Изв. АН Армении, Физика, т. 26, вып. 3, с. 111—115 (1991)

УДК 577.352.2

РАСЧЕТ ЭНЕРГИИ РЕАКТИВНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ С УЧЕТОМ НЕИДЕАЛЬНОСТИ ДИПОЛЯ

В. Б. АРАКЕЛЯН

(Поступила в редакцию 15 октября 1990 г.)

В работе рассчитана энергия реактивного взаимодействия неидеального диполя, окруженного сферическим слоем. Приводится оценка точности приближения идеального диполя в сравнении с более общим случаем неидеального диполя.

Для расчета энергии реактивного взаимодействия пользуются следующей моделью диполя в среде. В бесконечной диэлектрической среде выделяют сферическую полость, в центре которой находится идеальный (точечный) диполь. Вычисляется поле диполя в сферической полости, а затем по известным формулам определяют энергию реактивного взаимодействия [1—3]. Если плечо диполя много меньше размеров полости, то диполь можно считать идеальным. Если же плечо диполя сравнимо с размерами полости, то следует учесть вклад неидеальности (нетоточности) диполя в энергию реактивного взаимодействия. Случай, где следовало бы учесть неидеальность диполя, связан с транспортом ионов с помощью заряженных переносчиков. Комплекс иона с заряженным переносчиком представляет из себя систему из двух разноименных зарядов, окруженных слоем лигандов, так что нейтральный комплекс подобен диполю в сферическом слое. Поскольку внутримолекулярная полость имеет размеры сравнимые с расстоянием между заряженными частицами, то приближение идеального диполя при расчете энергии реактивного взаимодействия может оказаться слишком грубым. Таким образом, при расчете энергии поляризации среды следует рассматривать диполь как систему из двух зарядов, расположенных на некотором расстоянии друг от друга и поляризацию среды представить как результат действия двух зарядов.

Для определения энергии поляризации среды вначале решим следующую ключевую электростатическую задачу. Вычислим потенциал в случае, когда точечный заряд (q) находится в точке z_0 в сфере радиуса a. Сферу окружает слой с диэлектрической проницаемостью ε_k и внешним радиусом b, а за сферическим слоем находится бесконечная диэлектрическая среда с диэлектрической проницаемостью ε. В области $r<a$ диэлектрическая проницаемость равна ε_1. Потенциалы в трех средах удовлетворяют уравнениям

$$\Delta \varphi_1 = -\frac{q\delta(\mathbf{r}-\mathbf{z}_0)}{\varepsilon_0 \varepsilon_1}, \quad r<a, \tag{1}$$

$$\Delta \varphi_k = 0, \qquad a < r < b, \tag{2}$$

$$\Delta \varphi = 0, \qquad r > b, \tag{3}$$

где ε_0—диэлектрическая проницаемость вакуума. На границах раздела сред выполняются условия непрерывности потенциала и нормальной составляющей электрической индукции

$$\varphi_1 = \varphi_k, \qquad r = a, \tag{4}$$

$$\varepsilon_1 \frac{\partial \varphi_1}{\partial r} = \varepsilon_k \frac{\partial \varphi_k}{\partial r}, \qquad r = a, \tag{5}$$

$$\varphi_k = \varphi, \qquad r = b, \tag{6}$$

$$\varepsilon_k \frac{\partial \varphi_k}{\partial r} = \varepsilon \frac{\partial \varphi}{\partial r}, \qquad r = b. \tag{7}$$

К условиям (4—7) нужно добавить условие на бесконечности для потенциала φ ($\varphi(r=\infty)=0$). Уравнения (1—3) с граничными условиями (4—7) решаются стандартным способом [4]. Решения уравнений (1—3) имеют громоздкий вид. Здесь приведем выражение для потенциала φ_1, которое понадобится для дальнейших расчетов:

$$\varphi_1 = \frac{q}{4\pi \varepsilon_0 \varepsilon_1 R} + \frac{q}{4\pi \varepsilon_0 \varepsilon_1} \sum_{n=0}^{\infty} C_n r^n P_n(\cos\theta), \tag{8}$$

$$C_n = \frac{z_0^n}{a^{2n+1}} \cdot \frac{a^{2n+1}(\xi_1 n + n + 1) + \dfrac{b^{2n+1}\gamma_2(1-\xi_1)}{1-\xi_2}}{a^{2n+1} n (1-\xi_1) + \dfrac{b^{2n+1}\gamma_1\gamma_2}{(n+1)(1-\xi_2)}}, \tag{9}$$

$$R = (x^2 + y^2 + (z - z_0)^2)^{1/2}, \quad \xi_1 = \varepsilon_k/\varepsilon_1, \quad \xi_2 = \varepsilon/\varepsilon_k,$$

$$\gamma_i = \xi_i(n+1) + n, \quad i = 1, 2,$$

где P_n—многочлены Лежандра. Заметим, что потенциал φ_1 состоит из двух слагаемых, первое из которых потенциал собственно самого заряда (q), а второе—потенциал, созданный поляризацией диэлектрика φ_{1n}

$$\varphi_{1n} = \frac{q}{4\pi \varepsilon_0 \varepsilon_1} \cdot \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z_0^n}{a^{2n+1}} \cdot \tilde{C}_n r^n P_n(\cos\theta), \tag{10}$$

$$\tilde{C}_n = C_n \cdot a^{2n+1}/z_0^n,$$

где для удобства вычислений из коэффициентов C_n (9) в явном виде выделена зависимость от z_0. Далее, нужно вычислить потенциал от заряда $(-q)$, расположенного в точке $(-z_0)$. Для этого следует воспользоваться решением φ_1 ключевой задачи и заменить q на $(-q)$ и z_0 на $(-z_0)$ в формулах (8—10). Энергия поляризации среды при наличии в области $r<a$ двух зарядов (q в точке z_0 и $-q$ в точке $-z_0$) определяется по формуле

$$W=\frac{1}{2}\Big(q\,\varphi_{1n}^{+}(r=z_0,\ \theta=0)-q\,\varphi_{1n}^{+}(r=z_0,\ \theta=\pi)+ \\ +q\,\varphi_{1n}^{-}(r=z_0,\ \theta=0)-q\,\varphi_{1n}^{-}(r=z_0,\ \theta=\pi)\Big), \tag{11}$$

где индексы (+) и (—) у потенциала указывают на то, каким зарядом (положительным или отрицательным) создан потенциал поляризации. Подставив в (11) значнеие потенциалов из (10), получим следующее окончательное выражение для энергии поляризации

$$W=\frac{q^2}{4\pi\varepsilon_0\varepsilon_1 a}\cdot\sum_{n=0}^{\infty}\widetilde{C}_n\cdot\left(\frac{z_0}{a}\right)^{2n}(1-(-1)^n). \tag{12}$$

Ряд (12) содержит только члены с нечетными n и быстро сходятся, когда $(z_0/a)\ll 1$. Приближению идеального диполя отвечает случай, когда $z_0\to 0$, но так, что $z_0\cdot q=\text{const}$.

Из (12) имеем

$$W_1=-\frac{d^2}{4\pi\varepsilon_0\varepsilon_1 a^3}\cdot\frac{\dfrac{(\varepsilon_k-\varepsilon)(\varepsilon_k+2\varepsilon_1)}{\varepsilon_k+2\varepsilon}-\left(\dfrac{b}{a}\right)^3(\varepsilon_k-\varepsilon_1)}{\dfrac{2(\varepsilon_k-\varepsilon)(\varepsilon_k-\varepsilon_1)}{\varepsilon_k+2\varepsilon}-\left(\dfrac{b}{a}\right)^3(2\varepsilon_k+\varepsilon_1)}, \tag{13}$$

$$(d=2z_0q).$$

Заметим, что при $(b/a)\gg 1$, W_1 переходит в известную формулу [3]. Результат (13) можно получить прямым вычислением энергии реактивного взаимодействия идеального диполя (d), окруженного сферическим слоем. Для вычисления энергии поляризации среды следует вначале определить потенциал идеального диполя в следующей системе. Диполь находится в центре сферы радиуса a с диэлектрической проницаемостью ε_1. Среда окружена сферическим слоем с диэлектрической проницаемостью ε_k и внешним радиусом $b (b>a)$, а за этим слоем следует бесконечная среда с диэлектрической проницаемостью ε. Потенциал диполя определяется из следующей системы уравнений:

$$\Delta\Phi_1=\frac{(\mathbf{d}\cdot\nabla)\,\delta(\mathbf{r})}{\varepsilon_0\varepsilon_1},\qquad r<a, \tag{14}$$

$$\Delta\Phi_k=0,\qquad a<r<b, \tag{15}$$

$$\Delta\Phi=0,\qquad r>b. \tag{16}$$

К уравнениям (14—16) нужно добавить граничные условия (4—7), где вместо φ_1, φ_k, φ необходимо поставить Φ_1, Φ_k, Φ. На бесконечности потенциал равен нулю, так что имеем Φ $(r=\infty)=0$. Уравнения (14—16) легко решаются. Потенциалы Φ_1, Φ_k, Φ имеют громоздкий вид, поэтому здесь приведем лишь значение Φ_1, которое содержит необходимый для дальнейших вычислений потенциал реактивного поля

$$\Phi_1 = \frac{d \cos\theta}{4\pi\varepsilon_0\varepsilon_1 r^2} - R r \cos\theta, \tag{17}$$

$$\mathbf{R} = \frac{\mathbf{d}}{2\pi\varepsilon_0\varepsilon_1} \cdot \frac{\dfrac{(\varepsilon_k-\varepsilon)(\varepsilon_k+2\varepsilon_1)}{\varepsilon_k+2\varepsilon} - \left(\dfrac{b}{a}\right)^3(\varepsilon_k-\varepsilon_1)}{\dfrac{2(\varepsilon_k-\varepsilon)(\varepsilon_k-\varepsilon_1)}{\varepsilon_k+2\varepsilon} - \left(\dfrac{b}{a}\right)^3(2\varepsilon_k+\varepsilon_1)}. \tag{18}$$

В (18) $\mathbf{R}$ —реактивное поле диполя. Зная $\mathbf{R}$, можно легко вычислить энергию реактивного взаимодействия $(-\mathbf{R}\cdot\mathbf{d}/2$ [3]), что в точности совпадает с (13), т. е. с первым отличным от нуля членом ряда (12), для которого $n=1$. Оценим точность дипольного приближения для практически важных значений параметров, входящих в формулу (12). Внутримолекулярная полость имеет атомарные масштабы, так что для a имеем 0,2—0,3 нм. Комплекс имеет размеры порядка 1—1,5 нм [5], следовательно, можно принять $b/a=5$. Диэлектрическая проницаемость комплекса ε_k изменяется в пределах от 4 до 10 [6]. Максимальное отношение $z_0/a=0,5$ соответствует случаю, когда в сферической полости (где $\varepsilon_1=1$) радиуса a умещаются два иона с радиусами, равными z_0. Численный анализ формулы (12) показывает, что при $b/a=5$ зависимость (12) от ε слабая. Дипольное приближение дает погрешность менее 6,2%. Точность повысится, если сохранить второй, отличный от нуля член ряда (12), который имеет вид

$$W_2 = -\frac{2q^2 z_0^6}{\pi\varepsilon_0\varepsilon_1 a^7} \cdot \frac{\dfrac{(\varepsilon_k-\varepsilon)(3\varepsilon_k+4\varepsilon_1)}{3\varepsilon_k+4\varepsilon} - \left(\dfrac{b}{a}\right)^7(\varepsilon_k-\varepsilon_1)}{\dfrac{12(\varepsilon_k-\varepsilon)(\varepsilon_k-\varepsilon_1)}{3\varepsilon_k+4\varepsilon} - \left(\dfrac{b}{a}\right)^7(4\varepsilon_k+3\varepsilon_1)}. \tag{19}$$

Вклад остальных членов ряда менее одного процента. Таким образом, полученная в данной работе формула (12) учитывает вклад неидеальности диполя в энергию реактивного взаимодействия. Для приближенного учета неидеальности диполя в практически важных случаях энергию реактивного взаимодействия можно рассчитывать по формулам (13) и (19).

ЛИТЕРАТУРА

1. *Onsager L.* J. Amer. Chem. Soc., 58, 1486 (1936).
2. *Karlwood J. G.* J. Chem. Phys., **2**, 351(1934).
3. *Bottcher C. J. F.*, Theory of Electric Polarization, N. Y., 1952.

4. *Тихонов А. Н., Самарский А. А.* Уравнение математической физики, Изд. Наука, М., 1972.
5. *Морф В.* Принципы работы ионселективных электродов и мембранный транспорт, Изд. Мир, М., 1985.
6. *Кришталик Л. И.* Биофизика, 30, 768 (1985).

ՌԵԱԿՏԻՎ ՓՈԽԱԶԴԵՑՈՒԹՅԱՆ ԷՆԵՐԳԻԱՅԻ ՀԱՇՎԱՐԿՈՒՄԸ ՀԱՇՎԻ ԱՌՆԵԼՈՎ ԴԻՊՈԼԻ ՈՉ ԻԴԵԱԼԱԿԱՆՈՒԹՅՈՒՆԸ

Վ. Բ. ԱՌԱՔԵԼՅԱՆ

Աշխատանքում հաշվարկված է սֆերիկ շերտով շրջապատված ոչ-իդեալական դիպոլի ռեակտիվ փոխազդեցության էներգիան։ Բերվում է իդեալական դիպոլի մոտավորության ճշտության գնահատականը՝ համեմատած ոչ իդեալական դիպոլի ավելի ընդհանուր դեպքի հետ։

CALCULATION OF THE ENERGY OF REACTIVE INTERACTION OF DIPOLE WITH DUE REGARD FOR ITS NON-IDEALITY

V. B. ARAKELYAN

The energy of reactive interaction of a non-ideal dipole surrounded by a spherical layer is calculated. An estimate of the accuracy of ideal dipole approximation in comparison with the more general case of a non-ideal dipole is given.

Изв. АН Армении, Физика, т. 26, вып. 3, с. 115—120 (1991)

УДК 621.382

ВЛИЯНИЕ МАГНИТНОГО ПОЛЯ НА ОБРАТНЫЙ ТОК p—n-ПЕРЕХОДА

Р. Р. ВАРДАНЯН

Ереванский политехнический институт им. К. Маркса

(Поступила в редакцию 10 сентября 1990 г.)

Исследуется влияние магнитного поля на обратный ток p-n-переходов в допробойном состоянии. Получено выражение для обратного тока p-n-перехода при воздействии магнитного поля. Показано, что под воздействием магнитного поля уменьшается диффузионная составляющая обратного тока, а генерационный ток и ток утечки p-n-перехода не меняются (рассматриваются слабые поля). Дается способ определения указанных составляющих обратного тока p-n-перехода.

До сих пор, при изучении поведения полупроводниковых приборов в магнитном поле, основное внимание уделялось влиянию магнитного поля на прямую ветвь вольтамперной характеристики p—n-переходов [1—3]. Определенный научный и практический интерес представляет также вопрос влияния магнитного поля на обратную ветвь вольтамперной ха-