

УДК 532.5.032:541.182

Гидродинамический механизм перемещения микро-/наномотора с магнитным приводом*

Мартынов С. И., Ткач Л. Ю.

Сургутский государственный университет¹

Аннотация: Рассмотрен гидродинамический механизм перемещения модели микро-/наномотора с магнитным приводом. Мотор представляет собой цепочку из трех сферических частиц разного размера с электрическим зарядом, удерживающим их вместе. Общий заряд системы равен нулю. Одна или две крайние частицы в цепочке обладают магнитным моментом. Цепочка находится в вязкой жидкости и на нее действует вращающееся магнитное поле. В отсутствие внешнего поля частицы находятся в равновесии, что соответствует минимальной энергии взаимодействия. После включения вращающегося магнитного поля частицы с магнитным моментом начинают вращаться, образуя поток в окружающей вязкой жидкости. Течение жидкости вызывает гидродинамическую силу, которая перемещает цепочку в определенном направлении. Проведено численное моделирование динамики шести модельных цепочек с одной вращающейся частицей и одной цепочки с двумя вращающимися частицами. В расчетах учитывается действие на частицы внешнего момента от вращающегося магнитного поля, сил гидродинамического взаимодействия частиц друг с другом, а также внутренних сил, удерживающие частицы вместе. Определены параметры магнитного поля и структуры цепочки для наиболее быстрого ее перемещения. Предложенный механизм перемещения цепочки может быть использован для проектирования микро-/наномоторов и управления ими до места доставки полезной нагрузки.

Ключевые слова: численное моделирование, вязкая жидкость, микро-/наномотор, гидродинамическое взаимодействие, энергия взаимодействия, магнитное поле.

1. Введение

Результаты исследования динамики самодвижущихся частиц в жидкости, представленные в международных публикациях за последнее десятилетие, представляют собой часть обширных и интенсивно проводимых исследований неравновесных систем с активными частицами, находящихся в неравновесном состоянии вследствие воздействия внешних полей (электрических или магнитных), химических реакций или гидродинамических течений. Существующие нанотехнологии позволяют создавать разного рода синтетические самодвижущиеся частицы [1]. Системы с такими частицами демонстрируют возможность динамической самосборки, как результат коллективного поведения активных частиц в условиях неравновесного состояния [2]. Одной из выявленных проблем при применении активных частиц на основе каталитической реакции на ее поверхности является недостаточная их управляемость. В этом смысле активация частиц внешним полем (магнитным или электрическим) имеет преимущество, что показывают исследования [4, 5].

Во всех случаях движение наномотора происходит в вязкой жидкости, что требует более полного понимания гидродинамических процессов, происходящих при активации частиц. Например, в работах [6–8] результаты моделирования показали, что уравнения электрогидродинамики (континуальная модель), используемые в литературе [9, 10] для описания

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект No 18-41-86002/18)

электрофоретического механизма, не корректно учитывают гидродинамику окружающей жидкости за счет движения заряженных частиц в ней, и, следовательно, дают не корректный результат динамики каталитических микро-/наномоторов. Авторами предложен гидродинамический механизм, формирующий поток в окружающей жидкости, который перемещает наномотор в заданном направлении.

В работе [11] рассматривались системы заряженных или дипольных частиц, суммарный заряд или магнитный момент которых равен нулю, движущихся в результате действия гидродинамической силы, создаваемой потоком окружающей вязкой жидкости за счет относительного движения частиц системы во внешнем поле. Ниже моделируется динамика системы частиц с гибридными свойствами агрегатов заряженных и дипольных частиц, рассмотренных в [11].

2. Постановка задачи и метод решения

Искусственный магнитный микромотор, представляющий собой цепную структуру суперпарамагнитных частиц, покрытых стрептавидином, образованным вдоль приложенного постоянного магнитного поля, рассматривался в статье [12]. Частицы соединены двухцепочечной дезоксирибонуклеиновой кислотой (ДНК) с биотином на каждом конце (биотин и стрептавидин являются взаимными белками, которые образуют прочные связи). Цепь присоединяется к полезной нагрузке и движется в переменном магнитном поле, перпендикулярном приложенной постоянной.

В настоящей работе моделируется динамика агрегата, представляющего собой цепочку из трех заряженных частиц. Центральная частица имеет электрический заряд, который по величине равен сумме зарядов крайних частиц, но имеет другой знак. Система в целом не имеет заряда и находится в состоянии устойчивого равновесия благодаря действию неэлектрических сил. Подобные системы частиц были рассмотрены в статье [11]. Различие состоит в том, что одна или две частицы, расположенные вокруг центральной, должны иметь дипольный магнитный момент. Таким образом, рассматриваемая система является своего рода гибридной структурой, которая имеет сходство как с цепной структурой из [11], так и со структурой из [12].

Рассмотрим 3 твердых сферических частицы, помещенных в несжимаемую жидкость плотности ρ и вязкость η . Частицы могут иметь произвольный радиус и разную плотность. Предполагается, что силы взаимодействия (притяжение и отталкивание) действуют между частицами, удерживая их в равновесном положении, в котором потенциальная энергия взаимодействия U минимальная. Будем считать энергию частиц в агрегате U как сумму энергий парных взаимодействий частиц с номерами i и j :

$$U = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N U_{ij}, \quad i \neq j$$

Здесь необходимо отметить следующее. Как указано в работе [11], при учете энергии взаимодействия большого числа частиц возникает проблема, аналогичная случаю гидродинамического взаимодействия [13]: при сложении сил парных взаимодействий, имеющих вид пропорциональный r^{-n} , где $n \leq 3$, получаем расходящиеся ряды для большого числа взаимодействующих частиц. И хотя для определения потенциала взаимодействующих частиц решается линейная задача (обычно это уравнения Пуассона или Лапласа с соответствующими граничными условиями), граничные условия для потенциала на поверхности каждой частицы являются интегральными в том смысле, что описывают суммарный вклад от взаимодействия выделенной частицы со всеми остальными. Поэтому решение задачи о

потенциальном взаимодействии трех и более частиц нельзя представить в виде суммы решений задач о взаимодействии пар частиц, где суммирование берется по всем возможным комбинациям пар из заданной конфигурации частиц. Для корректного учета такого рода сил взаимодействия для большого числа частиц необходимо найти решение уравнений в областях вне и внутри частиц с соответствующими граничными условиями. Решение этой тривиальной задачи не является целью данной работы, поэтому используется метод парных взаимодействий, дающий достаточную точность для того числа частиц в агрегате, которые будут рассмотрены ниже.

Считая, что относительное положение частиц определяется радиус-векторами \mathbf{r}_{ij} , соединяющими центры i и j частиц, из условия минимальности энергии взаимодействия следует, что в положении равновесия каждой частицы с индексом i должно выполняться равенство

$$\left(\frac{\partial U_i}{\partial \mathbf{x}}\right)_{\mathbf{r}_{ij}=\mathbf{r}_{ij}^0} = 0, \quad U_i = \sum_{j=1}^N U_{ij},$$

где \mathbf{r}_{ij}^0 – радиусы-векторы, соответствующие положению равновесия частиц в агрегате.

В настоящей работе используется метод, основанный на представлении динамики агрегата как динамики системы частиц, образующих агрегат, при учете как внутренних сил или наложенных связей, которые удерживают частицы в агрегате, так и сил гидродинамического взаимодействия между ними. Этот подход предложен в работах [13, 14] и дает хорошее согласие с экспериментальными результатами. Суть метода заключается в том, что записываются уравнения движения каждой частицы с учетом всех сил, действующих на нее со стороны всех других частиц, в том числе и силы гидродинамического взаимодействия, а также уравнения вращательного движения, с учетом моментов действующих на частицы. Система уравнений динамики системы частиц записывается в виде:

$$\mathbf{F}_k^{(i)} + \mathbf{F}_k^{(e)} + \mathbf{F}_k^{(h)} = 0, \quad \mathbf{T}_k^{(i)} + \mathbf{T}_k^{(e)} + \mathbf{T}_k^{(h)} = 0. \quad (1)$$

Здесь $\mathbf{F}_k^{(h)}$ – силы, $\mathbf{T}_k^{(h)}$ – моменты сил со стороны жидкости, $\mathbf{F}_k^{(e)}$, $\mathbf{T}_k^{(e)}$ – внешние силы и моменты сил, $\mathbf{F}_k^{(i)}$, $\mathbf{T}_k^{(i)}$ – внутренние, действующие на частицу с номером k . Причем, $\mathbf{F}_k^{(i)} = -\nabla U_k$.

Для нахождения гидродинамических сил $\mathbf{F}_k^{(h)}$ и моментов $\mathbf{T}_k^{(h)}$, действующих на частицы, решается система уравнений гидродинамики. В случае малых чисел Рейнольдса система уравнений для скорости \mathbf{u} и давления p жидкости имеет вид:

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

На поверхности частицы с номером k должны выполняться условия:

$$u_i = V_i^k + \Omega_{ij}^k x_j^k, \quad |\mathbf{X}^k| = a^k.$$

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:

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

где p_0 – невозмущенное давление в жидкости.

Для решения системы уравнений гидродинамики и определения сил \mathbf{F}_k^h и моментов \mathbf{T}_k^h использовался метод [13, 14], основанный на представлении решения уравнений гидродинамики в виде мультипольного разложения с тензорными коэффициентами и позволяющий учитывать гидродинамическое взаимодействие большого числа частиц в вязкой жидкости. Для получения корректных вычислительных результатов учитывались слагаемые с тензорными коэффициентами шестого порядка, что дало погрешность вычислений в десятые доли процента. Указанная выше погрешность получена при компьютерном моделировании, когда вместо реальных параметров задачи используются модельные. Это связано с тем, что для реальных течений Стокса размеры частиц должны быть достаточно малыми, что затрудняет нахождения численного решения системы уравнений и визуализацию результатов. Поэтому применялся метод подобия и модельные параметры. При компьютерном моделировании задаются размер частицы \hat{a} , вязкость несущей жидкости $\hat{\eta}$, величина внешней силы \hat{F} , действующей на каждую частицу, и ее направление, а также промежуток времени \hat{t} . Детально такой метод моделирования и связь между реальными и модельными параметрами представлены в работах [14].

Рассмотрим агрегат, состоящий из трех частиц: центральная частица B и две A, C , расположенных вокруг центральной на расстоянии $5.5a$, где a – характерный размер (рис. 1). Радиусы частиц A, B и C равны, соответственно, k_1a, k_2a, k_3a , где $k_i, i = 1, 2, 3$ – коэффициенты, характеризующие масштаб частиц.

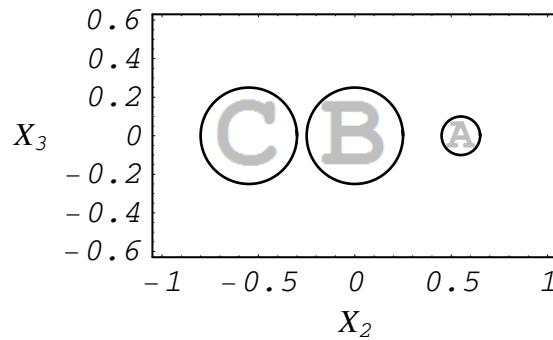


Рис. 1. Структура агрегата

Заряд частицы B положителен и равен по величине $2q$, где q – отрицательный заряд у каждой из двух других частиц, то есть агрегат в целом заряжен нейтрально. Энергия взаимодействия частиц в агрегате складывается из энергии притяжения U_1 между центральной положительно заряженной частицей и каждой из двух отрицательно заряженных частиц, энергии отталкивания U_2 между отрицательно заряженными частицами и энергией отталкивания некулоновского взаимодействия U_3 между центральной и двумя другими частицами [13]. Суммарная энергия, например в точке, занимаемой частицей A , имеет вид:

$$U = U_1 + U_2 + U_3, \quad U_1 = -k \frac{2q^2}{r_{BA}}, \quad U_2 = k \frac{q^2}{r_{CA}}, \quad U_3 = \frac{\gamma}{r_{BA}^2}$$

Здесь k – коэффициент пропорциональности в законе Кулона, неизвестный коэффициент γ определяется из условия равенства нулю сил в положении устойчивого равновесия. Для указанного на рис. 1 положения частиц имеем следующие равенства:

$$r_{CA} = 2r, \quad r_{BA} = r$$

. С учетом этих соотношений выражение для силы, действующей на частицу A , примет вид:

$$F_A = k \frac{2q^2}{r^2} - k \frac{q^2}{4r^2} - \frac{2\gamma}{r^3}.$$

Поскольку в положении равновесия сила должна быть равна нулю, получаем соотношение:

$$\gamma = kq^2 \cdot 0.48125a.$$

Будем предполагать, что частица A или C имеет магнитный момент \mathbf{m} . Во вращающемся однородном магнитном поле частица A или C также начинает вращаться с угловой скоростью ω , стремясь ориентировать свой магнитный момент вдоль приложенного поля. Вращение частицы приводит в движение жидкость, которая приводит в движение другие частицы агрегата. Как результат течения в окружающей агрегат жидкости формируется гидродинамическая сила, движущая агрегат в определенном направлении. Для того чтобы агрегат двигался в направлении, вдоль которого частицы находятся в положении равновесия, необходимо периодически менять направление вращения магнитного поля.

Цель данного исследования – показать, что агрегаты рассматриваемой структуры действительно движутся в выбранном направлении под действием гидродинамической силы, создаваемой потоком окружающей жидкости в результате деформации структуры вращающемся магнитным полем. Ниже приведены результаты моделирования динамики таких агрегатов.

3. Результаты моделирования

Численно моделировалась динамика шести модельных агрегатов рассмотренной выше структуры, в которой одна частица имеет магнитный момент \mathbf{m} . Агрегаты различаются по размеру частиц A и C , размер частицы B остается тем же. Однородное магнитное поле напряженностью \mathbf{H} приложена к системе. Вектор $\mathbf{H} = (0; -H \cos(\Omega t); -H \sin(\Omega t))$ вращается в плоскости агрегата с частотой Ω . Момент $\mathbf{m} \times \mathbf{H}$, действующий на частицу A , рассматривается одинаковым для все шести модельных структур агрегатов.

Как упоминалось выше, в расчетах вместо реальных параметров задачи используются модельные. В компьютерном моделировании задаются размер частиц \hat{a} , вязкость несущей жидкости $\hat{\eta}$, величина внешнего момента \hat{M} , действующего на частицу с магнитным моментом \hat{m} и интервал времени \hat{t} .

Модельные параметры выбираются из условия, чтобы число Рейнольдса было мало: $\hat{a} = 0.1$ см, $\hat{\eta} = 1$ г/(см·сек). Размеры частиц агрегатов приведены в таблице 1.

Таблица 1. Размеры частиц агрегата.

Частица A	Частица B	Частица C
0.15 \hat{a}	0.25 \hat{a}	0.3 \hat{a}
0.1 \hat{a}	0.25 \hat{a}	0.25 \hat{a}
0.1 \hat{a}	0.25 \hat{a}	0.1 \hat{a}
0.15 \hat{a}	0.25 \hat{a}	0.1 \hat{a}
0.2 \hat{a}	0.25 \hat{a}	0.1 \hat{a}
0.25 \hat{a}	0.25 \hat{a}	0.1 \hat{a}

Вращательный модельный момент $\hat{M} = |\mathbf{m} \times \mathbf{H}|$ прикладывается к частице A во всех рассмотренных случаях модельных агрегатов. Его величина берется равной 1.5 г·см²/сек². Считается, что величина вращательного момента \hat{M} остается постоянной и максимальной.

Для этого необходимо, чтобы угол между векторами \mathbf{m} и \mathbf{H} оставался неизменным. Это возможно, когда угловая скорость частицы A и частота вращения вектора \mathbf{H} одинаковые $\omega = \Omega$. Уравнения вращения модельного и реального агрегатов записываются следующим образом:

$$8K\pi\eta a^3\omega = M, \quad 8K\pi\hat{\eta}\hat{a}^3\hat{\omega} = \hat{M}$$

Здесь, коэффициент K характеризует геометрию структуры и не зависит от размеров частиц в структуре. Магнитный момент частицы определяется, как $m = M_s 4\pi a^3 / 3$, где M_s намагниченность насыщения материала из которого сделана частица. Подставляя выражения для магнитного момента частицы в эти уравнения, получаем:

$$8K\pi\eta a^3\omega = \frac{4\pi a^3}{3} M_s H, \quad 8K\pi\hat{\eta}\hat{a}^3\hat{\omega} = \frac{4\pi\hat{a}^3}{3} M_s \hat{H}$$

Эти уравнения дают соотношения между реальными и модельными параметрами при вращении частиц:

$$\frac{\eta\omega}{\hat{\eta}\hat{\omega}} = \frac{H}{\hat{H}}.$$

Другое соотношение следует из равенства чисел Рейнольдса модельного и реального течений жидкости при вращении частиц:

$$\frac{\rho\omega a^2}{\eta} = \frac{\rho\hat{\omega}\hat{a}^2}{\hat{\eta}}. \quad (2)$$

Из последних двух равенств следует соотношение между реальным и модельным значением напряженности магнитного поля:

$$H = \frac{\eta^2 \hat{a}^2}{\hat{\eta}^2 a^2} \hat{H}. \quad (3)$$

Для ферромагнетиков намагниченность насыщения M_s равна 450 Г. Для вращающейся частицы размером $\hat{a} = 0.1$ см, получаем модельное значение напряженности равное $\hat{H} = 0.796$ Э. Изменение размера вращающейся частицы также изменяет значение магнитного поля, поскольку крутящий момент одинаков для всех рассмотренных случаев.

В предположении, что модельный заряд частиц таков, что $k\hat{q}^2 = 20/7 \cdot 10^{-13}$ Н·м², численно моделируется динамика шести модельных агрегатов описанной выше структуры, находящихся в начальный момент в положении равновесия. Вектор магнитного момента частицы A направлен вдоль оси Ox_2 . Затем, перпендикулярно этому направлению включается вращающееся магнитное поле, действующее в течении 15 сек. После этого направление вращения меняется на противоположное и действует в течении 30 сек. После этого периода вращение вновь меняется на противоположное и действует в течении 30 сек. Изменение направления вращения происходит с периодом 30 сек. Движение агрегата происходит циклично и подобен движению некоторых плавающих организмов. Подобный механизм формирует в окружающей жидкости вихревое течение, которое создает гидродинамическую силу для перемещения агрегата. Численные результаты по моделированию динамики рассматриваемых агрегатов за модельный интервал времени $\hat{T} = 30$ сек приведены в таблице 2. Параметр ϵ означает погрешность вычислений. Перемещение частицы B обозначается $\Delta\hat{l}$. Из таблицы 2 следует, что результаты существенно зависят от относительных размеров частиц.

Смещение частиц A и C немного отличается по величине от смещения частицы B , что обусловлено деформацией агрегата действием гидродинамической силы.

Как видно из табл. 2, второй агрегат движется быстрее остальных. Поскольку сумма внешних сил, действующих на частицы агрегата со стороны магнитного поля, равна нулю,

Таблица 2. Результаты моделирования.

$\hat{\omega}$, сек ⁻¹	$\Delta \hat{l}$, см	ε
59.5897	-0.01037	$7.8415 \cdot 10^{-4}$
59.4719	-0.0200737	$1.6064 \cdot 10^{-3}$
59.4741	-0.0111532	$1.3225 \cdot 10^{-3}$
17.4758	-0.0113553	$1.2619 \cdot 10^{-3}$
7.24737	-0.0117475	$1.0064 \cdot 10^{-3}$
3.58787	-0.0126628	$3.8657 \cdot 10^{-3}$

а внутренние силы не могут изменить положение центра тяжести системы частиц, то следует признать, что движение агрегатов обусловлено действием гидродинамической силы. Взаимодействие частиц приводит к течению в окружающей вязкой жидкости, которое и создает силу, движущую агрегат. Динамика второго блока показана на рис. 2-6. Другие модели агрегатов имеют аналогичную динамику.

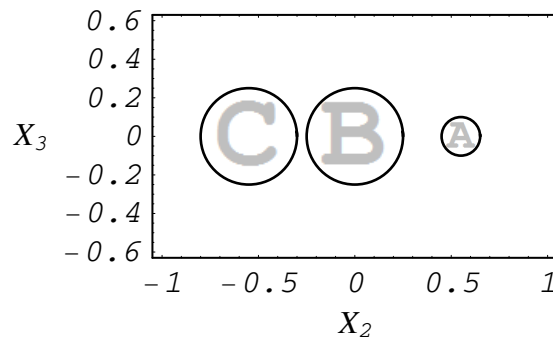


Рис. 2. Начальная положение.

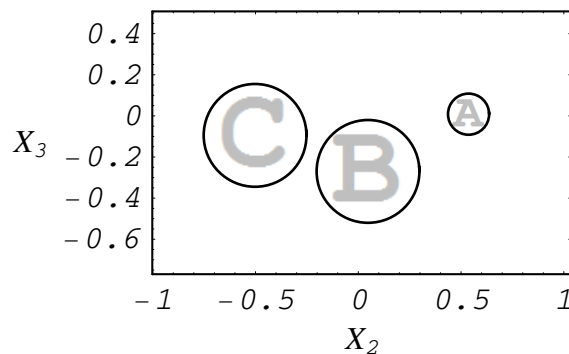


Рис. 3. Положение после 15 сек. Направление вращения магнитного поля меняется на противоположное.

Значения фактических параметров можно определить по формулам обновления, приведенным в [14]. Например, фактическое время действия магнитного поля и время релаксации

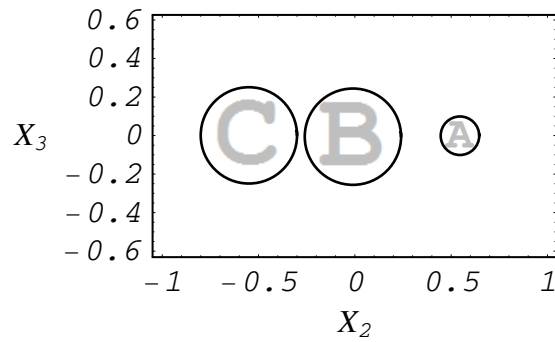


Рис. 4. Положение после 30 сек.

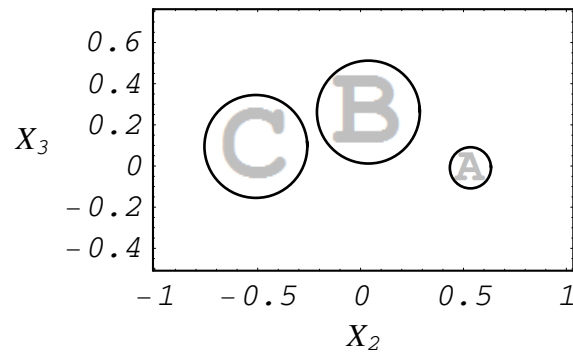


Рис. 5. Положение после 45 сек. Направление вращения магнитного поля меняется на противоположное.

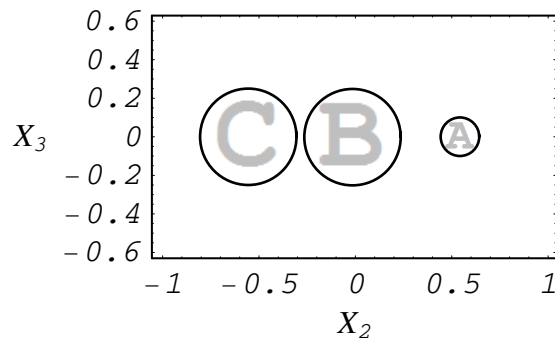


Рис. 6. Положение после 60 сек.

определяются по правилу:

$$t = \frac{a^2 \hat{\eta} \hat{t}}{\hat{a}^2 \eta}.$$

Для совокупности частиц размером $a = 10^{-4}$ см и для жидкости фактической вязкости $\eta = 10^{-2}$ Г/(см · сек), мы получаем $T = 3 \cdot 10^{-3}$ сек. Заряд частиц определяется следующим соотношением действительных и модельных сил [11]:

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

С учетом выбранной модельной величины заряда $k \hat{q}^2 = 20/7 \cdot 10^{-13}$ Н · м² и $k \approx 9 \cdot 10^9$ Н · м² / Кл² получаем, что фактический фактический заряд частиц равен $q =$

$5.63 \cdot 10^{-17}$ Кл. Из соотношений (3.1) и (3.2) получаем реальные значения угловой скорости и напряженности магнитного поля: $\omega = 10^4 \hat{\omega}$, $H = 100 \hat{H}$ Э. Подставляя в модель значение скорости вращения частицы из табл. 2, мы получаем фактическую скорость вращения частиц. Для модельного значения магнитного поля $\hat{H} = 0.796$ Э получаем, что его реальная величина должна быть $H = 79.6$ Э. Значения реальной угловой скорости и силы магнитного поля могут быть уменьшены путем уменьшения приложенного момента и увеличения времени воздействия на систему.

В качестве варианта конструкции рассматривалась модель агрегата, в которой обе частицы A и C обладают магнитным моментом. Динамика такой системы была смоделирована для второго блока из табл. 1. Считалось, что частица C имеет магнитный момент \mathbf{m} . Магнитное поле действует на него с моментом, равным $M = 1.5 \text{ г}\cdot\text{см}^2/\text{сек}^2$. Магнитный момент частиц определяется произведением объема частицы и намагниченности насыщения материала, из которого состоит частица. Поскольку частица A меньше, чем C , при условии одинакового состава магнитного материала частиц, его магнитный момент равен $0.064 \mathbf{m}$. В этом случае можно предположить, что частицы вращаются с одинаковой угловой скоростью. Продолжительность и цикл действия вращающегося магнитного поля такие же, как и для агрегатов, рассмотренных выше. Перемещение частицы B равно $\Delta l = 0.0128423$ см, угловая скорость частиц A и C равны 3.69655 сек^{-1} и 3.58121 сек^{-1} соответственно. Небольшое различие в значениях угловой скорости частиц может быть объяснено различными коэффициентами K , с учетом положения этих частиц в структуре. Существенной характеристикой такого агрегата является то, что он движется в противоположном направлении в отличие от агрегатов с одной вращающейся частицей. В случае двух дипольных частиц также необходимо учитывать их энергию диполь-дипольного взаимодействия. При параллельном вращении магнитных моментов частиц энергия взаимодействия равна $U_d = m_1 m_2 (1 - 3 \cos^2 \theta) / r^3$, где θ угол между магнитным моментом \mathbf{m} и радиус-вектором \mathbf{r} , соединяющим центры частиц. За один полный оборот магнитных моментов среднее значение этой энергии равно нулю. Поэтому энергию взаимодействия между частицами и, следовательно, силы взаимодействия можно считать такими же, как в случаях одной вращающейся частицы. Следует отметить, что в случае двух вращающихся частиц движение агрегата существенно зависит от их относительного размера. В случае одинакового размера частиц A и C их вращение не приводит к смещению агрегата.

4. Заключение

Рассмотрен гидродинамический механизм перемещения агрегата из трех частиц во вращающемся магнитном поле. Частицы агрегата заряжены так, что их суммарный электрический заряд равен нулю, но в то же время они образуют устойчивую цепочку за счет энергии взаимодействия, которая определяется кулоновским взаимодействием зарядов частиц и взаимодействием неэлектрической природы. Одна или две частицы, расположенные относительно центральной частицы, имеют магнитный момент. Вращающееся магнитное поле заставляет вращаться частицы, что создает поток в окружающей вязкой жидкости. Образующийся поток в окружающей жидкости вызывает гидродинамическую силу, действующую на устройство и перемещающую его в определенном направлении. Изменяя направление вращения магнитного поля, можно управлять движением такой цепочки частиц. Гидродинамическое взаимодействие всех частиц в цепи учитывается. Компьютерное моделирование движений таких агрегатов в вязкой жидкости выполнялось с использованием специального программного пакета. Численно рассчитана динамика 6 модельных цепочек, образованных из частиц разных размеров с одной вращающейся частицей и одной модели цепочки с двумя вращающимися частицами. Результаты численного моделирования позволяют определить, какая из моделей агрегатов частиц движется с большей скоростью. Предлагаемый механизм

перемещения цепного агрегата может быть использован при конструировании синтетических нано- или микромоторов.

Литература

1. Zhang J., Grzybowski B. A., Granick S. Janus Particle Synthesis, Assembly, and Application // *Langmuir*. 2017. No. 33. DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.langmuir.7b01123>
2. Wang Q., Yang L., Wang B., Yu E., Yu J., Zhang L. Collective Behavior of Reconfigurable Magnetic Droplets via Dynamic Self-Assembly // *ACS Appl. Mater. Interfaces*. 2019. Vol. 11, No. 1. DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.langmuir.7b01123>[10.1021/acsami.8b17402](https://doi.org/10.1021/acsami.8b17402)
3. Manjare M., Yang F., Vach P.J., Walker D., Fischer P., Fratzl, P., Faivre, D. Pattern formation and collective effects in populations of magnetic microswimmers // *J. Phys. D: Appl. Phys.* 2017. Vol. 50. 11LT03. DOI:10.1088/1361-6463/aa5d36
4. Kokot G., Kolmakov G. V., Aranson I. S., Snezhko A. Dynamic self-assembly and self-organized transport of magnetic micro-swimmers // *Scientific Reports*. 2017. Vol. 7. Article number: 14726. DOI:10.1038/s41598-017-15193-z
5. Kokot G., Das S., Winkler R.G., Gompper G., Aranson I. S., Snezhko A. Active turbulence in a gas of self-assembled spinners // *PNAS*. 2017. Vol. 114, No. 49. DOI <https://doi.org/10.1073/pnas.1710188114>
6. Мартынов С. И., Ткач Л. Ю. К вопросу о механизме движения синтетических наномоторов в вязкой жидкости // *Ж. вычисл. матем. и матем. физ.* 2020. Т. 60, № 11. С. 1975–1984. URL: DOI: <https://doi.org/10.31857/S0044466920110083>
7. Мартынов С.И., Ткач Л.Ю. Модель гидродинамического механизма перемещения наномоторов // *Матем. моделирование*. 2020. Т. 32, № 12. С. 81–94. DOI: <https://doi.org/10.20948/mm-2020-12-07>
8. 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>
9. 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, Iss. 6. 065302. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.81.065302>
10. Moran J.L., Posner J. D. Electrokinetic locomotion due to reaction-induced charge auto-electrophoresis // *J. Fluid Mech.* 2011. Vol. 680. DOI: <https://doi.org/10.1017/jfm.2011.132>
11. Martynov S. I., Tkach L. Yu. Mechanism of moving particle aggregates in a viscous fluid // *Comput. Math. Math. Phys.* 2019. Vol. 59. DOI: <https://doi.org/10.1134/S0965542520110081>
12. Dreyfus R., Baudry J., Roper M.L., Fermigier M., Stone H.A., Bibette J. Microscopic artificial swimmers // *Nature*. 2005. Vol. 437. DOI: <https://doi.org/10.1038/nature04090>
13. Martynov S. I. Hydrodynamic interaction of particles // *Fluid Dyn.* 1998. Vol. 33, No. 2. pp. 245-251.

14. Martynov S.I., Tkach L. Yu., Simulation of particle aggregate dynamics in a viscous fluid //Comput. Math. Math. Phys. 2015. Vol. 55. pp. 282–290. DOI: <https://doi.org/10.1134/S0965542515020141>

MSC2020 76D07, 76D09, 76D17

Hydrodynamic mechanism of movement of micro-/nanomotor with magnetic drive

S. I. Martynov, L. Yu. Tkach
Surgut State University

Abstract: The hydrodynamic mechanism of movement of a model of a micro-/nanomotor with a magnetic drive is considered. The motor is a chain of three spherical particles of different sizes with an electric charge holding them together. The total charge of the system is zero. One or two extreme particles in the chain have a magnetic moment. The chain is in a viscous liquid and is acted upon by a rotating magnetic field. In the absence of an external field, the particles are in equilibrium, which corresponds to the minimum interaction energy. After turning on the rotating magnetic field, particles with a magnetic moment begin to rotate, forming a flow in the surrounding viscous fluid. The fluid flow causes a hydrodynamic force that moves the chain in a specific direction. Numerical simulation of the dynamics of six model chains with one rotating particle and one chain with two rotating particles is carried out. The calculations take into account the effect on particles of an external moment from a rotating magnetic field, the forces of hydrodynamic interaction of particles with each other, as well as internal forces that hold the particles together. The parameters of the magnetic field and the structure of the chain for the fastest movement of the chain have been determined. The proposed chain movement mechanism can be used to design micro-/nanomotors and control them to the place of payload delivery.

Keywords: numerical modeling, viscous fluid, micro-/nanomotor, hydrodynamic interaction, interaction energy, magnetic field.

References

1. J. Zhang, B. A. Grzybowski, S. Granick. Janus Particle Synthesis, Assembly, and Application. *Langmuir*. 2017. No. 33. DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.langmuir.7b01123>
2. Q. Wang, L. Yang, B. Wang, E. Yu, J. Yu, L. Zhang. Collective Behavior of Reconfigurable Magnetic Droplets via Dynamic Self-Assembly. *ACS Appl. Mater. Interfaces*. 2019. Vol. 11, No. 1. DOI: <https://doi.org/10.1021/acsami.8b17402>
3. M. Manjare, F. Yang, P.J. Vach, D. Walker, P. Fischer, P. Fratzl, D. Faivre. Pattern formation and collective effects in populations of magnetic microswimmers. *J. Phys. D: Appl. Phys.* 2017. Vol. 50. 11LT03. DOI: <https://doi.org/10.1088/1361-6463/aa5d36>
4. G. Kokot, G. V. Kolmakov, I. S. Aranson, A. Snezhko. Dynamic self-assembly and self-organized transport of magnetic micro-swimmers. *Scientific Reports*. 2017V. 7. Article number: 14726. DOI: <https://doi.org/10.1038/s41598-017-15193-z>
5. Kokot G., Das S., Winkler R.G., Gompper G., Aranson I. S., Snezhko A. Active turbulence in a gas of self-assembled spinners. *PNAS*. 2017. Vol. 114, No. 49. DOI: <https://doi.org/10.1073/pnas.1710188114>

6. S. I. Martynov, L. Yu. Tkach. ["Mechanism of locomotion of synthetic nanomotors in a viscous fluid"], *Zh. Vychisl. Mat. Mat. Fiz.* 2020. Vol. 60, No. 11. pp. 1975–1984. DOI: <https://doi.org/10.31857/S0044466920110083> (In Russ.)
7. S. I. Martynov, L. Yu. Tkach. Model of Hydrodynamic Mechanism of the Movement of Nanomotors // *Mathematical Models and Computer Simulations.* 2021. Vol. 13, No. 4. DOI: <https://doi.org/10.1134/S2070048221040153> (In Russ.)
8. S. I. Martynov, L. Yu. Tkach. Hydrodynamic mechanism of movement of catalytic micro- / nanomotors. *Zhurnal Srednevolzhskogo Matematicheskogo Obshchestva.* 2021. Vol. 23, No. 1. pp. 91-109. DOI: [10.15507/2079-6900.23.202101.91–109](https://doi.org/10.15507/2079-6900.23.202101.91-109) (In Russ.)
9. J. L. Moran, P. M. Wheat, J. D. Posner. Locomotion of electrocatalytic nanomotors due to reaction induced charge autoelectrophoresis. *Phys. Rev. E.* 2010. Vol. 81. Iss. 6. pp. 065302. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.81.065302>
10. J.L. Moran, J. D. Posner. Electrokinetic locomotion due to reaction-induced charge auto-electrophoresis. *J. Fluid Mech.* 2011. Vol. 680. DOI: <https://doi.org/10.1017/jfm.2011.132>
11. S. I. Martynov, L. Yu. Tkach. Mechanism of moving particle aggregates in a viscous fluid. *Comput. Math. Math. Phys.* 2019. Vol. 59. DOI: <https://doi.org/10.1134/S0965542520110081>
12. R. Dreyfus, J. Baudry, M.L. Roper, M. Fermigier, H.A. Stone, J. Bibette. Microscopic artificial swimmers. *Nature.* 2005. Vol. 437. DOI: <https://doi.org/10.1038/nature04090>
13. S. I. Martynov. Hydrodynamic interaction of particles. *Fluid Dyn.* 1998. Vol. 33, No. 2. pp. 245-251.
14. S.I. Martynov, L. Yu. Tkach. Simulation of particle aggregate dynamics in a viscous fluid. *Comput. Math. Math. Phys.* 2015. Vol. 55, No. 2. pp. 282–290. DOI: <https://doi.org/10.1134/S0965542515020141>