

УДК 536.712

ДАВЛЕНИЕ И ИЗОТЕРМИЧЕСКАЯ СЖИМАЕМОСТЬ АСИММЕТРИЧНОЙ КОМПЛЕКСНОЙ ПЛАЗМЫ В ПРИБЛИЖЕНИИ ПУАССОНА–БОЛЬЦМАНА В КОРРЕЛЯЦИОННОЙ ПОЛОСТИ

© 2024 г. И. А. Мартынова^{1, 2, *}, И. Л. Иосилевский^{1, 2}

¹ Объединенный институт высоких температур РАН, Москва, Россия

² Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет),
Долгопрудный, Россия

*E-mail: martina1204@yandex.ru

Поступила в редакцию 03.09.2024 г.

После доработки 30.09.2024 г.

Принята к публикации 08.10.2024 г.

В данной работе рассмотрена двухкомпонентная равновесная асимметричная комплексная плазма макроионов конечных размеров с зарядами Z ($Z \gg 1$) и точечных противоположно заряженных микроионов с единичными зарядами. В рамках приближения Пуассона–Больцмана в корреляционной полости рассчитано давление в системе. Приведенный расчет построен на основе вычисления удельной энергии взаимодействия всех частиц (макроионов и микроионов) друг с другом и удельной свободной энергии Гельмгольца. Показано, что давление системы и изотермическая сжимаемость плазмы являются положительными во всем диапазоне концентраций макроионов.

DOI: 10.31857/S0040364424060042

ВВЕДЕНИЕ

Данная работа посвящена изучению термодинамической устойчивости комплексной плазмы и, в частности, расчету ее уравнения состояния (УРС). Комплексная плазма имеет достаточно много видов, среди которых коллоидная плазма [1,2], плазма с конденсированной дисперсной фазой [3], атмосфера белых карликов [4], пылевая плазма серебристых облаков [5], газоразрядная пылевая плазма [6], плазма пылевых частиц в космосе [7] и многие другие. В качестве модели рассматривается двухкомпонентная равновесная система классических макроионов с зарядовыми числами Z ($Z \gg 1$) и радиусом R_z и точечных противоположно заряженных микроионов с единичными зарядами. Результаты данной работы в наибольшей степени применимы к коллоидной плазме, где характерные параметры имеют следующие значения: зарядовые числа (далее – заряды) макроиона $Z \sim 10^2 - 10^4$, радиус макроиона $R_z \sim 0.1 - 10$ мкм, концентрация макроионов $n_z \sim 10^5 - 10^9$ см⁻³. Плазма является равновесной с температурой, близкой к комнатной.

Данная работа является продолжением работы [8], где определялись УРС двухкомпонент-

ной комплексной плазмы и знак изотермической сжимаемости в модели средней ячейки Вигнера–Зейтца в приближении Пуассона–Больцмана (ПБ). Задача получения знаков давления и изотермической сжимаемости являлась своеобразной верификацией результатов, полученных в статьях [9,10], где на основе использования уравнений состояния [11,12] предсказывалось существование заметных зон с отрицательным давлением и отрицательной сжимаемостью в значительной области характерных параметров комплексной плазмы. Такой вывод означал возможность существования фазовых расслоений на фазовой диаграмме комплексной плазмы [13]. Однако при подходе, описанном в статье [8], давление системы всегда остается положительным. Известно, что для проявления физического механизма эффективной энергии связи необходимо выйти за пределы приближения средней ячейки Вигнера–Зейтца. Это сделано в данной работе, где рассматривается приближение Пуассона–Больцмана в корреляционной полости.

Авторы полагают, что выводы УРС в данной работе и в статьях [11,12] имеют два основных отличия. Наиболее существенное из них заключается в том, что в данной работе в рамках прибли-

жения ПБ внутри корреляционной полости учитывается эффект нелинейности корреляций макроионов и микроионов друг с другом, в то время как в работах [11,12] для описания этих корреляций использовалось линеаризованное дебаевское приближение. Другим отличием является то, что в данной работе учтено влияние конечного радиуса макроионов, тогда как в работах [11,12] рассматривались точечные макроионы.

В настоящей работе рассчитывается давление в системе путем вычисления удельной поправки на неидеальность для энергии взаимодействия всех частиц (и макроионов, и микроионов), а затем удельной поправки на неидеальность для свободной энергии Гельмгольца. Ранее было показано [14], что учет нелинейного экранирования в рамках приближения ПБ в корреляционной области заметным образом отражается на величине энергии взаимодействия по сравнению с результатами, полученными в работах [11,12] с использованием линеаризованного приближения.

Указанный эффект нелинейного экранирования макроионов микроионами следует учитывать, если нарушается условие линеаризации $|e\varphi_{\text{sum}}(r)/(kT)| < 1$, где $\varphi_{\text{sum}}(r)$ – средний электростатический потенциал, создаваемый всеми микро- и макроионами. Для учета этого эффекта обычно используется приближение ПБ. Численное и (или) аналитическое решения уравнения ПБ приведены в ряде работ (см., например, [3, 15–20]). В работах [17–19] было показано хорошее согласие численных результатов вышеуказанных работ.

ПРИБЛИЖЕНИЕ ПУАССОНА–БОЛЬЦМАНА В КОРРЕЛЯЦИОННОЙ ПОЛОСТИ

Основная идея корреляционной полости и соответствующее «нормализованное дебаевское приближение» в приложении к модели однокомпонентной плазмы были предложены в работе [21] (см. подробнее [22]), а позже независимо предложены в работе [23]. Обобщение подхода [21] в приложении к многокомпонентной реальной плазме были развиты позже в работах [24–26] и др.

В приложении к комплексной плазме макро- и микроионов обобщение подхода [21,23] и соответствующее приближение были развиты в работе [11], где для такой плазмы была построена теоретическая модель корреляционной полости и получены численные результаты для уравнения состояния такой плазмы.

Суть рассматриваемого приближения заключается в том, что в некоторой окрестности пробного макроиона, называемой корреляционной полостью, находятся только микроионы (макроионы там отсутствуют). Так исправляется из-

вестная некорректность линеаризованного дебаевского приближения – проблема отрицательной концентрации макроионов на близких к пробному макроиону расстояниях. Это означает, что в пределах корреляционной полости с радиусом h концентрация макроионов полагается равной нулю, а вне полости описывается линеаризованным дебаевским приближением

$$n_{\text{macro}}(r) = \begin{cases} 0, & r \leq h, \\ n_Z \left(1 + \frac{Ze\varphi_{\text{out}}(r)}{kT} \right), & r \geq h. \end{cases} \quad (1)$$

Здесь n_Z – средняя концентрация макроионов в объеме системы V ; $\varphi_{\text{out}}(r)$ – средний электростатический потенциал, создаваемый вне полости макроионами и микроионами, макроионы имеют отрицательные заряды $-Z$ ($Z > 0$), микроионы – положительные единичные заряды; система электронейтральна $Zn_Z = n_i$, где n_i – средняя концентрация микроионов в объеме V ; T – температура системы. Макроионы имеют радиус $R_Z > 0$, микроионы точечные. Сшивая концентрации (1) на границе полости, получаем

$$e\varphi_{\text{out}}(h)/(kT) = -1/Z. \quad (2)$$

Как было указано во Введении, в статье [11] для описания корреляций макро- и микроионов использовалось дебаевское приближение. В данной работе предполагается, что внутри полости микроионы имеют Больцмановское распределение. В силу малости потенциала в (2) снаружи полости оно дебаевское:

$$n_{\text{micro}}(r) = \begin{cases} n_{i0} \exp\left(-\left(\frac{e\varphi(r)}{kT} - \frac{e\varphi(h)}{kT}\right)\right), & r \leq h, \\ n_i \left(1 - \frac{e\varphi_{\text{out}}(r)}{kT}\right), & r \geq h, \end{cases} \quad (3)$$

где n_{i0} – концентрация микроионов на границе полости; $\varphi(r)$ – средний электростатический потенциал, создаваемый макроионами и микроионами внутри полости. Сшивая концентрации микроионов (3) на границе полости, получаем

$$n_{i0} = (Z+1)n_Z.$$

Средний электростатический потенциал, создаваемый вне полости микроионами и макроионами имеет вид

$$\varphi_{\text{out}}(r) = \frac{D}{r} \exp\left(-\frac{r}{r_{\text{Dout}}}\right),$$

где D – константа, r_{Dout} – дебаевский радиус вне полости:

$$r_{\text{Dout}} = \left(\frac{4\pi e^2}{kT} (Z^2 n_Z + n_i) \right)^{-1/2}. \quad (4)$$

Средние электростатические потенциалы на границе полости равны

$$\varphi(h) = \varphi_{\text{out}}(h).$$

Напряженность внутри полости

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

Учитывая, что

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

условие сшивки для напряженностей на границе полости имеет вид

$$\frac{e}{h^2} \left(-Z + \int_{R_Z}^h n_i(r) 4\pi r^2 dr \right) = -\varphi'_{\text{out}}(h).$$

Более подробно это приближение и решение полученной системы уравнений рассматривались в работе [14].

УДЕЛЬНАЯ ЭНЕРГИЯ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ И УДЕЛЬНАЯ СВОБОДНАЯ ЭНЕРГИЯ ГЕЛЬМГОЛЬЦА

В [14] при постановке задачи с одним выделенным макроионом в начале координат и учетом электронейтральности всей системы $N_i = ZN_Z$, где N_Z и N_i – число макроионов и микроионов в указанном объеме V , энергию взаимодействия можно представить следующим образом [14]:

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

Здесь два первых члена учитывают кулоновскую энергию взаимодействия макро- и микроионов внутри корреляционной полости выделенного макроиона. Третий член $U_{ZZ^{\text{out}}}(V, T, N_Z)$ учитывает энергию взаимодействия выделенного макроиона с внешними макроионами, четвертое слагаемое $U_{i^{\text{in}}, Z^{\text{out}}}(V, T, N_Z)$ учитывает энергию взаимодействия микроионов внутри полости вокруг выделенного макроиона («внутренних») с макроионами вне полости («внешними»). Соответственно, члены $U_{Z^{\text{out}}, i^{\text{out}}}(V, T, N_Z)$ и $U_{i^{\text{in}}, i^{\text{out}}}(V, T, N_Z)$ учитывают взаимодействие внутренних макроионов и микроионов выделенного макроиона с микроионами вне полости. Член $U_{Z^{\text{out}}, Z^{\text{out}}}(V, T, N_Z)$ учитывает кулоновское взаимодействие друг с другом внешних макро-

ионов, а член $U_{i^{\text{out}}, i^{\text{out}}}(V, T, N_Z)$ – кулоновское взаимодействие друг с другом внешних микроионов. Наконец, член $U_{Z^{\text{out}}, i^{\text{out}}}(V, T, N_Z)$ учитывает кулоновское взаимодействие внешних макроионов с внешними микроионами.

Введем удельную (на один макроион) безразмерную кулоновскую поправку на неидеальность для энергии взаимодействия

$$u_{\text{ex}}(T, N_Z) \equiv U_{\text{ex}}(V, T, N_Z) / (N_Z kT).$$

В рассматриваемом приближении вокруг каждого макроиона находится корреляционная полость, внутри которой отсутствуют другие макроионы. Тогда для удельной кулоновской поправки на неидеальность для энергии взаимодействия всей системы можем записать

$$\begin{aligned} u_{\text{ex}}(T, N_Z) &= u_{Z^{\text{in}}}(T, N_Z) + u_{i^{\text{in}}, i^{\text{in}}}(T, N_Z) + \\ &+ u_{ZZ^{\text{out}}}(T, N_Z) + u_{i^{\text{in}}, Z^{\text{out}}}(T, N_Z) + \\ &+ u_{Z^{\text{out}}, i^{\text{out}}}(T, N_Z) + u_{i^{\text{in}}, i^{\text{out}}}(T, N_Z). \end{aligned} \quad (5)$$

В (5) приведены удельные (на один макроион) безразмерные кулоновские поправки на неидеальность: $u_{i^{\text{in}}, i^{\text{in}}}(T, N_Z)$ и $u_{Z^{\text{in}}}(T, N_Z)$ – для энергии взаимодействия внутренних макроионов и микроионов в каждой полости; $u_{ZZ^{\text{out}}}(T, N_Z)$ и $u_{i^{\text{in}}, Z^{\text{out}}}(T, N_Z)$ – для энергии взаимодействия внутренних макроионов и микроионов каждой полости с внешними макроионами; $u_{Z^{\text{out}}, i^{\text{out}}}(T, N_Z)$ и $u_{i^{\text{in}}, i^{\text{out}}}(T, N_Z)$ – для энергии взаимодействия внутренних макроионов и микроионов каждой полости с внешними микроионами.

Первые два слагаемых (5) можно записать следующим образом (см. подробнее [14]):

$$\begin{aligned} u_{i^{\text{in}}, i^{\text{in}}}(T, N_Z) &= \frac{e^2}{2kT} \int_{R_Z}^h \varphi_i(r) n_{\text{micro}}(r) 4\pi r^2 dr, \\ u_{Z^{\text{in}}}(T, N_Z) &= -\frac{Ze^2}{kT} \varphi_i(R_Z), \end{aligned}$$

где $\varphi_i(r)$ – потенциал, создаваемый внутренними микроионами

$$\varphi_{i^{\text{in}}}(r) \Big|_{r \leq h} = \frac{eq_{i^{\text{in}}}}{r} + \int_{r \leq h}^h \frac{eq_{i^{\text{in}}}(r_1)}{r_1^2} dr_1,$$

$$\text{где } q_{i^{\text{in}}}(r) = \int_{R_Z}^r n_{\text{micro}}(r) 4\pi r^2 dr,$$

$$q_{i^{\text{in}}} = \int_{R_Z}^h n_{\text{micro}}(r) 4\pi r^2 dr.$$

$$\text{Тогда } \varphi_{i^{\text{in}}}(r) \Big|_{r \geq h} = \frac{eq_{i^{\text{in}}}}{r}.$$

Слагаемые, описывающие кулоновские поправки на неидеальность для энергии взаимо-

действия внешних и внутренних частиц между собой:

$$u_{ZZ^{\text{out}}}(T, n_Z) = \frac{1}{kT} \int_h^{r_V} \frac{-Ze}{r} (-Ze) n_{\text{macro}}(r) 4\pi r^2 dr,$$

где r_V — расстояние от центра макроиона полости такое, что $4\pi r_V^3 / 3 = V$,

$$u_{i^{\text{in}}Z^{\text{out}}}(T, n_Z) = \frac{1}{kT} \int_h^{r_V} \Phi_{i^{\text{in}}}(r) (-Ze) n_{\text{macro}}(r) 4\pi r^2 dr,$$

$$u_{Z^{\text{out}}}(T, n_Z) = \frac{1}{kT} \int_h^{r_V} \frac{-Ze}{r} (-Ze) n_{\text{micro}}(r) 4\pi r^2 dr,$$

$$u_{i^{\text{in}}r^{\text{out}}}(T, n_Z) = \frac{1}{kT} \int_h^{r_V} \Phi_{i^{\text{in}}}(r) e n_{\text{micro}}(r) 4\pi r^2 dr.$$

Просуммировав эти четыре слагаемых, получим

$$u_{i^{\text{in}}Z^{\text{out}}}(T, n_Z) + u_{i^{\text{in}}r^{\text{out}}}(T, n_Z) + u_{ZZ^{\text{out}}}(T, n_Z) + \\ + u_{Z^{\text{out}}}(T, n_Z) = \frac{e^2}{kT} h r_{\text{Dout}} n_Z 4\pi (Z+1) (q_{i^{\text{in}}} - Z).$$

В данной работе приведен алгоритм расчета энергии взаимодействия макроионов друг с другом и с микроионами, где учитывается, что все макроионы имеют так называемые «голые» заряды Z . Это является упрощением более сложной задачи, где проводится деление всех микроионов на свободные и связанные и рассматриваются макроионы с эффективными зарядами Z^* . Пример проведения указанной процедуры деления и введения эффективного заряда макроиона в приближении Пуассона—Больцмана в корреляционной полости рассмотрен в работе [27]. В частности, выводы, сделанные там, позволяют утверждать, что в рассматриваемом приближении вследствие учета уменьшения за пределами полости эффективного заряда макроиона Z^* по сравнению с исходным Z получен существенно больший размер дебаевского радиуса r^*_{Dout} , учитывающего экранирование внешними макроионами и внешними микроионами, чем r_{Dout} в (4).

Введем удельную (на один макроион) безразмерную кулоновскую поправку на неидеальность для свободной энергии

$$f_{\text{ex}}(T, n_Z) \equiv F_{\text{ex}}(V, T, N_Z) / (N_Z kT).$$

Удельные кулоновские поправки на неидеальность для свободной энергии системы и для энергии взаимодействия системы связаны следующим соотношением (см. подробнее [14]):

$$f_{\text{ex}}(T, n_Z) = \int_T^{T_1} \frac{u_{\text{ex}}(T', n_Z)}{T'} d(T') + f_{\text{exl}}(T_1, n_Z),$$

где $f_{\text{exl}}(T_1, V)$ — удельная кулоновская поправка на неидеальность свободной энергии системы при некой известной температуре $T_1 > T$.

При повышении температуры радиус полости уменьшается, пока не достигнет размеров макроиона. Сжатие полости можно объяснить тем, что при повышении температуры в рассматриваемом приближении концентрация свободных микроионов остается неизменной (см. предыдущий раздел), а число связанных микроионов уменьшается. Когда температура достигнет такого значения, что полость полностью сожмется, вся система будет описываться так называемым «предельным» линеаризованным дебаевским приближением, но с макроионами, имеющими конечные размеры. В этом приближении (см., например, [24])

$$f_{\text{exl}}(T_1, n_Z) = \frac{\Gamma_D}{3n_Z} (n_i + n_Z Z^2),$$

где Γ_D — дебаевский параметр неидеальности

$$\Gamma_D = \frac{e^2}{r_{\text{Dout}} k T_1}.$$

На рис. 1 приведены удельные кулоновские поправки на неидеальность для энергии взаимодействия $u_{\text{ex}}(T, n_Z)$ и свободной энергии $f_{\text{ex}}(T, n_Z)$ (далее при описании графиков аргументы опускаются) для заряда $Z = 100$ в рамках приближения ПБ в ячейке Вигнера—Зейтца и в приближении ПБ в корреляционной полости. Здесь выбран небольшой заряд (по сравнению с остальными) из диапазона характерных зарядов макроиона, чтобы не выйти далеко за пределы применимости дебаевского приближения, которое используется в задаче за пределами полости. Приближение Дебая—Хюкеля применимо, если в пределах дебаевского радиуса r_{Dout} помещается достаточное количество макроионов. Для оценки указанный дебаевский радиус сравнивался со средним расстоянием между макроионами $[3/(4\pi n_Z)]^{1/3}$. Получено, что рассматриваемое приближение ПБ в корреляционной полости применимо только при достаточно небольших указанных характерных концентрациях (график приведен для всего диапазона концентраций), однако целью были приведенный ниже расчет давления в системе и определение знака изотермической сжимаемости.

Кулоновские поправки на неидеальность для обеих удельных энергий в полости и ячейке достаточно близки друг к другу, так как при указанных значениях в рассматриваемом приближении корреляционной полости почти все микроионы находятся в пределах этой полости, и она является практически электронейтральной. Так же достаточно близки кулоновские поправки на

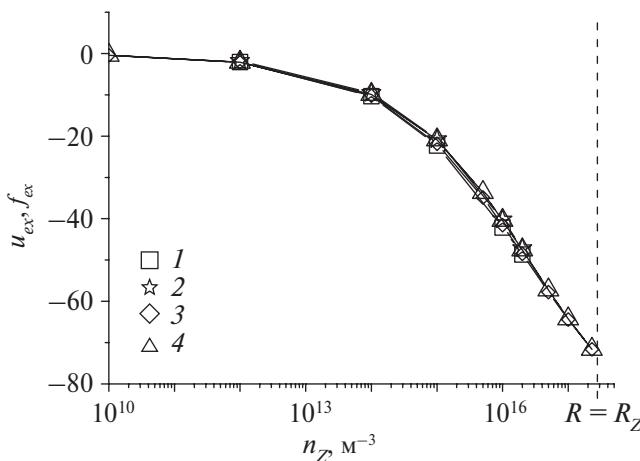


Рис. 1. Зависимость удельных (на один макроион) кулоновских поправок на неидеальность для энергии взаимодействия u_{ex} (1) и для свободной энергии f_{ex} (2) от концентрации макроионов в приближении ПБ в корреляционной полости и в средней сферической ячейке Вигнера–Зейтца ($3 - u_{ex}$, $4 - f_{ex}$) при $Z = 100$, $kT = 0.1$ эВ, $R_Z = 1$ мкм, $\chi \approx 1.44$: штриховая линия – концентрация макроионов, соответствующая сжатию ячейки до размера макроиона.

неидеальность для удельной энергии взаимодействия и для удельной свободной энергии в каждом из указанных двух приближений (ячейка и задача с полостью). Это является особенностью рассмотрения сравнительно небольшого (по сравнению с остальными значениями) характерного заряда $Z = 100$, так как система достаточно близка к идеальной (величина контактной «глубины притяжения», создаваемой микроионами на поверхности макроиона, $\chi = Ze^2/R_z kT$ составляет 1.44 для указанных на рис. 1 параметров). При заряде 1000 расхождение в величинах энергии достаточно существенно для большей части рассматриваемых концентраций макроионов по крайней мере в ячейке Вигнера–Зейтца (см. [8]), хотя полагается, что в задаче с полостью также можно предположить подобное значительное различие. Тем не менее величина энергии взаимодействия всегда больше свободной энергии по абсолютной величине даже на рис. 1.

ДАВЛЕНИЕ В СИСТЕМЕ

Давление в системе можно рассчитать следующим образом:

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

Оно состоит из идеально-газовых вкладов макро- и микроионов и кулоновской поправки на неидеальность $P_{ex}(T, n_Z)$:

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

Безразмерное давление $p(T, n_Z) \equiv P(T, n_Z)/(n_Z kT)$ и безразмерная кулоновская поправка на неидеальность для давления $p_{ex}(T, n_Z) \equiv P_{ex}(T, n_Z)/(n_Z kT)$ тогда связаны соотношением

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

Дифференцирование по объему можно заменить дифференцированием по концентрации макроионов:

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

На рис. 2 приведены зависимости давления p и кулоновской поправки на неидеальность для давления p_{ex} в зависимости от концентрации системы в приближении ПБ в корреляционной полости и в ячейке Вигнера–Зейтца. При низких концентрациях n_Z и макроионов, и микроионов мало, и их поведение можно описать как идеально-газовое. В этом случае безразмерное давление системы стремится к величине $Z + 1$. Как отмечено в выше, макроионы взаимодействуют друг с другом не с «голым», а с эффективным зарядом, который уменьшается с ростом концентрации макроионов n_Z . Это происходит вследствие того, что при увеличении n_Z вокруг центрального макроиона полости начинает наблюдаться некоторое «сгущение» микроионов. Следовательно, определяя эффективный заряд $Z^* = Z - Z_{\text{bound}}$, где Z_{bound} – заряд связанных микроионов, можно увидеть, что значение эффективного заряда макроиона падает при увеличении n_Z . Таким образом, давление также будет па-

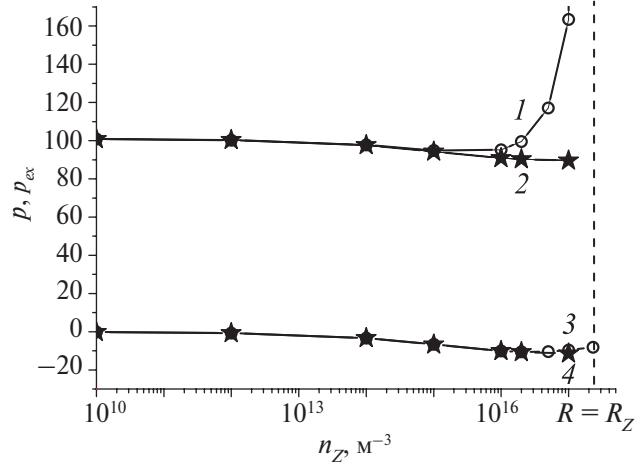


Рис. 2. Безразмерное давление в системе p (1,2) и безразмерная кулоновская поправка на неидеальность для давления p_{ex} (3,4) в зависимости от концентрации макроионов в ячейке Вигнера–Зейтца (1,3) и в приближении ПБ в корреляционной полости (2,4) при $Z = 100$, $kT = 0.1$ эВ, $R_Z = 1$ мкм, $\chi \approx 1.44$: штриховая линия – концентрации макроионов при сжатии ячейки до размеров макроиона.

дать с ростом n_Z . Деление микроионов на свободные и связанные и определение эффективного заряда можно провести и другим образом (см., например, [2, 3, 20, 28]), так как приближение ПБ является бескорреляционным в смысле отсутствия корреляций между микроионами системы, однако это не повлияет на основной вывод о характере изменения эффективного заряда при росте концентрации макроионов. Общепринятым параметром, малость которого трактуется как возможность пренебречь корреляциями микроионов, является параметр неидеальности

$$\Gamma_{ii}(r) = \frac{e^2}{kT} \left(\frac{4\pi}{3} n_{\text{micro}}(r) \right)^{1/3},$$

который в расчетах данной работы не превышает 0.07. В действительности условием, которое адекватно описывает необходимость учета указанных корреляций, является ограничение на химический потенциал микроионов в анализе появления нелинейного эффекта проявления их корреляций в виде их разрывных пространственных профилей. Более подробно это рассмотрено в статье [29].

Давление в ячейке рассчитывалось по формуле

$$p_{\text{WS}}(T, n_Z) = 1 + \frac{Z}{1 - (R_Z/R)^3} + p_{\text{WSex}}(T, n_Z),$$

где $p_{\text{WSex}}(T, n_Z)$ – безразмерная кулоновская поправка на неидеальность для давления в ячейке Вигнера–Зейтца (Wigner–Seitz), R – радиус ячейки, определяемый из условия $4\pi R^3 n_Z / 3 = 1$ (подробное описание расчета давления в ячейке приведено в работе [8]). В указанной выше формуле учтено, что при таком сжатии ячейки ее радиус стремится к радиусу макроиона, давление системы начинает неограниченно возрастать. В остальном объяснение поведения кривой зависимости давления от концентрации макроионов достаточно близко к тому, как описано выше для приближения с полостью с той разницей, что ячейка Вигнера–Зейтца в отличие от полости является электронейтральной. Также в одинаковых электронейтральных, непроницаемых, не взаимодействующих и не коррелирующих друг с другом ячейках Вигнера–Зейтца давление может быть рассчитано другим способом, основанным на предположении, что в первую очередь оно определяется тем давлением, которое создается свободными микроионами системы (см. подробнее [8]). Считая вклад макроионов в давление системы много меньше вклада от микроионов, получаем

$$p = 1 + \frac{n_{i0}}{n_Z}.$$

Давление, рассчитанное этим способом, практически совпадает с давлением, рассчитанным через энергию взаимодействия и свободную энергию Гельмгольца [8].

Кулоновская поправка на неидеальность для давления является отрицательной, так как она определяется взаимодействием противоположно заряженных макроионов и микроионов. При малых концентрациях макроионов система имеет идеально-газовое поведение, но при повышении концентрации взаимодействие между частицами увеличивается по абсолютной величине, и как следствие, поправка на неидеальность ведет себя аналогично.

Таким образом, в приближении ПБ в корреляционной полости, как и в средней сферической ячейке Вигнера–Зейтца [8], давление в системе положительное во всем рассматриваемом диапазоне концентраций макроионов. Также положительный знак давления был получен в еще одном подходе к системе пылевой плазмы во всем исследуемом диапазоне параметров в работе [30].

ИЗОТЕРМИЧЕСКАЯ СЖИМАЕМОСТЬ ПЛАЗМЫ

Изотермическая сжимаемость системы определяется как

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

Положительность изотермической сжимаемости является одним из дифференциальных условий термодинамической устойчивости [31]. В других переменных это условие можно записать как $(\partial P(T, n_Z) / \partial n_Z)_T > 0$. На рис. 3 приведена зависимость давления системы от концентрации макро-

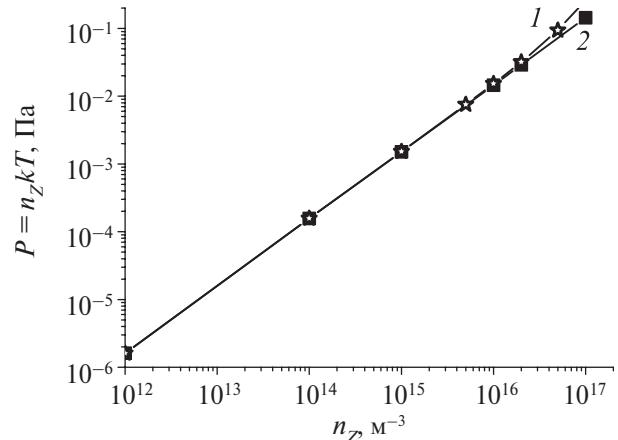


Рис. 3. Зависимость давления системы от концентрации макроионов в приближении ПБ в средней ячейке Вигнера–Зейтца (1) и в корреляционной полости (2) при $Z=100$, $kT=0.1$ эВ, $R_Z=1$ мкм, $\chi \approx 1.44$.

ионов. Видно, что изотермическая сжимаемость плазмы положительна во всем приведенном диапазоне концентраций макроионов. В приближении Пуассона–Больцмана в средней ячейке Вигнера–Зейтца изотермическая сжимаемость также является положительной во всем диапазоне характерных концентраций макроионов [8].

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе исследовалось влияние эффекта нелинейного экранирования макроионов с большими зарядами $Z \gg 1$ микроионами в высокозарядово-асимметричной комплексной плазме на ее уравнение состояния. Показано, что при учете эффекта нелинейного экранирования внутри корреляционной полости вокруг пробного макроиона давление в системе и изотермическая сжимаемость плазмы являются положительными.

Авторы считают, что основная причина различия знаков и давления системы, и изотермической сжимаемости для значительного диапазона характерных параметров рассматриваемой плазмы в настоящей работе и в статьях [9, 10], где были использованы уравнения состояния [11, 12], состоит в том, что в работах [11, 12] для описания корреляций макроионов и микроионов использовалось линеаризованное дебаевское приближение, тогда как в данной работе учтен эффект нелинейности указанных корреляций в рамках приближения Пуассона–Больцмана внутри корреляционной полости. Кроме того, в настоящей работе также учтено влияние конечного радиуса макроионов, в то время как в работах [11, 12] макроионы считались точечными.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Dijkstra M., van Roij R. Vapour–Liquid Coexistence for Purely Repulsive Point–Yukawa Fluids // J.Phys. Condens. Matter. 1998. V. 10. № 6. P. 1219.
2. Diehl A., Barbosa M., Levin Y. Charge Renormalization and Phase Separation in Colloidal Suspensions // EPL. 2001. V. 53. № 1. P. 86.
3. Жуховицкий Д.И., Храпак А.Г., Якубов И.Т. Ионизационное равновесие в сильно неидеальной плазме с конденсированной дисперской фазой // ТВТ. 1984. Т.22. № 5. С.833.
4. Kenzhebekova A.I., Bastykova N.K., Kodanova S.K., Ramazanov T.S., Maiorov S.A., Moldabekov Z.A. Destruction of a Dust Particle in the White Dwarf Atmosphere // Jpn. J. Appl. Phys. 2020. V. 59. SHHA04.
5. Клумов Б., Морфилл Г., Попель С. Формирование структур в запыленной ионосфере // ЖЭТФ. 2005. Т. 127. № 1. С. 171.
6. Фортов В.Е., Храпак А.Г., Якубов И.Т. Физика неидеальной плазмы. Учеб. пособие. М.: Физматлит, 2004. 528 с.
7. Кузнецов И.А., Захаров А.В., Зеленый Л.М. и др. Пылевые частицы в космосе: возможности экспериментальных исследований // Астроном. журн. 2023. Т. 100. №1. С. 41.
8. Мартынова И.А., Иосилевский И.Л. Давление и изотермическая сжимаемость асимметричной комплексной плазмы с учетом нелинейного экранирования в модели средней ячейки Вигнера–Зейтца // ТВТ. 2023. Т. 61. № 6. С. 836.
9. Martynova I., Iosilevskiy I. Features of Phase Transitions in Models of Complex Plasma // Contrib. Plasma Phys. 2016. V. 56. № 5. P. 432.
10. Мартынова И.А., Иосилевский И.Л. О сдвиге границ термодинамической неустойчивости асимметричной комплексной плазмы с учетом эффекта нелинейного экранирования // ТВТ. 2021. Т. 59. № 6. С. 817.
11. Khrapak S., Khrapak A., Ivlev A., Morfill G. Simple Estimation of Thermodynamic Properties of Yukawa Systems // Phys. Rev. E. 2014. V. 89. № 2. P. 023102.
12. Farouki R.T., Hamaguchi S. Thermodynamics of Strongly-coupled Yukawa Systems near the One-component-Plasma Limit. II. Molecular Dynamics Simulations // J. Chem. Phys. 1994. V. 101. № 11. P. 9885.
13. Hamaguchi S., Farouki R.T., Dubin D. Triple Point of Yukawa Systems // Phys. Rev. E. 1997. V. 56. P. 4671.
14. Мартынова И.А., Иосилевский И.Л. Энергия взаимодействия в приближении Пуассона–Больцмана в корреляционной полости в асимметричной комплексной плазме // ТВТ. 2023. Т. 61. № 2. С. 163.
15. Aleksander S., Chaikin P.M., Grant P., Morales G.J., Pincus P., Hone D. Charge Renormalization, Osmotic Pressure, and Bulk Modulus of Colloidal Crystals: Theory // J. Chem. Phys. 1984. V. 80. P. 5776.
16. Bystrenko O., Zagorodny A. Critical Effects in Screening of High-Z Impurities in Plasmas // Phys. Lett. A. 1999. V. 255. P.325.
17. D'yachkov L.G. Screening of Macroions in Colloidal Plasmas: Accurate Analytical Solution of the Poisson–Boltzmann Equation // Phys. Lett. A. 2005. V. 340. P.440.
18. Martynova I.A., Iosilevskiy I.L., Shagayda A.A. Non-linear Screening and Phase States of a Complex Plasma // Contrib. Plasma Phys. 2017. V. 58. Iss. 2-3. P. 203.
19. Martynova I., Iosilevskiy I., Shagayda A. Macroions Nonlinear Screening in Complex Plasma // J. Phys.: Conf. Ser. 2018. V. 946. P. 012147.
20. Zhukhovitskii D.I., Petrov O.F., Hyde T.W., Herdrich G., Laufer R., Dropmann M., Matthews L.S. Electrical Conductivity of the Thermal Dusty Plasma under the Conditions of a Hybrid Plasma Environment Simulation Facility // New J. Phys. 2015. V. 17. 053041.
21. Грязнов В.К., Иосилевский И.Л. Проблема построения интерполяционного уравнения состояния плазмы // Численные методы в механике сплошной среды. 1973. Т. 4. № 5. С. 166.

22. Иосилевский И.Л. Эффекты неидеальности в низкотемпературной плазме. В кн.: Энциклопедия низкотемпературной плазмы. Т.прилож. III-1 / Под ред. Старостина А.Н., Иосилевского И.Л. (под общ. ред. Фортова В.Е.). М.: Физматлит, 2004. С. 349.
23. Nordholm S. Simple Analysis of the Thermodynamic Properties of the One-component Plasma // Chem. Phys. Lett. 1984. V. 105. № 3. P. 302.
24. Иосилевский И.Л., Грязнов В.К. Расчет термодинамики многокомпонентной неидеальной плазмы // Теплофизические свойства низкотемпературной плазмы. Сб. /Ред. Иевлев В.М. М.: Наука, 1976. С.25.
25. Иосилевский И.Л. Об уравнении состояния плазмы // ТВТ. 1980. Т. 18. № 3. С.447.
26. Грязнов В.К., Иосилевский И.Л., Фортов В.Е. Термодинамика ударно-сжатой плазмы в представлениях химической модели //Ударные волны и экстремальные состояния вещества. Сб. / Ред. Фортов В.Е., Альтшуллер Л.В., Трунин Р.Ф., Фунтиков А.И. М.: Наука, 2000. С. 299.
27. Martynova I.A., Iosilevskiy I.L. Interaction Energy in the Poisson-Boltzmann Plus Hole Approximation in Asymmetric Complex Plasmas // Contrib. Plasma Phys. 2024. V.62. №9. e202200110.
28. Szichman H., Eliezer S., Salzmann D. Calculation of the Moments of the Charge State Distribution in Hot and Dense Plasmas Using the Thomas-Fermi Models // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 1987. V. 38. № 4. P. 281.
29. Martynova I.A., Iosilevskiy I.L. Macroion Effective Charge in Complex Plasmas with Regard to Microion Correlations // Contrib. Plasma Phys. 2024. V. 61. №2. e202000142.
30. Филиппов А.В., Решетняк В.В., Старостин А.Н., Ткаченко И.М., Фортов В.Е. Исследование пылевой плазмы на основе интегрального уравнения Орнштейна–Цернике для многокомпонентной жидкости // Письма в ЖЭТФ. 2020. Т.110. Вып. 10. С. 658.
31. Landau L.D., Lifshits E.M. Теоретическая физика. Учеб.пособ. В 10-ти т. Т. V. Статистическая физика. Ч. I. М.: Физматлит, 2002. 616 с.