КИЕВСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМ. ТАРАСА ШЕВЧЕНКО

На правах рукописи

МАЛЫШЕВ ДМИТРИЙ ВИТАЛЬЕВИЧ

ИССЛЕДОВАНИЕ СИСТЕМ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ В ПРОСТРАНСТВЕННО-НЕОДНОРОДНЫХ СРЕДАХ

01.04.02. Теоретическая физика

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Киев – 1994

Диссертация является рукописью

Работа выполнена в Институте математики АН Украины (г. Киев)

Научный руководитель — доктор физико-математических наук, профессор,
член-корреспондент АН Украины
ПЕТРИНА Дмитрий Яковлевич
(Институт математики АН Украины, г. Киев)

Официальные оппоненты:

1. Доктор физико-математических наук, профессор,
член-корреспондент АН Украины
ХРУСЛОВ Евгений Яковлевич
(Физико-технический институт низких температур АН Украины, г. Харьков)

2. Доктор физико-математических наук, профессор
ЧАЛЫЙ Александр Васильевич
(Киевский медицинский университет, г. Киев)

Ведущая организация — Институт теоретической физики АН Украины (г. Киев)

Защита состоится "14" июня 1994 г. в 14.30 на заседании специализированного учёного совета Д.068.18.22 при Киевском университете им. Тараса Шевченко (252085, г. Киев, просп. Академика Глушкова, 2).

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Киевского университета им. Тараса Шевченко.

Автореферат разослан "13" мая 1994 г.

Учёный секретарь
специализированного учёного совета Верлан Э. М. ВЕРЛАН

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы. Исследование свойств пространственно-неоднородных систем и их роли в различных физических процессах представляет важную задачу современной математической физики.

Особый интерес представляет изучение процессов, протекающих в растворах электролитов в присутствии мембран различных типов. Актуальность этой задачи обусловлена её тесной связью с проблемой мембранного разделения смесей и очистки воды. и тем фактом, что, хотя исследованию этих процессов посвящены многочисленные исследования, последовательная и непротиворечивая теория мембран до сих пор не создана.

Математически строгое описание свойств электролитов в пространственно-неоднородных средах может быть дано на основе решения краевой задачи для системы уравнений гидродинамики, диффузии и электростатики. При этом важную роль играет решение уравнений электростатики, позволяющее определить взаимодействие заряженных частиц и зарядов, наведенных на поверхности мембраны, и получить выражения для определения эффективных параметров, характеризующих мембрану.

Цель работы. Теоретически исследовать свойства мембран, состоящих из диэлектрических и проводящих тел. Определить возмущение электрических полей такими мембранами. Исследовать поляризацию мембраны во внешнем электрическом поле, определить эффективные постоянные, характеризующие такие системы.

Научная новизна. В диссертационной работе впервые решена задача об определении потенциала электрического поля в присутствии динамической мембраны, состоящей из произвольного числа слоёв диэлектрических или проводящих тел. Получены явные решения для потенциала электрического поля. Получены явные формулы для определения плотности зарядов, наведенных на поверхности мембраны, и дипольных моментов включений.

Развит строгий метод определения эффективных постоянных, характеризующих мембраны и позволяющих заменить исследование пространственно-неоднородных сред исследованием однородных сред с эффективными значениями параметров. С помощью этого метода впервые получены формулы для определения эффективной диэлектрической проницаемости динамических мембран, состоящих из произвольного числа слоёв диэлектрических либо проводящих тел. Исследована зависимость эффективной диэлектрической проницаемости динамической мембраны от числа слоёв составляющих её тел. Для системы сферических тел, центры которых размещены в узлах бесконечной кубической решётки, получена новая формула для определения эффективной диэлектрической проницаемости, обобщающая известные ранее результаты, в том числе классические формулы Максвелла и Рэлея.

Предложен строгий математически строгий метод исследования мембран, состоящих из проводящих тел.

Практическая ценность работы. Результаты проведенных теоретических исследований могут быть непосредственно использованы для расчёта различных физических характеристик реальных мембранных процессов. Эти результаты дают возможность качественно объяснять и количественно описывать процессы, протекающие вблизи динамических мембран, используемых в технологии мембранного разделения растворов электролитов. Эти результаты могут служить основой для построения общей теории мембран.

На защиту выносятся следующие основные положения:

1. Предложенный метод позволяет определять характеристики систем при наличии динамических мембран, состоящих из произвольного числа слоёв диэлектрических или проводящих включений, размещённых как регулярным, так и случайным образом, с заданной точностью по степеням плотности неоднородностей в мембране.

2. С увеличением числа слоёв тел в динамической мембране её эффективная диэлектрическая проницаемость возрастает, стремясь к предельному значению — эффективной диэлектрической проницаемости системы тел, размещённых в узлах бесконечной трёхмерной решётки, причём для большинства значений плотности структурных составляющих динамической мембраны отличие эффективной диэлектрической проницаемости мембраны от предельного значения становится несущественным при числе слоёв большем пяти.

3. Формула для определения эффективной диэлектрической проницаемости системы диэлектрических или проводящих тел сферической формы, размещенных в узлах бесконечной кубической решётки, частными случаями которой являются классические формулы Максвелла и Рэлея.

4. Метод решения краевых задач электростатики при наличии в среде систем проводящих включений, объединяющий методы теории потенциалов и функционального анализа, даёт возможность исследовать свойства таких систем и находить их эффективные характеристики.

Апробация работы. Основные результаты диссертации докладывались и обсуждались на научных семинарах в ИТФ АН Украины (1984 – 1986), ИМ АН Украины (1986 – 1992), ОИЯИ (г. Дубна, 1986), Варшавском университете (Польша, 1991), Техническом университете (Вена, Австрия, 1992), Университете г. Грац (Австрия, 1992), на Всесоюзных конференциях молодых учёных в ИТФ АН Украины (1984, 1985) и в ИМ АН Украины (1986), на Всесоюзной школе „Динамические системы и турбулентность" (Кацивели, 1988), на Всесоюзной конференции „Нелинейные проблемы дифференциальных уравнений и математической физики" (Тернополь, 1989), на Международной конференции "On Three Levels" (Лёвен, Бельгия, 1993).

Публикации. По результатам диссертации опубликовано 8 печатных работ.

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения, трёх глав, заключения и списка цитируемой литературы. Она имеет общий объём 123 страницы машинописного текста, включая библиографию из 111 наименований, 6 рисунков и 6 таблиц.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении приведён краткий обзор литературы по теме диссертации, обоснована актуальность избранной темы, перечислены основные положения, выносимые на защиту, дано краткое изложение содержания диссертации по главам.

Во введении к каждой главе (§ 1) даётся краткое изложение проблем, которые она затрагивает, и намечаются пути их решения.

<u>В первой главе</u> предложен метод исследования электрического поля при наличии в среде динамической мембраны, состоящей из конечного вдоль одной из осей числа слоёв диэлектрических включений.

В § 2 решена задача об определении возмущения однородного электрического поля динамической мембраной, состоящей из конечного числа слоёв диэлектрических тел, расположенных регулярным образом.

Рассматривается система одинаковых электрически нейтральных тел с диэлектрической проницаемостью ε_2, помещённых в среду с диэлектрической проницаемостью ε_1. Геометрические центры включений находятся в узлах трёхмерной решётки (элементарной ячейкой которой является прямоугольный параллелепипед со сторонами a_1, a_2 и a_3), лежащих в слое T между двумя плоскостями, перпендикулярными одному из рёбер решётки.

Решение краевой задачи для уравнения Лапласа $\varphi(x)$ ищется в виде суммы потенциала внешнего поля $\varphi_0(x)$ и потенциала простого слоя $\varphi_1(x)$:

$$\varphi(x) = -\frac{\vec{E}\cdot\vec{x}}{\varepsilon_1} + \frac{1}{4\pi\varepsilon_0\varepsilon_1}\sum_{i=1}^{N}\int_{\partial F_0}\sum_{k_1,k_2}\frac{\sigma^{(i)}(y)}{\left|\vec{x}-\vec{y}-\vec{R}^{(i)}_{k_1,k_2}\right|}\,dS_y = \varphi_0(x)+\varphi_1(x),$$

где $\vec{E}=(0,0,E)$ — напряжённость внешнего поля в вакууме, N — число слоёв включений, ∂F_0 — поверхность тела, с центром которого связано начало координат, $\sum_{k_1,k_2}=\sum_{k_1=-\infty}^{\infty}\sum_{k_2=-\infty}^{\infty}$, $\sigma^{(i)}(x)$ — плотность зарядов, наведенных на поверхности неоднородности из i-го слоя и $\vec{R}^{(i)}_{k_1,k_2}=(a_1k_1, a_2k_2, a_3(i-m))$, где $k_1\in\mathbb{Z}$, $k_2\in\mathbb{Z}$, m — номер слоя, в котором находится тело F_0. При этом плотности поверхностных зарядов $\sigma^{(i)}(x)$, $i=\overline{1,N}$, должны удовлетворять системе интегральных уравнений

$$\sigma^{(i)}(x) = \frac{\lambda}{2\pi}\sum_{j=1}^{N}\int_{\partial F_0}\sigma^{(j)}(y)\sum_{k_1,k_2}\frac{\cos\left(\vec{x}-\vec{y}-\vec{R}_{\vec{k}},\,\vec{n}_x\right)}{\left|\vec{x}-\vec{y}-\vec{R}_{\vec{k}}\right|^2}\,dS_y =$$

$$= -2\lambda\varepsilon_0\vec{E}\cdot\vec{n}_x,\quad x\in\partial F_0,\quad i=\overline{1,N}, \tag{1}$$

где $\lambda=\dfrac{\varepsilon_1-\varepsilon_2}{\varepsilon_1+\varepsilon_2}$, $\vec{R}_{\vec{k}}=(a_1k_1, a_2k_2, a_3(j-i))$, а также условию

$$\int_{\partial F_0}\sigma^{(i)}(x)\,dS_x = 0,\quad i=\overline{1,N}. \tag{2}$$

отражающему тот факт, что неоднородности электрически нейтральны.

Ряды, входящие в определение потенциала $\varphi_1(x)$ и в ядра интегральных уравнений (1), не являются, вообще говоря, абсолютно сходящимися. Поэтому, чтобы использовать эти соотношения, следует указать, что понимать под суммой этих рядов. Для преодоления этой трудности применяется следующий метод, предложенный Д.Я.Петриной: общий член рассматриваемого ряда раскладывается, в свою очередь, в ряд Тейлора в виде суммы первых членов разложения и остаточного члена. При этом ряд, в который входит остаточный член, является абсолютно сходящимся, а ряды, связанные с остальными слагаемыми в разложении, можно просуммировать, используя свойства симметрии системы, условие электронейтральности (2) и содержательные физические соображения. В результате получаются соотношения, поддающиеся строгому анализу. Такой анализ применительно к системе интегральных уравнений (1) позволяет доказать следующее утверждение.

Если выполнено неравенство

$$\frac{\lambda C v}{1-\lambda} < 1,$$

где C — некоторая постоянная, а v — объёмная плотность неоднородностей в слое T, то решение системы уравнений (1), преобразованной указанным выше способом, существует, единственно и представляется в виде сходящегося ряда.

Определив плотности поверхностных зарядов, можно найти потенциал электрического поля в системе, дипольные (и более высокие) моменты включений, а также эффективную диэлектрическую проницаемость мембраны.

Если объёмная плотность включений в слое T достаточно мала, то в системе интегральных уравнений можно пренебречь слагаемыми определённого порядка малости по v, иными словами, можно ограничиться учётом нескольких первых членов ряда Тейлора и пренебречь остаточным членом. В результате интегральные уравнения существенно упрощаются и их решения могут быть получены в явном виде. При этом для получения решения с заданной точностью по объёмной плотности включений необходимо учесть соответствующее количество членов разложения.

Для случая, когда в системе интегральных уравнений можно пренебречь слагаемыми порядка $v^{4/3}$ и выше, получены явные выражения для плотности поверхностных зарядов, дипольных моментов включений, потенциала электрического поля и эффективной диэлектрической проницаемости мембраны при $N = \overline{1, 8}$ (формулы для $N = \overline{3, 8}$ в диссертационной работе не приводятся ввиду их громоздкости). Показано, что с увеличением числа слоёв включений эффективная диэлектрическая проницаемость мембраны $\varepsilon_{эф}^{(N)}$ возрастает, уже для первых пяти слоёв весьма близко подходя к предельному значению $\varepsilon_{эф}^{(\infty)}$, вычисленному по формуле Максвелла, соответствующей рассматриваемому приближению (см. гл. 2 диссертации).

В § 3 исследован случай независимых отклонений геометрических центров неоднородностей от узлов решётки. Доказана теорема о существовании и единственности решения соответствующей системы интегральных уравнений. Получены приближённые формулы для определения дипольных моментов включений в такой системе.

<u>Во второй главе</u> исследован предельный случай $N = \infty$ (неоднородности размещены во всех узлах бесконечной трёхмерной решётки).

В §§ 2 – 5 задача решена для случая бесконечной кубической решётки ($a_1 = a_2 = a_3 = a$) и сферических неоднородностей ($v = 4\pi R^3/3a^3$, R — радиус включения). Доказана теорема существования и единственности решения интегрального уравнения. Показано, что известная формула Максвелла для эффективной диэлектрической проницаемости такой системы соответствует учёту первых двух членов разложения в ряд Тейлора общего члена ряда, входящего в ядро интегрального уравнения для плотности поверхностных зарядов (это приближение соответствует тому, что мы пренебрегаем слагаемыми порядка $v^{4/3}$ и выше в интегральном уравнении). Учёт следующих двух членов приводит к формуле Рэлея. В диссертационной работе получена в явном виде формула для определения эффективной диэлектрической проницаемости такой системы в приближении, когда в интегральном уравнении можно пренебречь слагаемыми порядка $v^{11/3}$ и выше (учитываются первые восемь членов ряда Тейлора):

$$\varepsilon_{эф} = \varepsilon_1 \left\{ 1 + 3v \left[\frac{\nu+2}{\nu-1} - v + \frac{1{,}3091 \frac{1-\nu}{\nu+4/3} v^{10/3} \left(1 - 0{,}1173 \frac{1-\nu}{\nu+6/5} v^{11/3}\right)^2}{1 + 0{,}4054 \frac{1-\nu}{\nu+4/3} v^{7/3} + 6{,}6568 \frac{(1-\nu)^2}{(\nu+4/3)(\nu+6/5)} v^6} + \right.\right.$$

$$\left.\left. + \; 0{,}0723 \frac{1-\nu}{\nu+6/5} v^{14/3} + 0{,}15256 \frac{1-\nu}{\nu+8/7} v^6 \right]^{-1} \right\}.$$

где $\nu = \varepsilon_2/\varepsilon_1$. В этом же приближении получены явные формулы для определения дипольного момента включений.

В § 6 исследована аналогичная задача для двух других типов решёток: гексагональной и кубической объёмноцентрированной. Получены явные выражения для определения плотности наведенных поверхностных зарядов, дипольных моментов включений, потенциала электрического поля вблизи неоднородностей, эффективной диэлектрической проницаемости системы.

В третьей главе предложен строгий метод решения краевых задач электростатики при наличии в среде бесконечных систем проводящих тел, объединяющий методы теории потенциалов и функционального анализа.

В § 2 исследованы задача об определении полей концентрации систем заряженных частиц и потенциала электрического поля при наличии в среде динамической мембраны, состоящей из одного слоя проводящих тел. В приближении самосогласованного поля эта задача сводится к решению нелинейных уравнений типа Пуассона – Больцмана с граничными условиями на поверхностях включений. Доказано, что решение существует и единственно при достаточно малых плотностях как заряженных частиц, так и неоднородностей в мембране.

В § 3 результаты, полученные в § 2 главы 1 и в главе 2 обобщены на случай проводящих включений. На основе предложенного метода, математически строго обоснована корректность перехода в полученных ранее формулах к пределу при $\varepsilon_2 \to \infty$ ($\lambda \to 1$, $\nu \to \infty$), соответствующему случаю проводящих включений.

В заключении сформулированы основные результаты, полученные в диссертации:

1. Решены уравнения электростатики при наличии в среде динамических мембран. Получены явные решения для потенциала электрического поля.

2. Развит метод определения эффективных постоянных, характеризующих динамические мембраны и позволяющих заменить исследование пространственно-неоднородных сред исследованием однородных сред с эффективными значениями параметров.

3. Исследована зависимость эффективной диэлектрической проницаемости динамической мембраны от числа слоёв включений в ней. С увеличением числа слоёв эффективная диэлектрическая проницаемость динамической мембраны

возрастает, стремясь к предельному значению, соответствующему наличию включений во всём пространстве.

4. Значение эффективной диэлектрической проницаемости среды при наличии включений, заполняющих всё пространство, с большой степенью точности может быть использовано в применении к динамическим мембранам даже если число слоёв неоднородностей невелико. Эта точность тем выше чем больше число слоёв и чем меньше объёмная плотность включений в мембране.

5. Получена обобщённая формула для определения эффективной диэлектрической проницаемости среды при наличии регулярно расположенных во всём пространстве неоднородностей, частными случаями которой являются классические формулы Максвелла и Рэлея

6. Предложен строгий метод исследования сред при наличии в них проводящих включений. Решена задача о потенциале электрического поля системы заряженных частиц при наличии в среде динамической мембраны, состоящей из проводящих включений.

Основные результаты диссертации опубликованы в следующих работах:

1. Malyshev D. V., Malyshev P. V. Perturbation of Uniform Electrostatic Field by a Dynamic Membrane. – Kiev, 1984. – 24 p. – (Prepr. / AS Ukr. SSR. Inst. Theor. Phys.;84–25E).
2. Малышев Д. В:, Малышев П. В. Возмущение однородного электростатического поля динамической мембраной // Докл. АН УССР. Сер. А. – 1986. – № 2. – С. 44 – 48.
3. Малышев Д. В., Малышев П. В. Решение классической задачи электростатики с помощью вычитательной процедуры. Обобщенная формула для эффективной диэлектрической проницаемости. – Киев, 1987. – 24 с. – (Препр. / АН УССР. Ин-т математики; 87.46).
4. Малышев Д. В., Малышев П. В. Определение эффективной диэлектрической проницаемости периодической системы тел // Докл. АН УССР. Сер. А. – 1987. – № 12. – С. 48 – 53.
5. Малышев Д. В., Малышев П. В. Определение эффективных характеристик систем со сложной структурой // Математические проблемы теории систем заряженных частиц в неоднородных средах: Сб. науч. тр. – Киев: Ин-т математики АН УССР, 1988. – С. 63 – 76.
6. Горўнович В. В., Малышев Д. В., Малышев П. В. О решении краевых задач для уравнения Пуассона – Больцмана и Лапласа в областях со сложной структурой // Всесоюзная конф. „Нелинейные проблемы диф. уравн. и матем. физики": Тезисы докладов, т. 1. – Тернополь, 1989. – С. 106 – 108.
7. Малышев Д. В. Возмущение электрического поля в областях с проводящими включениями. – Киев, 1991. – 20 с. – (Препр. / АН Украины. Ин-т математики; 91.40).
8. Малышев Д. В., Малышев П. В., Каюмов Ш. К. Определение характеристик электрического поля в периодической системе диэлектрических тел с отклонениями от узлов решетки. – Киев, 1992. – 41 с. – (Препр. / АН Украины. Ин-т математики; 92.25).

Подп. в печ. 19.04.94. Формат 60x84/16. Бумага тип. Офс. печать.
Усл. печ. л. 0,7 . Усл. кр.-отт. 0,7 . Уч.-изд. л. 0,6
Тираж 100 экз. Зак. 109 Бесплатно.

Отпечатано в Институте математики АН Украины
252601 Киев 4, ГСП, ул. Терещенковская, 3