

И.И. Наркевич, проф., д-р физ.-мат. наук (БГТУ, г. Минск);  
 А. Цях, проф., д-р. физ.-мат. наук (ИФХ Польской АН, г. Варшава);  
 О.В. Пагацан, ведущий науч. сотр., д-р. физ.-мат. наук  
 (ИФКС НАН Украины, г. Львов)

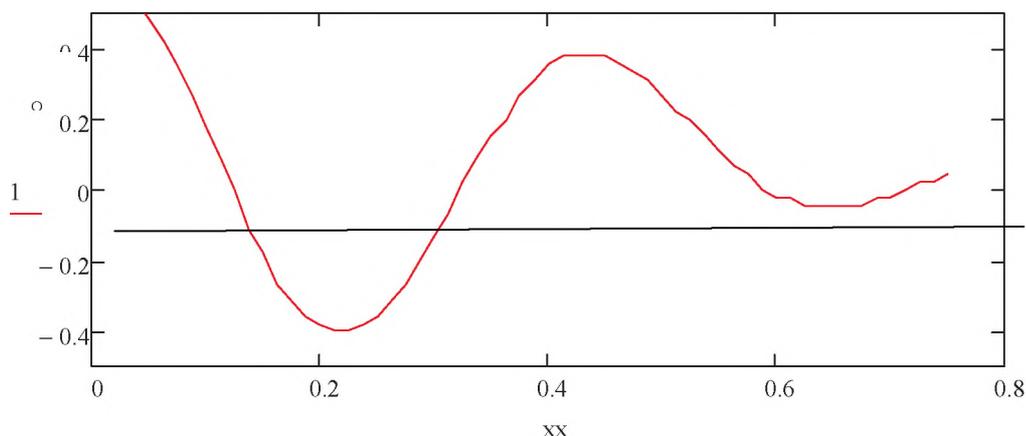
## СТАТИСТИЧЕСКОЕ ИЗУЧЕНИЕ ВОЗМОЖНОСТИ СУЩЕСТВОВАНИЯ СПЕКТРА МЕЗОСКОПИЧЕСКИХ НЕОДНОРОДНОСТЕЙ ПЛОТНОСТИ В ОБЪЕМЕ КОЛЛОИДНОГО РАСТВОРА С ПОТЕНЦИАЛОМ SALR

В работе [1] в рамках двухуровневого статистического метода установлено, что если к условию экстремальности свободной энергии добавить уравнение диффузии, то полученное решение для поля плотности указывает на возможность реализации устойчивых состояний системы с наноразмерными неоднородностями поля плотности, которые образуют периодическую пространственную структуру во всем макроскопическом объеме. Дальнейшие численные исследования функционала свободной энергии коллоидных растворов с использованием потенциала SALR (Short-range Attraction and Long-rang Repulsion) показывают, что функционал таких систем может иметь не один, а несколько минимумов с разными значениями длин волн, для которых свободная энергия меньше энергии однородного состояния. В этих расчетах потенциал SALR используется в виде суммы двух членов: потенциала Леннард–Джонса и экранированного потенциала Кулона, которые записываются в безразмерной форме:

$$\Phi(r) = 4(r^{-12} - r^{-6}) + Ar^{-1}e^{-\alpha r}, \quad A = 1,27; \quad \alpha = 0,5. \quad (1)$$

Здесь расстояния и потенциалы рассчитываются в единицах линейного ( $\sigma$ ) и энергетического ( $\epsilon$ ) параметров потенциала Леннард–Джонса соответственно.

В качестве примера этих расчетов на рис.1 приведен график зависимости относительной вариации  $\epsilon_{\Omega} = \Delta\Omega\{n_i\} / \Omega(n)$  термодинамического функционала  $\Omega\{n_i\} = F\{n_i\} - \mu \sum n_i$  от волнового числа  $k = 2\pi/\lambda$  для заданного значения чисел заполнения ячеек  $n$  однородной коллоидной системы, определяющего объемную плотность системы при безразмерной температуре  $\theta = 0,4$  ( $B$  – амплитуда гармонической неоднородности с волновым числом  $k$ ;  $\lambda_1$  и  $\lambda_2$  – длины волн, которые соответствуют минимумам относительной вариации  $\epsilon_{\Omega}$ ).



**Рисунок 1 – Зависимость вариации  $\epsilon_{\Omega}$  функционала  $\Omega$  от волнового числа  $k$  ( $\theta = 0,4$ ;  $n = 0,05$ ;  $B = 0,04$ ;  $\lambda_1 \approx 28,7$ ;  $\lambda_2 \approx 9,6$ )**

Из рисунка 1 видно, что гармоническая неоднородность поля плотности с длинами волн  $\lambda_1$  и  $\lambda_2$  приводит к уменьшению функционала  $\Omega$  (точки минимума на графике рисунка). Это означает, что коллоидная система с мезоскопическими неоднородностями  $\lambda_1$  и  $\lambda_2$  оказывается термодинамически более устойчивой по сравнению с однородной системой, которой соответствует волновое число  $k = 0$  ( $\lambda = \infty$ ).

В качестве заключения следует отметить, что имеется возможность модифицировать двухуровневую статистическую теорию с целью изучения адсорбции коллоидных частиц из водных растворов на заряженных поверхностях, рассматривая коллоидный раствор как систему, которая находится во внешнем поле заряженной поверхности либо рассматривая их как единую систему с соответствующим общим гамильтонианом.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Наркевич И. И., Бокун Г. С. Исследование наноструктуризации вещества в рамках двухуровневого молекулярно-статистического описания // Международная научно-исследовательская конференция «Приоритетные направления современных научных исследований XXI века». Сборник научных статей. –Трехгорный: ТТИ НИЯУ МИФИ, 2016. –С. 3–5.