

自扩散泳微观转动马达的介观模拟

沈明仁 刘锐 厚美瑛 杨明成 陈科

Mesoscale simulation of self-diffusiophoretic microrotor

Shen Ming-Ren Liu Rui Hou Mei-Ying Yang Ming-Cheng Chen Ke

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 65, 170201 (2016) DOI: 10.7498/aps.65.170201

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.170201>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2016/V65/I17>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

锂离子电池多尺度数值模型的应用现状及发展前景

[Application status and future of multi-scale numerical models for lithium ion battery](#)

物理学报.2015, 64(21): 210202 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.210202>

燃料抛撒成雾及其燃烧爆炸的光滑离散颗粒流体动力学方法数值模拟研究

[Numerical simulation of fuel dispersal into cloud and its combustion and explosion with smoothed discrete particle hydrodynamics](#)

物理学报.2015, 64(11): 110202 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.110202>

充模过程中熔接痕的改进光滑粒子动力学方法模拟与预测

[Simulation and prediction of the weld-line in the filling process using a corrected smoothed particle hydrodynamics method](#)

物理学报.2015, 64(8): 080202 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.080202>

非等温非牛顿黏性流体流动问题的修正光滑粒子动力学方法模拟

[A corrected smoothed particle hydrodynamics approach to solve the non-isothermal non-Newtonian viscous fluid flow problems](#)

物理学报.2014, 63(21): 210203 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.210203>

风沙运动问题的 SPH-FVM 耦合方法数值模拟研究

[Simulation of aerolian sand transport with SPH-FVM coupled method](#)

物理学报.2014, 63(13): 130202 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.130202>

自扩散泳微观转动马达的介观模拟*

沈明仁 刘锐 厚美璞 杨明成[†] 陈科[‡]

(中国科学院物理研究所, 软物质物理重点实验室, 北京凝聚态物理国家实验室, 北京 100190)

(2016年6月20日收到; 2016年6月24日收到修改稿)

转动的微尺度马达是一类重要的微流器件. 近年来, 因为其重要的应用及理论价值引起了学术界的广泛关注. 本文提出了一种新型的自扩散泳驱动微观转动马达模型. 通过介观动力学模拟, 验证了该模型的有效性. 模拟结果表明, 该自扩散泳微观转动马达可以单向地自驱动转动, 并且转动速度和马达表面发生的催化化学反应速率(即自产生的浓度梯度场强弱)、以及液体分子与马达之间的相互作用有关. 此外, 研究了两个转动马达共存时的运动行为, 重点考察了马达之间的流体力学相互作用和浓度梯度场效应对马达转动的影响. 该自扩散泳微观转动马达为设计实用的微流器件提供了新的思路和参考, 也为研究活性胶体系统的集体行为提供了理想模型.

关键词: 自扩散泳微观转动马达, 扩散泳效应, 多粒子碰撞动力学, 分子动力学模拟

PACS: 02.70.-c, 47.11.-j, 47.57.-j

DOI: 10.7498/aps.65.170201

1 引言

微流机器因为在生化检测、疾病诊断、药物治疗等领域中的潜在应用价值, 近年来已经成为学术界和工业界的研究热点^[1]. 在各种微流机器中, 微观转动马达是一类重要的微流机器. 转动马达可以将不同形式的能源转化为转动的动能, 从而驱动流体或其他微流器件. 微观转动马达广泛地存在于生物体之中^[2]. 比如, 细菌的螺旋状鞭毛就是由鞭毛根部的转动马达来驱动^[3]. 再比如, 细胞膜上的转动离子泵, 其维持细胞膜内部离子浓度恒定的功能主要通过 F_0F_1 -ATP合成酶(adenosine triphosphate (ATP) synthase) 绕着定轴转动实现^[4]. 受大自然的启发, 合成利用化学反应的能量实现定向转动的微观转动马达引起了人们的广泛兴趣. 但是, 这一目标并不容易实现. 设计可以在微观尺度定向运动的人工器件有三个困难需要克服^[5,6]. 首先是热扰动的影响. 随着尺寸的减小, 流体环境的

热扰动效应变得越来越显著. 其次是低雷诺数的影响. 在低雷诺数的条件下, Navier-Stokes方程可以简化为Stokes方程, 而Stokes方程是不包含时间项的线性方程, 所以简单的往复运动并不能导致净运动. 这一限制经常被称为Scallop定理, 它是由美国物理学家Edward Purcell首先提出来的^[2,7]. 简单来说, Scallop定理决定了人们无法通过简单地模仿宏观机械设计出微观机械^[8,9]. 第三个困难是如何实现稳定的能量来源. 特别是在复杂的生物体内环境中, 如何找到稳定、可靠、安全的方式给微流机器供能是一个至关重要的问题. 人们已经提出了不同的供能方案, 比如利用酶催化的化学反应^[10]或者微生物的集体运动^[11].

虽然随着体系的缩小, 热扰动的影响较难消除, 但是另外两个困难都是可以通过巧妙的物理和结构上的设计予以解决的. 在一系列的研究中, 利用化学反应供能的自驱动方式尤其受到关注, 因为该方式可以有效避免引入外界能源的困难且可以利用泳效应机理, 如扩散泳, 来克服Scallop定理的

* 国家重点基础研究发展计划(批准号: 2015CB856800)和国家自然科学基金(批准号: 11474327, 11404379)资助的课题.

[†] 通信作者. E-mail: mcyang@iphy.ac.cn

[‡] 通信作者. E-mail: kechen@iphy.ac.cn

限制^[12-20]. 扩散泳指的是溶剂中浓度梯度场导致的悬浮胶体粒子沿着梯度场的定向迁移运动, 其驱动力称为扩散泳力^[21]. 为了利用扩散泳效应来设计自驱动的转动马达, 两个条件需要得到满足: 首先马达自身要能够催化化学反应, 产生浓度梯度场; 其次马达自身的结构必须具有空间上的不对称性. 马达的空间非对称性可以通过马达构成材料的非均匀性或者马达几何形状的非对称性来实现. 前者的一个代表性例子就是 Janus 粒子类型的自驱动马达, 它由两种具有不同化学或者物理性质的材料组成. 比如, 球形 Janus 粒子的一个半球被喷涂上特定的催化材料从而催化溶液中的化学反应, 而另一端的材料在化学上是惰性的^[20]. 到目前为止, 几乎所有的化学驱动的微观马达都是利用异质的材料来实现自推进运动的. 在最近的研究中, 利用纯粹的几何形状的非对称性, 具有均一材料的自扩散泳转动马达也已经在模拟上被实现^[22].

在本文中, 我们提出一个十分简单的自扩散泳微观转动马达的设计方案. 马达由三个胶体球组成, 它们互相连接在一起并具有固定的中心, 其中一个胶体球负责催化化学反应, 产生驱动力的浓度梯度场; 另外两个胶体球不参与化学反应, 但与流体分子具有不同的相互作用, 因此负责产生推进的力矩. 与 Janus 类型的粒子相比, 我们把化学反应归结到一个单独胶体粒子上, 从而将化学反应与驱动作用分开, 明确组成马达的各个部分的作用, 方便进行理论分析. 另外, 利用当前的胶体合成技术, 该转动马达在实验上很容易实现. 通过分子动力学和多粒子碰撞动力学相结合的介观模拟方法, 对上述模型的可行性进行了检验. 进一步, 我们研究了两个转动马达共存时的运动行为, 重点考察了两个马达之间的流体力学相互作用和浓度梯度场效应对马达转动速度的影响. 我们的工作为设计实用的微观机器提供了新思路, 也为研究由转动马达组成的活性胶体系统提供了理想的模型.

2 模拟模型和方法

采用混合分子模拟方法 (hybrid molecular simulation) 研究二维的自扩散泳微观转动马达. 转动马达由三个相同大小的珠子组成, 珠子之间

没有相互作用, 且相对位置固定 (如图 1 所示). 珠子和流体粒子之间的相互作用用分子动力学方法 (molecular dynamics, MD) 模拟. 而溶剂采用多粒子碰撞动力学方法 (multiparticle collision dynamics, MPC) 模拟, 溶剂包括两种粒子, 分别记为 A, B. 多粒子碰撞动力学方法是一种可以模拟流体力学行为的粗粒化方法. 该方法最早由 Malevanets 和 Kapral 引入^[23], 目前在微流器件^[24]、胶体^[25]、高分子^[26]、生物细胞模拟^[27,28]中都得到了广泛的运用. 文献^[25,29]更加详细地介绍了多粒子碰撞方法的细节和应用.

在多粒子碰撞动力学方法中, 流体被模拟为有限数目的点粒子, 其中每个流体粒子在任一时刻具有质量 m , 位置 $\mathbf{r}(t)$ 和速度 $\mathbf{v}(t)$. 流体粒子的位置和速度交替地通过以下两个步骤进行演化: 自由传播 (streaming) 步骤和碰撞 (collision) 步骤. 在自由传播步骤, 流体粒子按照 $\mathbf{r}(t+h) = \mathbf{r}(t) + \mathbf{v}(t)h$ 更新其位置信息, h 为时间步长. 随后, 进行碰撞步骤. 具体方法是将体系划分为一系列边长为 a 的正方形格子并将流体粒子按照其所在的位置划分入相应的格子. 每个格子平均包含数目为 ρ 的流体粒子, 且每个流体粒子只和自己所在格子中的流体粒子发生碰撞. 碰撞过程按照 $\mathbf{v}(t+h) = \mathbf{v}_{c.m.}(t) + \mathbf{R}[\mathbf{v}(t) - \mathbf{v}_{c.m.}(t)]$ 更新 $t+h$ 时刻的流体粒子速度, 其中 $\mathbf{v}_{c.m.}(t)$ 表示 t 时刻该粒子所在格子的质心速度; \mathbf{R} 代表随机旋转矩阵, 具体取值依照 Ryder 引入的规则进行^[29,30]. 该规则将随机旋转矩阵的值和每个格子中流体粒子速度相关联, 从而保证多粒子碰撞动力学算法可以保持质量、动量、能量和角动量的局域守恒, 从而可以正确地描述流体力学相互作用、热涨落、质量扩散和耗散过程^[22,31]. 在碰撞步骤中, 并不区分流体粒子的种类.

图 1 显示了我们本文提出的二维自扩散泳微观转动马达模型, 它由三个大小相同的珠子构成, 珠子之间两两相切. 转动马达的中心和正方形模拟体系的中心重合并固定, 且允许马达绕该中心自由旋转. 三个珠子分别发挥不同的功能, 在图 1 中用不同的颜色表示. 为了简化, 我们假设 A 流体粒子对于所有的珠子作用相同, 驱动力矩完全来自于 B 流体粒子和不同珠子的相互作用差别.

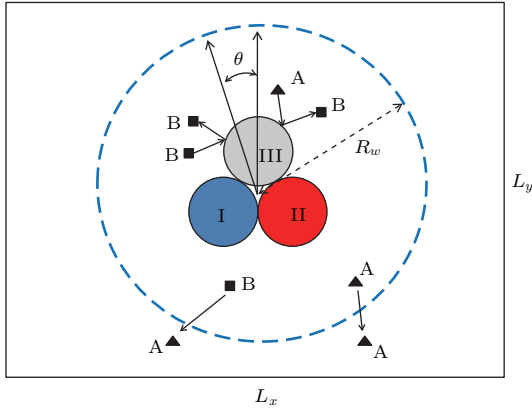


图1 (网刊彩色) 模拟体系示意图 体系中含有两种流体粒子 A 和 B, 以及三个珠子组成转动马达, 三个珠子编号分别为 I, II, III. 当 A 流体粒子碰撞到 III 号珠子时发生反应, 按照一定的概率 P_r 变成 B 流体粒子, B 流体粒子碰撞到 III 号珠子不发生变化. 当 B 流体粒子运动到超出体系中心 R_w 距离时, 所有的 B 流体粒子都会变为 A 流体粒子, 而 A 流体粒子不变. 系统以逆时针方向为转动的正方向. L_x, L_y 分别为体系 x, y 方向的边长

Fig. 1. (color online) Sketch of simulation system setup. Chemical reaction from A to B is catalyzed by Beads III and when the distance between system center and B is greater than R_w , chemical reaction from B to A takes place.

各个珠子的具体功能和性质总结如下.

1) 珠子 I (蓝色珠子): 不催化化学反应, 对于 A, B 流体粒子的相互作用不同, 分别记为 $U_{I,A}, U_{I,B}$. 因此在流体粒子的浓度梯度下, 可以产生扩散泳力.

2) 珠子 II (红色珠子): 不催化化学反应, 对于 A, B 流体粒子的相互作用不同, 分别记为 $U_{II,A}, U_{II,B}$. 因此在流体粒子的浓度梯度下, 可以产生扩散泳力. 与珠子 I 的共同作用下, 可以产生净的驱动力矩.

3) 珠子 III (灰色珠子): 催化化学反应 $A \rightarrow B$, 且对于 A, B 流体粒子的相互作用相同, 记为 $U_{III,A}, U_{III,B}$, 不产生驱动力.

4) 作用势之间的关系如下: $U_{II,B} \neq U_{I,B}, U_{I,A} = U_{II,A} = U_{III,A} = U_{III,B}$.

为了维持稳定的化学反应, 必须不断有反应物注入体系, 才能维持 III 号珠子上的化学反应 $A \rightarrow B$. 在模拟中, 我们利用相反的化学反应 $B \rightarrow A$ 实现反应物的注入. 如图 1 所示, 当 B 流体粒子运动到离体系中心足够远的距离 R_w 时, 则将转变为 A 流体粒子, 类似的技巧已经被成功地用来模拟其他的自扩散泳微观机械^[22,24,32-35]. 在 III 号珠子表面上, 化学反应 $A \rightarrow B$ 以一定的反应

概率 P_r 进行, 这样通过调节 P_r 即可调节产生的 B 流体粒子的浓度梯度, 进而调节 I, II 号珠子的扩散泳力的大小. 反向化学反应 $B \rightarrow A$ 则以 1 的概率进行. 实验上, 自扩散泳微观转动马达可以由经过不同表面修饰的胶体粒子相互黏连而成, 同时光镊技术可以固定这三个胶体粒子的中心区域从而实现绕固定中心的转动^[36,37].

流体粒子和珠子之间的相互作用采用 Lennard-Jones (LJ) 类型的势能,

$$U_{k,s}(\mathbf{r}) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{\mathbf{r}} \right)^{2n} - \left(\frac{\sigma}{\mathbf{r}} \right)^n \right] + \epsilon', \quad \mathbf{r} \leq r_c, \quad (1)$$

其中, 下标 k 代表珠子种类, 可取值为 I, II, III; s 代表流体粒子种类, 可取值为 A, B; ϵ 和 n 表示 LJ 势作用的强弱, σ 是珠子的半径, r_c 是对应的截断半径. 当 $\epsilon' = 0$ 时, (1) 式表示 LJ 吸引势, 记为 $A(n, \epsilon)$; 当 $\epsilon' = \epsilon \neq 0$ 时, (1) 式表示 LJ 排斥势, 记为 $R(n, \epsilon)$.

模拟中所有的物理量均采用无量纲化单位, 长度单位为正方形格子边长 a , 能量单位为 $k_B T$ (k_B 为玻尔兹曼常数, T 为温度), 质量单位为流体粒子的质量 m . 我们取 $a = 1, k_B T = 1, m = 1$. 在此约化单位制下, 可以推出其他的常用物理量的单位, 比如时间单位可以表示为 $t = a\sqrt{m/(k_B T)}$. 其他的参数如下, LJ 势强度为 $\epsilon = 1$, 珠子半径为 $\sigma = 3$, 体系的大小为 $L_x = 48$ 和 $L_y = 48$, 平均每个格子中的流体粒子数为 $\rho = 10$, 除非特别说明, 大部分情况下 $B \rightarrow A$ 的反应半径为 $R_w = 20$. 多粒子碰撞动力学时间步长为 $h = 0.1$, 在两次多粒子碰撞过程之间进行 50 步的分子动力学模拟, 即分子动力学时间步长为 $t_{MD} = 0.002$. 在分子动力学模拟中, 对于速度和位置的更新, 采用速度 Verlet 算法 (velocity-Verlet algorithm)^[38]. 在上述参数下, 按照多粒子碰撞方法的动力学理论, 我们可以计算得到此时流体的动力学黏滞系数 $\nu \approx 0.76$, 扩散系数 $D_S \approx 0.06$, 相应的流体 Schmidt 常数为 $Sc \approx 12$ ^[39], 因此具有很好的类液动力学行为.

珠子和流体粒子之间的 LJ 势有多种参数组合, 简单起见, 固定 I, III 号珠子的 Lennard-Jones 势组合, 将所有的 LJ 势变化都集中在 II 号珠子对于 B 流体粒子的 LJ 势作用上. 具体而言, 取 $U_{I,A} = U_{II,A} = U_{III,A} = U_{III,B} = R(24, 1), U_{I,B} = R(3, 1)$. 而 $U_{II,B}$ 在大多数情况下取为 $A(24, 1)$, 但在研究

作用势组合对微马达转动速度的影响时分别取为 $R(24, 1)$, $R(12, 1)$, $R(3, 1)$, $A(32, 1)$ 等不同的 LJ 势.

因为 B 流体粒子和 I, II 号珠子之间有不同的 LJ 势, 因此发生在 I, II 号珠子附近的 III 号珠子表面处的化学反应 $A \rightarrow B$ 可以导致局部的能量跳跃, 进而引入热效应干扰纯粹的自扩散泳模拟. 为了避免这一效应, 采用如下规则: 当满足进行化学反应的条件时, 不立刻进行化学反应, 只有当发生化学反应的流体粒子刚好超出所有珠子对于 A, B 流体粒子的作用范围时才发生化学反应 [22].

3 模拟结果与讨论

3.1 单转动马达

首先, 固定马达, 测量 III 号珠子所产生的浓度分布. 图 2 显示了稳态 B 流体粒子的浓度分布.

图 2 说明 B 流体粒子由 III 号珠子产生并扩散, 在 III 号珠子附近形成明显的浓度梯度. 进而 I 号和 II 号珠子感受到这个局域浓度梯度, 产生扩散泳力. 另外, 因为 I 号珠子对 B 流体粒子的 LJ 势是排斥势 $R(3, 1)$, 所以 I 号珠子周围的 B 流体粒子浓度偏低, 而 II 号珠子对 B 流体粒子是吸引势 $A(24, 1)$, 所以 II 号珠子周围的 B 流体粒子浓度偏高. 当这个马达不被固定时, 可以预期它将进行单向的自推进转动. 图 3 显示了微马达转动时的 B 流体粒子浓度分布以及相应的马达平均角位移随时间的改变.

图 3(a) 和图 2 的对比说明随着马达的转动, B 流体粒子的分布由局域在 III 号反应珠子附近变

为在整个转动马达周围的径向分布. 图 3(b) 是最重要的模拟结果, 它证明转动马达系统做匀角速度转动. 其中, 马达转动的角位移是经过多次平均的结果, 对于单个运动轨迹热涨落可以导致一定程度的振荡. 在稳态时转动马达所受到的合力矩为零, 即驱动力矩与流体的摩擦力矩相平衡. 图 3(b) 带来的另一个重要问题是为何该转动马达的转动方向为正. 对于二维系统, 转动的方向只可能有两个, 这里我们规定逆时针旋转为正方向. 因为 III 号珠子产生 B 流体粒子, 所以 I, II 号珠子依照各自与 B 流体粒子的作用势不同会受到不同的 B 流体粒子作用力. 因为 $U_{I,B} = R(3, 1)$, 所以 I 号珠子受到

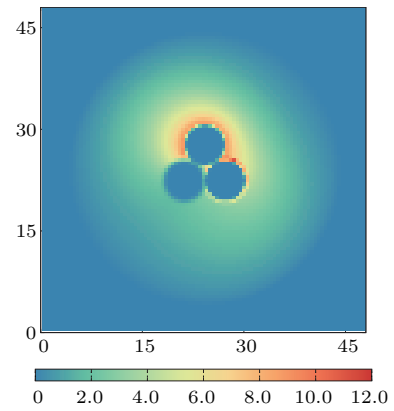


图 2 (网刊彩色) 静止马达所产生的 B 流体粒子浓度分布图. 此时珠子 III 催化 A 流体粒子的化学反应概率 $P_r = 0.5$, 珠子的作用势组合为 $U_{I,B} = R(3, 1)$, $U_{II,B} = A(24, 1)$

Fig. 2. (color online) Concentration distribution of B solvent in steady state. The employed beads-solvent interactions are $U_{I,B} = R(3, 1)$, $U_{II,B} = A(24, 1)$, with the reaction probability $P_r = 0.5$.

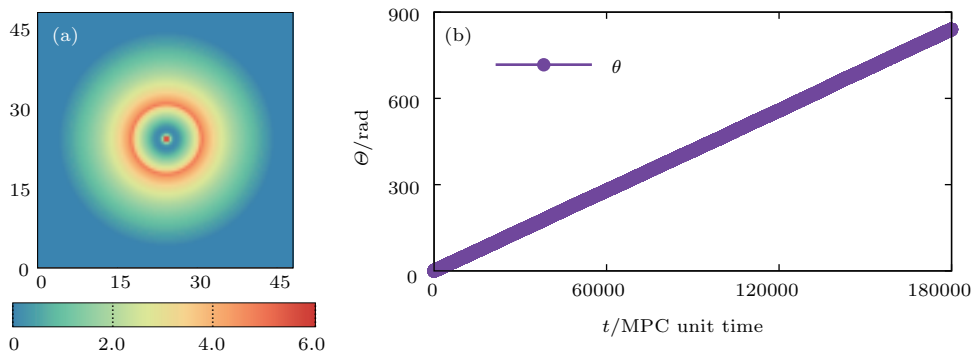


图 3 (网刊彩色) 自由转动马达 (a) B 流体粒子浓度分布图; (b) 角位移随时间的变化, 以逆时针方向为正方向, 珠子 III 催化 A 流体粒子的化学反应概率 $P_r = 0.5$, 珠子的作用势组合为 $U_{I,B} = R(3, 1)$, $U_{II,B} = A(24, 1)$.

Fig. 3. (color online) Freely rotating rotor (a) concentration distribution of B solvent; (b) angular displacement as a function of time. The employed beads-solvent interactions are $U_{I,B} = R(3, 1)$, $U_{II,B} = A(24, 1)$, with the reaction probability $P_r = 0.5$.

的力方向为远离 III 号珠子, 产生逆时针方向的正力矩; 而 $U_{II,B} = A(24, 1)$, 所以 II 号珠子受到的力方向指向 III 号珠子, 也产生逆时针方向的正力矩. 注意, 由于 A 流体粒子与 I 和 II 号珠子有同样的势能相互作用, 并且 I 和 II 号珠子的位置是关于 III 号珠子对称的, 因此 A 流体粒子的浓度梯度不贡献净的驱动力矩. 综上, B 流体粒子施加在体系上的驱动合力矩为逆时针方向, 导致逆时针方向的转动, 正如图 3 (b) 所示.

下面我们保持转动马达的结构和模型参数不变, 只改变 III 号珠子上的反应速率, 观察马达转动角速度的变化, 如图 4 所示.

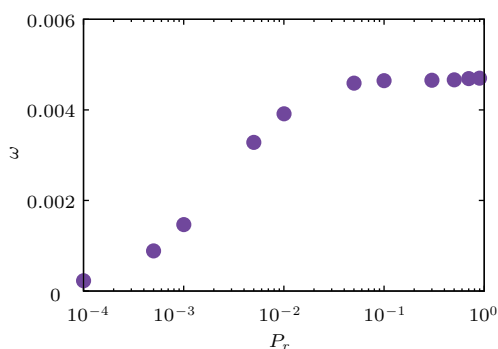


图 4 (网刊彩色) 转动马达角速度随 III 号粒子上反应概率的变化. 保持珠子间的作用势组合为 $U_{I,B} = R(3, 1)$, $U_{II,B} = A(24, 1)$.

Fig. 4. (color online) Angular velocity as a function of reaction probability. The employed beads - solvent interactions are $U_{I,B} = R(3, 1)$, $U_{II,B} = A(24, 1)$.

图 4 说明, 转动角速度在反应速率较低时也比较低. 但是随着反应速率的增加, 转动角速度迅速增加. 当 $P_r > 0.1$ 后, 转动角速度达到饱和, 进一步增大反应速率并不增加转动角速度. 这是因为转动角速度由驱动力矩决定, 而驱动力矩来源于 B 流体粒子的浓度梯度. 反应速率较低时, B 流体粒子数目不足, 所以产生的浓度梯度并不强. 随着反应速率增加, 相应的浓度梯度也增强, 导致角速度也会增加. 但是, 当反应速率进一步增加时, A 流体粒子不足以快速地扩散到 III 号珠子表面, 限制了反应产物 B 流体粒子浓度梯度的进一步提高, 所以出现扩散限制的反应饱和现象.

图 5 展示了不同相互作用势组合对马达转动角速度的影响, 所有改变的 LJ 势都是指改变 II 号珠子与 B 流体粒子的作用势. 在模拟中我们把 I 号珠子与 B 流体粒子的作用势固定为 $R(3, 1)$, 相对而言这是一个比较强的 LJ 相互作用势. 而最终的

角速度取决于 II 号珠子和 I 号珠子的合力. 我们从图 5 可以清晰地看出, 在 I 号珠子保持排斥, II 号珠子是吸引势的条件下, II 号珠子的吸引作用越强, 转动角速度越快; 相反, 当 II 号珠子为排斥势的时候, II 号珠子的排斥作用越弱, 则转动角速度越快.

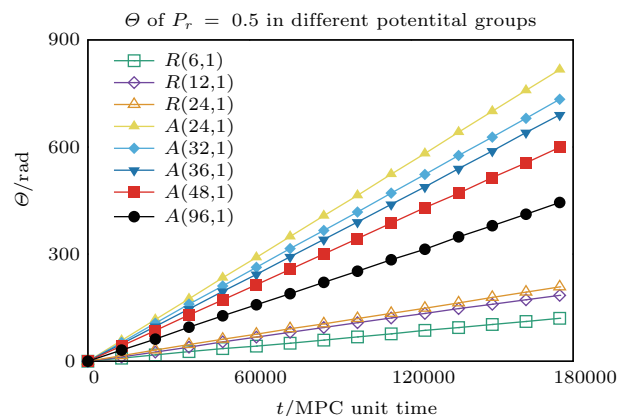


图 5 (网刊彩色) 不同 LJ 势组合的微观马达转动的角位移作为时间的函数. 此时保持 $U_{I,B} = R(3, 1)$ 不变, 改变 $U_{II,B}$; 实心符号代表吸引势, 空心符号代表排斥势.

Fig. 5. (color online) Angular velocity changes along with the change of LJ potential of beads II and keep LJ potential of beads I $U_{I,B} = R(3, 1)$. Filled symbols represent attractive LJ potential, and hollow symbols represent repulsive LJ potential.

3.2 双转动马达

我们首先测量两个转动马达都静止时所导致的 B 流体粒子的浓度分布. 其中两个固定马达之间的距离为 $D = 16$, B \rightarrow A 的反应边界是一个以双马达中心为圆点、以 $R_w = 20$ 为半径的一个大圆, 所导致的浓度分布如图 6 所示.

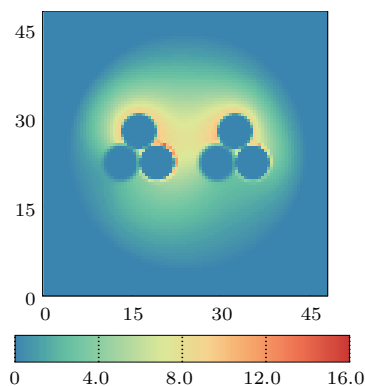


图 6 (网刊彩色) 双转动马达静止时的 B 流体粒子浓度分布.

Fig. 6. (color online) Concentration Distribution of B solvent when two rotors are static.

如果我们允许双转动马达各自转动, 则此时的浓度场和流场如图 7(a) 和图 7(b) 所示.

双转动马达的转动速度依赖于马达之间的相互作用, 由于在模拟中不考虑构成马达的珠子之间的直接势能相互作用, 因此马达之间是通过流体力学作用以及所导致的浓度梯度场来间接地传递相互作用. 两个转动马达之间的间接相互作用大小依赖于马达之间的距离. 图 7(c) 描绘了两个马达的转动速度随着它们之间距离的变化. 我们选取双转动马达间距 D 的倒数为横坐标, 其中 $1/D = 0$ 的点代表了双转动马达相隔无穷远的情形, 此时可以认为两者之间无相互作用, 转动的情况和单转动马达的情况相同. 随着转动马达的靠近, 两者之间的耦合加强, 图 7(c) 的结果表明两个马达之间的耦合会降低马达转动的角速度.

两个马达之间的耦合是流体力学作用和浓度梯度场效应联合在一起的结果, 然而本文的模拟系统允许我们独立地考察马达之间流体力学作用的影响, 从而把流体力学作用和浓度梯度场效应分离开, 确定主导的耦合机理. 为此, 我们考虑不同的模拟系统设置. 我们知道, R_w 的大小能够直接限制浓度场的作用范围, 如果每个转动马达各自有一个 $B \rightarrow A$ 的反应边界, 且它们之间不重叠, 如图 8(d) 所示, 那么马达之间的浓度梯度效应就可以完全被屏蔽掉, 仅仅存在流体力学相互作用. 此外, 为了比较双马达与单个马达的转动行为, 我们需要区分不同的 $B \rightarrow A$ 反应边界的选取. 我们知道 $B \rightarrow A$ 的反应边界和转动马达的中心存在偏心和共心的两种不同情况, 共心情况如图 3(a) 所示, 偏心情况则如图 7(a) 所示. 偏心和共心反应边界会导致不同的浓度梯度, 进而导致不同的马达转动行为. 表 1 具体列出了不同的系统设置下的转动马达的运动情况, 其中两个马达的间隔固定为 $D = 16$. 为了更加清晰地表示出表 1 中的各组数据的异同,

我们将所有 6 组数据的 B 粒子浓度分布图组合成图 8.

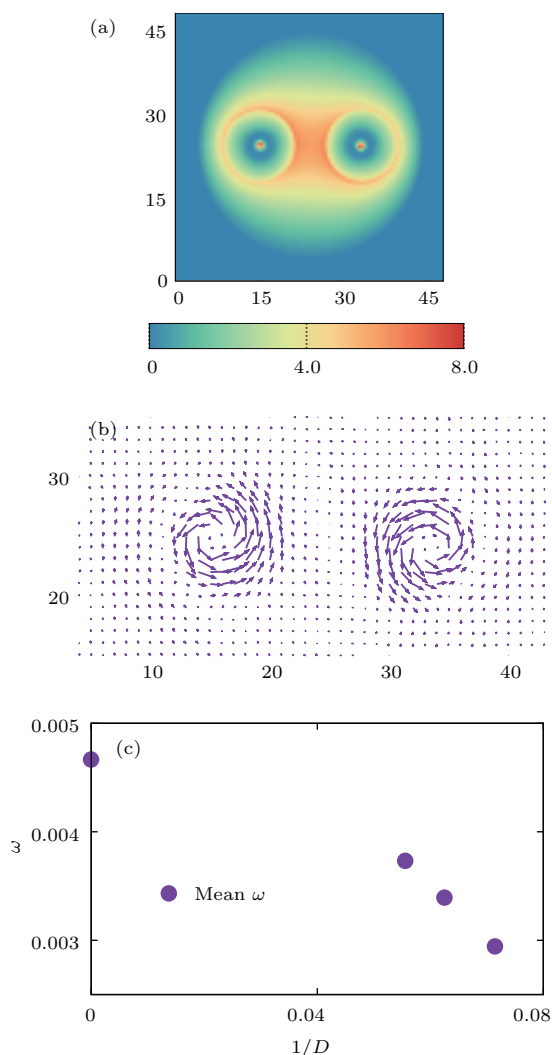


图 7 (网刊彩色) 自由转动的双马达 (a) B 流体粒子浓度分布; (b) 流场的局部图, 箭头指向代表流场方向, 箭头长度代表流场速度大小; (c) 双转动马达运动时, 平均角速度相对于双转动马达间距 D 的倒数的变化

Fig. 7. (color online) A pair of freely rotating motors: (a) Concentration distribution of B solvent; (b) flow field; (c) angular velocity as a function of the inverse of rotor separations $1/D$.

表 1 不同参数条件下, 转动马达角速度的变化, 其中 $R_w = 7.95$ 时, 浓度梯度效应被完全屏蔽, 两个马达之间仅存在流体力学耦合

Table 1. Angular motion velocity of rotor's system with different parameters.

序号	作用势组合	R_w	偏心/共心	左马达角速度	右马达角速度
1	$U_{I,B} = R(3, 1), U_{II,B} = A(24, 1)$	20	偏心	0.00281	0.00277
2	$U_{I,B} = R(3, 1), U_{II,B} = A(24, 1)$	20	偏心	0.00409	—
3	$U_{I,B} = R(3, 1), U_{II,B} = A(24, 1)$	20	共心	0.00392	—
4	$U_{I,B} = R(3, 1), U_{II,B} = A(24, 1)$	7.95	共心	0.00409	0.00424
5	$U_{I,B} = R(3, 1), U_{II,B} = A(24, 1)$	7.95	共心	0.00424	—
6	$U_{I,B} = A(24, 1), U_{II,B} = R(3, 1)$	20	偏心	0.00359	-0.00361

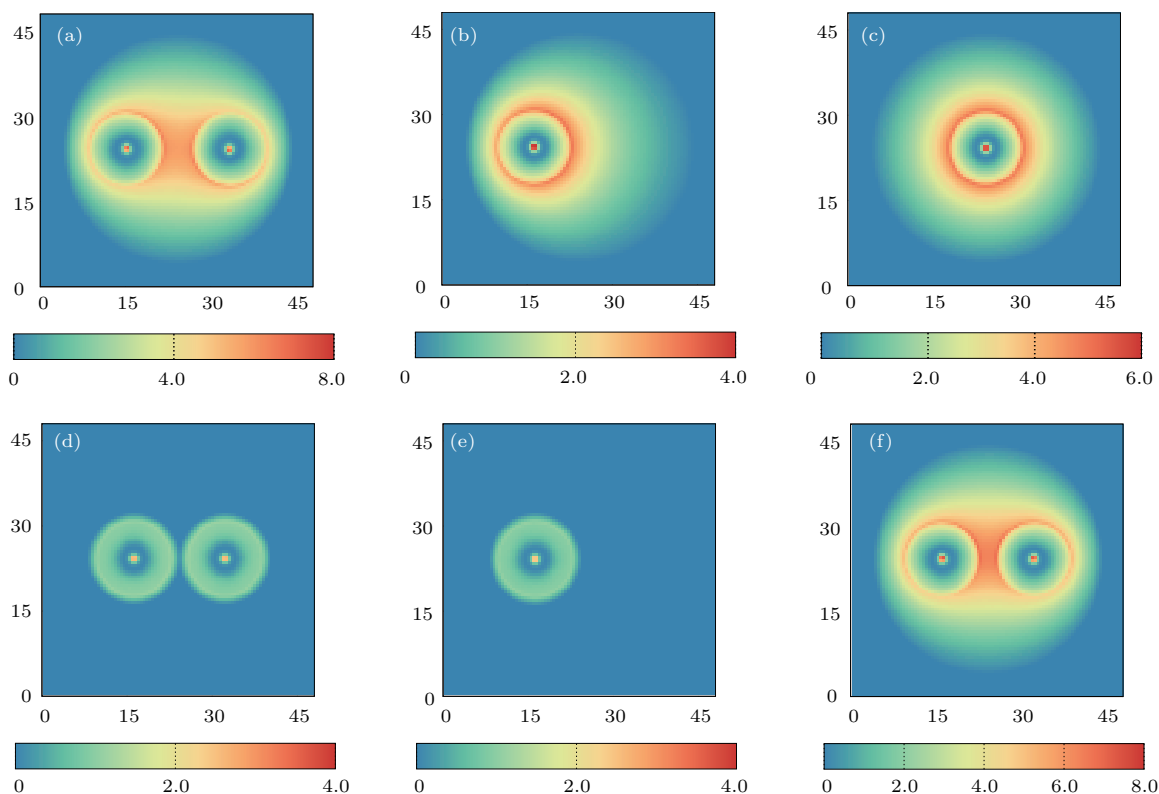


图8 (网刊彩色) 转动马达不同条件下的B流体粒子浓度分布图(分别对应于表1中的序号1至6) (a) 双转动马达 $R_w = 20$ 偏心条件下的B流体粒子浓度分布图; (b) 单转动马达 $R_w = 20$ 偏心条件下的B流体粒子浓度分布图; (c) 单转动马达 $R_w = 20$ 共心条件下的B流体粒子浓度分布图; (d) 双转动马达 $R_w = 7.95$ 共心条件下的B流体粒子浓度分布图; (e) 单转动马达 $R_w = 7.95$ 共心条件下的B流体粒子浓度分布图; (f) 双转动马达 $R_w = 20$ 偏心条件下的B流体粒子浓度分布图,但是此时区别于(a)–(e), 调换了I, II号珠子对于B流体粒子的作用势

Fig. 8. (color online) Concentration Distribution of B solvent for different conditions: (a) Two eccentric rotors with $R_w = 20$; (b) one eccentric rotors with $R_w = 20$; (c) one concentric rotors with $R_w = 20$; (d) two concentric rotors with $R_w = 7.95$; (e) one concentric rotors with $R_w = 7.95$; (f) two eccentric rotors with $R_w = 20$ but different LJ potential pattern from (a)–(e) where I and II Beads interaction potential with B solvent are exchanged.

从表1的数据可以得到如下结论: 1) 对比表1的第1组数据和第2组数据可知, 当两个转动马达的耦合包括所有流体力学作用和浓度梯度效应时, 它们之间的相互作用会导致两者的转动角速度都减小; 2) 对比第4组数据和第5组数据可知, 流体力学作用几乎不影响马达的转动行为, 这主要是因为我们的自驱动转动马达导致的流场是很短程的, 衰减得很快, 因此对近邻的马达仅仅有很弱的影响, 同时也表明浓度梯度效应在双马达耦合中起主导作用, 双马达之间浓度梯度场效应的效果是减小马达的转动速度, 这可以定性地解释为两个马达所产生的浓度场比单个马达所产生的浓度场更加均匀, 因此相应的浓度梯度更小; 3) 对比第2组数据和第3组数据可知, 偏心和共心也会影响转动马达的运动角速度, 正如我们先前所讨论的; 4) 表1第6组数据表明两个转动方向相反的微马达

之间的耦合仍然降低马达的转动角速度; 其中反向转动的马达是通过调换I, II号珠子对于B流体粒子的作用势来实现的。

4 结 论

我们设计了一种新型的自扩散泳微观转动马达, 该微观马达能够在自己产生的浓度梯度下进行单向的自驱动转动. 通过分子动力学与多粒子碰撞动力学相结合的介观模拟, 证明了该自扩散泳微观转动马达的可行性. 通过改变马达与流体之间的相互作用, 或者马达催化化学反应的速率, 可以灵活地调节该马达的转动速率和转动方向. 这一工作为进一步设计实用的微流器件提供了新的思路.

此外, 我们研究了两个并列放置的转动马达的运动行为, 马达之间可以通过流体力学作用和浓度

梯度场效应耦合在一起. 我们发现马达之间的这种间接相互作用会降低马达的转动速度, 且随着马达之间距离的减小而单调增强. 通过仔细地设计模拟系统, 我们可以把流体力学作用和浓度梯度场效应分离开, 结果表明, 相比于流场耦合, 浓度场的耦合对于马达转动行为的影响更大. 可以预期, 如果在流体中放入多个转动马达, 它们之间会通过复杂的多体相互作用耦合在一起, 可能会展现出某些活性物质的集体动力学特征. 因为该转动马达具有简单的结构, 所以是研究活性物质的集体行为 (collective behavior) 的理想模型系统^[40,41].

参考文献

- [1] Wang J 2013 *Nanomachines: Fundamentals and Applications* (Weinheim: John Wiley & Sons) pp1–9
- [2] Elgeti J, Winkler R G, Gompper G 2015 *Rep. Prog. Phys.* **78** 056601
- [3] Berg H C 2003 *Annu. Rev. Biochem.* **72** 19
- [4] Stock D, Leslie A G, Walker J E 1999 *Science* **286** 1700
- [5] Kay E R, Leigh D A, Zerbetto F 2007 *Angew. Chem. Int. Ed.* **46** 72
- [6] Sengupta S, Ibele M E, Sen A 2012 *Angew. Chem. Int. Ed.* **51** 8434
- [7] Purcell E M 1977 *Am. J. Phys.* **45** 3
- [8] Lauga E 2011 *Soft Matter* **7** 3060
- [9] Lauga E, Powers T R 2009 *Rep. Prog. Phys.* **72** 096601
- [10] Dey K K, Zhao X, Tansi B M, Méndez-Ortiz W J, Córdova-Figueroa U M, Golestanian R, Sen A 2015 *Nano Lett.* **15** 8311
- [11] Angelani L, Di Leonardo R, Ruocco G 2009 *Phys. Rev. Lett.* **102** 048104
- [12] Paxton W F, Kistler K C, Olmeda C C, Sen A, St. Angelo S K, Cao Y, Mallouk T E, Lammert P E, Crespi V H 2004 *J. Am. Chem. Soc.* **126** 13424
- [13] Sánchez S, Soler L, Katuri J 2015 *Angew. Chem. Int. Ed.* **54** 1414
- [14] Fournier-Bidoz S, Arsenault A C, Manners I, Ozin G A 2005 *Chem. Commun.* **4** 441
- [15] Catchmark J M, Subramanian S, Sen A 2005 *Small* **1** 202
- [16] He Y, Wu J, Zhao Y 2007 *Nano Lett.* **7** 1369
- [17] Qin L, Banholzer M J, Xu X, Huang L, Mirkin C A 2007 *J. Am. Chem. Soc.* **129** 14870
- [18] Fattah Z, Loget G, Lapeyre V, Garrigue P, Warakulwit C, Limtrakul J, Bouffier L, Kuhn A 2011 *Electrochim. Acta* **56** 10562
- [19] Wang Y, Fei S, Byun Y M, Lammert P E, Crespi V H, Sen A, Mallouk T E 2009 *J. Am. Chem. Soc.* **131** 9926
- [20] Ebbens S, Jones R A, Ryan A J, Golestanian R, Howse J R 2010 *Phys. Rev. E* **82** 015304
- [21] Anderson J L 1989 *Annu. Rev. Fluid Mech.* **21** 61
- [22] Yang M, Ripoll M, Chen K 2015 *J. Chem. Phys.* **142** 054902
- [23] Malevanets A, Kapral R 1999 *J. Chem. Phys.* **110** 8605
- [24] Yang M, Liu R, Ripoll M, Chen K 2015 *Lab. Chip.* **15** 3912
- [25] Padding J, Louis A 2006 *Phys. Rev. E* **74** 031402
- [26] Winkler R, Mussawisade K, Ripoll M, Gompper G 2004 *J. Phys. Condens. Matter* **16** S3941
- [27] Peltomäki M, Gompper G 2013 *Soft Matter* **9** 8346
- [28] Noguchi H, Gompper G 2004 *Phys. Rev. Lett.* **93** 258102
- [29] Gompper G, Ihle T, Kroll D, Winkler R 2009 *Multi-particle Collision Dynamics: A Particle-based Mesoscale Simulation Approach to the Hydrodynamics of Complex Fluids* (Berlin: Springer) pp1–87
- [30] Ryder J F 2005 *Ph. D. Dissertation* (Oxford: University of Oxford)
- [31] Yang M, Ripoll M 2014 *Soft Matter* **10** 1006
- [32] Yang M, Wysocki A, Ripoll M 2014 *Soft Matter* **10** 6208
- [33] Rückner G, Kapral R 2007 *Phys. Rev. Lett.* **98** 150603
- [34] Tao Y G, Kapral R 2010 *Soft Matter* **6** 756
- [35] Huang M J, Schofield J, Kapral R 2016 *Soft Matter* **12** 5581
- [36] Friese M, Rubinsztein-Dunlop H, Gold J, Hagberg P, Hanstorp D 2001 *Appl. Phys. Lett.* **78** 547
- [37] Grier D G 2003 *Nature* **424** 810
- [38] Rapaport D C 2004 *The Art of Molecular Dynamics Simulation* (Cambridge: Cambridge University Press) pp60–62
- [39] Tüzel E, Ihle T, Kroll D M 2006 *Phys. Rev. E* **74** 056702
- [40] Bricard A, Caussin J B, Desreumaux N, Dauchot O, Bartolo D 2013 *Nature* **503** 95
- [41] Nguyen N H, Klotsa D, Engel M, Glotzer S C 2014 *Phys. Rev. Lett.* **112** 075701

Mesoscale simulation of self-diffusiophoretic microrotor*

Shen Ming-Ren Liu Rui Hou Mei-Ying Yang Ming-Cheng[†] Chen Ke[‡]

(Beijing National Laboratory for Condensed Matter Physics and Key Laboratory of Soft Matter Physics, Institute of Physics,
Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China)

(Received 20 June 2016; revised manuscript received 24 June 2016)

Abstract

Artificial micro-scale or nano-scale machines that are capable of converting energy to mechanical work, have long been pursued by science and engineering communities for their potential applications in microfluidics, biology and medicine. From a physics point of view, they are also ideal models to investigate fundamental statistical phenomena in non-equilibrium active matters. Inspired by bio-machines and bio-motors like ATP synthase and flagellum motors, we propose a simple design of rotary motors based on pure self-diffusiophoresis effects. The basic design of the rotor consists of three colloidal beads with different surface properties, which leads to different interactions between the beads and solvent molecules. Chemical reactions are imposed on the surface of one of the beads, which creates a source of one of the two solvent molecules and generates a local concentration gradient. The other two beads connected to the catalytic bead have different affinities to the solvent molecules, which leads to asymmetric diffusiophoretic forces on the two non-catalytic beads. A net torque is thus obtained from difference of the diffusiophoretic forces between the two non-catalytic beads. In our simulation, we employ hybrid molecular dynamics (MD) simulations and multi-particle collision dynamics (MPC) to investigate the motion of microrotors. The binary fluid is composed with A-type and B-type solvent particle whose interactions are described by multi-particle collision dynamics while beads-particle interactions are modeled by molecular dynamics. In MPC, all fluid particles execute alternating streaming and collision steps. During streaming steps, the solvents move ballistically. During collision steps, particles are sorted into square cells and only interact with particles in the same cell under a specific stochastic rotation rule. MPC algorithm locally conserves mass, linear momentum, angular momentum and energy, and properly captures thermal fluctuation, mass diffusion, dissipation and hydrodynamic interactions. In our simulation, standard MPC parameters are employed which correspond to a liquid-like behavior of fluid. In MD, beads-solvent interactions are described by Lennard-Jones potential with different parameter combinations and the equations of motion is integrated by velocity-Verlet algorithm. To perform hybrid molecular dynamic simulations with multi-particle collision dynamics, between two MPC collision steps, 50 MD steps are implemented for the solvent particles that are in the interaction range of colloidal beads. We first investigate the solvent concentration distribution around static microrotor, and confirm that the catalytic bead generates a steady-state local concentration gradient. Net angular displacements are obtained when the rotor is allowed to rotate freely. The rotational direction and speed of the microrotor are determined by bead-solvent interactions, the rotor geometry, the solvent viscosity and the catalytic reaction ratio. We also study the scenario in which two rotors are placed in close vicinity to each other. We find that the coupling between the concentration fields around the rotors reduces the rotational speed of both rotors.

Keywords: self-diffusiophoretic microrotor, phoresis, molecular dynamic simulations, multi-particle collision dynamics

PACS: 02.70.-c, 47.11.-j, 47.57.-J

DOI: 10.7498/aps.65.170201

* Project supported by the National Basic Research Program of China (Grant No. 2015CB856800), and the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11474327, 11404379).

[†] Corresponding author. E-mail: mcyang@iphy.ac.cn

[‡] Corresponding author. E-mail: kechen@iphy.ac.cn