

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ

دانشکده علوم پایه

گروه فیزیک

(گرایش هسته‌ای)

پراکندگی نوترونی از غشای یونی

از

فرزاد عطایی کلایی

استاد راهنما

دکتر علیرضا صدرممتاز

و

دکتر سید نادر رسولی

اسفند ۱۳۹۱

قدردانی

جای آن است از همه کسانی که به ثمر رسیدن این پژوهش نقشی داشته‌اند سپاسگزاری نمایم.

نخست از استاد گرامی دکتر علیرضا صدرممتاز که راهنما و مشوق بنده بود و دکتر سید نادر رسولی که با درایت علمی و کمک فکری فراوان سهم بزرگی در به ثمر رسیدن این پایان‌نامه داشته است.

از همسر مهربانم و فرزندم نیز سپاسگزارم که با صبر و شکیبایی در فراهم آوردن محیط آسایش و آرامش در خانه کوشیدند و مرا در پیشبرد هدفم یاری دادند.

فهرست مطالب

صفحه	عنوان
ث.....	فهرست شکل ها.....
ح.....	فهرست جدول ها.....
خ.....	چکیده (فارسی).....
د.....	چکیده (انگلیسی).....
۱.....	فصل ۱) مقدمه.....
۷.....	فصل ۲) توزیع یون ها پیرامون کلونیدهای باردار و دولایه الکتریکی.....
۸.....	۱-۲- مقدمه.....
۸.....	۲-۲- معادله ی پواسون-بولتزمن.....
۱۰.....	۳-۲- تقریب دیبای- هوکل.....
۱۱.....	۴-۲- توزیع پتانسیل و رابطه ی بین پتانسیل سطح و چگالی بار سطحی برای یک ذره ی جامد.....
۱۱.....	۱-۴-۲- ذره ی تخت.....
۱۳.....	۲-۴-۲- ذره ی کروی.....
۱۶.....	۵-۲- توزیع پادیون ها در اطراف یک سطح باردار واقع در محلول.....
۱۸.....	فصل ۳) مبانی نظریه ی پراکندگی نوترون و اشعه ی ایکس.....
۱۹.....	۱-۳- مقدمه.....
۱۹.....	۲-۳- خواص اشعه ی ایکس و نوترون.....
۲۲.....	۳-۳- برهم کنش نوترون و اشعه ی ایکس با ماده.....
۲۴.....	۴-۳- پراکندگی نوترون از یک هسته تنها و ثابت.....
۲۶.....	۵-۳- طول و سطح مقطع پراکندگی.....

- ۳-۵-۱ - طول پراکندگی ۲۶
- ۳-۵-۲ - طول پراکندگی همدوس و ناهمدوس ۲۸
- ۳-۵-۳ - سطح مقطع پراکندگی ۳۰
- ۳-۵-۴ - سطح مقطع پراکندگی همدوس و ناهمدوس ۳۱
- ۳-۶ - دلیل استفاده از پراکندگی نوترون ۳۳
- ۳-۷ - فرایند پراکندگی نوترون‌ها از یک نمونه ۳۴
- ۳-۸ - پراکندگی کشسان نوترون از دو اتم ۳۷
- ۳-۹ - پراکندگی از مجموعه‌ای شامل N اتم (ذره) ۳۸
- ۳-۱۰ - سطح مقطع دیفرانسیلی ۴۰
- ۳-۱۱ - عامل ساختار ۴۴
- فصل ۴ (محاسبه‌ی پتانسیل و عامل ساختار در مدل انتخابی) ۴۷
- ۴-۱ - معرفی مدل ۴۸
- ۴-۲ - محاسبه‌ی پتانسیل الکتریکی سطح باردار در یک مکان مشخص ۴۸
- ۴-۳ - انرژی پتانسیل الکتریکی دستگاه ۵۰
- ۴-۳-۱ - مکان‌یون‌ها در سلول واحد ۵۰
- ۴-۳-۲ - تغییر انرژی پتانسیل الکتریکی سیستم ۵۲
- ۴-۴ - تابع توزیع‌یون‌های سازنده زیر شبکه ۵۸
- ۴-۵ - محاسبه‌ی عامل ساختار در پراکندگی نوترون ۶۰
- ۴-۵-۱ - محاسبه‌ی عددی متوسط عامل ساختار در سلول شبیه‌سازی ۶۱
- ۴-۵-۲ - تغییر عامل ساختار با بردار پراکندگی و زاویه‌های پراکندگی ۶۴
- ۴-۶ - مقایسه‌ی عامل ساختار برای توزیع پیوسته و تصادفی یون‌های شناور ۶۸
- فصل ۵ (خلاصه و نتیجه‌گیری، پیشنهادات در مورد ادامه‌ی کار) ۷۲

فهرست شکل‌ها

- شکل (۱-۱) توزیع بارهای آزاد مایع در مجاورت سطح ۲
- شکل (۲-۱) شمایی از دولایه‌ی الکتریکی ۳
- شکل (۳-۱) یک پلیمر در محلول الکترولیت با پادیون‌های یک ظرفیتی و دو ظرفیتی ۴
- شکل (۴-۱) تغییر پراکندگی با بردار پراکندگی ۵
- شکل (۵-۱) تغییرات q^* ، با X در روش‌های مختلف برای توصیف توزیع پادیون‌ها ۵
- شکل (۶-۱ الف) الگوی پراش نوترون از فیبر ۶
- شکل (۶-۱ ب) ساختار فیبر ۶
- شکل (۱-۲) دو لایه‌ی الکتریکی در اطراف یک ذره‌ی کلونیدیه‌ی طور مثبت باردار شده ۹
- شکل (۲-۲) توزیع پتانسیل $\psi(x)$ در نزدیکی سطح صفحه‌ی تخت با بار مثبت ۱۲
- شکل (۳-۲) یک ذره‌ی کروی با شعاع a ۱۳
- شکل (۱-۳) ساز و کارهای برهم‌کنش نوترون، الکترون و اشعه‌ی ایکس با ماده ۲۳
- شکل (۲-۳) عمق نفوذ باریکه‌های نوترون، الکترون و اشعه‌ی ایکس برای عنصرهای خاص ۲۴
- شکل (۳-۳) پراکندگی موج تخت نوترون از یک هسته‌ی منفرد، سخت و ثابت در مبداء مختصات ۲۶
- شکل (۴-۳) تغییر دامنه‌ی پراکندگی اشعه‌ی ایکس و طول پراکندگی نوترون با عدد اتمی اتم هدف ۲۷
- شکل (۵-۳) هفت پراکننده در یک نمونه با مساحت A و ضخامت X ۳۰
- شکل (۶-۳) پراکندگی باریکه‌ی نوترونی از یک ماده و بردار پراکندگی ۳۵
- شکل (۷-۳) مقادیر انتقال انرژی و بردار پراکندگی در برخی پدیده‌های ماده‌ی چگال ۳۶
- شکل (۸-۳) طرح پراکندگی باریکه نوترونی از دو اتم ۳۷
- شکل (۹-۳) طرح بردار موج‌های تابشی و پراکنده برای دو اتم ۳۷
- شکل (۱۰-۳) هندسه‌ی نوعی از رویداد پراکندگی ۴۰
- شکل (۱۱-۳) پراکندگی نوترون از یک نمونه شامل چند هسته ۴۱

- ۴۴ شکل (۳-۱۲) آرایش تناوبی N ذره در یک بعد با ثابت تناوب a
- ۴۵ شکل (۳-۱۳) تغییرات عامل ساختار شبکه‌ی یک بعدی با ثابت شبکه‌ی a بر حسب $\frac{q_x a}{2}$
- ۴۷ شکل (۴-۱) طرحی از توزیع یون‌های شناور واقع در آب در حضور دیواره‌ی باردار
- ۵۱ شکل (۴-۲) آرایش یون‌های شناور در آب
- ۵۳ شکل (۴-۳) مدلی از آرایش یون‌های شناور منفی در مجاورت سطح باردار با بارهای الکتریکی مثبت و ثابت
- ۵۴ شکل (۴-۴ الف) آرایش یون‌های شماره ۱ و ۲ نسبت به یکدیگر
- ۵۴ شکل (۴-۴ ب) جابجایی نسبی یون‌های ۱ و ۲
- ۵۵ شکل (۴-۵ الف) آرایش یون‌های ۱ و ۳ نسبت به یکدیگر
- ۵۵ شکل (۴-۵ ب) جابجایی نسبی یون‌های ۱ و ۳
- ۵۵ شکل (۴-۶ الف) آرایش یون‌های ۱ و ۴ نسبت به یکدیگر
- ۵۶ شکل (۴-۶ ب) جابجایی نسبی یون‌های ۱ و ۳
- ۵۶ شکل (۴-۷ الف) آرایش یون‌های ۲ و ۳ نسبت به یکدیگر
- ۵۶ شکل (۴-۷ ب) جابجایی نسبی یون‌های ۲ و ۳
- ۵۷ شکل (۴-۸ الف) آرایش یون‌های ۲ و ۴ نسبت به یکدیگر
- ۵۷ شکل (۴-۸ ب) جابجایی نسبی یون‌های ۲ و ۴
- ۵۸ شکل (۴-۹ الف) آرایش یون‌های ۳ و ۴ نسبت به یکدیگر
- ۵۸ شکل (۴-۹ ب) جابجایی نسبی یون‌های ۳ و ۴
- ۶۵ شکل (۴-۱۰) تغییر عامل ساختار با q_x و q_y برای الف - $T=300k$ و ب - $T=0k$
- ۶۵ شکل (۴-۱۱) نمودار برجسته‌ی مربوط به شکل (۴-۱۰)
- ۶۶ شکل (۴-۱۲): پراکندگی باریکه‌ی نوترونی از یک ذره و زاویه‌ی پراکندگی
- ۷۰ شکل (۴-۱۳) تغییرات قسمت موهومی و حقیقی $\eta(\vec{q})$ با q_z
- ۷۰ شکل (۴-۱۴) تغییر عامل ساختار با q_z در توزیع پیوسته‌ی پادیون‌ها

فهرست جدول‌ها

- ۲۱ جدول (۱-۳) دسته بندی نوترون‌ها بر اساس انرژی، دما و طول موج
- ۲۸ جدول (۲-۳) توزیع فراوانی ایزوتوپ‌ها در یک نمونه
- ۳۳ جدول (۳-۳) سطح مقطع پراکندگی برای بعضی از عناصر. گرفته شده از مرکز تحقیق نوترون NIST

چکیده

پراکندگی نوترونی از غشای یونی
فرزاد عطایی کلایی

سطح ذرات کلونیدی یا ارگان‌های مختلف سلولی در حضور آب اغلب باردار می‌گردد. این سطح باردار با جذب یون‌های مخالف و دفع یون‌های موافق، ناحیه‌ای باردار پیرامون خود ایجاد می‌کند که دولایه‌ی باردار (Electrical Double Layer) نامیده می‌شود. به دلیل پیچیدگی مربوط به توزیع عوامل باردار روی سطح کلونید و نیز ساختار پیچیده‌ی آب و ... پیش‌بینی توزیع بار و پتانسیل الکتریکی در این دولایه - به شکل دقیق عملاً - غیرممکن است. نظریه‌های موجود که با مقدار قابل توجهی از تقریب به دست آمده‌اند اغلب پیش‌بینی متفاوت با داده‌های تجربی به دست می‌دهند. پراکندگی نوترون و اشعه‌ی ایکس به عنوان ابزاری مستقیم و تجربی برای مطالعه‌ی توزیع بار/پتانسیل الکتریکی در داخل دولایه‌ی الکتریکی به کار می‌رود. این ابزار مانند چشمی است که می‌تواند تصویری دقیق از آنچه در داخل دولایه می‌گذرد به ما بدهد. در این پژوهش ما یک سطح ساده با توزیع مربعی از عوامل باردار بر روی آن را در داخل آب در نظر گرفته‌ایم؛ یون‌های با بار مخالف نیز در حضور این دیواره در داخل آب قرار دارند. عوامل باردار روی دیواره موجب جذب یون‌های مخالف به سمت دیواره می‌شوند؛ حال آنکه افت و خیز گرمایی محیط و نیز دافعه‌ی بلندبرد میان یون‌ها در برابر این جاذبه مقاومت می‌کنند. با در نظر گرفتن تمام این عوامل ما به پیش‌بینی نتیجه‌ی حاصل از یک آزمایش فرضی پراکندگی نوترون از یون‌های باردار محلول در آب پرداخته‌ایم و عامل ساختار (Structure Factor) را به صورت عددی محاسبه کرده‌ایم. مقایسه‌ی این مقدار عددی با نتیجه‌ی مدل سازی‌های پیشین می‌تواند به درک دقیق‌تر توزیع یون‌ها در حضور دیواره منجر شود.

کلید واژه: پراکندگی نرم، عامل ساختار، الکترولیت‌ها، کلونید، نظریه‌ی پواسون-بولتزمن.

Abstract:

Neutron scattering from ionic membrane
Farzad atae kalae

The surface of sub-cellular organs and most of colloidal particles will be charged, in the presence water as surrounding liquid. This charged surface then, attracts ions with the opposite charge and repels ions with charge similar to it, so that a region mostly composed of attracted oppositely charged ions appears in the proximity of it. This region, known as Electric Double Layer (EDL), may be simply described qualitatively; however it is very hard to understand it quantitatively. The reason is complicated structure of charged surface, the localized and singular nature charged ions beside it, and the discrete structure of water molecules. Thus, the result of simpler theoretical models hardly fits with obtained experimental data. Neutron/X-ray scattering, seem to be direct probes to study EDL complicated structure with enough accuracy. There are like eyes which let us obtain a picture of what is going inside the electric double layer. Here we consider a simple square lattice for distribution of charged elements on the colloidal surface; and only consider neutralizing oppositely charged ions inside water. The neutralizing counter-ions are attracted with charged elements on the surface, and also repelled due to the mutual repulsion between them. They also have thermal motion which dose not let them sit motion less in any particular point in the water. We tried to consider all these then predict the result of a possible scattering experiment which probes counter-ions positions. We numerically evaluated the structure factor of such system. Our obtained results may be compared with results of former simpler models for scattering and even existing experimental data. It will hopefully help us to obtain a more accurate picture of electric double layer.

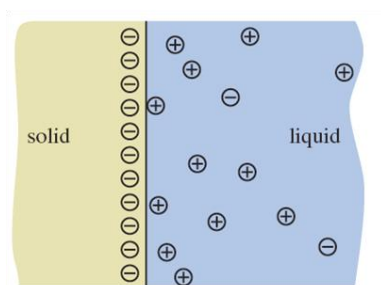
Keywords: Soft scattering, Structure factor, Electrolytes, Colloid, Poisson-Boltzmann theory

فصل ۱

مقدمه

مقدمه

بسیاری از مایعات از لحاظ الکتریکی کاملاً خنثی نیستند، بلکه حاوی مقداری متناهی از ذره‌های باردار آزاد، از جمله یون‌ها می‌باشند (محلول الکترولیت). به همین ترتیب، بسیاری از سطوح جامد با توجه به بارهای سطحی نامتعادل خنثی نیستند. هنگامی که از این نوع مایع در تماس با سطح جامد قرار می‌گیرد، تعدادی از بارهای الکتریکی آزاد مایع به علت نیروی الکتروستاتیکی به سطح جامد جذب می‌شوند. این گونه بارها لایه‌ای در نزدیکی سطح جامد تشکیل می‌دهند، به طوری که غلظت آن‌ها در این لایه در مقایسه با دیگر بخش‌های مایع متفاوت است (شکل ۱-۱).



شکل (۱-۱) توزیع بارهای آزاد مایع در مجاورت سطح [۲۹]

به همین ترتیب، وقتی ذره‌ای با بار الکتریکی سطحی، در محلول الکترولیت قرار می‌گیرد، یون‌هایی از الکترولیت که دارای بار مخالف با بار سطحی ذره هستند (پادیون^۱)، به دلیل نیروی جاذبه‌ی الکتروستاتیکی در اطراف آن جمع می‌شوند. شکل (۱-۲) نمایی از این پدیده را نشان می‌دهد. ناحیه‌ای که در آن غلظت پادیون‌ها نسبت به یون‌های دارای بار مشابه با بارهای سطحی بیشتر است، دولایه‌ی الکتریکی^۲ نام دارد، که شامل دو لایه‌ی استرن^۳ و پخشی^۴ است. لایه‌ی اول، یک لایه‌ی نازک و شامل پادیون‌هایی است که ثابت و به شدت به سطح جذب شده‌اند؛ اما لایه‌ی دوم، ناحیه‌ای شامل پادیون‌های متحرک و آزاد است که به بخش عمده‌ی محلول^۵ گسترش یافته است.

پتانسیل الکتریکی روی سطح ذره (لایه‌ی استرن)، درون دولایه‌ی الکتریکی، بیشترین مقدار را دارد و با افزایش فاصله از

¹ Counter ions

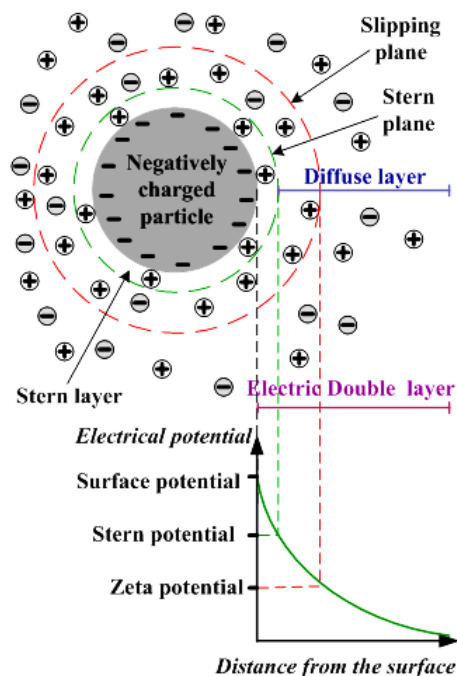
² Electric double layer

³ Stern

⁴ Diffuse

⁵ Bulk

سطح ذره، به صورت نمایی کاهش می‌یابد؛ به طوری که در مرز دولایه‌ی الکتریکی به صفر نزدیک می‌شود. مقدار پتانسیل الکتریکی در سطح اسلیپینگ^۱، پتانسیل زتا^۲ نام دارد، که پارامتر بسیار مهمی در نظریه‌ی برهم کنشی ذره‌های کلئیدی است [۳۰].



شکل (۲-۱) شمایی از دولایه‌ی الکتریکی [۳۰]

یک نمونه‌ی واقعی از این پدیده‌ها در فرایندهای زیستی رخ می‌دهد. تعداد زیادی از ماکرومولکول‌های زیستی مانند پروتئین‌ها، رشته‌های دی‌ان‌ای و پلیمرها، کلئید هستند که بسیاری از محققین و دانشمندان در شاخه‌ی زیست-فیزیک به تحقیق و بررسی رفتار آنها می‌پردازند [۱]. از آنجا که بیش از ۶۰٪ از بدن انسان را آب فراگرفته و همچنین در بدن انسان به مقدار قابل توجهی نمک وجود دارد [۱] و به سبب این که ماکرومولکول‌های زیستی باردار هستند، می‌توان رفتار آنها در بدن را، مانند رفتار کلئیدها در یک محلول الکترولیت در نظر گرفت.

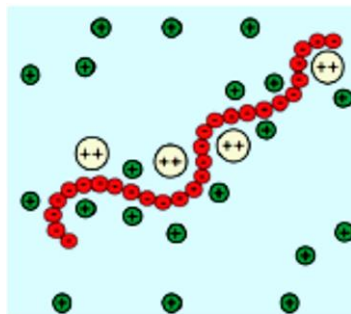
مدل‌ها و نظریه‌های گوناگونی برای توزیع یون‌های الکترولیت و پتانسیل الکتریکی در اطراف کلئید ارائه شده‌اند. اما پیش‌بینی این نظریه‌ها تا چه حدی با نتایج تجربی سازگاری دارد؟ در مرجع [۲] ساختار پلی الکترولیت‌هایی با مخلوطی از

¹ Slipping plane

² Zeta potential

پادیون‌های یک ظرفیتی و دوظرفیتی مورد بررسی قرار گرفته است، شکل (۳-۱). پلی الکترولیت‌ها، پلیمرهایی با گروه‌های قابل یونیده شدن هستند، به طوری که این گروه‌ها در حلال‌های قطبی مانند آب به بارهای روی زنجیره‌ی پلیمر و پادیون‌ها در محلول تفکیک می‌شوند.

چندین شیوه برای توصیف چگالش پادیون‌ها در محلول پلی الکترولیت وجود دارد. یک رویکرد مربوط به تئوری چگالش مینینگ-اوزاوا^۱ است، که در آن پادیون‌ها به دو گروه آزاد و متراکم تفکیک می‌شوند. پادیون‌های آزاد قادر به حرکت در داخل



شکل (۳-۱) یک پلیمر در محلول الکترولیت با پادیون‌های یک ظرفیتی و دو ظرفیتی [۲]

حجم محلول هستند، در حالی که پادیون‌های متراکم در داخل حجم کوچکی در اطراف زنجیره‌ی پلیمر محدود هستند [۳]. تئوری اولیه‌ی مینینگ-اوزاوا برای یک ماکرویون میله مانند بیان شد و برای زنجیره‌های انعطاف‌پذیر مسئله پیچیده‌تر خواهد شد. روش دوم بررسی شده در مرجع مذکور برای توصیف این پدیده، استفاده از معادله‌ی پواسون-بولتزمن^۲ در تقریب مدل سلول استوانه‌ای است. با توجه به وابستگی پادیون - پادیون و منومر - پادیون این روش نمی‌تواند نتیجه‌ی درستی را به ما بدهد.

روش سوم، پراکندگی اشعه‌ی ایکس و نوترون‌ها می‌باشند که یک روش تجربی برای بررسی ساختار ماکرویون‌ها، همچنین توزیع پادیون‌ها در اطراف ماکرویون‌ها است. توابع پراکندگی، بیشینه‌ی گسترده‌ای به نام قله‌ی پلی الکترولیت^۳ را نشان

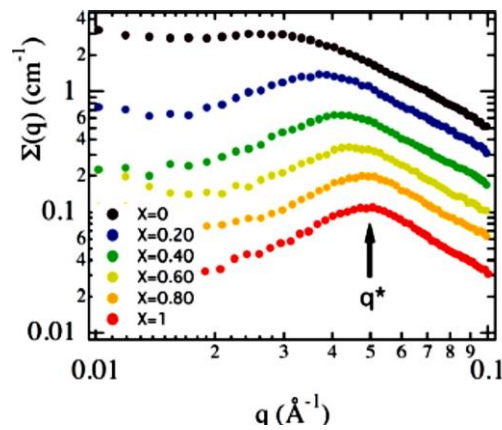
می‌دهد. مکان این پیک، q^* ، به غلظت منومرها C_p و $X = \frac{n_+}{n_+ + 2n_{2+}}$ وابسته است. در اینجا n_+ تعداد مول پادیون‌های

¹ Manning –Oosawa

² The Poisson-Boltzmann equation

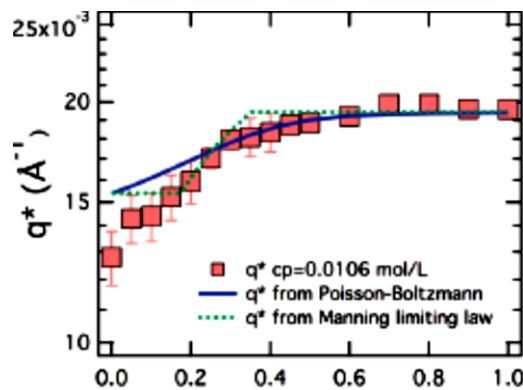
³ Polyelectrolyt peak

یک ظرفیتی و n_{2+} تعداد مول پادایون‌های دو ظرفیتی در محلول را نشان می‌دهد. $X = 0$ و $X = 1$ به ترتیب نشان دهنده الکترولیتی است که شامل پادایون‌های یک ظرفیتی خالص و دو ظرفیتی خالص است. q ، بزرگی بردار پراکندگی، توسط طول موج باریکه‌ی تابشی λ و زاویه‌ی پراکندگی θ از طریق رابطه‌ی $q = \frac{4\pi}{\lambda} \sin \frac{\theta}{2}$ تعریف می‌شود. تغییرات سطح مقطع پراکندگی در واحد حجم با بردار پراکندگی در شکل (۴-۱) نشان داده شده است. که در آن ارتفاع قله‌ی پراکندگی برای محلول الکترولیت یک ظرفیتی خالص کمتر است و با افزایش نسبت پادایون‌های یک ظرفیتی به دو ظرفیتی، مکان قله، q^* ، به سمت q های بزرگتر میل می‌کند.



شکل (۴-۱) تغییر پراکندگی با بردار پراکندگی [۲]

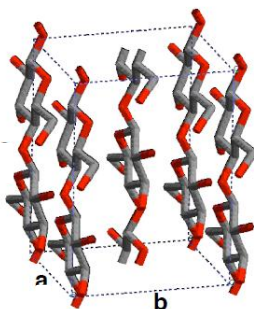
شکل (۵-۱) نمودار تغییرات q^* با X را برای یک غلظت معین منومرها در سه روش تجربی (نماد مربع) و مینینگ-اوزاوا (خط-چین) و حل معادله‌ی پواسون - بولتزمن در تقریب سلول استوانه‌ای (خط پر) را نشان می‌دهد که در مرجع [۲] مورد مطالعه قرار گرفته است.



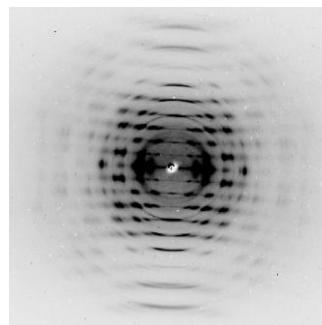
شکل (۵-۱) تغییرات q^* با X در روش‌های مختلف برای توصیف توزیع پادایون‌ها [۲]

همان‌طور که در این نمودار دیده می‌شود، پیش‌بینی‌های نظریه‌ی پواسون - بولتزمن^۱ و منینگ-اوزاوا در Xهای نزدیک به عدد یک، با نتایج تجربی حاصل از پراکندگی نوترون و اشعه‌ی ایکس سازگاری دارد ولی در Xهای کوچکتر و نزدیک به صفر سازگاری ندارد. این اختلاف‌های بزرگ در محلول‌هایی که شامل پادیون‌های دو ظرفیتی هستند، می‌تواند به این علت باشد که از همبستگی یون-یون در روش معادله‌ی پواسون بولتزمن چشم پوشی شده است. مدل پواسون - بولتزمن به طور گسترده در مورد پادیون‌های یک ظرفیتی به منظور بررسی خواص محلول الکترولیت به کار می‌رود. به همین علت برای به‌دست آوردن تصویری دقیق‌تر از توزیع یون‌ها در حضور دیواره‌ی باردار (که مدلی ساده از سطح کلونید است) به داده‌های ناشی از پراکندگی ایکس/نوترون تکیه می‌شود. نوترون یک روش قدرتمند و گاهی اوقات منحصر به فرد را برای بررسی ساختار و خواص ماده فراهم می‌کند. وقتی یک نمونه از ماده در مسیر باریکه‌ی نوترون قرار می‌گیرد، نوترون‌ها از راه‌های گوناگونی با ماده برهم‌کنش می‌کنند (که در فصل ۳ بررسی شده است). ممکن است با ماده انرژی مبادله کنند و جهت حرکت آن‌ها تغییر کند. وقتی انرژی نوترون‌ها بعد از برهم‌کنش بدون تغییر می‌ماند، پراکندگی کشسان یا پراش و اگر تغییری در انرژی آن‌ها ایجاد شود پراکندگی ناکشسان رخ می‌دهد. از طریق بررسی تعداد و انرژی نوترون‌های پراکنده شده می‌توان خواص ماده، ساختار آن، ارتعاش اتم‌ها و مولکول‌ها، سطوح انرژی، انتقال فازها و... را بررسی کرد.

شدت پراکندگی نوترون‌ها (یا عامل ساختار) با تبدیل فوریه‌ی فضایی چگالی تعداد ذره‌های پراکنده متناسب است. از این‌رو با اندازه‌گیری شدت پراکندگی، توزیع ذره‌های پراکنده و ساختار ماده‌ی هدف قابل دسترسی است. به عنوان مثال، شکل (۱-۶-الف) یک نمونه از طرح پراکندگی نوترون از یک فیبر در سطح آشکار ساز را نشان می‌دهد، که با تبدیل فوریه‌ی آن، ساختار فضایی ماده‌ی هدف به صورت شکل (۱-۶-ب) به‌دست آمده است.



شکل (۱-۶-ب) ساختار فیبر [۳۱]



شکل (۱-۶-الف) الگوی پراش نوترون از فیبر [۳۱]

¹ Poisson-Boltzmann

فصل ۲

توزیع یونها پیرامون کلوئیدهای باردار و دولایه‌ی الکتریکی

۲-۱- مقدمه

رفتار الکتریکی یک سیستم معلق از ذرات کلونیدی در یک محلول الکترولیت به توزیع یون‌های الکترولیت و پتانسیل الکتریکی در اطراف ذره کلونید بستگی دارد. این توزیع پتانسیل معمولاً توسط معادله‌ی پواسون - بولتزمن شرح داده می‌شود. در استفاده از این معادله، فرض می‌شود که: (۱) یون‌های الکترولیت بارهای نقطه‌ای هستند. (۲) از همبستگی یون-یون صرف‌نظر می‌شود. (۳) محلول، یک دی‌الکتریک، بدون ساختمان مشخص است که گذردهی الکتریکی یکنواخت، ϵ_r دارد. (۴) بارها بر روی سطح ذره، با چگالی بار سطحی یکنواخت σ اندازه‌گیری می‌شوند [۴].

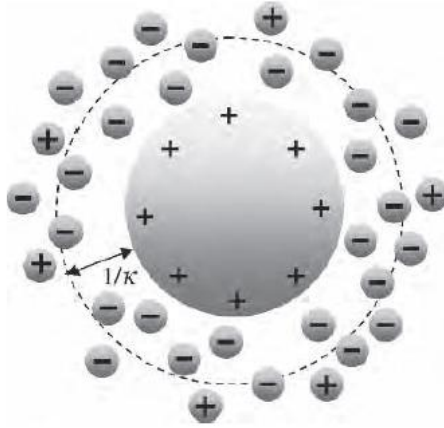
۲-۲- معادله‌ی پواسون-بولتزمن

وقتی یک ذره کلونیدی در یک محلول الکترولیت فروبرده می‌شود، به دلیل جذب یون‌ها به سطح ذره، یا یونش گروه‌های منزوی بر روی سطح، معمولاً باردار می‌شود. همان طوری که در فصل ۱ بیان شد، پادیون‌ها تمایل دارند که به سطح ذره نزدیک شوند تا بارهای سطح را خنثی کنند، اما حرکت‌های حرارتی این یون‌ها مانع از تراکم آنها می‌شود، به طوری که در اطراف کلونید یک ابریونی، شکل می‌گیرد. غلظت پادیون‌ها در ابر یونی خیلی بالا است، در حالی که غلظت یون‌های دارای بار مشابه بار سطحی کلونید در این محدوده بسیار پایین است، و ابر یونی همراه با بارهای سطحی ذره، دولایه الکتریکی تشکیل می‌دهند. این مطلب به طور طرح وار در شکل (۲-۱) نشان داده شده است [۴].

می‌خواهیم معادله‌ی حاکم بر توزیع پتانسیل در اطراف یک ذره کلونیدی که به طور یکنواخت باردار شده است، را به دست آوریم. برای این کار چگالی انواع بارهای متحرک آزاد در یک مکان اختیاری r در فاز محلول را توسط $\rho_{el}(r)$ نمایش می‌دهیم. معمولاً نیاز است که فقط یون‌های الکترولیت را به عنوان انواع بارها در نظر بگیریم.

در حالت کلی فرض می‌کنیم که الکترولیت ترکیبی از N نوع یون با ظرفیت Z_i و غلظت عمده‌ی محلول^۱ (غلظت در فاصله‌ی دور از سطح باردار کلونید) یا چگالی تعداد n_i^∞ ($i=1,2,\dots,N$) (بر حسب $1/m^3$) است.

¹ Bulk concentration



شکل (۱-۲) دو لایه‌ی الکتریکی در اطراف یک ذره‌ی کلئیدی به طور مثبت باردار شده [۴]

از شرط الکترون خنثایی^۱ داریم:

$$\sum_{i=1}^N Z_i n_i^{\infty} = 0 \quad (۱-۲)$$

پتانسیل الکتریکی $\psi(r)$ در مکان r خارج از ذره و چگالی بار $\rho_{el}(r)$ در همان نقطه طبق معادله‌ی پواسون با یکدیگر رابطه دارند [۲۸].

$$\nabla^2 \psi(r) = -\frac{\rho_{el}(r)}{\epsilon_r \epsilon_0} \quad (۲-۲)$$

در رابطه‌ی فوق ϵ_r گذردهی الکتریکی نسبی (همان ثابت دی الکتریک) محلول الکترولیت و ϵ_0 گذردهی الکتریکی خلاء می باشد. فرض می کنیم که توزیع یون‌های الکترولیت $n_i(r)$ از قانون بولتزمن^۲ پیروی می کند [۴].

$$n_i(r) = n_i^{\infty} \text{Exp}\left(-\frac{z_i e \psi(r)}{K_B T}\right) \quad (۳-۲)$$

در اینجا $n_i(r)$ غلظت (چگالی تعداد) یون نوع i ام در مکان r $e = 1.60 \times 10^{-19} \text{C}$ بار الکتریکی بنیادی،

$K_B = 1.38 \times 10^{-23} \text{ J/K}$ ثابت بولتزمن و T دمای مطلق است.

بنابراین چگالی بار $\rho_{el}(r)$ در مکان r توسط رابطه‌ی زیر داده می شود.

¹ Electroneutrality condition

² Boltzmann's law