

Выводы

Показано, что при учете нелинейного экранирования фазовое состояние системы, определяемое по ее параметрам, может отличаться от фазового состояния системы, рассчитанного без учета эффекта нелинейного экранирования.

Работа поддержана РФФ, грант № 14-50-00124.

Список литературы

1. Фортов В.Е., Храпак А.Г., Якубов И.Т. Физика неидеальной плазмы. // Учеб.пособие. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2004, 528С.
2. Жуховицкий Д.И., Храпак А.Г., Якубов И.Т. // Химия плазмы 11 / Ред. Смирнов, М.:Энергоиздат, 1984, с.130-170.
3. Fortini A., Hynninen A.-P., Dijkstra M. Gas-liquid phase separation in oppositely charged colloids: stability and interfacial tension // J. Chem. Phys. 2006. Vol. 125. P. 094502.
4. Клумов Б.А., Морфилл Г.Е., Попель С.И. Формирование структур в запыленной ионосфере // ЖЭТФ 2005. Т. 127, вып.1. С.171-185.
5. Hamaguchi S., Farouki R.T. Dubin D. Triple point of Yukawa systems // Phys. Rev. E 1997. Vol. 56. P. 4671–4682.
6. Panagiotopoulos A.Z., Hynninen A.P. Disappearance of the Gas-Liquid Phase Transition for Highly Charged Colloids // Phys. Rev. Lett. 2007. 98. P.198301.
7. Martynova I.A., Iosilevskiy I.L. Macroions non-linear screening in complex plasma. //XXXII International Conference on Intense Energy Fluxes with Matter. Book of abstracts. Elbrus, Russia, 2017, p.382.

FEATURES OF MACROIONS SCREENING IN COMPLEX PLASMA

I.A. Martynova, I.L Iosilevskiy, A.A. Shagayda

Joint Institute for High Temperatures RAS, Moscow, Russia

Non-ideal complex plasma is a subject of intensive study for many decades. In the present paper we consider four systems of non-ideal complex plasma. First, it is discharged dusty plasma [1]. Its representative values are the following: macroion concentration $nz \sim 10^3 - 10^4 \text{ cm}^{-3}$, a macroion charge number (hereafter we will call it a macroion charge) $Z \sim 10^3 - 10^4$, macroion temperature $Tz \sim 1 - 2 \text{ eV}$, electron temperature $Te \sim 1 - 7 \text{ eV}$, positive microion temperature $Ti \sim 0.03 \text{ eV}$ (there are two sorts of microions here -- electrons with charge -1 and positive microions with charge +1), a macroion radius $Rz \sim 1 - 10 \text{ }\mu\text{m}$. Also, we consider two idealized systems: colloidal plasma [2] and CDP—plasma (plasma with condensed dispersed phase) [3]. Their representative charge is $Z \sim 10 - 10^3$. Temperatures of macro- and microions are equal. For example, temperature of CDP—plasma is about 2000-3000 K. The fourth considered system is dusty plasma in noctilucent clouds [4]. Maximum charge comes to be $Z \sim 100$ and, again, temperatures of macro- and microions can be considered as equal $Tz = Te = Ti = 0.03 \text{ eV}$. In the present paper we consider two-component electroneutral models which consist of finite size macroions and one sort of pointlike microions.

Non-ideal plasma is characterized by two dimensionless parameters Γ and κ , where Γ is Coulomb non-ideality parameter and κ is structural parameter

$$\Gamma \equiv \frac{(Ze)^2}{akT}, \quad \kappa \equiv \frac{a}{r_D}, \quad a \equiv (3/4\pi n_Z)^{1/3}, \quad (0.1)$$

where a is the Wigner-Zeitz radius, and $r_D = \left(\frac{e^2 \langle n_i \rangle}{kT_i} + \frac{e^2 \langle n_e \rangle}{kT_e} \right)^{-1/2}$ is the Debye radius, $\langle n_i \rangle$ is average concentration of positive microions, $\langle n_e \rangle$ is average concentration of electrons (or negative microions).

There is a well-known phase diagram of dusty plasma in $\kappa-\Gamma$ plane [5]. The effective potential of macroions Z is widely assumed to be of the Yukawa form

$$\Phi_{YU} \approx \frac{Ze}{r} \exp(-r/r_D). \quad (0.2)$$

The Poisson–Boltzmann equation should be written as

$$\Delta\varphi(r) = -4\pi\Delta\rho(r) = 4\pi e \{n_{i0} \exp(-r/r_D) - n_{e0} \exp(+r/r_D)\}, \quad (0.3)$$

where n_{i0} is positive microion concentration at infinity, n_{e0} is electron concentration at infinity (or at the border of the cell).

Then a linearization condition $\frac{Ze^2}{R_Z T} \geq 1$ should be used.

We showed that as one considers non-linear screening a phase state can be different (see fig.1).

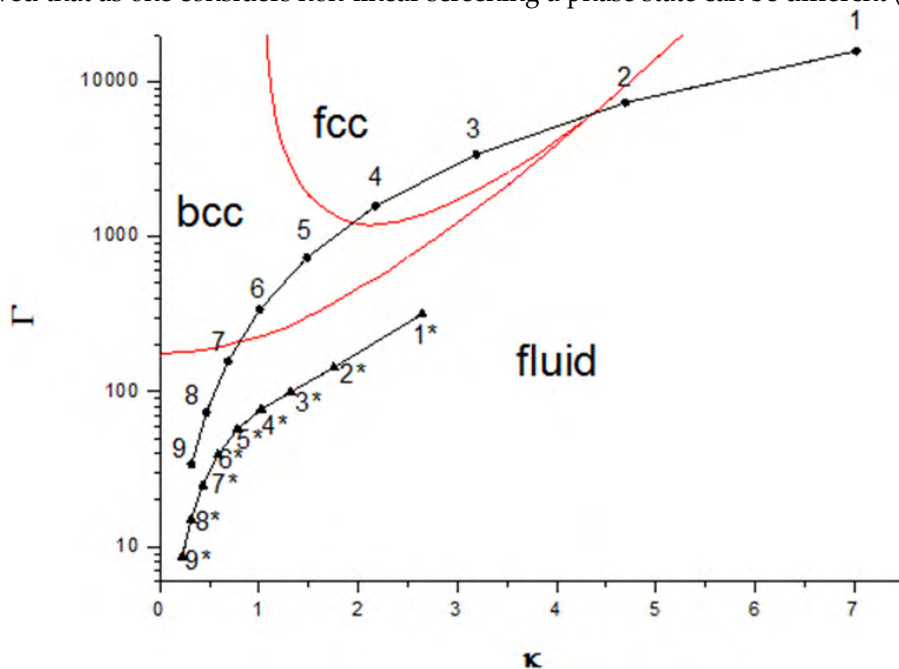


Figure 1. Change the phase state in the case of non-linear screening consideration. Points 1-2-3-4-5-6-7-8-9 are plotted as one does not consider non-linear screening. Points 1*-2*-3*-4*-5*-6*-7*-8*-9* are plotted as one considers non-linear screening. Red lines are phase boundaries of the initial phase diagram [5].

Conclusions

We showed that a real phase state can differ significantly as one takes into account non-linear screening effect.

The work is supported by the Russian Science Foundation, Grant No 14-50-00124.

References

1. Fortov V.E., Khrapak A.G., Yakubov I.T. Physics of non-ideal plasma. // Teaching book. – M.: FIZMATLIT, 2004, 528 pages.

2. Zhukhovitskiy D.I., Khrapak A.G., Yakubov I.T. // Plasma Chemistry 11 / Ed. Smirnov B., M.: ENERGOIZDAT, 1984, pp.130-170.
3. Fortini A., Hynninen A.-P., Dijkstra M. Gas-liquid phase separation in oppositely charged colloids: stability and interfacial tension // J. Chem. Phys. 2006. Vol. 125. P. 094502.
4. Klumov B.A., Morfill G.E., Popel S.I. Formation of structures in a dusty ionosphere. // JETP 2005. V. 100. pp.152-164.
5. Hamaguchi S., Farouki R.T. Dubin D. Triple point of Yukawa systems // Phys. Rev. E 1997. Vol. 56. P. 4671-4682.

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ УДАРНЫХ АДИБАТ ЭНЕРГОЕМКИХ МАТЕРИАЛОВ

С.А. Козлова¹, С.А. Губин¹, И.В. Маклашова¹, Ю.А. Богданова¹, А.А. Селезнев^{1,2}

¹ Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва, Россия

² РФЯЦ-ВНИИЭФ, Саров, Россия

Введение

Метод молекулярной динамики (МД) основан на прямом вычислении координат и скоростей ансамбля частиц (атомов или молекул) в процессе эволюции данного ансамбля частиц во времени. МД метод широко используется для моделирования различных физических процессов во многих атомных ансамблях, что позволяет получать достоверную информацию о свойствах исследуемых веществ. МД метод позволяет наблюдать на атомном уровне изменение структуры материала в заданном равновесном или неравновесном состоянии. Это особенно важно для энергетических материалов (ЭМ), так как детальное описание свойств таких материалов может выявить фундаментальный механизм, контролирующий инициирование детонации энергетического материала. Результаты МД моделирования, при аккуратном использовании метода, имеют достоверность, сопоставимую с экспериментальными данными. Метод МД моделирования применяется в физике, биохимии, биофизики и материаловедении, позволяя, в некоторых случаях, получить информацию о поведении вещества в экстремальных условиях, которую невозможно в настоящее время получить экспериментально.

В настоящей работе моделирование проводилось с использованием МД пакета *LAMMPS* (<http://lammps.sandia.gov>). Возможности, заложенные в программном пакете *LAMMPS*, позволяют исследовать процессы химического взаимодействия и предсказывать поведение различных материалов в условиях воздействия экстремальных давлений и температур. Понимание механизма ударно-волнового (УВ) сжатия молекулярных кристаллов (МК) представляет большой интерес. Это связано с тем, что большинство энергетических материалов являются молекулярными кристаллами. Из-за сильной сжимаемости молекулярных кристаллов, их низкого порога пластической деформации, и несимметричности эти кристаллы могут претерпевать различные физические и химические изменения под воздействием УВ сжатия.

1. Реакционное силовое поле ReaxFF

При МД моделировании статического и ударно-волнового сжатия монокристаллов рассматриваемых ЭМ использовалось реакционное силовое поле ReaxFF (Reactive Force Field). [1] Силовое поле ReaxFF разработано для описания химического взаимодействия, диссоциации и формирования химических связей, а также свойств дефектов и неидеальной поверхности