

УДК 621.384.8.

© З. З. Латыпов, Ю. К. Голиков

РАЗДЕЛЕНИЕ МОЛЕКУЛ ПО ПОЛЯРИЗУЕМОСТИ В ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ПОЛЯХ

Рассмотрено движение и возможность разделения поляризуемых молекул в неоднородных электрических полях. На примере поля, создаваемого системой параллельных заряженных нитей, оценены угловые дисперсии для молекул эндофуллеренов $\text{Sc}@C_{82}$, $\text{Y}@C_{82}$, $\text{La}@C_{82}$, $\text{Gd}@C_{82}$ и молекул фуллеренов C_{60} , C_{70} , C_{82} , C_{84} по известным величинам их дипольных моментов и коэффициентов поляризуемости. Результаты численного моделирования показали реализуемость использования рассмотренных полей как основы для создания сепаратора поляризуемых молекул.

Кл. сл.: молекулы, поляризуемость, дипольный момент, неоднородное поле, разделение

ВВЕДЕНИЕ

В работе рассмотрена возможность разделения в неоднородных электрических полях молекул в зависимости от их поляризуемости и дипольных моментов. Разделение молекул фуллеренов и их производных приводится как пример. В настоящее время стандартными методами разделения фуллеренов и их соединений являются химические методы селективной экстракции этих веществ из фуллеренсодержащей сажи [1], методы многоступенчатой сепарации в жидкостной хроматографической колонке [2], сепарация и идентификация высших фуллеренов в жидкостной хроматографической колонке, соединенной с масс-спектрометром, использующим ионизацию при электрораспылении [3]. Недостатками этих методов являются: низкое разрешение и длительность процесса разделения. Поэтому актуальными являются развитие исследований и разработка альтернативных методов разделения таких веществ, как фуллерены и их соединения.

В работе [4] была коротко представлена идея разделения молекулярного пучка фуллеренов и эндофуллеренов в неоднородных электрических полях. В настоящей работе приводится математическая модель движения фуллеренов и эндометаллофуллеренов в таких полях. И в качестве примера проведена оценка одной версии сепаратора потока фуллеренов, состоящего из системы заряженных параллельных металлических нитей. Полученные результаты показали достаточно высокую разрешающую способность рассмотренного метода. При этом предполагается, что ориентация поляри-

зуемых молекул в поле, а также использование метода термализации поступательной и вращательной энергий методом охлаждения в буферном газе позволяет пренебречь вращательной энергией исследуемых молекул при рассмотрении их движений.

1. МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ДВИЖЕНИЯ

1.1. Движение молекул, поляризуемых и имеющих постоянные дипольные моменты

В работе [1] показано, что молекулы фуллеренов имеют значительные коэффициенты поляризации α , молекулы эндометаллофуллеренов редкоземельных элементов имеют постоянные электрические дипольные моменты p_0 . Следовательно, эти молекулы отличаются как по массам, так и по наведенным и постоянным дипольным моментам. При исследовании движения этих молекул в сильных электромагнитных полях они могут рассматриваться в первом приближении как точечные объекты. Здесь мы ограничимся предположением, что доминирующая часть дипольного взаимодействия молекул с внешним статическим электрическим полем описывается потенциальной энергией

$$П = -p_0 |\mathbf{E}| - \alpha |\mathbf{E}|^2, \quad (1)$$

здесь $|\mathbf{E}|$ — модуль вектора электрического поля $\mathbf{E} = -\text{grad} \Phi$, $\Phi(X, Y, Z)$ — потенциал поля; $p_0 > 0$, $\alpha > 0$. Как видно из формулы (1), чем больше неоднородность поля, тем больше воздействие

поля на частицы. Уравнение (1) позволяет сделать следующий физический вывод: если область электрического поля отделена от внешнего пространства так, что она эквипотенциально — вне электродной системы, начальная энергия молекул сохраняется при статическом электрическом потенциале $\Phi(X, Y, Z)$. Пусть потенциал поля имеет вид

$$\Phi = \Phi_0 \cdot \varphi(x, y, z), \quad (2)$$

где x, y, z — безразмерные координаты, связанные с реальными координатами X, Y, Z с помощью соотношений $X=l \cdot x, Y=l \cdot y, Z=l \cdot z, l = \text{const}$; φ — безразмерная структурная функция, выражающая геометрию поля; Φ_0 — характерное значение величины потенциала, выбираемое в реальной ситуации. Нерелятивистская функция Лагранжа молекул эндофуллеренов описывается выражением

$$L = \frac{\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2}{2} - \mu \sqrt{\varphi_x^2 + \varphi_y^2 + \varphi_z^2} - \nu(\tau)(\varphi_x^2 + \varphi_y^2 + \varphi_z^2), \quad (3)$$

где
$$\mu = \frac{p_0 \Phi_0}{m l^3} T^2, \quad \nu = \frac{\alpha \Phi_0^2}{m l^4} T^2.$$

1.2. Разделение молекул в стационарных полях

Из потенциала (2) следует, что динамика молекулы определяется геометрическим фактором, т. е. формой траектории. Поэтому единицу времени T удобно выбрать такой, чтобы множитель μ или ν стал равным 1. Пусть $\nu = 1$, тогда будем иметь значения T и μ равными

$$T = \frac{l^2}{\Phi_0} \sqrt{\frac{m}{\alpha}}, \quad \mu = \frac{p_0}{\alpha} \frac{l}{\Phi_0}.$$

Молекулы фуллеренов не имеют постоянных дипольных моментов ($p_0 = 0$), следовательно второе слагаемое в (3) равно нулю и траектории частиц будут зависеть от значения величины α . Если частицы имеют дипольные моменты, как это имеет место с молекулами эндометаллофуллеренов, то динамика частиц будет определяться в основном вторым членом в (3). При условии, что начальные кинетические энергии E_0 всех молекул равны, их траектории будут существенно разными, что открывает возможность пространственного разделения молекул, отличающихся величинами отношения p_0 / α . Следует отметить, что величина μ явно не зависит от молекулярной массы m . Однако коэффициент поляризации α коррелирует с числом атомов в оболочке молекул фуллеренов [2] и неявно зависит от массы. Это открывает возможность масс-спектрометрии эндофуллеренов в неоднородных электрических полях.

1.3. Динамика молекул, поляризуемых и имеющих дипольные моменты в поле тонкой заряженной нити

Простейшей конфигурацией электрического поля является поле системы заряженных параллельных нитей. Такая система может быть использована для увеличения интенсивности конвертируемых молекулярных ленточных пучков. Исследование движения частиц в статических полях одиночной нити и системы параллельных нитей открывает возможности создания некоторых вариантов сепараторов пучков.

Пусть потенциал заряженной нити диаметром R_w в цилиндрических координатах R, Z, θ имеет вид

$$\Phi = \Phi_0 (\ln R / R_w - 1). \quad (4)$$

Примем $l = R_w$, введем безразмерный радиус согласно формуле $R = R_w r$, тогда напряженностью электрического поля будет $E = \Phi / R_w r$. Использование потенциала (4) в (3) позволяет получить безразмерную функцию Лагранжа для частиц с коэффициентом поляризации α и постоянным дипольным моментом p_0 . Пусть $\nu = 1$, тогда

$$T = \frac{l^2}{\Phi_0} \sqrt{\frac{m}{\epsilon_0 \alpha}} \quad \text{и} \quad \mu = \frac{p_0 l}{\epsilon_0 \alpha \Phi_0},$$

где ϵ_0 — электрическая постоянная. Функция Лагранжа молекул в этом случае будет равна

$$L = \frac{\dot{r}^2 + r^2 \dot{\theta}^2}{2} - \frac{\mu}{r} - \frac{1}{r^2}. \quad (5)$$

Начальными условиями здесь являются: $x_0, y_0, \dot{x}_0, \dot{y}_0$ — безразмерные координаты и скорости, и $E_0 = \frac{m l^2}{T^2} \frac{\dot{x}_0^2 + \dot{y}_0^2}{2}$ — начальная энергия. Функция (5) позволяет получить соответствующий интеграл энергии и уравнение

$$r(\theta) = 2c \cdot \left(-\sqrt{b^2 - 4ac} \cdot \sin \left(\frac{\sqrt{-2c}}{M} \theta + \arcsin \frac{2c + b r_0}{-r_0 \sqrt{b^2 - 4ac}} \right) - b \right)^{-1} \quad (6)$$

траектории частиц на основе значений коэффициентов поляризации и постоянных дипольных моментов. Данные об α и p_0 имеются в работе [2]. Здесь использованы следующие обозначения:

$$v_0 = \frac{l}{\Phi_0} \sqrt{\frac{3kT^0}{\varepsilon_0 \alpha}}, \quad c = -\frac{2-M^2}{2},$$

$$k = \frac{\varepsilon_0 \alpha \Phi_0}{p_0 l}, \quad M = r_0 v_0, \quad (7)$$

$$a = v_0^2 + \frac{p_0 l}{\varepsilon_0 \alpha \Phi_0 r_0} + \frac{1}{r_0^2}, \quad b = -\mu = -\frac{p_0 l}{\varepsilon_0 \alpha \Phi_0}.$$

2. ЭЛЕКТРОДНАЯ СИСТЕМА СЕПАРАТОРА

На рис. 1 представлены система координат, траектория молекулы с дипольным моментом и угол отклонения молекулы от направления начального движения. Как видно из уравнений (6) и (7), параметры траектории зависят от коэффициентов поляризации и значений постоянных дипольных моментов, что позволяет получать пространственное разделение фуллеренов и эндофуллеренов в поле заряженной нити. Эффект разделения может быть интенсифицирован с использованием системы параллельных нитей расположенных друг от друга на расстояниях около $20 R_w$, чтобы избежать взаимного ослабления полей отдельных нитей. Величина напряженности поля нити зависит от расстояния точки поля от нити. Для пространственного разделения молекул в рассматриваемом случае требуются поля напряженностью не менее 10^5 В/см. Это означает, что для сепарации молекул должна быть выбрана ограниченная область поля.

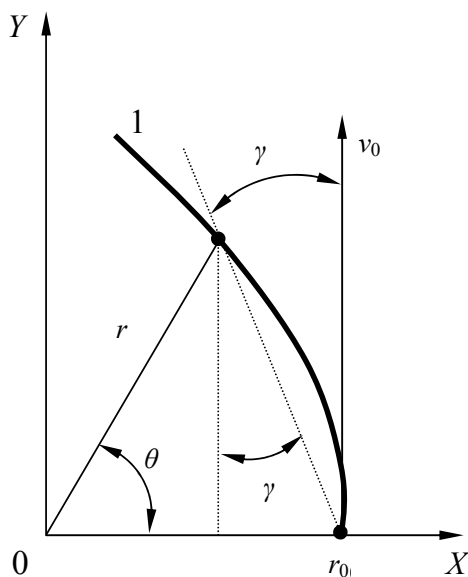


Рис. 1. Схема координат системы и траектории 1 молекулы эндофуллерена

На рис. 2 показана схема электродных систем и траектории пучков двух типов молекул, ограниченных внешними границами пространства электрического поля. Пучок частиц проходит через щель 4, сеточный экран 5, сетку-анализатор 7 и падает на коллектор молекул 7. Нити сеток 5 и 6 параллельны щели 4. Нити сетки 5 расположены на линии, проходящей через середину расстояния между нитями сетки 6. Таким образом, возможность прохождения молекул через слабое электрическое поле исключена.

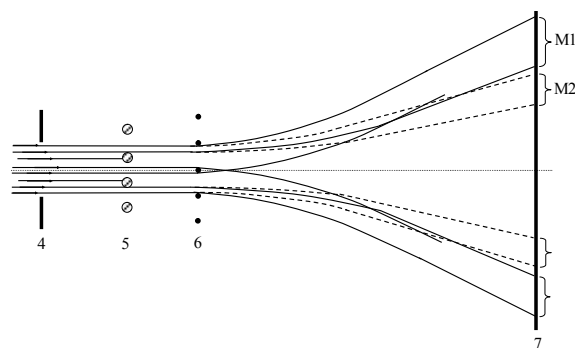


Рис. 2. Схема системы электродов и траекторий двух типов молекул (нумерация эл-тов, совпадающая с рис. 3). 4 — щель, 5 — сетка-экран, 6 — сетка-анализатор, 7 — коллектор молекул. Траектория M1 соответствует молекуле с большим дипольным моментом, чем траектория M2

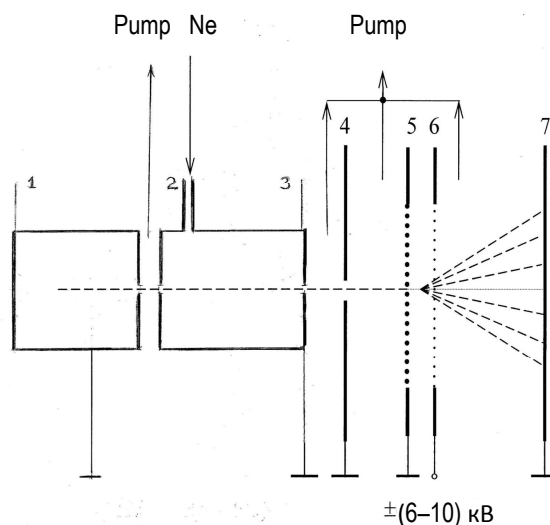


Рис. 3. Схема системы электродов сепаратора молекул.

1 — термическая эффузионная ячейка Кнудсена, 2 — капилляр подачи буферного газа, 3 — ячейка охлаждения буферным газом, 4 — щель, 5 — сетка-экран, 6 — сетка-анализатор, 7 — коллектор

На рис. 3 представлена возможная электродная система сепаратора для реализации рассмотренного метода разделения фуллеренов с дифференциальной системой откачки. Источник потока нейтральных фуллеренов или их соединений состоит из термической эффузионной ячейки Кнудсена [5], стыкованной с охлаждающей ячейкой с буферным газом [6], работающей при комнатной температуре. Ячейка Кнудсена диаметром 15 и длиной 15 мм содержит твердый исследуемый образец и ленточку-нагреватель для испарения образца при температурах около 400–600 °С. Пучок паров образца направляется через отверстие диаметром 1 мм в охлаждающую ячейку через ее щель шириной 1 и длиной 2.5 мм. Охлаждающая ячейка имеет размеры: диаметр 15 и длина 25 мм. В качестве буферного газа используются химически инертные Ne или Ar. Верхний предел газа поддерживается около 10^{-1} мм рт. ст. в специально экспериментально подобранных условиях [7]. Типичная плотность атомов при этом составляет 10^{14} – 10^{17} см⁻³. Использование охлаждающего буферного газа является эффективным методом для диссипации поступательной и вращательной энергий исследуемых молекул [8]. Пучок этих молекул формируется при истечении буферного газа и исследуемых молекул в высоковакуумную область устройства, поддерживаемую при давлении $1 \cdot 10^{-7}$ мм рт. ст. двухступенчатой системой дифференциальной откачки. "Охлажденный" молекулярный пучок через выходную щель (1×4 мм) ячейки и щель (1×4 мм) электрода 4 направляется в систему анализа, состоящую из сетчатого экрана 5 и сетчатого анализатора 6, и попадает на коллектор молекул 7. Расстояние между охлаждающей ячейкой и электродом 4 около 5 мм, между 4 и сеткой 5 — около 10 мм, между сетками 5 и 6 — около 3 мм. Сетка 5 состоит из параллельных нитей диаметром 0.12 мм, отстоящих друг от друга на расстояние 0.4 мм и параллельных щели охлаждающей ячейки. Сетка 6 состоит из нитей 0.04 мм диаметром, длиной 15 мм, отстоящих друг от друга на 0.4 мм. Коллектор 7 — металлическая фольга размерами около 8×50 мм отстоит от сетки 6 на расстояние 60 мм. На рис. 3 показаны потенциалы, приложенные к элементам системы, и схема откачки. Пленки на коллекторе, образованные в процессе накопления молекул, диагностируются в независимых экспериментах с помощью масс-спектрометрии с ионизацией при лазерной десорбции и оже-электронной спектрометрии.

Для реализации идеи разделения молекул необходимо рассмотреть движение дипольных молекул в достаточно сильных полях. В этом случае потенциальная энергия дипольной молекулы в поле будет превосходить по величине энергию вращательного движения молекул, и молекулы будут

ориентированы в направления поля. В соответствии с кинетической теорией газов, вращательная энергия частиц при температуре $T = 300$ К составляет величину $W \approx 3kT/2 = 0.025$ эВ. В рассматриваемом случае потенциальная энергия молекул превосходит величину W при условии $\Phi_0 > 6000$ В.

3. ОЦЕНКИ РАЗРЕШАЮЩЕЙ СПОСОБНОСТИ СЕПАРАТОРА

В целях оценки разрешающей способности рассматриваемой схемы был проведен численный анализ характеристик траектории четырех молекул эндометаллофуллеренов в поле системы нитей. Угол отклонения частицы от направления начальной скорости γ связан с углом θ зависимостью

$$\operatorname{tg} \gamma = \frac{r_0}{r} \frac{1}{\sin \theta} - \operatorname{ctg} \theta. \quad (8)$$

Углы отклонения γ для $\theta \rightarrow \pi/2$ вычислены с помощью (6) для молекул пучков, соответствующих внешним границам электрического поля, когда начальными условиями являются: r_0 (min) = 1.2, r_0 (max) = 8.0, $\theta_0 = 0$. Следует отметить, что в данной работе при вычислениях использовалась в некоторых случаях внесистемная единица измерения дипольного момента молекул "дебай" (Д), как это сделано в работе [2], на которую сделана ссылка. Следующие условия приняты в качестве начальных для последующих вычислений:

$R_w = l = 0.05$ мм = $5.0 \cdot 10^{-5}$ м — радиус нити;

$\Phi_0 = 6000$ В — потенциал нити;

$p_{01} = \sim 2$ Д = $0.66 \cdot 10^{-29}$ Кл·м — дипольный момент молекулы Sc@C₈₂;

$p_{02} = \sim 1.7$ Д = $0.56 \cdot 10^{-29}$ Кл·м — дипольный момент молекулы Y@C₈₂;

$p_{03} = \sim 3.5$ Д = $1.15 \cdot 10^{-29}$ Кл·м — дипольный момент молекулы La@C₈₂;

$p_{04} = \sim 4$ Д = $1.32 \cdot 10^{-29}$ Кл·м — дипольный момент молекулы Gd@C₈₂;

$\alpha = 110$ Å³ = $1.1 \cdot 10^{-28}$ м³ — коэффициент поляризации фуллерена C₈₂ [2];

$E_0 = 0.03$ эВ = $8.01 \cdot 10^{-19}$ Дж — начальная энергия молекул;

$\dot{y}_0 \neq 0$, $\dot{x}_0 = 0$ — начальные скорости молекул;

x_0 (min) = $1.2R_w$, x_0 (max) = $8R_w$, $y_0 = 0$ — начальные координаты.

Вычисления показывают, что в этих случаях величины членов в (6) и (7) с коэффициентами α существенно малы по сравнению с членами,

Табл. 1. Углы отклонения молекул $\bar{\gamma}_{0i}$ и их дипольные моменты

Молекулы	$\bar{\gamma}_{0i}$, рад	p_{0i}
Y@C ₈₂	0.9	1.85 Д = $0.56 \cdot 10^{-29}$ Кл·м
Sc@C ₈₂	0.143	2.0 Д = $0.66 \cdot 10^{-29}$ Кл·м
La@C ₈₂	0.027	3.5 Д = $1.15 \cdot 10^{-29}$ Кл·м

Табл. 2. Углы отклонения и коэффициенты поляризации молекул

α_i	$\bar{\gamma}_{0i}$, рад
$\alpha(C_{60}) = 0.788 \cdot 10^{-28} \text{ м}^3$	1.1160
$\alpha(C_{70}) = 0.975 \cdot 10^{-28} \text{ м}^3$	1.1114
$\alpha(C_{82}) = 1 \cdot 10^{-28} \text{ м}^3$	1.1110
$\alpha(C_{84}) = 1.14 \cdot 10^{-28} \text{ м}^3$	1.1100

зависящими от p_0 ($p_0 l r_0^2 \dot{\gamma}_0^2 \gg 2\epsilon_0 \alpha \Phi_0$). Поэтому динамика движения частиц определяется в основном значением p_0 .

Пучки отклоненных молекул имеют определенную "угловую ширину", зависящую от начальных координат r_0 (min), r_0 (max) и значений дипольных моментов p_0 , коэффициентов поляризации α . В некоторых случаях они могут перекрываться. Для оценки угловой дисперсии по дипольным моментам $D\gamma(p_0) = p_0 d\gamma/dp_0$ были использованы средние углы отклонения пучков $\bar{\gamma}_{0i}$ с учетом "угловых ширин". В табл. 1 приведены полученные углы отклонения и значения дипольных моментов указанных молекул.

Угловая дисперсия по дипольным моментам, оцененная на основе данных для молекул Y@C₈₂ и La@C₈₂ на уровне $p_0 = 2$ Д, равна $D\gamma(p_0) = 1.232$ рад. Эта величина, полученная на основе молекул Sc@C₈₂ и La@C₈₂, равна $D\gamma(p_0) = 0.63$ рад. Средняя угловая дисперсия по дипольным моментам на уровне $p_0 = 2$ Д составляет $D\gamma(p_0) = 0.93$ рад. Если коллектор частиц 7 расположить на расстоянии ~60 мм от сетки 6, то расстояние между полосками накопленных двух типов молекул с разностью дипольных моментов $\Delta p_0 \sim 2$ Д составит ~4 мм. Отсюда следует вывод, что линейная дисперсия будет около ~2 мм с учетом экспериментальной ширины исходных пучков

и угловой ширины отклоненных пучков.

Для оценки разрешающей способности рассматриваемой схемы по величине поляризуемости α молекул проведен также численный анализ характеристик траекторий для четырех молекул фуллеренов. Молекулы фуллеренов не обладают постоянными дипольными моментами, поэтому второе слагаемое в уравнении (3) обращается в нуль и траектории частиц зависят от α . В этом случае удобно выбрать единицу времени равной $T = (l^2 / \Phi_0)(m/\epsilon_0 \alpha)^{1/2}$; при этом в уравнении (3) величина ν будет равна $\nu = 1$. Использование функции (5) позволяет получить уравнение траектории молекул

$$r(\theta) = \left[\frac{\sqrt{-c}}{a \cdot \operatorname{tg} \left(\frac{\sqrt{-c}}{M} \theta + \operatorname{arctg} \frac{\sqrt{-c}}{ax_0^2 + c} \right)} - \frac{c}{a} \right]^{1/2}. \quad (9)$$

Здесь введены следующие обозначения:

$\alpha = (M^2 - 2)/r_0^2 + v_0 r_0^2/2$, $c = -(M^2 - 2)/2$, $M = r_0 \cdot v_0$, $v_0 = (3kT^0/\epsilon_0 \alpha)^{1/2} R_w/\Phi_0$, ϵ_0 — электрическая постоянная, T^0 — температура ячейки Кнудсена.

При численном моделировании работы анализатора потенциал нитей сетки 6 выбран равным $\Phi_0 = 6000$ В. В табл. 2 приведены полученные ре-

зультаты по углам отклонения а также коэффициенты поляризации молекул [2]. Численное моделирование движения фуллеренов показывает, что возможность разделения в этом случае существенно слабее, чем в случае молекул с постоянными дипольными моментами. Получены следующие значения угловой дисперсии $D\gamma(\alpha_0) = \alpha_0 d\gamma/d\alpha_0$:

на основе C_{60} и C_{70} — $D\gamma = 0.0216$ рад = 1.2° ;

на основе C_{70} и C_{84} — $D\gamma = 0.0897$ рад = 0.51° ;

на основе C_{70} и C_{82} — $D\gamma = 0.0158$ рад = 0.9° .

Среднее значение угловой дисперсии молекул по поляризуемости составляет величину $D\gamma(\alpha_0) = 0.0424$ рад. Очевидно, что отношение двух видов дисперсии составит $D\gamma(p_0) / D\gamma(\alpha_0) \sim 63$. При необходимости увеличение дисперсии может быть достигнуто путем увеличения потенциала Φ_0 .

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

1. В работе рассмотрена математическая модель движения молекул в неоднородном электростатическом поле и показана возможность разделения нейтральных молекул по их поляризуемости и постоянным электрическим дипольным моментам.

2. Используя электрическое поле ансамбля заряженных параллельных нитей в качестве примера, а) получено математическое выражение для траектории движения молекул в поле и б) оценены возможные значения дисперсий угловых и линейных значений дипольных моментов для молекул фуллеренов и эндометаллофуллеренов.

3. Полученные результаты позволяют развить новый метод разделения нейтральных молекул и создать спектрометр нейтральных молекул по их поляризуемости и постоянным электрическим дипольным моментам.

4. Метод может быть использован для очистки фуллеренов и их соединений.

5. Рассмотрена одна из возможных схем экспериментальной реализации предложенного метода.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Laukhin E.E., Bubnov V.P., Koltover V.K.* Abstracts of invited lectures and contributed papers. Fullerenes and atomic clusters // IWFA'99. Russia, St. Petersburg, 1999. P. 208–209.
2. *Fuchs D., Rietschel H., Michel R.H. et al.* Extraction and chromatographic elution behavior of endohedral metallofullerenes: inferences regarding effective dipole moments // *J. Phys. Chem.* 1996. V. 100. P. 725–729.
3. *Jinno K., Saqto Y., Nagshima H., Itho K.* Separation and identification of higher fullerenes by high-performance liquid chromatography coupled with electrospray ionization mass spectrometry // *J. Microcolumn Separations*. 1998. V. 10, N 1. P. 79–88.
4. *Latypov Z.Z., Golikov G.K.* Separation of fullerene and endofullerene molecules in inhomogeneous electric field // *Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures*. 2004. V. 12, N 1-2. P. 25–28.
5. *Copland E.H., Jacobson N.S.* Thermodynamic activity measurements with Knudsen cell mass spectrometry // *Electrochemical Society Interface*. Summer 2001. V. 10, N 2. P. 28–31.
6. *Patterson D., Doyle J.M.* Bright, guided molecular beam with hydrodynamic enhanced // *J. Chem. Phys.* 2007. V. 126. 154307 (6 pages).
7. *Hutzler N.R., Lu H.-L., Doyle J.M.* The buffer gas beam: an intense, cold, and slow source for atoms and molecules // *Chem. Rev.* 2012. V. 112, N 9. P. 4803–4827.
8. *Campbell W.C., Doyle J.M.* Cooling trap loading, and beam production using cryogenic helium buffer gas // *Cold Molecules: Theory, Experiment, Applications* / (Eds) R.V. Krems et al. CRC Press, 2009. 753 p.

*Институт аналитического приборостроения РАН,
г. Санкт-Петербург (Латыпов З.З., Голиков Ю.К.)*

*Санкт-Петербургский государственный
политехнический университет (Голиков Ю.К.)*

Контакты: Латыпов Зайдель Зарифович,
Zeidel@yandex.ru

Материал поступил в редакцию 3.06.2013

SEPARATION OF POLARIZABLE MOLECULES IN ELECTRIC FIELDS

Z. Z. Latypov¹, Yu. K. Golikov^{1,2}

¹*Institute for Analytical Instrumentation of RAS, Saint-Petersburg*

²*Saint-Petersburg State Polytechnical University*

The neutral molecule motion in the inhomogeneous electric fields is considered. The possibility of separating molecules with polarizabilities and a permanent electric dipole moments in these fields is shown. On the example of the electric field generated by system of charged parallel metallic wires the angle dispersions for the endofullerene molecules Gd@C_{82} , La@C_{82} , Sc@C_{82} , Y@C_{82} and fullerene molecules C_{60} , C_{70} , C_{82} , C_{84} are estimated using the known values of their the permanent dipole moments and polarizability coefficients. The results of the numerical simulation demonstrate the opportunity of using the inhomogeneous electric fields as the polarizable molecule separator base.

Keywords: molecules, polarizability, dipole moment, inhomogeneous field, separation