results of calculating the size of nanoparticles for various variants of the ratio of flow rates of dispersed and continuous phases are presented. Based on a computational experiment, the flow rates of the continuous and dispersed phases were determined, the ratio of which leads to the formation of nanoparticles with a size lying within the required range. The developed mathematical model makes it possible to predict the formation of polymer droplets and, subsequently, nanoparticles of the required size

Keywords: X-type microfluidic device, polymer droplets, mathematical modeling, ANSYS Fluent, hydrodynamics.

Для цитирования
Рылькова А.Ю., Сорокин С.В., Гусева Е.В. Моделирование процесса образования полимерных капель в микрофлюидном устройстве X-типа // Вестник ВГУИТ. 2026. Т. 88. № 2. С. 371–378. doi:10.20914/2310-1202-2026-2-371-378

For citation
Rylkova A.Y., Sorokin S.V., Guseva E.V. Modeling of the formation process of polymer droplets in an X-type microfluidic device. Vestnik VGUIT [Proceedings of VSUET]. 2026. vol. 88. no. 2. pp. 371–378. (in Russian). doi:10.20914/2310-1202-2026-2-371-378

© 2026, Рылькова А.Ю. и др. / Rylkova A.Y. et al.
This is an open access article distributed under the terms of the Creative Commons Attribution 4.0 International License

Введение

Микрофлюидные технологии, или «лаборатория-на-чипе», основаны на работе с небольшим объёмом жидкости, порядка микро- и нанолитра. Ключевым преимуществом использования данных технологий является возможность точного контроля и управления процессами, что обеспечивает высокую воспроизводимость, снижение расхода реагентов и миниатюризацию экспериментальных установок [1]. Течение потоков в ламинарном режиме позволяет избегать колебаний значений концентрации, скорости, температуры и давления во времени. Высокое значение отношения площади поверхности к объёму в микрофлюидных устройствах способствует интенсивному массо- и теплообмену, что хуже реализовано в макроскопических объёмах, где преобладают стохастические процессы.

В настоящее время использование данных технологий для осуществления процессов смешения и диспергирования является перспективным направлением и имеет широкий спектр применения в таких областях науки, как «лаборатория-на-чипе», химический, биологический синтезы и синтез наноструктурированных материалов [2–5].

Механизм образования наночастиц из капель эмульсии микрометрового размера путём испарения растворителя является широко используемым и заключается в диспергировании системы несмешивающихся фаз «жидкость-жидкость» [6, 7]. Основным преимуществом метода является отсутствие в конечных коллоидных системах таких примесей, как остаточный токсичный мономер, непрореагировавший агент или катализатор, что важно для применения в фармацевтике, поэтому процесс широко используется для синтеза биоразлагаемых микрочастиц [8], для наночастиц из полимеров полупроводникового состава [9] или полукристаллического состава [10] и для окислительно-восстановительных нанокапсул [11].

Основной проблемой при получении полимерных частиц является невозможность контролировать процессы смешения, необходимые для их синтеза, что приводит к изменению их физико-химических свойств [12]. В связи с этим, использование микрофлюидных технологий позволяет обеспечить точный контроль размера образующихся капель с учётом варьирования таких параметров процесса как скорости подачи потоков в каналы микрофлюидного устройства и состава контактирующих фаз. Кроме того, можно контролировать полидисперсность и, например, загрузку лекарственного вещества и его высвобождение из капель [13, 14].

При моделировании процесса образования капель в микрофлюидном чипе для описания течения потока жидкости используются уравнения Навье–Стокса и уравнение неразрывности [15]. Математическое моделирование на основе методов конечных разностей или конечных объемов, которые входят в методы вычислительной гидродинамики (CFD), позволяет получить решение дискретных уравнений при помощи регулярной структурированной сетки, которое приводит к простым, точным и надежным численным системам, подходящим к прямоугольной геометрии [16, 17]. Возможность использования данных методов представлена в коммерческом пакете программ ANSYS Fluent.

Цель работы – разработка математической модели процесса образования полимерных капель в каналах микрофлюидного устройства Х-типа с заданным размером.

Материалы и методы

Для изучения процесса образования капель в микрофлюидном устройстве Х-типа были использованы экспериментальные данные исследования по получению полимерных наночастиц методом эмульгирования с последующим удалением растворителя [18]. Для проведения процесса использовалась установка компании Dolomite Microfluidics, схематичное изображение которой представлено на рисунке 1. Растворы, представляющие собой сплошную и дисперсную фазы, подаются согласно схеме в микрофлюидное устройство. В нём происходит образование полимерных капель, после чего образцы собираются в сосуд. Далее на роторном испарителе выпаривается остаточный растворитель до получения полимерных наночастиц.

В процессе формирования капель эмульсии при получении полимерных наночастиц методом эмульгирования-испарения в качестве двух несмешивающихся фаз были задействованы следующие растворы: вода и 5 мл этанола с добавлением 2% поливинилового спирта (ПВС) – сплошная фаза; и дихлорметан с растворенным в нем полимером Resomer® RG 502H (Poly(D, L-lactide-co-glycolide) acid terminated, Mw 7,000–17,000, Evonik Röhm GmbH, Германия) (PLGA) – дисперсная фаза. Физико-химические свойства данных фаз представлены в таблице 1.

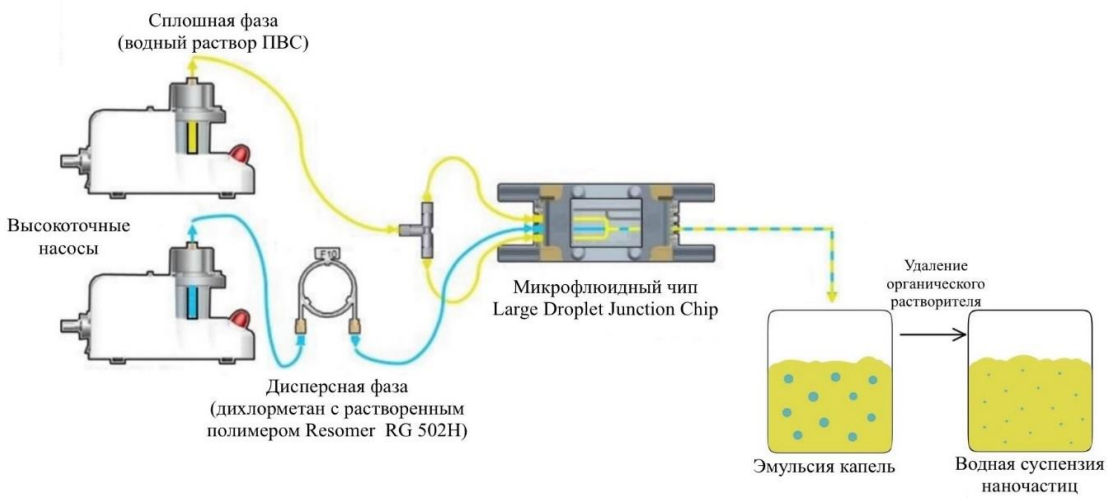

Рисунок 1. Общая схема установки Dolomite Microfluidics для получения полимерных капель с использованием микрофлюидного устройства

Figure 1. General scheme of the Dolomite Microfluidics installation for producing polymer droplets using a microfluidic device

Таблица 1.

Параметры для исследования процесса образования полимерных капель в каналах микрофлюидного устройства

Table 1.

Parameters for studying the process of polymer droplet formation in the channels of a microfluidic device

Параметр Parameter	Сплошная фаза Continuous phase	Дисперсная фаза Dispersed phase
Состав | Composition	Водный раствор ПВС 2% масс. Aqueous solution of PVA 2% by weight.	Полимер PLGA в дихлорметане PLGA polymer in dichloromethane
Объёмная скорость потока, мкл/мин Volumetric flow rate, μl/min	200	3,2
Плотность, кг/м^3 | Density, kg/m^3	997	1327
Динамическая вязкость, Па×с Dynamic viscosity, Pa×s	1327	0,0067
Коэффициент поверхностного натяжения, мН/м Surface tension coefficient, mN/m	2,53	

Полимер Resomer® RG 502H (PLGA), содержащийся в дисперсной фазе, имеет широкое применение в системах доставки лекарственных веществ, так как это биоразлагаемый и биодоступный полимер [19]. Водно-спиртовой раствор, содержащий 2% ПВС, применяется в качестве ПАВ и является структурно-механическим стабилизатором, предотвращая агрегацию получаемых частиц.

При помощи метода одностадийного эмульгирования с последующим испарением растворителя были получены полимерные наночастицы со средним размером 152 нм и с полидисперсным индексом, равным 0,08. Наночастицы обладают хорошей биоразлагаемостью и биодоступностью в организме человека, что является перспективным направлением исследования в сфере инкапсулирования лекарственных веществ.

Математическое моделирование

Для математического моделирования описанных процессов методом вычислительной гидродинамики был выбран пакет программ ANSYS Fluent 16.1. В первую очередь, необходимо построить геометрическую модель, полностью отражающую геометрические особенности и размеры объекта (рисунок 2). Затем формируется расчётная сетка, которая распределяется по всей площади и объёму объекта. После построения сгенерированной сетки необходимо провести настройку модели: выбрать метод решения задачи, граничные условия и параметры процесса. Затем происходит расчёт процесса и анализ полученных результатов.

В программном пакете ANSYS Fluent представлены варианты построения модели в дву- и трехмерном пространстве.

Для моделирования микрофлюидного чипа планарной геометрии допустимо решение двумерной задачи, что существенно сокращает объём вычислений по сравнению с трёхмерной.

Таким образом, была построена 2D-геометрия сечения каналов с обозначением граничных условий на входе и выходе из них и сгенерирована четырехугольная конечно-элементарная расчётная сетка, состоящая из 7090 узлов и 6844 элементов (рисунок 3).

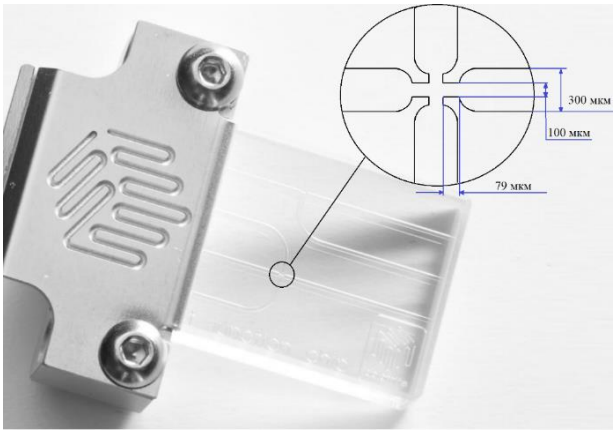

Рисунок 2. Микрофлюидный чип Large Droplet Junction Chip компании Dolomite Microfluidics, использующийся для получения эмульсии капель

Figure 2. Dolomite Microfluidics' Large Droplet Junction Chip, used to produce droplet emulsions

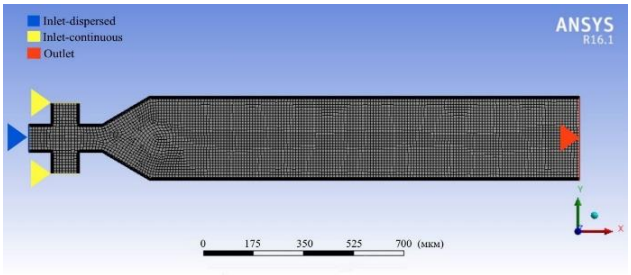

Рисунок 3. Геометрическая 2D-модель каналов микрофлюидного устройства Х-типа с граничными условиями и расчетной сеткой

Figure 3. Geometric 2D model of X-type microfluidic device channels with boundary conditions and computational grid

Для моделирования процесса образования полимерных капель в каналах микрофлюидного устройства был использован метод конечных объемов Volume of Fluid, который решает единый набор уравнений сохранения для обеих фаз, отслеживая объёмную долю сплошной и дисперсной фаз во всей расчётной области.

Уравнение сохранения массы для сплошной фазы:

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(a_2\rho_2\right)+\nabla\left(a_2\rho_2\overrightarrow{u_2}\right)=0, \qquad (1)$$

уравнение сохранения массы для дисперсной фазы:

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(a_2\rho_2\right)+\nabla\left(a_2\rho_2\overrightarrow{u_2}\right)=0, \qquad (2)$$

уравнение сохранения импульса для сплошной фазы:

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\rho_1\overrightarrow{u_1}\right)+\nabla\left(\rho_1\overrightarrow{u_1}\overrightarrow{u_1}\right)= =-\nabla p_1+\nabla\left[\mu_1\left(\nabla\overrightarrow{u_1}\nabla\overrightarrow{u_1}^T\right)\right]+\overrightarrow{F_{st}}+\rho\vec{g}, \qquad (3)$$

уравнение сохранения импульса для дисперсной фазы:

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\rho_2\overrightarrow{u_2}\right)+\nabla\left(\rho_2\overrightarrow{u_2}\overrightarrow{u_2}\right)= =-\nabla p_2+\nabla\left[\mu_2\left(\nabla\overrightarrow{u_2}\nabla\overrightarrow{u_2}^T\right)\right]+\overrightarrow{F_{st}}+\rho\vec{g}, \qquad (4)$$

где a_1, a_2 – объемная доля заполнения сплошной и дисперсной фаз в ячейке, соответственно, об. доли; ρ_1, ρ_2 – плотность сплошной и дисперсной фаз, соответственно, кг/м^3; $\overrightarrow{u_1}, \overrightarrow{u_2}$ – вектор скорости потока сплошной и дисперсной фаз, соответственно, м/с; $\nabla p_1, \nabla p_2$ – градиент давления сплошной и дисперсной фаз, соответственно, Па; μ_1, μ_2 – динамическая вязкость сплошной и дисперсной фаз, соответственно, кг / (м×с); $\overrightarrow{F_{st}}$ – сила поверхностного натяжения, кг×м/с^2.

Первый член в левой части уравнений 1 и 2 описывает изменение массы каждой фазы в объёме со временем, а второй член данных уравнений – перенос массы за счёт движения. В процессе эмульгирования несмешивающихся жидкостей массообмен между фазами равен нулю, так как фазовых переходов или химических превращений в канале микрофлюидного устройства не происходит.

Первый член в левой части уравнений 3 и 4 описывает скорость изменения количества движения в фиксированной точке пространства со временем и показывает, насколько быстро меняется импульс в определённой ячейке расчётной сетки. Второй член данных уравнений в левой части описывает дивергенцию потока импульса, то есть перенос импульса за счёт самого движения жидкостей.

В правой части члены уравнений 3 и 4 показывают какие силы действуют на исследуемые жидкости. Градиенты давления ∇p_1 и ∇p_2 – это силы, вызванные разностью давлений, которая создаётся шприцевыми насосами, подающими жидкости в каналы микрофлюидного чипа, а также в Х-пересечении каналов, где сплошная фаза сжимает полимерный поток за счёт своего давления и способствует сужению потока дисперсной фазы и отрыву капли.

Второй член уравнений 3 и 4 в правой части описывает дивергенцию тензора вязких напряжений. Это силы внутреннего трения между слоями жидкостями. Член $\rho\vec{g}$ – сила тяжести, действующая на массу жидкости. Ключевая для формирования и отрыва капель является сила поверхностного натяжения на границе раздела фаз F_{st}, которая описывается уравнением 5:

$$F_{st} = \sigma k n, \quad (5)$$

где σ – коэффициент поверхностного натяжения, Н/м; k – локальная кривизна поверхности раздела, м$^{-1}$; n – локальный вектор нормали к границе раздела, вычисляемый по градиенту объемной доли жидкости, м$^{-1}$:

$$n = \nabla \alpha_i, \quad (6)$$

где a_i – объемная доля заполнения сплошной $i=1$ и дисперсной $i=2$ фаз в ячейке, об. доля.

Усредненные по объёму свойства определяются в терминах объёмных долей сплошной α_1 и дисперсной α_2 фаз следующим образом:

$$\rho = \alpha_2\rho_2 + (1-\alpha_2)\rho_1, \quad (7)$$

$$\mu = \alpha_2\mu_2 + (1-\alpha_2)\mu_1. \quad (8)$$

Объёмная доля заполнения сплошной и дисперсной фаз в ячейке рассчитывается из:

$$\sum \alpha_i = 1; i = 1, 2. \quad (9)$$

Для $\alpha_i = 0$ предполагается, что ячейка лишена i-ой фазы, а $\alpha_i = 1$ указывает, что ячейка полностью заполнена i-ой фазой. Следовательно, ячейка, содержащая границу раздела между двумя фазами, определяется диапазоном объемной доли $0 < \alpha_i < 1$.

Начальные и граничные условия

В двумерной постановке задачи у каналов микрофлюидного чипа две характеристики – длина и ширина. Начальными условиями являются линейные скорости фаз и начальное положение границы раздела фаз. Граничные условия в данной задаче – это условия входа и выхода фаз, а также условия на стенках канала (рисунок 3). Граничные условия Inlet-dispersed и Inlet-continuous указаны для входа дисперсной и сплошной фаз соответственно и имеют тип Velocity-inlet, который задает линейную скорость потоков на входе в канал. Граничное условие Outlet является общим для обеих фаз и задается на границе выхода из канала микрофлюидного устройства. Оно имеет условие Pressure и задается значением, равным 0 атм. На стенках канала устанавливается условие прилипания, характеризующееся нулевой скоростью. Было введено допущение, что материал стенок идеально смачивается сплошной фазой, т. е. угол смачивания равен 0°, и абсолютно не смачивается дисперсной фазой, для которой угол смачивания равен 180°.

Результаты и обсуждение

На рисунке 4 представлен результат математического моделирования процесса формирования полимерных капель в каналах микрофлюидного устройства Х-типа при помощи пакета программ вычислительной гидродинамики Ansys Fluent 16.1.

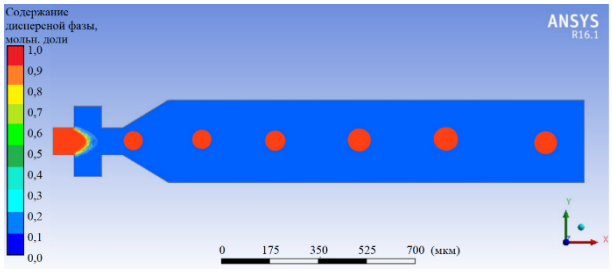

Рисунок 4. Результат математического моделирования процесса образования полимерных капель в каналах микрофлюидного устройства

Figure 4. The result of mathematical modeling of the process of formation of polymer droplets in the channels of a microfluidic device

Был рассчитан средний размер капель, образовавшихся в канале микрофлюидного устройства, равен 87 мкм, и полидисперсный индекс, равный 0,002.

Наночастицы образуются путем выпаривания на роторном испарителе остаточного растворителя из полимерных капель. Для определения размера наночастиц можно последовательно рассчитать массу полимера в наночастице, массу полимера в каплях с учетом коэффициент агрегации полимера [20, 21]. Так как наночастицы можно рассматривать как непористые сферы, то массу полимера (m_p) в наночастице ($m_{p/НЧ}$) можно рассчитать следующим образом:

$$m_{p/\text{НЧ}} = \rho\left(\pi/6 d_{\text{НЧ}}{}^3\right), \quad (10)$$

где $m_{p/НЧ}$ – масса полимера в наночастицах, мг; ρ – плотность полимера в наночастицах, мг/см^3; $d_{НЧ}$ – диаметр наночастицы, мкм.

Аналогичным образом можно определить массу полимера в каплях ($m_{p/капли}$):

$$m_{p/\text{капли}} = c\left(\pi/6 d_{\text{капли}}{}^3\right), \quad (11)$$

где $m_{p/капли}$ – масса полимера в каплях, мг; ρ – плотность полимера в наночастицах, мг/см^3; c – концентрация полимера в дисперсной фазе, мг/мл; $d_{капли}$ – диаметр капли, мкм.

Для пересчета диаметра капли в диаметр наночастицы можно использовать коэффициент агрегации A, который определяется как среднее число капель, необходимое для образования одной полимерной наночастицы, и рассчитывается по формуле 12:

$$A = m_{р/НЧ} / m_{р/капли} = \rho \Big/ \left(c \left(d_{капли} / d_{НЧ} \right)^3 \right), \quad (12)$$

где A – коэффициент агрегации, б/р; $m_{р/НЧ}$ – масса полимера в наночастицах, мг; $m_{р/капли}$ – масса полимера в каплях, мг; ρ – плотность полимера в наночастицах, мг/см^3; c – концентрация полимера в дисперсной фазе, мг/мл; $d_{капли}$ – средний диаметр капли, мкм; $d_{НЧ}$ – средний диаметр наночастицы, мкм.

Принимая, что для PLGA наночастиц коэффициент агрегации A равен 4×10-6 и не зависит от вязкости [21], диаметр наночастицы можно посчитать по формуле (13):

$$d_{НЧ} = \sqrt[3]{d_{капли}{}^3 cA / \rho}. \quad (13)$$

В табл. 2 приведены параметры, необходимые для расчета среднего размера наночастиц.

Таблица 2.

Параметры, необходимые для расчета среднего диаметра наночастиц

Table 2.

Parameters required to calculate the average diameter of nanoparticles

Параметр Index	$d_{капли}$, мкм	c, мг/мл	ρ, кг/м^3	A
Значение Value	87	2	1327	4×10^{-6}

Тогда расчетный средний диаметр наночастиц с учетом найденного при моделировании диаметра капли равен 158 нм. Средний размер наночастиц в эксперименте составил 152 нм. Относительная ошибка между значением диаметра наночастиц, полученным в эксперименте, и значением диаметра наночастиц, найденным при пересчете из диаметра капли, полученного из модели в Ansys Fluent, равна 4%.

Были проведены расчеты для исследования различных соотношений потоков дисперсной и сплошной фаз на входе в каналы микрофлюидного устройства с целью определения диапазонов изменения потоков и образования при этом капель и, в дальнейшем, наночастиц соответствующего размера.

В таблице 3 приведены результаты расчета диаметров при различных вариантах соотношения расхода потоков дисперсной и сплошной фаз. По сплошной фазе был выбран шаг в 50 мкл/мин, а по дисперсной – 5 мкл/мин. Если при пересчете диаметра капли в диаметр наночастицы диаметр наночастицы был равен меньше 100 нм и больше 500 нм, то данное соотношение расхода потоков дисперсной и сплошной фаз не рассматривалось, и в таблицу 3 значение не вносилось (–). Данный диапазон размеров наночастиц является оптимальным для эффективного улавливания макрофагами и попадания в клетку в исследованиях онкологических заболеваний. Кроме того, рассматривалось образование капель только сферического вида, поэтому при образовании несферической формы капель в таблицу не вносилось никакого значения (–) при соответствующих соотношениях расхода потоков.

Таблица 3.

Результаты расчета диаметров наночастиц при различных вариантах соотношения расходов потоков дисперсной и сплошной фаз

Table 3.

Results of calculation of nanoparticle diameters for different variants of the ratio of flow rates of dispersed and continuous phases

Диаметр, нм ↘		Объемный расход дисперсной фазы, мкл/мин Volumetric flow rate of dispersed phase, μl/min						
		5	10	15	20	25	30	35
Объемный расход сплошной фазы, мкл/мин Volumetric flow rate of continuous phase,	50	204	-	-	-	-	-	-
	100	200	184	-	-	-	-	-
	150	192	176	175	-	-	-	-
	200	183	168	174	164	-	-	-
	250	175	161	176	160	152	-	-
	300	166	155	168	154	145	135	-
	350	158	146	161	147	140	131	125
	400	149	138	153	142	134	127	124
	450	141	131	146	136	128	122	123
	500	132	123	138	130	123	121	122
	550	124	115	130	123	117	119	122
	600	115	108	123	116	112	115	117
	650	106	105	115	110	106	112	113
	700	104	102	108	107	104	108	109
	750	100	100	106	104	103	104	104
	800	-	-	103	102	100	108	100
	850	-	-	102	101	101	107	-
	900	-	-	-	-	100	106	-
	950	-	-	-	-	-	104	-
	1000	-	-	-	-	-	101	-

В результате расчета были получены размеры PLGA наночастиц в пределах заданного интервала. Из результатов, представленных в таблице 3, видно, что при малых значениях потока сплошной фазы капли либо не образуются ((–) в таблице), либо имеют наибольшее значение диаметра наночастиц. При увеличении расхода подачи потока сплошной фазы размер капель уменьшается, так же, как и с увеличением объемного расхода дисперсной фазы. Таким образом, данный расчет позволяет подобрать требуемые значения соотношения расходов потоков дисперсной и сплошной фаз для получения капель и в дальнейшем наночастиц нужного размера.

Заключение

Исследован процесс образования полимерных наночастиц методом эмульгирования-испарения с использованием микрофлюидного устройства Х-типа. Было проведено математическое моделирование процесса образования полимерных капель в каналах микрофлюидного устройства, модель которого была разработана при помощи пакета программ ANSYS Fluent 16.1. Относительная ошибка составила 4%. Приведены значения среднего диаметра капель и их полидисперсный индекс. Разработанная двумерная модель позволяет подбирать требуемый диапазон рабочих параметров для образования полимерных капель. Кроме того, представлено исследование влияния соотношения потоков дисперсной и сплошной фаз на размер образуемых капель, которое позволяет подобрать требуемые значения расхода потоков дисперсной и сплошной фаз для получения капель и в дальнейшем наночастиц нужного размера.

Литература

1 Tian C., Tu Q., Liu W., Wang J. Recent advances in microfluidic technologies for organ-on-a-chip // TrAC Trends in Analytical Chemistry. 2019. V. 117. P. 146–156.

2 Maurice A., Theisen J., Gabriel J.C.P. Microfluidic lab-on-chip advances for liquid–liquid extraction process studies // Current Opinion in Colloid & Interface Science. 2020. V. 46. P. 20–35.

3 Sohrabi S., Moraveji M.K. Droplet microfluidics: Fundamentals and its advanced applications // RSC Advances. 2020. V. 10. № 46. P. 27560–27574.

4 Ding Y. et al. Recent advances in droplet microfluidics // Analytical Chemistry. 2019. V. 92. № 1. P. 132–149.

5 Abedini-Nassab R., Pouryosef Miandoab M., Şaşmaz M. Microfluidic synthesis, control, and sensing of magnetic nanoparticles: A review // Micromachines. 2021. V. 12. № 7. P. 768.

6 Lepeltier E., Bourgaux C., Couvreur P. Nanoprecipitation and the “Ouzo effect”: Application to drug delivery devices // Advanced Drug Delivery Reviews. 2014. V. 71. P. 86–97.

7 Moinard-Checot D., Chevalier Y., Briançon S., Beney L. et al. Mechanism of nanocapsules formation by the emulsion–diffusion process // Journal of Colloid and Interface Science. 2008. V. 317. № 2. P. 458–468.

8 Nair L.S., Laurencin C.T. Polymers as biomaterials for tissue engineering and controlled drug delivery // Tissue Engineering I. Berlin, Heidelberg: Springer, 2005. P. 47–90.

9 Kietzke T., Neher D., Landfester K., Montenegro R. et al. Novel approaches to polymer blends based on polymer nanoparticles // Nature Materials. 2003. V. 2. № 6. P. 408–412.

10 Staff R.H., Lieberwirth I., Landfester K., Crespy D. Preparation and characterization of anisotropic submicron particles from semicrystalline polymers // Macromolecular Chemistry and Physics. 2012. V. 213. № 3. P. 351–358.

11 Staff R.H., Gallei M., Mazurowski M., Rehahn M. Patchy nanocapsules of poly(vinylferrocene)-based block copolymers for redox-responsive release // ACS Nano. 2012. V. 6. № 10. P. 9042–9049.

12 Karnik R., Gu F., Basto P., Cannizzaro C. et al. Microfluidic platform for controlled synthesis of polymeric nanoparticles // Nano Letters. 2008. V. 8. № 9. P. 2906–2912.

13 Chen Z., Kheiri S., Young E.W., Kumacheva E. Trends in droplet microfluidics: from droplet generation to biomedical applications // Langmuir. 2022. V. 38. № 20. P. 6233–6248.

14 Seeto W.J., Tian Y., Pradhan S., Minond D. et al. Droplet Microfluidics-Based Fabrication of Monodisperse Poly(Ethylene Glycol)–Fibrinogen Breast Cancer Microspheres for Automated Drug Screening Applications // ACS Biomaterials Science & Engineering. 2022. V. 8. № 9. P. 3831–3841.

15 Olenskyj A.G., Feng Y., Lee Y. Continuous microfluidic production of zein nanoparticles and correlation of particle size with physical parameters determined using CFD simulation // Journal of Food Engineering. 2017. V. 211. P. 50–59.

16 Bhatti M.M., Marin M., Zeeshan A., Abdelsalam S.I. Recent trends in computational fluid dynamics // Frontiers in Physics. 2020. V. 8. Art. 593111.

17 Einarsrud K.E. et al. Applied Computational Fluid Dynamics (CFD) // Processes. 2023. V. 11. № 2. P. 461.

18 Merkulova M.A. et al. Easy size control of polymer nanoparticles obtained by emulsification–evaporation technique in a microfluidic reactor // Mendeleev Communications. 2021. V. 31. № 6. P. 899–901.

19 Ekanem E.E. et al. Structured biodegradable polymeric microparticles for drug delivery produced using flow focusing glass microfluidic devices // ACS Applied Materials & Interfaces. 2015. V. 7. № 41. P. 23132–23143.

20 Staff R.H., Schaeffel D., Turshatov A., Donadio D. et al. Particle Formation in the Emulsion-Solvent Evaporation Process // Small. 2013. V. 9. № 20. P. 3514–3522.

21 Desgouilles S., Vauthier C., Bazile D., Vacus J. et al. The design of nanoparticles obtained by solvent evaporation: a comprehensive study // Langmuir. 2003. V. 19. № 22. P. 9504–9510.

References

1 Tian, C., et al. "Recent Advances in Microfluidic Technologies for Organ-on-a-Chip." TrAC Trends in Analytical Chemistry, vol. 117, 2019, pp. 146–156.

2 Maurice, A., J. Theisen, and J.C.P. Gabriel. "Microfluidic Lab-on-Chip Advances for Liquid–Liquid Extraction Process Studies." Current Opinion in Colloid & Interface Science, vol. 46, 2020, pp. 20–35.

3 Sohrabi, S., and M.K. Moraveji. "Droplet Microfluidics: Fundamentals and Its Advanced Applications." RSC Advances, vol. 10, no. 46, 2020, pp. 27560–27574.

4 Ding, Y., P.D. Howes, and A.J. deMello. "Recent Advances in Droplet Microfluidics." Analytical Chemistry, vol. 92, no. 1, 2019, pp. 132–149.

5 Abedini-Nassab, R., et al. "Microfluidic Synthesis, Control, and Sensing of Magnetic Nanoparticles: A Review." Micromachines, vol. 12, no. 7, 2021, p. 768.
6 Lepeltier, E., C. Bourgaux, and P. Couvreur. "Nanoprecipitation and the 'Ouzo Effect': Application to Drug Delivery Devices." Advanced Drug Delivery Reviews, vol. 71, 2014, pp. 86–97.
7 Moinard-Checot, D., et al. "Mechanism of Nanocapsules Formation by the Emulsion–Diffusion Process." Journal of Colloid and Interface Science, vol. 317, no. 2, 2008, pp. 458–468.
8 Nair, L.S., and C.T. Laurencin. "Polymers as Biomaterials for Tissue Engineering and Controlled Drug Delivery." Tissue Engineering I, Springer, Berlin, Heidelberg, 2005, pp. 47–90.
9 Kietzke, T., et al. "Novel Approaches to Polymer Blends Based on Polymer Nanoparticles." Nature Materials, vol. 2, no. 6, 2003, pp. 408–412.
10 Staff, R.H., et al. "Preparation and Characterization of Anisotropic Submicron Particles from Semicrystalline Polymers." Macromolecular Chemistry and Physics, vol. 213, no. 3, 2012, pp. 351–358.
11 Staff, R.H., et al. "Patchy Nanocapsules of Poly(vinylferrocene)-Based Block Copolymers for Redox-Responsive Release." ACS Nano, vol. 6, no. 10, 2012, pp. 9042–9049.
12 Karnik, R., et al. "Microfluidic Platform for Controlled Synthesis of Polymeric Nanoparticles." Nano Letters, vol. 8, no. 9, 2008, pp. 2906–2912.
13 Chen, Z., et al. "Trends in Droplet Microfluidics: From Droplet Generation to Biomedical Applications." Langmuir, vol. 38, no. 20, 2022, pp. 6233–6248.
14 Seeto, W.J., et al. "Droplet Microfluidics-Based Fabrication of Monodisperse Poly(Ethylene Glycol)–Fibrinogen Breast Cancer Microspheres for Automated Drug Screening Applications." ACS Biomaterials Science & Engineering, vol. 8, no. 9, 2022, pp. 3831–3841.
15 Olenskyj, A.G., et al. "Continuous Microfluidic Production of Zein Nanoparticles and Correlation of Particle Size with Physical Parameters Determined Using CFD Simulation." Journal of Food Engineering, vol. 211, 2017, pp. 50–59.
16 Bhatti, M.M., et al. "Recent Trends in Computational Fluid Dynamics." Frontiers in Physics, vol. 8, 2020, art. 593111.
17 Einarsrud, K.E., et al. "Applied Computational Fluid Dynamics (CFD)." Processes, vol. 11, no. 2, 2023, p. 461.
18 Merkulova, M.A., et al. "Easy Size Control of Polymer Nanoparticles Obtained by Emulsification–Evaporation Technique in a Microfluidic Reactor." Mendeleev Communications, vol. 31, no. 6, 2021, pp. 899–901.
19 Ekanem, E.E., et al. "Structured Biodegradable Polymeric Microparticles for Drug Delivery Produced Using Flow Focusing Glass Microfluidic Devices." ACS Applied Materials & Interfaces, vol. 7, no. 41, 2015, pp. 23132–23143.
20 Staff, R.H., et al. "Particle Formation in the Emulsion-Solvent Evaporation Process." Small, vol. 9, no. 20, 2013, pp. 3514–3522.
21 Desgouilles, S., et al. "The Design of Nanoparticles Obtained by Solvent Evaporation: A Comprehensive Study." Langmuir, vol. 19, no. 22, 2003, pp. 9504–9510

Сведения об авторах

Анастасия Ю. Рылькова аспирант, кафедра химического и фармацевтического инжиниринга, Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева, пл. Миусская, 9, г. Москва, 125047, Россия, rylkovanas@mail.ru
https://orcid.org/0009-0008-5688-8017

Сергей В. Сорокин магистрант, кафедра химического и фармацевтического инжиниринга, Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева, пл. Миусская, 9, г. Москва, 125047, Россия, sorokin.s.v@list.ru
https://orcid.org/0009-0009-6475-0816

Елена В. Гусева к.т.н., доцент, кафедра химического и фармацевтического инжиниринга, Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева, пл. Миусская, 9, г. Москва, 125047, Россия, guseva.e.v@muctr.ru
https://orcid.org/0000-0002-6835-4513

Information about authors

Anastasia Yu. Rylkova graduate student, chemical and pharmaceutical engineering department, D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Miusskaya sq., 9, Moscow, 125047, Russia, rylkovanas@mail.ru
https://orcid.org/0009-0008-5688-8017

Sergei V. Sorokin master student, chemical and pharmaceutical engineering department, D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Miusskaya sq., 9, Moscow, 125047, Russia, sorokin.s.v@list.ru
https://orcid.org/0009-0009-6475-0816

Elena V. Guseva Cand. Sci. (Engin.),, chemical and pharmaceutical engineering department, D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Miusskaya sq., 9, Moscow, 125047, Russia, guseva.e.v@muctr.ru
https://orcid.org/0000-0002-6835-4513

Вклад авторов

Все авторы в равной степени принимали участие в написании рукописи и несут ответственность за плагиат

Contribution

All authors are equally involved in the writing of the manuscript and are responsible for plagiarism

Конфликт интересов

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

Conflict of interest

The authors declare no conflict of interest.

Поступила 21/03/2026	**После редакции** 18/04/2026	**Принята в печать** 21/04/2026
Received 21/03/2026	**Accepted in revised** 18/04/2026	**Accepted** 21/04/2026