

Párhuzamos töltött rétegek közé adszorbeálódott elektrolitok Monte Carlo szimulációs vizsgálata

Szerző: Kovács Róbert

Témavezető: Boda Dezső

Pannon Egyetem
Mérnöki Kar
Kémiai Intézet
Fizikai Kémiai Intézeti Tanszék

Absztrakt

A két töltött fal között lévő elektrolit egy szokásos szimulációs elrendezés az elektromos kettősréteg vizsgálatára. Elektromos kettősréteg egy töltött fal és egy elektrolit határfelületén alakul ki. Amennyiben a két fal elég távol van egymástól, a falak mellett kialakuló kettősrétegek egymástól függetlenek és középen kialakul egy semleges tömbfázis.

Ha azonban a két fal közel van egymáshoz (rés, "slit"), a kettősrétegek átlapolódnak és a tömbfázis nem jelenik meg. Ez a geometria nagykanonikus sokaságon vizsgálható jól, ahol a tömbfázis egy adott kémiai potenciálokkal jellemzett virtuális, külső tároló. A valóságban mindig több rés létezik egymás mellett, szilárdfázisú töltött rétegekkel elválasztva egymástól (mint pl. rétegszilikát ásványokban).

A dolgozatban ezt a rendszert vizsgáljuk nagykanonikus Monte Carlo szimulációkkal, sűrűség-, töltés-, elektromos tér, és elektromos potenciál profilok számolásával. Vizsgálataink középpontjában a résrendszer elektromos viszonyai állnak. Megvizsgáljuk, hogy több egymás mellett lévő rés (résrendszer) mennyiben különbözik az elszigetelt réstől.

Mivel a résrendszerbe adszorbeálódó részecskék ionok, ezeknek le kell győzni egy elektromos potenciálgátat, hogy beléphessenek a rendszerbe, ezért azt ebben az esetben korrektebb a rendszert az őt határoló tömbfázisokkal együtt vizsgálni (az elszigetelt résre vonatkozó szimuláció erről nem ad felvilágosítást). A legyőzendő potenciálgát nagysága elsősorban a rendszert határoló kettősrétegek szerkezetétől függ, de azt találtuk, hogy ehhez még hozzáadódik egy a résrendszer külső rétegeinek polarizációjából adódó potenciálkülönbség.