DOI: 10.31857/S0023291226050019
УДК 544.354.5+544.623.032.73

Оригинальная статья / Original Article

Об электростатическом взаимодействии диэлектрических частиц сфероидальной формы в растворе электролита

С.И. Гращенков

Псковский государственный университет, Псков, Российская Федерация
E-mail: grasi@mail.ru

Аннотация. Рассматривается электростатическое взаимодействие двух идентичных заряженных диэлектрических частиц сфероидальной формы в растворе симметричного электролита. Исходя из уравнения Пуассона–Больцмана с помощью метода конечных элементов проводятся расчеты сил, с которыми частицы отталкиваются друг от друга при условии, что распределения заряда на их поверхностях не меняются с изменением расстояния между ними, а внешнее электростатическое поле отсутствует. Полагается, что распределение заряда на поверхности каждой частицы совпадает с распределением одиночной частицы при заданном значении потенциала на ее поверхности. Показано, что в зависимости от постоянной Дебая и расстояния между поверхностями частиц увеличение продольного размера частиц при переходе от сплюснутых сфероидов к вытянутым может как увеличивать, так и уменьшать силу взаимодействия между ними.

Ключевые слова: коллоидные частицы, частицы сфероидальной формы, уравнение Пуассона–Больцмана, две заряженные микрочастицы, кривизна поверхности, постоянство заряда

Финансирование. Данная работа финансировалась за счет средств бюджета университета. Никаких дополнительных грантов на проведение или руководство данным конкретным исследованием получено не было.

Конфликт интересов. Автор данной статьи заявляет, что у него нет конфликта интересов.

Вклад автора в публикацию. Концепция исследования – ГСИ; анализ данных литературы и экспериментальных данных – ГСИ; написание (подготовка оригинального текста и редактирование) – ГСИ.

Ссылка для цитирования: Гращенков С.И. Об электростатическом взаимодействии диэлектрических частиц сфероидальной формы в растворе электролита. *Коллоидный журнал / Colloid Journal*. 2026. Т. 88. № 5. С. 579–589. https://doi.org/10.31857/S0023291226050019

On the Electrostatic Interaction of Spheroidal Dielectric Particles in an Electrolyte Solution

S.I. Grashchenkov

Pskov State University, Pskov, Russian Federation
E-mail: grasi@mail.ru

Abstract. The electrostatic interaction of two identical charged dielectric spheroidal particles in a symmetrical electrolyte solution is considered. Based on the Poisson–Boltzmann equation, the finite element method is used to calculate the forces with which particles repel each other, provided that the charge distribution on their surfaces does not change with the distance between them, and there is no external electrostatic field. The surface charge distribution on each particle is assumed to coincide with that of an isolated single particle at a prescribed surface potential value. It is found that, depending on the Debye length and

© Гращенков С.И., 2026 / © Grashchenkov S.I., 2026

the surface-to-surface separation between the particles, varying the longitudinal size of the particles – from oblate to prolate spheroids – can either increase or decrease the interaction force.

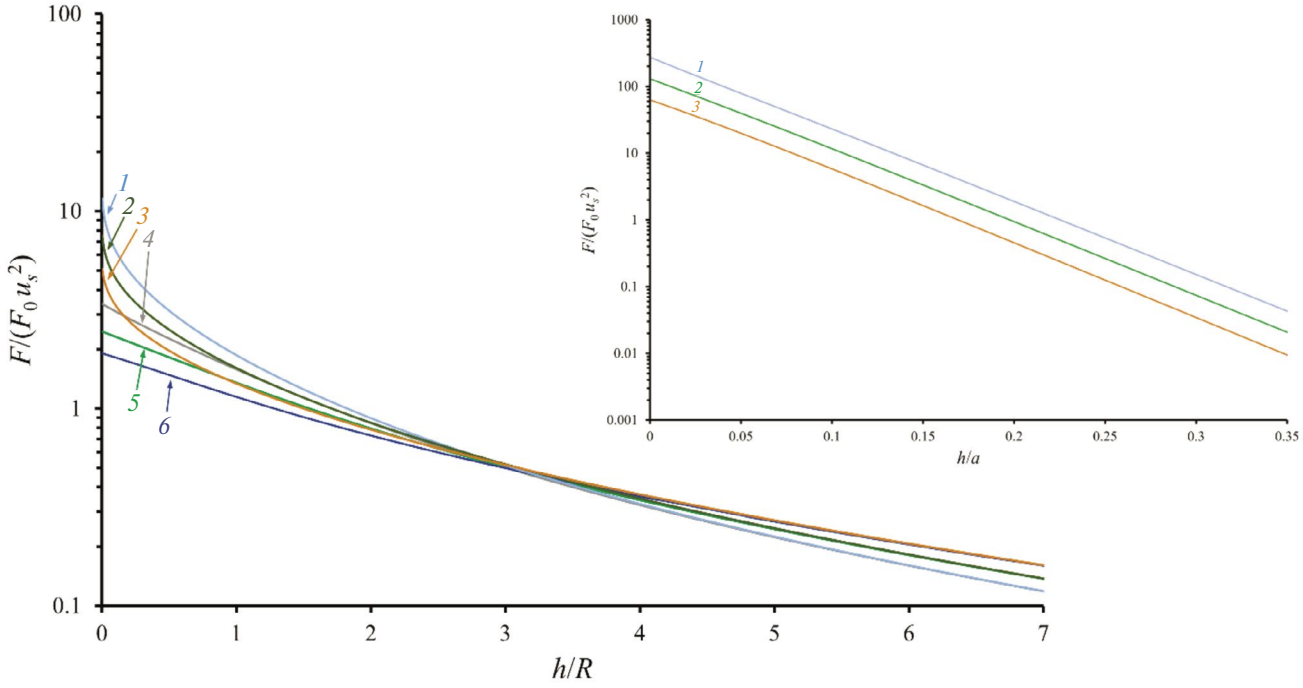
Keywords: colloidal particles, spheroidal particles, Poisson–Boltzmann equation, two charged microparticles, surface curvature, constant charge

Funding. This work was funded by the university budget. No additional grants have been received to conduct or direct this particular study.

Conflict of interest. The author of this article declares that he has no conflict of interest.

Author's contributions. Conceptualization – GSI; literature and experimental data analysis – GSI; writing (original text preparation and editing) – GSI.

For Citation: Grashchenkov S.I. On the Electrostatic Interaction of Spheroidal Dielectric Particles in an Electrolyte Solution. *Kolloidnyi zhurnal / Colloid Journal*. 2026;88(5):579–589. (In Russ.)
https://doi.org/10.31857/S0023291226050019



ВВЕДЕНИЕ

Взаимодействие коллоидной частицы с раствором электролита приводит к появлению заряда на ее поверхности [1]. Распределение потенциала в окрестности частиц часто ищут с помощью уравнения Пуассона–Больцмана [2]:

$$\Delta u = k_D^2 \sinh u, \qquad (1)$$

где $k_D = 1/\lambda_D$ – постоянная экранирования, λ_D – дебаевский радиус экранирования, $u = \psi/\psi_0$, ψ – распределение потенциала в рассматриваемой области, $\psi_0 = \dfrac{k_B T}{ie_0}$, k_B – постоянная Больцмана, i – валентность ионов электролита, e_0 – элементарный заряд, T – температура раствора. Величина ψ_0 не зависит от свойств растворителя, будь то вода или неполярная среда (например, гексадекан). Для систем с одновалентными ионами ($i = 1$) при комнатной температуре ($T = 298$ K) ее значение составляет приблизительно 26 мВ. Теоретические основы уравнения (1) и соответствующий обзор литературы – от классических работ Гуи [3], Дебая и Хюккеля [4] до различных модификаций уравнения Пуассона–Больцмана – приведены

в работах [5, 6]. Заряд на поверхностях частиц приводит к их электростатическому взаимодействию. Исследованию электростатического взаимодействия двух сферических макрочастиц с использованием уравнения (1) посвящено большое количество работ. В частности, в рамках теории Дерягина–Ландау–Фервея–Овербека [7] взаимодействие коллоидных частиц определяется суперпозицией электростатического отталкивания и молекулярного притяжения Ван-дер-Ваальса. Достаточно часто в таких расчетах ограничиваются случаями постоянного потенциала на поверхностях частиц и постоянного поверхностного распределения заряда. В случае постоянного потенциала на поверхностях частиц заданы однородные распределения потенциала, не зависящие от расстояния между ними, а на бесконечности потенциал полагается равным нулю. В условии постоянного поверхностного распределения заряда предполагается, что распределения заряда на поверхностях частиц не зависят от расстояния между ними и совпадают с распределениями для соответствующих уединенных частиц. В этом случае на поверхности каждой из частиц выполняется граничное условие [8]:

$$\left(\nabla u\right)_{\mathrm{e}} \mathbf{n}_{\mathrm{e}} + \frac{\varepsilon_i}{\varepsilon_{\mathrm{e}}}\left(\nabla u\right)_i \mathbf{n}_i = \frac{\sigma}{\psi_0 \varepsilon_{\mathrm{e}} \varepsilon_0}. \qquad (2)$$

Здесь σ – поверхностная плотность зарядов, ε_i и ε_{e} – диэлектрические проницаемости соответственно веществ частиц и окружающей их среды, ε_0 – электрическая постоянная, $\mathbf{n}_{\mathrm{e}}$ и $\mathbf{n}_i$ – единичные векторы нормали к элементу поверхности частицы, направленные от частицы и внутрь нее соответственно. Условие постоянного потенциала соответствует системам с быстрой релаксацией заряда. Условие постоянного распределения плотности заряда (2) адекватно описывает частицы с фиксированным или медленно релаксирующим зарядом, например, диэлектрические частицы в неполярных средах, где время перезарядки велико по сравнению с характерным временем сближения. Условие постоянного поверхностного распределения заряда позволяет совместно с условием постоянного потенциала определить интервал, в котором могут находиться значения силы электростатического отталкивания частиц. В случае сферических частиц их взаимодействие на основе уравнения (1) достаточно хорошо исследовано как для условия постоянства потенциала поверхности частицы, так и для условия неизменности поверхностного распределения заряда частицы [9–13]. На практике форма частиц может отличаться от сферической. Для несферических частиц рассматривались, как правило, либо различные асимптотические решения, либо решения, полученные с использованием линеаризованного уравнения Пуассона–Больцмана, также называемого уравнением Дебая–Хюккеля [14]

$$\Delta u - k_{\mathrm{D}}^2 u = 0. \qquad (3)$$

Хотя формально это уравнение применимо при $u \ll 1$, его часто применяют при условии, когда u порядка единицы и меньше. Однако на практике, как правило, $u > 1$. В работе [15] рассматривалось взаимодействие одинаковых эллипсоидов на основе уравнения (2) в приближении Дерягина, предполагающем, что расстояния между поверхностями частиц много меньше их размеров. В статье [16] на основе уравнения (1) исследовано электростатическое взаимодействие между двумя одинаковыми тонкими заряженными дисками произвольной ориентации. В работе [17] с использованием теории возмущений исследовано взаимодействие сфероидов при заданном потенциале на их поверхностях и низком потенциале в средней плоскости между частицами. Авторы [18] проводили анализ взаимодействия между двумя осесимметричными сфероидальными частицами на основе уравнения (1) как при условии постоянного заряда, так и при условии постоянства потенциала на поверхности частиц. Однако условие постоянного заряда описывалось не уравнением (2), а его предельным случаем при $\varepsilon_i/\varepsilon_{\mathrm{e}}=0$. Также это условие использовалось в работе [19] при рассмотрении взаимодействия сфероидов на основе уравнения (3) при больших расстояниях между ними. Эта же задача, но без ограничения на расстояние между частицами, рассматривалась в работе [20]. Анализ же на основе уравнения (3) в случае условия постоянства потенциала на поверхностях частиц проведен в работе [21]. Таким образом, исследование взаимодействия частиц при использовании граничного условия (2) в настоящее время проведено только в приближении Дебая–Хюккеля (3). Вместе с тем, как показано в работе [13], когда расстояние между поверхностями частиц сравнимо с радиусом Дебая или меньше его, пренебрегать нелинейностью уравнения Пуассона–Больцмана нельзя, даже если потенциалы частиц малы и по формальным критериям применимо линеаризованное уравнение. Поэтому данная работа посвящена исследованию электростатического взаимодействия сфероидальных частиц на основе нелинейного уравнения Пуассона–Больцмана при условии постоянного поверхностного распределения заряда частиц. При этом мы ограничимся случаем одинаковых частиц, имеющих общую ось симметрии.

МЕТОДИКА РАСЧЕТА

Как и в работе [13], электростатическое взаимодействие макрочастиц анализируется методом конечных элементов. Суть подхода заключается в разбиении исследуемого пространства на мелкие подобласти для создания расчетной сетки. Эта сетка используется для генерации семейства базисных функций, на основе которых осуществляется аппроксимация искомого решения в виде линейной комбинацией этих функций с неизвестными коэффициентами. Как и в работе [13], для нахождения данных коэффициентов используется следующая слабая форма уравнения (1):

$$\int_{\Omega_i} \varepsilon \tilde{\nabla} u \cdot \tilde{\nabla} \phi d\tilde{V} + \int_{\Omega_{\mathrm{e}}} \tilde{\nabla} u \cdot \tilde{\nabla} \phi d\tilde{V} + \\ + \int_{\Omega_{\mathrm{e}}} \phi k^2 \sinh u d\tilde{V} = \int_{\Gamma_{\mathrm{N}}} f \phi d\tilde{S}, \qquad (4)$$

где введены следующие безразмерные величины: $\varepsilon = \varepsilon_i/\varepsilon_e$, $k = R/\lambda_D$, $f = \sigma/\sigma_0$, $\sigma_0 = \dfrac{\psi_0\varepsilon_e\varepsilon_0}{R}$. Символ тильды (~) над выражаемыми через координаты величинами и операторами означает, что координаты нормированы на максимальное расстояние R от оси симметрии частицы до ее поверхности. Здесь Ω_i – конечная область, содержащая вещество частиц, Ω_e – конечная область, занятая средой, окружающей частицы, $\tilde{V}$ и $\tilde{S}$ – нормированные элементы объема и площади, Γ_N – граница, проходящая по поверхностям частиц. Уравнение (4) сводится к системе уравнений для неизвестных коэффициентов последовательной подстановкой тестовых функций ϕ, которые в данном методе совпадают с базисными функциями. С учетом симметрии задачи расчет распределения потенциала проводится в полупространстве, содержащем лишь одну из частиц. Это позволяет при переходе в цилиндрическую систему координат свести трехмерную задачу к двухмерной, в которой все распределения зависят лишь от двух пространственных переменных – полярного радиуса ρ и аппликаты z. На рис. 1 приведена структура расчетной области в случае сплюснутых сфероидов.

Толстой линией показана граница, соответствующая поверхности частицы. На этой линии задается распределение величины f. Линия AC соответствует оси симметрии задачи, проходящей через центры частиц. Линия BC проводится по внешней границе системы. Значение потенциала u на ней полагается равным нулю. Линия AB лежит в плоскости симметрии, равноудаленной от центров частиц. На линиях AB и AC граничные условия явно не задаются: при использовании слабой формы это эквивалентно условию обращения в нуль нормальных составляющих градиента потенциала [22]. Расчет проводился с помощью

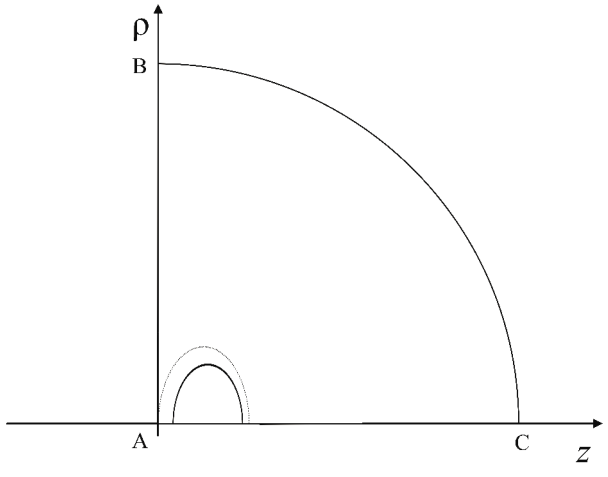


Рис. 1. Вид расчетной области для определения распределения потенциала в окрестности двух частиц

Fig. 1. The computational domain for determining the potential distribution in the vicinity of two particles

свободно распространяемого пакета NGSolve [23]. Для расчета значения действующих на частицы сил электростатического отталкивания использовалось выражение [9]:

$$\mathbf{F} = \oint_S \mathbf{T}\cdot\mathbf{n}dS. \qquad (5)$$

Здесь интегрирование ведется по любой замкнутой поверхности, которая охватывает частицу, $\mathbf{n}$ – вектор нормали к этой поверхности, который направлен внутрь области, охватываемой этой поверхностью, S – площадь этой поверхности, $\mathbf{T}$ – тензор напряжений

$$\mathbf{T} = \left(\Pi + \frac{1}{2}\varepsilon_e\varepsilon_0 E^2\right)\mathbf{I} - \varepsilon_e\varepsilon_0\mathbf{E}\otimes\mathbf{E},$$

где $\mathbf{I}$ – единичный тензор, $\mathbf{E}$ – напряженность электрического поля в рассматриваемой точке среды, Π – гидростатическое давление, обусловленное наличием разности между локальным и объемным осмотическим давлениями

$$\Pi = F_0 k_D^2\left(\cosh(u) - 1\right),$$

где

$$F_0 = \varepsilon_e\varepsilon_0\psi_0^2.$$

Точность расчета силы контролировалась на основе независимости ее значения от выбора замкнутой поверхности интегрирования (5) при отсутствии численных погрешностей. Исходя из этого для оценки погрешности силы ее расчет проводился по двум поверхностям, одна из которых соответствует линиям AB и BC, а вторая – вспомогательной границе, показанной на рис. 1 пунктирной линией. Метод конечных элементов предназначен для численного решения линейных дифференциальных уравнений, тогда как уравнение (1) является нелинейным. Для его численного решения применяют итерационные методы, которые позволяют сводить решение исходного нелинейного уравнения к последовательному решению линейных уравнений. Как и в работе [13], в качестве такого метода был выбран метод Ньютона–Рафсона. Сходимость итерационного процесса в этом методе существенным образом определяется распределением потенциала, используемого в качестве начального приближения. В данной работе в качестве начального приближения используется решение уравнения (3) при заданном нормированном потенциале u_s на поверхностях частиц. Соответствующая слабая форма для этого случая имеет вид [24]:

$$\int_{\Omega_e}\tilde{\nabla}u\tilde{\nabla}\phi d\tilde{V} + \int_{\Omega_e}k^2u\phi d\tilde{V} = 0.$$

Очевидно, что внутри частиц в качестве первоначального приближения при этом берется однородное распределение потенциала. Радиус внешней границы выбирался из условия, что при решении уравнения (1) в неограниченной области потенциал на ней не превышает 1/5000 от потенциала на поверхности частиц. Для сферических частиц этот радиус в работе [13] определялся численным решением уравнения

$$h_{\mathrm{mc}} = 10^4 \exp\left(k\left(1 - h_{\mathrm{mc}}\right)\right),$$

где h_{mc} – нормирование на R минимальное расстояние от центра частицы до указанной границы. Это уравнение получено на основе линеаризованного уравнения Пуассона–Больцмана для одиночной частицы сферической формы радиусом R. В данной работе это же уравнение используется для случая частиц сферической формы и сплюснутых сфероидов. В случае вытянутых сфероидов величина h_{mc} численно рассчитывается из уравнения:

$$h_{\mathrm{mc}} \frac{R}{a} = 10^4 \exp\left(k\left(\frac{a}{R} - h_{\mathrm{mc}}\right)\right),$$

где a – расстояние от центра частицы до ее поверхности вдоль оси z. Данное уравнение получено на основе приближения Дебая–Хюккеля для одиночной частицы сферической формы радиусом a. Кроме того, дополнительно требовалось, чтобы величина h_{mc} была не меньше трех и разность $(h_{\mathrm{mc}}-a)$ не меньше единицы. При больших значениях величины k фактически использовалось это дополнительное требование.

Как было указано ранее, в учитываемом в данной работе условии (2) распределение поверхностной плотности заряда полагается совпадающим с распределением заряда на поверхности уединенной частицы при заданном значении u_{s} нормированного потенциала на этой поверхности. Для поиска этого распределения также используется метод конечных элементов. Так как задача симметрична, расчет распределения потенциала проводится в области, содержащей лишь одну четверть частицы. Структура расчетной области для случая сплюснутого сфероида показана на рис. 2.

На линии CD задается значение потенциала u_{s} на поверхности частицы. На линии AB задается нулевое значение потенциала. Размер расчетной области находится так же, как это было описано выше для случая двух частиц. Слабая форма (4) в рассматриваемом случае упрощается и принимает вид:

$$\int_{\Omega_{\mathrm{e}}} \tilde{\nabla} u \cdot \tilde{\nabla}\phi d\tilde{V} + \int_{\Omega_{\mathrm{e}}} \phi k^2 \sinh u d\tilde{V} = 0.$$

Обратим внимание на то, что слабая форма в этом случае не содержит величины ε. Для одиночного сфероида при постоянном потенциале

$$\left(\nabla u\right)_{\mathrm{e}} \mathbf{n}_{\mathrm{e}} = \frac{\sigma}{\psi_0 \varepsilon_{\mathrm{e}} \varepsilon_0}.$$

При постоянном потенциале на поверхности частицы тангенциальная составляющая градиента потенциала равна нулю. Учитывая это обстоятельство, из данного выражения нетрудно получить выражение, связывающее на поверхности частицы распределение величины f с распределением градиента потенциала:

$$f = \left|\left(\tilde{\nabla} u\right)_{\mathrm{e}}\right|.$$

Обратим внимание на то, что при одинаковых знаках величины f на поверхностях разных частиц они всегда отталкиваются. Поэтому мы можем брать модуль этой величины. Таким образом, для нахождения распределения величины f на поверхности частицы нам достаточно найти распределение потенциала в окрестности частицы. Подчеркнем, параметр u_{s} в данной работе задает нормированный потенциал на поверхности уединенной частицы, используемый для расчета распределения нормированной поверхностной плотности заряда f. Это распределение, согласно условию постоянства распределения заряда, остается неизменным при сближении частиц, тогда как распределение потенциала на их поверхностях меняется.

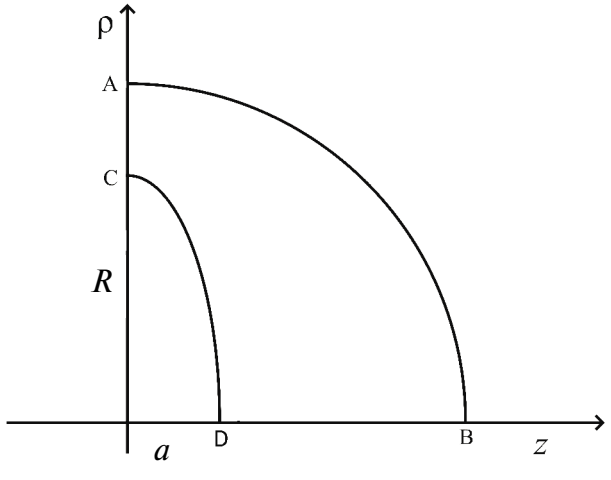


Рис. 2. Структура расчетной области для расчета распределения потенциала в окрестности одиночной частицы

Fig. 2. The computational domain for determining the potential distribution in the vicinity of a single particle

ТЕСТИРОВАНИЕ АЛГОРИТМА

Как и в работах [12, 13], для увеличения точности расчетов применялась процедура h-адаптации расчетной сетки. Под h-адаптацией понимают итерационное изменение расчетной сетки, ведущее к уточнению искомого результата. Используемая в данной работе процедура h-адаптации полностью совпадает с процедурой, которая описана в [12], при которой на каждом шаге сетка измельчается в областях с большими градиентами решения. Максимальное число шагов h-адаптации ограничено выбираемым максимальным числом степеней свободы, под которым в данном случае понимается общее количество неизвестных в разложении по базисным функциям искомого решения. Максимальное значение числа степеней свободы при расчете распределения потенциала в окрестности одиночной частицы полагалось равным 10^6. Для того чтобы убедиться, что используемое число степеней свободы достаточно для корректного расчета распределения потенциала, на каждом шаге адаптации в точке с координатами $(1.1a, 1.1R)$ фиксировались значения проекции градиента потенциала. Расчеты показали, что во всех случаях при превышении числа степеней

свободы $2.5\cdot10^5$ проекции градиента потенциала в данной точке изменялись лишь в пятой значащей цифре. Кроме того, фиксировались значения проекций градиента потенциала в точках пересечения поверхности с осями z и ρ. В этих точках одна нормальная к оси компонента проекции градиента должна быть равна нулю. Однако так как в этих точках одновременно задается и значение потенциала, и условие равенства нулю нормальной к координатной оси компоненты градиента потенциала, эти компоненты вычисляются с наименьшей точностью, и значения нормальных к осям компонент градиента оказываются отличными от нуля. В результате по этим значениям можно судить о минимально возможной точности расчета распределения величины f. Указанный анализ показал, что распределение данной величины в настоящей работе вычислялось с относительной погрешностью не более 0.1%. Для оценки сходимости решения изменялся также размер области и анализировалась сходимость значения полного заряда частицы.

Как было сказано выше, при расчете взаимодействия двух частиц для оценки точности использовалось сравнение значений сил, получаемых интегрированием по двум различным поверхностям, охватывающим частицы. Как показали расчеты, при увеличении расстояния между частицами точность вычисления сил падает, что накладывает ограничение на максимальные значения этих расстояний. Кроме того, при слишком маленьких значениях расстояния между поверхностями частиц используемый пакет NGSolve не мог сгенерировать расчетную сетку, что накладывало ограничения на минимально возможные расстояния между частицами. При минимальных расстояниях относительная погрешность расчета сил, как правило, составляла тысячные доли процента, а при максимальных расстояниях не превышала 1%. Максимальное число степеней свободы достигало $4.5\cdot10^6$.

Приведем также результаты тестовых расчетов для различных асимптотических случаев. Из формул, приведенных в работе [12], следует, что при уменьшении величин u_s и k интеграл от $\left|\left(\tilde{\nabla}u\right)_e\right|$ по поверхности одиночной сферической частицы должен стремиться к $4\pi u_s\left(1+k\right)$. Расчеты показали, что при $u_s = 0.01$ и $k = 0.1$ этот результат получается с точностью до 0.04%. При ε→0 граничное условие (2) переходит в условие, использованное в работе [20], где рассматривалось взаимодействие сфероидов с постоянным зарядом на основе уравнения Дебая–Хюккеля. Кроме того, при малых потенциалах решение должно стремиться к линейному. Следовательно, при уменьшении u_s и ε значения нормированных сил должны приближаться к результатам работы [20]. Расчеты показывают, что при ε = 0.01, $u_s = 0.1$, $k = 0.1$, $a/R = 2$ и расстоянии между поверхностями частиц большем $2R$ получаются значения сил, отличающиеся от полученных в работе [20] не более чем на 0.1%. Однако для расстояния $0.1R$ это отличие достигает 36%. Этот результат соответствует сделанному в работе [13] выводу, что при расстояниях между поверхностями частиц сравнимых или меньших радиуса Дебая, нелинейностью уравнения Пуассона–Больцмана нельзя пренебрегать, даже если поверхностные потенциалы частиц невелики и по формальным критериям можно использовать уравнение Дебая–Хюккеля.

РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ

Параметры расчетов выбирались так, чтобы охватить широкий диапазон физически реализуемых систем – как водных, так и неполярных коллоидных суспензий. Значения $k = 0.1$ соответствуют режиму слабого экранирования, который может быть реализован, например, в системе полиметилметакрилатных частиц в растворе NaAOT в гексадекане, для которой по экспериментальным данным [25, 26] и расчетам [12] получено $k \approx 0.086$. Для моделирования режима сильного экранирования был выбран параметр $k = 25$. Этот случай отвечает тонкому ДЭС и описывает классические водные системы, как, например, микронные частицы диоксида кремния в слабых электролитах. Выбранные значения ε, равные 0.1 и 10, задают физические границы для типичных пар «частица–среда». Вариант ε = 0.1 отвечает случаю, когда диэлектрическая проницаемость жидкого электролита существенно больше диэлектрической проницаемости вещества частиц (например, полимерные или кремневые частицы в водной среде). Напротив, ε = 10 соответствует ситуации, когда вещество частиц обладает более высокой поляризуемостью по сравнению со средой (например, частицы оксидов металлов в растворах электролитов на основе слабополярных растворителей).

На рис. 3 для частиц разных форм показаны зависимости сил отталкивания от расстояния h между их поверхностями при разных значениях ε в условиях слабого экранирования ($k = 0.1$, то есть дебаевская длина λ_D в 10 раз превышает характерный размер частицы R) и $u_s = 4$.

Численный анализ показал, что при переходе от сплюснутых сфероидов к вытянутым (при увеличении a/R) заряд частиц увеличивается. Это, в свою очередь, способствует росту электростатического отталкивания. С другой стороны, увеличение продольных размеров частиц приводит к тому, что при фиксированном зазоре между поверхностями увеличивается расстояние между их центрами, а значит, и среднее расстояние между зарядами, что приводит к уменьшению сил взаимодействия. Таким образом, эти два конкурирующих фактора приводят к немонотонной зависимости силы от формы частиц. Поэтому в условиях слабого экранирования увеличение продольных размеров частиц может как увеличивать, так и уменьшать действующие на них силы в зависимости от расстояния h. То есть здесь наблюдаются те же закономерности, которые раньше были обнаружены на основе приближения Дебая–Хюккеля для условий постоянства потенциала и постоянного заряда при ε = 0 в работах [20, 21]. Также проводились аналогичные расчеты при $u_s = 1$. Эти расчеты не дали качественно новых результатов и поэтому соответствующие рисунки не приводятся. Отметим

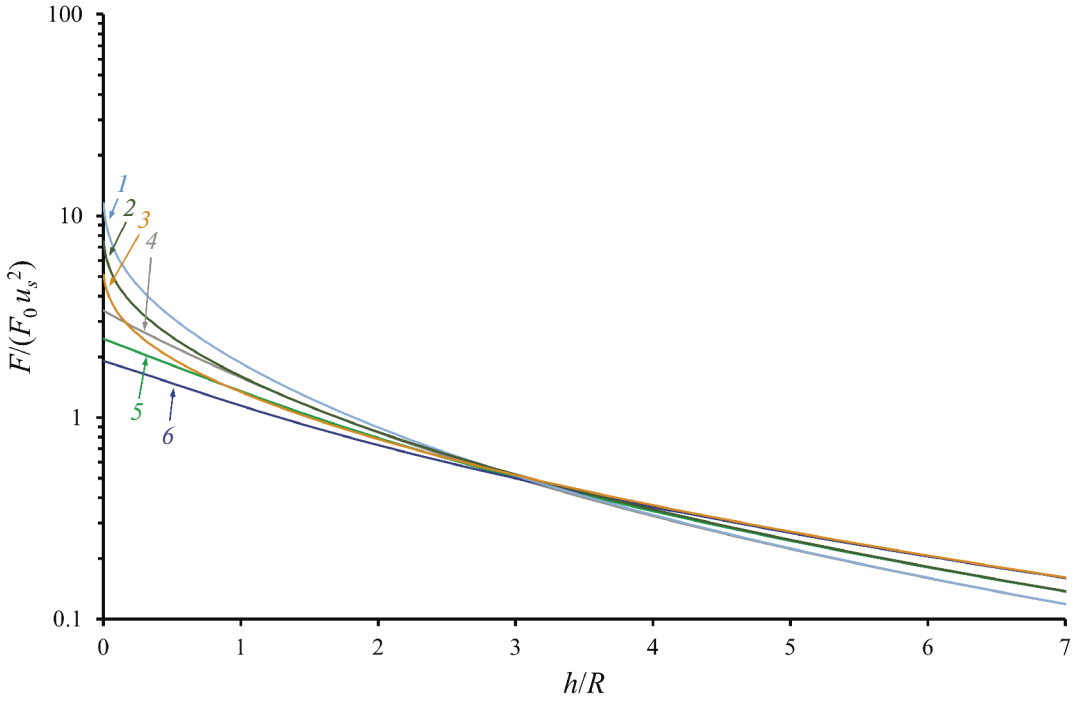


Рис. 3. Зависимость силы электростатического взаимодействия частиц от расстояния между поверхностями частиц при $k = 0.1$, $u_s = 4$: *1* – $\varepsilon = 0.1$, $a/R = 0.5$; *2* – $\varepsilon = 0.1$, $a/R = 1$; *3* – $\varepsilon = 0.1$, $a/R = 2$; *4* – $\varepsilon = 10$, $a/R = 0.5$; *5* – $\varepsilon = 10$, $a/R = 1$; *6* – $\varepsilon = 0.1$, $a/R = 2$

Fig. 3. Dependence of the electrostatic interaction force on the distance between the particle surfaces at $k = 0.1$ and $u_s = 4$: *1* – $\varepsilon = 0.1$, $a/R = 0.5$; *2* – $\varepsilon = 0.1$, $a/R = 1$; *3* – $\varepsilon = 0.1$, $a/R = 2$; *4* – $\varepsilon = 10$, $a/R = 0.5$; *5* – $\varepsilon = 10$, $a/R = 1$; *6* – $\varepsilon = 0.1$, $a/R = 2$

только, что с ростом u_s значения сил, нормированных на u_s^2 немного уменьшаются, т. е. сила отталкивания растет медленнее, чем u_s^2. Эти результаты соответствуют проведенным в [13] расчетам для сферических частиц, которые показывают, что хотя плотность поверхностного распределения заряда растет медленнее чем u_s, но при k, меньшем 10, зависимость между этими величинами мало отличается от линейной.

Анализ получаемых распределений поверхностной плотности заряда показал, что с ростом постоянной Дебая распределение заряда становится более однородным. Поэтому при сильном экранировании (при больших значениях k) при анализе некоторых явлений можно считать плотность заряда в наиболее близких друг к другу точках на поверхностях разных частиц зависящей только от k и u_s. С другой стороны, согласно приближению Дерягина [1] при больших значениях k сила взаимодействия определяется в основном взаимодействием наиболее близких друг к другу участков поверхностей разных частиц и пропорциональна радиусам кривизны этих участков (в ситуации, когда эти радиусы равны). В нашем случае для сплюснутых сфероидов радиус кривизны в точках, в которых ось симметрии пересекает поверхности частиц, равен $2R$, а для вытянутых сфероидов $0.5R$. Таким образом, следует ожидать, что при сильном экранировании для вытянутых сфероидов нормированная сила окажется приблизительно в два раза меньше, чем для шара, а для сплюснутых сфероидов – в два раза больше. Расчеты, результаты которых отображены на рис. 4 и 5 показывают, что в рассмотренных диапазонах расстояний между частицами их продольных размеров при $k = 25$ эта гипотеза оправдывается, и силы взаимодействия между частицами можно считать пропорциональными радиусу кривизны их поверхностей в ближайших друг к другу точках с точностью не менее 7%.

Из рис. 4 видно, что чем больше ε, тем шире диапазон значений расстояний, на котором с достаточно большой точностью получаемые результаты можно аппроксимировать экспоненциальной зависимостью. Этот диапазон также увеличивается с уменьшением u_s, что хорошо видно из рис. 5. Для всего диапазона расстояний, используемого на этом рисунке, результаты расчетов можно аппроксимировать зависимостью вида $A\exp\left(-\dfrac{h}{\lambda_D}\right)$. При этом получаемое в результате такой аппроксимации значение дебаевского радиуса λ_D экранирования отличается от используемого не более чем на 0.7%. Постоянную A в рассматриваемом случае можно считать пропорциональной радиусу кривизны поверхностей частиц в наиболее близких друг к другу точках с точностью не менее 0.5%. Отметим, что чем больше величина ε,

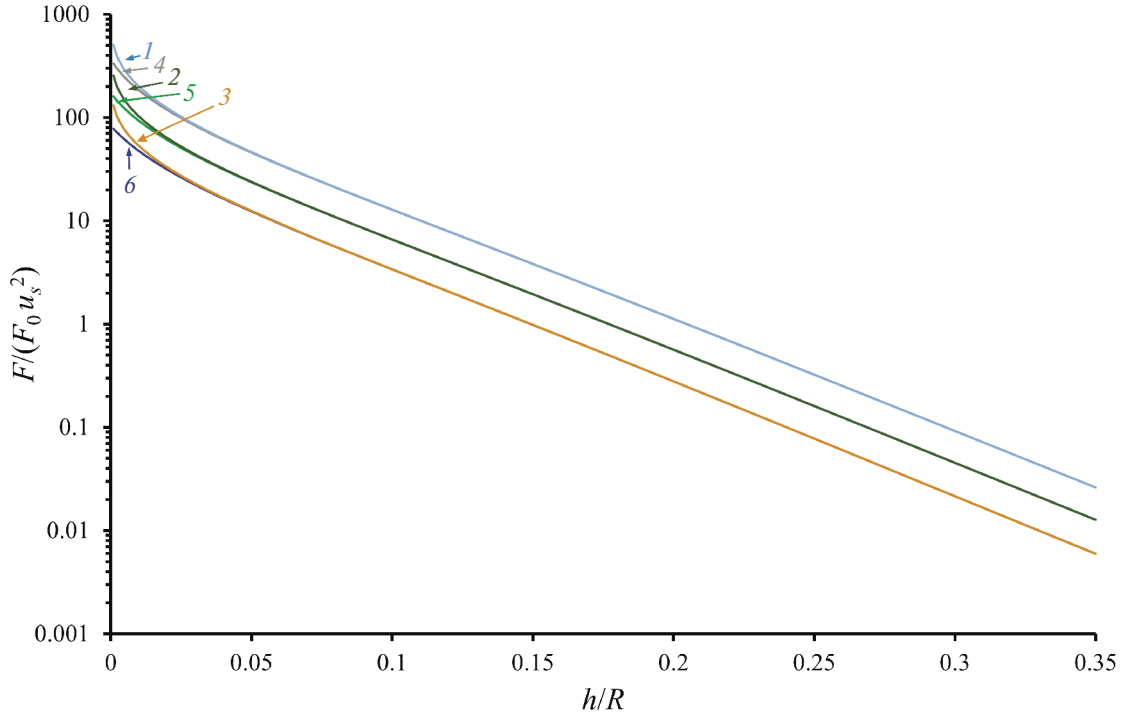


Рис. 4. Зависимость силы электростатического взаимодействия частиц от расстояния между поверхностями частиц при $k = 25$, $u_s = 4$: *1* – $\varepsilon = 0.1$, $a/R = 0.5$; *2* – $\varepsilon = 0.1$, $a/R = 1$; *3* – $\varepsilon = 0.1$, $a/R = 2$; *4* – $\varepsilon = 10$, $a/R = 0.5$; *5* – $\varepsilon = 10$, $a/R = 1$; *6* – $\varepsilon = 0.1$, $a/R = 2$

Fig. 4. Dependence of the electrostatic interaction force on the distance between the particle surfaces at $k = 25$ and $u_s = 4$: *1* – $\varepsilon = 0.1$, $a/R = 0.5$; *2* – $\varepsilon = 0.1$, $a/R = 1$; *3* – $\varepsilon = 0.1$, $a/R = 2$; *4* – $\varepsilon = 10$, $a/R = 0.5$; *5* – $\varepsilon = 10$, $a/R = 1$; *6* – $\varepsilon = 0.1$, $a/R = 2$

тем более равномерно распределен потенциал на поверхности частиц. Таким образом, чем меньше потенциал на поверхности частиц и выше диэлектрическая проницаемость их вещества, тем точнее в результате экспериментов можно определить постоянную экранирования экстраполированием значений сил экспоненциальной зависимостью при условии, что получаемое значение этой постоянной много больше единицы. Отметим также, что из представленных на рис. 3 и 4 результатов следует, что с ростом расстояния между частицами и значения сил при силах при разных ε, но одинаковых u_s, a/R и k стремятся друг к другу, что указывает на уменьшение влияния поляризации при удалении частиц друг от друга.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В представленной работе рассмотрено электростатическое взаимодействие двух одинаковых заряженных диэлектрических частиц сфероидальной формы с общей осью симметрии в растворе симметричного электролита при условии, что распределение заряда на поверхности каждой частицы совпадает с распределением одиночной частицы при заданном значении потенциала на ее поверхности. Показано, что характер зависимости сил взаимодействия между частицами от расстояния существенным образом зависит от величины постоянной экранирования. При малых значениях постоянной основными влияющими факторами являются увеличение заряда частицы при увеличении ее продольного размера и увеличение расстояния между центрами частиц при заданном расстоянии между их поверхностями. В результате увеличение продольных размеров частиц может приводить как к увеличению, так и к уменьшению действующих на них сил в зависимости от расстояния между ними. При больших значениях постоянной определяющими факторами, влияющими на характер рассматриваемой зависимости, являются: плотность заряда в наиболее близких друг к другу точках на поверхностях разных частиц; тенденция к однородности распределения заряда при увеличении постоянной экранирования; значение кривизны поверхности частиц наиболее близких друг к другу участков их поверхностей. В результате при достаточно больших значениях постоянной экранирования и не слишком большом интервале изменения продольного радиуса частиц при анализе некоторых явлений можно полагать, что сила взаимодействия пропорциональна кривизне поверхностей частиц в точках, лежащих на их оси симметрии. Также показано, что при увеличении k и ε и уменьшении u_s силы взаимодействия между частицами от расстояния приближается к экспоненциальной с показателем экспоненты $-h/\lambda_D$.

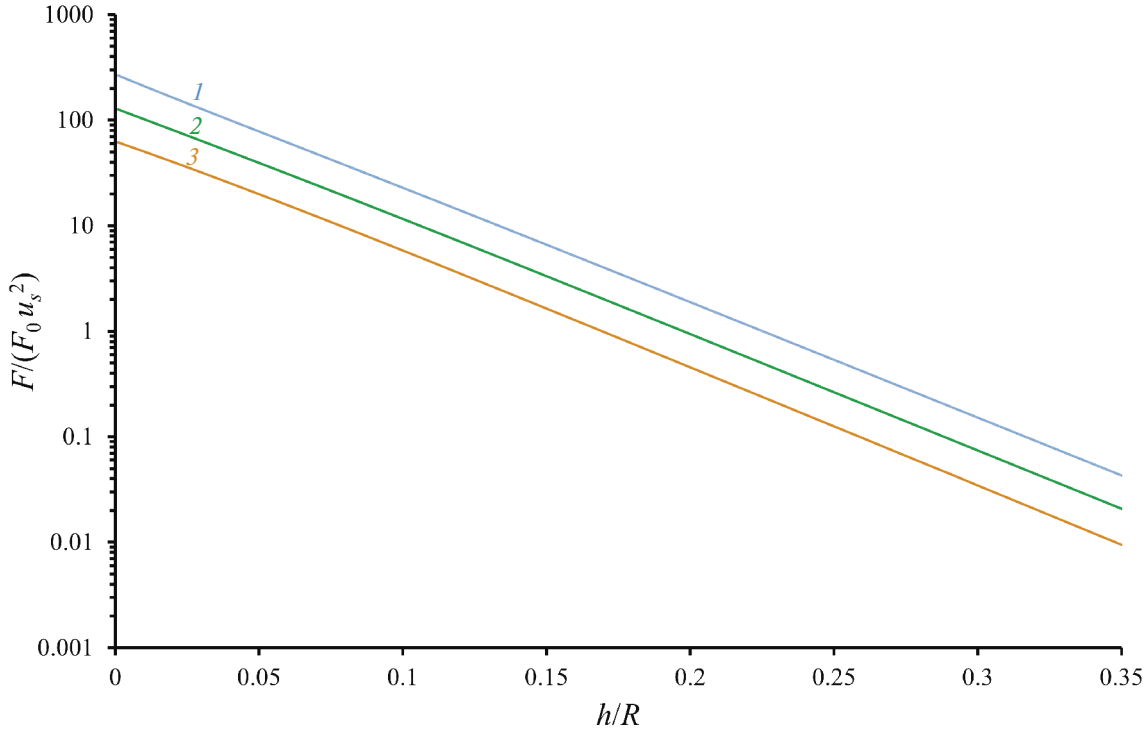


Рис. 5. Зависимость силы электростатического взаимодействия частиц от расстояния между поверхностями частиц при $k = 25$, $\varepsilon = 10$, $u_s = 1$: *1* – $a/R = 0.5$, *2* – $a/R = 1$, *3* – $a/R = 2$

Fig. 5. Dependence of the electrostatic interaction force on the distance between the particle surfaces at при $k = 25$, $\varepsilon = 10$, and $u_s = 1$: *1* – $a/R = 0.5$, *2* – $a/R = 1$, *3* – $a/R = 2$

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Israelachvili J.N. Intermolecular and Surface Forces.* San Diego: Academic press, 2011.
2. Ledbetter J.E., Croxton T.L., McQuarrie D.A. The interaction of two charged spheres in the Poisson–Boltzmann equation. *Can. J. Chem.* 1981. Vol. 59. no. 13. Pp. 1860–1864. https://doi.org/10.1139/v81-277
3. Gouy M. Sur la constitution de la charge électrique à la surface d'un electrolyte [О создании электрического заряда на поверхности электролита]. *J. Phys. Theor. Appl.* 1910. Vol. 9. no. 1. Pp. 457–468. (На фр. яз.) https://doi.org/10.1051/jphystap:019100090045700
4. Debye P., Hückel E. Zur theorie der Elektrolyte. I. Gefrierpunktserniedrigung und verwandte erscheinungen [К теории электролитов. I. Понижение температуры замерзания и связанные с этим явления]. *Physikalische Zeitschrift* [*Физический журнал*]. 1923. Vol. 24. Pp. 185–206. (На нем. яз.)
5. Lamm G. The Poisson–Boltzmann equation. *Rev. Comput. Chem*. 2003. Vol. 19. Pp. 147–365. https://doi.org/10.1002/0471466638.ch4
6. Budkov Y.A., Kalikin N.N. *Statistical Field Theory of Ion-Molecular Fluids: Fundamentals and Applications in Physical Chemistry and Electrochemistry*. Switzerland: Springer Nature, 2024. https://doi.org/10.1007/978-3-031-68364-0
7. Derjaguin B., Landau L. Theory of the stability of strongly charged lyophobic sols and of the adhesion of strongly charged particles in solutions of electrolytes. *Prog. Surf. Sci*. 1993. Vol. 43. nos. 1–4. Pp. 30–59. https://doi.org/10.1016/0079-6816(93)90013-L
8. Ether D.S., Rosa F.S.S., Tibaduiza D.M. et al. Double-layer force suppression between charged microspheres. *Phys. Rev. E*. 2018. Vol. 97. no. 2. P. 022611. https://doi.org/10.1103/PhysRevE.97.022611
9. Carnie S.L., Chan D.Y.C., Stankovich J. Computation of forces between spherical colloidal particles: Nonlinear Poisson–Boltzmann theory. *J. Colloid Interface Sci*. 1994. Vol. 165. no. 1. Pp. 116–128. https://doi.org/10.1006/jcis.1994.1212

10. Warszyński P., Adamczyk Z. Calculations of double-layer electrostatic interactions for the sphere/plane geometry. *J. Colloid Interface Sci*. 1997. Vol. 187. no. 2. Pp. 283–295. https://doi.org/10.1006/jcis.1996.4671
11. Lima E.R.A., Tavares F.W., Biscaia Jr E.C. Finite volume solution of the modified Poisson–Boltzmann equation for two colloidal particles. *Phys. Chem. Chem. Phys*. 2007. Vol. 9. no. 24. Pp. 3174–3180. https://doi.org/10.1039/b701170a
12. Гращенков С.И. Электростатическое взаимодействие диэлектрических частиц в растворе электролита. *Коллоидный журнал*. 2024. Т. 86. № 5. С. 561–570. https://doi.org/10.31857/S0023291224050045
13. Гращенков С.И. Об электростатическом взаимодействии диэлектрических частиц в растворе электролита в режиме сильного экранирования. *Коллоидный журнал*. 2025. Т. 87. № 2. С. 101–108. https://doi.org/10.7868/S3034543X25020023
14. Derjaguin B. On the repulsive forces between charged colloid particles and on the theory of slow coagulation and stability of lyophobe sols. *Prog. Surf. Sci*. 1993. Vol. 43. nos. 1–4. Pp. 15–27. https://doi.org/10.1016/0079-6816(93)90011-J
15. Belouschek P., Lorenz D., Adamczyk Z. Calculation of electrostatic interaction forces between ellipsoidal particles. *Colloid Polym. Sci*. 1991. Vol. 269. no. 5. Pp. 528–531. https://doi.org/10.1007/BF00655891
16. Jyh-Ping Hsu, Ming-Tsan Tseng. Electrostatic interactions between two identical thin disks of arbitrary orientation in an electrolyte solution. *Langmuir*. 1997. Vol. 13. no. 6. Pp. 1810–1819. https://doi.org/10.1021/la9606781
17. Jyh-Ping Hsu, Bo-Tau Liu. Electrical interactions between two charged spheroids in a symmetric electrolyte solution. *Langmuir*. 1998. Vol. 14. no. 19. Pp. 5383–5388. https://doi.org/10.1021/la980227w
18. Kuan-Liang Liu, Eric Lee, Jung-Jyh Lee et al. Numerical analysis of electrical interaction between two axisymmetric spheroids. *Int. J. Phys. Math. Sci*. 2009. Vol. 3. no. 5. Pp. 320–327. https://doi.org/10.5281/zenodo.1081735
19. Ohshima H. Electrostatic interaction between two spheroidal particles at large separations. *Colloids Surf. A: Physicochem. Eng. Asp*. 2021. Vol. 629. P. 127482. https://doi.org/10.1016/j.colsurfa.2021.127482
20. *Гращенков С.И.* О взаимодействии заряженных сфероидальных частиц в растворе электролита. *Журнал технической физики*. 2024. Т. 94. № 1. С. 26–31. https://doi.org/10.61011/JTF.2024.01.56898.157-23
21. Гращенков С.И. О силе электростатического взаимодействия двух сфероидальных макрочастиц в модели Пуассона–Больцмана. *Журнал технической физики*. 2022. Т. 92. № 12. С. 1770–1775. https://doi.org/10.21883/JTF.2022.12.53742.145-22
22. Benzhuo Lu. Finite element modeling of biomolecular systems in ionic solution. In: Yongjie Zhang (ed.). *Image-Based Geometric Modeling and Mesh Generation*. Dordrecht: Springer Netherlands, 2013. Pp. 271–301. https://doi.org/10.1007/978-94-007-4255-0_14
23. Gangl P., Sturm K., Neunteufel M. et al. Fully and semi-automated shape differentiation in NGSolve. *Struct. Multidisc. Optim*. 2021. Vol. 63. no. 3. Pp. 1579–1607. https://doi.org/10.1007/s00158-020-02742-w
24. Zhangxin Chen. *Finite Element Methods and Their Applications*. Berlin, Heidelberg: Springer, 2005. https://doi.org/10.1007/3-540-28078-2
25. Sainis S.K., Merrill J.W., Dufresne E.R. Electrostatic interactions of colloidal particles at vanishing ionic strength. *Langmuir*. 2008. Vol. 24. no. 23. Pp. 13334–13337. https://doi.org/10.1021/la8024606
26. Merrill J.W., Sainis S.K., Dufresne E.R. Many-body electrostatic forces between colloidal particles at vanishing ionic strength. *Phys. Rev. Lett*. 2009. Vol. 103. no. 13. P. 138301. https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.103.138301

REFERENCES

1. Israelachvili J.N. *Intermolecular and Surface Forces.* San Diego: Academic press, 2011.
2. Ledbetter J.E., Croxton T.L., McQuarrie D.A. The interaction of two charged spheres in the Poisson–Boltzmann equation. *Can. J. Chem.* 1981;**59**(13):1860–1864. https://doi.org/10.1139/v81-277
3. Gouy M. Sur la constitution de la charge électrique à la surface d'un electrolyte [On the constitution of the electric charge on the surface of an electrolyte]. *J. Phys. Theor. Appl.* 1910;**9**(1):457–468. (In French) https://doi.org/10.1051/jphystap:019100090045700
4. Debye P., Hückel E. Zur theorie der Elektrolyte. I. Gefrierpunktserniedrigung und verwandte erscheinungen [The theory of electrolytes. I. Freezing point lowering and related phenomena]. *Phys. Z.* [*Physical Journal*]. 1923;**24**:185–206. (In German)
5. Lamm G. The Poisson–Boltzmann equation. *Rev. Comput. Chem*. 2003;**19**:147–365. https://doi.org/10.1002/0471466638.ch4
6. Budkov Y.A., Kalikin N.N. *Statistical Field Theory of Ion-Molecular Fluids: Fundamentals and Applications in Physical Chemistry and Electrochemistry*. Switzerland: Springer Nature, 2024. https://doi.org/10.1007/978-3-031-68364-0

7. Derjaguin B., Landau L. Theory of the stability of strongly charged lyophobic sols and of the adhesion of strongly charged particles in solutions of electrolytes. *Prog. Surf. Sci*. 1993;**43**(1–4):30–59. https://doi.org/10.1016/0079-6816(93)90013-L
8. Ether D.S., Rosa F.S.S., Tibaduiza D.M. et al. Double-layer force suppression between charged microspheres. *Phys. Rev. E*. 2018;**97**(2):022611. https://doi.org/10.1103/PhysRevE.97.022611
9. Carnie S.L., Chan D.Y.C., Stankovich J. Computation of forces between spherical colloidal particles: nonlinear Poisson–Boltzmann theory. *J. Colloid Interface Sci*. 1994;**165**(1):116–128. https://doi.org/10.1006/jcis.1994.1212
10. Warszyński P., Adamczyk Z. Calculations of double-layer electrostatic interactions for the sphere/plane geometry. *J. Colloid Interface Sci*. 1997;**187**(2):283–295. https://doi.org/10.1006/jcis.1996.4671
11. Lima E.R.A., Tavares F.W., Biscaia Jr E.C. Finite volume solution of the modified Poisson–Boltzmann equation for two colloidal particles. *Phys. Chem. Chem. Phys*. 2007;**9**(24):3174–3180. https://doi.org/10.1039/b701170a
12. Grashchenkov S.I. Electrostatic interaction of dielectric particles in electrolyte solution. *Colloid J*. 2024:**86**(5):690–698. https://doi.org/10.1134/S1061933X24600659
13. Grashchenkov S.I. On the electrostatic interaction of dielectric particles in an electrolyte solution under the strong screening regime. *Colloid J*. 2025;**87**(2):184–191. https://doi.org/10.1134/S1061933X25600046
14. Derjaguin B. On the repulsive forces between charged colloid particles and on the theory of slow coagulation and stability of lyophobe sols. *Prog. Surf. Sci*. 1993;**43**(1–4):15–27. https://doi.org/10.1016/0079-6816(93)90011-J
15. Belouschek P., Lorenz D., Adamczyk Z. Calculation of electrostatic interaction forces between ellipsoidal particles. *Colloid Polym. Sci*. 1991;**269**(5):528–531. https://doi.org/10.1007/BF00655891
16. Jyh-Ping Hsu, Ming-Tsan Tseng. Electrostatic interactions between two identical thin disks of arbitrary orientation in an electrolyte solution. *Langmuir*. 1997;**13**(6):1810–1819. https://doi.org/10.1021/la9606781
17. Jyh-Ping Hsu, Bo-Tau Liu. Electrical interactions between two charged spheroids in a symmetric electrolyte solution. *Langmuir*. 1998;**14**(19):5383–5388. https://doi.org/10.1021/la980227w
18. Kuan-Liang Liu, Eric Lee, Jung-Jyh Lee et al. Numerical analysis of electrical interaction between two axisymmetric spheroids. *Int. J. Phys. Math. Sci*. 2009;**3**(5):320–327. https://doi.org/10.5281/zenodo.1081735
19. Ohshima H. Electrostatic interaction between two spheroidal particles at large separations. *Colloids Surf. A: Physicochem. Eng. Asp*. 2021;**629**:127482. https://doi.org/10.1016/j.colsurfa.2021.127482
20. Grashchenkov S.I. About the interaction of charged spheroidal particles in an electrolyte solution. *Technical Physics*. 2024;**69**(1):23–28. https://doi.org/10.61011/JTF.2024.01.56898.157-23
21. Grashchenkov S.I. About the force of electrostatic interaction between two spheroidal macroparticles in the Poisson–Boltzmann model. *Technical Physics*. 2022;**67**(12):1533–1538. https://doi.org/10.21883/TP.2022.12.55186.145-22
22. Benzhuo Lu. Finite element modeling of biomolecular systems in ionic solution. In: Yongjie Zhang (ed.). *Image-Based Geometric Modeling and Mesh Generation*. Dordrecht: Springer Netherlands, 2013:271–301. https://doi.org/10.1007/978-94-007-4255-0_14
23. Gangl P., Sturm K., Neunteufel M. et al. Fully and semi-automated shape differentiation in NGSolve. *Struct. Multidisc. Optim*. 2021;**63**(3):1579–1607. https://doi.org/10.1007/s00158-020-02742-w
24. Zhangxin Chen. *Finite Element Methods and Their Applications*. Berlin, Heidelberg: Springer, 2005. https://doi.org/10.1007/3-540-28078-2
25. Sainis S.K., Merrill J.W., Dufresne E.R. Electrostatic interactions of colloidal particles at vanishing ionic strength. *Langmuir*. 2008; **24**(23):13334–13337. https://doi.org/10.1021/la8024606
26. Merrill J.W., Sainis S.K., Dufresne E.R. Many-body electrostatic forces between colloidal particles at vanishing ionic strength. *Phys. Rev. Lett*. 2009;**103**(13):138301. https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.103.138301

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРЕ

Гращенков Сергей Иванович – канд. физ.-мат. наук; доц. каф. физики, Псковский государственный университет, Псков, Российская Федерация
E-mail: grasi@mail.ru
https://orcid.org/0000-0002-8321-8587

ABOUT THE AUTHOR

Grashchenkov, Sergey I. – Cand. Sc. (Physics and Mathematics); Associate Professor at the Department of Physics, Pskov State University, Pskov, Russian Federation
E-mail: grasi@mail.ru
https://orcid.org/0000-0002-8321-8587

Поступила в редакцию 19.05.2026
После доработки 02.07.2026
Принята к публикации 02.07.2026