

УДК 536.71

АНОМАЛИИ ПРОФИЛЯ ПРОСТРАНСТВЕННОГО ЗАРЯДА И ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В МОДИФИЦИРОВАННЫХ МОДЕЛЯХ ОДНОКОМПОНЕНТНОЙ ПЛАЗМЫ

© 2021 г. И. Л. Иосилевский^{1, 2, *}, А. Ю. Чигвинцев^{1, 2, **}, Л. Ю. Ногинова³, И. Г. Зорина⁴

¹ФГАОУ ВО “Московский физико-технический институт
(национальный исследовательский университет)”, г. Долгопрудный, Россия

²ФГБУН Объединенный институт высоких температур РАН, Москва, Россия

³ФГАОУ ВО “Национальный исследовательский технологический
университет “МИСиС”, Москва, Россия

⁴ФГБОУ ВО “Московский государственный технический университет
им. Н.Э. Баумана (национальный исследовательский университет)”, Москва, Россия

*E-mail: iosilevskiy@gmail.com

**E-mail: alex012008@gmail.com

Поступила в редакцию 27.09.2021 г.

После доработки 27.09.2021 г.

Принята к публикации 23.11.2021 г.

В работе обсуждается появление разрывов в равновесных профилях пространственного заряда в неоднородных кулоновских системах в широком спектре задач термоэлектростатики. Такие разрывы рассматриваются как своеобразное микроуровневое проявление фазовых переходов и внутренних макроуровневых эффектов неидеальности в локальном уравнении состояния, которое используется для описания неидеальной электронной или ионной подсистемы в рамках приближения локальной плотности (“псевдожидкость”, “желе” и т.д.). Особое внимание в статье уделяется эффектам неидеальности в неоднородных ионных подсистемах, таким как профиль микроионов в экранирующем “облаке” вокруг макроионов в сложной (пылевой, коллоидной и т.д.) плазме, равновесный профиль заряда в ионных ловушках или в окрестности “заряженной стенки”. Также в работе построено многофазное уравнение состояния для упрощенной ионной модели классических заряженных твердых сфер на однородно сжимаемом электростатическом компенсирующем фоне и рассчитано несколько иллюстративных примеров обсуждаемых прерывистых ионных профилей.

DOI: 10.31857/S0040364421060077

ВВЕДЕНИЕ

Проблема возможности существования специфических фазовых переходов в плазме и наличие особых свойств, присущих фазовым превращениям в системах с дальнедействующим кулоновским взаимодействием, была одной из главных сквозных тем, характерных для всего научного творчества Владимира Евгеньевича Форгова [1–3] и др. Наряду с теоретическими и экспериментальными поисками гипотетических “плазменных” фазовых переходов в плотных и нагретых состояниях (в неидеальной плазме) реальных веществ, таких как цезий [4], ксенон [5], водород (дейтерий) [6] и др., важную роль в изучении проблемы фазовых переходов в плазме играет исследование особенностей фазовых превращений и проявлений аномалий с их участием в простейших кулоновских моделях (см., например, [1, 7]).

Приближение “желе” (или приближение “квазиоднородности” [8], или приближение локальной

плотности – ПЛП [9] и др.), т.е. замена равновесного ансамбля дискретных частиц (электронов и/или ионов) гипотетической псевдожидкостью с чисто локальными термодинамическими свойствами (т.е. зависящими только от температуры и локальной плотности), широко используется не только в гидродинамических приложениях, но и в термоэлектростатике, т.е. при расчете равновесного распределения заряженных частиц вблизи источника неоднородности. Для этого используется локальное уравнение состояния (УРС), которое связывает локальное давление, энергию и химический потенциал заряженных частиц с локальной плотностью и температурой [9]. В большинстве случаев это уравнение состояния идеального газа, основанное на “бескорреляционных” приближениях Томаса–Ферми или Пуассона–Больцмана (например, [8]). Основная проблема такого подхода в приложении к сильно неидеальным системам: корректный учет влияния межчастичных корреляций (т.е. неидеальности). Самый простой способ сделать это в рамках

приближения локальной плотности – использовать локальную форму поправок на корреляции, что приводит к приближениям Томаса–Ферми–Дирака для вырожденных систем электронов или же к приближению Пуассона–Больцмана–Дебая для классических зарядов [10] и [11]. Уже в ряде ранних статей утверждалось [12–14], что очевидным решением этой проблемы в рамках ПЛП является замена приближения уравнения состояния идеального газа точным уравнением состояния для неидеальных однокомпонентных электронных или ионных подсистем с полностью развитыми корреляциями.

ВАРИАЦИОННЫЙ ПОДХОД К РЕШЕНИЮ ЗАДАЧ ТЕРМОЭЛЕКТРОСТАТИКИ

Хорошо известно (см., например, [8]), что любую задачу термoeлектростатики можно в наиболее общем виде сформулировать как вариационную задачу для экстремума термодинамического потенциала (свободной энергии Гельмгольца), как функционала от пространственной плотности зарядов $n(r)$ при наложенных линейных ограничениях сохранения числа частиц и электронейтральности:

$$F = \min_{n(\cdot)} F[n(\cdot)] = Ze \int \phi_{\text{ext}}(\bar{x}) n(\bar{x}) d\bar{x} + \frac{Z^2 e^2}{2} \int \frac{n(\bar{x}) n(\bar{y})}{|\bar{x} - \bar{y}|} d\bar{x} d\bar{y} + F^*[n(\cdot)]. \quad (1)$$

Здесь первый и второй члены представляют собой соответственно энергию зарядов во внешнем поле (например, в поле центрального заряда атомной ячейки или в “поле” ионной ловушки и др.) и кулоновскую энергию зарядов в “бескорреляционном” приближении среднего поля. Третий член – это априори неизвестный член, учитывающий все корреляции зарядов и их кинетическую энергию – $F^*[n(\cdot)]$. По своему смыслу этот член соответствует свободной энергии неоднородной неидеальной системы зарядов, “натянутой” на противоположно заряженный компенсирующий фон с плотностью $n(r)$. В широко используемом, как правило, приближении “локальной плотности” (или “квазиоднородности” [8], или локального термодинамического равновесия (ЛТР)) данное слагаемое аппроксимируется, как интеграл от удельной (локальной) свободной энергии макроскопической системы зарядов $f(n(r))$:

$$F^*[n(\cdot), T] \approx \int f(n(\bar{x})) n(\bar{x}) d\bar{x}, \quad (2)$$

$$f(n) \equiv \lim \left\{ \frac{F(N, V, T)}{N} \right\}_{N \rightarrow \infty, N/V = n}.$$

Если $F(N, V, T)$ представляет собой свободную энергию идеального газа (Больцмана или Ферми), то приходим к хорошо известным бескорреляционным приближениям Пуассона–Больцмана или Томаса–Ферми соответственно [8]. В случае

же когда в рамках приближения ЛТР выполняется попытка учесть корреляции зарядов, то в качестве $F(N, V, T)$ выступает уже свободная энергия однокомпонентного неидеального газа с полностью развитыми межчастичными корреляциями. Существенно [12–14], что в этом случае последнее слагаемое функционала (1) становится свободной энергией модифицированной модели однокомпонентной плазмы – ОСР(#), но уже на однородно сжимаемом компенсирующем фоне (см. подробнее [15, 16]). Следует подчеркнуть, что в этом случае во взаимодействии данной однокомпонентной системы помимо эффекта кулоновского отталкивания зарядов есть еще и эффект притяжения с “фоном” (!). Как прямой результат этого обстоятельства, все эффекты указанного притяжения, включая, прежде всего, наличие при достаточно низких температурах различных фазовых переходов, непосредственно входят вместе с используемой в (1), (2) удельной свободной энергией $f(n, T)$ в процедуру минимизации (1), где должны проявиться в тех или иных особенностях финального равновесного профиля зарядов.

СЕМЕЙСТВО МОДИФИЦИРОВАННЫХ ОДНОКОМПОНЕНТНЫХ МОДЕЛЕЙ ЗАРЯДОВ НА ОДНОРОДНО СЖИМАЕМОМ ФОНЕ

Хорошо известная классическая однокомпонентная плазма – это идеализированная электронейтральная в целом система заряженных частиц, погруженных в однородный несжимаемый (“замороженный”) фон заряда противоположного знака (обозначаемая ниже как ОСР(#)). Модель демонстрирует единственный фазовый переход – кристаллизацию Вигнера. Этот переход в модели ОСР(#) происходит без изменения плотности.

В ряде предыдущих исследований [12–14, 17–19] в контексте обсуждаемой проблемы было предложено семейство модифицированных (“безассоциативных” [12]) моделей плазмы (общее обозначение ниже – ОСР(~)) со следующими общими чертами:

- отсутствие индивидуальных корреляций между зарядами разного знака;
- возможность однородной сжимаемости всей системы в целом или ее отдельных макроскопических частей (фаз).

В частности, были изучены следующие варианты “безассоциативных” моделей:

- 1) классические точечные заряды на однородно сжимаемом компенсирующем фоне идеального ферми-газа электронов [13];
- 2) квантовый взаимодействующий электронный газ на однородно сжимаемом компенсирующем электростатическом фоне [14];

3) классические заряженные твердые сферы на однородно сжимаемом компенсирующем электростатическом фоне [20] (обозначается ниже как HS-ОСР(\sim));

4) “сдвоенная” модель ОСР (double-ОСР) – суперпозиция двух пространственно совмещенных разнозаряженных ОСР(\sim) с равными или различающимися массами (например, “бескорреляционные” системы электронов и ионов или электронов и дырок) [13, 14].

Указанному семейству “безассоциативных” моделей может быть дано точное формальное определение, позволяющее прямое моделирование свойств каждой из них [19]. Определение первой из перечисленных моделей (классические точечные заряды на сжимаемом компенсирующем фоне идеального ферми-газа электронов) выглядит следующим образом [19]:

$$\begin{aligned} (F/NkT)_{\text{ОСР}(-)} &= f_{\text{ОСР}(-)} = \\ &= (f_{\text{id}} + \Delta f_{\text{int}})_{ii} + (f_{\text{id}})_{ee} = (f_{\text{ОСР}(\#)})_{ii} + (f_{\text{id}})_{ee}, \end{aligned}$$

где f_{ee} и f_{ii} – удельные свободные энергии подсистем, учитывающие соответственно электрон-электронные и ион-ионные корреляции и включающие идеальные f_{id} и неидеальные Δf_{int} части.

ФАЗОВЫЕ РАССЛОЕНИЯ В МОДИФИЦИРОВАННЫХ МОДЕЛЯХ ОСР НА ОДНОРОДНО СЖИМАЕМОМ ФОНЕ

Однородная сжимаемость фона в семействе “безассоциативных” моделей ОСР(\sim) приводит к появлению трех стандартных фазовых переходов: плавление, испарение и сублимация (см. [13, 14]). Благодаря постулируемому в моделях отсутствию индивидуальных корреляций между подсистемами разных знаков (например, ион-электронных корреляций), все параметры фазовых переходов (включая параметры спиновидных и метастабильных ветвей) могут быть явно вычислены, если известны уравнения состояния подсистем зарядов.

Для рассматриваемых далее модельных задач термоэлектростатики (а именно, электроны в атомной ячейке; электроны вблизи заряженной стенки; Z-пинч; полиион в электролите, коллоидной и пылевой плазме; заряды в макроскопической полости) понадобятся уравнения состояния идеального и/или неидеального ферми-газа электронов и уравнение состояния заряженных твердых сфер на однородно сжимаемом компенсирующем электростатическом фоне. Следует подчеркнуть, что для расчета профиля заряда в задачах термоэлектростатики нельзя использовать УРС классических точечных зарядов на сжимаемом, компенсирующем электростатическом фоне [21]. Это связано с тем, что при температурах классической ионной подсистемы ниже критической температуры фазового перехода в этом варианте модели

ОСР(\sim) точечные ионы “конденсируются” (налипают) на поверхность источника неоднородности (центрального макроиона), образуя на его поверхности бесконечно тонкую и бесконечно плотную “пленку” (в работе [21] эта аномалия названа “структурной катастрофой”).

РАЗРЫВНЫЕ ПРОФИЛИ ЗАРЯДА В НЕОДНОРОДНОЙ ПЛАЗМЕ КАК ОТРАЖЕНИЕ ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА В МОДЕЛИ ОСР(\sim)

Явление, которое на макроскопическом уровне в модели ОСР(\sim) выглядит как фазовый переход, на микроскопическом уровне при соответствующих условиях (достаточно низких температурах и высоких плотностях) выглядит как разрыв в равновесном неоднородном профиле заряда (рис. 1). Это должно происходить, даже когда для учета эффекта корреляций зарядов используются простые локальные приближения типа Томаса–Ферми–Дирака или Пуассона–Больцмана–Дебая. Тем более это реализуется при использовании в вариационной процедуре (1) “точных” (т.е. полученных в рамках прямого численного моделирования) локальных уравнений состояния равновесной неоднородной системы зарядов.

Следует подчеркнуть, что это “фазовое расслоение” экранирующего заряда происходит в системе взаимно отталкивающихся частиц и, по-видимому, является одним из примеров ситуации, когда малость локального параметра неидеальности $\Gamma(r)$, оцененного в приближении Пуассона–Больцмана, никак не гарантирует не только количественной, но и качественной правильности профиля заряда, который дает это приближение.

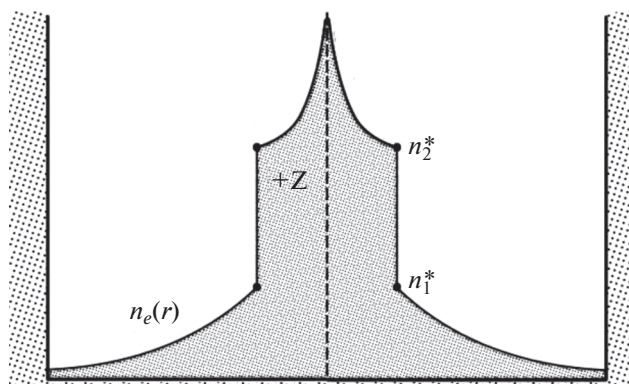


Рис. 1. Схематическое изображение ячейки Вигнера–Зейтца с разрывным профилем электронов: $+Z$ – заряд ядра, $n_e(r)$ – профиль электронов, n_1^* – плотность “газовой фазы”, n_2^* – плотность “жидкой фазы” [13].

ФАЗОВЫЙ ПЕРЕХОД В НЕИДЕАЛЬНОМ ФЕРМИ-ГАЗЕ ЭЛЕКТРОНОВ НА ОДНОРОДНО СЖИМАЕМОМ ЭЛЕКТРОСТАТИЧЕСКОМ ФОНЕ

Модель квантового электронного газа на несжимаемом фоне хорошо изучена [22]. Переход к варианту с однородным, но сжимаемым фоном приводит к появлению фазового перехода типа газ–жидкость с верхней критической точкой (рис. 2). Наиболее существенным отличием обсуждаемой модели по сравнению со случаем электронов на несжимаемом фоне является то, что новый фазовый переход исключает возможность существования вигнеровского электронного кристалла, поскольку его кривая плавления оказывается расположенной глубоко внутри области абсолютной неустойчивости (спинодали) перехода газ–жидкость [13, 14]. Рассмотрим несколько модельных задач, иллюстрирующих вышеприведенные утверждения.

АНОМАЛИИ ПРОФИЛЯ ЭЛЕКТРОНОВ В АТОМНОЙ ЯЧЕЙКЕ

В иерархии приближений, используемых для решения этой задачи, видное место занимает бескорреляционное приближение (Томаса–Ферми), дающее гладкий монотонный профиль электронов [10]. Переход в рамках локального приближения [10, 22] к неидеальному УРС как путем добавления локальной обменной поправки (приближение Томаса–Ферми–Дирака), так и в более сложных вариантах [23] может при $T < T_c$ привести к разрывному профилю электронов, распадающемуся на плотную “конденсированную каплю”

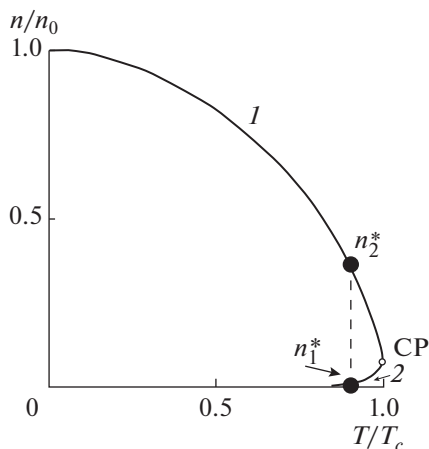


Рис. 2. Фазовая диаграмма модели неидеального ферми-газа электронов на однородно сжимаемом электростатическом фоне: CP – критическая точка; пунктирная линия – фазовый переход газ–жидкость при определенной температуре; 1 – жидкость, 2 – газ, n_1^* – плотность газа, n_2^* – плотность жидкости [14].

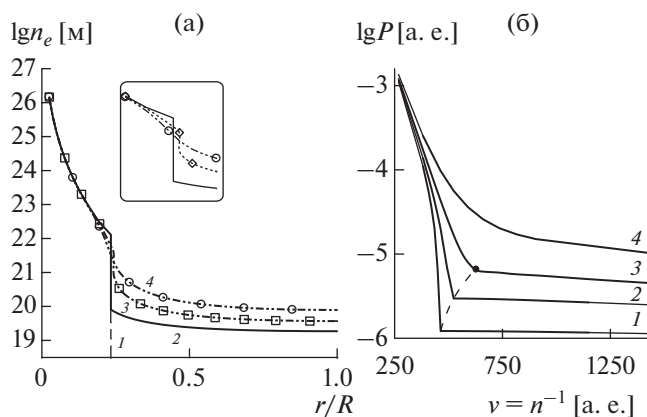


Рис. 3. Результаты расчета профиля электронов в атомной ячейке Pb (а): 1 – $T = 0$, 2 – $0.8T_c$, 3 – T_c , 4 – $1.6T_c$; (б) – электронная составляющая уравнения состояния атомной ячейки Pb [19]: 1 – $T = 0.8T_c$, 2 – $0.9T_c$, 3 – T_c , 4 – $1.2T_c$.

лю” вблизи ядра и диффузную “газовую корону” на периферии ячейки [13, 14] (рис. 1).

При $T = 0$ плотность “короны” равна нулю, и такой результат хорошо известен (например, см. рис. 12–15 в [10]). В то же время в литературе практически не обсуждается вид профиля электронов при $T > 0$ и не встречается вариантов интерпретации разрыва в терминах фазового перехода в модели ОСР [13]. На рис. 3а представлен расчет профиля электронов в сферической электронеutralной ячейке Вигнера–Зейтца с использованием вместо обменной поправки Дирака “точного” уравнения состояния квантового взаимодействующего электронного газа в виде аналитической аппроксимации [24], справедливой для произвольной степени вырождения и неидеальности электронного газа.

Аномальные профили электронов в свою очередь приводят к аномалии в суммарном УРС вещества, вычисляемом с их использованием. Аномалия в уравнении состояния появляется, когда при сжатии ячейки ее граница касается соответствующего разрыва в электронной плотности. Из-за неидеального характера локального УРС электронов суммарные давление и химический потенциал остаются непрерывными при скачкообразном изменении плотности электронов на границе ячейки. Однако производные этих величин по плотности терпят разрыв. Результирующая аномалия в УРС имеет вид излома, т.е. разрыва второго рода (рис. 3б).

Подчеркнем, что в координатах давление–температура для электронной составляющей уравнения состояния соответствующая кривая эквивалентна кривой испарения вышеупомянутого фазового перехода в модели электронного газа. Дальнейший учет нелокальности электронов сглаживает обсуждаемую аномалию, так что она не

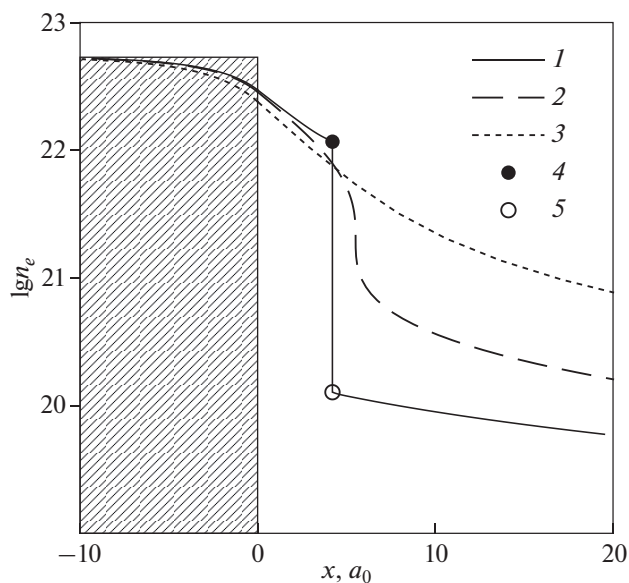


Рис. 4. Расчет профиля электронов на границе полубесконечного жесткого положительного фона (простейшая модель поверхности металлов) при различных температурах: 1 – $T = 0.8T_c$, 2 – T_c , 3 – $2T_c$; 4 – точка, соответствующая плотности испарения в модели ОСР(~) неидеального электронного газа; 5 – точка, соответствующая плотности насыщения в модели ОСР(~) неидеального электронного газа; x – расстояние в атомных единицах.

означает реального фазового перехода второго рода в веществе, а всего лишь резкое падение сжимаемости, имитирующее наличие “собственного объема” атома.

АНОМАЛЬНЫЕ ПРОФИЛИ ЗАРЯДОВ ВБЛИЗИ ЗАРЯЖЕННОЙ СТЕНКИ

Ряд физических задач можно формализовать как задачу расчета равновесного профиля заряженных частиц вблизи заряженной стенки (проницаемой или непроницаемой). Например, простейшая модель металлической поверхности (“модель желе”) рассматривает профиль электрона вблизи конца полубесконечного жесткого положительного фона. В физике пылевой плазмы интерес представляет профиль заряженных частиц в окрестности стенки. При попытке учесть корреляции в подсистеме заряженных частиц необходимо перейти в функционале плотности к использованию свободной энергии неидеального газа: в первом случае – ОСР электронов [25], во втором – ОСР заряженных твердых шаров на сжимаемом компенсирующем фоне. При низкой температуре (т.е. при температурах ниже критической для данной модели) фазовый переход, существующий в ОСР(~), проявляется как разрыв в равновесном профиле заряженных частиц, например электронов (рис. 4).

УРАВНЕНИЕ СОСТОЯНИЯ ЗАРЯЖЕННЫХ ТВЕРДЫХ СФЕР НА СЖИМАЕМОМ ЭЛЕКТРОСТАТИЧЕСКОМ ФОНЕ

Уравнение состояния модели классической системы заряженных твердых сфер (НС-ОСР) на сжимаемом электростатическом фоне может быть получено с помощью широко используемого подхода, когда свободную энергию, связанную с неидеальностью, представляют как сумму свободной энергии системы твердых сфер $F_{НС}$ и свободную энергию точечных зарядов $F_{ОСР}$ [26]:

$$F(V, N, T) = F_{НС} + F_{ОСР}.$$

В литературе можно найти множество аппроксимаций для свободной энергии системы жидких и кристаллических твердых сфер [27]. Для представления электростатической составляющей использовалось так называемое среднее сферическое приближение [21]. Фазовая диаграмма модели НС-ОСР(~) демонстрирует все три стандартных фазовых перехода между газовой, жидкой и кристаллической фазами: плавление, кипение и сублимацию (рис. 5).

ЭКРАНИРОВАНИЕ МАКРОИОНА В АСИММЕТРИЧНОЙ КОЛЛОИДНОЙ ИЛИ ПЫЛЕВОЙ ПЛАЗМЕ

Расчет пространственного распределения зарядов в задачах моделирования полиионов в электро-

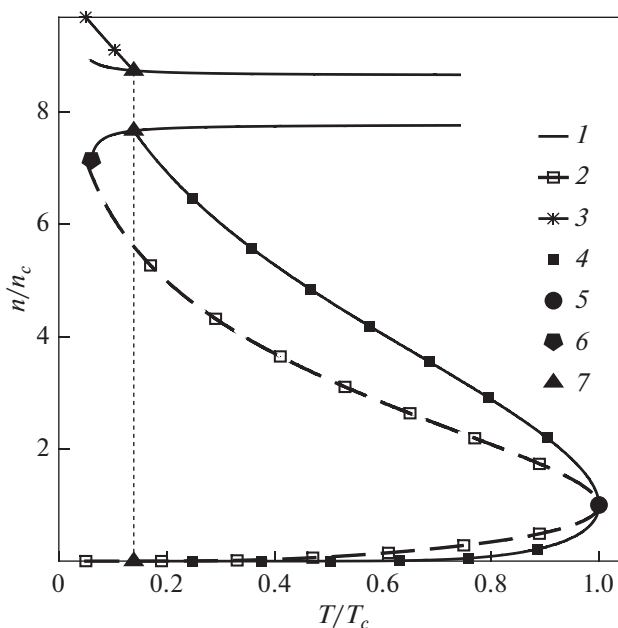


Рис. 5. Фазовая диаграмма модели заряженных твердых сфер на сжимаемом электростатическом фоне: 1 – плавление, 2 – спиноподобный флюида, 3 – кристаллическая бинодаль, 4 – флюидная бинодаль, 5 – критическая точка, 6 – спиноподобный распад зоны плавления, 7 – тройная точка; n_c – критическая плотность.

лите, коллоидной и пылевой плазме требует правильного учета ион-ионной корреляции. Простейшим способом сделать это в рамках ПЛП является замена идеального газа (в данном случае, Больцмана [28]) в уравнении Пуассона точным уравнением состояния неидеальной классической системы заряженных твердых сфер (HS-ОСР) на сжимаемом электростатическом фоне (рис. 6).

ВОЗМОЖНЫЕ АНОМАЛИИ РАВНОВЕСНОГО ПРОФИЛЯ ИОНОВ В ЛОВУШКЕ

В качестве простейшей модели “ионной ловушки” может быть рассмотрена сферическая полость, в которой находятся одноименно заряженные микроионы (рис. 7). При учете неидеальности ионной подсистемы в приближении локальной плотности, т.е. при использовании УРС HS-ОСР(~), так же как и в предыдущем случае, при достаточно низкой температуре в профиле микроионов будут наблюдаться два разрыва, связанные с кристаллизацией/плавлением и конденсацией/испарением в модели HS-ОСР(~).

При этом плотная фаза (кристалл/жидкость) будет образовываться не в центре ячейки, а на ее периферии (рис. 8).

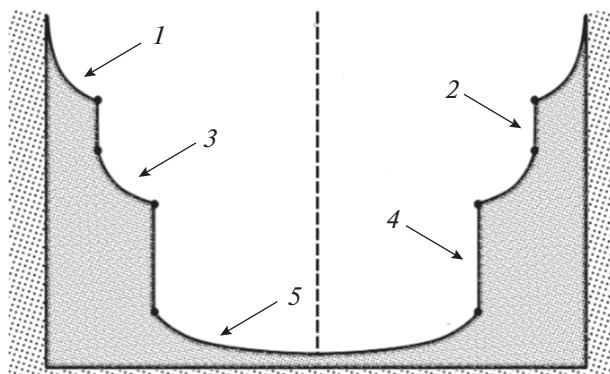


Рис. 7. Схематическое изображение простейшей модели “ионной ловушки” — сферическая полость, заполненная микроионами: 1 — “кристалл”; 2 — разрыв в профиле ионов, соответствующий фазовому переходу кристалл—жидкость в модели HS-ОСР(~); 3 — “жидкость”; 4 — разрыв в профиле ионов, соответствующий фазовому переходу газ—жидкость в модели HS-ОСР; 5 — “газ”.

ПРОСТРАНСТВЕННОЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ИОНОВ В ПРИМИТИВНОЙ МОДЕЛИ “Z-ПИНЧА”

Электрон-ионная система сильноточного разряда “Z-пинч” [29, 15] фактически является двух-

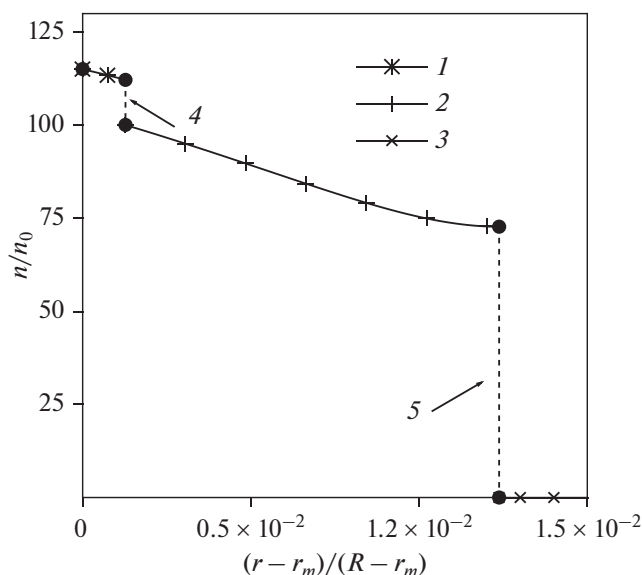


Рис. 6. Расчет распределения микроионов вокруг макроиона $Z_{\text{macroion}} = 10^5 e$ при температуре ионной подсистемы $0.35 T_c$: 1 — “кристалл”, 2 — “жидкость”, 3 — “газ”; 4 — разрыв в профиле, соответствующий фазовому переходу кристалл—жидкость в модели HS-ОСР(~); 5 — переход жидкость—газ; n_0 — средняя плотность микроионов, r_m — радиус макроиона, R — радиус ячейки.

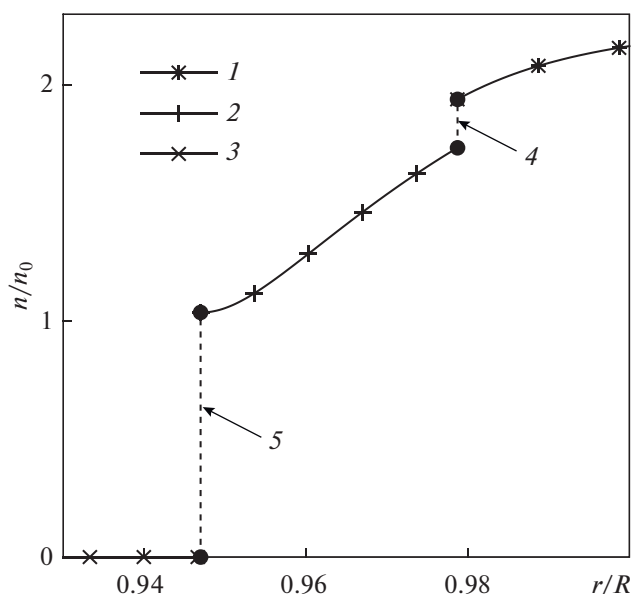


Рис. 8. Расчет распределение микроионов в ячейке R при температуре ионной подсистемы $0.5 T_c$: 1 — “кристалл”; 2 — “жидкость”; 3 — “газ”; 4 — разрыв в профиле, соответствующий фазовому переходу кристалл—жидкость в модели HS-ОСР(~); 5 — переходу газ—жидкость.

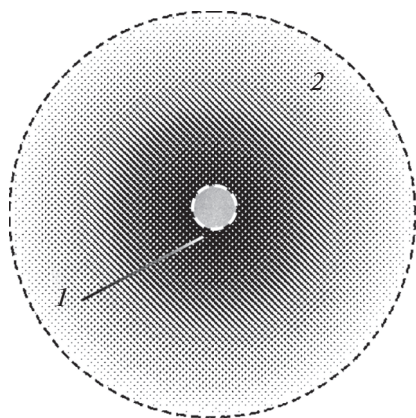


Рис. 9. Схематическое изображение цилиндрической ячейки — простейшая модель “Z-пинча”: 1 — “сколлапсировавшие” в “струну” токнесущие электроны, 2 — неоднородный равновесный флюид ионов.

компонентной системой, однако из-за большой средней скорости токнесущих электронов относительно практически неподвижных ионов обе подсистемы можно в хорошем приближении считать не коррелирующими друг с другом, т.е. взаимодействующими лишь “в среднем” [29, 15]. Более того, из-за большой инерции ионная подсистема гораздо медленнее эволюционирует в процессе сжатия пинча, и на определенной стадии развития может быть оправдано использование следующей идеализированной модели. Все свободные электроны сжались в тонкую токне-

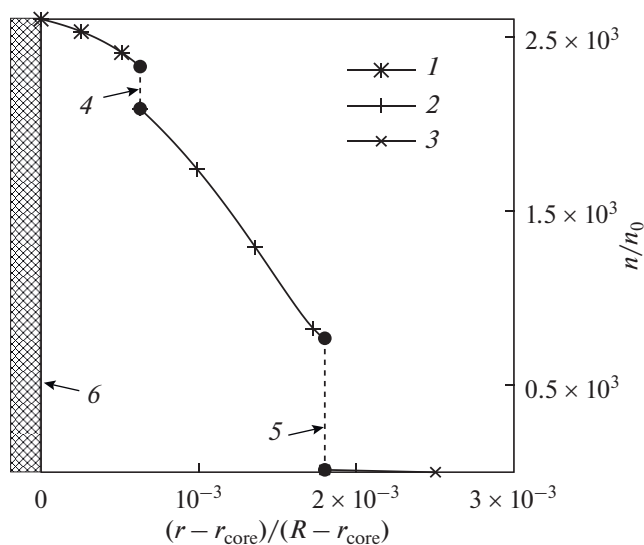


Рис. 10. Расчет профиля ионов в модели “Z-пинча” при $T=0.8T_c$: 1 — “кристалл”; 2 — “жидкость”; 3 — “газ”; 4 — разрыв в профиле, соответствующий фазовому переходу кристалл–жидкость в модели HS-ОСР(~); 5 — переходу газ–жидкость; 6 — токнесущие электроны; r_{core} — размер центрального линейного заряда “сколлапсировавших” электронов.

сущую “нить”, и необходимо найти равновесное распределение ионов вокруг центрального линейного заряда в центре цилиндрической ячейки (рис. 9). Переход от бескорреляционного приближения в описании профиля ионов, например в рамках задачи на экстремум функционала плотности, к полному описанию ион-ионных корреляций потребует использования для ионной подсистемы уравнения состояния ОСР для заряженных твердых/мягких шариков на сжимаемом компенсирующем фоне. Содержащийся в данной модели HS-ОСР(~) фазовый переход проявляется при определенном наборе параметров в виде разрыва в равновесном профиле ионов (рис. 10).

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

- Несмотря на кулоновское отталкивание одноименных зарядов, учет их корреляций в приближении локальной плотности в вариационной формулировке решения задач термостатистики эквивалентен дополнительному эффективному притяжению зарядов, вследствие чего их результирующие равновесные профили будут более крутыми в сравнении с профилями, рассчитанными в широко используемом “бескорреляционном” приближении.

- При достаточно низких температурах (даже при малом параметре неидеальности Γ) этот эффект столь значителен, что может привести к резкому изменению профиля заряженных частиц вплоть до реализации разрывной формы этого профиля.

- Факт возникновения разрывов в пространственном распределении зарядов, а также параметры, при которых это происходит, получают естественную интерпретацию в терминах фазовых переходов в модели однокомпонентной плазмы на однородно сжимаемом компенсирующем фоне — ОСР(~), уравнение состояния которой заменяет уравнение состояния идеального газа в локальном приближении обменно-корреляционного члена в функционале плотности.

Авторы благодарят И.А. Мартынову за плодотворные обсуждения проблем, затронутых в данной статье.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Форт В.Е., Храпак А.Г., Якубов И.Т. Физика неидеальной плазмы. М.: Физмалит, 2004.
2. Форт В.Е. Уравнения состояния вещества. От идеального газа до кварк-глюонной плазмы. М.: Физмалит, 2013. 492 с.
3. Энциклопедия низкотемпературной плазмы. Т. I / Под ред. Фортова В.Е. М.: Наука, 2000.
4. Бушман А.В., Ломакин Б.Н., Сеченов В.А., Форт В.Е., Щекотов О.Е., Шарипджанов И.И. Термодинамика неидеальной плазмы цезия // ЖЭТФ. 1975. Т. 69. № 5. С. 1624.

5. Грязнов В.К., Иосилевский И.Л., Фортвов В.Е. Расчет ударных адиабат аргона и ксенона // ПМТФ. 1973. Т. 3. С. 70.
6. Fortov V.E., Ilkaev R.I., Arinin V.A., Burtzev V.V., Golubev V.A., Iosilevskiy I.L., Khrustalev V.V., Mikhailov A.L., Mochalov M.A., Ternovoi V.Ya., Zhernokletov M.V. Phase Transition in Strongly Non-ideal Deuterium Plasma, Generated by Quasi-isentropical Compression at Megabars // Phys. Rev. Lett. 2007. V. 99. Iss. 18. 185001.
7. Иосилевский И.Л., Красников Ю.Г., Сон Э.Е., Фортвов В.Е. Термодинамика и транспорт в неидеальной плазме. М.: Изд-во МФТИ, 2002. 476 с.
8. Киржниц Д.А., Лозовик Ю.Е., Шпатаковская Г.В. Статистическая модель вещества // УФН. 1975. Т. 117. № 1. С. 3.
9. Фортвов В.Е. Физика высоких плотностей энергии. М.: Физматлит, 2013. 712 с.
10. Гомбаш П. Статистическая теория атома. Пер. с нем. М.: Изд-во иностр. лит., 1951. 400 с.
11. Жуховицкий Д.Н., Храпак А.Г., Якубов И.Т. Ионизационное равновесие в плазме с конденсированной дисперсной фазой. В сб.: Химия плазмы / Под ред. Смирнова Б.М. М.: Энергоатомиздат, 1984. Т. 11. С. 130.
12. Иосилевский И.Л. Фазовые переходы в кулоновских моделях. В сб.: Уравнение состояния в экстремальных условиях / Под ред. Гадияка Г.В. Новосибирск: ИТПМ, 1981. С. 20.
13. Иосилевский И.Л. Фазовый переход в простейшей модели плазмы // ТВТ. 1985. Т. 23. № 6. С. 1041.
14. Iosilevski I., Chigvintsev A. Phase Transition in Simplest Plasma Models. In: Physics of Non-Ideal Plasmas / Eds. Ebeling W., Forster A., Radtke R. Stuttgart—Leipzig: Teubner, 1992. P. 87.
15. Мейерович Б.Э. На пути к осуществлению электромагнитного коллапса // УФН. 1986. Т. 149. № 2. С. 221.
16. Чигвинцев А.Ю., Иосилевский И.Л. Приближение сплошной среды и аномалии в неоднородной неидеальной плазме // Физика экстремальных состояний вещества / Ред. Фортвов В.Е. Черноголовка: ИПХФ РАН, 2008. С. 243.
17. Iosilevski I., Chigvintsev A. Anomalous Phase Diagram in Simplest Plasma Model. In: Strongly Coupled Coulomb Systems / Eds. Kalman G., Blagoev K., Rommel J. N.Y.—London: Plenum Press, 1998. P. 135.
18. Iosilevski I., Chigvintsev A. Phase Transition in Simplest Plasma Models. In: Physics of Strongly Coupled Plasmas / Eds. Kraeft W., Schlanges M. Singapore—London: World Sci., 1996. P. 145.
19. Iosilevski I. Phase Transition in Simplest Plasma Models. In: Strongly Coupled Plasma Physics / Eds. Horn H.V., Ichimaru S. Rochester: University of Rochester Press, 1993. P. 343.
20. Chigvintsev A. Yu., Iosilevskiy I.L., Zorina I.G., Noginova L. Yu. Phase Transitions in Local Equation-of-state Approximation and Anomalies of Spatial Charge Profiles in Non-uniform Plasma // J. Phys.: Conf. Ser. 2018. V. 946. 012092.
21. Penfold R., Nordholm S. A Simple Analysis of the Classical Hard-sphere One-component Plasma // J. Chem. Phys. 1991. V. 95. P. 2048.
22. Теория неоднородного электронного газа / Под ред. Марча Н. М.: Мир, 1966.
23. Иосилевский И.Л., Чигвинцев А.Ю. Фазовый переход в модели ОСР и аномалии в приближении УрС Томаса—Ферми. В сб.: Уравнение состояния вещества / Под ред. Фортвова В.Е. Нальчик: КБГУ, 1997. С. 109.
24. Ichimaru S., Yyetomi H., Tanaka S. Statistical Physics of Dense Plasmas: Thermodynamics, Transport Coefficients, and Dynamic Correlations // Phys. Rep. 1987. V. 149. Iss. 2–3. P. 91.
25. Иосилевский И.Л. Эффекты неидеальности в низкотемпературной плазме. В кн.: Энциклопедия низкотемпературной плазмы / Под общ. ред. Фортвова В.Е. Т. III-1 / Под ред. Старостина А.Н., Иосилевского И.Л. М.: Физматлит, 2004. С. 349.
26. Brilliantov N., Malinin V., Netz R. Systematic Field-theory for the Hard-core One-component Plasma // Eur. Phys. J. D. 2002. V. 18. P. 339.
27. Theory and Simulation of Hard-Sphere Fluids and Related Systems / Eds. Mulero A. Berlin, Heidelberg: Springer, 2008.
28. Martynova I., Iosilevskiy I. Macroion Effective Charge in Complex Plasmas with Regard to Microions Correlations // Contrib. Plasma Phys. 2021. V. 61. e202000142.
29. Мейерович Б.Э. Канал сильного тока. М.: ФИМА, 1999.