

# 國立交通大學

機械工程學系

碩士論文

奈米粒子之布朗運動模擬

Simulation of Nanoparticle Brownian Motion

研究生：王宏元

指導教授：陳慶耀 博士

中華民國九十八年七月

奈米粒子之布朗運動模擬

**Simulation of Nanoparticle Brownian Motion**

研究生：王宏元

Student : Hong-Yuan Wang

指導教授：陳慶耀

Advisor : Ching-Yao Chen



**A Thesis**

**Submitted to Department of Mechanical Engineering**

**College of Engineering**

**National Chiao Tung University**

**in Partial Fulfillment of The Requirements**

**for the Degree of**

**Master of Science**

**in**

**Mechanical Engineering**

**July 2009**

**Hsinchu, Taiwan, Republic in China**

中華民國九十八年七月

# 奈米粒子之布朗運動模擬

學生:王宏元

指導教授:陳慶耀

國立交通大學機械工程學系碩士班

## 摘要



布朗運動，為最早被徹底研究的一種應用機率的過程。但其真的受到世人的重視是在愛因斯坦(Einstein)和朗級文(Langevin)的數學模式成立之後。在這之前，由於沒有理論的支持，所以使得布朗運動的產生方法眾說紛紜，也較沒有說服的能力。本論文以 Fortran90/95 撰寫程式，以朗級文所推導的數學模式作為出發，藉由牛頓第二運動定律模擬出單一顆粒子的布朗運動，然後再將其數量化，去做大量的粒子的一維、二維、三維的運動模擬，並且用使用統計的方法，將粒子在的所有位置的數量加以統計，並藉由四個參數觀察其集中趨勢、離散情況、對稱的程度、峰值狀況，所以較注重的是整體粒子的運動趨勢，而不是單一粒子的運動軌跡。

關鍵字：布朗運動，奈米粒子，磁性粒子，擴散

# 誌謝

首先誠摯的感謝指導教授陳慶耀博士兩年來的悉心指導與諄諄教誨，並且不時的討論並指導我正確的方向，使得我獲益良多。而老師對學問嚴謹的態度、幽默的言談、做人處事的方法更是我學習的典範。浩瀚師恩，非筆墨難以形容，永銘於心，謹誌於此，以表由衷感謝與敬意。

其次要感謝立傑學長、琦雯學姊不厭其煩的指出我研究中的缺失，並且總能在我迷惘的時候為我解惑。也要感謝奇軒、詒翔同學陪我度過這兩年生活的點點滴滴。再來是感謝實驗室的啟鳴、裕盛、柏瑋學弟、及佳芬學妹們當然也不能忘記，感謝你/妳們在生活及學術上的幫忙。

最後謹以本論文獻給我的父母及親友，感謝你們對我的生活無止境的關懷與照顧，並在精神上全力的支持與鼓勵，此恩此情銘記於心。



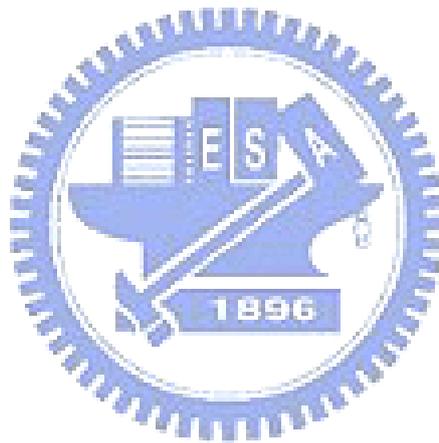
# 目錄

摘要 .....	i
誌謝 .....	ii
目錄 .....	iii
表目錄 .....	v
圖目錄 .....	vi
符號說明 .....	x
第一章 緒論 .....	1
1.1 前言 .....	1
1.2 文獻回顧 .....	2
1.3 研究目的 .....	3
第二章 愛因斯坦與朗級文之數學模式 .....	8
2.1 愛因斯坦之數學模式 .....	8
2.1.1 一維布朗運動之理論解 .....	10
2.1.2 二維布朗運動之理論解 .....	11
2.1.3 三維布朗運動之理論解 .....	11
2.2 朗級文之數學模式 .....	12
2.2.1 純布朗運動影響之推導 .....	12

2.2.2 粒子受外在磁力影響之推導 .....	14
第三章 程式之建立 .....	17
3.1 無磁力作用下之一維布朗運動 .....	17
3.2 無磁力作用下之二維布朗運動 .....	18
3.3 無磁力作用下之三維布朗運動 .....	19
3.4 受磁力作用下之布朗運動 .....	20
3.5 程式之驗證與分析 .....	21
第四章 結果與討論 .....	26
4.1 無外力之布朗運動模擬 .....	26
4.1.1 一維純布朗運動模擬 .....	26
4.1.2 二維純布朗運動之模擬 .....	26
4.1.3 三維純布朗運動之模擬 .....	27
4.2 有磁場之布朗運動模擬 .....	27
4.2.1 加入不同強度磁場之模擬 .....	28
4.3 有溫差之布朗運動模擬 .....	29
第五章 結論 .....	59
參考文獻 .....	60

# 表目錄

表 3-1 電腦中常用的兩種的 Random(均勻分佈)與 Randomn(高斯分佈)比較 .....	23
表 4-1 模擬所使用的相關參數 .....	31



# 圖目錄

圖 1-1 單一粒子之一維布朗運動之示意圖 .....	5
圖 1-2 單一粒子之二維布朗運動之示意圖 .....	5
圖 1-3 單一粒子之三維布朗運動之示意圖 .....	5
圖 1-4 單一粒子之布朗運動與類布朗運動的情形[4].....	6
圖 1-5 大量粒子在無邊界限制的情況下作一維布朗運動[5].....	7
圖 1-6 大量粒子在一面有牆的情況下作一維布朗運動[5].....	7
圖 2-1 懸浮粒子所受滲透壓的淨力 .....	16
圖 3-1 電腦中均勻分布的隨機值(Random)的分布狀況.....	24
圖 3-2 電腦中常態分布的隨機值(Randomn)的分布狀況.....	24
圖 3-3 一維布朗運動運動方向示意圖 .....	25
圖 3-4 二維布朗運動運動方向示意圖 .....	25
圖 3-5 三維布朗運動運動方向示意圖 .....	25
圖 4-1 程式執行流程圖 .....	32
圖 4-2 時間 $t=0$ ，一維純布朗運動之模擬圖 .....	33
圖 4-3 時間 $t=5$ ，一維純布朗運動之模擬圖 .....	33
圖 4-4 時間 $t=10$ 之一維純布朗運動之模擬圖 .....	34
圖 4-5 時間 $t=100$ ，一維純布朗運動之模擬圖 .....	34

圖 4-6 時間 $t=200$ ，一維純布朗運動之模擬圖 .....	35
圖 4-7 時間 $t=300$ ，一維純布朗運動之模擬圖 .....	35
圖 4-8 一維布朗運動模擬之中央濃度圖 .....	36
圖 4-9 一維布朗運動之時間與粒子位置關係圖 .....	37
圖 4-10 一維布朗運動之時間與粒子標準差關係圖 .....	37
圖 4-11 一維布朗運動之時間與粒子偏態系數關係圖 .....	38
圖 4-12 一維布朗運動之時間與粒子峰態系數關係圖 .....	38
圖 4-13 時間 $t=0$ ，二維純布朗運動之模擬圖 .....	39
圖 4-14 時間 $t=5$ ，二維純布朗運動之模擬圖 .....	39
圖 4-15 時間 $t=10$ ，二維純布朗運動之模擬圖 .....	40
圖 4-16 時間 $t=100$ ，二維純布朗運動之模擬圖 .....	40
圖 4-17 時間 $t=200$ ，二維純布朗運動之模擬圖 .....	41
圖 4-18 時間 $t=300$ ，二維純布朗運動之模擬圖 .....	41
圖 4-19 二維布朗運動模擬之中央濃度圖 .....	42
圖 4-20 二維布朗運動之時間與粒子位置關係圖 .....	43
圖 4-21 二維布朗運動之時間與粒子標準差關係圖 .....	43
圖 4-22 二維布朗運動之時間與粒子偏態系數關係圖 .....	44
圖 4-23 二維布朗運動之時間與粒子峰態系數關係圖 .....	44
圖 4-24 時間 $t=0$ ，三維純布朗運動之模擬圖 .....	45

圖 4-25 時間 $t=5$ ，三維純布朗運動之模擬圖 .....	45
圖 4-26 時間 $t=10$ ，三維純布朗運動之模擬圖 .....	46
圖 4-27 時間 $t=100$ ，三維純布朗運動之模擬圖 .....	46
圖 4-28 時間 $t=200$ ，三維純布朗運動之模擬圖 .....	47
圖 4-29 時間 $t=300$ ，三維純布朗運動之模擬圖 .....	47
圖 4-30 三維布朗運動模擬之中央濃度圖 .....	48
圖 4-31 三維布朗運動之時間與粒子位置關係圖 .....	49
圖 4-32 三維布朗運動之時間與粒子標準差關係圖 .....	49
圖 4-33 三維布朗運動之時間與粒子偏態系數關係圖 .....	50
圖 4-34 三維布朗運動之時間與粒子峰態系數關係圖 .....	50
圖 4-35 二維布朗運動在磁力影響遠小於布朗運動之影響之模擬，(a) $t=0$ 、 (b) $t=5$ 、(c) $t=10$ 、(d) $t=100$ 、(e) $t=200$ 、(f) $t=300$ .....	51
圖 4-36 二維布朗運動在磁力影響與布朗運動影響均重要之模擬，(a) $t=0$ 、 (b) $t=5$ 、(c) $t=10$ 、(d) $t=100$ 、(e) $t=200$ 、(f) $t=300$ .....	52
圖 4-37 二維布朗運動在磁力影響遠大於布朗運動之影響之模擬，(a) $t=0$ 、 (b) $t=5$ 、(c) $t=10$ 、(d) $t=100$ 、(e) $t=200$ 、(f) $t=300$ .....	53
圖 4-38 二維布朗運動在不同磁場強度模擬之中央濃度圖 .....	54
圖 4-39 不同磁場強度下的粒子平均位置與時間之比較圖 .....	55
圖 4-40 不同磁場強度下的粒子標準差與時間之比較圖 .....	55

圖 4-41 不同磁場強度下的粒子偏態系數與時間之比較圖 .....	56
圖 4-42 不同磁場強度下的粒子峰態系數與時間之比較圖 .....	56
圖 4-43 二維布朗運動之相同磁場強度下之粒子平均位置關係圖 .....	57
圖 4-44 由粒子標準差比較有溫度梯度之模擬與理論解之比較圖 .....	58
圖 4-45 有溫度梯度之模擬之粒子位置平均度 .....	58



# 符號說明

D	擴散係數
R	理想氣體常數
T	環境溫度
N	亞佛加厥常數
n	粒子的數目
$\pi$	圓周率
$\mu_c$	黏滯係數
a	粒子直徑
$\langle \rangle$	平均
t	時間
x	粒子在 X 軸的座標
y	粒子在 Y 軸的座標
z	粒子在 Z 軸的座標
ST	Soret coefficient
$\rho$	密度
V	體積
$k_B$	波茲曼常數
u	粒子相對流體的運動速度
$\nabla$	$\frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z}$



$\Delta$	微小的位移量
$\infty$	無限大
$\phi$	機率密度函數
$f$	數目密度函數
$\tau$	微小的時間
$\delta$	單位脈衝函數(Dirac Delta function)
$m$	粒子質量
$v$	粒子重量
$F(t)$	隨機作用在粒子上的力
B	mobility
$C_c$	Cunningham correction factor
下標	
b	布朗運動所造成的位移量
m	磁力所造成的位移量



# 第一章 緒論

## 1.1 前言

布朗運動(Brownian motion)，如圖1-1~圖1-3所示，為最早被徹底研究的一種應用機率的過程。而真正被世人重視是在西元1827年，英國植物學家布朗(Robert Brown) (1773-1858) 在顯微鏡中觀察到懸浮於水中的花粉粒子漂浮於水中時所發現的。在當時一般人的認知中，花粉粒子在水中應該呈現靜止的狀態；但布朗從實驗中發現事實並不是如此。他經觀察發現，花粉粒子會呈現連續、隨機且鋸齒狀的不規則運動。這項發現也引起科學界的重視，此後便以布朗運動稱呼此現象。

19世紀中期，自布朗發現布朗運動之後，科學家們也相繼的對此運動做了很多研究。一開始，許多科學家認為粒子的運動是由於本身是活的，但是後來的科學家Poincaré證明此現象不符合熱力學第二定律。而今日我們知道布朗運動是因粒子與四周的液體分子碰撞所造成的，也間接證明了Poincaré當初的觀點[3]。Poincaré之後許多科學家嘗試用傳統的連續體的概念來解釋布朗運動，但均無法合理解釋布朗運動的現象。直到西元1905年之後，愛因斯坦(Einstein)和朗級文(Langevin)才分別用自己的一套理論成功的推導出布朗運動的數學模型，也成為近代研究布朗運動理論的重要基礎[2]、[3]。

愛因斯坦[1]結合氣體粒子熱運動(kinetic molecular theory of heat)的概念與巨觀的流體力學中所描述阻滯力的影響，是第一位成功用數學物理理論來解釋布朗運動的科學家。朗級文以牛頓第二運動定律為出發，得到布朗運動在短時間與長時間的動態表現，推導出另一套數學模式，此數學模式

也與愛因斯坦的結果相互呼應，使得後來的人對布朗運動有了更多且更詳細的了解。

布朗運動的應用範圍[2]、[4]遍及股票市場的分析、生物族群的擴散現象、液體的沉澱現象、單細胞生物體積大小的估計等等。這些都說明了布朗運動的重要性與應用範圍。

## 1.2 文獻回顧

Einstein 等人[1] 由(molecular-kinetic theory of heat)氣體粒子熱運動的方法再加上理想氣體方程式作為出發，成功的推導出擴散方程式。並且推出愛因斯坦關係式，此關係式是非常合乎物理意義。如溫度(T)越高擴散的速度越快、液體越黏稠( $\mu$  越大)則擴散越慢。使得後來的科學家更清楚且更容易的了解布朗運動的原理和影響布朗運動的因素。

龐寧寧[2] 提到布朗運動的延伸和應用主要有幾項：徑向擴散與指數成長、液體中的沈澱現象、人耳的聽覺、電流計的熱擾動、樹枝狀的金屬電化學沈積、單細胞生物體積大小的估計...等。說明了布朗運動的應用範圍遍及物理、化學、電子工程、生物、社會科學等等。

黃文璋[3] 在文章中提到Wiener(1923)指出布朗運的樣本路徑是一種連續且到處不可微之函數。在此之後，L'evy(1939)則研究多維布朗運動，且推廣到Hilbert空間。由於此二人的貢獻，所以布朗運動又稱Wiener過程或Wiener-L'evy過程。黃在文章中也證明了布朗運動的兩個特性：到處不可微及標準布朗運動過程為一高斯過程。

R. Pyke 等人[4] 引入破碎理論中的 Von Koch Curve 的方法加入參數 H

來模擬布朗運動和類布朗運動，其中  $H=0.5$  為標準布朗運動，如圖 1-4 所示。並且在文章中提出布朗運動的三個特色：第一，位移量  $X(t+h)-X(t)$  必須為高斯分佈、第二，位移量  $X(t+h)-X(t)$  與過去的時間的位移量獨立、及第三，位置的平均值為零，然而這三個特色也使我們對布朗運動有更多的了解。

Clayton Crowe 等人[5] 在書中用機率函數積分之後所推導出的平均位移量  $\langle x^2 \rangle = 2Dt$  應用在描述一維大量粒子在無邊界的情況下自由擴散，如圖 1-5 所示。與在有一面牆的情況擴散的結果，如圖 1-6。

Chen 等人[6] 文章中說明 Ludwig and Soret 在一百年前提出物質擴散的原因，不僅僅只因為濃度差異而產生的滲透壓會使得粒子會移動，而溫度也是一個重要的影響因素。因此提出 Soret coefficient 來修正 Fick's Law，使得 Fick's Law 的更加準確。再加入 Soret coefficient (ST) 的修正之後，Chen 再使用 CFD 中的 Lattice Boltzmann methods (LBM) 來模擬粒子運動的情形，並且藉由 10 個串聯的粒子來模擬出 DNA 運動的狀況。

Volker and Odenbach 等人[7] 將布朗運動的觀念引入磁性粒子中，故粒子會受磁場、濃度、溫度三個重要因素的影響，並且考慮因溫度而週遭流體所產生的自然對流。所以將 Soret coefficient (ST) 再加以修正成  $ST = ST_0 + ST_m$ ，其中  $ST_m$  就是對磁場的修正項。而文章將磁場設為均勻的，且分為垂直和平行溫度梯度兩個方向，並且分別算出其中的  $ST_m$  的理論值，然後在與實驗結果比較。

### 1.3 研究目的

隨著時代的進步，工業的發展，很多東西都隨之越做越小，越做越精細。而在尺度方面認知也從以前的微米時代，進步到了現在的奈米時代。

而奈米粒子由於其尺寸小、重量輕，所以一些細微的影響都需要考慮進去，其中就以布朗運動的影響最為常見。在文獻中，我們也看到奈米科技的運用非常廣泛。從，食、衣、住、行、育、樂等。都脫離不瞭跟奈米粒子的關係。其中，若將奈米粒子之研究延伸到磁性奈米粒子，將可以應用於生醫工程方面的研究[8]。如利用制癌劑混入磁性流體製成乳液，注入血管，外部以磁場把含制癌劑的乳液導入患部，以制癌劑釋放藥性治療病變的癌細胞，因制癌劑也會對正常的細胞有強力作用，所以制癌劑最好只集中於癌細胞患部，利用磁性流體可藉由磁場力集中癌細胞患部，而磁性流體對人體無不良影響，可由人體排出，故磁性奈米粒子研究之重要性也越來越重要。

在一般對奈米粒子之研究中，大多針對單一粒子去進行布朗運動影響的模擬，而將重點在於觀察粒子的運動軌跡，然後再對軌跡加以分析，由於數量稀少，所以相對的不準確性也較高。而本研究使用 Fortran90/95 撰寫程式，模擬出大量的粒子做布朗運動的情形，並且使用 Matfor 即時畫出粒子運動的情形。然後引入統計學中研究資料分布狀況的四大指標，觀察其集中趨勢、離散性測度、偏態及峰態的狀況。因此較重視的是整體運動的狀況，而不單一粒子運動的軌跡。

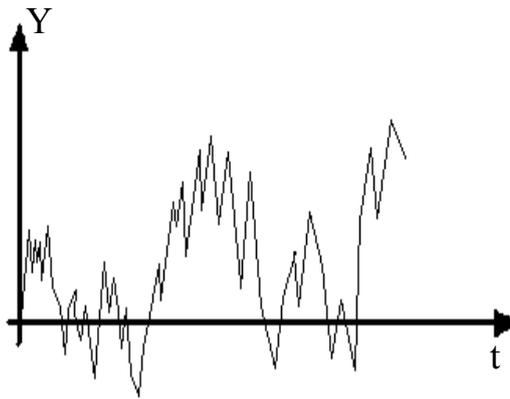


圖 1-1 單一粒子之一維布朗運動之示意圖

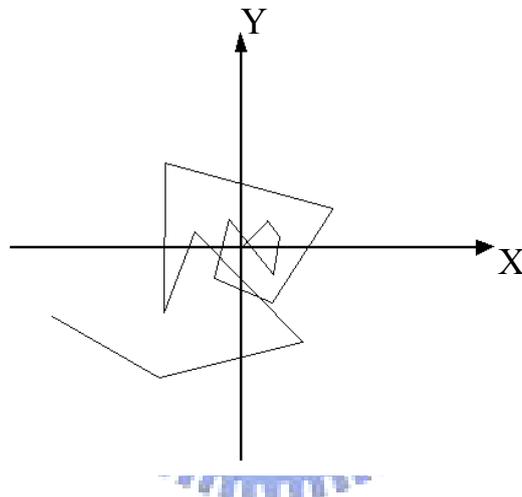


圖 1-2 單一粒子之二維布朗運動之示意圖

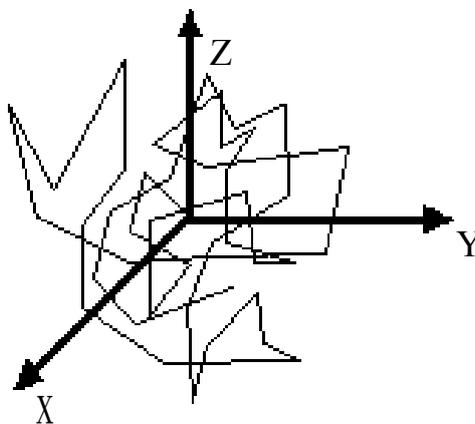


圖 1-3 單一粒子之三維布朗運動之示意圖

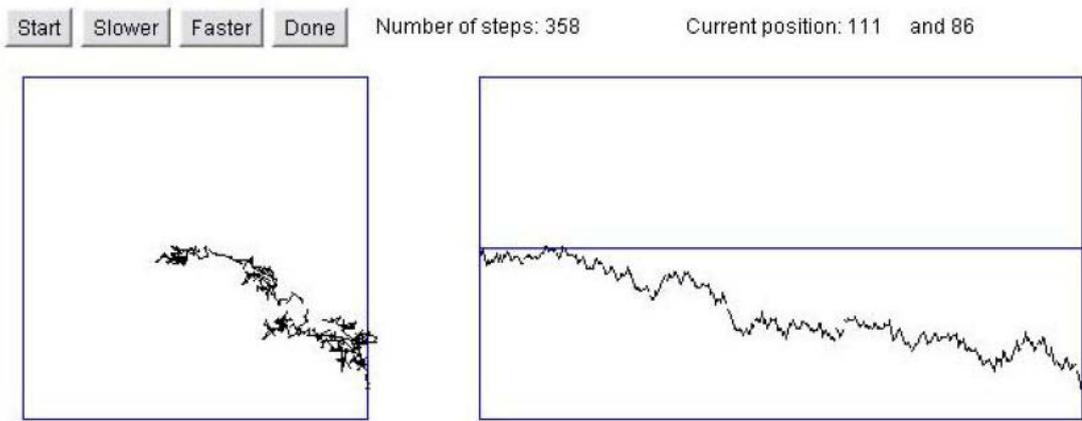


圖 1-4 單一粒子之布朗運動與類布朗運動的情形[4]

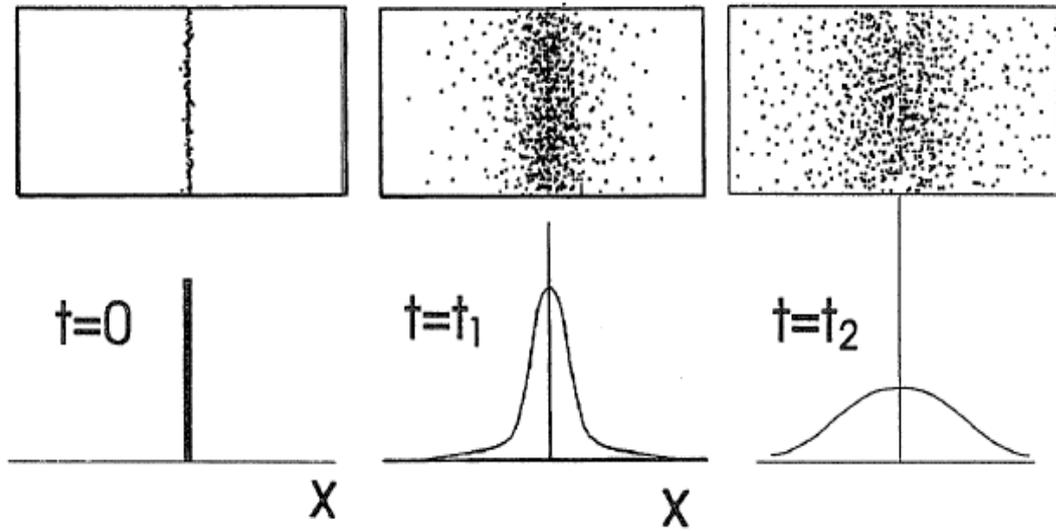


圖 1-5 大量粒子在無邊界限制的情況下作一維布朗運動[5]

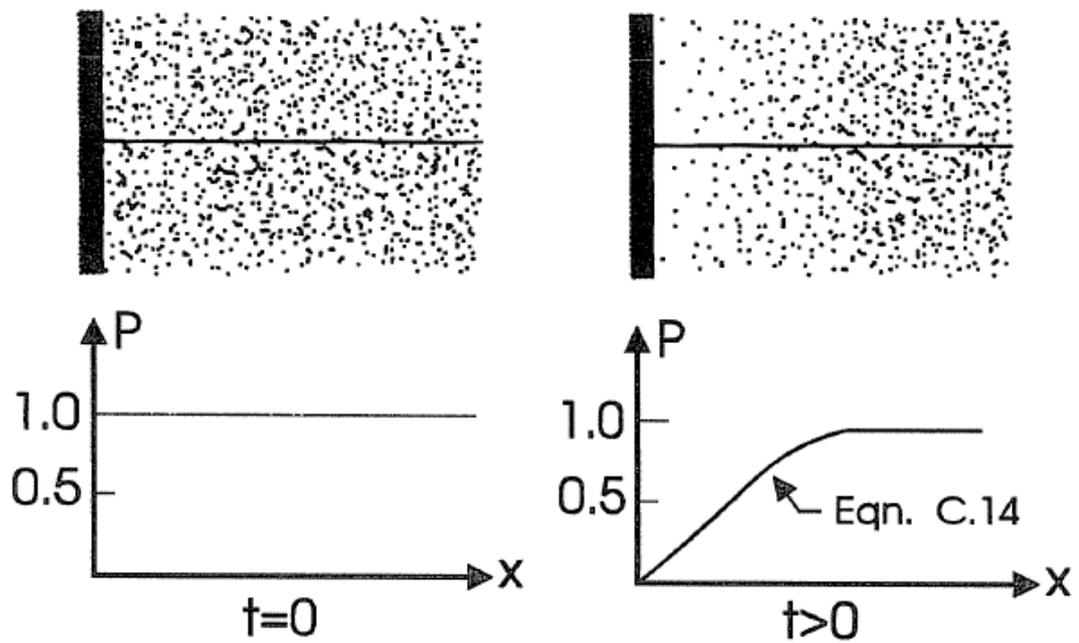


圖 1-6 大量粒子在一面有牆的情況下作一維布朗運動[5]

## 第二章 愛因斯坦與朗級文之數學模式

### 2.1 愛因斯坦之數學模式

如圖 2-1 所示，假設液體中懸浮粒子很小，且在 X 方向的分佈呈現不均勻的狀況，故懸浮粒子的濃度密度  $\rho$  與 X 軸有關，即

$$\rho = \rho(x) \quad (2-1)$$

由理想氣體方程式可知道，

$$P = \frac{RT}{V} \cdot \frac{n}{N}$$

經整理之後可改成

由於


$$P = \frac{n}{V} \cdot \frac{R}{N} \cdot T$$
$$k_B = \frac{R}{N} \text{ 為波茲曼常數}$$
$$\rho = \frac{n}{V} \text{ 為單位體積的粒子數}$$

所以上式可以修正為

$$P = \rho k_B T \quad (2-2)$$

由(2-1)式與(2-2)式可知  $P = P(x)$ ，若將上式對 x 微分

$$-\frac{dP(x)}{dx} = -\frac{d\rho(x)k_B T}{dx}$$

其中負號代表滲透壓的方向。而  $-\frac{d\rho(x)k_B T}{dx}$  此項由也代表著粒子將會由濃度

高的向濃度低的而方向移動。

由於懸浮粒子速度並不是很大，所以對週遭的流體影響很小，故流體仍是層流。所以由流體力學中的 Stokes' Law 可知懸浮粒子所受的阻力為  $6\pi\mu_c a v$ ，然而粒子在流體中運動卻會因為流體的黏滯性所產生的阻力而影響

其運動，各二者必須達成平衡，即

$$-\frac{d\rho(x)k_B T}{dx} = 6\pi\mu_c a u$$

整理之後

$$u = -\frac{k_B T}{6\pi\mu_c a} \cdot \frac{d\rho}{dx} \quad (2-3)$$

再由質量守衡方程式(Continuity equation)

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho u) = 0$$

將上式帶入(2-3)式中，可得

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \nabla \cdot \left\{ \rho \left( -\frac{k_B T}{6\pi\mu_c a} \cdot \frac{d\rho}{dx} \right) \right\} = 0$$

若考慮一維布朗運動則  $\nabla = \frac{\partial}{\partial x}$ ，故上式整理之後

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} = \left( \frac{k_B T}{6\pi\mu_c a} \right) \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} = D \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} \quad (2-4)$$

其中

$$D = \frac{k_B T}{6\pi\mu_c a} \quad (2-5)$$

上式即為愛因斯坦關係式[1]

若特徵時間  $\tau$  內，一個粒子所移動的距離為  $\Delta$ ，則機率密度函數  $\phi(\Delta)$  必須滿足

$$\int_{\Delta \rightarrow -\infty}^{\Delta \rightarrow \infty} \phi(\Delta) d\Delta = 1 \quad (2-6)$$

且具正負對稱性質，即  $\phi(\Delta) = \phi(-\Delta)$  為偶函數

若  $f(x, t)$  代表懸浮粒子在位置  $x$ 、時間  $t$  的時候，所對應的數目密度，由獨立運動的概念可得

$$f(x, t + \tau) = \int_{\Delta \rightarrow -\infty}^{\Delta \rightarrow \infty} f(x + \Delta, t) \phi(\Delta) d\Delta \quad (2-7)$$

因為  $\tau$  很小 ( $10^{-7}$  sec)[2] 可知

$$f(x, t + \tau) \approx f(x, t) + \tau \frac{\partial f(x, t)}{\partial t}$$

$$\text{且 } f(x + \Delta, t) \approx f(x, t) + \Delta \frac{\partial f(x, t)}{\partial x} + \frac{\Delta^2}{2} \frac{\partial^2 f(x, t)}{\partial x^2}$$

將上兩式帶入(2-7)式可得

$$f(x, t) + \tau \frac{\partial f(x, t)}{\partial t} = \int_{\Delta \rightarrow -\infty}^{\Delta \rightarrow \infty} (f(x, t) + \Delta \frac{\partial f(x, t)}{\partial x} + \frac{\Delta^2}{2} \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}) \phi(\Delta) d\Delta$$

經整理之後

$$f(x, t) + \tau \frac{\partial f(x, t)}{\partial t} = f \int_{\Delta \rightarrow -\infty}^{\Delta \rightarrow \infty} \phi(\Delta) d\Delta + \frac{\partial f(x, t)}{\partial x} \int_{\Delta \rightarrow -\infty}^{\Delta \rightarrow \infty} \Delta \phi(\Delta) d\Delta + \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \int_{\Delta \rightarrow -\infty}^{\Delta \rightarrow \infty} \frac{\Delta^2}{2} \phi(\Delta) d\Delta$$

上式右邊的偶數項因對稱關係皆為零。則右邊僅剩第一、三項，即

$$f(x, t) + \tau \frac{\partial f(x, t)}{\partial t} \approx f \int_{\Delta \rightarrow -\infty}^{\Delta \rightarrow \infty} \phi(\Delta) d\Delta + \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \int_{\Delta \rightarrow -\infty}^{\Delta \rightarrow \infty} \frac{\Delta^2}{2} \phi(\Delta) d\Delta$$

將(2-6)式帶入上式，可得  $f \int_{\Delta \rightarrow -\infty}^{\Delta \rightarrow \infty} \phi(\Delta) d\Delta = f$ ，故上式可整理為

$$\frac{\partial f(x, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \quad (2-8)$$

$$\text{其中 } D = \frac{1}{\tau} \int_{\Delta \rightarrow -\infty}^{\Delta \rightarrow \infty} \frac{\Delta^2}{2} \phi(\Delta) d\Delta$$

(2-8)式即為粒子擴散方程式。

### 2.1.1 一維布朗運動之理論解

若考慮(2-8)式之 P.D.E 配合以下特殊的邊界條件、和初始值

$$\text{擴散方程式: } \frac{\partial f}{\partial t} = D \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}$$

$$\text{初使值: } f(x, 0) = \delta(x) \quad (2-9)$$

$$\text{邊界條件: } x = \pm \infty, f = 0$$

可解得

$$f(x, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-\frac{x^2}{4Dt}} \quad (2-10)$$

其中， $\int_{x \rightarrow -\infty}^{x \rightarrow \infty} f(x, t) dx = 1$  代表總數濃度為百分之百

(2-10) 式即為一維布朗運動在無邊界的情況下的理論解。

### 2.1.2 二維布朗運動之理論解

同理，若考慮二維 P.D.E 配合以下特殊的邊界條件、和初始值

$$\text{擴散方程式: } \frac{\partial f}{\partial t} = D \left( \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} \right)$$

$$\text{初使值: } f(x, y, 0) = \delta(x)\delta(y) \quad (2-9)$$

$$\text{邊界條件: } x = \pm \infty, y = \pm \infty, f = 0$$

可解得

$$f(x, y, t) = \frac{1}{4\pi Dt} e^{-\frac{x^2+y^2}{4Dt}} \quad (2-11)$$

(2-11) 式即為二維布朗運動在無邊界的情況下的理論解。

### 2.1.3 三維布朗運動之理論解

同理，若將其延伸到三維空間，其 P.D.E 配合以下特殊的邊界條件、和初始值

$$\text{擴散方程式: } \frac{\partial f}{\partial t} = D\left(\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial z^2}\right)$$

$$\text{初使值: } f(x, y, z, 0) = \delta(x)\delta(y)\delta(z) \quad (2-9)$$

$$\text{邊界條件: } x = \pm\infty, y = \pm\infty, z = \pm\infty, f = 0$$

可解得

$$f(x, y, z, t) = \frac{1}{\sqrt[3]{4\pi Dt}} e^{-\frac{x^2+y^2+z^2}{4Dt}} \quad (2-13)$$

(2-13)式即為三維布朗運動在無邊界的情況下的理論解。

## 2.2 朗級文之數學模式

### 2.2.1 純布朗運動影響之推導

不同於愛因斯坦的方法，朗級文以牛頓第二運動定律作為出發，並做以下假設。若考慮懸浮粒子受流體的隨機碰撞力，和粒子運動流體所產生的阻力為運動時的外力，則牛頓第二運動定律可表示如下：

$$m \frac{dv_b(t)}{dt} = F(t) + F_d(t)$$

其中  $F(t)$  為流體隨機作用在粒子上的碰撞力(random impact force due to the molecules)。而  $F_d(t) = -\frac{1}{B}v$  代表粒子在流體中因受碰撞而運動所造成的阻力(Stokes Drag force modified rarefaction effects)。

將  $v_b = \frac{dx_b}{dt}$  帶入上式中並且同乘  $x$ ，可得

$$\frac{1}{2} m \frac{d^2 x_b^2}{dt^2} - m \left(\frac{dx_b}{dt}\right)^2 = x_b F(t) - \frac{1}{2B} \frac{dx_b^2}{dt}$$

因隨機力  $F(t)$  與位置無關所以取平均之後為零，故上式整理之後可得

$$\frac{1}{2}m \frac{d^2 \langle x_b^2 \rangle}{dt^2} + \frac{1}{2B} \frac{d \langle x_b^2 \rangle}{dt} = m \langle v_b^2 \rangle$$

其中符號  $\langle \rangle$  代表平均的意思。

上式右邊代表粒子的動能，因  $\frac{1}{2}m \langle v_b^2 \rangle = \frac{1}{2}k_B T$  帶入上式並積分，經整理之後可得

$$\frac{d \langle x_b^2 \rangle}{dt} = 2k_B B T + C \exp\left(-\frac{t}{mB}\right)$$

上式右邊第二項經一段時間後會趨近零。若忽略長時間後右邊第二項的影響，故上式可改寫成

$$\langle x_b^2 \rangle = 2k_B B T t \quad (2-14)$$

其中  $D = k_B B T$

上式中  $B = \frac{C_c}{6\pi\mu_c a}$ ，且  $C_c = 1$ 。故上式之結果與愛因斯坦所推導的(2-5)式

結果相呼應。而由(2-14)式之結果，可以得知在微小時間內，因布朗運動而造成的平均微小位移量可表示如下

$$\langle \Delta x_b \rangle = \sqrt{2D\Delta t} \quad \text{for 1-D B.M.} \quad (2-15a)$$

同理，若將上述方法推廣至二、三維空間，則結果分別如下，

$$\langle \Delta r_b \rangle = \sqrt{4D\Delta t}, r = \sqrt{x^2 + y^2} \quad \text{for 2-D B.M.} \quad (2-15b)$$

$$\langle \Delta r_b \rangle = \sqrt{6D\Delta t}, r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \quad \text{for 3-D B.M.} \quad (2-15c)$$

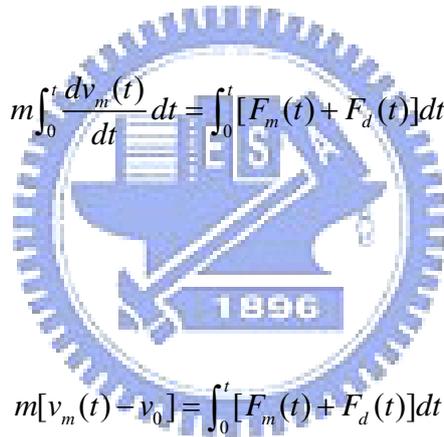
### 2.2.2 粒子受外在磁力影響之推導

假設將布朗運動和磁力所造成運動視為兩個獨立運動，則牛頓第二運動定律可表示如下：

$$m \frac{dv_m(t)}{dt} = F_m(t) + F_d(t) \quad (2-16)$$

其中  $F_m(t)$  代表粒子所受的磁力，而  $F_d(t) = -6\pi\mu_c av(t)$  代表粒子受磁力影響所產生的運動而造成的阻力。

將上式從 0~t 積分，並整理可得因磁力影響所造成的速度函數


$$m \int_0^t \frac{dv_m(t)}{dt} dt = \int_0^t [F_m(t) + F_d(t)] dt$$

整理之後可得

$$m[v_m(t) - v_0] = \int_0^t [F_m(t) + F_d(t)] dt$$

同理，再對上式從 0~t 積分，並整理可得 t 秒後的位置函數

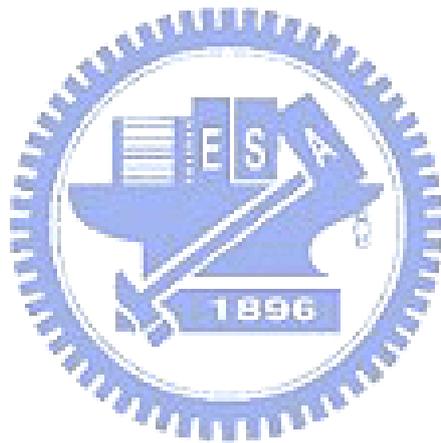
$$x_m(t) = \frac{1}{m} \int_0^t \int_0^t [F_m(t) + F_d(t)] dt + v_0 t + x_0 \quad (2-17)$$

而由上式之結果，我可以得到一粒子受磁力的影響而造成 t 秒後的位置函數。故可知在微小時間內，磁力所造成粒子的位移量為

$$\Delta x_m = \frac{1}{2m} [F_m(t) + F_d(t)] \Delta t^2 + v_0 \Delta t \quad (2-18a)$$

同理，若將上述方法推廣至二維空間，則結果如下，

$$\Delta r_m = \frac{1}{2m} [F_m(t) + F_d(t)] \Delta t^2 + v_0 \Delta t \quad (2-18b)$$



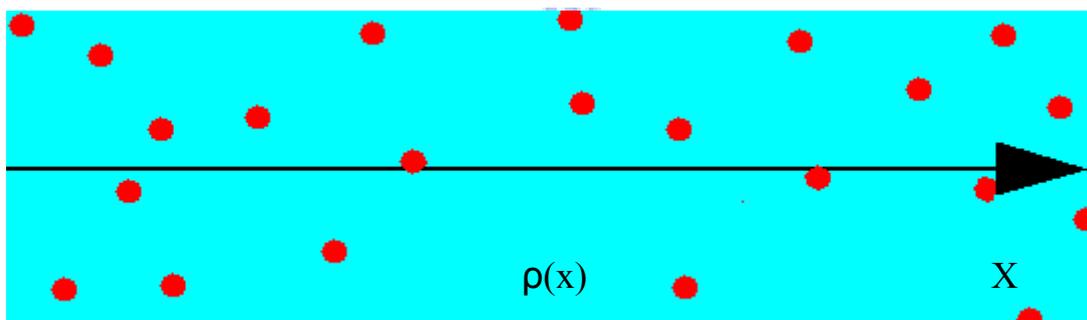


圖 2-1 懸浮粒子所受滲透壓的淨力

## 第三章 程式之建立

由先前的文獻回顧，我們發現布朗運動有以下主要特性：粒子的位移量  $X(t+h)-X(t)$  為隨機的，與之前的位移量獨立，且呈高斯分布，並且平均後的位置為零(原點)。所以在模擬布朗運動之前，必須運用到兩個隨機亂數值，分別為均勻分布的隨機值(Random)，和常態分布的隨機值(Randomn)，其分佈情形和特色如圖 3-1、圖 3-2 及表 3-1 所示，以用來產生上述之特性。

### 3.1 無磁力作用下之一維布朗運動

假設忽略粒子間的碰撞，僅考慮粒子與四周流體間的隨機碰撞所造成的影響，則粒子在很小的時間  $h$  內，受周遭流體碰撞所產生微小的位移量為  $\Delta x_b$ ，則其位置函數可表示如下


$$X(t+h)-X(t)=\Delta x_b \quad (3-1)$$

其中  $X(t+h)$  代表  $h$  秒後的位置， $X(t)$  代表原本的位置， $\Delta x_b$  表示粒子因布朗運動的影響而造成的位移量。由於布朗運動的其位移量必須成高斯分佈，且平均後的位置為零，故使用電腦中的隨機高斯值(Randomn)寫入程式，用以產生高斯分佈。並且藉由參數  $A$  來產生運的方向，如下所示

$$X(t+h)-X(t)=A(1+Randomn)$$

但是經測試發現 Random 與 Randomn 的特點，如圖 3-1~3-2 及表 3-1 所示。其中 Randomn 落在  $[-4,4]$  區間中。所以必須將所取之隨機高斯值除四，用以產生平均為零之高斯分佈，即將上式修改成

$$X(t+h)=X(t)+A(1+Randomn/4) \quad (3-2)$$

如此一來位移量為 $(1+\text{Randomn}/4)$ 個單位長度便呈高斯分佈。

而因為一維的布朗運動粒子的運動方向只有左右兩邊，為了使得左右機率相同，如圖 3-3 所示。所以在程式中呼叫均勻分布的隨機值 Random，用以判斷粒子運動的方向，即  $\text{Random} > 0.5$  表示粒子向右移動，即  $A=1$ ；反之則向左移動，即  $A=-1$ 。因為向左向右機率均相等，所以平均值為零。由於布朗運動每次所造成的位移量與過去的位移量獨立，所以每次程式迴圈執行的時候將上述兩個隨機值重取，這樣才會與之前的位移量成獨立的關係。再由我們由之前推導的(2-15a)式可知粒子的位移量為， $\langle \Delta x_b \rangle = \sqrt{2D\Delta t}$ ，即為粒子每次移動單位長度(unit length)。將此結果與(3-2)式結合，便可以模擬出一維的布朗運動，即

$$X(t+h) = X(t) + A \langle \Delta x_b \rangle (1 + \text{Randomn}/4) \quad (3-3)$$

上式即為懸浮粒子在無外力作用之下之一維布朗運動的方程式。

### 3.2 無磁力作用下之二維布朗運動

同理，若我們將(3-1)式的方法推廣至二維空間，即

$$\begin{aligned} X(t+h) &= X(t) + \Delta x_b \\ Y(t+h) &= Y(t) + \Delta y_b \end{aligned} \quad (3-4)$$

其中  $X(t+h)$  代表  $h$  秒後粒子的位置， $X(t)$  代表原本粒子的位置， $\Delta x_b$  為布朗運動影響所造成的  $X$  軸方向位移量， $Y(t+h)$  代表  $h$  秒後粒子的位置， $Y(t)$  代表原本粒子的位置， $\Delta y_b$  為布朗運動影響所造成的  $Y$  軸方向位移量，由極座標轉換的公式可將上式轉換如下

$$\begin{aligned} X(t+h) &= X(t) + \langle \Delta r_b \rangle \cdot \cos \theta (1 + \text{Randomn}/4) \\ Y(t+h) &= Y(t) + \langle \Delta r_b \rangle \cdot \sin \theta (1 + \text{Randomn}/4) \end{aligned} \quad (3-5)$$

其中  $\theta$  用以控制粒子的運動的方向，而  $\langle \Delta r_b \rangle$  代表每次移動的長度。

因為二維的布朗運動，所以粒子運動為整個二維平面，所以粒子的運動的角度  $\theta$  的範圍為  $[0, 2\pi]$ ，如圖 3-4 所示。且所有角度機率均相等，故我們使用如同 3.1 節的方法，呼叫一個均勻分布的隨機值 Random 用來判斷運動的方向，由表 3-1 可知隨機值 Random 的範圍在  $[0, 1]$  之間，且均勻分布，故乘上  $2\pi$  即  $\theta = 2\pi \times \text{Random}$ ，如此一來  $\theta$  的範圍便滿足上述的要求。而單位位移量可由(2-15b)式得知  $\langle \Delta r_b \rangle = \sqrt{2D\Delta t}$ ，上式即為懸浮粒子在無外力作用之下之二維布朗運動的方程式。

### 3.3 無磁力作用下之三維布朗運動

同理，若我們將(3-1)式的方法推廣至三維空間，即



$$\begin{aligned} X(t+h) &= X(t) + \Delta x_b \\ Y(t+h) &= Y(t) + \Delta y_b \\ Z(t+h) &= Z(t) + \Delta z_b \end{aligned} \quad (3-6)$$

其中  $X(t+h)$  代表  $h$  秒後粒子的位置， $X(t)$  代表原本粒子的位置， $\Delta x_b$  為布朗運動影響所造成的  $X$  軸方向位移量， $Y(t+h)$  代表  $h$  秒後粒子的位置， $Y(t)$  代表原本粒子的位置， $\Delta y_b$  為布朗運動影響所造成的  $Y$  軸方向位移量， $Z(t+h)$  代表  $h$  秒後粒子的位置， $Z(t)$  代表原本粒子的位置， $\Delta z_b$  為布朗運動影響所造成的  $Z$  軸方向位移量，由球座標轉換的公式可將上式轉換如下

$$\begin{aligned} X(t+h) &= X(t) + \langle \Delta r_b \rangle \cdot \sin \phi \cdot \cos \theta (1 + \text{Randomn}/4) \\ Y(t+h) &= Y(t) + \langle \Delta r_b \rangle \cdot \sin \phi \cdot \sin \theta (1 + \text{Randomn}/4) \\ Z(t+h) &= Z(t) + \langle \Delta r_b \rangle \cdot \cos \phi (1 + \text{Randomn}/4) \end{aligned} \quad (3-7)$$

其中  $\theta$  與  $\phi$  用以控制粒子的運動的方向，而  $\langle \Delta r_b \rangle$  代表每次移動的長度。因為三維的布朗運動，所以粒子運動為整個三維空間，故必須使用兩個參數來

控制粒子的運動的方向，由圓球座標公式可知，運動的角度 $\theta$ 的範圍為 $[0, 2\pi]$ ，而 $\phi$ 的範圍為 $[0, \pi]$ 如圖 3-5 所示。且所有角度機率均相等，故我們使用如同 3.1 節的方法，呼叫一個均勻分布的隨機值 *Random* 用來判斷運動的方向，由表 2-1 可知隨機值 *Random* 的範圍在 $[0, 1]$ 之間，且均勻分布，故乘上 $2\pi$ 即 $\theta = 2\pi \times \text{Random}$ 。同理， $\phi = \pi \times \text{Random}$ 。且如此一來 $\theta$ 與 $\phi$ 的範圍便滿足上述的要求。而單位位移量可由(2-15c)式得知 $\langle \Delta r_b \rangle = \sqrt{2D\Delta t}$ ，上式即為懸浮粒子在無外力作用之下之三維布朗運動的方程式。

### 3.4 受磁力作用下之布朗運動

假設布朗運動所造成的影響與磁力所造成的影響不互相干預，則可將(3-1)式修正如下



$$X(t+h) - X(t) = \Delta x_b + \Delta x_m \quad (3-8)$$

其中 $X(t+h)$ 代表 $h$ 秒後粒子的位置， $X(t)$ 代表原本粒子的位置， $\Delta x_b$ 為布朗運動影響所造成 $X$ 軸方向位移量， $\Delta x_m$ 代表粒子受磁力影響所造成 $X$ 軸方向位移量。

同理，將上述概念推廣到二維空間，則可分別表示如下

$$\begin{aligned} X(t+h) &= X(t) + \Delta x_b + \Delta x_m \\ Y(t+h) &= Y(t) + \Delta y_b + \Delta y_m \end{aligned} \quad (3-9)$$

其中 $X(t+h)$ 、 $Y(t+h)$ 代表 $h$ 秒後粒子的位置， $X(t)$ 、 $Y(t)$ 代表原本粒子的位置， $\Delta x_b$ 為布朗運動影響所造成 $X$ 軸方向位移量， $\Delta x_m$ 代表粒子受磁力影響所造成 $X$ 軸方向位移量。 $\Delta y_b$ 為布朗運動影響所造成 $Y$ 軸方向位移量， $\Delta y_m$ 代表粒子受磁力影響所造成 $Y$ 軸方向位移量。

同理，將上述概念推廣到三維空間，則可分別表示如下

$$\begin{aligned}
X(t+h) &= X(t) + \Delta x_b + \Delta x_m \\
Y(t+h) &= Y(t) + \Delta y_b + \Delta y_m \\
Z(t+h) &= Z(t) + \Delta z_b + \Delta z_m
\end{aligned}
\tag{3-10}$$

其中  $X(t+h)$ 、 $Y(t+h)$ 、 $Z(t+h)$  代表  $h$  秒後粒子的位置， $X(t)$ 、 $X(t)$ 、 $X(t)$  代表原本粒子的位置， $\Delta x_b$  為布朗運動影響所造成  $X$  軸方向位移量， $\Delta x_m$  代表粒子受磁力影響所造成  $X$  軸方向位移量。 $\Delta y_b$  為布朗運動影響所造成  $Y$  軸方向位移量， $\Delta y_m$  代表粒子受磁力影響所造成  $Y$  軸方向位移量。 $\Delta z_b$  為布朗運動影響所造成  $Z$  軸方向位移量， $\Delta z_m$  代表粒子受磁力影響所造成  $Z$  軸方向位移量。

### 3.5 程式之驗證與分析

為了分析我們的程式，我們使用統計學中的四個指標。分別為，集中趨勢由平均值(mean)求得、離散性測度由標準差(standard deviation)求得、偏態由偏態系數(skewness)求得及峰態則由峰態係數(kurtosis)求得。其定義與意義分別如下：

平均值(Mean)，主要來反應資料聚集的情況，其定義如下

$$\mu = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (x_i)
\tag{3-11}$$

標準差(STD)，主要反映內個體間的離散程度。定義如下

$$\sigma = \sqrt{\frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (x_i - \mu)^2}
\tag{3-12}$$

偏態系數(SK)，用以描寫圖形不對稱的程度，即傾向的程度(偏態)。Sk 之值愈接近 0，機率分配對稱(symmetric distri.)、Sk 之值愈大於 0，機率

分配右偏、Sk 之值愈大於 0，機率則分配左偏。定義如下

$$SK = \frac{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (x_i - \mu)^3}{\sigma^3} \quad (3-13)$$

峰態係數(Kur)，用以描寫圖形描述峰值的尖銳程度，即  $Kur > 3$ ，此分配的峰態為高狹峰(愈尖)、 $Kur = 3$ ，此分配的峰態為常態峰、 $Kur < 3$ ，此分配的峰態為低闊峰(愈扁)。定義如下

$$Kur = \frac{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (x_i - \mu)^4}{\sigma^4} \quad (3-14)$$

由於布朗運動是常態分佈的一種特數型態，所以必須滿足常態分佈的要求，即由必須滿足  $\mu = 0$ 、 $\sigma = \sqrt{2Dt}$ 、 $SK = 0$  及  $Kur = 3$  的四個要求才是常態分佈的一種。由稍後的結果可以看出我們的布朗運動滿足常態分佈的分布情況。



隨機種類	範圍	平均值	特色
Random	[0, 1]	0.5	在範圍內均勻分佈
Randomn	[-4, 4]	0	平均值為零，呈高斯分佈

表 3-1 電腦中常用的兩種的 Random(均勻分佈)與 Randomn(高斯分佈)比較

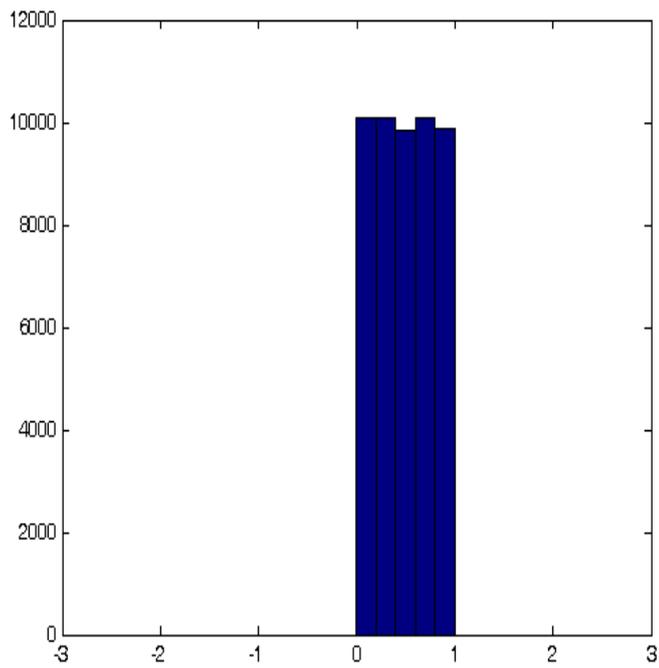


圖 3-1 電腦中均勻分布的隨機值(Random)的分布狀況



[-4,4]取100等份

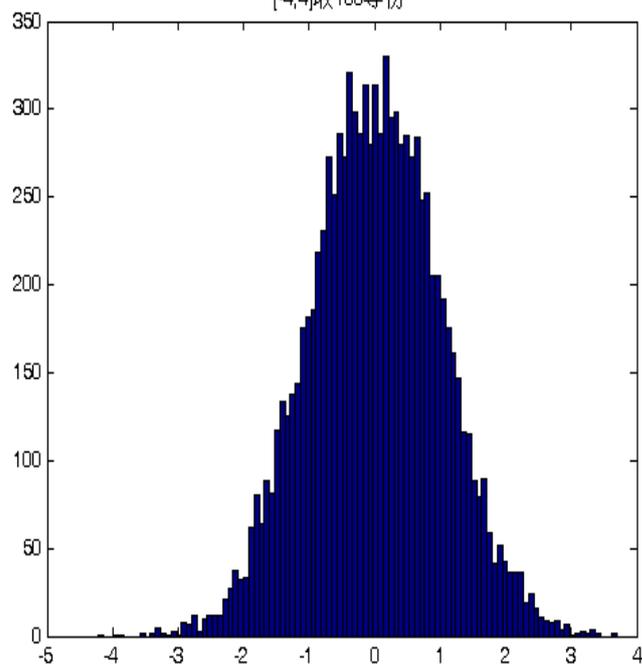


圖 3-2 電腦中常態分布的隨機值(Randomn)的分布狀況

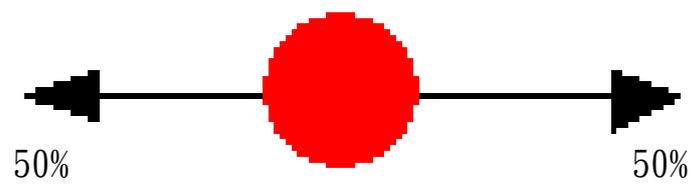


圖 3-3 一維布朗運動運動方向示意圖

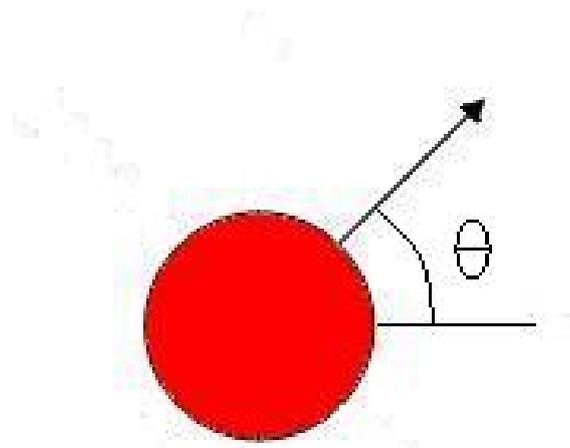


圖 3-4 二維布朗運動運動方向示意圖

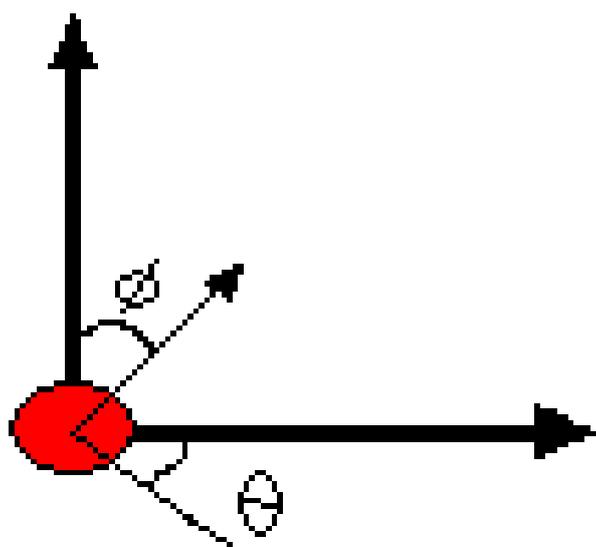


圖 3-5 三維布朗運動運動方向示意圖

## 第四章 結果與討論

本章將奈米粒子之模擬分成兩大類，一是無外力的純布朗運動模擬、另一是加入磁場之後假設磁力的影響和布朗運動的影響在不互相干預之模擬。並且假設模擬的粒子很小，故忽略粒子間相互碰撞的情況，僅考慮粒子受週遭流體碰撞所造成的影響的前提下去做相關的模擬。而模擬所需的相關參數可由文獻得到，如表 4-1 所示。再輸入相關參數之後，我們嘗試模擬五千個粒子在無外力作用的純布朗運動，整個過程如圖 4-1 所示。

### 4.1 無外力之布朗運動模擬

#### 4.1.1 一維純布朗運動模擬

如圖4-2(a)，一開始粒子由原點靜止狀態釋放，隨著時間增加，粒子會受布朗運動的影響而開始運動，故粒子會隨機的向左或右移動，使得整體的濃度向外擴散，如圖4-2(b)~4-2(d)所示，而造成濃度圖開始坍塌，故中央的濃度一開始會急遽下降如圖4-3。但是然後經過一段時間之後，粒子的分佈會呈現比較穩定的狀態，如圖4-2(e)~4-2(f)所示，所以中央濃度下降趨勢也開始趨緩如圖4-3。而由圖4-4(a)~4-4(d)可看在所有的時間  $\mu \approx 0$ 、 $\sigma \approx \sqrt{2Dt}$ 、 $Sk \approx 0$  及  $Kur \approx 0$  的值都非常的接近常態分佈的標準值。可知粒子呈現常態分佈的狀況，這個結果也文獻相符合。

#### 4.1.2 二維純布朗運動之模擬

同理，一開始粒子由原點靜止狀態釋放，如圖4-5(a)。隨著時間增加，粒子會受布朗運動的影響而開始運動，故粒子會隨機的向四周移動，造成

整體濃度的向外擴散，如圖4-5(b)~4-5(d)所示，所以中央的濃度一開始會急遽下降如圖4-6。但是然後經過一段時間之後，粒子的濃度便會呈現相較於一開始穩定的狀態，如圖4-5(e)~4-5(f)所示，所以中央濃度下降趨勢也開始趨緩如圖4-6。而由圖4-7(a)~4-7(d)可看在所有的時間的平均位置  $\mu_x \approx 0$ 、 $\mu_y \approx 0$ ，標準差  $\sigma_x \approx \sqrt{2Dt}$ 、 $\sigma_y \approx \sqrt{2Dt}$ ，偏態系數  $Sk_x \approx 0$ 、 $Sk_y \approx 0$  及峰態系數  $Kur_x \approx 0$ 、 $Kur_y \approx 0$  的值都非常的接近常態分佈的標準值。可知粒子呈現常態分佈的狀況，此結果與文獻相符合。

### 4.1.3 三維純布朗運動之模擬

同理，一開始粒子由原點靜止狀態釋放，如圖4-8(a)。隨著時間增加，粒子會受布朗運動的影響而開始運動，故粒子會隨機的向四面八方移動，造成整體濃度的向外擴散，如圖4-8(b)~4-8(d)所示，所以中央的濃度一開始會急遽下降如圖4-9。但是然後經過一段時間之後，粒子的濃度便會呈現相較於一開始穩定的狀態，如圖4-8(e)~4-8(f)所示，所以中央濃度下降趨勢也開始趨緩如圖4-9。而由圖4-10(a)~4-10(d)可看在所有的時間的平均位置  $\mu_x \approx 0$ 、 $\mu_y \approx 0$ 、 $\mu_z \approx 0$ ，標準差  $\sigma_x \approx \sqrt{2Dt}$ 、 $\sigma_y \approx \sqrt{2Dt}$ 、 $\sigma_z \approx \sqrt{2Dt}$ ，偏態系數  $Sk_x \approx 0$ 、 $Sk_y \approx 0$ 、 $Sk_z \approx 0$  及峰態系數  $Kur_x \approx 0$ 、 $Kur_y \approx 0$ 、 $Kur_z \approx 0$  的值都非常的接近常態分佈的標準值。可知粒子呈現常態分佈的狀況，此結果與文獻相符合。

## 4.2 有磁場之布朗運動模擬

由之前(2-18b)式的推導知道粒子產生的微小變化量與磁力有關，由文獻知道單位體積的磁力可表示為

$$f_m = \mu_0 M \nabla H$$

其中  $\mu_0$  代表真空導磁率(vacuum permeability)， $\nabla H$  代表磁力場梯度。

即粒子所受的磁力可表示為

$$F_m = f_m \cdot \nabla$$

其中  $\nabla$  代表粒子的體積。

若假設磁場線性分佈如下

$$f_m = \mu_0 H_0 r$$

其中  $H_0$  磁場強度有關、 $r$  代表距離原點的位置。

將上兩式帶入(2-18b)式並整理可得

$$\Delta r_m = \frac{1}{2m} [\mu_0 H_0 r \nabla + F_d(t)] \Delta t^2 + v_0 \Delta t \quad (4-1)$$

由於

$$\rho = \frac{m}{\nabla}$$

其中  $\rho$  代表粒子之比重。

故(4-1)式可修改成

$$\Delta r_m = \frac{1}{2\rho} \mu_0 H_0 r \Delta t^2 + \frac{1}{2m} F_d(t) \Delta t^2 + v_0 \Delta t \quad (4-2)$$

故我們可以藉由上式來模擬粒子受限性分佈磁場之影響。

#### 4.2.1 加入不同強度磁場之模擬

若假設模擬所用的粒子為鐵磁粒子，其比重為  $\rho_{Fe} = 7800 \text{ kg/m}^3$ ，而磁場強度以  $H_0 = (C \times 80) / (7.5 \times 10^{-3}) \text{ Oe}$  表示，下面將透過改變不同  $C$  值去模擬不同強度之磁場下磁性粒子運動之結果。

若控制磁場的參數  $C=0.78$  很小，即磁場強度很小，所以磁場所產生的磁力對粒子所造成的影響遠小於布朗運動對粒子造成的影響，故粒子幾乎不受磁力的影響，如圖 4-11(a)~ 4-11(f)所示，所以粒子分佈情況與 4.1.2 節中所模擬的純布朗運動非常相似(圖 4-5(a)~ 4-5(f))。而由圖 4-15(a)~4-15(d)中可以看出，無論位置的平均值，還是標準差，偏態系數、峰態系數之值接與純布朗運動之值即為接近，這代表著此磁場幾乎不對粒子產生任何影響。

若改變控制磁場的參數 $C=7.8 \times 10^1$ ，使得磁力對粒子造成的影響與布朗運動對粒子造成的影響相當，由圖 4-12(a)~ 4-12(f)可看出粒子開始受到磁力影響，所以外移的情況也就比純布朗運動而明顯。而由圖 4-15(b)中可得知一開始由於粒子位置較接近原點，所以受的磁力較小，故磁力的作用較小，故布朗運動影響較大，故一開始的峰值狀況為常態峰，見圖 4-15(d)。但是隨著時間增加，因布朗運動影響，造成粒子慢慢擴散開來，所以所受的磁力也越來越大，故由圖 4-15(a)可看出粒子後面平均位置開始急遽變化，而由圖 4-15(b)也可以得知粒子間的距離也相對越來越大，且從常態峰轉變成為低闊峰。

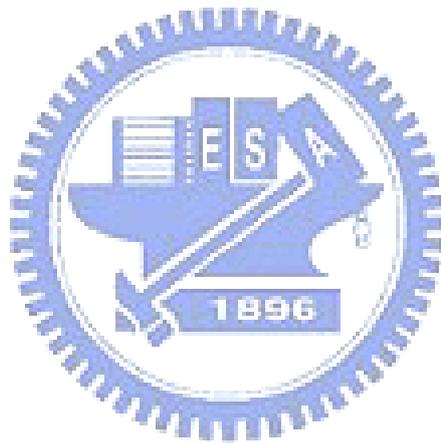
若控制磁場的參數 $C=7.8 \times 10^3$ 很大，即代表著磁場強度很大，所以磁場所產生的磁力對粒子所造成的影響遠大於布朗運動對粒子造成的影響，所以布朗運動的影響僅在一開始瞬間，而因為磁力相當的大，所以粒子一開始便產生很大的加速度，造成在很短的時間內粒子迅速的向四面散射出去，如圖 4-13(a)~ 4-13(f)所示，故會造成中央濃度迅速下降，如圖 4-14。而由圖 4-15(b)可得知粒子間離散的程度也相當的大，這也造成粒子的峰值狀況迅速發展成低闊峰，如圖 4-15(d)所示。

由於模擬磁力是位置的函數，且向外呈線性變大，故粒子在外圍所受的磁力更大，且方向向外，因此外圍粒子受磁力所造成的向外位移量大於布朗運動的位移量，故造成位置的平均值不在原點，如圖 4-16 所示，在相同 $C=7.8 \times 10^3$ 之值之下，因布朗運動的隨機性與不確定性，而造成受磁力影響之後有不同的偏向結果。

### 4.3 有溫差之布朗運動模擬

本節假設模擬時溫度呈線性分佈且溫差很大，即 $T=273 + \frac{1000}{10^{-5}}r$  k。

經模擬之後可以發現，因為溫度的不同，所以粒子的活躍程度也不同，故粒子之分佈情況會較分散，如圖 4-17(a)所示，標準差很明顯較標準值大很多。但是因溫度所造成的位移量沒方向性，不像前一節磁場所造成的位移量有方向性，故不會溫度差不會造成粒子的平均位置大量偏向，如圖 4-17(b)所示。



參數值	單位
Num=5000	個
$\rho_{\text{Fe}}=7800$	$\text{kg} / \text{m}^3$
$\rho_{\text{Oil}}=750$	$\text{kg} / \text{m}^3$
$B_k = 1.3801 \times 10^{-23}$	
$\text{Temp} = 273 + 17$	k
$\text{Mc} = 1.35 \times 10^{-2}$	$\text{cm}^2 / \text{sec}$
$C_c = 1.0$	
$a = 1 \times 10^{-6}$	m
$\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7}$	$T \cdot \text{m} / \text{A}$
$H_0 = (100 / (7.5 \times 10^{-3}) \times 80)$	Oe

表 4-1 模擬所使用的相關參數

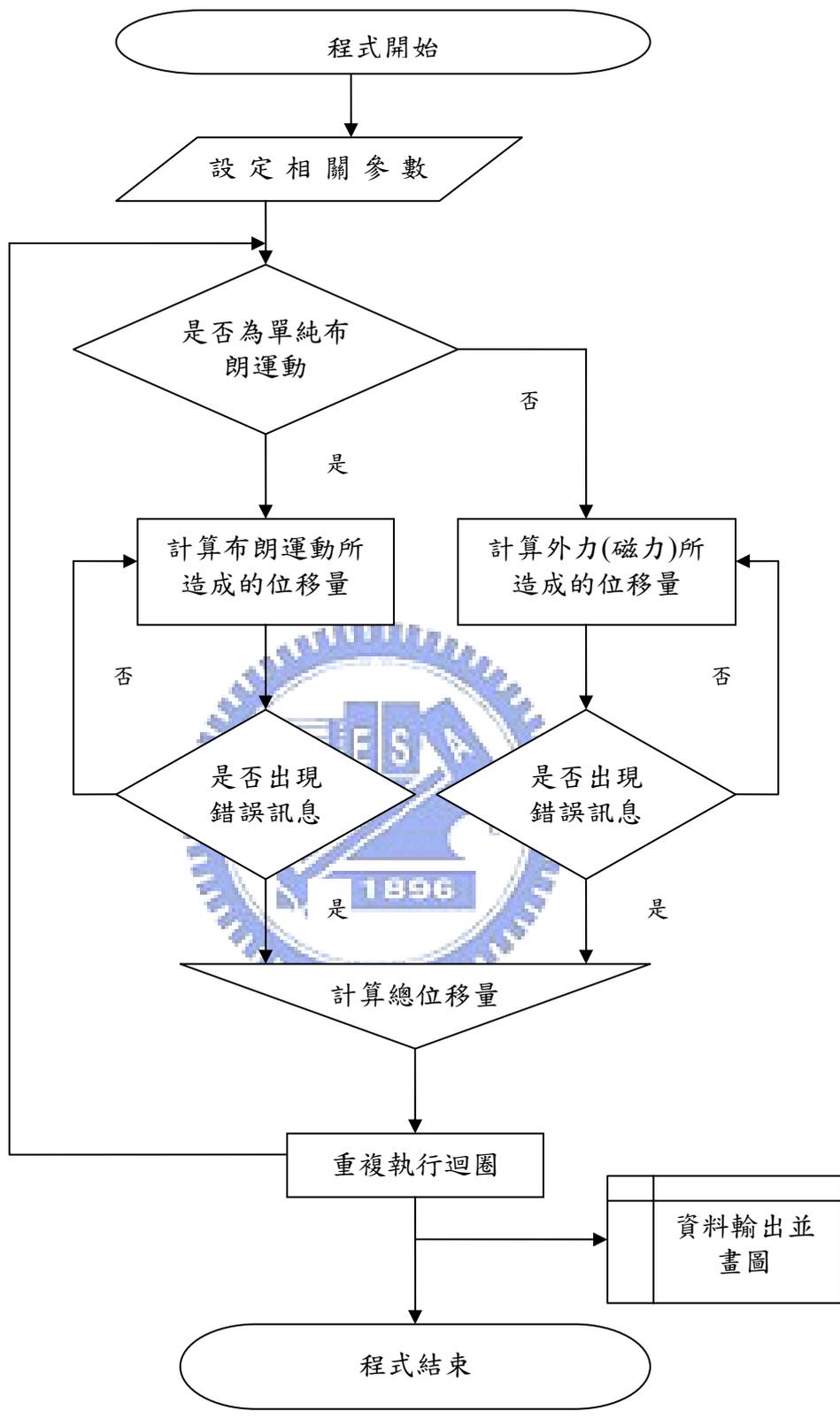


圖 4-1 程式執行流程圖



圖 4-2 時間  $t=0$ ，一維純布朗運動之模擬圖

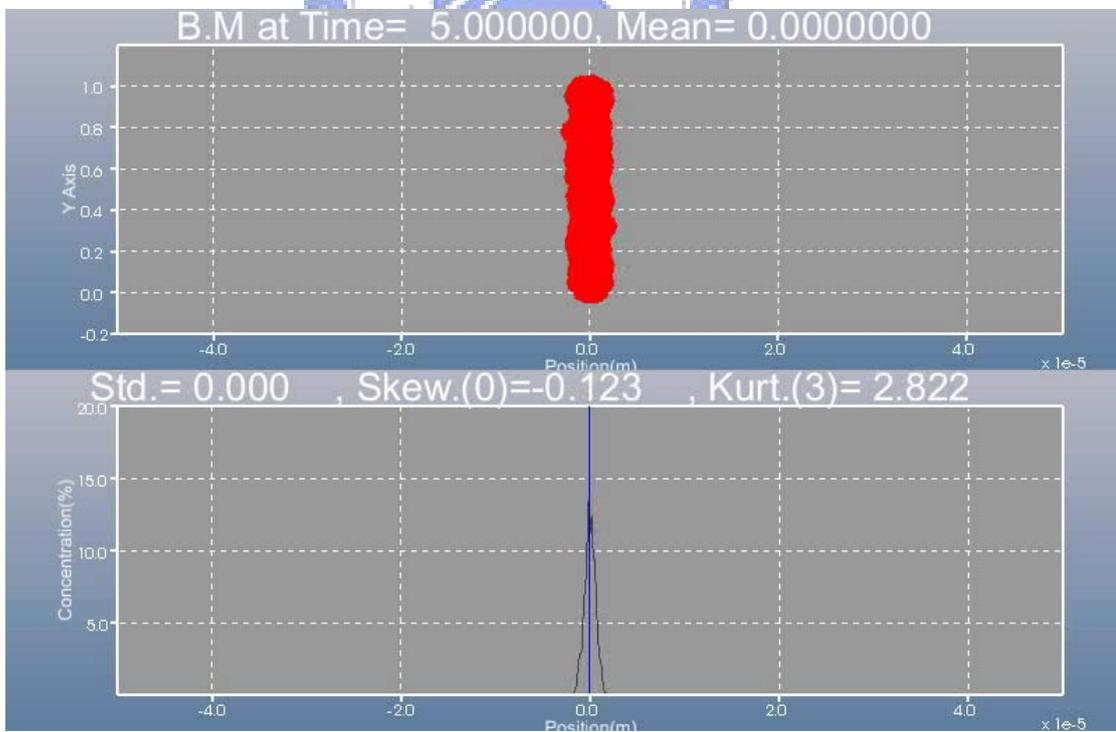


圖 4-3 時間  $t=5$ ，一維純布朗運動之模擬圖

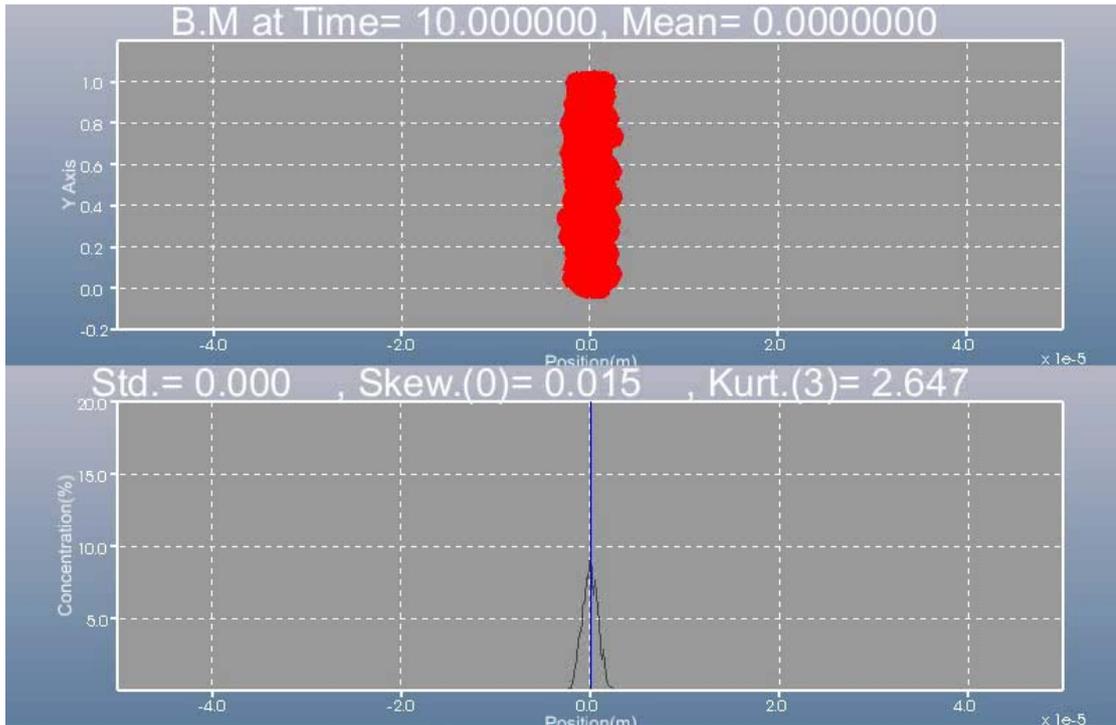


圖 4-4 時間  $t=10$  之一維純布朗運動之模擬圖

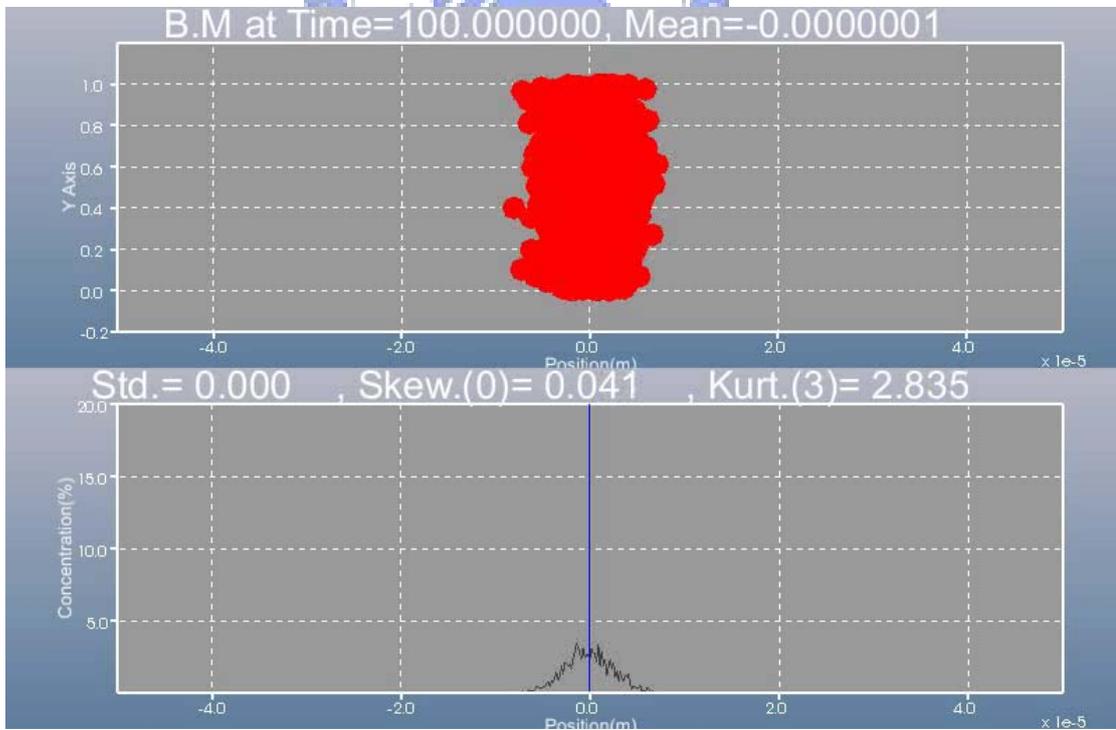


圖 4-5 時間  $t=100$ ，一維純布朗運動之模擬圖

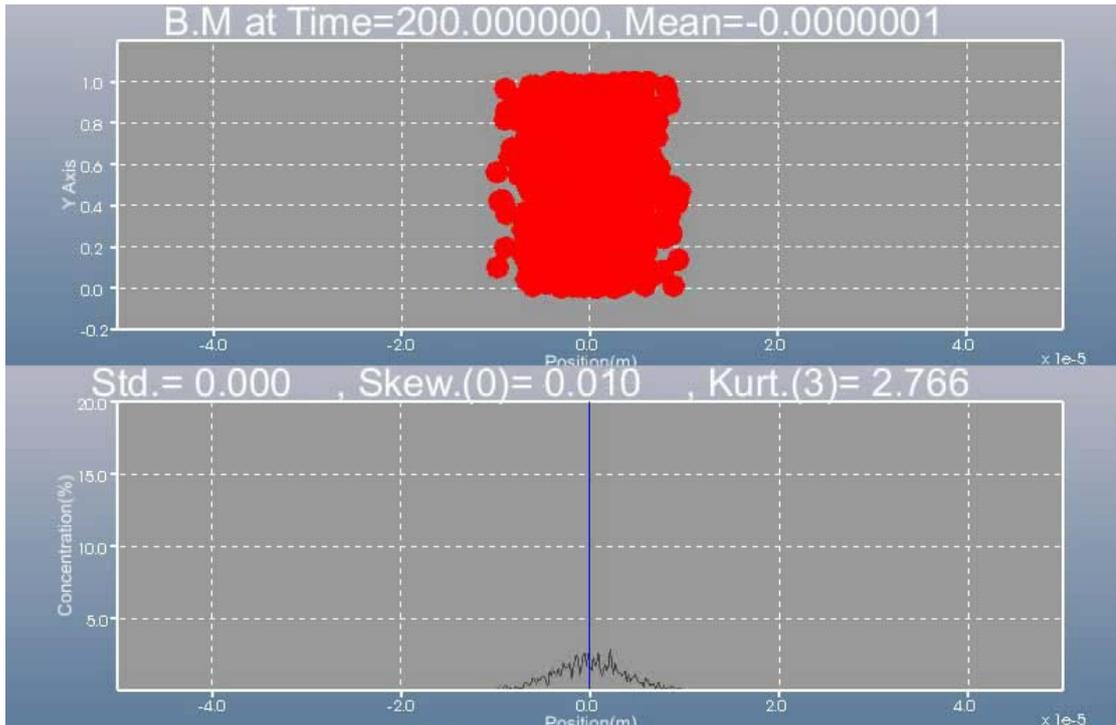


圖 4-6 時間  $t=200$ ，一維純布朗運動之模擬圖



圖 4-7 時間  $t=300$ ，一維純布朗運動之模擬圖

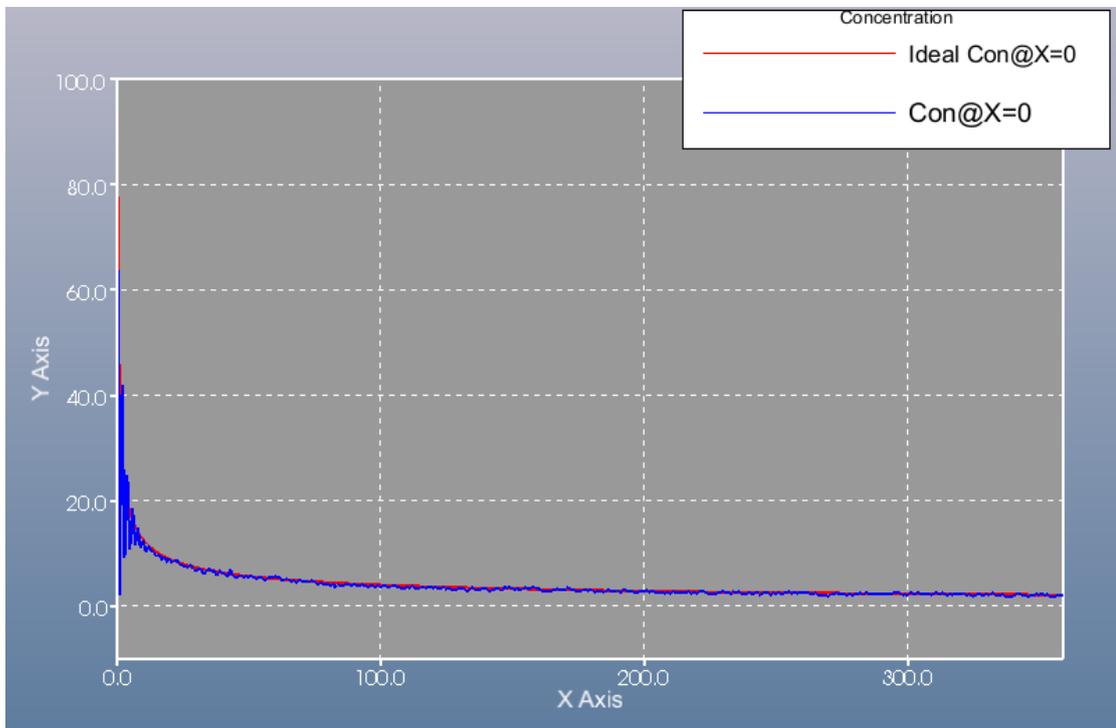


圖 4-8 一維布朗運動模擬之中央濃度圖

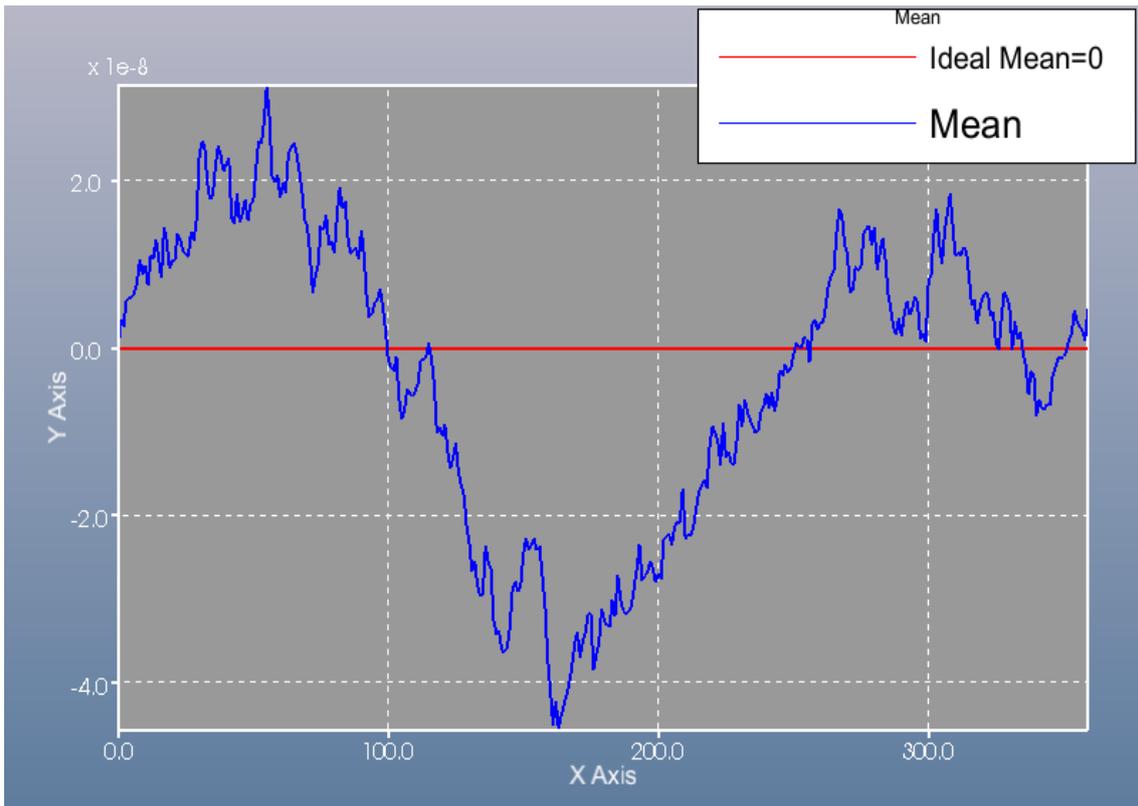


圖 4-9 一維布朗運動之時間與粒子位置關係圖

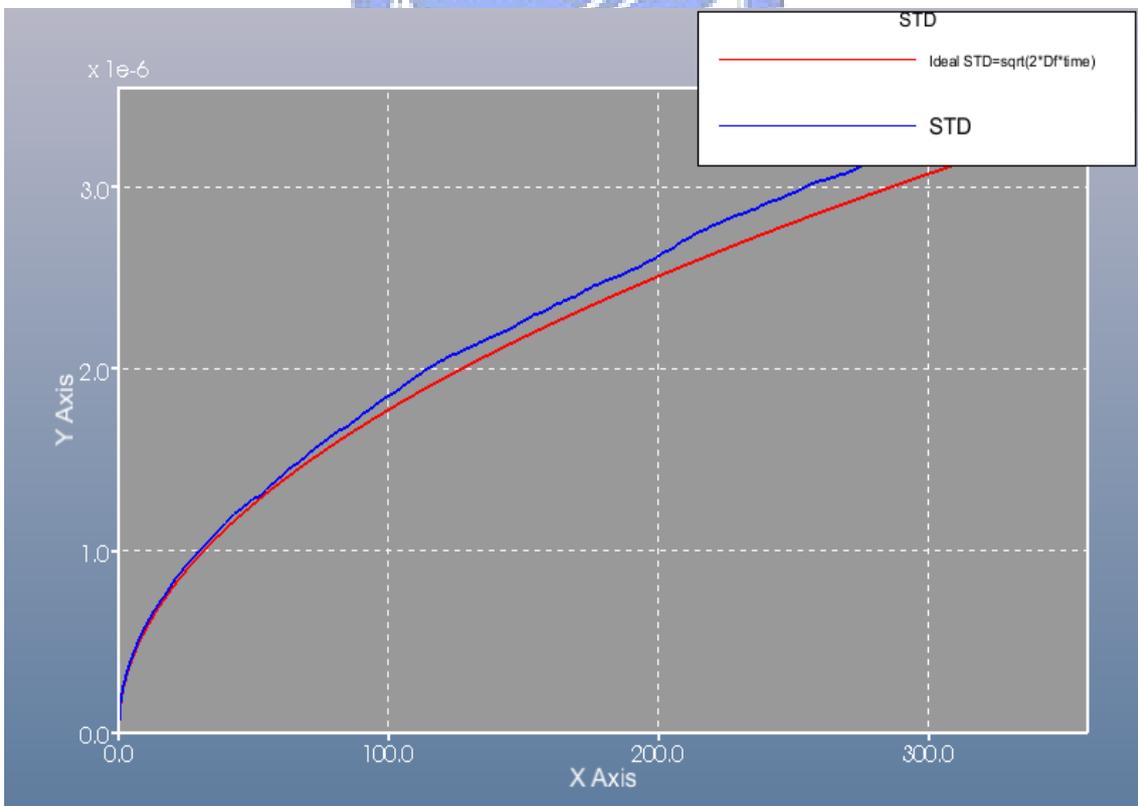


圖 4-10 一維布朗運動之時間與粒子標準差關係圖

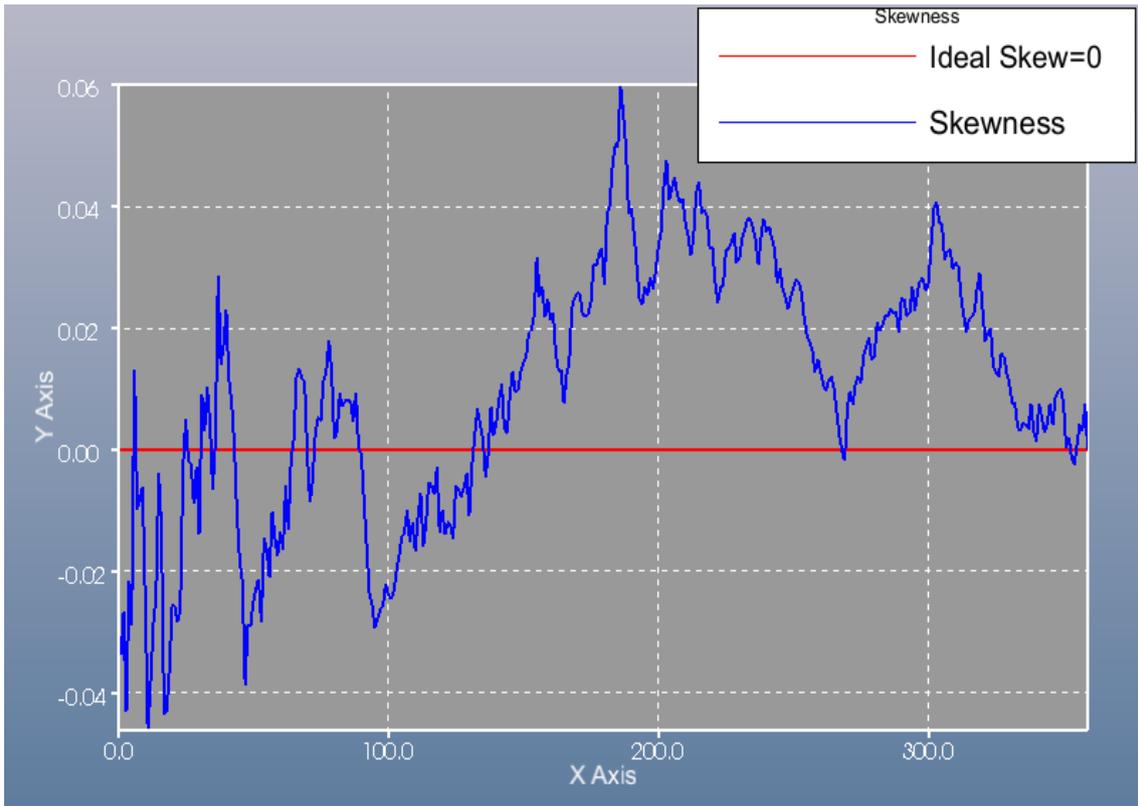


圖 4-11 一維布朗運動之時間與粒子偏態系數關係圖

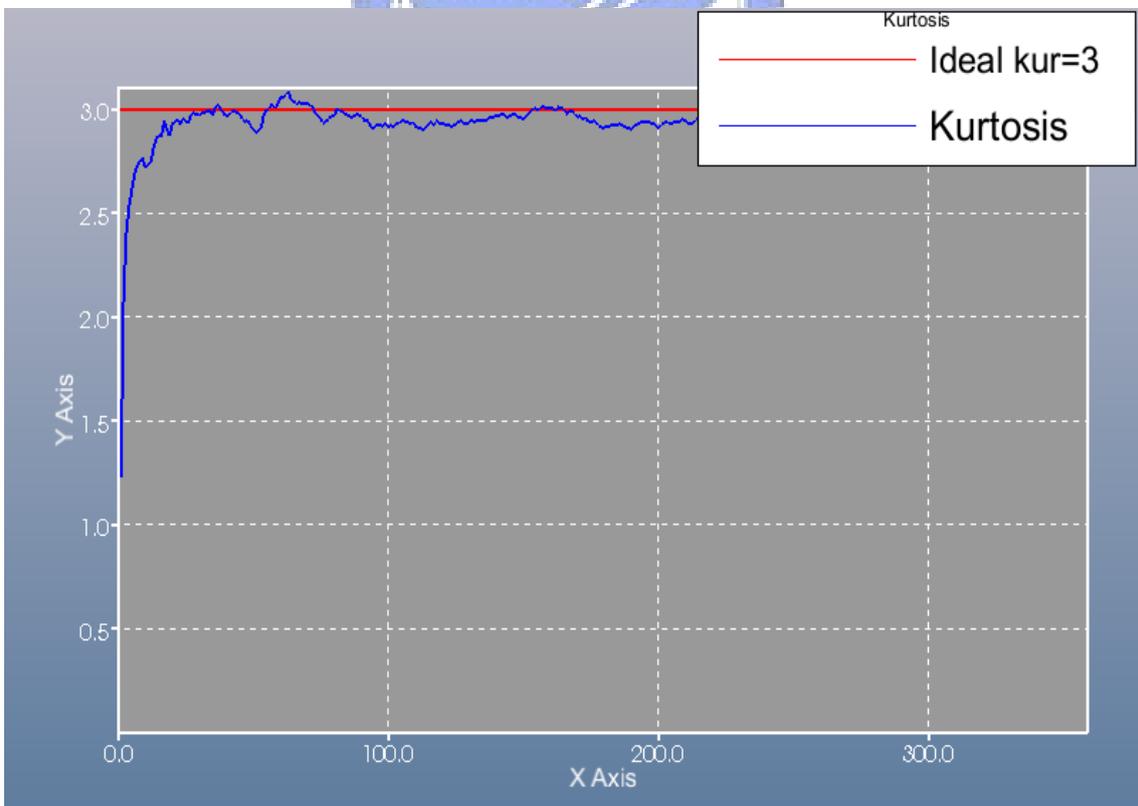


圖 4-12 一維布朗運動之時間與粒子峰態系數關係圖

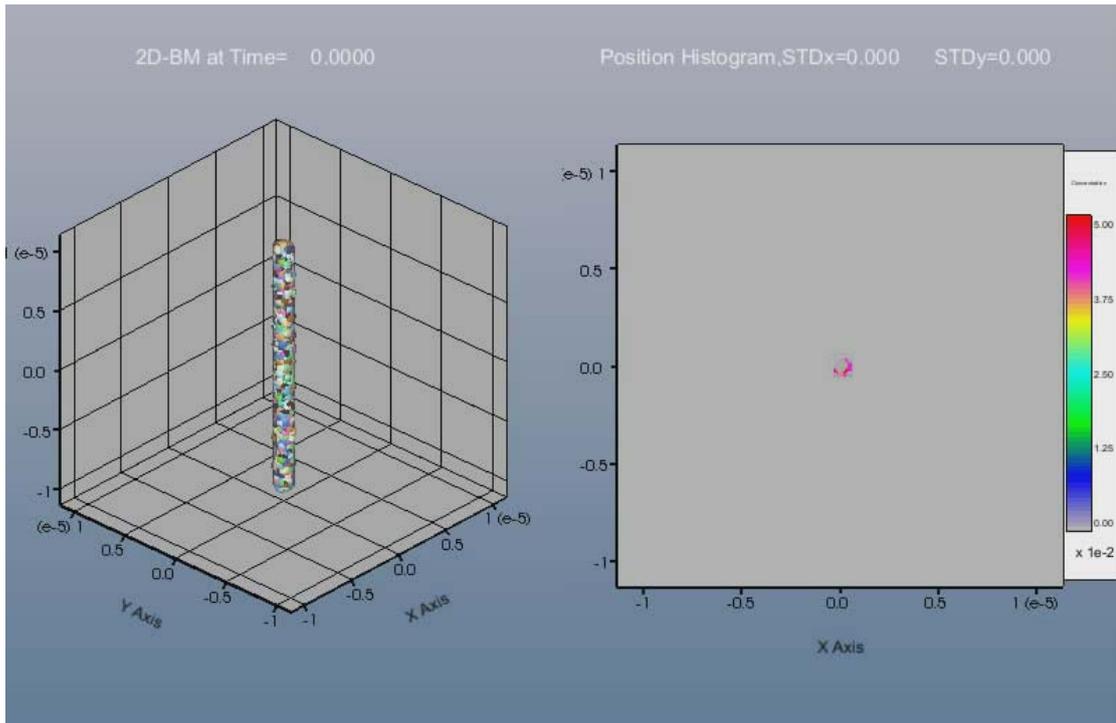


圖 4-13 時間  $t=0$ ，二維純布朗運動之模擬圖

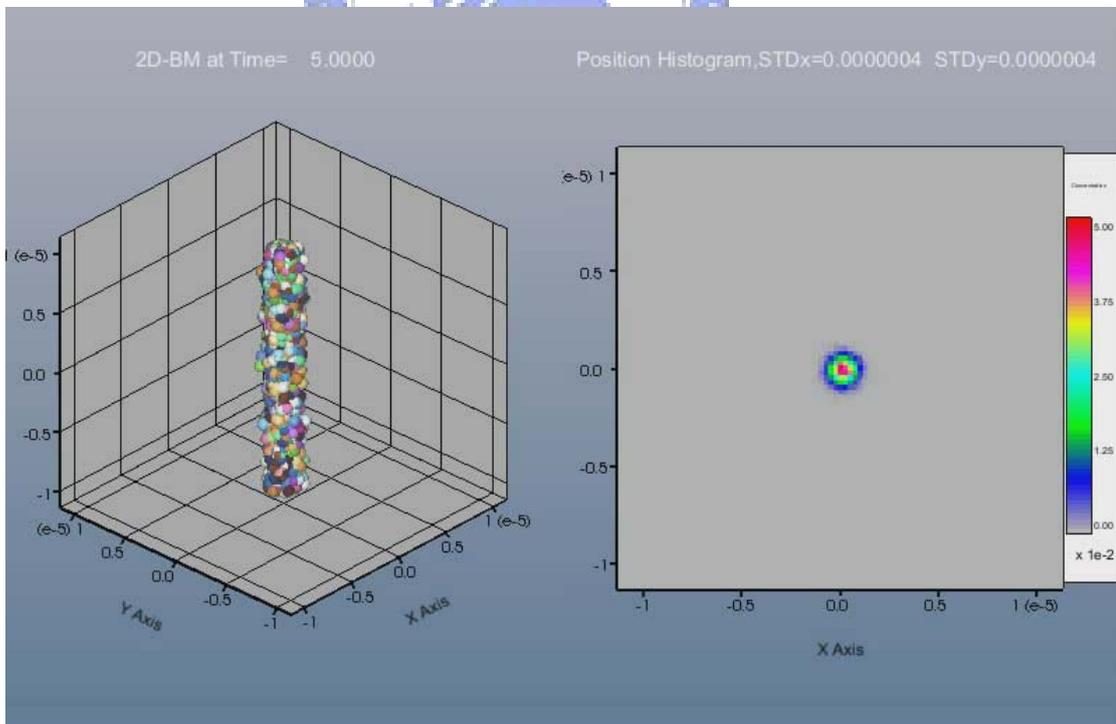


圖 4-14 時間  $t=5$ ，二維純布朗運動之模擬圖

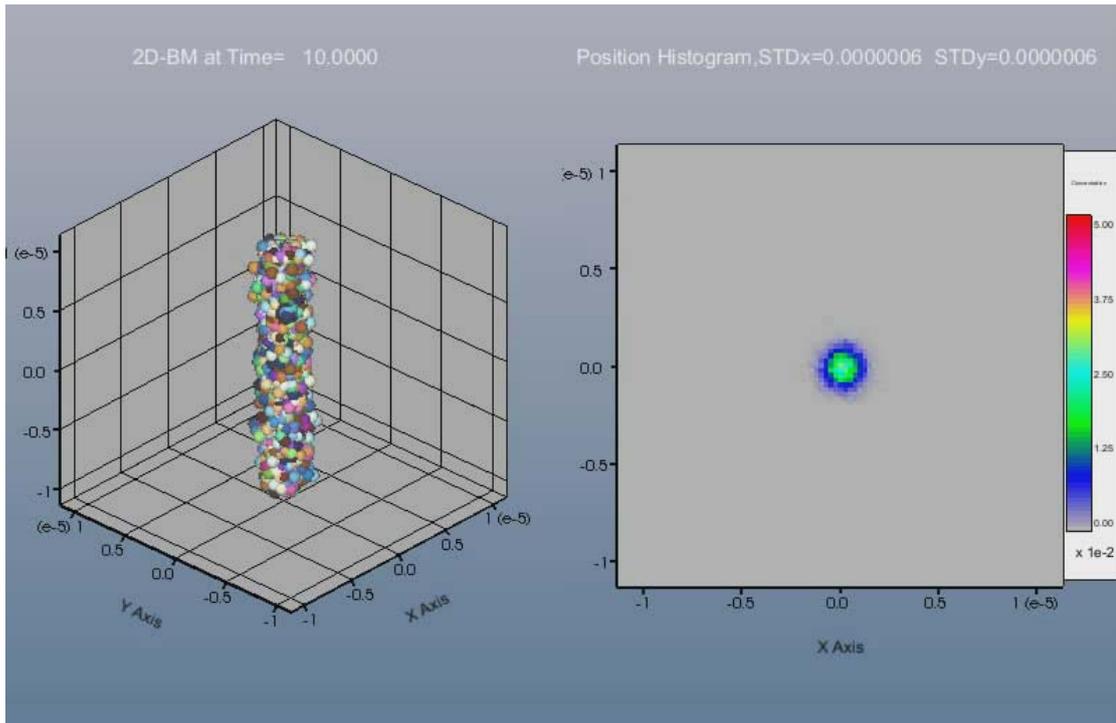


圖 4-15 時間  $t=10$ ，二維純布朗運動之模擬圖

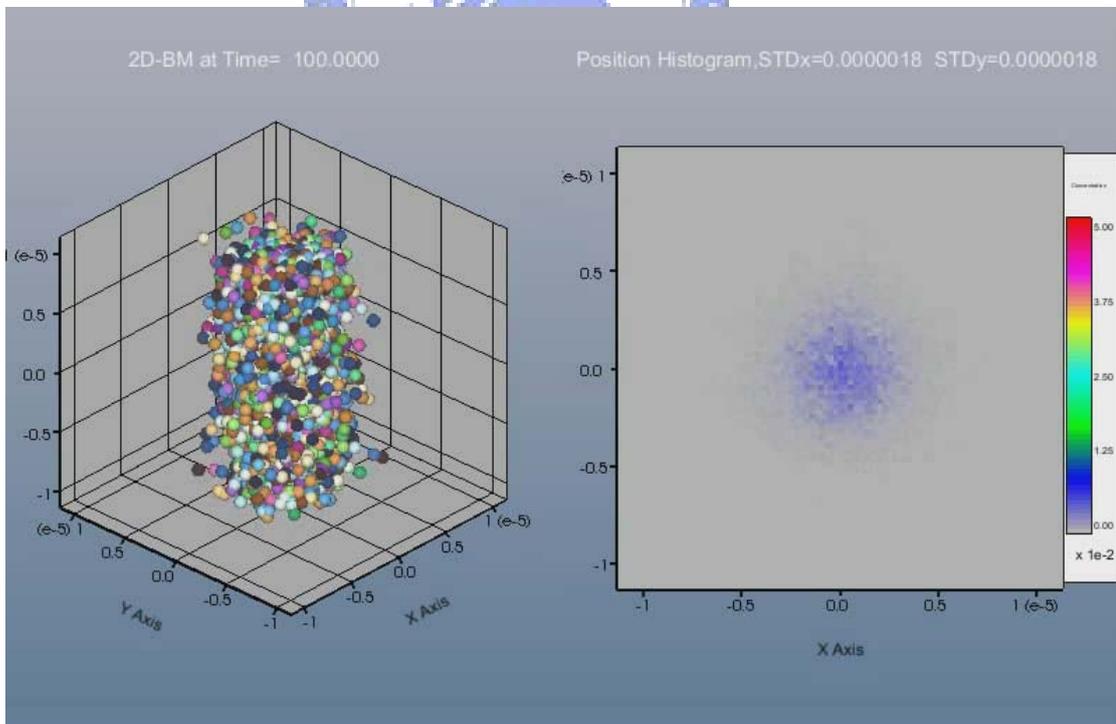


圖 4-16 時間  $t=100$ ，二維純布朗運動之模擬圖

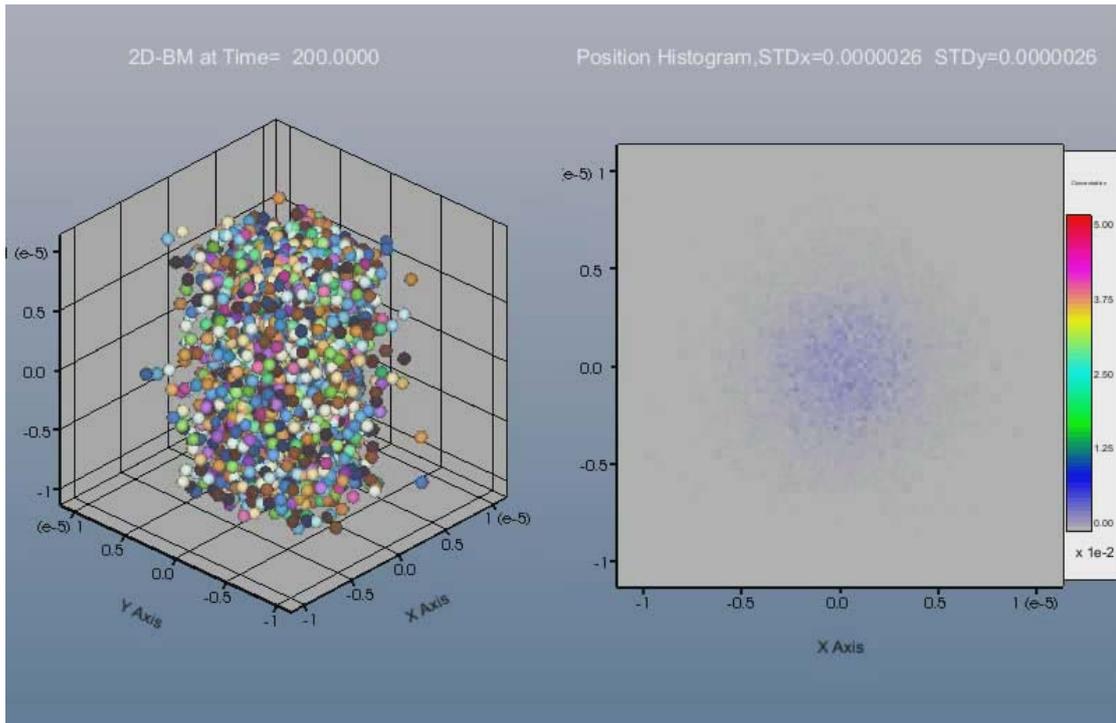


圖 4-17 時間  $t=200$ ，二維純布朗運動之模擬圖

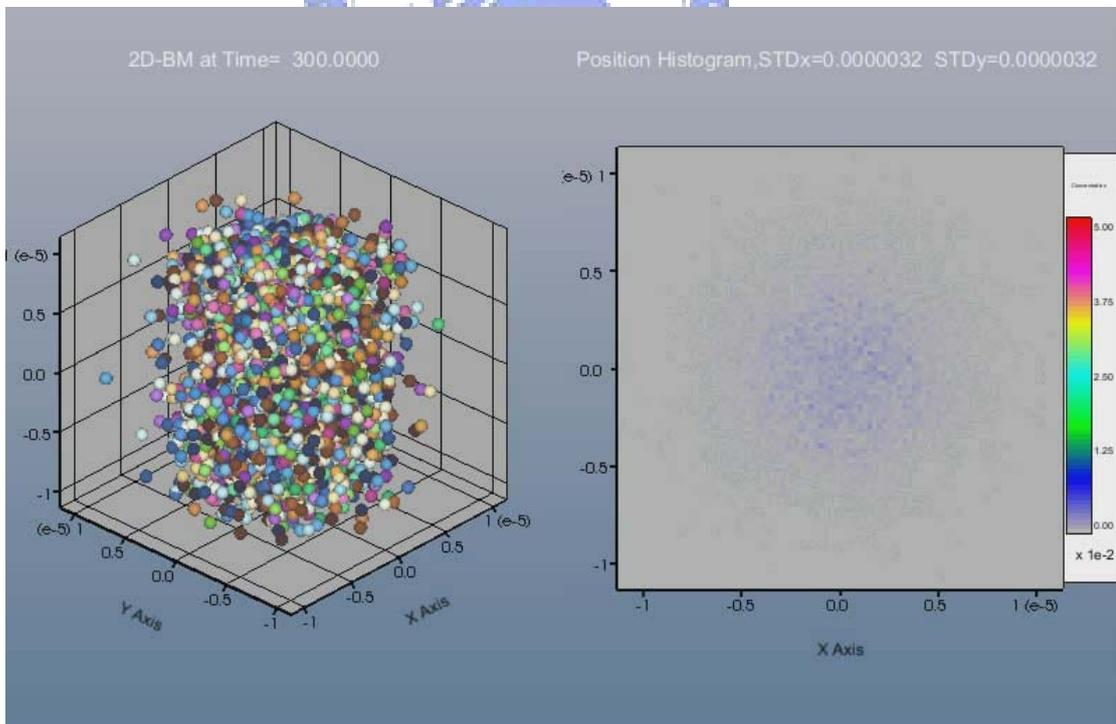


圖 4-18 時間  $t=300$ ，二維純布朗運動之模擬圖

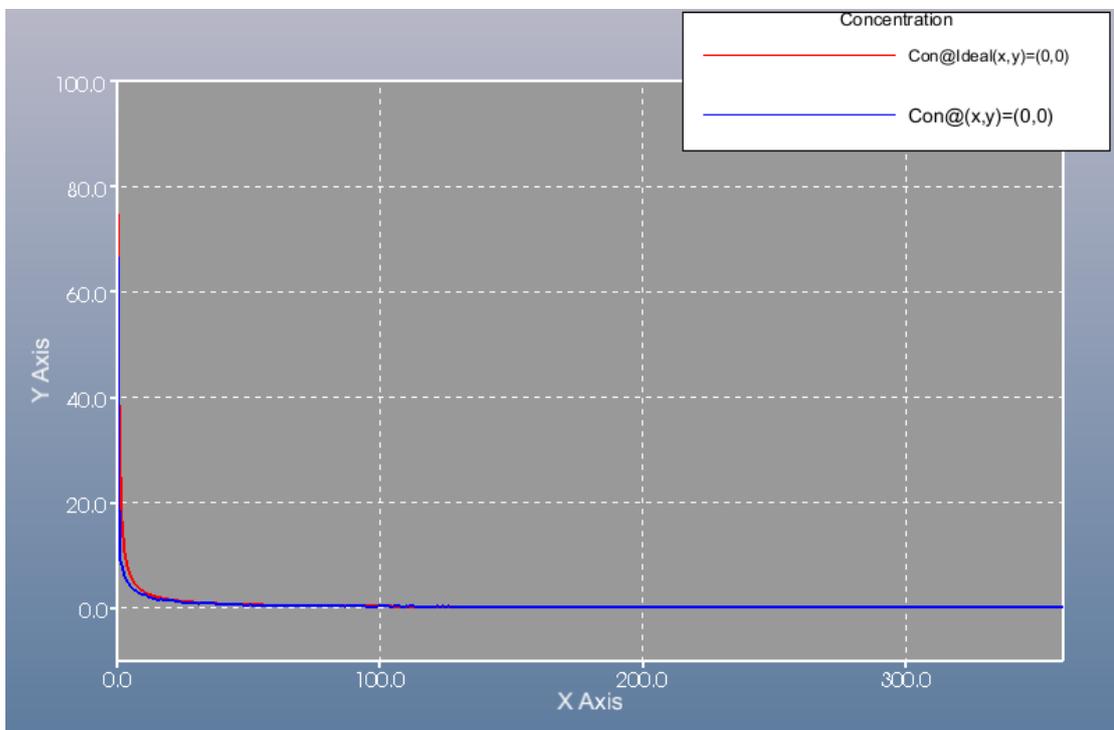


圖 4-19 二維布朗運動模擬之中央濃度圖



圖 4-20 二維布朗運動之時間與粒子位置關係圖

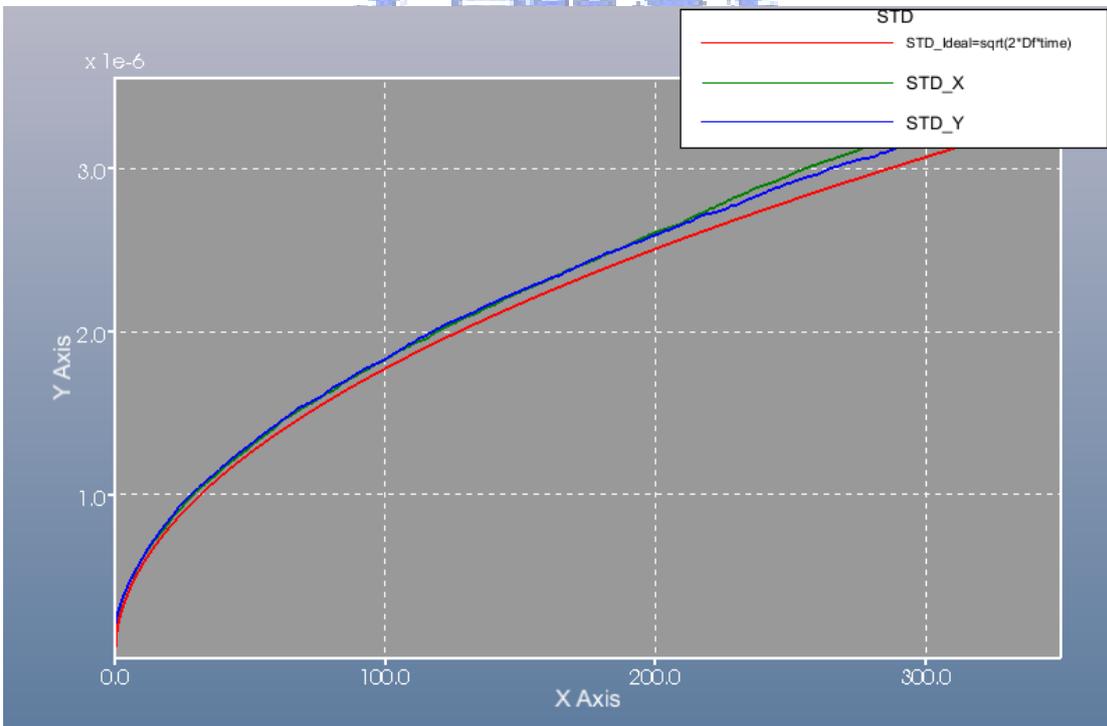


圖 4-21 二維布朗運動之時間與粒子標準差關係圖



圖 4-22 二維布朗運動之時間與粒子偏態系數關係圖

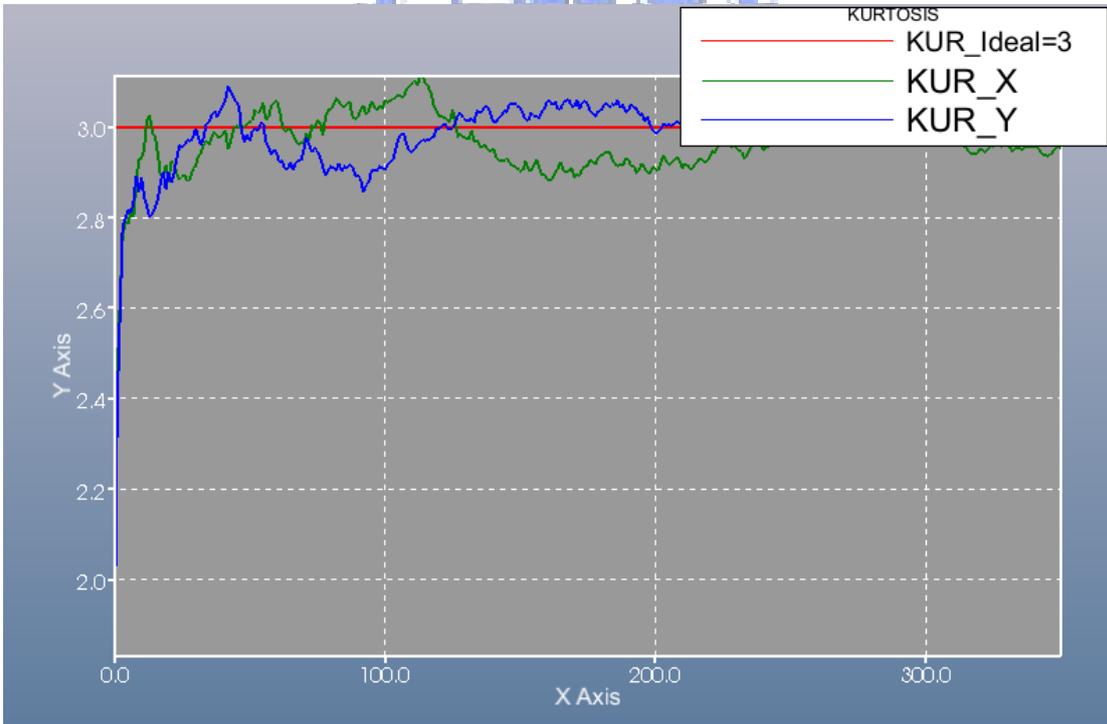


圖 4-23 二維布朗運動之時間與粒子峰態系數關係圖

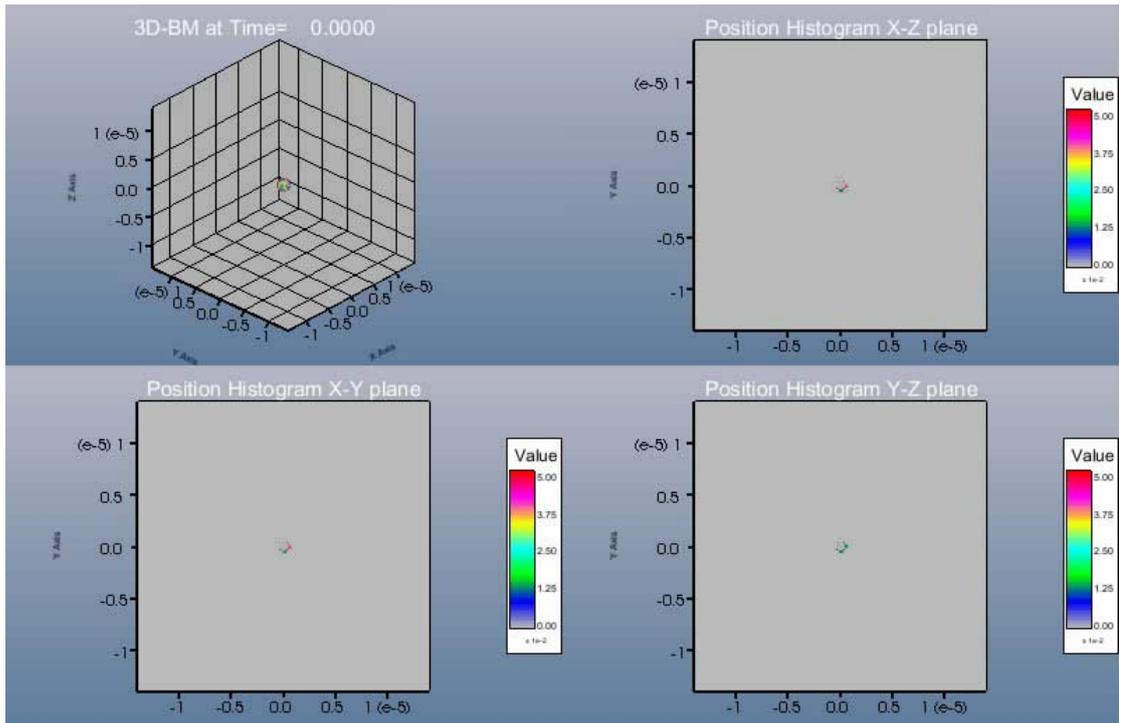


圖 4-24 時間  $t=0$ ，三維純布朗運動之模擬圖

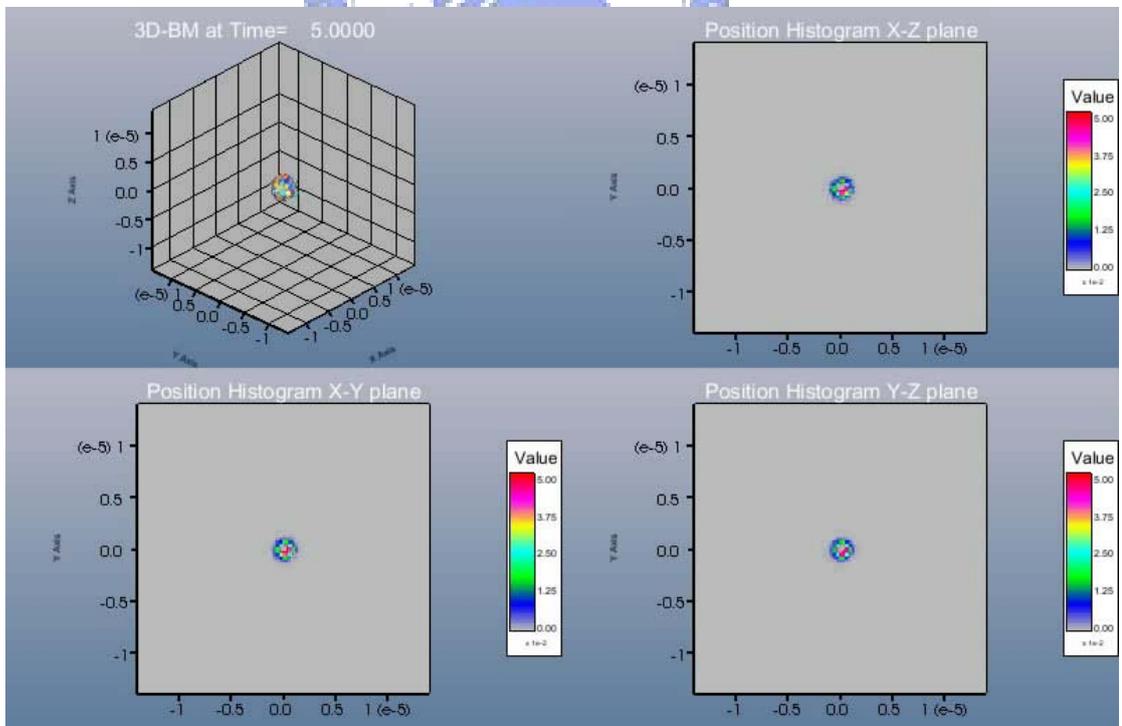


圖 4-25 時間  $t=5$ ，三維純布朗運動之模擬圖

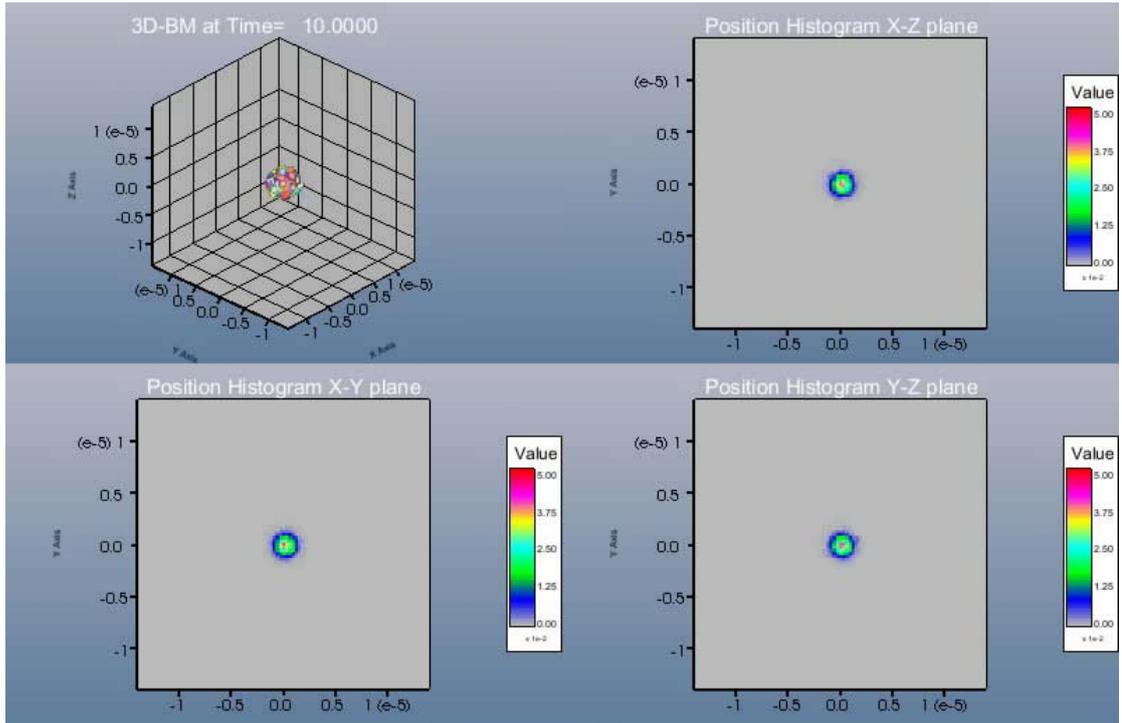


圖 4-26 時間  $t=10$ ，三維純布朗運動之模擬圖

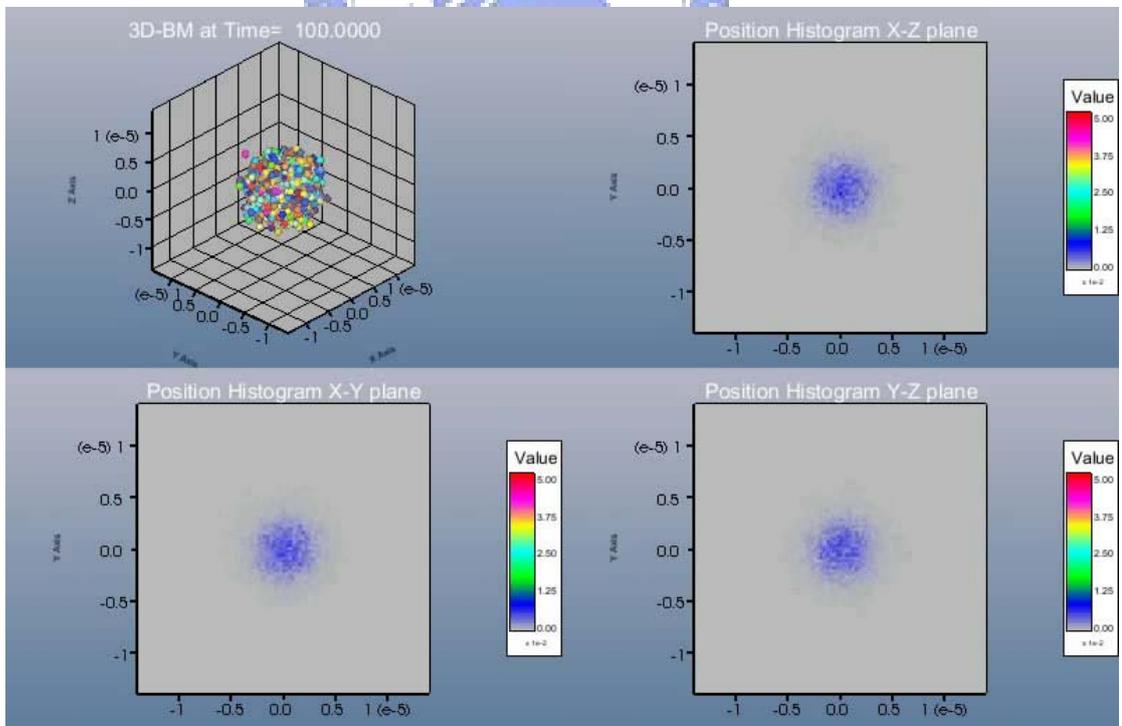


圖 4-27 時間  $t=100$ ，三維純布朗運動之模擬圖

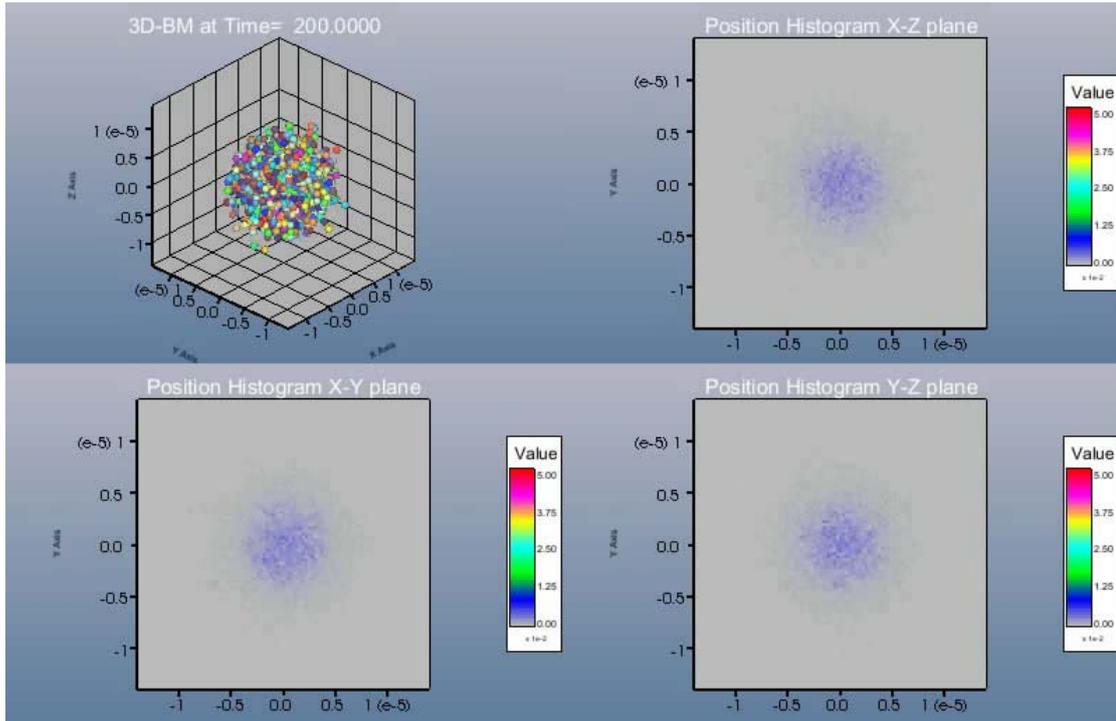


圖 4-28 時間  $t=200$ ，三維純布朗運動之模擬圖

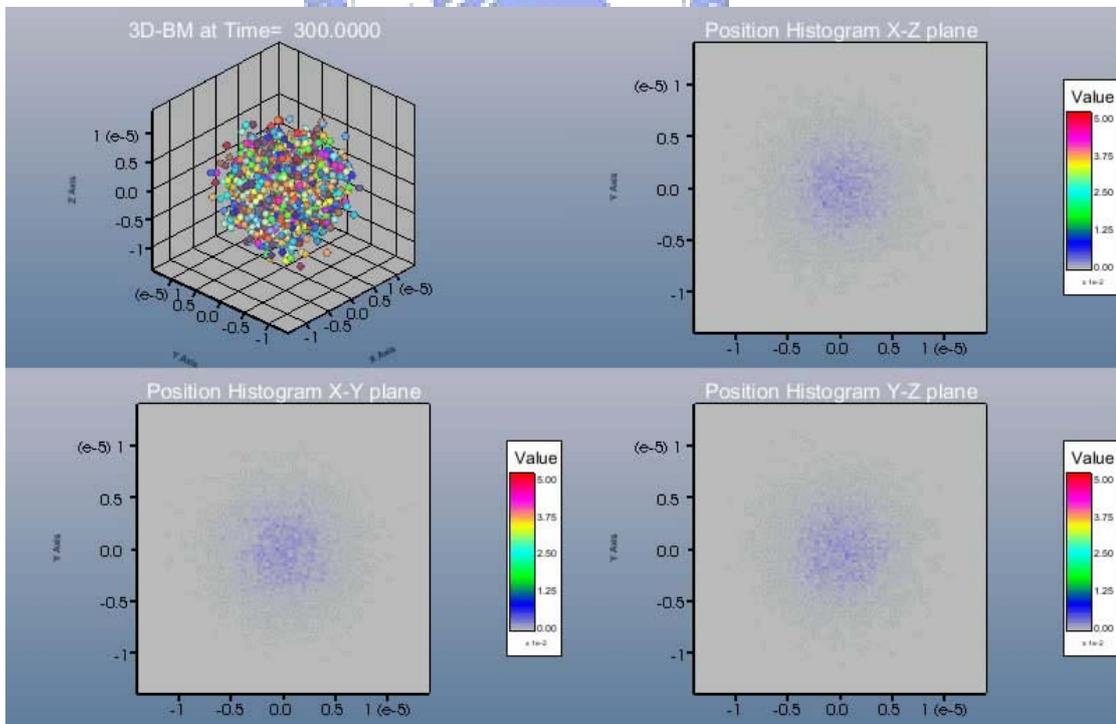


圖 4-29 時間  $t=300$ ，三維純布朗運動之模擬圖

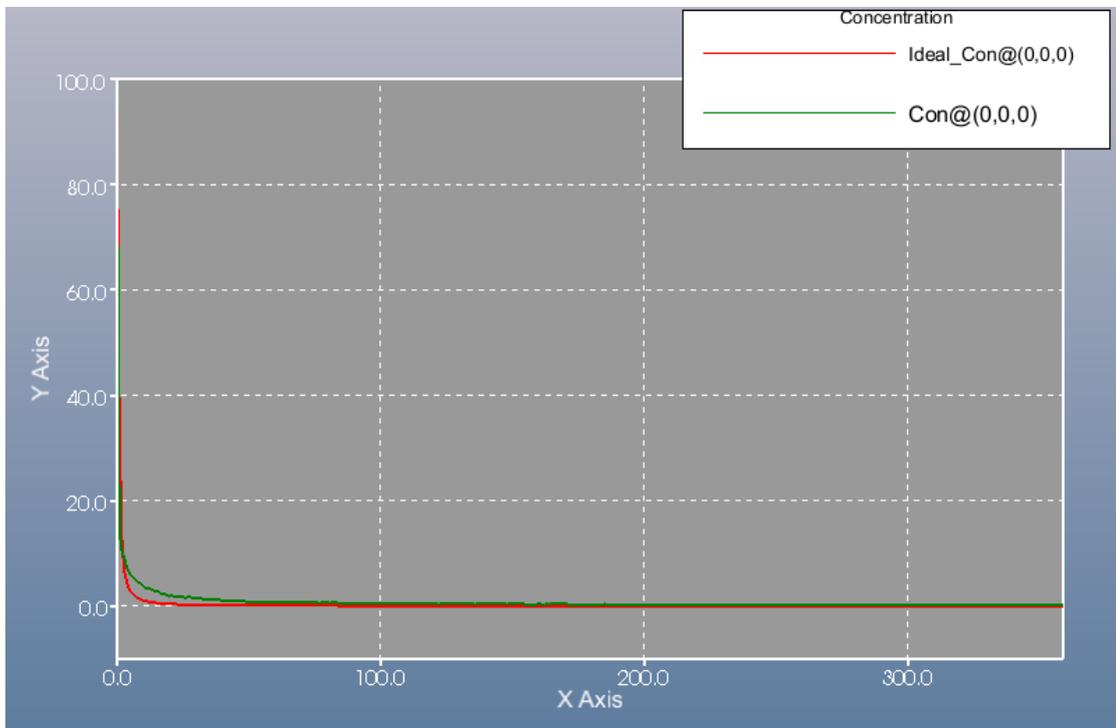


圖 4-30 三維布朗運動模擬之中央濃度圖



圖 4-31 三維布朗運動之時間與粒子位置關係圖

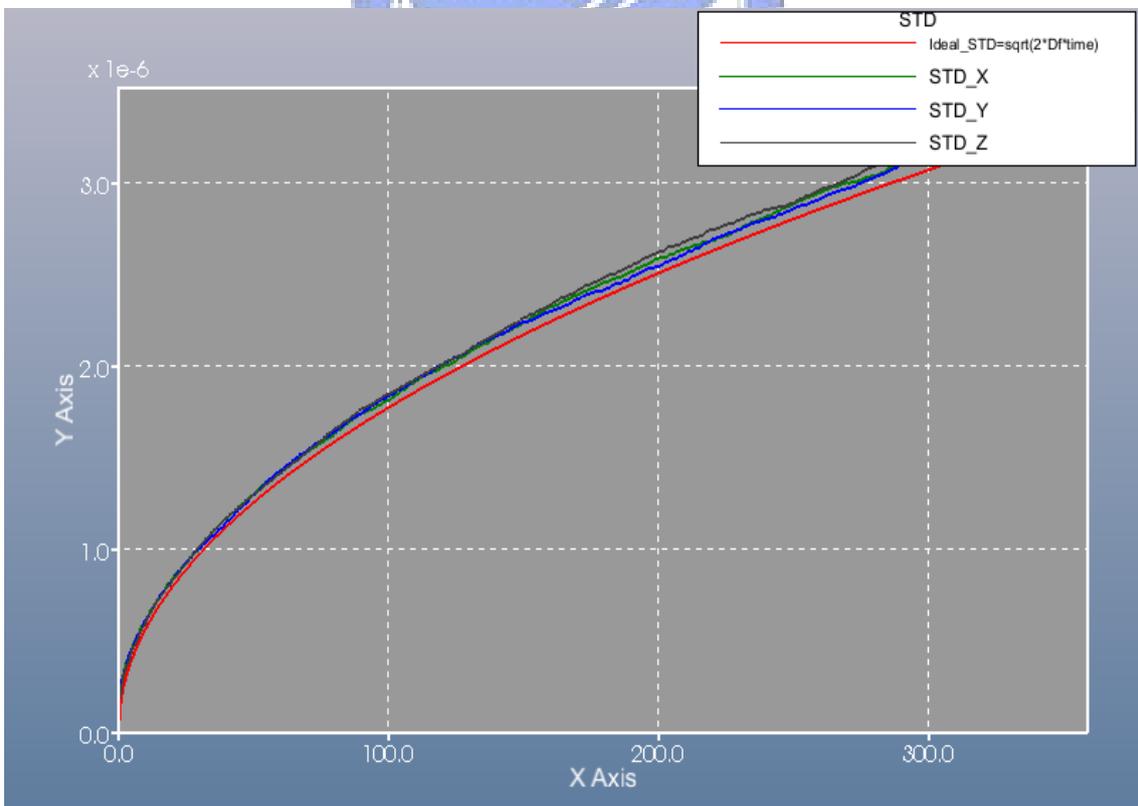


圖 4-32 三維布朗運動之時間與粒子標準差關係圖

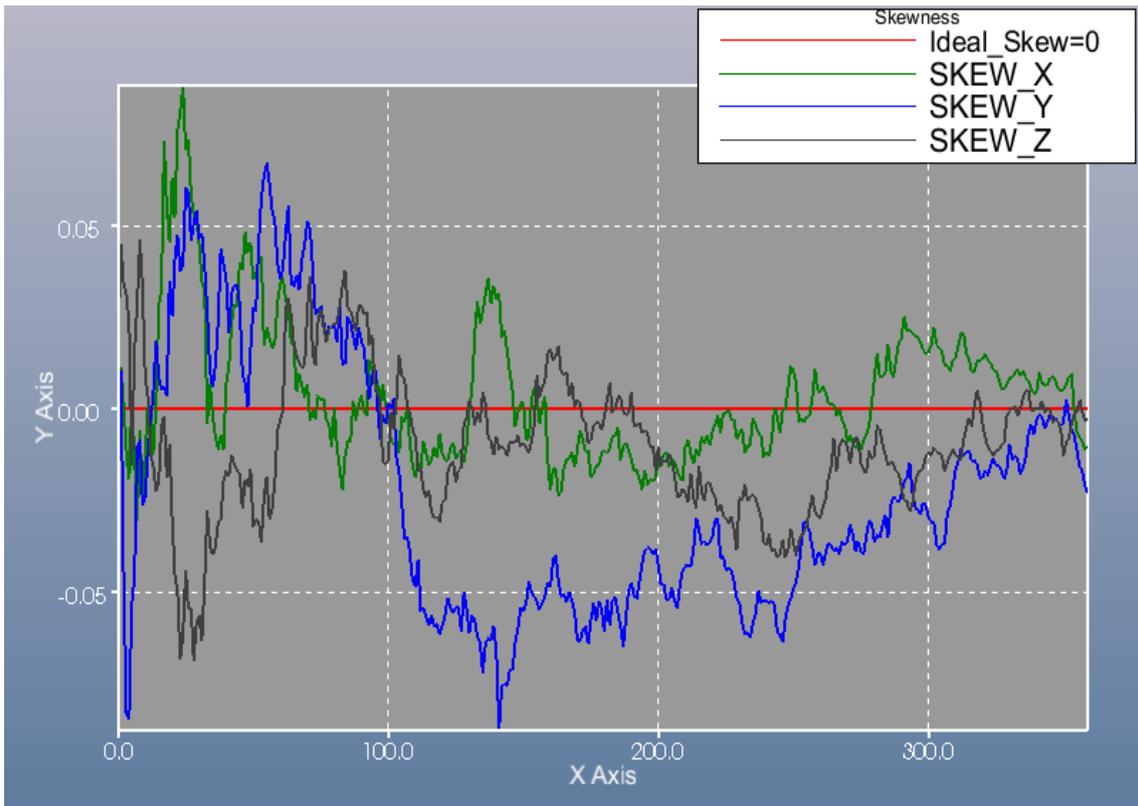


圖 4-33 三維布朗運動之時間與粒子偏態系數關係圖

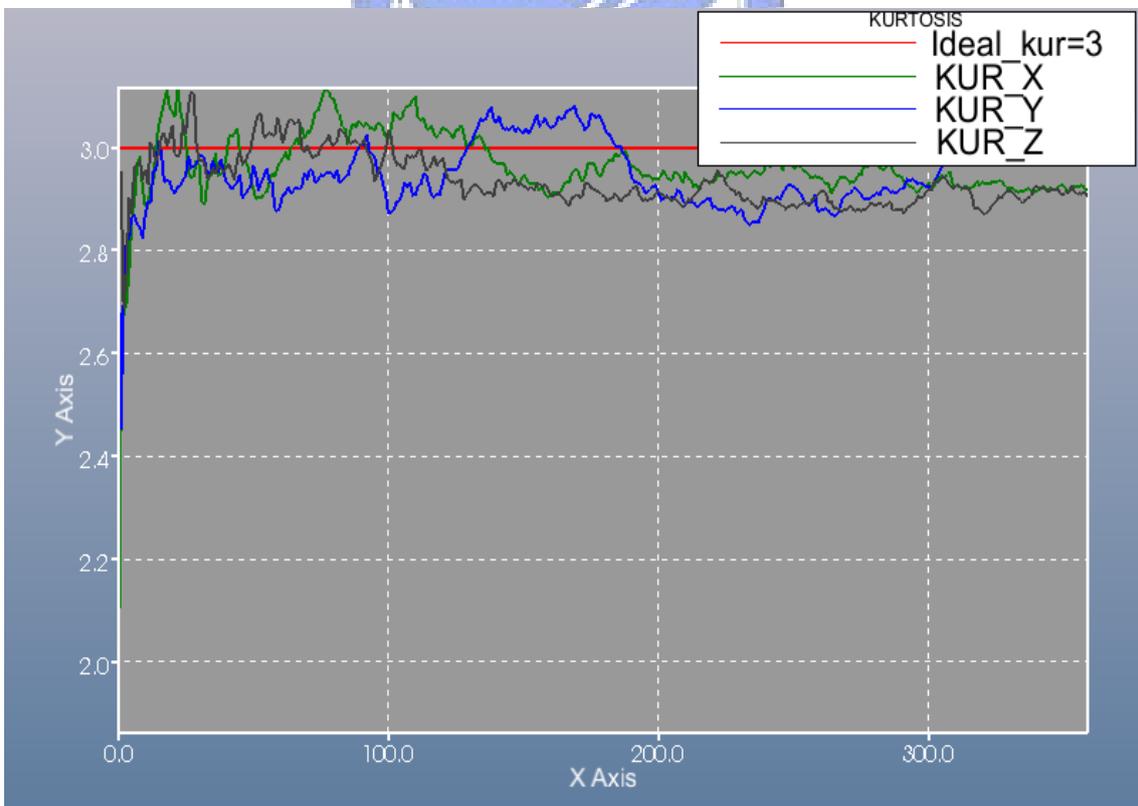


圖 4-34 三維布朗運動之時間與粒子峰態系數關係圖

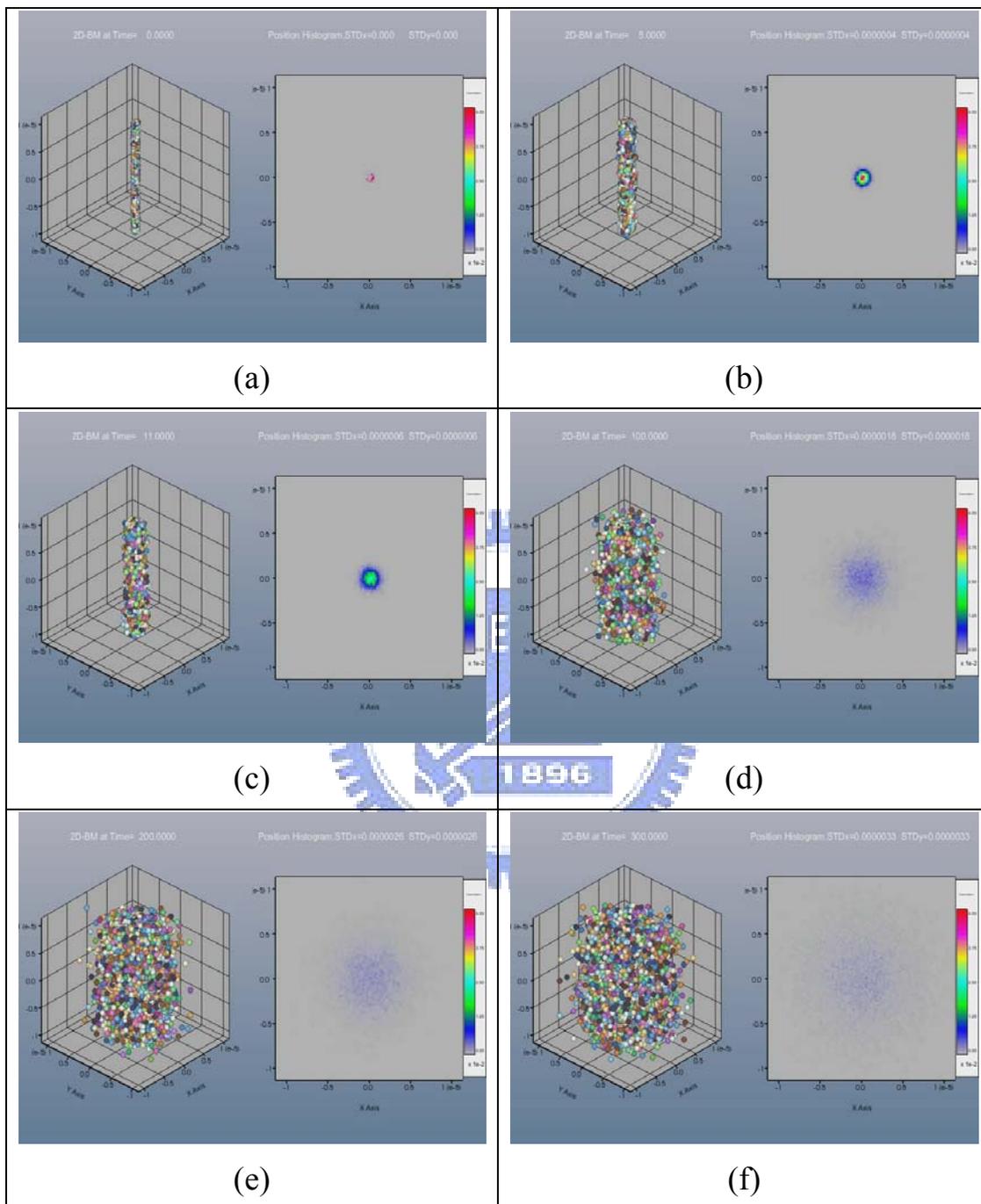


圖 4-35 二維布朗運動在磁力影響遠小於布朗運動之影響之模擬，(a)  $t=0$ 、(b)  $t=5$ 、(c)  $t=10$ 、(d)  $t=100$ 、(e)  $t=200$ 、(f)  $t=300$

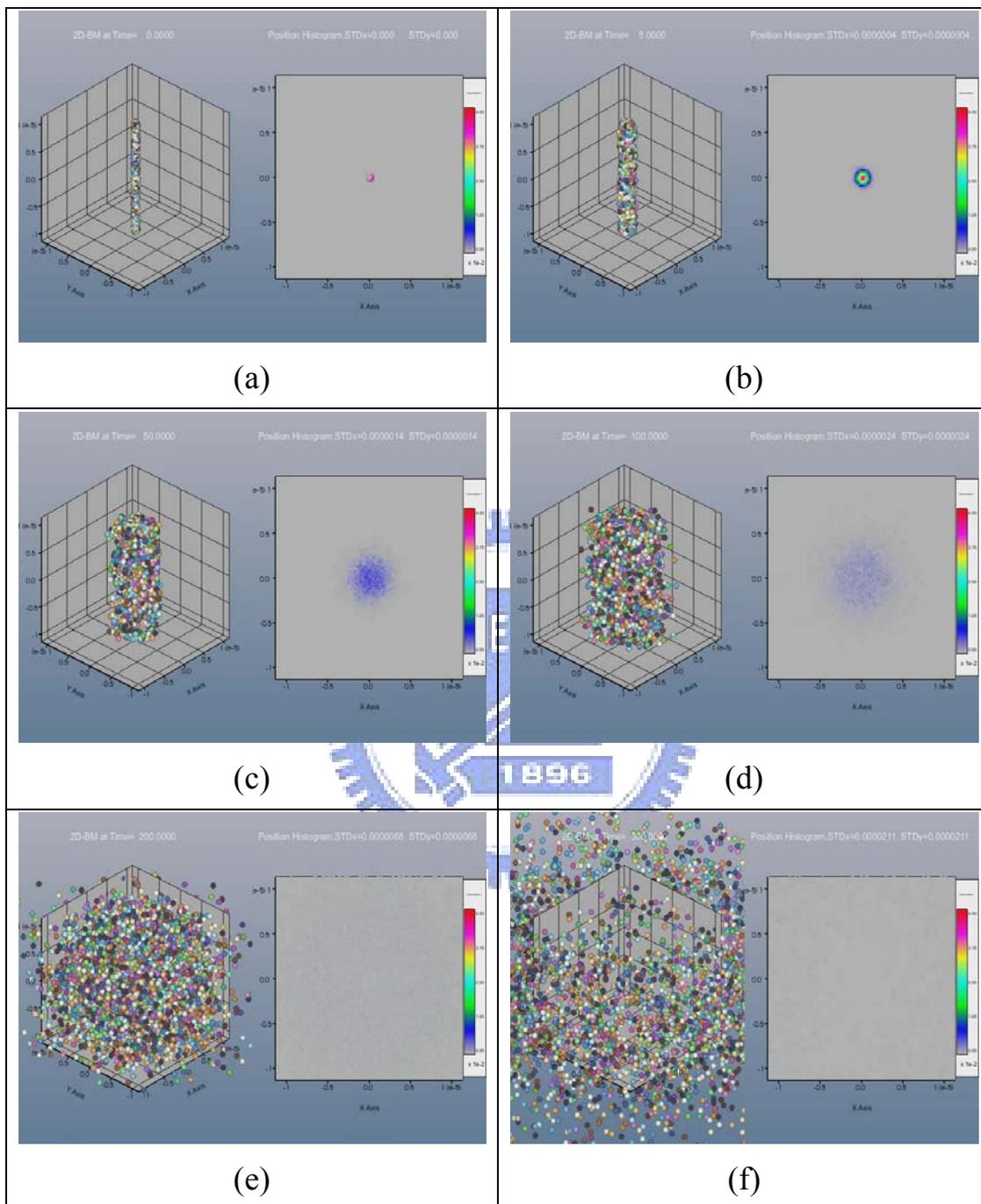


圖 4-36 二維布朗運動在磁力影響與布朗運動影響均重要之模擬，(a)  $t=0$ 、  
(b)  $t=5$ 、(c)  $t=10$ 、(d)  $t=100$ 、(e)  $t=200$ 、(f)  $t=300$

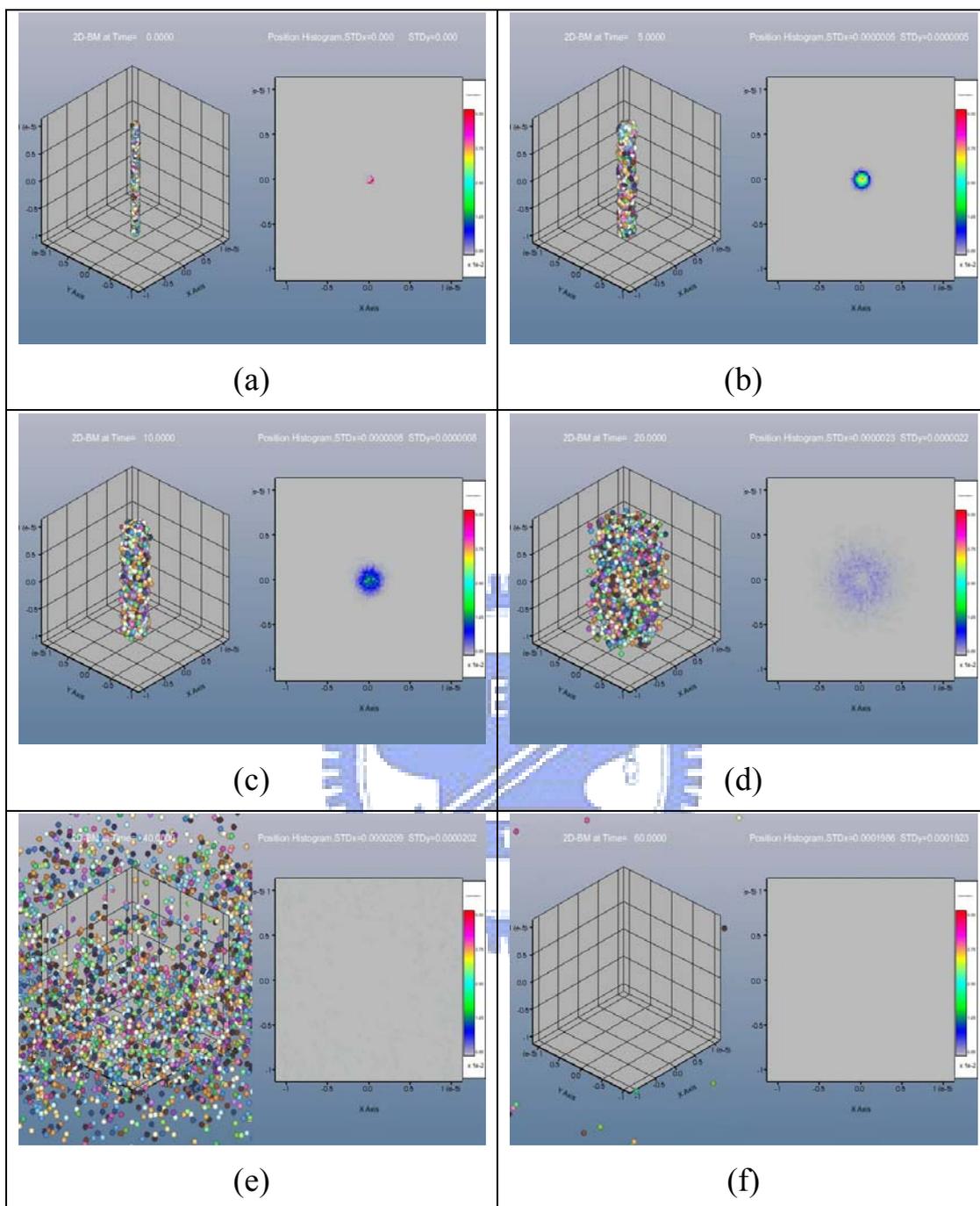


圖 4-37 二維布朗運動在磁力影響遠大於布朗運動之影響之模擬，(a)  $t=0$ 、  
 (b)  $t=5$ 、(c)  $t=10$ 、(d)  $t=100$ 、(e)  $t=200$ 、(f)  $t=300$

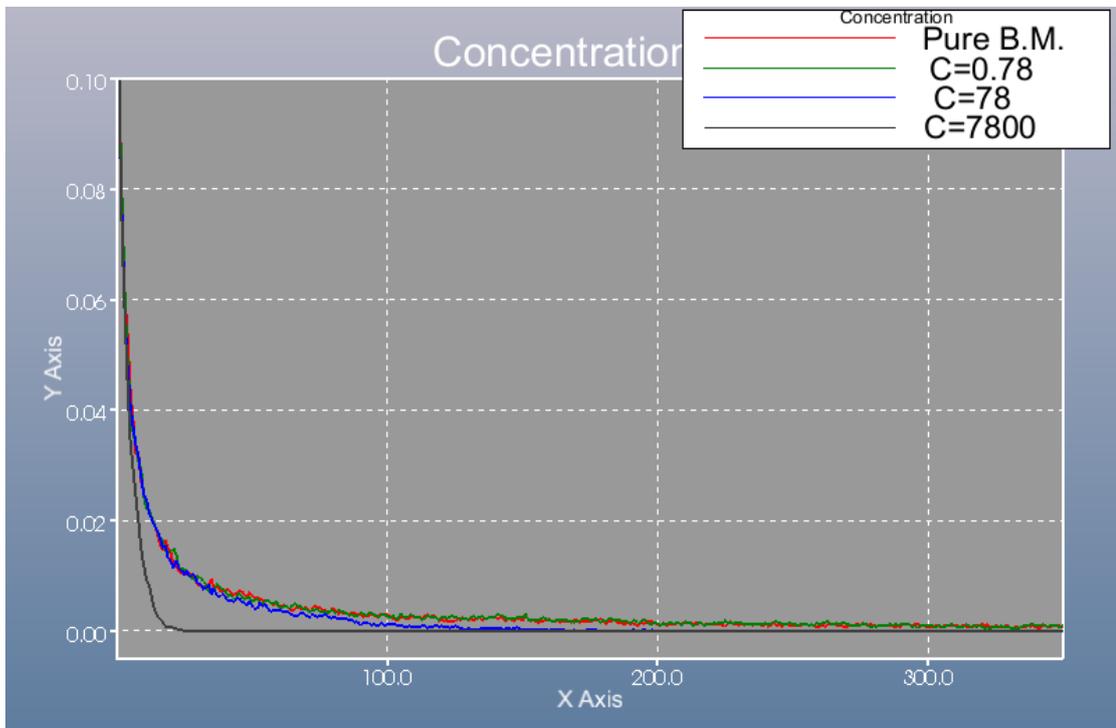


圖 4-38 二維布朗運動在不同磁場強度模擬之中央濃度圖

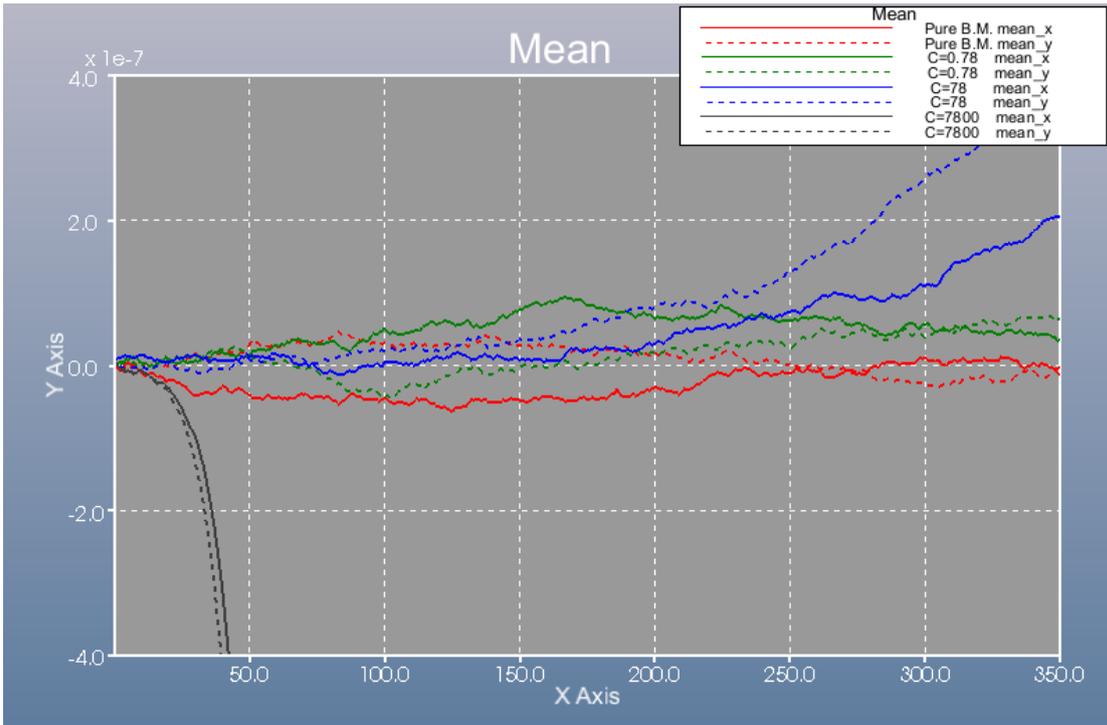


圖 4-39 不同磁場強度下的粒子平均位置與時間之比較圖

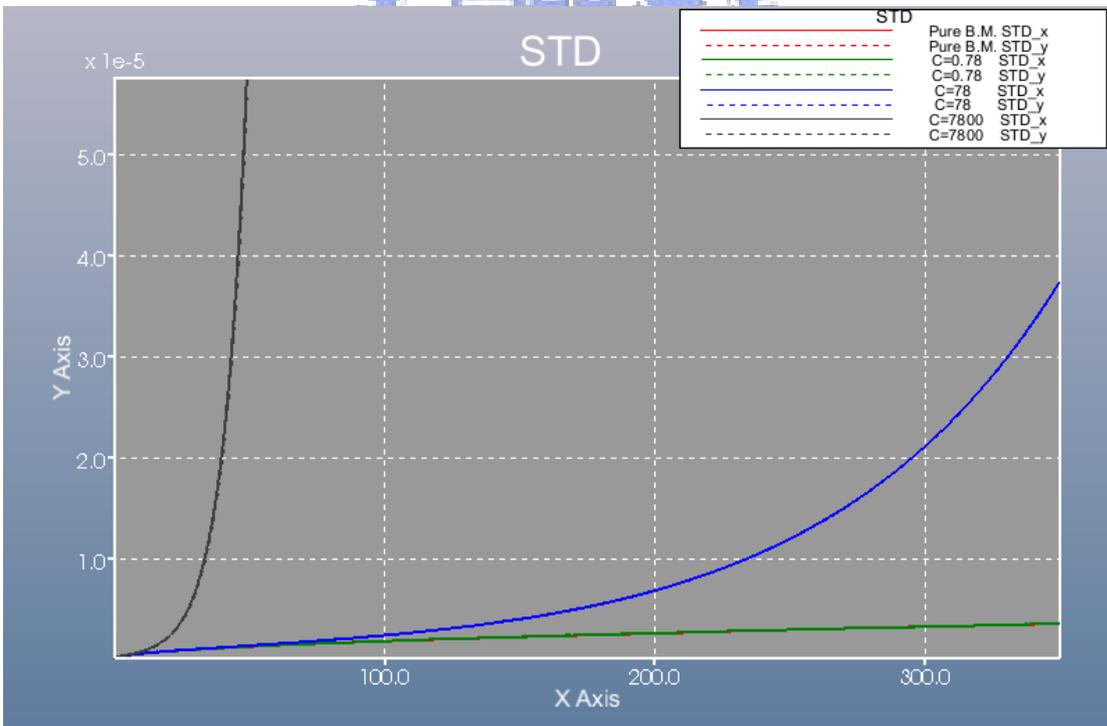


圖 4-40 不同磁場強度下的粒子標準差與時間之比較圖

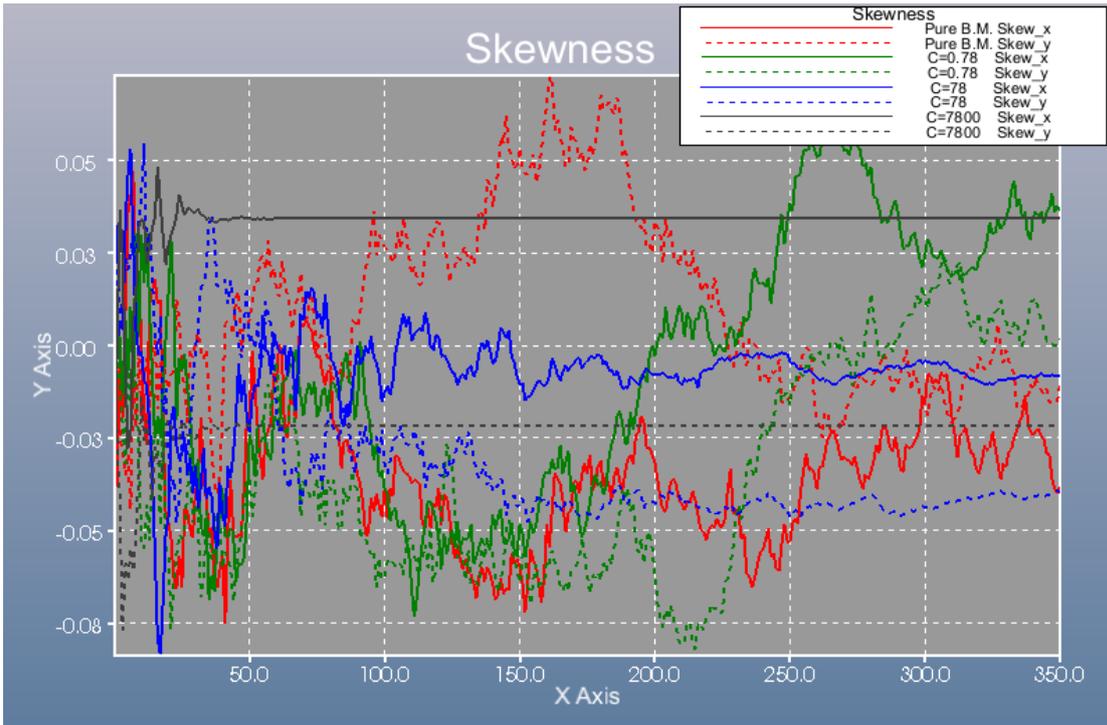


圖 4-41 不同磁場強度下的粒子偏態系數與時間之比較圖

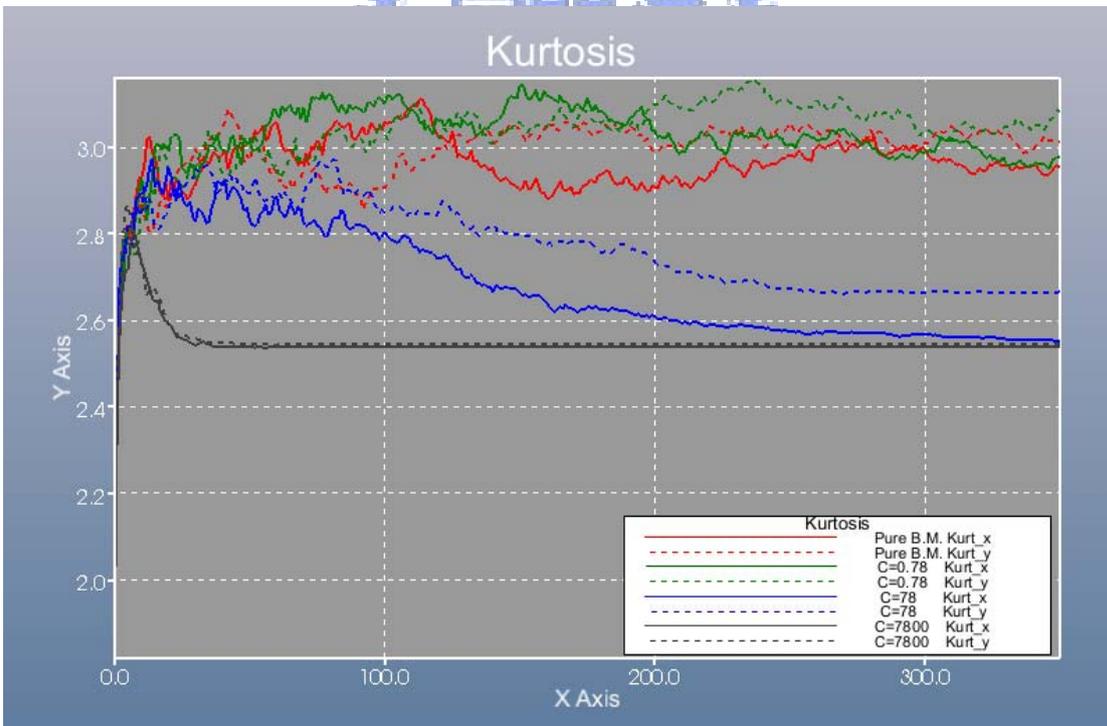


圖 4-42 不同磁場強度下的粒子峰態系數與時間之比較圖

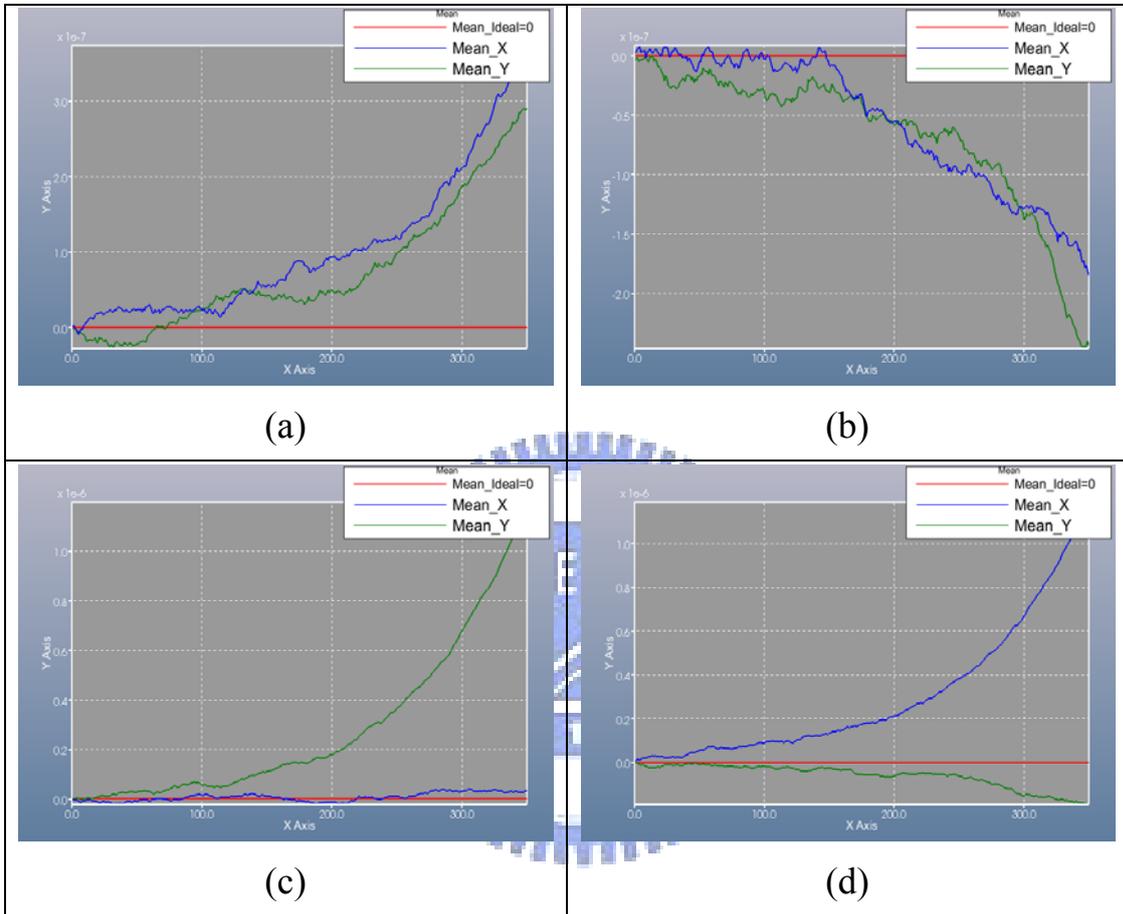


圖 4-43 二維布朗運動之相同磁場強度下之粒子平均位置關係圖

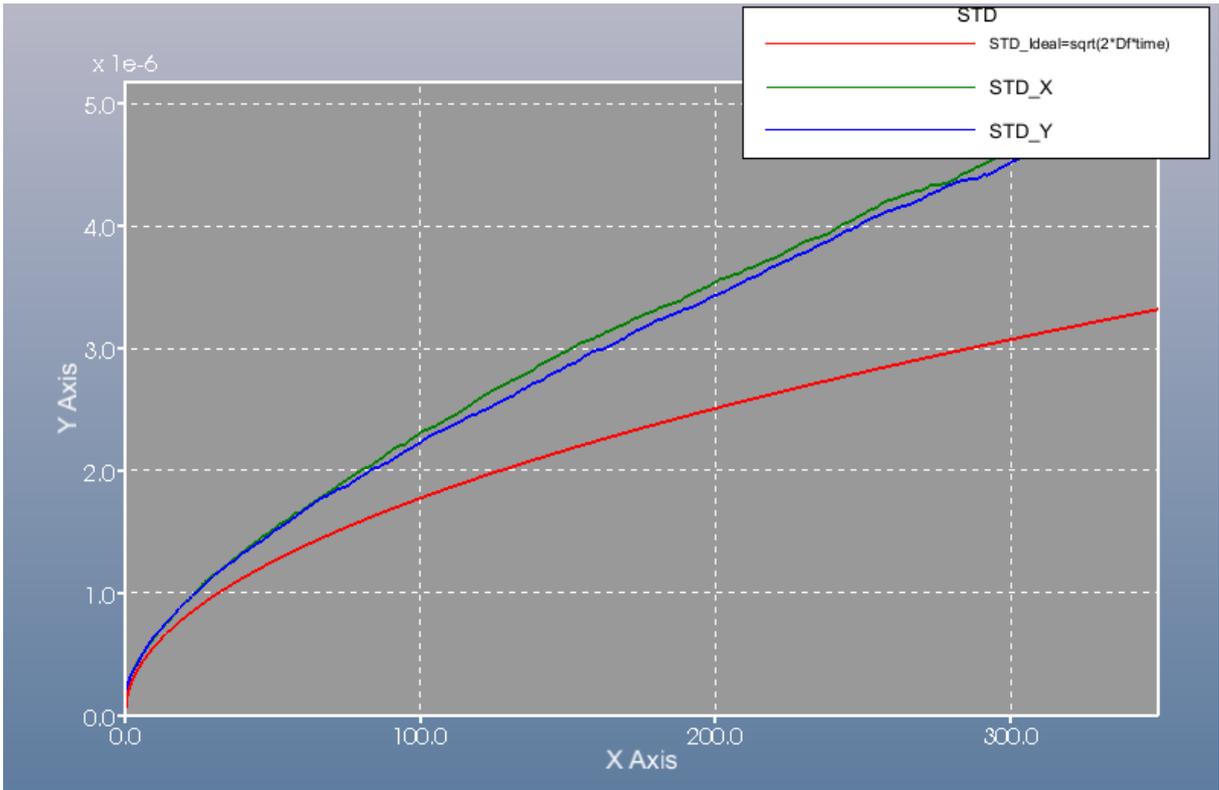


圖 4-44 由粒子標準差比較有溫度梯度之模擬與理論解之比較圖



圖 4-45 有溫度梯度之模擬之粒子位置平均度

## 第五章 結論

布朗運動，為最早被徹底研究的一種應用機率的過程。但其真的受到世人的重視是在愛因斯坦(Einstein)和朗級文(Langevin)的數學模式成立之後。在這之前，由於沒有理論的支持，所以使得布朗運動的產生方法眾說紛紜，也較沒有說服的能力。

由於布朗運動乃隨機與不穩定性之運動，所以其研究的應用與分析的難度也就相對較高，這也是一般的文獻對布朗運動的分析較少的原因。本論文藉由朗級文所推導的數學模式作為出發，將奈米粒子之模擬分成兩大類，一是標準的純布朗運動模擬，並與愛因斯坦所推出的擴散方程式配合特殊的邊界條件與初始值所解出的理論相互比較，所得之模擬結果非常近似；另一是加入其他外在因素的布朗運動模擬，如溫度場、和磁力場的影響之模擬，並且假設溫度場與磁力場所造成影響與布朗運動所造成之影響不互相干預。而整個模擬過程因模擬的粒子很小，故可忽略粒子間相互碰撞的情況，僅考慮粒子受週遭流體碰撞所造成的影響的前提下去做相關的模擬。並且使用電腦去模擬大量粒子做布朗運動之情形，再無其他外在影響因素的情況下，其重複模擬的結果大致均相等，故降低了一般模擬之不確定性，所以也較一般文獻準確。而本研究在後面發現，有方向性的影響因素，如磁力，會造成粒子整體分佈情況的改變，並且會造成整體位置平均偏向；而無方向性的影響，如溫度，會使得粒子分佈情況改變，但不會造成整體位置的平均值改變。

## 參考文獻

- [1] Albert Einstein, "Investigations On The Theory Of ,The Brownian Movement" ,1968.
- [2] 龐寧寧, "漫談布朗運動", 物理雙月刊 (廿八卷一期) ,2006 年二月。
- [3] 黃文璋, "布朗運動簡介", 數學傳播十六卷四期民, 1992 年 12 月。
- [4] R. Pyke, "One Dimensional Brownian Motion", Matthew Moore MAT335H1 — Chaos, Fractals, and Dynamics, 24 April 2002.
- [5] Clayton Crowe et al., "MULTIPHASE FLOWS with DROPLETS and PARTICLES, pp 467-471".
- [6] Jennifer Kreft and Yeng-Long Chen, "Thermal diffusion by Brownian-motion-induced fluid stress", Institute of Physics, 1. Academia Sinica, Taipei, Taiwan 2. Research Center for Applied Science, Academia Sinica, Taipei, Taiwan, 10 August 2007.
- [7] T. Voßler and S. Odenbach, "The influence of a uniform magnetic field on the Soret coefficient of magnetic nanoparticles", Center of Applied Space Technology and Microgravity (ZARM), University of Bremen, Am Fallturm, 28359 Bremen, Germany, 25 June 2003.
- [8] 楊謝樂, "磁性奈米粒子於生物醫學上之應用", 物理雙月刊 (廿八卷四期) 2006 年 8 月。