

# ИССЛЕДОВАНИЕ ПОВЕДЕНИЯ МАЛОРАЗМЕРНЫХ ЧАСТИЦ ПОД ВОЗДЕЙСТВИЕМ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ТОКА С ПОМОЩЬЮ ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Куцепалова Е.С.<sup>1</sup>, Шелистов В.С.<sup>2</sup>, Демехин Е.А.<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Куцепалова Екатерина Сергеевна - студент магистратуры,  
факультет математики и компьютерных наук;

<sup>2</sup>Шелистов Владимир Сергеевич - кандидат физико-математических наук,  
Научно-исследовательская часть,  
Кубанский государственный университет;

<sup>3</sup>Демехин Евгений Афанасьевич - доктор физико-математических наук,  
Финансовый университет при правительстве Российской Федерации,  
г. Краснодар

**Аннотация:** задача о движении проводящих микро- и наночастиц в электрическом поле, электрофорез — хорошо известный феномен, широко применяемый в промышленности и биологии (напыление краски на металлы, разделении смесей, в частности, белков и заряженных макромолекул в биохимии и медицине). Интерес к данной задаче в последнее время усилился благодаря ее применению в нанотехнологиях, она является частью некоторых космических биотехнологий.

**Ключевые слова:** электрическое поле, наночастицы, электрофорез, ток, моделирование, исследования.

При малых напряженностях электрического поля, согласно теории Смолуховского, скорость частицы пропорциональна напряженности поля и не зависит от размера микрогранулы; при больших — скорость частицы пропорциональна радиусу и квадрату напряженности поля. Это явление носит название электрофореза 2-го рода.

Несмотря на обилие как теоретических, так и экспериментальных работ, обзор которых можно найти в [2-3], многие вопросы, связанные с электрофорезом, остаются открытыми.

Движение проводящей микрочастицы в растворе бинарного электролита под действием электрического поля описывается замкнутой системой Нернста-Планка-Пуассона-Стокса. Частица считается непроницаемой для анионов, на ее поверхности задается постоянная концентрация катионов, потенциал на проводящей поверхности постоянен, и выполняются условия прилипания. Вдали от частицы концентрация ионов стремится к равновесной, скорость жидкости — к скорости частицы, электрическое поле — к внешнему наложенному.

В настоящей работе впервые численными методами получено замкнутое решение задачи. Трудности построения решения связаны с рядом факторов: уравнения Нернста-Планка-Пуассона-Стокса являются сильно сцепленной нелинейной системой в частных производных; задача имеет малый параметр при старшей производной. Существует несколько характерных пространственных масштабов, причем в каждом пространственном диапазоне происходят свои достаточно сложные явления, а весь феномен электрофореза 2-го рода является интегральным результатом действия этих факторов. Задача описывается тремя безразмерными параметрами: напряженностью внешнего поля  $E_\infty$ , коэффициентом сцепления гидродинамики и электростатики  $k$  и безразмерным числом Дебая  $\nu$ .

Поскольку на полюсах частицы (соответствующих направлению действия электрического поля) решение системы имеет особенности, в алгоритме было использовано разложение по собственным функциям системы - многочленам Лежандра и Гегенбауэра. Для выполнения нелинейных операций был использован квазиспектральный метод, для реализации которого потребовалась разработка преобразований Фурье по указанным многочленам. В радиальном направлении был сохранён конечноразностный метод, который оказался удобным за счёт возможности использования произвольного растяжения сетки. Формирование в окрестности частицы большого градиента концентраций потребовало сгущения узлов сетки в этой области. Напротив, на расстоянии порядка нескольких радиусов частицы сетка может быть разрежена без существенного ухудшения точности. Для решения системы уравнений по времени использовался полуневявный метод Рунге-Кутты третьего порядка.

На рис. 1 изображена частица и основные области решения, существование которых подтверждено расчетами: I — зона пространственного заряда, II — диффузионная область, III — зона, где пространственный заряд и диффузионный пограничный слой отсутствуют, она отделяется от I и II точкой  $x_0$  с углом  $\theta_0$ . Стрелками обозначено направление потока катионов к поверхности частицы. В процессе расчетов получены поля скоростей, электрического потенциала, концентраций ионов и плотности заряда в пространстве.

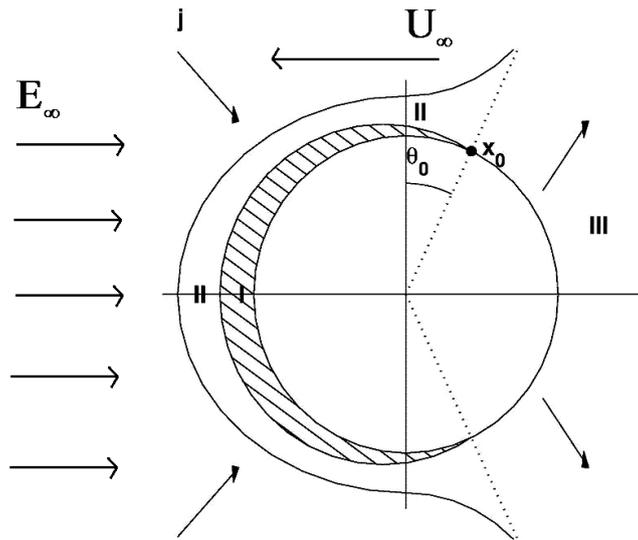


Рис. 1. Схема решения задачи

Найдено, что сразу за экватором,  $\theta > 90^\circ$ , скорость меняет свое направление, что приводит к образованию на задней части частицы вихря. На рис. 2 приведено типичное распределение тангенциальной компоненты скорости от угловой координаты вдоль частицы ( $E_\infty = 30$ ,  $\nu = 0,001$ ,  $\kappa = 0,2$ ). очень узкая зона около жесткой стенки с резким ростом скорости от нуля до скорости проскальзывания на рисунке не показана.

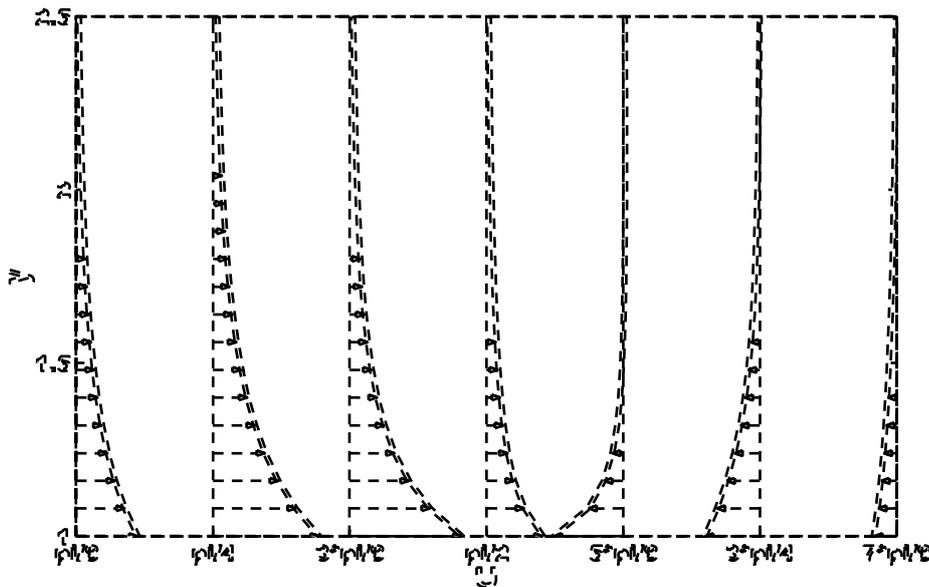


Рис. 2. Распределение тангенциальной скорости вдоль частицы

Анализ контрольных расчётов выявил следующие особенности модельной системы:

- 1) чрезвычайно большой градиент концентрации одного сорта ионов (не проходящих через поверхность частицы) в малой окрестности частицы;
- 2) слабое изменение полей концентраций на расстоянии порядка 4-5 радиусов частицы;
- 3) формирование за частицей вихрей

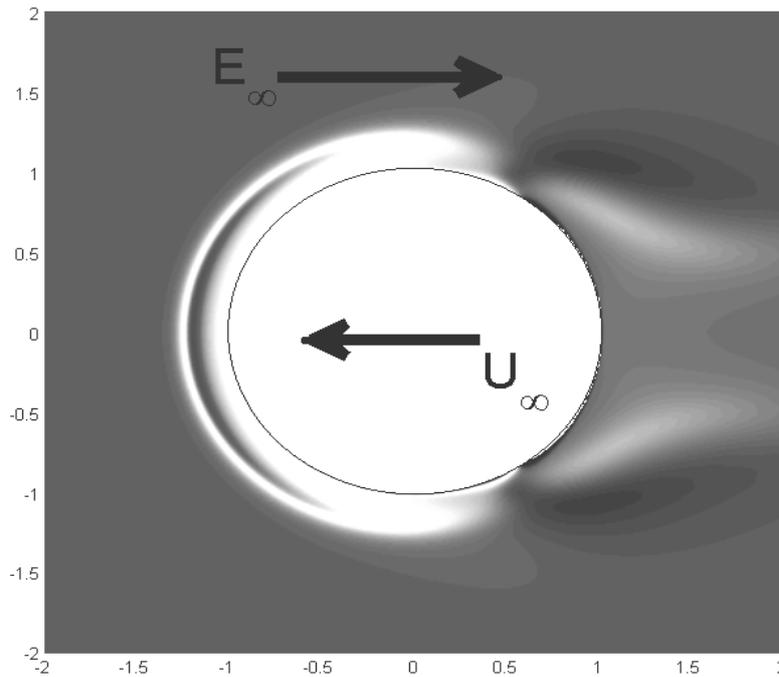


Рис. 3. Распределение  $\rho$  для  $E_\infty = 30$ ,  $\nu = 0,001$ ,  $\kappa = 0,2$

Результаты расчетов показали хорошее сходство с теоретическими результатами (см. рис. 4).

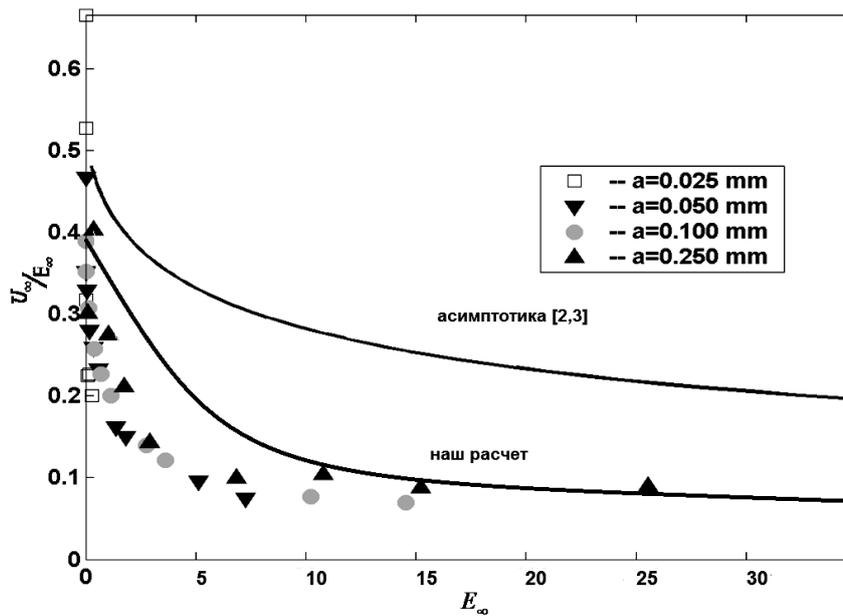


Рис. 4. Сравнение с аналитикой

В заключение укажем на впервые выявленный в настоящей работе переход от регулярного течения к хаотическому при достаточно больших напряженностях внешнего поля.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проекты №11-01-96505, №11-08-00480, 12-08-00924).

#### Список литературы

1. Dukhin S.S. Electrokinetic phenomena of second kind and their applications // Adv. Colloid Interface Sci., 1991. V. 35. P. 173–196.
2. Ben Y., Demekhin E.A., Chang H.-C. Nonlinear electrokinetics and "superfast" electrophoresis // J. Colloid Interface Sci., 2004. V. 276. P. 483–497.
3. Калайдин Е.Н., Демехин Е.А., Коровяковский А.С. К теории электрофореза второго рода // ДАН, 2009. Т. 425. № 5. С. 626–630.