

Дипольный момент кластера, образованного из частиц, обладающих постоянным дипольным моментом

Балабин Роман Михайлович

магистрант

Российский государственный университет нефти и газа им. И.М. Губкина, Москва,
Россия

E-mail: balabin.r@gubkin.ru

В настоящее время считается твердо установленным, что межмолекулярные силы имеют в основном электростатическую природу. Кроме того, известно, что дипольный момент является важным параметром, характеризующим физическое взаимодействие частиц и молекул.

Многие известные модели физического взаимодействия одиночных частиц построены с учетом только диполь-дипольного фактора взаимодействия. Их результаты нашли широкое применение при описании не склонных к специфическим видам взаимодействия веществ.

Дипольный момент одиночных частиц известен для целого ряда веществ. Но для случая макромолекул и иных частиц, склонных к ассоциации, подобных данных оказывается недостаточно для расчета их поведения в смесях и растворах. Для полного описание систем, содержащих указанные вещества, необходимо знание дипольного момента, как одиночной частицы, так и агрегата из нескольких таких частиц. Причем, число частиц в агрегате может меняться в широких пределах: от двух (процесс димеризации) до многих миллионов и более (процесс образования новой фазы).

Из вышесказанного можно сделать вывод, что создание теории расчета дипольного момента кластера (или фрактала) имеет большое значение для успешного изучения межмолекулярного взаимодействия на всех уровнях организации материи. В этой работе предпринята попытка создания подобной теории.

Для построения указанной теории авторами была рассмотрена задача о присоединении одиночной частицы к агрегату при наличии у обоих дипольного момента. Ниже изложены основные моменты, принятые за аксиому, при расчете дипольного момента кластера из одинаковых частиц, обладающих постоянным дипольным моментом:

- энергия диполь-дипольного взаимодействия намного меньше средней кинетической энергии частиц;
- взаимодействием диполей не в непосредственной близости друг от друга (до момента присоединения частицы) можно пренебречь;
- распределение диполей по направлениям вблизи границы агрегата соответствует распределению Гиббса;
- частицы не обладают поляризуемостью.

В результате рассмотрения процесса агрегации получена формула для расчета дипольного момента кластера (образованного из произвольного количества частиц N). Для простейшего случая $N > 10^5$ данное решение упрощается до обычной степенной зависимости:

$$p_N = p_0 |N^\beta \tag{1}$$

где параметр β определяется соотношением энергии диполь-дипольного взаимодействия двух элементарных частиц («мономеров») к средней кинетической энергии системы.