УДК 539.612
Андрей Скапцов, Владимир Юревич
Могилевский государственный университет продовольствия, Республика Беларусь

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЭНЕРГИИ АДГЕЗИИ ПРИ КОНТАКТЕ НАНОЧАСТИЦА-ПОВЕРХНОСТЬ

Andrey Skaptsov, VladimirYurevich
FINDING OF ADHESION ENERGY AT CONTACT NANOPARTICLE-SURFACE

При взаимодействии частиц с поверхностью, рассматриваемом в большинстве задач теории адгезии, следует учитывать молекулярное взаимодействие, электростатическое взаимодействие, механический захват частиц, наличие молекул воды, как на самой поверхности, так и на частицах, двойной электрический слой и химические связи. Для наночастиц следует учитывать только первую из указанных причин.

Теория молекулярного взаимодействия Брэдли-Гамакера основана на подходе Ван-дер-Ваальса. Атомы тела рассматриваются как диполи, и взаимодействие между этими диполями суммируется по всем атомам. Это суммарное взаимодействие выражается постоянной Гамакера. Взаимосвязь между постоянными Гамакера для двух различных материалов может быть представлена в виде:

$$A_{12} = \sqrt{A_{11}A_{22}}\,, \tag{1}$$

где A_{11} и A_{22} – постоянные Гамакера для веществ 1 и 2, соответственно.

Если между двумя веществами (частица-поверхность) существует третья среда, то цепочка взаимодействия может быть описана выражением:

$$A_{132} = A_{12} + A_{33} - A_{13} - A_{23}\,. \tag{2}$$

Известны две теории, позволяющие определить постоянную Гамакера. Согласно теории Лондона, получившей название микроскопической, полная энергия взаимодействия между атомами определяется по формуле:

$$E_{11} = \frac{\beta_{11}}{r_0^6}\,, \tag{3}$$

где r_0 - расстояние между атомами, а β_{11} – некоторая константа, для вычисления которой используют различные приближения. Теория Лондона, основанная на парном взаимодействии между атомом и телом, приводит к следующему результату:

$$A_{11} = \pi^2 q_1^2 \beta_{11}\,, \tag{4}$$

где q_1 – число атомов, приходящихся на единицу объема. Для двух различных материалов:

$$A_{12} = \pi^2 q_1 q_2 \beta_{12}\,, \tag{5}$$

где $\beta_{12} = \sqrt{\beta_{11}\beta_{22}}$.

Теория Лондона справедлива только для случая, когда расстояние между атомами и телом менее 10 нм.

Несколько иной подход предложен в макроскопической теории, допущением которой является то, что энергия взаимодействия между атомами определяется, как и предыдущем случае, формулой (3). Энергия взаимодействия между телами плоской формы может быть рассчитана по формуле:

$$E_{132} = -\frac{A_{132}}{12\,\pi\, z_0^2}, \tag{6}$$

где z_0 – расстояние между телами; E_{132} – энергия, приходящаяся на единицу площади.

Для двух сфер радиусами R_1 и R_2 , находящихся в среде 3 на расстоянии d друг от друга (расстояние между центрами сфер) энергия парного взаимодействия описывается выражением:

$$E_{132} = -\frac{A_{132}}{3}\left[\frac{R_1R_2}{d^2-(R_1+R_2)^2}+\frac{R_1R_2}{d^2-(R_1-R_2)^2}+\frac{1}{2}\ln\frac{d^2-(R_1+R_2)^2}{d^2-(R_1-R_2)^2}\right]. \tag{7}$$

Для малых расстояний между сферами $z_0 = d-(R_1+R_2)$ и формула (7) упрощается до вида

$$E_{132} = -\frac{A_{132}R}{12\,z_0}. \tag{8}$$

Для случая взаимодействия сферы с плоской поверхностью формула (7) дает следующий результат:

$$E_{132} = -\frac{A_{132}R}{6\,z_0}. \tag{9}$$

Таким образом, энергия адгезии $E_{ад}$ равная E_{132} может быть определена по формуле (9), где R=r – радиус частицы. Введем обозначение постоянной Гамакера A_{132}=A. В формуле (9) z_0 можно считать минимальным размером между частицей и поверхностью, при котором происходит отскок частицы. При выполнении расчетов, как правило, принимают z_0 равным 0,4 нм. С учетом введенных обозначений выражение (9) принимает вид:

$$E_{ад} = -\frac{A\,r}{6\,z_0}. \tag{10}$$

Несколько иной подход применяется в модели адгезии Джонсона-Кендалла-Робертса. Энергию адгезии можно рассчитать, если знать энергию, приходящуюся на единицу поверхности (так называемую приведенную энергию адгезии $\sigma_{P,S}$) и площадь контакта частица-поверхность:

$$E_{ад} = \frac{1}{4}\sigma_{P,S}\,\pi\, d_0^{\,2}. \tag{11}$$

Здесь d_0 – диаметр площади контакта. Величину d_0 можно оценить, используя следующее выражение:

$$d_0 = \left[9\pi^2 D_p^2 \sigma_{P,S}\left(K_p + K_s\right)\right]^{1/3}. \tag{12}$$

Здесь индексы «p» и «s» относятся к частице и поверхности, соответственно; K_p и K_s – механические константы частицы и поверхности.

Используя выражения (10) и (11) можно получить явный вид формулы для расчета критической скорости, при которой начинается отскок наночастиц от поверхности волокон фильтра, и оценить вероятность улавливания частиц волокнами.