บทคัดย่อ

182130

การดูดซับของอนุภาครูปร่างทรงรีบนพื้นผิวเรียบสามารถจำลองแบบได้ด้วยการดูดซับแบบไม่สมดุลแบบลำดับขั้น ในแบบจำลองนี้ อนุภาคถูกเติมเข้าไปบนพื้นผิวทีละตัวโดยการสุ่มตำแหน่งและไม่ทับอนุภาคอื่น จากนั้นอนุภาคจะเคลื่อนที่บนพื้นผิวภายใต้ผลของแรงดึงดูดจากอนุภาคอื่นๆ ที่อยู่บนพื้นผิว แล้วจึงหยุดนิ่งที่ตำแหน่งหนึ่งโดยไม่มีการเคลื่อนที่ต่อไปและไม่หลุดออกจากพื้นผิวอีกด้วย งานวิจัยนี้เสนอแบบจำลองของรูปแบบพลังงานศักย์ที่เหมาะสมสำหรับอธิบายแรงดึงดูดของทรงรี โดยประกอบด้วยส่วนของแรงผลักซึ่งป้องกันไม่ให้อนุภาคทับตำแหน่งกันได้ และส่วนของแรงดึงดูดซึ่งเป็นความสัมพันธ์ของ r^{-6} เมื่อ r แทนระยะห่างระหว่างจุดศูนย์กลางของทรงรีสองรูป ทั้งพารามิเตอร์ของแรงดึงดูดและของขนาดอนุภาคจะขึ้นกับการวางตัวของอนุภาคทรงรีทั้งสองนั่นคือ $\varepsilon \propto \sigma^{-\lambda}$. ในที่นี้ λ เป็นพารามิเตอร์อีกตัวหนึ่งซึ่งเป็นตัวกำหนดอัตราส่วนแรงดึงดูดในการเรียงตัวแบบข้างแนบข้างต่อการเรียงตัวแบบหัวต่อหาง จึงมีผลต่อการจัดเรียงตัวของอนุภาคทรงรีบนพื้นผิว ค่าตามธรรมชาติของพารามิเตอร์ λ เป็น 2.19 1.92 และ 1.79 โดยหาจากการคำนวณพลังงานต่ำสุดของการวางตัวของอนุภาคทรงรีสองอนุภาคที่มีอัตราส่วนของความยาวแกนหลักต่อแกนรองเป็น 2:1 3:1 และ 4:1 ตามลำดับ ผลของอุณหภูมิและพารามิเตอร์ λ ต่อการเรียงตัวของทรงรีถูกตรวจสอบ โดยพิจารณาจากฟังก์ชันการกระจายตัวของอนุภาคตามแนวรัศมี หรือ $g(r)$ และฟังก์ชันสหสัมพันธ์ของการวางตัวของอนุภาค $G(r)$ ซึ่งพบว่าที่อุณหภูมิต่ำกว่าจะมีการเกาะกลุ่มกันของอนุภาคและเกิดการเรียงตัวที่เป็นระเบียบเป็นระยะทางไกลกว่าที่อุณหภูมิสูงๆ และพบว่าเมื่อค่า λ =3.5 จะพบการเรียงตัวเป็นระเบียบแบบข้างแนบข้างมากกว่าที่ค่าตามธรรมชาติของ λ และเมื่อ λ =0.1 ผลดังกล่าวสามารถสังเกตได้จากรูปแสดงตัวอย่างการจัดเรียงตัวของอนุภาค โดยพบว่า ที่ λ =3.5 อนุภาคจะมีการเรียงตัวกันเป็นแนวมากกว่าที่ λ ค่าอื่นๆ นอกจากนี้ยังได้ศึกษาผลของความหนาแน่นที่มีต่อการจัดเรียงตัว พบว่าสำหรับระบบที่อุณหภูมิต่ำ ความเป็นระเบียบเริ่มตั้งแต่ที่ความหนาแน่นต่ำและจะลดลงเมื่อความหนาแน่นของระบบเพิ่มสูงขึ้น ตรงกันข้ามกับระบที่อุณหภูมิสูง ซึ่งพบว่าที่ความหนาแน่นต่ำ ความเป็นระเบียบจะเกิดขึ้นน้อย แต่เมื่อเพิ่มความหนาแน่นของระบบ จะทำให้โครงสร้างเกิดความเป็นระเบียบมากขึ้นได้

The adsorption of prolate ellipsoids on a homogeneous surface was modeled by sequential quenching. In this model, particles were added one at a time at random position on a surface, providing that they do not over with other particles. Once a particle was added, it would be moved on the surface under the effect of interactions of other previously adsorbed particles. Finally, it was fixed at apposition and never moved nor detached. The work began by proposing an appropriate potential whose repulsive part was that of hard ellipses and attractive part was the r^{-6} pairwise attraction. Both the strength and range parameters for the attraction were functions of the orientations of the pair of ellipses and related by $\varepsilon \propto \sigma^{-\lambda}$. The parameter λ determines the relative strength of the side-by-side and end-to-end attractions and thus plays an important role in determining the alignment of the particles. The natural values of parameter λ of 2.19, 1.92 and 1.79 were adopted by using point-energy additivity to compute the minimum energies for both of these configurations for a pair of ellipsoids of revolution with aspect ratio of 2:1, 3:1 and 4:1, respectively. The effect of temperature and the parameter λ on the alignments of ellipses were then investigated. Both radial distribution function, $g(r)$, and orientational correlation function, $G(r)$, showed the expected longer ranges of orientational correlation at lower temperatures and showed higher degree of orientational order for λ=3.5 than λ=natural values and λ=0.10. This could also be seen in the examples of configurations showing that for λ=3.5, ellipses are more aligned than λ=natural values and λ=0.1. The effect of density was also studied. It was found that at a low temperature, structures possessed less degree of ordering when increasing density. On the contrary, at a high temperature, they showed higher degree of ordering when density was increased.