



Scientific-Coordination Workshop on

# Non-Ideal Plasma Physics

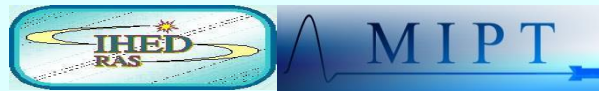
December 7-8, 2023, Moscow, Russia

## Давление в приближении Пуассона-Больцмана в средней сферической ячейке Вигнера-Зейтца в асимметричной комплексной плазме

Мартынова Инна Александровна,  
Иосилевский Игорь Львович

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

7-8 декабря 2023г., Москва



# Содержание

- Модель
- Предпосылки
- Приближение Пуассона-Больцмана в средней ячейке Вигнера-Зейтца
- Расчет энергии взаимодействия и свободной энергии Гельмгольца
- Расчет давления через неидеальную часть свободной энергии
- Специфический расчет давления в средней ячейке Вигнера-Зейтца
- Изотермическая сжимаемость

# Рассматриваемая модель комплексной плазмы

Двухкомпонентная равновесная электронейтральная система классических макроионов конечных размеров с зарядами  $Z$  ( $Z \gg 1$ ) и точечных микроионов с единичными зарядами

Наиболее близка к коллоидной плазме\*

(заряд макроиона  $Z \sim 1000-10000$  ( $Z \approx const$ ))

комнатная температура всей системы,

радиус макроиона  $R_Z \sim 0.1-10$  мкм,

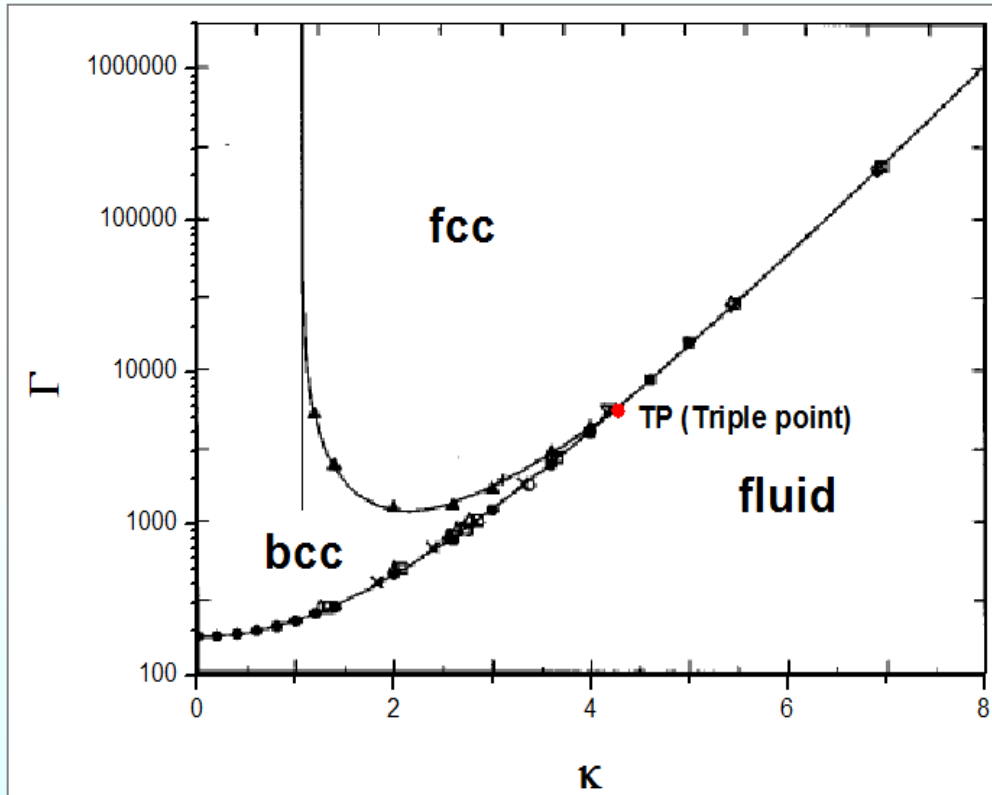
концентрация макроионов  $n_Z \sim 10^5-10^9$  см<sup>-3</sup>)

\*M. Dijkstra, R. van Roij, *J. Phys. Condens. Matter* **2019**, 10, 1219.

\*A. Diehl, M. Barbosa, Y. Levin, *Europhys. Lett.* **2001**, 53, 86.

# Предпосылки

На фазовой диаграмме[\*] комплексной плазмы были обнаружены области отрицательного давления и отрицательной сжимаемости, рассчитанные по некоторым УРС[\* , \*\*] комплексной плазмы.



$$V_{\text{YU}}(r) = \frac{(Ze)^2}{r} \exp(-r / r_D)$$

$$\Gamma \equiv \frac{(Ze)^2}{akT}$$

$$\kappa \equiv \frac{a}{r_D}$$

$$a \equiv \left( \frac{3}{4\pi n_Z} \right)^{1/3}$$

[\*] Hamaguchi S. *et al.*, *J.Chem.Phys.* **101** (1994) // *Phys. Rev. E* **56** (1997)

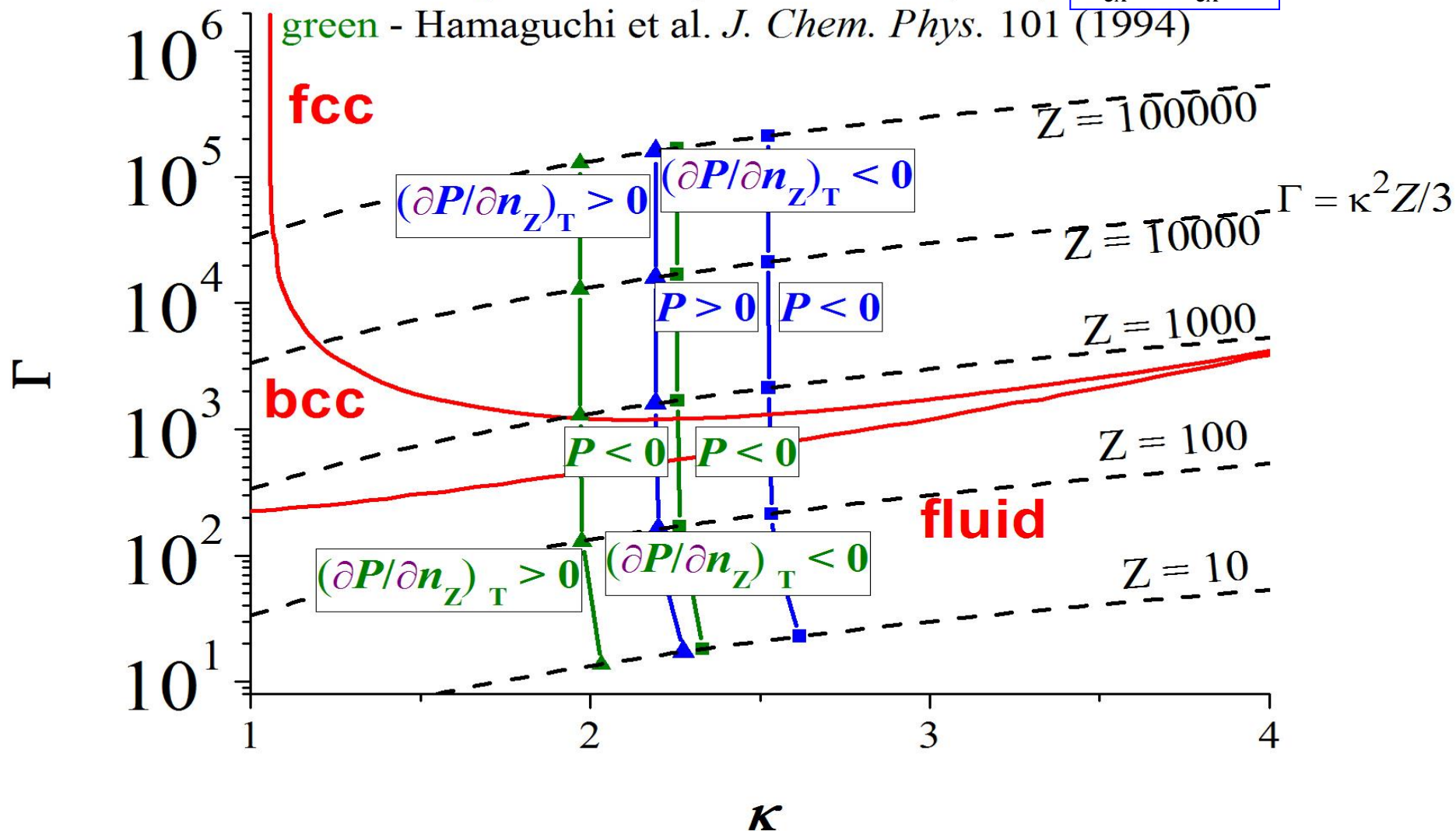
[\*\*] Khrapak et al. *Phys. Rev. E* **89** (2014)

# Области положительных и отрицательных давления и сжимаемости на фазовой диаграмме

red - phase diagram (Hamaguchi et al. *Phys. Rev. E* 56 (1997))

blue - Khrapak et al. *Phys. Rev. E* 89 (2014)  $p_{\text{ex}} = u_{\text{ex}} / 3$

green - Hamaguchi et al. *J. Chem. Phys.* 101 (1994)



# Переход к нелинейному экранированию

$$\Delta\varphi(r) = -4\pi en(r)$$

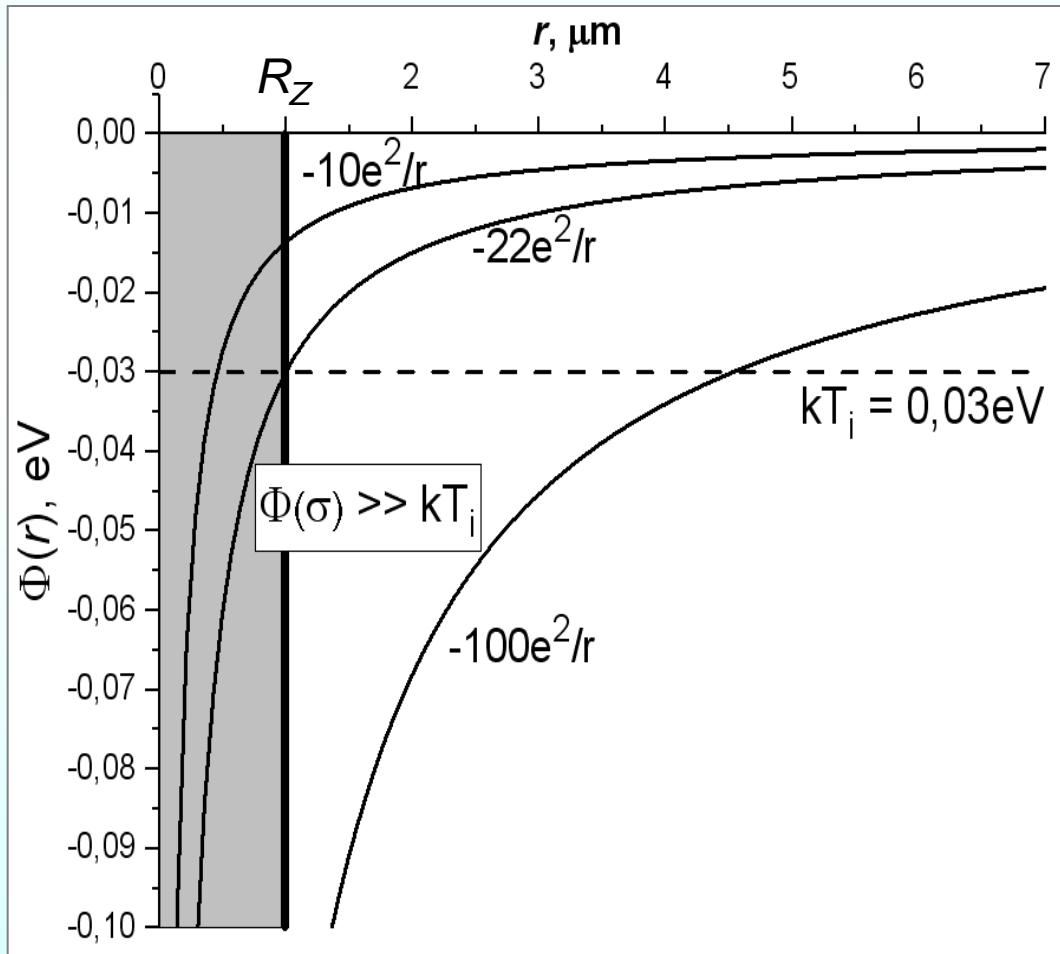


$$\frac{Ze^2 / r}{kT} \ll 1$$



$$\varphi(r) = \frac{Ze}{r} \exp(-r / r_D)$$

$$r = R_Z \approx 1 \mu\text{м}, \quad kT \equiv kT_i = 0,03 \text{эВ}$$



- при  $Z = 10 \quad \frac{Ze^2 / \sigma}{kT} \approx 0,45 < 1$
- при  $Z = 22 \quad \frac{Ze^2 / \sigma}{kT} \approx 1$
- при  $Z = 100 \quad \frac{Ze^2 / \sigma}{kT} \approx 4,5 > 1$
- при  $Z = 1000 \quad \frac{Ze^2 / \sigma}{kT} \approx 45 \gg 1$

# Приближение Пуассона-Больцмана в средней сферической ячейке Вигнера-Зейтца

$$\int_{R_Z}^R n_i(r) 4\pi r^2 dr = Z$$

условие электронейтральности

$$n_i(r) = n_{i0} \exp\left(-\frac{e\varphi(r)}{kT}\right)$$

распределение микроионов  
( $\varphi(r)$  – средний электростат. потенциал, создаваемый макроионом и микроионами,  
 $n_{i0}$  – концентрация микроионов на границе ячейки)

$$\frac{4\pi}{3} R^3 n_Z = 1$$

( $n_Z$  – концентрация макроионов)

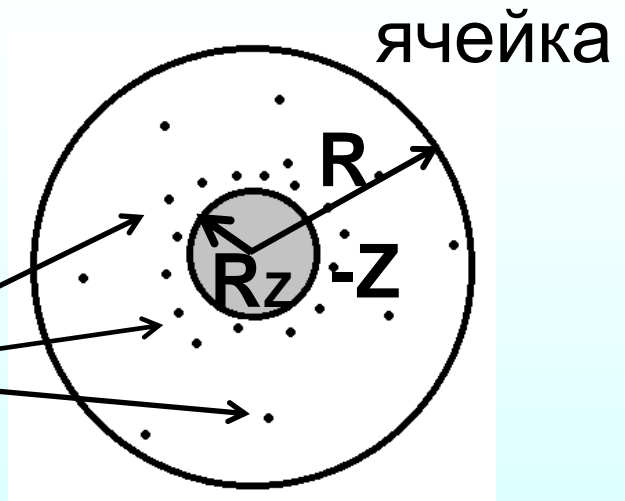
$$E(r) = \frac{e}{r^2} \left( -Z + \int_{R_Z}^r n_i(r) 4\pi r^2 dr \right)$$

$$\frac{d\varphi(r)}{dr} = -E(r)$$

Граничное условие:

$$\varphi(R) = 0$$

Положительные  
микроионы +1



# Энергия взаимодействия и свободная энергия в приближении Пуассона-Больцмана в ячейке

$$u \equiv \frac{U}{N_Z kT} = \frac{U}{kT}, \quad f \equiv \frac{F}{N_Z kT} = \frac{F}{kT}$$

$$u = u_{Zi} + u_{ii}$$

$$u_{Zi} = -\frac{Ze}{kT} \left( \varphi(R_Z) + \frac{Ze}{R_Z} \right)$$

$$u_{ii} = \frac{1}{2kT} \int_{R_Z}^R \left( \varphi(r) + \frac{Ze}{r} \right) e n_i(r) 4\pi r^2 dr$$

$\varphi(r)$  – средний электростат. потенциал, создаваемый макроионом и микроионами

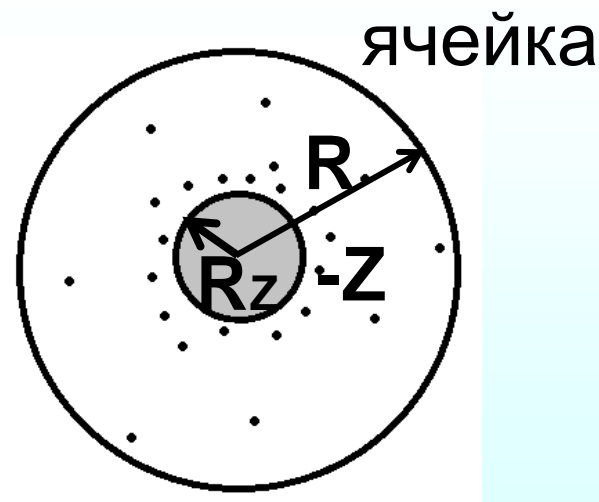
Связь энергии взаимодействия и свободной энергии:

$$\frac{F(V, T) - U(V, T)}{T} = \left( \frac{\partial F(V, T)}{\partial(T)} \right)_V$$

$$f_{ex}(n_Z, T) = \int_{T < T_0}^{T_0} \frac{u_{ex}(n_Z, T')}{T'} d(T') + f_{ex}(n_Z, T_0)$$

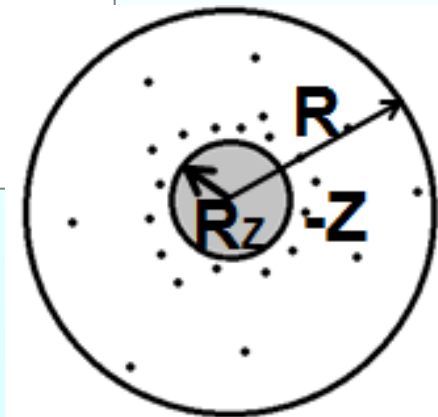
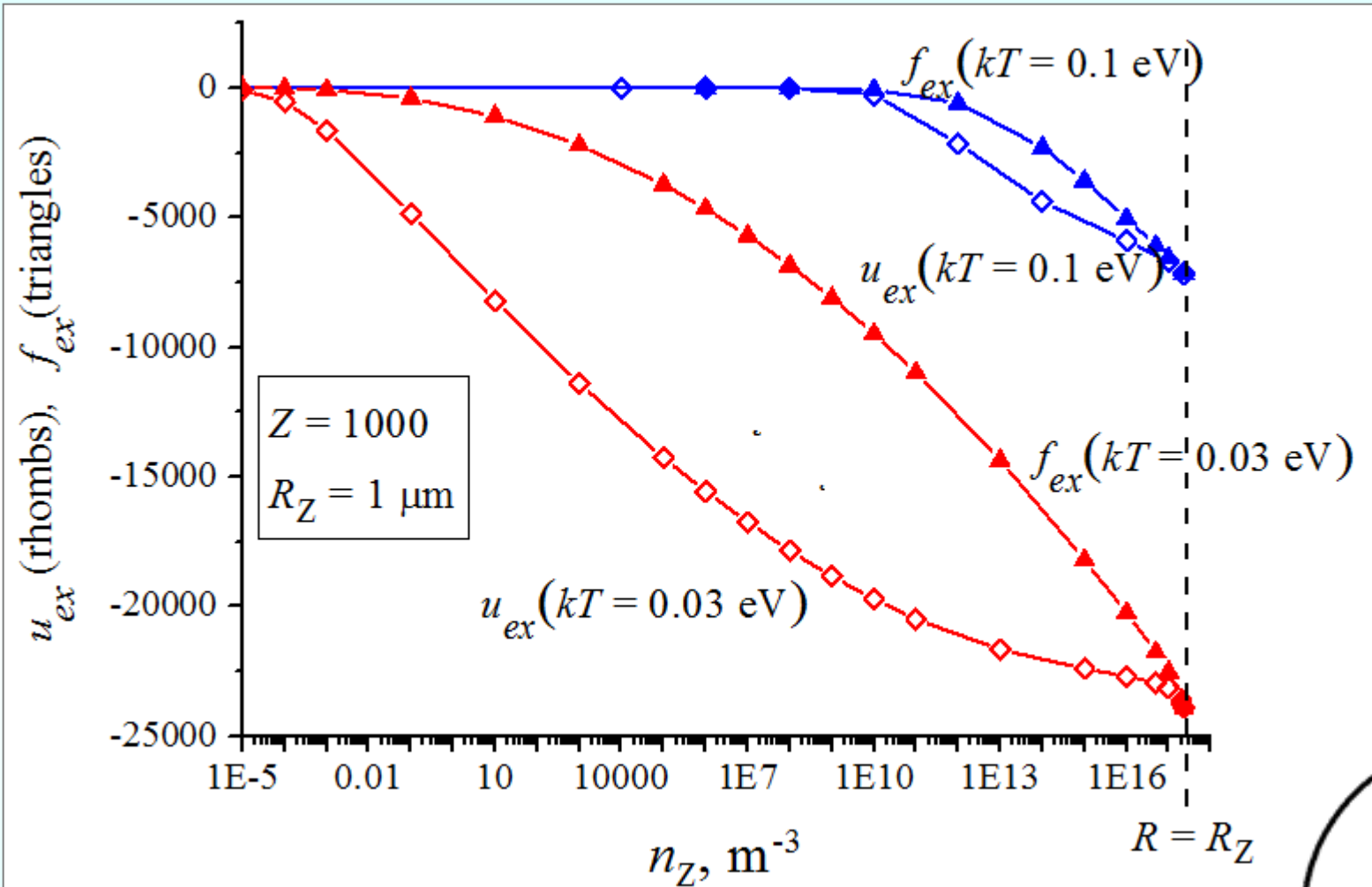
Для достаточно высокой температуры распределение микроионов равномерное и

$$f_{ex}(n_Z, T_0) = u_{ex}(n_Z, T_0)$$





# Кулоновские поправки для энергии взаимодействия и свободной энергии в приближении Пуассона-Больцмана в ячейке



# Расчет давления через неидеальную часть свободной энергии

$$P = n_Z kT + n_i kT + P_{ex}$$

$$n_i = \frac{N_{micro}}{V - 4\pi R_Z^3/3}$$

$$p = 1 + \frac{Z}{1 - (R_Z/R)^3} + p_{ex}$$

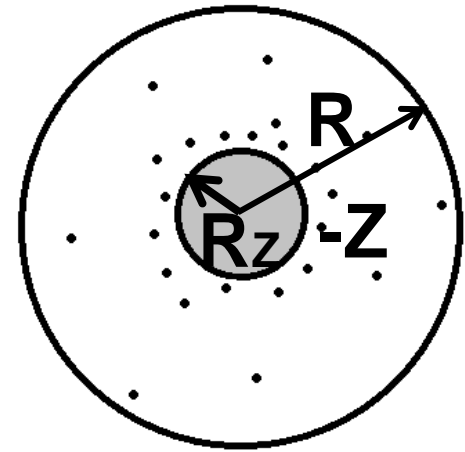
$$p \equiv \frac{P}{n_Z kT}, \quad p_{ex} \equiv \frac{P_{ex}}{n_Z kT}$$

Связь давления и свободной энергии:

$$P(V, T) = - \left( \frac{\partial F(V, T)}{\partial V} \right)_T$$

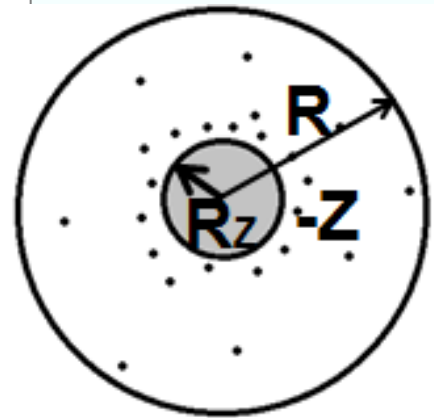
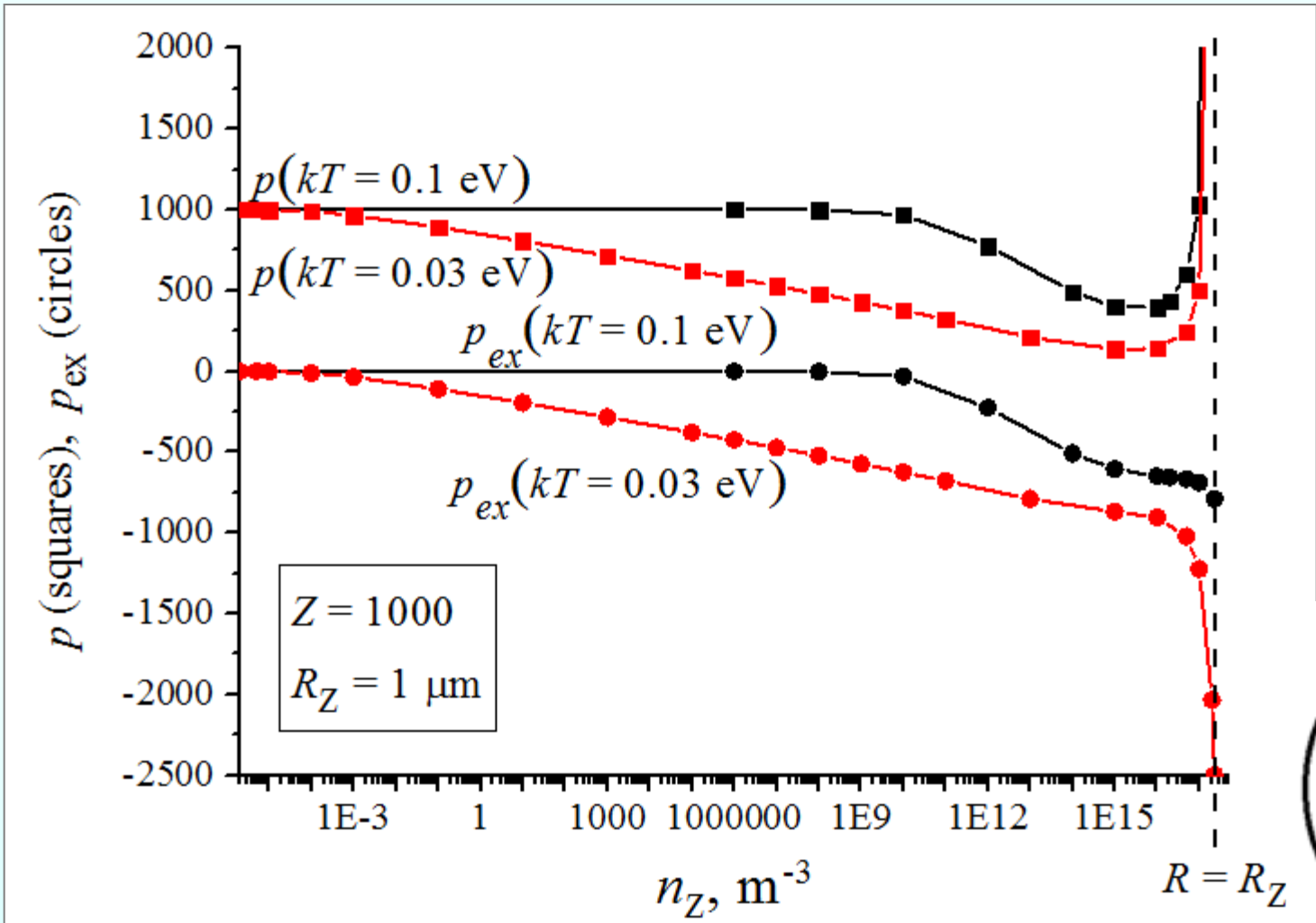
Так как  $\frac{4\pi}{3} R^3 n_Z = V n_Z = 1$ , то

$$p_{ex}(n_Z, T) = n_Z \left( \frac{\partial f_{ex}(n_Z, T)}{\partial n_Z} \right)_T$$



# Расчет давления $p$ и его кулоновской поправки $p_{ex}$ через неидеальную часть свободной энергии

$$p \equiv \frac{P}{n_Z kT}, \quad p_{ex} \equiv \frac{P_{ex}}{n_Z kT}$$



# Расчет давления в определенной модели: средняя сферическая ячейка Вигнера-Зейтца

**Средние сферические ячейки Вигнера-Зейтца:** одинаковые, непроницаемые электронейтральные, не взаимодействующие и не коррелирующие друг с другом

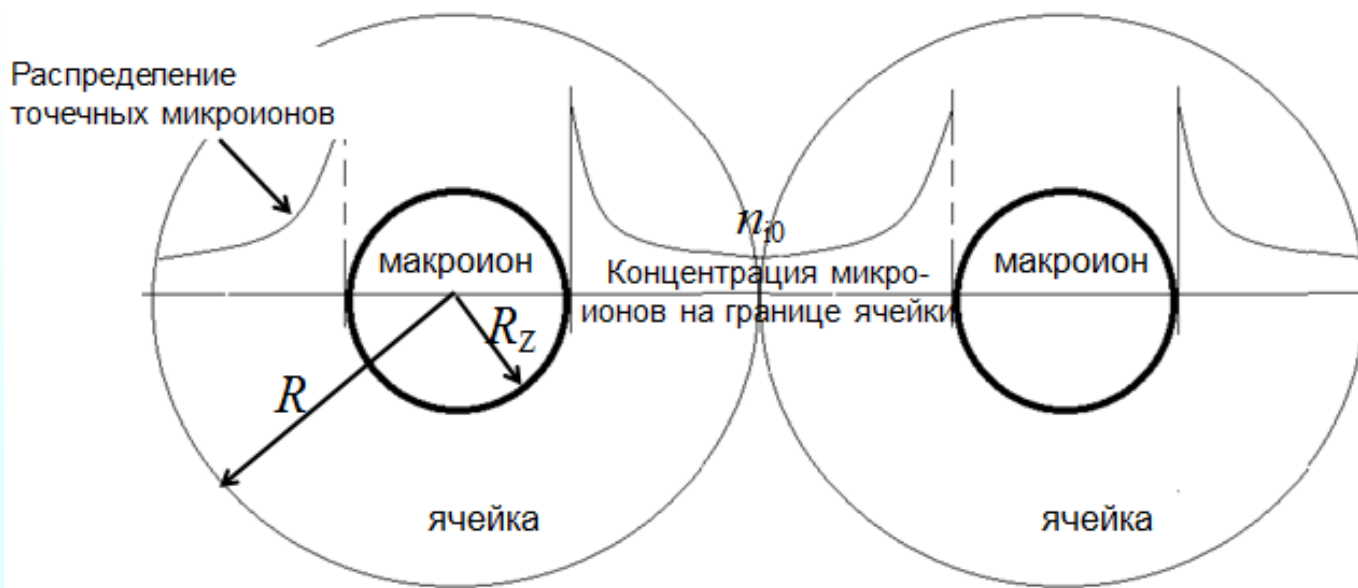
**Приближение Пуассона-Больцмана:**  
корреляции микроионов друг с другом отсутствуют.

**ПРЕДПОЛОЖЕНИЕ:** давление системы определяется свободными микроионами

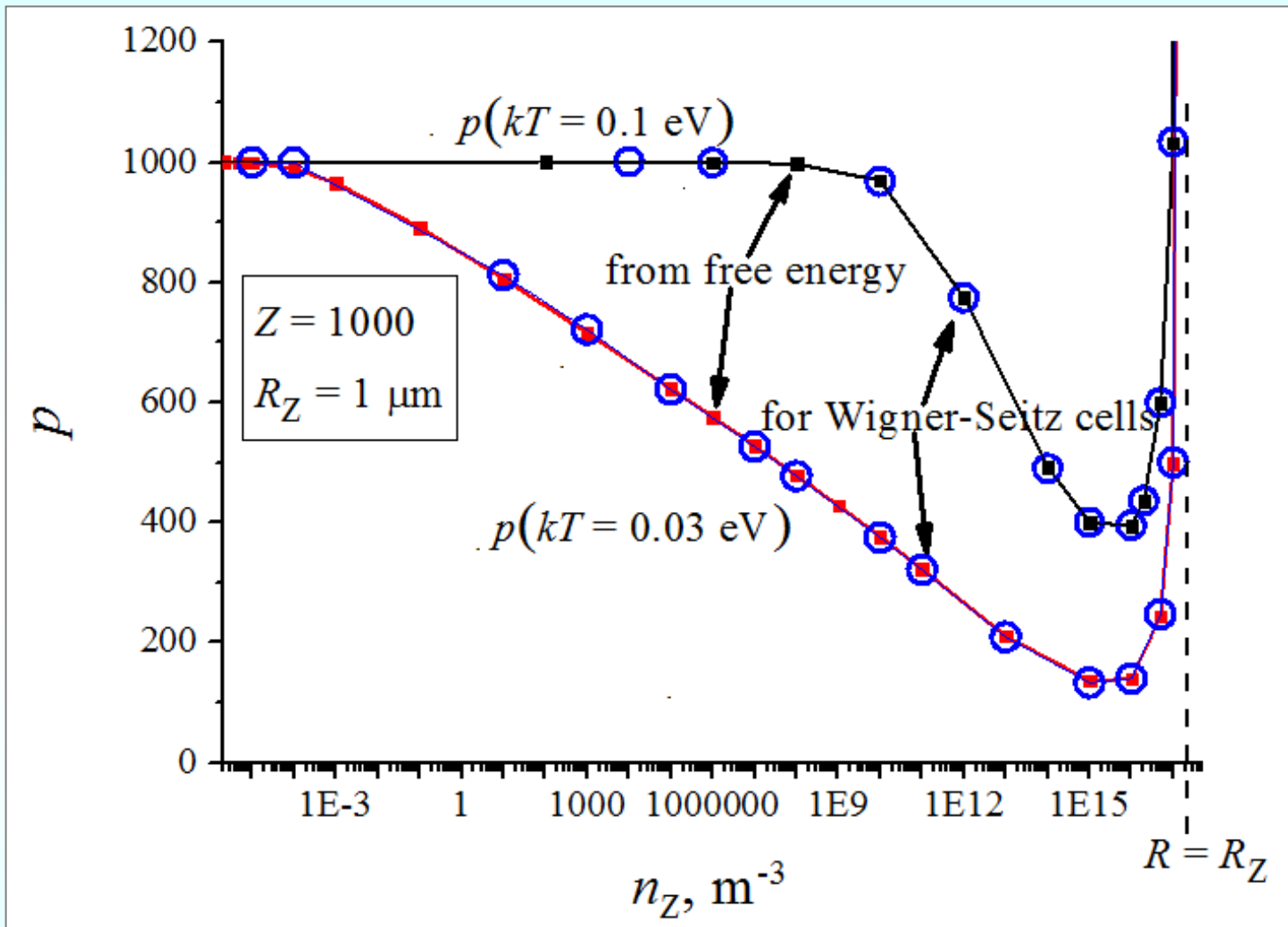
$$P = n_Z kT + n_{i0} kT$$



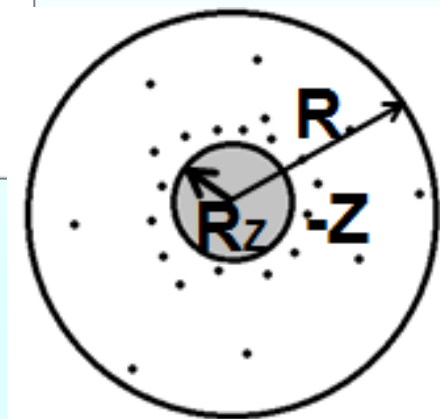
$$p \equiv \frac{P}{n_Z kT} = 1 + \frac{n_{i0}}{n_Z}$$



# Соотнесение двух способов расчета давления

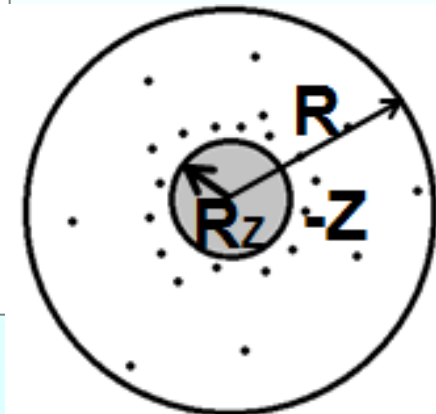
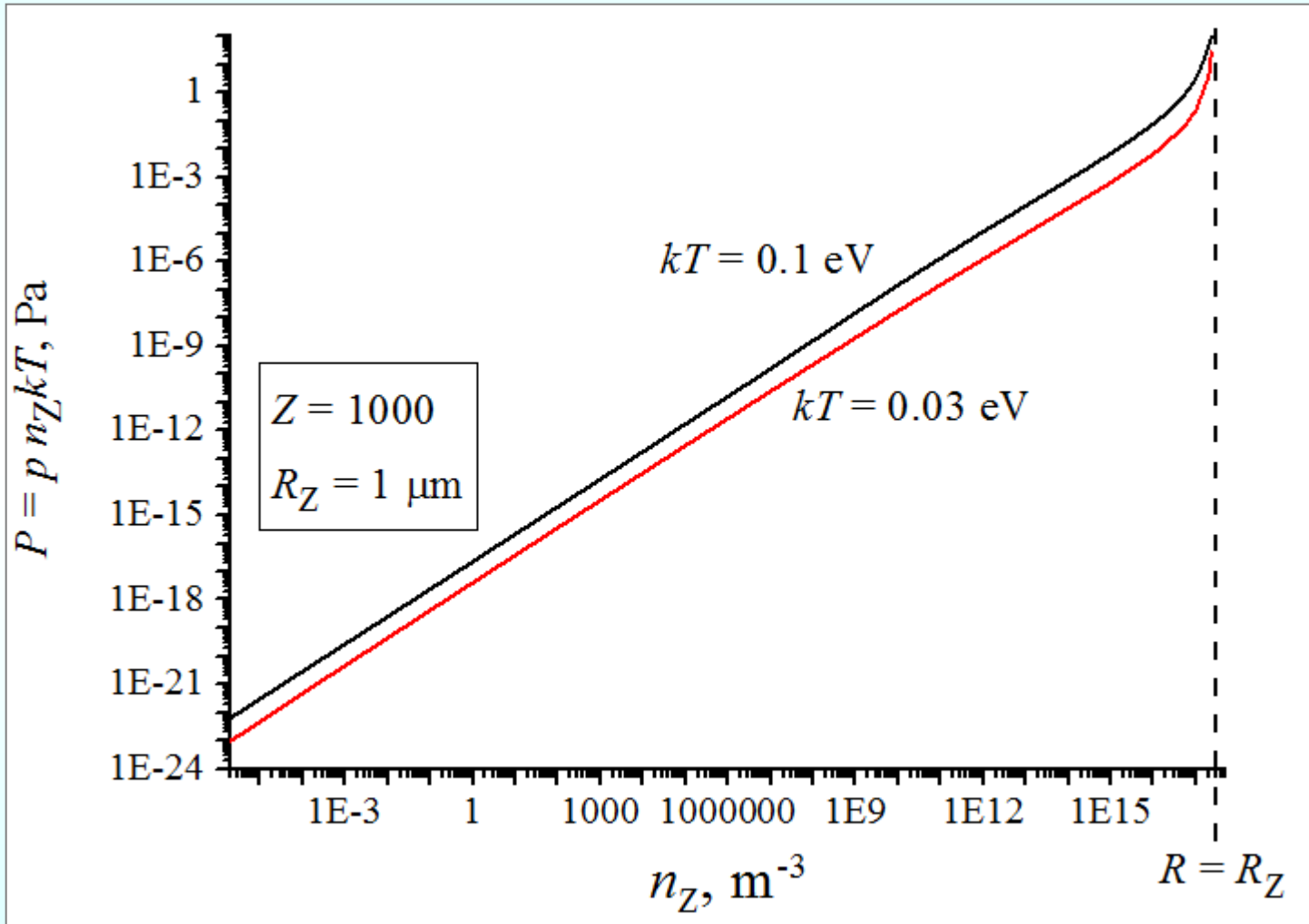


Совпадение результатов расчета



# Изотермическая сжимаемость

$$\beta \equiv -\frac{1}{V} \left( \frac{\partial V}{\partial P} \right)_T = \frac{1}{n_Z} \left( \frac{\partial n_Z}{\partial P} \right)_T$$



# Выводы:

В модели средней сферической ячейки Вигнера-Зейтца в приближении Пуассона-Больцмана

- были рассчитаны энергия взаимодействия всех частиц и свободная энергия Гельмгольца,
- было рассчитано давление системы и показано, что и давление, и изотермическая сжимаемость системы являются положительными,
- было показано, что выводы предыдущих работ о наличии заметных зон отрицательности давления и сжимаемости плазмы в исследованной области параметров не подтверждаются.

Martynova, I. Iosilevskiy **2023**, *Contrib. Plasma Phys.*, e202300097.  
DOI: 10.1002/ctpp.202300097