



Scientific-Coordination Workshop on

Non-Ideal Plasma Physics

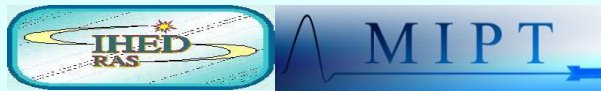
December 4-5, 2024, Moscow, Russia

Давление и изотермическая сжимаемость асимметричной комплексной плазмы в приближении Пуассона-Больцмана в корреляционной полости

Мартынова Инна Александровна,
Иосилевский Игорь Львович

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

4-5 декабря 2024г., Москва



Содержание

- Модель
- Предпосылки
- Приближение Пуассона-Больцмана в корреляционной полости
- Расчет энергии взаимодействия и свободной энергии Гельмгольца
- Расчет давления через неидеальную часть свободной энергии
- 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,

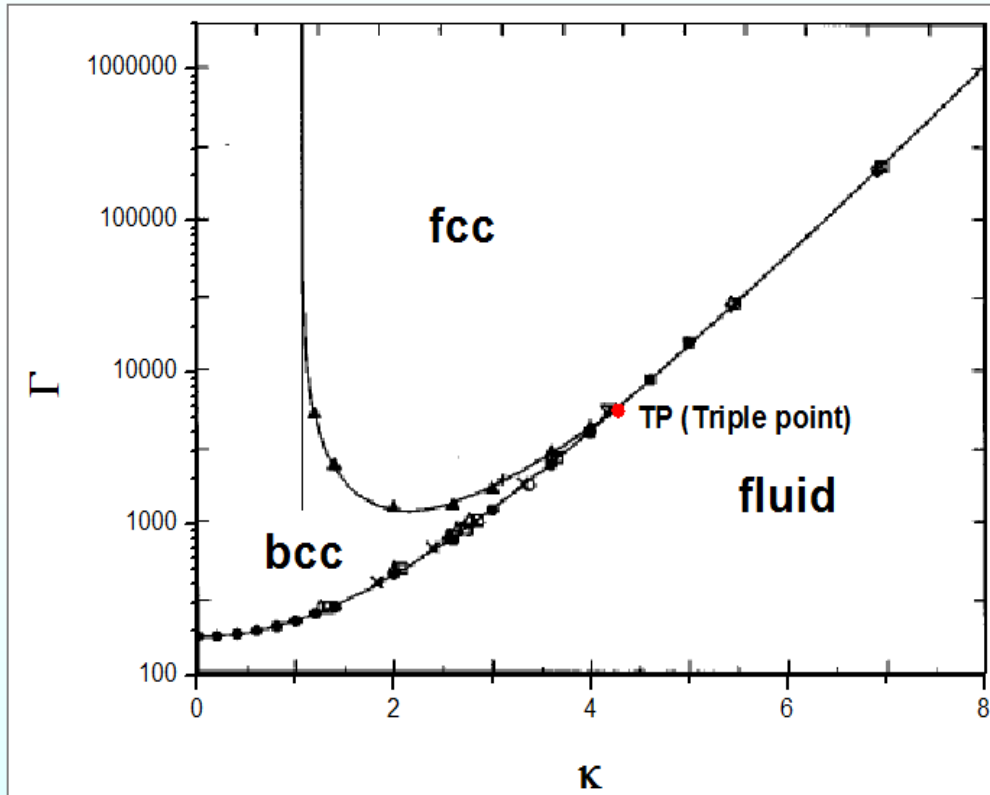
концентрация макроионов $n_Z \sim 10^5-10^9$ см⁻³)

*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)

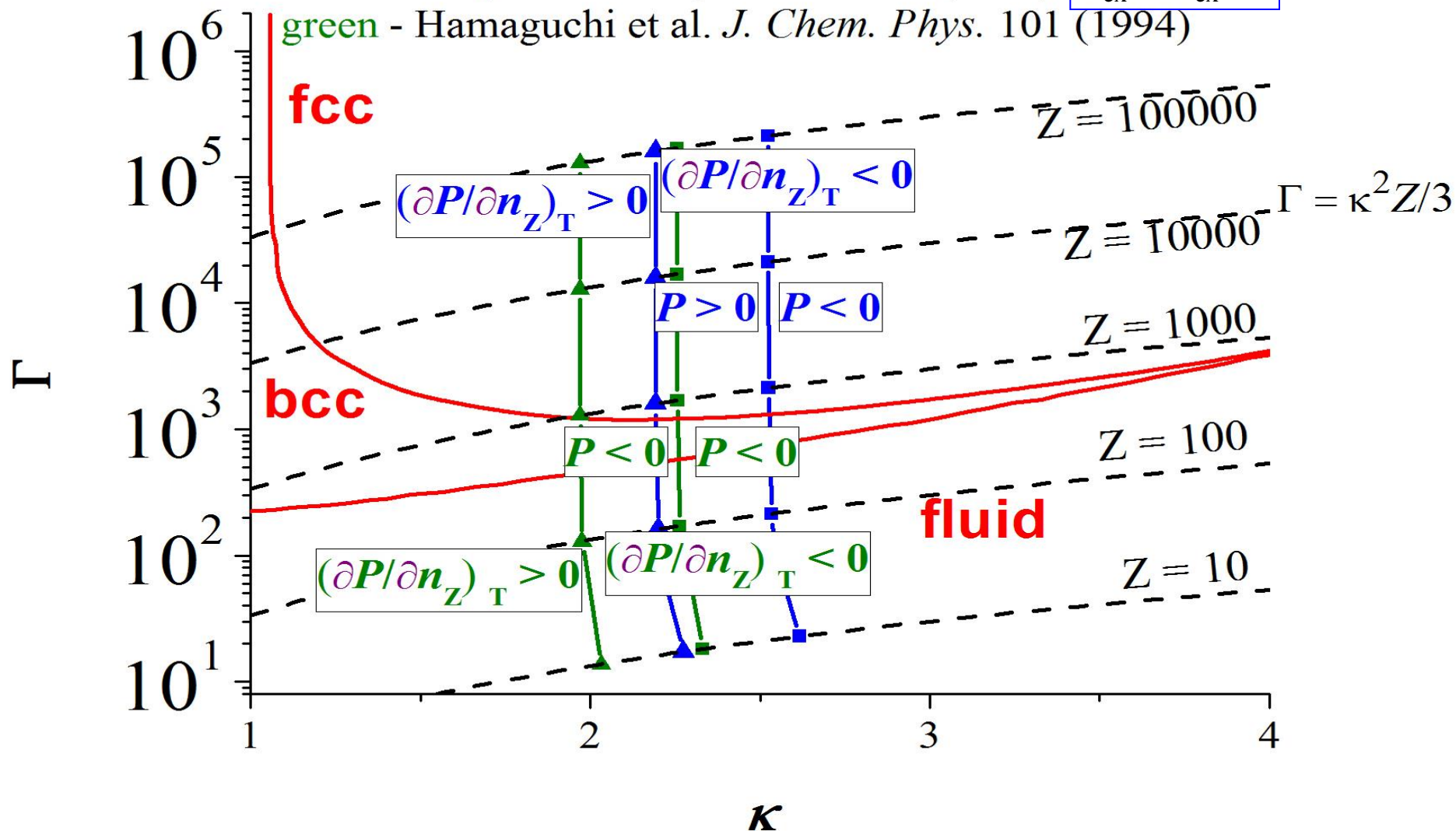
[**] Khrapak et al. *Phys. Rev. E* **89** (2014)

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) $p_{ex} = u_{ex} / 3$

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



Переход к нелинейному экранированию

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

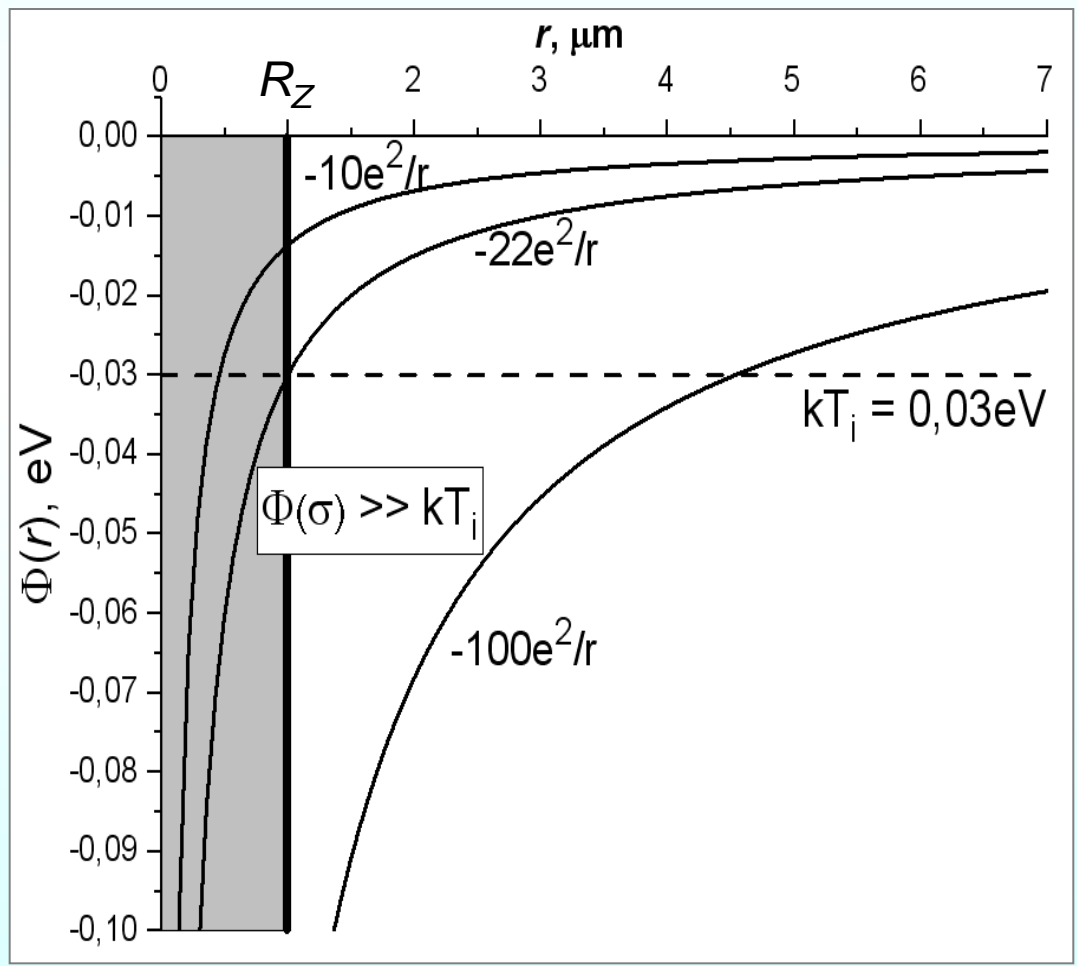


$$\frac{Ze^2 / r}{kT} \ll 1$$



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

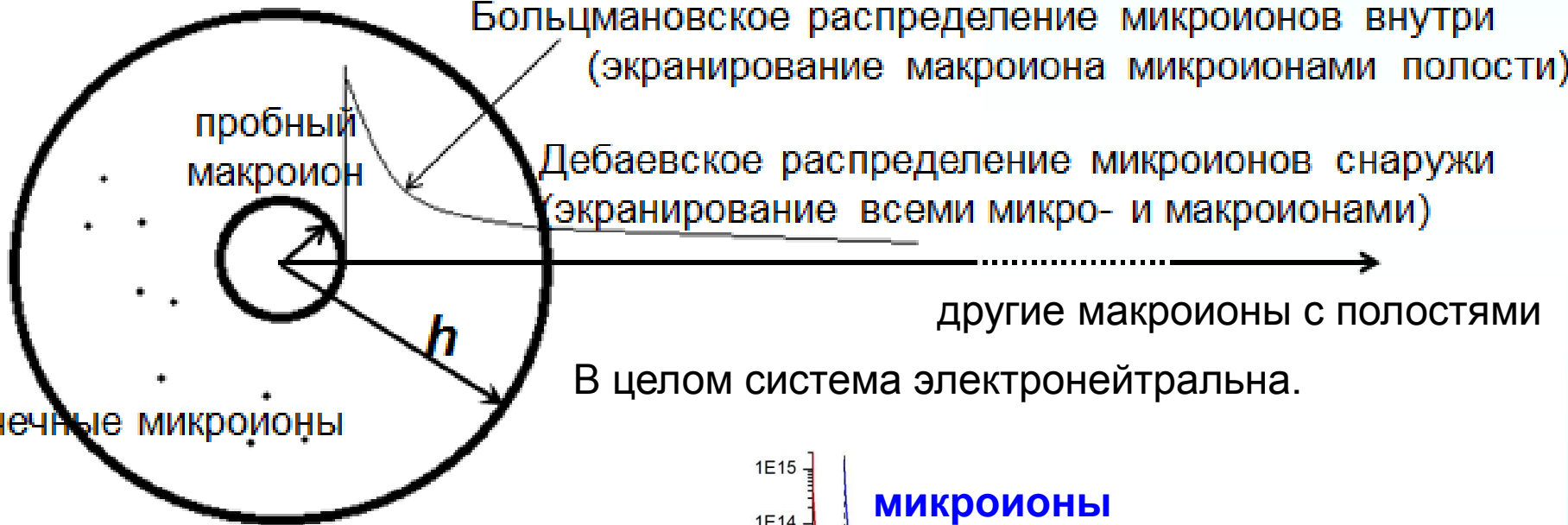
$$r = R_Z \approx 1 \mu\text{м}, \quad kT \equiv kT_i = 0,03 \text{эВ}$$



- 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 корреляционной полости (ПБП)

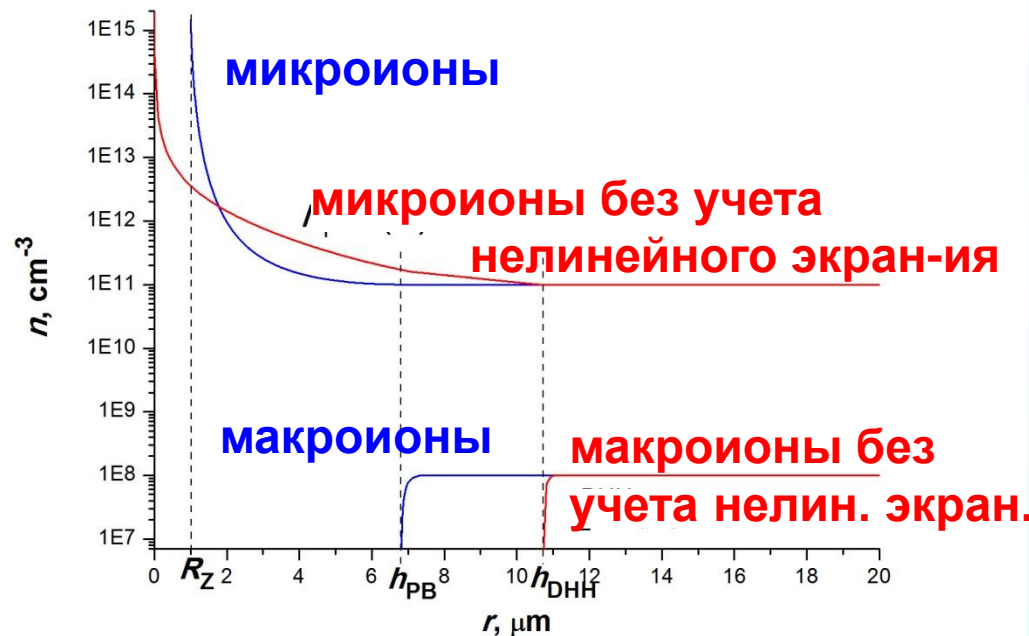
НЕэлектронейтральная полость



В целом система электронейтральна.

Концентрация макроионов:

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



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,..

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

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

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

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

Энергия взаимодействия в приближении Пуассона-Больцмана в полости

$$\begin{aligned}
 U_{\text{ex}}(V, T, N_Z) = & (U_{i^{\text{in}};i^{\text{in}}}(V, T, N_Z) + U_{Z^{\text{in}}}(V, T, N_Z)) + \\
 & + (U_{ZZ^{\text{out}}}(V, T, N_Z) + U_{i^{\text{in}};Z^{\text{out}}}(V, T, N_Z) + U_{Z^{\text{in}};i^{\text{out}}}(V, T, N_Z) + U_{i^{\text{in}};i^{\text{out}}}(V, T, N_Z)) + \\
 & + (U_{Z^{\text{out}};Z^{\text{out}}}(V, T, N_Z) + U_{i^{\text{out}};i^{\text{out}}}(V, T, N_Z) + U_{Z^{\text{out}};i^{\text{out}}}(V, T, N_Z))
 \end{aligned}$$

Удельная (на 1 макроион) энергия взаимодействия и удельная свободная энергия:

$$u_{\text{ex}}(T, n_Z) \equiv \frac{U_{\text{ex}}(V, T, N_Z)}{N_Z kT}, \quad f_{\text{ex}}(T, n_Z) \equiv \frac{F_{\text{ex}}(V, T, N_Z)}{N_Z kT}$$

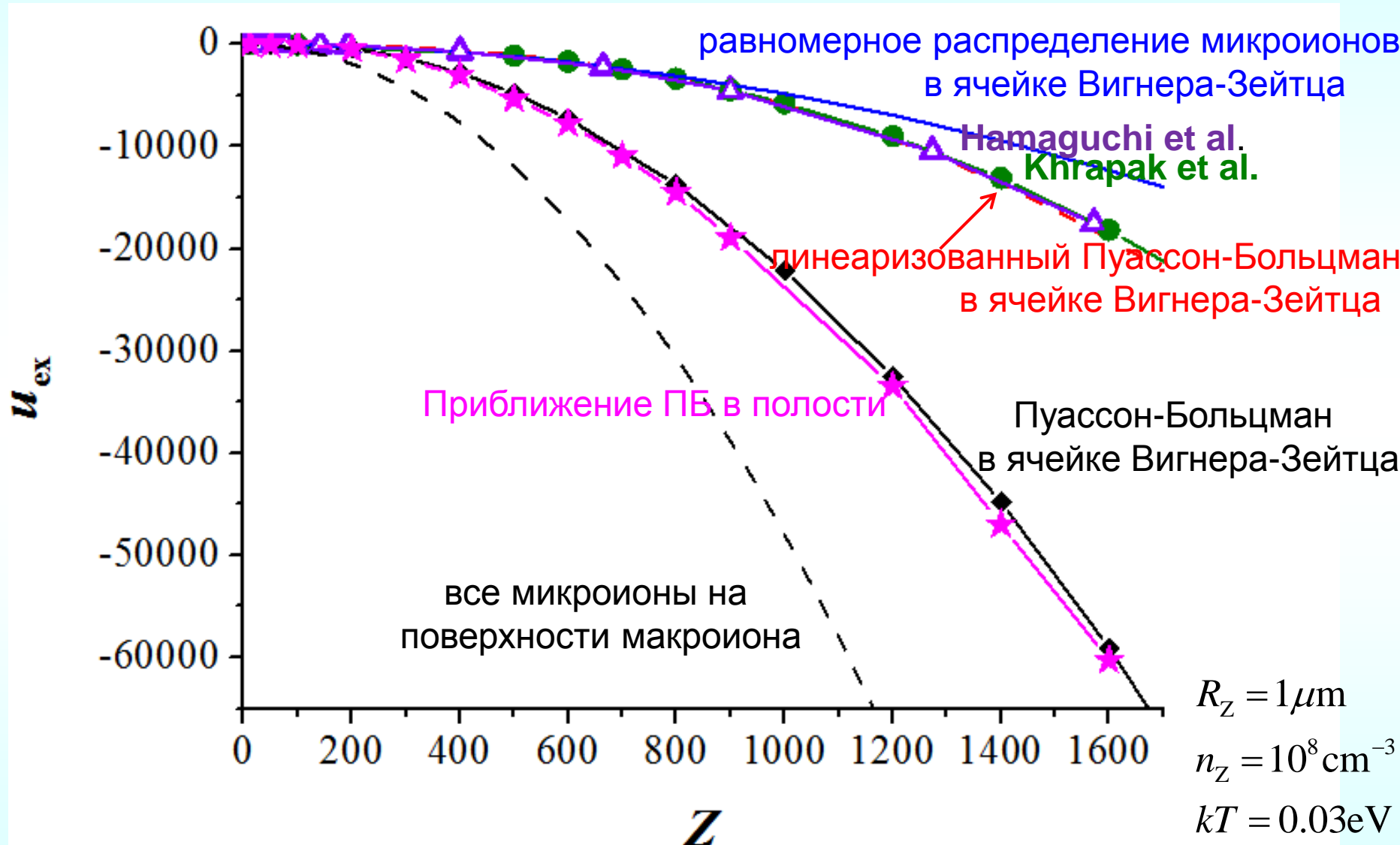
Вокруг каждого макроиона полость:

$$\begin{aligned}
 u_{\text{ex}}(T, n_Z) = & (u_{i^{\text{in}};i^{\text{in}}}(T, n_Z) + u_{Z^{\text{in}}}(T, n_Z)) + \\
 & + (u_{ZZ^{\text{out}}}(T, n_Z) + u_{i^{\text{in}};Z^{\text{out}}}(T, n_Z) + u_{Z^{\text{in}};i^{\text{out}}}(T, n_Z) + u_{i^{\text{in}};i^{\text{out}}}(T, n_Z))
 \end{aligned}$$

$$u_{jk} = \begin{cases} \frac{1}{kT} \int_{r_m}^{r_n} \varphi_j(r) q_k n_k(r) 4\pi r^2 dr, & j \neq k, \\ \frac{1}{2kT} \int_{r_m}^{r_n} \varphi_j(r) q_k n_k(r) 4\pi r^2 dr, & j = k, \end{cases}$$

где j и k - сорт частиц,
 $\varphi_j(r)$ – потенциал, создаваемый зарядами сортами j в сфере радиуса r на поверхности этой сферы,
 $q_k n_k(r)$ – плотность заряда k -го сорта на расстоянии r от центра полости.

Энергия взаимодействия в приближении Пуассона-Больцмана (ПБ) в полости



Khrapak et al. 2014 Phys. Rev. E 89; Hamaguchi et al. 1997 Phys. Rev. E 56

ПБ в полости: Martynova, Iosilevskiy 2022 Contrib. Plasma Phys. e202200110.

Свободная энергия в приближении Пуассона-Больцмана в полости

$$u_{\text{ex}}(T, n_Z) \equiv \frac{U_{\text{ex}}(V, T, N_Z)}{N_Z kT}, \quad f_{\text{ex}}(T, n_Z) \equiv \frac{F_{\text{ex}}(V, T, N_Z)}{N_Z kT}$$

Связь энергии взаимодействия и свободной энергии:

$$\frac{F_{\text{ex}}(V, T, N_Z) - U_{\text{ex}}(V, T, N_Z)}{T} = \left(\frac{\partial F_{\text{ex}}(V, T, N_Z)}{\partial(T)} \right)_{V, N_Z}$$

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

В пределе линеаризованного дебаевского приближения

$$\frac{F_D(V, T, N_Z)}{VkT} = \frac{2U_D(V, T, N_Z)}{3VkT} = \frac{\Gamma_D}{3} (Z^2 n_Z + n_i)$$

$$\Gamma_D = \frac{e^2}{r_{\text{Dout}} kT_0}$$

Расчет давления через неидеальную часть свободной энергии

$$P(T, n_Z) = n_Z kT + n_i kT + P_{ex}(T, n_Z)$$

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

$$p(T, n_Z) = 1 + Z + p_{ex}(T, n_Z)$$

Связь давления и свободной энергии:

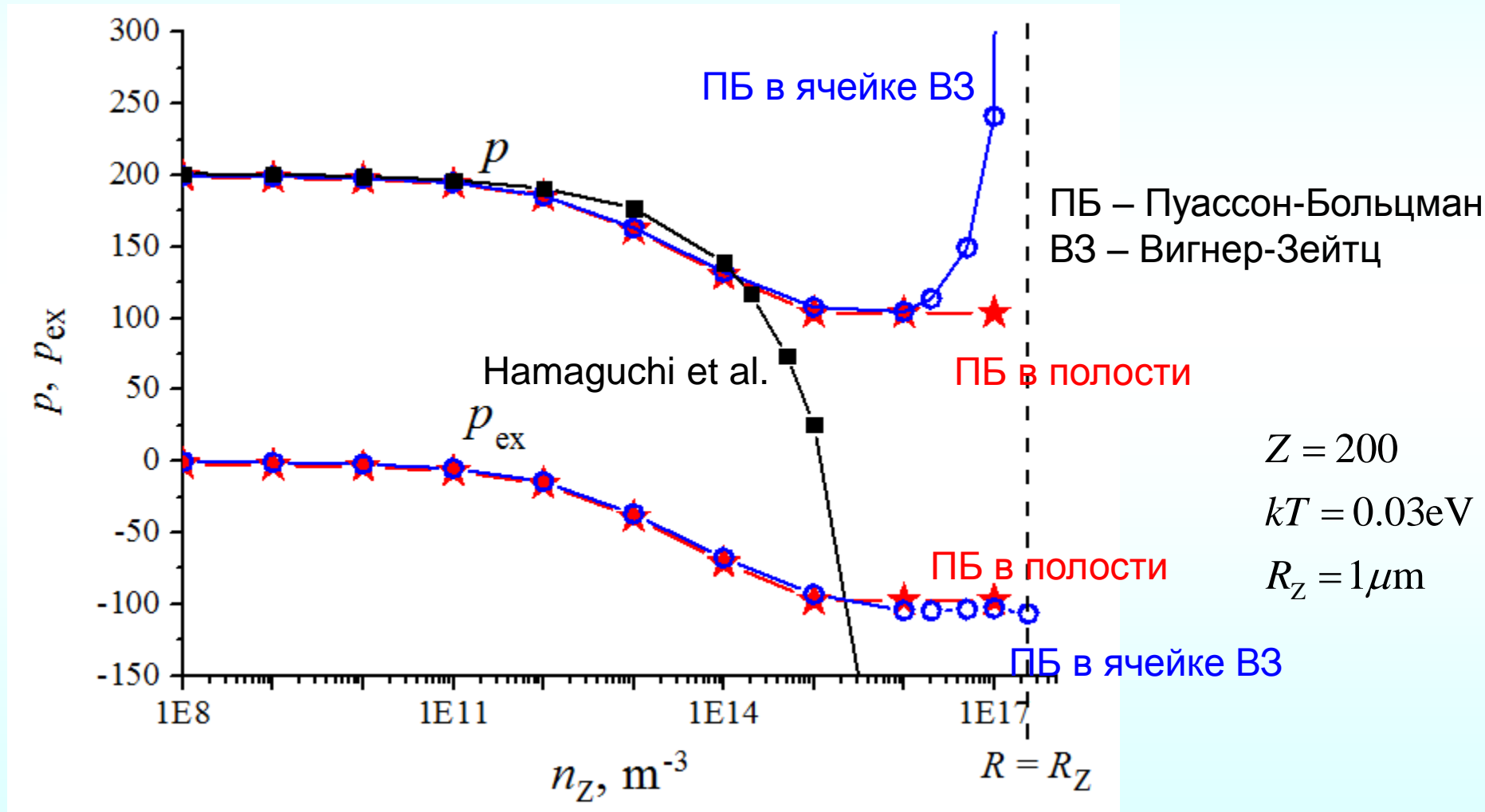
$$P(T, n_Z) = - \left(\frac{\partial F(V, T, N_Z)}{\partial V} \right)_{T, N_Z}$$

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

Безразмерные давление p и его кулоновская поправка p_{ex}

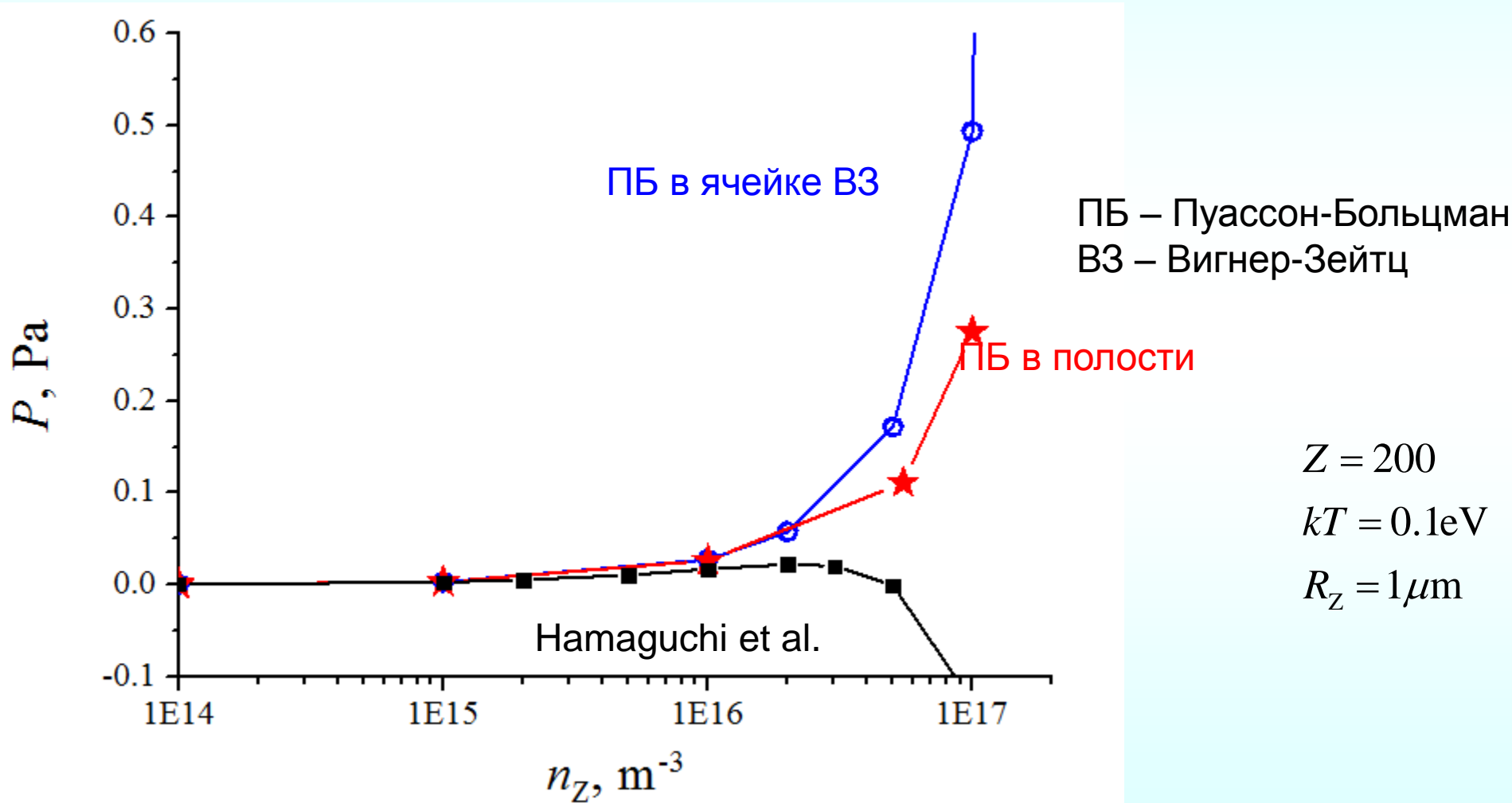
$$p \equiv \frac{P}{n_Z kT}, \quad p_{ex} \equiv \frac{P_{ex}}{n_Z kT}$$

$$p(T, n_Z) = 1 + Z + p_{ex}(T, n_Z)$$



Давление системы

$$P(T, n_Z) = n_Z kT + n_i kT + P_{ex}(T, n_Z)$$



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

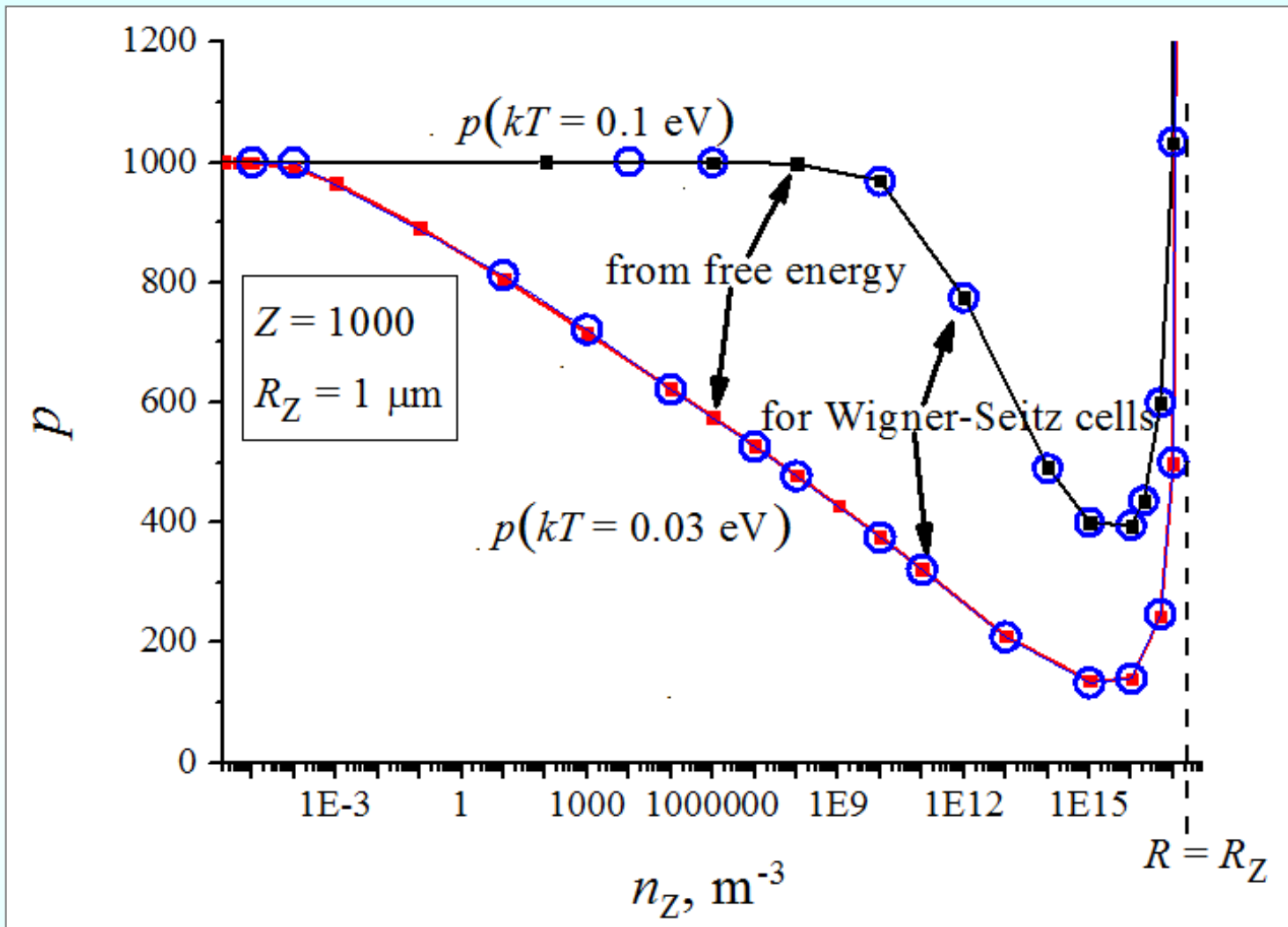
$$P = n_Z kT + n_{i0} kT$$



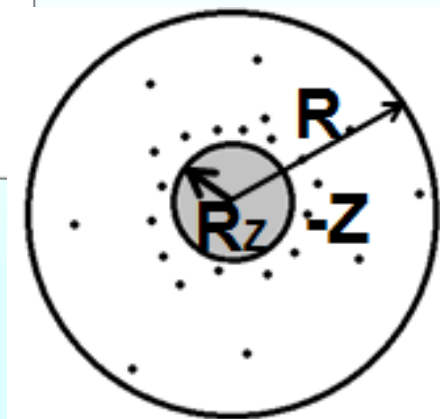
$$p \equiv \frac{P}{n_Z kT} = 1 + \frac{n_{i0}}{n_Z}$$



Соотнесение двух способов расчета давления

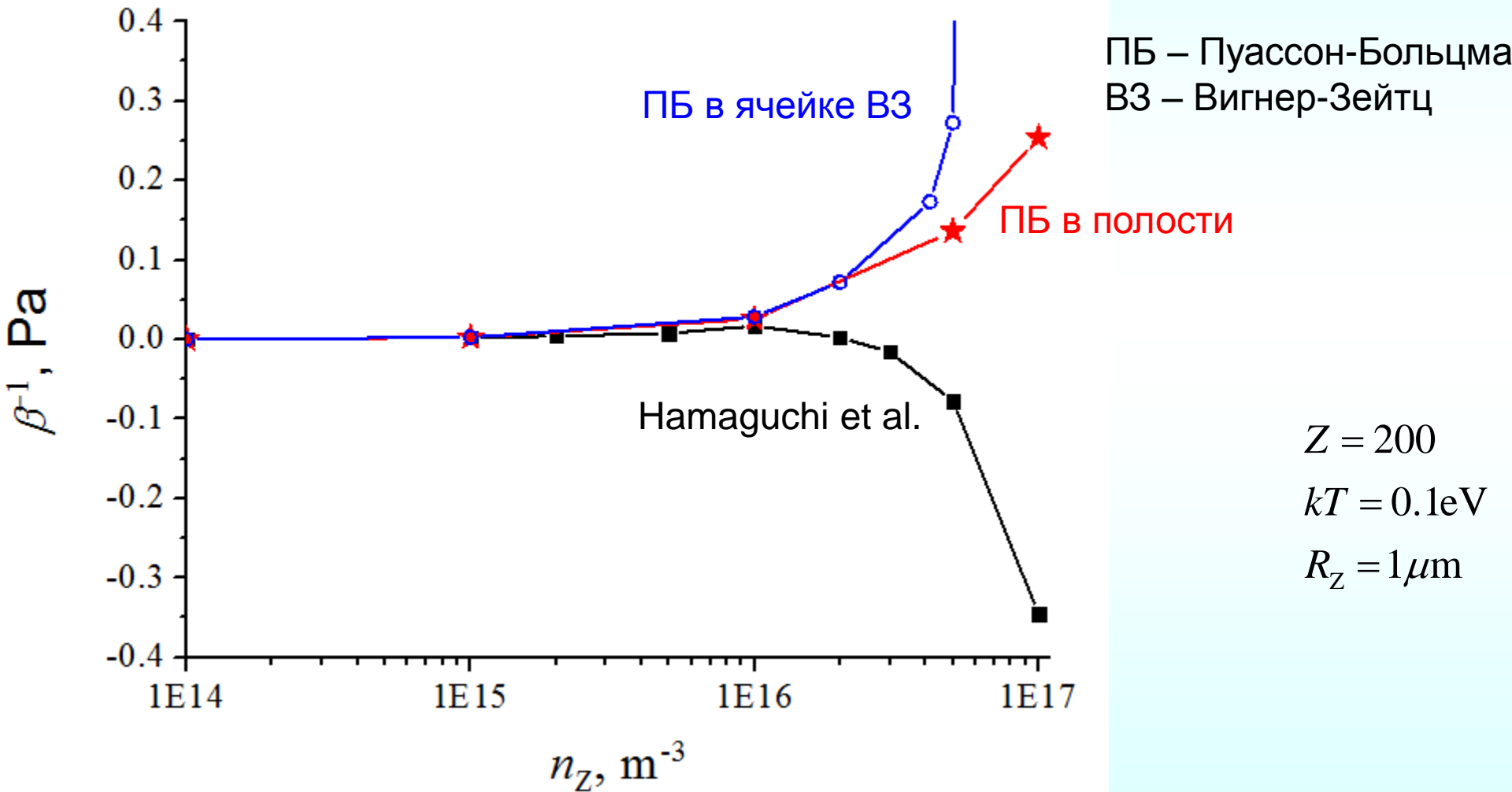


Совпадение результатов расчета



Изотермическая сжимаемость

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



Выводы:

В приближении Пуассона-Больцмана в корреляционной полости

- 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 **2024**, *Contrib. Plasma Phys.*, e202400095.

<https://doi.org/10.1002/ctpp.202400095> [10.1002/ctpp.202300097](https://doi.org/10.1002/ctpp.202300097)