Electrostatic interaction of a charged dielectric sphere with a flat charged boundary of homogeneous dielectrics

A.V. Filippov[a,b,1]

[a]JIHT RAS, Moscow, Russia

[b]SRC RF TRINITI, Troitsk, Moscow, Russia

Scientific-Coordination Workshop on

Non-Ideal Plasma Physics

December 9-10, 2021, Moscow, Russia

December 9-10, 2021, Moscow, Russia

[1]fav@triniti.ru

План

Актуальность задачи:

- Описание процесса взаимодействия наночастиц со стенкой в технологиях производства наночастиц с уникальными свойствами и в технологии нанесения нанослоев;
- Калибровка атомных силовых микроскопов и точное выделение ван-дер-ваальсовского взаимодействия на малых расстояниях;
- Изучение адгезии заряженных частиц тонера к пластине;
- Моделирование процесса удаления мелких пылевых частиц из воздуха и т.д.

$$F_{ps} = \frac{q_1 q_2}{\varepsilon R^2} - \frac{q_2^2}{\varepsilon R^2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{n(n+1)(\varepsilon_1 - \varepsilon)}{\varepsilon_1 n + \varepsilon(n+1)} \left(\frac{a_1}{R}\right)^{2n+1} \qquad (1)$$

$$F_{ps} = \frac{q_1 q_2}{\varepsilon R^2} - \frac{q_2^2}{\varepsilon} \left(\frac{a_1}{R}\right)^3 \frac{1}{R^2 - a_1^2} \frac{1}{\varepsilon_1 + \varepsilon} \times \left[\frac{R^2}{R^2 - a_1^2}(\varepsilon_1 - \varepsilon) + \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_1 + \varepsilon}\right] - \delta f_{ps},$$

где поправка δf_{ps} определена выражением:

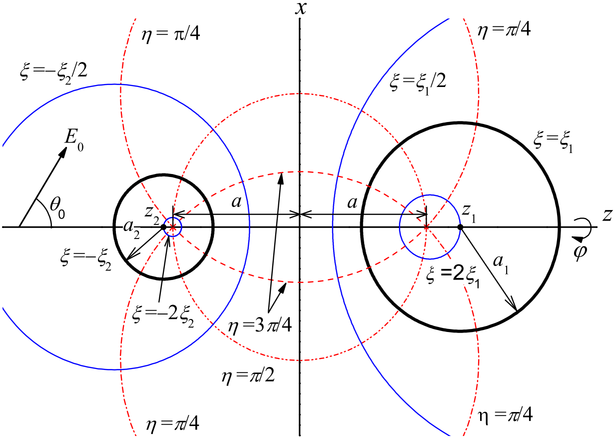
$$\delta f_{ps} = \frac{q_2^2}{\varepsilon R^2} \sum_{n=1}^{\infty} f_n \left(\frac{a_1}{R}\right)^{2n+1}$$

$$f_n = \frac{n(n+1)(\varepsilon_1 - \varepsilon)}{\varepsilon_1 n + \varepsilon(n+1)} - \frac{1}{\varepsilon_1 + \varepsilon}\left[(\varepsilon_1 - \varepsilon) n + \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_1 + \varepsilon}\right]$$

$$F_{pp} = \frac{4\pi\sigma_1 q_2}{\varepsilon} - \frac{q_2^2}{4\varepsilon(L + a_2)^2} \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon}{\varepsilon_1 + \varepsilon}, \qquad (2)$$

Бисферическая система координат

$$x = \frac{a \sin\eta \cos\varphi}{\operatorname{ch}\xi - \cos\eta}, \quad y = \frac{a \sin\eta \sin\varphi}{\operatorname{ch}\xi - \cos\eta}, \quad z = \frac{a \operatorname{sh}\xi}{\operatorname{ch}\xi - \cos\eta}$$



В бисферических координатах поверхности макрочастиц определяются соотношениями $\xi = \xi_1$, $\xi = -\xi_2$,

$$\operatorname{ch}\xi_1 = \frac{R^2 + a_1^2 - a_2^2}{2Ra_1}, \quad \operatorname{ch}\xi_2 = \frac{R^2 + a_2^2 - a_1^2}{2Ra_2}$$

Электростатическое взаимодействие частиц в однородном диэлектрике определяется уравнением Лапласа $\Delta\phi = 0$, которое в бисферических координатах может быть решено методом разделения переменных введением новой величины

$$\phi(\xi, \eta, \varphi) = \psi(\xi, \eta, \varphi)\sqrt{\operatorname{ch}\xi - \cos\eta}$$

Рассматриваем аксиально-симметричную задачу.

$$\phi\,(\xi, \eta) = \sqrt{\operatorname{ch}\xi - \cos\eta}\,\sum_{\ell=0}^{\infty}\left[C_\ell e^{-(\ell+1/2)\xi} + D_\ell e^{(\ell+1/2)\xi}\right]P_\ell(\cos\eta)$$

Потенциал однородного внешнего электрического поля:

$$\phi_0 = -E_{0x} \frac{a \sin\eta \cos\varphi}{\operatorname{ch}\xi - \cos\eta} - E_{0z} \frac{a \operatorname{sh}\xi}{\operatorname{ch}\xi - \cos\eta}$$

$$\phi_0 = -\sqrt{2} a E_{0z} \operatorname{sign}(\xi) \sqrt{\operatorname{ch}\xi - \cos\eta} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)\, e^{-\left(l+\frac{1}{2}\right)|\xi|} P_l(\cos\eta) -$$

$$- 2\sqrt{2} a E_{0x} \sqrt{\operatorname{ch}\xi - \cos\eta} \sum_{l=1}^{\infty} e^{-\left(l+\frac{1}{2}\right)|\xi|} P_l^1(\cos\eta) \cos\varphi.$$

Граничные условия:

$$\phi\,|_{\xi=\xi_1-0} = \phi\,|_{\xi=\xi_1+0}, \quad \phi\,|_{\xi=-\xi_2-0} = \phi\,|_{\xi=-\xi_2+0},$$

$$\varepsilon \frac{1}{h_\xi} \frac{\partial\phi}{\partial\xi}\,|_{\xi=\xi_1-0} - \varepsilon_1 \frac{1}{h_\xi} \frac{\partial\phi}{\partial\xi}\,|_{\xi=\xi_1+0} = 4\pi\sigma_1,$$

$$\varepsilon_2 \frac{1}{h_\xi} \frac{\partial\phi}{\partial\xi}\,|_{\xi=-\xi_2-0} - \varepsilon \frac{1}{h_\xi} \frac{\partial\phi}{\partial\xi}\,|_{\xi=-\xi_2+0} = 4\pi\sigma_2.$$

Решение аксиально-симметричной задачи при $E_0 = 0$

$$
\begin{aligned}
&-\ell e^{-\xi_1} D_{\ell-1} + \left[-\tau_1 \operatorname{sh}\xi_1 + (2\ell+1)\operatorname{ch}\xi_1\right] D_\ell - (\ell+1)\, e^{\xi_1} D_{\ell+1} = \\
&= \frac{2\sqrt{2}\operatorname{sh}\xi_1}{\varepsilon+\varepsilon_1}\frac{q_1}{a_1} e^{-(2\ell+1)\xi_1} + \tau_1 \Big\{\ell e^{\xi_1} C_{\ell-1} + \left[\operatorname{sh}\xi_1 - (2\ell+1)\operatorname{ch}\xi_1\right] C_\ell + \\
&\qquad + (\ell+1)\, e^{-\xi_1} C_{\ell+1}\Big\} e^{-(2\ell+1)\xi_1},
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
&-\ell e^{-\xi_2} C_{\ell-1} + \left[-\tau_2 \operatorname{sh}\xi_2 + (2\ell+1)\operatorname{ch}\xi_2\right] C_\ell - (\ell+1)\, e^{\xi_2} C_{\ell+1} = \\
&= \frac{2\sqrt{2}\operatorname{sh}\xi_2}{\varepsilon+\varepsilon_2}\frac{q_2}{a_2} e^{-(2\ell+1)\xi_2} + \tau_2 \Big\{\ell e^{\xi_2} D_{\ell-1} + \left[\operatorname{sh}\xi_2 - (2\ell+1)\operatorname{ch}\xi_2\right] D_\ell + \\
&\qquad + (\ell+1)\, e^{-\xi_2} D_{\ell+1}\Big\} e^{-(2\ell+1)\xi_2}.
\end{aligned}
$$

$$
\tau_1 = \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon}{\varepsilon_1 + \varepsilon}, \; \tau_2 = \frac{\varepsilon_2 - \varepsilon}{\varepsilon_2 + \varepsilon}
$$

Распределение свободных поверхностных зарядов

$$\sigma_i(\theta_i) = \sum_{n=0}^{\infty} \sigma_{i,n} P_n(\cos\theta_i), \quad i = 1,\ 2.$$

Здесь θ_i – широта точки поверхности i-ой частицы в сферической системе координат с полюсом в ее центре. Разложение этого распределения по полиномам Лежандра в бисферической системе координат:

$$\sigma_i(\eta) = \sqrt{\operatorname{ch}\xi_i - \cos\eta} \sum_{l=0}^{\infty} \widetilde{\sigma}_{i,l} e^{-\left(l+\frac{1}{2}\right)|\xi_i|} P_l(\cos\eta), \quad i = 1, 2.$$

где

$$\widetilde{\sigma}_{i,l} = \sum_{n=0}^{\infty} b_{i,l}^{n} \sigma_{i,n}.$$

$$b_{i,l}^{n} = \sqrt{2} e^{-n\xi_i} \sum_{\nu=0}^{\min(l,n)} (-1)^{n+\nu}\, e^{2\nu\xi_i} \frac{(l+n-\nu)!}{\nu!\,(n-\nu)!\,(l-\nu)!}.$$

Выражение для силы

$$F_{1z} = \frac{\varepsilon}{2} \sum_{\ell=0}^{\infty} D_\ell \left[(2\ell+1)\, C_\ell - \ell C_{\ell-1} - (\ell+1)\, C_{\ell+1} \right].$$

Случай $\varepsilon_2 = \varepsilon$.
В этом случае $\tau_2 = 0$ и для C_ℓ получаем

$$- \ell e^{-\xi_2} C_{\ell-1} + (2\ell+1) \operatorname{ch} \xi_2 C_\ell - (\ell+1)\, e^{\xi_2} C_{\ell+1} = \frac{2\sqrt{2} q_2}{a_2 (\varepsilon + \varepsilon_2)} \operatorname{sh} \xi_2 e^{-(2\ell+1)\xi_2}.$$

Решение этого уравнения имеет вид:

$$C_\ell = \frac{\sqrt{2}}{\varepsilon} \frac{q_2}{a_2} e^{-(2\ell+1)\xi_2}.$$

Используя это решение, для D_ℓ получаем уравнение

$$-\ell e^{-\xi_1} D_{\ell-1} + \left[-\tau_1 \operatorname{sh}\xi_1 + (2\ell+1)\operatorname{ch}\xi_1\right] D_\ell - (\ell+1)\, e^{\xi_1} D_{\ell+1} =$$
$$= 8\pi\sqrt{2}\frac{\sigma_1 a_1 \operatorname{sh}\xi_1}{\varepsilon+\varepsilon_1} - \frac{2\sqrt{2}q_2}{a_2\,(\varepsilon+\varepsilon_2)}\tau_1 e^{-(2\ell+1)(\xi_1+\xi_2)} \times$$
$$\times \left[\ell e^{\xi_1} e^{2(\xi_1+\xi_2)} + \operatorname{sh}\xi_1 - (2\ell+1)\operatorname{ch}\xi_1 - (\ell+1)\, e^{\xi_1} e^{-2(\xi_1+\xi_2)}\right]$$

При достаточно больших $\ell > \ell_{\text{min}}$ это уравнение приобретает вид:

$$\ell e^{-\xi_1} D_{\ell-1} + \left[-\tau_1 \operatorname{sh} \xi_1 + (2\ell+1) \operatorname{ch} \xi_1\right] D_\ell - \\ - (\ell+1)\, e^{\xi_1} D_{\ell+1} = \frac{2\sqrt{2} q_1}{a_1 \left(\varepsilon + \varepsilon_1\right)} \operatorname{sh} \xi_1 e^{-(2\ell+1)\xi_1}.$$

Значение ℓ_{min} определяется точностью вычисления силы взаимодействия. В настоящей работе значение ℓ_{min} определялось из выражения:

$$\ell_{\text{min}} \approx -\tfrac{1}{2} \ln \delta / \left(\xi_1 + \xi_2\right).$$

Решение полученного уравнения имеет вид, аналогичный решению для C_l:

$$D_\ell = \frac{\sqrt{2}}{\varepsilon} \frac{q_1}{a_1} e^{-(2\ell+1)\xi_1}.$$

Трудность решения при сильно отличных размерах шаров

Радиус малого шара $a_2 = 100$ нм, радиус большого $a_1 = 10^4 a_2$, расстояние между поверхностями $L = 0.1$ нм. В этом случае $\xi_1 = 4.473 \times 10^{-6}$, а координата поверхности малого шара равна $\xi_2 = 4.473 \times 10^{-2}$. При этом $l_{\min} \sim 1000$.

Решением для больших мультипольных моментов $\ell > \ell_{\min}$ как при $\varepsilon_2 = \varepsilon$, так и при $\varepsilon_1 = \varepsilon$ будут приведенные выше выражения для C_ℓ и D_ℓ. Анализ показывает, что эти решения будут справедливы при любых ε_1, ε_2 и для ε $\ell > \ell_{\min}$.

В случае $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = \varepsilon$ эти решения будут справедливы для всех ℓ и для силы взаимодействия можно получить выражение:

$$F_{1z} = \frac{q_1 q_2}{\varepsilon a_1 a_2} \frac{\operatorname{sh}\xi_1 \operatorname{sh}\xi_2}{\operatorname{sh}^2(\xi_1 + \xi_2)}.$$

Переход к пределу $a_1 \to \infty$

$$\lim_{a_1\to\infty} \xi_1 = 0, \qquad \lim_{a_1\to\infty} \operatorname{ch}\xi_2 = 1 + \frac{L}{a_2},$$

При этом произведение $a_1 \operatorname{sh}\xi_1 = a_2 \operatorname{sh}\xi_2 \equiv a$ остается конечной величиной.
В пределе $a_1 \to \infty$ для D_ℓ

$$D_\ell^0 = \lim_{a_1\to\infty} D_\ell = \frac{4\pi\sqrt{2}}{\varepsilon}\sigma_1 \left[a_1 - (2\ell+1)\, a\right].$$

Поэтому введем новые новые коэффициенты:

$$d_\ell = D_\ell - D_\ell^0,$$

$$-\ell d_{\ell-1} + (2\ell+1)\, d_\ell - (\ell+1)\, d_{\ell+1} = \\ = \tau_1 \left[\ell C_{\ell-1} - (2\ell+1)\, C_\ell + (\ell+1)\, C_{\ell+1}\right]$$

Из этого уравнения следует равенство

$$d_\ell = -\tau_1 C_\ell.$$

$$-\ell e^{-\xi_2}\left(1-\beta_{\ell-1}\right)C_{\ell-1}+\Big\{\left(1-\tau_2\right)\operatorname{sh}\xi_2+ \\ +\left(1-\beta_\ell\right)\left[\left(2\ell+1\right)\operatorname{ch}\xi_2-\operatorname{sh}\xi_2\right]\Big\}C_\ell- \\ -\left(\ell+1\right)e^{\xi_2}\left(1-\beta_{\ell+1}\right)C_{\ell+1}= \\ =e^{-(2\ell+1)\xi_2}\Big\{\alpha_1\operatorname{sh}\xi_2+2\alpha_2\tau_2\operatorname{sh}\xi_2\times \\ \times\left[\left(2\ell+1\right)\operatorname{sh}\xi_2-\operatorname{ch}\xi_2\right]\Big\},$$

где введены обозначения:

$$\beta_\ell=\tau_1\tau_2 e^{-(2\ell+1)\xi_2},\ \alpha_1=\frac{2\sqrt{2}}{\varepsilon+\varepsilon_2}\frac{q_2}{a_2},\ \alpha_2=\frac{4\pi\sqrt{2}}{\varepsilon}a_2\sigma_1.$$

При больших ℓ, когда становятся пренебрежимо малыми β_ℓ и ими можно пренебречь. Решение будем искать в виде $C_\ell=\left(\alpha+\beta\ell\right)e^{-(2\ell+1)\xi_2}$, где α и β – независящие от ℓ величины. В итоге находим следующее решение уравнения для C_l:

$$C_\ell=\left\{\frac{\sqrt{2}q_2}{\varepsilon a_2}+\alpha_2\frac{\varepsilon_2-\varepsilon}{2\varepsilon+\varepsilon_2}\left[\left(2\ell+1\right)\operatorname{sh}\xi_2-\operatorname{ch}\xi_2\right]\right\}e^{-(2\ell+1)\xi_2}.$$

Сила через коэффициенты d_ℓ в рассматриваем случае определяется выражением:

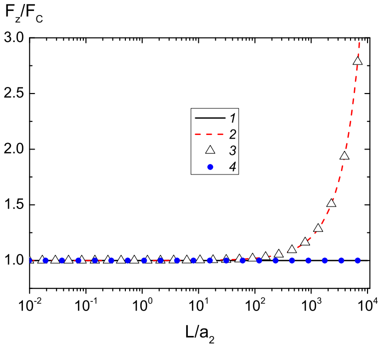
$$F_{z\infty} = \sum_{\ell=0}^{\infty} C_\ell \big[-\ell d_{\ell-1} + (2\ell+1)\, d_\ell - (\ell+1)\, d_{\ell+1} + \alpha_2 \operatorname{sh}\xi_2\big].$$

Используя приближенное решение находим:

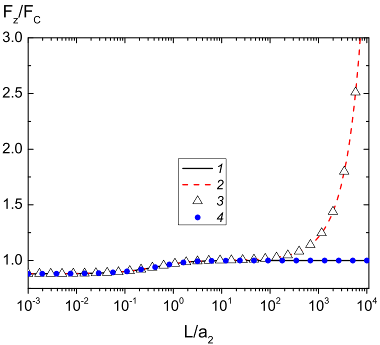
$$F^a_{z\infty} = \frac{4\pi\sigma_1 q_2}{\varepsilon} - \frac{1}{\varepsilon a_2^2 \operatorname{ch}^2\xi_2}\frac{\varepsilon_1-\varepsilon}{\varepsilon+\varepsilon_1}\Bigg[\frac{q_2^2}{4} - \\ - \frac{\varepsilon_2-\varepsilon}{2\varepsilon+\varepsilon_2}\frac{2\pi q_2\sigma_1 a_2^2}{\operatorname{ch}\xi_2} + \left(\frac{\varepsilon_2-\varepsilon}{2\varepsilon+\varepsilon_2}\right)^2\frac{6\pi^2\sigma_1^2 a_2^4}{\operatorname{ch}^2\xi_2}\Bigg].$$

Подставим вместо $\operatorname{ch}\xi_2$ его значение:

$$F^a_{z\infty} = \frac{4\pi\sigma_1 q_2}{\varepsilon} - \frac{\varepsilon_1-\varepsilon}{\varepsilon+\varepsilon_1}\frac{1}{(L+a_2)^2}\frac{q_2^2}{4\varepsilon} + \\ + \frac{\varepsilon_1-\varepsilon}{\varepsilon+\varepsilon_1}\frac{\varepsilon_2-\varepsilon}{2\varepsilon+\varepsilon_2}\frac{2\pi\sigma_1 a_2^3}{\varepsilon(L+a_2)^3}\left[q_2 - \left(\frac{\varepsilon_2-\varepsilon}{2\varepsilon+\varepsilon_2}\right)\frac{3\pi a_2^3\sigma_1}{(L+a_2)}\right].$$



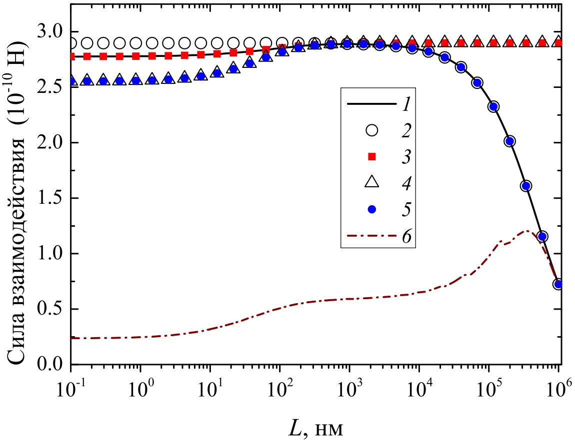
$\varepsilon_1 = 1,\ \varepsilon_2 = 4$



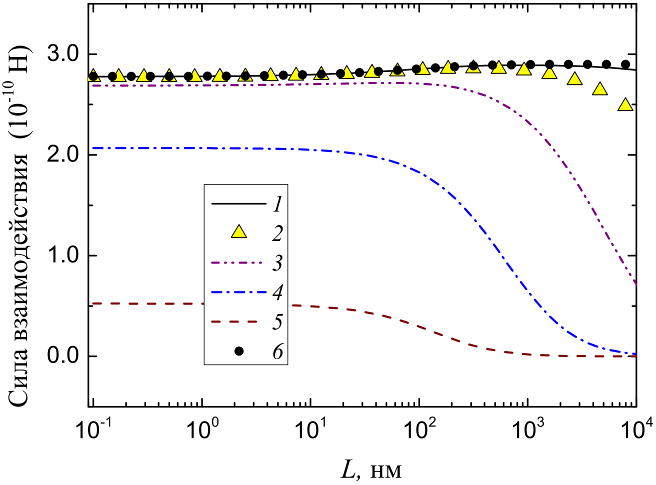
$\varepsilon_1 = 4,\ \varepsilon_2 = 1$

Кривая 1 – $a_1 = 10^4 a_2$, 2 – $a_1 = \infty$, 3 – F_{pp}, 4 – F_{ps}

$\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 4$

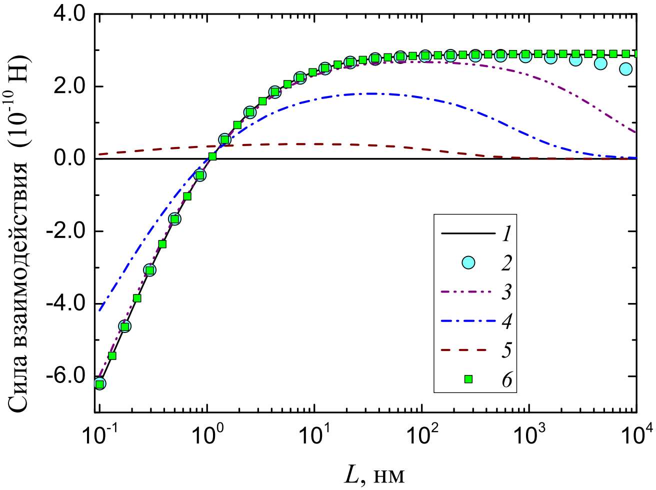


Кривая 1 – $a_1 = 10^4 a_2$, 2 – F_C, 3 – $a_1 = \infty$, 4 – F_{pp}, 5 – F_{ps}, 6 – $a_1 = 10^4 a_2$, $C_{\ell_{\min}} = D_{\ell_{\min}} = 0$, 7 – $a_1 = 10^4 a_2$, и $C_{\ell_{\min}} = 0$, $D_{\ell_{\min}} = \frac{4\pi\sqrt{2}a_1\sigma_1}{\varepsilon} e^{-(2\ell_{\min}+1)\xi_1}$



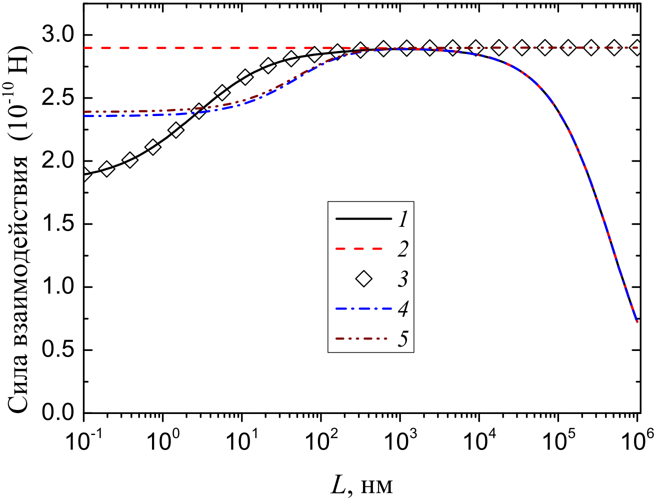
$\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 4$

Кривая 1 – $a_1 = 10^4 a_2$, 2 – $a_1 = 10^3 a_2$, 3 – $a_1 = 10^2 a_2$, 4 – $a_1 = 10 a_2$, 5 – $a_1 = a_2$, 6 – $F_{z\infty}$.



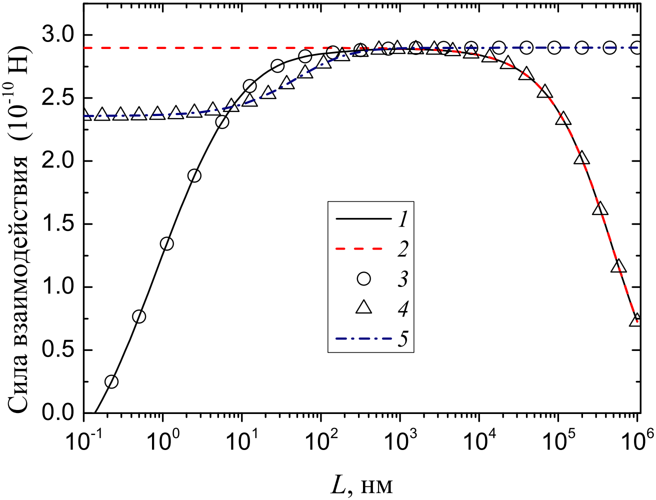
$\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 80$

Кривая 1 – $a_1 = 10^4 a_2$, 2 – $a_1 = 10^3 a_2$, 3 – $a_1 = 10^2 a_2$, 4 – $a_1 = 10 a_2$, 5 – $a_1 = a_2$, 6 – $F_{z\infty}$.



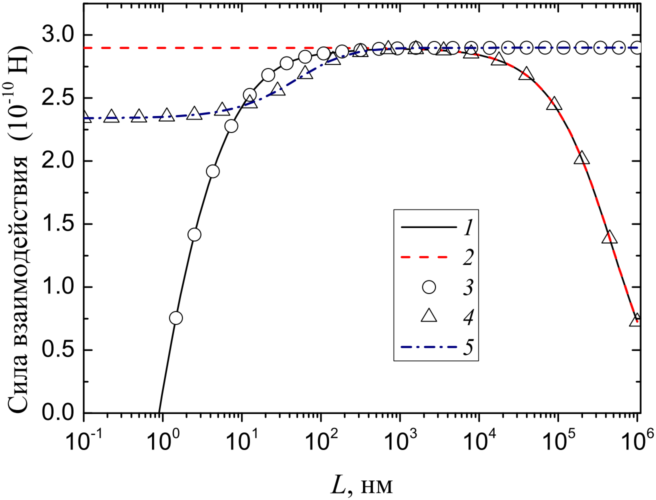
$\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 16$

Кривая 1 – $a_1 = 10^4 a_2$, 2 – F_C, 3 – $a_1 = \infty$, 4 – F_{pp}, 5 – F_{ps}.



$\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 32$

Кривая 1 – $a_1 = 10^4 a_2$, 2 – F_C, 3 – $a_1 = \infty$, 4 – F_{pp}, 5 – F_{ps}.



$\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 64$

Кривая 1 – $a_1 = 10^4 a_2$, 2 – F_C, 3 – $a_1 = \infty$, 4 – F_{pp}, 5 – F_{ps}.

Выводы

- В настоящей работе найдены ряд аналитических решений для коэффициентов разложения потенциала в бисферической системе координат для больших номеров мультипольного момента.
- Выполнен переход к бесконечному радиусу одного из шаров и впервые найдено аналитическое решение данной задачи.
- Найденное решение позволяет с высокой точностью рассчитать силу взаимодействия заряженной диэлектрической частицы сферической формы с частицей значительно большего радиуса или с плоской границей диэлектриков при расстояниях между их поверхностями в области 0.1-1 нм.
- Получено выражение для силы взаимодействия заряженного шара с плоской заряженной границей диэлектриков, которое описывает с высокой точностью силу при малых $\varepsilon_1 < 5$.

Спасибо за внимание