

УДК 535.211

PACS: 81.16.-c

Влияние конечного размера наночастиц на их пространственное распределение в жидкости в однородном световом поле

В. И. Крылов, Г. Д. Иванова, И. Н. Егоршин

Рассмотрена задача осаждения наночастиц в жидкости под действием сил светового давления. Определена зависимость концентрации наночастиц в жидкости от координаты, вдоль которой на частицы действует постоянная сила. Результат получен с учетом отталкивания наночастиц без учета их притяжения друг к другу. Показано, что найденная зависимость может существенно отличаться от полученной в рамках модели идеального газа наночастиц.

Ключевые слова: наносuspензия, световое давление, осаждение наночастиц, неоднородная концентрация.

Ссылка: Крылов В. И., Иванова Г. Д., Егоршин И. Н. // Прикладная физика. 2020. № 3. С. 11.

Reference: V. I. Krylov, G. D. Ivanova, and I. N. Egorshin, Applied Physics, No. 3, 11 (2020).

Введение

В настоящее время существует ряд экспериментальных и теоретических работ, посвященных изучению движения наночастиц в прозрачных средах под действием интенсивного электромагнитного излучения (см., например, [1–3]). В частности рассматриваются возможности образования под действием излучения различных структур на подложке, которая представляет собой дно кюветы, содержащей наносuspензию [4]. В теоретических работах [1–3] оптическое осаждение анализировалось в модели идеального газа наночастиц, т. е. в этих работах пренебрегалось размерами наночастиц и их взаимодей-

ствием друг с другом. Понятно, что при достаточно большой концентрации наночастиц, пренебрегать их взаимодействием уже нельзя. Обычно модели газа наночастиц с учетом их взаимодействия решаются численными методами [5–7].

В данной работе получено точное аналитическое решение задачи определения пространственного распределения находящихся в ограниченном объеме наночастиц, на которые действует внешняя сила (сила светового давления). Мы будем предполагать, что взаимодействие между наночастицами проявляется только в виде их отталкивания друг от друга (подобно модели жестких сфер).

В уравнении состояния реального разреженного газа отталкивание его молекул друг от друга проявляется в появлении параметра b величиной порядка объема молекулы во втором вириальном коэффициенте. При переходе к рассмотрению реального газа с произвольной плотностью, эта величина становится подгоночным параметром в каком-либо интерполяционном уравнении. Подобный подход можно применить и к взаимодействующим наночастицам, которые находятся в жидкости в равновесном состоянии.

Действительно, наночастицы, находящиеся в макроскопическом, но малом объеме V

Крылов Владимир Иванович¹, профессор кафедры, д.ф.-м.н.

Иванова Галина Дмитриевна¹, ст. преподаватель.

Егоршин Иван Николаевич², ст. преподаватель.

¹ Дальневосточный государственный университет путей сообщения.

Россия, 680021, г. Хабаровск, ул. Серышева, 47.

E-mail: krylov_vladimir@mail.ru; tmeh@festu.khv.ru

² Тихоокеанский Государственный университет.

Россия, 680035, г. Хабаровск, ул. Тихоокеанская, 136.

E-mail ikarrus@mail.ru

Статья поступила в редакцию 25 марта 2020 г.

© Крылов В. И., Иванова Г. Д., Егоршин И. Н., 2020

по сравнению с объемом кюветы, можно рассматривать, как квазизамкнутую и статистически независимую подсистему с переменным числом частиц, а вероятность найти подсистему в некотором состоянии определяется большим каноническим распределением [8], содержащим потенциальную энергию. Если ее можно представить в виде парных, тройных и т. д. взаимодействий между частицами, то термическое уравнение состояния $P = P(V, T, \bar{N})$ (T – температура (в дальнейшем используем энергетические единицы), \bar{N} – среднее число частиц), для достаточно разреженного «газа» наночастиц можно записать в вириальной форме, также как и для обычного реального газа. При переходе же к произвольной плотности наночастиц, вириальное уравнение по аналогии с реальным газом можно заменить одним из интерполяционных уравнений [8, 9], наиболее известные из которых – уравнение Ван-дер-Ваальса, первое и второе уравнения Дитеричи и уравнение Бергло [9]. Причем, если пренебречь притяжением между наночастицами, то все четыре вышеперечисленные уравнения состояния для однородной наносuspензии будут иметь одинаковый вид:

$$P(V - b\bar{N}) = \bar{N}T. \quad (1)$$

Данное выражение позволяет определить зависимость концентрации n от координаты z , вдоль которой на наночастицы действует постоянная сила F .

Постановка задачи и основные результаты

Пусть N наночастиц находятся в кювете с жидкостью. Ее объем равен Sh (S – площадь основания, h – высота). Сначала наножидкость однородна с концентрацией наночастиц $\bar{n} = N/Sh$. В некоторый момент времени на каждую наночастицу начинает действовать внешняя постоянная сила $\mathbf{F} = (0, 0, -F)$, направленная антипараллельно оси z декартовой системы координат, причем, плоскость $z = 0$ соответствует основанию кюветы. Очевидно, что после «включения» внешней силы концентрация наночастиц начнет изменяться, и за достаточно большой интервал времени (физически бесконечно большой) ус-

тановится термодинамическое равновесие. Причем, для наножидкости, находящейся в тонком слое Sdz , где ее можно считать однородной, будет выполняться уравнение состояния (1), если в нем заменить V на Sdz и \bar{N} на dN . Тогда, введя $n = dN/Sdz$ – концентрацию наночастиц в сечении наножидкости с координатой z , перепишем (1) в виде

$$P = nT / (1 - bn), \quad (2)$$

или

$$n = P / (Pb + T). \quad (3)$$

Подставляя (3) в очевидное выражение

$$dP = -nFdz,$$

и интегрируя его, получим:

$$b(P - P_0) + T \ln(P / P_0) = -Fh(z / h), \quad (4)$$

где P_0 – давление «газа» наночастиц при $z = 0$.

Подставляя (2) в (4) и введя безразмерный параметр $q = Fh/T$, нетрудно найти:

$$\begin{aligned} (b/q) \ln(n_0 / n) - n_0 / (bn_0 - 1) - \\ - (1/q) \ln(nT / ((1 - bn)P_0)) = (z / h), \end{aligned} \quad (5)$$

где в соответствии с (3) $n_0 = P_0 / (P_0b + T)$.

Для того, чтобы сравнивать зависимости (5) с формулой Больцмана (для концентрации идеального газа), перепишем эту формулу в виде

$$(1/q) \ln(n_0 / n) = (z / h), \quad (6)$$

а параметры n_0 и P_0 выразим через \bar{n} , при этом учтем, что в (5) и в (6) они определяются различными математическими выражениями.

Очевидно, что для (6) такая задача решается простым интегрированием, если воспользоваться (6) и (3) с $b = 0$:

$$N = Sh \int_0^1 n_0 \exp(-q\tilde{z}) d\tilde{z} = Sh \frac{n_0}{q} (1 - e^{-q}),$$

где $\tilde{z} = z/h$.

Тогда

$$n_0 = \frac{\bar{n}q}{1 - e^{-q}}. \quad (7)$$

Для определения через \bar{n} соответствующих параметров, входящих в (5) (т. е. при $b \neq 0$), воспользуемся очевидным соотношением

$$Shd(\tilde{z}n(\tilde{z})) = Shn(\tilde{z})d\tilde{z} + Sh\tilde{z}dn. \quad (8)$$

Интегрируя (8) по \tilde{z} от нуля до единицы, а по n от $n_0 = n(0)$ до $n_1 = n(1)$ и учитывая, что

$$N = Sh \int_0^1 n(\tilde{z}) d\tilde{z},$$

получим:

$$N = Shn_1 - Sh \int_{n_0}^{n_1} \tilde{z} dn. \quad (9)$$

Подставляя в (9) выражение (5) и проведя элементарное интегрирование, получим:

$$\bar{n} = n_1 - \frac{1}{q} \left[\frac{P_0}{Tn_0} (1 - n_0) + n_1 \ln \left(\frac{P_0}{P_1} \right) \right]. \quad (10)$$

Положив в (5) $z = h$ и умножив обе части этого выражения на n_1 , запишем его в виде:

$$n_1 \ln \frac{P_0}{P_1} = qn_1 + n_1 \frac{b(P_1 - P_0)}{T}. \quad (11)$$

Заменяя в (10) слагаемое, содержащее логарифм, на правую часть выражения (11), после достаточно простых, но несколько громоздких вычислений, получим:

$$n_1 = \frac{P_0/T - q\bar{n}}{1 + b(P_0/T - q\bar{n})} = \frac{n_0 - q\bar{n} + q\bar{n}n_0b}{1 - bq\bar{n} + q\bar{n}n_0b^2}. \quad (12)$$

Используя (2), запишем (5) при $z = h$ в виде:

$$b \left(\frac{n_1}{1 - n_1b} - \frac{n_0}{1 - n_0b} \right) + \ln \frac{P_1}{P_0} = -q. \quad (13)$$

Подставляя в (13) величину n_1 , определяемой правой частью выражения (12), найдем:

$$bq\bar{n} + \ln \frac{P_0}{P_1} = q,$$

или

$$P_0 = P_1 \exp[q(1 - b\bar{n})]. \quad (14)$$

Снова используя (2), получим из (14) значение наибольшей концентрации наночастиц при $z = 0$

$$n_0 = \frac{q\bar{n}}{1 + bq\bar{n} - \exp[-q(1 - b\bar{n})]}. \quad (15)$$

Нетрудно заметить, что выражение (15) совпадает с формулой (7) при $b = 0$.

Подставляя (15) в (12) получим значение n_1 – наименьшей концентрации наночастиц при $z = h$:

$$n_1 = \frac{q\bar{n} \exp[-q(1 - b\bar{n})]}{1 + (bq\bar{n} - 1) \exp[-q(1 - b\bar{n})]}. \quad (16)$$

Несложно проверить, что при $b = 0$ выражение (16) будет совпадать с формулой, определяющей наименьшую концентрацию взаимодействующих наночастиц, которую нетрудно получить из $n = n_0 \exp(-Fz/T)$ и (7).

Наконец, используя (2), (5) и (15), найдем \tilde{z} как функцию $\tilde{n} = n/\bar{n}$:

$$\tilde{z} = \frac{\tilde{b}}{1 - \exp[-q(1 - \tilde{b})]} - \frac{\tilde{b}\tilde{n}}{q(1 - \tilde{n}\tilde{b})} + \frac{1}{q} \ln \frac{1 - \tilde{n}\tilde{b}}{\tilde{n}} + \frac{1}{q} \ln \frac{q}{1 - \exp[-q(1 - \tilde{b})]}, \quad (17)$$

где введен безразмерный параметр $\tilde{b} \equiv \bar{n}b = Nb/(Sh)$, численное значение которого порядка величины относительного объема всех наночастиц.

Анализ полученных результатов

Из выражения (17) следует, что зависимость $\tilde{z} = \tilde{z}(\tilde{n})$ (или $\tilde{n} = \tilde{n}(\tilde{z})$) включает в себя только два безразмерных параметра $\tilde{b} = bN/Sh$ и $q = Fh/T$.

Уже из формулы (2) следует, что $bn_0 = \tilde{b}\tilde{n}_0 < 1$. Если теперь воспользоваться выражением (15), то получаем неравенство $0 < 1 - \exp[-q(1 - \tilde{b})]$, т. е. \tilde{b} также должно быть меньше единицы. В дальнейшем мы будем рассматривать $\tilde{b} = 0,00001$. В соответствии с соображениями, изложенными в [3, 10], для наночастиц с радиусами $0,5 \times 10^{-6}$ см. ве-

личина параметра q (при $T = 300$ К и $h = 1$ см) может достигать значений порядка 10^7 , когда лазерное излучение с длиной волны $0,5 \times 10^{-4}$ см и мощностью в 1 Вт сфокусировано в пятне с радиусом его длины волны [3]. Понятно, что для одномерного приближения радиус лазерного пучка должен быть близок к радиусу основания кюветы, поэтому, чтобы сила, приложенная к каждой частице, не изменилась, мощность излучения должна быть выше, что можно реализовать с помощью современных квантовых генераторов.

Численный анализ функций (17) и (6) (или (17) с $\tilde{b} = 0$) показал, что при значении параметра $\tilde{b} = 0,00001$ они начинают заметно отличаться друг от друга, если $q \geq 10^4$, но наиболее существенное отличие происходит при $q \geq 10^6$.

На рисунке 1, а и б показаны графики функций (17) с $q = 10^7$ и $\tilde{b} = 0,00001$ на перекрывающихся интервалах: $\tilde{n} \in \langle 1, 100 \rangle$ и $\tilde{n} \in \langle 0, \tilde{n}_0 \rangle$ ($\tilde{n}_0 = 99009,90099$), соответственно. На рисунке 2, а и б показаны графики функций (6) с $q = 10^7$ также на перекрываю-

щихся интервалах: $\tilde{n} \in 1, 100$ и $\tilde{n} \in \langle 0, \tilde{n}_0 \rangle$ ($\tilde{n}_0 = 10^7$), соответственно. Нетрудно заметить, что построенные кривые существенно отличаются друг от друга при всех \tilde{n} . Отметим, что, как следует из (15), при стремлении параметра q к бесконечности, максимальная концентрация \tilde{n}_0 ограничена величиной $1/\tilde{b}$: $n_0 = 1/b$, тогда как \tilde{n}_0 (при $\tilde{b} = 0$ см., также (7)) стремится к бесконечности. Таким образом, в выражениях (15), (17) учтен эффект несжимаемости наножидкости. То, что приведенные на рисунках графики построены не от значения $\tilde{n}_1 = 4,07 \times 10^{-4342895}$ для функции (17), и не от $\tilde{n}_1 = 4,07 \times 10^{-4342938}$ для функции (6), связано с тем, что, при выбранном q , у дна кюветы создается относительная концентрация частиц с чрезвычайно большим градиентом в очень тонком слое толщиной порядка $10^{-5}h$, поэтому, чтобы заметить отличие кривых $\tilde{z}(\tilde{n})$ от осей абсцисс и ординат, при значениях $\tilde{n} \in [\tilde{n}_1, \tilde{n}_0]$ и $\tilde{z} \in [0, 1]$, высота и ширина каждого графика должны быть порядка 10^5 см.

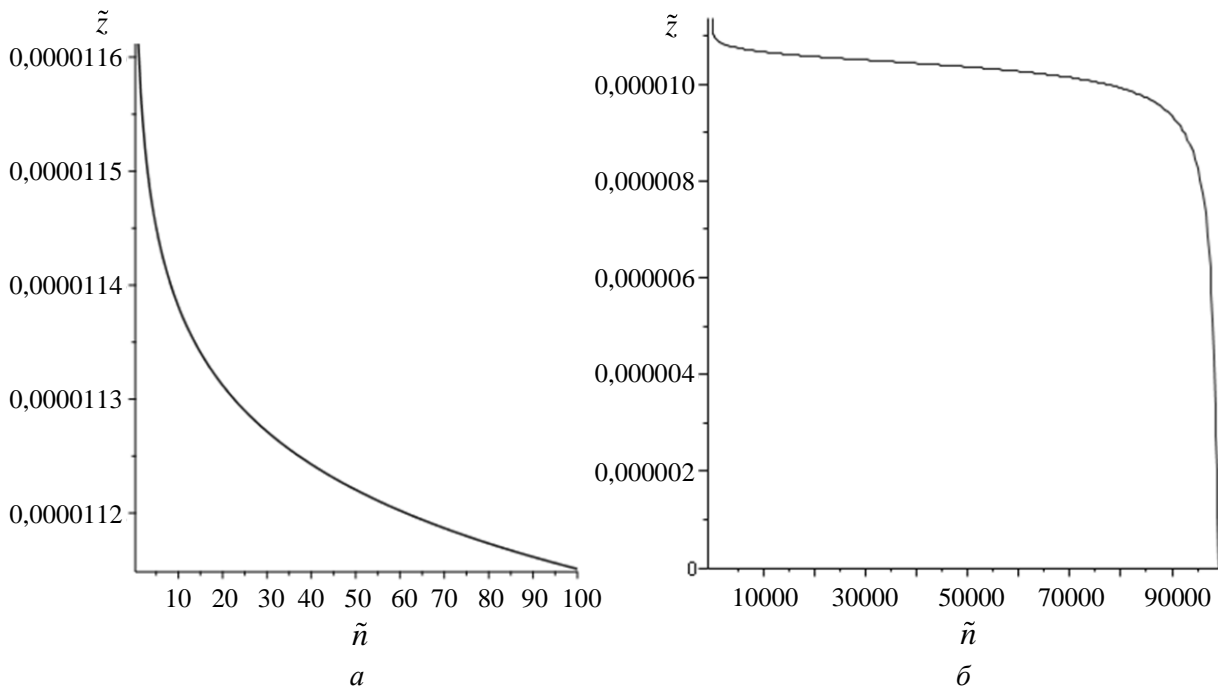


Рис. 1 (а, б). Функции $\tilde{z} = \tilde{z}(\tilde{n})$, определяемые выражениями (17) при $\tilde{b} = 0,00001$ и $q = 10^7$.

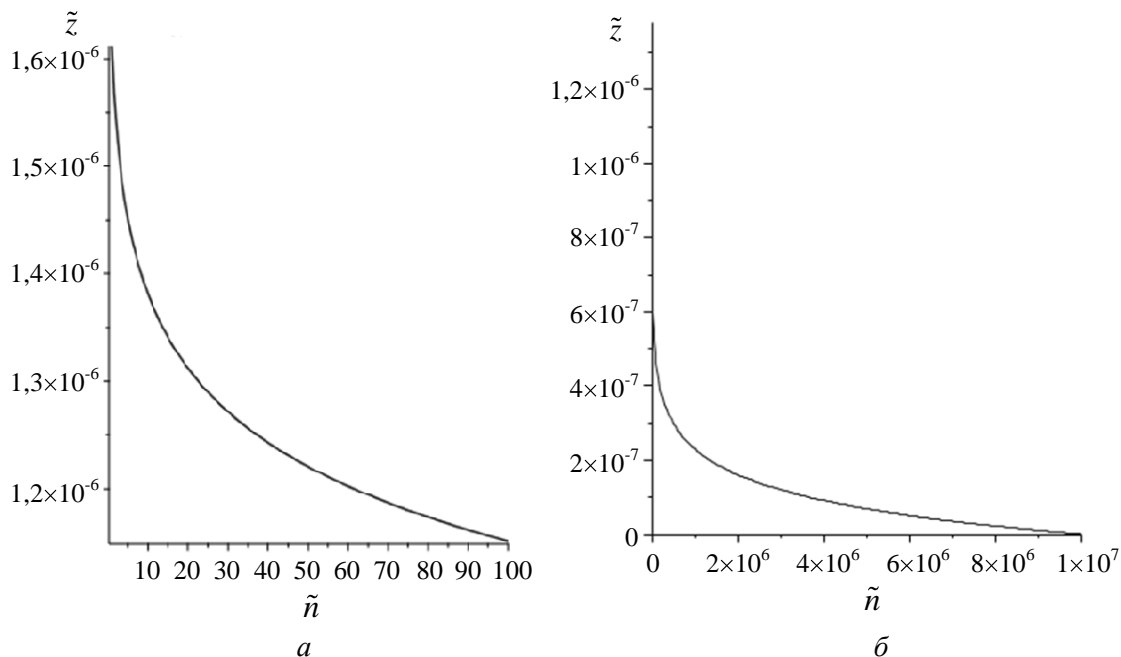


Рис. 2 (а, б). Функции $\tilde{z} = \tilde{z}(\tilde{n})$, определяемые выражениями (6) при $\tilde{b} = 0$ и $q = 10^7$.

Заключение

Таким образом, использование для нахождения концентрации наночастиц (как функции координат) сравнительно простых принципов равновесной статистики вместе с интерполяционными термическими уравнениями, в которых учитывается объем наночастиц, приводит к существенному отличию (17) от результатов, ранее найденных в литературе, когда объем наночастиц не учитывался.

Полученные выражения (15)–(17) демонстрируют возможность управления наночастицами в жидкости для формирования тонкоплёночных структур при помощи лазерного излучения и представляют интерес для разработки оптических методов управления частицами, а также для методов нелинейной оптики и диагностики жидкофазных сред.

Работа поддержана грантом 21с/2019
 Министерства образования и науки
 Хабаровского края.

ЛИТЕРАТУРА

1. Сырников Д. А., Куркотов А. Д., Крылов В. И. // VIII Международная конференция по фотонике и информационной оптике. Сборник научных трудов. 2019. С. 453–454.
2. Khe V. K., Ivanov V. I., Ivanova G. D., Chigrin P. G. // Proc. SPIE. 2017. 10466. P. 104664K.
3. Иванов В. И., Иванова Г. Д., Крылов В. И., Хе В. К. // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. 2018. № 10. С. 286.
4. Duhr S., Braun D. // Applied Physics Letters. 2005. Vol. 86. P. 131921.
5. Chintamani P., Shalini M., Agnel P., Meera V., Tejas I. H. and Radha S. // International Journal of Chemical and Physical Sciences. 2014. Vol. 3 (5). P. 44.
6. Buzzaccaro S., Tripodi A., Rusconi R., Vigolo D., Piazza R // Journal of Physics: Condensed Matter. 2008. Vol. 20. P. 494219.
7. Ivanov V. I., Ivanova G. D., Krylov V. I., Khe V. K. // Proceedings of SPIE - The International Society for Optical Engineering Ser. "Asia-Pacific Conference on Fundamental Problems of Opto- and Microelectronics" 2017. P. 101760V.
8. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Статистическая физика. – М.: Наука, 1964.
9. Базаров И. П. Термодинамика. – М.: Высшая школа, 1991.
10. Эшкин А. // УФН. 1973. Т. 110. Вып. 1. С. 101.

Influence of the final size of nanoparticles on their spatial distribution in a liquid in a uniform light field

V. I. Krylov¹, G. D. Ivanova¹, and I. N. Egorshin²

¹ Far Eastern State Transport University
47 Serysheva st., Khabarovsk, 680021, Russia

² Pacific National University
136 Tikhookeanskaya st., Khabarovsk, 680035, Russia

Received March 25, 2020

The problem of the deposition of nanoparticles in a liquid under the action of light pressure forces is considered. The dependence of the concentration of nanoparticles in a liquid on the coordinate along which a constant force acts on the particles is determined. The result was obtained taking into account the repulsion of nanoparticles without taking into account their attraction to each other. It is shown that the found dependence can significantly differ from that obtained in the framework of the model of an ideal gas of Nanoparticles.

Keyword: nanosuspension, light pressure, deposition of Nanoparticles, inhomogeneous concentration.

REFERENCES

1. D. A. Syrnikov, A. D. Kurkotov, and V. I. Krylov, in *VIII International Conference on Photonics and Information Optics. Collection of scientific papers*. pp. 453–454 (2019).
2. V. K. Khe, V. I. Ivanov, G. D. Ivanova, and P. G. Chigrin, *Proc. SPIE* **10466**, 104664K (2017).
3. V. I. Ivanov, G. D. Ivanova, V. I. Krylov, and V. K. Khe, *Physico-chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials*, No. 10, 286. (2018).
4. S. Duhr and D. Braun, *Applied Physics Letters* **86**, 131921 (2005).
5. P. Chintamani, M. Shalini, P. Agnel, V. Meera, I. H. Tejas, and S. Radha, *International Journal of Chemical and Physical Sciences* **3** (5), 44 (2014).
6. S. Buzzaccaro, A. Tripodi, R. Rusconi, D. Vigolo, and R. Piazza, *Journal of Physics: Condensed Matter*. **20**, 494219 (2008).
7. V. I. Ivanov, G. D. Ivanova, V. I. Krylov, and V. K. Khe, in *Proceedings of SPIE - The International Society for Optical Engineering Cep. "Asia-Pacific Conference on Fundamental Problems of Opto- and Microelectronics"* p. 101760V (2017).
8. L. D. Landau and E. M. Lifshits, *Statistical Physics* (Nauka, Moscow, 1964).
9. I. P. Bazarov, *Thermodynamics* (Vyshay shkola, Moscow, 1991).
10. A. Eshkin, *Uspekhi fizicheskikh nauk* **110** (1), 101 (1973).