

8. De Vore R.A. Constructive Approximation/ De Vore R.A., Lorentz G.G. Springer-Verlag, New York/Berlin, 1993. – 356 p.

Исследована связь между DT-модулем гладкости r -й производной функции f и обычным k -модулем гладкости r -й производной периодической функции $\tilde{f} = f(\cos t)$. В частности, в случае, когда k – четное, r – нечетное, доказана эквивалентность этих модулей гладкости.

Приближение функций, конструктивная характеристика, DT-модуль гладкости.

We investigate the relation between DT-module of smoothness of the r -s derivative of the function f and usual module of smoothness of the r -s derivative of the periodic function $\tilde{f} = f(\cos t)$. In particular, we prove the equivalence of modules of smoothness, when k – even, r – odd.

Function approximation, constructive characteristic, modules of smoothness.

УДК 535.3

ЗАСТОСУВАННЯ АНАЛІТИЧНОГО ПІДХІДУ ДО ГРАНИЧНОЇ ПОЛЯРИЗОВАНОСТІ ГЕТЕРОГЕННИХ СИСТЕМ

**О.Ю. Грищук, кандидат фізико-математичних наук
Інститут хімії поверхні НАН України
С.В. Стеценко, старший викладач
Національний університет біоресурсів
і природокористування України**

Отримано аналітичний розв'язок рівнянь Максвелла для діелектричної системи сферичних частинок у середовищі, розміщеному між двома паралельними пластинами, на які подається змінна напруга низької частоти. Цей розв'язок одержано із відповідної крайової задачі для функції Гріна. Всі мультипольні моменти та електричне поле виражені у термінах потенціалу, прикладеного до пластин і матриці, яка залежить від конфігурації системи.

Сферична частинка, діелектрична система, мультипольний момент.

Вивчення електричного відгуку гетерогенних середовищ має довгу історію, починаючи із робіт Пуасона, Моссотті, Клаузіуса, Лоренца, Максвелла [3], Гарнетта, Вагнера. У всіх цих роботах, в основному, отримані еквівалентні результати, хоча в основу кожної покладено дещо

відмінні гіпотези. Стисло і точно виклав їх Ландауер [4]. Також розглядали роль вищих мультипольних моментів Девіс і Шварц, Кларо і Брауерс [5].

Мета роботи полягає у застосуванні аналітичного підходу до дослідження діелектричної системи сферичних частинок, оточених певним середовищем з різною діелектричною проникністю.

Матеріали та методика досліджень. Розглянемо гетерогенну систему, яка складається із сферичних частинок, розміщених у деякому середовищі, яке описується залежною від частоти комплексною діелектричною проникністю ϵ_m . i -та частинка центрована в \vec{r}_i , має радіус a_i та частотно-залежну комплексну діелектричну проникність ϵ_i . Вся система розміщена між двома плоскими електродами $z = \pm \frac{d}{2}$. До електродів прикладено синусоїдальну напругу з амплітудою V_0 . Припускаємо, що поперечні розміри системи набагато більші d , тому крайовими ефектами можна знехтувати. Розглянемо низькі частоти і малі частинки $\lambda \gg d > a_i$, тому можна знехтувати і магнітними ефектами. За таких умов можна визначити залежність від часу і електричний потенціал буде мати вигляд:

$$u(\vec{r}, t) = u(\vec{r})e^{-j\omega t}. \quad (1)$$

У цій ситуації заряди можуть накопичуватись лише на межі «частинки - середовище» або «середовище – електроди». Тому $u(\vec{r})$ задовольняє рівнянню Лапласа:

$$\Delta u(\vec{r}) = 0 \quad (2)$$

з крайовими умовами:

$$u(\vec{r})|_{z=-d/2} = V_0, \quad ; \quad u(\vec{r})|_{z=+d/2} = 0, \quad (3a)$$

$$u_{зовн}(\vec{r})|_{s_i} = u_{внут}(\vec{r})|_{s_i}, \quad (3b)$$

$$\epsilon_m \frac{\partial u_{зовн}(\vec{r})}{\partial n_i} \Big|_{s_i} = \epsilon_i \frac{\partial u_{внут}(\vec{r})}{\partial n_i} \Big|_{s_i}, \quad (3c)$$

де s_i – поверхня i -ї частинки; n_i – напрямок її нормалі; $u_{зовн}$, $u_{внут}$ – потенціали зовні та всередині частинки відповідно.

Потенціал $u(\vec{r})$ можна записати у вигляді суперпозиції:

$$u(\vec{r}) = u^0(\vec{r}) + u^1(\vec{r}), \quad (4)$$

$$\text{де } u^0(\vec{r}) = V_0/2 - \vec{E}_0 \vec{r} = V_0/2 - \vec{E}_0 \vec{r}_i - \vec{E}_0 (\vec{r} - \vec{r}_i), \quad (5)$$

являє собою прикладений потенціал,

$$\vec{E}_0 = \vec{e}_z \frac{V_0}{d} - \text{прикладене електричне поле,}$$

$u^1(\vec{r})$ – потенціал, що створюється всіма частинками, а також наведеними ними зарядами на електродах.

Потенціал u^1 задовольняє:

$$\Delta u^1(\vec{r}) = 0;$$

$$u^1(\vec{r})|_{z=+d/2} = 0. \quad (6)$$

Формула Гріна для крайових умов Діріхле на електродах:

$$G(\vec{r}, \vec{r}') = \sum_k \frac{(-1)^k}{|\vec{r} - \vec{r}'_k|}, \quad (7a)$$

$$\text{де } \vec{r}'_k = \{x', y', kd + (-1)^k z'\}, \quad k = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (7b)$$

У рівнянні (7a) доданок $\vec{r}'_0 = \vec{r}'$ являє собою потенціал одиничного заряду, що знаходиться в \vec{r}' , а всі інші доданки з $k \neq 0$ є потенціалами зображень цього одиничного заряду. Оскільки заряди зосереджуються лише на границях, маємо:

$$u^1(\vec{r}) = \sum_{ik} (-1)^k \int_{s_i} \frac{\delta_i(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'_k|} ds', \quad (8)$$

де $\delta_i(\vec{r}')$ – поверхнева щільність повного заряду i -ї частинки, оскільки інтеграл по поверхні електродів зникає в силу крайових умов (6).

Тепер можна використати розкладання:

$$\begin{aligned} \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'_k|} &= \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}_{ik}| - (\vec{r} - \vec{r}_{ik})} = 4\pi \sum_{lm} \frac{1}{(2l+1)} \frac{r_{<}^l}{r_{>}^{l+1}} Y_{l,m}^*(\vec{r}_k - \vec{r}_{ik}) Y_{l,m}(\vec{r} - \vec{r}_{ik}) = \\ &= 4\pi \sum_{lm} \frac{(-1)^{(l+m)k}}{(2l+1)} \frac{r_{<}^l}{r_{>}^{l+1}} Y_{l,m}^*(\vec{r}' - \vec{r}_i) Y_{l,m}(\vec{r} - \vec{r}_{ik}), \end{aligned} \quad (9)$$

де \vec{r}_{ik} визначається аналогічно (7b), але тільки для центрів частинок,

$$\begin{aligned} |\vec{r}'_k - \vec{r}_{ik}| &= |\vec{r}' - \vec{r}_i| = a_i, \\ Y_{l,m}(\vec{r}'_k - \vec{r}_{ik}) &= (-1)^{(l+m)k} Y_{l,m}(\vec{r}' - \vec{r}_i), \quad r_{<}(r_{>}) - \text{означає найменше} \\ &(\text{найбільше}) \text{ із } a_i \text{ та } |\vec{r} - \vec{r}_{ik}|. \end{aligned}$$

Підставляючи (9) у (8) та комбінуючи з (5), отримуємо загальний потенціал:

$$\begin{aligned} u_{\text{внут}}(\vec{r}) &= (V_0/2 - E_0 \vec{r}_i) - E_0(\vec{r} - \vec{r}_i) + 4\pi \sum_{ilm} \frac{q_{ilm}}{(2l+1) a_i^{2l+1}} |\vec{r} - \vec{r}_i|^l Y_{l,m}(\vec{r} - \vec{r}_i) + \\ &+ 4\pi \sum_{i'l'm'k} (-1)^{(l'+m'+1)k} (1 - \delta_i^{i'} \delta_k^0) \frac{q_{i'l'm'}}{(2l'+1)} \frac{Y_{l',m'}(\vec{r} - \vec{r}_{i'k})}{|\vec{r} - \vec{r}_{i'k}|^{l'+1}}, \quad |\vec{r} - \vec{r}_i| \leq a_i \end{aligned} \quad (10)$$

$$\begin{aligned} u_{\text{зовн}}(\vec{r}) &= (V_0/2 - E_0 \vec{r}_i) - E_0(\vec{r} - \vec{r}_i) + 4\pi \sum_{ilm} \frac{q_{ilm}}{(2l+1)} \frac{Y_{l,m}(\vec{r} - \vec{r}_i)}{|\vec{r} - \vec{r}_{i'k}|^{l+1}} + \\ &+ 4\pi \sum_{i'l'm'k} (-1)^{(l'+m'+1)k} (1 - \delta_i^{i'} \delta_k^0) \frac{q_{i'l'm'}}{(2l'+1)} \frac{Y_{l',m'}(\vec{r} - \vec{r}_{i'k})}{|\vec{r} - \vec{r}_{i'k}|^{l'+1}}, \quad a_i \leq |\vec{r} - \vec{r}_i| \leq |\vec{r}' - \vec{r}_i| - a_i, \quad i' \neq i, \end{aligned} \quad (11)$$

де q_{ilm} – мультипольні моменти i -ї частинки відносно її центра;

$(1 - \delta_i^{i'} \delta_k^0)$ - множник, введений для виключення подвоєного підрахунку i -ї частинки.

По три доданки в (10) і (11) ідентифікуються як прикладений потенціал i -ї частинки та потенціал всіх інших частинок ($k=0$) та всіх зображень ($k \neq 0$).

Рівняння (10) і (11) показують, що поле, створене зображеннями, залежить від властивостей системи, тому зовнішнє поле, яке є сумою прикладеного поля та поля зображень, у загальному випадку не є ні однорідним, ні експериментально контрольованим. Саме цей випадок є типовим для тонких плівок, коли d співрозмірне з A_i , або коли d співрозмірне з неоднорідністю системи. Вирази (10) і (11) для потенціалів справедливі для частинок будь-якої форми та орієнтації, крім виразу для потенціалу, який створює сама i -та частинка, який для загального випадку необхідно модифікувати.

Потенціали (10) і (11) задовольняють рівнянню Лапласа та крайовим умовам (3а), (3б). Рівняння (3с) використаємо пізніше для визначення мультипольних моментів сферичних частинок. Спочатку виразимо всі доданки із (10) і (11) у вигляді функцій від $\vec{r} - \vec{r}_i$. Для будь-якого $\vec{r}_{i'k} \neq \vec{r}_i$ можна розкласти

$$\frac{Y_{l',m'}(\vec{r} - \vec{r}_{i'k})}{|\vec{r} - \vec{r}_{i'k}|^{l'+1} (2l'+1)} = \sum_{lm} A_{lm}^{l'm'}(\vec{r}_{i'k} - \vec{r}_i) |\vec{r} - \vec{r}_i|^l Y_{lm}(\vec{r} - \vec{r}_i), \quad (12)$$

де $|\vec{r} - \vec{r}_i| < |\vec{r}_{i'k} - \vec{r}_i|$,

оскільки ліва частина задовольняє в цій області рівняння Лапласа.

Коефіцієнти розкладу:

$$A_{lm}^{l'm'}(\vec{r}_{i'k} - \vec{r}_i) = \frac{Y_{l+l',m-m'}^*(\vec{r}_{i'k} - \vec{r}_i)}{|\vec{r}_{i'k} - \vec{r}_i|^{l+l'+1}} \times (-1)^{l'+m'} \left[\frac{4\pi(l+l'+m-m')!(l+l'-m+m')!}{(2l+1)(2l'+1)(2l+2l'+1)(l+m)!(l-m)!(l'+m')!(l'-m')!} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (13)$$

Підставляючи (12) у (10) і (11) і визначаючи

$$C_{lm}^{l'm'}(\vec{r}_i - \vec{r}_i) = \sum_k (-1)^{(l'+m'+1)k} A_{lm}^{l'm'}(\vec{r}_{i'k} - \vec{r}_i) (1 - \delta_i^{i'} \delta_k^0), \quad (14)$$

отримуємо:

$$U_{внут}(\vec{r}) = (V_0/2 - E_0 \vec{r}_i) - E_0(\vec{r} - \vec{r}_i) + 4\pi \sum_{lm} \frac{q_{ilm}}{(2l+1)a_i^{2l+1}} |\vec{r} - \vec{r}_i|^l Y_{l,m}(\vec{r} - \vec{r}_i) + 4\pi \sum_{i'l'm'} q_{i'l'm'} \sum_{lm} C_{lm}^{l'm'}(\vec{r}_i - \vec{r}_i) |\vec{r} - \vec{r}_i|^l Y_{l,m}(\vec{r} - \vec{r}_i), \quad |\vec{r} - \vec{r}_i| \leq a_i, \quad (15)$$

$$U_{зовн}(\vec{r}) = (V_0/2 - E_0 \vec{r}_i) - E_0(\vec{r} - \vec{r}_i) + 4\pi \sum_{lm} \frac{q_{ilm}}{(2l+1)} \frac{Y_{l,m}(\vec{r} - \vec{r}_i)}{|\vec{r} - \vec{r}_{i'k}|^{l+1}} + 4\pi \sum_{i'l'm'} q_{i'l'm'} \sum_{lm} C_{lm}^{l'm'}(\vec{r}_i - \vec{r}_i) |\vec{r} - \vec{r}_i|^l Y_{l,m}(\vec{r} - \vec{r}_i), \quad a_i \leq |\vec{r} - \vec{r}_i| \leq |\vec{r}_i - \vec{r}_i| - a_i, \quad i' \neq i. \quad (16)$$

Останні доданки в (15) і (16), які є потенціалами, створені іншими частинками та всіма зображеннями, а також відповідні коефіцієнти

$C_{lm}^{l'm'}(\vec{r}_i - \vec{r}_i)$ все ще застосовуються до частинок довільних форм та орієнтацій.

Для сферичних частинок, підставляючи (15) і (16) в крайові умови (3с), отримуємо:

$$\begin{aligned} & \sum_{lm} \frac{l\epsilon_i + (l+1)\epsilon_m}{(2l+1)a_i^{l+2}} q_{ilm} Y_{l,m}(\vec{r} - \vec{r}_i) = \\ & = (\epsilon_i - \epsilon_m) \left\{ \frac{E_0}{\sqrt{12\pi}} Y_{1,0}(\vec{r} - \vec{r}_i) - \sum_{lm} \left[la_i^{l-1} \sum_{i'l'm'} C_{lm}^{i'l'm'}(\vec{r}_i - \vec{r}_i) q_{i'l'm'} \right] Y_{l,m}(\vec{r} - \vec{r}_i) \right\}. \end{aligned} \quad (17)$$

Порівнюючи коефіцієнти при відповідних сферичних гармоніках, отримуємо:

$$q_{ilm} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \beta_{il} E_0 \delta_l^1 \delta_m^0 - (2l+1) \beta_{il} \sum_{i'l'm'} C_{lm}^{i'l'm'}(\vec{r}_i - \vec{r}_i) q_{i'l'm'}, \quad (18)$$

$$\text{де } \beta_{il} = \frac{(\epsilon_i - \epsilon_m) la_i^{2l+1}}{l\epsilon_i + (l+1)\epsilon_m}. \quad (19)$$

Оскільки, $\beta_{i0} = 0$, $q_{i00} = 0$, то будемо вважати $l, l' \geq 1$. Збираючи всі q_{ilm} у лівій частині (18), можемо записати в матричній формі:

$$Gq = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} h E_0, \quad (20a)$$

де q – матриця-стовбчик, що складається із всіх q_{ilm} ;

$$G_{ilm}^{i'l'm'} = \delta_i^l \delta_l^{l'} \delta_m^{m'} + (2l+1) \beta_{il} C_{lm}^{i'l'm'}(\vec{r}_i - \vec{r}_i) \quad \text{– матриця конфігурації системи}; \quad (20b)$$

$$h_{ilm} = \beta_{il} \delta_l^1 \delta_m^0. \quad (20c)$$

Після перетворення матриць маємо:

$$q = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} G^{-1} h E_0 \quad (21a)$$

або у явному вигляді:

$$q_{ilm} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \sum_{i'} (G^{-1})_{ilm}^{i'10} \beta_{i'1} E_0. \quad (21b)$$

Таким чином, всі мультипольні моменти виражаються в явному вигляді через прикладене поле і конфігураційну матрицю системи.

Результати досліджень. Оскільки ми визначили електричне поле всюди точно, то можна отримати ефективну діелектричну проникність, безпосередньо усереднюючи $\vec{D} = \epsilon \vec{E}$ так, що:

$$\langle \epsilon \vec{E} \rangle = \frac{1}{V} \int_V \epsilon \vec{E}(\vec{r}) d^3 \vec{r} = \epsilon_m \vec{E}_0 + \sum_i (\epsilon_i - \epsilon_m) \left(\frac{4\pi a_i^3}{3} \right) \langle \vec{E} \rangle_i, \quad (22a)$$

де $\langle \vec{E} \rangle_i$ – середнє електричне поле всередині i -ї частинки.

Ми використали:

$$\langle \vec{E} \rangle = \frac{1}{V} \iint dx dy \int_{-d/2}^{+d/2} \vec{E}(\vec{r}) dz = \vec{E}_0, \quad (22b)$$

що впливає з крайової умови (3с), в припущенні симетрії $x \rightarrow -x$ та $y \rightarrow -y$, так що $\langle E_x \rangle = \langle E_y \rangle = 0$.

Для обчислення $\langle \vec{E} \rangle_i$ використаємо такий результат: вклад у середнє поле всередині сфери радіуса r , зумовлений джерелами зовні цієї сфери,

рівний полю, створеному цими джерелами в центрі цієї сфери. Вибираючи r трішки меншим, ніж a_i та використовуючи рівняння (15) (враховується лише доданок з $l=1$ та потрібна z -компонента), отримуємо:

$$\langle E_z \rangle_i = E_0 - \sqrt{\frac{4\pi}{3}} \frac{q_{i10}}{a_i^3} - \sqrt{12\pi} \sum_{i'l'm'} C_{10}^{l'm'} (\vec{r}_{i'} - \vec{r}_i) q_{i'l'm'}. \quad (23)$$

Із рівняння (18) маємо:

$$\sum_{i'l'm'} C_{10}^{l'm'} (\vec{r}_{i'} - \vec{r}_i) q_{i'l'm'} = \sqrt{\frac{1}{12\pi}} E_0 - \frac{q_{i10}}{3\beta_{i1}}. \quad (24)$$

Підставляючи (24) в (23), отримуємо:

$$\langle E_z \rangle_i = \sqrt{12\pi} \frac{\epsilon_m q_{i10}}{(\epsilon_i - \epsilon_m) a_i^3}. \quad (25)$$

Визначаючи ефективну діелектричну проникність як $\langle \vec{D} \rangle = \epsilon_e \langle \vec{E} \rangle$, ліву частину рівняння (22a) пишемо просто як $\epsilon_e \vec{E}_0$. Тоді, підставляючи (25) у (22a), отримуємо:

$$\frac{\epsilon_e}{\epsilon_m} = 1 + \frac{4\pi}{V} \sqrt{\frac{4\pi}{3}} \sum_i \frac{q_{i10}}{E_0} = 1 + \frac{4\pi}{V} \sum_{i'l'} (G^{-1})_{i10}^{i'l'} \beta_{i'l'}. \quad (26)$$

Цей результат для ефективної діелектричної проникності є точним без жодного припущення про конфігурацію системи. Він є справедливим і для випадків, коли зовнішнє поле неоднорідне в масштабах порівнюваних з d , наприклад для тонких плівок та неоднорідних систем. У таких випадках система нееквівалентна нескінченній системі: зображення відіграють вирішальну роль і повинні враховуватись точно. Про зовнішнє поле, яке неоднорідне і невизначене, не можна робити жодного припущення: воно залежить від самої системи через її зображення. Тому не можна розглядати зовнішнє поле як збурення, в яке поміщена система: його необхідно трактувати як частину відгуку системи. В таких випадках суттєвим для розв'язку фізичної крайової задачі є розгляд лише прикладеного поля як збурення.

Той факт, що тільки дипольні моменти частинок входять у перший вираз у (26) для ϵ_e , є чітким наслідком наявності середніх по всьому образу \vec{D} та \vec{E} . Інші результати можна отримати при використанні інших визначень, наприклад при усередненні за малими (але такими, що містять у собі все ще багато частинок) об'ємами. Тоді можна отримати нелокальне співвідношення між \vec{D} та \vec{E} , яке включатиме похідні вищих мультипольних моментів.

Перший вираз в (26) можна довести також і в загальному випадку, коли частинки мають довільну форму та орієнтацію, тоді як другий вираз справедливий лише для сферичних частинок. Другий вираз вказує на зв'язок дипольних моментів частинки з усіма мультипольними моментами всіх частинок і всіх зображень. Цей зв'язок відбувається за допомогою конфігураційної матриці системи.

Висновки

Отримано точні вирази для полів і всіх мультипольних моментів у термінах поля, прикладеного до плоских електродів, і конфігурації системи. Точне електричне поле має включення від прикладеного поля, поля частинок і поля зображень частинок. Зовнішнє поле як суперпозиція прикладеного поля за відсутності частинок та поля зображень частинок, у загальному випадку неоднорідне та залежить від властивостей і конфігурації системи. Ефективна діелектрична проникність залежить лише від індукованих дипольних моментів, які, в свою чергу, залежать від усіх мультипольних моментів частинок та їх зображень. Знання точних полів всюди в системі є дуже цінним при вивченні складних систем і розподілів.

Список літератури

1. Гречко Л.Г. Ефективна діелектрична проникність матричних дисперсних систем з багатошаровими включеннями: пряма та обернена задачі / Гречко Л.Г., Лерман Л.Б., Шкода Н.Г. // Вісник Київ. ун-ту. Серія: фіз.-мат. науки. – 2004. – №2. – С. 181–186.
2. Поглинання електромагнітного випромінювання багатошаровими кульовими частинками та матричними дисперсними системами / Л.Г. Гречко, Ю.Б. Гнучій, С.В. Шостак, С.В. Стеценко // Наук. вісник НУБіП України. Серія: техніка та енергетика в АПК. – 2010. – №153. – С. 188–198.
3. Maxwell J.C. A Treatise on Electricity and Magnetism / Maxwell J.C. // Dover, New York, 1954, Vol. 1, Sec. 314, p.440.
4. Landauer R. Proceeding of the First Conference on the Electrical Transport and Optical Properties of Inhomogeneous Media, Ohio State University / Landauer R. // J. C. Garland and D. B. Tanner, AIP Conf., 1977, № 40, p.2.
5. Claro F. and Brauers F. // Phys. Rev., 1989, B 40, 3261.

Получено аналитическое решение уравнений Максвелла для диэлектрической системы сферических частиц в среде, размещенной между двумя параллельными пластинами, на которые подается переменное напряжение низкой частоты. Указанное решение получено из соответствующей краевой задачи для функции Грина. Все мультипольные моменты и электрическое поле выражены в терминах потенциала, прилагаемого к пластинам и матрице, которая зависит от конфигурации системы.

Сферическая частица, диэлектрическая система, мультипольный момент.

The analytical solution of Maxwell's equations was found for dielectric system of spherical particles that is placed in a medium between two parallel plates with a variable voltage low frequency. The indicated solution is obtained from the corresponding boundary value problem for the Green's function. All multipole moments and electric field are expressed in the terms of the potential applied to the plates and the matrix, which depends on system configuration.

Spherical particle, dielectric system, multipole moment.