УДК 535.3

АНАЛІТИЧНЕ РІШЕННЯ ДЛЯ СФЕРИЧНО-СИМЕТРИЧНИХ ДВОЧАСТКОВИХ РОЗПОДІЛІВ

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

Показано, що для сферично-симетричних двочасткових розподілів всі мультипольні моменти, крім дипольного, рівні нулю. Тому результат Максвелл-Гарнетта, або, відповідно співвідношення Клаузиуса-Моссотті для сферичних частинок, є вірним незалежно від концентрації частинок.

Сферична частинка, мультипольний момент, ефективна діелектрична проникність.

Застосування аналітичного підходу до дослідження граничної поляризованості гетерогенних систем було розглянуто в [1,3]. Для випадку частинок сферичної форми було виведено формули всіх мультипольних моментів, електричного поля та ефективної діелектричної проникності, які є справедливими для будь-якого заданного розподілу. Для несферичних розподілів наша діелектрична проникність відрізняється від результату Максвелл-Гарнетта: в цьому випадку відмінність має порядок долі об'єму, який займає частинка і може бути досить суттєвою. Ці результати отримані в [2].

Мета досліджень – аналіз важливого окремого випадку застосування аналітичного підходу до дослідження діелектричної системи сферичних частинок, при якому функція $f(\vec{r}-\vec{r}_i)$ є повністю сферично-симетричною.

Матеріали та методика досліджень. Якщо функція $f(\vec{r}-\vec{r}_i)$ є повністю сферично-симетричною, тоді $f_l^{r'} = 0$ в силу ортогональності сферичних гармонік. Це означає, що інші частинки із зони кореляції не дають взагалі ніякого вкладу в локальне поле, що діє на дану частинку. Відповідно локальне поле стає однорідним, незалежно від того, яка при цьому може бути радіальна залежність $f(\vec{r}-\vec{r}_i)$. Це справедливо для частинок довільних форм та орієнтацій.

Для сферичних частинок рівняння

$$\sum_{i'} G_{il0}^{i'l'0} = \delta_l^{l'} - v\alpha\delta_l^1\delta_l^{l'} + (2l+1)\beta_l f_l^{l'}$$

із [2] зводиться до

$$G_l^{l'} = \delta_l^{l'} - v\alpha\delta_l^1. \tag{1}$$

Отже, безпосередньо знаходимо:

$$(G^{-1})_l^{l'} = \delta_l^{l'} + \frac{v\alpha}{1-v\alpha}\delta_l^1\delta_l^{l'}. \tag{2}$$

Підставляючи (2) у

$$q_{l0} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\,\alpha a^3 E_0 \delta_l^1.$$

із [2], отримуємо для мультипольних моментів:

$$q_{l0} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\frac{\alpha a^3 E_0}{(1-v\alpha)}\delta_l^1\,. \tag{3}$$

очасткового розподілу з дрібномасштабною сферично-симетричною кореляцією відмінні від нуля лише дипольні моменти.

Підставляючи

$$\sum_{i'} G_{l0}^{l'0}(\vec{r} - \vec{r}_i) = f_l^{l'} + \left(\frac{8\pi}{9}\right)n^0\delta_l^1\delta_1^{l'} - \left(\frac{4\pi}{3}\right)n^0\delta_l^1\delta_1^{l'}$$

із [2] разом із $f_l^{l'} = 0$ та (3) у

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

$$4\pi\sum_{i'l'm'} q_{i'l'm'}\sum_{lm} C_{lm}^{l'm'}(\vec{r}_{i'} - \vec{r}_i)|\vec{r} - \vec{r}_i|^l Y_{l,m}(\vec{r} - \vec{r}_i),\ |\vec{r} - \vec{r}_i| \le a_i\,,$$

$$u_{зовн}(\vec{r}) = (V_0/2 - E_0\vec{r}_i) - E_0(\vec{r} - \vec{r}_i) + 4\pi\sum_{lm}\frac{q_{ilm}}{(2l+1)}\frac{Y_{l,m}(\vec{r} - \vec{r}_i)}{|\vec{r} - \vec{r}_{i'k}|^{l+1}} +$$

$$4\pi\sum_{i'l'm'} q_{i'l'm'}\sum_{lm} C_{lm}^{l'm'}(\vec{r}_{i'} - \vec{r}_i)|\vec{r} - \vec{r}_i|^l Y_{l,m}(\vec{r} - \vec{r}_i), \qquad a_i \le |\vec{r} - \vec{r}_i| \le |\vec{r}_{i'} - \vec{r}_i| - a_{i'}\,, \quad i' \ne i$$.із [3],

отримаємо для електричного поля:

$$\vec{E}_{внутр} = \vec{E}_0 + \frac{3v\alpha}{(1-v\alpha)}\vec{E}_0 - \frac{2v\alpha}{(1-v\alpha)}\vec{E}_0 - \frac{v\alpha}{(1-v\alpha)}\vec{E}_0, \tag{4}$$

$|\vec{r} - \vec{r}_i| \le \alpha,$

$$\vec{E}_{\text{зовні}} = \vec{E}_0 + \frac{3v\alpha}{(1-v\alpha)}\vec{E}_0 - \frac{2v\alpha}{(1-v\alpha)}\vec{E}_0 - \frac{\alpha a^3[3n_i(E_0 n_i) - E_0]}{(1-v\alpha)|\vec{r}-\vec{r}_i|^3}, \quad (5)$$

$a \le |\vec{r} - \vec{r}_i| < a + \delta$,

де $\vec{n}_i = \frac{\vec{r}-\vec{r}_i}{|\vec{r}-\vec{r}_i|}$.

Доданками в (4) і (5) є прикладене поле, поле зображень, поле інших частинок і поле самої *i*-тої частинки. Зовнішнє поле, яке рівне сумі прикладеного поля і поля зображень, дійсно є однорідним, хоч і залежить від властивостей системи.

Підставляючи (3) або (2) в

$$\frac{\epsilon_l}{\epsilon_m} = 1 + 4\pi\sqrt{\frac{4\pi n^0 q_{10}}{3 E_0}} = 1 + 3v\alpha(G^{-1})_1^1$$

із [2], отримаємо ефективну діелектричну проникність:

$$\frac{\epsilon_l}{\epsilon_m} = \frac{1+2v\alpha}{1-v\alpha}, \quad (6)$$

що збігається з формулою Максвелл-Гарнетта.

Таким чином, ми довели, що це справедливо для будь-якого сферично-симетричного розподілу двох частинок, незалежно від концентрації частинок.

Результати досліджень. У рамках наближення середнього поля поправки до формули Максвелл-Гарнетта можуть випливати лише із несферичності розподілу, при якому мультипольні моменти сусідніх частинок дають вклад у локальне поле цієї частинки. Ці поправки з'являються перед усім із коефіцієнтів $f_l^{l'}$, а не із середньої концентрації частинок. Тому будь-яка теорія в рамках наближення середнього поля, що передбачає видозмінення формули Максвелл-Гарнетта, яка базується на середній концентрації частинок, а не специфіці двочасткового розподілу, несумісна з нашим результатом.

Висновки

Розглянуто важливий окремий випадок сферично-симетричного двочасткового розподілу. В цьому випадку частинки, які знаходяться за межами відстані кореляції від розглянутої частинки, не дають ніякого вкладу в локальне поле, що діє на цю частинку. Тому кожна частинка зазнає дії однорідного локального поля незалежно від того, якою при цьому є радіальна залежність розподілу, а також форма та орієнтація частинок. Якщо частинки сферичні, то вказане однорідне локальне поле може індукувати лише дипольні моменти, в той час як вищі мультипольні моменти зникають. Тому результат Максвелл-Гарнетта, або, відповідно, співвідношення Клаузиуса-Массотті для сферичних частинок, є чітким наслідком і необмеженим у застосуванні до розбавлених систем або застосуванні дипольного наближення. Тому, відповідно, модифікації результату Максвелл-Гарнетта в рамках наближення середнього поля, які враховують лише концентрацію частинок і залишають без уваги специфічну форму двочасткового розподілу, відрізняються від нашого результату.

Список літератури

1. Гречко Л.Г. Ефективна діелектрична проникність матричних дисперсних систем з багатошаровими включеннями: пряма та обернена задачі / Л.Г. Гречко, Л.Б. Лерман , Н.Г. Шкода // Вісник Київ. ун-ту. Серія «Фіз.-мат. науки.» – 2004. – №2. – С. 181–186.

2. Грищук О.Ю. Аналітичний підхід до розподілу дрібномасштабних кореляцій включень дисперсних матричних систем / О.Ю. Грищук, С.В. Стеценко // Науковий вісник НУБіП України. Серія «Техніка та енергетика АПК». – 2011. – №166, ч.3. – С. 254–258.

3. Грищук О.Ю. Застосування аналітичного підходу до граничної поляризованості гетерогенних систем /О.Ю. Грищук, С.В. Стеценко // Науковий вісник НУБіП України. Серія «Техніка та енергетика АПК». – 2012. – №174, ч.1. – С.161–167.

4. Поглинання електромагнітного випромінювання багатошаровими кульовими частинками та матричними дисперсними системами / Л.Г. Гречко, Ю.Б. Гнучій, С.В. Шостак, С.В. Стеценко // Науковий вісник НУБіП України. Серія «Техніка та енергетика АПК». – 2010. – №153. – С. 188–198.

Показано, что для сферически-симметричных двухчастичных распределений все мультипольне моменты, кроме дипольного, равны нулю. Поэтому результат Максвелл-Гарнетта, или, соответственно соотношение Клаузиуса-Моссотти для сферических частиц, является верным независимо от концентрации частиц.

Сферическая частица, мультипольный момент, эффективная диэлектрическая проницаемость.

It is shown that for spherically-symmetric double-particle distributions all multipole moments, except dipole, levels to the zero. Therefore, result of Maxwell-Garnett, or, accordingly correlation of Clausius-Mossotti for spherical particles, is faithful regardless of concentration of particles.

Spherical particle, multipole moment*, *effective dielectric function.