

Одеський національний університет імені І. І. Мечникова

(повне найменування вищого навчального закладу)

Факультет математики, фізики та інформаційних технологій

(повне найменування інституту/факультету)

Кафедра теоретичної фізики та астрономії

(повна назва кафедри)

Дипломна робота

бакалавра

(освітньо-кваліфікаційний рівень)

на тему: **«Вплив подвійного електричного шару на оптичні
характеристики суспензій наночастинок»**

«Effect of the electrical double layer on optical characteristics of suspensions of nanoparticles»

Виконав: студент денної форми навчання
напряму підготовки 6.040203 Фізика
Цибузгін Володимир Олегович

Керівник: _____ к.ф.-м.н., доц. Сушко М.Я.

Рецензент: д.ф.-м.н., проф. Гоцульський В.Я.

Рекомендовано до захисту:

Протокол засідання кафедри

№ __ від __.__.2019 р.

Захищено на засіданні ЕК № __

протокол № __ від __.__.2019 р.

Оцінка _____ / _____ / _____
(за національною шкалою, шкалою ECTS, бали)

Завідувач кафедри

Голова ЕК

Адамян В.М.

Шевчук В.Г.

(підпис)

(підпис)

ЗМІСТ

ВСТУП.....	3
1. Розсіяння світла.....	6
2. Подвійний електричний шар.....	7
3. Модель.....	11
4. Загальні положення теорії і результати.....	12
5. Аналіз довжини вільного пробігу фотона.....	17
ВИСНОВКИ.....	20
ЛІТЕРАТУРА.....	21
Додаток А. Програма Wolfram Mathematica 12.0 для обчислення залежності величини довжини вільного пробігу фотона від товщини шару.....	22

ВСТУП

Зручним і результативним способом дослідження внутрішньої структури речовини є метод розсіювання світла.

Розсіювання світла виникає в результаті появи оптичних неоднорідностей в середовищі. Фізичні причини виникнення оптичних неоднорідностей численні і різноманітні. Оптично неоднорідним середовище може стати в результаті сторонніх включень таких, як дефекти в кристалах, краплі води або твердих частинок в атмосфері [1, 2]. З іншого боку, розсіювання світла може спостерігатися в речовинах, вільних від сторонніх включень, але в яких оптичні неоднорідності носять флуктуаційну природу, тобто виникають внаслідок теплового руху частинок речовини [3]. В цьому випадку флуктуації діелектричної проникності речовини викликані в першу чергу флуктуаціями густини речовини, орієнтації молекул, або концентрації компонент розчину.

У даній роботі розглядається розсіювання світла на суспензіях наночастинок та впливу на нього подвійного електричного шару, що формується навколо наночастинок. Увага зосереджується на дослідженні довжини вільного пробігу фотона, яка є одним із найважливіших оптичних параметрів систем.

При розв'язуванні таких задач для концентрованих суспензій широко використовуються неконтрольовані модельні припущення про характер процесів багатократного розсіяння на частинках і багаточастинкових кореляцій в їх положеннях. З другого боку, виникає проблема розходжень в вищих членах ітераційного ряду, що пов'язані із сингулярною поведінкою пропагаторів на малих відстанях. Різниця між вимірними і обчисленими значеннями параметрів концентрованих суспензій досягає 30%. У цілому питання про оптичні параметри суспензій неоднорідних

частинок, що представляють найбільший інтерес для колоїдної хімії та біофізики, залишається в теоретичному відношенні маловивченим.

У цій роботі ми показуємо, що ефективним підходом до вивчення оптичних параметрів концентрованих суспензій виступає метод компактних груп неоднорідностей. Під компактною групою розуміється будь-яка макроскопічна область системи, всередині якої всі відстані між неоднорідностями набагато менше довжини хвилі в середовищі:

$$\sqrt{\varepsilon_0} k_0 |r_i - r_j| \ll 1,$$

де k_0 - модуль хвильового вектора хвилі у вакуумі. Розсіювання світла на таких групах з фізичної точки зору є одноразовим. З усіх членів нескінченних ітераційних рядів ці внески можна виділити, скориставшись сингулярною поведінкою пропагаторів, що описують перевипромінювання між частинками компактних груп.

Доведено [6], що ефекти багаторазових перевипромінювань в компактних групах частинок концентрованої дрібнодисперсної системи ефективно змінюють загальну інтенсивність розсіювання світла в порівнянні із інтенсивністю розсіювання на парі частинок, тоді як спектральний і кутовий розподіли інтенсивності визначаються в обох випадках просторово-часовим Фур'є-образом функції Ван-Хова зважених частинок. Відповідно, для обчислення оптичних параметрів можна користуватися відомими точними розв'язками для парної кореляційної функції моделі твердих куль в наближенні Перкуса-Йевіка. Отримані результати використовуються для обчислення довжини вільного пробігу фотонів в концентрованій дисперсній системі і порівнюються з експериментом.

Ми застосовуємо цей підхід до моделі ізотропних двошарових куль, де зовнішня оболочка моделює присутність подвійного електричного шару та виконуємо аналіз впливу властивостей цього шару на довжину вільного

пробігу фотонів. Показуємо, що вплив подвійного шару при певних умовах є суттєвим і може спостерігатися на експерименті.

Структура роботи наступна. У першому розділі коротко описуються типи розсіювання в концентрованих середовищах. У другому розділі розглядається природа подвійного електричного шару. У третьому розділі описується модель дисперсної системи з двошаровими частинками. У четвертому розділі формулюються основні положення методу компактних груп та їх застосування до теорії розсіювання світла в концентрованих дисперсних системах двошарових частинок та отримуються явні вирази для знаходження довжини вільного пробігу фотонів в таких системах. У п'ятому розділі виконується числовий аналіз впливу подвійного електричного шару на поведінку вільного пробігу фотонів. У висновках сформульовані основні результати роботи.

ВИСНОВКИ

Використовуючи метод компактних груп неоднорідностей, обчислена довжина вільного пробігу концентрованих суспензій двошарових діелектричних частинок. Зовнішній шар частинки моделює присутність подвійного електричного шару.

Виконано аналіз впливу параметрів подвійного шару на довжину вільного пробігу фотонів. Показано, що при відмінності діелектричної проникності шару від проникності частинки на величину порядку 1 та відносній товщині шару порядку 0,1 довжина вільного пробігу фотонів може змінюватися на величину порядку 40%. Така зміна може бути зареєстрована експериментально.

Отримані результати роблять актуальною задачу пошуку відповідних експериментальних даних з метою виявлення ролі подвійного шару у формуванні оптичних властивостей неоднорідних систем.

_____ Цибузгін В.О.

ЛІТЕРАТУРА

1. М. Борн, Э. Вольф - Основы оптики, Наука, 1973, с 219-224.
2. И. З. Фишер – Статистична теорія рідини, Наука, 1961, с 53-65.
3. В. Л. Кузьмін – ЖЕТФ, 2005, 127, с 1173-1180.
4. К. Борен, Д. Хафмен – Поглинання і розсіювання світла малими частинками, Мир, 1986, с 660 .
5. М. Сушко – Журнал фізичних досліджень т. 13, № 4, 2009, 4708(5 с.).
6. P. M. Saulnier, M. P. Zinkin, and G. H. Watson Phys. Rev. 2, , 1990, V. 2 No 4, 2622-2624.

**Додаток А. Програма Wolfram Mathematica 12.0 для обчислення
залежності величини довжини вільного пробігу фотона від товщини
шару**

ClearAll["Global`*"]

$\epsilon_0=1.33^2$;(*діелектрична проникність рідини, в якій зважені наночастинки (вода)*)

$\epsilon_1=1.59^2$;(*д. п. наночастинки*)

$\epsilon_2[\delta__] = \epsilon_1(1 + \delta__)$;(* д. п. подвійного електричного шару*)

$\lambda_0=0.5145 \cdot 10^{-6}$;

(* $\lambda_0=0.5785 \cdot 10^{-6}$);*)

$rad_1=0.087/2 \cdot 10^{-6}$;(*радіус наночастинки без урахування п. е. ш.*)

$rad_2[\delta__] = rad_1(1 + \delta__)$;(*її радіус з урахуванням п. е. ш.*)

$\delta=0.2$;

$n[\eta__] = \eta / (4 \text{ Pi } rad_1^3)^{1/3}$;(*числова щільність диспергованих наночастинок;
 η - об'ємна концентрація д. н.*)

$d_2[\delta__] = 2 \cdot rad_2[\delta__]$;(*середній діаметр наночастинки разом із подвійним шаром*)

$k_0 = 2 \text{ Pi } / \lambda_0$;(* волновой вектор світла в вакуумі*)

$k = k_0 \sqrt{\epsilon_0}$;(*в. в. с. у воді*)

$q[\theta__] = 2 k \text{ Sin}[\theta/2]$ (*зміна в. в. с. внаслідок розсіювання в середі*)

$aa_1[\theta__, \epsilon_1__] = 3 ((\epsilon_1 - \epsilon_0) rad_1) / ((\epsilon_1 + 2\epsilon_0) q[\theta]^2) (\text{Sin}[q[\theta] rad_1] / (q[\theta] rad_1) - \text{Cos}[q[\theta] rad_1])$ (*ефективна поляризованість частинки без урахування п. е. ш.*)

$aa_2[\theta__, \epsilon_1__, \delta__, \delta__] = 3 ((\epsilon_1 - \epsilon_0) rad_1) / ((\epsilon_1 + 2\epsilon_0) q[\theta]^2) (\text{Sin}[q[\theta] rad_1] / (q[\theta] rad_1) - \text{Cos}[q[\theta] rad_1]) + 3 (\epsilon_2[\delta__] - \epsilon_0) / ((\epsilon_2[\delta__] + 2\epsilon_0) q[\theta]^2) (rad_2[\delta__] (\text{Sin}[q[\theta] rad_2[\delta__]] / (q[\theta] rad_2[\delta__]) - \text{Cos}[q[\theta] rad_2[\delta__]]) - rad_1 (\text{Sin}[q[\theta] rad_1] / (q[\theta] rad_1) - \text{Cos}[q[\theta] rad_1]))$ (*е. п. ч. з урахуванням п. е. ш.*)

```

 $\alpha[\eta\_]:= (2\eta + 1)^2 / (1 - \eta)^4;$ 
 $\beta[\eta\_]:= -((6 \eta (\eta/2 + 1)^2) / (1 - \eta)^4);$ 
 $\gamma[\eta\_]:= (\alpha[\eta\_]*\eta) / 2;$ 
 $c[\theta\_,\eta\_,\delta\_]:= (4\pi d2[\delta]) / q[\theta]^2 ((\alpha[\eta\_]+\beta[\eta\_]+\gamma[\eta\_])(\text{Cos}[q[\theta] d2[\delta]] - \text{Sin}[q[\theta] d2[\delta]]) / (q[\theta] d2[\delta])) - \beta[\eta\_](\text{Sin}[q[\theta] d2[\delta]] / (q[\theta] d2[\delta]) + 2 (\text{Cos}[q[\theta] d2[\delta]] - 1) / (q[\theta]^2 d2[\delta]^2)) - \gamma[\eta\_](3 \text{Sin}[q[\theta] d2[\delta]] / (q[\theta] d2[\delta]) + 12 \text{Cos}[q[\theta] d2[\delta]] / (q[\theta]^2 d2[\delta]^2) - 24 \text{Sin}[q[\theta] d2[\delta]] / (q[\theta]^3 d2[\delta]^3) - 24 (\text{Cos}[q[\theta] d2[\delta]] - 1) / (q[\theta]^4 d2[\delta]^4)))$ ; (*Фур'є-образ прямої кореляційної функції*)
 $\text{struc}[\theta\_,\eta\_,\delta\_]:= 1 / (1 - \eta[\eta\_]*c[\theta,\eta,\delta]);$  (*структурний фактор твердих куль в наближенні Перкуса-Йевіка*)
 $l1[\epsilon1\_,\eta\_,\delta\_]:= 1 / (2 \text{Pi} k0^4 \epsilon0^2 / 2 * \text{NIntegrate}[\text{Sin}[\theta] (1 + \text{Cos}[\theta]^2) \text{Abs}[aa1[\theta,\epsilon1]]^2 \eta[\eta_*] \text{struc}[\theta,\eta,\delta], \{\theta, 0.001, \text{Pi}\}]);$  (*довжина вільного пробігу фотона без урахування п. е. ш.*)
 $l2[\epsilon1\_,\delta\epsilon\_,\eta\_,\delta\_]:= 1 / (2 \text{Pi} k0^4 \epsilon0^2 / 2 * \text{NIntegrate}[\text{Sin}[\theta] (1 + \text{Cos}[\theta]^2) \text{Abs}[aa2[\theta,\epsilon1,\delta\epsilon,\delta]]^2 \eta[\eta_*] \text{struc}[\theta,\eta,\delta], \{\theta, 0.001, \text{Pi}\}]);$  (*д.в.п.ф. з урахуванням п. е. ш.*)
 $M[\epsilon1\_,\delta\epsilon\_,\eta\_,\delta\_]:= l2[\epsilon1,\delta\epsilon,\eta,\delta] / l1[\epsilon1,\eta,\delta];$  (*відношення довжин пробігу фотона (з шаром і без)*)
 $[\epsilon1\_,\delta\epsilon\_,\eta\_,\delta\_]:= l2[\epsilon1,\delta\epsilon,\eta,\delta] / l1[\epsilon1,\eta,\delta];$ 
 $\text{Plot}[M[\epsilon1, 1.5, 0.068, \delta], \{\delta, 0, 1\}, \text{PlotStyle} \rightarrow \text{Directive}[\text{Thick}], \text{AxesLabel} \rightarrow \{\delta, M\}, \text{BaseStyle} \rightarrow \text{FontSize} \rightarrow 16]$ 

```