

引言：自驱动微纳米马达是一种新型的智能仿生材料，具有自主运动，动态自组装以及群体行为等特性。数值模拟能够帮助我们理解其运动机理，提供了研究多体相互行为的可能性。

本研究通过对自电泳机理驱动的双金属棒马达复杂运动机理的模拟，加深了对其个体行为和相互作用的理解。

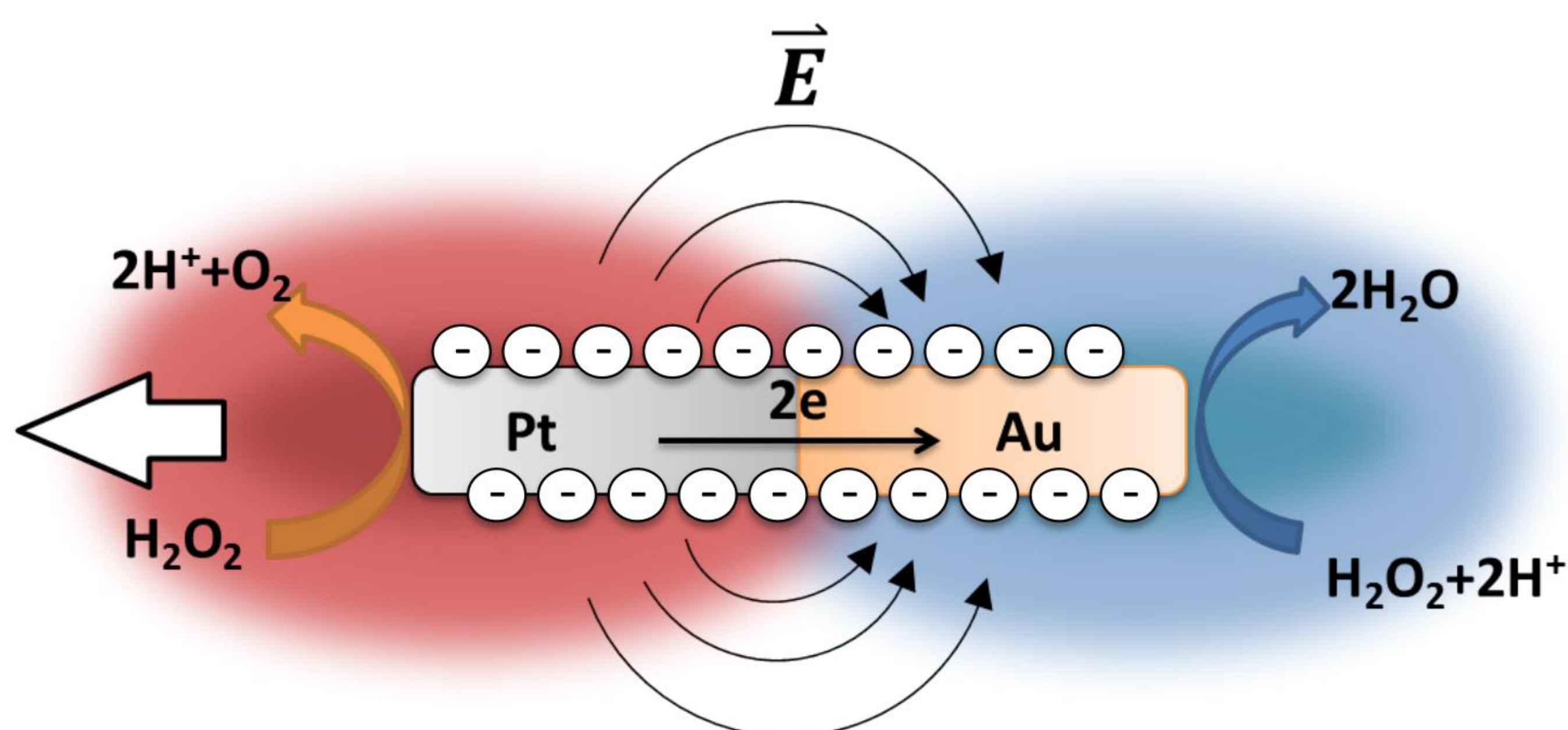
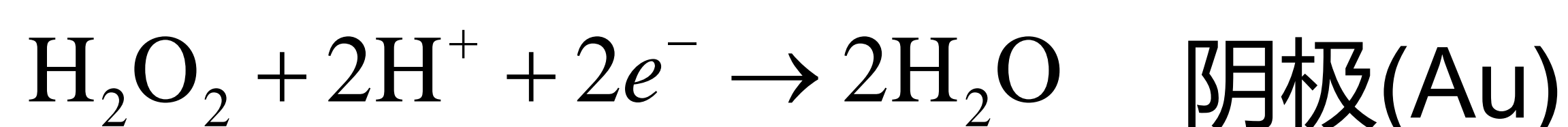
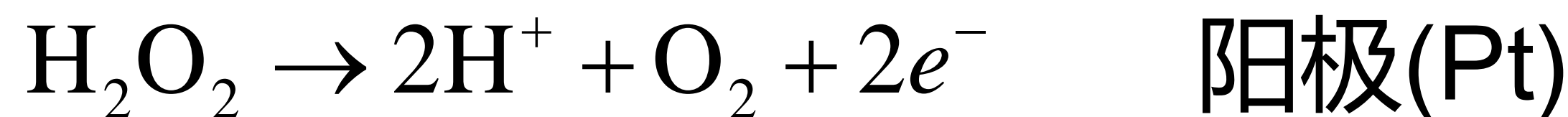


图 1. 自电泳机理示意图

运动机理：过氧化氢在金铂两种金属表面产生不对称的歧化反应，造成了金属棒周围氢离子的分布不均匀，进而产生一个自生电场驱动带有负电的金属棒运动。



计算方法：自电泳机理涉及到马达周围**流体流动**，**离子传输**以及**电场作用**，三个过程环环相扣，互相影响。通过对稀物质传递，静电和蠕流接口进行有效的耦合，我们实现了马达周围离子场，电场和流场的模拟。

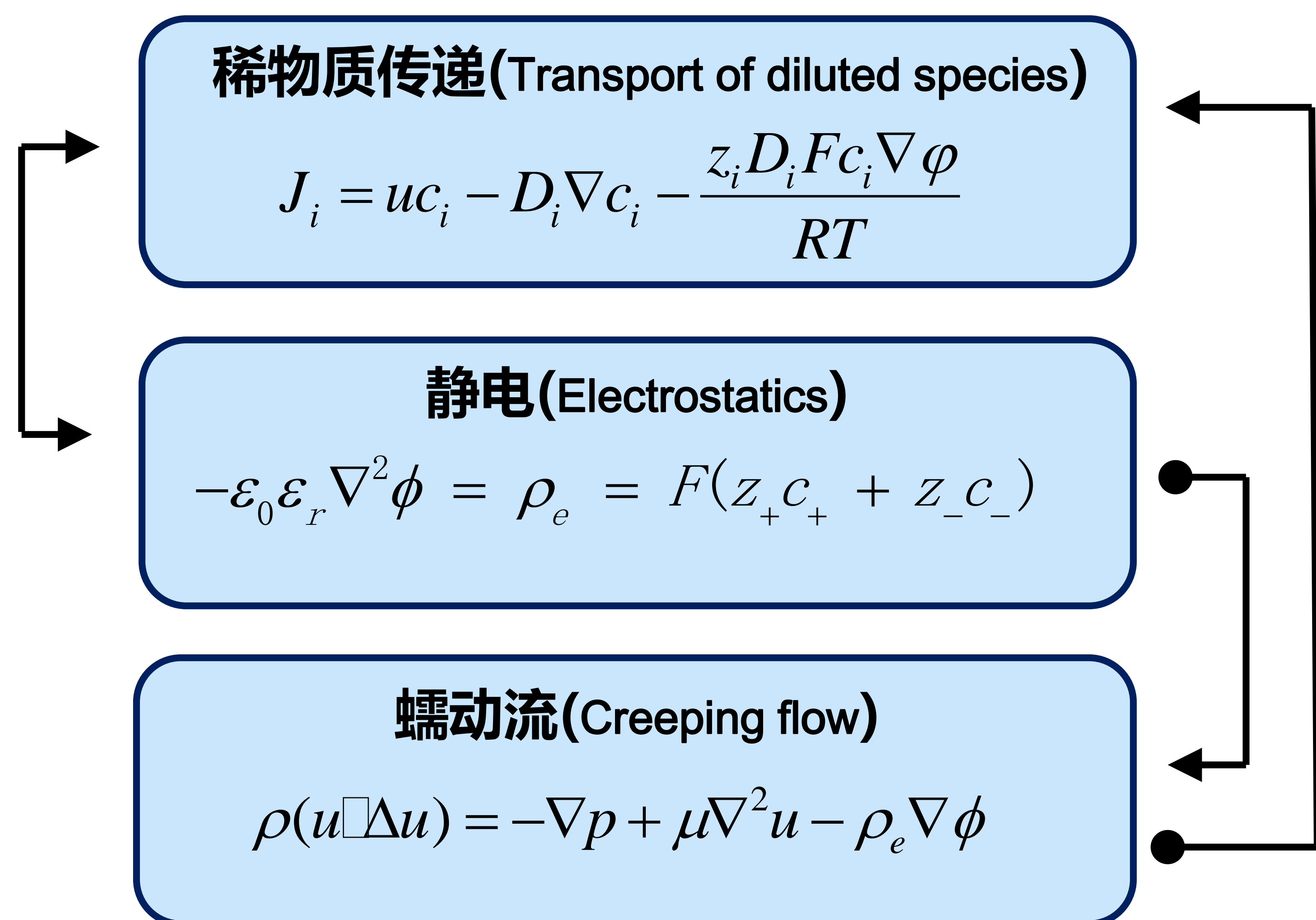


图 2. 模型基本计算原理

模型建立：采用二维轴对称模型对单个双金属棒进行模拟，用金属棒两端氢离子的流入和流出模拟两端的化学反应，马达边界设为电渗流边界。基于以上设置，建立了两个双金属棒马达的三维模型。

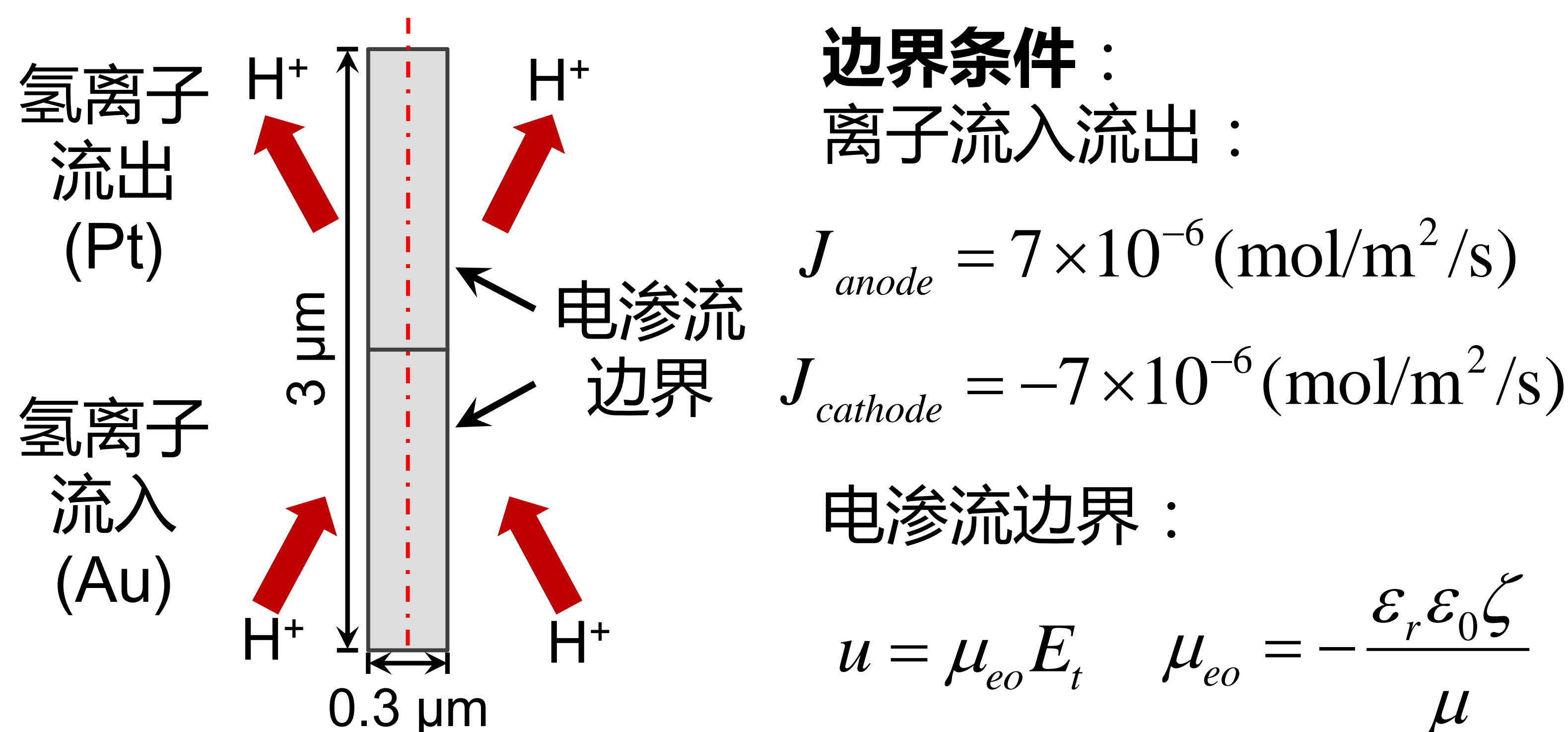


图 3. 二维轴对称双金属棒模型边界条件¹

结果：双金属棒周围的流场显示双金属棒的 Pt 在前运动，其周围电场呈现类偶极子的电学特性。

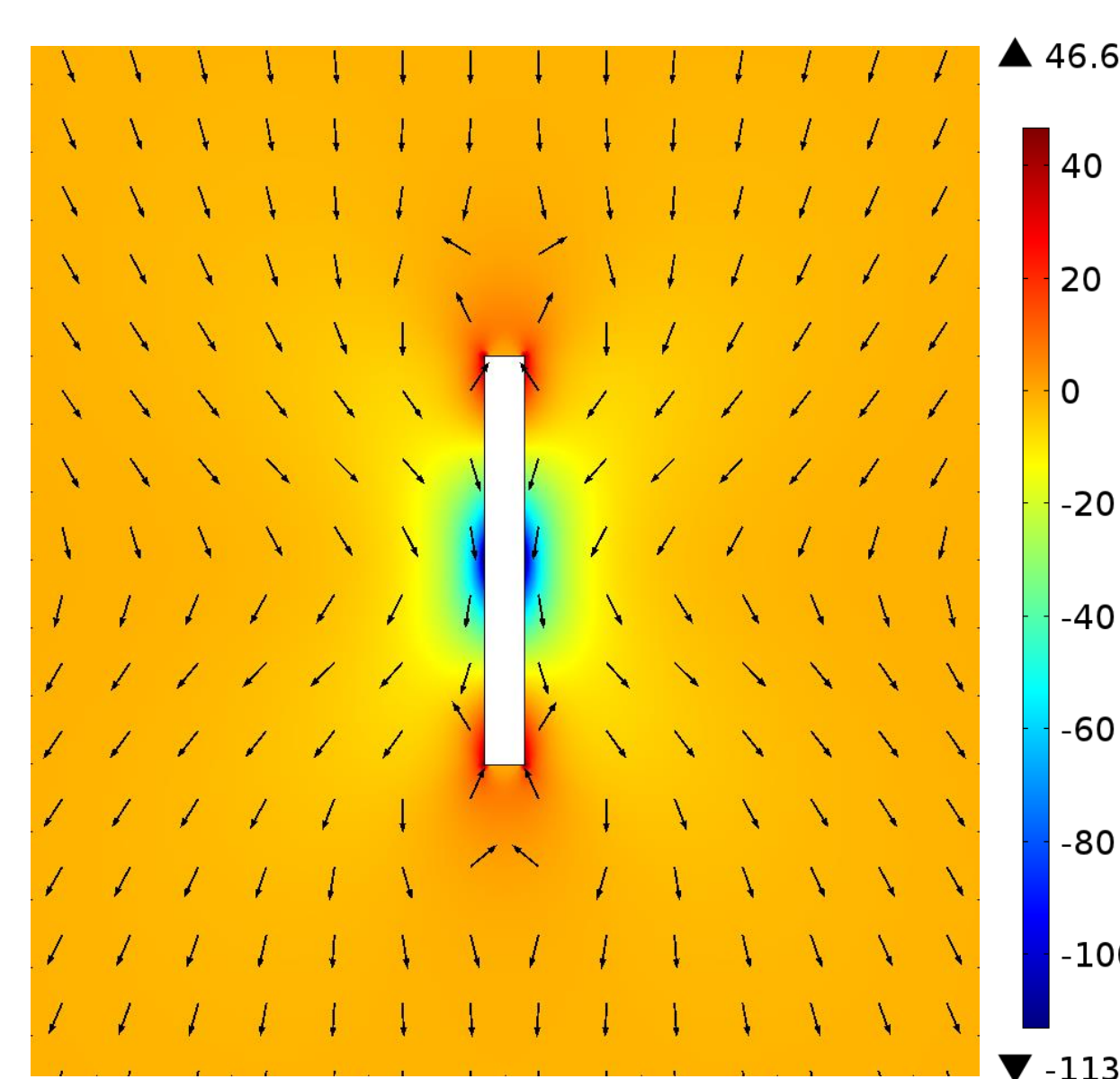


图 5. 马达周围流场分布

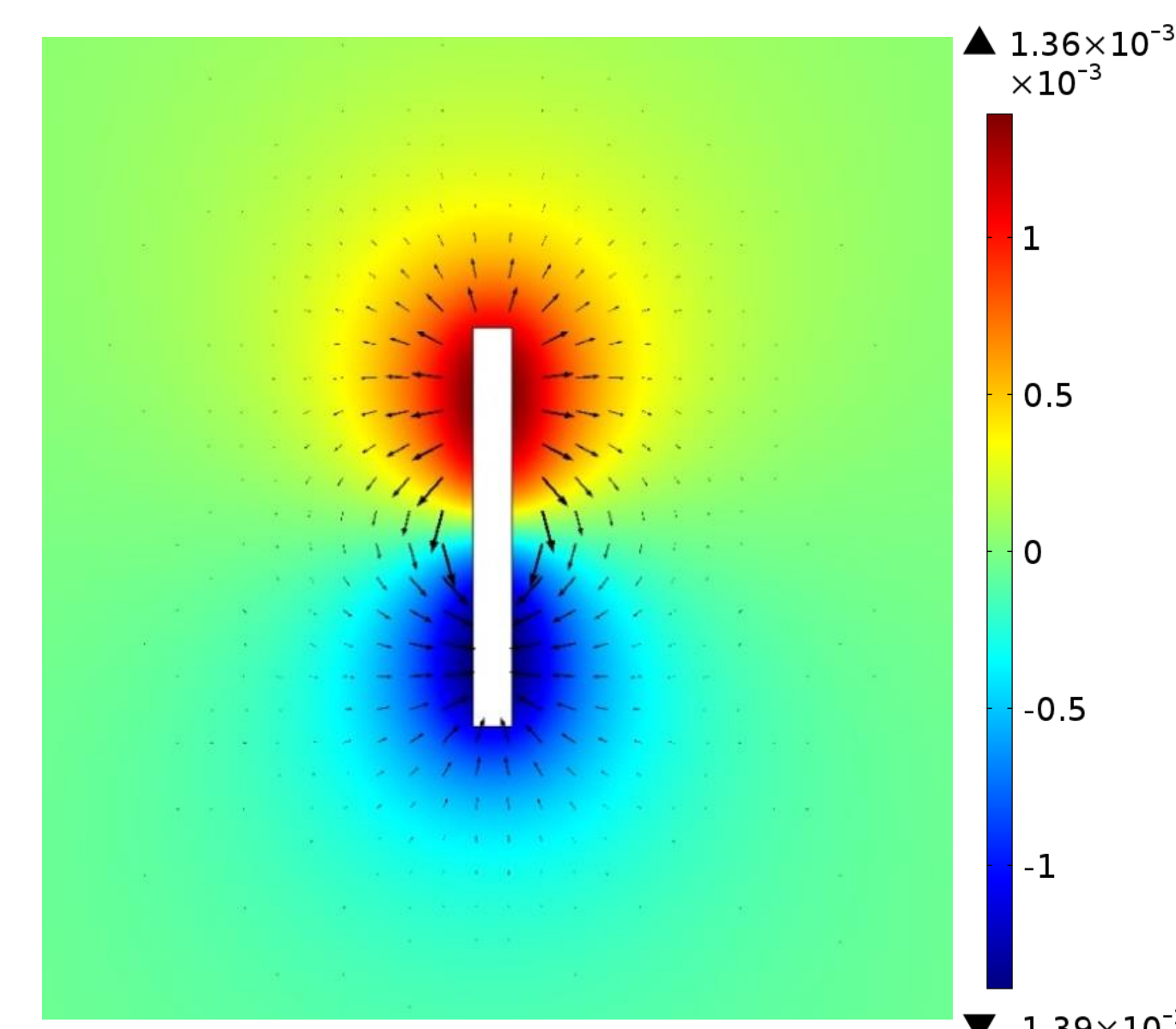


图 6. 马达周围电场分布

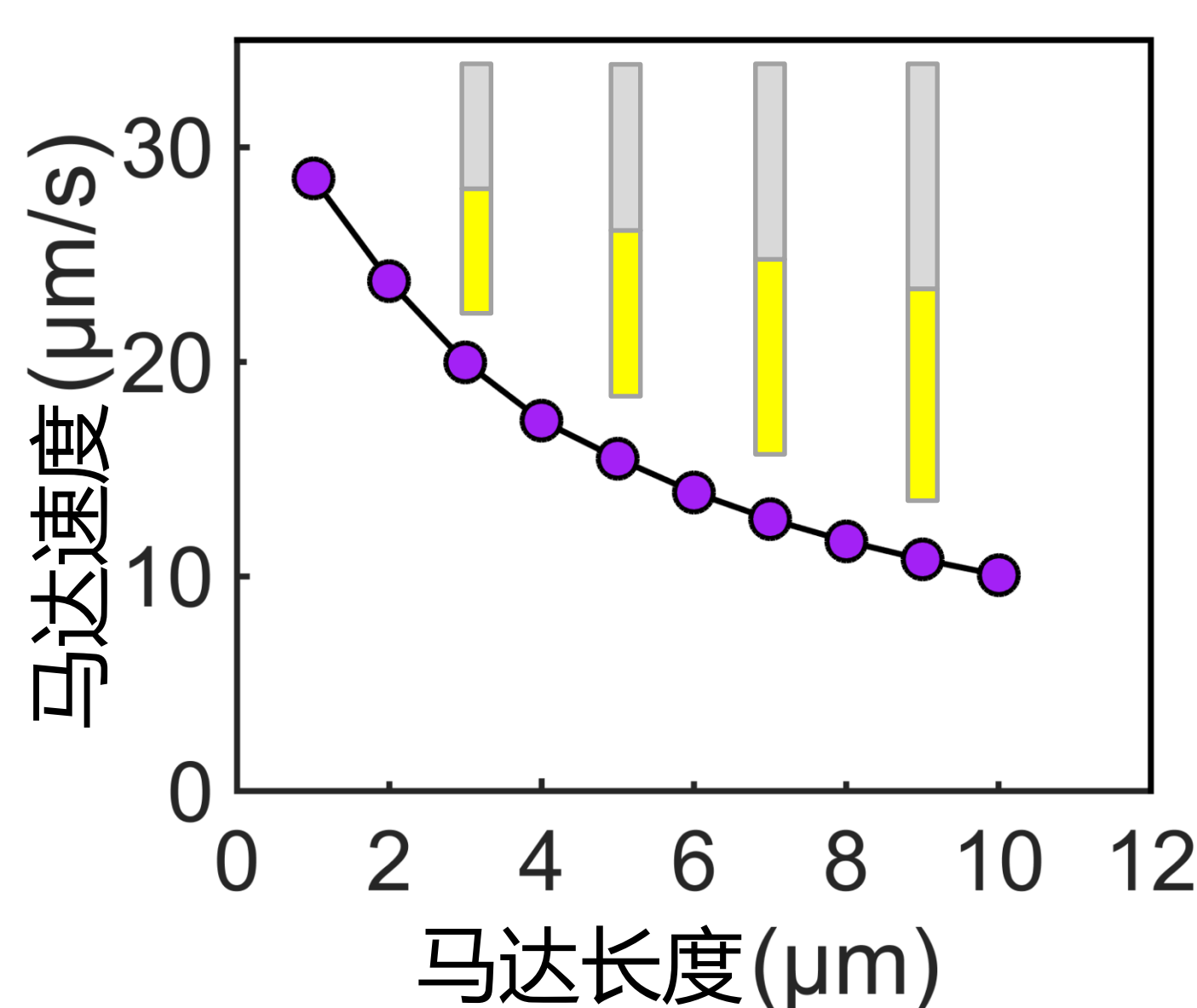


图 7. 单个马达的运动速度与长度的关系

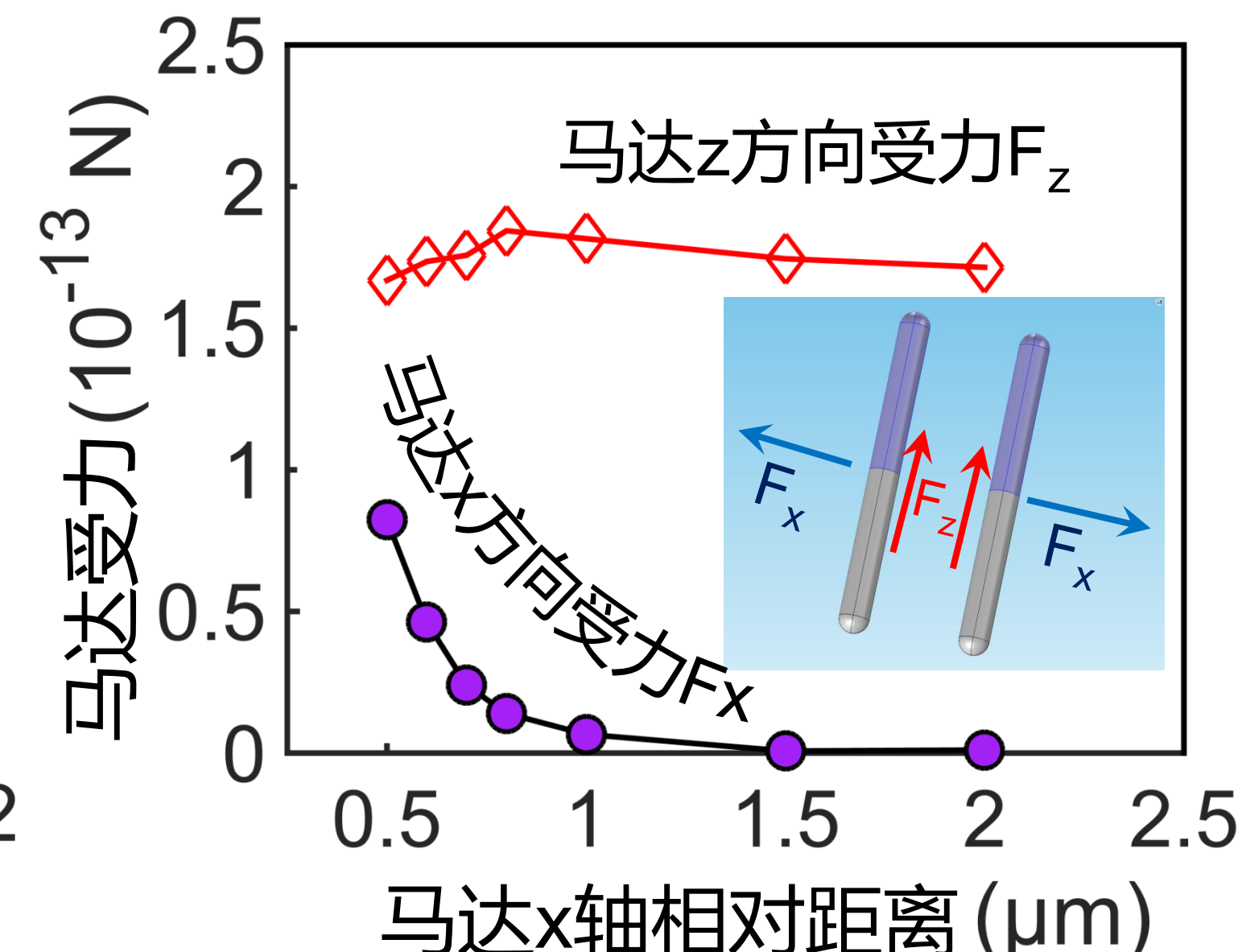


图 8. 两个马达同极相对时马达受力状况

结论：COMSOL Multiphysics® 模型有效模拟了双金属棒的自电泳特性，模拟显示马达类偶极子的电学特性对两个马达的组装有重要影响。

参考文献：

Wei Wang et al., Understanding the Efficiency of Autonomous Nano- and Microscale Motors, JACS, 135, 10557-10565 (2013).