

УДК 536.715

ЭНЕРГИЯ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В ПРИБЛИЖЕНИИ ПУАССОНА–БОЛЬЦМАНА В КОРРЕЛЯЦИОННОЙ ПОЛОСТИ В АСИММЕТРИЧНОЙ КОМПЛЕКСНОЙ ПЛАЗМЕ

© 2023 г. И. А. Мартынова^{1, 2, *}, И. Л. Иосилевский^{1, 2}¹Объединенный институт высоких температур РАН, Москва, Россия²Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет), Долгопрудный, Россия

*E-mail: martina1204@yandex.ru

Поступила в редакцию 19.08.2022 г.

После доработки 11.10.2022 г.

Принята к публикации 06.12.2022 г.

В работе рассматривается двухкомпонентная электронейтральная система классических макроионов конечных размеров с зарядом $Z \gg 1$ и точечных противоположно заряженных микроионов с единичным зарядом. В приближении Пуассона–Больцмана в корреляционной полости учтен эффект нелинейного экранирования макроионов микроионами внутри полости. Рассчитана энергия взаимодействия всех частиц системы, которая по абсолютной величине существенно превышает значения, полученные некоторыми другими авторами.

DOI: 10.31857/S0040364423020138

ВВЕДЕНИЕ

Данная работа посвящена изучению термодинамики комплексной плазмы. Под комплексной плазмой в настоящее время понимают достаточно много видов плазмы. Это равновесная коллоидная плазма [1, 2], неравновесная газоразрядная пылевая плазма [3, 4], плазма с конденсированной дисперсной фазой [5, 6], пылевая плазма сербристых облаков [7] и атмосферы белых карликов [8]. В данной работе рассматривается двухкомпонентная равновесная электронейтральная система макроионов с радиусом R_Z и большим зарядовым числом $Z \gg 1$ и точечных микроионов с единичным зарядом противоположного знака. Для определенности будем считать заряд макроиона ($-Ze$) отрицательным, $Z > 0$ (далее зарядовое число Z называется “зарядом”). В работе изучается трехмерная сильно-неидельная низкотемпературная ионная система, наиболее близкая к коллоидной плазме. Характерная температура kT коллоидной плазмы комнатная (однако для некоторых результатов диапазон температур расширен), характерный заряд макроиона – 10^3 – 10^4 , его характерный радиус R_Z варьируется от 0.1 до 10 мкм, характерная концентрация макроионов n_Z составляет 10^5 – 10^9 см⁻³.

Термодинамика комплексной плазмы рассматривалась в большом числе работ. Например, описание однокомпонентной системы с эффективным потенциалом выполнено в [1, 6, 9, 10], многокомпонентных – в работах [11–15]. В частности, в

статье [11] рассматривались сильные корреляции точечных макроионов друг с другом в так называемом «приближении корреляционной полости». Основная идея этого приближения описана в работе [16], а позже независимо предложена в [17]. Его суть заключается в том, что в некоторой окрестности пробного макроиона (корреляционной полости) есть только микроионы, а другие макроионы отсутствуют. Это исправляет известную некорректность линеаризованного дебаевского приближения – проблему так называемой “отрицательной вероятности” (отрицательной величины концентрации макроионов на близких к пробному макроиону расстояниях). Таким образом, в пределах корреляционной полости с радиусом h концентрация макроионов полагается равной нулю, а вне полости описывается линеаризованным дебаевским приближением

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

Здесь n_Z – концентрация макроионов на бесконечности, где выполняется условие электронейтральности $Zn_Z = n_i$ (n_i – концентрация микроионов на бесконечности); $\phi_{\text{out}}(r)$ – средний электростатический потенциал, создаваемый макро- и микроионами за пределами полости. Более подробно приближение корреляционной полости будет рассмотрено ниже.

В статье [11] были получены аналитические формулы, позволяющие построить аппроксимации численных результатов нескольких других работ для энергии взаимодействия и некоторых зависимостей, описывающих колебательные свойства системы. Для этого в [11] рассмотрено линейное экранирование макроионов микроионами и внутри, и снаружи полости. Однако здесь есть некоторые ограничения, которые связаны с изучением линейного (дебаевского) экранирования макроионов внутри полости. Во-первых, в [11] исследуется именно линейризованное приближение, однако на достаточно близких расстояниях к макроиону условие линейризации нарушается для характерных параметров рассматриваемой комплексной плазмы $|e\phi(r)/(kT)| > 1$, где $\phi(r)$ – средний электростатический потенциал, создаваемый внутри полости всеми микро- и макроионами. Поэтому в нашей работе будем учитывать нелинейное экранирование внутри полости в рамках приближения Пуассона–Больцмана, т.е. рассмотрим более сильные корреляции микроионов с макроионом внутри полости, чем в статье [11]. Концентрация микроионов внутри полости при этом является экспоненциальной, а не линейризованной, как в [11]. Во-вторых, макроионы в [11] считаются точечными, в то время как в настоящей работе предполагается их конечный размер. Указанные два отличия рассмотрены в следующем разделе.

Нелинейное экранирование макроионов рассматривалось ранее и в других приближениях, например в средней сферической ячейке Вигнера–Зейтца (ВЗ) [5, 18–20], а в статье [15] предложено аналитическое решение уравнения Пуассона–Больцмана для случаев сферической и аксиальной симметрии.

В представленной работе будет описано приближение Пуассона–Больцмана в корреляционной полости, где нелинейное экранирование рассматривается только внутри полости, затем рассчитана энергия взаимодействия всех частиц системы и продемонстрировано отличие от некоторых других работ.

ПРИБЛИЖЕНИЕ ПУАССОНА–БОЛЬЦМАНА В КОРРЕЛЯЦИОННОЙ ПОЛОСТИ

Будем рассматривать отрицательно заряженные макроионы с зарядовым числом (зарядом) $-Z$, где $Z > 0$, и радиусом R_Z , а также положительные точечные микроионы с единичным зарядом.

Как отмечено во Введении, в приближении корреляционной полости концентрация макроионов внутри полости полагается равной нулю. В таком случае из условия равенства концентраций на границе полости и выражений для концентраций макроионов (1), а также средних электростатических потенциалов снаружи и внутри полости

$\phi_{\text{out}}(h) = \phi(h)$, создаваемых всеми частицами (микро- и макроионами), получим

$$\phi(h) = -\frac{kT}{Ze}. \quad (2)$$

Так как $Z \gg 1$, то на границе полости выполняется условие линейризации. Следовательно, вне полости можно рассматривать дебаевское распределение микроионов. Учитывалось нелинейное экранирование внутри полости, поэтому там распределение микроионов больцмановское. Таким образом, концентрация микроионов имеет вид

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

Из условия равенства концентраций микроионов на границе полости получаем их концентрацию $n_{i0} = n_Z(Z + 1)$ на этой границе.

Средний электростатический потенциал вне полости имеет дебаевский вид

$$\phi_{\text{out}}(r) = \frac{D}{r} \exp\left(-\frac{r}{r_{\text{Dout}}}\right), \quad (4)$$

где r_{Dout} – дебаевский радиус вне полости, который определяется экранированием внешними макро- и микроионами:

$$r_{\text{Dout}} = \left(\frac{4\pi e^2}{kT} n_Z Z(Z + 1)\right)^{-1/2}. \quad (5)$$

С учетом равенства концентраций макроионов (1) на границе полости и (4) получаем

$$D = -\frac{hkT}{Ze} \exp\left(\frac{h}{r_{\text{Dout}}}\right). \quad (6)$$

Напряженность внутри неэлектронейтральной полости

$$E(r) = \frac{e}{r^2} \left(-Z + \int_{R_Z}^r n_i(r) 4\pi r^2 dr\right). \quad (7)$$

С учетом

$$\frac{d\phi(r)}{dr} = -E(r) \quad (8)$$

условие сшивки напряженностей на границе полости имеет следующий вид:

$$\frac{e}{h^2} \left(-Z + \int_{R_Z}^h n_i(r) 4\pi r^2 dr\right) = -\phi'_{\text{out}}(h). \quad (9)$$

Подставляя в (9) уравнения (3)–(6), получаем уравнение для неизвестного радиуса полости h

$$h^2 + hr_{\text{Dout}} - \frac{Ze^2}{kT} r_{\text{Dout}} \times \left(Z - \int_{R_Z}^h n_Z(Z + 1) \exp\left(-\left(\frac{e\phi(r)}{kT} + \frac{1}{Z}\right)\right) 4\pi r^2 dr\right) = 0. \quad (10)$$

Решая итерационно систему уравнений (3), (7), (9) и (10) (при условии, что на бесконечности

потенциал $\varphi_{\text{out}}(r)|_{x \rightarrow +\infty} \rightarrow 0$), находим распределение среднего электростатического потенциала $\varphi(r)$ внутри полости и размер самой полости. Более подробно это приближение рассматривалось в работе [12].

ЭНЕРГИЯ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В ПРИБЛИЖЕНИИ КОРРЕЛЯЦИОННОЙ ПОЛОСТИ

Введем безразмерную энергию взаимодействия для всех будущих нижних индексов $u = U/(kT)$, где U – размерная энергия взаимодействия. В приближении корреляционной полости энергию взаимодействия можно представить в виде девяти слагаемых:

$$u = u_{i_{\text{in}},i_{\text{in}}} + u_{Z_{\text{in}}} + u_{ZZ^{\text{out}}} + u_{i_{\text{in}},Z^{\text{out}}} + u_{Z_{\text{in}}^{\text{out}}} + u_{i_{\text{in}},i_{\text{out}}} + u_{Z^{\text{out}},Z^{\text{out}}} + u_{i_{\text{out}},i_{\text{out}}} + u_{Z^{\text{out}},i_{\text{out}}}, \quad (11)$$

где $u_{i_{\text{in}},i_{\text{in}}}$ – энергия взаимодействия внутренних микроионов (тех, которые находятся внутри полости) друг с другом, $u_{Z_{\text{in}}}$ – центрального макроиона и внутренних микроионов, $u_{ZZ^{\text{out}}}$ – центрального макроиона и внешних макроионов (которые находятся вне полости), $u_{i_{\text{in}},Z^{\text{out}}}$ – внутренних микроионов и внешних макроионов, $u_{Z_{\text{in}}^{\text{out}}}$ – центрального макроиона и внешних микроионов, $u_{i_{\text{in}},i_{\text{out}}}$ – внутренних и внешних микроионов, $u_{Z^{\text{out}},Z^{\text{out}}}$ – внешних макроионов друг с другом, $u_{i_{\text{out}},i_{\text{out}}}$ – внешних микроионов друг с другом, $u_{Z^{\text{out}},i_{\text{out}}}$ – внешних макроионов и внешних микроионов. В общем виде энергия взаимодействия записывается как

$$u_{jk} = \begin{cases} \frac{1}{kT} \int_{r_m}^{r_n} \varphi_j(r) q_k n_k(r) 4\pi r^2 dr, & j \neq k, \\ \frac{1}{2kT} \int_{r_m}^{r_n} \varphi_j(r) q_k n_k(r) 4\pi r^2 dr, & j = k, \end{cases} \quad (12)$$

где j и k – сорт частиц (внешние микроионы, внешние макроионы, внутренние микроионы или центральный макроион полости); $\varphi_j(r)$ – потенциал, создаваемый зарядами сортов 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. Если рассматривается заряд макроиона, то $q_k = -Ze$, если же заряд микроионов, то $q_k = e$ ($e > 0$). Более подробно выпишем два слагаемых:

$$u_{Z_{\text{in}}} = -\frac{Ze}{kT} \varphi_{i_{\text{in}}}(r)|_{r \rightarrow R_Z},$$

где $\varphi_{i_{\text{in}}}(r)$ – потенциал, создаваемый внутренними микроионами, находящимися в сфере радиуса r , на поверхности этой сферы, и

$$u_{Z^{\text{out}},i_{\text{out}}} = \frac{1}{kT} \times \int_h^{+\infty} (\varphi_{Z^{\text{out}}}(r) e n_i(r) + \varphi_{i_{\text{out}}}(r) (-Ze) n_Z(r)) 2\pi r^2 dr, \quad (13)$$

где $\varphi_{Z^{\text{out}}}(r)$ – потенциал, создаваемый внешними макроионами, находящимися в сфере радиуса r , на поверхности этой сферы; $\varphi_{i_{\text{out}}}(r)$ – потенциал, создаваемый внешними микроионами, находящимися в сфере радиуса r , на поверхности этой сферы. Слагаемое (13) можно представить как (12), однако запись (13) облегчает аналитические выкладки.

Найдем потенциал $\varphi_{i_{\text{in}}}(r)$ при $R_Z \leq r \leq h$:

$$\varphi_{i_{\text{in}}}(r)|_{r \leq h} - \varphi_{i_{\text{in}}}(0) = \int_{r < h}^0 E_{i_{\text{in}}}(r_1) dr_1, \quad (14)$$

где напряженность, создаваемая внутренними микроионами:

$$E_{i_{\text{in}}}(r_1) = \begin{cases} eq_{i_{\text{in}}}(r_1)/r_1^2, & r_1 \leq h, \\ eq_{i_{\text{in}}}/r_1^2, & r_1 \geq h, \end{cases} \quad (15)$$

$eq_{i_{\text{in}}}(r_1)$ – заряд внутренних микроионов в сфере радиуса $r_1 < h$, $eq_{i_{\text{in}}}$ – полный заряд внутренних микроионов (с учетом (3)):

$$eq_{i_{\text{in}}}(r_1) = e \int_{R_Z}^{r_1} n_i(r_2) 4\pi r_2^2 dr_2, \\ eq_{i_{\text{in}}} = e \int_{R_Z}^h n_Z(Z+1) \exp\left(-\left(\frac{e\varphi(r)}{kT} - \frac{e\varphi(h)}{kT}\right)\right) 4\pi r^2 dr.$$

Найдем $\varphi_{i_{\text{in}}}(0) = \varphi_{i_{\text{in}}}(R_Z)$. Для этого запишем уравнение, аналогичное (14), но для потенциала $\varphi_{i_{\text{in}}}(r)$, создаваемого внутренними микроионами вне полости (при $r \geq h$):

$$\varphi_{i_{\text{in}}}(r)|_{r \geq h} - \varphi_{i_{\text{in}}}(0) = \int_{r \geq h}^h E_{i_{\text{in}}}(r_1) dr_1 + \int_h^{R_Z} E_{i_{\text{in}}}(r_1) dr_1. \quad (16)$$

Будем считать, что потенциалы всех компонент, каждый по отдельности, на бесконечности равны нулю. Тогда из (15) и (16) получим

$$\varphi_{i_{\text{in}}}(0) = \frac{eq_{i_{\text{in}}}}{h} + \int_{R_Z}^h \frac{eq_{i_{\text{in}}}(r_1)}{r_1^2} dr_1.$$

Это приводит к выражению для потенциала, создаваемого внутренними микроионами вне полости:

$$\varphi_{i_{\text{in}}}(r)|_{r \geq h} = \frac{eq_{i_{\text{in}}}}{r}.$$

Для потенциала, создаваемого внутренними микроионами внутри полости, получаем

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

Найдем потенциал $\varphi_{Z^{\text{out}}}(r)$, создаваемый внешними макроионами, находящимися в сфере радиуса r , на поверхности этой сферы:

$$\varphi_{Z^{\text{out}}}(r)|_{r \geq h} - \varphi_{Z^{\text{out}}}(0) = - \int_0^{r \leq h} \frac{(-Ze)q_{Z^{\text{out}}}(r_1)}{r_1^2} dr_1,$$

где $(-Ze)q_{Z^{\text{out}}}(r_1)$ – заряд внешних (находящихся вне полости) макроионов в сфере радиуса r_1 :

$$(-Ze)q_{Z^{\text{out}}}(r_1) = (-Ze) \int_h^{r_1 > h} n_Z(r_2) 4\pi r_2^2 dr_2.$$

Так как внешние макроионы отсутствуют внутри полости, то $\varphi_{Z^{\text{out}}}(0) = \varphi_{Z^{\text{out}}}(r)|_{\forall r \leq h}$. Обнуляя потенциал на бесконечности, находим

$$\varphi_{Z^{\text{out}}}(0) = - \int_h^{+\infty} \frac{(-Ze)q_{Z^{\text{out}}}(r_1)}{r_1^2} dr_1.$$

Таким образом:

$$\varphi_{Z^{\text{out}}}(r)|_{r \geq h} = -Ze \int_r^{+\infty} \frac{q_{Z^{\text{out}}}(r_1)}{r_1^2} dr_1.$$

По аналогии получаем потенциал, создаваемый внешними микроионами за пределами полости:

$$\varphi_{i,\text{out}}(r)|_{r \geq h} = e \int_r^{+\infty} \frac{q_{i,\text{out}}(r_1)}{r_1^2} dr_1.$$

Запишем формулы для слагаемых энергии взаимодействия (11). Первое и второе слагаемые с учетом (2)

$$u_{i,\text{in},\text{in}} = \frac{e^2}{2kT} \int_{R_Z}^h \left[\frac{q_{i,\text{in}}}{h} + \int_{r < h} \frac{q_{i,\text{in}}(r_1)}{r_1^2} dr_1 \right] \times \quad (17)$$

$$\times n_Z(Z+1) \exp\left(-\left(\frac{e\varphi(r)}{kT} + \frac{1}{Z}\right)\right) 4\pi r^2 dr,$$

$$u_{Z^{\text{in}}} = -\frac{Ze^2}{kT} \left(\frac{q_{i,\text{in}}}{h} + \int_{R_Z}^h \frac{q_{i,\text{in}}(r)}{r^2} dr \right). \quad (18)$$

Сумма третьего, четвертого, пятого и шестого слагаемых, описывающих взаимодействие внутренних и внешних частиц, выглядит следующим образом:

$$\begin{aligned} & u_{i,\text{in},Z^{\text{out}}} + u_{i,\text{in},\text{out}} + u_{ZZ^{\text{out}}} + u_{Z^{\text{in},\text{out}}} = \\ & = \frac{e^2}{kT} hr_{\text{Dout}} n_Z 4\pi \left(q_{i,\text{in}}(Z+1) + Z(1-Z) \right). \end{aligned} \quad (19)$$

Сумма седьмого, восьмого и девятого слагаемых, описывающих взаимодействие частиц внешних подсистем, имеет вид

$$\begin{aligned} & u_{Z^{\text{out}},Z^{\text{out}}} + u_{Z^{\text{out}},i,\text{out}} + u_{i,\text{out},i,\text{out}} = \frac{e^2}{kT} (Z+1)^2 h^3 n_Z^2 \times \\ & \times r_{\text{Dout}}^2 8\pi^2 \left(1 + \frac{r_{\text{Dout}}}{h} \right) - \frac{e^2}{kT} (Z+1)^2 h^2 n_Z^2 r_{\text{Dout}}^3 4\pi^2 - \\ & - \frac{e^2}{kT} (Z+1)^2 h^2 n_Z^2 r_{\text{Dout}} 8\pi^2 \exp\left(\frac{2h}{r_{\text{Dout}}}\right) \times \quad (20) \\ & \times \left(1 - \left(\frac{r_{\text{Dout}}}{h} \right)^2 \right) \times \\ & \times \int_h^{+\infty} r \exp\left(-\frac{r}{r_{\text{Dout}}}\right) \left[\int_{r > h}^{\infty} \frac{1}{r_1} \exp\left(-\frac{r_1}{r_{\text{Dout}}}\right) dr_1 \right] dr. \end{aligned}$$

На рис. 1–3 приведено сравнение результатов расчетов энергии взаимодействия для нескольких вариантов наборов параметров: концентрации макроионов n_Z и температуры системы kT . Для удобства линии, соответствующие одинаковым приближениям, имеют на всех трех рисунках одинаковые номера. Кривые с номером 2 (со звездами) рассчитаны авторами в приближении Пуассона–Больцмана в корреляционной полости по формулам (11), (17)–(20) и соответствуют энергии взаимодействия всех макроионов и всех микроионов друг с другом. На рис. 1 также приведена кривая 2a (с квадратами). Она соответствует части энергии взаимодействия в приближении Пуассона–Больцмана в корреляционной полости в работе [12]. Рассмотрим, чем эти расчеты в [12] отличаются от выполненных в данной работе. В [12] энергия взаимодействия была рассчитана как

$$\begin{aligned} u_{\text{prev}} = & \frac{1}{2} \int_{R_Z}^h \left(\frac{e\varphi(r)}{kT} + \frac{Ze^2}{rkT} \right) n_i(r) 4\pi r^2 dr - \\ & - Z \left(\frac{e\varphi(r)}{kT} + \frac{Ze^2}{rkT} \right)_{r \rightarrow R_Z}. \end{aligned} \quad (21)$$

Так как $\varphi(r)$ является средним потенциалом, то

$$\varphi(r) = \varphi_{i,\text{in}}(r)|_{r \leq h} - \frac{Ze}{r} + \varphi_{Z^{\text{out}}}(0) + \varphi_{i,\text{out}}(0),$$

т.е.

$$\begin{aligned} u_{\text{prev}} = & u_{i,\text{in},\text{in}} + u_{Z^{\text{in}}} + u_{ZZ^{\text{out}}} + u_{Z^{\text{in},\text{out}}} + \\ & + 0.5u_{i,\text{in},Z^{\text{out}}} + 0.5u_{i,\text{in},\text{out}}. \end{aligned}$$

Два первых слагаемых описывают взаимодействие внутренних (т.е. находящихся внутри полости) частиц друг с другом, а четыре последних представляют собой часть энергии взаимодействия внутренних и внешних (находящихся вне полости) частиц. Корреляции частиц внутри полости преобладают над корреляциями внешних частиц друг с другом и над корреляциями внешних и внутренних частиц между собой, поэтому при достаточно больших зарядах макроиона Z основной вклад в энергию взаимодействия вносит ее “внутренняя” часть (два первых слагаемых). Поэтому кривая 2a на рис. 1, соответствующая более ранним результатам [12] и рассчитанная по

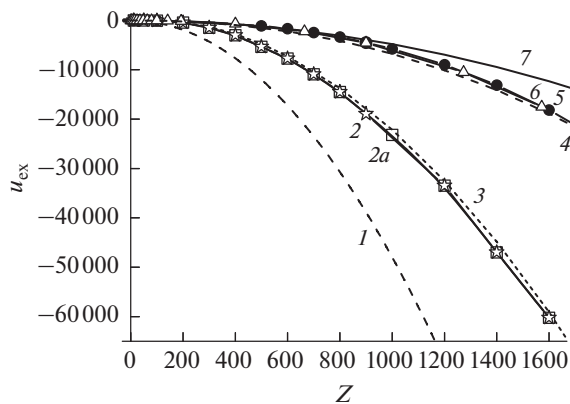


Рис. 1. Энергия взаимодействия в различных приближениях при $n_Z = 10^8 \text{ см}^{-3}$, $kT = 0.03 \text{ эВ}$, $R_Z = 1 \text{ мкм}$: 1 – все микроионы находятся на поверхности макроиона, 2 (со звездами) – приближение Пуассона–Больцмана в корреляционной полости (расчет данной работы), 2a (с квадратами) – часть энергии взаимодействия [12] (см. (21)) в приближении Пуассона–Больцмана в корреляционной полости, 3 – энергия взаимодействия в средней сферической ячейке ВЗ, 4 (штриховая) – линеаризованное дебаевское приближение в ячейке ВЗ, 5 (с кружками) – расчет по формулам [11] (см. (22)) в приближении Дебая–Хюккеля в корреляционной полости, 6 (с треугольниками) – расчет по формулам [21], 7 – равномерное распределение микроионов в ячейке ВЗ.

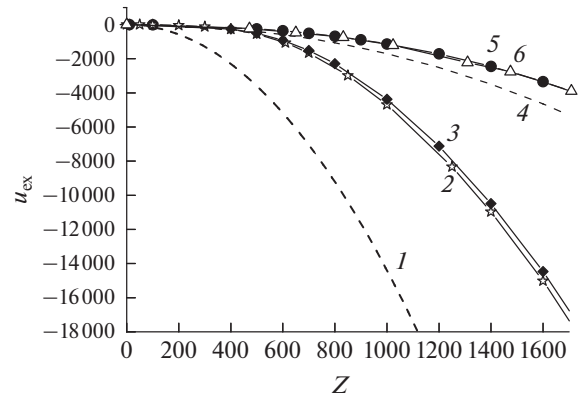


Рис. 2. Энергия взаимодействия в различных приближениях при $n_Z = 10^8 \text{ см}^{-3}$, $kT = 0.1 \text{ эВ}$, $R_Z = 1 \text{ мкм}$: 1 – все микроионы находятся на поверхности макроиона, 2 – приближение Пуассона–Больцмана в корреляционной полости (данная работа), 3 – энергия взаимодействия в средней сферической ячейке ВЗ, 4 – линеаризованное дебаевское приближение в ячейке ВЗ, 5 (с кружками) – расчет по формулам [11] (см. (22)) в приближении Дебая–Хюккеля в корреляционной полости, 6 (с треугольниками) – расчет по формулам [21].

формуле (21), практически совпадает с результатами данной работы (кривая 2).

Сравним результаты данной работы (кривая 2) с более ранними. Например, в [11] энергия взаимодействия (кривая 5 с кружками) для двухкомпонентной системы была рассчитана как

$$u_{\text{кhr}} = \frac{Ze}{2kT} \left(\Phi_{\text{ДНН}}(r) - \frac{Ze}{r} \right)_{r \rightarrow 0}, \quad (22)$$

где $\Phi_{\text{ДНН}}(r)$ – средний электростатический потенциал внутри полости в дебаевском приближении (концентрация микроионов линеаризована внутри полости). Из рис. 1–3 видно существенное различие энергий взаимодействия, полученных по формуле (22) и по уравнениям (11) и (17)–(20), предложенным в данной работе в приближении Пуассона–Больцмана для корреляционной полости. Полагаем, что такой способ расчета полной энергии взаимодействия более корректен. Также приведена энергия взаимодействия (кривая 6 с треугольниками), рассчитанная с помощью результатов работы [21].

На рис. 1–3 для сравнения представлены результаты расчетов в других приближениях в средней сферической электронейтральной ячейке ВЗ радиусом $R = (3/(4\pi n_Z))^{1/3}$ с центральным макроионом радиусом R_Z и противоположно заряженными точечными микроионами в остальной части ячейки. Эти расчеты соответствуют искусственному равномерному распределению микроионов (кривая 7 на рис. 1), линеаризованному дебаев-

скому распределению (штриховые кривые 4 на рис. 1–3) и больцмановскому распределению (кривые 5, приближение Пуассона–Больцмана в ячейке). Для расчета энергии взаимодействия в указанных трех приближениях учитывалась энергия взаимодействия микроионов в ячейке друг с другом и микроионов с центральным макроионом. Таким образом, энергия взаимодействия в этих приближениях рассчитывалась по формулам, аналогичным (21), с той разницей, что в этих случаях радиус полости h заменялся на радиус ячейки R и подставлялись соответствующие распределения микроионов $n_i(r)$ и средний потенциал $\phi(r)$. В общем виде потенциал в линеаризованном (дебаевском) приближении выглядит следующим образом:

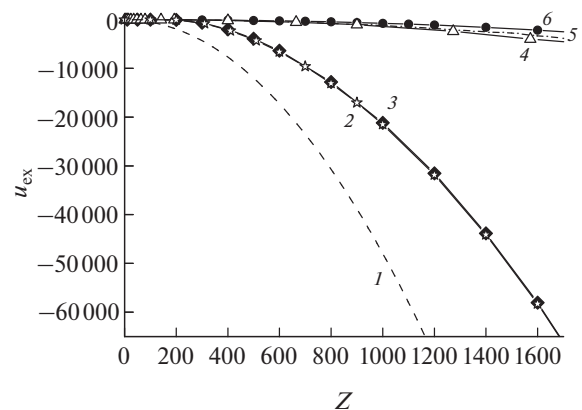


Рис. 3. Энергия взаимодействия в различных приближениях при $n_Z = 10^6 \text{ см}^{-3}$, $kT = 0.03 \text{ эВ}$, $R_Z = 1 \text{ мкм}$: обозначения как на рис. 2.

$$\varphi_{\text{lin}}(r) = \begin{cases} \frac{C_1 \exp(\kappa_{\text{lin}} r) + C_2 \exp(-\kappa_{\text{lin}} r)}{r} + \varphi_1, & R_Z \leq r \leq R, \\ 0, & r \geq R, \end{cases}$$

где C_1 , κ_{lin} , C_2 и φ_1 – константы. Уравнение Пуассона–Больцмана в дебаевском приближении линеаризуется как

$$\Delta \varphi_{\text{lin}}(r) = -4\pi e n_{\text{lin}_i0} \left(1 - \frac{e\varphi_{\text{lin}}(r)}{kT} \right),$$

где n_{lin_i0} – концентрация микроионов на границе ячейки ВЗ в дебаевском приближении. Подставляя в него частное решение φ_1 , получаем значение $\varphi_1 = kT_i/e$. Константа κ_{lin} численно вычисляется из условия

$$\varphi'_{\text{lin}}(R_Z) = -\frac{Ze}{R_Z^2},$$

а константы C_1 и C_2 определяются из $\varphi'_{\text{lin}}(R) = 0$ и $\varphi_{\text{lin}}(R) = 0$. Общий вид потенциала при равномерном распределении микроионов в ячейке ВЗ имеет следующий вид:

$$\varphi_{\text{UP}}(r) = \begin{cases} C_3 r^2 + \frac{C_4}{r} + \varphi_2, & R_Z \leq r \leq R, \\ 0, & r \geq R, \end{cases} \quad (23)$$

где C_3 , C_4 и φ_2 – константы, две из которых (C_4 и φ_2) можно найти, приравняв средний потенциал и напряженность на границе ячейки нулю. Оставшаяся константа C_3 вычисляется при подстановке среднего потенциала (23) в уравнение Пуассона–Больцмана:

$$6C_3 = -\frac{Ze}{(R^3 - R_Z^3)/3}.$$

Более подробно расчет энергий взаимодействия в случае ячеечного приближения представлен в работе [12].

Для сравнения на рис. 1 приведена кривая 1, соответствующая случаю, когда все микроионы (и внутри, и снаружи полости) находятся на поверхности макроиона. Как и ожидалось, эта кривая соответствует большим значениям энергии по абсолютной величине, чем в остальных расчетах.

На рис. 4 приведена зависимость заряда макроиона от размеров полости для тех же параметров системы, что и на рис. 1.

В связи с использованием в настоящей работе приближения Пуассона–Больцмана при расчете равновесного профиля заряда возникает проблема доказательства существования и единственности такого решения. Близкая проблема анализировалась в работе [15] в рамках другой постановки задачи, при решении которой соответствующий профиль заряда находился аналитически. В данной работе приближение Пуассона–Больцмана используется в рамках более сложной процедуры, включающей использование дополнительной тео-

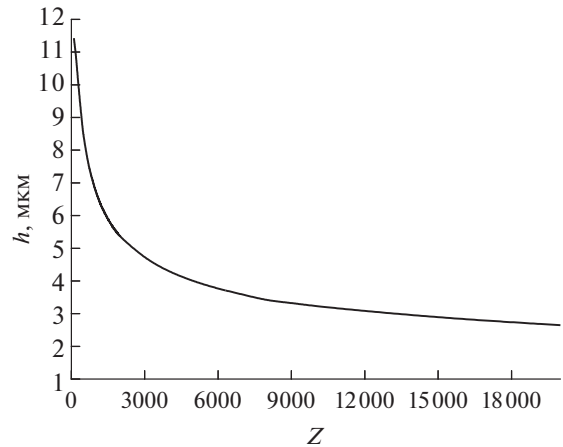


Рис. 4. Зависимость размера полости от заряда макроиона в корреляционной полости в приближении Пуассона–Больцмана при $n_Z = 10^8 \text{ см}^{-3}$, $kT = 0.03 \text{ эВ}$, $R_Z = 1 \text{ мкм}$.

ретической конструкции – так называемой корреляционной полости как неэлектронейтральной ячейки переменного радиуса, величина которого находится в дополнительной итеративной процедуре. Использование приближения Пуассона–Больцмана в этой процедуре делает проблему существования и единственности искомого решения неочевидной. При более простой постановке задачи с использованием приближения Пуассона–Больцмана для нахождения равновесного профиля заряда в электронейтральной сферической ячейке ВЗ с фиксированным радиусом (см., например, [12, 22]) проблема существования и единственности искомого профиля не вызывает опасений. Действительно, как известно (см., например, [23, 24]), в этой постановке равновесный профиль заряда может быть найден в рамках вариационного подхода статистической механики (метода функционала плотности) как минимум функционала свободной энергии, когда в качестве корреляционного функционала выступает выражение, где для локального уравнения состояния флюида микроионов используется простейшее приближение идеального газа. При этом искомый профиль микроионов, обеспечивающий минимум функционала свободной энергии, локализован между двумя пределами, где указанный функционал свободной энергии заведомо завышен: а) профилем микроионов, равномерно заполняющих всю ячейку ВЗ за исключением самого макроиона, и, напротив, б) профилем, где микроионы сконцентрированы в виде тонкой (конденсированной) пленки на поверхности макроиона. Что же касается итеративной схемы настоящей работы, использующей приближение Пуассона–Больцмана только внутри корреляционной полости переменного радиуса, в то время как вне корреляционной полости применяется стандартное дебаевское приближение, то вопрос о существовании и единственности решения такой

комбинированной схемы является открытым. Вместе с тем, чтобы получить по возможности содержательное сравнение с результатами аналитического подхода работы [15], где была обнаружена область параметров, в которой задача Пуассона–Больцмана формально не имела решения с конечной величиной заряда макроиона, была построена зависимость размера полости от заряда макроиона. Дело в том, что вывод об области параметров, где формально отсутствует решение, был основан на полученной в работе [15] зависимости заряда макроиона от размеров ячейки (см. рис. 1 в [15]), где при некотором размере ячейки заряд макроиона должен был стремиться к бесконечности. Полученная в настоящей работе зависимость, приведенная на рис. 4, качественно похожа на указанную выше. Однако заряд макроиона, определенный расчетами настоящей работы, должен стать слишком большим, чтобы наблюдалась указанная асимптотическая зависимость.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Энергия взаимодействия, полученная в данной работе с учетом нелинейного экранирования в приближении Пуассона–Больцмана в корреляционной полости, имеет большее по абсолютной величине значение, чем более ранние результаты [11, 21]. Основной вклад в рассчитанную энергию взаимодействия вносят слагаемые, отвечающие за взаимодействие частиц, находящихся внутри полости, т.е. энергия взаимодействия центрального макроиона полости с микроионами полости и энергия взаимодействия микроионов полости друг с другом.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (соглашение с ОИВТ РАН № 075-15-2020-785 от 23 сентября 2020 г.).

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. *Фортон В.Е., Храпак А.Г., Якубов И.Т.* Физика неидеальной плазмы. Учеб. пособ. М.: Физматлит, 2004. 528 с.
4. *Луцаев А.М., Молотков В.И., Жуховицкий Д.И., Намкин В.Н., Усачев А.Д., Зобнин А.В., Петров О.Ф., Фортон В.Е.* Исследования пылевой газоразрядной плазмы на космической установке “Плазменный кристалл-3 Плюс” (обзор) // *ТВТ.* 2020. Т. 58. № 4. С. 485.
5. *Жуховицкий Д.И., Храпак А.Г., Якубов И.Т.* Ионизационное равновесие в сильно неидеальной плазме с конденсированной дисперсной фазой // *ТВТ.* 1984. Т. 22. № 5. С. 833.
6. *Асиновский Э.И., Олейникова Е.Н., Хомкин А.Л.* Ван-дер-ваальсова модель термической пылевой плазмы // *ТВТ.* 2001. Т. 39. № 6. С. 853.
7. *Клумов Б., Морфилл Г., Попель С.* Формирование структур в запыленной ионосфере // *ЖЭТФ.* 2005. Т. 127. № 1. С. 171.
8. *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.
9. *Vaulina O.S., Koss X.G., Khrustalyov Yu.V., Petrov O.F., Fortov V.E.* Thermodynamic and Transport Properties of Nonideal Systems with Isotropic Pair Potentials // *Phys. Rev. E.* 2010. V. 82. P. 056411.
10. *Решетняк В.В., Старостин А.Н., Филиппов А.В.* Теоретическое исследование равновесных свойств жидкости Юкавы в широком диапазоне параметров // *ЖЭТФ.* 2018. Т. 154. № 6(12). С. 1258.
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. *Martynova I.A., Iosilevskiy I.L.* Non-linear Screening and Phase States of a Complex Plasma // *Contrib. Plasma Phys.* 2018. V. 58. № 2–3. P. 203.
13. *Hynninen A.-P., Panagiotopoulos A.Z.* Disappearance of the Gas–Liquid Phase Transition for Highly Charged Colloids // *Phys. Rev. Lett.* 2007. V. 98. № 19. P. 198301.
14. *Мартьянова 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.
15. *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.
16. *Грязнов В.К., Иосилевский И.Л.* Проблема построения интерполяционного уравнения состояния плазмы // *Численные методы в механике сплошной среды.* 1973. Т. 4. № 5. С. 166.
17. *Nordholm S.* Simple Analysis of the Thermodynamic Properties of the One-component Plasma // *Chem. Phys. Lett.* 1984. V. 105. № 3. P. 302.
18. *Zhukhovitskiy D.I., Petrov O.F., Hyde T.W., Herdrich G., Laufer R., Drogmann 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. P. 053041.
19. *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.
20. *Bystrenko O., Zagorodny A.* Critical Effects in Screening of High-Z Impurities in Plasmas // *Phys. Lett. A.* 1999. V. 255. P. 325.
21. *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.
22. *Martynova I., Iosilevskiy I., Shagayda A.* Macroions Nonlinear Screening in Complex Plasma // *J. Phys.: Conf. Ser.* 2018. V. 946. P. 012147.
23. *Киржниц Д.А., Лозовик Ю.Е., Шпатаковская Г.В.* Статистическая модель вещества // *УФН.* 1975. Т. 117. С. 3.
24. *Иосилевский И.Л., Чигвинцев А.Ю., Ногинова Л.Ю., Зорина И.Г.* Аномалии профиля пространственно-зарядного и фазовые переходы в модифицированных моделях однокомпонентной плазмы // *ТВТ.* 2021. Т. 59. № 6. С. 836.