

УДК533.9.01

А.Е. Давлетов\*, Л.Т. Еримбетова, Е.С. Мухаметкаримов

Казахский национальный университет им. аль-Фараби, Казахстан, г. Алматы

\*E-mail: [askar@physics.kz](mailto:askar@physics.kz)

### Решение уравнения Орнштейна-Цернике в гиперцепном приближении для пылевой плазмы с частицами конечных размеров

Изучаются равновесные свойства пылевой плазмы с частицами конечных размеров путем решения уравнения Орнштейна-Цернике в гиперцепном приближении. Проанализировано поведение радиальных функций распределения в широкой области изменения параметров плазмы и продемонстрирована возможность формирования ближнего или дальнего порядка в системе. Во взаимодействии пылевых частиц конечных размеров учитываются эффекты поляризации, приводящие к наличию дополнительного механизма притяжения между пылинками. Для простоты рассмотрения частицы считаются твердыми металлическим сферами, при взаимодействии которых учитывается явление электростатической индукции методом изображений.

**Ключевые слова:** пылевая плазма, эффекты экранировки, поляризация, модель взаимодействия частиц, радиальные функции распределения, интегральное уравнение Орнштейна-Цернике.

А.Е. Давлетов, Л.Т. Еримбетова, Е.С. Мухаметкаримов

### Гиперцепті жуықтауда Орнштейн-Церник теңдеуін шектелген өлшемді тозақ плазмасы бөлшектері үшін шешу

Өлшемдері шектеулі тозақ бөлшектерінің тепе-теңдік қасиеттерін гиперцепті жуықтаудағы Орнштейн-Церник теңдеуін шешу арқылы зерттеу. Плазма параметрлерінің кең аймақта өзгеруіндегі радиаль функциясы таралуының сипатына талдау жасалынды және жүйедегі алыс немесе жақын реттіліктің қалыптасу мүмкіндігі көрсетілді. Өлшемдері шектеулі тозақ бөлшектерінің өзара әсерлесуінде тозақтардың арасында қосымша тартылу механизмінің болуына алып келетін поляризация эффектілері ескеріледі. Қарастыруды жеңілдету үшін өзара әсерлесу кезінде бейнелеу әдісіндегі электростатикалық индукция құбылысын ескерілетін, бөлшектерді қатты металл сферасы деп есептейміз.

**Түйін сөздер:** тозаңды өткізгіш бөлшектері бар плазма, экранировка эффектілері, поляризация, бөлшектердің әсерлесу моделі, радиалды таралу функциясы, Орнштейн-Церник интегралдық теңдеуі.

A.E. Davletov, L.T. Yerimbetova, Ye.S. Mukhametkarimov

### The solution of the Ornstein - Zernike relation in the HNC approximation for a dusty plasma with finite size particles

We study the equilibrium properties of a dusty plasma with finite-size particles by solving the Ornstein-Zernike relation in the hyper-netted chain approximation. The behavior of the radial distribution function is investigated in a wide range of plasma parameters and it is demonstrated that the formation of short- or even long-range order in the system turns possible. Polarization effects are taken into account in the interaction of finite size dust particles which provides an additional mechanism of attraction between the dust grains. For sake of simplicity, the particles are

considered to besolidmetalballswhose interactionisstrongly influenced bythe phenomenon ofelectrostatic induction and treated by the image method.

**Key words:**Dusty plasma, screening effects, polarization, interaction model, radial distribution function, the Ornstein-Zernike integral equation.

### Введение

Изучение систем с сильным межчастичным взаимодействием всегда представляло большой интерес с точки зрения фундаментальной физики. Вот уже в течении двух веков ученые ищут ответы на вопросы о том, каким образом взаимодействие между структурными элементами определяет физические свойства тел, находящихся в различных агрегатных состояниях. Не исключением является и физика плазмы, в которой в последние десятилетия бурно развивалась теория сильносвязанных кулоновских систем. Было предложено много экспериментальных методов изучения самых разнообразных свойств плотной плазмы, достигнут значительный прогресс в теоретическом понимании элементарных процессов, обусловленных сильным взаимодействием между частицами.

В последние годы особо следует выделить цикл работ по изучению статических и динамических свойств так называемой пылевой плазмы, возникающей в обычной (буферной) плазме при добавлении частиц микроскопических размеров, называемых пылинками. Подобного рода системы не только создаются искусственно в лабораторных условиях, но и встречаются в астрофизических объектах, возникают в пристеночных областях токамаков при контакте плазмы с первой стенкой реактора и при травлении микросхем в электронике.

Интерес к изучению свойств пылевой плазмы объясняется крайне просто: наблюдение частиц микроскопических размеров можно проводить стандартными оптическими методами, фиксируя их поведение видеокamerой. Это дало важный практический инструмент для проверки существующих теоретических подходов и выводов, поставило много новых проблем и стимулировало дальнейшее развитие экспериментальных методик.

Практически сразу было обнаружено, что в определенных условиях пылинки в плазме образуют некое подобие упорядоченной структуры [1, 2], которая получила название плазменно-пылевого кристалла. Фактически был обнаружен дальний порядок в распо-

ложении пылевых частиц, которые большую часть времени наблюдения находятся в узлах некоторой квазирешетки, периодически срываясь со своих равновесных положений [3-5].

При попадании в буферную плазму пылинки начинают поглощать электроны и ионы, однако, поток электронов сильно превышает поток ионов, так как из-за различия в массах первые обладают большей подвижностью и скоростью. Таким образом, микроскопические частицы обычно приобретают отрицательный заряд [6-8], который может достигать сотен и даже тысяч элементарных, что, в свою очередь, приводит к появлению сильных эффектов неидеальности, обусловленных их межчастичным взаимодействием. Отсюда можно заключить, что для корректного теоретического описания микроскопических и макроскопических свойств пылевой компоненты плазмы крайне важно установление точного вида потенциала взаимодействия пылевых частиц между собой, а также с ионами буферного газа [9-11]. Следует отметить, что при теоретическом анализе часто в качестве такого потенциала взаимодействия выбирается экранированный потенциал Юкавы [12-14], который в физике неидеальной плазмы носит название потенциала Дебая-Хюккеля. Это автоматически подразумевает, что микроскопические частицы считаются точечными [15-17], то есть среднее расстояние между ними значительно превышает их размеры, что не всегда выполняется на практике.

В работах [18,19] была предложена принципиально новая схема учета двух важных эффектов во взаимодействии пылинок. Первое – это конечность размеров самих пылевых частиц, и второе – поляризационные эффекты, которые наиболее просто выражаются в методе электростатических изображений для проводящих пылевых частиц, приобретающих дипольный момент вследствие электростатической индукция. В данной работе на основе этой модели взаимодействия изучаются радиальные функции распределения путем решения уравнения Орнштейна-Цернике в гиперцепном приближении.

### Параметры плазмы

В физике неидеальной плазмы принято описывать ее состояние некоторыми безразмерными параметрами. В частности, введем эффективный параметр неидеальности, определяемый выражением

$$\Gamma_R = \frac{e^2}{Rk_B T}, \quad (1)$$

где  $R$  – радиус пылевой частицы,  $e$  – элементарный заряд,  $k_B$  – постоянная Больцмана,  $T$  – температура среды. Следует отметить, что параметр неидеальности (1) является не вполне общепринятым, так как представляет собой отношение кулоновской энергии взаимодействия электронов, расположенных на расстоянии  $R$  друг от друга, к их средней энергии хаотического теплового движения.

Для описания явления экранировки поля заряда пылевых частиц буферной плазмой введем безразмерный параметр экранирования

$$\kappa = \frac{R}{\lambda_D}, \quad (2)$$

где  $\lambda_D = (k_B T / 8\pi n e^2)^{1/2}$  – так называемый дебаевский радиус.

Заряд пылевых частиц  $Z_d$  и введенные параметры (1) и (2) полностью описывают взаимодействие двух изолированных проводящих шаров, помещенных в буферную плазму.

Также необходим параметр связи пылевых частиц  $\Gamma_D$ , который связан с эффективным параметром связи  $\Gamma_R$  соотношением

$$\Gamma_D = \frac{Z_d^2 e^2}{a_d k_B T} = \frac{Z_d^2 \Gamma_R}{D}, \quad (3)$$

где новый безразмерный параметр  $D = a_d / R$  представляет собой отношение среднего расстояния между пылевыми частицами  $a_d = (3 / 4\pi n_d)^{1/3}$  к их радиусу, а  $n_d$  – концентрация пылевых частиц.

### Уравнение Орнштейна-Цернике в гиперцепном приближении

В теории жидкого состояния вещества огромную роль играет метод интегральных уравнений для равновесных функций распределения, так как он позволяет наиболее просто рассчитывать структурные свойства среды, определяемые как экспериментально, так и путем математического моделирования методами Монте-Карло и молекулярной динамики. Исторически первым интегральным уравнением было уравнение Боголюбова-Борна-Грина-Кирквуда-Ивона (ББГКИ), полученное фактически из цепочки уравнений Боголюбова для равновесных функций распределения, разрыв которой производился суперпозиционным приближением Кирквуда. С увеличением точности экспериментов по рентгенографическому структурному анализу стало понятным, что при существующей точности эксперимента уравнение ББГКИ неудовлетворительно описывает такую важную характеристику жидкости, как радиальная функция распределения. Это явилось следствием физической необоснованности суперпозиционного приближения Кирквуда, которое, несмотря на все недостатки, все же предсказывало формирование ближнего порядка в жидкостях.

Позднее были предложены более физически обоснованные подходы к получению интегральных уравнений, справедливые при достаточно высоких плотностях системы  $\rho$ . В частности, два голландских ученых, Орнштейн и Цернике, предложили выразить полную корреляционную функцию  $h(r)$  через прямую  $c(r)$  и непрямую корреляционные функции в виде:

$$h(r) = c(r) + \rho \int c(r-r')h(r')dr', \quad (4)$$

в котором интегральный член в правой части и представляет собой непрямую корреляционную функцию, а полная корреляционная функция по определению выражается через радиальную функцию распределения  $g(r)$  в виде

$$h(r) = g(r) - 1. \quad (5)$$

Само по себе уравнение (4) является фактически определением прямой корреляционной функции, поэтому, в некотором смысле, оно точное. Принципиальным моментом здесь является то, что прямая корреляционная функция в соответствии с (4) представляет собой непосредственный вклад в полную корреляционную функцию от взаимодействующей пары частиц, а значит ее математические свойства более предсказуемы, чем свойства полной корреляционной функции.

В частности, для плазменного состояния вещества наиболее пригодным оказалось так называемое гиперцепное приближение, которое дает хорошее согласие по радиальным функциям распределения с методом Монте-Карло. Используя метод диаграммной техники, удалось показать, что [20]

$$c(r) = h(r) - \ln g(r) - \frac{\varphi(r)}{k_B T}, \quad (6)$$

где  $\varphi(r)$  – микрорпотенциал взаимодействия частиц,  $k_B$  – постоянная Больцмана,  $T$  – температура жидкости.

Система уравнений (4)-(6) и представляет собой систему интегральных уравнений Орнштейна-Цернике в гиперцепном приближении.

Для ее решения воспользуемся следующим приемом. Прежде всего, заметим, что уравнение (4) можно переписать в Фурье пространстве следующим образом

$$\tilde{h}(k) = \tilde{c}(k) + \rho \tilde{c}(k) \tilde{h}(k), \quad (7)$$

то есть оно стало алгебраическим. Здесь  $\tilde{h}(k)$  и  $\tilde{c}(k)$  – Фурье-образы полной и прямой корреляционных функций, соответственно.

Теперь для решения всей системы будем использовать метод итераций, а в качестве начального приближения прямой корреляционной функции естественно выбрать микрорпотенциал взаимодействия с обратным знаком

$$c_0(r) = -\frac{\varphi(r)}{k_B T}. \quad (8)$$

В соответствии с (7) в каждой итерации придется выполнять прямое и обратное преобразование Фурье. Для увеличения скорости работы воспользуемся следующим приемом. Известно, что, например, прямое преобразование Фурье функции  $f(r)$  имеет вид

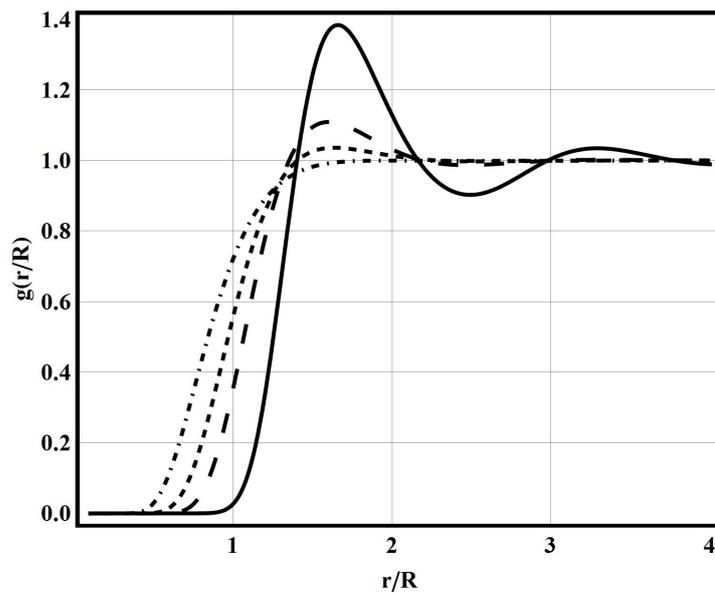
$$\tilde{f}(k) = \frac{4\pi}{k} \int_0^\infty r \sin(kr) f(r) dr. \quad (9)$$

Само Фурье преобразование линейно по преобразуемой функции, поэтому для ускорения работы вычислительной программы представляется вполне естественным дискретизировать выражение (9) и вычислить один раз матрицу преобразования, справедливую для любой преобразуемой функции. После этого прямые и обратные преобразования Фурье производятся очень быстро перемножением матриц.

#### Радиальные функции распределения пылевой плазмы

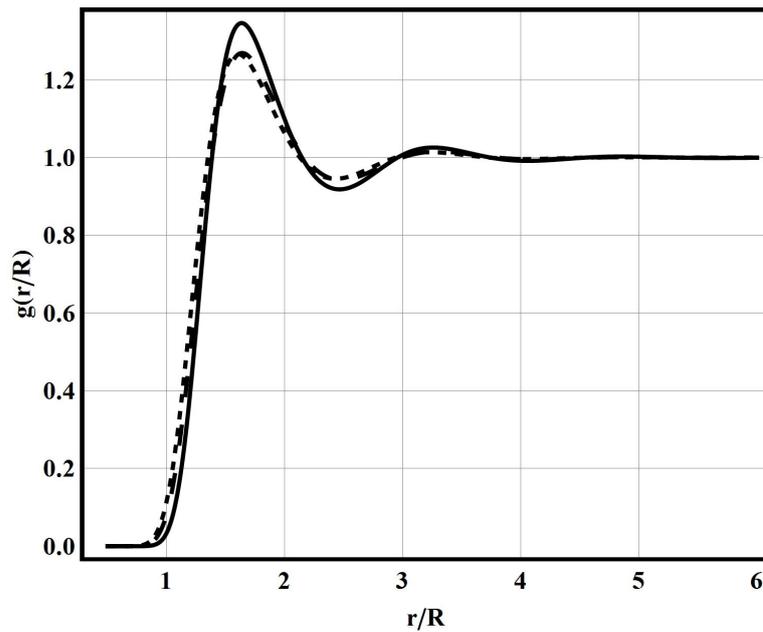
В предыдущей серии работ [18,19] был предложен потенциал взаимодействия двух изолированных пылевых частиц, помещенных в буферную плазму. При этом автоматически учитываются следующие эффекты: конечность размеров пылевых частиц, поляризационные эффекты во взаимодействии частиц и экранировка поля зарядов пылевых частиц электронами и ионами буферной плазмы. Полученный таким образом потенциал взаимодействия не включает в себя плотность пылевых частиц, что позволяет задействовать все теоретические подходы, разработанные в статистической механике систем многих частиц.

В предыдущем разделе была описана процедура решения уравнения Орнштейна-Цернике в гиперцепном приближении, которое было решено в достаточно широкой области изменения параметров плазмы, а результаты представлены на рисунках 1-4.



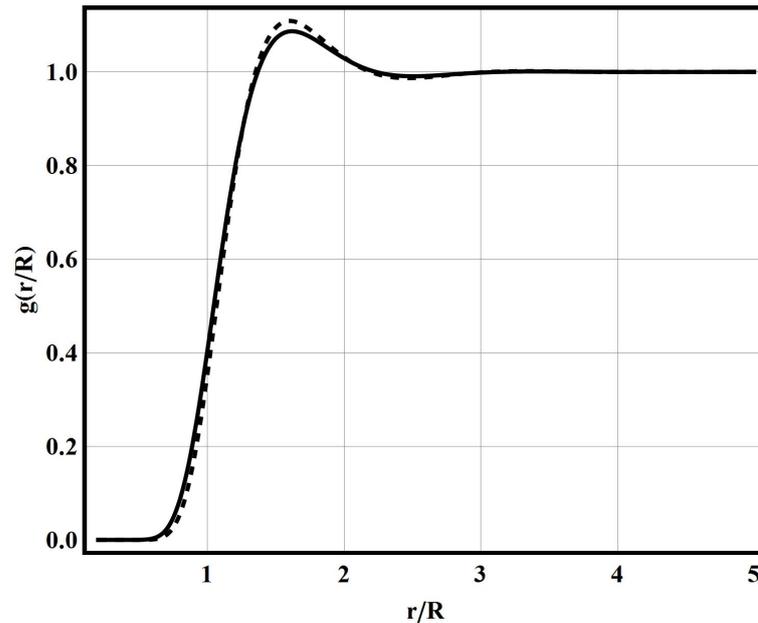
Сплошная линия:  $D = 2$ ; пунктирная линия:  $D = 5$ ; штриховая линия:  $D = 7$ ; штрих-пунктирная линия:  $D = 10$ , значения безразмерных параметров при  $\Gamma_R = 0.1$ ,  $\kappa = 10$  и  $Z_d = 100$

**Рисунок 1** – Радиальная функция распределения пылевых частиц



Сплошная линия:  $\kappa = 2$ ; штриховая линия:  $\kappa = 5$ ; пунктирная линия:  $\kappa = 10$ ; значения безразмерных параметров:  $\Gamma_R = 0.1$ ,  $D = 3$  и  $Z_d = 100$ .

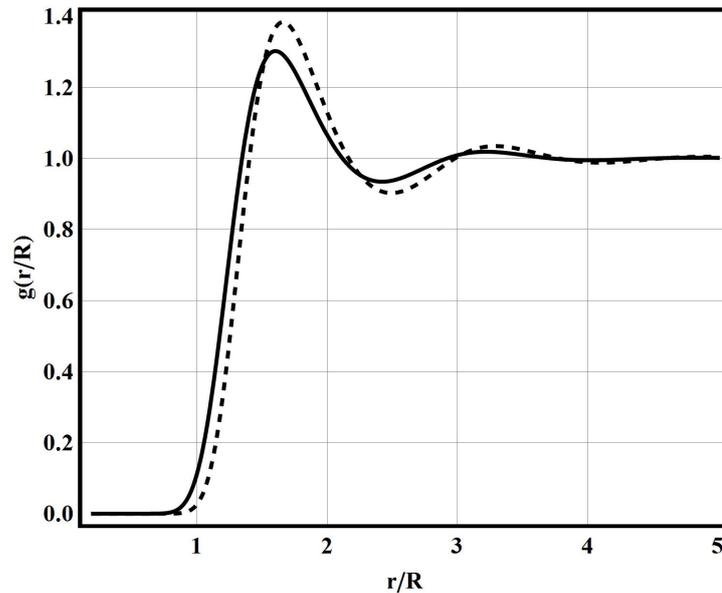
**Рисунок 2** – Радиальная функция распределения пылевых частиц



Сплошная линия: потенциал, учитывающий конечность размеров пылевых частиц; пунктирная линия: потенциал, учитывающий конечность размеров пылевых частиц и эффекты поляризации; значения безразмерных параметров:

$$\Gamma_R = 0.1, \kappa = 10, D = 5 \text{ и } Z_d = 100.$$

**Рисунок 3** – Радиальная функция распределения пылевых частиц



Сплошная линия: потенциал, учитывающий конечность размеров пылевых частиц; пунктирная линия: потенциал, учитывающий конечность размеров пылевых частиц и эффекты поляризации; значения безразмерных параметров

$$\Gamma_R = 0.1, \kappa = 10, D = 2 \text{ и } Z_d = 100.$$

**Рисунок 4** – Радиальная функция распределения пылевых частиц

Анализируя радиальные функции распределения, можно сделать следующие выводы:

- при определенных значениях параметров плазмы наблюдается формирование ближнего или даже дальнего порядка, что выражается в появлении максимумов и миниму-

мов на кривых радиальных функций распределения;

- чем меньше величина параметра  $D$ , тем более ярко выраженными становятся локальные максимумы и минимумы на кривых радиальной функции распределения, при этом

значительно сказывается конечность размеров пылевых частиц. Положение же локальных максимумов и минимумов практически не изменяется;

- при увеличении параметра экранирования величина экстремумов на радиальных функциях распределения уменьшается, так как при этом ослабевает взаимодействие между пылевыми частицами;

- поляризационные эффекты приводят к усилению формирования упорядоченных структур в пылевой плазме, так как они ответственны за появление дополнительного механизма притяжения между пылевыми частицами, а положение экстремумов смещается в сторону больших расстояний. При маленьких значениях параметра экранирования поляризационные эффекты практически не вносят никакого различия в радиальные функции распределения;

- очевидно, что радиальные функции распределения с увеличением заряда пылевых

частиц и параметра связи должны демонстрировать более ярко выраженное немонотонное поведение, так как это приведет к усилению взаимодействия между пылевыми частицами, что было продемонстрировано на предыдущем этапе выполнения работ.

### Заключение

В данной работе были изучены радиальные функции распределения пылевых частиц, имеющих конечные размеры. С этой целью использовалась построенная ранее псевдопотенциальная модель и решалось уравнение Орнштейна-Цернике в гиперцепном приближении. Обнаружено немонотонное поведение радиальных функций распределения, свидетельствующее о возможности формирования ближнего и дальнего порядка в расположении пылевых частиц. Полученные результаты могут быть использованы для расчета вклада пылевых частиц в термодинамические характеристики плазмы.

### References

- 1 Antipov S.N., Vasiliev M.M., Petrov O.F. Non-ideal dust structures in cryogenic complex plasmas//Contrib. Plasma Phys. – 2012. – Vol. 52. – P. 203-206.
- 2 Hyde T.W., Kong J., Matthews L.S. Helical structures in vertically aligned dust particle chains in a complex plasma// Phys. Rev. E – 2013. – Vol. 87. – P. 053106.
- 3 Polyakov D.N., Shumova V.V., Vasiljak L.M., Fortov V.E. Study of glow discharge positive column with cloud of disperse particles// Phys. Lett. A – 2011. – Vol. 375. – P. 3300-3305.
- 4 Adhikary N.C., Bailung H., Pal A.R., Chutia J. Observation of sheath modification in laboratory dusty plasmas// Phys. Plasmas – 2007. – Vol. 14. – P. 103705.
- 5 Zhukhovitskii D.I., Fortov V.E., Molotov V.I., Lipaev A.M., Naumkin V.N., Thomas H.M., Ivlev A.V., Schwabe M., Morfill G.E. Nonviscous motion of a slow particle in a dust crystal under microgravity conditions// Phys. Rev. E – 2012. – Vol. 86. – P. 016401.
- 6 Ali S. Dust charging effects on test charge potential in a multi-ion dusty plasma// Phys. Plasmas. – 2009. – Vol. 16. – P. 113706.
- 7 Tribeche M., Shukla P.K. Charging of a dust particle in a plasma with a nonextensive ion distribution function// Phys. Lett. A – 2012. – Vol. 376. – P. 1207-1210.
- 8 Vishnyakov V.I. Charging of dust in thermal collisional plasmas// Phys. Rev. E – 2012. – Vol. 85. – P. 026402.
- 9 Hutchinson I.H. Intergrain forces in low-Mach-number plasma wakes// Phys. Rev. E – 2012. – Vol. 85. – P. 066409.
- 10 Donko Z., Hartmann P., Shukla P.K. Consequences of an attractive force on collective modes and dust structures in a strongly coupled dusty plasma// Phys. Lett. A – 2012. – Vol. 376. – P. 3199-3203.
- 11 Liu Y., Liu S.Q., Xu K. Debye shielding in a dusty plasma with nonextensively distributed electrons and ions// Phys. Plasmas. – 2012. – Vol. 19. – P. 073702.
- 12 Shahzad A., He M.-G. Thermal conductivity of three dimensional Yukawa liquids// Contrib. Plasma Phys. – 2012. – Vol. 52. – P. 667-675.
- 13 Khrustalyov Yu.V., Vaulina O.S. Numerical simulations of thermal conductivity in dissipative two-dimensional Yukawa systems// Phys. Rev. E – 2012. – Vol. 85. – P. 046405.
- 14 Goree J., Donko Z., Hartmann P. Cutoff wavenumber for shear waves and Maxwell relaxation time in Yukawa liquids// Phys. Rev. E – 2012. – Vol. 85. – Article number 066401.
- 15 Ghosh S. Shock wave in a two-dimensional dusty plasma crystal// Phys. Plasmas – 2009. – Vol. 16. – P. 103701.
- 16 Schwabe M., Graves D.B. Simulating the dynamics of complex plasmas// Phys. Rev. E – 2013. – Vol. 88. – P. 023101.
- 17 Melzer A., Schella A., Miksch T., Schablinski J., Block D., Piel A., Thomsen H., Kahlert H., Bonitz M. Phase transitions of finite dust clusters in dusty plasmas// Contrib. Plasma Phys. – 2012. – Vol. 52. – P. 795-803.
- 18 Davletov A. E., Yerimbetova L.T., Mukhametkarimov Ye.S., Kudyshev Zh.A., Influence of polarization phenomena on radial distribution function of dust particles // Contrib. Plasma Phys. 53, No.4-5, 414-418, 2013.
- 19 Davletov A.E., Yerimbetova L.T., Ospanova A. Sticheskiy strukturniy faktor makrochastich v pylivoi plazme // Izvestia RAN RK. – 2013. – S.51-55.
- 20 Bredov R., Bornath Th., Kraeft W.-D., Redmer R. Hypernetted chain calculations for multi-component and non-equilibrium plasmas// Contrib. Plasma Phys. – 2013. – Vol. 53. – P. 276-284.