

Research Paper

Investigation of Fluid around Nanoparticles via Stokes Method and Calculation of Hydrodynamic Radius of Gold Nanoparticles Synthesized by Reduction Method¹

Ehsan Koushki*² and Adel Zare Tazarghi³

Received: 2021.09.10

Revised: 2021.11.12

Accepted: 2022.01.10

Abstract

In this paper, we are going to study the fluid around nanoparticles and their hydrodynamic size, completely. First, we obtain the complete set of relations of the velocity equations and the velocity vector field around a spherical nanoparticle. For this, we use Stokes' analytical method with boundary conditions. Using the velocity vector field equations, we obtain the stress tensor components on the sphere surface and the fluid resistance force on the nanoparticle. In the next step, we consider the hydrodynamic diameter of the particle to be the diameter at which the fluid no longer moves effectively with the particle, and we obtain a description for this quantity from the equations of velocity. We will examine and find a significant correlation between these values. In the experimental part, gold nanoparticles with a diameter of 12 nm are synthesized and characterized by the Turkevich method. The diameter and hydrodynamic diameter of particles are measured using an electron microscope (TEM) and dynamic light scattering (DLS). By numerical fitting the Fortran 90 programming code and using experimental data, we were able to estimate the relative velocity of the particles relative to the fluid. These studies can be a useful method for the experimental and theoretical study of resistance force and dispersion of nanoparticles in colloidal media and have many applications in experimental applications of nano colloids such as nanoparticle drug delivery.

Keywords: *Velocity Vector Filed, Fluid, Au Nanoparticles, Hydrodynamic Diameter, Dynamic Light Scattering.*

¹ DOI: 10.22051/ijap.2022.37653.1236

² Assistant Professor, Department of Physics, Hakim Sabzevari University, Sabzevar, Razavi Khorasan, Iran. (Corresponding Author). Email: ehsan.koushki@hsu.ac.ir.

³ B. Sc. Graduated, Department of Physics, Hakim Sabzevari University, Sabzevar, Razavi Khorasan, Iran. Email: adelzare79@gmail.com.



بررسی سیال اطراف نانوذرات به روش استوکس و محاسبه شعاع هیدرودینامیکی نانو ذرات طلا سنتز شده به روش احیاء^۱

احسان کوشکی^{۲*} و عادل زارع طزرقی^۳

فصلنامه علمی فیزیک کاربردی ایران
دانشکده فیزیک شیمی، دانشگاه الزهرا
سال دوازدهم، پیاپی ۲۸، بهار ۱۴۰۱
صص ۴۷-۶۸

تاریخ دریافت: ۱۴۰۰/۰۶/۱۹
تاریخ بازنگری: ۱۴۰۰/۰۸/۲۱
تاریخ پذیرش: ۱۴۰۰/۱۰/۲۰

چکیده:

در این مقاله بررسی کاملی بر سیال اطراف نانوذرات و اندازه هیدرودینامیکی آن‌ها خواهیم داشت. در ابتدا روابط کامل معادلات سرعت و میدان برداری سرعت در اطراف یک نانو ذره کروی را به دست می‌آوریم. به این منظور از روش تحلیلی استوکس همراه با شرایط مرزی سود می‌بریم. به کمک معادلات بردار سرعت، به مؤلفه‌های تانسور تنش روی سطح کره و نیروی مقاومت سیال بر روی نانو ذره خواهیم رسید. در گام بعد قطر هیدرودینامیکی ذره را، قطری در نظر می‌گیریم که سیال دیگر به صورت تاثیرگذار همراه ذره حرکت نمی‌کند. همچنین، از معادلات سرعت به تعریفی برای این کمیت می‌رسیم و تاثیرات سرعت نسبی ذره به سیال و گرانیروی سیال بر این کمیت را بررسی و به ارتباطی معنادار بین این مقادیر خواهیم رسید. در بخش تجربی، نانو ذرات طلا با قطر ۱۲ نانومتر به روش ترکویچ سنتز و مشخصه‌یابی می‌شوند. اندازه حقیقی و اندازه هیدرودینامیکی ذرات به کمک میکروسکوپ گذار الکترونی (TEM) و پراکندگی نور دینامیکی (DLS) اندازه‌گیری می‌شوند. با برازش عددی در کد برنامه نویسی به زبان فرترن ۹۰ و استفاده از داده‌های تجربی، توانستیم سرعت نسبی ذرات نسبت به سیال را برآورد کنیم. این مطالعات می‌تواند روشی مفید برای مطالعه تجربی و تئوری مقاومت و پخش نانو ذرات در محیط‌های کلئیدی باشد و کاربردهای فراوانی در استفاده‌های تجربی از نانو کلئیدها مانند داروسازی به کمک نانوذرات داشته باشد.

واژگان کلیدی: میدان برداری سرعت، سیال، نانوذرات طلا، شعاع هیدرودینامیکی، پراکندگی نور دینامیک.

¹ DOI: 10.22051/ijap.2022.37653.1236

^۲ استادیار، گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه حکیم سبزواری، سبزوار، خراسان رضوی، ایران. (نویسنده مسئول). Email: ehsan.koushki@hsu.ac.ir

^۳ دانش‌آموخته کارشناسی، گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه حکیم سبزواری، سبزوار، خراسان رضوی، ایران. Email: adelzare79@gmail.com.



۱. مقدمه

فناوری نانو یکی از فعال‌ترین علوم کاربردی است. زمینه‌های پژوهش و روش‌های مدرن در برنامه‌های کاربردی نانوذرات در سال‌های گذشته به دلیل منحصر به فرد بودن و ویژگی‌های شیمیایی، فیزیکی و زیست‌شناسی آن‌ها در صنعت رو به افزایش است [۱-۲]. میکروشاره در علوم و صنایع مختلفی از جمله فیزیک، مهندسی مکانیک، پزشکی، زیست‌شناسی، شیمی، صنعت نفت و گاز و غیره به کار برده می‌شود. میکروشاره شاخه‌ای از دینامیک سیالات است که با روش‌های تولید و کنترل مایعات در دستگاه‌هایی که در ابعاد میکرومتر ساخته شده‌اند، سروکار دارد. در واقع رفتار مایعات در محدوده میکرو تا حدی متفاوت از ابعاد ماکرو است. عواملی همچون گرانش^۱ و کشش سطحی نقش مهمی در میکروسیالات ایفا می‌کنند. بسیاری از سیالات پیچیده که با آنها سروکار داریم روان برش^۲ هستند، به این معنی که با افزایش آهنگ برش، چسبندگی (وشکسانی) آن‌ها کاهش می‌یابد. اضافه و پخش کردن یک فاز جامد در یک سیال نیوتنی تشکیل یک سوسپانسیون را می‌دهد. اگر فاز جامد از ذرات زیر میکرون تشکیل شده باشد، سوسپانسیون کلوییدی نامیده می‌شود که در غلظت‌های پایین این سیالات معمولاً رفتار نیوتنی از خود نشان می‌دهند. برای اینکه بتوانیم حرکت یک نانوذره را در سیال بررسی کنیم باید از معادله ناویر-استوکس^۳ بهره ببریم [۳].

معادله ناویر-استوکس با استدلال‌های مختلف توسط بسیاری از افراد دوباره نویسی شده است. این معادله توانست دلیل حرکت آرام برخی از مایعات چسبناک را توضیح دهد. در حقیقت معادلات ناویر-استوکس، پس از آن‌که کلود لوئیس ناویر^۴ و جورج گابریل استوکس^۵ حرکت سیالات تراکم‌ناپذیر دارای گرانش را تشریح کردند، نام‌گذاری شد. این معادلات با به کار بردن قانون دوم نیوتن برای حرکت سیال به دست می‌آیند و در کنار این فرض که تنش در سیال شامل یک جمله گرانشی (مربوط به گرادیان سرعت) به اضافه یک جمله حاصل از فشار می‌باشد، قادر به بیان دینامیک سیال است [۴]. معادلات ناویر-استوکس نقش اساسی در علم دینامیک سیالات محاسباتی برای تحلیل عددی جریان سیال بازی می‌کند و کاربرد آن در توربو ماشین و علوم آیرودینامیک مشهود است. این معادلات یکی از پرکاربردترین معادلات هستند زیرا فیزیک بسیاری از پدیده‌های علمی و با سود اقتصادی را تشریح می‌کنند. از کاربردهای این معادلات می‌توان به مواردی چون

¹ Viscosity

² Shear thinning

³ Navier-Stokes equations

⁴ Claude-Louis Navier

⁵ George Gabriel Stokes



مدل سازی هوا، جریان‌های اقیانوسی، جریان جاری در یک لوله، جریان اطراف یک ایرفویل (بال)، حرکت ستارگان در کهکشان و غیره اشاره کرد. در حقیقت این معادله جواب‌های بسیار کارآمدی را به ما می‌دهد و می‌تواند ابزار بسیار خوبی در بیان حرکت نانوذرات در سیال نیوتنی باشد. استفاده از این روش برای شکل‌های دیگری از نانو ذرات طلا مانند بیضی‌گون و چندوجهی امکان‌پذیر است ولی بی‌گمان ملاحظات ریاضی و روابط فیزیکی تغییر خواهند نمود و بسیار دشوارتر خواهند شد. برای ذراتی که شبه کروی هستند می‌توان با تقریب خوبی از این مدل استفاده نمود. در این مقاله مدل ریاضی اثبات شده را برای نانو ذرات طلا به کار می‌بریم. دلیل این انتخاب آن است که سنتز نانو ذرات طلا ساده و کم هزینه است و کاربردهای بسیار زیادی در حوزه‌های مختلفی از صنعت و علم، همچون فوتوآکوستیک، دارو رسانی، تصویر برداری پزشکی، اپتیک غیرخطی و غیره، دارد. از همه مهم‌تر اینکه در حین سنتز این نانو ذرات، هاله‌ای از عامل‌های سطحی از جمله یون‌های سیترات اطراف ذره را پوشانده‌اند و دیگر نیازی به عامل‌دار کردن سطح آن‌ها جهت پراکنده‌سازی در کلئوئید نیست [۷-۵].

۲. تئوری

می‌خواهیم از روش استوکس استفاده و معادلات سرعت سیال، مؤلفه‌های تانسور تنش و سرانجام نیروی کشش وارد بر کره‌ای متحرک داخل یک سیال نیوتونی را بررسی کنیم. نیروی کاهنده‌ی استوکس^۱ تحت شرایطی به دست می‌آید که نیروهای داخل بین ذرات در مقایسه با نیروی گرانشی ناچیز باشند.

۲-۱ معادلات میدان سرعت سیال

فرض کنید ذره‌ای به جرم m و شعاع a داخل یک شاره حرکت می‌کند. سرعت ذره نسبت به شاره به اندازه‌ی کافی دور (∞) برابر v است. برای یافتن سرعت شاره (میدان سرعت شاره) اطراف ذره از معادله‌ی ناویر- استوکس^۲ استفاده می‌کنیم. تابع جریان استوکس^۳ را با ψ تعریف می‌کنیم [۹-۸]. با کاهش معادله‌ی دیفرانسیل برای ψ ، مشتقات ψ ، میدان سرعت را به ما می‌دهند. مانند این است که پتانسیل الکتریکی را به جای میدان الکتریکی به کار ببریم. با یافتن ψ و v می‌توان به فشار اطراف ذره رسید که استرس (تنش) اطراف کره را به ما می‌دهد. در ابتدا معادله ناویر- استوکس را با این

¹ Stokes drags

² Navier-Stokes

³ Stokes stream function



شرایط کاهش می‌دهیم. معادله‌ی ناویر-استوکس برای یک سیال تراکم‌پذیر را به صورت زیر داریم [۱۰-۱۱]:

$$\rho_D \left(\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + (\vec{v} \cdot \nabla) \vec{v} \right) = -\nabla p + \mu \nabla^2 \vec{v} + \vec{f} \quad (1)$$

که ρ_D چگالی سیال، \vec{v} سرعت، p فشار، μ گرانروی و \vec{f} هر نیروی خارجی است که به کره وارد شود. فرض می‌کنیم عدد رینولدز^۱ کم باشد؛ $Re = \frac{v l \rho}{\mu}$ ، که در آن l طول مشخصه از مرتبه‌ی a در ناحیه‌ی نزدیک به کره است. این یعنی نیروهای گرانروی غالب‌اند، پس جمله‌ی درونی $(\vec{v} \cdot \nabla) \vec{v}$ را در نظر نمی‌گیریم. ما به دنبال یک حل پایدار هستیم که در آن معادله‌ی ناویر-استوکس به صورت زیر کاهش یابد:

$$\nabla p = \mu \nabla^2 \vec{v} \quad (2)$$

چون در معادله (۱)، \vec{f} و سمت چپ معادله کاملاً صفر است (v ثابت و $\frac{\partial v}{\partial t} = 0$ است) و از طرفی طبق رابطه بک-کب داریم:

$$\nabla \times (\nabla \times \vec{v}) = \nabla(\nabla \cdot \vec{v}) - \nabla^2 \vec{v} \quad (3)$$

و نیز از طرفی مایع تراکم‌ناپذیر است، پس بنابر معادله‌ی پیوستگی:

$$\frac{\partial \rho_D}{\partial t} + \rho_D \nabla \cdot \vec{v} = 0$$

$\nabla \cdot \vec{v} = 0$ است و از معادله (۲) داریم:

$$\nabla p = -\mu \nabla \times (\nabla \times \vec{v}) = -\mu \nabla \times \vec{\Omega} \quad (4)$$

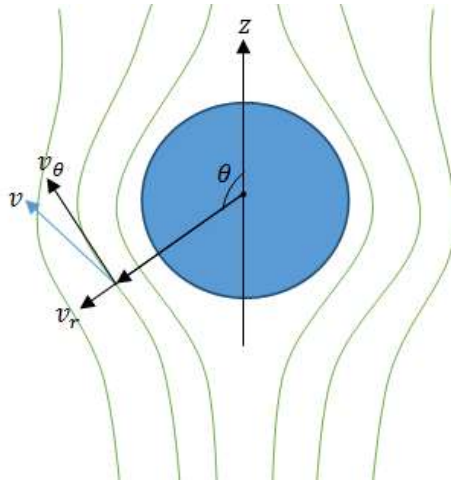
که $\vec{\Omega} = \nabla \times \vec{v}$ با نام گرداب میدان سرعت^۲ تعریف شده است. با توجه به شکل (۱)، تقارن کروی مسئله منجر به میدان سرعت با تقارن محوری می‌شود:

$$\vec{v} = v_r(r, \theta) \hat{e}_r + v_\theta(r, \theta) \hat{e}_\theta \quad (5)$$

¹ Reynolds number

² Vorticity of the velocity field





شکل ۱ میدان سرعت شاره و تقارن محوری آن حول سرعت اصلی.

اکنون به دنبال تابع جریان استوکس هستیم، دیورژانس $\vec{\nabla} \cdot \vec{v}$ در مختصات کروی برای هر میدان سرعت با تقارن محوری داده می‌شود:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{v} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 v_r) + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (v_\theta \sin \theta) \quad (6)$$

که همان تعریف دیورژانس بدون بخش سمتی φ در دستگاه کروی است. برای آن که در معادله $\vec{\nabla} \cdot \vec{v} = 0$ برآورده شود، باید داشته باشیم:

$$v_r = \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial \psi}{\partial \theta}, v_\theta = \frac{-1}{r \sin \theta} \frac{\partial \psi}{\partial r} \quad (7)$$

جملات اول و دوم معادله (۶) به ترتیب خواهند شد:

$$\begin{aligned} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 v_r) &= \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \times \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) = \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial r \partial \theta} \\ \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (v_\theta \sin \theta) &= \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \times \frac{-1}{r \sin \theta} \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) = \frac{-1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial r \partial \theta} \end{aligned}$$

جمع دو جمله بالا برابر صفر است، از این جا می‌توان نتیجه گرفت که میدان سرعت تنها با تابع جریان $\psi(r, \theta)$ معرفی می‌شود. به منظور یافتن تابع جریان از معادله‌ی کاهش یافته ناویر-استوکس (معادله‌ی ۴)، Ω را می‌یابیم:

$$\vec{\Omega} = \vec{V} \times \vec{v} = \Omega_r \hat{e}_r + \Omega_\theta \hat{e}_\theta + \Omega_\varphi \hat{e}_\varphi \quad (۸)$$

حال از آنجا که \vec{v} تقارن محوری دارد (سرعت باید محوری باشد)، Ω فقط مؤلفه φ دارد:

$$\begin{aligned} \Omega = \vec{V} \times \vec{v} &= \frac{1}{r^2 \sin\theta} \begin{vmatrix} \hat{e}_r & r\hat{e}_\theta & r\sin\theta\hat{e}_\varphi \\ \frac{\partial}{\partial r} & \frac{\partial}{\partial \theta} & \frac{\partial}{\partial \varphi} \\ v_r & rv_\theta & r\sin\theta v_\varphi = 0 \end{vmatrix} \\ &= \frac{1}{r^2 \sin\theta} \left[r\hat{e}_\theta \left(\frac{\partial}{\partial \varphi} v_r - \frac{\partial}{\partial r} (0) \right) \right. \\ &\quad \left. + r\sin\theta\hat{e}_\varphi \left(\frac{-\partial}{\partial \theta} v_r + \frac{\partial}{\partial r} (rv_\theta) \right) \right. \\ &\quad \left. + \hat{e}_r \left(\frac{\partial}{\partial \theta} (0) - \frac{\partial}{\partial \varphi} (rv_\theta) \right) \right] \\ &= \frac{r\sin\theta}{r^2 \sin\theta} \hat{e}_\varphi \left(+ \frac{\partial(rv_\theta)}{\partial r} - \frac{\partial(v_r)}{\partial \theta} \right) \\ &= \hat{e}_\varphi \frac{1}{r^2 \sin\theta} \times r\sin\theta \times \left(-\frac{\partial v_r}{\partial \theta} + \frac{\partial}{\partial r} (rv_\theta) \right) \\ &= \hat{e}_\varphi \frac{1}{r} \left(\frac{\partial(rv_\theta)}{\partial r} - \frac{\partial v_r}{\partial \theta} \right) \end{aligned}$$

در نتیجه Ω فقط مؤلفه \hat{e}_φ دارد:

$$\Omega_\varphi = \frac{1}{r} \left(\frac{\partial(rv_\theta)}{\partial r} - \frac{\partial v_r}{\partial \theta} \right) \quad (۹)$$

در این رابطه از معادله (۷)، جایگذاری می‌کنیم:

$$\begin{aligned} \Omega_\varphi &= \frac{1}{r} \left(\frac{\partial}{\partial r} \left(-\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{1}{r^2 \sin\theta} \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) \right) = \frac{-1}{r\sin\theta} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} \right) - \\ \frac{\sin\theta}{r^3 \sin\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) &= \frac{-1}{r\sin\theta} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} + \frac{\sin\theta}{r^2} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) \right) = \frac{-1}{r\sin\theta} E^2 \psi \quad (۱۰) \end{aligned}$$

که در آن عملگر دیفرانسیلی E^2 را تعریف کرده‌ایم:

$$E^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{\sin\theta}{r^2} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \quad (۱۱)$$

آن را در معادله (۴) قرار می‌دهیم:



$$\vec{\nabla}p = -\mu\vec{\nabla} \times \vec{\Omega} = -\mu \times \frac{1}{r^2 \sin\theta} \begin{vmatrix} \hat{e}_r & r\hat{e}_\theta & r\sin\theta\hat{e}_\varphi \\ \frac{\partial}{\partial r} & \frac{\partial}{\partial \theta} & \frac{\partial}{\partial \varphi} \\ \Omega_r & r\Omega_\theta & r\sin\theta\Omega_\varphi \end{vmatrix}$$

با استفاده از معادله (۱۰) می توان نوشت:

$$\begin{aligned} \vec{\nabla}p &= \frac{-\mu}{r^2 \sin\theta} \left(\hat{e}_r \frac{\partial}{\partial \theta} (r\sin\theta\Omega_\varphi) - r\hat{e}_\theta \frac{\partial}{\partial r} (r\sin\theta\Omega_\varphi) \right) \\ &= \frac{-\mu}{r^2 \sin\theta} \left(\hat{e}_r \frac{\partial}{\partial \theta} \left(r\sin\theta \times \frac{-1}{r\sin\theta} E^2\psi \right) \right. \\ &\quad \left. - r\hat{e}_\theta \frac{\partial}{\partial r} \left(r\sin\theta \times \frac{-1}{r\sin\theta} E^2\psi \right) \right) \\ &= \frac{\mu}{r^2 \sin\theta} \times \left(\hat{e}_r \frac{\partial}{\partial \theta} (E^2\psi) + \hat{e}_\theta r \frac{\partial}{\partial r} (E^2\psi) \right) \end{aligned}$$

که نتیجه می دهد:

$$\vec{\nabla}p = \frac{\mu}{r^2 \sin\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (E^2\psi) \hat{e}_r - \frac{\mu}{r\sin\theta} \frac{\partial}{\partial r} (E^2\psi) \hat{e}_\theta \quad (12)$$

از طرفی طبق تعریف $\vec{\nabla}$ داریم:

$$\vec{\nabla}p = \hat{e}_r \frac{\partial p}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial p}{\partial \theta} \hat{e}_\theta + \frac{1}{r\sin\theta} \frac{\partial p}{\partial \varphi} \hat{e}_\varphi \quad (13)$$

با مساوی قرار دادن مؤلفه های معادلات (۱۲) و (۱۳) داریم:

$$\frac{\partial p}{\partial r} = \frac{\mu}{r^2 \sin\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (E^2\psi) \quad , \quad \frac{\partial p}{\partial \theta} = \frac{-\mu}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial r} (E^2\psi), \quad \frac{\partial p}{\partial \varphi} = 0 \quad (14)$$

مشتق های عرضی این معادلات منجر می شود به:

$$\frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{\partial p}{\partial r} \right) = \frac{\mu}{r^2} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (E^2\psi) \right) \quad , \quad \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{\partial p}{\partial \theta} \right) = \frac{-\mu}{\sin\theta} \frac{\partial^2}{\partial r^2} (E^2\psi) \quad (15)$$

از آن جا که این دو معادله باید برابر باشند، داریم:

$$\frac{\mu}{\sin\theta} \frac{\partial^2}{\partial r^2} (E^2\psi) + \frac{\mu}{r^2} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (E^2\psi) \right) = 0$$



$$\frac{\partial^2}{\partial r^2}(E^2\psi) + \frac{\sin\theta}{r^2} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta}(E^2\psi) \right) = 0$$

و در نتیجه:

$$E^2(E^2\psi) = 0 \quad (۱۶)$$

از معادله (۱۱) می توان تابع جریان استوکس را نوشت:

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{\sin\theta}{r^2} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \right) \right]^2 \psi = 0 \quad (۱۷)$$

شرایط مرزی را اعمال می کنیم که به قرار زیرند:

۱- شرط غیرلغزشی روی سطح کره: $v(a, \theta) = 0$.

۲- شار یکنواخت است و سرعت شار در نقاط دور از کره برابر v است.

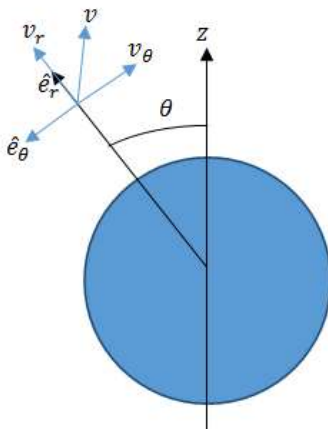
شرط اول را با کمک معادله ی (۷) چنین می نویسیم:

$$\frac{\partial\psi}{\partial r} \Big|_{r=a} = 0, \quad \frac{\partial\psi}{\partial\theta} \Big|_{r=a} = 0 \quad (۱۸)$$

شرط دوم این است که اگر جهت حرکت سیال در نقاط دور را موازی محور Z بگیریم ($\theta=0$),

داریم (شکل ۲):

$$\lim_{r \rightarrow \infty} v_r = v \cos\theta, \quad \lim_{r \rightarrow \infty} v_\theta = -v \sin\theta \quad (۱۹)$$



شکل ۲ مؤلفه های سرعت شار اطراف کره در مختصات قطبی - کره ی.

این شرایط مرزی نیاز دارند تا به عنوان نیاز و لزومی بر ψ باز نویسی شوند تا v . از (۷) داریم:



$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial \psi}{\partial \theta} = v \cos \theta \\ \frac{-1}{r \sin \theta} \frac{\partial \psi}{\partial r} = -v \sin \theta \end{array} \right. \rightarrow \left\{ \begin{array}{l} d\psi = r^2 v \int \sin \theta \cos \theta d\theta \\ d\psi = v \sin^2 \theta \int r dr \end{array} \right. \quad (20)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \psi = \frac{1}{2} v r^2 \sin^2 \theta + F(r) \\ \psi = \frac{1}{2} v r^2 \sin^2 \theta + F(\theta) \end{array} \right.$$

که در آن $F(r)$ به θ و $F(\theta)$ به r وابسته

نیست، پس باید $F(r)=F(\theta)=0$ باشد و شرایط مرزی باید بازنویسی شود:

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \psi = \frac{1}{2} v r^2 \sin^2 \theta \quad (21)$$

پس حل ψ به صورت کلی زیر است:

$$\psi = f(r) \sin^2 \theta \quad (22)$$

عملگر E^2 را بر ψ اثر می‌دهیم:

$$\begin{aligned} E^2 \psi(r, \theta) &= E^2(f(r) \sin^2 \theta) \\ &= \frac{\partial^2}{\partial r^2} (f(r) \sin^2 \theta) + \frac{\sin \theta}{r^2} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (f(r) \sin^2 \theta) \right) \\ &= \frac{d^2 f(r)}{dr^2} \sin^2 \theta - \frac{2f(r) \sin^2 \theta}{r^2} \\ &= \left(\frac{d^2}{dr^2} - \frac{2}{r^2} \right) f(r) \sin^2 \theta = g(r) \sin^2 \theta \end{aligned}$$

که در آن فرمول $g(r) = \left(\frac{d^2}{dr^2} - \frac{2}{r^2} \right) f(r)$ گرفته شده است و حال:

$$E^2(E^2(\psi)) = E^2(E^2(f(r) \sin^2 \theta)) = E^2(g(r) \sin^2 \theta)$$

همچون اثبات قبل پیش می‌رویم و تنها به جای f از g استفاده می‌کنیم:

$$E^2(E^2(\psi)) = \left(\frac{d^2}{dr^2} - \frac{2}{r^2} \right) g(r) \sin^2 \theta = \left(\frac{d^2}{dr^2} - \frac{2}{r^2} \right) f(r) \sin^2 \theta \quad (23)$$

چون $E^2(E^2 \psi) = 0$ است (از معادله ۱۶) و $\sin^2 \theta$ می‌تواند غیر صفر باشد پس:

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} - \frac{2}{r^2} \right)^2 f(r) = 0 \quad (24)$$

اگر $f(r) = r^\alpha$ را به عنوان یک جواب عمومی در نظر بگیریم، خواهیم داشت:

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} - \frac{2}{r^2}\right)^2 r^\alpha = 0$$

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} - \frac{2}{r^2}\right)\left(\frac{d^2}{dr^2} - \frac{2}{r^2}\right)r^\alpha = 0$$

$$\rightarrow \left(\frac{d^2}{dr^2} - \frac{2}{r^2}\right)(\alpha(\alpha - 1)r^{\alpha-1} - 2r^{\alpha-2}) = 0$$

که از آن نتیجه می‌شود:

$$(\alpha(\alpha - 1) - 2)((\alpha - 2)(\alpha - 3) - 2) = 0 \quad (25)$$

در نتیجه:

$$\alpha(\alpha - 1) - 2 = 0 \rightarrow \alpha = -1, 2$$

$$(\alpha - 2)(\alpha - 3) - 2 = 0 \rightarrow \alpha = 1, 4$$

پس $\alpha = -1, 1, 2, 4$ است و می‌توان جواب را به صورت زیر نوشت:

$$\psi = (Ar^{-1} + Br + Cr^2 + Dr^4)\sin^2\theta \quad (26)$$

چهار شرط مرزی باید اعمال شوند؛ شرایط ۱۸ و ۲۱. از (۲۱) داریم:

$$C = \frac{1}{2}u, \quad D = 0$$

و از شرط (۱۸) داریم:

$$\left.\frac{\partial\psi}{\partial r}\right|_{r=a} = 0 \rightarrow \frac{-A}{a^2} + B + 2\left(\frac{1}{2}v\right)a = 0 \rightarrow \frac{-A}{a^2} + B + va = 0 \quad (27)$$

$$\left.\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\right|_{r=a} = 0 \rightarrow \frac{A}{a} + Ba + \frac{1}{2}va^2 = 0 \quad (28)$$

$$\frac{-A}{a^2} + B = -va \rightarrow B = -va + \frac{A}{a^2}$$

$$\frac{A}{a} + Ba = -\frac{1}{2}va^2 \rightarrow \frac{A}{a} - va^2 + \frac{A}{a} = -\frac{1}{2}va^2 \rightarrow \frac{2A}{a} = \frac{1}{2}va^2$$

$$\rightarrow A = \frac{1}{4}va^3 \rightarrow B = -va + \frac{1}{4}\frac{va^3}{a^2} = -va + \frac{1}{4}va = \frac{-3}{4}va, B$$

$$= \frac{-3}{4}va$$

$$\psi = \left(\frac{1}{4}\frac{va^3}{r} - \frac{3}{4}var + \frac{1}{2}vr^2\right)\sin^2\theta$$

$$\psi = v\left(2r^2 - 3ar + \frac{a^3}{r}\right)\sin^2\theta \quad (29)$$

حال از معادله (۷) می‌توان نوشت:



$$v_r = \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial \psi}{\partial \theta} = \frac{1}{r^2 \sin \theta} \times \frac{1}{4} v \left(2r^2 - 3ar + \frac{a^3}{r} \right) \times 2 \sin \theta \cos \theta$$

$$= v \cos \theta \left(1 - \frac{3a}{2r} + \frac{a^3}{2r^3} \right)$$

و نیز:

$$v_\theta = \frac{-1}{r \sin \theta} \frac{\partial \psi}{\partial r} = \frac{-1}{r \sin \theta} \times \frac{1}{4} v \left(4r - 3a + \frac{a^3}{r^2} \right) \sin^2 \theta$$

$$= -v \sin \theta \left(1 - \frac{3a}{4r} - \frac{a^3}{4r^3} \right)$$

$$\vec{v} = v \cos \theta \left(1 - \frac{3a}{2r} + \frac{a^3}{2r^3} \right) \hat{e}_r - v \sin \theta \left(1 - \frac{3a}{4r} - \frac{a^3}{4r^3} \right) \hat{e}_\theta \quad (30)$$

رابطه (۳۰) معادله بردار سرعت سیال در هر نقطه از فضای اطراف ذره است. به کمک این معادله می توان میدان سرعت سیال را شبیه سازی نمود.

۲-۲ محاسبه تانسور تنش و نیروی کاهنده

از معادلات (۱۴) استفاده می کنیم و به p و در نهایت به F می رسم. باید $E^2 \psi$ را به دست آورید.

$$E^2 \psi = \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{\sin \theta}{r^2} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \right) \left(\frac{v}{4} \left(2r^2 - 3ar + \frac{a^3}{r} \right) \right) \sin^2 \theta$$

$$= \frac{v}{4} \left(4 - 0 + \frac{2a^3}{r^3} \right) \sin^2 \theta$$

$$+ \frac{\sin \theta}{r^2} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{1}{\sin \theta} \times 2 \sin \theta \cos \theta \right)$$

$$\times \frac{v}{4} \left(2r^2 - 3ar + \frac{a^3}{r} \right)$$

$$= \left(v \sin^2 \theta + \frac{va^3}{2r^3} \sin^2 \theta \right)$$

$$+ \left(\frac{-v \sin^2 \theta}{2r^2} \times 2r^2 + \frac{v \sin^2 \theta}{2r^2} \times 3ar - \frac{v \sin^2 \theta}{2r^2} \times \frac{a^3}{r} \right)$$

$$= \frac{3av}{2r} \sin^2 \theta$$

پس می توان نوشت:

$$E^2\psi = \frac{3av}{2r} \sin^2\theta \quad (31)$$

اگر \vec{v} میدان سرعت را $\vec{v} = v_x\hat{i} + v_y\hat{j} + v_z\hat{k}$ گرفته و از آن گرادیان بگیریم، یک تانسور می دهد:

$$\begin{aligned} \vec{\nabla} \cdot \vec{v} &= \left(\hat{r} \frac{\partial \vec{v}}{\partial r} + \hat{\theta} \frac{1}{r} \frac{\partial \vec{v}}{\partial \theta} + \hat{\phi} \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial \vec{v}}{\partial \phi} \right) \\ &= \left(\hat{r} \frac{\partial}{\partial r} (v_r \hat{r} + v_\theta \hat{\theta} + v_\phi \hat{\phi}) + \hat{\theta} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} (v_r \hat{r} + v_\theta \hat{\theta} + v_\phi \hat{\phi}) \right. \\ &\quad \left. + \hat{\phi} \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} (v_r \hat{r} + v_\theta \hat{\theta} + v_\phi \hat{\phi}) \right) \\ &= \hat{r} \left(\frac{\partial v_r}{\partial r} \hat{r} + v_r \frac{\partial \hat{r}}{\partial r} \right) + \hat{r} \left(\frac{\partial v_\theta}{\partial r} \hat{\theta} + v_\theta \frac{\partial \hat{\theta}}{\partial r} \right) + \hat{r} \left(\frac{\partial v_\phi}{\partial r} \hat{\phi} + v_\phi \frac{\partial \hat{\phi}}{\partial r} \right) \\ &\quad + \hat{\theta} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial v_r}{\partial \theta} \hat{r} + \frac{1}{r} v_r \frac{\partial \hat{r}}{\partial \theta} \right) + \hat{\theta} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial v_\theta}{\partial \theta} \hat{\theta} + \frac{1}{r} v_\theta \frac{\partial \hat{\theta}}{\partial \theta} \right) \\ &\quad + \hat{\theta} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial v_\phi}{\partial \theta} \hat{\phi} + \frac{1}{r} v_\phi \frac{\partial \hat{\phi}}{\partial \theta} \right) \\ &\quad + \hat{\phi} \left(\frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial v_r}{\partial \phi} \hat{r} + \frac{1}{r \sin \theta} v_r \frac{\partial \hat{r}}{\partial \phi} \right) \\ &\quad + \hat{\phi} \left(\frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial v_\theta}{\partial \phi} \hat{\theta} + \frac{1}{r \sin \theta} v_\theta \frac{\partial \hat{\theta}}{\partial \phi} \right) \\ &\quad + \hat{\phi} \left(\frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial v_\phi}{\partial \phi} \hat{\phi} + \frac{1}{r \sin \theta} v_\phi \frac{\partial \hat{\phi}}{\partial \phi} \right) \end{aligned}$$

اگر مشتقات بردارهای یکه در مختصات کروی را از جدول ۱ جایگذاری و ساده کنیم خواهیم داشت:

جدول ۱ مشتقات بردارهای یکه در مختصات قطبی-کروی.

	\hat{r}	$\hat{\theta}$	$\hat{\phi}$
$\frac{\partial}{\partial r}$.	.	.
$\frac{\partial}{\partial \theta}$	$\hat{\theta}$	$-\hat{r}$	0
$\frac{\partial}{\partial \phi}$	$\hat{\phi} \sin \theta$	$\hat{\phi} \cos \theta$	$-(\hat{r} \sin \theta + \hat{\theta} \cos \theta)$



$$\begin{aligned} \vec{\nabla} \cdot \vec{v} &= r\hat{r} \left(\frac{\partial v_r}{\partial r} \right) + r\hat{\theta} \left(\frac{\partial v_\theta}{\partial r} \right) + r\hat{\phi} \left(\frac{\partial v_\phi}{\partial r} \right) + \hat{\theta}\hat{r} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial v_r}{\partial \theta} \right) + \hat{\theta}\hat{\theta} \left(\frac{1}{r} v_r \right) \\ &+ \hat{\theta}\hat{\theta} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial v_\theta}{\partial \theta} \right) + \hat{\theta}\hat{r} \left(-\frac{1}{r} v_\theta \right) + \hat{\theta}\hat{\phi} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial v_\phi}{\partial \theta} \right) \\ &+ \hat{\phi}\hat{r} \left(\frac{1}{r\sin\theta} \frac{\partial v_r}{\partial \phi} \right) + \frac{1}{r} v_r \hat{\phi}\hat{\phi} + \frac{1}{r\sin\theta} \frac{\partial v_\theta}{\partial \phi} \hat{\phi}\hat{\theta} \\ &+ \frac{1}{r\sin\theta} \frac{\partial v_\phi}{\partial \phi} \hat{\phi}\hat{\phi} + \frac{1}{r\sin\theta} v_\phi (-\sin\theta) \hat{\phi}\hat{r} \\ &+ \frac{1}{r\sin\theta} v_\phi (-\cos\theta) \hat{\phi}\hat{\theta} \\ \vec{\nabla} \cdot \vec{v} &= \begin{vmatrix} \frac{\partial v_r}{\partial r} & \frac{\partial v_\theta}{\partial r} & \frac{\partial v_\phi}{\partial r} \\ \frac{1}{r} \frac{\partial v_r}{\partial \theta} - \frac{1}{r} v_\theta & \frac{1}{r} \frac{\partial v_\phi}{\partial \theta} + \frac{v_r}{r} & \frac{1}{r} \frac{\partial v_\phi}{\partial \theta} \\ \frac{1}{r\sin\theta} \frac{\partial v_r}{\partial \phi} - \frac{v_\phi}{r} & \frac{1}{r\sin\theta} \frac{\partial v_\theta}{\partial \phi} - \frac{v_\phi}{r} \cot\theta & \frac{v_r}{r} + \frac{1}{r\sin\theta} \frac{\partial v_\phi}{\partial \phi} \end{vmatrix} \end{aligned} \quad (32)$$

مؤلفه‌های تانسور تنش ناشی از دیورژانس سرعت از رابطه زیر بدست می‌آیند [۱۴-۱۲]:

$$\vec{\tau} = \mu \vec{\nabla} \cdot \vec{v} \quad (33)$$

که می‌توان از آن نتیجه گرفت:

$$\tau_{rr} = 2\mu \frac{\partial v_r}{\partial r} \quad (34)$$

$$\tau_{r\theta} = \mu \left[\frac{\partial v_\theta}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial v_r}{\partial \theta} - \frac{1}{r} v_\theta \right] = \mu \left[r \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{v_\theta}{r} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial v_r}{\partial \theta} \right] \quad (35)$$

از رابطه (۱۴) می‌توان فشار در هر نقطه را به دست آورد:

$$\begin{aligned} p_\infty - p(r) &= \int_r^\infty \frac{\partial p}{\partial r} dr = \int_r^\infty \left(\frac{\mu}{r^2 \sin\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (E^2 \psi) \right) dr = \\ &= \int_r^\infty \left(\frac{\mu}{r^2 \sin\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{3av}{2r} \sin^2\theta \right) \right) dr \\ &= \frac{\mu}{\sin\theta} \int_r^\infty \left(\frac{1}{r^2} \times \frac{3av}{2r} \times 2\sin\theta \cos\theta \right) dr \\ &= \frac{\mu}{\sin\theta} \times 3av \sin\theta \cos\theta \int_r^\infty \frac{1}{r^3} dr = 3\mu av \cos\theta \left(\frac{1}{-2r^2} \right)_r \\ &= \frac{3\mu av \cos\theta}{-2} \left(\frac{1}{\infty} - \frac{1}{r^2} \right) = + \frac{3\mu av \cos\theta}{2r^2} \end{aligned}$$

و در نتیجه:

$$p(r) = p_{\infty} - \frac{3\mu av \cos\theta}{2r^2} \quad (۳۶)$$

سپس به شکل نهایی تنش‌ها در مختصات قطبی - کروی می‌رسیم:

$$\begin{aligned} \tau_{rr} &= -p + 2\mu \frac{\partial v_r}{\partial r} = -p(r) + 2\mu \frac{\partial}{\partial r} \left(1 - \frac{3a}{2r} + \frac{a^3}{2r^3} \right) \\ &= -p(r) + 2\mu v \cos\theta \times \left(-\frac{3a}{2} \times \frac{-1}{r^2} + \frac{a^3}{2} \times \frac{-3}{r^4} \right) \\ &= -p(r) + 2\mu v \cos\theta \left(\frac{3a}{2r^2} - \frac{3a^3}{2r^4} \right) \end{aligned}$$

$$\tau_{rr} = -p(r) + 3\mu v \cos\theta \left(\frac{a}{r^2} - \frac{a^3}{r^4} \right) \quad (۳۷)$$

روی سطح کره $r = a$ ، این کمیت برابر است با:

$$\tau_{rr}|_{r=a} = -p(r) + 0 = -p_{\infty} + \frac{3\mu av \cos\theta}{2a^2} = -p_{\infty} + \frac{3\mu av \cos\theta}{2a} \quad (۳۸)$$

و نیز داریم:

$$\begin{aligned} \tau_{r\theta} &= \mu \left[r \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{v_{\theta}}{r} \right) + \frac{1}{r} \left(\frac{\partial v_r}{\partial \theta} \right) \right] \\ &= \mu \left[r \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{-v \sin\theta}{r} \left(1 - \frac{3a}{4r} - \frac{a^3}{4r^3} \right) \right) \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(v \cos\theta \left(1 - \frac{3a}{2r} + \frac{a^3}{2r^3} \right) \right) \right] \\ &= \mu \left[-rv \sin\theta \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{1}{r} - \frac{3a}{4r^2} - \frac{a^3}{4r^4} \right) + v \left(\frac{1}{r} - \frac{3a}{2r^2} - \frac{a^3}{2r^4} \right) \frac{\partial}{\partial \theta} \cos\theta \right] \\ &= \mu \left[\frac{v \sin\theta}{r} - \frac{3vas \sin\theta}{2r^2} - \frac{a^3 v \sin\theta}{r^4} - \frac{v \sin\theta}{r} + \frac{3vas \sin\theta}{2r^2} - \frac{va^3 \sin\theta}{2r^4} \right] \end{aligned}$$

$$\tau_{r\theta} = \mu \left(-\frac{3va^3 \sin\theta}{2r^4} \right) = -\frac{3\mu va^3}{2r^4} \sin\theta \quad (۳۹)$$

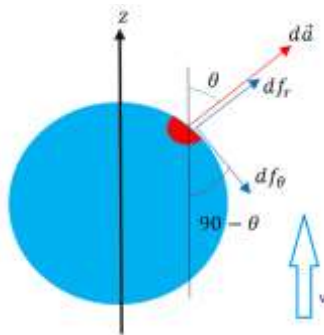
و مقدار این کمیت روی سطح کره برابر خواهد بود با:

$$\tau_{r\theta} = \frac{-3\mu v}{2a} \sin\theta \quad (۴۰)$$

مطابق شکل (۳) چون جهت نیروی مقاومت F_z در جهت \vec{v} سرعت سیال در دور دست است،

نیروی کل حاصل از نیروهای df که بر المان سطح $d\vec{a}$ وارد می‌شوند برابر است با:





شکل ۳ المان‌های بردار نیروی وارد بر المان سطح.

$$\begin{aligned}
 F_{\delta} &= \int dF_{\delta} = \int (dF_r \cos\theta - dF_{\theta} \sin\theta) \\
 &= \int [(\tau_{rr} da) \cos\theta - (\tau_{\theta r} da) \sin\theta] \\
 &= \int (\tau_{rr} \cos\theta - \tau_{\theta r} \sin\theta) da \\
 &= a^2 \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} \left[\left(-p_{\infty} + \frac{3\mu v \cos\theta}{2a} \right) \cos\theta \right. \\
 &\quad \left. + \left(\frac{3\mu v}{2a} \sin\theta \right) \sin\theta \right] \sin\theta d\theta d\varphi \\
 &= a^2 \times 2\pi \times \int_0^{\pi} \left[-p_{\infty} \cos\theta + \frac{3\mu v}{2a} \cos^2\theta + \frac{3\mu v}{2a} \sin^2\theta \right] \sin\theta d\theta \\
 &= 2\pi a^2 \left[-p_{\infty} \int_0^{\pi} \sin\theta \cos\theta d\theta + \frac{3\mu v}{2a} \int_0^{\pi} \cos^2\theta \sin\theta d\theta \right. \\
 &\quad \left. + \frac{3\mu v}{2a} \int_0^{\pi} \sin^3\theta d\theta \right]
 \end{aligned}$$

از آن‌جا که داریم:

$$\begin{aligned}
 \int \cos^2\theta \sin\theta d\theta &= \frac{-\cos^3\theta}{3}, \quad \int \sin^3\theta d\theta = -\cos\theta \\
 + \frac{\cos^3\theta}{3}, \quad \int \sin\theta \cos\theta d\theta &= \frac{\cos^2\theta}{2}
 \end{aligned}$$

پس در نتیجه:

$$\begin{aligned}
 F_z &= 2\pi a^2 \times \left[-p_{\infty} \times \frac{0}{2} + \frac{3\mu v}{2a} \left(\frac{-\cos^3\pi}{3} + \frac{\cos^3 0}{3} \right) + \frac{3\mu v}{2a} \left(\frac{4}{3} \right) \right] \\
 &= 2\pi a^2 \times \left(\frac{\mu v}{a} + \frac{2\mu v}{a} \right) = 2\pi a^2 \times \frac{3\mu v}{a} = 6\pi \mu v a
 \end{aligned}$$

$$D = 6\pi\mu\nu a \quad (41)$$

رابطه (۴۱) بیان دقیقی از نیروی مقاومت سیال بر ذره‌ای کروی شکل با شعاع a است و چنان‌که دیدیم نتیجه‌ای مستقیم از معادلات میدان سرعت سیال اطراف ذره است.

۳. نتایج و بحث

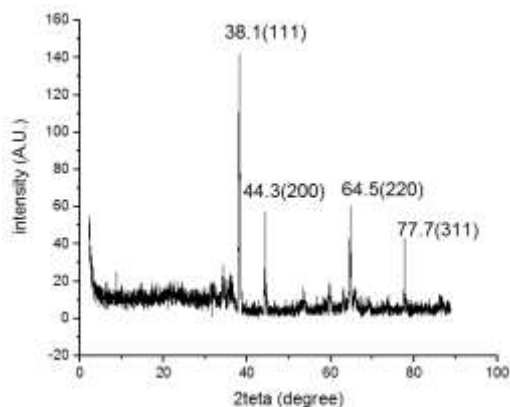
در ادامه قصد داریم نتایج جدیدی از معادلات فوق را در زمینه حرکت نانوذرات در یک سیال نیوتنی ارائه دهیم که در علوم جدید حوزه نانو فناوری کاربرد وسیعی دارند. بررسی نظری اندازه هیدرودینامیکی ذرات و مقایسه با مقادیر تجربی از جمله این اهداف است. این کار را بر روی نانو ذرات طلا انجام می‌دهیم. در ابتدا این ذرات را سنتز و مشخصه‌یابی می‌کنیم و سپس به شبیه‌سازی سیال اطراف آن پرداخته و از این راه به اندازه هیدرودینامیکی و برآورد عددی سرعت نسبی ذرات نسبت به سیال می‌پردازیم.

۳-۱ سنتز و مشخصه‌یابی نانو ذرات طلا

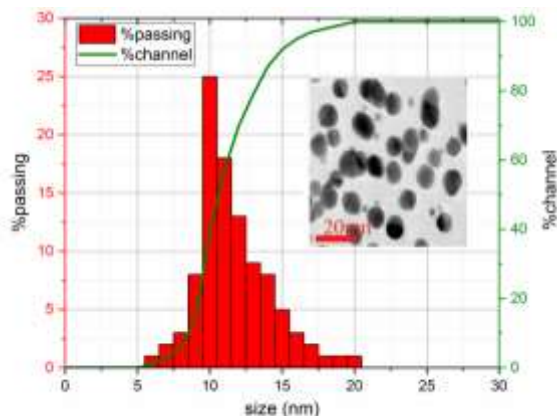
در این قسمت، نانوذره‌های طلای پراکنده شده در آب، به روش معروف تورکویچ تولید شده‌اند [۱۵-۱۷]. به منظور سنتز نانوذرات طلا، ۰.۲ گرم سیترات سدیم در ۲۰ میلی‌لیتر آب مقطر ریخته و به مدت ۲۰ دقیقه در دمای ۵۰ درجه سانتی‌گراد هم زده شد. پس از آن، ۶/۷۷ میلی‌گرم HAuCl_4 در ۲۰ میلی‌لیتر آب مقطر حل شد و به مدت ۲۰ دقیقه در دمای ۱۰۰ درجه سانتی‌گراد روی همزن مغناطیسی گرم کننده قرار گرفت تا حجم آن به ۱۵ میلی‌لیتر رسید. پس از آن، ۲ میلی‌لیتر از محلول سدیم سیترات (که حاوی ۰/۰۲ گرم سیترات سدیم است) به مدت ۴ ثانیه به صورت قطره‌ای به محلول HAuCl_4 اضافه شد و به مدت ۸ دقیقه در دمای ۱۰۰ درجه سانتی‌گراد بر روی صفحه گرم قرار گرفت [۱۸]. نانو ذرات طلا تشکیل شده و در اولین گام برای مشخصه‌یابی آن از پراکندگی اشعه ایکس (XRD) استفاده می‌کنیم که همانگونه که در شکل (۴) می‌بینیم نمودار بیانگر تشکیل نانوذرات از جنس طلاست. در این الگو، قله‌های قابل توجه θ در ۳۸/۱، ۴۴/۳، ۶۴/۵ و ۷۷/۷ درجه ظاهر شده‌اند که به ساختار بلوری مکعب با سطح مرکزدار (fcc) طلا و با صفحات به ترتیب (۱۱۱)، (۲۰۰)، (۲۲۰) و (۳۱۱) نسبت داده شد و صفحات بلوری با شماره کارت استاندارد JCPDS No.04-0784 همبستگی خوبی داشتند. تجزیه و تحلیل پراکندگی نور دینامیک (DLS) با دستگاه Malvern Zetasizer 3000 انجام شده است، و تشکیل ذرات با میانگین قطر ۱۲ نانومتر را نشان می‌دهد (شکل ۵). در شکل (۵) تصویری که با میکروسکوپ الکترونی عبوری گرفته شده



است نشان داده شده است. چنانکه می بینیم اندازه واقعی ذرات ۸ نانومتر گزارش شده است که بی گمان از اندازه هیدرودینامیکی کوچک تر است.



شکل ۴ پراکندگی اشعه ایکس (XRD) از نمونه خشک شده کلونید طلا.



شکل ۵ نمودار فراوانی ذرات طلای عبوری توسط اندازه گیری نور دینامیک (DLS) و شکل درونی، تصویر میکروسکوپ گذار الکترونی (TEM) که تشکیل ذرات با اندازه واقعی میانگین ۸ نانومتر را نشان می دهد.

۳-۲ شبیه سازی عددی اندازه هیدرودینامیکی و سرعت شاره

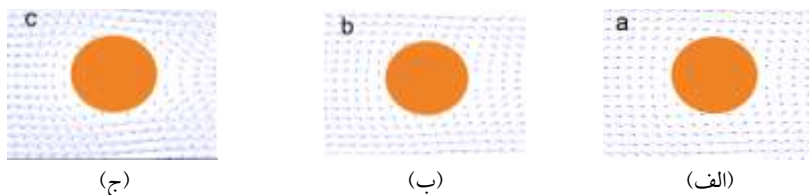
در ابتدا لازم است از رابطه (۳۰) کمک بگیریم و میدان سرعت در اطراف نانو ذره ذکر شده را به دست آوریم. چنانکه پیشتر بیان شد، اندازه هیدرودینامیکی توسط پراکندگی نور دینامیکی (DLS) تعیین می شود. این اندازه به صورت اندازه یک کره سخت فرضی تعریف می شود که به همان شکل

ذره اندازه گیری شده، پخش می شود [۱۹]. در مورد ماکرومولکولها یا ذرات موجود در محلول که اغلب شکل کروی ندارند، برای محاسبه ضریب پخش ناگزیر به تعریف این اندازه هستیم و از ویژگی های انتشار ذره می توان به اندازه ظاهری ذره آب پوشیده شده (هیدراته) رسید. در حقیقت بین اندازه هیدرودینامیکی و ویژگی های انتشار ذره رابطه مستقیمی وجود دارد. پس می توان اندازه هیدرودینامیکی را شعاع کره ای از حلال اطراف جسم در نظر گرفت که تقریباً همراه ذره حرکت می کند و به همراه آن ماهیت دینامیکی یکسانی دارد. مثلاً می توان گفت نیروی مقاومتی که این کره در سیال تجربه می کند برابر با همان نیرویی است که ذره تجربه می کند [۲۱-۲۰]. از این رو اصطلاح مورد استفاده معمولاً قطر هیدرودینامیکی است. بنابراین، قطر استوکس یا قطر هیدرودینامیکی، کره ای است که ضریب انتشار مشابه ذره ی مورد نظر را داراست، با فرض اینکه یک لایه آب پوشیده در اطراف مولکول یا ذره قرار گرفته باشد. خوشبختانه در مورد نانو ذرات کروی تقارن هندسی کاملی برای کره ذره و کره هیدرودینامیکی وجود دارد.

در شکل (۶) ذره طلا با قطر ۸ نانومتر را در نظر گرفته ایم و به کمک رابطه (۳۰) میدان سرعت حلال در محلول کلئیدی در اطراف آن را بررسی کردیم. برای رسم نمودارها از نرم افزار اورجین استفاده شده است که با انتخاب الگوی نمودار و دادن مولفه های X و Y و نیز طول و زاویه بردارها نمودارها به سادگی رسم می شوند. این کار را برای سرعت های متفاوت (سه سرعت نوعی) ذره نسبت به شاره تکرار کردیم. چنانکه دیده می شود میدانها در یک نقطه مفروض اطراف ذره در سه حالت بسیار موازی هم هستند و با تغییر سرعت، زاویه بردارها تغییری نکرده اند و فقط مقدار بردارها تفاوت کرده است. به عبارت دیگر کمیت زاویه بردارهای سرعت نسبت به کمیت مقدار سرعت سیال در دوردست (یا سرعت نسبی ذره به سیال)، کمیتی ناورد است.

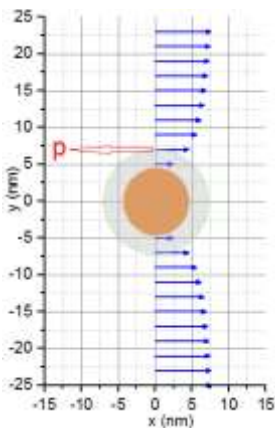
همچنین لازم به یادآوری است که سیال در این آزمایش (روش ترکویچ) مخلوطی از آب و نمک است و ممکن است غلظت های آب و در نتیجه گرانیوی آن با درصد های مختلف نمک تغییر کند [۲۲]. البته از آنجا که در رابطه (۳۰) شکل میدان سرعت شاره مستقل از گرانیوی است، می توان نتیجه گرفت که نتایج ما تا اینجا مستقل از درصد نمک است و این کمیت فقط روی نیروی مقاومت (رابطه ۴۱) تاثیر گذار است، به صورتی که با افزایش درصد نمک، این نیرو هم زیاد می شود.





شکل ۶ نمایش میدان برداری اطراف ذره طلاي ۸ نانومتری با سرعت نسبی نسبت به سیال اطراف: الف) $v = 0.5 \text{ nm/s}$ ، ب) $v = 0.612 \text{ nm/s}$ ، ج) $v = 1.25 \text{ nm/s}$.

در گام بعد به بررسی این امر می پردازیم که آیا از مدل میدان سرعت استوکس می توان به شعاع هیدرودینامیکی رسید یا خیر. برای این کار کد برنامه نویسی را اندکی تغییر داده ایم که در دستگاه مختصات متصل به مرکز ذره، سرعت های موازی با سرعت شاره (در جهت X ها) را روی محور عمود بر آن (محور Y ها) در فاصله های متفاوت بدهد. در حقیقت، قطر هیدرودینامیکی را از بُعد عمود بر سرعت سیال بررسی می کنیم. شکل (۷)، تصویری با ابعاد و اندازه های درست از این مسئله ارائه می دهد. در این شکل، هاله اطراف ذره با قطر ۱۲ نانومتر از آزمایش DLS رسم شده است. در لبه این ناحیه و در نقطه ای مانند p اندازه بردار سرعت به دو سوم مقدار نهایی بیشینه خود (در دوردست) رسیده است. به عبارت دیگر دستگاه DLS اندازه هیدرودینامیکی را در فاصله ای از ذره می گیرد که سرعت سیال به حدود ۶۵ درصد سرعت در دوردست رسیده باشد (می توان آن را فاصله موثر کاهش مقدار سرعت نامید) که این جواب با توجه به ماهیت نمایی بردار سرعت نسبت به فاصله کاملاً منطقی است. نکته بسیار مهم آن است که شبیه سازی های ما نشان داد تغییر مقدار سرعت در دوردست هم به همین نتیجه منجر می شود و بنابر آنچه پیش از این در مورد تغییر سرعت دوردست بیان کردیم، پیکربندی و گرادیان آن در تمام راستاها مستقل از مقدار اولیه سرعت شاره است. بنابراین برای نخستین بار مقایسه ای بین اندازه هیدرودینامیکی و فاصله موثر کاهش مقدار سرعت اطراف ذره بدست آوردیم که با تقریب بسیار خوبی، به ازای همه مقادیر ν با هم برابر هستند. پس به عنوان یک نتیجه مهم از شبیه سازی حاضر می توان گفت شعاع هیدرودینامیکی ذره در واقع فاصله ای از مرکز ذره است که سرعت شاره به حدود ۶۵٪ سرعت شاره می رسد. این نتیجه گیری از روی معادلات استوکس برای نخستین بار است که در مقاله حاضر ارائه می شود. مطالعه حاضر می تواند گامی نو در بررسی فیزیکی و محاسباتی رفتار نانوذرات کلوئیدی باشد.



شکل ۲ میدان برداری در راستای عمود بر سرعت سیال و مقایسه فاصله تغییرات سرعت از ذره با شعاع هیدرودینامیکی.

۴. نتیجه گیری

در این مقاله اثبات کامل و با جزئیات روابط استوکس برای محاسبه میدان سرعت اطراف یک ذره کروی شناور در یک سیال را به دست آوردیم و به کمک آن به معادلات تنش های سطحی و نیز نیروی مقاومت وارد بر ذره رسیدیم. در بخش تجربی نانوذرات هشت نانومتری طلا به روش ترکویچ ساختیم و پس از مشخصه یابی، به کمک اندازه گیری پراکندگی نور دینامیک (DLS) اندازه هیدرودینامیکی آن را بدست آوردیم. برای نخستین بار مقایسه ای بین اندازه هیدرودینامیکی و فاصله موثر کاهش مقدار سرعت اطراف ذره به دست آوردیم که با تقریب بسیار خوبی با هم برابر هستند. نتایج این بررسی می تواند دریچه ای نو بر مطالعه رفتار نانو کلوئیدها باز نموده و کاربردهای فراوانی در شبیه سازی دینامیکی ذرات معلق در سیال و آزمایش های پراکندگی نور دینامیک به وجود آورد.

۵. تقدیر و تشکر

نویسندگان لازم می دانند ضمن تشکر و قدردانی از داوران محترم که با نظرات سازنده خود باعث ارتقای مقاله شدند، از جناب آقای دکتر ابوالقاسم فوجی مسئول محترم آزمایشگاه های گروه فیزیک دانشگاه حکیم سبزواری کمال قدردانی را داشته باشند.



منابع

- [1] Akherat Doost H., Ghasedi A., Koushki E., Electrical effects of Au NPs and PVA polymers on optical band gap and thermo-optical properties of TiO₂ nanoparticles, *Journal of Molecular Liquids*, **323**. 115074. 2021.
- [2] Majles Ara MH., Koushki E., Data analysis of z-scan experiment using Fresnel–Kirchoff integral method in colloidal TiO₂ nanoparticles, *Applied Physics B*, **107**. 429–434. 2012.
- [3] Pengzhi L. and Philip L.F. Liu, Internal Wave-Maker for Navier-Stokes Equations Models, *Journal of Waterway, Port, Coastal, and Ocean Engineering*, **125**. 207. 1999.
- [4] Gaitan F., Finding flows of a Navier–Stokes fluid through quantum computing, *npj Quantum Information*, **6**. 61. 2020.
- [5] Koushki E., Effect of conjugation with organic molecules on the surface plasmon resonance of gold nanoparticles and application in optical biosensing, *RSC Adv.*, **11**. 23390. 2021.
- [6] Perera M., A. Wijenayaka L., Siriwardana K., Dahanayake D., de Silva K.M.N., Gold nanoparticle decorated titania for sustainable environmental remediation: green synthesis, enhanced surface adsorption and synergistic photocatalysis, *RSC Adv.*, **10**. 29594. 2020.
- [7] Akherat Doost H., Majles Ara M.H., Ghasedi A., Koushki E., Effects of Gold and Silver Nanoparticles on Optical Bistability of Titanium Dioxide Nanocolloid, *Physics of the Solid State*, **62**. 318. 2021.
- [8] Kadivar E., A numerical study of droplet deformation in a flat funnelform microchannel, *Iranian Journal of Physics Research*, **75**. 197-205. 2019.
- [9] Happel J., H. Brenner, *Low Reynolds number hydrodynamics*, volume 1, springer. (1983)
- [10] S. Ozarkar S., S. Sangani A., A method for determining Stokes flow around particles near a wall or in a thin film bounded by a wall and a gas-liquid interface, *Physics of Fluids*. 20.063301. 2008.
- [11] Dey S., Ali SZ., Padhi E., Terminal fall velocity: the legacy of Stokes from the perspective of fluvial hydraulics. *Proc. R.Soc.A*. 475. 20190277. 2019.
- [12] Moridpour M., Razeghizadeh A.R., Rafee V., Synthesis and Experimental Study of the Effect of Volume Fraction and Temperature on Thermal Conductivity Coefficient of Copper Oxide-Water Nanofluid, *Iranian Journal of Applied Physics*. **9**. 71-89. 2019.
- [13] Dev Sharma B., Stresses due to a nucleus of thermo-elastic strain (i) in an infinite elastic solid with spherical cavity and (ii) in a solid elastic sphere, *Zeitschrift für angewandte Mathematik und Physik ZAMP*, **8**. 142–150. 1957
- [14] Ji X., Li A. Q., Zhou S. J., The Strain Gradient Elasticity Theory in Orthogonal Curvilinear Coordinates and its Applications, *Journal of Mechanics*, **34**. 311–323. 2018
- [15] Turkevich J., Stevenson P.L., Hillier J., A study of the nucleation and growth process in the synthesis of colloidal gold. *Discuss. Faraday Soc.* **11**. 55–75. 1951
- [16] Darweesh R.S., Ayoub M.N., Nazzal S., Gold nanoparticles and angiogenesis: molecular mechanisms and biomedical applications, *Int J Nanomedicine*. **14**. 7643–7663. 2019.
- [17] Ojea-Jiménez I., BastN. G., Puentes V., Influence of the Sequence of the Reagents Addition in the Citrate- Mediated Synthesis of Gold Nanoparticles. *J. Phys. Chem. C*. **115**. 15752–15757. 2011.
- [18] Koushki E., Mirzaei Mohammadabadi F., Baedi J., Ghasedi A., The effects of glucose and glucose oxidase on the Uv-vis spectrum of gold nanoparticles: A study on optical



- biosensor for saliva glucose monitoring, Photodiagnosis and Photodynamic Therapy 30. 101771. 2020.
- [19] Maguire C.M., Rösslein M., Wick P., Prina-Mello A., Characterisation of particles in solution – a perspective on light scattering and comparative technologies, CIENCE AND TECHNOLOGY OF ADVANCED MATERIALS, 19. 732–745.2018.
- [20] Peskir G., On the Diffusion Coefficient: The Einstein Relation and Beyond, STOCHASTIC MODELS, 19. 383–405. 2003.
- [21] Momeni Heravi M. E., Effects of Hydrodynamic Diameter of Nanoparticles on Antibacterial Activity and Durability of Ag-treated Cotton Fabrics, Fibers and Polymers, 21. 1173–1179. 2020.
- [22] Hai-Lang Zh., Shi-Jun H., Viscosity and Density of Water + Sodium Chloride + Potassium Chloride Solutions at 298.15 K, J. Chem. Eng. Data, 41. 516-520. 1996.

© 2020 Alzahra University, Tehran, Iran. This article is an open-access article distributed under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution-Noncommercial 4.0 International (CC BY-NC 4.0 license) (<http://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>).

