

Janus 颗粒自驱运动的数值模拟

崔海航 王雷磊 谭晓君

西安建筑科技大学，环境与市政工程学院，雁塔路13号，西安，陕西，710055

Email: cuihaihang@xauat.edu.cn

引言： Janus 颗粒是由物理或化学性质不同的两部分所构成的颗粒的总称¹。由于结构的特殊性以及自驱动特性使其在 MEMS、药物传输等领域有着潜在的应用价值。本文基于 COMSOL Multiphysics® 多物理场耦合模拟平台对不同形状的 Pt-SiO₂ 型 Janus 颗粒在不同浓度 H₂O₂ 溶液中的自扩散泳动进行了数值模拟，并进一步研究模拟了球形 Janus 颗粒的近壁面运动。

结果： 通过模拟得出柱状 Janus 颗粒在不同径长比 W 下的运动速度，并得出最佳径长比。球形 Janus 颗粒的近壁面运动模拟与实验数据显示出一致性^{2、3}。

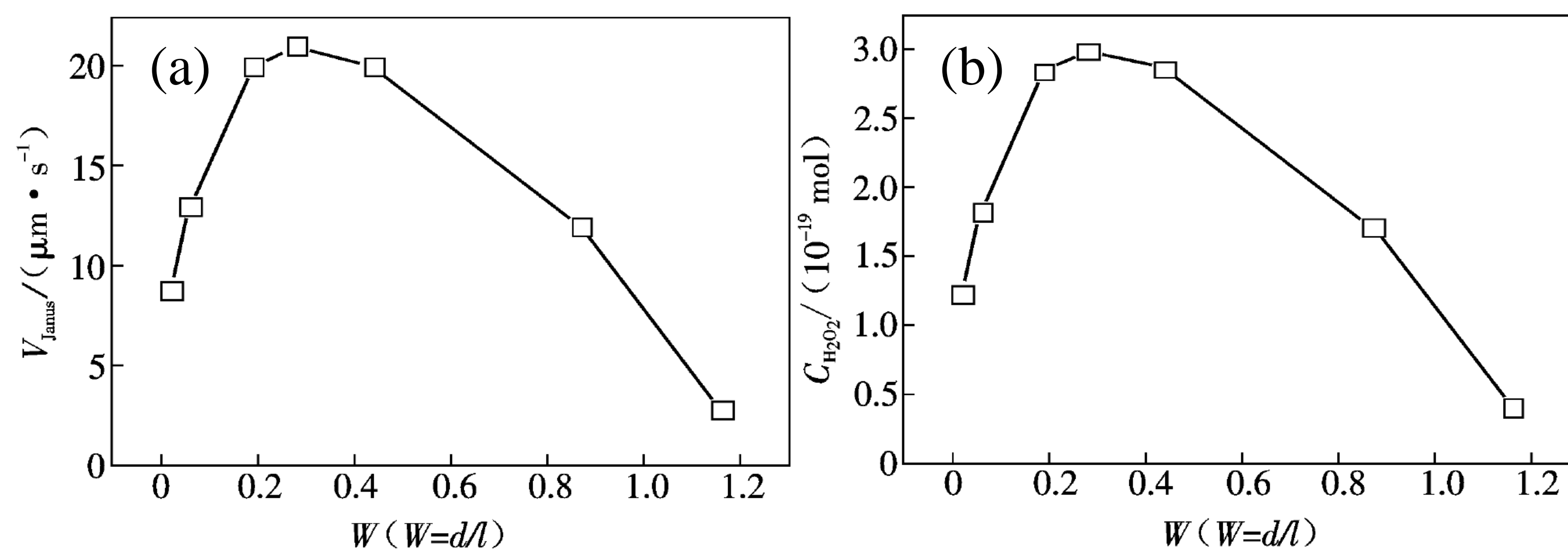


图 4 (a) Janus 颗粒速度; (b) H₂O₂ 浓度消耗随 W 变化图

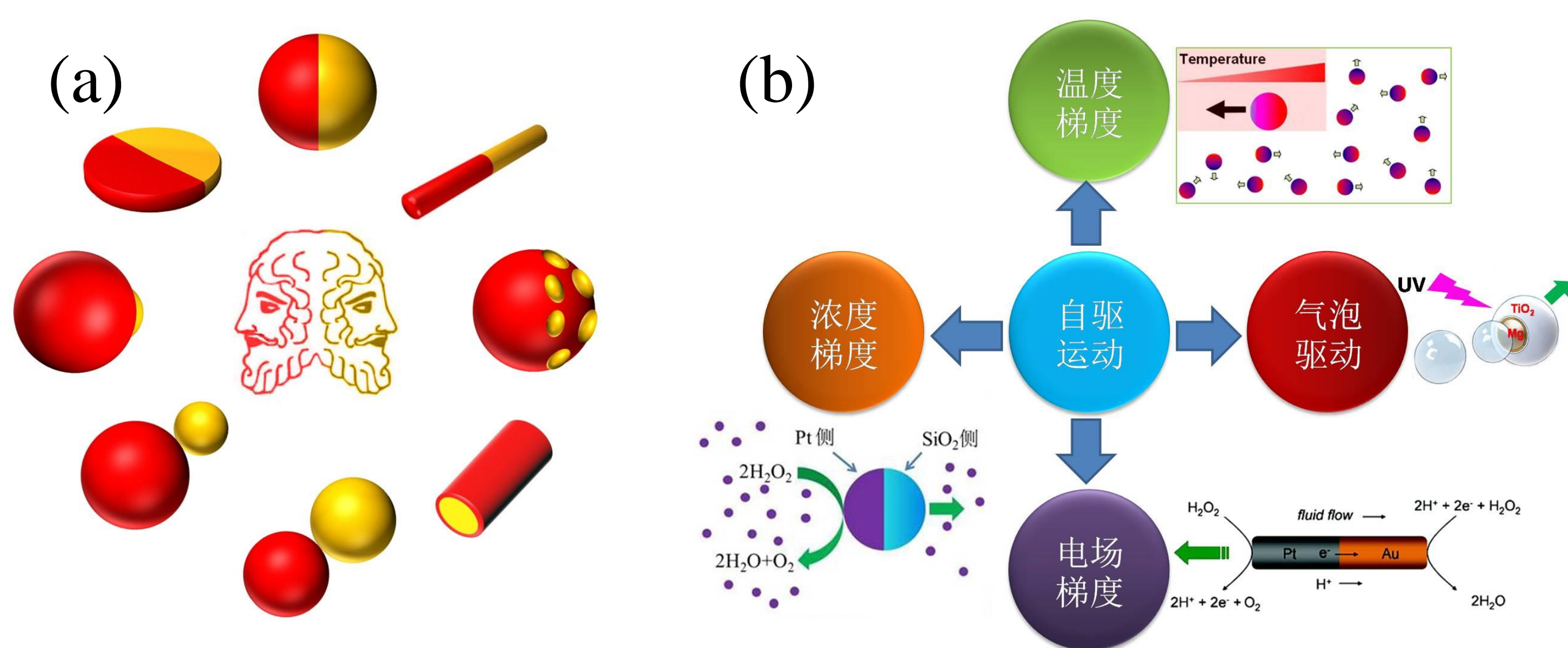


图 1 (a) 不同形状的Janus颗粒; (b) 自驱运动示意图

计算方法： 数值模型需要考虑三个模型：反应工程模型（如图2）、层流模型以及稀物质传输模型。在此基础上进行受力分析，得出受力平衡方程，进行计算。

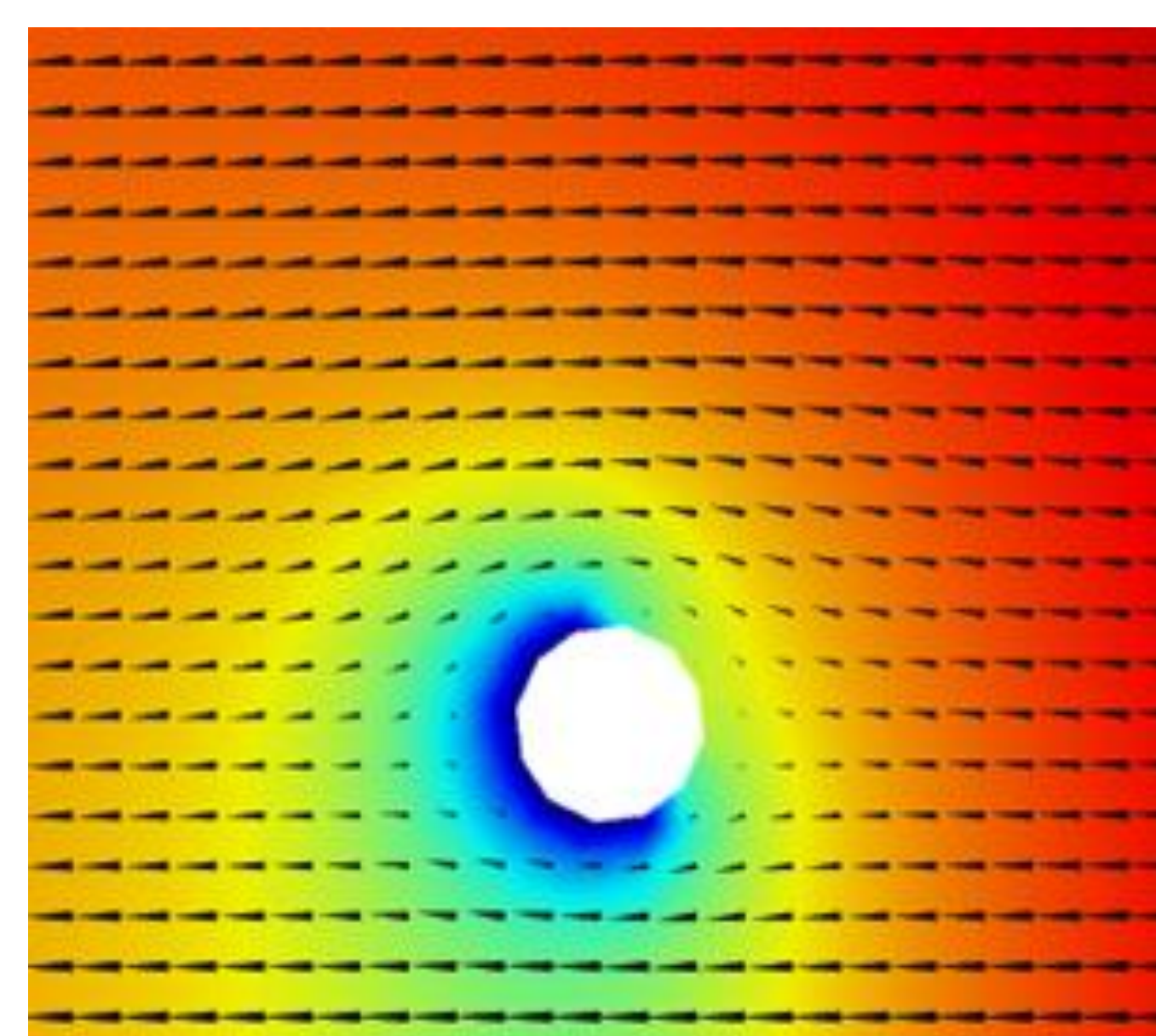


图 5 Janus 微球外部的速度 (箭头) 及 H₂O₂ 浓度 (颜色)

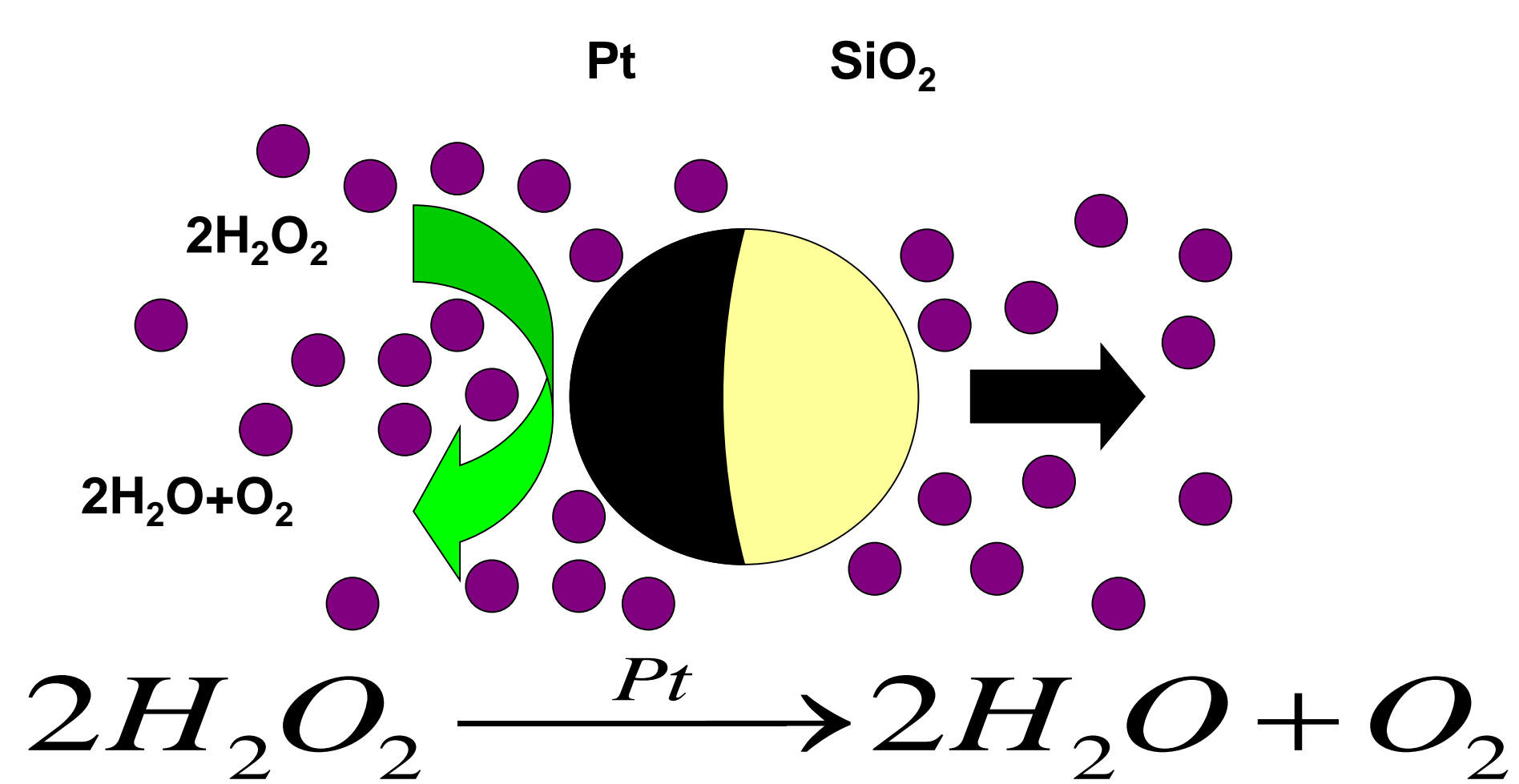
$C_{\text{H}_2\text{O}_2}$	2.5%	5%	10%
$V_{Janus} / \mu\text{m} \cdot \text{s}$	3	4.4	4.8
$\varphi / ^\circ$	18	16	9
$\delta / \mu\text{m}$	2.5	3.6	4.1
$\delta_{\varphi=0^\circ} / \mu\text{m}$	2.1	3	3.2

表 1 Janus 微球近壁面运动模拟结果

结论： 通过 COMSOL Multiphysics® 多物理场耦合模拟平台的数值模拟，得出不同形状下 Janus 颗粒的运动速度。在此基础上，球形 Janus 颗粒的近壁面运动模拟结果与实验结果相一致。以上研究成果为进一步利用 Janus 颗粒制作自驱动装置提供了理论基础。

参考文献：

- De Gennes P G. Rev. Mod. Phys., 1992
- 崔海航等. 不同形状 Janus 颗粒自驱动特性数值模拟[J]. 纳米技术与精密工程, 12(5): 340-345, 2014.
- 崔海航等. 自驱动 Janus 微球近壁运动特性实验与数值模拟研究[J]. 物理学报, 64(13): 134705-134705, 2015.



模型设置：

$$r = k_s^f C$$

$$\begin{cases} \nabla U = 0 \\ \mu \nabla^2 U = \nabla p \end{cases}$$

$$U \nabla C - D \nabla^2 C = R_i$$

图 2 Janus 颗粒自扩散泳动原理图

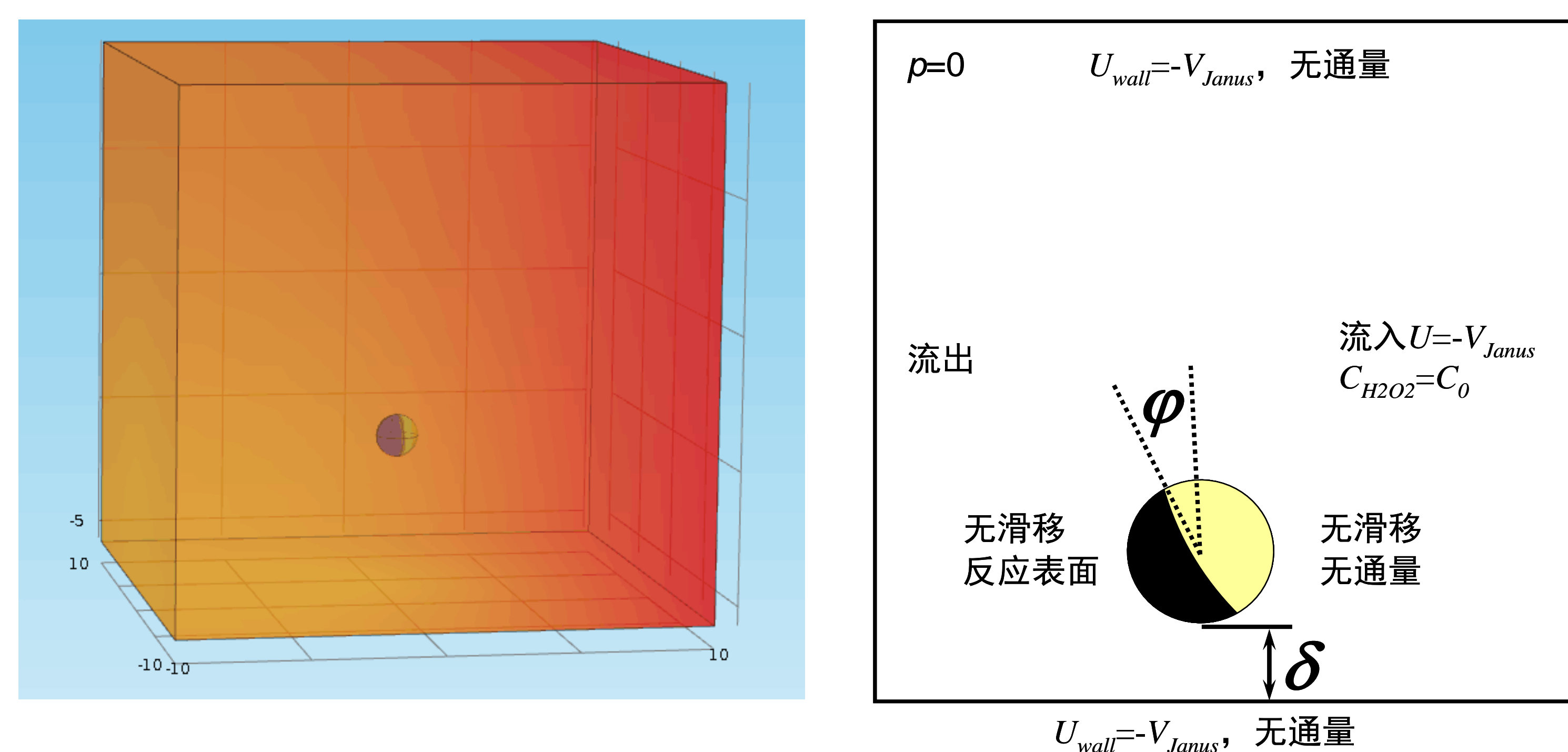


图 3 模型及边界条件设置