МРНТИ 29.27.00 https://doi.org/10.26577/RCPh.2023.v87.i4.04

С.К. Коданова, Н.Е. Джиенбеков, Н.Х. Бастыкова, М.К. Исанова*
Казахский национальный университет им. аль-Фараби, НИИЭТФ, Казахстан, г.Алматы
*e-mail: issanova@physics.kz

ВЫЧИСЛЕНИЕ ТРАНСПОРТНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ЮКАВА СИСТЕМЫ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

В данной работе были исследованы транспортные характеристики двумерных систем с помощью метода молекулярной динамики. Проведено компьютерное моделирование с помощью потенциала Юкава в широком диапазоне значений параметра неидеальности. Потенциал Юкавы был выбран из-за его широкой применимости в описании экранированных взаимодействий в пылевой плазме и других системах. Для определения транспортных характеристик был применен метод молекулярной динамики. Исследование проведено с целью расширения знаний о теплопередаче и вязкости в двумерных системах. В работе представлены результаты численных экспериментов, в которых изучались зависимости коэффициента теплопроводности и коэффициента вязкости от параметра неидеальности в системах с потенциалом Юкава. Были выявлены зависимости вязкости и теплопроводности от различных параметров системы. Установлено, что с уменьшением частоты замены, коэффициенты переноса стабилизируются для определенных значений параметра связи. Полученные данные могут также служить основой для дальнейших теоретических и экспериментальных исследований в области транспортных характеристик двумерной системы. Эти данные не только расширяют понимание особенностей двумерных систем, но и могут быть полезными при проектировании и анализе наноструктур и различных микроустройств.

Ключевые слова: Юкава системы, метод молекулярной динамики, транспортные свойства, диффузия, теплопроводность.

S.K. Kodanova, N.E. Djienbekov, N.Kh. Bastykova, M.K. Issanova*
Al-Farabi Kazakh National University, IETP, Kazakhstan, Almaty
*e-mail: issanova@physics.kz

Calculation of transport characteristics of Yukawa systems by molecular dynamics method

In this paper, the transport characteristics of two-dimensional systems has been investigated. Modeling by means of the Yukawa potential, in a wide range of values of the nonideality parameter, has been carried out. The Yukawa potential was chosen because of its wide applicability in the description of screened interactions in plasmas and other systems. A molecular dynamics method was used to determine the transport characteristics. The study was carried out with the aim of expanding the knowledge of heat transfer in two-dimensional systems. The paper presented the results of numerical experiments in which the dependences of the heat transfer and viscosity coefficients on the screening and non-ideality parameters in systems with Yukawa potential were studied. The obtained data can also serve as a basis for further theoretical and experimental studies in the field of transport characteristics of two-dimensional systems. These data not only expand the understanding of the peculiarities of two-dimensional systems, but also can be useful in the design and analysis of nanostructures and various microdevices.

Key words: Yukawa systems, molecular dynamics method, transport properties, diffusion, thermal conductivity.

С.К. Коданова, Н.Е. Джиенбеков, Н.Х. Бастыкова, М.К. Исанова*
Әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, ЭТФҒЗИ, Қазақстан, Алматы қ.
*e-mail: issanova@physics.kz

Юкава жүйелерінің транспорттық сипаттамаларын молекулалық динамика әдісі арқылы есептеу

Бұл жұмыста екі өлшемді жүйелердің көлік сипаттамалары молекулалық динамика әдісі арқылы зерттелді. Юкава потенциалын қолдана отырып, идеалдылық параметрінің мәндерінің кең ауқымында модельдеу жүргізілді. Юкава потенциалы тозаң плазмадағы және басқа жүйелердегі экрандалған өзара әрекеттесулерді сипаттауда кең қолданылуына байланысты таңдалды. Жылу өткізгіштік коэффициенті мен тұтқырлық коэффициентін анықтау үшін молекулалық динамика әдісі қолданылды. Зерттеу екі өлшемді жүйелердегі жылу беру және тұтқырлығы туралы білімді кеңейту мақсатында жүргізілді. Жұмыста жылу өткізгіштік коэффициентінің скринингтік параметрлерге тәуелділігі және Юкава потенциалы бар жүйелердегі идеалдылық зерттелген сандық эксперименттердің нәтижелері ұсынылды. Зерттеулер нәтижесінде тұтқырлық пен жылу өткізгіштіктің жүйенің әртүрлі параметрлеріне тәуелділігі анықталды. Ауыстыру жиілігінің төмендеуімен байланыстыру параметрінің белгілі бір мәндері үшін тасымалдау коэффициенттері тұрақталатыны анықталды. Нәтижелер сонымен қатар екі өлшемді жүйелердегі транспорттық сипаттамалары саласында теориялық және эксперименттік зерттеулерге негіз бола алады. Бұл деректер екі өлшемді жүйелердің ерекшеліктерін түсінуді кеңейтіп қана қоймайды, сонымен қатар наноқұрылымдар мен әртүрлі микроқұрылымдарды жобалау мен талдауда пайдалы болуы мүмкін.

Түйін сөздер: Юкава жүйелері, молекулалық динамика әдісі, тасымалдау қасиеттері, диффузия, жылу өткізгіштік.

Введение

Изучение параметров переноса в двумерных системах представляет большой интерес в связи с приложениями в нано- и микротехнологиях и материаловедении [1, 2]. Примерами двумерных физических систем являются пылевая плазма [3-5], ионы в расширенных плоскостях решетки [6], система диполей [7-9], коллоидная [10, 11] и системы полярных молекул [12]. В век прогрессивного развития технологий с минимизацией масштабов и уникальных сверхчувствительнных материалов очень важно знание фундаментальных физических свойств. Понимание теплопроводности в жидких системах позволяет создавать микро- и наномеханические материалы (устройства), работающие в условиях высокой теплопроводности.

В настоящее время существует множество работ, посвященных исследованию транспортных характеристик сильно связанной немагнитной системы Юкавы методами компьютерного моделирования как равновесными [13-15], так и неравновесными [16, 17] методами молекулярной динамики. Расчет коэффициентов переноса методом равновесной молекулярной динамики с использованием соотношений Грина-Кубо отличается сложностью и отнимает много времени. В жидкостях и газах теплопроводность осуществляется за счет механического перемещения нагретых частей системы. Следовательно, в методе молекулярной динамики искусственно создается тепловой поток между горячей и холодной пластинами, что приводит к температурному градиенту, позволяющему определить теплопроводность в системе.

Вычислительные подробности

Физическая модель двумерной Юкава системы представляет собой абстрактное описание системы частиц в двумерном пространстве, взаимодействующих через потенциал Юкава:

$$\varphi = \frac{Q^2}{r}\exp(-\,\kappa * r).$$

В данной модели частицы рассматриваются как точечные, а это значит, что они не имеют структуры и размера, а их взаимодействие между собой определяется на основе координат и потенциала взаимодействия.

Перед началом вычислений всех параметров для дальнейшего получения теплопроводности система находится в термостате, при этом устанавливаются определенные значения энергии, после термолизации системы можно получать данные.

Размер моделируемого квадрата зависит от плотности частиц, как и любая длина или расстояние в системе $L = \sqrt{\pi n}a$, a- среднее расстояние между частицами. Время выражается через обратную двумерную плазменную частоту ${\omega_p}^{-1} = (Q^2/2\pi\epsilon_0 m a^3)^{-1/2}$, Q^2 – квадрат заряда,

$\epsilon = Q^2/4\pi\varepsilon_0 a$ – единица измерения энергии. Система характеризуется двумя безразмерными параметрами: параметром связи (неидеальности) Γ и параметром экранирования κ. Теплопроводность выражается в единицах $\lambda_0 = mnw_p a^2 k_B$, где k_B - постоянная Больцмана, а вязкость выражается в единицах $\eta_0 = mnw_p a^2$. Количество частиц в моделировании равна $N = 1600$ для расчета теплопроводности и $N = 990$ для расчета вязкости.

Метод расчета

В данном разделе описан алгоритм метода расчета коэффициентов переноса методом молекулярной динамики. Поделим нашу двумерную систему на полосы, параллельные оси x, будем далее называть их плиты. Для того чтобы посчитать вязкость необходимо создать поток импульса в системе. На полосах, которые находятся на высотах $y = (L/4)$ и $y = (3L/4)$, будем искать частицы, которые обладают самой большой скоростью в одной полосе и самой маленькой скоростью в другой. Затем меняем импульсы этих частиц, повторяя этот процесс с определенной периодичностью. В итоге в системе возникает поток импульса и линейный профиль скоростей, в результате чего можно определить коэффициента вязкости. А для вычисления теплопроводности создается градиент температуры, где одна плита будет обладать более высокой температурой по сравнению с другой. Данный метод не нарушает законы сохранения, поэтому полная энергия системы в течение всего моделирования остается неизменной.

Как известно, поток импульса прямо пропорционален скорости сдвига между слоями газа или жидкости. И коэффициентом пропорциональности является вязкость

$$A_p = -\eta \frac{\partial v_x}{\partial y}, \quad (1)$$

$A_p -$ поток импульса, $\eta -$ вязкость, $\frac{\partial v_x}{\partial y} -$ скорость сдвига, градиент x-компоненты скорости.

С другой стороны, согласно математическому определению потока некоторой величины, поток импульса можно записать как переданный импульс через определенную площадку за определенный промежуток времени. В двумерном случае площадь меняется на отрезок

$$A_p = \frac{\Delta p}{2Lt}, \quad (2)$$

$\Delta p -$ переданный импульс между плитами, $t -$ промежуток времени, в течение которого создавался градиент. Коэффициент 2 обусловлен тем что поток импульса проходит через две стороны моделируемого квадрата.

Приравняем два определения потока импульса:

$$\frac{\Delta p}{2Lt} = \eta \frac{\partial v_x}{\partial y}. \quad (3)$$

Выразим вязкость и получим расчетную формулу:

$$\eta = \frac{\Delta p}{2Lt \frac{\partial v_x}{\partial y}}. \quad (4)$$

Градиент вычисляется следующим образом, находится средняя скорость каждой плиты вдоль оси x, суммируются все x-компоненты скоростей частиц и делится на их количество в данной плите. Строится точечный график зависимости x-компоненты скорости от вертикальной длины коробки, а участок между двумя пиками, соответствующим самой быстрой плите в одну сторону и в другую, аппроксимируется методом линейной регрессии, где угол наклона прямой и есть градиент.

Коэффициент теплопроводности определяется через поток тепловой энергии:

$$\lambda = \frac{-\Delta E}{2Lt \frac{\partial T}{\partial y}}, \quad (5)$$

где ΔE – количество переданной энергии между полосами, градиента $\partial T/\partial y$ – градиент температуры, L – размер коробки моделирования, t – время моделирования.

Результаты и их обсуждение

Ниже приведен фотоснимок из моделирования, где показано расположение частиц (рисунок 1). Для выявления изменений в моделировании изначально была выделена полоса частиц серого цвета в центре системы. Визуально видно, что спустя некоторое время образуется градиент X-компонент скоростей.

На рисунке 2 приведен градиент X-компоненты скоростей для расчета вязкости. Для определения вязкости был выбран период замены скоростей 40. При таком системном параметре поток импульса переходит в устойчивое состояние достаточно быстро.

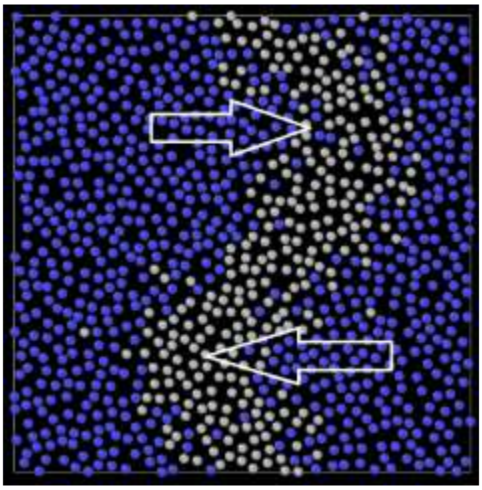

Рисунок 1 - Снимок из моделирования. Изначально была выделена полоса частиц серого цвета.

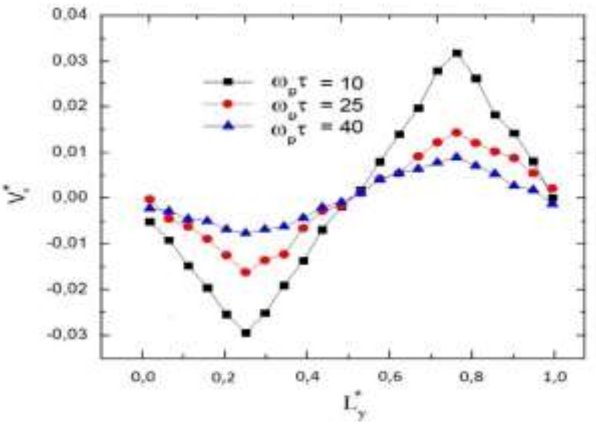

Рисунок 2 - Профиль X-компоненты скорости плит при разных шагах замены

На рисунке 3 показана зависимость коэффициентов вязкости от параметра связи при $\kappa = 1$. Зависимость коэффициентов вязкости от параметра связи плазмы имеет немонотонный характер при различных значениях параметра связи. Это может быть связано с потенциальным взаимодействием частиц в системе, а точнее их движением при разных параметрах. При более сильном взаимодействии частиц, они могут находится ближе друг к другу, что скорее всего приводит к коллективному движению и изменению макрохарактеристик плазмы.

Зависимость коэффициента теплопроводности от параметра связи с плазмой имеет немонотонный характер (рисунок 4) при $\kappa = 1$. Это также может быть связано с потенциальным взаимодействием частиц в системе, точнее, с их движением при различных параметрах. При более сильном взаимодействии частиц они могут находиться ближе друг к другу, что, скорее всего, приводит к коллективному движению и изменению макроструктуры. Проведено сравнение результатов коэффициента теплопроводности с аналогичными исследованиями [15,17-18].

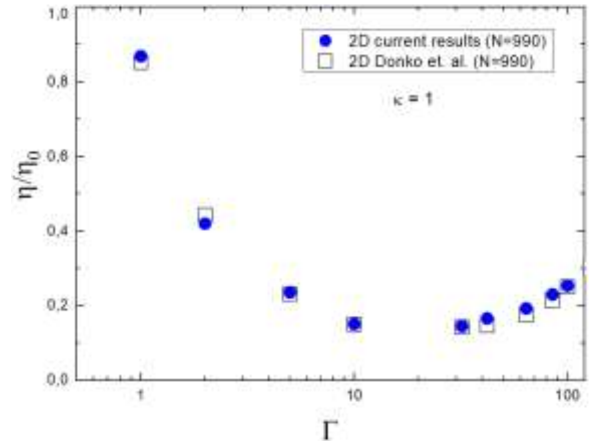

Рисунок 3 - Зависимость вязкости от параметра связи при $\kappa = 1$

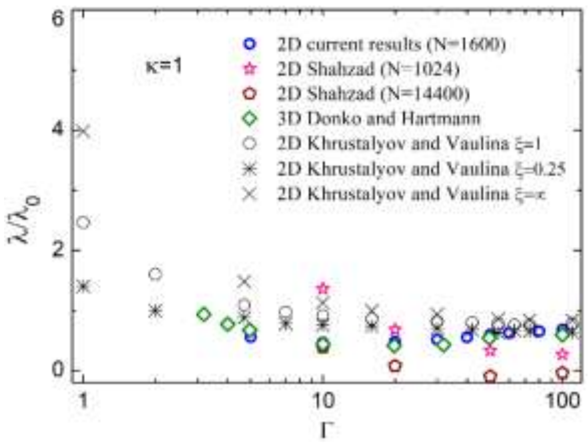

Рисунок 4 - Зависимость теплопроводности от параметра связи при $\kappa = 1$

Заключение

В итоге проведенных исследований были выявлены зависимости вязкости и теплопроводности от различных параметров системы. Установлено, что с уменьшением частоты замены, коэффициенты переноса стабилизируются для определенных значений параметра связи. Это подтверждает важность корректного выбора этого параметра для получения физически корректных данных. Исследование зависимости коэффициента теплопроводности и вязкости от параметра связи выявило его немонотонный характер. Это свидетельствует о сложной природе взаимодействия частиц в системе и их коллективных эффектах, особенно при изменении параметров экранирования. Результаты этого исследования представляют ценную информацию для дальнейших экспериментальных и теоретических работ, связанных с теплопроводностью в системах с потенциалом Юкава.

Финансирование

Работа выполнена в рамках гранта AP19678033 «Исследование транспортных и оптических свойств водорода при высоких давлениях» Министерства науки и высшего образования РК.

Литература

1 Ovchinnikov A.A., Timashev S.F. Kinetics of Diffusion Controlled Chemical Processes. – New York.: Nova Science Publishers, Commack, 1989. – 132 p.

2 Vladimirov S.V., Ostrikov K., Samarian A. Physics and Applications of Complex Plasmas. – London.: Imperial College, 2005. – 456 p.

3 Hartmann P., Donkó Z., Ott T., Kählert H., and Bonitz M. Magnetoplasmons in Rotating Dusty Plasmas //Physical review letters. –2013. – Vol. 111. – Art.No.155002.

4 Bonitz M., Donkó Z., Ott T., Kählert H., and Hartmann P. Nonlinear Magnetoplasmons in Strongly Coupled Yukawa Plasmas //Physical review letters. – 2010. – Vol. 105. – Art.No.055002.

5 Edward Thomas J., Lynch B., Konopka U., Merlino R. L., and Rosenberg M. Observations of imposed ordered structures in a dusty plasma at high magnetic field // Physics of Plasmas. –2015. –Vol. 22. – Art.No.030701.

6 Mitchell T.B., Bollinger J.J., Huang X.-P., Itano W.M., and Dubin D.H.E. Direct observations of the structural phases of crystallized ion plasmas // Physics of Plasmas. –1999. –Vol. 6. – P.1751-1758.

7 Golden K.I., Kalman G.J., Hartmann P., and Donkó Z. Dynamics of two-dimensional dipole systems // Phys. Rev. E – 2010. – Vol. 82. – Art.No.036402.

8 Aldakul Y.K., Moldabekov Z.A., and Ramazanov T.S. Melting, freezing, and dynamics of two-dimensional dipole systems in screening bulk media // Phys. Rev. E – 2020. –Vol. 102. – Art.No.033205.

9 Djienbekov N.E., Bastykova N.K., Bekbussyn A.M., Ramazanov T.S., and Kodanova S.K. Shear viscosity in two-dimensional dipole systems // Phys. Rev. E – 2022. –Vol. 106. – Art.No.065203.

10 Zanghellini J., Keim P., and H.H. von Grünberg. The softening of two-dimensional colloidal crystals // Journal of Physics: Condensed Matter. –2005. –Vol. 17. –P. S3579–S3586.

11 H.H. von Grünberg, Keim P., Zahn K., and Maret G. Elastic behavior of a two-dimensional crystal near melting // Phys. Rev. Lett. –2004. –Vol. 93. – Art.No.255703.

12 Lemeshko M., Krems R.V., Doyle J.M., and Kais S. Manipulation of molecules with electromagnetic fields// Molecular Physics –2013. –Vol. 111. – P.1648-1682.

13 Bernu B. and Vieillefosse P. Transport coefficients of the classical one-component plasma // Phys. Rev. A –1978. –Vol. 18. – P.2345.

14 Donkó Z., Goree J., Hartmann P., and Liu B. Time-correlation functions and transport coefficients of two-dimensional Yukawa liquids// Phys. Rev. E –2009. –Vol. 79. – Art.No.026401.

15 Khrustalyov Y.V. and Vaulina O.S. Numerical simulations of thermal conductivity in dissipative two-dimensional Yukawa systems // Phys. Rev. E –2012. –Vol. 85. – Art.No.046405.

16 Müller-Plathe F. A simple nonequilibrium molecular dynamics method for calculating the thermal conductivity // The Journal of Chemical Physics –1997. –Vol. 106. – P.6082-6085.

17 Donkó Z. and Hartmann P. Thermal conductivity of strongly coupled Yukawa liquids // Phys. Rev. E –2004. –Vol. 69. – Art.No.016405.

18 Shahzad, A., He, M.-G. Numerical experiment of thermal conductivity in two-dimensional Yukawa liquids // Physics of Plasmas –2015. –Vol. 22(12). – Art.No.123707.

References

1 A.A. Ovchinnikov, S.F. Timashev, Kinetics of Diffusion Controlled Chemical Processes, (New York, Nova Science Publishers,Commack, 1989), 132 p.

2 S.V. Vladimirov, K. Ostrikov, Physics and Applications of Complex Plasmas, (London, Imperial College, 2005), 456 p.

3 P. Hartmann, Z. Donkó, T. Ott, H. Kählert, and M. Bonitz, Physical review letters, 111, 155002 (2013).

4 M. Bonitz, Z. Donkó, T. Ott, H. Kählert, & P. Hartmann, Physical review letters, 105, 055002 (2010).

5 J. Thomas, Edward, B. Lynch, U. Konopka, R. L. Merlino, & M. Rosenberg, Physics of Plasmas, 22, 030701 (2015).
6 T.B. Mitchell, J.J. Bollinger, X.-P. Huang, W.M. Itano, & D.H.E. Dubin, Physics of Plasmas, 6, 1751 (1999).
7 K.I. Golden, G.J. Kalman, P. Hartmann, & Z. Donkó, Phys. Rev. E, 82, 036402 (2010).
8 Y.K. Aldakul, Z.A. Moldabekov, & T. S. Ramazanov, Phys. Rev. E, 102, 033205 (2020).
9 N.E. Djienbekov, N.K. Bastykova, A.M. Bekbussyn, T.S. Ramazanov, & S.K. Kodanova, Phys. Rev. E, 106, 065203 (2022).
10 J. Zanghellini, P. Keim, and H.H. von Grünberg, Journal of Physics: Condensed Matter, 17, S3579–S3586 (2005).
11 H.H. von Grünberg, P. Keim, K. Zahn, & G. Maret, Phys. Rev. Lett., 93, 255703 (2004).
12 M. Lemeshko, R.V. Krems, J.M. Doyle, & S. Kais, Molecular Physics, 111, 1648 (2013).
13 B. Bernu & P. Vieillefosse, Phys. Rev. A, 18, 2345 (1978).
14 Z. Donkó, J. Goree, P. Hartmann, & B. Liu, Phys. Rev. E, 79, 026401 (2009).
15 Y.V. Khrustalyov & O.S. Vaulina, Phys. Rev. E, 85, 046405 (2012).
16 F. Müller-Plathe, The Journal of Chemical Physics, 106, 6082-6085 (1997).
17 Z. Donkó and P. Hartmann, Phys. Rev. E, 69, 016405 (2004).
18 A. Shahzad, M.-G. He, Physics of Plasmas, 22(12), 123707 (2015).