پژوهشگاه دانش‌های بنیادی

شماره مقاله : ۶۰

مقاله‌نامه بیست و سومین کنفرانس بهاره فیزیک (۳۰-۲۹ اردیبهشت ۱۳۹۵)

شارش ذرات کلوئیدی کنشگر واداشته در یک میکروکانال باریک دو بعدی

ابراهیم فولادوند [۱]، بهاره آقایی [۱]

[۱] گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه زنجان

چکیده

در این مقاله با استفاده از دینامیک براوونی به بررسی شارش آمیزه‌ای از ذرات کلوئیدی شامل کلوئیدهای کنشگر و معمولی در یک کانال باریک دو بعدی پرداختیم. دیواره‌های کانال را دیواره‌های سخت در نظر گرفتیم و پتانسیل میان کلوئیدی را پتانسیل پوششی کولومبی یوکاوا فرض کردیم. به کلوئیدها نیروی کاتوره‌ای از سوی مولکولهای شاره وارد میشود، افزون بر این به کلوئیدهای کنشگر نیروی بیرونی در راستای کانال اعمال کردیم و سپس به بررسی وابستگی پارامتر نظم به نیروهای بیرونی پرداختیم.

۱. مدل

دو گونه کلوئید نوع $\boldsymbol{A}$ و $\boldsymbol{P}$ را در نظر می‌گیریم، کلوئیدهای نوع $\boldsymbol{A}$ کنشگر و کلوئیدهای نوع $\boldsymbol{P}$ کلوئیدهای معمولی می‌باشند. شمار کل کلوئیدها برابر است با $\boldsymbol{N_A + N_P = N}$ که در آن شمار کلوئیدهای کنشگر کسری از کل کلوئیدها می‌باشند $\boldsymbol{N_A = fN}$ پس برای کلوئیدهای معمولی $\boldsymbol{N_P = (1-f)N}$ است. ذرات در یک میکروکانال باریک دو بعدی با پهنای $\boldsymbol{L_x}$ و درازای $\boldsymbol{L_y}$ محدود شده‌اند، به گونه‌ای که در مکان‌های $\boldsymbol{X = 0}$ و $\boldsymbol{X = L_x}$ دیواره‌های سخت و در راستای $\boldsymbol{L_y}$ شرایط مرزی دوره‌ای در نظر گرفتیم. برهم کنش میان کلوئیدها را با چشم پوشی از گونه کلوئیدها، پتانسیل پوششی کولومبی یوکاوا در نظر گرفتیم[۱].

$$\boldsymbol{V(r) = V_0 \sigma \exp[-\kappa(r-\sigma)]\,/r} \qquad (۱)$$

که $\boldsymbol{\sigma}$ قطر ذرات، $\boldsymbol{r}$ فاصله میان ذرات، $\boldsymbol{V_0}$ مقیاس انرژی، $\boldsymbol{\kappa}$ وارون طول پوششی و نشان دهنده میزان برهم کنش میان ذرات می‌باشد. کلوئیدها در یک شاره با دمای ثابت T شناورند. به کلوئیدهای کنشگر نیروی بیرونی در راستای کانال اعمال کردیم به طوریکه $\boldsymbol{F^A_{ext} = F_A \hat{j}}$. معادله حاکم بر کلوئیدها را معادله حرکت لانژون فرا میرا در نظر گرفته و از برهم کنش‌های هیدرودینامیکی چشم پوشی کردیم[۲].

$$\boldsymbol{\gamma \frac{dr_i^A}{dt} = -\nabla_{r_i^A} \sum_{j\neq i} V(r_{ij}) + \gamma v_i^A + F^A_{ext,i} + W_i \qquad i = 1, \dots, N_A} \qquad (۲)$$

مقاله‌نامه بیست و سومین کنفرانس بهاره فیزیک (۳۰-۲۹ اردیبهشت ۱۳۹۵)

$$\frac{d\phi_i^A}{dt} = \sqrt{2D_R}W_i^\phi \quad (۳)$$

که ϕ_i^A زاویه بین راستای v_i^A و راستای محور x می‌باشد. در رابطه (۲) γ ضریب اصطکاک و v_i^A بردار سرعت حرکت مختص نیروی خودران می‌باشد که اندازه آن را برابر با مقدار ثابت v فرض کردیم، اما راستای آن تحت تاثیر راستای پخش با ضریب پخش چرخشی $D_R = \frac{k_BT}{8\pi\eta\sigma^3}$ است که η ضریب چسبندگی شاره می‌باشد و ضریب پخش انتقالی برابر است با $D_T = \frac{k_BT}{3\pi\eta\sigma}$.که در این رابطه W_i نیروی کاتوره‌ای است که از طرف مولکولهای شاره به کلوئیدها وارد می‌شوند میانگین این نیروی کاتوره‌ای صفر است و همبستگی زمانی آن به شکل زیر می‌باشد[۱و۳].

$$\overline{w_{i\alpha}(t)w_{j\beta}(\acute{t})} = 2k_BT\gamma\delta_{\alpha\beta}\delta_{ij}\delta(t-\acute{t}) \quad (٤)$$

W_i^ϕ نیز به همین شکل تعریف می شوند[٤].

این رابطه برای کلوئیدهای معمولی نیز به همین شکل است اما بدون جمله‌های نیروی خودران و نیروی بیرونی.

۲. جزئیات شبیه سازی

شمار $N = 100$ کلوئید را درون کانالی با پهنای $L_x = 5\sigma$ و درازای $L_y = 20\sigma$ به صورت کاتوره‌ای می‌چینیم. سطح کانال را با $S = L_xL_y$ و چگالی عددی را با $\rho = \frac{N}{S}$ نشان می‌دهیم. $f = 0.5$ در نظر گرفتیم پس $N_A = N_P = 50$ در نتیجه چگالی عددی هر دو گونه $\rho_A = \frac{N_A}{S}$ و $\rho_P = \frac{N_P}{S}$ در اینجا مقدار یکسانی دارند.

گام زمانی استفاده شده dt=0.001 و زمان کل شبیه سازی را برابر با ۱۰۰۰۰۰ گام زمانی قرار دادیم. و مقادیر $\sigma = 1$، $\kappa = \frac{1}{\sigma}$ و $\rho = \frac{1}{\sigma^2}$ اختیار کردیم و همچنین $U_0 = 2.5$ قرار دادیم، U_0 و V_0 توسط رابطه $U_0 = V_0/k_BT$ با هم در پیوند هستند.

۳. نتایج شبیه سازی

پارامتر نظم

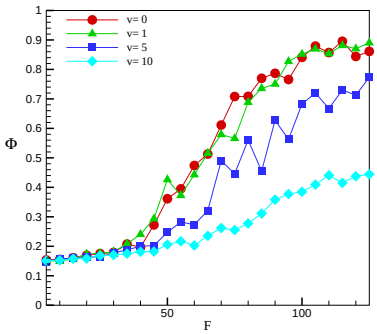
در این بخش پارامتر نظمی را معرفی می‌کنیم که تو سط آن می‌توانیم ر سیدن سامانه به حالت منظم و ت شکیل خطوط حرکتی را م شخص می‌کنیم. این پارامتر بدین گونه است که برای هر ذره i یک پارامتر نظم ϕ_i تعریف می‌کنیم که مقدار آن را یک در نظر می‌گیریم برای زمانی که فاصله عرضی

مقاله‌نامه بیست و سومین کنفرانس بهاره فیزیک (۳۰-۲۹ اردیبهشت ۱۳۹۵)

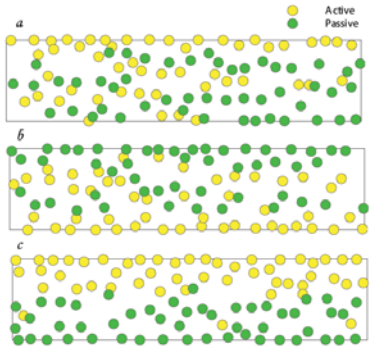
$r_1 = |x_i - x_j|$ از همه ذرات j از گونه دیگر بزرگتر از مقیاس طولی $r_1 > \rho^{-1/d}/2$ باشد و در غیر این صورت مقدار آن را صفر در نظر می‌گیریم. باید یادآور شویم که d بعد سامانه می‌باشد. پس پارامتر نظم ϕ به شکل زیر است[۳].

$$\Phi = \frac{1}{N}\langle \sum_{i=1}^{N} \phi_i \rangle \qquad (۵)$$

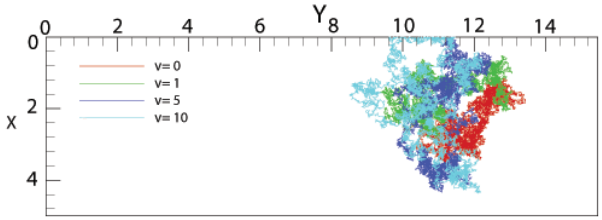
توجه کنید که در اینجا براکت میانگین زمانی می‌با شد. همان گونه که در شکل ۱ می‌بینید Φ تابعی از F ا ست. گذر از حالت نامنظم به حالتی که خطوط حرکتی تشکیل می‌شود یک گذار مرتبه اول است. در شکل ۲، تصویر آنی از این سامانه به ازای مقادیر گوناگونی از v را مشاهده می‌کنیم.



شکل ۱. در شکل بستگی پارامتر نظم Φ به نیروی بیرونی F برای مقادیر گوناگونی از v نشان داده شده است و همانطور که انتظار داریم با افزایش مقدار v بی نظمی در کانال بیشتر است.



شکل ۲. تصاویرآنی از سامانه برای $F_A = 125$ a) حالت نامنظم برای $v = 10, \Phi = 0.44$. b) $v = 5, \Phi = 0.77$ c) حالت نسبتا منظم برای $v = 0, \Phi = 0.86$.



شکل۳. در این شکل مسیر حرکتی یک ذره کلوئید کنشگر را به ازای مقادیر گوناگونی از v می‌بینیم.

نتیجه‌گیری

پارامتر نظم را برای سامانه‌ای با دو گونه ذره کلوئیدی در یک میکروکانال باریک به دست آوردیم و دیدیم که با افزایش نیروی بیرونی اعمال شده سامانه یک گذار مرتبه اولی از حالت نا منظم به حالت منظم انجام می‌دهد. و همان‌گونه که انتظار داشتیم با افزایش سرعت نیروهای خودران بی نظمی در سامانه بیشتر شد.

مرجع‌ها

1. M. E. Foulaadvand, B. Aghaee, *Eur. Phys. J. E.*, 2016.
2. Giorgio. Volpe, Giovanni. Volpe, *Am. J. Phys.*, 81, 224, 2013.
3. J. Dzubiella, G. P. Hoffmann, H. Lowen, *Phys. Rev. Lett.*, 65, 021402, 2002.
4. G. Volpe, S. Gigan, G. volpe, *Am. J. Phys*, 82, 7, 2014.