

## شارش سیال الکترولیت در محیطی متشکل از نانو/میکروسیمها

بابام خانی ممقانی، مهسا؛ حمزه پور، حسین

دانشگاه فیزیک، دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی، تهران

### چکیده

شارش الکترولیت در محیط متخلخل دارای اهمیت ویژه‌ای است. محیط مورد بررسی در این مقاله، یک محیط دو بعدی شامل نانو/میکروسیمها می‌باشد. الکترولیت با اعمال اختلاف فشار و در نظر گرفتن پتانسیل جاری در محیط شارش می‌یابد. حضور الکترولیت در مجاورت سیمها باعث ایجاد پتانسیل الکتریکی زتا در مرز الکترولیت و سیمها می‌شود. پتانسیل ایجاد شده امکان محاسبه توزیع پتانسیل الکتریکی، توزیع فشار، پروفایل سرعت و توزیع پتانسیل یونی در محیط را فراهم می‌کند. در نهایت می‌توان کمیت‌های ماکروسکوپی شبکه از جمله ضرایب جفت‌شدگی و تراوایی محیط و تابعیت آن‌ها بر حسب پتانسیل زتا و خواص میکروسکوپی شبکه (چگالی، تخلخل و عرض سیمها) محاسبه نمود.

## Electrolyte fluid flow in a medium containing nano/microwires

Babamkhani.M, Mahsa; Hamzehpour, Hossein

Department of Physics, K. N. Toosi University of Technology, Tehran

### Abstract

*The electrolyte flow in a porous medium is very important. The medium that we study in this paper is a 2D medium which is a network of nano/micro wires. The fluid, flows by applying the pressure difference and considering stream potential. Existence electrolyte in presence of wires, creates electric zeta potential on the boundaries. By considering the electric zeta potential, the electric potential, pressure, ionic potential distributions and velocity profile is obtained. Finally the macroscopic properties of the network (permeability and coupling coefficient) as functions of zeta potential and some microscopical properties (density, porosity and wire's width) is obtained.*

PACS No. 66.10

شارش سیال در شبکه‌ای متشکل از میکروکانال‌ها با روش پتانسیل جاری مورد مطالعه قرار گرفته است [5]. همچنین در مطالعه دیگر شبکه‌ای متشکل از میکروکانال‌ها تحت اعمال میدان الکتریکی مورد بررسی قرار گرفته است [6]. در این مطالعه قصد داریم تا کمیت‌های ماکروسکوپی الکترودینامیکی محیط شامل نانو/میکروسیمها را بر حسب پتانسیل زتا و پارامترهای مربوط به هندسه محیط بدست آوریم.

### تولید محیط

برای تولید محیط شامل نانو/میکروسیمها شبکه مربعی انتخاب می‌شود و مستطیل‌هایی به طول  $l$  و عرض  $b$  با جهت‌گیری و مکان تصادفی در نظر گرفته می‌شود. مستطیل‌ها نمایانگر سیمها می‌باشند.

### مقدمه

در این مقاله الکترودینامیکی مربوط به شبکه‌ای متشکل از سیمها با در نظر گرفتن پتانسیل جاری [1] مورد بررسی قرار گرفته است. بدین صورت که ابتدا تولید محیط مورد توجه قرار گرفته است و در ادامه معادلات الکترودینامیکی و روش‌های حل عددی بیان شده است. در نهایت کمیت‌های ماکروسکوپی شبکه بر حسب کمیت‌های میکروسکوپی شبکه محاسبه شده‌اند. این بررسی‌ها در حوزه‌های گوناگون از جمله صنعت، خاک، نفت، بیوتکنولوژی [2] کاربرد دارد. محیط مورد بررسی در میکروفیبرها [3]، بافت استخوان، و شبکه نانوسیمها که با استفاده از آن طیف گسترده‌ای از DNA ها تجزیه و تحلیل می‌شوند [4]، مشاهده شده است. در شبیه‌سازی مشابه

در این معادلات  $n$  شار تعداد یون،  $n^0$  غلظت تعداد یون،  $z$  والانس کاتیون،  $D$  ضریب پخشی،  $\Phi$  پتانسیل یونی،  $u$  سرعت انتقال شار در هر نقطه،  $\psi^0$  پتانسیل الکتریکی حالت تعادل و  $p$  نمایانگر فشار است. اندیس  $i$  مربوط به جزء یون نام است و علامت  $(\prime)$  نشان‌دهنده کمیت‌های بی بعد شده می باشد. سرعت سوق ماکروسکوپی (سرعت میانگین انتقال شار) شارش سیال،  $U'$  و چگالی جریان الکتریکی ماکروسکوپی،  $J'$  می باشند که وابستگی آنان به کمیت‌های ماکروسکوپی با روابط زیر نشان داده می شود [9].

$$J' = \frac{1}{\tau} \int_{\tau} \sum_{i=1}^N q_i z_i^2 D_i' \nabla' \Phi_i' d\tau + \frac{1}{\tau} \int_{\tau} \sum_{i=1}^N q_i z_i u' d\tau \quad (6)$$

$$U' = \frac{1}{\tau} \int_{\tau} u' d\tau. \quad (7)$$

همچنین تابعیت این دو متغیر نسبت به کمیت‌های ماکروسکوپی بدین صورت بیان می شود

$$J' = (\Theta) \cdot E' - \alpha' \cdot \nabla' p',$$

$$U' = \beta(9) E' - K' \cdot \nabla' p'.$$

در اینجا  $\Theta'$  و  $K'$  به ترتیب رسانندگی الکتریکی و تراوایی هیدرودینامیکی،  $\alpha'$  و  $\beta'$  ضرایب جفت شدگی الکترواسمزی هستند. شرایط مرزی بی بعد شده برای حل معادلات بر روی سطح جامد

$$\psi' = \zeta', \nabla' \psi' \cdot \mathbf{n}' = 0, \mathbf{u}' = 0, \quad (10)$$

و برای محیط مورد بررسی

$$[\psi^0] = 0, \quad [\nabla \psi^0] = 0,$$

$$[\Phi_i']_j = E' \cdot L_j', \quad [\delta p']_j = \nabla' p' \cdot L_j',$$

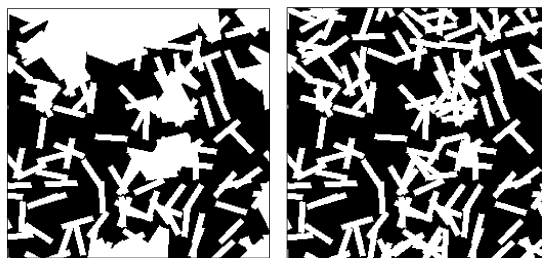
$$[\delta u'] = 0 \quad (11)$$

می باشند. نماد  $[\dots]$  بیانگر اختلاف اندازه تابع مربوطه در دو نقطه مقابل محیط شبیه سازی شده، به عنوان شرایط مرزی مساله می باشد.

پتانسیل الکتریکی جفت لایه الکتریکی،  $v$  بردار یکه عمود بر سطح جامد و  $E$  میدان الکتریکی می باشد.

در اثر تماس الکترولیت با سطح جامد یون های با بار مخالف جذب سطح می شوند. این امر موجب تولید لایه ای موسوم به جفت لایه الکتریکی می شود. ضخامت این لایه برابر با طول دبابی،  $\kappa^{-1}$  است و مقدار پتانسیل الکتریکی در مرز این لایه و سطح جامد به پتانسیل الکتریکی جفت لایه الکتریکی یا پتانسیل زتا،  $\zeta$  معروف است.

این محیط معکوس محیط متشکل از کانالها است که جزئیات مربوط به آن در مقالات قبلی ما [6,7] به طور مفصل توضیح داده شده است. نمونه ای از محیط مورد نظر در شکل 1- الف نشان داده شده است. محیط شامل قسمت های مختلفی است که به اصطلاح هر کدام از آنها خوشه نامیده می شود. طبق نظریه ی پرکولاسیون سیال مورد نظر فقط در خوشه ی اصلی قادر به حرکت است. برای کاهش حجم محاسبات و زمان اجرای برنامه، محاسبات تنها برای خوشه اصلی، انجام می گیرد (شکل 1-ب) [8]. در فرآیند شبیه سازی طول سیم ها 972.8 نانومتر و عرض آنان 60.8-182.4 نانومتر فرض شده است.



شکل 1. الف) محیط متشکل از نانو/میکروسیم ها (ب) خوشه اصلی (قسمت سیاه رنگ) مربوط به شارش سیال

معادلات الکتروجنبشی

توزیع های مورد نیاز با استفاده از معادلات بی بعد شده محاسبه می شوند. به منظور افزایش سرعت و ساده شدن محاسبات روابط خطی سازی شده مورد استفاده قرار می گیرد. معادلات خطی و بی بعد حاکم بر یک الکترولیت نیوتونی به صورت زیر در نظر گرفته می شود [9].

$$\nabla' \cdot \mathbf{j}'_i = 0, \quad \mathbf{j}'_i = n_i^0 z_i D_i' \nabla' \Phi_i' + n_i^0 \mathbf{u}', \quad (1)$$

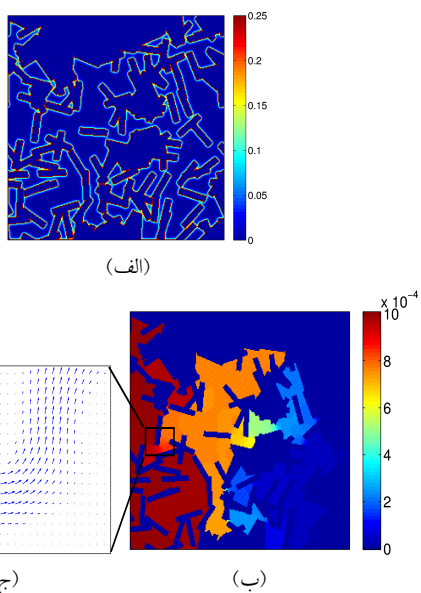
$$\nabla'^2 \psi^0 = - \sum_{i=1}^N q_i z_i \exp(-z_i \psi^0),$$

$$\nabla'^2 \Phi_i' = \nabla \psi^0 \cdot \left( z_i \nabla' \Phi_i' (\Theta) \frac{1}{D_i'} \mathbf{u}' \right),$$

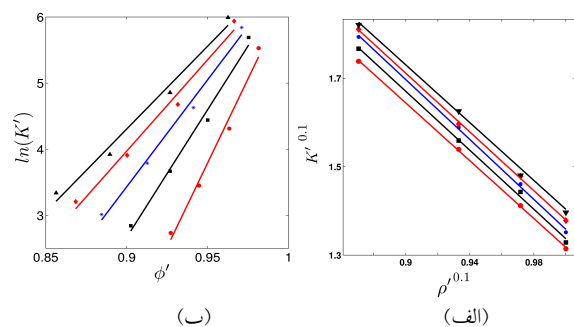
$$\nabla'^2 \mathbf{u}' = \nabla' p' - \sum_{i=1}^N q_i z_i \exp(-z_i \psi^0) \nabla \Phi_i',$$

$$\nabla' \cdot \mathbf{u}' = 0.$$

حال معادلات را برای محیط متشکل از نانو/میکروسیم‌ها حل می‌کنیم. با حل معادلات توزیع پتانسیل، توزیع فشار و پروفایل سرعت برای این محیط به دست می‌آید (شکل 2). پتانسیل یونی برای محیط با در نظر گرفتن پتانسیل جاری بسیار کوچک و قابل چشم‌پوشی به دست می‌آید. در نهایت کمیت‌های ماکروسکوپی محیط قابل محاسبه‌اند. تغییرات ضریب تراوایی بر حسب کمیت‌های میکروسکوپی در شکل 3 نشان داده شده است.



شکل 2. (الف) توزیع پتانسیل (ب) توزیع فشار (ج) پروفایل سرعت



شکل 3. (الف) نمودار تغییرات  $K'$  بر حسب  $\rho'$  برای  $b'$  های متفاوت،

(ب) نمودار تغییرات  $K'$  بر حسب  $\phi'$  برای  $b'$  های متفاوت، داده‌ها برای  $b'$

2 (●)، 3 (■)، 4 (\*)، 5 (◆)، 6 (▲) می‌باشند.

فرض می‌کنیم که  $\zeta' \ll \|\nabla' p'\|$ ، بدین معنی که اختلاف فشار اعمال شده به کل محیط در مقایسه با پتانسیل زتا مقدار بسیار کوچکی می‌باشد [9].

### شبیه سازی عددی

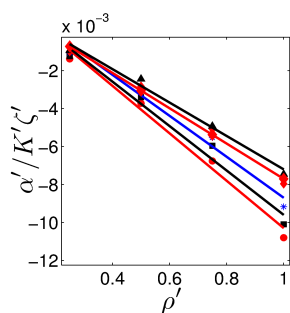
با توجه به این که معادلات (2-4) معادلات جفت شده هستند و محیط مورد نظر ما بی‌نظم می‌باشد و قادر به حل معادلات به صورت تحلیلی نمی‌باشیم، با استفاده از گسسته‌سازی معادلات را به صورت عددی حل می‌کنیم [9]. بدین منظور ابتدا توزیع پتانسیل حالت تعادل  $\psi^{0'}$  با توجه به پتانسیل زتای مربوط به سطح جامد و با استفاده از فرم گسسته معادله (2) به دست آمد. توزیع فشار و پروفایل سرعت با استفاده از فرم گسسته معادلات جفت شده (4 و 5) با روش MAC بدست می‌آید [10]. بعد از محاسبه این مقادیر و در نظر گرفتن معادله (3) قادر به محاسبه پتانسیل یونی خواهیم بود. در نهایت به کمک معادلات (6 و 7)،  $J'$  و  $U'$  محاسبه می‌شوند. مقادیر آغازین کمیت‌های مجهول صفر در نظر گرفته می‌شود. تمامی محاسبات تا زمانی که مقادیر به دست آمده با دقت مناسبی همگرا شوند ادامه خواهد داشت. الکترولیت مورد بررسی محلول آبی  $HClO_4$  در دمای  $25^\circ C$  با گذردهی نسبی  $\epsilon_r = 78.38$ ، ویسکوزیتی  $\mu = 8.9 \times 10^{-4} Pas$ ، غلظت‌های یونی  $n_1^\infty = n_2^\infty = 10^{-4} \frac{mol}{L}$ ، پخش‌پذیری اجزای یونی برای  $H^+$   $D_1 = 9.31 \times 10^{-9} m^2 s^{-1}$ ، برای  $ClO_4^-$   $D_2 = 1.79 \times 10^{-9} m^2 s^{-1}$  می‌باشد. همچنین در این شبیه سازی  $\kappa a = 1$  در نظر گرفته می‌شود که  $a$  طول یاخته یکانی شبکه است و مقدار  $\kappa^{-1} = 30.4 n m$  در نظر گرفته می‌شود.

### نتایج

به منظور مقایسه نتایج شبیه سازی و نتایج تئوری ابتدا یک محیط بدون سیم شبیه سازی شده است و معادلات برای این محیط حل شده است. ضرایب جفت شدگی و تراوایی با استفاده از معادلات (8 و 9) قابل محاسبه‌اند. مقادیر به دست آمده از شبیه سازی در توافق خوبی با نتایج تئوری زیر است [9]

$$K = \frac{(\kappa h)^2}{3}, \quad (12)$$

$$\alpha' = \zeta' \left( \frac{\tanh(\kappa h)}{\kappa h} - 1 \right).$$



شکل 5. تغییرات  $\frac{\alpha'}{K'\zeta'}$  بر حسب  $\rho'$  برای  $b'$  های متفاوت، داده‌ها برای  $b'$  2 (●)، 3 (■)، 4 (\*)، 5 (◆)، 6 (▲) می‌باشند.

### مراجع

[1] A. V. Delgado; "Interfacial electrokinetics and electrophoresis"; surfactant science series, V106, MarcelDekerInc, (2002).  
 [2] S. Ghosal; "Electrokinetic-flow-induced viscous drag on a tethered DNA inside a nanopore"; *Phys. Rev. E* 76, 061916 (2007).  
 [3] L. M. Bellan M. Pearsall, D. M. Cropek, R. Langer; "A 3D Interconnected Microchannel Network Formed in Gelatin by Sacrificial Shellac Microfibers"; *Advanced Materials*, 24, 38, (2012) 5187-5191.  
 [4] S. Rahongl, T. Yasui, T. Yanagida1, K. Nagashima1, M. Kanai1, A. Klamchuen1, G. Meng1, Y. He1, F. Zhuge1, N. Kaji, T. Kawai1, Y. Baba; "Ultrafast and Wide Range Analysis of DNA Molecules Using Rigid Network Structure of Solid Nanowires"; *Scientific reports*, 4, 5252, (2014).  
 [5] مهسا بابام خانی ممقانی، حسین حمزه پور؛ " شبیه سازی پدیده الکتروجنینی در شبکه ای نامنظم از کانال ها با روش پتانسیل جاری "؛ مقاله نامه کنفرانس فیزیک محاسباتی؛ دانشگاه تربیت دبیر شهید رجایی (1394) 29-32.  
 [6] H. Hamzhepour, A. Atakhani, A. Kumar Gupta, and M. Sahimi; "Electro-osmotic flow in disordered porous and fractured media"; *Phys. Rev. E*, **89**, 033007 (2014).  
 [7] A. Yazdi, H. Hamzhepour, M. Sahimi; "Permeability, porosity, and percolation properties of two-dimensional disordered fracture networks"; *Phys. Rev. E*, **84**, 046317, (2011).  
 [8] J. Hoshen, R. Kopelman; "Percolation and cluster distribution. I. Cluster multiple labeling technique and critical concentration algorithm"; *Phys. Rev. B*, **14**, 3438, (1976).  
 [9] D. Coelho, M. Shapiro, J.F. Thovert, P.M. Adler; "Electroosmotic Phenomena in Porous Media"; *J. Colloid InterfaceSci*, **181**, 169 (1996).  
 [10] R. Peyret, T. D. Taylor; "Computational Methods for Fluid Flow"; Springer Series in Computational Physics, Springer, Berlin, (1985).

تابعیت به دست آمده برای ضریب تراوایی با استفاده از محاسبه معادله حاکم بر شیب خطوط نمودارهای فوق به صورت زیر بیان می‌شود

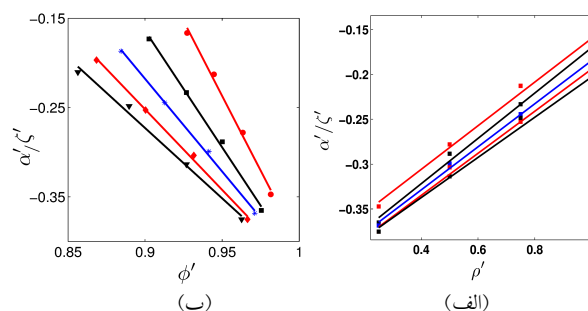
$$K'^{0.1} \propto (-0.85b'\rho'^{0.1} - 328.95\rho'^{0.1} + 2.81b') \times 10^{-2} \quad (13)$$

$\ln(K') \propto (\exp(-0.65 \ln(b')) + 4.37) \varphi' + 24.07 \ln(b')$ .  
 $b'$  و  $\varphi'$  به ترتیب عرض سیم‌ها، چگالی سیم‌ها و تخلخل محیط هستند. همان‌طور که اشاره شد پتانسیل یونی بسیار کوچک است. بنابراین با توجه به معادلات، ضریب تراوایی در محیط مورد بررسی به‌طور موثر وابستگی به پتانسیل زتا ندارد.

برای به دست آوردن تابعیت ضریب جفت شدگی، به منظور سهولت در محاسبات تغییرات  $\frac{\alpha'}{\zeta'}$  بر حسب کمیت‌های میکروسکوپی مورد بررسی قرار می‌گیرد. این تغییرات در شکل 4 نشان داده شده است. بنابراین با توجه به نمودارها می‌توان  $\alpha'$  را به صورت زیر در نظر گرفت

$$\alpha' \propto (-0.38b'\rho' + 25.04\varphi' - 0.53b')\zeta' \times 10^{-2} \quad (14)$$

$$\alpha' \propto (0.43b'\varphi' - 4.02\varphi' - 0.44b')\zeta'$$



شکل 4. الف) نمودار تغییرات  $\frac{\alpha'}{\zeta'}$  بر حسب  $\rho'$  برای  $b'$  های متفاوت، ب) نمودار تغییرات  $\frac{\alpha'}{\zeta'}$  بر حسب  $\varphi'$  برای  $b'$  های متفاوت، داده‌ها برای  $b'$  2 (●)، 3 (■)، 4 (\*)، 5 (◆)، 6 (▲) می‌باشند.

در نهایت تغییرات  $\frac{\alpha'}{K'\zeta'}$  بر حسب  $\rho'$  برای  $b'$  های متفاوت در شکل 5 نشان داده شده است. بنابراین با استفاده از معادله حاکم بر شیب خطوط ارتباط کمیت های ماکروسکوپی بدین صورت خواهد بود

$$\frac{\alpha'}{K'\zeta'} \propto (0.10b'\rho' - 1.45\rho' - 0.02b') \times 10^5 \varphi'^2$$