

УДК 538.911; 544.7

И. И. Наркевич, проф., д-р физ.-мат. наук (БГТУ, г. Минск);
Цях А., проф., д-р физ.-мат. наук (ИФХ Польской АН, Варшава)

СТАТИСТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ АДСОРБЦИИ КОЛЛОИДНЫХ ЧАСТИЦ ИЗ ВОДНЫХ РАСТВОРОВ

В работе проведено исследование микроструктуры однородного коллоидного водного раствора в рамках двухуровневого молекулярно-статистического подхода [1] с использованием потенциала SALR (Short-range Attraction Long-range Repulsion [2]), который в безразмерных переменных имеет следующий вид:

$$\Phi(r) = 4 \left(\frac{1}{r^{12}} - \frac{1}{r^6} \right) + \frac{A}{r} e^{-kr}, \quad A = 1,27, \quad k = 0,5. \quad (1)$$

Первое слагаемое является потенциалом Леннард-Джонса, а второе – потенциалом Юкавы. Суммарный потенциал $\Phi(r)$ учитывает наличие отталкивания между коллоидными частицами раствора на малых расстояниях ($r < 1,15$), притяжения на промежуточных расстояниях ($1,15 \leq r \leq 1,9$) и отталкивания на больших расстояниях ($1,9 \leq r < \infty$). Этот необычный вид межчастичного взаимодействия коллоидных частиц (по сравнению с обычным взаимодействием между молекулами простых веществ) является следствием того, что коллоидные частицы взаимодействуя с растворителем (в данном случае водой) приобретают сольватную оболочку и их взаимодействие друг с другом описывается с помощью экранированного кулоновского потенциала, так называемого потенциала Юкавы.

Микроструктура однородного коллоидного раствора (без учета силового поля адсорбирующей поверхности) в используемом двухуровневом статистическом подходе [1] описывается с помощью условных функций распределения центров тяжести коллоидных частиц в микроячейках метода условных распределений [3], центры которых образуют гексагональную кристаллическую решетку. Используя ранее полученные общие уравнения и формулы [4] модифицированного метода условных распределений (двухуровневый подход) рассчитаны среднеквадратичные отклонения центров коллоидных частиц от узлов гексагональной решетки при безразмерной температуре $\theta = 0,4$, которая меньше температуры тройной точки ($\theta_{тр} = 0,7$) простых молеку-

лярных систем, описываемых с помощью потенциала Леннарда-Джонса.

В результате рассчитана изотерма свободной энергии изучаемой коллоидной системы и обнаружена область значений чисел заполнения n ячеек для однородной системы, в которой имеется одно решение при $n < 0,5$. При $n > 0,5$ существуют два решения ($n \cong 0,5$ – точка бифуркации решения), одно из которых описывается унарной функцией распределения с сильной локализацией в окрестности узлов решетки. Это квазикристаллическое состояние среды характеризуется меньшими значениями свободной энергии и является термодинамически более устойчивым по сравнению с состоянием, отвечающим второму решению с делокализованным распределением центров коллоидных частиц.

ЛИТЕРАТУРА:

1. Наркевич, И. И. Молекулярно-статистическая теория неоднородных конденсированных сред: дис. ... д-ра физ.-мат. наук: 01.04.14. СПб., 1993. 242 л.

2. A. Ciach, W. T. Gózdź. Mesoscopic description of network-forming clusters of weakly charged colloids. *Condensed Matter Physics* 2010, Vol. 13, № 2, 23603.

3. Ротт, Л. А. Статистическая теория молекулярных систем. М.: Наука, 1979. 280 с.

4. Наркевич, И. И., Квасов Н.Т., Козич Е.Ю. Двухуровневое молекулярно-статистическое изучение структуры и термодинамических характеристик однородных макроскопических систем и сферических наночастиц / И. И. Наркевич, Н. Т. Квасов, Е. Ю. Козич // Труды БГТУ: №6 (188). 2016. С. 61–65.