

DOI 10.15507/2079-6900.23.202101.91–109

Оригинальная статья

ISSN 2079-6900 (Print)

ISSN 2587-7496 (Online)

УДК 532.529:541.182

Гидродинамический механизм перемещения каталитических микро-/наномоторов

С. И. Мартынов, Л. Ю. Ткач

БОУ ВО «Сургутский государственный университет» (г. Сургут, Российская Федерация)

Аннотация. В статье обосновывается гидродинамический механизм перемещения дипольного микро-/наномотора в жидкости с ионами разного знака. Дипольный заряд и ионы в окружающей жидкости образуются в результате электрокаталитической реакции на поверхности наномотора. С этой целью проводится сравнение известных результатов моделирования динамики дипольного агрегата на основе уравнений электрогидродинамики с результатами моделирования динамики системы, в которой дипольный агрегат перемещается в облаке мелких противоположно заряженных частиц в окружающей его вязкой жидкости. Учитывается гидродинамическое взаимодействие всех частиц в облаке между собой и с дипольным агрегатом при их различных распределениях в жидкости вокруг диполя. Суммарный заряд мелких частиц может быть как равен нулю, так и иметь отличное от нуля значение. Под действием поля дипольного агрегата частицы в облаке приводятся в движение, которое формирует в окружающей жидкости течение, создающее гидродинамическую силу, перемещающую агрегат. Проведенные расчеты подтвердили возможность дипольного агрегата перемещаться во всех рассмотренных случаях в результате действия гидродинамической силы, создаваемой формируемым течением окружающей жидкости. При этом скорость и направление его перемещения существенно зависит как от распределения мелких частиц в окружающей жидкости, так и от их суммарного заряда. Показано и обосновано существенное отличие имеющихся в литературе результатов моделирования от полученных на основе рассматриваемой модели, которая более точно описывает динамику такого рода микро-/наномотора.

Ключевые слова: вязкая жидкость, заряженные частицы, гидродинамическое взаимодействие, дипольный агрегат, микро-/наномотор

Для цитирования: Мартынов С. И., Ткач Л. Ю. Гидродинамический механизм перемещения каталитических микро-/наномоторов // Журнал Средневолжского математического общества. 2021. Т. 23, № 1. С. 91–109. DOI: <https://doi.org/10.15507/2079-6900.23.202101.91–109>

1. Введение

Развитие современных технологий невозможно без использования последних достижений в области управления физическими процессами в микро- и наномасштабе. Это касается, например, процессов получения новых материалов с управляемыми свойствами на основе жидких дисперсных сред; конструирования миниатюрных самодвижущихся устройств, основанного на применении в их работе принципов движения живых организмов в природе. Такие устройства необходимы при обследовании сосудов и органов человека и точечной доставке терапевтической нагрузки в больную клетку, а также при выполнении других прикладных задач. Потенциальная возможность инженерной разработки наномеханических систем с разными функциональными возможностями уже в настоящее время обеспечивается современными научными достижениями в молекулярной биологии и в нанотехнологиях. Активно изучаются биологические и синтетические наномоторы [1–2], которые планируется применять в качестве управляемых транспортных средств для доставки полезного груза (терапевтической нагрузки,



элементов самособирающихся микроустройств и т. п.) к месту назначения как в естественных, так и в лабораторных условиях.

Проводятся эксперименты по использованию самодвижущихся микрочастиц для эффективного удаления загрязнений в воде [3] и возможности использования их в медицине [4–5] для изоляции раковых клеток. Большое число самодвижущихся частиц обладают возможностью к самоорганизации [6], что позволяет управлять образованием динамических структур, состоящих из таких частиц. Конструируются различные синтетические наномоторы в виде янусподобных частиц, перемещающиеся за счет химических реакций [7–10] в жидкостях, которые являются топливом для таких двигателей. Химические реакции одновременно и подают топливо на наномотор, и удаляют продукты, которые они производят. Кроме использующих энергию химических реакций [15], конструируются наномоторы, перемещающиеся в жидкости за счет энергии внешнего поля – электрического [11], магнитного [12], ультразвукового [13–14], фотонного [16]. Обсуждаются инженерные проблемы выбора материалов и конструкции микро- и наномоторов с целью увеличения их грузоподъемности [17–18].

Механизм движение синтетических наномоторов в вязкой жидкости во многих случаях связывают с образованием градиента концентрации определенных частиц в окружающей жидкости в результате реакции на его поверхности (янусподобные частицы) или действия электрического или фотонного поля. Градиент концентрации приводит частицы в движение, которое формирует течение жидкости, создающее гидродинамическую силу, перемещающую наномотор. При этом возникают вопросы, связанные с более глубоким пониманием гидродинамических процессов, определяющих формирование такого рода течения в окружающей наномотор жидкости, и с эффективным использованием таких микротранспортных средств на практике: как управлять направлением и скоростью перемещения наномотора, какая конструкция и используемые для нее материалы позволят переносить большую полезную нагрузку. Ответ на эти вопросы может дать подробный анализ гидродинамических потоков, возникающих в окружающей наномотор вязкой жидкости из-за наличия в ней движущихся частиц.

Для этого подробно рассмотрим механизм перемещения наномотора, представляющего собой биметаллический стержень из золота и платины и находящийся в растворе перекиси водорода. В экспериментах [7–8] биметаллический стержень наноразмера из платины Pt и золота Au автономно перемещается в водных растворах пероксида водорода, катализируя образование кислорода на конце Pt . В 2 – 3% растворе перекиси водорода стержень движется преимущественно вдоль своей оси в направлении конца Pt со скоростью до 10 длин тела в секунду. В работе [10] была получена скорость таких стержней, превышающая 100 длин тела в секунду за счет увеличения ионов в окружающей жидкости. Первоначально считалось [7], что сила вдоль оси стержня создается градиентом концентрации кислорода, который и приводит к возникновению силы, приводящей в движение частицу. Однако такой механизм дает противоположное направление движения частицы, чем наблюдаемое в эксперименте. Поэтому в работе [8] был предложен другой механизм перемещения, а именно движение наностержней Pt/Au в H_2O_2 обусловлено, прежде всего, каталитически индуцированным электрокинетическим процессом. Предполагается, что стержень движется за счёт самоиндуцированных электрофоретических потоков, возникающих при каталитическом распаде H_2O_2 в точке контакта золота и платины. Распад перекиси водорода на ионы генерирует электрическое поле вокруг стержня, которое действует на сами ионы в окружающей вязкой жидкости, приводя ее в движение. Причем считается, что реализуется асимметричный поток ионов на поверхности стержня. За счет этого создается градиент концентрации

ионов одного знака, что приводит в движение жидкость и создает гидродинамическую силу, перемещающую стержень. Механизм, связанный с асимметрией потоков ионов разного знака, был предположен в работе [21] относительно перемещений определенного рода бактерий.

Модель такого механизма была рассмотрена в работах [19–20], в которых авторы попытались обосновать перемещение частицы предположением об асимметричности потоков ионов на поверхности биметаллического стержня. Раствор, окружающий стержень, рассматривается как водная среда, содержащая протоны (H^+), гидроксид-ионы (OH^-), перекись водорода (H_2O_2) и растворенный молекулярный кислород (O_2). В результате электрокинетической реакции платиновый конец стержня приобретает положительный заряд, а золотой – отрицательный. В окружающей стержень жидкости образуется заряд, который под действием силы qE (q – объемная плотность заряда в жидкости, E – вектор напряженности индуцированного электрического поля) приводит в движение жидкость вокруг стержня и создает гидродинамическую силу, перемещающую стержень в направлении от отрицательно заряженного конца стержня к концу с положительным зарядом. Наличие объемного заряда в жидкости связано с предполагаемой асимметрией в потоках ионов на поверхности стержня, что приводит к большей концентрации положительных ионов. При расчетах использовались уравнения электрогидродинамики, в которых, как известно, заряженные частицы рассматриваются как сплошная среда, взаимодействующая с жидкостью. Но принимая во внимание размер наностержня, возникает вопрос: как точно такое приближение учитывает гидродинамическое взаимодействие заряженных частиц и стержня на таких масштабах. К тому же в рассматриваемой задаче ионы H^+ по размерам и массе, примерно, в 15 и 17 раз соответственно меньше ионов OH^- [22]. Кроме того, в работе [23] показано, что даже в случае нулевого суммарного заряда агрегат из заряженных частиц разного знака перемещается в жидкости в переменном однородном электрическом поле в результате гидродинамического взаимодействия. Все это ставит под сомнение модель, предложенную в работах [19–20], и требует более детального исследования механизма перемещения биметаллического наностержня.

В настоящей работе предлагается гипотеза о гидродинамическом механизме перемещения биметаллического наностержня. Для обоснования предложенной гипотезы моделировалась динамика системы дипольная частица – облако малых заряженных частиц, распределенных случайным и определенным образом в окружающей жидкости и имеющих заряды противоположного знака. Результаты моделирования динамики такой системы и сравнение с расчетами на основе уравнений электрогидродинамики приведены ниже.

2. Выбор модели для описания динамики микро-/наномотора

Рассмотрим проводящую частицу симметричной формы, помещенную в жидкость вязкости η и движущуюся со скоростью \mathbf{u} . Будем предполагать, что в результате каталитической реакции на поверхности проводящей частицы в жидкости образуются анионы и катионы с концентрациями n_1 и n_2 , зарядами частиц e_1 и $e_2 = -e_1 = e > 0$, скоростями \mathbf{v}_1 и \mathbf{v}_2 , подвижностью b_1 и b_2 , коэффициентами диффузии D_1 и D_2 соответственно. Считаем, что коэффициенты диффузии связаны с подвижностями ионов соотношениями Эйнштейна $D_i = k_B T b_i$. В результате каталитической реакции на противоположных концах проводящей частицы накапливаются заряды разных знаков. Другими словами, частицу можно рассматривать как диполь с моментом \mathbf{P} , вокруг которой создается

электрическое поле напряженности \mathbf{E} , соответствующее полю диполя с таким моментом. Система уравнений динамики жидкости с ионами двух видов в приближении электрогидродинамики имеет вид [24]:

$$\begin{aligned} \nabla \mathbf{u} &= 0, \quad \eta \Delta \mathbf{u} - \nabla p + q \mathbf{E} = 0, \\ \frac{\partial n_i}{\partial t} + \nabla(\mathbf{v}_i n_i) &= 0, \quad n_i \mathbf{v}_i = n_i \mathbf{u} \mp en_i b_i \mathbf{E} - D_i \nabla n_i, \\ q &= \sum_{i=1}^2 en_i, \quad i = 1, 2. \end{aligned} \quad (2.1)$$

Также на поверхности частицы задаются условия для скорости несущей жидкости и для нормальных составляющих потоков ионов. В случае симметричных потоков ионов на поверхности частицы получаем равенство концентраций ионов разного знака $n_1 = n_2$, что соответствует отсутствию суммарного объемного заряда в жидкости $q = 0$. Из второго уравнения системы (2.1) следует, что в этом случае решение гидродинамической задачи не зависит от распределения зарядов в жидкости. Согласно граничным условиям, в системе координат, связанной с частицей, скорость жидкости на ее поверхности должна быть равна нулю. Поскольку далеко от частицы жидкость также находится в состоянии покоя, то равенство нулю скорости \mathbf{u} является решением гидродинамической задачи во всей области. Однако это приводит к противоречию. Поскольку градиенты концентрации ионов существенны только вблизи поверхности частицы, на больших расстояниях от частицы можно считать, что скорость ионов определяется равенствами

$$\mathbf{v}_1 = \mathbf{u} - eb_1 \mathbf{E}, \quad \mathbf{v}_2 = \mathbf{u} + eb_2 \mathbf{E}.$$

Поскольку внешняя сила, действующая на жидкость с ионами, равна нулю, то суммарный импульс системы также должен быть равен нулю, поскольку в начальный момент среда находилась в состоянии покоя. Другими словами, должно выполняться равенство

$$m\mathbf{u} + m_1 \mathbf{v}_1 + m_2 \mathbf{v}_2 = 0.$$

Здесь m – масса нейтральных молекул; m_1 – масса ионов OH^- ; m_2 – масса ионов H^+ в единице объема среды. Будем полагать, что выражения для подвижности ионов аналогичны выражениям для сферических частиц такого же размера:

$$b_1 = \frac{1}{6\pi\eta a_1}, \quad b_2 = \frac{1}{6\pi\eta a_2}.$$

Подставляя в условие выражения для скоростей \mathbf{v}_1 , \mathbf{v}_2 и учитывая, что, согласно [20], $m_1 = 17m_2$ и $a_1 = 15a_2$, получаем следующую оценку для скорости жидкости на большом расстоянии от частицы:

$$\mathbf{U} = -\frac{m_2 e \mathbf{E}}{45\pi\eta a_2 (m + 18m_2)}.$$

Несмотря на то, что эта скорость небольшая, т. к. напряженность поля диполя быстро убывает с увеличением расстояния от частицы, и концентрация заряженных частиц мала по сравнению с концентрацией нейтральных, тем не менее в случае равенства

концентраций ионов H^+ и OH^- движение жидкости будет определяться движением последних. С учетом вида электрического поля диполя \mathbf{E} получается, что движение жидкости происходит в направлении, противоположном, зафиксированному в ходе эксперимента [8]. При увеличении концентрации ионов OH^- по сравнению с концентрацией H^+ возникает внешняя сила, связанная с появлением объемного отрицательного заряда q , которая увеличивает скорость движения жидкости в том же направлении. При увеличении же концентрации ионов H^+ по сравнению с OH^- меняется знак объемного заряда, а внешняя сила и, следовательно, движение несущей жидкости меняют свои направления на противоположные. Считается, что в эксперименте [8] реакция проходила с преобладанием концентрации положительных ионов, что определило направление движения стержня. Однако, как показано выше, движение возможно и при нулевой суммарной концентрации ионов H^+ и OH^- за счет их разных размеров и массы. Если к системе приложено еще и внешнее однородное электрическое поле \mathbf{E}_0 , направленное вдоль вектора дипольного момента \mathbf{P} , то скорость жидкости на большом расстоянии от частицы будет равна:

$$\mathbf{U} = -\frac{m_2 e(\mathbf{E}_0 + \mathbf{E})}{45\pi\eta a_2(m + 18m_2)}.$$

В случае $\mathbf{E}_0 \gg \mathbf{E}$ жидкость относительно частицы будет двигаться в направлении, противоположном вектору внешнего поля, т. е., как указано в эксперименте, но это движение определяется движением отрицательно заряженных ионов при равенстве их концентрации с положительными. В системе отсчета, в которой жидкость на большом расстоянии от частицы находится в состоянии покоя, частица будет перемещаться со скоростью $-\mathbf{U}_0$. При повышении концентрации в объеме жидкости положительных ионов это приводит к тому, что направление движения жидкости меняется на противоположное. Применительно к рассматриваемому эксперименту о движении биметаллического стержня это означает, что внешнее электрическое поле должно уменьшить его скорость, но при этом оно стабилизирует направление движения стержня за счет ориентации вектора дипольного \mathbf{P} вдоль вектора \mathbf{E}_0 . Суммируя сказанное, получим, что при равенстве концентраций ионов разных знаков решение гидродинамической задачи такое же, как если бы ионов в жидкости не было. Проблема заключается в том, что они в жидкости присутствуют, но система уравнений (2.1) не дает корректного их учета при решении гидродинамической задачи. Этот вывод можно обосновать в т. ч. следующим образом. Используя соотношения для скоростей ионов

$$\frac{n_i(\mathbf{v}_i - \mathbf{u})}{b_i} + k_B T \nabla n_i = \mp e n_i \mathbf{E}, \quad i = 1, 2,$$

и объемной плотности заряда, следующие из (2.1), выражение для силы $q\mathbf{E}$ можно представить в виде

$$q\mathbf{E} = \frac{n_1(\mathbf{v}_1 - \mathbf{u})}{b_1} + \frac{n_2(\mathbf{v}_2 - \mathbf{u})}{b_2} + k_B T \nabla n_1 + k_B T \nabla n_2.$$

Тогда второе уравнение динамики жидкости можно записать в виде

$$6\pi\eta a_1 n_1(\mathbf{v}_1 - \mathbf{u}) + 6\pi\eta a_2 n_2(\mathbf{v}_2 - \mathbf{u}) - \nabla(p - k_B T n_1 - k_B T n_2) + \eta \Delta \mathbf{u} = 0. \quad (2.2)$$

Слагаемые в уравнении (2.2), содержащие разность скоростей ионов и жидкости, имеют смысл сил трения, действующих на жидкость-носитель со стороны ионов каждого сорта. При этом ионы рассматриваются как сплошные среды с соответствующими давлениями kTn_i . Уравнение (2.2) получено из системы (2.1), но также можно провести обратную процедуру и из уравнения (2.2) получить второе уравнение системы (2.1). Другими словами, в выбранном приближении эти уравнения равнозначны. Отличия связаны с представлением взаимодействия ионов с жидкостью. Если в системе (2.1) на жидкость действует объемная сила со стороны электрического поля, то в уравнении (2.2) поле отсутствует, а на жидкость действует сила трения со стороны самих ионов. Это отличие становится еще существеннее, если иметь в виду, что ионы, распределены дискретно и предположение о том, что они образуют сплошную среду, есть способ описания их динамики в жидкости. Если учесть сказанное и представить ионы как частицы, распределенные в жидкости, окружающей дипольную частицу, то уравнение (2.2) можно записать в виде

$$\sum_{j=1}^{N_1} 6\pi\eta a_1(\mathbf{v}_{1j} - \mathbf{u}) + \sum_{j=1}^{N_2} 6\pi\eta a_2(\mathbf{v}_{2j} - \mathbf{u}) - \nabla p + \eta\Delta\mathbf{u} = 0. \quad (2.3)$$

Здесь точечные силы, действующие на жидкость со стороны ионов, представлены в виде суммы сил трения со стороны каждой заряженной частицы. Это уже существенно отличается от интегральной записи сил трения в (2.2). Дело в том, что результирующие силы каждой суммы приложены в разных точках, т. к. расположение ионов одного знака не совпадает с расположением ионов другого знака. Направления этих сил противоположные, т. к. положительно и отрицательно заряженные частицы в электрическом поле двигаются в противоположные стороны. Поэтому даже в случае равенства каждой суммы по величине результирующая их сил не равна нулю, а дает пару сил. Очевидно, что наличие таких сил меняет решение гидродинамической задачи даже в случае равенства нулю объемного заряда частиц в жидкости. Воздействие заряженных частиц на жидкость имеет место даже в случае, когда центры приложения суммарных сил трения от частиц разного знака в (2.3) совпадают, так и в этом случае они получены от различных распределений точечных сил по объему жидкости. Примером такого распределения может служить система четырех равных по величине сил, две из которых направлены в одну сторону, а две другие направлены в противоположную и симметрично расположены между двумя первыми. Такая система дает две пары сил с противоположно направленными моментами, создающими течение жидкости. Таким образом, различное распределение даже равных по величине и противоположно направленных точечных сил формирует различную гидродинамику окружающей жидкости. Предположение, что ионы каждого знака представляют собой сплошную среду, приводит к тому, что в уравнении (2.2) результирующая суммы двух сил трения со стороны ионов разного знака при их одинаковой концентрации равна нулю, т. к. в этом случае они приложены в одной точке, равны по величине и противоположны по направлению. Отличие в их распределении в объеме жидкости не учитывается. Метод точечных сил, который фактически используется в уравнении (2.3) для учета влияния заряженных частиц на гидродинамику жидкости вокруг дипольной частицы, впервые был предложен в работе [25]. Этот прием позволил свести исходную задачу о течении вязкой жидкости через периодическую решетку сферических частиц с соответствующими граничными условиями на их поверхности к задаче о течении вязкой жидкости, на которую действуют точечные силы, приложенные к центрам частиц. Полученная задача относительно

проще, однако ее решение требует дополнительных предположений для определения значения точечных сил. Поэтому для корректного учета гидродинамического воздействия движения заряженных частиц на перемещение дипольной частицы необходимо решать исходную задачу о течении вязкой жидкости с частицами для определения их динамики. Ниже рассматривается постановка задачи, метод ее решения и результаты расчетов динамики дипольной частицы в облаке мелких заряженных частиц в окружающей диполь жидкости.

3. Постановка задачи

Рассмотрим дипольный агрегат, состоящий из двух частиц A и B одинакового радиуса a , расположенных на расстоянии $3a$ друг от друга и соединенных между собой тонким жестким стержнем, который не дает гидродинамическое сопротивление, но сохраняет расстояние между ними. Все частицы имеют электрические заряды, которые равны по величине q и противоположны по знаку. В окружающей агрегат жидкости случайным образом распределены 80 частиц меньшего радиуса $0,2a$ величина заряда (q) которых равна 40. Рассматриваются случаи, когда половина из них имеет заряд, одинаковый по знаку с зарядом частицы A , а половина - заряд одинаковый по знаку с зарядом частицы B с равномерным и неравномерным распределением заряда мелких частиц вокруг диполя. Таким образом моделируется биметаллический стержень и результат электрохимической реакции, при которой в жидкости вокруг него образуются электрически нейтральная или имеющая заряд система заряженных частиц. Распределение частиц в жидкости происходило следующим образом: выделялся некоторый ограниченный объем вокруг каждой частицы в агрегате, а каждая мелкая частица случайным образом помещалась в этот объем. Считалось, что частица с равной вероятностью может оказаться в любой точке выделенного объема, если эта точка еще не занята другой частицей. В системе координат, центр которой помещен в середину отрезка, соединяющего частицы A и B , а ось OY направлена вдоль этого отрезка по направлению от A к B , выделенные объемы представляли собой два прямоугольных параллелепипеда, координаты точек которых лежат в интервалах $-2.5a \leq x \leq 2.5a$, $-5a \leq y \leq 0$, $-2.5a \leq z \leq 2.5a$ для первого и в интервалах $-2.5a \leq x \leq 2.5a$, $0 \leq y \leq 5a$, $-2.5a \leq z \leq 2.5a$ для второго. При этом сначала в первом объеме распределялись частицы, имеющие противоположный знак с частицей A , а потом частицы с зарядом другого знака. Во втором объеме аналогично: сначала распределялись мелкие частицы имеющие противоположный знак с частицей B , а потом другие частицы. Такой порядок распределения соответствует механизму реакции на поверхности наномотора с образованием ионов, имеющих противоположный знак, чем заряд на поверхности стержня. Поскольку электрический заряд мелких частиц мал по сравнению с зарядом частиц A и B , кроме того, они расположены случайным образом, то кулоновское взаимодействие между ними не учитывается, а считается, что они находятся в электрическом поле, создаваемом только зарядами диполя из частиц A и B . Гидродинамическое взаимодействие учитывается между всеми частицами. Движение наностержня происходит в результате реакции на его поверхности и образованием ионов в той области окружающей его жидкости, где их раньше не было. Поэтому данный процесс не является стационарным. Это означает, что в рассматриваемой модели число мелких частиц в выделенном объеме окружающей его жидкости должно изменяться за счет появления новых и прореагировавших старых. Будем рассчитывать динамику агрегата за промежутки времени гораздо меньший, чем характерное время реакции, что позволяет

считать число заряженных частиц в объеме жидкости постоянным. Система уравнений динамики жидкости и частиц записывается в следующем виде [23]:

$$\nabla \mathbf{u} = 0, \quad -\nabla p + \eta \Delta \mathbf{u} = \mathbf{0}, \quad (3.1)$$

$$\mathbf{F}_k^{(i)} + \mathbf{F}_k^{(e)} + \mathbf{F}_k^{(h)} = 0, \quad \mathbf{T}_k^{(i)} + \mathbf{T}_k^{(e)} + \mathbf{T}_k^{(h)} = 0. \quad (3.2)$$

Здесь $\mathbf{F}_k^{(h)}$ – силы; $\mathbf{T}_k^{(h)}$ – моменты сил со стороны жидкости; $\mathbf{F}_k^{(e)}$, $\mathbf{T}_k^{(e)}$ – внешние и $\mathbf{F}_k^{(i)}$, $\mathbf{T}_k^{(i)}$ – внутренние силы и моменты сил, действующие на частицу с номером k . При этом внутренние силы равны

$$\mathbf{F}_j^{(i)} = \pm k \frac{q^2 \mathbf{r}_{Aj}}{40r_{Aj}^3} \mp k \frac{q^2 \mathbf{r}_{Bj}}{40r_{Bj}^3}.$$

Здесь k – коэффициент пропорциональности в законе Кулона; \mathbf{r}_{Aj} и \mathbf{r}_{Bj} – радиус-векторы, соединяющие частицу A или B в агрегате с частицей в облаке с номером j . Знак $+$ или $-$ выбирается в зависимости знаков зарядов соответствующих частиц. Как отмечалось выше, кулоновским взаимодействием между мелкими частицами в облаке пренебрегается по сравнению с силами, действующими со стороны частиц в агрегате. На поверхности частиц задаются граничные условия для скорости жидкости \mathbf{u} :

$$\begin{aligned} u_i &= V_i^A + \Omega_{ij}^A x_j^A, & |\mathbf{X}^A| &= a, \\ u_i &= V_i^B + \Omega_{ij}^B x_j^B, & |\mathbf{X}^B| &= a, \quad u_i = V_i^k + \Omega_{ij}^k x_j^k, & |\mathbf{X}^k| &= 0.2a, \quad k = 1, \dots, 80. \end{aligned}$$

Здесь введены следующие обозначения: \mathbf{V}^k – вектор абсолютной линейной скорости; Ω_{ij}^k – тензор угловой скорости; \mathbf{X}^k – вектор положения точки жидкости относительно центра частицы с номером k и радиусом a^k .

На большом расстоянии от частиц должны выполняться условия:

$$u_i \rightarrow 0, \quad p \rightarrow p_0, \quad \text{если } |\mathbf{X}| \rightarrow \infty.$$

Здесь p_0 – невозмущенное давление в жидкости.

В результате действия электрических сил происходит деформация облака за счет перемещения в электрическом поле диполя заряженных частиц разного знака в противоположных направлениях. Поскольку система заряженных частиц находится в вязкой жидкости, то предполагается, что в результате такой деформации облака в окружающей жидкости формируется течение, создающее гидродинамическую силу, действующую на агрегат и перемещающую его. Ниже приводятся результаты расчетов, доказывающие это предположение для всех рассматриваемых выше случаев (нейтрально заряженной системы частиц и имеющей заряд определенного знака), а также позволяющие определить направление и скорость перемещения диполя в зависимости в т. ч. от распределения заряженных частиц в облаке.

4. Метод решения и результаты расчетов динамики дипольного агрегата частиц

Для решения системы уравнений гидродинамики и определения сил \mathbf{F}_k^h и моментов \mathbf{T}_k^h использовался метод, предложенный в работе [26]. Метод основан на представлении

решения уравнений гидродинамики в виде мультипольного разложения с тензорными коэффициентами и позволяет учитывать гидродинамическое взаимодействие большого числа частиц в вязкой жидкости. В рассматриваемом случае распределение лавления и скорости в жидкости имеет вид

$$p = \sum_{k=1}^{82} (H_i^k L_i(\mathbf{X}^k) + H_{ij}^k L_{ij}(\mathbf{X}^k) + H_{ijl}^k L_{ijl}(\mathbf{X}^k) + H_{ijkl}^k L_{ijkl}(\mathbf{X}^k) + \dots),$$

$$\eta u_i = \sum_{k=1}^{82} \left(-\frac{2}{3} H_i^k L_0(\mathbf{X}^k) - \frac{1}{6} H_j^k L_{ij}(\mathbf{X}^k) \cdot (X^k)^2 - \frac{3}{5} H_{ij}^k L_j(\mathbf{X}^k) - \frac{1}{10} H_{jil}^k L_{ijl}(\mathbf{X}^k) \cdot (X^k)^2 + \dots \right).$$

Здесь $L_{ijl\dots s}(\mathbf{X}^k)$ – мультиполь, вычисляемый следующим образом:

$$L_{ijl\dots s}(\mathbf{X}^k) = \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\partial}{\partial x_j} \frac{\partial}{\partial x_l} \dots \frac{\partial}{\partial x_s} \left(\frac{1}{X^k} \right).$$

С учетом вида решения уравнений гидродинамики (3.1) содержит 492 алгебраических уравнения для определения линейной и угловой скорости частиц. Для численного решения системы уравнений использовалась специальная программа [27].

Для получения корректных результатов расчета были учтены члены разложения с тензорными коэффициентами шестого порядка, что привело к ошибке расчета порядка 10^{-3} . Это означает, что учет остальных членов может вносить вклад в результирующее значение только в третьем десятичном разряде. Такая ошибка была получена при компьютерном моделировании, когда вместо реальных параметров задачи использовались параметры модели, в частности характерный масштаб составлял 1 см. Другими словами относительно размера модели погрешность расчета составила около 0,1%. Использование модельных параметров связано с тем, что для реальных систем размеры частиц должны быть достаточно малыми, например, 10^{-4} – 10^{-5} см. Использование такой шкалы затрудняет нахождение численного решения системы уравнений и визуализацию результатов, т. к. в этом случае ошибка в 0,1% требует вычислений с точностью до 10^{-6} – 10^{-7} . Поэтому при моделировании использовался метод подобия, когда вместо реальных параметров задаются их модельные значения, но так, чтобы характеристики реального и модельного потоков совпадали. При компьютерном моделировании задается размер частиц $\hat{a} = 1$ см, вязкость несущей жидкости $\hat{\eta} = 10$ г/(см·с) и такие модельные значения электрических зарядов \hat{q} в кулоновской силе взаимодействия, что $k\hat{q}^2/(40\hat{a}^2) = 5 \cdot 10^{-6}$ Н. Детали такого представления при моделировании и взаимосвязи между реальными и модельными параметрами представлены в [19–20].

Рассматривался случай отсутствия внешних сил \mathbf{F}_k^e и моментов $\mathbf{T}_k^e=0$, действующих на заряженные частицы и жидкость. Расчеты проводились на модельных структурах четырех видов. Во всех случаях размеры частиц были одинаковыми: радиусы частиц A и B равны $\hat{a} = 1$ см, а размеры мелких частиц равны $0,2\hat{b}$ см. Первая структура соответствовала нейтрально заряженной системе с одинаковой концентрацией положительных и отрицательных зарядов в окружающей диполь жидкости. Процедура получения такой структуры описана выше в разделе 2. Вторая структура получалась из первой заменой знака заряда у половины частиц: все мелкие частицы, распределенные в соответствующих областях вокруг частиц A и B , имели противоположный с этими частицами заряд. Третья структура получалась из первой уменьшением до 15 числа противоположно заряженных с частицей A мелких частиц в объеме, выделенном в жидкости вокруг первой частицы агрегата. Четвертая структура получалась из первой

уменьшением до 15 числа одинаково заряженных с частицей B мелких частиц в соответствующем объеме жидкости вокруг второй частицы дипольного агрегата. Другими словами, последние две структуры имели одинаковый объемный заряд.

Результаты расчетов динамики агрегатов за модельный промежуток времени $\hat{t} = 0,05$ с приведены в табл. 4.1. Средние значения линейной U и угловой скорости Ω всей системы определялись по стандартным формулам статистики, зная значения скоростей всех частиц. Как видно из приведенных в таблице значений, во всех случаях агрегаты перемещаются в жидкости. Поскольку в первых двух структурах сумма зарядов мелких частиц равна нулю, то суммарная сила, действующая на них со стороны электрического диполя, также равна нулю. Поэтому можно полагать, что перемещение агрегатов обусловлено действием гидродинамических сил со стороны окружающей их вязкой жидкости. Поскольку знак зарядов частиц A и B не указывался, а считалось, что они противоположны, – соответственно, и у мелких частиц так же, – то полученный результат означает, что направление перемещения определяется только распределением мелких частиц в окружающей жидкости. Распределение скоростей заряженных частиц для первой структуры представлена на Рис. 4.1, для второй – на Рис. 4.2. С уменьшением числа частиц, имеющих заряд одинакового знака с частицей B (агрегаты третьего и четвертого вида), происходит увеличение продольной составляющей скорости дипольного агрегата. Причем наибольшая скорость наблюдается в случае четвертой структуры, когда число противоположно заряженных частице B мелких частиц превышает число одинаково заряженных в области вокруг нее. Распределение скоростей заряженных частиц таких структур представлены на Рис. 4.3 и Рис. 4.4, соответственно.

Таблица 4.1. Результаты численного моделирования динамики агрегатов.

Table 4.1. Results of numerical modeling of aggregate dynamics.

Скорость \ Velocity	Агрегат 1 \ Aggregate 1	Агрегат 2 \ Aggregate 2	Агрегат 3 \ Aggregate 3	Агрегат 4 \ Aggregate 4
\hat{u}_{Ax} [10^{-3} см/сек \ cm/sec]	6.30	-4.6	8.9	6.8
\hat{u}_{Ay} [10^{-3} см/сек \ cm/sec]	9.68	6.11	7.5	11.2
\hat{u}_{Az} [10^{-3} см/сек \ cm/sec]	6.87	8.3	6.8	7.03
\hat{u}_{Bx} [10^{-3} см/сек \ cm/sec]	2.31	2.3	9.8	-1.13
\hat{u}_{By} [10^{-3} см/сек \ cm/sec]	9.67	6.11	7.5	11.02
\hat{u}_{Bz} [10^{-3} см/сек \ cm/sec]	1.996	-12.6	1.5	0.711
\hat{U}_x [10^{-3} см/сек \ cm/sec]	-0.57	0.45	-1.7	0
\hat{U}_y [10^{-3} см/сек \ cm/sec]	-1.31	1.26	-1.55	-2.1
\hat{U}_z [10^{-3} см/сек \ cm/sec]	-5.03	2.09	-4.9	-4.2
$\hat{\Omega}_x$ [10^{-3} сек $^{-1}$ \ sec $^{-1}$]	-0.59	0.41	-6.3	-0.49
$\hat{\Omega}_y$ [10^{-3} сек $^{-1}$ \ sec $^{-1}$]	0.19	0.0	0.31	0.0
$\hat{\Omega}_z$ [10^{-3} сек $^{-1}$ \ sec $^{-1}$]	-0.34	0.2	-0.37	-0.36

Результаты, полученные для модельных структур третьего и четвертого вида, качественно отличаются от того, что следует из уравнений электрогидродинамики (2.1). А именно, из уравнений (2.1) следует, что в случае наличия объемного заряда перемещение диполя должно происходить в другом направлении, чем получено для указанных

модельных структур. Согласие результатов по направлению перемещения диполя, полученное из уравнений (2.1) и рассматриваемой модели, имеют место только в случае, когда все мелкие частицы имеют заряд одного знака. Такое различие можно объяснить тем, что уравнения (2.1) фактически учитывают воздействие на жидкость только частиц, дающих объемный заряд, т. е. только малой части из всех, имеющих заряд, т. к. частицы, чей суммарный заряд равен нулю, вообще не учитываются при расчете течения жидкости. В случае нейтральной системы заряженных частиц воздействие на жидкость со стороны заряженных частиц в уравнениях (3.1) отсутствует, в то время как из расчетов динамики первой модельной структуры следует, что такое воздействие существует и приводит к перемещению дипольного агрегата.

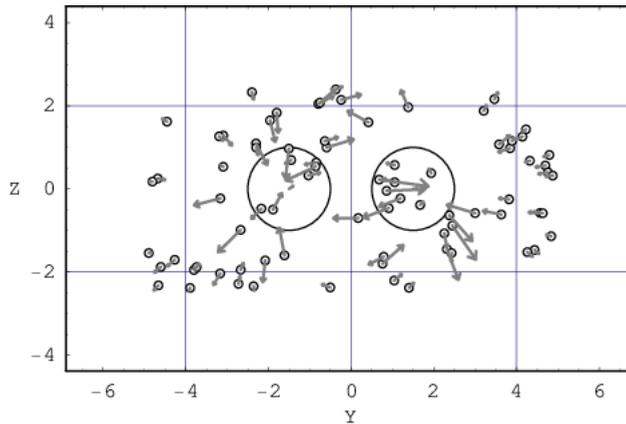


Рис. 4.1. Скорости частиц для первого агрегата.

Fig 4.1. Particle velocities for the first aggregate.

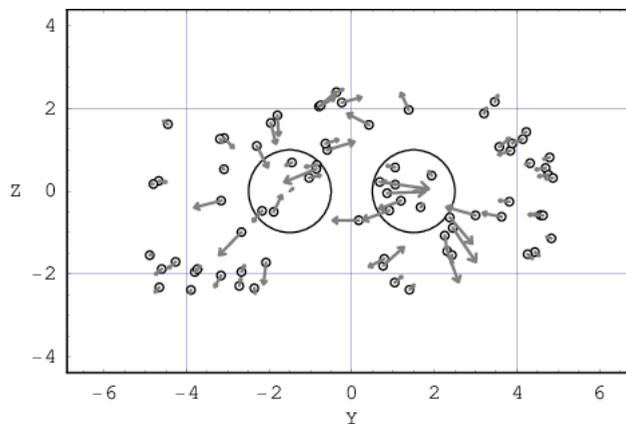


Рис. 4.2. Скорости частиц для второго агрегата.

Fig 4.2. Particle velocities for the second aggregate.

Значения реальных параметров можно определить согласно формулам пересчета, приведенным в [27]. Так, реальное значение скорости агрегата v определяется из условия подобия модельного и реального течения при равенстве плотностей жидкости:

$$v = \frac{\hat{a}\eta}{a\hat{\eta}} \hat{v}.$$

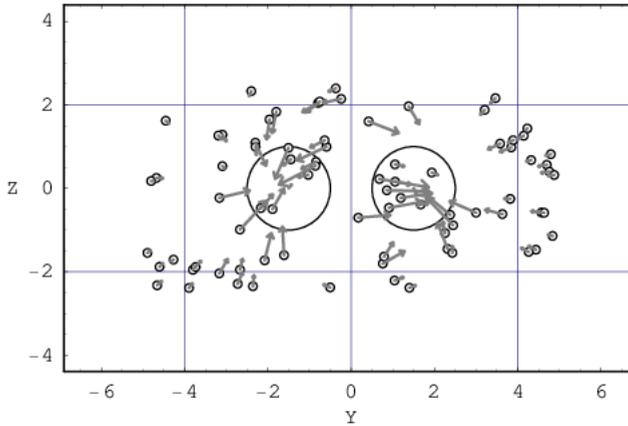


Рис. 4.3. Скорости частиц для третьего агрегата.

Fig 4.3. Particle velocities for the third aggregate.

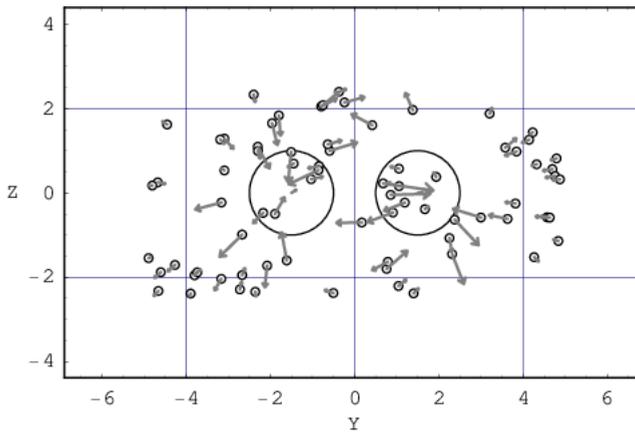


Рис. 4.4. Скорости частиц для четвертого агрегата.

Fig 4.4. Particle velocities for the fourth aggregate.

Так, для агрегата из частиц размером $a = 10^{-4}$ см и реальной вязкости жидкости $\eta = 10^{-2}$ г/(см·с) получаем $v = 10u$. Как было установлено в эксперименте [10], скорость таких стержней зависит от количества ионов в жидкости и может превышать величину, равную 100 длин тела в секунду, т. е. быть выше, чем скорость $v = 2 \cdot 10^{-2}$ см/с. Как видно из таблицы, реальная скорость рассмотренных агрегатов соответствует этим значениям. Направление движения агрегатов также совпадает с тем, что наблюдалось в эксперименте для случая, когда частица B имеет отрицательный заряд, а мелкие частицы – положительный. Для реального заряда q запишем следующее выражение через модельные параметры, полученное из условия подобия реального и модельного течений [27]:

$$k \frac{q^2}{a^2} \eta^2 = k \frac{\hat{q}^2}{\hat{a}^2} \eta^2$$

С учетом выбранного значения величины модельного q заряда величина реального равна $q = 2.3 \cdot 10^{-17}$ Кл, что соответствует $1.47 \cdot 10^2$ величин элементарного электрического заряда. Потенциал такого заряда на расстоянии 10^{-5} см равен $20.7 \cdot 10^{-3}$ В, что согласуется со значениями потенциала, используемого в работах [19–20] для расчета электрофоретической силы, действующей на диполь. Таким образом, приведенные выше расчеты динамики системы на основе модели диполя в облаке мелких заряженных частиц дают обоснование перемещения диполя за счет гидродинамической силы, действующей со стороны окружающей его вязкой жидкости. Эта сила образуется сформированным течением жидкости за счет движения в ней мелких заряженных частиц в поле диполя. Можно предположить, что из-за неравномерной плотности распределения частиц в жидкости их движение в противоположные стороны под действием электрического поля диполя формирует в жидкости вокруг агрегата характерное вихревое течение, которое рассматривалось в работе [28]. Формирование в окружающей вязкой жидкости такого вихревого течения и создает гидродинамическую силу, перемещающую агрегат. Наличие такого течения подтверждает также тот факт, что при изменении знака зарядов частиц A и B и сохранении знака зарядов мелких частиц в облаке скорость перемещения агрегата меняется на противоположную, т. е. вихревое течение также меняет свое направление. Наличие такого течения и дает отличие результатов по динамике заряженных частиц по сравнению с приближением электрогидродинамики.

Из-за случайного расположения мелких частиц относительно оси агрегата возникает поперечная составляющая скорости, поэтому возникает вопрос об управлении такого перемещения в заданном направлении. Как было указано выше, внешнее однородное электрическое поле стабилизирует движение агрегата, но уменьшает его скорость, поэтому более подходящим для управления таким движением является внешнее магнитное поле. В этом случае дипольный агрегат должен обладать магнитным моментом, например, за счет наличия внутри частицы ядра из намагничивающегося материала.

5. Заключение

Предложен гидродинамический механизм перемещения микро-/наномотора с каталитической реакцией на его поверхности, индуцирующей дипольный заряд в нем. Для этого проведено численное моделирование динамики дипольного агрегата из двух сфер в облаке противоположно заряженных мелких частиц, имитирующих наличие ионов разных знаков в жидкости в результате реакции. При расчетах учитывается гидродинамическое взаимодействие всех частиц между собой и кулоновское взаимодействие мелких частиц с диполем. Рассмотрены случаи с нейтральным зарядом системы диполь-мелкие частицы и случаи наличия объемного заряда у системы. Рассматривались нейтрально заряженные системы двух типов: с равномерным и неравномерным распределением зарядов разного знака вокруг диполя. Наличие объемного заряда в окружающей диполь жидкости моделировалось путем уменьшения числа заряженных частиц определенного знака в электрически нейтральной системе с равномерным распределением зарядов. Во всех рассмотренных случаях происходит перемещение дипольного агрегата. Механизм этого перемещения основан на действии на агрегат гидродинамической силы со стороны сформированного в окружающей жидкости течения. Формирование течения

происходит за счет движения мелких заряженных частиц в электрическом поле дипольного агрегата. Расчетная продольная скорость перемещения дипольного агрегата согласуется со скоростью, полученной в эксперименте. Поскольку из-за случайного распределения мелких частиц в окружающей дипольный агрегат жидкости его скорость имеет поперечную составляющую, то для управления его движением требуется внешнее воздействие. Показано, что внешнее электрическое поле стабилизирует направление перемещения, но уменьшает его скорость, поэтому управляющего воздействия предлагается использовать внешнее магнитное поле. Для этого требуется, чтобы диполь обладал еще и магнитной структурой, например, в виде внутреннего ядра из намагничивающегося материала. Сравнение полученных результатов по динамике такого диполя с имеющимися, основанными на решении уравнений электрогидродинамики, дает существенные отличия, связанные с тем, что электрогидродинамическая модель некорректно учитывает гидродинамику заряженных частиц в окружающей диполь жидкости. Предложенный механизм перемещения может использоваться для моделирования динамики каталитических синтетических наномоторов.

Благодарности. Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 18-41-860002/18).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Montemagno C., Bachand G., Stelick S., Bachand M. Constructing biological motor powered nanomechanical devices // *Nanotechnology*. 1999. Vol. 10, No. 3. pp. 225–231.
2. Gao W., Wang J. Synthetic micro/nanomotors in drug delivery // *Nanoscale*. 2014. No. 6. pp. 10486–10494. DOI: <https://doi.org/10.1039/x0xx00000x>
3. Li X., Sun Y.-M., Zhang Z.-Y., Feng N.-X., Song H., Liu Y.-L., Hai L., Cao J.-M., Wang G. P. Visible light-driven multi-motion modes CNC/TiO₂ nanomotors for highly efficient degradation of emerging contaminants // *Carbon*. 2019. Vol. 155. pp. 195–203. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2019.08.039>
4. Gao W., de Avila B. E.-F., Zhang L., Wang J. Targeting and isolation of cancer cells using micro/nanomotors // *Adv. Drug Deliv. Rev.* 2018. Vol. 125. pp. 94–101. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.addr.2017.09.002>
5. Medina-Sanchez M., Haifeng Xu H., Schmidt O. G. Micro- and nano-motors: the new generation of drug carriers // *Therapeutic Delivery*. 2018. Vol. 9, No. 4. pp. 303–316. DOI: <https://doi.org/10.4155/tde-2017-0113>
6. Lin Z., Gao C., Chen M., Lin X., He Q. Collective motion and dynamic self-assembly of colloid motors // *Current Opinion in Colloid & Interface Science*. 2018. Vol. 35. pp. 51–58. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cocis.2018.01.006>
7. Paxton W. F., Sen A, Mallouk T. E. Motility of catalytic nanoparticles through self-generated forces // *Chemistry*. 2005. Vol. 11, Issue 22. pp. 6462–6470. DOI: <https://doi.org/10.1002/chem.200500167>

8. Paxton W. F., Baker P. T., Kline T. R., Wang Y., Mallouk T. E., Sen A. Catalytically induced electrokinetics for motors and micropumps // *J. Am. Chem. Soc.* 2006. Vol. 128, No. 46. pp. 14881–14888. DOI: <https://doi.org/10.1021/ja0643164>
9. Wang Y., Hernandez R. M., Bartlett D. J., Bingham J. M., Kline T. R., Sen A., Mallouk T. E. Bipolar electrochemical mechanism for the propulsion of catalytic nanomotors in hydrogen peroxide solutions // *Langmuir*. 2006. Vol. 22, No. 25. pp. 10451–10456. DOI: <https://doi.org/10.1021/la0615950>
10. Laocharoensuk R., Burdick J., Wang J. Carbon-nanotube-induced acceleration of catalytic nanomotors // *ACS Nano*. 2008. Vol. 2, No. 5. pp. 1069–1075. DOI: <https://doi.org/10.1021/nn800154g>
11. Vissers T., van Blaaderen A., Imhof A. Band formation in mixtures of oppositely charged colloids driven by an ac electric field // *Phys. Rev. Lett.* 2011. Vol. 106, Issue 22. 228303. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.106.228303>
12. Dreyfus R., Baudry J., Roper M. L., Fermigier M., Stone H. A., Bibette J. Microscopic artificial swimmers // *Nature*. 2005. Vol. 437. pp. 862–865. DOI: <https://doi.org/10.1038/nature04090>
13. Ahmed S., Wang W., Mair L. O., Fraleigh R. D., Li S., Castro L. A., Hoyos M., Huang T. J., Mallouk T. E. Steering acoustically propelled nanowire motors toward cells in a biologically compatible environment using magnetic fields // *Langmuir*. 2013. Vol. 29. Issue 52. pp. 16113–16118. DOI: <https://doi.org/10.1021/la403946j>
14. Tailin Xu T., Xu L-P., Zhang X. Ultrasound propulsion of micro-nanomotors // *Applied Materials Today*. 2017. Vol. 9. pp. 493–503. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.apmt.2017.07.011>
15. Robertson B., Kapral R. Nanomotor dynamics in a chemically oscillating medium // *J. Chem. Phys.* 2015. Vol. 142, Issue 15. 154902. DOI: <https://doi.org/10.1063/1.4918329>
16. Rozenbaum V. M., Dekhtyar M. L., Lin S. H., Trakhtenberg L. I. Photoinduced diffusion molecular transport // *J. Chem. Phys.* 2016. Vol. 145, Issue 6. 064110. DOI: <https://doi.org/10.1063/1.4960622>
17. Santiago I. Nanoscale active matter matters: challenges and opportunities for self-propelled nanomotors // *Nano Today*. 2018. Vol. 19. pp. 11–15. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.nantod.2018.01.001>
18. Xing Y., Zhou M., Du X., Li X., Jianqiang Li J., Xu T., Zhang X. Hollow mesoporous carbon@Pt Janus nanomotors with dual response of H_2O_2 and near-infrared light for active cargo delivery // *Applied Materials Today*. 2019. Vol. 17. pp. 85–91. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.apmt.2019.07.017>
19. Moran J. L., Wheat P. M., Posner J. D. Locomotion of electrocatalytic nanomotors due to reaction induced charge autoelectrophoresis // *Phys. Rev. E*. 2010. Vol. 81, Issue 6. 065302. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.81.065302>

20. Moran J. L., Posner J. D. Electrokinetic locomotion due to reaction-induced charge auto-electrophoresis // J. Fluid Mech. 2011. Vol. 680. pp. 31–66. DOI: <https://doi.org/10.1017/jfm.2011.132>
21. Mitchell P. Hypothetical thermokinetic and electrokinetic mechanisms of locomotion in microorganisms // Proc. R. Phys. Soc. Edin. 1956. Vol. 25. pp. 32–34.
22. Баданов С. С. Экспериментальные основы структурной химии (справочное пособие). М.: Издательство стандартов, 1986. 240 с.
23. Мартынов С. И., Ткач Л. Ю. О механизме перемещения агрегатов частиц в вязкой жидкости в переменном однородном внешнем поле // Журнал вычислительной математики и математической физики. 2019. Т. 59, № 3. С. 505–515. DOI: <https://doi.org/10.1134/S0044466919030128>
24. Жакин А. И. Электрогидродинамика // Успехи физ. наук. 2012. Т. 182, № 5. С. 495–520. DOI: <https://doi.org/10.3367/UFNr.0182.201205b.0495>
25. Hasimoto H. On the periodic fundamental solutions of the Stokes' equations and their application to viscous flow past a cubic array of spheres // J. Fluid Mech. 1959. Vol. 5, Issue 2. pp. 317–328. DOI: <https://doi.org/10.1017/S0022112059000222>
26. Мартынов С. И. Гидродинамическое взаимодействие частиц // Известия РАН. Механика жидкости и газа. 1998. № 2. С. 112–119.
27. Мартынов С. И., Ткач Л. Ю. Моделирование динамики агрегатов частиц в вязкой жидкости // Журнал вычислительной математики и математической физики. 2015. Т. 55, № 2. С. 109–118. DOI: <https://doi.org/10.7868/S0044466915020143>
28. Мартынов С. И., Ткач Л. Ю. Об одной модели динамики самодвижущихся агрегатов частиц в вязкой жидкости // Нелинейная динамика. 2016. Т. 12, № 4. С. 605–618. DOI: <https://doi.org/10.20537/nd1604005>

*Поступила 3.12.2020; доработана после рецензирования 15.02.2021;
принята к публикации 27.02.2021*

Информация об авторах:

Мартынов Сергей Иванович, главный научный сотрудник, БУ ВО «Сургутский государственный университет» (628412, Россия, г. Сургут, пр. Ленина, д. 1), доктор физико-математических наук, ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-6420-3315>, martynovsi@mail.ru

Ткач Леонилла Юрьевна, научный сотрудник, БУ ВО «Сургутский государственный университет» (628412, Россия, г. Сургут, пр. Ленина, д. 1), ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-8814-9285>, leonilla7777@mail.ru

Все авторы прочитали и одобрили окончательный вариант рукописи.

Конфликт интересов: авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

MSC2020 76D07, 76D09, 76D17

Hydrodynamic mechanism of movement of catalytic micro-/nanomotors

S.I. Martynov, L.Yu. Tkach

Surgut State University (Surgut, Russian Federation)

Abstract. A hydrodynamic mechanism of movement of a micro/nanomotor with a dipole charge induced by an electro-catalytic reaction on its surface and the formation of charges in the surrounding liquid is proposed. For this, the dynamics of a dipole aggregate in a cloud of small oppositely charged particles in a viscous fluid surrounding it is simulated. Under the action of the field of the aggregate, the particles in the cloud are set in motion, which forms a flow in the surrounding fluid. In turn, the flow creates a hydrodynamic force that moves the aggregate. The hydrodynamic interaction of all particles in the cloud with each other and with the dipole aggregate is taken into account at their different distributions in the liquid around the dipole. The total charge of all small particles can be either equal to zero or have a non-zero value. The calculations carried out confirmed the possibility of the dipole unit to move in all the cases considered as a result of action of the hydrodynamic force created by the formed flow of the surrounding fluid. In this case, the speed and direction of dipole movement significantly depends both on the distribution of small particles in the surrounding liquid and on their total charge. As the result of asymmetry in the distribution of small charged particles in the surrounding fluid, dipole unit will move not only in longitudinal but also in transverse direction. This leads to the need to use some mechanism of controlling its movement. As such a mechanism the action of an external field can be used, orienting the dipole unit in a given direction of motion. It is proposed to use an external magnetic field for such control. In this case, the dipole aggregate must have a magnetic moment due to the presence of a magnetizable nucleus inside the particles.

Key Words: viscous fluid, charged particles, hydrodynamic interaction, dipole aggregate, micro-/nanomotor

For citation: S.I. Martynov, L.Yu. Tkach. Hydrodynamic mechanism of movement of catalytic micro-/nanomotors. *Zhurnal Srednevolzhskogo matematicheskogo obshchestva*. 23:1(2021), 91–109. DOI: <https://doi.org/10.15507/2079-6900.23.202101.91-109>

REFERENCES

1. C. Montemagno, G. Bachand, S. Stelick, M. Bachand, “Constructing biological motor powered nanomechanical devices”, *Nanotechnology*, **10** (1999), 225–231.
2. W. Gao, J. Wang, “Synthetic micro/nanomotors in drug delivery”, *Nanoscale*, 2014, no. 6, 10486–10494. DOI: <https://doi.org/10.1039/x0xx00000x>
3. X. Li, Y.-M. Sun, Z.-Y. Zhang, N.-X. Feng, H. Song, Y.-L. Liu, L. Hai, J.-M. Cao, G.P. Wang, “Visible light-driven multimotion modes CNC/TiO₂ nanomotors for highly efficient degradation of emerging contaminants”, *Carbon*, **155** (2019), 195–203. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2019.08.039>
4. W. Gao, B. E.-F. de Avila, L. Zhang, J. Wang, “Targeting and Isolation of cancer cells using micro/nanomotors”, *Adv Drug Deliv Rev.*, **125** (2018), 94–101. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.addr.2017.09.002>

5. M. Medina-Sanchez, Xu H. Haifeng, O. G. Schmidt, “Micro- and nano-motors: the new generation of drug carriers”, *Therapeutic Ddelivery*, **9**:4 (2018), 303–316. DOI: <https://doi.org/10.4155/tde-2017-0113>
6. Z. Lin, C. Gao, M. Chen, X. Lin, Q. He, “Collective motion and dynamic self-assembly of colloid motors”, *Current Opinion in Colloid & Interface Science*, **35** (2018), 51–58. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cocis.2018.01.006>
7. W. F. Paxton, A. Sen, T. E. Mallouk, “Motility of catalytic nanoparticles through self-generated forces”, *Chemistry*, **11**:22 (2005), 6462–6470. DOI: <https://doi.org/10.1002/chem.200500167>
8. W. F. Paxton, P. T. Baker, T. R. Kline, Y. Wang, T. E. Mallouk, A. Sen, “Catalytically Induced Electrokinetics for Motors and Micropumps”, *J. Am. Chem. Soc.*, **128**:46 (2006), 14881–14888. DOI: <https://doi.org/10.1021/ja0643164>
9. Y. Wang, R. M. Hernandez, D. J. Bartlett, J. M. Bingham, T. R. Kline, A. Sen, T. E. Mallouk, “Bipolar electrochemical mechanism for the propulsion of catalytic nanomotors in hydrogen peroxide solutions”, *Langmuir*, **22**:25 (2006), 10451–10456. DOI: <https://doi.org/10.1021/la0615950>
10. R. Laocharoensuk, J. Burdick, J. Wang, “Carbon-nanotube-induced acceleration of catalytic nanomotors”, *ACS Nano*, **2**:5 (2008), 1069–1075. DOI: <https://doi.org/10.1021/nm800154g>
11. T. Vissers, A. van Blaaderen, A. Imhof, “Phys. Rev. Lett.”, **106**:22 (2011), 228303. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.106.228303>
12. R. Dreyfus, J. Baudry, M. L. Roper, M. Fermigier, H. A. Stone, J. Biette, “Microscopic artificial swimmers”, *Nature*, **437** (2005), 862–865. DOI: <https://doi.org/10.1038/nature04090>
13. S. Ahmed, W. Wang, L. O. Mair, R. D. Fraleigh, S. Li, L. A. Castro, M. Hoyos, T. J. Huang, T. E. Mallouk, “Steering acoustically propelled nanowire motors toward cells in a biologically compatible environment using magnetic fields”, *Langmuir*, **29**:52 (2013), 16113–16118. DOI: <https://doi.org/10.1021/la403946j>
14. Tailin Xu, L.-P. Xu, X. Zhang, “Ultrasound propulsion of micro-nanomotors”, *Applied Materials Today*, **9** (2017), 493–503. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.apmt.2017.07.011>
15. B. Robertson, R. Kapral, “Nanomotor dynamics in a chemically oscillating medium”, *J. Chem. Phys.*, **142**:15 (2015), 154902. DOI: <https://doi.org/10.1063/1.4918329>
16. V. M. Rozenbaum, M. L. Dekhtyar, S. H. Lin, L. I. Trakhtenberg, “Photoinduced diffusion molecular transport”, *J. Chem. Phys.*, **145**:6 (2016), 064110. DOI: <https://doi.org/10.1063/1.4960622>
17. I. Santiago, “Nanoscale active matter matters: Challenges and opportunities for self-propelled nanomotors”, *Nano Today*, **19** (2018), 11–15. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.nantod.2018.01.001>

18. Y. Xing, Zhou M. Mengyun, X. Du, X. Li, Jianqiang J. Li, T. Xu, X. Zhang, “Hollow meso-porous carbon@Pt Janus nanomotors with dual response of H_2O_2 and near-infrared light for active cargo delivery”, *Applied Materials Today*, **17** (2019), 85–91. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.apmt.2019.07.017>
19. J.L. Moran, P.M. Wheat, J.D. Posner, “Locomotion of electrocatalytic nanomotors due to reaction induced charge autoelectrophoresis”, *Phys. Rev. E.*, **81**:6 (2010), 065302. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.81.065302>
20. J.L. Moran, J.D. Posner, “Electrokinetic locomotion due to reaction-induced charge auto-electrophoresis”, *J. Fluid Mech.*, **680** (2011), 31–66. DOI: <https://doi.org/10.1017/jfm.2011.132>
21. P. Mitchell, “Hypothetical thermokinetic and electrokinetic mechanisms of locomotion in microorganisms”, *Proc. R. Phys. Soc. Edin.*, **25** (1956), 32–34.
22. S.S. Batsanov, *Experimental foundations of structural chemistry (reference manual)*, Publishing house of standardsIzdatelstvo standartov Publ., Moscow., 1986, 240 p.
23. S.I. Martynov, L.Yu. Tkach, “Mechanism of moving particle aggregates in a viscous fluid subjected to a varying uniform external field”, *Computational Mathematics and Mathematical Physics*, **59**:3 (2019), 475–483. DOI: <https://doi.org/10.1134/S0044466919030128>
24. A. I. Zhakin, “Electrohydrodynamics”, *Physics - Uspekhi fizicheskikh nauk*, **55**:5 (2012), 465–488. DOI: <https://doi.org/10.3367/UFNr.0182.201205b.0495>
25. H. Hasimoto, “On the periodic fundamental solutions of the Stokes’ equations and their application to viscous flow past a cubic array of spheres”, *J. Fluid Mech.*, **5**:2 (1959), 317–328. DOI: <https://doi.org/10.1017/S0022112059000222>
26. S.I. Martynovs, “Hydrodynamic interaction of particles”, *Izvestiya RAN. Fluid and Gas MechanicsMekhanika zhidkosti I gaza*, 1998, no. 2, 112–119.
27. S.I. Martynov, L. Yu. Tkach, “Simulation of particle aggregate dynamics in a viscous fluid”, *Computational Mathematics and Mathematical Physics*, **55**:2 (2015), 282109–118. DOI: <https://doi.org/10.7868/S0044466915020143290>
28. S. I. Martynov, L. Yu. Tkach, “On one model of the dynamics of self-propelled aggregates of particles in a viscous fluid”, *Rus. J. Nonlin. Dyn.*, **12**:4 (2016), 605–618. DOI: <https://doi.org/10.20537/nd1604005>

Submitted 3.12.2020; Revised 15.02.2021; Accepted 27.02.2021

Information about the authors:

Sergey I. Martynov, Chief Researcher, Surgut State University (1 Lenina av., Surgut, 628412, Khanty-Mansiysk Autonomous District - Yugra, Russia), Dr. Sci. (Physics and Mathematics), ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-6420-3315>, martynovski@mail.ru

Leonilla Yu. Tkach, Researcher, Surgut State University (1 Lenina av., Surgut, 628412, Khanty-Mansiysk Autonomous District - Yugra, Russia), ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-8814-9285>, leonilla7777@mail.ru

All authors have read and approved the final manuscript.

Conflict of interest: The authors declare no conflict of interest.