

Фундаментальные проблемы электродинамики и электрохимии гетерогенных сред



Нельзя сказать, что проблемы электроники гетерогенных сред ушли на второй план, хотя основное внимание исследователей в последние годы сосредоточено на фундаментальных ограничениях теории Максвелла и вычислительных методах. В связи с этим просматриваются три блока вопросов, среди которых – моделирование сложных сред, вычислительные ограничения и проблемы, связанные с разработкой устройств нового поколения на основе гетерогенных сред для экстремальных условий (сверхвысоких частот, терагерцового диапазона, сильных полей, квантовых режимов). Это, в свою очередь, обуславливает выявление новых физических эффектов и ограничений и требует более основательных подходов для преодоления этих фундаментальных вызовов в ситуации, когда классические приближения становятся неприменимыми.



Николай Гринчик,
ведущий научный сотрудник
Института тепло- и массообмена
им. А.В. Лыкова НАН Беларуси,
доктор физико-математических
наук, доцент по специальности
электроника и микроэлектроника

Электродинамика

В уравнениях Максвелла величины напряженности электрического и магнитного полей обозначают одними буквами, полагая, что это обычные векторы. На самом деле, согласно справочникам по математике, магнитное поле, конечно же, представляет собой псевдовектор, так как оно определяется ротором от вектора напряженности электрического поля. Примером псевдовектора является момент силы. Действительно, если изменить знаки у радиуса вектора и приложенной силы, то момент силы будет иметь то же самое значение. Псевдовектор также представляет собой и момент количества движения.

Рассмотрим систему, состоящую из ядра и вращающегося вокруг него электрона, то есть атом. Электрон движется по орбите со скоростью порядка скорости света, и поэтому, несмотря на малый размер атома, система «ядро–электрон» обладает значительным собственным моментом количества движения. Так как последний происходит за счет вращения электрона по орбите, он называется орбитальным моментом количества движения. Кроме того, электрон, а также ядро имеют собственный момент количества движения – спин, наличие которого нельзя объяснить с помощью введения соответствующего механического движения. Таким образом, все атомы, вообще говоря, обладают собственными моментами количества движения. Но сумма этих величин для всех атомов в силу хаотичности их движения во многих случаях равна нулю. Однако движение элементарных частиц можно упорядочить, например, магнитное поле,

и тогда сумма внутренних моментов всех атомов будет отличной от нуля. В этом случае в выражение для момента количества движения макроскопической частицы сплошной среды должна входить сумма собственных аналогичных величин.

Рассмотрим опыт, который указывает на то, что внутренние моменты количества движения нужно учитывать. Если в магнитное поле поместить железный стержень, то он намагнитится, и можно показать, что сумма внутренних моментов количества движения в нем станет отличной от нуля.

В самом деле, пусть этот стержень свободно подвешен при наличии магнитного поля в пустоте и находится в покое. Снимем магнитное поле. Тогда из-за хаотического теплового движения распределение внутренних моментов количества движения в стержне через некоторое время станет беспорядочным, и поэтому сумма внутренних моментов количества движения обратится в нуль.

При этом, так как на стержень не действуют никакие внешние объекты, полный момент количества движения должен сохраниться. Поэтому можно предсказать возникновение момента количества движения за счет вращения стержня как целого, то есть он должен начать вращаться.

Опыт показывает, что после снятия магнитного поля так и происходит. Это так называемый гиромангнитный эффект. Его нельзя объяснить без учета внутренних моментов количества движения.

Конечно, нет запрета на использование в одной системе уравнений вектора и псевдовектора, но это приводит к тому,

что на границе раздела смежных сред в этом случае необходимо задавать поверхностный ток и поверхностный заряд, которые неизвестны: замыкающих соотношений для их определения при наличии тока смещения нет. В настоящее время в большинстве работ используют выражение для поверхностного заряда и поверхностного тока, которые были получены для задач электростатики без учета влияния тока смещения.

Поскольку уравнения Максвелла справедливы для любых (в рамках применимости макроэлектродинамики) неоднородных сред, то в областях резкого изменения их параметров иногда можно игнорировать тонкую структуру распределения полей в переходном слое и ограничиться «сшиванием» полей по разные стороны от него, заменяя тем самым переходный слой математической поверхностью – границей, лишенной толщины. Если внутри переходной области имелись заряды с объемной плотностью ρ или токи с объемной плотностью j , то при сжатии слоя в поверхность сохраняются их интегральные значения – вводятся поверхностные заряды и поверхностные токи [1–18]. В этом случае имеет место сильный разрыв электромагнитного поля (разрыв функции).

При формулировке начально-краевой задачи электромагнитные поля по разные стороны от раздела границы нам неизвестны, поэтому мы не знаем ничего о поверхностных токах и поверхностных зарядах. В средах с ионной проводимостью условия на границе раздела смежных сред еще больше усложняются. Следовательно, на данный момент в электродинамике отсутствуют

методы, позволяющие учитывать при расчетах влияние поверхностных зарядов и поверхностных токов на линии разграничения смежных сред.

В радиофизике при моделировании часто используют монохроматические волны и комплексные переменные. На самом деле на практике волны имеют естественное уширение, то есть монохроматических волн не бывает.

Если осциллятор тратит энергию только на излучение, так что из тормозящих его сил достаточно учитывать только лучистое трение, то возникает минимально возможная ширина спектральной линии (ее называют естественной), появление которой обусловлено самим фактом излучения, то есть взаимодействием излучающей системы с полем излучения. Если данная система взаимодействует еще и с другими физическими объектами, то это приводит к уширению спектральных линий.

При взаимодействии электромагнитной волны с поверхностью и ее поглощении теряется всякий смысл понятия монохроматической волны. Поэтому задачи с поглощением для объектов конечных размеров практически не рассматриваются. Для вычисления интенсивности электромагнитной волны (средняя энергия, проходящая через единицу поверхности в единицу времени), как правило, используют вектор Умова – Пойнтинга и рассматривают распространяющиеся плоские электромагнитные волны, для которых не выполняются условия согласования при формулировке начально-краевой задачи, в природе таких волн нет. Кроме того, при вычислении работы намагничивания была использована тео-

рема о циркуляции без учета тока смещения, поэтому в векторе Умова – Пойнтинга не учитываются токи смещения. В данном случае на границах раздела смежных сред имеет место разрыв электромагнитного поля, поэтому использование в этом случае для вычисления вектора Умова – Пойнтинга и понятия «плоской электромагнитной волны» без учета влияния токов смещения, поверхностного тока, поверхностного заряда может приводить к большим погрешностям при расчетах.

В журнале «Известия вузов. Радиофизика» за последние 5 лет только в 1 статье были выписаны исходные уравнения поля Максвелла, но начально-краевые задачи даже не принимались во внимание. Ни в одной статье не говорится о том, что при падении электромагнитной волны на границу раздела должны выполняться условия согласования: равенство функций и ее производных по времени. В наших работах использовались волновые пакеты, для которых работают условия согласования для любого момента времени [1–18]. В квантовой механике широко применяют группу волн, мало отличающихся друг от друга по длине волны и направлению распространения, с применением комплексных переменных [24]. Однако в этом случае для волны и группы волн квантовой механики на границах раздела смежных сред не выполняются условия согласования: в природе таких волн не бывает [1–18].

Как мы реально решали задачу? Уравнения Максвелла сводились только к волновому уравнению для напряженности электрического поля, а на границах задавалось условие непрерывности полного тока, которое

следует из 1-го уравнения Максвелла. Действительно, дивергенция от полного тока равна нулю, поскольку нулю равна дивергенция от ротора непрерывной функции. Для вычисления магнитного поля использовалось 2-е уравнение Максвелла. Зная напряженность электрического поля в зависимости от координаты и времени, всегда можно вычислить магнитное поле. Переход к гиперболическому уравнению для напряженности электрического поля требует задания в начальный момент времени не только самой функции, но и ее производной по времени.

В противном случае – при численном моделировании с задействованием классических уравнений Максвелла – могут быть большие погрешности при расчетах, так как в них не требуется задания производных по времени в начальный момент времени для волнового уравнения.

Впервые в мире данный подход позволил моделировать взаимодействие электромагнитного поля с фрактальными шероховатыми поверхностями на основе использования условий непрерывности полного тока [8].

В радиофизике для решения задач часто применяют комплексные переменные. Однако этот подход корректен при условии постоянства амплитуды падающей волны. Если амплитуда электромагнитной волны модулирована по времени, то появляются частоты, не присущие исходным колебаниям [19]. Данные вопросы подробно изложены в публикациях [1–19].

Фактически нами предлагается новый метод расчета и моделирования работы высокочастотного радиотехнического устройства.

ВЫСОКОЧАСТОТНАЯ ЭЛЕКТРОДИНАМИКА МЕДЛЕННО ДВИЖУЩИХСЯ ОГРАНИЧЕННЫХ СРЕД С УЧЕТОМ ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО ЗЕРКАЛЬНОГО ОТРАЖЕНИЯ

Предлагаемый метод расчета

Уравнения гидродинамики, акустики, газовой динамики, теплопроводности в пульсирующих потоках могут иметь не только вторые производные по времени, но и смешанные производные по времени и пространственным переменным. Разностные схемы для численного моделирования для данных задач отсутствуют. Кроме того, гиперболическое уравнение аэроакустики, выведенное Д.И. Блохинцевым, содержащее смешанные производные, справедливо, если скорость среды зависит только от времени, но не зависит от координаты. В аналитическом виде в настоящее время даже нет уравнений для общего случая, когда скорость среды зависит от времени и координаты [24].

В связи с вышеизложенным была построена согласованная физико-математическая модель распространения волн в медленно движущихся средах конечных размеров, когда скорость последних зависит от координат и времени. В ходе построения указанной модели были решены следующие задачи:

- предложен численный алгоритм для определения скорости распространения волн в медленно движущихся средах конечных размеров;
- предложены уравнения для описания волн, распространяющихся в медленно движущихся средах конечных размеров;

- разработан подход к моделированию процесса распространения волн в медленно движущихся средах конечных размеров с использованием бесконечно малых преобразований Лоренца – Эйнштейна в разностной ячейке.

В технологических установках при наличии акустических колебаний распространение импульсов, как правило, сопровождается движением среды. Соответствующее гиперболическое уравнение аэроакустики решалось нами численными методами. Впервые моделирование распространения звука в медленно движущейся неоднородной среде проводилось путем построения специальной разностной схемы, учитывающей движение среды в разностной ячейке с использованием преобразований Лоренца – Эйнштейна и условием Куранта, которое связывает шаг по времени и пространству. На границах раздела смежных сред для волновых пакетов учитывалось уширение спектральной линии и соотношения для обеспечения условий согласования: равенство функции и равенство производных функций на границах раздела смежных сред.

Данный метод расчета нами также применялся в электродинамике медленно движущихся ограниченных сред, при этом скорость движения среды определялась с учетом коэффициента увлечения Френеля [2, 20]. В теории относительности А. Эйнштейна рассматривается электродинамика движущихся фактически безграничных сред, так как отсутствует

формулировка начально-краевой задачи. В работе лауреата Нобелевской премии В.Л. Гинзбурга [21] также рассматривается распространение электромагнитных монохроматических волн в безграничной плазме. Начально-краевая задача не принимается в расчет, исследуются только монохроматические волны без учета уширения спектральных линий, что неизбежно приводит к большим погрешностям при расчетах.

При больших токах плазмы, например, молнии (сотни тысяч ампер), ионы и электроны ускоряются в этом поле до колоссальных скоростей (десятки и сотни тысяч км/с), поэтому предложенный метод расчета может оказаться перспективным и в физике плазмы.

Электрохимия

В электрохимии при использовании классических уравнений электромагнитного поля Максвелла для напряженностей электрического и магнитного полей необходимо учитывать влияние магнитного поля на процесс диффузии, вследствие чего система взаимосвязанных уравнений для потоков заряда, тепла и массы значительно усложняется, так как требуется введение дополнительных феноменологических коэффициентов переноса. Именно поэтому более предпочтительно сведение уравнений поля к волновому уравнению для напряженности электрического поля.

При наличии нормальной составляющей вектора электрического смещения на контакте

возникают нескомпенсированные поверхностные заряды. Такого рода заряд, как известно, образуется вследствие спонтанного перераспределения ионов или электронов на границе слоистой среды для выравнивания энергетических уровней Ферми. В результате возникает двойной электрический слой (происходит пространственное распределение электрических зарядов на границе соприкосновения различных сред). В сегодняшней науке для моделирования электрохимических процессов используют уравнение Нернста – Планка, неявно постулируется, что катионы и анионы в растворе электролита являются различными, независимыми компонентами. Уравнения переноса для катионов и анионов выписываются отдельно. Однако в объемном растворе электролита их изменения функционально связаны условием электрической нейтральности, поэтому, согласно термодинамике необратимых процессов, они не являются независимыми компонентами. На возможность такого описания впервые указал Л.Д. Ландау [22]. Данный подход, обоснованный выше, не предусматривает введения и определения коэффициентов молекулярной диффузии для катионов и анионов, а также степени диссоциации электролита в проводниках второго рода, и применялся нами в работах [1–18].

Плотность тока проводимости J_g , потока массы J_m , потока тепла J_T при неравновесном состоянии среды имеет вид [1–18]:

$$J_g = \lambda(E - \beta \text{grad}n) - \lambda\alpha(T) \text{grad}T, \quad (1)$$

$$J_m = -D_M \text{grad}n - D_A^* \lambda E - D_T \text{grad}T, \quad (2)$$

$$J_T = -k \text{grad}T + I_q (\Pi + \varphi) - \lambda D_T^* \text{grad}n, \quad (3)$$

где D_m – коэффициент молекулярной диффузии; D_A^* – коэффициент амбиполярной диффузии; D_T^* – коэффициент, учитывающий перенос тепла вследствие движения примеси; β – коэффициент удельной электрической амбиполярной проводимости, обусловленный Δn ; Π – коэффициент Пельтье.

Системой уравнений (1–3) можно воспользоваться и для моделирования электрохимических процессов в дисперсных, например капиллярно-пористых средах, содержащих электролит. Для определения феноменологических коэффициентов системы уравнений (1–3) используются «опознающие» устройства, экспериментально регистрирующие потоки массы, тепла и заряда. Более подробно проблема определения, например, удельного электрического сопротивления электролита в гетерогенной среде изложена нами в работах [1–18]. В физике полупроводников при рассмотрении диффузии электронов и дырок [23] фактически используют систему уравнений для исследования диффузии катионов и анионов Нернста – Планка для электролитов, полагая, что электроны и дырки выступают независимыми компонентами. Уравнения непрерывности записываются отдельно для каждого из них. Однако, согласно термодинамике необратимых процессов, электроны и дырки, так же как катионы и анионы, не являются независимыми компонентами. Поэтому рассчитывать на данный подход на практике для моделирования процессов диффузии в полупроводниках затруднительно.

Нестационарные тепловые процессы влияют на структуру двойного электрического слоя и распределение зарядов, что еще больше усложняет проблему моделирова-

ния электрических полей. Влияние наведенного поверхностного заряда необходимо учитывать при формулировке краевых условий. В современной науке отсутствует метод, который бы позволил корректно учитывать влияние двойного электрического слоя [1–18].

Дальнейшее развитие проведенных исследований может быть направлено на разработку согласованной физико-математической модели процесса взаимодействия электромагнитного излучения с неоднородными средами, содержащими проводники второго рода (электролиты). Такая модель представляется перспективной для использования в целях проектирования электромагнитных экранов на основе композиционных материалов с влагосодержащими наполнителями, которые характеризуются требуемыми значениями коэффициентов отражения и передачи электромагнитного излучения.

Исходя из общих представлений об электромагнитных свойствах среды, получим выражение для полного тока при наличии диффузии и потоков тепла. При формальном рассмотрении ограничимся лишь одним физическим допущением: если некоторое тело помещено во внешнее электромагнитное поле, то среднее поле в объеме тела мало по сравнению с внутриатомными полями. Иными словами, предположим, что средние поля внутри тела слабые.

Аналогично [22] покажем, что полный ток зависит от векторов E , B , Δn , ΔT и скорости их изменения во времени

$$\frac{\partial E}{\partial t}, \frac{\partial B}{\partial t}, \frac{\partial}{\partial t} \nabla n, \frac{\partial}{\partial t} \nabla T,$$

то есть

$$j_{\text{полн}} = f(E, B, \nabla n, \nabla T, \frac{\partial E}{\partial t}, \frac{\partial B}{\partial t}, \frac{\partial}{\partial t} \nabla n, \frac{\partial}{\partial t} \nabla T). \quad (4)$$

Поскольку поля слабые, можно разложить функцию $j_{\text{полн}}$ в ряд по степеням переменных и ограничиться первыми степенями разложения. По существу, это разложение производится по степеням малого отклонения типа $|E|/|E_{\text{вн.ам}}|$, где $E_{\text{вн.ам}}$ – напряженность внутриаомного поля.

Разлагая $j_{\text{полн}}$ в ряд по степеням переменных, необходимо учитывать, что $j_{\text{полн}}$ является полярным вектором. Поэтому все члены ряда, выражающего искомое разложение, также должны быть такими же векторами (не скалярами, не аксиальными векторами).

Отметим, что напряженность электрического поля E – полярный вектор; ими же являются Δn и ΔT . Напротив, напря-

женность магнитного поля H , а также B – аксиальные векторы, или псевдовекторы.

В искомом разложении могут фигурировать векторы E , $\partial E/\partial t$, Δn , ΔT , $(\partial/\partial t)\Delta n$, $(\partial/\partial t)\Delta T$, и, таким образом, разлагая полный ток в ряд Тейлора, имеем:

$$j_{\text{полн}} = \lambda(E - \beta \text{grad} n) - \lambda \alpha(T) \text{grad} T + \varepsilon \varepsilon_0 \frac{\partial E}{\partial t} - \varepsilon \varepsilon_0 \beta \frac{\partial}{\partial t} \nabla n - \varepsilon \varepsilon_0 (T) \frac{\partial}{\partial t} \nabla T. \quad (5)$$

Выражение для полного тока (5) с учетом потоков массы и тепла в токе смещения получено и обосновано нами впервые. Вектор электрической индукции D при наличии диффузии и потоков тепла должен иметь вид:

$$D = \varepsilon \varepsilon_0 (E \pm \beta \nabla n \pm \alpha(T) \nabla T).$$

В полупроводниках и биологических мембранах градиенты концентрации примеси значительны, поэтому в общем случае необходимо учитывать данные поляризации эффекты.

Данный метод моделирования работы электрохимических систем применялся в [11] для исследования нагрева электрохимической ячейки при постоянном и импульсном электролизе.

Конечно, мы постарались несколько развеять пелену тумана у ученых, которые используют классические уравнения электромагнитного поля Максвелла. Как говорят философы: нельзя не удивляться тому, что, зная так мало, человечество достигло так много и, зная так много, достигло так мало. ■

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

- Grinchik N.N. Electrodynamics of Inhomogeneous (Laminated, Angular) Structures // *J. of Electromagnetic Analysis and Applications*. 2014. Vol 6, is. 5. P. 57–105.
- Grinchik N.N., Boiprav O.V. High-frequency electrodynamics of slow moving media taking into account the specular reflection // *Advanced Electromagnetics*. 2021. Vol. 10, is. 1. P. 6–14.
- Grinchik N.N., Grinchik Yu.N. Fundamental Problems of the Electrodynamics of Heterogeneous Media // *Physics Research International*. 2012. Vol. 2012. Art. 185647. С. 45–62.
- Measurement of electrical resistance of liquid electrolytes and materials containing them / K.V. Dobrego [et al.] // *Journal of Electromagnetic Analysis and Applications*. 2020. Vol. 12, is. 2. P. 7–14.
- Modeling the Interaction of Solit-Like Pulse Signals with Electromagnetic Shields in the Form of Heterogeneous Media / M.A. Aliseyko [et al.] // *Edelweiss Chemical Science J*. 2020. Vol. 3, is. 1. P. 1–5.
- Non-Monochromatic Electromagnetic Radiation of Inhomogeneous Media / N.N. Grinchik [et al.] // *Journal of Electromagnetic Analysis and Applications*. 2018. Vol. 10, is. 2. P. 13–33.
- Numerical simulation of diffusional-electrical phenomena / N.N. Grinchik [et al.]. Minsk: [s.n.], 1997. 10 p. (Preprint / Acad. of Sciences of Belarus, Inst. of Mathematics. №12 (535)).
- Regularities of Nanofocusing of the Electromagnetic Field of a Fractal Rough Surface / N.N. Grinchik [et al.] // *Journal of Electromagnetic Analysis and Applications*. 2019. Vol. 11, is. 8. P. 117–133.
- Взаимодействие тепловых и электрических явлений в поляризованных средах / Н.Н. Гринчик [и др.] // *Математическое моделирование*. 2000. Т. 12, №11. С. 67–76.
- Fundamental problems of the electrodynamics of heterogeneous media with boundary conditions corresponding to the total-current continuity / N.N. Grinchik, O.P. Korogoda, M.S. Khomich [et al.] // *Electromagnetic waves propagation in complex matter* / ed. by A.A. Kishk. – [S.l.]: INTECHopen, 2011. Chap. 2. P. 25–54.
- Гринчик Н.Н. Моделирование электрофизических и теплофизических процессов в слоистых средах. – Минск, 2008.
- Гринчик Н.Н. Процессы переноса в пористых средах, электролитах и мембранах. – Минск, 1991.
- Гринчик Н.Н., Лазук В.И. Солитоподобный импульсный сигнал в среде с сильными разрывами электромагнитного поля. Ч. II: Численное моделирование // *Тепло- и массоперенос* – 2016: сб. науч. тр. / Нац. акад. наук Беларуси; редкол.: О.Г. Пеняzków (гл. ред.) [и др.]. – Минск, 2017. С. 189–196.
- Гринчик Н.Н., Мучинский А.М., Цурко В.А. Моделирование электрических явлений в распределенных системах // *Весці АН Беларусі. Сер. фіз.-мат. навук*. 1997. №2. С. 66–70.
- Гринчик Н.Н., Цурко В.А. К проблеме моделирования нестационарных электрических полей в слоистых средах. – Минск, 2000. (Препринт / Нац. акад. наук Беларусі, Ин-т математики; №3 (557)).
- Метод конечных разностей для моделирования диффузионно-электрических явлений / Н.Н. Гринчик [и др.] // *Математическое моделирование*. 1998. Т. 10, №8. С. 54–66.
- Моделирование нестационарных диффузионно-электрических явлений в электролитах / Н.Н. Гринчик [и др.] // *Инженерно-физический журнал*. 1998. Т. 71, №4. С. 704–709.
- Нестационарная модель теплопереноса в электрохимических системах / В.Г. Анисимович [и др.] // *Инженерно-физический журнал*. 2000. Т. 73, №2. С. 561–566.
- Вакман Д.Е., Вайнштейн В.А. Амплитуда, фаза, частота – основные понятия теории колебаний // *Успехи физических наук*. 1977. Т. 123, Вып. 4. С. 657–682.
- Гринчик Н.Н. Электродинамические и электрохимические процессы в неоднородных средах / Н.Н. Гринчик, О.В. Бойправ. – Минск, 2022.
- Гинзбург В.Л. Распространение электромагнитных волн в плазме. – М., 2015.
- Ландау Л.Д. Электродинамика сплошных сред / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. – М., 1982.
- Грундман М. Основы физики полупроводников. Нанофизика и технические приложения: [монография] / Грундман М.; пер. с англ. Ванюшин И.В., Верховцева А.В., Горшкова Н.М. [и др.]; ред. пер. Гергель В.А. – 2-е изд. – М., 2012.
- Блохинцев Д.И. Акустика неоднородной движущейся среды / Д.И. Блохинцев. – Изд. 2-е. – М., 1981.