

МОДЕЛИРОВАНИЕ ИСПАРИТЕЛЬНОЙ САМОСБОРКИ НАНОТРУБОК ПРИ ВЫСЫХАНИИ КАПЛИ НА ПОДЛОЖКЕ

Колегов К.С., Водолазская И.В., Есеркепов А.В.

Астраханский государственный университет им. В.Н. Татищева,
лаборатория «Математическое моделирование и
информационные технологии в науке и образовании»,
Россия, 414056, г. Астрахань, ул. Татищева 20а,
Тел.: (8512)24-64-96, E-mail: irina.vodolazskaya@asu.edu.ru

Самосборка наночастиц — перспективный путь к разработке устройств, использующих свойства анизотропных материалов, от электроники до биоматериалов. Контролируемая сборка удлиненных частиц, таких как углеродные нанотрубки, нанопроволоки и ДНК, позволяет осуществлять их преимущественное выравнивание в пространственном направлении. Индуцированная испарением самосборка на твердых поверхностях как способ изготовления высокоорганизованных структур является недорогим по сравнению с технологиями, основанными на использовании внешних сил. Авторы [1] исследовали экспериментально влияние температуры, рН-раствора, начальной концентрации, длины, заряда нанотрубок галлуазита на их выравнивание на краю капли водного раствора. Эксперимент показал, что длинные нанотрубки после процедуры функционализации способны упорядочиваться. Температура, начальная концентрация трубок и рН-раствора является решающими факторами для самосборки.

В нашей модели предполагается, что нанотрубки достаточно маленькие и не оказывают влияния на течение жидкости. После размещения капли на подложке и ее закрепления возникают компенсационные течения, направленные к краю капли. Поступательное и вращательное движения нанотрубок, находящихся в жидкости, рассчитывалось с помощью уравнений динамики. Диффузия нанотрубок, поступательная и вращательная, моделируется методом Монте-Карло. Радиальная скорость потока рассчитывается с использованием аналитической формулы [2]. Получено, что на выравнивание нанотрубок влияют все три рассматриваемых фактора в совокупности: адвекция, диффузия и электростатическое отталкивание. Чем выше величина заряда частиц и скорость потока жидкости, тем сильнее такое выравнивание проявляется.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-79-10216, <https://rscf.ru/project/22-79-10216/>.

Литература

1. Zhao Y., Cavallaro G., Lvov Yu. Orientation of charged clay nanotubes in evaporating droplet meniscus // *Journal of Colloid and Interface Science* **440**, 2015. P. 68–77.
2. Kolegov K.S., Barash L.Yu., Joint effect of advection, diffusion, and capillary attraction on the spatial structure of particle depositions from evaporating droplets // *Physical Review E* **100**, 2019. P. 033304.