

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРОФОРЕЗА ЧАСТИЦ ЯНУСА

Т.Ю. Молотилин^{1,2}, В.А. Лобаскин³, О.И. Виноградова¹

¹Лаборатория физико-химии модифицированных поверхностей ИФХЭ РАН, 119071, Москва, Ленинский проспект, д.31, корп.4; e-mail: taras.molotilin@gmail.com

²МГУ, химический факультет, 119991, Москва, ГСП-1, Ленинские горы, д. 1, стр. 3;

³University College Dublin, Stillorgan Rd, Belfield, Dublin 4, Co. Dublin, Ireland

Интерес к исследованию коллоидных частиц с гетерогенной поверхностью в настоящее время диктуется такими важными и перспективными задачами как адресная доставка лекарств, сепарация субстратов для химического синтеза и анализа на микро- и нано-уровнях, а также созданием активных наноструктурированных объектов на основе самоорганизующихся коллоидных систем. Частицы Януса, поверхность которых поделена на две части с различными свойствами, являются базовым прототипом для многих более сложных структур; фундаментальное исследование их поведения в растворах электролитов может дать важную информацию для дальнейшей направленной модификации и создания высокоспецифичных коллоидных систем для упомянутых выше задач.

Одним из наиболее важных способов управления транспортом и характеристики коллоидных частиц является электрофорез. Электрофоретическая подвижность частиц связана непосредственно с электрическим потенциалом поверхности и структурой двойного электрического слоя. В нашей работе мы пытались ответить на вопрос: возможно ли варьируя лишь распределение заряда по поверхности коллоидной частицы, не меняя при этом суммарный заряд, радиус и другие фундаментальные свойства, существенным образом повлиять на электрофоретическую подвижность? В случае положительного ответа открываются широкие перспективы по созданию высокоподвижных коллоидных суспензий на основе направленного дизайна их поверхности.

Для решения поставленной задачи в настоящей работе использовалось компьютерное моделирование частиц Януса методами молекулярной динамики в сочетании с решеточной моделью Больцмана. Использовали примитивную модель электролита, задавая ионы в явном виде как жесткие сферы с единичным зарядом, помещенные в жидкость, моделируемую методом решеточной модели Больцмана. Граничные условия были периодическими по всем координатам. Для симуляции коллоида использовали модель «малины»: набор частиц, равномерно распределенных по сферической поверхности заданного радиуса и скрепленных между собой упругим потенциалом FENE. Внешнее электрическое поле имитировали с помощью фиксированной силы, действующей на каждый заряд в системе. В симуляциях изучали скорость частиц Януса и рассчитывали их электрофоретическую подвижность. Варьировали концентрацию ионов в системе и распределение заряда по поверхности частицы Януса.

Полученные результаты свидетельствуют о том, что с уменьшением площади, на которой распределён заряд, электрофоретическая подвижность частицы Януса существенно снижается, для частиц с экваториальным распределением заряда снижения подвижности практически не наблюдается. Также было изучено распределение ионной атмосферы вокруг различных частиц Януса, сделаны выводы о вкладе поляризации двойного электрического слоя в подвижность.