arXiv:2304.05300v1 [cond-mat.soft] 11 Apr 2023

离子微型游泳器的受限推进

叶夫根尼·S·阿斯莫洛夫（Евгений С.Асмолов）[1,2] 和奥尔加·I·维诺格拉多娃（Ольга И. Виноградова）[1]

[1)] 弗鲁姆金物理化学与电化学研究所，俄罗斯科学院，俄罗斯莫斯科列宁大街*31*号，邮编*119071* [2)] 莫斯科国立大学罗蒙诺索夫力学研究所，俄罗斯莫斯科米丘林大街*1*号，邮编*119991*[a)]

电解质溶液中催化性 Janus 游动体的自推进是由其表面不均匀的离子释放所诱导的。在此，我们考虑实验上具有相关性的两种情况：颗粒仅释放一种类型的离子（I型），或以相等通量释放阳离子和阴离子（II型）。在静电扩散层较薄的极限下，我们推导出电场以及活性离子（即从表面释放的离子）和被动离子种类浓度的非线性外部解。我们表明，对于I型游动体，最大离子通量和推进速度均受到限制。这表明，可以通过调节活性离子的浓度来优化 Janus 游动体的自推进。

I. 引言

催化型 Janus 游动体在过去几十年中引起了广泛关注[1–3]，因为它们能够自主运动。其潜在应用包括药物递送、芯片实验室设备和纳米机器人[4]。离子型游动体的自推进机制基于粒子表面不均匀的离子释放。离子扩散会产生浓度梯度和电场[5]。

尽管催化反应种类繁多，离子通量的两种主要模型已获认可[3,6,7]（见图 1）：仅释放一种离子（I型），以及阳离子和阴离子以相同通量释放（II型）。第一种类型的典型例子包括双金属[8] 和金属—绝缘体[9]Janus 粒子。过氧化氢在催化粒子一侧分解，产生的质子释放到溶液中，随后被吸附到非催化一侧。第二种类型的离子通量可由盐在水中的溶解[10]，、酶促增强的有机化合物分解[11,12] 或光化学反应[13]产生。

浸没在电解质溶液中的带电粒子被一个电扩散层（电双层）包围，其中电荷不平衡较大，电场很强。催化游动粒子附近离子种类的浓度、电势和流体流动由Nernst-Planck方程、泊松方程和斯托克斯方程组控制。对于微米尺寸的游动粒子，电双层很薄，通常采用匹配渐近展开法对自推进[14–16]进行理论描述。电双层效应在宏观上表现为粒子表面的滑移速度。由于离子扩散和微小的电荷不平衡，外部区域（距粒子表面的距离与粒子尺寸同量级处）的电场并不为零，并且会影响滑移速度[17,18]。在假设场扰动较小且 Nernst-Planck方程可以线性化-

a)通讯作者：aes50@yandex.ru

线性化。

最近，我们提出了[18,20] 非线性分析解，用于求解体相电解质仅含活性离子（从游泳体表面释放）的情况下的能斯特–普朗克方程和泊松方程。然而，实验中的自推进是在同时含有活性离子和被动离子的介质中进行的。添加被动盐会降低游泳体的速度[1,19,21]。在本文中，我们将先前的解拓展至纳入体相被动离子的影响。我们得到了两种游泳体类型及所有离子种类在外部区域的分析解。对于I型游泳体，在粒子吸附侧附近会出现活性离子耗尽。这对游泳体的最大速度施加了限制。

本文结构如下。第 II 节建立控制方程。第 III 节给出在粒子尺寸量级距离处（外部区域）的方程解。第 IV 节展示浓度和粒子极限速度的数值结果，并在第 V 节进行总结。

II. 控制方程式

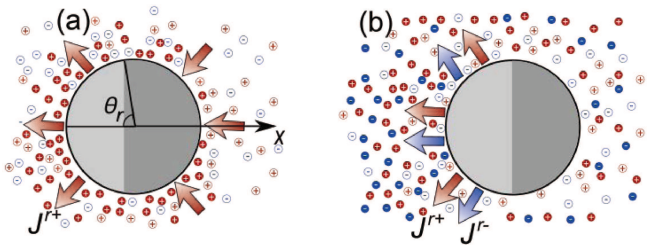

图 1.两种离子游动器。(a)I型仅在活性侧释放阳离子，并在另一侧吸附阳离子。(b) II型在活性侧同时释放阳离子和阴离子。

我们考虑一种 1:1 水溶液电解质，其体相离子浓度为 c_∞. 。其中包含浓度为 $C^{s\pm}$ (r)（以c_∞为标度）的被动盐离子，以及从粒子表面释放的离子

其浓度为 $C^{r\pm}$(r)。这里，上（下）号对应正（负）离子。假设佩克莱数很小，因此忽略对流通量，离子通量由无量纲 Nernst-Planck方程控制

$$\nabla \cdot \mathbf{J}^i = 0, \tag{1}$$

$$\mathbf{J}^i = -\nabla C^i \mp C^i \nabla \Phi. \tag{2}$$

其中 $i = r\pm$、 $s\pm$，电势 Φ 按k_BT/e进行标度化，其中 e 为基本正电荷， k_B为玻尔兹曼常数， T 为系统温度，坐标按粒子尺寸 a进行标度化

带相反电荷的离子不均匀分布会产生电场，该电场由电势的泊松方程所描述,

$$\Delta\Phi = \lambda^{-2}\frac{C^{s+} + C^{r+} - C^{s-} - C^{r-}}{2}, \tag{3}$$

其中，无量纲参数 $\lambda = (\kappa a)^{-1}$ 是德拜长度 $\kappa^{-1} = \left(8\pi e^2 c_\infty/\epsilon k_B T\right)^{-1/2}$ 与粒子尺寸之比， ϵ 是流体的介电常数。我们考虑具有薄电双层的较大颗粒，即 $\lambda \ll 1$，并使用在具有不同长度尺度的两个区域中进行匹配渐近展开的方法构造渐近解。外部区域的长度尺度是粒子尺寸 a ，而内部区域的长度尺度是德拜长度 κ^{-1}。

粒子表面的边界条件 S （定义为 $\mathbf{r} = \mathbf{r}_s$）为,

$$\mathbf{r} \in S: \ \mathbf{J}^{r+} \cdot \mathbf{n} = -\mathrm{Da} j^+(\mathbf{r}_s), \tag{4}$$

$$\mathbf{J}^{r-} \cdot \mathbf{n} = -\mathrm{Da} j^-(\mathbf{r}_s), \tag{5}$$

$$\mathbf{J}^{s\pm} \cdot \mathbf{n} = 0, \tag{6}$$

$$\Phi = \phi_s(\mathbf{r}_s), \tag{7}$$

$$\mathrm{Da} = \frac{Ja}{c_\infty D^{r+}}, \tag{8}$$

其中，Da 为达姆科勒数， J 是释放阳离子的有量纲通量的平均模。前两个条件定义了活性离子的表面通量，第三个条件则规定被动离子的通量为零。函数 $j^{\pm}$(r$_s$) 表征粒子表面无量纲的非均匀离子生成。根据定义 (8)，阳离子通量满足以下条件。

$$\frac{1}{S}\int_{S_p} \left|j^+\right| dS = 1. \tag{9}$$

I型游动器的净通量在稳态下应为零:

$$\int_{S_p} j^+ dS = 0. \tag{10}$$

边界条件（7）设定了表面电势 ϕ_s，并假定其为常数。

无穷远处的边界条件为,

$$r \to \infty: \ C^{s\pm} = C_\infty^{s\pm}, \ C^{r\pm} = C_\infty^{r\pm}, \ \Phi = 0. \tag{11}$$

体相电解质溶液是电中性的，因此

$$C_\infty^{s+} + C_\infty^{r+} = C_\infty^{s-} + C_\infty^{r-} = 1.$$

流体流动满足斯托克斯方程,

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0, \quad \Delta\mathbf{v} - \nabla p = \mathbf{f}. \tag{12}$$

这里，v和 p 是无量纲流体速度和压力（分别按 $\frac{\epsilon k_B^2 T^2}{4\pi\eta e^2 a}$和 $\frac{\epsilon k_B^2 T^2}{4\pi e^2 a^2}$进行标度）， η是黏度，$\mathbf{f} = -\Delta\Phi\nabla\Phi$ 是静电体力。

III. 理论

本节给出长度尺度为 a. 的外部区域中系统 (1)-(8) 的解。由于 $\lambda \ll 1$，式 (3) 在外部区域中的主阶解为

$$C^{s+} + C^{r+} = C^{s-} + C^{r-} = C(\mathbf{r}), \tag{13}$$

即电中性条件在 $O\left(\lambda^2\right)$. 下成立。然而，应考虑微小电荷 $C^{s+} + C^{r+} - C^{s-} - C^{r-} = O\left(\lambda^2\right)$，因为它会在外部区域中引起有限的电势差。将正、负离子的方程 (1) 相加，系统便变为

$$\Delta C + \nabla \cdot (C\nabla\Phi) = 0, \tag{14}$$

$$\Delta C - \nabla \cdot (C\nabla\Phi) = 0. \tag{15}$$

将方程 (14) 和 (15) 相加并相减，我们得到 [17,19,20]:

$$\Delta C = 0, \tag{16}$$

$$\nabla \cdot (C\nabla\Phi) = 0. \tag{17}$$

类似地，通过计算式 (4)、(5) 和 (6) 的和与差，我们推导出式 (16) 和 (17) 的边界条件:

$$\mathbf{r} \in S: \ \nabla C \cdot \mathbf{n} = -\frac{\mathrm{Da}}{2}\left(j^+ + j^-\right), \tag{18}$$

$$C\nabla\Phi \cdot \mathbf{n} = -\frac{\mathrm{Da}}{2}\left(j^+ - j^-\right). \tag{19}$$

求解拉普拉斯方程 (16) 可得净离子浓度 C。然而，电势所满足的非线性方程 (17) 通常不易求解。这里我们考虑表面通量之比为常数的情形:

$$j^-(\mathbf{r}_s)/j^+(\mathbf{r}_s) = \alpha = \mathrm{const}. \tag{20}$$

该条件对两种游动体类型均有效： α =0 对于 I 型（仅释放阳离子）以及 α =

D^{r+}/D^{r-} 对于II型。满足边界条件(11)和(19)的方程(17)的解为[20]

$$\Phi = -\beta \ln(C), \tag{21}$$

$$\beta = \frac{\alpha - 1}{\alpha + 1}. \tag{22}$$

上述无量纲参数受到限制，即$|\beta| \leq 1$.

为了求出浓度 C^i ，我们不需要求解方程组 (1)-(6)。被动离子$C^{s\pm}$ 的边界通量为零，因此它们的场满足玻尔兹曼分布，

$$C^{s\pm} = C_\infty^{s\pm} \exp(\mp\Phi) = C_\infty^{s\pm} C^{\pm\beta}. \tag{23}$$

一旦已知 C 和 $C^{s\pm}$ ，我们还可以根据公式 (13)、(23) 确定活性离子的分布：

$$C^{r+} = C - C^{s+} = C - C_\infty^{s+} C^\beta, \tag{24}$$

$$C^{r-} = C - C^{s-} = C - C_\infty^{s-} C^{-\beta}. \tag{25}$$

因此，我们得到了任意达姆科勒数 Da 和 $j^\pm(\mathbf{r}_s)$ 下外部区域中所有离子种类的浓度。这是我们工作的主要结果之一。然而，并非所有边界条件都能得到物理上合理的结果。限制来自这样一个条件：对于所有 r 和 i，浓度都不能为负。

$$C^i(\mathbf{r}) \geq 0. \tag{26}$$

这意味着，对于给定的 C_∞^i and$j^\pm(\mathbf{r}_s)$，Da受到物理约束。当整个粒子表面上的法向梯度 $\nabla C \cdot \mathbf{n}$均为负时，即释放离子的净通量$j^+(\mathbf{r}_s) + j^-(\mathbf{r}_s)$始终为正，如II型的情况，方程(16)的解满足条件 $C \geq 1$ ，对于任意r均成立，即净浓度超过体相值。这意味着释放离子的浓度（方程(24)、(25)）始终为正，因为 $C_\infty^{s\pm} \leq 1$. 。相反的情况发生在I型中：当离子在某些表面部分被吸附时，表面通量为负，而 $\nabla C \cdot \mathbf{n}$为正。此时，当Da足够大时，我们可能得到物理上不可能的解 $C \leq 0$。此外，即使在较小的Da下，活性离子也可能根据方程(24)、(25)得到负解（见第IV节）。因此，存在一个极限值$\mathrm{Da}_{\max}$ ，使得最小浓度 $C_\infty^{r\pm} = 0$.

内部区域中的解表示电双层[14,15]外缘处的滑移速度 $\mathbf{v}_s$

$$\mathbf{v}_s = \psi \nabla_s \Phi_s + 4 \nabla_s (\ln C_s) \ln\left[\cosh\left(\frac{\psi}{4}\right)\right], \tag{27}$$

$$\psi = \phi_s - \Phi_s, \quad \Phi_s = \Phi(\mathbf{r}_s), \quad C_s = C(\mathbf{r}_s).$$

其中， ∇_s 是沿粒子表面的梯度算子，式（27）中的第一项和第二项分别对应电渗流和扩散渗流，

ψ 是内部区域中的电势降， Φ_s 和 C_s 分别是内部区域与外部区域之间分界面处的外部电势和浓度。

自由运动的粒子沿 $x-$方向的速度可通过使用互易定理[22]确定。

$$v_p = -\frac{1}{6\pi} \int_{V_f} \mathbf{f} \cdot (\mathbf{v}_1 - \mathbf{e}_x)\, dV. \tag{28}$$

积分是在整个流体体积 V_f上进行的，$\mathbf{v}_1(\mathbf{r})$ 表示形状相同的粒子在静止流体中以速度 $\mathbf{e}_x$平移时的速度场。该速度可以表示为外部区域和内部区域[18],贡献的叠加。

$$v_p = v_{po} + v_{pi}, \tag{29}$$

$$v_{po} = -\frac{\beta^2}{6\pi} \int_{V_f} \frac{(\nabla C)^2 \nabla C \cdot (\mathbf{v}_1 - \mathbf{e}_x)}{C^3} dV, \tag{30}$$

$$v_{pi} = -\frac{1}{S} \int_{S_p} (\mathbf{v}_s \cdot \mathbf{e}_x)\, dS. \tag{31}$$

方程(27)-(31) 不包含每种离子种类的浓度，而只包含净值 C. 因此，速度与 C_∞^{s+} 无关，只要达姆科勒数 <达姆科勒数$_{\max}(C_\infty^{s+})$。

当达姆科勒¨数较小时，外部区域中的浓度场和电势场仅受到轻微扰动， $C = 1 + O$(达姆科勒数) $\Phi = O$(达姆科勒数) $\psi \simeq \phi_s$因为达姆科勒数 $\ll 1$. 外部区域对速度的贡献为 O(达姆科勒数^3) ，可以忽略，因为式（30）中的被积函数与 $(\nabla C)^3$成正比。于是，达姆科勒数阶的主要贡献来自内部区域（31），其滑移速度线性化为：

$$\mathbf{v}_s = \phi_s \nabla_s \Phi_s + 4 \nabla_s C_s \ln\left[\cosh\left(\frac{\phi_s}{4}\right)\right] = O(\mathrm{Da}). \tag{32}$$

下面我们将展示，这个线性解在 $\mathrm{Da} \sim 1$. 范围内能够很好地近似精确结果。

IV. 结果与讨论

我们考虑相对于 $x-$ 轴具有对称离子释放的球形粒子，因此 $j^\pm$ 仅取决于方位角 θ 。边界条件（18）改写为

$$r = 1: \ \partial_r C = -\frac{\mathrm{Da}}{2}\left(j^+ + j^-\right). \tag{33}$$

我们使用球坐标系，在边界条件（33）下求解方程（16），并用勒让德多项式 $P_n(\cos\theta)$ 表示解，

$$C = 1 + \frac{\mathrm{Da}}{2} \xi(r, \theta), \tag{34}$$

$$\xi = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{j_n}{n+1} P_n(\cos\theta)\, r^{-n-1}, \tag{35}$$

$$j_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \int_0^{\pi} \left(j^+ + j^-\right) P_n \sin\theta d\theta. \tag{36}$$

我们用分段常数函数对非均匀分布 $j^+(\theta)$ $j^-(\theta)$ 进行建模，即离子从表面释放，条件为 $\theta \le \theta_r$. 在球体的另一侧，$\theta_r < \theta \le \pi$，对于I型游动器，阳离子被吸附（见图1(a)）；对于II型，通量为零（见图1(b)）。于是，满足条件（9）和（10）的表面通量分布为

$$\begin{aligned} &0 \le \theta \le \theta_r: \quad j^+ = \tfrac{1}{2(1+\cos\theta_r)} < 0, \; j^- = 0, \\ &\theta_r < \theta \le \pi: \; j^+ = -\tfrac{1}{2(1-\cos\theta_r)} > 0, \; j^- = 0, \end{aligned} \tag{37}$$

对于第一种类型，以及

$$\begin{aligned} &0 \le \theta \le \theta_r: \; j^+ = j^-/\alpha = \tfrac{1}{(1+\cos\theta_r)} > 0, \\ &\theta_r < \theta \le \pi: \qquad\quad j^+ = j^- = 0, \end{aligned} \tag{38}$$

对于第二个。

我们在均匀网格上对方程（36）中的积分进行数值计算，以获得离子净浓度 $\xi(r,\theta)$，其中表面通量由式（37）和（38）给出，网格位于 θ ，步长为 $N_\theta = 200.$ 。为计算粒子速度，我们使用相同的 θ 网格计算式（31）中的表面积分，并使用 r 上的非均匀网格计算式（30）中的体积分（网格步长按 r^2 变化），该网格包含 $N_r = 100$ 个节点，截断半径为 $R_{out} = 100$。图 2（a）显示了 I型游动器（$\beta = -1$，实线和点划线）和 II型游动器（ $\beta = -0.5$、$\alpha = D^{r+}/D^{r-} = 1/3$，虚线和点线）的函数 $\xi_s(\theta) = \xi(1,\theta)$。这些函数随 θ 衰减，即在释放离子的催化区域，离子浓度始终较高。对于 II型，在整个表面上任意角度 θ_r 均有 $\xi_s > 0$ ，因此 $C \ge 1$ （见式（34））， 即净浓度始终高于体相值。相反，对于 I型， $\xi_s(\theta)$ 会改变符号，因此在吸附离子的后方球面一侧有 $C_s < 1$ 。由式（34）可得非物理值 $C_s < 0$ ，当 Da $>$ Da$_{\max} = -2/\xi_{\min}$ 时，其中 $\xi_{\min} = \xi(1,0) < 0$ 是函数 ξ 的绝对最小值，该最小值在后方球面的极点处取得。最小值 $\xi_{\min}$ 增大，而极限达姆科勒数随着 θ_r （较小的阳离子吸附区域）而减小。

当我们将所有离子种类的浓度也必须为正这一条件考虑在内时，达姆科勒数的极限值会变得更小。我们使用方程（23）—（25）计算C^i，并在图 2（b， c）中展示结果。对于 II型，当 $C \ge 1$、$C_\infty^{s+} \le 1$、 $|\beta| \le 1$时，方程（23）—（25）预测所有种类的浓度均为正（见图 2（c））， 因此达姆科勒数没有限制。被动离子（点划线和点线）的浓度相当低，而释放离子（实线和虚线）的浓度较高，并超过体相值 $C_\infty^{r+} = 0.7.$ 。对于 I型，图 2（b）中则可见另一种行为。释放离子的浓度律宾阳离子（实线）在 $\theta = \pi.$ 处接近于零。因此，图示出了对于给定的 C_∞^{r+}和 j^+ （θ），在$_{\max} \simeq 6$ 处达到的极限状态。更大的达姆科勒数是不可能的，因为式（25）给出 $C^{r+} < 0.$ 。我们注意到， $C_s^{r+}(\theta)$ （实线）沿球体表面显著减小，而被动阳离子的浓度$C_s^{s+}(\theta)$ （点划线）增加，因此净浓度的变化并不太大。因此，被动盐的存在降低了极限达姆科勒数。

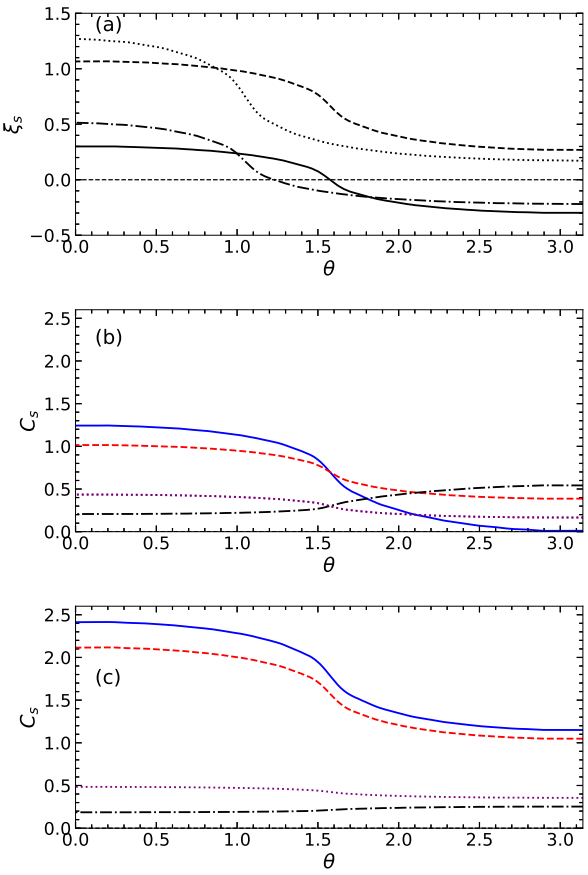

图2.(a) 粒子表面的归一化离子浓度随 θ的变化。实线和点划线分别对应于 $\theta_r = \pi/2$ 和 $\theta_r = \pi/3$ 的I型游动器，虚线和点线对应于 $\theta_r = \pi/2$ 和 $\theta_r = \pi/3$的II型游动器。使用 $\theta_r = \pi/2$、达姆科勒数 $= 3$ 和 $C_\infty^{s+} = 0.3$计算得到的(b) I型和(c)II型游动器中各离子种类的浓度。实线和虚线分别表示释放的阳离子和阴离子的浓度，点划线和点线表示盐阳离子和阴离子的浓度。

条件 $C^{r+} \ge 0$ 可改写为最小体相值或最大达姆科勒数的限制。带有 $\beta = -1$ 的方程（24）写作

$$C^{r+} = C - C_\infty^{s+}/C \ge 0. \tag{39}$$

然后利用（34）式可得

$$C_\infty^{s+} \le C_{\min}^2 = \left(1 + \frac{\mathrm{Da}}{2}\xi_{\min}\right)^2, \; C_\infty^{r+} \ge 1 - C_{\min}^2 > 0, \tag{40}$$

或者等价地,

$$\mathrm{Da} < \mathrm{Da}_{\max} = 2\frac{\sqrt{C_\infty^{s+}} - 1}{\xi_{\min}}. \tag{41}$$

最大达姆科勒数仅取决于盐浓度 C_∞^{s+}和角度 θ_r。图3（a, b）展示了 $\mathrm{Da}_{\max}$ 作为这两个参数的函数。它随 θ_r 和 C_∞^{s+}. 的增加而减小。当体相中不存在活性阳离子时（ $C_\infty^{r+} \to 0$），或阳离子吸附区域趋于零时（$\theta_r \to \pi$），活性阳离子无法在催化表面释放（$\mathrm{Da}_{\max} \to 0$ 和 $v_p \to 0$）。

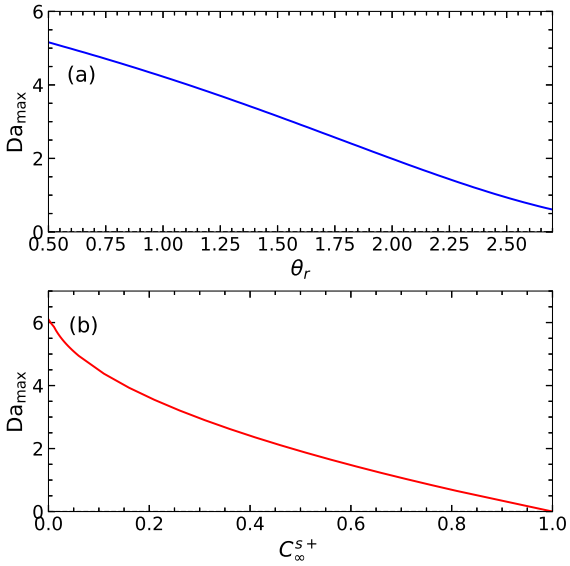

图3. 计算得到的极限达姆科勒数：（a）作为 θ_r 的函数，适用于 $C_\infty^{s+} = 0.3$；（b）作为 C_∞^{s+}的函数，适用于 $\theta_r = \pi/2$。

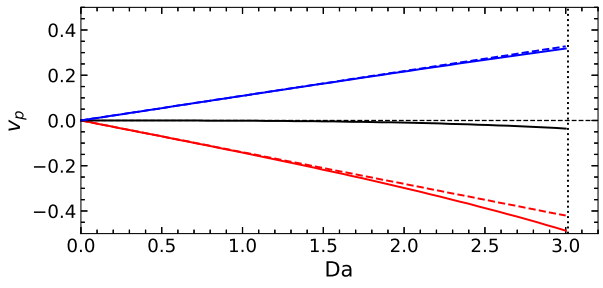

图4. 使用 $\phi_s = -1$、0、1（从上到下）计算得到的粒子速度，以及 $\theta_r = \pi/2$、 $C_\infty^{s+} = 0.3$ 作为Da的函数。实线表示总速度 $v_{pi} + v_{po}$，虚线对应线性解（32），点线表示极限达姆科勒数。

粒子速度 v_p 取决于三个无量纲参数：Da ϕ_s、 θ_r.。方程（27）—（29）不包含各离子种类的浓度，只包含其净值 C，因此当 Da $<$Da$_{\max}$ $(C_\infty^{s+}, \theta_r)$ 时，对于任意 C_∞^{s+}，速度都保持不变。我们此前评估了 v_p，对象为 II型游泳体[18]（另见[3]中的图4）。在这种情况下，Da 可以是任意值，而 v_p 随 Da $\to \infty$.呈对数增长。

图4展示了I型游动器的粒子速度随达姆科勒数的变化，适用于不同的 ϕ_s.。不带电粒子（$\phi_s = 0$）的速度非常小；在有限的 ϕ_s 和Da下，该速度接近线性解（32）的预测值。最大速度出现在Da $=$Da$_{\max}$ $(C_\infty^{s+}, \theta_r)$时，并且强烈依赖于 C_∞^{s+}。

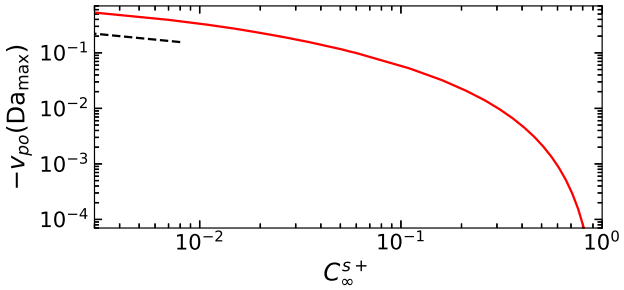

图 5. 外部区域对粒子速度的贡献 v_{po}，计算时取 Da $=$ Da$_{\max}$ 和 $\theta_r = \pi/2$ （实线）。虚线为指数为 -0.355 的幂函数。

我们进一步研究最大粒子速度 v_p(Da$_{\max}$) 对 C_∞^{s+}、θ_r 和 ϕ_s 的依赖关系，并分别评估外部区域和内部区域的贡献，即 v_{po} 和 v_{pi}。速度 v_{po} 在图 5 中表示为盐浓度的函数。对于任意 C_∞^{s+}，它都为负；在有限盐浓度下，其值极小，但其绝对值会随着 $C_\infty^{s+} \to 0$ 趋近于无穷而按 $(C_\infty^{s+})^{-0.355}$ 的规律无限增大（虚线）。原因在于这种情况下，后球极附近的净离子浓度 C(r) $= C^{r+} + C^{s+}$ 很小，因为 C^{r+} 和 C^{s+} 都趋于零，而梯度 ∇C 有限。因此，式 (30) 中的被积函数趋于无穷。

我们在图 6 中展示了使用方程 (31)、(27) 计算的内部区域 v_{pi} eval- uated 贡献，以及粒子的总速度 $v_p = v_{po} + v_{pi}$。在有限盐浓度 C_∞^{s+} 和任意 ϕ_s. 下，速度 v_{pi} 占主导，而 v_{po} 可以忽略。直到 $C_\infty^{s+} \simeq 0.4$，速度 v_{pi}近似随 C_∞^{r+}线性变化（见图 6(a)），但在较小的 C_∞^{s+} 下，它会无限增大，与 v_{po}类似。这两种贡献的奇异性来源相同：在极限 $C_\infty^{s+} \to 0$ 下，后极点附近的 $C \to 0$，达姆科勒数 $\to$达姆科勒数$_{\max}$。然而， v_{pi} 的奇异性比.....更弱。

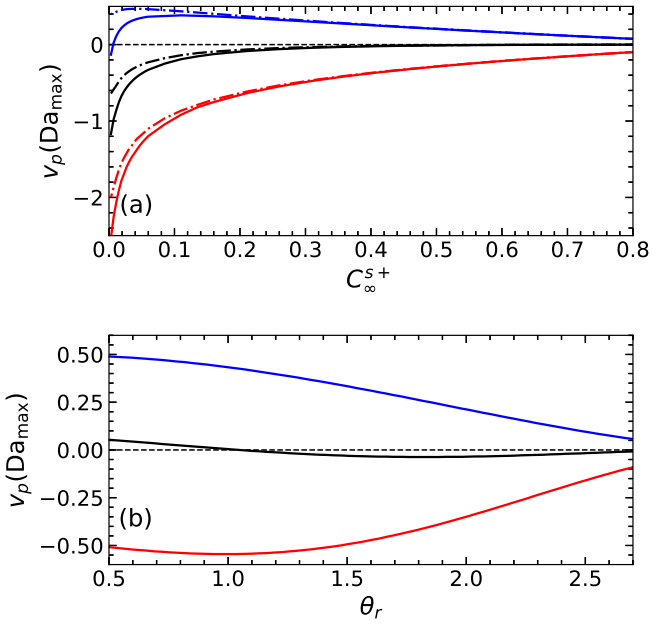

图 6. 极限速度（实线）分别作为 (a) C_∞^{r+}（对应 $\theta_r = \pi/2$ ）和 (b) θ_r（对应 $C_\infty^{s+} = 0.3$）的函数。点划线对应内部区域 v_{pi} 的贡献。

v_{po}. 原因在于，式（31）被积函数中滑移速度（式（27））的奇点弱于式（30）被积函数中针对 v_{po} 的奇点（分别正比于 C^{-1}和 C^{-3}）。当 C_∞^{s+}极小时，外部区域的贡献占主导，因此对于任意 ϕ_s. ，总速度均为负值。最大粒子速度随角度 θ_r 衰减，即随催化区域面积减小而衰减（见图 6(b)）。

V. 结论

我们建立了一种理论，用于描述在同时含有活性离子（由游动体表面释放）和被动盐离子的介质中，催化离子游动体的自推进。该理论涉及两类游动体：仅释放一种离子（I型），或以相同通量释放阳离子和阴离子（II型）。在薄电双层极限下，我们推导出了距离粒子尺度相当处（外部区域）所有离子种类浓度的解析解。对于I型游动体，最大达姆科勒数的约束¨源于粒子吸附侧附近活性离子的耗尽（其浓度必须为正）。达姆科勒数$_{\max}$ 随盐浓度 C_∞^{s+} 增加而降低，但随吸附区域面积增大而增加。当 Da $\to$Da$_{\max}$ 时，粒子推进速度会无限增大， $C_\infty^{s+} \to 0$.

致谢

本研究得到俄罗斯联邦科学与高等教育部的资助。

数据可用性

支持本研究发现的数据可在本文中获得。

参考文献

[1]J. L. Moran 和 J. D. Posner。泳动自推进。流体力学年度评论，49:511–540，2017。[2]K. K. Dey 和 A. Sen。化学驱动的分子与机器。美国化学会志，139(23):7666–7676，2017。[3]T. V. Nizkaya、E. S. Asmolov 和 O. I. Vinogradova。催化自推进的理论建模。胶体与界面科学当前观点，62:101637，2022。[4]M. Hu、X. Ge、X. Chen、W. Mao、X. Qian 和 W.-E. Yuan。微纳机器人：一种前景广阔的靶向药物递送系统。药剂学，12(7):665，2020。[5]R. Golestanian、T. B. Liverpool 和 A. Ajdari。反应产物的不对称分布驱动分子机器推进。物理评论快报，94(22):220801，2005。[6]W. Wang、X. Lv、J. L. Moran、S. Duan 和 C. Zhou。活性胶体实用指南：为软物质物理研究选择合成模型系统。软物质，16(16):3846–3868，2020。[7]Y. Peng、P. Xu、S. Duan、J. Liu、J. L. Moran 和 W. Wang。区分自泳胶体马达的通用规则。应用化学，134(12):e202116041，2022。[8]W. F. Paxton、K. C. Kistler、C. C. Olmeda、A. Sen、S. K. St. Angelo、Y. Cao、T. E. Mallouk、P. E. Lammert 和 V. H. Crespi。催化纳米马达：条纹纳米棒的自主运动。美国化学会志，126(41):13424–13431，2004。[9]J. R. Howse、R. A. L. Jones、A. J. Ryan、T. Gough、R. Vafabakhsh 和 R. Golestanian。自驱动胶体粒子：从定向推进到随机游走。物理评论快报，99(4):048102，2007。[10]J. J. McDermott、A. Kar、M. Daher、S. Klara、G. Wang、A. Sen 和 D. Velegol。碳酸钙微型泵产生的自生扩散渗透流。朗缪尔，28(44):15491–15497，2012。[11]K. K. Dey、X. Zhao、B. M. Tansi、W. J. M´endez-Ortiz、U. M. C´ordova-Figueroa、R. Golestanian 和 A. Sen。由酶催化驱动的微型马达。纳米快报，15 8315，2015 12 8311( ): – 。[12]T. Pati˜no、X. Arqu´e、R. Mestre、L. Palacios 和 S. S´anchez。酶驱动微型和纳米游动体的基本方面。化学研究述评，51(11):2662–2671，2018。[13]C. Zhou、H.P. Zhang、J. Tang 和 W. Wang。光化学驱动的氯化银雅努斯微型马达：用于理解离子自扩散泳的模型系统。朗缪尔，34 3295，2018 10 3289( ): – 。[14]D. C. Prieve、J. L. Anderson、J. P. Ebel 和 M. E. Lowell。由化学梯度产生的粒子运动。第二部分：电解质。*J. Fluid Mech.*，148:247–269，1984。[15]J. L. Anderson。界面力驱动的胶体输运。流体力学年度评论，21:61–99，1989。[16]R. Golestanian、T. B. Liverpool 和 A. Ajdari。设计泳动微型和纳米游动体。新物理学杂志，9 126，2007 5( ): 。[17]A. Nourhani、P. E. Lammert、V. H. Crespi 和 A. Borhan。球形电催化纳米马达的通用基于通量的分析。流体物理，27(1):012001，2015。

[18]E.S. Asmolov、T. V. Nizkaya 和 O.I.Vinogradova。释放离子的 Janus 粒子的自扩散泳。流体物理，34:032011，2022。[19]Y. Ibrahim、R. Golestanian 和T. B.Liverpool。Pt-绝缘体 Janus游动体自推进中的多种趋动机制。流体力学杂志，828:318–352，2017。

[20]E. S. Asmolov、T. V. Nizkaya 和 O. I. Vinogradova。催化微型游动器推进所依据的非线性偏微分方程的精确解。数学，10(9):1503，2022。[21]X. Arqu´e、X. Andr´es、R. Mestre、B. Ciraulo、J. Ortega Arroyo、R. Quidant、T. Pati˜no 和 S. S´anchez。离子种类影响脲酶驱动微型马达的自推进。研究，2020，2020。[22]M. Teubner。带电胶体粒子在电场中的运动。化学物理学杂志，76(11):5564–5573，1982。