

ИЗУЧЕНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ПРОСТЫХ МОЛЕКУЛ С ПОРИСТОЙ ПОВЕРХНОСТЬЮ ТВЕРДОГО ТЕЛА С УЧЕТОМ АНИЗОТРОПНОСТИ СРЕДЫ

Ю.А. Фадеев, Е.В. Салтанова

С микроскопической точки зрения поверхность реального кристалла является рельефной, что приводит к значительной степени анизотропности потенциала межмолекулярного взаимодействия. При физической адсорбции в приповерхностных слоях твердого тела характер межмолекулярного взаимодействия существенно изменяется по сравнению с условиями гомогенной среды. Рассмотрено взаимодействие простых молекул с поверхностью твердого тела с привлечением потенциала электростатического взаимодействия.

Ключевые слова: пористая поверхность, физическая адсорбция, потенциал электростатического взаимодействия

ВВЕДЕНИЕ

Многочисленными исследованиями, выполненными ранее, было установлено, что динамика адсорбированных молекул в приграничных к поверхности областях и в сплошной среде имеет существенные отличия [1, 2]. С микроскопической точки зрения поверхность реального кристалла является рельефной из-за большого числа трещин, выступов и других дефектов. Такая поверхность приводит к тому, что потенциал межмолекулярного взаимодействия становится в значительной степени анизотропным. Это особенно ярко проявляется на поверхности пористых систем. При физической адсорбции твердотельной пористой матрицы в приповерхностных слоях характер межмолекулярного взаимодействия существенно изменяется по сравнению с условиями гомогенной среды. Молекулы, располагаясь на поверхности, находятся в предельно анизотропных условиях гомогенной среды. Необходимо отметить, что потенциал взаимодействия адсорбированных молекул в пористой матрице, а тем более на ее поверхности, существенно ниже, чем потенциал в кристалле или жидкости в силу того, что в матрице для большинства молекул не выполняется принцип плотной упаковки. Это отражается на подвижности молекул внедренных в пористую матрицу. Изучение различных процессов межмолекулярного взаимодействия на границе сред протекающих на молекулярном уровне имеет микро- и нано- масштабы, а, следовательно, физические методы исследования таких молекулярных объектов должны быть адекватными поставленным задачам. В настоящей работе будут рассмотрены потенциалы взаимодействия между зарядом и пористой поверхностью диэлектрика.

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Определим потенциал электрического поля на границе раздела двух однородных диэлектриков методом изображений [3]. Граница раздела двух однородных диэлектриков с проницаемостями ε_1 и ε_2 имеет вид сферической поры радиуса R . Пусть точечный заряд $q_1 = q_0/\varepsilon_1$ (q_0 - заряд в вакууме) расположен в среде I на расстоянии a сверху от границы разделяющей диэлектрики (рис.1).

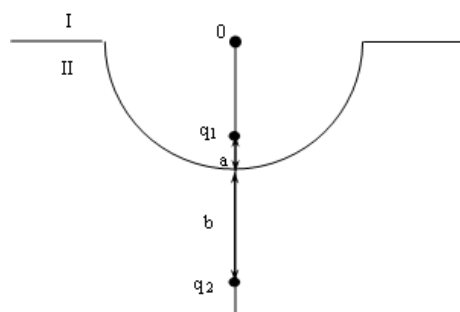


Рисунок 1. Схема расположения заряда q_1 и заряда-изображения q_2

Заряд-изображение имеет величину $q_2 = \lambda q_0/\varepsilon_1$ (λ - некоторая постоянная) и расположен на расстоянии

$$b = aR/(R - 2a), \quad (1)$$

т.к. именно там будет находиться изображение светящейся точки q_1 в сферическом зеркале. Анализируя (1) приходим к выводу, что если $0 < a < R/2$, то заряд-изображение находится в среде II на расстоянии $0 < b < \infty$ от границы раздела диэлектриков, если $a > R/2$, то заряд-изображение находится в

ИЗУЧЕНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ПРОСТЫХ МОЛЕКУЛ С ПОРИСТОЙ ПОВЕРХНОСТЬЮ ТВЕРДОГО ТЕЛА С УЧЕТОМ АНИЗОТРОПНОСТИ СРЕДЫ

среде I на расстоянии $0 < b < -R/2$. Рассмотрим первый случай. Поле в среде I находим как поле двух зарядов q_1 и q_2 , хотя физически существует только заряд q_0 , а поле и потенциалы в средах I и II получаются из-за поляризации диэлектриков. Для определения величины заряда-изображения и потенциала применим граничные условия для нормальной и тангенциальной составляющих вектора напряженности электростатического поля. Нормальная составляющая поля на границе двух диэлектрических сред претерпевает разрыв и подчиняется условию $\varepsilon_1 E_{n1} = \varepsilon_2 E_n$, где E_{n1} и E_n - нормальные составляющие напряженности поля в средах I и II соответственно. Тангенциальная составляющая поля, при переходе из среды I в среду II, остается неизменной: $E_{t1} = E_t$. Найдем нормальную и тангенциальную составляющие вектора напряженности электрического поля в точке A, расположенной на границе раздела диэлектриков. В выбранной системе координат (рис.2),

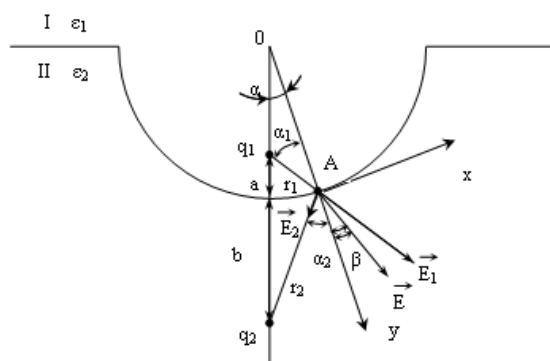


Рисунок 2. Схема, поясняющая расчет потенциала электрического поля в случае, когда заряд $q_2 < 0$

$$\begin{aligned} E_{n1} &= E_1 \cos \alpha_1, & E_n &= E \cos \beta, \\ E_{t1} &= E_1 \sin \alpha_1, & E_t &= E \sin \beta, \end{aligned} \quad (2)$$

где E_1 - напряженность поля в среде I, E - напряженность поля во II среде, α_1 и β - углы, которые составляют вектора напряженности E_1 и E с нормалью к границе раздела сред, в первой и во второй средах соответственно. Из (2) получаем соотношение

$$\frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} = \frac{\tan \alpha_1}{\tan \beta} \text{ из которого следует, что если}$$

$\varepsilon_1 > \varepsilon_2$, то $\alpha_1 > \beta$ и тогда заряд-изображение q_2 должен быть отрицательным (рис. 2), если $\varepsilon_1 < \varepsilon_2$, то $\alpha_1 < \beta$ и тогда заряд q_2 должен быть положительным (рис.3).

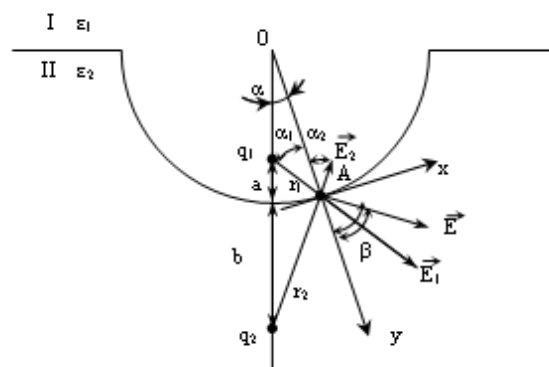


Рисунок 3. Схема, поясняющая расчет потенциала электрического поля в случае, когда заряд $q_2 > 0$

Рассмотрим случай $\varepsilon_1 > \varepsilon_2$. В точке A напряженность электрического поля E создано зарядами q_1 и q_2 удовлетворяет равенству $\vec{E}_1 + \vec{E}_2 = \vec{E}$, где $\vec{E}_2$ - напряженность электрического поля заряда q_2 . В проекциях на ось Ox и Oy последнее уравнение примет вид

$$E_1 \sin \alpha_1 - E_2 \sin \alpha_2 = E \sin \beta \quad \text{и} \quad (4)$$

$$E_1 \cos \alpha_1 + E_2 \cos \alpha_2 = E \cos \beta. \quad (5)$$

Модуль вектора напряженности электрического поля, которое создает заряд q_1 , определяется его величиной и расстоянием r_1 до точки A: $E_1 = q_0 / (4\pi\varepsilon_0\varepsilon_1 r_1)$. Заряд q_2 в точке A создает электрическое поле, модуль вектора напряженности которого определяется выражением: $E_2 = \lambda q_0 / (4\pi\varepsilon_0\varepsilon_1 r_2)$, где r_2 - расстояние от заряда-изображения до рассматриваемой точки. Используя выражения (4) и (5), а также выражения для E_1 и E_2 , получаем

$$\lambda = \frac{r_2^3}{r_1^3} \frac{\varepsilon_{отн} - 1}{\varepsilon_{отн} \frac{R+b}{R-a} - \frac{R-(R+b)\cos\alpha}{R-(R-a)\cos\alpha}}. \quad (6)$$

Т.к. точка A находится в среде I, то ее потенциал определяется равенством

$$\varphi = \varphi_1 - \varphi_2 = \frac{q_0}{4\pi\epsilon_0\epsilon_1} \left(\frac{1}{r_1} - \frac{\lambda}{r_2} \right).$$

Случай, когда во II среде находится положительный заряд-изображение q_2 , рассчитывается аналогично; для величины λ получим выражение

$$\lambda = \frac{r_2^3}{r_1^3} \frac{\epsilon_{отн} - 1}{\frac{R+b}{R-a} + \epsilon_{отн} \frac{R-(R+b)\cos\alpha}{R-(R-a)\cos\alpha}}, \quad (7)$$

а потенциал электрического поля в точке A определяется выражением

$$\varphi = \varphi_1 + \varphi_2 = \frac{q_0}{4\pi\epsilon_0\epsilon_1} \left(\frac{1}{r_1} + \frac{\lambda}{r_2} \right).$$

Анализируя выражения (6) и (7) можно сделать вывод, что величина заряда-изображения зависит не только от места расположения заряда Q_1 внутри поры, т.е. расстояния a , но и от радиуса поры R и угла α , который определяет положение точки, в которой вычисляются потенциал.

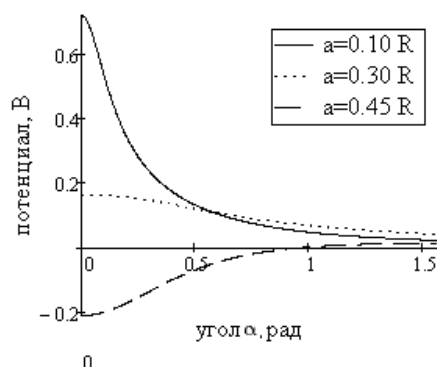


Рисунок 4. График зависимости $\varphi = \varphi(\alpha)$ для различных расстояний a ($\epsilon_1 < \epsilon_2$)

Анализируя полученные результаты, следует отметить, что потенциал взаимодействия между зарядом и поверхностью поры кристалла изменяется нелинейно, и существенно зависит от радиуса поры и расположения заряда.

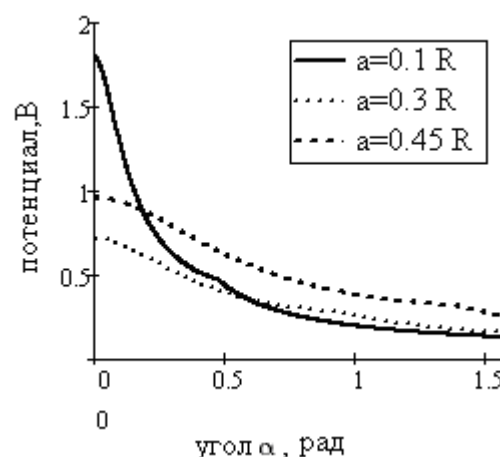


Рисунок 5. График зависимости $\varphi = \varphi(\alpha)$ для различных расстояний a ($\epsilon_1 > \epsilon_2$).

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Расчет потенциала проведен для элементарного заряда, находящегося внутри поры диаметром 100 Å. На рис. 4 приведены графики изменения потенциала на границе раздела двух диэлектрических сред для случая, когда $\epsilon_1 < \epsilon_2$, на рис. 5 приведены графики зависимости $\varphi(\alpha)$ для случая, когда $\epsilon_1 > \epsilon_2$, величина угла α изменяется в пределах $0 \leq \alpha \leq \pi/2$.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Фадеев Ю.А., Салтанова Е.В. // Конденсированные среды и межфазные границы. - 2010. - Т.12, № 1. - С. 66-69.
2. Сечкарев А.В., Бегер В.Н. Взаимодействие с твердой поверхностью и тепловое движение многоатомных молекул в поле адсорбционных сил. – В кн.: Спектроскопия внутри- и межмолекулярных взаимодействий. - Л.: Изд-во ЛГУ, 1991., В.5., С. 69-92.
3. Тамм И.Е., Основы теории электричества. М.: Наука, 1989., с.504.