

Электрический вклад в работу агрегации ионной мицеллы и различные модели для коэффициента связывания противоионов

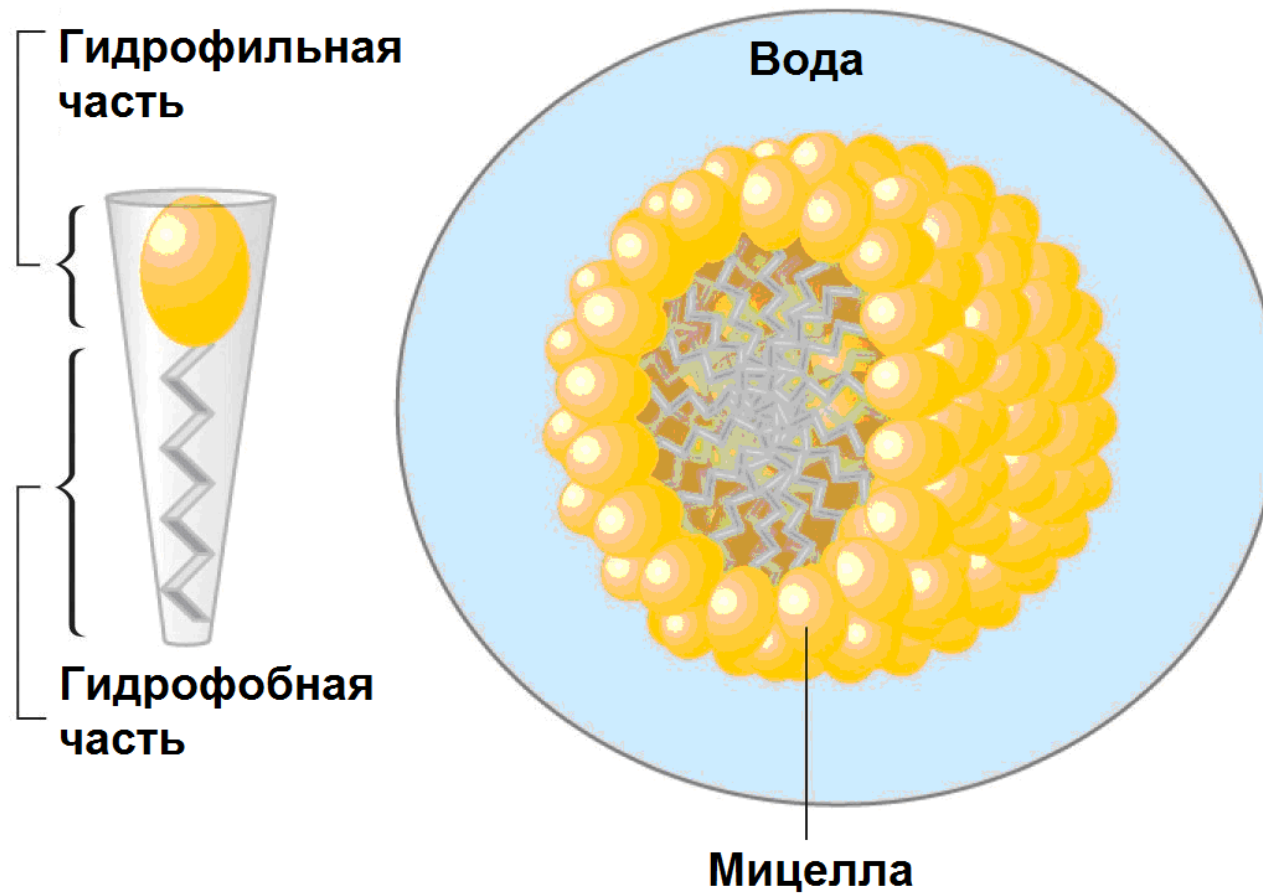
Казанцева Марина Андреевна

Группа 306

Научный руководитель: проф. А.К. Щёкин

2015

Введение



Задачи работы

- Найти решение линейного и нелинейного уравнения Пуассона-Больцмана для 1-1 электролита в растворителе (воде).
- Численно найти потенциал на поверхности мицеллы.
- Рассчитать электрический вклад в работу агрегации ионных мицелл.
- Найти коэффициенты связывания противоионов мицеллами, сравнить разные подходы.

Уравнение Пуассона-Больцмана

$$\Delta \psi(r) = -\frac{\rho(r)}{\varepsilon_0 \varepsilon}$$

Переход к сферическим координатам, обезразмеривание и граничные условия:

$$\frac{d^2 y}{dx^2} + \frac{2}{x} \frac{dy}{dx} = \sinh y$$

$$\left. \frac{dy}{dx} \right|_{x=x_0} = -\frac{\sigma e_0}{\kappa \varepsilon_0 \varepsilon k T}$$

$$\left. \frac{dy}{dx} \right|_{x=\infty} = 0$$

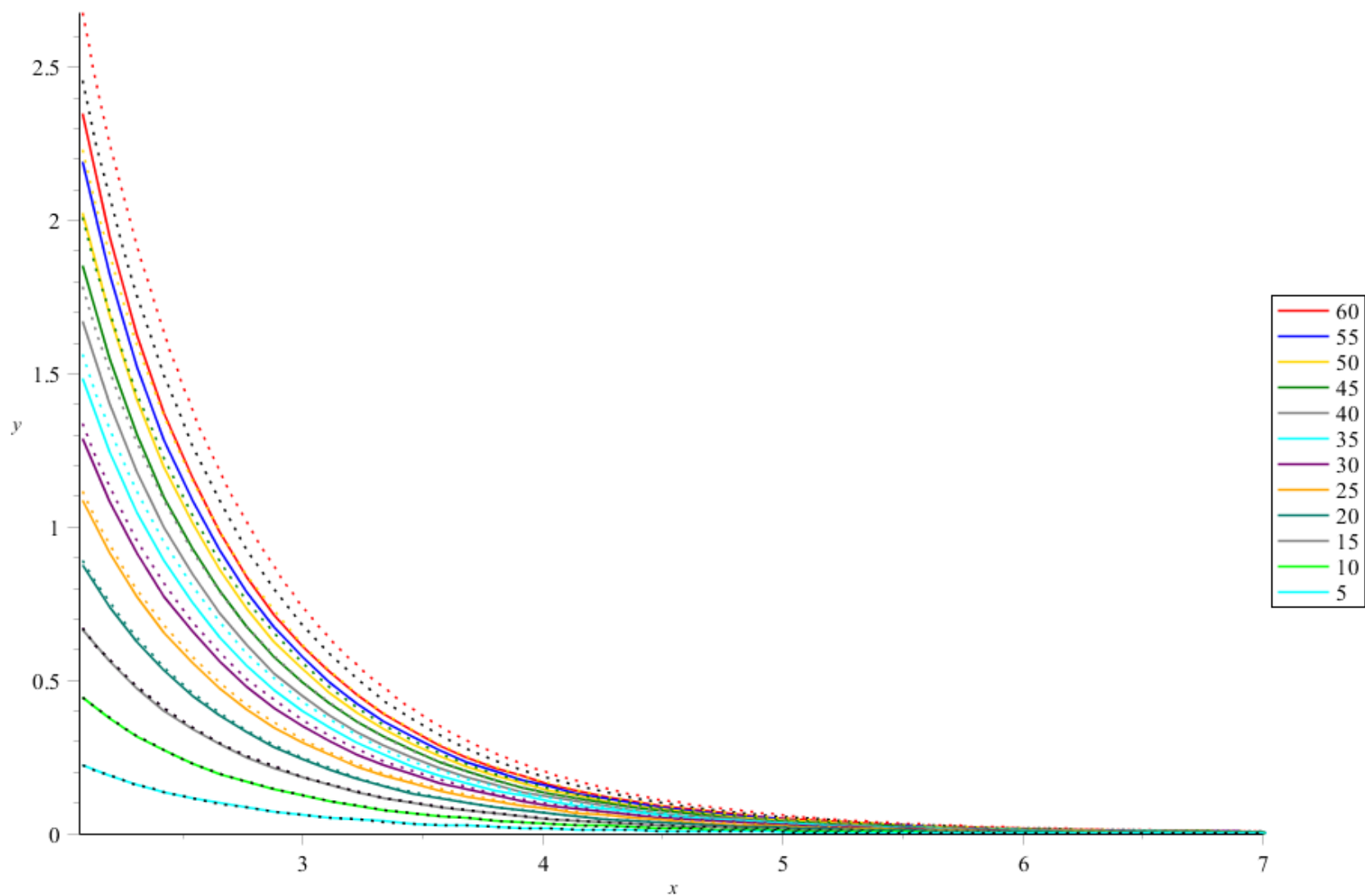
$$y|_{x=\infty} = 0$$

$$x = \kappa r$$

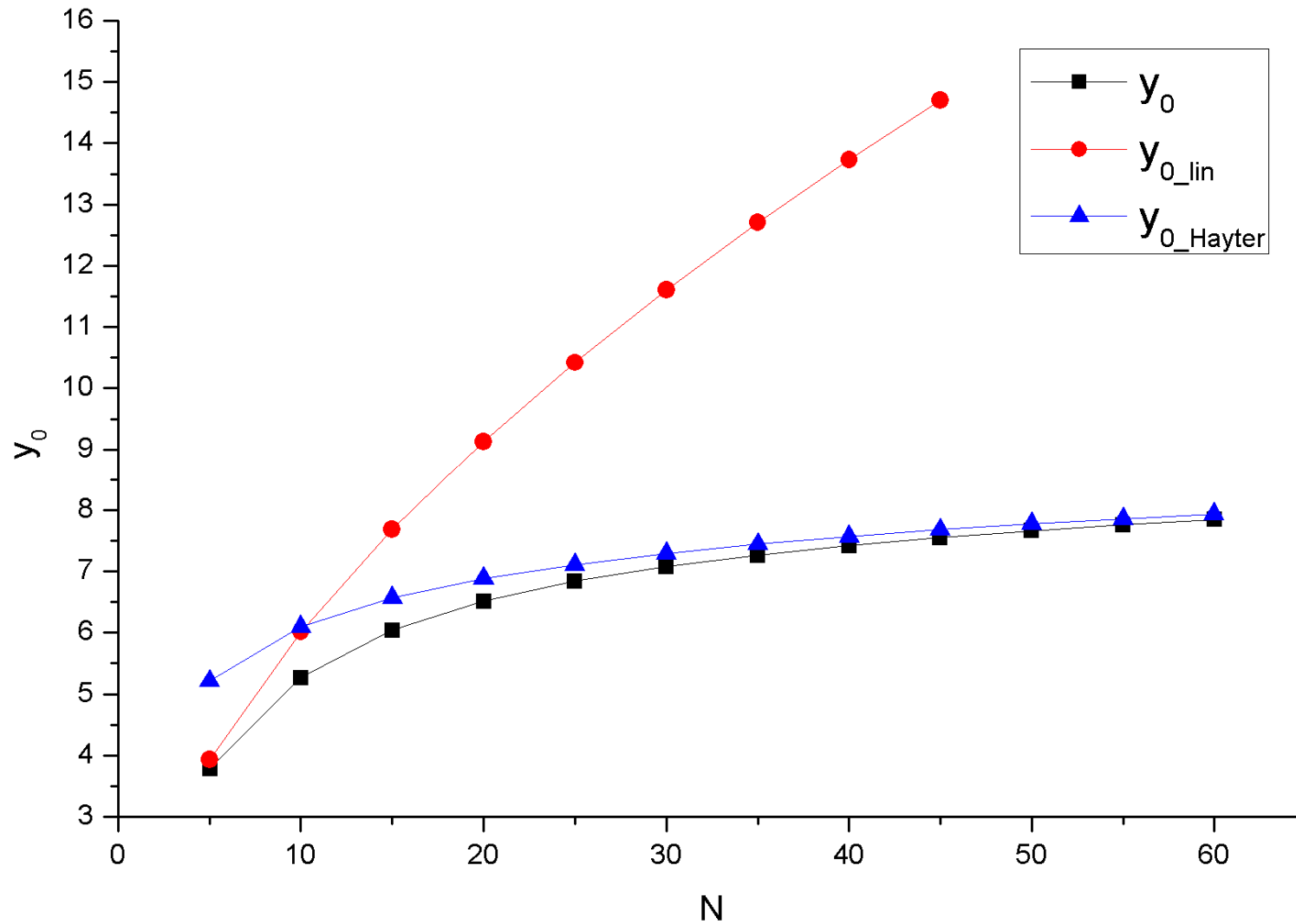
$$y = \frac{e_0 \psi}{k T}$$

$$\kappa = \sqrt{\frac{2e_0^2 n_0}{\varepsilon_0 \varepsilon k T}}$$

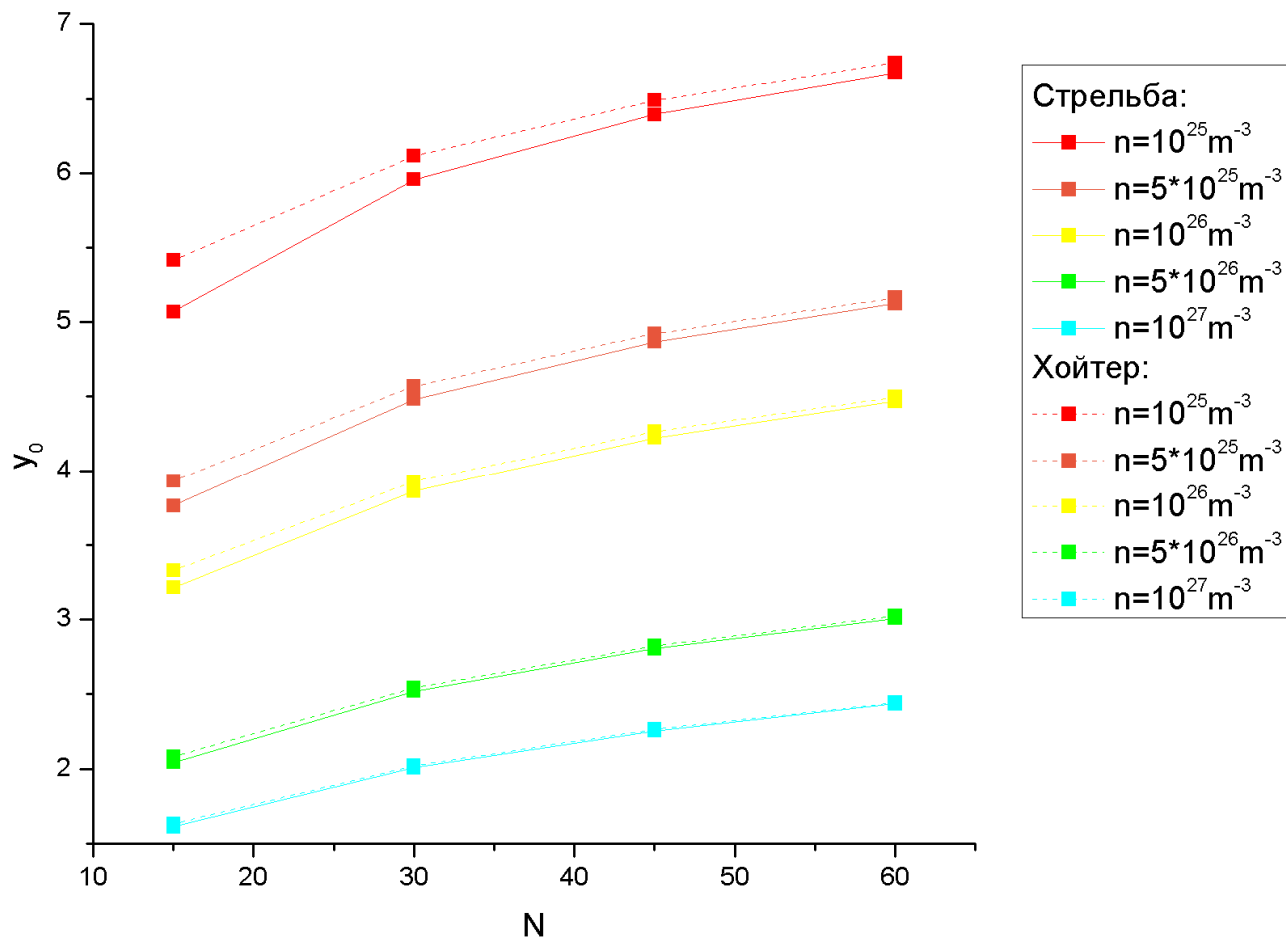
Электрический потенциал вблизи поверхности мицеллы



Значение потенциала на границе мицеллы

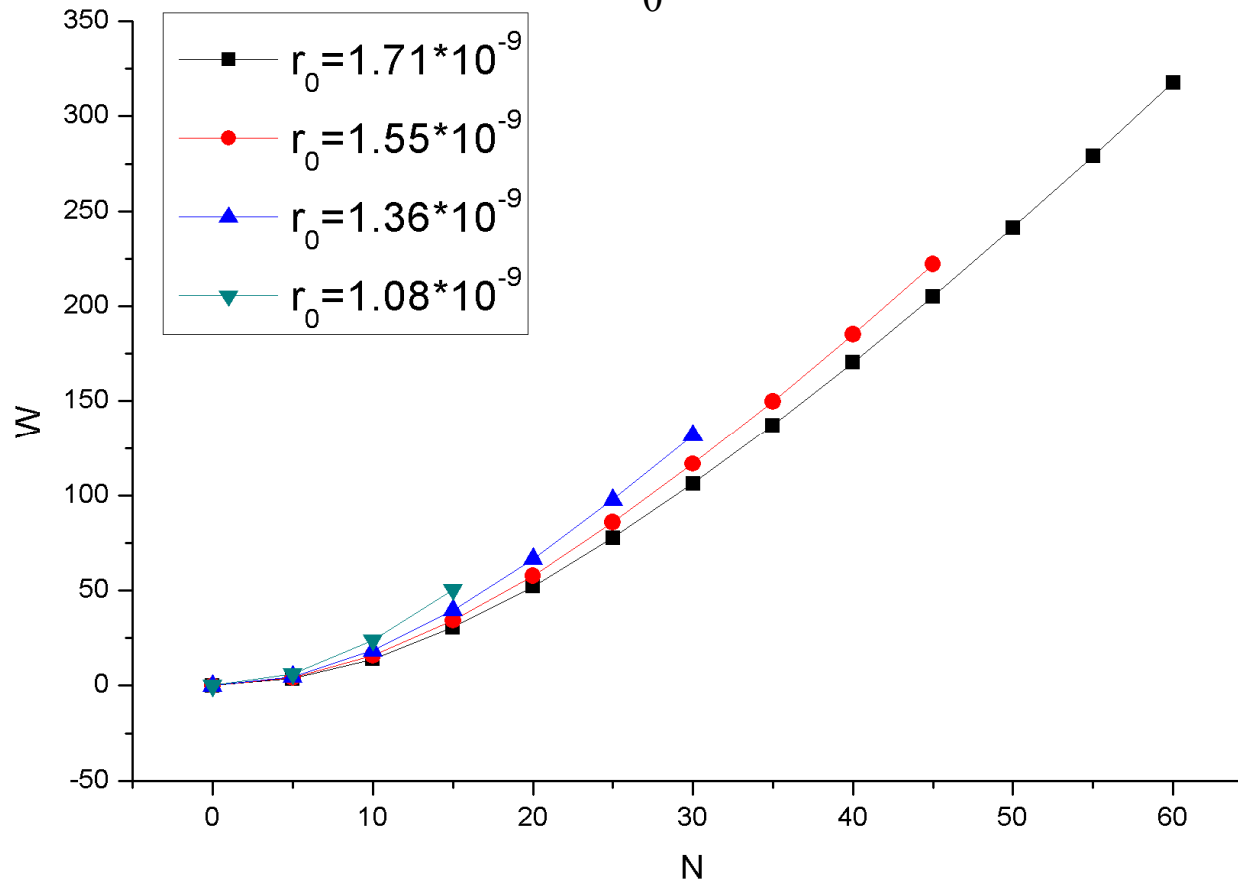


Значения потенциала на границе мицеллы при различных концентрациях ПАВ



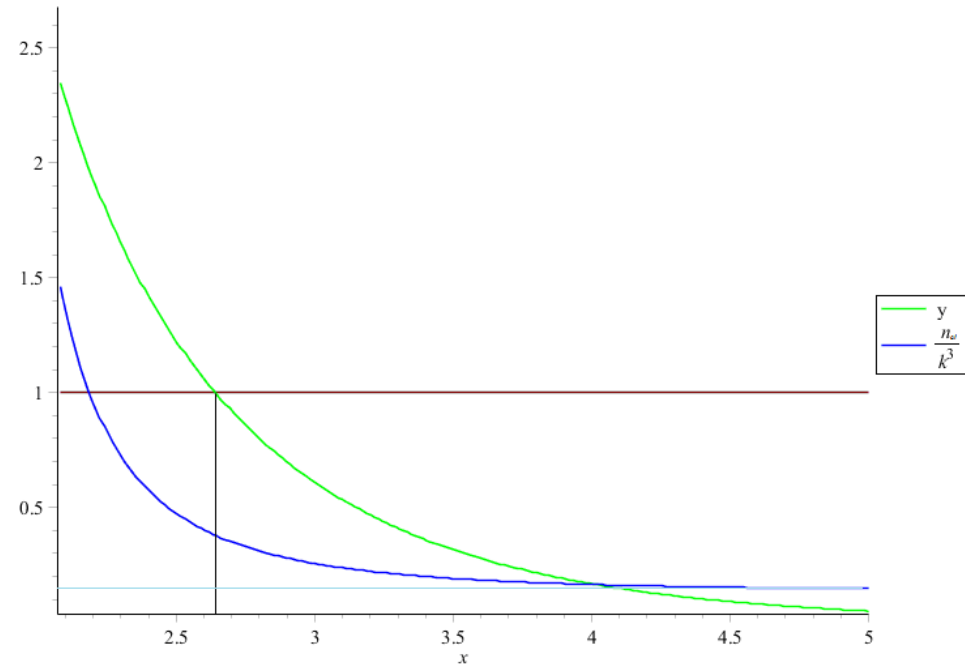
Электрические вклады в работу агрегации

$$w_q^{el} = \int_0^q \psi(\tilde{q}) d\tilde{q}$$



Количество связанных противоионов

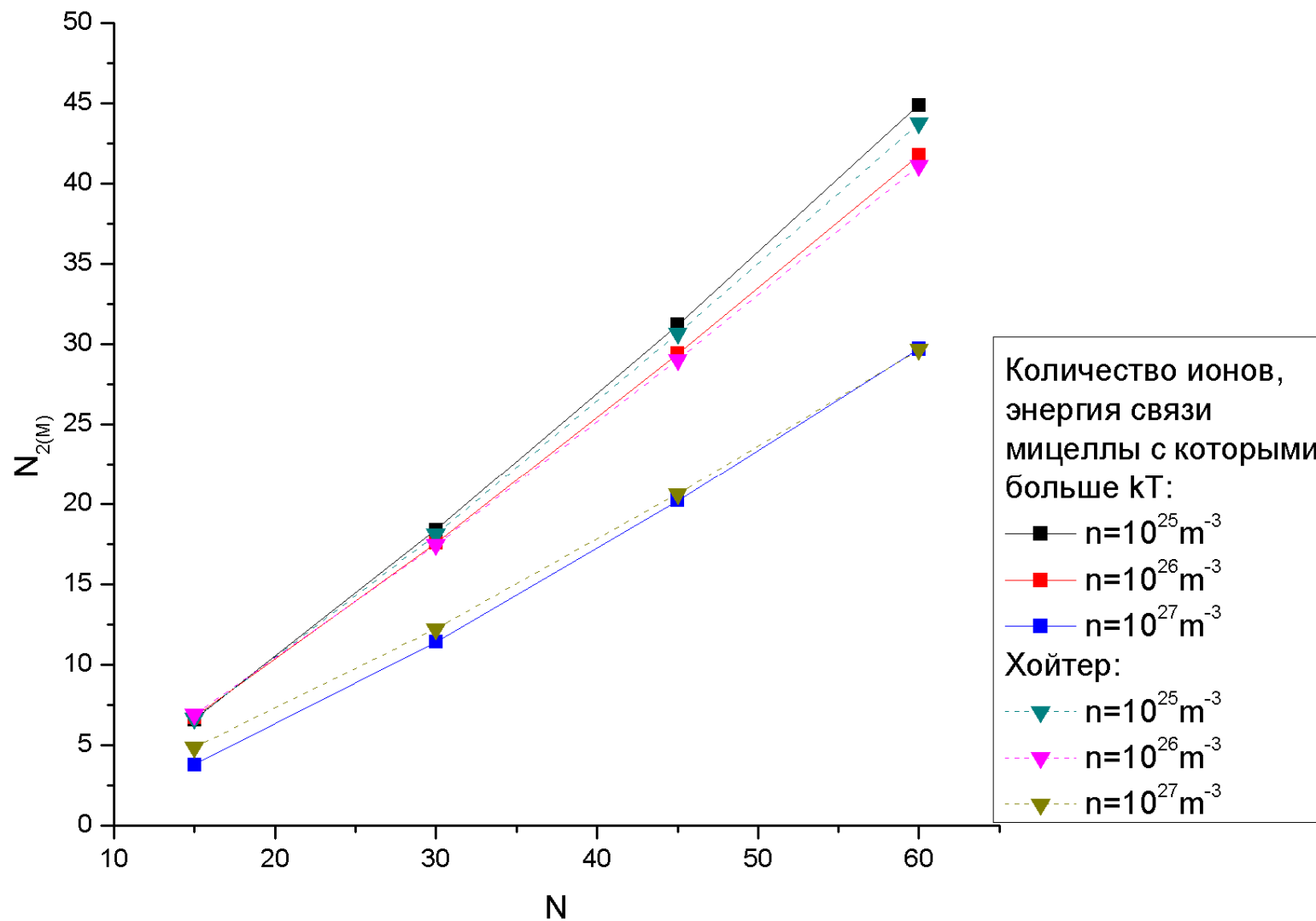
$$1) \bar{N}_{2(M)} = 4\pi \int_{x_0}^{x_k} (ne^{y(x)} - n)x^2 dx$$



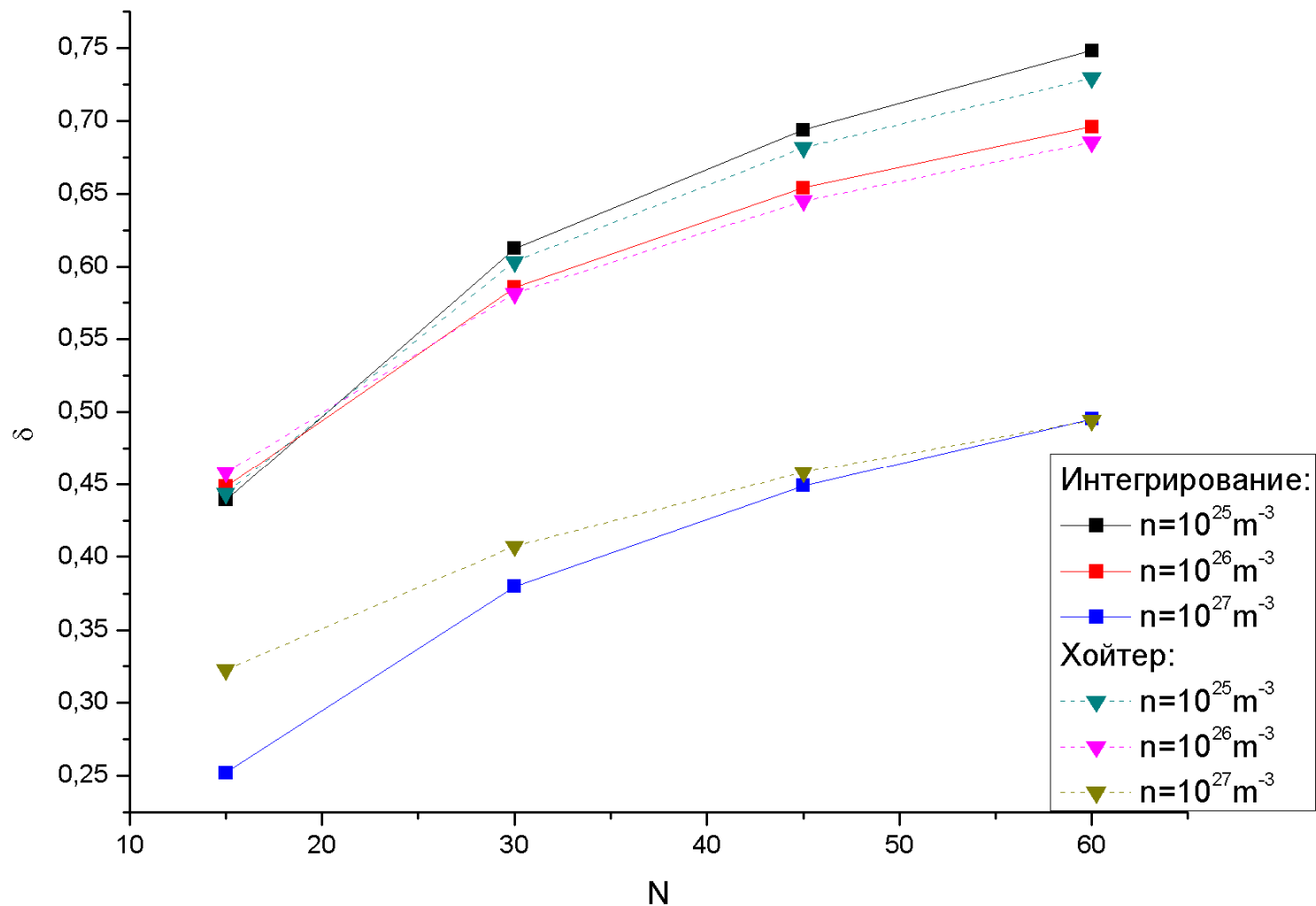
$$2) \bar{N}_{2(M)} = N \frac{4}{x_0} \left(\left(1 + \left(x_0 \frac{(z+1)}{2} \right)^2 \right)^{1/2} - (1 + x_0^2)^{1/2} \right)$$

$$z \approx \left(\left(1 + \frac{2}{x_0} \right)^2 + \left(\frac{\sigma e_0}{2\kappa \epsilon_0 \epsilon k T} \right)^2 \right)^{1/2} - \frac{2}{x_0}$$

Количество связанных противоионов



Коэффициенты связывания противоионов



Заключение

- В работе было решено линейное и нелинейное уравнение Пуассона-Больцмана
- Рассчитано распределение электрического потенциала и концентрации противоионов вокруг агрегата.
- Найден потенциал на поверхности мицеллы с помощью решения нелинейного уравнения Пуассона-Больцмана и с помощью приближённых формул, полученных Дж. Хойтером.
- Найден электрический вклад в работу агрегации ионных мицелл и коэффициенты связывания противоионов мицеллами.

Спасибо за внимание!