ПОЛУПРОНИЦАЕМАЯ МЕМБРАНА

А.Н. Богданов, В.А. Лобаскин, О.И. Виноградова

Лаборатория физикохимии модифицированных поверхностей ИФХЭ РАН, Москва, Ленинский проспект, д.31, корп.4, e-mail: bogdanovartem@polly.phys.msu.ru

Полупроницаемые мембраны являются элементами живых и искусственных систем. Осмотическое равновесие, связанное с ними играет важную роль, как в биологии, так и в технических науках. В этой работе мы изучаем плоскую полупроницаемую двухслойную мембрану в присутствии электролитов. В нашей модели мембраны проницаемы для одного типа ионов, в результате чего заряжается внутреннее пространство бислоя. Мы полагаем, что взаимодействие между слоями мембраны происходит по гармоническому потенциалу. В результате изучения такой системы мы используем как теоретический подход, основанный на уравнении модели Пуассона-Больцмана для получения распределения заряда, потенциала и давления для различных электролитных систем, так и метод молекулярной динамики для компьютерного моделирования данной системы. Компьютерное моделирования такой системы также необходимо для того, чтобы оценить эффект от структуры иона и его валентности. Геометрия исследуемой системы приведена на рис.1.

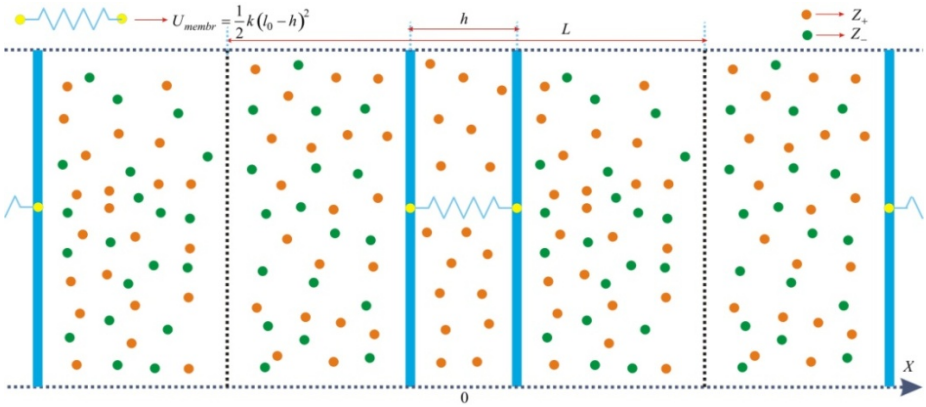

Рис.1.

Мембрану мы сделали непроницаемой для катионов, включая олигомеры, но “невидимой” для анионов. Мы рассматривали электролит трех различных типов: 1) моновалентная соль, 2) ассиметричная соль с трехвалентными катионами и моновалентными контрионами, 3) олигомеры, состоящие из 7 звеньев и моновалентные противоионы.

В результате компьютерной симуляции была изучена данная система, было обнаружено, что из-за диффузии ионов бислой приобретает заряд проникающих ионов (анионов). Однако в моделировании трехвалентной соли и олигомеров мы наблюдаем перезарядку бислоя адсорбированными полиионами, так что знак эффективного заряда бислоя меняет знак, если концентрация электролита достаточно велика. Во всех случаях мы наблюдаем монотонное увеличение осмотического давления на бислой при увеличении концентрации электролита. Бислой сжимается наиболее сильно в случае трехвалентной соли и сжатие примерно в два раза больше чем для моновалентного электролита с той же самой длиной Дебая в режиме $\kappa h \sim 10$.