ЕРЕМКИНА Н. В.

СИЛЫ, ДЕЙСТВУЮЩИЕ МЕЖДУ ДВУМЯ ОДИНАКОВЫМИ СФЕРАМИ, ОКРУЖЕННЫМИ ДВОЙНЫМ ЭЛЕКТРИЧЕСКИМ СЛОЕМ

Аннотация. В начальном приближении получено выражение для силы, действующей между двумя одинаковыми сферическими частицами, окруженными двойным электрическим слоем. Данный результат согласуется с законом Кулона.

Ключевые слова: суспензия, двойной электрический слой, уравнение Пуассона-Больцмана, мультиполь, закон Кулона.

EREMKINA N. V.

FORCES OPERATING BETWEEN TWO IDENTICAL SPHERES SURROUNDED BY ELECTRICAL DOUBLE LAYER

Abstract. The expression of initial-order accuracy is obtained for the force operating between two identical spherical particles surrounded by a double electric layer. This result agrees with the Coulomb's law.

Keywords: suspension, double electric layer, Poisson-Boltzmann equation, multipole, Coulomb’s law.

Введение. Электростатическое взаимодействие между частицами взвеси может происходить при перекрытии двойных электрических слоев (ДЭС) их окружающих. ДЭС – это поверхностные слои пространственно разделенных электрических зарядов противоположного знака, образующихся на границе раздела «твердое тело – электролит» [1].

Толщина ДЭС определяет дальность электростатических взаимодействий в растворе и характеризуется величиной κ^{-1} [1; 2].

При описании таких взаимодействий особый интерес представляют силы, которые возникают между частицами с перекрывающимися ДЭС. Вычислению сил, возникающих между двумя одинаковыми частицами посвящена данная работа.

Математическая модель. В неподвижной сплошной среде расположены две неподвижные сферические частицы $\Omega(1)$ и $\Omega(2)$ радиуса a. Для простоты введем декартову прямоугольную систему координат $Ox_1x_2x_3$ с началом O в центре первой частицы. Вектор $\vec{x} = (x_1, x_2, x_3)$ задает положение произвольной точки пространства относительно центра первой частицы, а вектор $\vec{x} - \vec{r}$ – относительно центра второй, который находится на оси x_3 на расстоянии r от начала координат.

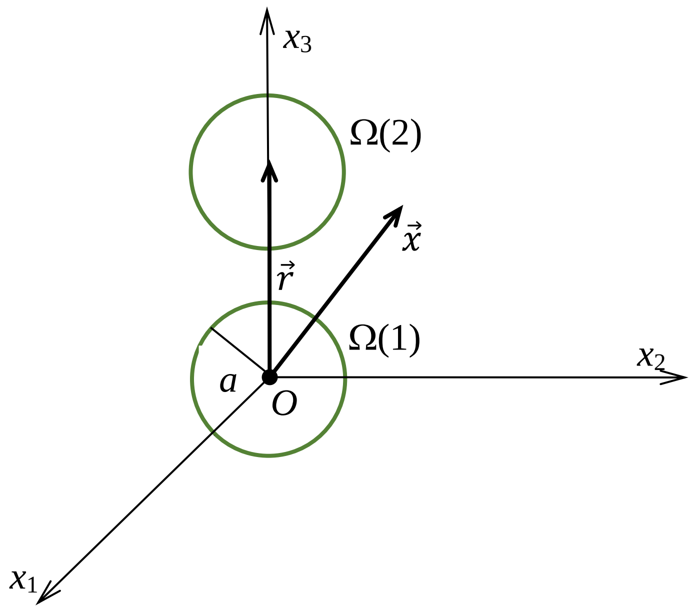

Рис. 1.

В данном случае для описания поля нам достаточно указать его потенциал ψ. Вне частиц он удовлетворяет уравнению Пуассона – Больцмана:

$$\Delta\psi = \kappa^2\psi, \tag{1}$$

где Δ – это оператор Лапласа.

На поверхности частиц потенциал постоянен, а вдали от частиц равен 0:

$$\begin{gathered} \psi|_{\partial\Omega(1)} = \psi|_{\partial\Omega(2)} = \psi_a, \\ \psi|_\infty = 0. \end{gathered} \tag{2}$$

На произвольную частицу Ω действует сила с компонентами

$$F_i = \oint\limits_{\partial\Omega} p_{ij} n_j dS. \tag{3}$$

В среде с неоднородным распределением потенциала компоненты тензора напряжений p_{ij} вычисляются по формуле:

$$p_{ij} = -\frac{\varepsilon_F}{8\pi}\frac{\partial\psi}{\partial x_s}\frac{\partial\psi}{\partial x_s}\delta_{ij} + \frac{\varepsilon_F}{4\pi}\frac{\partial\psi}{\partial x_i}\frac{\partial\psi}{\partial x_j}; \tag{4}$$

δ_{ij} есть символ Кронекера, ε_F – диэлектрическая проницаемость среды, по повторяющимся индексам идет суммирование в пределах от 1 до 3 [3].

Наша задача – из уравнений (3) и (4) вычислить силу F_i, действующую на частицу Ω(1), а для этого необходимо найти функцию ψ, удовлетворяющую уравнению (1) и краевым условиям (2).

Решение задачи. В [4] распределение потенциала было найдено в виде разложения по мультиполям:

$$\psi = C_0(1)\Lambda_0(\vec{x}) + C_j(1)\Lambda_j(\vec{x}) + C_{jk}(1)\Lambda_{jk}(\vec{x}) + C_0(2)\Lambda_0(\vec{x}-\vec{r}) +$$
$$+ C_{jkl}(1)\Lambda_{jkl}(\vec{x}) + C_{jklm}(1)\Lambda_{jklm}(\vec{x}) + \dots + C_j(2)\Lambda_j(\vec{x}-\vec{r}) + C_{jk}(2)\Lambda_{jk}(\vec{x}-\vec{r}) + \quad (5)$$
$$+ C_{jkl}(2)\Lambda_{jkl}(\vec{x}-\vec{r}) + C_{jklm}(2)\Lambda_{jklm}(\vec{x}-\vec{r}) + \dots$$

Функция Λ_0 определяется следующим образом:

$$\Lambda_0(\vec{x}) = \frac{\exp(-\kappa|\vec{x}|)}{|\vec{x}|},$$

а мультиполи более высокого порядка суть частные производные Λ_0:

$$\Lambda_{j\dots k}(\vec{x}) = \frac{\partial}{\partial x_j} \dots \frac{\partial}{\partial x_k} \Lambda_0(\vec{x}).$$

Искомыми величинами служат тензорные коэффициенты $C_0(N)$, $C_j(N)$, $C_{jk}(N)$,… в этом разложении. Номер $N = 1,2$ указывает на частицу, к которой относится тот или иной коэффициент.

Принцип построения общего решения (5) является достаточно общим и может быть применен для моделирования ДЭС в системах с произвольным количеством и конфигурацией частиц. Эти частицы могут, например, образовать бесконечную трехмерную периодическую решетку [5]. В любом случае структура коэффициентов определяется группой симметрии, которую имеют граничные условия исходного уравнения в частных производных.

В нашей работе конфигурация частиц имеет осевую симметрию, поэтому

$$C_i = CB \cdot b_i,\ C_{ij} = CC \cdot b_i b_j,\ C_{ijkl} = CD \cdot b_i b_j b_k b_l, \dots,$$

где b_i – компоненты единичного направляющего вектора оси симметрии Ox_3.

Чтобы найти коэффициенты C_0, CB, CC, CD и им подобные, вводятся малые безразмерные параметры, характеризующие расстояние между частицами и толщину ДЭС по сравнению с их радиусами:

$$\varepsilon = \frac{a}{r}, \qquad \delta = \kappa r = \frac{r}{\kappa^{-1}}.$$

В работе [4] коэффициенты разложения были найдены с точностью до восьмой степени малых параметров.

Пользуясь этим решением, мы в начальном приближении нашли силу, действующую на частицу с центром в начале координат.

С точностью до второй степени малых параметров коэффициенты имеют вид:

$$C_0(1) = C_0(2) = \Psi - \varepsilon\Psi + \delta\varepsilon\Psi,$$
$$CB(1) = -CB(2) = a\varepsilon^2\Psi. \quad (6)$$

Остальные коэффициенты имеют более высокий порядок малости и потому считаются равными нулю. Здесь и далее $\Psi = a\psi_a / e^{\kappa a}$.

Подставив (5) и выражения для коэффициентов (6) в (4) и (3), получим:

$$F_i = -\Psi^2 \frac{\varepsilon_F \varepsilon^2}{a^2} b_i,$$

что равносильно

$$F_i = -\Psi^2 \frac{\varepsilon_F}{r^2} b_i. \tag{7}$$

Анализ решения. Можно показать, что при $\varepsilon \to 0$ и $\delta \to 0$ заряд Q, сосредоточенный на поверхности частицы $\Omega(1)$, равен

$$Q = \varepsilon_F \Psi.$$

Поскольку частицы одинаковы, на поверхности $\Omega(2)$ сосредоточен такой же заряд.

Выражая отсюда Ψ и подставляя в (7), получаем известный закон Кулона:

$$F_i = -\frac{Q^2}{\varepsilon_F r^2} b_i.$$

Это означает, что выражение (7) верно. В пределе, когда сферы, окруженные ДЭС, расположены далеко друг от друга, их можно считать точечными зарядами.

Так как вектор $\vec{b}$ сонаправлен с осью Ox_3, то знак «–» в выражении (7) говорит о том, что сила действует со стороны частицы $\Omega(2)$ на частицу $\Omega(1)$ в направлении ($-x_3$), а значит, является силой отталкивания. Именно такие силы должны действовать между частицами с одноименными зарядами.

Заключение. Итак, полученный результат согласуется с законом Кулона. В пределе при $r \to \infty$, $\varepsilon \to 0$ частицы, окруженные ДЭС, ведут себя как точечные заряды. Так как распределение ψ симметрично, заряды частиц равны; поэтому они должны отталкиваться.

Выражение (7), полученное вручную, можно использовать в качестве теста при проведении более сложных расчетов на ЭВМ, например, в системе Wolfram Mathematica. Результаты, найденные с более высокой степенью точности, в пределе должны переходить в формулу (7).

Саму найденную силу F_i можно применять для детального описания суспензии, например, исследовать движение частиц и жидкости под действием такой силы.

ЛИТЕРАТУРА

1. Фридрихсберг Д. А. Курс коллоидной химии: учебник для вузов. – СПб: Химия, 1995. – 400 с.
2. Остроумов Г. А. Взаимодействие электрических и гидродинамических полей. Физические основы электрогидродинамики. – М.: Наука, 1979. – 320 с.
3. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Электродинамика сплошных сред. – М.: ГИФМЛ, 1959. – 532 с.
4. Сыромясов А. О., Еремкина Н. В. Математическое моделирование электростатического взаимодействия двух одинаковых сфер, окруженных ДЭС // Журнал Средневолжского математического общества. – 2015. – Т. 17, № 3. – С. 100–108.
5. Сыромясов А. О. Электрогидродинамика структурированной суспензии // Труды Средневолжского математического общества. – 2006. – Т. 8, № 1. – С. 301–306.