

均匀电场中颗粒簇偶极矩的确定

姜泽辉

(哈尔滨工业大学应用物理系, 哈尔滨 150001)

赫晓东 韩杰才 杜善义

(哈尔滨工业大学复合材料研究所, 哈尔滨 150001)

(1998 年 10 月 5 日收到; 1998 年 11 月 23 日收到修改稿)

置于均匀电场中的一簇球形颗粒, 由于其内部的相互作用而耦合在一起. 这致使簇的感应偶极矩与簇的几何结构, 大小以及颗粒的介电常数等参量有关. 试图通过已知的链的偶极矩确定任意大小长方结构的簇的偶极矩. 假定颗粒链可以被具有同样偶极矩的一个等效介质球代替, 并将具有空间结构的颗粒簇处理成面结构簇, 再将面结构简化成一个颗粒链, 从而确定簇的偶极矩. 在这一过程中, 通过不断增加等效球的尺寸, 将颗粒间的相互作用包含在簇的偶极矩中. 数值分析了立方结构簇的偶极矩, 结果是可接受的.

PACC: 4110D; 7730

1 引 言

确定均匀电场中颗粒簇团的偶极矩是一个重要的电磁学多体问题. 这一问题的基本特征是簇内颗粒间存在着复杂的相互作用. 系统内电势由 Laplace 方程描述, 并在各球表面上满足边界条件. 这是一个极难处理的边界值问题, 因为难以找到合适的坐标系来分离变量. 多数理论采用多极矩展开法, 这需要数值计算各球上的感应多极矩. 在颗粒相对介电常数较高并且排列较密时, 颗粒间的高阶多极矩相互作用显著增强. 为获得精确结果所要包含的高阶矩的数量如此之大, 致使这一方法变得不实用. 因而, 需要能估算所有各阶多极矩影响的简单方法.

近些年的研究多集中于较简单的链结构上. Jones^[1]用电像法计算了含 2—4 个导体球的链的偶极矩. 之后, Meyer^[2]将计算扩展到 5—7 个导体球. 受到计算机内存的限制, 电像法难以计算更长的链. 基于电像法, Meyer^[2]引入最近邻近似, 给出一个近似式. Jones 等人^[3]用多极矩展开法计算了介质球链的偶极矩. 当球的相对介电常数较高时, 这种方法遇到数据分散的困难. 为了避免直接计算多极矩, 最近建立了导体^[4]及介质^[5,6]球链偶极矩的分形模型. 根据双球体系的精确解(包含了多极矩的影响), 通过分形生成过程(一种迭代过程)确定了任意长度球链的偶极矩. 链偶极矩具有如下形式:

$$p_N = cN^k, \quad (1)$$

其中, N 为球个数, 即链长. c 与 k 是与链长无关的常数, 且 k 与分维成反比^[4-6]. 在分形模型中, 颗粒间的相互作用被包含在分形球的等效半径中, 通过分形的生长, 等效半径增

大, 链内的多极矩相互作用被包含进来. 为了估算微粒结团对随机复合介质等效介电常数的影响, Doyle 和 Jacobs^[7]最近计算了密堆积导体小球构成的球形簇团的偶极极化率. 由于簇内导体小球靠得很近甚至相互接触, 各球间的多极矩相互作用很强. Doyle 和 Jacobs^[7]假定簇团发生金属化转变, 也就是将簇团等效成一个大的导体球. 在簇团足够大的情况下, 簇内每个球的平均极化率为单球极化率的 $(1/p_c)$ 倍, p_c 为簇内小球的密堆积率. 这一模型能较好地估计颗粒空间排列方式对极化的影响. Jones^[8]考虑在估算了导体球链偶极矩的情况下, 分析了链长和取向对含链体系的等效介电常数的影响. 在他的模型中, 尽管多极矩的影响包含在链的极化中, 但无法估计链与链之间的相互作用.

这里, 我们试图根据已知的链的偶极矩确定形状规则的簇的偶极矩. 将簇看成是由排列在一起的链构成的, 并假定链可以被一个具有等偶极矩的单球所代替. 这样空间结构的簇被一个面结构的簇所代替. 再将面形簇内链用等偶极矩的单球代替, 进而将其进一步简化为一个单链, 而单链的偶极矩是已知的, 由此最终确定出簇的偶极矩. 在这一过程中, 通过增大等效球的半径和调整球心间距将簇内颗粒间的相互作用包含进来, 最终将簇偶极矩表示成颗粒个数、间距及相对介电常数的简洁函数. 对内部颗粒是简立方排列的正方形簇进行了数值分析, 结果表明我们的结论是可以接受的.

2 理 论

2.1 链偶极矩

等间距介质球链的偶极矩与链长及外场的施加方向有关. 根据分形模型纵向和横向偶极矩可以分别表示成^[4-6]

$$p_N^L(\tau, x) = N^{\ln \alpha_2^L(\tau, x)/\ln 2} p_0 = \alpha_N^L(\tau, x) p_0, \quad (2)$$

$$p_N^T(\tau, x) = N^{\ln \alpha_2^T(\tau, x)/\ln 2} p_0 = \alpha_N^T(\tau, x) p_0, \quad (3)$$

$$p_0 = 4\pi\epsilon_m \frac{2}{3} \frac{\tau}{\tau - \epsilon_0} E_0 R^3. \quad (4)$$

其中, 上标“L”和“T”分别表示纵向和横向. N 表示介质球的个数. p_0 为均匀电场 E_0 中不带电单介质球的偶极矩. $\tau = (\epsilon - \epsilon_m)/(\epsilon + \epsilon_m)$, ϵ , ϵ_m 分别表示球和周围基质的介电常数. $x = r/2R$ 为约化间距, r 为相邻两球的球心间距, R 为球半径. N 为链内所含的球个数. $\alpha_2^L(\tau, x)$ 和 $\alpha_2^T(\tau, x)$ 分别表示纵向和横向时介质双球的相对极化系数(见附录). 由于 $\alpha_2^L(\tau, x)$ 和 $\alpha_2^T(\tau, x)$ 均大于 1, 因而偶极矩随着链长而增大. $\alpha_N^L(\tau, x)$ 和 $\alpha_N^T(\tau, x)$ 表示纵向和横向时链的相对极化系数.

2.2 立方结构颗粒簇的偶极矩

考虑如图 1(a)所示的结构. 共含 $N = N_1 \cdot N_2 \cdot N_3$ 个介电常数为 ϵ 的介质球. 周围基质的介电常数为 ϵ_m . 在 x , y , z 三个方向球心间距分别为 r_1 , r_2 和 r_3 . 沿着这三个棱边球个数分别是 N_1 , N_2 和 N_3 . 首先考虑外电场 E_0 沿 x 轴施加于介质球时的情况. 我们将其

看成是由 $N_1 \times N_2$ 个长度为 N_3 的链构成的. 这些链的轴垂直于电场方向. 假定这些链的偶极矩可以由(3)式决定, 并且每一条链可以被一个具有同样偶极矩的介质单球代替. 这个介质单球的介电常数仍为 ϵ , 其等效半径为 $R_1 = (\alpha_{N_3}^T(\tau, x_3))^{1/3} R = N_3^{\ln \alpha_2^T(\tau, x_3)/3 \ln 2} R$ (将(4)式等于(3)式即可获得). 这样可以将图 1(a)代以图 1(b). 在图 1(b)中沿 x 方向的球心间距调整为 r'_1 , 以保证新结构中的约化间距 $x'_1 = r'_1/2 R_1 = x_1 = r_1/2 R$ 与原结构中的相同. 同样沿 y 方向的球心间距调整为 r'_2 以使 $x'_2 = r'_2/2 R_1 = x_2 = r_2/2 R$. 对于图 1(b)的结构, 同样可以看成是 N_1 条长为 N_2 垂直于电场方向排列的链构成的. 将这 N_2 条链

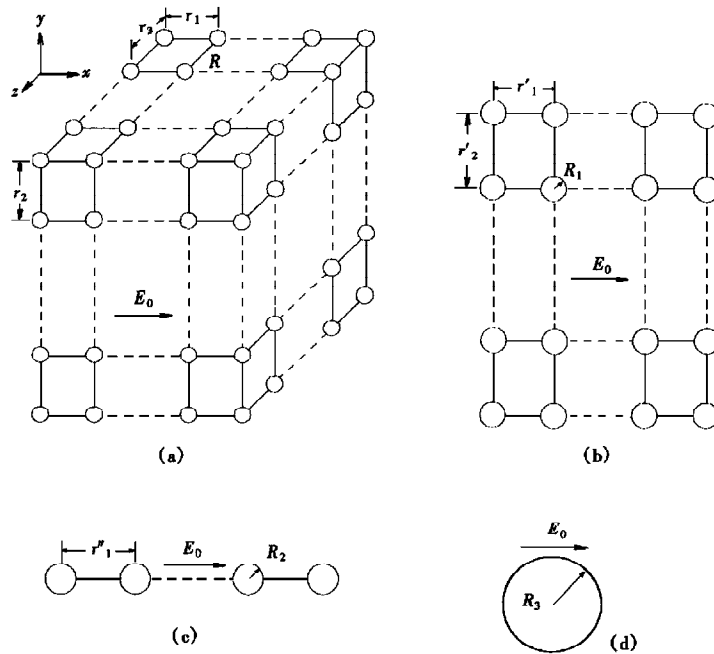


图 1 长方形颗粒簇的结构示意图 (a) $N_1 \cdot N_2 \cdot N_3$ 个介质球沿 x, y, z 三个方向分别以 r_1, r_2, r_3 等间距排列, 电场 E_0 沿 x 轴方向; (b) 简化后的面结构簇. 球半径为 R_1 , 沿 x, y 方向的球心间距分别为 r'_1 和 r'_2 , 球个数为 $N_1 \cdot N_2$; (c) 由(b)简化而来的链结构, 球个数为 N_1 , 沿 x 方向排列; 球半径为 R_2 , 球心间距 r''_1 ; (d) 将(c)中的链结构代替具有等偶极矩的单球, 其半径为 R_3

分别用一具有同样偶极矩介电常数为 ϵ 的介质球代替, 得到图 1(c)的结构. 图 1(c)中, 每个球的半径为 $R_2 = (\alpha_{N_2}^T(\tau, x_2))^{1/3} R_1 = N_2^{\ln \alpha_2^T(\tau, x_2)/3 \ln 2} N_3^{\ln \alpha_2^T(\tau, x_3)/3 \ln 2} R$ (由(3), (4)两式可得), 球心间距增大为 r''_1 , 确保 $x''_1 = r''_1/2 R_2 = x_1 = r_1/2 R$. 将这个长为 N_1 沿电场方向排列的链再用一个介质单球代替得到半径 $R_3 = (\alpha_{N_1}^L(\tau, x_1))^{1/3} R_2 = N_1^{\ln \alpha_2^L(\tau, x_1)/3 \ln 2} N_2^{\ln \alpha_2^T(\tau, x_2)/3 \ln 2} N_3^{\ln \alpha_2^T(\tau, x_3)/3 \ln 2} R$. 将半径 R_3 代入单球偶极矩方程(4)最终得到电场沿 x 方向施加时簇的偶极矩

$$p_N^{xx}(\tau, x_1, x_2, x_3) = N_1^{\ln \alpha_2^L(\tau, x_1)/\ln 2} N_2^{\ln \alpha_2^T(\tau, x_2)/\ln 2} N_3^{\ln \alpha_2^T(\tau, x_3)/\ln 2} p_0. \quad (5)$$

依照同样方法可以得到电场沿 x, y 方向时的偶极矩, 它们分别表示为

$$p_N^x(\tau, x_1, x_2, x_3) = N_1^{\ln \alpha_2^T(\tau, x_1)/\ln 2} N_2^{\ln \alpha_2^L(\tau, x_2)/\ln 2} N_3^{\ln \alpha_2^T(\tau, x_3)/\ln 2} p_0, \quad (6)$$

$$p_N^y(\tau, x_1, x_2, x_3) = N_1^{\ln \alpha_2^T(\tau, x_1)/\ln 2} N_2^{\ln \alpha_2^T(\tau, x_2)/\ln 2} N_3^{\ln \alpha_2^L(\tau, x_3)/\ln 2} p_0. \quad (7)$$

簇内颗粒间的相互作用是非常复杂的. 尤其当颗粒排列得很紧密时, 这种相互作用变得很强烈. 这导致簇的偶极矩强烈地依赖于颗粒的空间分布, 簇的形状和大小, 以及颗粒的相对介电常数. 给出精确解析解目前是不可能的. 另外, 与无限周期结构不同, 簇内颗粒的极化与其在簇内的相对位置有关; 而无限周期结构内颗粒的极化是等同的^[9-11]. 在以上分析中, 为避免直接计算相互作用对各成员球极化的影响, 而将颗粒间的相互作用包含在等效球的半径中, 并假定等效球间的相互作用与真实球相同. 这使分析过程大为简化, 最终可以将簇的偶极矩表示成关于 $\alpha_2^L(\tau, x)$ 和 $\alpha_2^T(\tau, x)$ 的函数. 对图 1(a)所示的结构, 大致而言沿电场方向排列的球之间的相互作用对偶极矩起增强作用, 而垂直于电场方向排列的球间的相互作用对偶极矩起减弱作用(对双球结构这体现在 $\alpha_2^L(\tau, x)/2 > 1$ 而 $\alpha_2^T(\tau, x)/2 < 1$). 这一点在方程(5)–(7)中体现为偶极矩与各棱边上的球个数 N_1, N_2 和 N_3 有关. 显见, $N_2 = N_3 = 1$ 时, 方程(5)变为方程(2), 方程(6), (7)变为方程(3), 即单链情况. 当 $N_1 = N_2 = N_3 = N^{1/3}$, 且 $r_1 = r_2 = r_3$ 时, 沿三个棱边方向的偶极矩是相同的, 表示为

$$P_N(\tau, x) = N^{\ln[\alpha_2^L(\tau, x)\alpha_2^T(\tau, x)\alpha_2^T(\tau, x)]/\ln 8} p_0. \quad (8)$$

当各球相互接触($x=1$)并为导体球($\tau=1$)时, 上式变为

$$P_N(1, 1) = N^{\ln(9 \cdot 3^3)/\ln 8} p_0 = N^{1.322} p_0. \quad (9)$$

3 讨 论

由方程(5)–(7)可见, 颗粒簇的偶极矩与簇的几何形状有着复杂的函数关系. 为了便于讨论, 这里限定讨论等间距排列情况下的正方形簇. 图 2 给出了正方形簇(方程(8))的平均约化偶极矩($p_N(\tau, x)/Np_0$)随球心间距、球个数及 τ 分别取 0.05, 0.2, 0.6, 1.0 时的变化情况. 由图 2 可见当颗粒间距较大, 即颗粒排列得较疏松($x = r/2R \gg 1$), 或颗粒相对介电常数较小($\tau \ll 1$)时, 平均约化偶极矩接近于 1. 在这种情况下簇内各成员球间的相互影响可以忽略, 各球的行为接近于孤立球的情况. 此时, 各球上只激发出偶极矩而高阶多极矩的强度可以不计. 这正是所期望的. 而当颗粒相当介电常数较高($\tau \sim 1$)且相互非常接近($x \sim 1$)时, 各球间耦合很强, 这导致簇偶极矩随簇尺寸(N)的增大而增大.

图 3 给出了各球相互接触($x=1$)情况下, τ 取不同值时平均约化偶极矩随球个数 N 的变化情况. 在相同颗粒数的情况下, 偶极矩随 τ 而增大. 在 τ 不变的情况下, 偶极矩随颗粒数 N 而增大, 且 τ 值越大偶极矩随 N 增大的趋势越大. 为了便于比较, 图 3 中也绘出了 $\tau=0.2$ 和 0.4 时链的纵向偶极矩随链长的变化曲线. 显见在相同颗粒数的情况下, 簇偶极矩远小于链偶极矩. 这是因为纵向时链内颗粒间的吸引相互作用使偶极矩增大, 而在簇中垂直于电场方向排列的颗粒间存在着排斥相互作用, 这种相互作用致使作用于颗

粒上的局域场减弱,从而导致簇偶极矩相对链偶极矩变小.

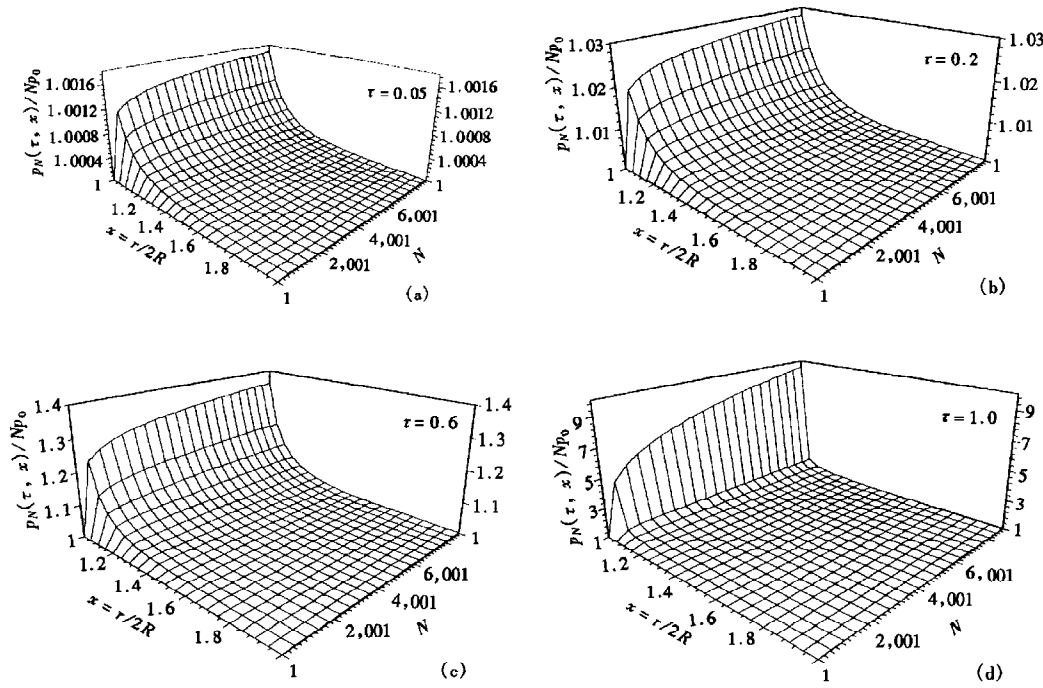


图2 平均约化偶极矩($p_N(\tau, x)/Np_0$)随球心间距及球个数的变化情况 (a) $\tau=0.05$; (b) $\tau=0.2$; (c) $\tau=0.6$; (d) $\tau=1.0$

由于缺乏簇偶极矩的实验数值和其他理论结果,这里只将正方形簇的偶极矩与颗粒链的纵向偶极矩进行了比较.颗粒链偶极矩的确定采用了类似的方法,所得结果与实验值及其他数值结果符合极好(参见文献[4,6]).另外,我们注意到对按简立方结构排列的导体球,平均约化偶极矩与 $N^{0.322}$ 成正比,而在Doyle和Jacobs^[7]关于球形簇偶极矩的分析中平均约化偶极矩正比于 $1/p_c$ (对简立方结构 $p_c=0.52$).这是因为Doyle和Jacobs^[7]的模型只适合于簇团较大的情况,难以分析簇团由小变大过程的影响.实际上簇团生长过程会对其偶极矩带来一定影响.最近关于富勒烯线性偶极极化率的计算^[12]表明其平均偶极极化率亦具有类似于方程(1)的形式.

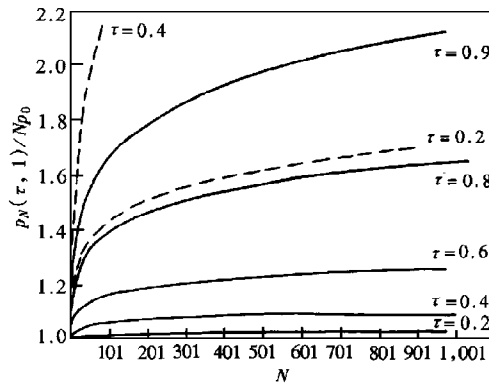


图3 密堆积($x=1$)时簇偶极矩(方程(8))随颗粒数的变化曲线(实线) 虚线为链的纵向偶极矩(方程(2),令 $x=1$)

4 结 论

提出了预测颗粒簇偶极矩的简单方法,并给出了简洁表达式.确定簇偶极矩的关键在于处理簇内的多体相互作用,这种相互作用导致簇偶极矩与诸多因素有着复杂的函数关系.在假定链可以被具有同样偶极矩的单球所代替,而两个这样的虚球间的相互作用与两个真实球相同的前提下,将形状规则的簇简化成一系列链,再根据链偶极矩确定出簇偶极矩.这一过程避免了直接计算多极矩,而将其影响包含在等效球的半径中.数值分析表明我们的结果是可接受的.

附 录

Poladian 用电像法^[13]计算了均匀电场中介质双球偶极矩.根据他的结果,具有任意间距的双介质球的偶极矩可以表示为

$$p_2^L(\tau, x) = \alpha_2^L(\tau, x) p_0, \quad (\text{A1})$$

$$p_2^T(\tau, x) = \alpha_2^T(\tau, x) p_0, \quad (\text{A2})$$

$$\alpha_2^L(\tau, x) = 2 \left\{ \sum_{n=0}^{\infty} \tau^n \left[\frac{\text{sh}^3 \eta_0}{\text{sh}^3(n+1) \eta_0} + \frac{\text{sh} \eta_0 \text{sh}^2(n \eta_0)}{\text{sh}^3(n+1) \eta_0} \right] - \left[\sum_{n=0}^{\infty} \tau^n \frac{\text{sh} \eta_0 \text{sh}(n \eta_0)}{\text{sh}^2(n+1) \eta_0} \right]^2 / \sum_{n=0}^{\infty} \tau^n \frac{\text{sh} \eta_0}{\text{sh}(n+1) \eta_0} \right\}, \quad (\text{A3})$$

$$\alpha_2^T(\tau, x) = 2 \sum_{n=0}^{\infty} (-\tau)^n \left[\frac{\text{sh} \eta_0}{\text{sh}(n+1) \eta_0} \right]^3. \quad (\text{A4})$$

其中, η_0 由下式定义

$$\text{ch} \eta_0 = r/2R = x. \quad (\text{A5})$$

这里, r 为球心间距, R 为球半径, x 为约化间距.分析表明 $2 \leq \alpha_2^L(\tau, x) \leq 4.808, 1.803 \leq \alpha_2^T(\tau, x) \leq 2$. 当两球相互接触 ($x=1$) 时, (A3), (A4) 两式变为^[13]

$$\alpha_2^L(\tau, 1) = 2 \left[\frac{2 Li_3(\tau)}{\tau} - \frac{Li_2(\tau)^2}{\tau Li_1(\tau)} \right], \quad (\text{A6})$$

$$\alpha_2^T(\tau, 1) = -2 p_0 \frac{Li_3(-\tau)}{\tau}. \quad (\text{A7})$$

其中, $Li_n(x) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{x^k}{k^n}$, ($|x| < 1$), 为 Polylogarithm 函数^[15].

对于任意间距的导体 ($\tau=1$) 双球的偶极矩, 由 Levine 和 McQuarrie^[14]在双球坐标系中求解 Laplace 方程获得. 纵向和横向极化率可以分别表示为

$$\alpha_2^L(1, x) = \{4 \text{sh}^3 \eta_0 ([s_0(\eta_0) s_2(\eta_0)] - [s_1(\eta_0)]^2 / s_0(\eta_0))\}, \quad (\text{A8})$$

$$\alpha_2^T(1, x) = \{2 \text{sh}^3 \eta_0 \sum_{i=2}^{\infty} (-1)^{i-1} (\text{sh}(s \eta_0))^{-3} + 2\}. \quad (\text{A9})$$

其中, 函数 s_0, s_1, s_2 由下式定义,

$$s_k(\eta_0) = \sum_{t=0}^{\infty} \frac{(2t+1)^k}{\exp[(2t+1)\eta_0] - 1} \quad (k = 0, 1, 2). \quad (\text{A10})$$

当两球相互接触时 ($\tau=1, x=1$), (A8), (A9) 两式变为常数,

$$\alpha_2^L(1, 1) = 4 \zeta(3), \quad (\text{A11})$$

$$\alpha_2^T(1, 1) = 1.5 \zeta(3). \quad (\text{A12})$$

其中, $\zeta(3) = 1.2020$ 为 Riemann ζ -函数^[16].

- [1] T. B. Jones, *J. Appl. Phys.*, **60**(1986), 2226; *Addendum*, **61**(1987), 2416.
- [2] R. J. Meyer, *J. Electrostat.*, **33**(1994), 133.
- [3] T. B. Jones, R. D. Miller, K. S. Robinson, W. T. Fowlkes, *J. Electrostat.*, **22**(1989), 231.
- [4] Jiang Ze-hui, Zhang Xue-ru, Han Jie-cai, He Xiao-dong, Du Shan-yi, *J. Electrostat.*, **39**(1997), 297.
- [5] Jiang Ze-hui, He Xiao-dong, Han Jie-cai, Zhang Bo-ming, Du Shan-yi, *J. Electrostat.*, **44**(1998), 47.
- [6] Jiang Ze-hui, He Xiao-dong, Han Jie-cai, Du Shan-yi, *Ann. Phys.*, **266**(1998), 244.
- [7] W. T. Doyle, I. S. Jacobs, *Phys. Rev.*, **B42**(1990), 9319.
- [8] T. B. Jones, *Electromechanics of particles*(Cambridge Univ. Press, New York, 1995), p. 173.
- [9] R. C. McPhedran, D. R. McKenzie, *Proc. Roy. Soc. Lond.*, **A359**(1978), 45.
- [10] D. R. McKenzie, R. C. McPhedran, G. H. Derrick, *Proc. Roy. Soc. Lond.*, **A359**(1978), 45.
- [11] W. T. Doyle, *J. Appl. Phys.*, **49**(1978), 795.
- [12] B. Shanker, J. Applequist, *J. Phys. Chem.*, **98**(1994), 6486.
- [13] L. Poladian, *Phys. Rev.*, **B44**(1991), 2092.
- [14] H. B. Levine, D. A. McQuarrie, *J. Chem. Phys.*, **49**(1968), 4181.
- [15] L. Lewin, *Polylogarithms and associated functions*(New York, Elsevier North Holland Inc. 1981),
- [16] M. Abramowitz, I. A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions*(Dover, New York, 1965),

AN ESTIMATE OF THE DIPOLE MOMENT OF PARTICLE CLUSTERS

JIANG ZE-HUI

(*Department of Applied Physics, Harbin Institute of Technology, Harbin 150001*)

HE XIAO-DONG HAN JIE-CAI DU SHAN-YI

(*Research Laboratory of Composite Materials, Harbin Institute of Technology, Harbin 150001*)

(Received 5 October 1998; revised manuscript received 23 November 1998)

ABSTRACT

When a cluster of particles is immersed in a uniform electric field, the particles are coupled together due to the mutual interaction among them. This interaction causes the dipole moment of the cluster to be dependent upon the spatial arrangement and relative permittivity of the particles and upon the cluster size. In this work, we attempt to estimate the dipole moment of finite cubic arrays of particles, in terms of that of particle chains which has been known. We assume that a chain may be replaced by a single equivalent sphere with the same dipole moment. With replacing the chain by equivalent sphere, a cluster is simplified to a planar array, and this planar array is simplified to a chain, then the dipole moment is obtained. Numerical calculations are performed. It is found that our results are acceptable.

PACC: 4110D; 7730