

Исследование пылевой плазмы на основе интегрального уравнения Орнштейна–Цернике для многокомпонентной жидкости

А. В. Филиппов^{+*1)}, В. В. Решетняк⁺, А. Н. Старостин⁺, И. М. Ткаченко[×], В. Е. Фортов^{*}

⁺ Государственный научный центр Российской Федерации “Троицкий институт инновационных и термоядерных исследований”, 108840 Троицк, Москва, Россия

^{*} Объединенный институт высоких температур РАН, 125412 Москва, Россия

[×] Departament de Matemàtica Aplicada, Universitat Politècnica de València, 46022 Valencia, Spain

Поступила в редакцию 1 октября 2019 г.

После переработки 1 октября 2019 г.

Принята к публикации 11 октября 2019 г.

На основе интегрального уравнения жидкости Орнштейна–Цернике для многокомпонентной плазмы проведено исследование электростатического взаимодействия заряженных частиц в пылевой плазме. Для самой неидеальной подсистемы плазмы выполнен переход к однокомпонентному приближению. Показано, что при значениях параметра неидеальности пылевой подсистемы Γ , меньших единицы, потенциал взаимодействия заряженных частиц плазмы друг с другом достаточно хорошо описывается дебаевским потенциалом с полной постоянной экранирования. При $\Gamma > 1$ статическая диэлектрическая функция в области малых значений волнового числа становится отрицательной и эта область с ростом Γ расширяется. Это приводит к появлению области расстояний, где наблюдается притяжение одноименно заряженных частиц и отталкивание разноименно заряженных. При этом суммарное давление, изохорическая теплоемкость и изотермическая сжимаемость пылевой плазмы во всем исследованном диапазоне параметра неидеальности $\Gamma < 250$ остаются положительными, но изотермическая сжимаемость только пылевой, неидеальной подсистемы становится отрицательной при $\Gamma \approx 2$.

DOI: 10.1134/S0370274X19220041

1. Введение. Пылевая плазма широко распространена в природе и технике, поэтому ее исследование представляет значительный интерес как для фундаментальной науки [1], так и для ряда приложений, например, для индустрии производства наночастиц [2]. Теоретическое исследование взаимодействия заряженных макрочастиц в такой плазме (электролите) все еще остается одним из самых важных вопросов [3–6]. При моделировании свойств пылевой плазмы, например, методом молекулярной и броуновской динамики, широко используется потенциал Юкавы или Дебая в качестве парного потенциала взаимодействия (см., например, [7]). Такой вид потенциала взаимодействия пылевых частиц имеет место только в случае применимости приближения Дебая–Гюккеля [8] и его использование для изучения пылевой плазмы при высоких значениях параметра неидеальности (по взаимодействию в пылевой подсистеме) вызывает вопросы.

В настоящей работе для описания пылевой плазмы используется многокомпонентное уравнение

Орнштейна–Цернике (ОЦ) [9, 10]. В работах [11, 12] было показано, что уравнение ОЦ в гиперцепном приближении (ГЦП) очень хорошо описывает термодинамические свойства пылевой плазмы. Поэтому в настоящей работе для замыкания уравнений ОЦ используется именно это приближение.

2. Уравнение Орнштейна–Цернике для многокомпонентной плазмы. Рассматривается трехкомпонентная плазма, взаимодействие между заряженными частицами в которой описывается кулоновским потенциалом:

$$V_{\nu\mu}(|\mathbf{r}_\nu - \mathbf{r}_\mu|) = \frac{e^2 z_\nu z_\mu}{|\mathbf{r}_\nu - \mathbf{r}_\mu|}, \quad (1)$$

где греческие индексы ν и μ пробегает значения 0 для пылевых частиц, 1 – для электронов и 2 – для ионов, z_ν – зарядовое число частиц сорта ν : $z_1 = -1$, \mathbf{r}_ν и \mathbf{r}_μ – радиус-векторы положений частиц сорта ν и μ , соответственно. Для устранения проблем с кулоновским потенциалом на малых расстояниях можно ввести эффективные потенциалы (см. [13, 14] и цитированную в них литературу) и явно учесть конечный размер пылевых частиц [15]. Но при рассматриваемом

¹⁾e-mail: fav@triniti.ru

мых в настоящей работе параметрах плазмы вид потенциала на малых расстояниях не имеет значения.

Уравнение ОЦ для однородной многокомпонентной жидкости имеет вид [9]:

$$h_{\nu\mu}(r) = C_{\nu\mu}(r) + \sum_{\lambda} n_{\lambda} \int C_{\nu\lambda}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) h_{\lambda\mu}(r') d\mathbf{r}', \quad (2)$$

где $h_{\nu\mu} = g_{\nu\mu} - 1$ – парциальная парная корреляционная функция и $C_{\nu\mu}$ – прямая корреляционная функция. Здесь n_{λ} по определению есть усредненная концентрация частиц сорта λ : $n_{\lambda} = N_{\lambda}/V$, N_{λ} – полное число частиц сорта λ в системе с объемом V . Поэтому условие полной квазинейтральности имеет вид:

$$\sum_{\nu} z_{\nu} n_{\nu} = 0. \quad (3)$$

С учетом симметрии корреляционных функций: $h_{\nu\mu} = h_{\mu\nu}$, $C_{\nu\mu} = C_{\mu\nu}$, система уравнений (2) в трехкомпонентной пылевой плазме определяет шесть функций. После трехмерного интегрального преобразования Фурье система интегральных уравнений (2) переходит в систему алгебраических уравнений:

$$\tilde{h}_{\nu\mu}(k) = \tilde{C}_{\nu\mu}(k) + \sum_{\lambda} n_{\lambda} \tilde{C}_{\nu\lambda}(k) \tilde{h}_{\lambda\mu}(k). \quad (4)$$

Здесь и далее Фурье-образы функций отмечены тильдой.

Из двух уравнений для \tilde{h}_{01} и \tilde{h}_{02} найдем их связь с \tilde{h}_{00} (аргумент k опускаем):

$$\begin{aligned} \tilde{h}_{01} &= \left(1 + n_0 \tilde{h}_{00}\right) \frac{\tilde{C}_{01} \left(1 - n_2 \tilde{C}_{22}\right) + n_2 \tilde{C}_{02} \tilde{C}_{12}}{D(k)}, \\ \tilde{h}_{02} &= \left(1 + n_0 \tilde{h}_{00}\right) \frac{\tilde{C}_{02} \left(1 - n_1 \tilde{C}_{11}\right) + n_1 \tilde{C}_{01} \tilde{C}_{12}}{D(k)}, \end{aligned} \quad (5)$$

где

$$D(k) = \left(1 - n_1 \tilde{C}_{11}\right) \left(1 - n_2 \tilde{C}_{22}\right) - n_1 n_2 \tilde{C}_{12}^2.$$

Теперь, подставив решение (5) в уравнение для \tilde{h}_{00} в системе (4), находим (см. [15, 16]):

$$\tilde{h}_{00}(k) = \tilde{C}_{\text{eff}}(k) + n_0 \tilde{C}_{\text{eff}}(k) \tilde{h}_{00}(k), \quad (6)$$

где введена эффективная прямая корреляционная функция

$$\begin{aligned} \tilde{C}_{\text{eff}}(k) &= \tilde{C}_{00} + \frac{1}{D(k)} \left[n_1 \tilde{C}_{01}^2 \left(1 - n_2 \tilde{C}_{22}\right) + \right. \\ &\left. + n_2 \tilde{C}_{02}^2 \left(1 - n_1 \tilde{C}_{11}\right) + 2n_1 n_2 \tilde{C}_{01} \tilde{C}_{02} \tilde{C}_{12} \right]. \end{aligned} \quad (7)$$

Видно, что уравнение (6) имеет вид уравнения ОЦ для однокомпонентной жидкости.

Далее рассматриваем условия, когда неидеальность может проявиться только в пылевой подсистеме. В этом случае возможно использование дебаевского приближения для прямых корреляционных функций [9] ($\nu = 0, 1, 2$; $\mu = 1, 2$):

$$C_{\nu\mu}(r) = -\beta V_{\nu\mu}(r) \equiv -\frac{e^2 z_{\nu} z_{\mu} \beta}{r}, \quad (8)$$

где β – обратная температура: $\beta = 1/T$, T – температура в энергетических единицах. Следовательно, после Фурье-преобразования имеем:

$$\tilde{C}_{\nu\mu}(k) = -\frac{4\pi e^2 z_{\nu} z_{\mu} \beta}{k^2}, \quad \nu = 0, 1, 2; \mu = 1, 2. \quad (9)$$

Используя (9), из (5) находим ($\nu = 1, 2$):

$$\tilde{h}_{0\nu}(k) = -4\pi e^2 z_0 z_{\nu} \beta f(k), \quad (10)$$

где $k_{ei}^2 = k_1^2 + k_2^2$, постоянные экранирования k_{ν} определены соотношениями:

$$k_{\nu}^2 = 4\pi e^2 z_{\nu}^2 n_{\nu} \beta, \quad (11)$$

$f(k)$ – функция, определенная соотношением: $f(k) = \left[1 + n_0 \tilde{h}_{00}(k)\right] / (k^2 + k_{ei}^2)$. Аналогично, из (7) находим:

$$\tilde{C}_{\text{eff}}(k) = \tilde{C}_{00}(k) + \frac{4\pi e^2 z_0^2 \beta k_{ei}^2}{k^2 (k^2 + k_{ei}^2)}. \quad (12)$$

После обратного преобразования отсюда получаем:

$$C_{\text{eff}}(r) = C_{00}(r) + \frac{e^2 z_0^2 \beta}{r} (1 - e^{-k_{ei}r}). \quad (13)$$

Уравнения ОЦ (2) замыкаются уравнениями:

$$h_{\nu\mu}(r) = e^{-\beta V_{\nu\mu}(r) + h_{\nu\mu}(r) - C_{\nu\mu}(r) + B_{\nu\mu}(r)} - 1, \quad (14)$$

где $B_{\nu\mu}(r)$ – бридж-функционал [10]. Выпишем это выражение для h_{00} явно и подставим в него C_{00} , выраженное через C_{eff} из (13):

$$\begin{aligned} h_{00}(r) &= \exp \left[-\frac{e^2 z_0^2 \beta}{r} e^{-k_{ei}r} + h_{00}(r) - \right. \\ &\left. - C_{\text{eff}}(r) + B_{00}(r) \right] - 1. \end{aligned} \quad (15)$$

Отсюда видно, что решение для h_{00} не изменится, если ввести эффективный дебаевский потенциал:

$$V_{\text{eff}}(r) = \frac{e^2 z_0^2}{r} e^{-k_{ei}r}. \quad (16)$$

Особо отметим, что постоянная экранирования при этом определяется только электронами и ионами, концентрации которых связаны условием квазинейтральности (3). Поэтому при изменении заряда или концентрации пылевых частиц постоянная экранирования k_{ei} также будет меняться.

В ГЦП полагается $V_{\nu\mu}(r) = 0$ и для замыкания уравнения ОЦ (6) имеем уравнение:

$$h_{00}(\mathbf{r}) = e^{-\beta V_{\text{эф}}(\mathbf{r}) + h_{00}(\mathbf{r}) - C_{\text{эф}}(\mathbf{r})} - 1. \quad (17)$$

3. Статическая диэлектрическая функция многокомпонентной пылевой плазмы. Статическая диэлектрическая функция (СДФ) определяется зарядовой функцией отклика χ_{ZZ} , которая сама связана со структурным фактором флуктуационно-диссипационной теоремой [9, 17]

$$\chi_{ZZ}(k) \equiv \sum_{\nu} \sum_{\mu} z_{\nu} z_{\mu} \chi_{\nu\mu}(k) = -\beta n S_{ZZ}(k), \quad (18)$$

где $\chi_{\nu\mu}$ – парциальные функции отклика [9]:

$$\chi_{\nu\mu}(k) = -\beta n S_{\nu\mu}(k), \quad (19)$$

n – суммарная концентрация заряженных частиц; $n = \sum_{\nu} n_{\nu}$, S_{ZZ} – структурный фактор заряд-заряд:

$$S_{ZZ}(k) = \sum_{\nu} \sum_{\mu} z_{\nu} z_{\mu} S_{\nu\mu}(k), \quad (20)$$

$S_{\nu\mu}$ – парциальные структурные факторы [9]:

$$S_{\nu\mu}(k) = \frac{n_{\nu}}{n} \left[\delta_{\nu\mu} + n_{\mu} \tilde{h}_{\nu\mu}(k) \right], \quad (21)$$

$\delta_{\nu\mu}$ – символ Кронекера. Следовательно, для определения обратной СДФ имеем:

$$\frac{1}{\varepsilon(k)} = 1 + \frac{4\pi e^2}{k^2} \chi_{ZZ}(k) \equiv 1 - \frac{4\pi e^2}{k^2} \beta n S_{ZZ}(k). \quad (22)$$

Так как функция $S_{ZZ}(k)$ по определению положительна, то из (22) имеем неравенство:

$$\varepsilon^{-1}(k) \leq 1, \quad (23)$$

верное при всех k . Это неравенство допускает отрицательные значения обратной СДФ, соответственно, и самой СДФ, которая не может принимать значения в диапазоне от нуля до единицы: $\varepsilon(k) \geq 1$ или $\varepsilon(k) < 0$ [18, 19].

4. Потенциал взаимодействия пылевых частиц. Потенциал точечного заряда q , помещенного в начало сферической системы координат, в пространстве координат определяется выражением [20]:

$$\phi(r) = \frac{2q}{\pi r} \int_0^{\infty} \frac{\sin(kr)}{k\varepsilon(k)} dk. \quad (24)$$

Следовательно, потенциал взаимодействия двух точечных зарядов q_1 и q_2 , находящихся друг от друга на расстоянии R , определяется выражением:

$$U(R) = \frac{2q_1 q_2}{\pi R} \int_0^{\infty} \frac{\sin(kR)}{k\varepsilon(k)} dk. \quad (25)$$

5. Давление и внутренняя энергия. Часть внутренней энергии, связанная с взаимодействием, для однородной плазмы определяется соотношением [9]:

$$\Delta U = \frac{1}{2} \sum_{\nu} \sum_{\mu} n_{\nu} n_{\mu} \int V_{\nu\mu}(r) g_{\nu\mu}(r) dr, \quad (26)$$

а давление по формуле:

$$\frac{\beta P}{n} = 1 - \frac{\beta}{6n} \sum_{\nu} \sum_{\mu} n_{\nu} n_{\mu} \int \mathbf{r} \frac{\partial V_{\nu\mu}(r)}{\partial \mathbf{r}} g_{\nu\mu}(r) dr. \quad (27)$$

Отсюда, для кулоновского потенциала взаимодействия (1) с учетом условия полной квазинейтральности (3), находим:

$$\Delta U = 2\pi e^2 \sum_{\nu} \sum_{\mu} n_{\nu} n_{\mu} z_{\nu} z_{\mu} \int_0^{\infty} h_{\nu\mu}(r) r dr, \quad (28)$$

$$P = nT + \frac{2\pi e^2}{3} \sum_{\nu} \sum_{\mu} n_{\nu} n_{\mu} z_{\nu} z_{\mu} \int_0^{\infty} h_{\nu\mu}(r) r dr. \quad (29)$$

6. Дебаевское приближение для пылевой компоненты. В этом разделе рассмотрим случай, когда идеальна и пылевая подсистема, т.е. дебаевское приближение применимо и для пылевой компоненты:

$$\Gamma = \frac{e^2 z_0^2 n_0^{1/3}}{T} \ll 1. \quad (30)$$

В этом случае из (12) находим:

$$\tilde{C}_{\text{эф}}(k) = -\frac{4\pi e^2 z_0^2 \beta}{k^2 + k_{ei}^2}. \quad (31)$$

Таким образом, из (6), (10) и решения трех последних уравнений системы (4) находим, что для всех ν и μ парная корреляционная функция имеет вид:

$$\tilde{h}_{\nu\mu}(k) = -\frac{4\pi e^2 \beta z_{\nu} z_{\mu}}{k^2 + k_D^2}, \quad (32)$$

где k_D – полная постоянная экранирования:

$$k_D^2 = 4\pi\beta e^2 \sum_{\nu} z_{\nu}^2 n_{\nu}. \quad (33)$$

Выполнив обратное преобразование Фурье, отсюда получаем хорошо известный результат [17]:

$$g_{\nu\mu}(r) = 1 - \frac{e^2 z_\nu z_\mu \beta}{r} e^{-k_D r}. \quad (34)$$

Далее, используя (32), из (22) для статической диэлектрической функции получаем ожидаемые результаты:

$$\frac{1}{\varepsilon(k)} = 1 - \frac{k_D^2}{k^2 + k_D^2}, \quad \varepsilon(k) = 1 + \frac{k_D^2}{k^2}. \quad (35)$$

С этой функцией из (25) находим:

$$U_D(r) = \frac{2q_1 q_2}{\pi R} \int_0^\infty \frac{k \sin(kR)}{k^2 + k_D^2} dk = \frac{q_1 q_2}{R} e^{-k_D R}. \quad (36)$$

Таким образом, в случае идеальности всех подсистем, потенциал взаимодействия точечных зарядов в пылевой плазме будет дебаевским с полной постоянной экранирования.

7. Численное моделирование и обсуждение результатов. Далее рассмотрим результаты исследования взаимодействия в пылевой плазме на основе численного решения уравнения ОЦ (6) в ГЦП (17) и на основе метода молекулярной динамики (МД) с потенциалом (16). Метод решения уравнения ОЦ в ГЦП подробно описан в работе [11]. В расчетах зафиксированы концентрация ионов $n_2 = 10^8 \text{ см}^{-3}$, их зарядовое число $z_2 = 1$, концентрация пылевых частиц $n_0 = 10^5 \text{ см}^{-3}$, температура $T = 300 \text{ К}$. Параметр неидеальности Γ менялся изменением заряда пылевых частиц z_0 , при этом концентрация электронов определялась из условия полной квазинейтральности (3).

На рисунке 1 приведены зависимости обратной и прямой СДФ пылевой плазмы, полученные из выражения (22) на основе численного решения уравнения ОЦ в ГЦП. Видно, что при $\Gamma \leq 1$ СДФ положительна, а при $\Gamma = 3.2$ в области малых значений волнового числа становится отрицательной. С ростом значения параметра неидеальности область отрицательных значений продвигается все дальше в область больших значений k и растут абсолютные значения СДФ. Возможность появления отрицательных значений СДФ обсуждалась в работах [21–23]. Зависимости $\varepsilon(k)$, представленные в работах [21, 23], похожи на приведенные на рис. 1, но все же отличаются от них из-за того, что в этих работах, как и в работе [22], использовалась не совсем последовательная схема определения СДФ.

На рисунке 1 также приведены зависимости $\varepsilon^{-1}(k)$ и $\varepsilon(k)$ при $\Gamma = 1, 5, 10$ и 100 , полученные

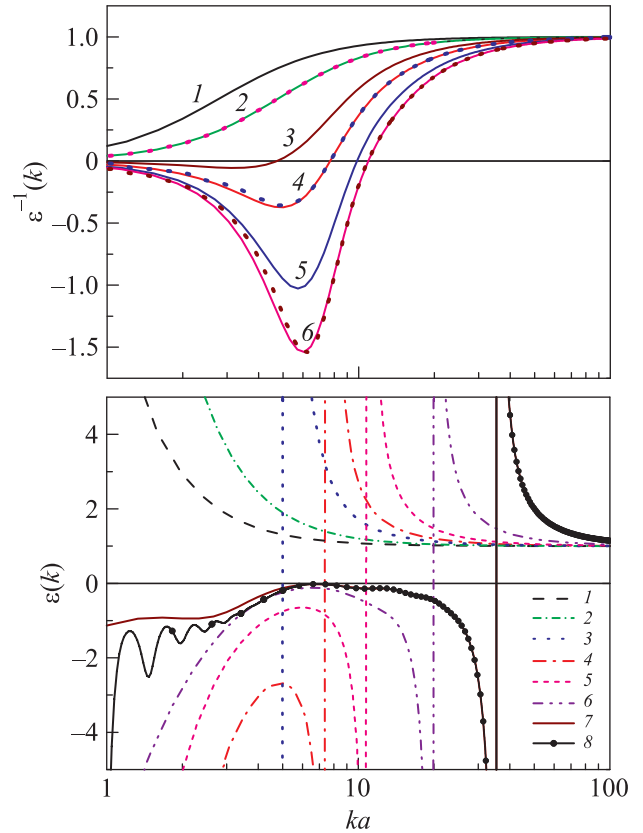


Рис. 1. (Цветной онлайн) Обратная (а) и прямая СДФ (б) пылевой плазмы при разных значениях параметра неидеальности: 1 – $\Gamma = 0.1$, 2 – 1, 3 – 3.2, 4 – 5, 5 – 7.9 (а), 10 (б), 6 – 10 (а), 32 (б), 7, 8 – 100 (б); (а) – сплошные линии – из уравнения ОЦ в ГЦП, точечные – методом молекулярной динамики при $\Gamma = 1, 5$ и 10 ; (б) – 1–7 – из уравнения ОЦ в ГЦП, 8 – методом молекулярной динамики

на основе расчетов структурного фактора пылевых частиц методом молекулярной динамики (МД) с потенциалом (16). Для всех, кроме S_{00} , парциальных структурных факторов использовалось дебаевское приближение, а структурный фактор пылевой подсистемы вычислялся методом молекулярной динамики. Из рисунка 1 видно хорошее согласие данных, полученных двумя разными методами, а расхождение при малых k для $\Gamma = 100$ отражает трудности определения структурного фактора методом МД в этой области.

На рисунке 2 приведены зависимости потенциала взаимодействия пылевых частиц, определенные из выражений (25) и (36). Видно, что при $\Gamma < 1$ потенциал взаимодействия хорошо описывается дебаевским потенциалом. При $\Gamma = 1$ на расстояниях, больших дебаевского радиуса, видны отклонения от дебаевского потенциала. При дальнейшем увеличении

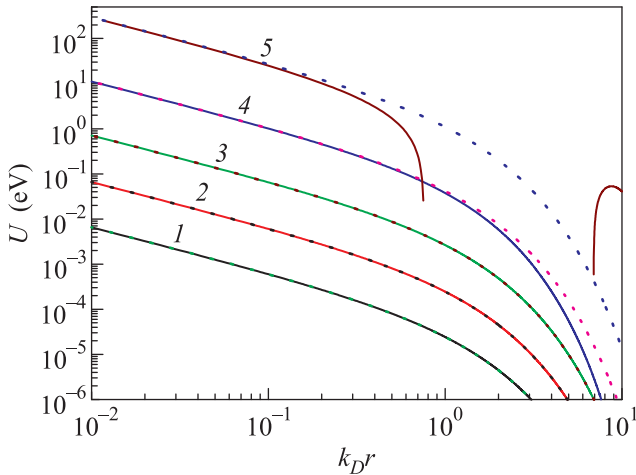


Рис. 2. (Цветной онлайн) Потенциал взаимодействия пылевых частиц при малых значениях параметра неидеальности: 1 – $\Gamma = 10^{-3}$, 2 – 10^{-2} , 3 – 10^{-1} , 4 – 1, 5 – 10. Сплошные кривые – из (25) на основе решения уравнения ОЦ в ГЦП, точечные – дебаевский потенциал (36)

параметра неидеальности появляется область межчастичных расстояний, где между одноименно заряженными частицами наблюдается притяжение, что хорошо демонстрирует рис. 3. Видно, что с ростом Γ область притяжения расширяется, растет глубина ямы, появляется барьер в потенциале взаимодействия со стороны больших расстояний и потенциал принимает осциллирующий характер.

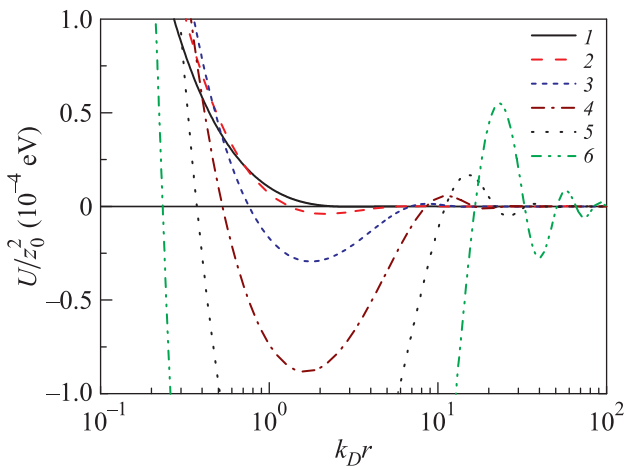


Рис. 3. (Цветной онлайн) Графики зависимости от $k_D r$ приведенного потенциала взаимодействия пылевых частиц при $\Gamma > 1$ с большим (а) и малым масштабами по оси ординат (б): 1 – $\Gamma = 2$, 2 – 4, 3 – 10, 4 – 20, 5 – 40, 6 – 100

Расчеты показали, что при малых значениях параметра неидеальности $\Gamma < 0.1$ (при этом $z_0 < 20$)

отклонения от дебаевской теории незначительны. С ростом Γ отклонения растут и уже при $\Gamma \simeq 1$ появляется притяжение между одноименно заряженными частицами при больших расстояниях между ними.

На рисунке 4 показаны левая и правая границы области отрицательных значений потенциала взаимодействия пылевых частиц (до первого максимума). Хорошо видно, что левая граница с ростом Γ все дальше продвигается в область малых расстояний, а правая граница – в область больших расстояний. Отметим, что при $\Gamma < 2$ правая граница не определялась из-за малости потенциала взаимодействия в этой области. Из рисунка 4 видно, что отрицательные значения потенциала появляются уже при $\Gamma \sim 0.5$, но на расстояниях, превосходящих двадцать радиусов Дебая. При $\Gamma \geq 1$ потенциал взаимодействия становится отрицательным на расстояниях в несколько дебаевских радиусов и меньше, что будет играть важную физическую роль в пылевой плазме, особенно в процессах формирования упорядоченных плазменно-пылевых структур и фазовых переходах.

На рисунке 4 также показаны точки первых (со стороны малых расстояний) минимума и максимума потенциала взаимодействия пылевых частиц. (При $\Gamma < 2$ точки максимума не определялись по той же причине, что и правая граница на рис. 4.) Из рисун-

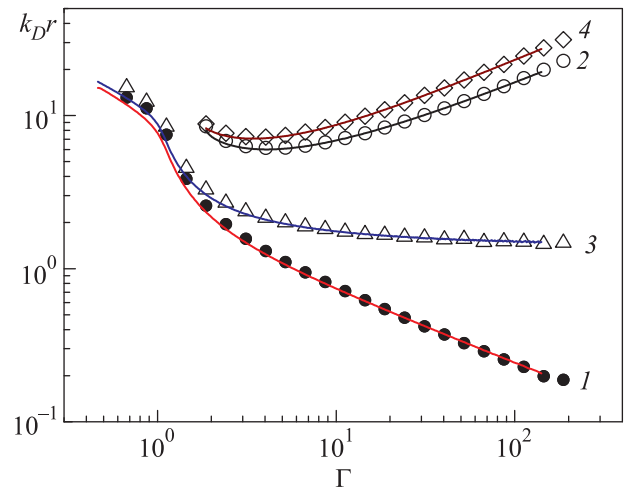


Рис. 4. (Цветной онлайн) Левая (1) и правая (2) границы отрицательных значений (до первого максимума), положения первых минимума (3) и максимума (4) потенциала взаимодействия пылевых частиц из решения уравнения ОЦ в ГЦП как функции Γ . Символы – $n_0 = 10^5 \text{ см}^{-3}$, $n_2 = 10^8 \text{ см}^{-3}$, $T = 300 \text{ К}$, $z_0 < 0$; сплошные кривые – $n_0 = 10^7 \text{ см}^{-3}$, $n_2 = 10^{10} \text{ см}^{-3}$, $T = 2000 \text{ К}$, $z_0 > 0$

ка 4 можно сделать вывод, что межчастичное расстояние, при котором взаимодействие между пыле-

выми частицами переходит от отталкивания к притяжению (точка минимума потенциала), с ростом Γ уменьшается и составляет примерно 1.5 дебаевских радиуса при высоких значениях параметра неидеальности. Отметим, что при $\Gamma > 3$ глубина ямы становилась заметно больше тепловой энергии пылевых частиц.

Использованный в настоящей работе подход подразумевает изотермичность плазмы, хотя возможно использование выражений для прямых корреляционных функций, полученных на основе цепочек уравнений ББГКИ (Боголюбова–Борна–Грина–Кирквуда–Ивона) для неизотермической плазмы. Этот подход без оговорок применим для изотермической пылевой плазмы, которая исследовалась, например, в работе [24]. В настоящей работе были проведены расчеты диэлектрических свойств и потенциала взаимодействия в изотермической плазме со следующими, близкими к экспериментальным [24] параметрами: $n_0 = 10^7 \text{ см}^{-3}$, $n_2 = 10^{10} \text{ см}^{-3}$, $T = 2000 \text{ К}$, при этом полагалось, что заряд пылевых частиц из-за термомиссии электронов положителен: $z_0 > 0$.

Расчеты показали, что в термической пылевой плазме при $\Gamma \gtrsim 1$ также имеют место отрицательные значения СДФ и наблюдается притяжение одноименно заряженных частиц. На рисунке 4 приведены левая и правая границы области отрицательных значений, а также положения первых минимума и максимума потенциала взаимодействия пылевых частиц в такой плазме. Видно, что картина очень похожа на случай плазмы с отрицательными зарядами. При уменьшении концентрации ионов до 10^9 см^{-3} заметных изменений представленной выше картины не происходило.

Исследования поправки к давлению за счет взаимодействия в пылевой плазме как с отрицательным, так и положительным зарядом пылевых частиц показали, что при $\Gamma < 1$ поправка мала и хорошо описывается дебаевской теорией. С ростом Γ поправка росла по абсолютной величине, оставаясь отрицательной, как и в дебаевском приближении, во всем исследованном диапазоне значений параметра неидеальности. При этом суммарное давление было положительным.

В работах [11, 12] были получены положительные значения поправки к давлению при рассмотрении системы пылевых частиц, взаимодействие между которыми описывалось дебаевским потенциалом. Разный знак поправок связан с тем, что в этих работах давление вычислялось с дебаевским потенциалом, а в настоящей работе — с кулоновским. Как было показано выше, введение дебаевского потенциала

является удобным приемом для расчета парной корреляционной функции пылевых частиц h_{00} в случае, когда только взаимодействие пылевых частиц друг с другом неидеально. При этом реальный потенциал взаимодействия заряженных частиц остается кулоновским.

8. Термодинамическая устойчивость пылевой плазмы. Появление отрицательных значений СДФ указывает на неустойчивость системы [18, 19] и возможность перехода в новое фазовое состояние. Ранее в работах [25, 26] на основе рассмотрения вырожденной плазмы был предсказан плазменный фазовый переход при $\Gamma \gtrsim 1$. Затем как в однокомпонентном приближении [21, 23], так и экстраполяцией результатов дебаевской теории было показано, что система теряет устойчивость при $\Gamma \approx 3$, что согласуется с полученными в настоящей работе результатами.

Пылевую плазму можно рассматривать как раствор: пылевые частицы являются частицами растворенного в электрон-ионной плазме вещества, а электроны и ионы — частицами растворителя. В этом случае для ее термодинамической устойчивости (ТДУ) должны быть положительными три величины [17]: 1) изохорическая теплоемкость C_V ; 2) изотермическая сжимаемость K_T ; 3) производная химического потенциала пылевой подсистемы μ_0 по полному числу пылевых частиц N_0 при постоянных P , T , N_1 и N_2 .

Численные расчеты показали, что вклад за счет взаимодействия в изохорическую теплоемкость отрицателен и с ростом Γ монотонно растет по абсолютной величине. Но с учетом идеальной составляющей, C_V оставалась положительной во всем исследованном диапазоне значений параметра неидеальности $\Gamma < 250$ и первое условие ТДУ пылевой плазмы выполнено. Значения изотермической сжимаемости K_T , вычисленные на основе решения уравнения ОЦ в ГЦП, были больше единицы и оставались конечными во всем исследованном диапазоне изменения Γ . Следовательно, второе условие ТДУ также выполнено.

Перейдем теперь к рассмотрению третьего условия ТДУ. Так как определение химического потенциала в численных расчетах встречается с определенными трудностями, определим его в дебаевском приближении, исходя из выражения для свободной энергии в дебаевском приближении [17]. В результате получаем, что ТДУ пылевой плазмы в дебаевском приближении определяется знаком величины ζ , которая задается выражением:

$$\zeta = \frac{N_0}{T} \left(\frac{\partial \mu_0}{\partial N_0} \right)_{P,T,N_1,N_2} = \left(1 - \frac{e^2 z_0^2 k_0^2}{4k_D T} \right) - \frac{n_0}{T} \frac{(T - \frac{1}{4} e^2 z_0^2 k_D)^2}{\frac{3}{2} P - \frac{1}{2} n T}. \quad (37)$$

Авторы [25] отмечают, что третье условие ТДУ можно свести к требованию устойчивости неидеальной подсистемы без учета идеальных подсистем, для которой должна быть положительной изотермическая сжимаемость:

$$K_{T,00} = -\frac{1}{V} \left[\left(\frac{\partial P_{00}}{\partial V} \right)_T \right]^{-1}. \quad (38)$$

В дебаевском приближении изотермическая сжимаемость пылевой подсистемы определяется как

$$K_{T,00}^D = \frac{1}{n_0 T} \left[1 - \frac{e^2 z_0^2 k_0^2}{3k_D T} \left(1 - \frac{k_0^2}{4k_D^2} \right) \right]^{-1}. \quad (39)$$

Вычисления показали, что в дебаевском приближении значения величин $\chi_{00} = (K_{T,00}^D n_0 T)^{-1}$ из (39) и ζ из (37) при разных Γ оказываются достаточно близкими, также практически совпадали точки смены их знака, поэтому именно условие положительности изотермической сжимаемости пылевой компоненты из (38) использовалось нами как третье условие ТДУ пылевой плазмы. Также заметим, что именно условие положительности $K_{T,00}$ используется для определения термодинамической устойчивости в однокомпонентном приближении.

На рисунке 5 приведены значения изотермической сжимаемости пылевой подсистемы плазмы. Видно, что значения $K_{T,00}$ становятся отрицательными как при расчете на основе решения уравнения ОЦ в ГЦП (при $\Gamma \approx 2$), так и в дебаевском приближении (при $\Gamma \approx 1$). Также отметим, что значения $K_{T,00}$ для двух рассмотренных здесь наборов значений параметров плазмы с отрицательными и положительными зарядами пылевых частиц совпадают. На рисунке 5 также приведены данные для однокомпонентной плазмы, полученные на основе численного решения уравнения ОЦ в ГЦП из работы [23] и по данным работы [27]. Видно, что в однокомпонентном приближении изотермическая сжимаемость пылевой плазмы становится отрицательной при $\Gamma \approx 3$, что достаточно близко к данным, полученным в настоящей работе. Отрицательные значения $K_{T,00}$ говорят о том, что третье условие ТДУ пылевой плазмы нарушено, и она при высоких значениях параметра неидеальности $\Gamma \gtrsim 2$ становится термодинамически неустойчивой.

9. Заключение. В настоящей работе на основе уравнения ОЦ для многокомпонентной плазмы

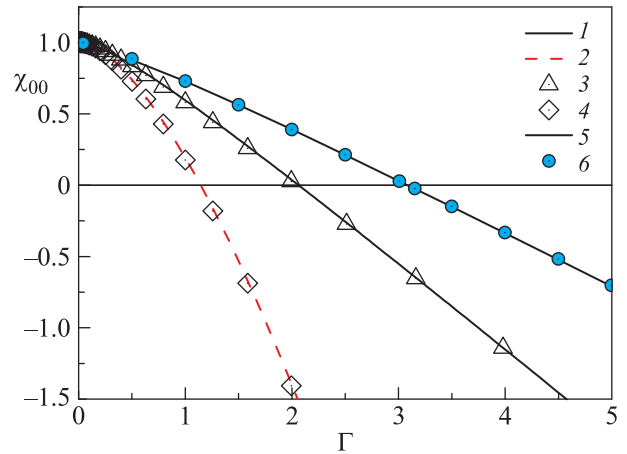


Рис. 5. (Цветной онлайн) Обратная изотермическая сжимаемость пылевой компоненты плазмы $\chi_{00} = (K_{T,00} n_0 T)^{-1}$ как функция Γ : 1,2 — $n_0 = 10^5 \text{ см}^{-3}$, $n_2 = 10^8 \text{ см}^{-3}$, $T = 300 \text{ К}$, $z_0 < 0$; 3,4 — $n_0 = 10^7 \text{ см}^{-3}$, $n_2 = 10^{10} \text{ см}^{-3}$, $T = 2000 \text{ К}$, $z_0 > 0$; 1,3 — на основе решения уравнения ОЦ в ГЦП, 2,4 — в дебаевском приближении (39), 5 — по данным работы [27], 6 — из работы [23]

выполнен переход к однокомпонентному приближению в случае, когда все подсистемы, кроме пылевой, являются идеальными. Установлено, что эффективный псевдопотенциал для определения корреляций в выбранной подсистеме должен определяться без ее вклада в постоянную экранирования, но с учетом условия полной квазинейтральности плазмы.

Также в настоящей работе обнаружено, что при $\Gamma < 1$ потенциал взаимодействия заряженных частиц плазмы друг с другом достаточно хорошо описывается дебаевским с полной постоянной экранирования. А при $\Gamma > 1$ статическая диэлектрическая функция плазмы становится отрицательной при малых значениях волнового числа k и по мере роста Γ эта область заметно расширяется. Поэтому экранирование в неидеальной плазме при $\Gamma > 1$ более не описывается дебаевской теорией.

Показано, что изотермическая сжимаемость только пылевой, неидеальной подсистемы становится отрицательной при $\Gamma \approx 2$ как в пылевой плазме с отрицательными, так и с положительными зарядами (в термической пылевой плазме). Потому вопрос о термодинамической устойчивости пылевой плазмы требует дальнейших исследований с учетом ее открытости и неравновесности.

Работа поддержана Российским научным фондом (проект # 16-12-10424-П).

1. V. E. Fortov, A. V. Ivlev, S. A. Khrapak, A. G. Khrapak, and G. E. Morfill, Phys. Rep. **421**, 1 (2005).

2. F. Greiner, A. Melzer, B. Tadsen, S. Groth, C. Killer, F. Kirchschrager, F. Wieben, I. Pilch, H. Krüger, D. Block, A. Piel, and S. Wolf, *Eur. Phys. J. D* **72**, 81 (2018).
3. А. В. Филиппов, А. Н. Старостин, А. Ф. Паль, *ЖЭТФ*, **148**, 1039 (2015).
4. H. Ohshima, *Electrostatic Interaction Between Colloidal Particles*, John Wiley & Sons, Inc., Hoboken, NJ (2016).
5. А. В. Филиппов, И. Н. Дербенев, *ЖЭТФ* **150**, 1262 (2016).
6. I. N. Derbenev, A. V. Filippov, A. J. Stace, and E. Besley, *J. Chem. Phys.* **145**, 084103 (2016).
7. V. E. Fortov and G. E. Morfill, *Complex and Dusty Plasmas*, Taylor Francis, London (2009).
8. P. Debye and E. Hückel, *Phys. Zeitschr.* **24**, 185 (1923).
9. J.-P. Hansen and I. R. McDonald, *Theory of Simple Liquids*, Elsevier, London (2006).
10. Г. Н. Саркисов, *УФН* **169**(6), 625 (1999).
11. В. В. Решетняк, А. Н. Старостин, А. В. Филиппов, *ЖЭТФ* **154**, 1258 (2018).
12. В. В. Решетняк, А. В. Филиппов, *ЖЭТФ* **156**, 545 (2019).
13. V. Schwarz, T. Bornath, W. D. Kraeft, S. H. Glenzer, A. Höll, and R. Redmer, *Contrib. Plasma Phys.* **47**(4–5), 324 (2007).
14. K. Wünsch, P. Hilde, M. Schlanges, and D. O. Gericke, *Phys. Rev. E* **77**(5), 056404 (2008).
15. M. Fushiki, *J. Chem. Phys.* **89**, 7445 (1988).
16. B. Beresford-Smith, D. Y. Chan, and D. J. Mitchell, *J. Colloid Interface Sci.* **105**(1), 216 (1985).
17. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Статистическая физика*, Наука, М. (1976), ч. 1.
18. О. В. Долгов, Е. Г. Максимов, *УФН* **135**, 441 (1981).
19. O. V. Dolgov, D. A. Kirzhnits, and E. G. Maksimov, *Rev. Mod. Phys.* **53**, 81 (1981).
20. А. Ф. Александров, Л. С. Богданкевич, А. А. Рухадзе, *Основы электродинамики плазмы*, Высшая школа, М. (1988).
21. S. Ichimaru, *Rev. Mod. Phys.* **54**, 1017 (1982).
22. A. V. Filippov, A. N. Starostin, I. M. Tkachenko, and V. E. Fortov, *Phys. Lett. A* **376**, 31 (2011).
23. A. V. Filippov, A. N. Starostin, I. M. Tkachenko, and V. E. Fortov, *Contrib. Plasma Phys.* **53**(4–5), 442 (2013).
24. В. Е. Фортов, А. П. Нефедов, О. Ф. Петров, А. А. Самарян, А. В. Чернышев, *ЖЭТФ* **111**, 467 (1997).
25. Г. Э. Норман, А. Н. Старостин, *ТВТ* **6**, 410 (1968).
26. Г. Э. Норман, А. Н. Старостин, *ТВТ* **8**, 413 (1970).
27. M. Baus and J.-P. Hansen, *Phys. Rep.* **59**, 1 (1980).