

ICMP-01-30U

I.V.Стасюк, O.V.Величко\*

ВІВЧЕННЯ ДІЕЛЕКТРИЧНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ  
СИСТЕМИ ДРІБНОДИСПЕРСНИХ ТІЛ З ОСАДЖЕНИМИ  
НА ЇХ ПОВЕРХНІ ДИПОЛЬНИМИ ЧАСТИНКАМИ У  
РАМКАХ МІКРОСКОПІЧНОЇ МОДЕЛІ

\*Інститут фізики конденсованих систем НАН України,  
79011 Львів, вул. Свєнціцького, 1

ЛЬВІВ

УДК: 538.956, 539.215

PACS: 77.22, 68.43, 89.60

Вивчення діелектричних властивостей системи дрібнодисперсних тіл з осадженими на їх поверхні дипольними частинками у рамках мікроскопічної моделі

I.V.Стасюк, O.V.Величко

**Анотація.** Створено модель, що описує діелектричні властивості системи дрібнодисперсних часток лавоподібних паливомісних матеріалів (ЛПВМ) з осадженими на їх поверхні частинками, що володіють дипольним моментом. Ці частинки перебувають у рівновазі з оточуючим середовищем, тому процес їх адсорбції залежить від зовнішніх чинників. Для описаної вище моделі в наближенні середнього поля отримано основні діелектричні властивості системи та досліджено їх поведінку при зміні таких параметрів, як зовнішнє електричне поле, хімпотенціал та температура. В рамках створеної моделі розраховано середню заселеність, спонтанну поляризацію та статичну діелектричну сприйнятливість для часток ЛПВМ різної форми.

**Study of dielectric properties of the system of high-disperse bodies with dipole particles adsorbed onto their surface by means of microscopic model.**

I.V.Stasyuk, O.V.Velychko

**Abstract.** A model describing dielectric properties of the system of high-disperse fuel-containing lava-like materials (FCLM) with dipole particles adsorbed onto their surface is proposed. These dipole particles are in equilibrium with the environment, so the process of their adsorption is affected by the range of factors. Main dielectric properties of the system described by such a model are obtained in the mean field approximation and their dependences on external electric field, chemical potential of dipole particles and temperature are studied. The model proposed allows one to calculate average occupancy, spontaneous polarization and static dielectric susceptibility for pieces of FCLM with various shapes.

Подається в Condensed Matter Physics  
Submitted to Condensed Matter Physics

© Інститут фізики конденсованих систем 2001  
Institute for Condensed Matter Physics 2001

## 1. Вступ

При аналізі можливості використання електромагнітного поля в технологічних процесах, пов'язаних з сепарацією часток лавоподібних паливовмісних матеріалів (ЛПВМ), найчастіше звертають увагу на магнітні методи сепарації. Електричні способи, пов'язані з застосуванням електростатичних полів, вивчені порівняно менше. Їх ефективна дія може бути пов'язана з відмінностями діелектричних характеристик компонент ЛПВМ. Такі відмінності між параметрами, що описують об'ємні діелектричні властивості різних сполук чи матеріалів, які входять в склад ЛПВМ, повинні бути значними.

Серед факторів, що визначають діелектричний стан часток ЛПВМ малого розміру, утворених окислами  $\text{SiO}_2$ ,  $\text{FeO}$ ,  $\text{Fe}_2\text{O}_3$ ,  $\text{CrO}_2$ , суттєву роль можуть відігравати поверхневі процеси. В атмосфері насичений водяною парою активно відбуваються адсорбційні явища. Адсорбція молекул води, яка пов'язана з їх дисоціацією, приводить до осідання на поверхні іонних груп ( $\text{OH}^-$ ). Результатом цього є, по-перше, ефективне порушення електронейтральності (поява поверхневого електричного заряду) і, по-друге, виникнення макроскопічних електричних дипольних моментів внаслідок осідання іонних груп, що мають просторово розділені електричні заряди протилежного знаку. Як показують квантовохімічні розрахунки (див. препринт ІФКС-01-04У), адсорбція груп  $\text{OH}^-$  на поверхні перехідних металів (Fe, Ni), їх окислів ( $\text{FeO}$ ) чи двоокислу кремнію ( $\text{SiO}_2$ ) характеризується орієнтацією групи нормально до поверхні (в рівноважному положенні іон водню розташовується далі від поверхні, а іон кисню ближче). Виникаючий дипольний момент орієнтується у напрямку від поверхні і може складати з розрахунку на одну іонну групу від  $1,5\text{D}$  до  $4,5\text{-}5,0\text{D}$  (роздіжності у числових значеннях пов'язані з застосуванням різних методик квантовохімічних розрахунків).

Поява нескомпенсованого сумарного дипольного моменту окремої частки ЛПВМ може суттєвим чином визначати її поведінку у зовнішньому електричному полі. В неоднорідному полі  $\vec{E}(\vec{x})$  сила, що діє на диполь ( $\vec{F} = (\rho\nabla)\vec{E}$ ), пов'язана з неоднорідністю поля. Дипольна частка втягується в область простору, де напруженість електричного поля є більшою. Можливість використання цього ефекту залежить від абсолютних значень дипольних моментів, що в свою чергу визначається характером розподілу адсорбованих іонних груп на поверхні окремих фрагментів ЛПВМ. Одним з визначальних факторів при цьому є наявність згаданого електричного поля.

У зв'язку з вищесказаним розв'язувалася задача про осідання дипольних іонних груп (іонів  $\text{OH}^-$ ) на поверхні окремої частки (фрагмента ЛПВМ), матеріал якої є діелектриком. Форма частки може бути довільною, хоча при розрахунках бралися найпростіші випадки (частки у вигляді сфери, півсфери або паралелепіпеда). Досліджувався розподіл адсорбованих частинок на поверхні при наявності зовнішнього електричного поля з врахуванням взаємодії між частинками. Проведено розрахунки середнього дипольного моменту частки, досліджено поверхневі внески до діелектричної сприйнятливості. Вплив оточуючого середовища (газової атмосфери чи водного розчину) враховано через відповідні зміни хімічного потенціалу адсорбента). Проаналізовано роль форми часток і їх розмірів при формуванні умов, за яких неоднорідне електричне поле може суттєвим чином визначати їх динаміку.

## 2. Модельний опис системи

Для дослідження рівноважних умов осідання дипольних частинок на поверхнях часток ЛПВМ використовується грата модель. Вважається, що при адсорбції іонні групи локалізуються в певних позиціях, що утворюють регулярну структуру типу двовимірної кристалічної грата (це підтверджено даними квантовохімічних розрахунків, у яких досліджувалися адіабатичні потенціали для адсорбованих частинок – груп  $\text{OH}^-$ ). Враховано, що дипольні моменти іонних груп орієнтується перпендикулярно до поверхні. Приймається до уваги наявність зовнішнього електричного поля, прикладеного у певному напрямі (у більшості випадків це вісь OZ).

З врахуванням парних взаємодій між частинками адсорбату гамільтоніан задачі має вигляд

$$H = \sum_i H_i - \frac{1}{2} \sum_{ij} V_{ij} n_i n_j, \quad (1)$$

$$\begin{aligned} H_i &= (E_i - \mu)n_i, \\ E_i &= -h \cos \vartheta_i, \\ h &= Ed. \end{aligned} \quad (2)$$

Тут  $i$  – індекс позиції на поверхні;  $n_i$  – числа заповнення дипольних частинок;  $d$  – дипольний момент частинки (іонної групи), адсорбованої на поверхні;  $\mu$  – хімічний потенціал адсорбата в оточуючому середовищі;  $E_i$  – енергія дипольних частинок на поверхні у діючому

полі з напруженістю  $E$ ;  $\vartheta_i$  – кут між вектором диполя і вектором поля  $\vec{E}$ .

Взаємодія  $V_{ij}$  включає диполь-дипольну та непряму (через електронну підсистему базового матеріалу, на якому відбувається адсорбція) складові.

У наближенні середнього поля гамільтоніан (1) спрощується і набуває форми

$$H_{MF} = \frac{V}{2} V \bar{n}^2 + \sum_i (E_i - \mu - V \bar{n}) n_i. \quad (3)$$

Тут  $\bar{n} = \frac{1}{N} \sum_i \bar{n}_i$  – загальне середнє число заповнення позицій для адсорбованих частинок (яке є фактором покриття поверхні);  $0 \leq \bar{n} \leq 1$ ;  $\bar{n}_i$  – середнє число заповнення певної позиції

$$\bar{n}_i = \frac{1}{e^{\beta(E_i - V \bar{n} - \mu)} + 1}; \quad (4)$$

$N$  – загальне число позицій на поверхні вибраної частки.

Параметр  $\bar{n}$  визначається у даному випадку з рівняння

$$\bar{n} = \frac{1}{N} \sum_i \frac{1}{e^{\beta(E_i - \mu - V \bar{n})} + 1}. \quad (5)$$

Зазначимо, що розв'язок цього рівняння дає рівноважне значення фактора покриття поверхні, що відповідає мінімуму термодинамічного потенціалу

$$\Omega = -\theta \ln Z = \frac{N}{2} V \bar{n}^2 - \theta \sum_i \ln \left( 1 + e^{-\beta(E_i - \mu - V \bar{n})} \right). \quad (6)$$

Виходячи з формули (6), легко записати вирази для поздовжньої складової (паралельної до поля  $\vec{E}$ ) повного дипольного моменту частинки (з розрахунку на одну позицію):

$$M_Z = -\frac{\partial \Omega}{\partial h} \frac{1}{N} = \frac{1}{N} \sum_i \frac{\cos \vartheta_i}{e^{\beta(-h \cos \vartheta_i - \mu - V \bar{n})} + 1} \quad (7)$$

та поздовжньої діелектричної сприйнятливості

$$\chi_{ZZ} = \frac{\partial M_Z}{\partial h}, \quad (8)$$

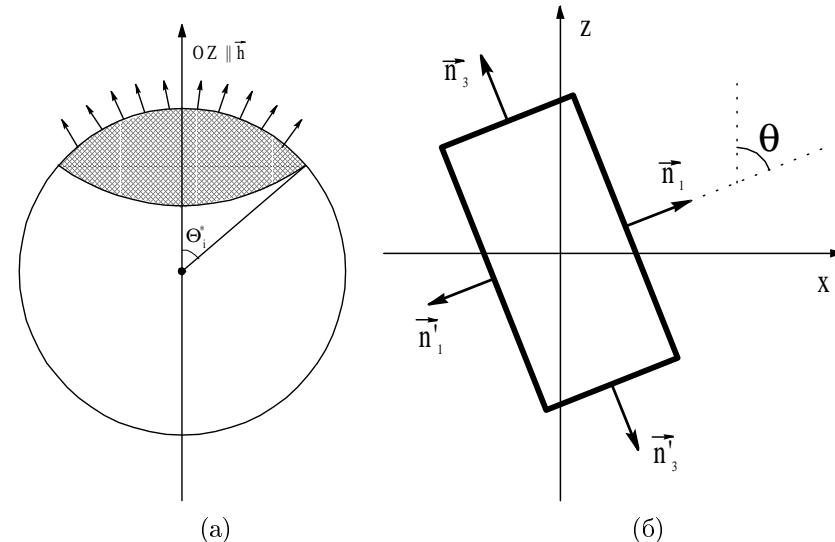


Рис. 1. Сфера (а) і паралелепіпед (б) з дипольними частинками на поверхні у електричному полі. Для спрощення розрахунків вибрано орієнтацію граней паралелепіпеда 2 і 2' перпендикулярно до осі  $y$ .

тобто

$$\chi_{ZZ} = \frac{\beta}{N} \sum_i \cos^2 \vartheta_i \frac{e^{\beta(-h \cos \vartheta_i - \mu - V \bar{n})}}{(e^{\beta(-h \cos \vartheta_i - \mu - V \bar{n})} + 1)^2}. \quad (9)$$

З виразу (4) для  $\bar{n}_i$ , який має характер розподілу Фермі, випливає можливість часткового заповнення поверхні диполями. При певних співвідношеннях між параметрами  $h$ ,  $V$  і  $\mu$  існує критичний кут  $\vartheta^*$ , що при низьких температурах ( $T \sim 0$ ) розмежовує заповнені адсорбованими частинками та пусті області поверхні

$$\vartheta^* = \arccos \frac{\alpha}{h}, \quad (10)$$

де  $\alpha = -\mu - \frac{V}{2} + V \xi$ ;  $\xi = \frac{1}{2} - \bar{n}$ . При  $\vartheta < \vartheta^*$   $\bar{n}_i \approx 1$ ; при  $\vartheta > \vartheta^*$   $\bar{n}_i \approx 0$  (див. рис. 1а, де це проілюстровано для поверхні сфери).

Підсумовування по позиціях при розрахунках за формулами (5)–(9) здійснюється за допомогою функції розподілу  $\rho(x)$ :

$$\frac{1}{N} \sum_i \Phi(d_i) = \int dx \rho(x) \Phi(x); \quad \rho(x) = \frac{1}{N} \sum_i \delta(x - \cos \vartheta_i). \quad (11)$$

Вигляд цієї функції залежить від форми поверхні, на якій відбувається адсорбція. У випадку сферичних часток

$$\rho(x) = \frac{1}{2}, \quad x \in [-1, 1]. \quad (12)$$

Для дископодібних часток (при орієнтації осі диска вздовж поля  $\vec{E}$ )

$$\rho(x) \approx \frac{1}{2} [\delta(x - 1) + \delta(x + 1)]; \quad (13)$$

для голкоподібних часток (розташованих вздовж поля)

$$\rho(x) \approx \delta(x); \quad (14)$$

для напівсфер (коли напрям поля  $\vec{E}$  є віссю обертання напівсфери)

$$\rho(x) = \frac{1}{2} \delta(x + 1) + \rho_1(x); \quad \rho_1(x) = \frac{1}{2}, \quad x \in [0, 1]; \quad (15)$$

врешті, для поверхні у вигляді паралелепіпеда

$$\rho(x) = \sum_K \frac{S_K}{S} (x - \cos \gamma_K), \quad (16)$$

де  $\gamma_K$  - кут між напрямком поля і нормальню до  $K$ -ї грані;  $S_K$  - площа  $K$ -ї грані;  $S = \sum_K S_K$  - загальна площа поверхні паралелепіпеда.

При використанні функції розподілу  $\rho(x)$  маємо

$$\frac{\Omega}{N} = \frac{V}{2} \bar{n}^2 - \theta \int_{-1}^1 dx \ln \left( 1 + e^{-\beta(\alpha - hx)} \right) \rho(x). \quad (17)$$

Рівняння (5), що визначає фактор покриття  $\bar{n} = 1/2 - \xi$ , представляється у формі

$$\xi = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 \rho(x) \operatorname{th} \frac{\beta}{2} (hx + V\xi) dx; \quad (18)$$

відповідно, поздовжні компоненти дипольного моменту і сприйнятливості будуть

$$M = \int_{-1}^1 dx \frac{x \rho(x)}{e^{\beta(\alpha - hx)} + 1},$$

$$\chi_{ZZ} = \frac{1}{\theta} \int_{-1}^1 dx \frac{x^2 \rho(x) e^{\beta(\alpha - hx)}}{(e^{\beta(\alpha - hx)} + 1)^2}. \quad (19)$$

Зазначимо, що при відсутності поля ( $\vec{E} = 0; h = 0$ ) покриття поверхні є рівномірним (число заповнення позиції  $\bar{n}_i$  не залежить від її розташування). Сумарний середній дипольний момент і сприйнятливість даються інтегралами

$$M = \frac{1}{e^{\beta\alpha} + 1} \int_{-1}^1 x \rho(x) dx,$$

$$\chi_{ZZ} = \frac{1}{\theta} \frac{e^{\beta\alpha}}{(e^{\beta\alpha} + 1)^2} \int_{-1}^1 x^2 \rho(x) dx. \quad (20)$$

звідки видно, що  $M = 0$ , якщо  $\rho(x)$  є парною функцією (що має місце у випадку фігур, які володіють центральною симетрією). Сприйнятливість досягає максимальних значень при  $\alpha \sim 0$ , тобто при  $\mu \sim -\frac{V}{2} + V\xi = -V\bar{n}$ .

Подібно до наведеного розраховуються поперечні компоненти сумарного дипольного моменту частки з певною формою поверхні. Зокрема

$$\begin{aligned} M_x &= \frac{1}{N} \sum_i \frac{\sin \vartheta_i \cos \varphi_i}{e^{\beta(-h \cos \vartheta_i - \mu - V\bar{n})} + 1}; \\ M_y &= \frac{1}{N} \sum_i \frac{\sin \vartheta_i \sin \varphi_i}{e^{\beta(-h \cos \vartheta_i - \mu - V\bar{n})} + 1}. \end{aligned} \quad (21)$$

Якщо ввести функцію розподілу

$$g(x, y) = \frac{1}{N} \sum_i \delta(x - \cos \vartheta_i) \delta(y - \cos \varphi_i), \quad (22)$$

причому

$$\rho(x) = \int dy g(x, y), \quad (23)$$

то

$$\begin{aligned} M_x &= \int dx \int dy \frac{\sqrt{1 - x^2} y g(x, y)}{e^{\beta(\alpha - hx)} + 1}; \\ M_y &= \int dx \int dy \frac{\sqrt{1 - x^2} \sqrt{1 - y^2} g(x, y)}{e^{\beta(\alpha - hx)} + 1}. \end{aligned} \quad (24)$$

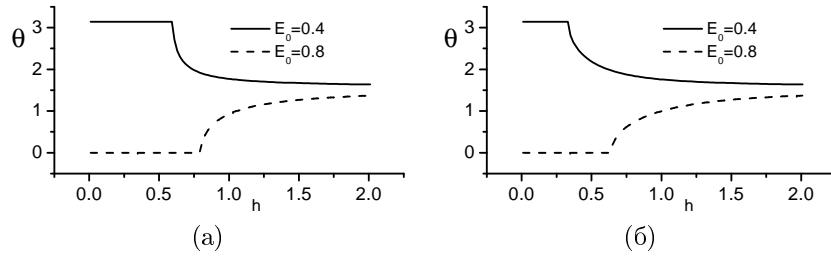


Рис. 2. Залежність величини кута  $\theta$ , що розмежовує заповнену та порожню області на сфері, від величини поля при різних  $E_0$  та температурі ((a) –  $T = 0.01$ , (б) –  $T = 0.30$ ).

Як приклад, наведемо вигляд функції  $g(x, y)$  для випадку сферичної поверхні

$$g(x, y) = \frac{1}{2\bar{n}} \cdot \frac{1}{\sqrt{1 - x^2 - y^2}}. \quad (25)$$

### 3. Розрахунок діелектричних функцій системи

Нижче наведено залежності таких характеристик системи, як заселеність і компоненти спонтанної поляризації та сприйнятливості, від параметрів системи: величини електричного поля, значення хімптенціалу та температури. Температура  $T$ , поле  $h$  та хімптенціал  $\mu$  подані на рисунках у безрозмірних відношеннях  $\theta/V$ ,  $h/V$ ,  $dE/V$  та  $E_0 = -\mu/V$ .

#### 3.1. Випадок сфери

Оскільки сфера є повністю ізотропною щодо вектора електричного поля, поведінка залежностей має плавний характер. Центросиметричність сфери зумовлює нульову сумарну спонтанну поляризацію при відсутності поля. Отримані результати зображені на Рис. 2–5.

#### 3.2. Випадок паралелепіпеда

З метою спрощення розрахунків грані паралелепіпеда 2 і 2' зафіксовано перпендикулярно до осі  $y$  (див. Рис. 1б). Це, однак, не впливає загальність отриманих результатів. Паралелепіпед обрано як своєрідний антипод високосиметричної сфери. Хоча найпростішим багатогранником є тетраедр, вибір паралелепіпеда у ролі модельного об'єкта дає значні вигоди у розрахунках, дозволяючи показати

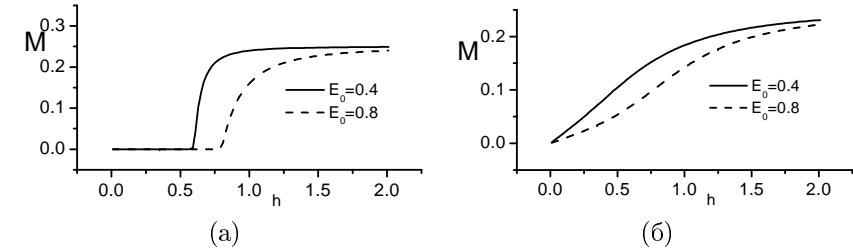


Рис. 3. Залежність спонтанної поляризації  $M$  від величини поля при різних  $E_0$  та температурі ((а) –  $T = 0.01$ , (б) –  $T = 0.30$ ).

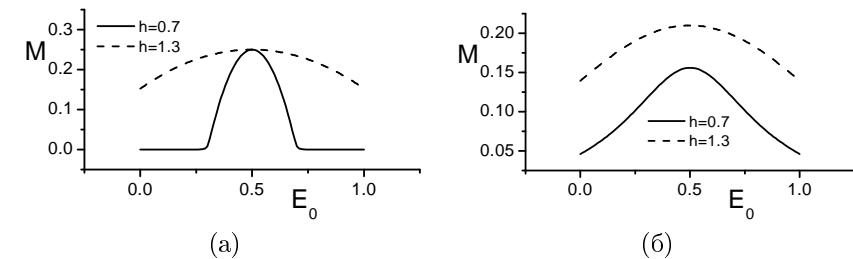


Рис. 4. Залежність спонтанної поляризації  $M$  від величини  $E_0$  при різних полях та температурі ((а) –  $T = 0.01$ , (б) –  $T = 0.30$ ).

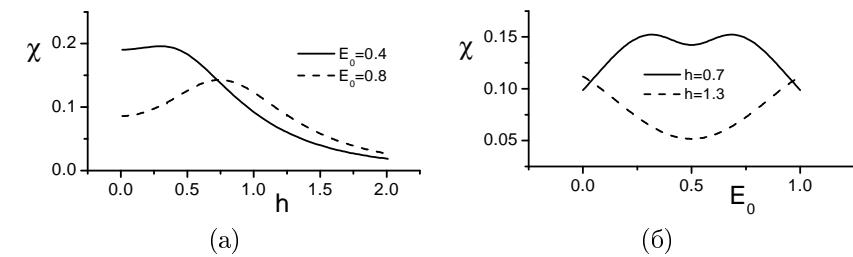


Рис. 5. Залежність сприйнятливості  $\chi$  від величини поля при різних  $E_0$  (а) та від величини  $E_0$  при різних полях ( $T = 0.30$ ).

особливості діелектричних характеристик неізотропного тіла. Розраховані для даного випадку термодинамічні функції ілюструють малюнки 7–9.

#### 4. Деякі числові оцінки

Сумарний середній дипольний момент частинок, адсорбованих на поверхні, залежить від характеру заповнення. Він рівний нулю у випадку рівномірного (в тому числі повного) заповнення та коли поверхня за своєю формою володіє центром інверсії. У загальному ж сумарний дипольний момент відмінний від нуля. Оцінити його максимальну величину можна, припустивши якнайбільш нерівномірний розподіл адсорбата: поверхня заповнена наполовину ( $\theta^* = \pi/2$ ). У випадку сфери з діаметром  $a$  число позицій для адсорбованих частинок на половині її поверхні визначається як  $N_{loc} = \frac{\pi a^2}{2a_0^3}$ , де параметр  $a_0$  визначає середню віддаль між найближчими позиціями адсорбованих частинок на поверхні. Відповідне значення сумарного дипольного моменту може бути оцінене за формулою

$$\bar{M} = dN_{loc}M,$$

а його максимальне значення  $\bar{M}_{max} \approx dN_{loc}$ .

Використаємо при числових оцінках наступні значення параметрів:

$$d = 3D = 10^{-29} \text{Кл} \cdot \text{м},$$

$$a_0 = 3\text{\AA} = 3 \cdot 10^{-10} \text{м}, \quad (27)$$

$$a = 10^{-7} \dots 10^{-5} \text{м}.$$

При цьому  $\bar{M}_{max} \approx 1.7 \cdot 10^{-24} \dots 1.7 \cdot 10^{-20} \text{Кл} \cdot \text{м}$ . При градієнті електричного поля  $\nabla E \sim 10^4 \text{В/м}^2$  це дає силу

$$F = \bar{M}_{max} \cdot \nabla E \sim 1.7 \cdot 10^{-20} \dots 1.7 \cdot 10^{-16} \text{Н}. \quad (26)$$

З другого боку, частка, на поверхні якої відбувається адсорбція, при густині  $\rho \sim 5 \text{г}/\text{см}^3$  і діаметрі  $a = 10^{-7} \dots 10^{-5} \text{м}$  важитиме

$$P \approx \frac{1}{2}a^3\rho \cdot g = 2.5 \cdot 10^{-17} \dots 2.5 \cdot 10^{-11} \text{Н}. \quad (27)$$

Як видно, електростатична сила  $F$  при частках сферичної форми не може зрівноважити їх ваги; таке співвідношення ще більше посилюється при зростанні розмірів часток.

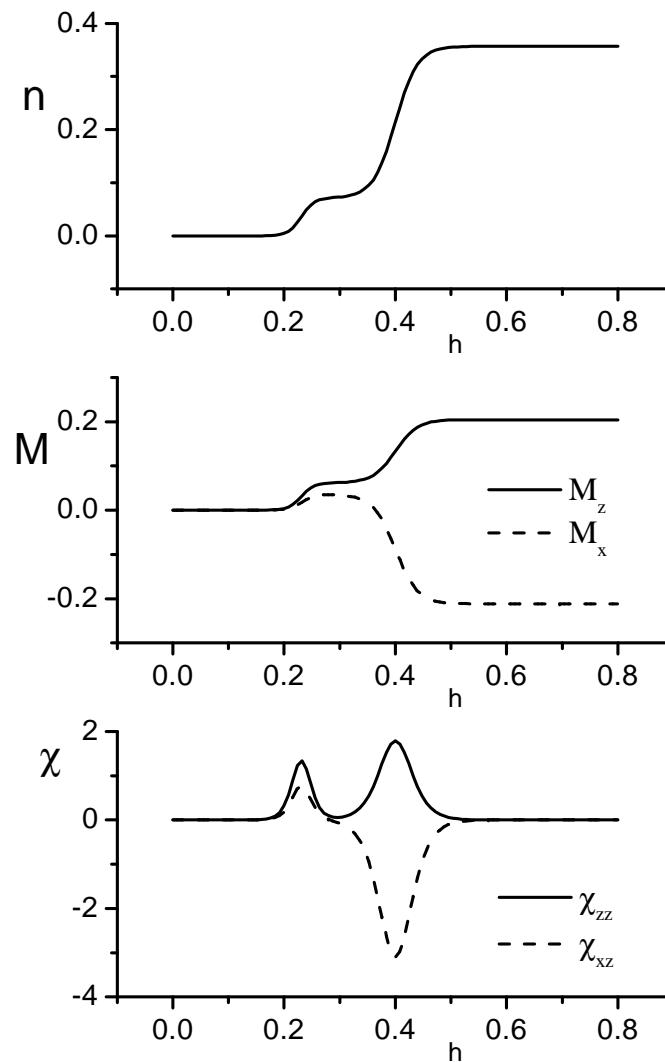


Рис. 6. Залежність заселеності, компонент спонтанної поляризації та сприйнятливості від величини поля ( $T = 0.01$ ,  $\gamma = \pi/6$ ,  $E_0 = 0.2$ ).

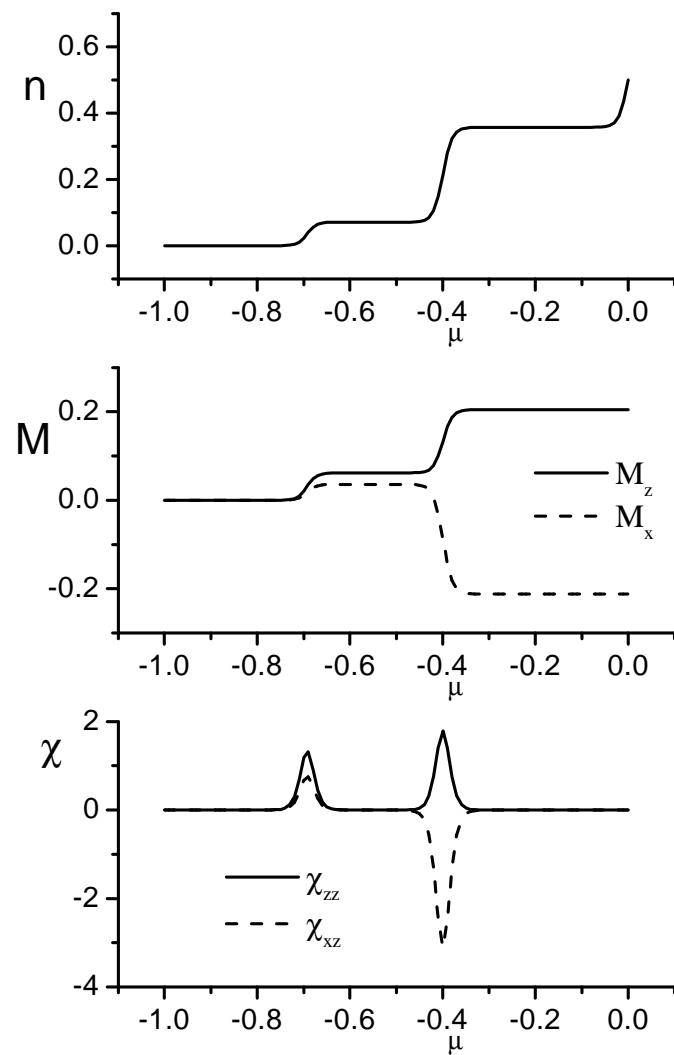


Рис. 7. Залежність заселеності, компонент спонтанної поляризації та сприйнятливості від хімпотенціалу ( $T = 0.01, \gamma = \pi/6, h = 0.8$ ).

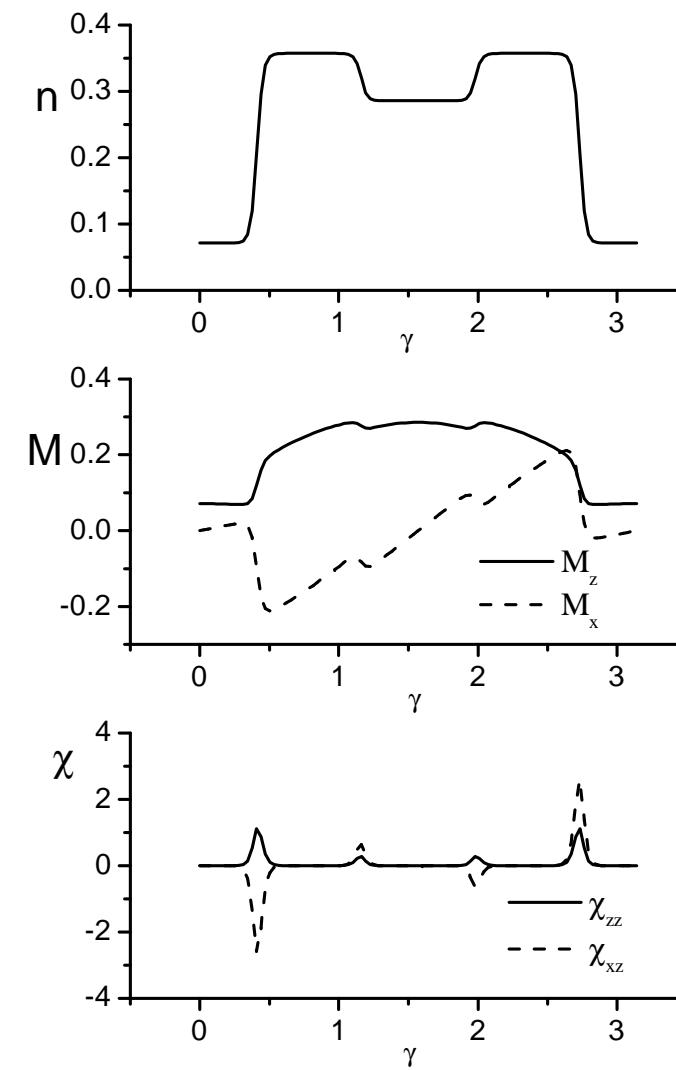


Рис. 8. Залежність заселеності, компонент спонтанної поляризації та сприйнятливості від орієнтації паралелепіпеда ( $T = 0.01, h = 0.05, E_0 = 0.2$ ).

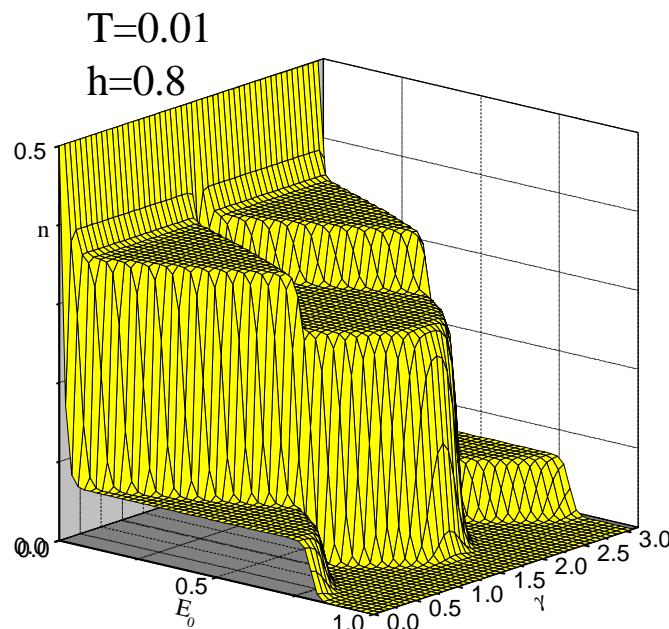


Рис. 9. Залежність заселеності від величини хімпотенціалу та орієнтації паралелепіпеда ( $T = 0.01, h = 0.8$ ).

Це однак не виключає можливості переносу субмікронних часток ( $a \sim 10^{-7} \dots 10^{-6}$  м) під дією сили  $F$  у горизонтальному напрямі. Сприятливими для ефекту є несферичність часток (сплюснутість веде до збільшення площі поверхні при незмінному об'ємі), а також їх пористість (яка супроводжується ефективним зменшенням густини та збільшенням площі поверхні, активної щодо адсорбції).

Слід зазначити, що ми описуємо діелектричні процеси, пов'язані з адсорбцією дипольних частинок, у припущення про збереження електронейтральності часток базового матеріалу. Ефекти, зумовлені можливою появою надлишкових зарядів, потрібно було б розглянути окремо.

Цікавими можуть бути ефекти, які виникають при щільній упаковці часток ЛПВМ (коли сусідні частки у певних точках доторкаються, але між ними залишається вільний простір; це забезпечує пористість всієї системи). У зовнішньому електричному полі виникатиме сумарний дипольний момент за рахунок додавання окремих доданків; на одиницю об'єму буде припадати

$$M' = d \cdot N' \cdot M, \quad (28)$$

де  $N' = N_{loc} \cdot \frac{12}{\sqrt{2}a^3}$ ; тут другий множник характеризує кількість часток даного розміру в одиниці об'єму у випадку упаковки типу гексагональної.

Відповідно, діелектрична сприйнятливість рівна

$$\chi' = \frac{\partial M'}{\partial E} = \frac{d^2 N'}{\varepsilon_0} \chi_{ZZ}. \quad (29)$$

Як показують оцінки,  $M' \sim d \cdot N'$  може складати  $1.6 \cdot 10^5 \dots 2.6 \cdot 10^6$  Кл·м. Це вже близьке до значень, які характерні для електричних дипольних моментів (спонтанної поляризації), що виникають при фазових переходах у сегнетоелектричних системах. При цьому  $\chi' \sim 10 \dots 30$  (при  $a = 10^{-7}$  м). Це свідчить, що при наявності термодинамічних нестабільностей у системі стають можливими помітні електретні ефекти. Їх роль у процесах електричної сепарації може бути особливою і потребує окремого дослідження.

## 5. Висновки

Створено просту і ефективну модель для опису рівноважного процесу адсорбції частинок з дипольним моментом на дрібнодисперсні уламки у зовнішньому електричному полі. Виходячи з припущення

про сферичну форму уламків, отримано вирази для діелектричних характеристик моделі (спонтанна поляризація та статична діелектрична сприйнятливість) у залежності від зовнішніх параметрів (напруженість електричного поля, хімічний потенціал частинок і температура). На їх основі проведено розрахунки поверхневих внесків у статичну поляризацію та діелектричну сприйнятливість часток ЛПВМ.

З отриманих результатів, представлених в графічному вигляді, видно, що у вузькій області значень хімічного потенціалу та поля  $h = d \cdot E$  відбуваються різкі зміни середньої поляризації  $\bar{M}$  і сприйнятливості  $\tilde{\chi}$ . Така поведінка має місце при частковому заповненні дипольними частинками поверхні сфер при адсорбції. Кут  $\theta^*$ , що визначає це заповнення, може змінюватись практично стрибкоподібно від 0 до  $\pi$ , або більш плавно, але достатньо швидко при невеликих змінах хімічного потенціалу груп  $\text{OH}^-$  в оточуючому середовищі. Значення діючого поля  $E$  може визначатись як діелектричною стягою  $\epsilon_0$ , так і товщиною  $\Delta$  приповерхневого (приелектродного) шару, в якому відбувається основне падіння напруги. При малих значеннях  $\Delta$  ефект підвищення поля може досягати 2–3 порядки.

Щодо особливостей діелектричних властивостей паралелепіпеда з дипольними частинками на поверхні, то одразу кидається ввічі ступінчастий характер залежностей. Це легко зрозуміти, адже всі вузли на певній грані паралелепіпеда перебувають в одинакових умовах, отже їх заселення/звільнення відбувається стрибкоподібно. Неізотропність паралелепіпеда викликає появу поперечної складової поляризації та сприйнятливості. Оскільки зміна величини поля викликає складний перерозподіл дипольних частинок на гранях, то поперечні складові поляризації та сприйнятливості можуть приймати від'ємні значення.

Виявлене явище часткового осідання дипольних частинок (груп  $\text{OH}^-$ ) на поверхню уламків ЛПВМ повинно впливати на характеристики системи і може бути важливим при дослідженні оптимальних режимів сепарації ядерних відходів.

## Література

1. Дубасов Ю.В., Савоненков В.Г., Смирнова Е.А. // Радиохимия, 1996, том 38, № 2, с. 16.
2. Пазухин Э.М. // Радиохимия, 1994, том 36, № 2, с. 97.
3. Матюнин Ю.И., Демин А.В., Тетерин Э.Г. // Физика и химия стекла, 1995, том 21, № 6, с. 612.

4. Матюнин Ю.И., Демин А.В., Тетерин Э.Г. // Атомна энергия, 1995, том 79, № 2, с. 101.

Препринти Інституту фізики конденсованих систем НАН України розповсюджуються серед наукових та інформаційних установ. Вони також доступні по електронній комп'ютерній мережі на WWW-сервері інституту за адресою <http://www.icmp.lviv.ua/>

The preprints of the Institute for Condensed Matter Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine are distributed to scientific and informational institutions. They also are available by computer network from Institute's WWW server (<http://www.icmp.lviv.ua/>)

Ігор Васильович Стасюк  
Олег Володимирович Величко

Вивчення діелектричних властивостей системи  
дрібнодисперсних тіл з осадженими на їх поверхні  
дипольними частинками у рамках мікроскопічної моделі

Роботу отримано 30 листопада 2001 р.

Затверджено до друку Вченого радиою ІФКС НАН України

Рекомендовано до друку семінаром відділу квантової статистики

Виготовлено при ІФКС НАН України  
© Усі права застережені