

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования  
«Московский государственный технический университет имени Н.Э. Баумана  
(национальный исследовательский университет)»  
(МГТУ им. Н.Э. Баумана)

Факультет «Фундаментальные науки»

Кафедра «Физика» ФН4

На правах рукописи

УДК 538.9

## НАУЧНО-КВАЛИФИКАЦИОННАЯ РАБОТА

**«Определение термодинамических свойств системы по статистике  
распределений плотностей и явлениях переноса»**

Направление подготовки: 03.06.01 Физика и астрономия

Направленность (профиль): 01.04.07 Физика конденсированного состояния

Студент \_\_\_\_\_

Дмитрюк Н.А.

Научный руководитель  
д.ф.-м.н. \_\_\_\_\_

Юрченко С.О.

Москва – 2020

# Оглавление

<b>ВВЕДЕНИЕ . . . . .</b>	<b>3</b>
<b>ГЛАВА 1. Системы с невзаимными взаимодействиями . . . . .</b>	<b>6</b>
1.1. Активные системы . . . . .	6
1.2. Системы с невзаимными взаимодействиями . . . . .	6
1.3. Невзаимные взаимодействия в пылевой (комплексной) плазме . .	9
1.4. Цели и задачи работы . . . . .	11
<b>ГЛАВА 1. Коллективные спектры в конденсированных системах</b>	<b>12</b>
2.1. Расчет спектров в МД . . . . .	12
2.2. Анализ спектров в комплексной (пылевой) плазме . . . . .	16
2.3. Выводы . . . . .	18
<b>ГЛАВА 2. Диссипативные фазовые переходы в пылевой (комплексной) плазме . . . . .</b>	<b>20</b>
3.1. Фазовые диаграммы в диссипативных системах . . . . .	20
3.2. Высвобождение энергии . . . . .	22
3.3. Странный аттрактор . . . . .	24
3.4. Выводы . . . . .	26

## ВВЕДЕНИЕ

### **Актуальность.**

Для физики конденсированного состояния большой интерес представляют такие явления, как кристаллизация, плавление, критические явление, а также их зависимость от свойств системы. Понимание влияния этих свойств на систему играет важную роль в материаловедении.

На данный момент эти проблемы решаются с использованием математических моделей систем.

**Цель работы** – создание программного комплекса для расчета термодинамических свойств  $2D$  систем.

### **Задачи работы:**

1. Разработка программного комплекса для расчета явлений переноса в  $2D$  системах.
2. Разработка методов определения термодинамических свойств системы по распределениям плотностей.
3. Усовершенствование метода распознавание фаз и построения фазовых диаграмм.
4. Применение разработанных методов на различных потенциалах взаимодействия.
5. Применение наработок для изучения влияния потенциала взаимодействия на различные термодинамические параметры.

### **Научная новизна работы:**

1. Впервые показано, что термодинамические свойства системы могут быть рассчитаны по распределению статических параметров.

### **Положения, выносимые на защиту:**

1. Показано, что ...
2. Показано, что ...
3. Показано, что ...

**Методология и методы исследования.** Сформулированные задачи были решены с помощью моделирования систем методами молекулярной динамики, с использованием свободного программного пакета LAMMPS. Пост-обработка результатов выполнена с помощью разработанного программного комплекса на языке MATLAB и Python.

**Достоверность.**

**Личный вклад автора.**

**Теоретической значимостью.**

**Практическая значимость.**

**Результат работы.**

**Апробация работы.**

**Публикации.** Основные результаты работы находятся на рецензировании.

**Структура и объем работы.** Научно квалификационная работа состоит из введения, N глав и заключения, содержит N страниц, N рисунков. Список литературы включает N источников.

Во **введении** кратко обосновывается актуальность работы, формулируется цель, перечисляются положения, выносимых на защиту, указывается научная новизна, достоверность, фундаментальная и практическая значимость результатов работы, личный вклад автора, апробация работы и содержание по главам.

**Глава 1** является обзорной. В разделе 1.1 кратко рассматриваются активные системы. В разделе ?? рассматриваются системы с невзаимными взаимодействиями. Кратко излагаются основные уранения, описывающие данные уравнения. В разделе ?? кратко рассматриваются системы комплексной (пылевой) плазмы, в которых эффективные взаимодействия невзаимны. В завершении главы формулируются цель и задачи работы.

**Глава 2** посвящена изучению элементарных возбуждений в жидкостях с различными потенциалами. В разделе ?? приводится обзор существующих подходов к описанию спектров элементарных возбуждений. В разделе ?? излагается метод построения спектров элементарных возбуждений на примере жидкости с потенциалом Леннарда-Джонса. В разделе ?? демонстрируется применение предложенного подхода к анализу систем комплексной (пылевой) плазмы. В разделе ?? систематически изучаются коллективные возбуждения в различ-

ных двумерных и трехмерных жидкостях на основе В разделе ?? обобщаются основные результаты главы.

**Глава 3** посвящена рассмотрению диссипативных фазовых переходов в пылевой (комплексной) плазме. В разделе ?? В разделе ?? В разделе ?? обобщаются основные результаты главы.

**В общих выводах и заключении** обобщаются основные результаты работы.

# ГЛАВА 1

## СИСТЕМЫ С НЕВЗАЙМНЫМИ ВЗАИМОДЕЙСТВАМИ

### **1.1. Активные системы**

Термин активная материя описывает естественные или искусственные системы, которые находятся в состоянии термодинамического неравновесия из-за энергии, поступающей в отдельные ее части или проходящей через них. Такие живые существа, как птицы, рыбы или бактерии внутренне существуют вне равновесия, преобразуя химически их пищу в некую форму механической работы. Активные системы не только позволяют экспериментально проверить положения неравновесной статистической физики, но и лежат в основе естественных процессов жизнедеятельности [?]: от образования биопленок или клеточных инвазий до морфогенеза и даже скопления рыб, птиц или стад животных.

Важной особенностью материалов, состоящих из активной материи, является коллективное движение, при котором группы активных частиц движутся вместе как единое целое на масштабах, значительно превышающих размер отдельного человека. Подобные системы часто встречаются в природе: летающие стаи скворцов или стаи рыб, движущихся вместе, чтобы избежать хищника.

Подобная коллективная динамика проявляется даже на уровне микромасштабов: бактериальные суспензии, ткани и внутриклеточные нити используют свою внутреннюю энергию для движения, масштабы которого превышают размеры отдельных клеток или белков. Таким образом, понимание механизмов и динамики коллективного движения активных веществ имеет большое значение при изучении различных систем в природе в широком диапазоне длин волн.

### **1.2. Системы с невзаимными взаимодействиями**

Открытые и неравновесные системы различного рода встречаются в физике, химии, материаловедении и даже мультиагентных системах и сетях. Понимание механизмов, ответственных за коллективную динамику в таких системах, имеет важное значение для различных фундаментальных и прикладных задач. К таким механизмам относятся: самоорганизация, диссипативные фазовые переходы и критические явления.

Существуют системы, в которых взаимодействия невзаимны и симметрия действие-реакция нарушается. Это является основной чертой открытых систем. Эффективные взаимодействия в них опосредованы неравновесной средой [?], примерами которой могут быть коллоидные суспензии, комплексная (пылевая) плазма, где существенную роль играют потоки [?, ?], неравновесные флуктуации [?], оптические пучки [?] и диффузиофорез [?].

Невзаимность взаимодействий может быть достигнута с помощью внешних сил, индуцирующих потоки, как в случае комплексной плазмы, так и за счет химических реакций (кatalитически активных коллоидов). К ним относятся: активная материя [?, ?, ?], бактерии и самоходные частицы, динамика которых определяется гидродинамическими потоками и локальной химической средой [?]. Нарушение симметрии действие-реакция в эффективных взаимодействиях играет важную роль в динамике мультиагентных систем, в том числе групп животных, человеческих толп [?], пешеходных систем, систем беспилотных транспортных средств и эпидемических систем.

Рассмотрим более подробно динамику таких систем. Представим ансамбль частиц [?], разделенных на разные подсистемы (обозначаются индексом  $s$ ), так что парные взаимодействия внутри каждой подсистемы взаимные, в то время как взаимодействия между частицами, принадлежащими к разным подсистемам, невзаимны, в этом случае динамика отдельных частиц описывается уравнением

$$m_{is} \dot{\mathbf{v}}_{is} = \sum_{j \neq i} \mathbf{F}_{js,is} + \sum_{s' \neq s} \sum_j \mathbf{F}_{js',is}, \quad (1.1)$$

где  $m_{is}$  и  $\dot{\mathbf{v}}_{is}$  – это масса и скорость  $i$ -ой частицы в  $s$ -й подсистеме соответственно, а  $\mathbf{F}_{js',js}$  – сила действующая на  $i$ -ю частицу с помощью частицы  $js'$ . В правой части уравнения (1.1) первый член описывает полную силу, действующую на  $i$ -й частицу из-за взаимодействий внутри  $s$ -й подсистемы, а второй член представляет общую силу, обусловленную невзаимными взаимодействиями с другими подсистемами  $s'$ .

Пусть силы действия и взаимодействия действуют вдоль радиус-вектора между взаимодействующими частицами, но имеют разные величины, как проиллюстрировано на рис. 1.1. Тогда  $\mathbf{F}_{js',is} = F_{js,is}(\mathbf{r}_{js'} - \mathbf{r}_{is})/|\mathbf{r}_{js'} - \mathbf{r}_{is}|$  и, следо-

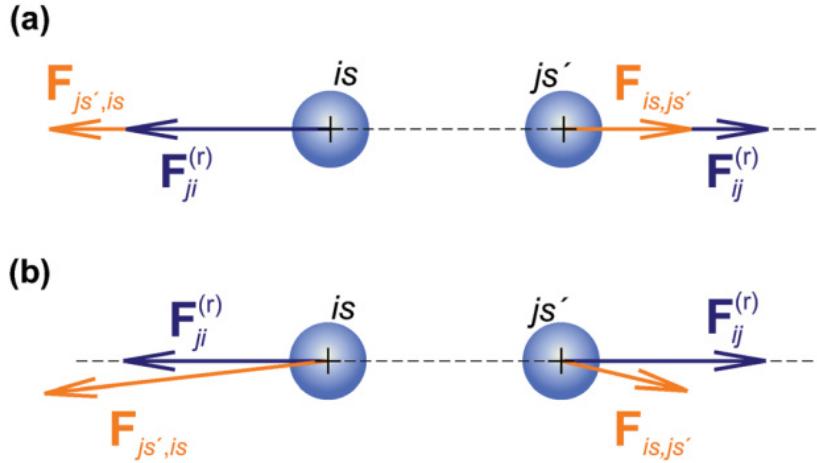


Рис. 1.1. Отклонение от третьего закона Ньютона: а) скалярная невзаимность, (б) тензорная невзаимность.

вательно, можно написать

$$F_{js',is} = (1 + \Delta_{s's}) F_{ji}^{(r)}, \quad (1.2)$$

$$F_{ji}^{(r)} = 1/2(F_{js',is} + F_{is,js'}), \quad \Delta_{s's} = \frac{F_{js',is} - F_{is,js'}}{F_{js',is} + F_{is,js'}}, \quad (1.3)$$

где  $F_{ji}^{(r)}$  - невзаимная часть взаимодействия,  $\Delta_{s's} = -\Delta_{ss'}$  - скалярная характеристика невзаимности, характеризующая видимое отклонение от третьего закона Ньютона, которая, в целом, зависит от расстояния между частицами. Силы  $F_{ji}^{(r)}$  подчиняются третьему закону Ньютона для эффективного взаимодействия и, следовательно, потенциальную энергию  $\varphi(r_{ji})$  можно ввести так, чтобы выполнялось  $F_{ji}^{(r)} = -\partial\varphi(r_{ji})/\partial\mathbf{r}_i$ . Можно обеспечить детальную симметрию действие-реакция между каждой парой частиц в подсистемах  $s'$  и  $s$  за счет перенормировки константы:

$$\alpha F_{js',is} = \alpha_{s'} F_{is,js'} \quad (1.4)$$

Данный подход эквивалентен перенормировке масс и потенциалов взаимодействия. Видно, что в случае скалярной радиально независимой невзаимности, уравнение (1.4) выполняется в том случае, если силы можно разложить следующим образом:

$$F_{js',is} = f(p_{s'})g(p_s, p_{s'})F_{ji}^{(r)}, \quad (1.5)$$

где  $f(p)$  – произвольная функция параметра  $p$ , а  $g(p_s, p_{s'}) = g(p_{s'}, p_s)$  – произвольная функция, инвариантная относительно транспонирования переменных. Параметр  $p_s$  вводится для подсистемы  $r$ , которая связана с невзаимными взаимодействиями:  $p_s$  может быть вертикальной координатой слоев частиц в случае комплексной (пылевой) плазмы или отношением  $k/\mu$  химической активности  $k$  к подвижности  $\mu$  в каталитически активных коллоидах.

Используя уравнение (1.5), можно получить решение уравнения (1.4):

$$\alpha_s = Af(p_s), \Delta_{s's} = \frac{f(p_{s'}) - f(p_s)}{f(p_{s'}) + f(p_s)} \quad (1.6)$$

где  $A$  – произвольная постоянная. Решение означает, что если силы  $F_{js',is}$  могут быть представлены в форме (1.5), то система обладает консервативной (псевдогамильтоновой) динамикой и может быть строго описана в терминах равновесной статистической механики. Константы  $\alpha_s$  определяют температуры подсистем,  $T_s = \alpha_s \tilde{T}$ , где  $\tilde{T}$  является псевдотемпературой, соответствующей перенормированной функции Гамильтона.

### 1.3. Невзаимные взаимодействия в пылевой (комплексной) плазме

В пылевой (комплексной) плазме заряженные микрочастицы левитируют в слабоионизированном газе, например в плазме емкостно связанного радиочастотного разряда. Благодаря взаимодействию гравитационных и электрических сил частицы могут образовывать однослойные или многослойные структуры, в зависимости от условий эксперимента. На взаимодействие между микрочастицами обычно влияет вертикальный поток плазмы, который генерирует так называемые "плазменные вейки" ниже по потоку от каждой частицы. Появление плазменных вейков приводит к невзаимности эффективного взаимодействия [?], которое зависит от параметров плазменного разряда и может быть настроено в экспериментах. В результате микрочастицы могут получать энергию из потока плазмы, что открывает широкие перспективы для исследования неравновесных явлений в системах с активационным тепловым поведением, в част-

ности, распространение фронтов пламени, критических тепловых явлений и термоакустическая неустойчивость в химически активных средах.

Комплексная плазма часто встречается в космосе. Она присутствует в кольцах планет, хвостах комет, межпланетных и межзвездных облаках [?, ?], встречается в окрестностях искусственных спутников и космических станций [?] и др. Также активно исследуется пылевая плазма в лабораториях.



Рис. 1.2. Пример межзвездных облаков.

Наличие массивных заряженных частиц в комплексной плазме имеет важное значение для коллективных процессов. Ансамбли микрочастиц рождают новые низкочастотные волновые моды, которые представляют из себя колебания частиц относительно квазиравновесного фона из электронов и ионов. Сами частицы достаточно велики, что их можно визуализировать индивидуально и, следовательно, их движение можно легко отследить. Это позволяет исследовать явления, происходящие в комплексной плазме на фундаментальном кинетическом уровне. Частицы микронных размеров, внедренные в плазму, не только изменяют состав заряда, но и создают новые физические процессы в системе, например эффекты, связанные с диссипацией и рекомбинацией плазмы на поверхностях, изменением зарядов частиц и так далее. Эти процессы предполагают новые механизмы притока энергии в систему. Следовательно, комплексная плазма является новым типом негамильтоновых систем со свойствами, которые могут полностью отличаться от обычной многокомпонентной плазмы.

В экспериментальных условиях микрочастицы находятся в условиях конфайнмента созданного электрическими и гравитационными полями и могут образовывать в зависимости от условий однослойные или многослойные структуры. Взаимодействие между микрочастицами обычно зависит от вертикального

потока плазмы, который генерирует так называемые плазменные следы под каждой частицей (рис. 1.3).

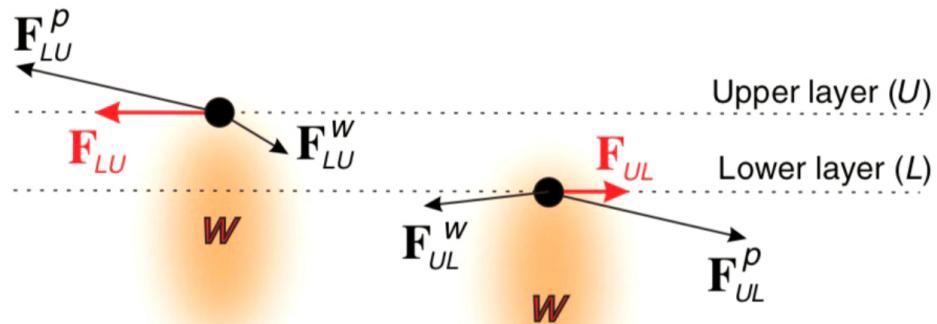


Рис. 1.3. Полная сила, действующая на частицу верхнего слоя (U) от частицы нижнего слоя (L).

Полная сила, действующая на частицу верхнего слоя (U) от частицы нижнего слоя (L), представляет собой сумму силы отталкивания  $\mathbf{F}_{LU}^p$  прямого межчастичного взаимодействия и силы притяжения  $\mathbf{F}_{LU}^p$  от следа нижней частицы (аналогично для полной силы на нижнюю частицу).

Эффект возникновения плазменных следов приводит к невзаимности эффективных взаимодействий [?], которые зависят от параметров плазменного разряда. В результате, микрочастицы могут получать энергию из плазменного потока. Данный эффект позволяет исследовать огромный ряд различных неравновесных явлений: системы с активацией теплового поведения, в частности, распространение фронтов пламени, [?] критические тепловые явления [?] и термоакустическая нестабильность в химически реактивных средах [?].

## 1.4. Цели и задачи работы

**Цель бакалаврской работы:**

## ГЛАВА 2

# КОЛЛЕКТИВНЫЕ СПЕКТРЫ В КОНДЕНСИРОВАННЫХ СИСТЕМАХ

### 2.1. Расчет спектров в МД

Коллективные возбуждения являются одной из ключевых концепций современной физики конденсированного состояния [?, ?, ?]. Это обусловлено тем, что знание коллективных возбуждений в конденсированной системе позволяет понять многие свойства системы, такие как: термодинамические, упругие, структурные и т.д. Коллективные возбуждения в случае кристаллических систем являются наиболее изученными. Главным образом благодаря наличию трансляционной симметрии и малости отклонений частиц кристаллической решетки от положений равновесия. Трансляционная симметрия позволяет рассматривать коллективные возбуждения в кристалле как плоские волны, а малость отклонений позволяет рассматривать как гармонические невзаимодействующие колебания. В физике твердого данных колебания принято отождествлять с квазичастицами - фононами. При высоких температурах отклонения частиц становятся большими и фононы уже нельзя рассматривать как невзаимодействующие.

В случае жидкостей так же можно говорить о коллективных возбуждениях, однако они имеют более сложную структуру и хуже изучены. Однако существует теоретический подход к оценке дисперсионных зависимостей в жидкостях, известный, как QCA (quasi-crystalline approximation) [?]. Во многих случаях описание на основе QCA справедливо и согласуется с дисперсионными кривыми, полученными экспериментально, для различных простых жидкостей, по крайней мере.

В контексте физики плазмы первоначально был предложен аналог QCA – подход QLCA (quasi-localized charge approximation) [?], который использовался для расчета дисперсии коллективных мод в сильно коррелированной жидкой фазе.

Метод был создан для сильно связанных систем, где традиционная аппроксимация рандомной фазы RPA (random-phase approximation) или иерархия ББГКИ не была бы оправдана. Теория QLCA позволила предсказать диспер-

сию плазменных и сдвиговых мод не только в упомянутых выше системах, но и в намагниченной однокомпонентной плазме и в электронных сверхрешетках.

Подход QCA связывает динамические и структурные характеристики системы, то есть позволяет рассчитать дисперсионные соотношения для коллективных возбуждений в жидкости, на основе потенциальной энергии парного взаимодействия и парной-корреляционной функции  $g(r)$ . Однако обратная процедура плохо изучена, и теория восстановления парных корреляций с использованием потенциала взаимодействия и динамических свойств хорошо развита только для кристаллов [?, ?, ?].

Для анализа различных подходов к построению спектров элементарных возбуждений было проведено моделирование на основе методов молекулярной динамики (МД) с использованием NVT ансамбля. Рассматривался метод построения на основе простых жидкостей с потенциалами Леннарда-Джонса и Юкавы:

$$\varphi_{LJ} = 4\epsilon \left[ \left( \frac{\lambda}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\lambda}{r} \right)^6 \right], \quad (2.1)$$

$$\varphi_Y = \epsilon \frac{\lambda}{r} \left( -\frac{r}{\lambda} \right), \quad (2.2)$$

где  $\epsilon$  и  $\lambda$  – магнитуда и характерная длина взаимодействия соответственно.

В случае систем с потенциалом Леннарда-Джонса система состояла из  $N = 10^4$  частиц с радиусом отсечки  $r_c = 7.5n^{-1/D}$ , где  $n = N/V$  - плотность, а  $D$  - размерность системы. Моделирования проводились с временным шагом  $\Delta t = 5 \times 10^{-3} \sqrt{T_0 m \sigma^2 / (T \epsilon)}$ .

Для рассмотренной системы на основе данных, полученных в результате моделирования, были рассчитаны плотности потока скоростей на основе фурье-преобразования [?]:

$$C_{L,T}(q, \omega) = \int dt e^{i\omega t} \text{Re} \langle \mathbf{j}_{L,T}(\mathbf{q}, t) \mathbf{j}_{L,T}(-\mathbf{q}, 0) \rangle, \quad (2.3)$$

где  $\mathbf{j}_{L,T}(\mathbf{q}, t) = N^{-1} \sum_s \mathbf{v}_s(t) \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}_s(t))$  - плотность потока скоростей;  $\mathbf{v}_s(t) = \dot{\mathbf{r}}_s(t)$  - это скорость  $s$ -ой частицы; суммирование проводилось по всем  $N$  частицам системы.  $\mathbf{j}_L = \mathbf{q}(\mathbf{j} \cdot \mathbf{q})/q^2$  и  $\mathbf{j}_T = \mathbf{j}e_\perp$  - продольные и поперечные компоненты потока,  $e_\perp$  - единичный вектор, нормальный к  $\mathbf{q}$ ; скобки  $\langle \dots \rangle$  обозначают усреднение по каноническому ансамблю.

В связи с изотропностью простых жидкостей, спектры потоков частиц зависят только от частоты  $\omega$  и волнового числа  $q = |\mathbf{q}|$ . Пользуясь этим свойством, значение  $C_{L,T}(\mathbf{q}, \omega)$  усреднялось по всем направлениям волнового вектора для подавления шума, вызванного ограниченностью набора частиц и времени моделирования:

$$C_{L,T}(q, \omega) = \frac{1}{N_q} \sum_{q=|\mathbf{q}|} C_{L,T}(\mathbf{q}, \omega), \quad (2.4)$$

где  $N_q$  – количество направлений, используемых для усреднения.

Данный подход применим при условии  $\mathbf{q} \lesssim 2\pi/L$ , где  $L$  – характерный размер области моделирования. Предполагается, что спектры потоков частиц имеют следующий вид:

$$\text{Re}\langle \mathbf{j}_{L,T}(\mathbf{q}, t)\mathbf{j}_{L,T}(-\mathbf{q}, 0) \rangle \propto e^{-\Gamma_{L,T}(q)|t|} \cos(\omega_{L,T}(q)t), \quad (2.5)$$

где  $\omega_{L,T}$  и  $\Gamma_{L,T}$  – частота и коэффициент затухания соответственно для продольных и поперечных колебаний. Таким образом, получается следующее выражение для спектров потоков частиц (DHO модель):

$$C_{L,T}(q, \omega) \propto \frac{\Gamma_{L,T}(q)}{(\omega - \omega_{L,T}(q))^2 + \Gamma_{L,T}^2(q)} + \frac{\Gamma_{L,T}(q)}{(\omega + \omega_{L,T}(q))^2 + \Gamma_{L,T}^2(q)}. \quad (2.6)$$

Частоты и коэффициенты затухания (2.4) можно так же получить как раздельной аппроксимацией (2.6) продольных и поперечных колебаний, так и совместной аппроксимацией (модель 2DHO), при котором полный спектр  $C(q, \omega) = C_L(q, \omega) + (D - 1)C_T(q, \omega)$  получается в виде суммы двух аппроксимаций высокочастотных и низкочастотных колебаний:

$$C(q, \omega) \propto \frac{\Gamma_L}{(\omega - \omega_L)^2 + \Gamma_L^2} + \frac{\Gamma_L}{(\omega + \omega_L)^2 + \Gamma_L^2} + \frac{(D - 1)\Gamma_T}{(\omega - \omega_T)^2 + \Gamma_T^2} + \frac{(D - 1)\Gamma_T}{(\omega + \omega_T)^2 + \Gamma_T^2}, \quad (2.7)$$

где  $D$  – это размерность системы.

Оба метода дают зависимости с разбросом значений частот  $\omega_{L,T}(q)$  и коэффициентов затухания  $\Gamma_{L,T}(q)$ . На рис. 2.1 можно увидеть результаты для Леннарда-Джонса при низких (a) - (d) и высоких (e) - (h) температурах ( $T =$

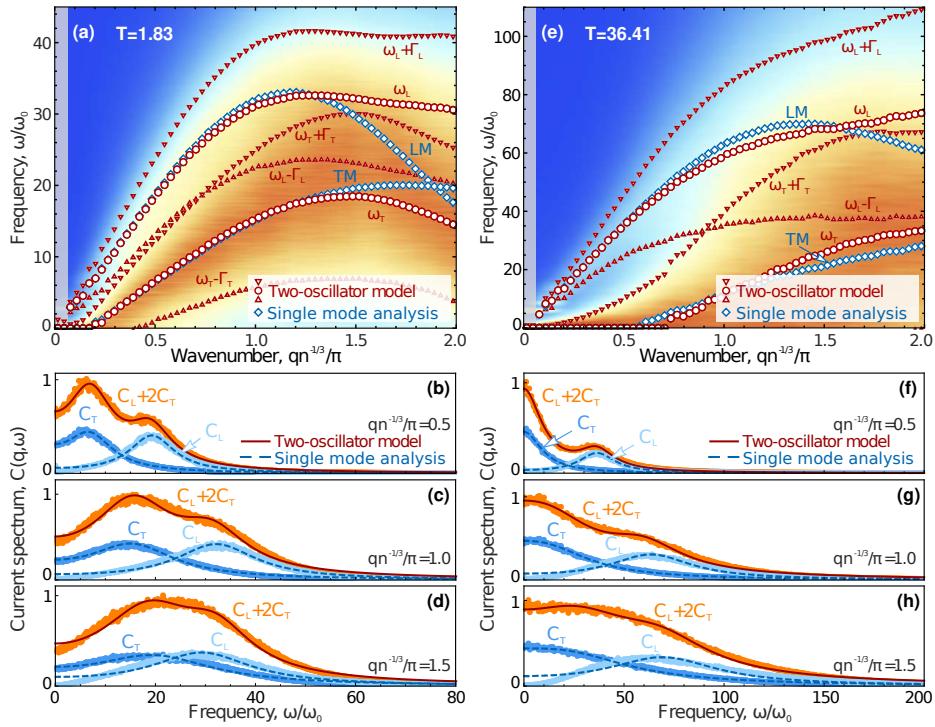


Рис. 2.1. Амплитуды и спектры возбуждений для трехмерной жидкости с потенциалом Леннарда-Джонса.

1.83 и 36.41 соответственно).

На рис. 2.1(а) представлены результаты  $C(q, \omega)$  в цветовом формате. Синие ромбы соответствуют дисперсионным соотношениям  $\omega_{L,T}(q)$ , рассчитанным путем раздельной аппроксимации продольной и поперечной мод. Результаты, полученные с помощью совместной аппроксимации, показаны красными кругами для  $\omega_{L,T}(q)$  и треугольниками для  $\omega_{L,T}(q) \pm \Gamma_{L,T}$ . Результаты, полученные с помощью модели DHO, не изображены, поскольку они совпадают с теми, что уже показаны на рисунке. Профили  $C(q, \omega)$ , а также их продольные и поперечные составляющие  $C_{L,T}(q, \omega)$  для различных значений волнового числа изображены на рис. 2.1(б) - (д) символами, в то время как сплошные линии соответствуют результатам аппроксимации по формулам (2.6) и (2.7).

Следует отметить, что оба подхода дают близкие результаты, если полный спектр  $C(q, \omega)$  имеет два хорошо выраженных максимума (на более низких и более высоких частотах, которые обычно соответствуют продольным и поперечным модам), что обычно выполняется в первой псевдозоне Бриллюэна. Отклонение между дисперсионными соотношениями, полученными различными методами, растет с ростом температуры, как видно на рис. 2.1(а) и 2.1(е). Видно, что результаты, полученные методами молекулярной динамики, хорошо

согласуются с теоретическими подходами (2.6) и (2.7).

При больших температурах и коротких длинах волн, как показано на рис. 2.1(h), результаты сильно искажаются, что связано с изменением формы спектров на длинноволновом пределе. Если поперечные и продольные волны пересекаются, то модель DHO становится неприменимой (при  $qn^{-1/3}/\pi \simeq 1.9$ ). Смешивание мод и эффективное взаимодействие между ними сопровождается сильным перераспределением спектров и гибридизацией [?, ?].

## 2.2. Анализ спектров в комплексной (пылевой) плазме

Для анализа скрещивания мод в сильно связанных жидкостях с потенциалом Юкавы было проведено моделирование МД для квазидвумерной жидкости при  $\varepsilon = e^2 Z^2 / 4\pi\varepsilon_0\lambda_D = 874$  эВ, где  $Z = 1.25 \times 10^4$  - зарядовое число,  $\lambda_D = 260$  нм - длина экранировки Дебая.

Система состояла из  $N = 10^4$  частиц с массами, равными  $m = 6.1 \times 10^{-10}$  гр, помещенными в кубическую область с периодическими граничными условиями со сторонами  $L = 30.5$  м. Частицы находились в параболической потенциальной яме  $U(z) = 0.5m\Omega_z^2 z^2$ , где  $\Omega_z^2 = 25$  Гц - частота поперечных колебаний частиц в длинноволновом пределе.

Радиус отсечки был взят равным  $r_c = 2.29$  мм, что примерно соответствовало 7.5 межчастичных расстояний. Моделирование проводилось в термостате Ланжевена с  $T = 18$  эВ, скоростью затухания  $\nu = 1.8 \text{ c}^{-1}$  и шагом по времени  $\Delta t = 38$  нс. На начальном этапе была задана квадратная решетка в плоскости  $z = 0$  с плотностью  $\rho = 1/V_0 = N/L^2 = 10.75 \text{ mm}^{-2}$  при температуре  $T = 26.9$  эВ (которая соответствует распределению Максвелла). Первые  $10^6$  шагов система находилась в состоянии равновесия, затем следующие  $10^6$  шагов были использованы для анализа спектров флюктуаций.

На рис. 2.2 изображены спектры элементарных возбуждений для квазидвумерных жидкостей с потенциалом Юкавы.

На (a) - (c) изображены спектры, скорости затухания и параметры связи между продольными и поперечными возбуждениями, полученные в ходе эксперимента, а на панелях (d) - (f) - результаты, полученные методом МД.

Видно, что данные, полученные в ходе эксперимента, согласуются с результатами МД. Наблюдаемые различия обусловлены лучшей статистикой МД

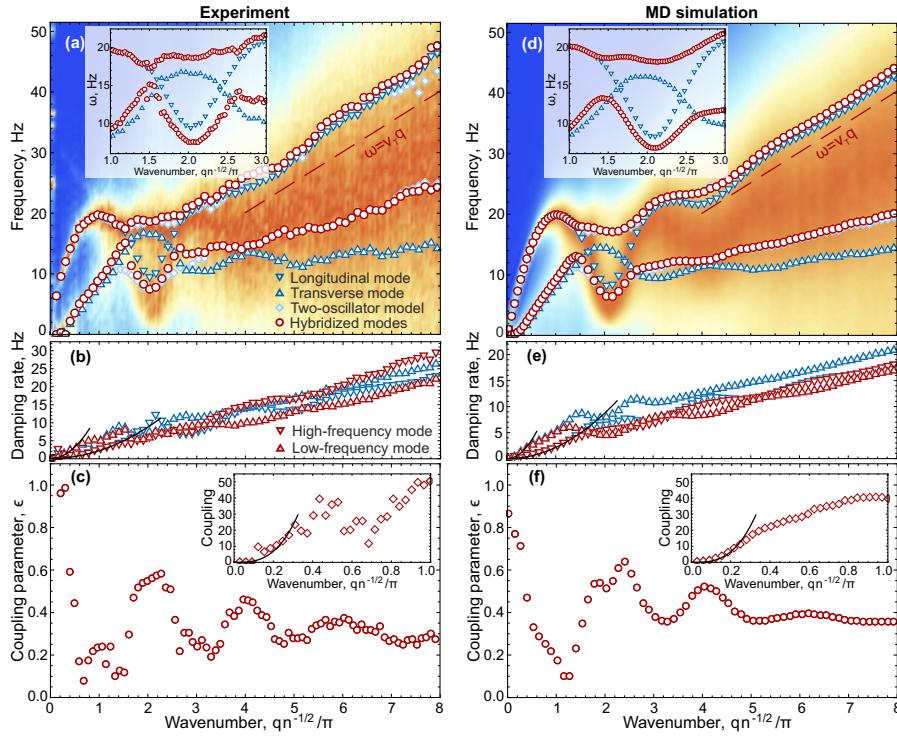


Рис. 2.2. Амплитуды и спектры возбуждений для квазидвумерной жидкости с потенциалом Юкавы.

и более сложными взаимодействиями в эксперименте из-за плазменных вейков. Антикрессинг мод наблюдается при  $q^{-1/2}\pi^{-1} \approx 1.6$  или  $2.4$  (в диапазоне волновых чисел между коллективной и одиночастичной динамикой), где две пересекающиеся моды (показанные синими треугольниками) отталкиваются друг от друга. В результате антикрессинга наблюдается высокочастотные и низкочастотные моды гибридизированных возбуждений, представленные красными кругами на рис. 2.2(а) и 2.2(д) вместо продольных и поперечных возбуждений, показанных синими треугольниками.

В жидкостях возбуждения сильно демпфированы и поэтому продольная и поперечная составляющие амплитуды  $C(q, \omega) = C_{\parallel}(q, \omega) + C_{\perp}(q, \omega)$ , показанные на рис. 2.2(а) и 2.2(д) оказываются размытыми в плоскости  $(q, \omega)$ . Скорости затухания представлены на рис. 2.2(б) и 2.2(е). Сплошные черные линии показывают для эксперимента и моделирования диффузационное затухание  $\Gamma_{\parallel, \perp} \sim q^2$  на небольших  $q$ . Безразмерный параметр связи  $\epsilon$  показан на рис. 2.2(с) и 2.2(ф) для эксперимента и моделирования МД. Сплошная черная линия на (с), (ф) - это результаты аппроксимации  $\epsilon \Omega_{\parallel, \perp} \sim q^3$ . Данное соотношение получается из того, что при малых  $q$   $\Omega_{\parallel} \approx \omega_{\perp} \sim q$ , а  $\Omega_{\perp} \approx \omega_{\parallel} \sim q^2$ .

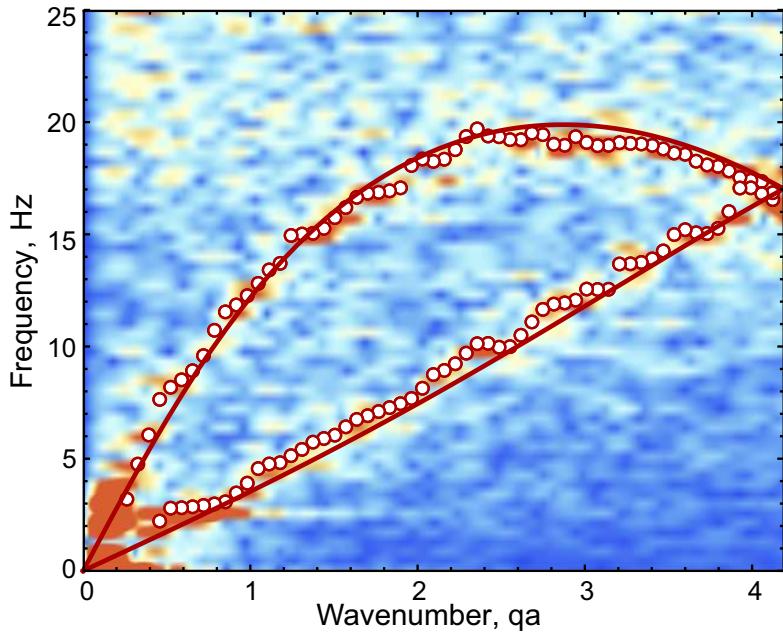


Рис. 2.3. Спектры возбуждений для кристалла с потенциалом Юкавы.

Фононный спектр в комплексной (пылевой) плазме изображен на рис. 2.3: амплитуды показаны в цветовом формате; красные символы показывают дисперсионные соотношения  $\omega_{\parallel,\perp}(q)$  для продольных и поперечных колебаний, полученные путем аппроксимации экспериментально полученных значений  $C(q, \omega)$  моделью затухающего гармонического осциллятора. Сплошная красная линия соответствует теоретическим дисперсионным соотношениям для кристаллов с потенциалом Юкавы.

## 2.3. Выводы

Метод, основанный на модели 2DHO, пригоден для анализа возбуждений в двумерных и трехмерных жидкостях с различными потенциалами взаимодействия. Однако в длинноволновом пределе наблюдается возврат к режиму индивидуальной динамики частиц, при котором продольные и поперечные спектры потока определяются распределениями Максвелла по скоростям.

Полученные результаты могут быть применены для анализа возбуждений в жидкой комплексной (пылевой) плазме. Так же с помощью данного подхода можно детально анализировать возбуждения в жидких средах различной природы, от простых жидкостей и благородных газов до жидких металлов, молекулярных и сложных жидкостей. Смешивание мод в сильно связанных

жидкостях приводит к эффективному взаимодействию между продольными и поперечными возбуждениями, что приводит к антикроссингу мод. Детальный анализ возбуждений открывает захватывающие перспективы для установления соотношений между индивидуальной, коллективной динамикаами и термодинамикой жидкостей.

# ГЛАВА 3

## ДИССИПАТИВНЫЕ ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В ПЫЛЕВОЙ (КОМПЛЕКСНОЙ) ПЛАЗМЕ

### 3.1. Фазовые диаграммы в диссипативных системах

В диссипативных системах важную роль играет нелинейная динамика [?], которая проявляется в таких системах как: нелинейные осцилляторы, квазирегулярное движение, странные аттракторы и хаос [?, ?, ?].

Невзаимность сил может играть ключевую роль в динамике активной материи [?] или таких многоагенных систем, как: крабы [?], насекомые [?], косяки рыб [?], стаи животных [?] или животные клетки [?]. На сегодняшний день данные системы привлекают к себе наибольший интерес с точки зрения межчастичных взаимодействий в диссипативных многочастичных системах. Несмотря на это, до сих пор плохо изучен вопрос того, как изменения в силе внутричастичных взаимодействиях влияют на динамику таких систем.

Известно, что в коллоидных суспензиях и пылевой плазме эффективные взаимодействия могут быть невзаимными, так как они помещены в неравновесную среду [?, ?]. Примерами таких сред могут быть: оптические лучи, потоки [?, ?, ?, ?], диффузиофорез [?, ?, ?] и плазменные вейки [?, ?, ?, ?, ?, ?, ?, ?].

Взаимодействия, вызванные потоками плазмы, являются невзаимными, что приводит к резким и фундаментальным изменениям в динамике внутри диссипативных систем. Эти изменения регулируются выделением энергии и диссипацией [?] и могут привести к многотемпературным стационарным состояниям [?], одно- и двухступенчатой термической активации [?, ?, ?], термоакустической неустойчивости [?] или бистабильности [?].

В качестве модельной системы, способной к плавлению и термической активации, обычно рассматривают монослой заряженных микрочастиц в потоке плазмы. Рассмотрим, например, частицы, взаимодействующие посредством отталкивающего потенциала Юкавы (Дебая-Хукеля), где нересепрокальность обеспечивается за счет плазменных вейков, образующихся под каждой частицей. Частицы помещают в параболическую потенциальную яму и моделируют в термостате Ланжевена []. Устойчивые состояния состояния получают с помощью моделирования MD (Molecular Dynamic Simulation) и с использованием

балансового подхода [?].

Если взять конкретные модель взаимодействия и плотность системы, то ее динамика определяется временем затухания  $\tau$ , частотой конфайнмента  $\Omega$  и температурой термостата  $T_{th}/T_m$ , которая нормируется на температуру плавления  $T_m$  соответствующего двумерного кристалла Юкавы).

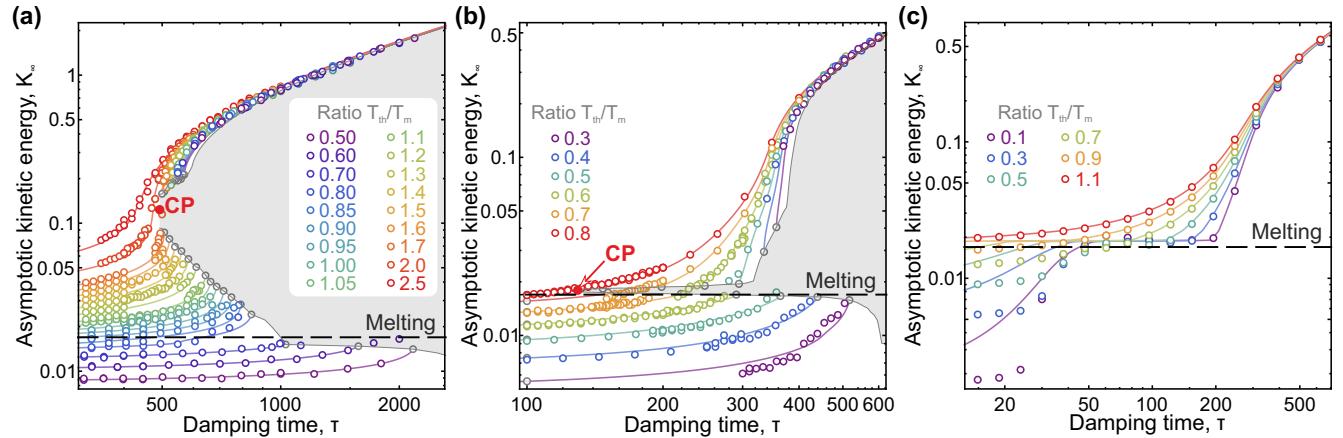


Рис. 3.1. Диссипативные фазовые диаграммы при различных значениях конфайнмента  $\Omega$

При сильных значениях конфайнмента система показывает диссипативный спинодальный распад между неактивированным и активированным состояниями и имеет диссипативную критическую точку (CP), показанную на рис. 3.1(а). В зависимости от энергии  $K_\infty/T_m \leq 3/2$ , система может существовать в жидком или твердом состояниях, а линии с одинаковыми значениями температуры плавления  $T_{th}$  играют роль изотерм. Диссипативный спинодальный распад возможен только в том случае, если  $T_{th}$  меньше критической температуры термостата. Так как критическая точка находится выше линии плавления в энергии  $K_\infty$ , жидкость может существовать в неактивированных или активированных состояниях при  $0.8 \leq T_{th}/T_m \leq 1.6$ .

При уменьшении силы конфайнмента критическая точка смещается вниз к линии плавления, как показано на рис.3.1(б). В данном случае значения энергии  $K_\infty$  в критической точке и при плавлении практически совпадают, и неактивированное жидкое состояние становится неустойчивым. При дальнейшем уменьшении величины конфайнмента  $\Omega$  фазовая диаграмма резко меняется, как показано на рис.3.1(с). Для  $\Omega^2 = 9$  средняя энергия  $K_\infty(\tau)$  вблизи линии плавления превращается в вертикальную линию при  $T_{th}/T_m \leq 0.6$ , что говорит о значительных изменениях в динамике системы между  $\Omega^2 = 9.75$  и  $\Omega^2 = 9$ . В

связи с этим изучение влияния силы конфайнмента на вид спектра элементарных возбуждений и мощности энерговыделения является важной и актуальной проблемой.

Диссипативные фазовые диаграммы показаны на рис 3.1, где асимптотические значения средней кинетической энергии на одну частицу  $K_\infty$  были получены при различных  $\tau$ ,  $T_{th}/T_m$ , и различных значениях конфайнмента ( $\Omega = 11.25, 9.75, 9.0$ ). Пунктирные черные линии соответствуют линии плавления  $K_\infty/T_m = 3/2$ , где  $K$  в данном случае играет роль, аналогичную температуре. Серые зоны, полученные с помощью балансового подхода, являются областями диссипативного спинодального распада, в которых система термически неустойчива. Важно, что результаты, полученные моделированием MD, хорошо согласуются с балансовым подходом (сплошная линия). Расхождения наблюдаются только на низких значениях  $K_\infty$  и  $\tau$  и обусловлены особенностями энергии высвобождение при нестабильности связи мод [?, ?].

## 3.2. Высвобождение энергии

Устойчивое состояние диссипативной системы определяется балансом между энергиами выделения и диссипации [?], который в данном случае обеспечивается невзаимностью взаимодействия и демпфированием. Диссипация контролируется скоростью затухания и температурой термостата, а величина конфайнмента влияет на возбуждения в системе внутри плоскости и перпендикулярно ей, таким образом влияя на мощность энерговыделения.

Мощность высвобождения энергии при различных значениях конфайнмента  $\Omega^2$  показана на рис.3.2(а), где пунктирная черная линия показывает, где находится линия плавления. На рис.3.2(а) так же можно видеть зазор  $\Delta P$  между мощностью высвобождения энергии в кристалле и жидкости на линии плавления. В кристалле  $\Delta P = 0$ , энергия не высвобождается при  $\Omega^2 > \Omega_*^2 \approx 9.5$ , и  $P_{NR}$  монотонно зависит от  $K$ . Величина  $\Delta P$  становится положительной в  $\Omega^2 \leq \Omega_*^2$  и растет приблизительно линейно, как показано сплошной красной линией на вставке на рис.3.2(а).

В этом диапазоне значений  $\Omega^2$  высвобождение энергии в кристалле становится значительно больше, чем в жидкости, и стабильно растет при  $\Omega^2 \rightarrow 9.0$ , что приводит к  $\Delta P > 0$ . Это означает, что при одних и тех же условиях кри-

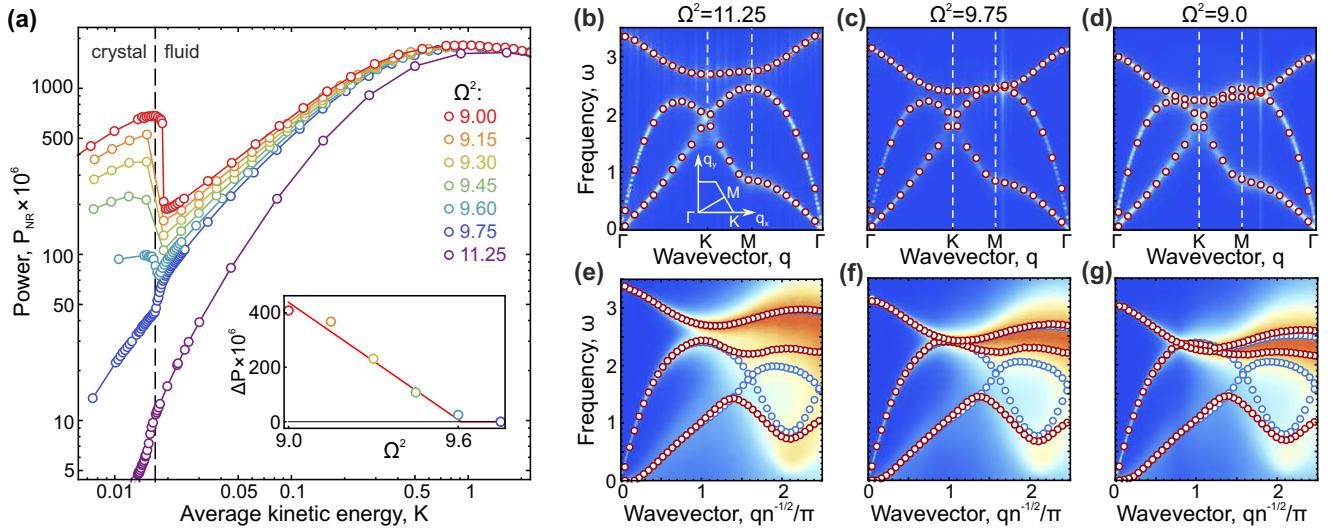


Рис. 3.2. Мощность энергии высвобождения и спектры возбуждения при различных значениях конфайнмента

сталл термически активируется, а жидкость – нет.

При  $\Omega^2 \approx \Omega_*^2$  энергии высвобождения в кристалле и жидкости становятся равными возле линии плавления. Данное поведение можно более детально изучить с помощью дисперсионных соотношений  $\omega(q)$  в кристаллах и жидкостях, которые изображены на рис.3.2(b-g). При сильном значении конфайнмента продольные (оптические) ветви, лежащие вне плоскости, и акустические ветви, лежащие внутри плоскости, не пересекаются, как это видно на рис.3.2(b),(e). Однако, по мере приближения  $\Omega^2$  к  $\Omega_*^2$  ветви сближаются друг к другу и затем пересекаются при  $\Omega^2 \approx \Omega_*^2$ , способствуя сильному выделению энергии за счет их взаимодействия, что, как правило, характерно для невзаимных систем [?, ?, ?, ?], как показано на рис.2(c,d) и (f,g).

Спектры показаны на рис.3.2(c-g) синими и красными символами. Результаты, полученные различными подходами, хорошо согласуются друг с другом в кристалле и при малом  $q$ . При  $qn^{-1/2}/\pi \geq 1.5$  продольные и поперечные моды в жидкости пересекаются и становятся гибридизированными.

Таким образом, рост  $\Delta P$  в мощности энерговыделения коррелирует с пересечением оптических и продольных акустических мод в жидкости, которое отвечает за принципиальное изменение диссипативной фазовой диаграммы показано на рис. 3.2(b, c) при  $\Omega^2 = \Omega_*^2$ . На самом деле, зазор  $\Delta P$  в мощности  $P_{NR}(K)$ , как результат плавления, приводит к динамическому поведению системы (в динамике средней кинетической энергии  $K$ ), которое называется странным аттрактором.

### 3.3. Странный аттрактор

Увеличение разности  $\Delta P$  в мощности энергии высвобождения приводит к колебанию энергии  $K(t)$  вокруг плато, наблюдаемого на рис.3.1(с), что соответствует динамике странных аттракторов, которые, в свою очередь вызваны интерференцией активации и плавления. Данное поведение проиллюстрировано на рис.3.3, где на панели (а) изображены те же данные для  $K_\infty$  при  $T_{th} = T_m = 0.1$ , что и на рис.3.1(с), при которых плато находится в диапазоне  $40 \lesssim \tau \lesssim 200$ .

Как видно на рис.3.3(б), при малых и больших значениях  $\tau$ ,  $P_{NR}(K)$  и  $P_d(K)$  пересекаются в одной точке, которая соответствует устойчивому состоянию. Однако, при значении  $\tau = 97$ , которое соответствует выходу зависимости на плато (см. рис. ), система должна была находиться в устойчивом состоянии, в зазоре, как показано на рис. ,

При этом и кристалл, и жидкость становятся термически неустойчивыми: кристалл нагревается и стремится расплавиться, а жидкость охлаждается и стремиться застынуть. Значения  $K(t)$  испытывают колебания при  $\tau = 97$ , как показано на рис.3.3(с), в то время как при  $\tau = 30$  и  $247$  такого не наблюдается.

Проанализировать показанную динамику системы можно так же с помощью спектральной плотности мощности (Power Spectrum Density), которая описывает мощность как функцию, деленную на единицу частоты (см. рис. 3.3(д-ф)). Для вычислений мощности использовалось следующее выражение:

$PSD(\omega) = \int R(t') \exp(-i\omega t') dt'$ , где  $R(t') = \langle K(t) K(t + t') \rangle / \langle (t)^2 \rangle$ ,  $\langle \dots \rangle$  обозначает усреднение по ансамблю, а значение  $K(t)$ , соответствующее промежутку релаксации, отбрасывались.

Видно, что спектральные плотности одинаковы на малых и больших расстояниях, что демонстрирует наличие только тепловых колебаний и медленную релаксацию, в то время как при  $\tau = 97$  наблюдается широкий пик вокруг  $\omega \approx 1.35 \cdot 10^{-2}$ .

Как известно, хаотическая динамика может быть визуализирована с помощью зависимостей, типичных для анализа нелинейных систем [?], которые показаны на рис.3.3 в координатах  $\{K, \dot{K}, \dot{H}\}$ . При этом система эволюционирует, демонстрируя сильные апериодические колебания и хаотические скачки между кристаллическим и жидким состояниями, что называется странным аттрактором.

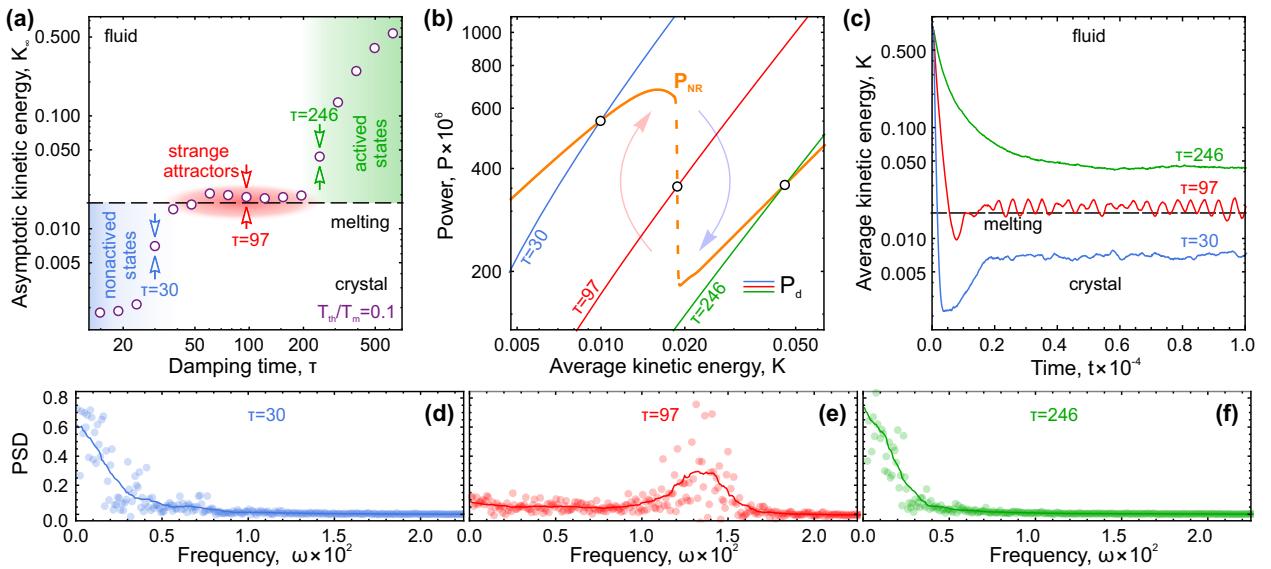


Рис. 3.3. Динамика странного аттрактора

Наблюдаемое хаотическое поведение может быть объяснено с помощью дискретно-временной модели [?], предполагающая выполнение следующих соотношений:

$$K_{n+1} = f(K_n), \quad (3.1)$$

$$f(K_n) = K + \eta(P_{NR}(K) - P_d(K)), \quad (3.2)$$

где  $K_n$  - кинетическая энергия в дискретный момент времени  $t_n$ ,  $f(K)$  - функция отображения а  $\eta$  – параметр модели, характеризующий время инерции системы.

Диаграмма каскада бифуркации удвоения периода для мощностей  $P_{NR}(K)$ ,  $P_d(K)$ , показанных на рис.3.3(b) (при  $\tau = 97$ ), изображена в цветовом формате для различных вероятностей от синего, что соответствует низкому значению, до красного, что соответствует высокому значению. Пример функции  $f(K)$  при  $\eta = 1.5$  показан во вставке рис. 3.3 сплошной красной линией.

Классический сценарий перехода к хаосу через каскады бифуркаций удвоения периодов [?] хорошо виден на рис.3.3. Это обусловлено формой функции  $f(K)$ , которая необратима и, следовательно, может привести к хаотическому поведению с образованием странных аттракторов. Рассматриваемая модельная система может демонстрировать при определенных условиях хаотические скачки между различными состояниями, спонтанное плавление и замерзание.

Можно провести оценку  $\eta \approx 11$ , соответствующую странному аттрактору

на рис.3.3 при  $\tau = 97$ , сравнивая величины флуктуаций кинетической энергии на рис.3.3(с). Малость отношения  $\eta/\tau \approx 0.11$ , которая означает, что шаг дискретизации, используемый в данной модели, существенно меньше характерного времени релаксации системы, оправдывает пригодность модели (1) для качественного анализа нелинейной динамики в данной системе.

### 3.4. Выводы

В данной главе были описаны диссипативные фазовые переходы в пылевой (комплексной) плазме. Был проведен анализ факторов, влияющих на устойчивость состояние диссипативной системы, было показано, что она определяется балансом между энергиами выделения и диссипации. Было обнаружено, что в результате плавления структурные корреляции на дальних расстояниях исчезают, и спектры флуктуаций изменяются скачкообразно, что играет решающую роль в поведении динамики системы. Было показано, что изменения структуры и вида спектров элементарных возбуждений приводят к образованию зазора в мощности энергии высвобождения между значениями в кристалле и жидкости на линии плавления. При попадании мощности диссипации в зазор активированный кристалл нагревается и имеет тенденцию плавиться, тогда как неактивированная жидкость охлаждается и имеет тенденцию замерзать, что приводит к появлению странного аттрактора. Таким образом, данные заключения позволили связать динамическое поведение странного аттрактора с взаимодействиями между отдельными частицами. И диссипативные фазовые диаграммы в таких системах могут быть легко рассчитаны с высокой точностью с помощью простого балансового подхода.