

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 (σ) и энергетического (ϵ) 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 ; λ_1 и λ_2 – длины волн, которые соответствуют минимумам относительной вариации ϵ_{Ω}).

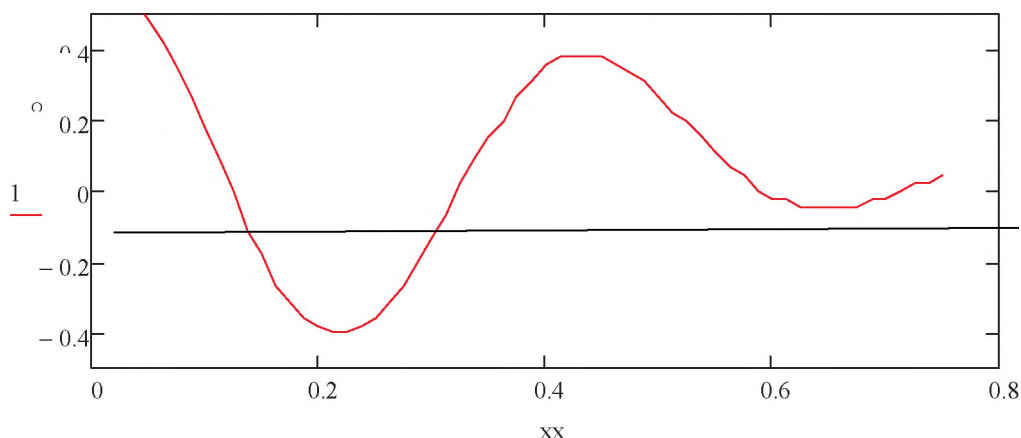


Рисунок 1 – Зависимость вариации ϵ_{Ω} функционала Ω от волнового числа k ($\theta = 0,4$; $n = 0,05$; $B = 0,04$; $\lambda_1 \approx 28,7$; $\lambda_2 \approx 9,6$)

Из рисунка 1 видно, что гармоническая неоднородность поля плотности с длинами волн λ_1 и λ_2 приводит к уменьшению функционала Ω (точки минимума на графике рисунка). Это означает, что коллоидная система с мезоскопическими неоднородностями λ_1 и λ_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.