

Мартынова Инна Александровна

РАСЧЕТНО-ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ
СВОЙСТВ КОМПЛЕКСНОЙ ПЛАЗМЫ

01.04.08 – Физика плазмы

Автореферат диссертации на соискание ученой степени кандидата
физико-математических наук

Москва – 2019

Работа выполнена в Федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего образования «Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)»

Научный руководитель: доктор физико-математических наук,
старший научный сотрудник,
главный научный сотрудник
ФГБУН Объединенного института высоких температур РАН
Иосилевский Игорь Львович

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук, доцент,
заместитель директора Научно-производственного
центра физики ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ» по НИР
Дубинов Александр Евгеньевич

доктор физико-математических наук, профессор,
главный научный сотрудник
ФГБУН Института общей физики
им. А.М. Прохорова РАН
Игнатов Александр Михайлович

Ведущая организация: Государственный научный центр
Российской Федерации
Троицкий институт инновационных и
термоядерных исследований

Защита состоится 11 декабря 2019 г. в 11 ч. 00 мин. на заседании Диссертационного совета Д 002.110.02 при Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Объединенном институте высоких температур Российской академии наук, расположенном по адресу: г. Москва, ул. Ижорская, 13, стр. 2.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Объединенного института высоких температур РАН.

Автореферат разослан октября 2019 г.

Ученый секретарь Диссертационного совета
доктор физико-математических наук

М.М. Васильев

Общая характеристика работы

Диссертация посвящена расчетно-теоретическому исследованию термодинамических свойств классической трехмерной комплексной плазмы.

Актуальность темы исследования

Изучение сильно-неидеальной комплексной плазмы крайне актуально. Оно имеет давнюю историю (асимметричные электролиты, коллоиды, КДФ-плазма и др.) и очень активно развивается в последние десятилетия (электроразрядная пылевая плазма, мезоскопическая атмосферная и космическая плазма и др.). Вместе с тем, изучение возможных фазовых превращений в таких системах неоправданно ограничено исследованиями, связанными прежде всего с кристаллизацией и переходом между кристаллами с объемно-центрированной кубической (ОЦК) и гранецентрированной кубической (ГЦК) решетками в искусственно суженной системе с потенциалом в форме Юкавы (дебаевской плазме), фазовые границы в которой хорошо известны по результатам прямого численного моделирования [1]. Предварительные оценки и уже имеющиеся в литературе отдельные исследования показывают, что номенклатура возможных фазовых превращений в сильно-неидеальных асимметричных кулоновских системах гораздо шире и может включать в себя также изоструктурные и неизоструктурные переходы типа газ – жидкость и газ – кристалл.

Кроме того, сегодняшнее изучение фазовых переходов в семействе моделей комплексной плазмы также искусственно ограничено упрощенными системами только с одним сортом макроионов, в то время как актуальным является изучение более сложных и более реалистичных систем с двумя и более сортами макроионов.

Цели и задачи диссертационной работы

В данной работе были поставлены следующие задачи: изучение характеристик плавления и полиморфного перехода между различными кристаллическими решетками как фазовых переходов первого рода; учет эффектов нелинейного экранирования в комплексной плазме в рамках приближения средней сферической ячейки Вигнера-Зейтца; модификация известной схемы расчета термодинамики комплексной плазмы в приближении в корреляционной полости путем учета нелинейности экранирования макроиона; изучение термодинамики комплексной плазмы с двумя сортами макроионов.

Для достижения этих целей были решены следующие задачи:

- 1) Исходная фазовая диаграмма однокомпонентной системы с фиксированным (не дебаевским) потенциалом Юкавы перестроена и проанализирована в термодинамические переменные температура–концентрация и кривая плавления перестроена в переменные

температура–давление с выделением ключевых точек, предельных асимптотик и аппроксимаций. Особое внимание при этом уделено характеристикам границы плавления;

2) Для указанной системы Юкавы теоретически оценена величина скачка плотности вдоль всей границы плавления (отсутствующая в оригинальной работе [1] и во всех последующих работах). Проанализировано выполнение закона Симона для границы плавления;

3) Для однокомпонентной плазмы макроионов, но с зависящим от температуры и плотности фоновых микроионов экранированным (дебаевским) потенциалом, исходная фазовая диаграмма [1] перестроена и проанализирована в термодинамических переменных концентрация–температура;

4) В рамках модели средней сферической ячейки Вигнера–Зейтца в приближении Пуассона–Больцмана учтено влияние нелинейного экранирования на профиль самосогласованного потенциала и на пространственное распределение микроионов;

5) На основе введения понятий эффективного («видимого») заряда макроиона и разделения микроионов на «свободные» и «связанные», а также с привлечением дополнительных физических соображений, перестроена исходная фазовая диаграмма [1]. Выявлены и проанализированы результирующие сдвиги фазовых границ плавления и перехода между двумя кристаллическими решетками;

6) Проведен сравнительный анализ нарушения условий термодинамической устойчивости в приближенных уравнениях состояния [2] и [3]. Выявлены границы неустойчивости относительно самопроизвольного распада системы на фазы разной плотности. Проведено сравнение полученных результатов с известными результатами прямого численного моделирования методом Монте-Карло асимметричной дебаевской системы [4] и асимметричной системы заряженных твёрдых сфер [5].

7) С использованием численного решения приближения Пуассона–Больцмана модифицирована линеаризованная схема расчета [3] самосогласованного потенциала и профиля микроионов в двухкомпонентной асимметричной комплексной плазме в приближении корреляционной полости;

8) В рамках построенной модификации приближения корреляционной полости рассчитана термодинамика асимметричной комплексной плазмы;

9) Эффект смешения двух сортов макроионов рассчитан в приближении смеси средних сферических ячеек Вигнера-Зейтца с учетом эффектов нелинейного экранирования по Пуассону–Больцману.

Научная новизна

Впервые теоретически оценен скачок плотности вдоль всей границы плавления, рассчитанной ранее на фазовой диаграмме комплексной плазмы [1].

Впервые высказано предположение и показано, что положение границ фазового состояния равновесной электронейтральной резко-асимметричной классической двухкомпонентной системы на фазовой диаграмме комплексной плазмы определяется *эффективным* зарядом макроиона и его экранированием только *свободными* микроионами, а не исходным («голым») зарядом макроиона и экранированием всеми микроионами.

Впервые проведена модификация схемы расчета термодинамики двухкомпонентной комплексной плазмы в приближении Дебая-Хюккеля в корреляционной полости путем учета нелинейности экранирования макроиона в этой полости.

Опираясь на результаты расчета нелинейного экранирования в приближении средних сферических ячеек Вигнера-Зейтца для одного сорта макроионов, *впервые* обобщена теория нелинейного экранирования на случай смеси двух сортов макроионов одним сортом микроионов.

Научная и практическая значимости

Научная значимость состоит в изучении влияния эффекта нелинейного экранирования на термодинамику и положение фазового состояния на фазовой диаграмме комплексной плазмы, а также в изучении термодинамики мало исследовавшихся ранее системах комплексной плазмы с двумя сортами микроионов и макроионов. Практическая значимость состоит в выработке рекомендаций для проведения экспериментальных исследований свойств трехмерной комплексной плазмы, в том числе уточнения характерного диапазона положений системы на фазовой диаграмме комплексной плазмы.

На защиту выносятся следующие положения.

1) Фазовая диаграмма однокомпонентной системы с потенциалом Юкавы в переменных температура–концентрация и кривая плавления указанной системы в переменных температура–давление. Теоретическая оценка величины скачка плотности и анализ выполнения закона Симона для границы плавления.

2) Полосатая структура фазовой диаграммы в переменных концентрация–температура для зон кристаллического и флюидного состояний однокомпонентной плазмы макроионов с экранированным дебаевским потенциалом.

3) Расчет в приближении Пуассона–Больцмана профиля самосогласованного потенциала и распределения микроионов для модели средней сферической ячейки Вигнера–

Зейтца. Сдвиг фазовых границ плавления и полиморфного перехода на исходной фазовой диаграмме на основе разделения микроионов на свободные и связанные и соответствующей перенормировки эффективного (видимого) заряда макроиона.

4) Расчет границ термодинамической неустойчивости асимметричной комплексной плазмы относительно самопроизвольного распада системы на фазы разной плотности в известных из литературы приближенных уравнениях состояния [2] и [3]. Сравнительный анализ полученных границ с известными результатами прямого численного моделирования методом Монте-Карло (а) асимметричной дебаевской системы [4] и (б) асимметричной системы заряженных твёрдых сфер [5] и результирующая неполнота фазовой диаграммы комплексной плазмы.

5) Учет нелинейного экранирования и модификация линейризованной схемы приближения корреляционной полости расчета [3] с использованием численного решения уравнения Пуассона–Больцмана в двухкомпонентной асимметричной комплексной плазме. Расчет термодинамики комплексной плазмы в рамках построенной модификации.

Апробация работы

Основные результаты диссертации докладывались на **Международных конференциях**: по физике неидеальной плазмы (Алматы, Казахстан, 2015 и Сен-Мало, Франция, 2018), «Сильно-связанные кулоновские системы» (Киль, Германия, 2017), по физике пылевой плазмы (Прага, Чехия, 2017), «Уравнения состояния вещества» (Эльбрус, 2014, 2016 и 2018), «Взаимодействие интенсивных потоков энергии с веществом» (Эльбрус, 2015, 2017 и 2019), Харитоновские тематические научные чтения «Экстремальные состояния вещества. Детонация. Ударные волны» (Саров, 2015, 2017 и 2019) и «Применение лазерных технологий для решения задач по физике высоких плотностей энергии» (Саров, 2018), Научно-координационная Сессия РАН «Исследование неидеальной плазмы» (Москва, 2014–2018), «Забабахинские научные чтения» (Снежинск, 2014), конференция по физике плазмы и управляемому термоядерному синтезу (Звенигород, 2015–2019), «Информационные и коммуникационные технологии в образовании, науке и производстве» (Протвино, 2014), Воркшоп по физике плазмы с интенсивными лазерными и тяжелоионными пучками (Москва, 2014). На **Всероссийских конференциях**: (с международным участием) по теплофизическим свойствам (Казань и Москва, 2014, 2018), по фундаментальным и инновационным вопросам современной физики (Москва, 2015), научный форум «Наука будущего – наука молодых» (Казань, 2016), молодежный конкурс научных работ по современным проблемам фундаментальных и прикладных наук в МФТИ (Москва, 2014) и научная конференция МФТИ

(Долгопрудный, 2014–2018). **Также**, на конференции «Молодежь в науке» (Саров, 2014, 2016), на семинарах Отделения низкотемпературной плазмы ОИВТ РАН (Москва, 2015) и теоретического отдела ОИВТ РАН (Москва, 2016), на конкурсах научных работ студентов и молодых ученых ОИВТ РАН, посвященном памяти академика Шейндлина А.Е. (Москва, 2017), и научных работ, посвященном столетию член-корреспондента РАН Бибермана (Москва, 2015).

Публикации

Материалы диссертации опубликованы в 46 печатных работах, из них 11 статей в рецензируемых журналах (из них 9 статей опубликованы в журналах, которые в настоящее время рецензируются ВАК по направлению 01.04.08 – физика плазмы, список приведен в конце автореферата), 14 докладов и 21 тезис докладов в сборниках трудов конференций.

Личный вклад автора

Содержание диссертации и основные положения, выносимые на защиту, отражают персональный вклад автора в опубликованные работы. Подготовка полученных результатов к публикациям проводилась совместно с соавторами, причем вклад диссертанта был определяющим. Все представленные в диссертации результаты получены автором лично.

Структура и объем диссертации

Диссертация состоит из введения, 4 глав, заключения, словаря терминов и списка литературы. Общий объем диссертации 112 страниц, в том числе 52 рисунка. Список литературы включает 104 наименования на 12 страницах.

Содержание работы

Во введении обоснована актуальность диссертационной работы, сформулирована цель и приведена научная новизна исследований, описана научная и практическая значимости полученных результатов и представлены выносимые на защиту научные положения.

В главе 1 приведен краткий обзор основных работ, использованных в диссертации. В основе работы лежит фазовая диаграмма электронейтральной комплексной плазмы [1] в переменных κ – Γ (κ – структурный параметр, Γ – параметр кулоновской неидеальности)

$$\Gamma = \frac{(Ze)^2}{kT_z} \left(\frac{4\pi n_z}{3} \right)^{1/3}, \quad (1)$$

$$\kappa = \left(\frac{3}{4\pi n_z} \right)^{1/3} \frac{1}{r_D}, \quad (2)$$

$$r_D = \left(\frac{4\pi e^2 n_{i_cp}}{kT_i} + \frac{4\pi e^2 n_{e_cp}}{kT_e} \right)^{-1/2}, \quad (3)$$

где r_D – дебаевский радиус экранирования микроионами, Z – модуль зарядового числа макроиона (далее будем называть его «зарядом»), e – модуль заряда электрона, k – константа Больцмана, kT_i и kT_e – температуры положительных микроионов и электронов, n_Z – концентрация макроионов, n_{i_cp} и n_{e_cp} – средние концентрации микроионов и электронов. На фазовой диаграмме [1] зафиксированы три фазовых состояния: флюид, кристаллы ОЦК и ГЦК. Помимо этого, в главе 1 рассмотрены работы, посвященные прямому численному моделированию фазовых переходов в дебаевской плазме [4] и в двухкомпонентной асимметричной плазме заряженных твердых шаров [5]. Также, в главе 1 рассмотрены некоторые уравнения состояния комплексной плазмы, предложенные в литературе.

Вторая глава посвящена анализу причин явного несоответствия общей структуры фазовой диаграммы трех вышеназванных работ [1], [4] и [5] а также оценке величины скачка плотности при плавлении, отсутствующего в результатах [1]. Для этой цели исходная фазовая диаграмма [1] перестраивается в естественные термодинамические переменные: температура–концентрация–давление.

В разделе 2.1 исходная фазовая диаграмма однокомпонентной системы Юкавы перестроена в переменные температура–концентрация. Выделены ключевые точки и линия максимальной плотности существования фазы ГЦК, а также рассчитаны асимптотики кривой плавления при $\kappa \ll 1$ и $\kappa \gg 1$. Далее кривая плавления однокомпонентной системы с потенциалом Юкавы перестроена в переменные температура–давление с использованием программы вычисления уравнения состояния [6]. Для этого представления проанализировано выполнение закона Симона, хорошо выполняющегося для кривых плавления в системе мягких сфер и других системах с простым отталкиванием.

Главным результатом раздела 2.1 является оценка скачка плотности на границе плавления в однокомпонентной системе Юкавы на основе допущения [7], [8] об универсальности скачков энтропии и плотности в системах с простым отталкиванием. Приведены аналитические аппроксимации указанного скачка плотности от параметров κ и Γ на кривой плавления. Максимальное значение оцененного таким образом скачка плотности достигает 10%.

Раздел 2.2 посвящен проблеме фазовой диаграммы в более реалистичной модели комплексной плазмы, все еще описываемой как однокомпонентная система, но с эффективным дебаевским потенциалом, зависящим от температуры и плотности, и с экранированием только

одним сортом микроионов. Центральным моментом является то, что для *однотемпературной* ($T_Z = T_i$) асимметричной комплексной плазмы с потенциалом Дебая макроионов параметры Γ и κ уже не являются более независимыми, а связаны соотношением $\Gamma = \kappa^2 Z/3$. Это означает, что при фиксированном Z вся двумерная фазовая диаграмма в переменных $n_Z - T_Z$ сжимается в координатах $\kappa - \Gamma$ диаграммы [1] в одномерную кривую $\Gamma = \kappa^2 Z/3$ (!). И напротив, фазовая диаграмма [1], перенесенная в плоскость $n_Z - T_Z$, приобретает вид чередующихся полос кристаллического, флюидного и двухфазного состояний в зависимости от выбора величины Z системы. Это показано на рисунке 1. На рисунке 2 приведен пример такой полосатой фазовой диаграммы для $Z = 1000$.

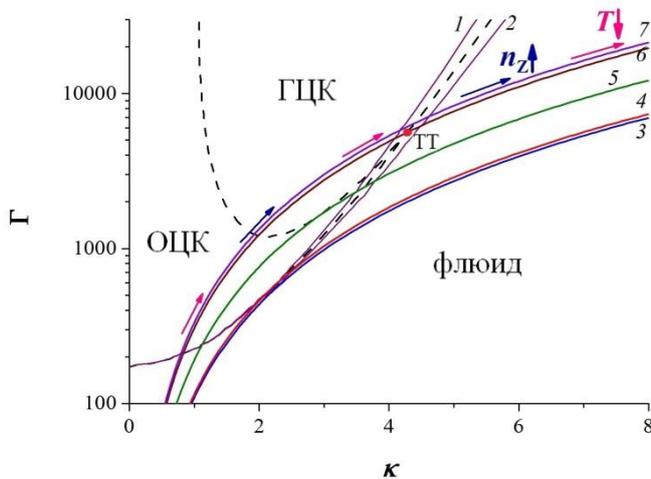


Рисунок 1 – Фазовая диаграмма дебаевской системы с линиями $Z = \text{const}$. Пунктир – границы фазовых переходов диаграммы [1], 1 – граница плавления кристалла, 2 – граница замерзания жидкости, 3–7 – параболы $\Gamma \sim \kappa^2$ для разных Z : 3 – $Z = 327$, касательная к линии 1, 4 – $Z = 345$, касательная к линии 2, 5 – $Z = 570$, касательная к границе ОЦК-ГЦК, 6 – $Z = 920$, проходит через тройную точку диаграммы [1], 7 – $Z = 1000$. Стрелки: направление изменения температуры при изохорическом охлаждении и концентрации при изотермическом сжатии вдоль $\Gamma \sim \kappa^2$.

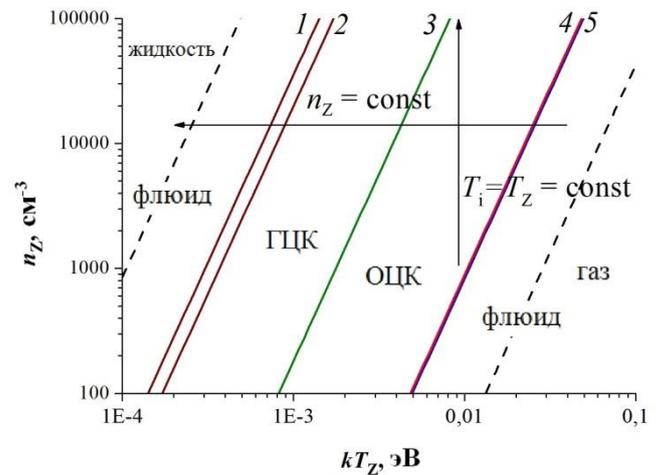


Рисунок 2 – Фазовая диаграмма однотемпературной дебаевской системы для $Z = 1000$ в переменных температура–концентрация. Линии 1 и 2 – границы межфазной зоны флюид+ГЦК, 3 – граница ГЦК–ОЦК (скачок плотности не оценивался), 4 и 5 – границы межфазной зоны ОЦК+флюид. Пунктирные линии – экстраполированные границы фазового расслоения во флюиде согласно [4].

Необычным является то, что при изохорическом понижении температуры конечным стабильным состоянием такой диаграммы [1] является флюид, а не кристалл! Строго говоря,

это является артефактом системы, так как при $n_Z = const$ и $T_Z \rightarrow 0$ $r_D \ll r_{cp}$, где r_{cp} – среднее расстояние между макроионами, и система искусственно становится идеальной. Кроме того, при расчете исходной фазовой диаграммы [1] в переменных κ – Γ не учитывался собственный объем макроионов, а также эффект нелинейного экранирования макроионов микроионами, т.е. в этом случае не выполнялись условия $4\pi n_Z R_Z^3/3 < 1$ и $Ze^2/(R_Z k T_i) \ll 1$ соответственно.

Глава 3 посвящена проблеме термодинамической устойчивости и фазовых переходов в асимметричной комплексной плазме. Как уже отмечено в главе 2, фазовые границы на диаграмме [1] искусственно ограничены условием перехода при постоянной плотности, т.е. в качестве условия межфазного равновесия используется условие равенства свободных энергий Гельмгольца фаз (так называемое приближение «замороженного фона»), а не условие равенства давлений и химических потенциалов. Тем самым из анализа [1] искусственно удалена возможность фазовых переходов типа газ–жидкость и газ–кристалл. Именно эта возможность проанализирована в главе 3.

В подразделе 3.1 с использованием уравнений состояния [2] и [3] выявлено наличие обширных областей отрицательного давления и отрицательной сжимаемости (рисунок 3). При их вычислении учтена связь параметров κ и Γ ($\Gamma = \kappa^2 Z/3$) и справедливость теоремы вириала для чисто кулоновской системы, рассмотренной в [3] ($p_{ex} = u_{ex}/3$, где p_{ex} и u_{ex} – неидеальные части безразмерных давления и энергии взаимодействия). Общий вывод подраздела 3.1 таков, что в рассмотренной в [2] и [3] асимметричной комплексной плазме помимо изохорических фазовых переходов, описываемых диаграммой [1], возможны дополнительные фазовые переходы с существенным скачком плотности.

В подразделе 3.2 проблема фазовых переходов проанализирована на основе работы [4], где для системы ионов с *дебаевским* потенциалом прямым численным моделированием (Монте-Карло) зафиксирован фазовый переход флюид–флюид с существенным скачком плотности. Границы фазового перехода из работы [4] перенесены, во-первых, на исходную диаграмму [1] в координатах κ – Γ (рисунок 4), а во-вторых, на диаграмму рисунка 2 в координатах $\lg(kT_Z)$ – $\lg(n_Z)$. В первом случае показано, что заметная часть границ изохорического плавления и перехода ГЦК–ОЦК из [1] попадает в двухфазную зону перехода флюид–флюид из [4], и, следовательно, не может реализоваться вне искусственного ограничения изохоричности в моделировании [1]. Этот же эффект выявлен и в координатах $\lg(kT_Z)$ – $\lg(n_Z)$, где двухфазная область расслоения флюид–флюид согласно [4] оказывается обширной полосой, захватывающей всю зону существования кристалла согласно [1]. Кроме

того, эта зона расслоения флюид-флюид [4] качественно соответствует полученным ранее границам отрицательной сжимаемости согласно [2] и [3] (рисунок 3).

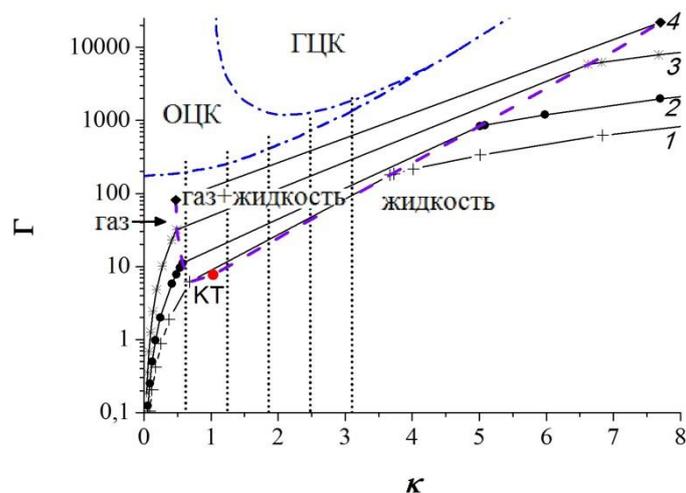
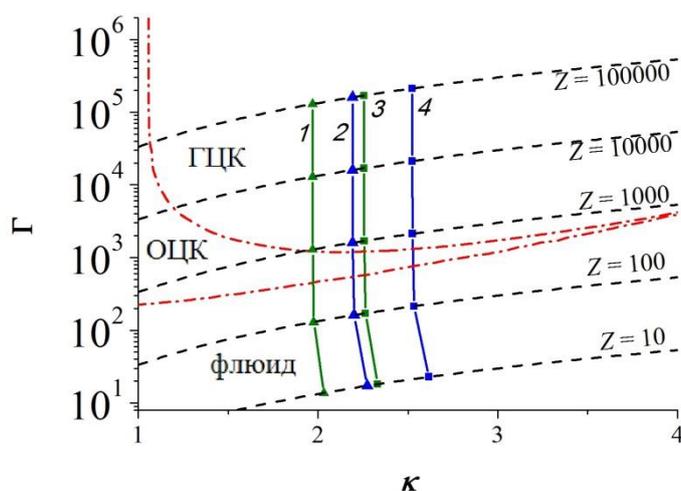


Рисунок 3 – Границы отрицательной сжимаемости (справа от линий 1 и 2) и отрицательного давления (справа от 3 и 4) на исходной диаграмме [1] согласно уравнениям состояния [2] (линии 1 и 3) и [3] (линии 2 и 4). Штрихпунктир – границы фазовых переходов [1]. Пунктир – параболы $\Gamma = \kappa^2 Z/3$ (цифры – заряд макроиона).

Рисунок 4 – Границы фазовых переходов в дебаевской системе на исходной диаграмме [1] (штрихпунктир) и в [4] (пунктир – границы двухфазной области газ-жидкость (КТ – критическая точка согласно [4])). Линии 1-3 [4]: 1 – $Z = 40$, 2 – $Z = 100$, 3 – $Z = 400$; 4 – экстраполяция данных [4] для $Z = 1000$. Вертикальный пунктир – расчеты флюидной дебаевской системы [6] с положительным давлением.

В подразделе 3.3 проблема фазовых переходов (ФП) в комплексной плазме проанализирована на основе работы [5], где для прототипа комплексной плазмы – асимметричной двухкомпонентной системы разнозаряженных твердых сфер прямым численным моделированием зафиксированы три (!) типа ФП с существенным скачком плотности: плавление, кипение и сублимация. Как и в подразделе 3.2, границы всех трех ФП из работы [5] перенесены на исходную диаграмму [1] в координатах κ - Γ . При этом, как уже отмечено в главе 2, для каждого фиксированного Z вся (!) совокупность ФП с диаграммы температура-концентрация из [5] оказывается ограниченной одной двумерной кривой – параболой $\Gamma = Z\kappa^2/3$. Анализ приведенных в [5] фазовых диаграмм показывает, что на фазовой диаграмме [1] в координатах κ - Γ не удастся найти никакого соответствия между ФП [5] и [1]. Следовательно, фазовая диаграмма однокомпонентной дебаевской системы [1] не описывает

фазовые переходы, получаемые прямым моделированием двухкомпонентной асимметричной плазмы заряженных твердых шаров [5].

Таким образом, в главе 3 делается вывод, что фазовая диаграмма [1] *существенно неполна* и не отражает все доступные для асимметричной комплексной плазмы фазовые переходы из-за искусственного ограничения только *изохорическими* переходами.

Глава 4 посвящена изучению влияния эффекта нелинейного экранирования макроионов микроионами на параметры комплексной плазмы, положение ее фазового состояния на фазовой диаграмме и термодинамику системы.

В разделе 4.1 рассмотрена двухкомпонентная система классических макроионов конечных размеров с зарядами $Z \gg 1$ и точечных противоионов с зарядами 1.

В подразделе 4.1.1 в приближении Пуассона–Больцмана в модели средней сферической ячейки Вигнера–Зейтца с центральным макроионом рассчитан средний самосогласованный потенциал и профиль микроионов. Продемонстрировано отличие получившихся распределений потенциала и профиля микроионов от аналогичных, рассчитанных в линеаризованном приближении. Для этого решается уравнение:

$$E(x) = -\frac{Ze^2}{kT_i R} \frac{1}{x^2} \left(1 - \frac{\int_{x_z}^x 4\pi x_1^2 \exp(-\Phi(x_1)) dx_1}{\int_{x_z}^1 4\pi x_1^2 \exp(-\Phi(x_1)) dx_1} \right) \quad (4)$$

для $x \in [x_z, 1]$, где x , $E(x) = -d\Phi(x)/dx$ и $\Phi(x)$ – безразмерные расстояние, напряженность и потенциал, R – радиус ячейки Вигнера–Зейтца, $x \equiv r/R$, r – размерное расстояние, $x_z \equiv R_z/R$, $\Phi(x) \equiv e\phi(x)/(kT_i)$, $\phi(x)$ – размерный потенциал, $E(x) = eR/(kT_i)E(x)$, $E(x)$ – размерная напряженность. Граничные условия $\Phi(R) = 0$ и $E(R) = 0$. По полученному профилю микроионов рассчитана кулоновская энергия взаимодействия зарядов в ячейке.

В подразделе 4.1.2 предложено разделение всех микроионов на свободные и связанные. За счет связанных микроионов, локализованных вблизи макроиона, заряд последнего на средних расстояниях между макроионами фактически кажется меньше, чем он есть на самом деле. Этот меньший (видимый) заряд называют эффективным [9]. В работе рассчитана зависимость эффективного заряда макроиона Z^* от его реального заряда Z . В зависимости $Z^*(Z)$ выявлено существование двух участков – участка линейного нарастания Z^* от Z при малых Z , и режима “насыщения” – слабо растущего Z^* от Z из-за проявления эффекта нелинейного экранирования, учитываемого в рамках приближения Пуассона–Больцмана. В работе проведено сравнение с результатами расчета, предложенными в работе [10], и отмечена

общая тенденция двухстадийного изменения эффективного заряда в зависимости от исходного.

В разделе 4.2 проведена приближенная оценка влияние эффекта нелинейного экранирования на *реальное* фазовое состояние двухкомпонентной комплексной плазмы. В основу положено допущение, что фазовое состояние системы в первую очередь определяется *эффективным* взаимодействием макроионов на *средних расстояниях* между ними. Предполагается, что последнее определяется *эффективным зарядом* Z^* , экранируемым только *свободными микроионами* с концентрацией $n_{i0}(r)$:

$$\kappa^* = \left(\frac{3}{4\pi n_z} \right)^{1/3} \left(\frac{4\pi e^2 n_{i0}}{kT_i} \right)^{-1/2}, \quad (5)$$

$$\Gamma^* = \frac{(Z^* e)^2}{kT_i} \left(\frac{4\pi n_z}{3} \right)^{1/3}. \quad (6)$$

В работе делается утверждение, что *структура* диаграммы Хамагучи *приблизительно* сохраняется, но уже в переменных $\kappa^* - \Gamma^*$. Поскольку $Z^* < Z$ и $n_{i0}^* < n_{i,cr}$, то при учете эффекта нелинейного экранирования реальное положение фазового состояния на исходной фазовой диаграмме смещается в сторону меньших Γ и κ . Это продемонстрировано на рисунках 5 и 6. Показано, что обсуждаемый сдвиг положения фазовых границ на исходной фазовой диаграмме тем значительнее, чем ниже температура. Также можно ожидать более заметное смещение в системах с более высоким зарядом макроионов.

В разделе 4.3 проводится модификация предложенного в работе [3] приближения Дебая–Хюккеля в корреляционной полости с учетом эффекта нелинейного экранирования внутри этой полости. В этой модификации профили макроионов и микроионов описываются следующей системой уравнений:

$$E_1(x) = \frac{Ze^2}{kT_i h_1} \frac{1}{x^2} \left(-Z + \int_{x_{Z1}}^x 4\pi h_1^3 x_{var}^2 n_{i01} \exp(-(\Phi_1(x_{var}) - \Phi_1(1))) dx_{var} \right), \quad (7)$$

$$h_1 = -\frac{r_{Dout1}}{2} \left(-1 + \frac{4Ze^2}{kT_i r_{Dout1}} \left(Z - \int_{x_{Z1}}^1 4\pi h_1^3 x^2 n_{i01} \exp(-(\Phi_1(x) - \Phi_1(1))) dx \right) \right), \quad (8)$$

где $E_1(x) = -d\Phi_1(x)/dx$ и $\Phi_1(x)$ – безразмерные напряженность и потенциал в модификации, h_1 – размер корреляционной полости, $x_{Z1} = R_z/h_1$ – безразмерный радиус макроиона в модификации, n_{i01} – плотность микроионов на границе корреляционной полости, r_{Dout1} – дебаевский радиус вне корреляционной полости. В работе показано, что размер

корреляционной полости, полученный в приближении Пуассона-Больцмана, меньше, чем аналогичный размер в приближении Дебая-Хюккеля, рассчитанный по формулам [3]. Помимо этого, в работе предложена формула для расчета внутренней энергии, более корректно, на наш взгляд, чем в [3], учитывающая вклад взаимодействия макроиона с микроионами и микроионов друг с другом. На рисунке 7 продемонстрировано, что энергия взаимодействия двухкомпонентной комплексной плазмы, полученная в приближении Пуассона-Больцмана (линия б), заметно отличается от рассчитанной в линеаризованном приближении Дебая-Хюккеля в корреляционной полости (линия 4).

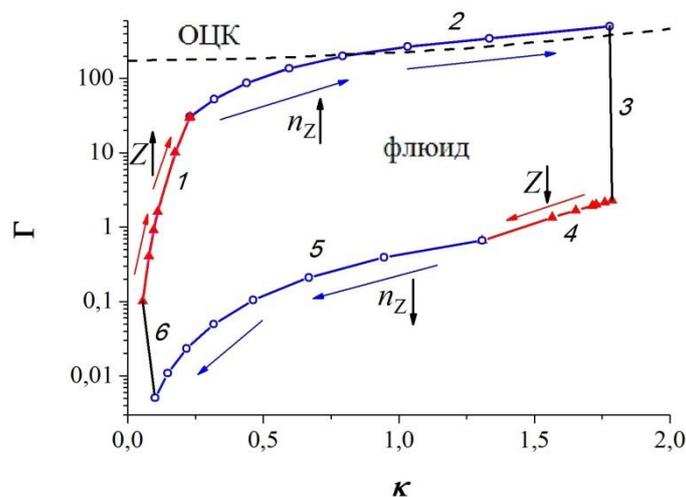
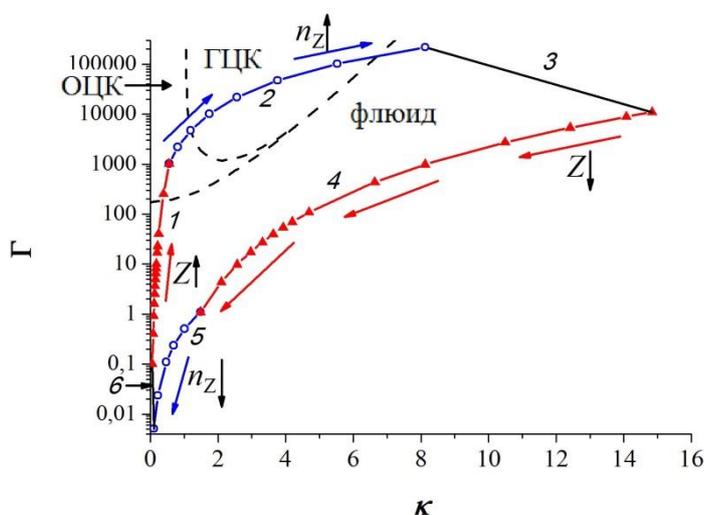


Рисунок 5 – Ожидаемая область характерных значений параметров двухкомпонентной комплексной плазмы ($R_Z = 1$ мкм). Линии: 1 – $n_Z = 10^2$ см $^{-3}$, $kT_Z = kT_i = kT = 0.1$ эВ, Z меняется в пределах ($10^2 \div 10^4$) (показано стрелками); 2 – $kT = 0.1$ эВ, $Z = 10^4$, n_Z меняется в пределах ($10^2 \div 10^9$) см $^{-3}$; 3 – $Z = 10^4$, $n_Z = 10^9$ см $^{-3}$; 4 – $kT_Z = 2$ эВ, $kT_i = 0.03$ эВ, $n_Z = 10^9$ см $^{-3}$, Z меняется в пределах ($10^4 \div 10^2$); 5 – $kT_Z = 2$ эВ, $kT_i = 0.03$ эВ, $Z = 10^2$, n_Z меняется в пределах ($10^9 \div 10^2$) см $^{-3}$; 6 – $Z = 10^2$, $n_Z = 10^2$ см $^{-3}$. Пунктир – границы фазовых состояний на диаграмме [1].

Рисунок 6 – Реальная область характерных значений параметров двухкомпонентной комплексной плазмы. Параметры системы и линий соответствуют обозначениям рисунка 5.

В разделе 4.4 анализируется термодинамика изохорического смешения в комплексной плазме с двумя сортами макроионов. Рассчитывается энергетический эффект смешения

средних сферических ячеек Вигнера-Зейтца, где в центре располагается макроион одного из сортов, и показано, что в положении устойчивого термодинамического равновесия полная свободная энергия Гельмгольца уменьшается.

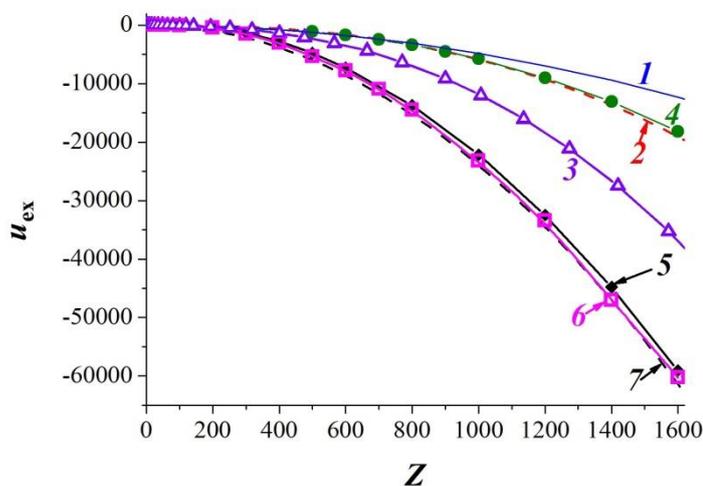


Рисунок 7 – Безразмерная энергия взаимодействия в зависимости от Z ($n_Z = 10^8 \text{ см}^{-3}$, $kT_i = 0,03 \text{ эВ}$, $R_Z/R \approx 0,075$, $R_Z = 1 \text{ мкм}$). Приближения: линия 1 и линия 5 с ромбами – равномерное распределение микроионов и приближение Пуассона-Больцмана в средних сферических ячейках Вигнера-Зейтца соответственно, пунктирная линия 2 – внеячеечное приближение Дебая-Хюккеля ($-Ze/(r_D kT_i)$ – потенциал), линия 3 с треугольниками и линия 4 с кружками – расчет по уравнениям [2] и [3] соответственно. Линия 6 с квадратами – модифицированное приближение. Линия 7 – приближение микроионов, локализованных на поверхности макроиона (потенциал $-Ze/(R_Z kT_i)$).

В заключении сформулированы основные результаты работы.

1) Фазовая диаграмма однокомпонентной системы с фиксированным (не дебаевским) потенциалом Юкавы перестроена в термодинамические переменные температура–концентрация с выделением ключевых точек, предельных асимптотик и аппроксимаций. Кривая плавления однокомпонентной системы с фиксированным потенциалом Юкавы перестроена в переменные температура–давление.

2) Проведена теоретическая оценка величины скачка плотности вдоль всей границы плавления, отсутствующего в оригинальной работе [1], и получена аналитическая зависимость скачка плотности на границе плавления от параметров κ и Γ на этой кривой. Максимальный скачок плотности составил около 10%. Проанализировано выполнение закона Симона для границы плавления и выявлены отличия между полученными зависимостями давления в системе от температуры и этим законом.

3) Фазовая диаграмма однокомпонентной плазмы макроионов с экранированным (дебаевским) потенциалом, зависящим от температуры и плотности фоновых микроионов [1], перестроена в термодинамические переменные температура–концентрация. Проанализирована полосатая структура фазовых состояний в плоскости n_Z-T_Z и подчеркнута нефизичность флюидного состояния в пределе $T_Z \rightarrow 0$ и $n_Z \rightarrow \infty$.

4) Проведен расчет профиля самосогласованного потенциала и пространственного распределения микроионов в рамках модели средней сферической ячейки Вигнера–Зейтца в приближении Пуассона–Больцмана.

5) Продемонстрированы сдвиги фазовых границ плавления и перехода между двумя кристаллическими решетками исходной диаграммы на основе введения понятий эффективного (видимого) заряда макроиона и разделения микроионов на свободные и связанные.

6) Проведен сравнительный анализ нарушения условий термодинамической устойчивости в приближенных уравнениях состояния [2] и [3]. Рассчитаны границы неустойчивости относительно самопроизвольного распада флюидного состояния системы на фазы разной плотности. Проведен анализ и сравнение полученных результатов с известными результатами прямого численного моделирования методом Монте-Карло асимметричной дебаевской системы [4] и асимметричной системы заряженных твёрдых сфер [5].

7) Модифицирована линеаризованная схема расчета [3] самосогласованного потенциала и профиля микроионов в двухкомпонентной асимметричной комплексной плазме в приближении корреляционной полости с использованием численного решения приближения Пуассона–Больцмана.

8) Рассчитана энергия кулоновского взаимодействия асимметричной комплексной плазмы в рамках построенной модификации приближения корреляционной полости. Рассчитанная энергия существенно отличается от полученной в линеаризованном (дебаевском) приближении корреляционной полости.

9) Проведен расчет эффекта изохорического смешения двух сортов макроионов в приближении смеси средних сферических ячеек Вигнера-Зейтца с учетом эффектов нелинейного экранирования по Пуассону–Больцману.

Цитированная литература

1. Hamaguchi S., Farouki R.T. Dubin D. Triple point of Yukawa systems // Physical Review E. – 1997. – V. 56. – P. 4671–4682.

2. Hamaguchi S., Farouki R.T. Thermodynamics of strongly coupled Yukawa systems near the one-component OCP limit. II. Molecular dynamics simulations. // *Journal of Chemical Physics*. – 1994. – V. 101. – P. 9885–9893.
3. Khrapak S.A., Khrapak A.G. Ivlev A.V., Morfill G.E. Simple estimation of thermodynamic properties of Yukawa systems // *Physical Review E*. – 2014. – V. 89. – P. 023102.
4. Dijkstra M., van Roij, R. Vapour–liquid coexistence for purely repulsive point-Yukawa fluids // *Journal of Physics: Condensed Matter*. – 1998. – V. 10. – P. 1219–1228.
5. Hynninen A., Panagiotopoulos A. Disappearance of the gas–liquid phase transition for highly charged colloids // *Physical Review Letters*. – 2007. – V. 98. – P. 198301.
6. Решетняк В.В., Старостин А.Н., Филиппов А.В. Теоретическое исследование равновесных свойств жидкости Юкавы в широком диапазоне параметров // *Журнал экспериментальной и теоретической физики*. – 2018. – Т.124, № 6(12). – С.1258–1270.
7. DeWitt H., Rosenfeld Y. Derivation of the one component plasma fluid equation of state // *Physics Letters*. – 1979. – V. 75A. – P. 79–80.
8. Стишов С. М. Термодинамика плавления простых веществ // *Успехи физических наук*. – 1974. – Т. 114. – С. 3–40.
9. Жуховицкий Д. И., Храпак А. Г., Якубов И. Т. Ионизационное равновесие в сильно неидеальной плазме с конденсированной дисперсной фазой. // *Теплофизика высоких температур*. – 1984. – Т. 22, № 5. – С. 833–840.
10. Diehl A., Barbosa M., Levin Y. Charge renormalization and phase separation in colloidal suspensions // *Europhysics Letters*. – 2001. – V. 53. – P. 86–92.

Основные публикации по теме диссертации

1. Martynova I., Iosilevskiy I. Effect of the non-linear screening on a modification of the Debye-Hückel plus hole approximation in complex plasma // *Contributions to Plasma Physics*. – 2019. – V. 59, № 4-5. – P. 1-6.
2. Martynova I., Iosilevskiy I. Effect of non-linear screening on thermodynamic properties of complex plasma // *Journal of Physics: Conference Series*. – 2019. – V. 1147. – P. 012107.
3. Martynova I., Iosilevskiy I., Shagayda A. Effect of nonlinear screening on a complex plasma phase state // *IEEE Transactions on Plasma Science*. – 2018. – V. 46, № 1. – P. 14–18.
4. Martynova I., Iosilevskiy I., Shagayda A. Non-linear screening and phase states of a complex plasma // *Contributions to Plasma Physics*. – 2018. – V. 58, № 2–3. – P. 203–208.

5. Martynova I., Iosilevskiy I. Non-linear charge screening and interaction energy of macroions in complex plasma // Journal of Physics: Conference Series. – 2018. – V. 1094. – P. 012032.
6. Martynova I., Iosilevskiy I., Shagayda A. Macroions non-linear screening in complex plasma // Journal of Physics: Conference Series. – 2018. – V. 946. – P. 012147.
7. Martynova I., Iosilevskiy I. Features of Phase Transitions in Models of Complex Plasma // Contributions to Plasma Physics. –2016. – V. 56. – P. 432–441.
8. Martynova I., Iosilevskiy I. Problem of phase transitions and thermodynamic stability in complex (dusty, colloid etc) plasmas // Journal of Physics: Conference Series. – 2016. – V. 774. P. 012173.
9. Martynova I., Iosilevskiy I. On melting density gap and non-congruence of phase transitions in models of dusty and colloid plasmas // Journal of Physics: Conference Series. – 2015. – V. 653. – P. 012141.
10. Мартынова И.А., Иосилевский И.Л. О кривой плавления и неконгруэнтности в коллоидной и пылевой плазме // Вестник Казанского технологического университета. – 2014. – Т. 22. – С. 147–151.
11. Мартынова И.А., Иосилевский И.Л. Пылевая плазма. Фазовые диаграммы, скачок плотности и неконгруэнтность фазовых переходов // Известия института инженерной физики. – 2014. – Т. 3, № 33. – С.39–44.

Мартынова Инна Александровна

Автореферат

РАСЧЕТНО-ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ
КОМПЛЕКСНОЙ ПЛАЗМЫ