



Scientific-Coordination Workshop on

# Non-Ideal Plasma Physics

December 9-10, 2021, Moscow, Russia

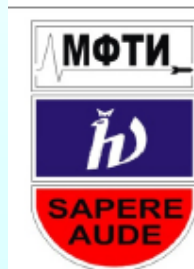
## Эффективный заряд макроиона в асимметричной комплексной плазме

Мартынова Инна Александровна,  
Иосилевский Игорь Львович

Объединенный институт высоких температур РАН  
Московский физико-технический институт (национальный  
исследовательский университет)



2021, Москва



**Модель:** двухкомпонентная электронейтральная классическая равновесная система макроионов конечных размеров с зарядовым числом  $Z$  ( $Z \gg 1$ ) и противоположно заряженных микроионов с зарядом  $+1$

## Содержание

• **Автомодельная зависимость эффективного заряда макроиона  $Z^*(Z, kT, n_z, R_z)$**

- от исходного заряда макроиона  $Z$ ,
- от температуры системы  $kT$ ,
- от концентрации макроионов  $n_z$ ,
- от радиуса макроиона  $R_z$

**& разделение микроионов на свободные и связанные**

в приближении Пуассона-Больцмана

в ячейке Вигнера-Зейтца

&

в корреляционной полости

• **Зависимость  $Z^*(Z)$  в приближениях Пуассона-Больцмана в корреляционной полости и Дебая-Хюккеля в корреляционной полости с учетом корреляций микроионов внутри полости**

## Определение эффективного заряда и деление всех микроионов на свободные и связанные

$$Z^* = Z - Z_{\text{bound}}$$

квазичастица с  $Z^*$

$$Z^* \leq Z \text{ or even } Z^* \ll Z$$

1) Полная энергия  $> 0 \Rightarrow$  свободные микроионы

Полная энергия  $< 0 \Rightarrow$  связанные микроионы

[Szichman H. et al., 1997, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* ]

2) Свободные микроионы в зоне, где выполняется условие линеаризации

[Diehl, Barbosa, Levin, 2001, *EPL*]

3) Разделение микроионов на свободные и связанные (с учетом величины радиуса макроиона) по величинам потенциала взаимодействия и концентрации микроионов [Жуховицкий, Храпак, Якубов, 1984, *ТВТ*]

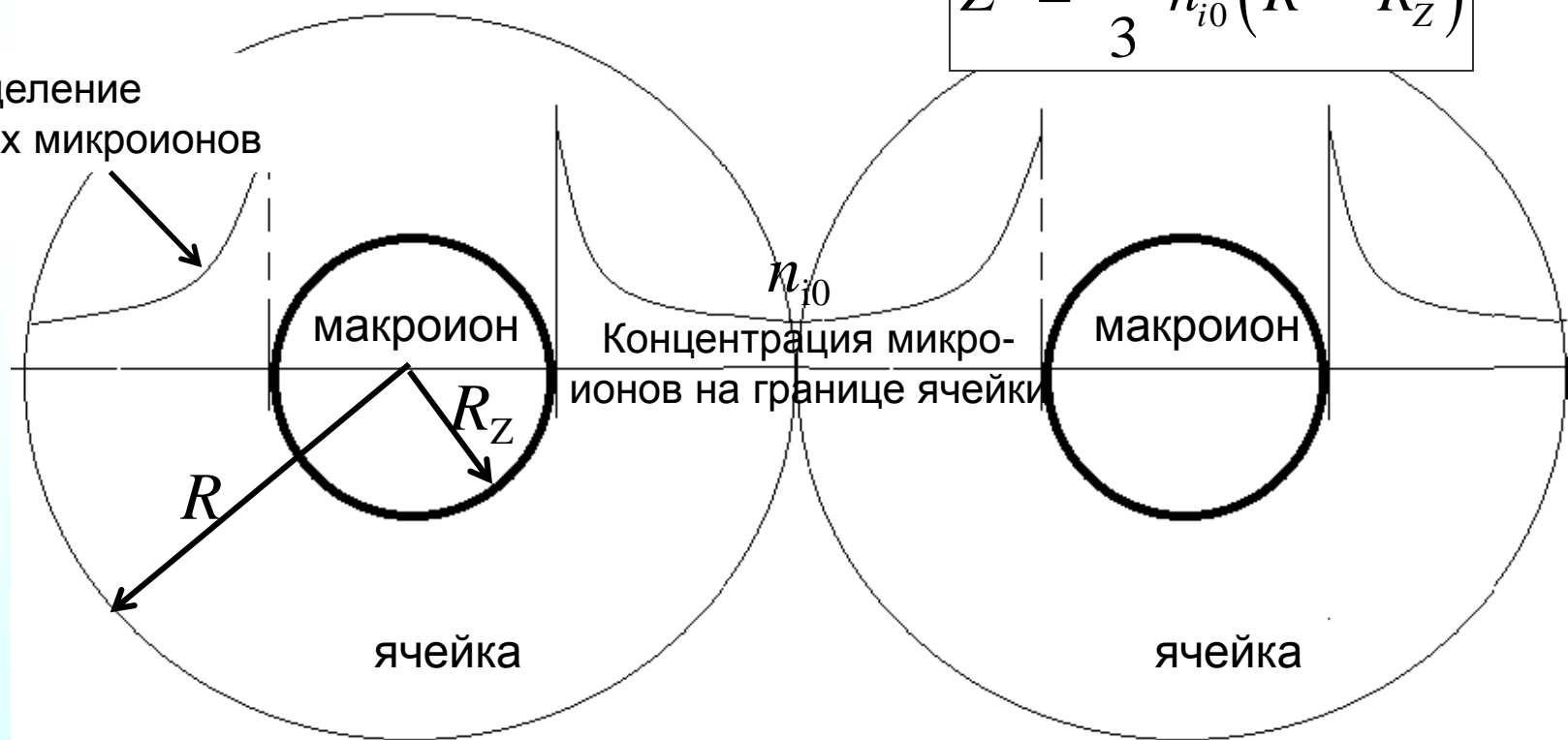
И другие...

# Автомодельная зависимость эффективного заряда макроиона $Z^*(Z)$ от его исходного заряда в ячейке Вигнера-Зейтца

В электронейтральной ячейке:

$$Z^* = \frac{4\pi}{3} n_{i0} (R^3 - R_Z^3)$$

Распределение  
точечных микроионов



# Уравнения в приближении Пуассона-Больцмана в средней сферической ячейке Вигнера-Зейтца

$$\Delta\varphi = -4\pi en_{i0} \exp\left(-\frac{e\varphi}{kT_i}\right), \quad n_{i0} = n_i(R)$$

условие линеаризации должно нарушаться

Напряженность внутри ячейки, условие электронейтральности

$$\frac{Ze^2}{R_Z kT} > 1$$

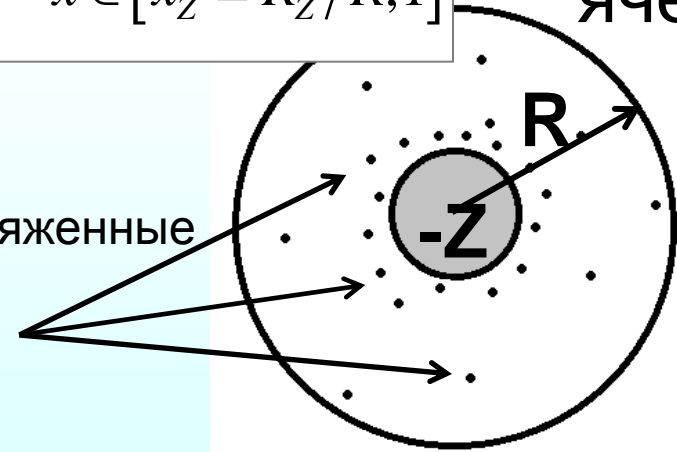
$$\frac{d\Phi(x)}{dx} = \frac{\delta^2}{3x^2} \left[ 1 - \left( \int_{x_Z}^x x_1^2 e^{-\Phi(x_1)} dx_1 \right) / \left( \int_{x_Z}^1 x_1^2 e^{-\Phi(x_1)} dx_1 \right) \right], \quad \delta^2 = \frac{3Ze^2}{kTR}$$

$$\Phi(1) = 0$$

$$x = \frac{1}{R} r, \quad \Phi(x) = \frac{e}{kT} \varphi(x), \quad E(x) = \frac{eR}{kT} E(x), \quad x \in [x_Z \equiv R_Z/R, 1]$$

ячейка

Положительно заряженные микроионы +1

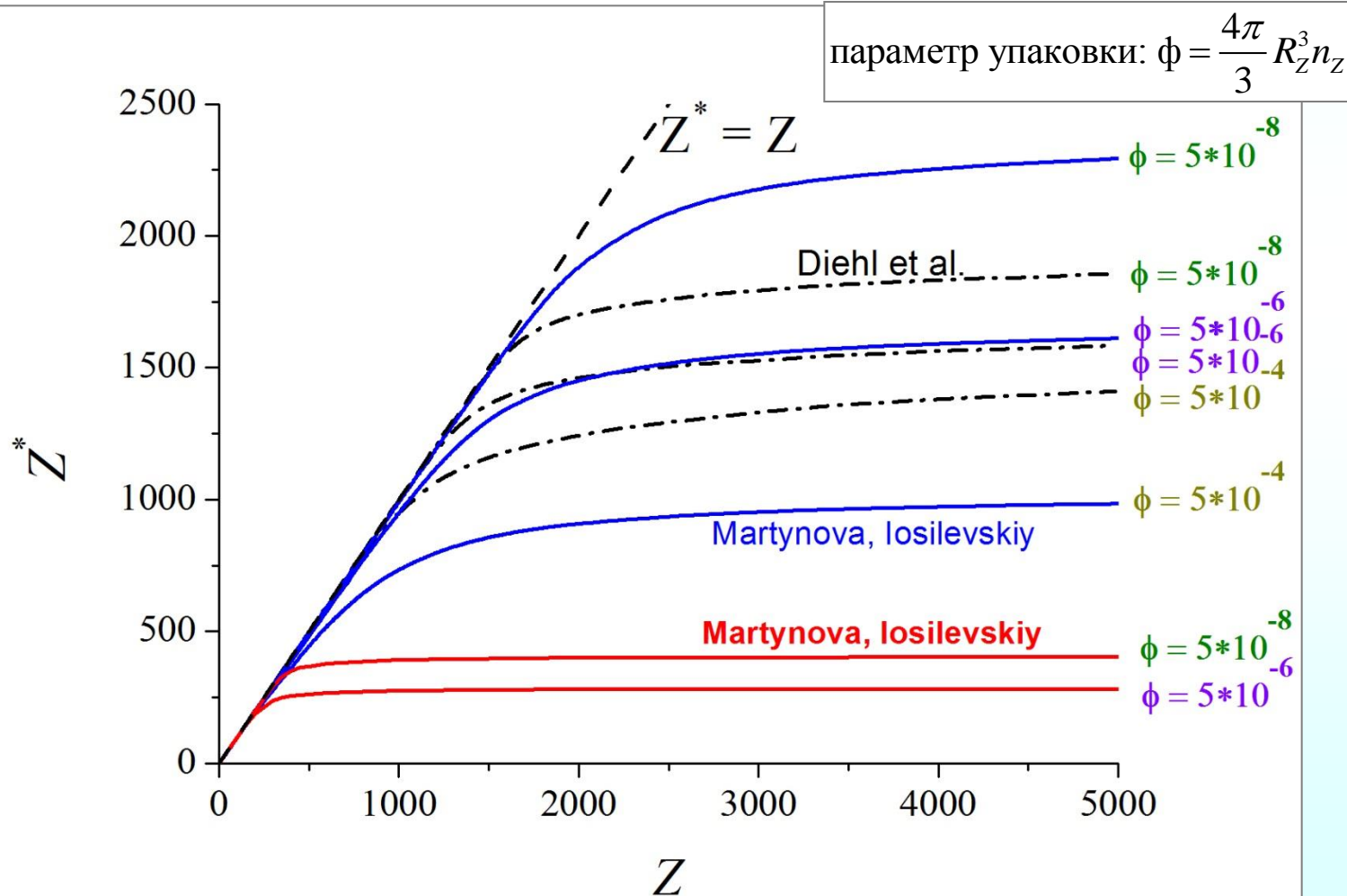


# Сравнение зависимостей эффективного заряда макроиона $Z^*$ от исходного $Z$ при различных определениях $Z^*$

2 ветви изменения зависимости  $Z^*(Z)$  – линейное экранирование и насыщение

[Diehl et al. EPL 2001]: радиус макроиона  $R_Z = 0.1$  мкм,  $kT = 0.026$  эВ

[Martynova, Iosilevskiy, CPP 2020]:  $R_Z = 1$  мкм (красный),  $R_Z = 1$  мкм (синий),  $kT = 0.03$  эВ

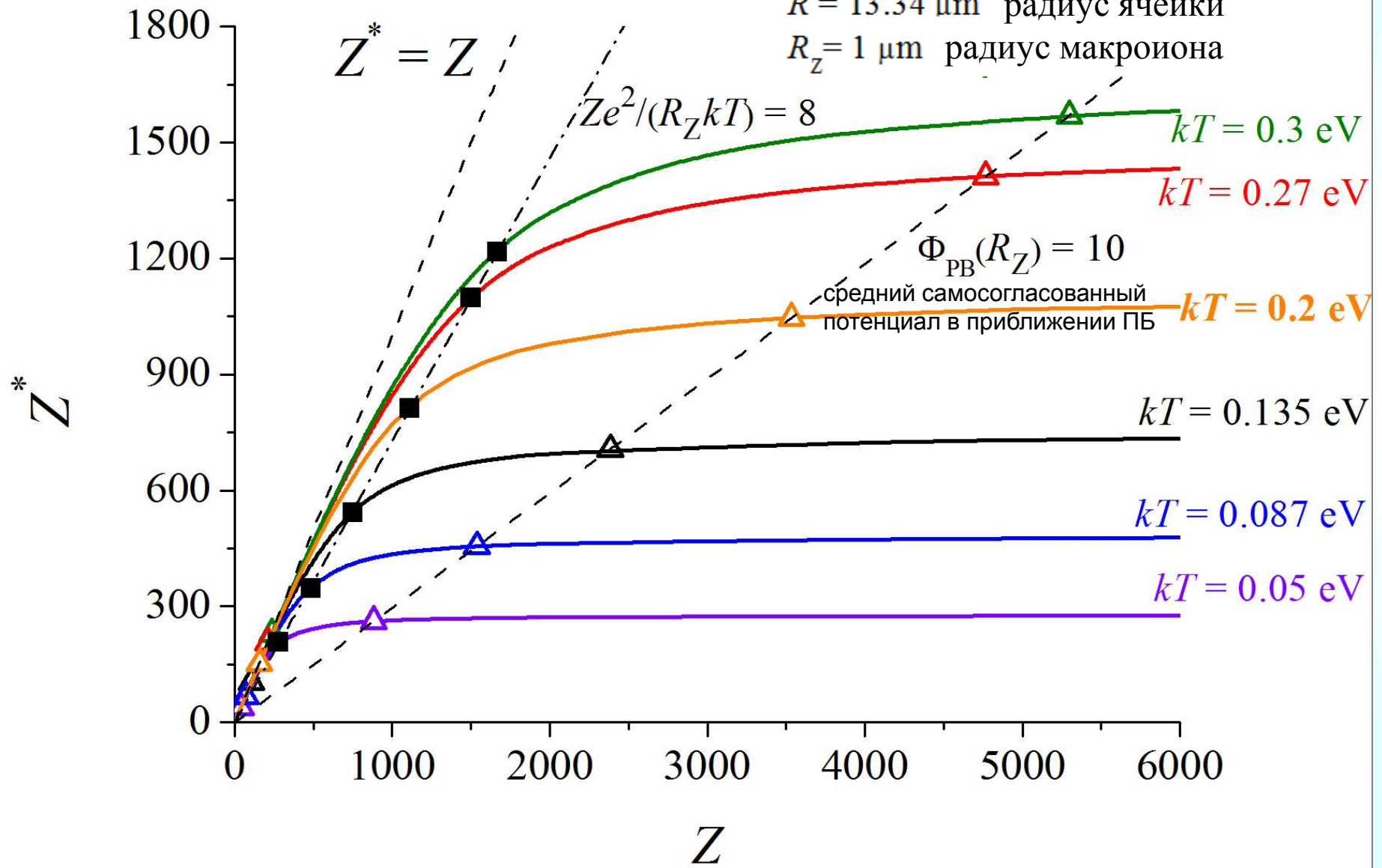


# Зависимость эффективного заряда макроиона $Z^*$ от исходного $Z$ для различных температур с учетом нелинейного экранирования

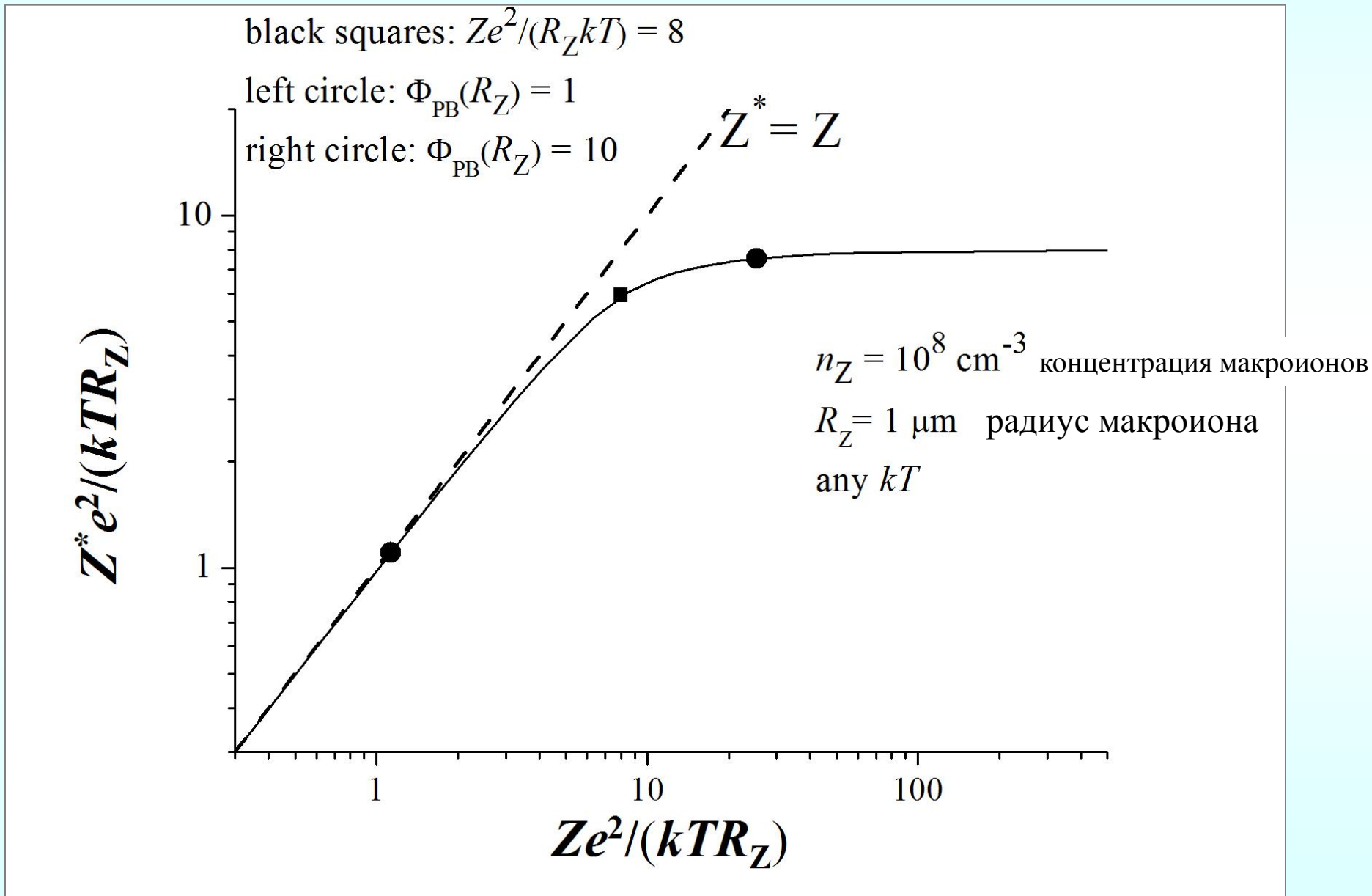
$n_Z = 10^8 \text{ cm}^{-3}$  концентрация макроионов

$R = 13.34 \text{ }\mu\text{m}$  радиус ячейки

$R_Z = 1 \text{ }\mu\text{m}$  радиус макроиона

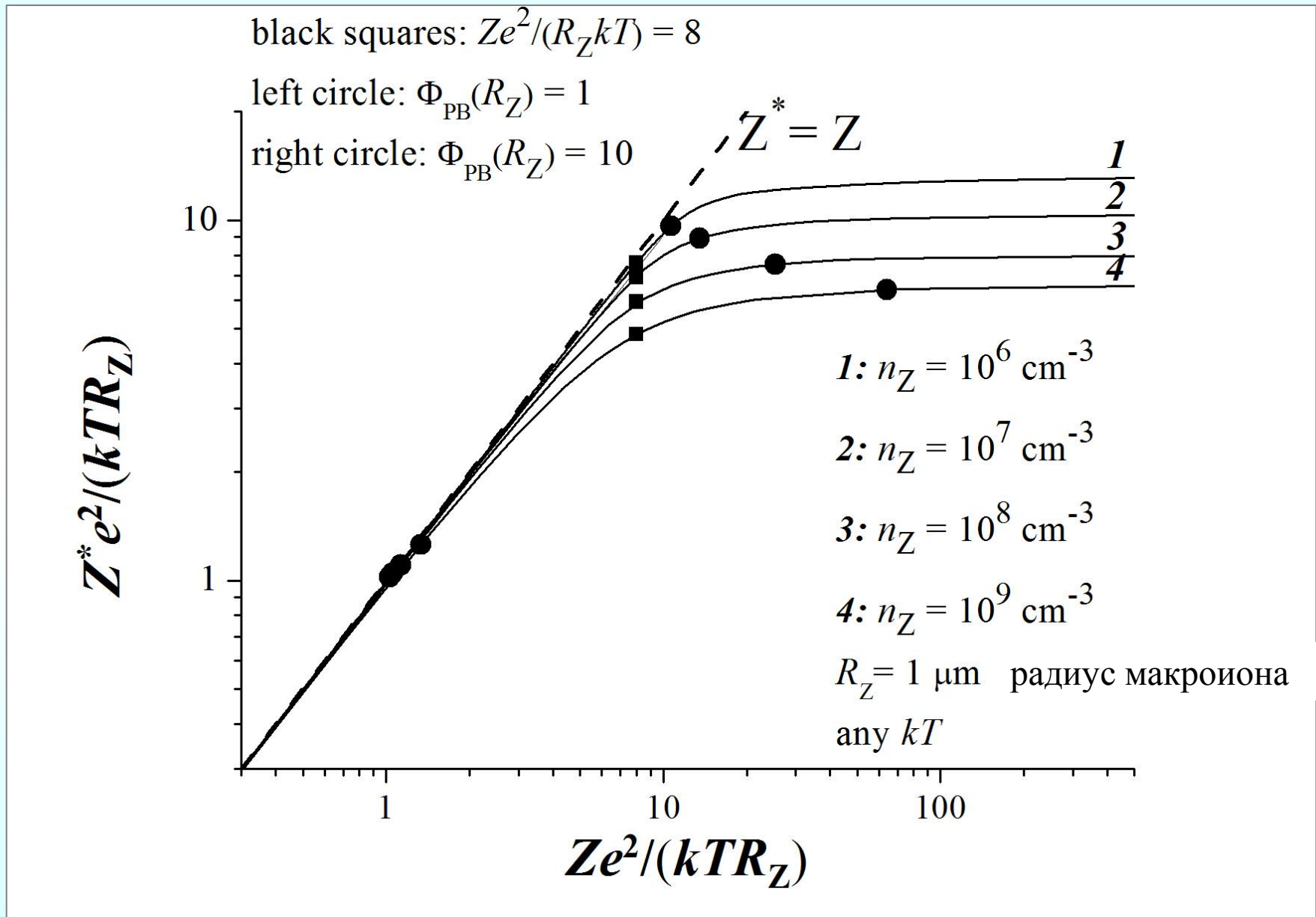


Единая автомодельная зависимость эффективного заряда  $Z^*$  от исходного  $Z$  для различных температур  $kT$  при фиксированной концентрации макроионов  $n_Z$





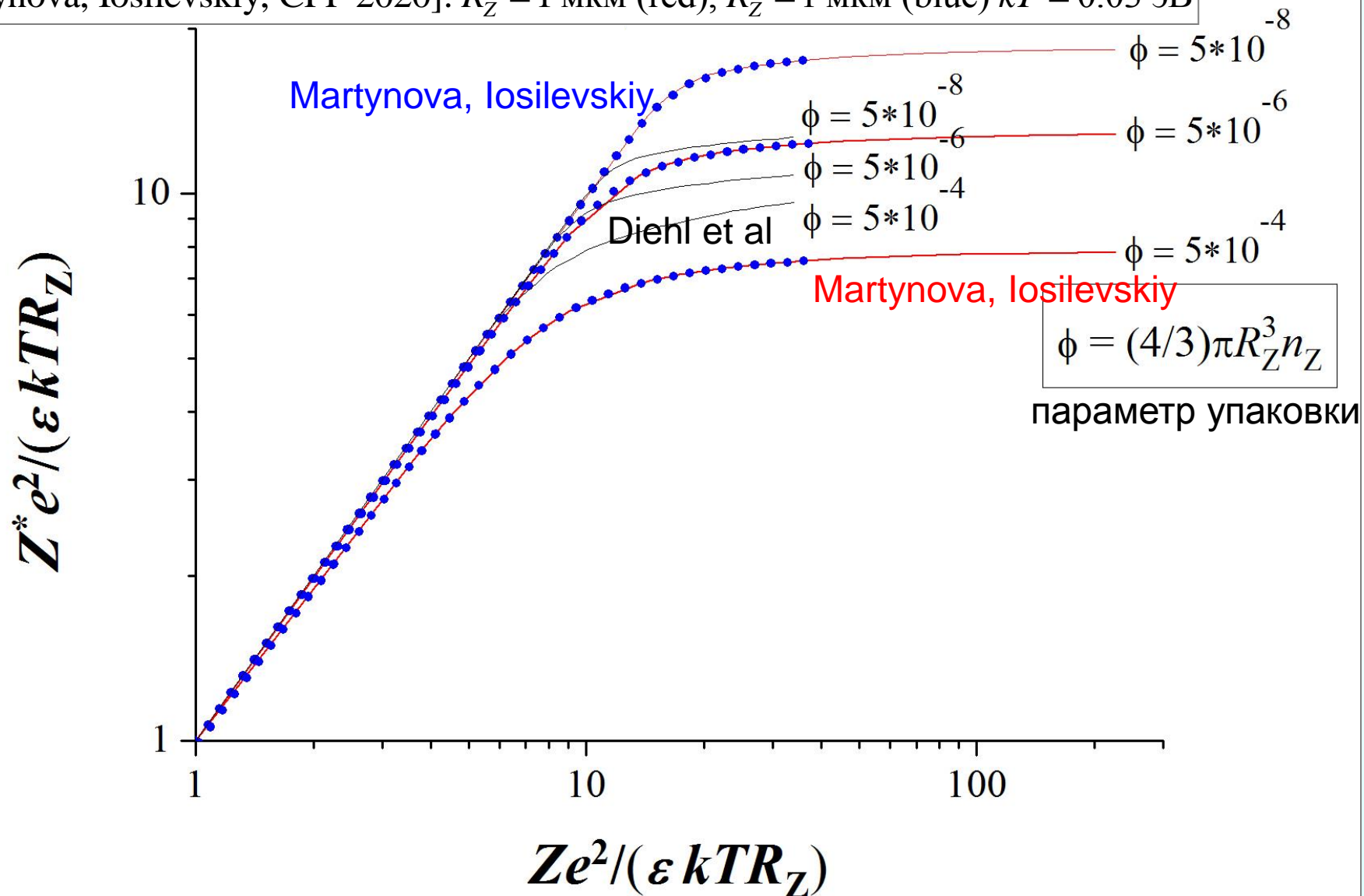
**Автомодельные зависимости эффективного заряда  $Z^*$  от исходного  $Z$   
 для различных температур  $kT$   
 при фиксированных концентрациях макроионов  $n_Z$**



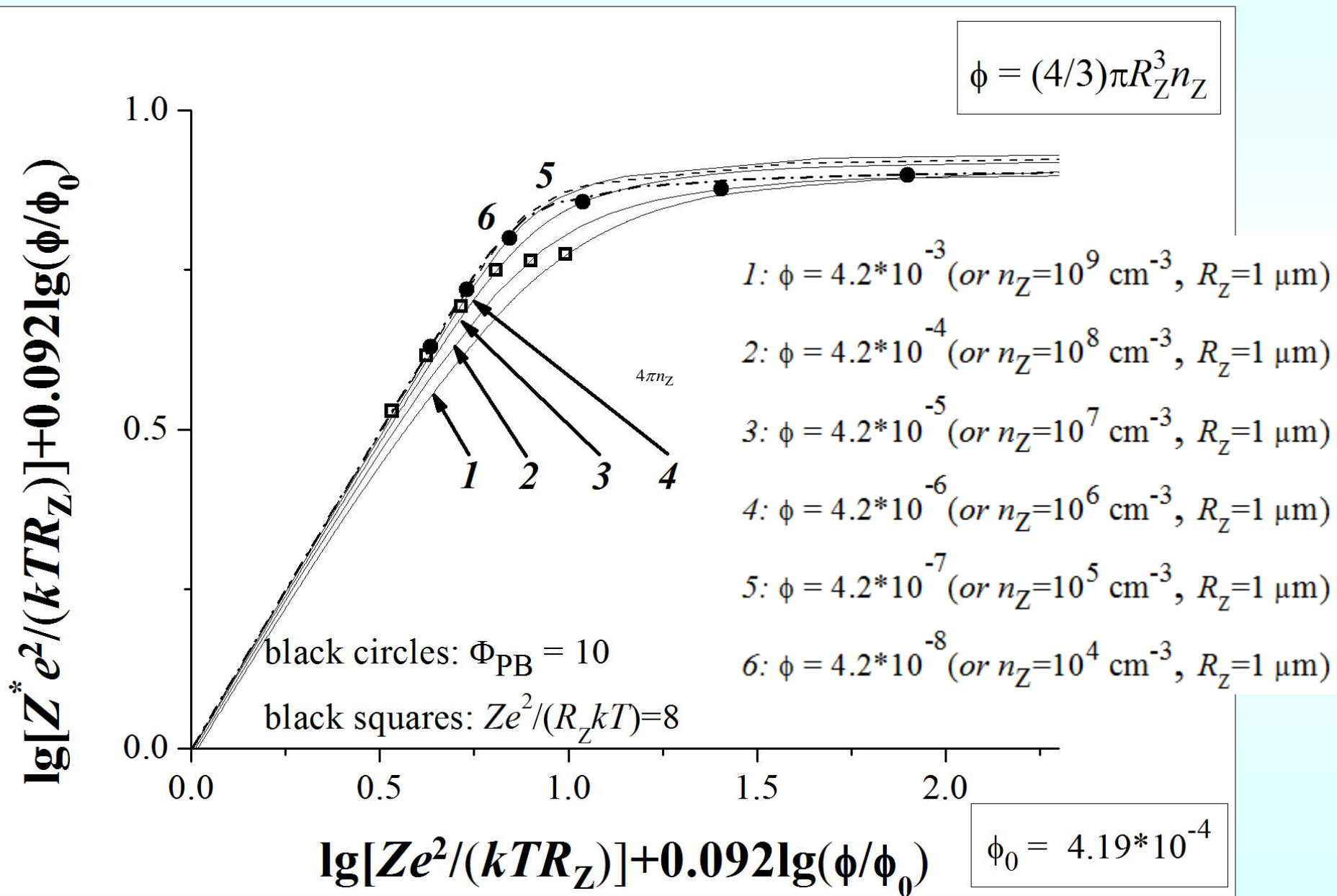
# Автомодельные зависимости эффективного заряда макроиона $Z^*$ от исходного заряда $Z$ для различных параметров упаковки $\phi$

[Diehl et al. EPL 2001]: радиус макроиона  $R_Z = 0.1$  мкм,  $kT = 0.026$  эВ,  $\varepsilon = 81$

[Martynova, Iosilevskiy, CPP 2020]:  $R_Z = 1$  мкм (red),  $R_Z = 1$  мкм (blue)  $kT = 0.03$  эВ



Автомодельная зависимость эффективного заряда макроиона  $Z^*$  от  
 исходного заряда  $Z$ , температуры  $kT$ , радиуса макроиона  $R_Z$   
 и концентрации макроионов  $n_Z$



Автомодельная зависимость эффективного заряда макроиона  $Z^*(Z)$  от исходного заряда в приближении Пуассона-Больцмана в корреляционной полости

НЕэлектронейтральная полость



**Эффективный заряд:**

$$Z^* \equiv Z - Z_{связ}^{пол} = Z - (Z_{микро}^{пол} - Z_{своб}^{пол})$$

$$Z_{микро}^{пол} \equiv \int_{R_Z}^h n_i(r) d^3 r, \quad Z_{своб}^{пол} \equiv \frac{4\pi}{3} n_{i0} (h^3 - R_Z^3)$$

Концентрация макроионов:

$$n_Z(r) = \begin{cases} 0, & r \leq h \\ n_Z (1 - Ze\phi_{out}(r)/(kT)), & r \geq h \end{cases}$$

\*Debye-Hückel plus hole:  
Khrapak S. et al. 2014 Phys. Rev. E 89

# Уравнения в приближении Пуассона-Больцмана в корреляционной полости

Равенство

- концентраций микроионов на границе полости,
- концентраций макроионов на границе полости,
- средних электростатических потенциалов на границе полости,
- электростатических полей на границе полости.

Напряженность  $E(x)$  в полости,..

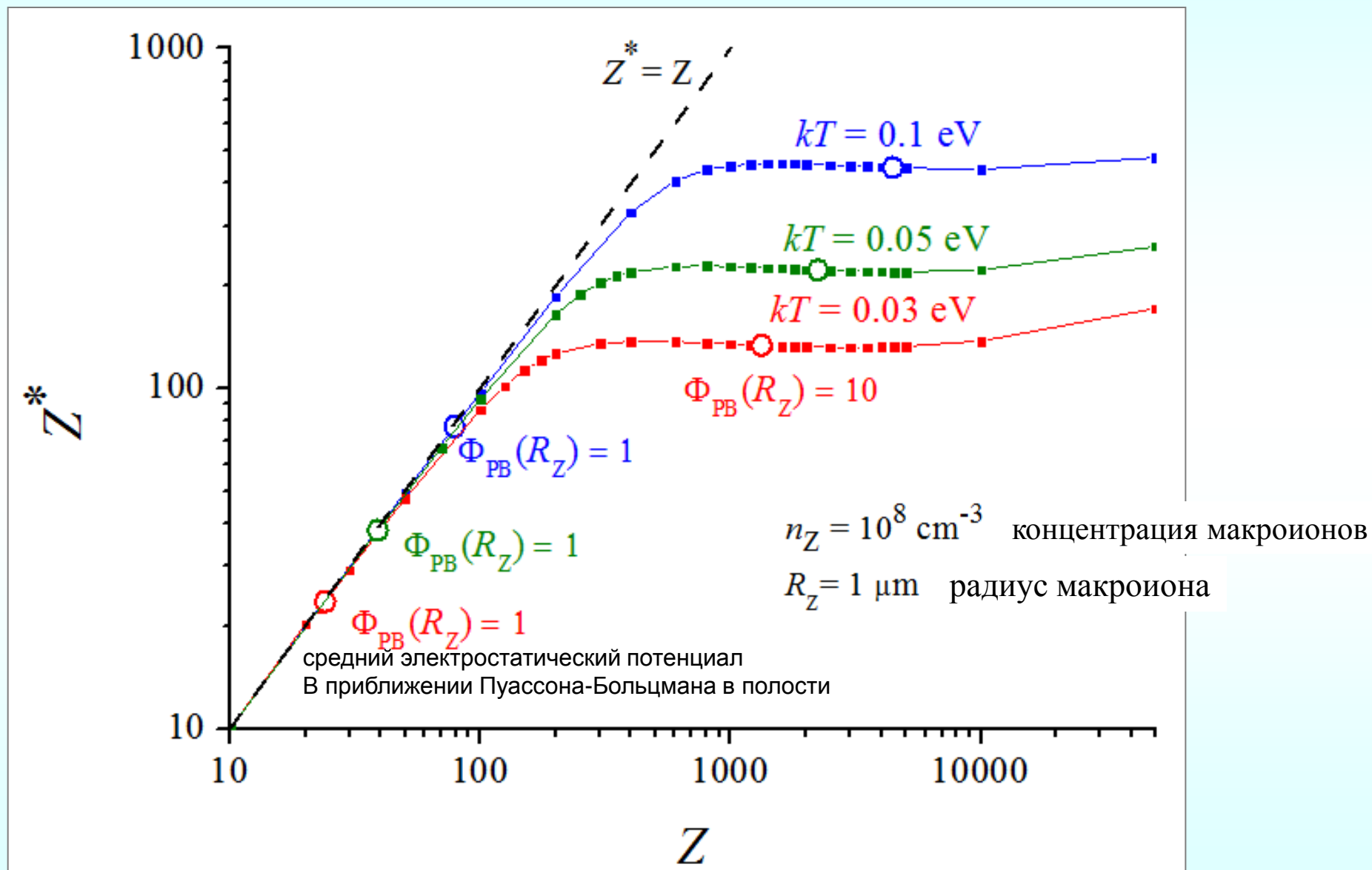
$$\frac{d\Phi(x)}{dx} = \frac{e}{kTh} \frac{1}{x^2} \left( Z - \int_{x_Z}^x n_Z (Z+1) \exp(-(\Phi(x) - \Phi(1))) 4\pi x^2 h^3 dx \right)$$

$$\Phi(1) = -\frac{1}{Z}$$

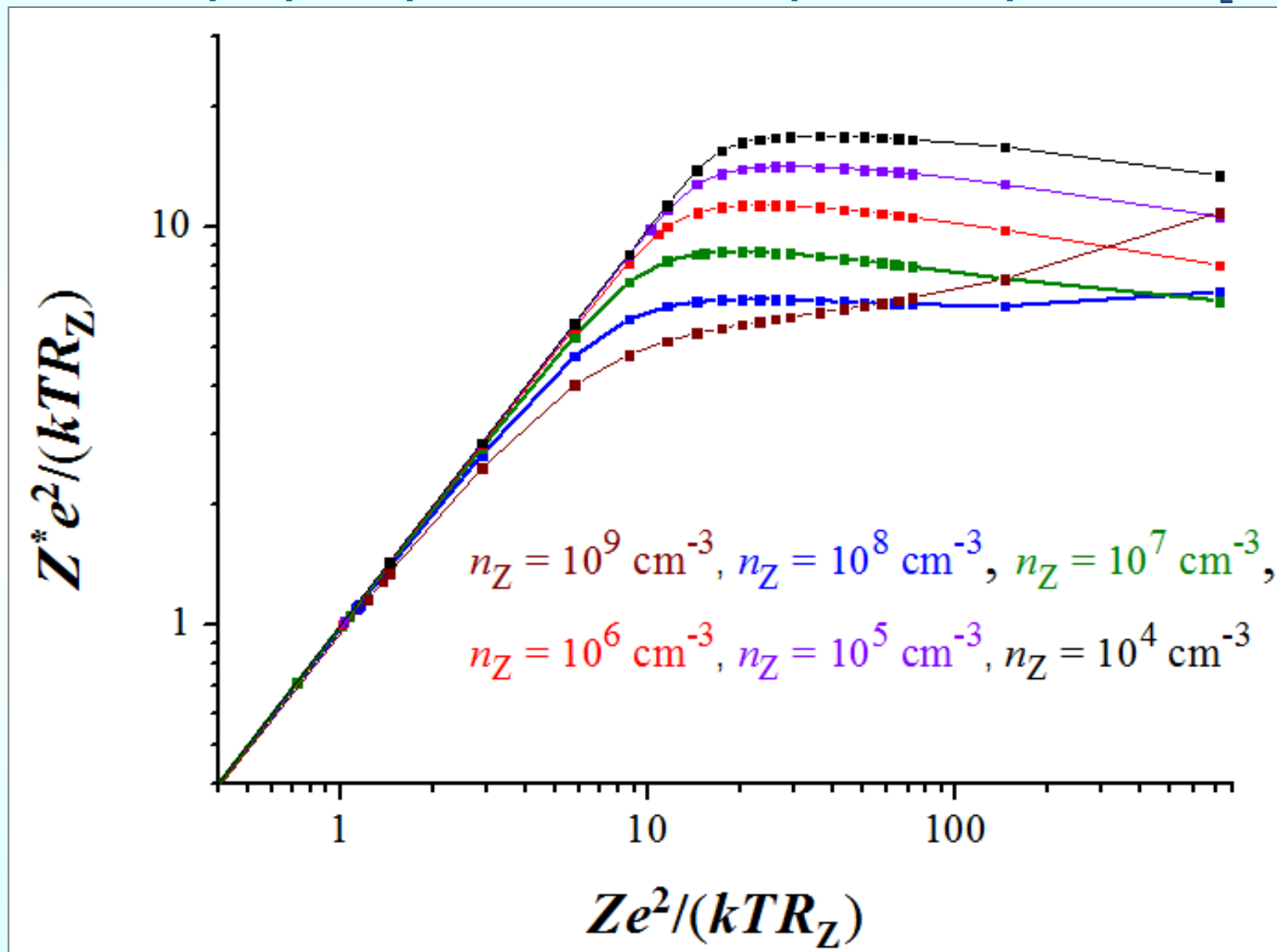
$$h^2 + r_{Dout} h - \frac{Ze^2 r_{Dout}}{kT} \left( Z - h^3 \int_{x_Z}^1 n_Z (Z+1) \exp(-(\Phi(x) - \Phi(1))) 4\pi x^2 dx \right) = 0$$

$$x = \frac{r}{h}, \quad \Phi(x) = \frac{e\varphi(x)}{kT}, \quad E(x) = \frac{eh}{kT} E(x), \quad x \in [x_Z \equiv R_Z/h, 1]$$

# Зависимость эффективного заряда макроиона от исходного $Z^*(Z)$ для различных температур

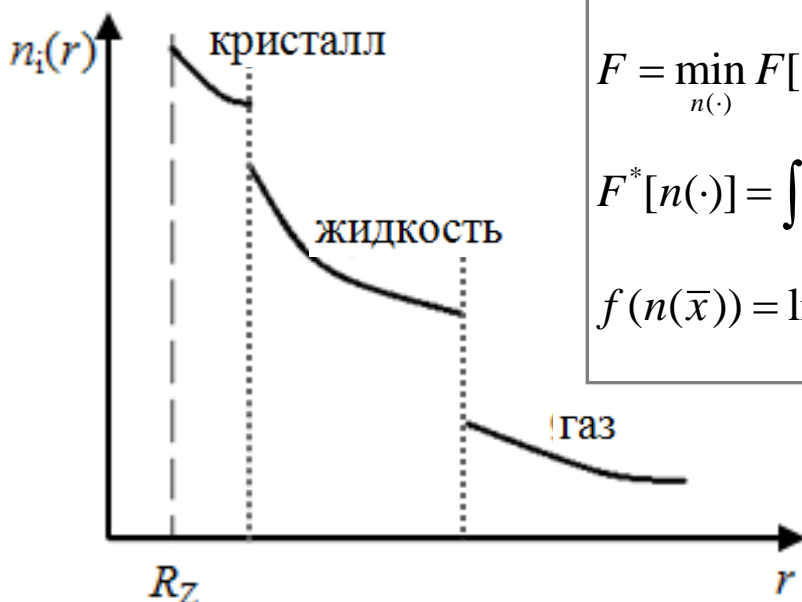


Единые автомодельные зависимости  $Z^*(Z)$   
для различных температур  $kT$ ,  
каждая при фиксированной концентрации макроионов  $n_Z$



# Автомодельная зависимость эффективного заряда $Z^*(Z)$ от исходного в приближении Пуассона-Больцмана в корреляционной полости с учетом корреляций микроионов внутри полости

- Разрыв профиля микроионов при достаточно низких температурах ( $T < T_{\text{critical}}$ )
- Объяснение в терминах фазового перехода однокомпонентной плазмы
- Возможные фазовые переходы: газ-жидкость, газ-кристалл, жидкость-кристалл.



$$F = \min_{n(\cdot)} F[n(\cdot)] = Ze \int \varphi_{\text{ext}}(\bar{x}) n(\bar{x}) d\bar{x} + \frac{(Ze)^2}{2} \int \frac{n(\bar{x})n(\bar{y})}{|\bar{x} - \bar{y}|} d\bar{x}d\bar{y} + F^*[n(\cdot)]$$

$$F^*[n(\cdot)] = \int f(n(\bar{x})) n(\bar{x}) d\bar{x}$$

$$f(n(\bar{x})) = \lim_{N \rightarrow \infty, N/V \rightarrow n} \left( \frac{F(N, V, T)}{N} \right)$$

Здесь и далее микроионы имеют диаметр  $\sigma$ .

- 1) И. Иосилевский, Теплофизика высоких температур, **1985**, 23 // [arXiv:0901.3535](https://arxiv.org/abs/0901.3535)
- 2) И. Иосилевский, Термодинамика неидеальной плазмы, в *Энциклопедии низкотемпературной плазмы*, Том III-1 (под общей редакцией Фортова В.Е.). Под ред. Иосилевского И. и Старостина А. М.: ФИЗМАТЛИТ, **2004**, с. 349-428



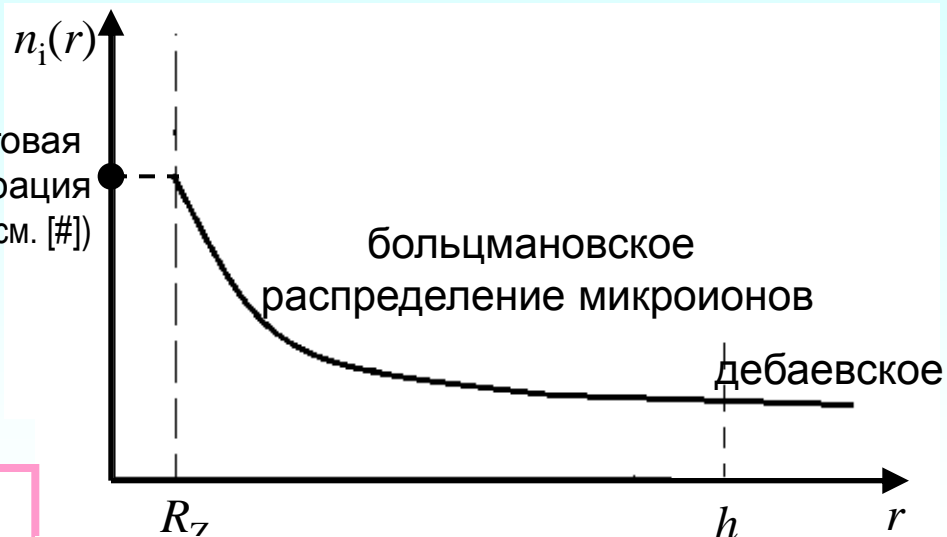
# Эффективный заряд макроиона $Z^*$ в приближении с учетом корреляций микроионов

$$Z^* \equiv Z - Z_{\text{связанные}}^{\text{полость}} =$$

$$= Z - \left( Z_{\text{микро}}^{\text{полость}} - Z_{\text{свободные}}^{\text{полость}} \right)$$

$$Z_{\text{свободные}}^{\text{полость}} \equiv \frac{4\pi}{3} n_{i0} (h^3 - R_Z^3)$$

пороговая  
концентрация  
 $n_{\text{gas}}$  (см. [#])



Равенство химических потенциалов двух фаз:

$$\ln(n_{\text{liq}} \lambda^3) + \mu_{\text{ex}} = \ln(n_{\text{gas}} \lambda^3)$$

$$n_{\text{gas}} = n_{\text{liq}} \exp(\mu_{\text{ex}}) \text{ на газовой бинодали}$$

Приближение:

$$\mu_{\text{ex\_liq}} \approx u_{\text{ex\_liq}}$$

$$u_{\text{ex\_liq}} - [*Penfold, 1991]$$



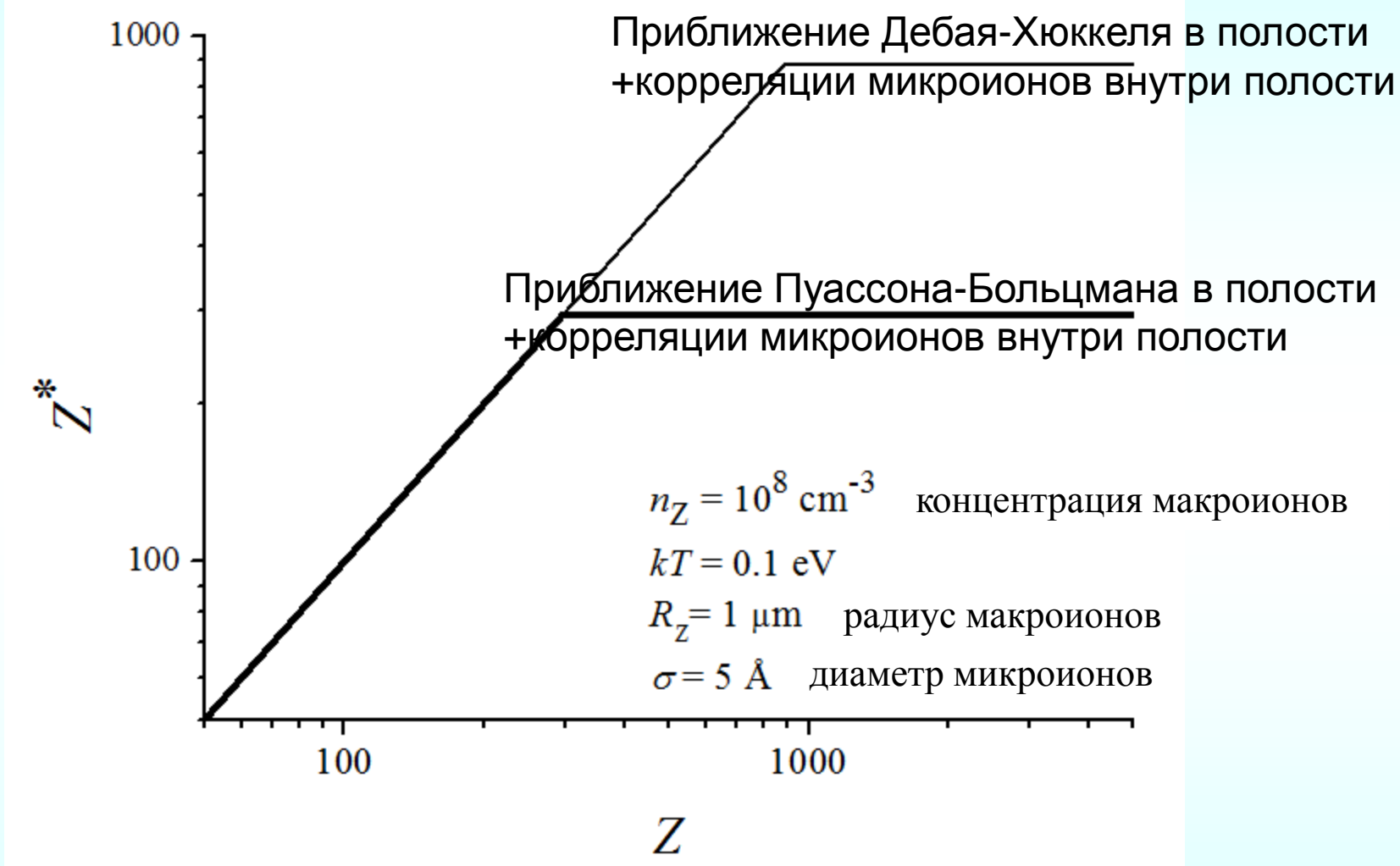
$$n_{\text{gas}} \approx \frac{6\eta_{\text{liq}}}{\pi\sigma^3} \exp(u_{\text{ex}})$$

\*Penfold R., Nordholm S. **1991** *J. Chem. Phys.* 95

\*\*Chigvintsev A., Iosilevskiy I., Zorina I., Noginova L. **2018** *J. of Phys. Conf. Ser.* 946

[#] Иосилевский И., Красников Ю., Сон Э., Фортон В. В *Термодинамика и транспорт в неидеальной плазме*, М.: Изд-во МФТИ, 2000, С. 107-274

# Зависимость эффективного заряда с учетом корреляций микроионов



## Выводы

**В приближении Пуассона-Больцмана в сферической ячейке Вигнера-Зейтца:**

- 1) выявлена единая автомодельная зависимость  $Z^*(Z, kT, n_z, R_z)$  эффективного заряда макроиона  $Z^*$  от исходного  $Z$  для различных температур системы при фиксированном параметре упаковки;
- 2) получена автомодельная зависимость эффективного заряда  $Z^*(Z, kT, n_z, R_z)$  для различных температур системы, концентраций макроионов и их размеров;

**В приближении Пуассона-Больцмана в корреляционной полости выявлены:**

- 3) единая автомодельная зависимость  $Z^*(Z, kT, n_z, R_z)$  эффективного заряда макроиона  $Z^*$  от исходного  $Z$  для различных температур системы при фиксированном параметре упаковки;

**В приближениях Пуассона-Больцмана и Дебая-Хюккеля в корреляционной полости, оба с учетом корреляций микроионов продемонстрировано:**

- 4) уменьшение эффективного заряда макроиона от исходного;
- 5) фазовое расслоение в псевдо-флюидном состоянии микроионов при характерных параметрах системы.

1) Martynova I., Iosilevskiy I., Macroion effective charge in complex plasmas with regard to microions correlations **2021** *Contrib. Plasma Phys.* V.61, e202000142.

2) Martynova I., Iosilevskiy I., Self-similarity of nonlinear screening in asymmetric complex plasmas **2021** *Contrib. Plasma Phys.*, e202100007, <https://doi.org/10.1002/ctpp.202100007/>