

РАЗВИТИЕ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ И КИНЕТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ ДЛЯ МИЦЕЛЛЯРНЫХ СИСТЕМ

Ю.А. Ерошкин

Явление образования устойчивых агрегатов в растворах поверхностно-активных веществ (ПАВ), называемых мицеллами, известно уже более ста лет и нашло широкое применение в современных технологиях очистки, разделения веществ и синтеза наночастиц. Основы теоретического описания кинетики мицеллообразования были заложены в работах Анианссона, в которых использовалась непрерывная аппроксимация Фоккера-Планка для конечно-разностных уравнений Беккера-Дёринга, описывающих молекулярный механизм агрегации.

Однако произведённые ранее численные расчёты показывают что, несмотря на то что аналитическая теория молекулярного механизма мицеллярной релаксации в растворах как со сферическими, так и с цилиндрическими мицеллами приводит к хорошему согласию для времени медленной релаксации, качество предсказаний спектра быстрой релаксации остаётся неудовлетворительным.

Нами была разработана общая аналитическая схема перехода к непрерывному описанию мицеллярной релаксации, не использующая аппроксимации для работы агрегации и коэффициентов присоединения, в рамках которой получено уравнение, определяющее спектр быстрой релаксации мицеллярных систем. Это уравнение было успешно применено в аналитических и полуаналитических расчётах спектра быстрой релаксации для различных мицеллярных систем. С его помощью получены результаты, хорошо согласующиеся с предсказаниями, полученными при численном решении уравнений Беккера-Дёринга.

EXTENSION OF THERMODYNAMIC AND KINETIC MODELS FOR MICELLAR SYSTEMS

Yu. A. Eroshkin

The phenomenon of formation of stable aggregates in surfactant solutions, named micelles, has been known for more than a hundred years and has found wide application in modern technologies of purification, separation of substances and synthesis of nanoparticles. The foundations of the theoretical description of the kinetics of micelle formation were laid in the works of Aniansson, who used the continuous Fokker-Planck approximation for the finite-difference Becker-Döring equations describing the molecular aggregation mechanism.

However, numerical calculations carried out earlier have shown that despite the fact that the analytical theory of the molecular mechanism of micellar relaxation in solutions with spherical as well as cylindrical micelles leads to a good agreement for the slow relaxation time, the quality of the predictions of the fast relaxation spectrum remains unsatisfactory.

We have developed a general analytical scheme for passing to a continuous description of micellar relaxation that does not use approximations for the aggregation work and attachment coefficients, in the framework of which the equation defining the fast relaxation spectrum of micellar systems is obtained. This equation has been successfully applied in analytical and semi-analytical calculations of the fast relaxation spectrum for various micellar systems. Its results are in good agreement with predictions obtained by numerical solution of the Bekker-Döring equations.