

V Міжнародна науково-технічна конференція «Стан і перспективи харчової науки та промисловості»

УДК 539.612

Андрей Скапцов, Владимир Юревич

Могилевский государственный университет продовольствия, Республика Беларусь

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЭНЕРГИИ АДГЕЗИИ ПРИ КОНТАКТЕ НАНОЧАСТИЦА-ПОВЕРХНОСТЬ

Andrey Skaptsov, Vladimir Yurevich

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:

$$A_{12} = \sqrt{A_{11} A_{22}}, \quad (1)$$

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:

$$A_{132} = A_{12} + A_{33} - A_{13} - A_{23}. \quad (2)$$

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

$$E_{11} = \frac{\beta_{11}}{r_0^6}, \quad (3)$$

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:

$$A_{11} = \pi^2 q_1^2 \beta_{11}, \quad (4)$$

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

$$A_{12} = \pi^2 q_1 q_2 \beta_{12}, \quad (5)$$

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:

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

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:

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

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

$$E_{132} = -\frac{A_{132} R}{12 z_0}. \quad (8)$$

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

$$E_{132} = -\frac{A_{132} R}{6 z_0}. \quad (9)$$

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:

$$E_{ад} = -\frac{A r}{6 z_0}. \quad (10)$$

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:

$$E_{ад} = \frac{1}{4} \sigma_{p,s} \pi d_0^2. \quad (11)$$

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

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

Здесь индексы «р» 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.