01;04

Аналитическое решение уравнения Пуассона–Больцмана для сферической и аксиальной симметрии

© *Л.Г. Дьячков*

Институт теплофизики экстремальных состояний
Объединенного института высоких температур РАН, Москва
E-mail: dyachk@iht.mpei.ac.ru

Поступило в Редакцию 17 сентября 2004 г.

Найдено точное аналитическое решение уравнения Пуассона–Больцмана (УПБ) в случае сферической, аксиальной или плоской геометрии в виде логарифма от степенного ряда, которое описывает распределение электростатического потенциала вокруг заряженной макрочастицы (провода или плоскости) в условиях термического равновесия при произвольном соотношении между плотностями зарядов макрочастиц (проводов, плоскостей) и плазмы. Ранее было известно аналитическое решение УПБ только для плоской геометрии.

Одной из основных в физике пылевой плазмы и коллоидных систем в электролитах является проблема экранирования заряженных макрочастиц. В условиях термического равновесия распределение электростатического потенциала и заряда вокруг макрочастицы определяется уравнением Пуассона–Больцмана (УПБ). В пылевой плазме такие условия могут возникнуть при термоэмиссионном механизме зарядки пылинок. Хорошо известно решение линеаризованного УПБ — потенциалы Дебая–Хюккеля и Дерягина–Ландау–Вервея–Овербека [1,2]. Но при больших зарядах макрочастиц их экранировка существенно нелинейна. Поэтому во многих работах УПБ решается численно [3–6] или аналитически с учетом следующих членов разложения больцмановской экспоненты [4,7]. В данной работе получено точное аналитическое решение УПБ в виде логарифма от степенного ряда, которое справедливо не только для сферической геометрии, но также для аксиальной и плоской. Ранее точное аналитическое решение УПБ было известно только в случае плоской геометрии [1,8]. Полученное решение справедливо для макрочастицы с зарядом любого знака. Для определенности будем полагать его положительным, а окружающую среду называть плазмой.

Уравнение Пуассона–Больцмана имеет следующий вид:

$$\Delta\Phi = 4\pi e\left[n_{e0}\exp(e\Phi/kT) - n_{i0}\exp(-e\Phi/kT)\right], \tag{1}$$

где n_{i0}, n_{e0} — концентрации соответственно положительно и отрицательно заряженных частиц плазмы в области, где потенциал $\Phi = 0$. Эти частицы для простоты будем считать однозарядными и называть соответственно ионами и электронами. В экранировке макрочастицы не участвуют другие макрочастицы, тем самым предполагается, что среднее расстояние между ними превышает радиус экранирования. Введем безразмерный потенциал $\varphi = e\Phi/kT$, а в качестве единицы длины возьмем электронный радиус Дебая для области с нулевым потенциалом $R_{eD} = (kT/4\pi e^2 n_{e0})^{1/2}$. Тогда в сферически симметричном $(L = 2)$, аксиально симметричном $(L = 1)$ или плоском $(L = 0)$ случаях уравнение (1) запишем в виде

$$\frac{d^2\varphi}{dr^2} + \frac{L}{r}\frac{d\varphi}{dr} = e^{\varphi} - \delta e^{-\varphi}, \tag{2}$$

где $\delta = n_{i0}/n_{e0}$. Значение $\delta = 1$ соответствует уединенной частице (проводу или плоскости) в квазинейтральной плазме, а значение $\delta = 0$ — случаю, когда весь положительный заряд сосредоточен на макрочастицах (проводах, плоскостях), например термоэмиссионной плазме. Вид граничных условий зависит от решаемой физической задачи. Например, для уединенной сферической частицы с заданным значением заряда Z_d

$$\varphi(\infty) = 0, \qquad d\varphi/dr\big|_{r_d} = -z_d/r_d^2, \tag{3}$$

где $z_d = Z_d e^2/kTR_{eD}$ — безразмерный заряд, r_d — безразмерный радиус макрочастицы. Но в данном случае удобно задать нулевые гранусловия на некотором конечном расстоянии a:

$$\varphi(a) = 0, \qquad d\varphi/dr\big|_{a} = 0. \tag{4}$$

Условия (4) применимы и для плоской задачи, и в случае аксиальной симметрии $(L = 0, 1)$. В первую очередь, нас интересует решение УПБ для сферической симметрии $(L = 2)$, но одновременно в данной работе получено решение и для $L = 0$, 1. Условия (4) соответствуют ячеечному приближению, которое применимо, если система макрочастиц является сильно неидеальной $(Z_d^2 e^2/kTaR_{eD})^{1/2} \gg 1$ [9]. Граничные условия зададим при $a = (4\pi N_d/3)^{-1/3}/R_{eD}$, где N_d — концентрация макрочастиц. Если задан заряд макрочастицы, можно, решая уравнение (2) с гранусловиями (4), подобрать значение a, удовлетворяющее второму из условий (3). В случае уединенной частицы следует взять $a \gg 1$.

Чтобы решить (2) аналитически, выразив решение через степенной ряд, избавимся от экспоненциальной нелинейности:

$$\varphi = q \ln y, \tag{5}$$

где q — некоторое целое, отличное от нуля число. Разложить y в ряд естественно около точки $r = a$, где заданы нулевые граничные условия. Поэтому сделаем замену переменной

$$r = a(1 - x)^p,$$

где p — положительное целое или полуцелое число. В результате получим уравнение

$$(1 - x)\left[y \frac{d^2y}{dx^2} - \left(\frac{dy}{dx}\right)^2\right] - (Lp - p + 1)\, y \frac{dy}{dx}$$
$$- \frac{p^2}{q} a^2 (1 - x)^{2p-1} \left(y^{q+2} - \delta y^{2-q}\right) = 0 \tag{6}$$

с граничными условиями

$$y(0) = 1, \qquad dy/dx\big|_0 = 0. \tag{7}$$

Будем искать решение (6) в виде ряда

$$y = \sum_{n=0}^{\infty} b_n x^n. \tag{8}$$

Из (7) сразу следует $b_0 = 1$, $b_1 = 0$. Подставляя (8) в (6), можно получить рекуррентное соотношение для коэффициентов b_n, $n \geqslant 2$, но в общем случае для произвольных p и q оно будет иметь весьма сложный вид. Возникает вопрос о выборе оптимальных значений этих параметров. От q зависит степень нелинейности (6), т. е. число степенных рядов, которые следует перемножить, и, следовательно, кратность сумм, входящих в рекуррентное соотношение. Чтобы излишне не усложнять решение, параметр q следует выбрать таким, чтобы степень нелинейности уравнения (6) была минимальной. В общем случае $\delta \neq 0$ это достигается при $q = 1$. Сходимость ряда (8) ухудшается при $x \to 1$, т. е. вблизи поверхности малых частиц $(r_d \ll a)$. В этом случае, возможно, потребуется вычислить большое число членов ряда $(\sim 10^3)$. Ускорить сходимость ряда можно, если параметр p взять достаточно большим, так как с ростом p при заданных a и r уменьшается $x = 1 - (r/a)^{1/p}$. Но большие значения p усложняют уравнение (6). Положим $p = 2$. При $q = 1$, $p = 2$ рекуррентное соотношение для коэффициентов ряда (8) имеет следующий вид:

$$
\begin{aligned}
b_{n+2} &= \frac{2L-1}{n+2}\, b_{n+1} \\
&\quad + \frac{1}{(n+1)(n+2)} \Big\{ 4a^2 \big[(1-\delta) b_n + \delta(3b_{n-1} - 3b_{n-2} + b_{n-3})\big] + S_1 \Big\},
\end{aligned}
\tag{9}
$$

$$
\begin{aligned}
S_1 &= \sum_{k=0}^{n-1} \Big\{ (k+1)\big[(k+2) b_{k+2} (b_{n-k-1} - b_{n-k}) \\
&\quad + (n-k+1) b_{k+1} (b_{n-k+1} - b_{n-k}) + 2L b_{k+1} b_{n-k}\big] + 4a^2 b_k (b_{n-k} + S_2) \Big\}, \\
S_2 &= \sum_{k'=0}^{n-k-1} b_{k'} (b_{n-k-k'} - 3b_{n-k-k'-1} + 3b_{n-k-k'-2} - b_{n-k-k'-3}).
\end{aligned}
$$

Здесь все коэффициенты b_n с отрицательным индексом и суммы S_1 и S_2 с отрицательным верхним пределом следует положить равными нулю. Приведем явные выражения для нескольких первых коэффициентов:

$$
b_2 = 2a^2(1-\delta), \qquad b_3 = \frac{2}{3}\, a^2 (1-\delta)(2L-3),
$$

$$
b_4 = \frac{a^2}{6}\,(1-\delta)\big[(2L-1)^2 + 2 + 8a^2(2-\delta)\big].
$$

Рассмотрим два предельных случая $\delta \to 1$ и $\delta \to 0$. При $\delta \to 1$ плотность положительного заряда, сосредоточенного на макрочастицах, становится ничтожно малой по сравнению с плотностью зарядов плазмы. Это может происходить за счет уменьшения Z_d или N_d. Если уменьшается N_d, радиус ячейки a неограниченно возрастает. Но этот рост довольно медленный. Для макрочастиц малых ($r_d \ll 1$) размеров $a < 10$ даже при $1 - \delta \sim 10^{-5}$. При $\delta = 0$ весь положительный заряд сосредоточен на макрочастицах. В этом случае в (6) пропадает член $\sim y^{2-q}$ и оптимальным является значение $q = -2$. При этом достаточно взять $p = 1$. Тогда рекуррентное соотношение будет значительно проще, чем (9):

$$b_{n+2} = \frac{L}{n+2}\, b_{n+1} + \frac{1}{(n+1)(n+2)} \left(\frac{a^2}{2} (\delta_{n1} - \delta_{n0}) + S_1 \right), \tag{10}$$

$$S_1 = \sum_{k=0}^{n-1} (k+1) \Big\{ (k+2) b_{k+2} (b_{n-k-1} - b_{n-k}) + b_{k+1} \big[(n-k+1) b_{n-k+1} - (n-k-L) b_{n-k} \big] \Big\},$$

где δ_{ij} — символ Кронекера. Для нескольких первых коэффициентов имеем

$$b_2 = -\frac{a^2}{4}, \qquad b_3 = -\frac{a^2}{12}\, L,$$

$$b_4 = -\frac{a^2}{96} \big[2L(L+2) - a^2 \big], \quad b_5 = -\frac{a^2}{240}\, L \big[(L+2)(L+3) - 3a^2 \big].$$

Известно, что многократное применение рекуррентных формул может приводить к значительным погрешностям. Для приповерхностной области малых частиц ($r/a \sim 0.01$), где сходимость ряда (8) ухудшается и требуется до $\sim 10^3$ членов, были проведены вычисления как с обычной, так и с двойной точностью. Сопоставление результатов показывает, что они совпадают с точностью до нескольких знаков.

Зная потенциал $\varphi(r)$, легко найти электрическое поле

$$E(r) = -\frac{d\varphi}{dr} = \frac{q dy/dx}{pa(1-x)^{p-1} y}$$

и заряд внутри сферы или цилиндра заданного радиуса r или слоя с полушириной r

$$z(r) = \begin{cases} E/2\pi, & L = 0, \\ 2^{L-2} E r^L, & L = 1, 2 \end{cases} \tag{11}$$

(при $L = 0, 1$ заряд z относится к единичной площади или длине). Для кулоновского поля ($E \sim r^{-L}$) функция (11) является константой, поэтому в общем случае ее вид наглядно показывает характер экранировки макрочастицы (провода, плоскости). Очевидно, $z(r_d) = z_d$.

Для плоской задачи ($L = 0$) известно точное аналитическое решение уравнения (2) [1,8]. Простой вид оно имеет при $\delta = 0$ и $\delta = 1$. Для $\delta = 0$ потенциал $\varphi = \ln\{\cos^{-2}[(a - r)/2^{1/2}]\}$, и в этом случае нами показана его тождественность решению (5), (8), (10).

Средняя по ячейке концентрация электронов определяется выражением

$$\overline{n_e} = \frac{L+1}{a^{L+1} - r_d^{L+1}} \int\limits_{r_d}^{a} n_e(r) r^L \, dr$$

$$= \frac{(L+1)pn_{e0}}{1 - (r_d/a)^{L+1}} \int\limits_{0}^{x_d} y^q (1-x)^{(L+1)p-1} \, dx, \tag{12}$$

где $x_d = 1 - (r_d/a)^{1/p}$. При $q > 0$ интеграл в (12) берется аналитически. Для $L = 2$, $p = 2$, $q = 1$ имеем

$$\overline{n_e} = \frac{6n_{e0}}{1 - (r_d/a)^3} \sum_{n=0}^{\infty} b_n \left(\frac{x_d^{n+1}}{n+1} - 5\,\frac{x_d^{n+2}}{n+2} \right.$$

$$\left. + 10\,\frac{x_d^{n+3}}{n+3} - 10\,\frac{x_d^{n+4}}{n+4} + 5\,\frac{x_d^{n+5}}{n+5} - \frac{x_d^{n+6}}{n+6} \right). \tag{13}$$

Для тех же L, p, q средняя концентрация ионов

$$\overline{n_i} = \frac{3}{a^3 - r_d^3} n_{i0} \int\limits_{r_d}^{a} \frac{r^2 dr}{y}, \tag{14}$$

но в этом случае интегрировать надо численно.

Потенциал $\varphi(r)$ и заряд $z(r)$ внутри сферы радиуса r (11) найдем для экспериментальных условий [10], в которых термически равновесная плазма при $T = 1700\,\mathrm{K}$ содержала пылевые частицы CeO_2 радиусом $0.4\,\mu$m с концентрацией $N_d = 5 \cdot 10^7\,\mathrm{cm}^{-3}$. Концентрация электронов n_e составляла $2.5 \cdot 10^{10}\,\mathrm{cm}^{-3}$ с погрешностью в пределах 30%, а концентрация ионов была на порядок меньше. В пренебрежении ионами из квазинейтральности плазмы был получен заряд пылевых частиц $Z_d \approx 500$. Измеренное значение n_e следует сравнивать, вообще

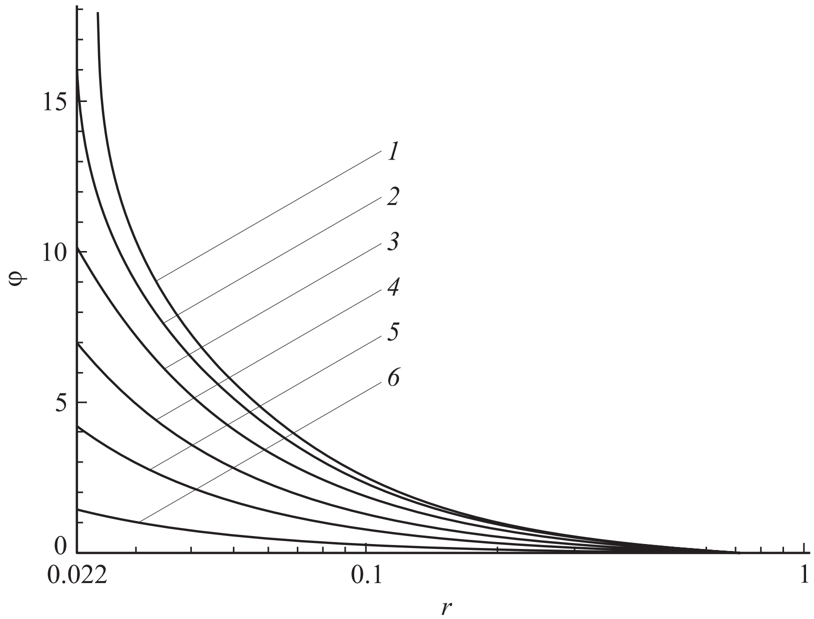

Рис. 1. Распределение электростатического потенциала $\varphi(r)$ вокруг макрочастицы для условий эксперимента [10] при нескольких значениях параметра δ: *1* — $\delta = 0$, *2* — 0.1, *3* — 0.28, *4* — 0.5, *5* — 0.7, *6* — 0.9.

говоря, с некоторой средней по ячейке концентрацией электронов, например (12). Но с учетом погрешности измерений приближенно приравняем его n_{e0}. Тогда $R_{eD} = 18\,\mu$m и $r_d = 0.022$, $z_d = 0.27$, $a = 0.94$. Параметр δ следует взять равным нулю или малым по сравнению с единицей.

Полученные распределения потенциала и заряда для указанных параметров и нескольких значений δ приведены соответственно на рис. 1 и 2. Для $\delta = 0$ решения не существует, при $r = 0.0243$ потенциал и заряд обращаются в бесконечность. Для $\delta = 0.1$ решения есть, но в этом случае заряд $Z_d \approx 4000$ на порядок превышает экспериментальное значение, которое достигается при увеличении δ до 0.28 (для сравнения показаны также кривые для еще больших значений δ). Для такого значения δ из (13), (14) получим $\overline{n_e} = 1.25 n_{e0} = 3.1 \cdot 10^{10}\,\text{cm}^{-3}$,

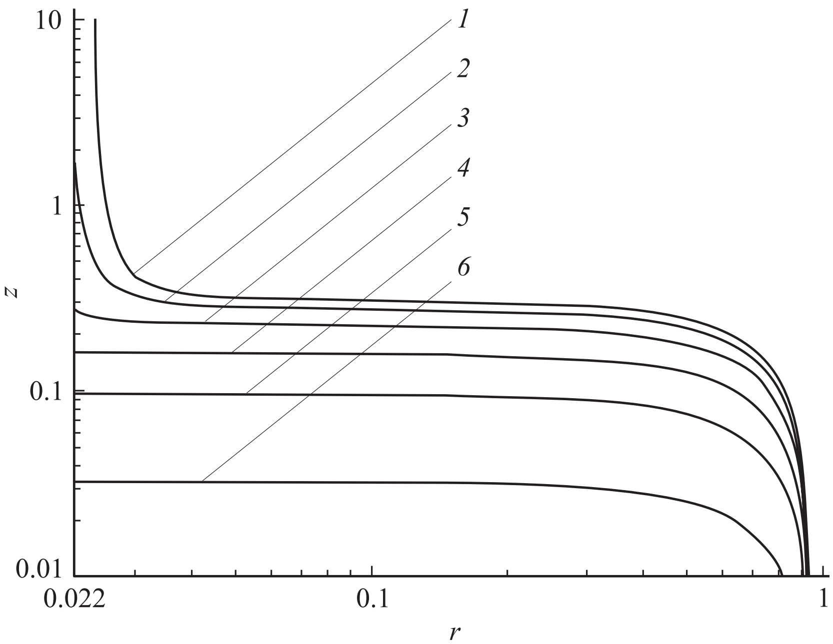

Рис. 2. Заряд $z(r)$ внутри сферы радиуса r для условий эксперимента [10] при нескольких значениях параметра δ, обозначения как на рис. 1.

$\overline{n_i} = 0.95 n_{e0}\delta = 0.66 \cdot 10^{10}\,\mathrm{cm}^{-3}$. На рис. 2 для всех значений δ видна довольно широкая область почти постоянного значения $z(r)$. В этой области потенциал практически кулоновский с эффективным зарядом, равным $z(r)$. При малых значениях δ, когда заряд макрочастицы z_d велик, эффективный заряд значительно меньше него. С увеличением параметра δ заряд частицы уменьшается, а эффективный заряд практически с ним совпадает.

Работа выполнена при частичной поддержке Программой президиума РАН „Теплофизика и механика интенсивных энергетических воздействий“ и Программой государственной поддержки ведущих научных школ Российской Федерации (проект НШ–1953.2003.2).

Список литературы

[1] *Derjaguin B.V., Landau L.D.* // Acta Physicochim. USSR. 1941. V. 14. N 6. P. 633–662; *Ландау Л.Д.* Собрание трудов. Т. 1. М.: Наука, 1969. С. 386–411.

[2] *Verwey E.J.W., Overbeek J.Th.G.* Theory of the Stability of Lyophobic Colloids. Amsterdam: Elsevier, 1948.

[3] *Gibson E.G.* // Phys. Fluids. 1966. V. 9. N 12. P. 2389–2399.

[4] *Нефедов А.П., Петров О.Ф., Храпак С.А.* // Физика плазмы. 1998. Т. 24. № 12. С. 1109–1113.

[5] *Яковленко С.И.* // Краткие сообщения по физике ФИАН. 2002. № 1. С. 9–18.

[6] *Гундиенков В.А., Яковленко С.И.* // ЖЭТФ. 2002. Т. 122. В. 5. С. 1003–1018.

[7] *Vranješ J., Tanaka M.Y., Pandey B.P., Kono M.* // Phys. Rev. E. 2002. V. 66. N 3. P. 037401–1–4.

[8] *Яковленко С.И.* // Письма в ЖТФ. 2001. Т. 27. В. 9. С. 83–94.

[9] *Yakubov I.T., Khrapak A.G.* // Sov. Technol. Rev. B: Therm. Phys. Rev. 1989. V. 2. P. 269–337.

[10] *Фортов В.Е., Нефедов А.П., Петров О.Ф.* и др. // ЖЭТФ. 1997. Т. 111. В. 2. С. 467–477.