

КОЭФФИЦИЕНТЫ ТЕПЛОПЕРЕНОСА В ДВУМЕРНЫХ СИСТЕМАХ ЮКАВЫ (ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ)

Ю. В. Хрусталева*, О. С. Ваулина^{a,b}

^aОбъединенный институт высоких температур Российской академии наук
127412, Москва, Россия

^bМосковский физико-технический институт (государственный университет)
141700, Долгопрудный, Московская обл., Россия

Поступила в редакцию 18 сентября 2012 г.

Получены новые данные о теплопереносе в двумерных системах типа Юкавы. Представлены результаты численного исследования теплопроводности для равновесных систем с параметрами, близкими к условиям лабораторных экспериментов в пылевой плазме. Для вычисления коэффициентов теплопереноса использовались формулы Грина–Кубо. Исследовано влияние диссипации (внутреннего трения) на процессы теплопереноса в неидеальных системах. Предложены новые аппроксимации для коэффициентов теплопроводности и температуропроводности для неидеальных диссипативных систем. Приведено сравнение полученных результатов с существующими экспериментальными и численными данными.

DOI: 10.7868/S0044451013050285

1. ВВЕДЕНИЕ

Исследование транспортных свойств неидеальных систем представляет значительный фундаментальный и прикладной интерес в различных областях физики (физика плазмы, физика медицины, биологическая физика, физика полимеров и т. д.) [1–5]. Особое внимание вызывает исследование физических характеристик двумерных и квазидвумерных систем. Образование таких систем, состоящих из нескольких (от 1 до 10) протяженных слоев заряженных пылевых частиц, часто наблюдается в условиях лабораторной пылевой плазмы высокочастотного (ВЧ) емкостного разряда. Помимо фундаментальных аспектов исследование таких структур представляет особый прикладной интерес для нано- и микротехнологий, а также при разработке и использовании комбинированных топлив, покрытий и материалов с заданными свойствами [3–5].

Транспортные коэффициенты являются фундаментальными константами, которые отражают природу межчастичного взаимодействия и фазовое состояние систем. Методики точного теоретического расчета транспортных коэффициентов в неидеаль-

ных жидких средах в настоящее время отсутствуют. Для анализа физических свойств таких систем обычно применяют компьютерное моделирование с использованием различных потенциалов межчастичного взаимодействия, а также разные полуэмпирические подходы, основанные на элементарной кинетической теории или на аналогиях физических свойств жидкости и твердого тела [1–5].

Пылевая (комплексная) плазма представляет собой ионизованный газ, содержащий заряженные частицы конденсированного вещества (пылевые частицы, макрочастицы). Такая плазма широко распространена в природе: в хвостах и атмосферах комет, в кольцах планет-гигантов и др., и образуется в ряде технологических процессов: при сгорании твердых топлив, комбинированных топлив, в состав которых входят активные металлы, при травлении и напылении, в производстве наночастиц и т. д.

Лабораторная пылевая плазма является частично ионизованным газом, содержащим частицы дисперсной фазы микронных размеров, которые могут приобретать значительный электрический заряд и формировать устойчивые пылевые структуры, подобные жидкости или твердому телу по характеру движения составляющих частиц и либо близкие к однородным трехмерным системам, либо имеющие сильно анизотропный квазидвумерный харак-

*E-mail: yuri.khrustalov@gmail.com

тер. Благодаря своему размеру пылевые частицы и их движение могут наблюдаться визуально и могут быть сняты видеокамерой. Это позволяет детально исследовать их динамику и делает возможной реализацию принципиально новых методов диагностики параметров пылевых частиц и окружающей их плазмы. В настоящее время значительный интерес вызывают исследования физических свойств пылевой плазмы, где столкновения пылевых частиц с атомами или молекулами окружающего их нейтрального газа могут оказывать существенное влияние на транспортные характеристики пылевой среды [3–5].

С точки зрения исследования свойств пылевой плазмы особый интерес представляет экранированный кулоновский потенциал (потенциал типа Юкавы)

$$\phi(r) = \frac{(Ze)^2}{r} \exp\left(-\frac{r}{\lambda}\right),$$

где r — расстояние между частицами, Ze — их заряд, а λ — длина экранирования. Кроме того, упомянутая модель достаточно часто используется для моделирования отталкивания в кинетике взаимодействующих частиц (например, в медицине, биологии или физике полимеров) [1, 2].

В отличие от результатов численного моделирования процессов диффузии и вязкости в неидеальных системах Юкавы, которые представлены в ряде работ [6–10], численные данные о коэффициентах теплопереноса в таких системах в настоящее время весьма малочисленны (практически отсутствуют). Для моделирования процессов теплопроводности в неидеальных системах частиц в настоящее время используется два основных метода молекулярной динамики. Один из них — неравновесный метод (Non-Equilibrium Molecular Dynamics, NEMD), основанный на применении закона Фурье для теплового потока и включающий в себя моделирование градиентов температур. Второй, равновесный подход (Equilibrium Molecular Dynamics, EMD), основан на применении соотношений Грина–Кубо в отсутствие каких-либо полей или других факторов, возмущающих систему частиц.

Отметим, что в настоящее время в научной литературе представлены расчеты теплопроводности только для трехмерных (3D) дисперсионных систем в отсутствие диссипации, а именно: для неравновесных систем Юкавы [11, 12] для величин параметра экранирования $\kappa = r_p/\lambda < 6$, где r_p — среднее межчастичное расстояние, (см. ниже рис. 1, кривые 1 и 2) и для равновесных систем с другими типами

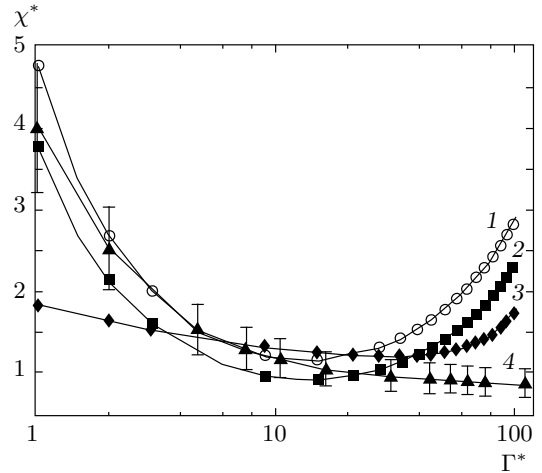


Рис. 1. Нормированная величина коэффициента теплопроводности $\chi^* = \chi/k_B n \omega^* r_p^2$ для трехмерных дисперсионных систем ($\nu_{fr} = 0$) в зависимости от параметра Γ^* для случаев NEMD-моделирования: кривая 1 — [11], кривая 2 — [12], и EMD-моделирования: кривая 3 — уравнение (13) для трехмерных чисто дисперсионных систем ($\nu_{fr} = 0$); кривая 4 — результаты вычислений настоящей работы для двумерных диссипативных систем Юкавы в случае слабой диссипации ($\nu_{fr} \ll \omega^*$, см. разд. 5)

изотропных потенциалов, отличающихся от модели Юкавы [2] (см. рис. 1, кривая 3).

Следует особо подчеркнуть, что процессы теплопереноса по большей части изучены только в газообразных и кристаллических 2D- и 3D-системах [13]. Что же касается теплопроводности в двумерных жидкостях, то к настоящему моменту известно только две теоретические работы. Первая из них посвящена численному моделированию тепловых свойств чисто дисперсионной системы жестких дисков (коэффициент трения для которых равен нулю: $\nu_{fr} = 0$) [14]. Вторая работа — это теоретическое исследование [15], где описаны трудности корректного определения коэффициентов теплопроводности для систем без трения, связанные с медленным (степенным) затуханием временных автокорреляционных функций тепловых потоков.

Первые результаты экспериментальных исследований тепловых свойств пылевой плазмы представлены в работах [16–18]. Так, в работе [16] изучалась теплопроводность в двумерных кристаллических пылевых структурах, формирующихся в приэлектродном слое ВЧ-разряда. Исследования процессов теплопереноса для слабо коррелированных

трехмерных многослойных пылевых структур описаны в работе [17]. Измерения коэффициентов теплопроводности жидкостного пылевого монослоя в условиях, близких к условиям кристаллизации плазменно-пылевой системы, представлены в работе [18].

Во всех упомянутых экспериментах наблюдалась слабая зависимость коэффициентов теплопроводности от температуры пылевой компоненты. Кроме того, в работе [18] было отмечено отсутствие выраженного скачка коэффициента теплопроводности при переходе двумерного пылевого монослоя из жидкостного состояния в кристаллическое.

В настоящей работе представлены результаты численного исследования процессов теплопроводности в двумерных диссипативных ($\nu_{fr} \neq 0$) системах типа Юкавы.

2. ОСНОВНЫЕ ПАРАМЕТРЫ

Для сравнительного анализа существующих численных данных, описывающих физические характеристики неидеальных систем, удобно ввести два безразмерных параметра, которые полностью описывают процессы массопереноса и фазовое состояние для систем с широким кругом парных изотропных потенциалов [8, 9, 17], а именно, эффективный параметр неидеальности

$$\Gamma^* = \frac{a_1 r_p^2 \phi''(r_p)}{2T} \quad (1)$$

и параметр масштабирования

$$\xi = \frac{\omega^*}{\nu_{fr}}. \quad (2)$$

Здесь

$$\omega^* = \left| \frac{a_2 \phi''(r_p)}{2\pi M} \right|^{1/2}, \quad (3)$$

M — масса пылевой частицы, T — температура пылевой компоненты, ν_{fr} — коэффициент трения (т. е. эффективная частота столкновений пылевых частиц с нейтралами окружающего газа), $\phi'(r_p)$ и $\phi''(r_p)$ — соответственно первая и вторая производная парного потенциала в точке среднего межчастичного расстояния $r = r_p$, a_1 и a_2 — безразмерные коэффициенты: $a_1 = a_2 = 1$ для 3D-систем и $a_1 = 1.5$, $a_2 = 2$ для 2D-структур.

Указанные параметры отвечают за структурные, транспортные и термодинамические свойства диссипативных систем с изотропными парными потенциалами в том случае, если парный потенциал взаимодействия $\phi(r)$ удовлетворяет условию [9]

$$2\pi > \left| \frac{\phi''(r_p) r_p}{\phi'(r_p)} \right|. \quad (4)$$

При этом пространственная корреляция между частями системы не зависит от ν_{fr} и целиком определяется величиной параметра Γ^* в диапазоне его значений от $\Gamma^* \sim 10$ до точки кристаллизации системы Γ_c^* (т. е. до точки формирования идеального кристалла, в котором коэффициент диффузии частиц $D = 0$). Для двумерной неидеальной системы, формирующей в кристаллическом состоянии примитивную треугольную решетку hp , величина $\Gamma_c^* = \Gamma_{2D}^* = 154 \pm 4$ [8, 9]. Для трехмерных систем, образующих в процессе кристаллизации объемно-центрированную кубическую решетку bcc , $\Gamma_c^* = \Gamma_{3D}^* = 102 \pm 3$ [4, 9].

Для систем типа Юкавы эффективный параметр неидеальности (1) может быть представлен в форме [8, 9]

$$\Gamma^* = a_1 \Gamma \left(1 + \kappa + \frac{\kappa^2}{2} \right) \exp(-\kappa), \quad (5)$$

где $\Gamma = (Ze)^2 / Tr_p$ — кулоновский параметр неидеальности, а $\kappa = \lambda / r_p$ — параметр экранирования. Характерную частоту (3) в этом случае можно записать в виде [8, 9]

$$\omega^* = \left\{ a_2 (Ze)^2 \left(1 + \kappa + \frac{\kappa^2}{2} \right) \frac{\exp(-\kappa)}{\pi r_p^3 M} \right\}^{1/2}. \quad (6)$$

3. СУЩЕСТВУЮЩИЕ ПРИБЛИЖЕНИЯ

Коэффициенты переноса (такие как коэффициенты диффузии D , теплопроводности χ , вязкости η и т. д.) характеризуют термодинамическое состояние анализируемой системы и отражают природу межчастичного взаимодействия. Для газов коэффициенты тепловой диффузии, кинематической вязкости $\nu = \eta / \rho$ и температуропроводности $\theta = \chi / \rho c_P$ близки по величине и могут быть записаны в виде известных аналитических соотношений (здесь $\rho = Mn$ — плотность, M и n — соответственно масса и концентрация частиц, $c_P = C_P k_B / M$ — удельная теплоемкость при постоянном давлении P , C_P — безразмерный коэффициент теплоемкости) [1–3]. К сожалению, такие простые соотношения успешно описывают процессы переноса только в случае существенно слабых взаимодействий между частицами системы, близкой к идеальному газу. Наличие аналитических аппроксимаций, описывающих транспортные коэффициенты для жидкого состояния вещества, позволило бы использовать известные гидродинамические модели для анализа распространения

волн, сдвиговых течений, формирования вихрей и различных неустойчивостей в сильно неидеальных средах.

В случае малых отклонений исследуемой системы от состояния статистического равновесия кинетические коэффициенты линейных транспортных процессов могут быть найдены из хорошо известных формул Грина–Кубо [2], которые были получены на основе теории марковских стохастических процессов в предположении линейного отклика системы на ее слабое возмущение. В соответствии с указанным подходом, коэффициенты диффузии D и теплопроводности χ в квазиравновесных системах могут быть записаны как

$$D = \int_0^{\infty} \langle v_x(0)v_x(t) \rangle dt, \quad (7)$$

$$\chi = \frac{k_B n}{T^2} \int_0^{\infty} \langle \delta j_x(0)\delta j_x(t) \rangle dt. \quad (8)$$

Здесь k_B — постоянная Больцмана; угловые скобки $\langle \dots \rangle$ обозначают усреднение по ансамблю, состоящему из N частиц, и по всем интервалам времени длительностью t ; $\langle v_x(0)v_x(t) \rangle$ — автокорреляционная функция скорости v_x частиц в некотором выбранном направлении x [9]; $\langle \delta j_x(0)\delta j_x(t) \rangle$ — автокорреляционная функция флуктуаций вектора теплового потока \mathbf{j} в выбранном направлении x [2].

Величина $j_x(t)$ (т. е. x -компонента вектора \mathbf{j}) для системы, состоящей из N взаимодействующих частиц, может быть представлена как сумма кинетической части, $j_{Kx}(t)$, потенциальной части $j_{Ux}(t)$, зависящей от вида потенциала парного взаимодействия, и части $j_{Px}(t)$, связанной с собственным (внутренним) давлением частиц в системе [2]:

$$\begin{aligned} j_x(t) &= \frac{1}{2} v_x M \mathbf{v}^2 + \frac{1}{2} v_x \sum_{k:r_k < R_c} \phi(r_k) - \\ &- \frac{s}{4} \sum_{k:r_k < R_c} \frac{\phi'(r_k)}{r_k} (\mathbf{r}_{k\alpha} \cdot \mathbf{v}_{k\alpha}) r_{kx} = \\ &= j_{Kx}(t) + j_{Ux}(t) + j_{Px}(t). \end{aligned} \quad (9)$$

Здесь s — размерность системы. Соотношение (9) может быть записано для каждой частицы в системе. Тогда r_k — это расстояние от данной частицы до ее k -го соседа, R_c — расстояние, на котором можно пренебречь вкладом частиц в суммы соотношения (9). Суммирование по всем частицам, окружающим данную частицу и влияющим на ее движение,

будем ниже для краткости обозначать \sum_{vic} и называть суммированием по ближайшим соседям; индекс суммирования в этом случае будет обозначаться через k .

Выполняя для каждого момента t усреднение соотношения (9) по всему ансамблю частиц, получим зависимость вектора макроскопического теплового потока от времени в расчете на одну частицу — элементарный тепловой поток. Флуктуации элементарного теплового потока

$$\delta j_x(t) = \delta j_{Kx}(t) + \delta j_{Ux}(t) + \delta j_{Px}(t),$$

используемые в (8), могут быть вычислены как отклонение мгновенного значения элементарного потока $j_x(t)$ от его среднего значения $\langle j_x(t) \rangle$ по каноническому ансамблю Гиббса:

$$\delta j_x(t) = j_x(t) - \langle j_x(t) \rangle, \quad (10a)$$

$$\delta j_{Kx}(t) = j_{Kx}(t) - \langle j_{Kx}(t) \rangle, \quad (10b)$$

$$\delta j_{Ux}(t) = j_{Ux}(t) - \langle j_{Ux}(t) \rangle, \quad (10c)$$

$$\delta j_{Px}(t) = j_{Px}(t) - \langle j_{Px}(t) \rangle. \quad (10d)$$

Поскольку при выводе соотношений (7) и (8) не делается предположений о характере теплового движения частиц, они справедливы как для газов, так и для неидеальных сред. Однако в случае неидеальных сред расчет коэффициентов переноса при помощи указанных формул не допускает аналитических решений. И, как уже было упомянуто, для прогнозирования транспортных характеристик таких систем в настоящее время широко используются методы численного моделирования задачи и различные полуэмпирические подходы [1–5].

Численное моделирование процессов переноса в простых одноатомных жидкостях с широким кругом потенциалов взаимодействия частиц показывает, что в случае, когда длина свободного пробега l_{dd} заряженных частиц между их столкновениями сравнима со средним межчастичным расстоянием r_p , кинетические коэффициенты D и χ можно записать в виде [2]

$$D \approx 0.6 r_p V_T \exp(-0.8\sigma), \quad (11)$$

$$\chi \approx 1.5 k_B n r_p V_T \exp(-0.5\sigma). \quad (12)$$

Здесь $V_T = (T/M)^{1/2}$, σ — величина, пропорциональная конфигурационной энтропии [2]. Значение σ рассчитывается как сумма спектральных (частотных) характеристик системы и зависит от температуры и типа потенциала парного взаимодействия [19]. Неоднозначность в определении величины σ легко устранить путем совместного решения уравнений (11),

(12). При этом для коэффициента теплопроводности можно получить следующее соотношение:

$$\chi \approx 1.5k_B n r_p V_T \left(\frac{0.6r_p V_T}{D} \right)^{5/8}. \quad (13)$$

Нормированные значения $\chi^*(\Gamma^*) = \chi/k_B n \omega^* r_p^2$ в зависимости от эффективного параметра неидеальности Γ^* для чисто дисперсионных систем Юкавы ($\nu_{fr} = 0$) представлены на рис. 1. Кривые 1 и 2 описывают результаты неравновесных расчетов для систем с параметром экранирования $\kappa < 6$ [11, 12]. Кривая 3 — численные данные, полученные для равновесных систем по формуле (13), где для коэффициента диффузии D использовалась аппроксимация, предложенная в работе [20]:

$$D^* = 1 - \frac{1}{s} \left[\frac{4\varepsilon}{1 + \exp \varepsilon} + \frac{s-1}{s} \frac{\Gamma^*}{\Gamma_c^*} \right], \quad (14)$$

где

$$D^* = D(\nu_{fr} + \omega^*)M/T, \quad \varepsilon = 0.5 + (s - 0.5)\Gamma^*/\Gamma_c^*,$$

$\Gamma_c^* = \Gamma_{2D}^*$ для двумерных систем и $\Gamma_c^* = \Gamma_{3D}^*$ — для трехмерных.

Нормированная величина $\theta^* = \chi/c_P \rho \omega^* r_p^2$ для коэффициента температуропроводности θ системы в зависимости от эффективного параметра неидеальности Γ^* для случаев NEMD- и EMD-моделирования показана на рис. 2.

Здесь для вычисления коэффициента температуропроводности θ принимается во внимание, что в большинстве случаев для жидких и твердых сред разность $C_P - C_V$ является незначительной из-за низкой сжимаемости конденсированных сред [2, 20]. Таким образом, для оценки C_P , учитывая, что $C_P \approx C_V$, можно использовать аппроксимацию для величины теплоемкости при постоянном объеме C_V , предлагаемую в работе [20] для неидеальных систем с параметрами неидеальности Γ^* в диапазоне от 10 до Γ_c^* :

$$C_V^a = \frac{s}{2} + \frac{2 + 4(\varepsilon - 0.5)\varepsilon \exp \varepsilon / (1 + \exp \varepsilon)}{1 + \exp \varepsilon}. \quad (15)$$

Данная аппроксимация будет также использована ниже для анализа результатов численных исследований (см. разд. 5) и для сравнения полученных данных с существующими численными и экспериментальными результатами (см. разд. 6).

Дополнительно отметим, что согласно теории флуктуаций связь между величиной C_V и плотно-

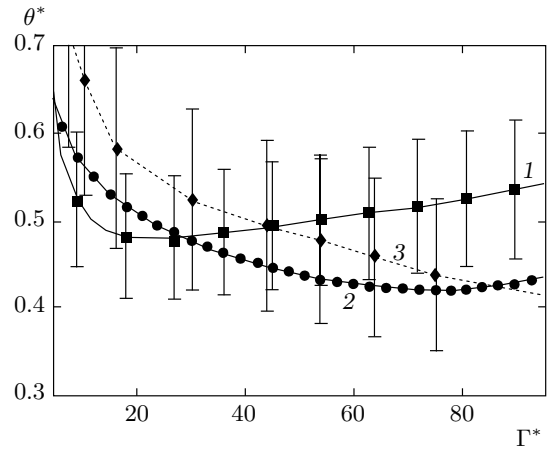


Рис. 2. Нормированная величина коэффициента температуропроводности $\theta^* = \chi/c_P \rho \omega^* r_p^2$ в зависимости от параметра Γ^* для 3D-систем при $\nu_{fr} = 0$: кривая 1 — для случаев NEMD-моделирования, усредненные данные работ [11, 12], кривая 2 — для случаев EMD-моделирования, уравнение (13) для 3D-систем при $\nu_{fr} = 0$; кривая 3 — результаты вычислений настоящей работы для диссипативных 2D-систем Юкавы при $\xi \rightarrow \infty$

стью флуктуаций внутренней энергии системы [21] можно записать в виде следующего соотношения:

$$C_V = \frac{\langle (M \mathbf{v}^2 + \sum \phi(r_k) - \langle M \mathbf{v}^2 + \sum \phi(r_k) \rangle)^2 \rangle}{4T^2}. \quad (16)$$

Здесь суммирование понимается так же, как определено в формуле (9), а усреднение — так же, как в (8).

Обсудим разницу тепловых свойств системы, которая обнаруживается при различных методах (NEMD и EMD) моделирования (см. рис. 1 и 2). В первую очередь необходимо отметить, что в случае реальных одноатомных жидкостей в условиях, близких к точке кристаллизации системы, величина коэффициента теплопроводности обычно меняется в пределах 30%–35% в диапазоне температур между $\sim T_c$ и $\sim 2T_c$ (что соответствует значениям Γ^* между ~ 100 и ~ 50), см., например, данные по щелочным металлам [22]. Такие изменения находятся в соответствии с результатами EMD-моделирования. Для данных NEMD-моделирования наблюдаемые отклонения коэффициентов теплопроводности, по крайней мере, в два раза выше и оставляют около 70%.

Одной из причин существующей разницы в результатах NEMD- и EMD-моделирования могут являться численные ошибки, величина которых оце-

нивается в работах [11, 12] приблизительно как 20 % (диапазон этих ошибок показан на рис. 2). Другая причина — возможное влияние градиента концентрации частиц в случае NEMD-моделирования, поскольку для механического равновесия в системе в данном случае необходимо постоянство давления P , а не концентрации частиц n . Из-за такого постоянства P при наличии температурных градиентов величина концентрации в системе может заметно меняться. В отличие от NEMD-вычислений, большинство EMD-вычислений (см. разд. 4 и 5) выполняются при постоянной величине средней концентрации n взаимодействующих частиц.

В заключение данного раздела отметим, что для случая $\nu_{fr} \ll \omega^*$ (т. е. $\xi = \omega^*/\nu_{fr} \rightarrow \infty$) можно предположить, что результаты моделирования методом молекулярной динамики слабо диссипативных систем и одноатомных жидкостей (где $\nu_{fr} = 0$) должны совпадать. Возможность применения соотношения (13) для случая диссипативных систем $\nu_{fr} \neq 0$ обсуждалась в работе [20]. Однако, как будет показано ниже (см. разд. 5), данное предположение оказалось ошибочным.

4. ПАРАМЕТРЫ ЧИСЛЕННОЙ ЗАДАЧИ

Моделирование транспортных процессов, связанных с движением макрочастиц в пылевой плазме, требует применения метода молекулярной динамики, основанного на решении системы дифференциальных уравнений с силой Ланжевена \mathbf{F}_L . Случайные силы \mathbf{F}_L являются одной из двух компонент механизма обмена энергией между термостатом и ансамблем пылевых частиц, т. е. между пылевой компонентой комплексной плазмы и ее термостатом. Второй компонентой являются процессы диссипации (внутреннего трения). Для моделирования равновесных процессов в однородных протяженных облаках взаимодействующих макрочастиц наряду с силами \mathbf{F}_L в системе из N_p уравнений движения (где N_p — количество частиц) необходимо учитывать силы парного межчастичного взаимодействия \mathbf{F}_{int} . Здесь мы не учитываем в явном виде силы, действующие на пылевое облако со стороны ловушки, считая пылевую среду протяженной. На практике это означает применение периодических граничных условий. Таким образом, мы можем выписать уравнения движения пылевых частиц в виде

$$M \frac{d^2 \mathbf{r}}{dt^2} = \sum_{vic} F_{int}(\Delta r) \frac{\Delta \mathbf{r}}{\Delta r} - M \nu_{fr} \frac{d\mathbf{r}}{dt} + \mathbf{F}_L. \quad (17)$$

Здесь $F_{int}(r) = -\partial\phi(r)/\partial r$, $\Delta \mathbf{r} = \mathbf{r} - \mathbf{r}_k$, $\Delta r = |\Delta \mathbf{r}|$ — расстояние между данной частицей и ее k -м соседом.

Для корректного моделирования случайных сил шаг интегрирования Δt должен удовлетворять условию $\Delta t \ll 1/\max\{\nu_{fr}, \omega^*\}$, где $\omega^* \approx |\phi''(r_p)/\pi M|^{1/2}$ — характерная частота столкновений частиц с концентрацией n и зарядом Ze , $\phi''(r_p)$ — вторая производная парного потенциала ϕ в точке $r = r_p$ [4, 5]. Шаг интегрирования в наших расчетах соответствовал $\Delta t = (20 \max\{\nu_{fr}, \omega^*\})^{-1}$, время численных экспериментов варьировалось в диапазоне от $t_1 \approx 10(\min\{\nu_{fr}, \omega^*\})^{-1}$ до $t_2 \approx 1000(\min\{\nu_{fr}, \omega^*\})^{-1}$.

Расчеты были выполнены для однородных двумерных систем Юкавы с параметрами экранирования $\kappa = 1, 2, 3, 4$. Межчастичное расстояние вычислялось по формуле $r_p = (N_p/S)^{-1/2}$, где S — площадь моделируемой области двумерной структуры. Для моделирования протяженного однородного слоя задавались периодические граничные условия в двух выбранных направлениях (x и y). Число независимых частиц в центральной счетной ячейке N_p варьировалось от 256 до 1225. В зависимости от числа частиц длина обрезания потенциала R_c менялась от $5r_p$ до $25r_p$. Основные расчеты были выполнены для $N_p = 576$ независимых частиц при длине обрезания потенциала $R_c = 8r_p$. Для проверки независимости результатов расчета от числа частиц и длины обрезания потенциала был проведен анализ вычислений с различными значениями N_p и r_p . Отклонение между результатами данных расчетов не превышало численной ошибки и находилось в пределах $\pm 1 \dots 3\%$.

Величина параметра масштабирования варьировалась в пределах от $\xi = 0.125$ до $\xi = 2.0$, типичных для условий экспериментов в пылевой плазме газовых разрядов [4, 5]. Величина эффективного параметра неидеальности Γ^* менялась от 0.5 до 180.

5. РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

В результате обработки численных данных были получены коэффициенты теплопроводности χ (см. уравнения (7) и (8)) как сумма нескольких компонент:

$$\chi = \chi_{KK} + \chi_{UU} + \chi_{PP} + \chi_{KU} + \chi_{P(K+U)}. \quad (18)$$

Каждая компонента в (18) образована попарной комбинацией трех компонент флуктуаций потока тепла в (10): $\delta j_{Kx}(t)$, $\delta j_{Ux}(t)$ и $\delta j_{Px}(t)$. Соотношения для

компонент коэффициента теплопроводности для системы взаимодействующих частиц имеют следующий вид:

$$\chi_{\alpha\alpha} = \frac{k_B n}{T^2} \times \int_0^\infty \langle \delta j_{\alpha x}(0) \delta j_{\alpha x}(t) \rangle dt, \alpha = K, U, P, \quad (19a)$$

$$\chi_{KU} = \frac{k_B n}{T^2} \int_0^\infty \langle \delta j_{Kx}(0) \delta j_{Ux}(t) \rangle dt + \frac{k_B n}{T^2} \int_0^\infty \langle \delta j_{Ux}(0) \delta j_{Kx}(t) \rangle dt, \quad (19b)$$

$$\chi_{P(K+U)} = \frac{k_B n}{T^2} \int_0^\infty \langle (\delta j_{Kx}(0) + \delta j_{Ux}(0)) \delta j_{Px}(t) \rangle dt + \frac{k_B n}{T^2} \int_0^\infty \langle (\delta j_{Kx}(t) + \delta j_{Ux}(t)) \delta j_{Px}(0) \rangle dt. \quad (19c)$$

Нормированные автокорреляционные функции флуктуаций теплового потока

$$A^*(t) = \frac{\langle \delta j_x(0) \delta j_x(t) \rangle}{\langle \delta j_x(0) \delta j_x(0) \rangle}$$

для различных параметров Γ^* и ξ показаны на рис. 3. Нормированные функции $\chi^*(\Gamma^*)$ для различных ξ показаны на рис. 1 и 4, а также приведены в таблице для $\nu_{fr} \ll \omega^*$ при некоторых параметрах Γ^* совместно с величиной

$$\chi_{3\Sigma}^* = \frac{\chi_{KK} + \chi_{UU} + \chi_{P(K+U)}}{k_B n \omega^* r_p^2}.$$

Величина перекрестной компоненты χ_{KU} (19b) не оказывала существенного влияния на коэффициент теплопроводности χ во всем исследуемом диапазоне параметров Γ^* и ξ и оставалась в пределах стандартной ошибки. Величина среднеквадратичного отклонения численных данных, полученная при расчете транспортных коэффициентов в системах с различными параметрами экранирования ($\kappa = 1 \dots 4$), составляла менее 15%.

Анализ данных показал, что величина коэффициента теплопроводности полностью определяется двумя безразмерными параметрами Γ^* и ξ . Для всех рассмотренных случаев перенос тепла за счет P -компоненты потока тепла (9) (т.е. компоненты,

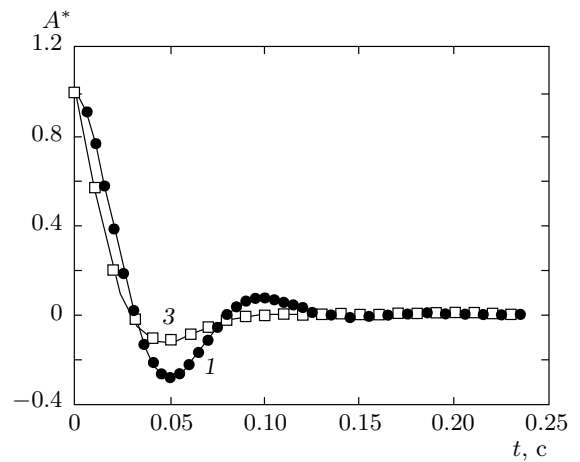
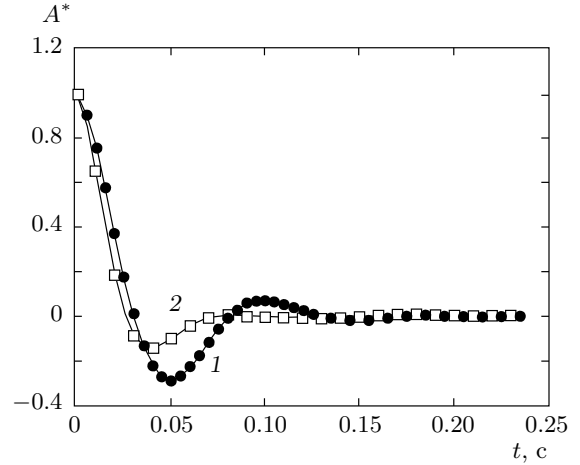


Рис. 3. Нормированная автокорреляционная функция теплового потока $A^*(t) = \langle \delta j_x(0) \delta j_x(t) \rangle / \langle \delta j_x(0) \delta j_x(0) \rangle$ для случаев: 1 — $\xi = 1, \Gamma^* = 75$, 2 — $\xi = 1, \Gamma^* = 10$, 3 — $\xi = 0.25, \Gamma^* = 75$

связанной с собственным давлением частиц в системе) χ_{PP} (19a) не зависел от коэффициента трения ν_{fr} и оставался практически постоянным для всех $\Gamma^* > 5$, а отношение

$$\chi_{PP}^* = \frac{\chi_{PP}}{k_B n \omega^* r_p^2} \approx 0.75 \pm 0.12$$

не зависело от температуры системы.

Теплоперенос внутренней энергии за счет кинетической χ_{KK} , потенциальной χ_{UU} и перекрестной $\chi_{P(K+U)}$ составляющих был обратно пропорционален сумме характерных частот $\nu_{fr} + \omega^*$. При этом величина

$$\chi_{UU}^* = \chi_{UU} \frac{1 + \xi^{-1}}{k_B n \omega^* r_p^2} \approx 0.110 \pm 0.015$$

Таблица. Нормированные коэффициенты теплопроводности в зависимости от Γ^* для чисто дисперсионных ($\xi \rightarrow \infty$) двумерных систем Юкавы

Γ^*	1	4.7	10.5	16.2	30.4	54.2	75.3	111	160
$\chi_{3\Sigma}^*$	3.26	0.78	0.42	0.29	0.204	0.162	0.132	0.119	0.110
χ^*	4.01	1.53	1.17	1.04	0.96	0.91	0.88	0.87	0.86

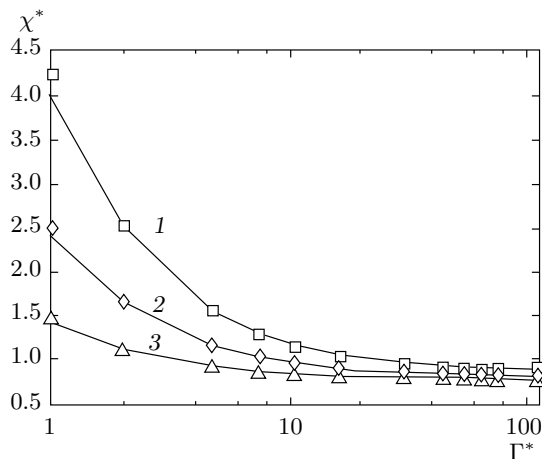


Рис. 4. Нормированная величина коэффициента теплопроводности χ^* в зависимости от Γ^* для диссипативных 2D-систем Юкавы с различными значениями параметра масштабирования ξ : $\xi \rightarrow \infty$ (1), $\xi = 1.0$ (2), 0.25 (3); символы — результаты численных расчетов, линии — аппроксимации (21)

сохранялась постоянной и слабо зависела от эффективного параметра неидеальности при $\Gamma^* > 5$. Таким образом, можно полагать, что нормированная величина коэффициента теплопроводности $\chi^* = \chi/k_B n \omega^* r_p^2$ практически полностью определяется значением эффективного параметра неидеальности Γ^* и параметра масштабирования ξ для всех $\Gamma^* > 5 \dots 10$ и может быть аппроксимирована как

$$\chi^* \approx \frac{\Omega}{1 + \xi^{-1}} + \frac{0.11}{1 + \xi^{-1}} + 0.75, \quad (20)$$

где Ω — коэффициент, вообще говоря, зависящий от Γ^* , величина которого определяется значением суммы $\chi_{3\Sigma}^* = \chi_{KK} + \chi_{UU} + \chi_{P(K+U)}$ для случая чисто дисперсионных систем $\xi \rightarrow \infty$ (см. таблицу).

Принимая во внимание, что $\chi_{KK}/k_B \rho \propto C_P D \approx C_V D$ (для $\Gamma^* > 5 \dots 10$), и используя процедуру минимизации среднеквадратичного отклонения между численными и аналитическими данными, можно найти более удобную аппроксимацию

для коэффициента теплопроводности в двумерных неидеальных системах, не требующую дополнительной информации о параметрах системы в случае чисто дисперсионной системы (т.е. о коэффициенте Ω):

$$\chi^* \approx \frac{\pi C_V^a D^*}{\Gamma^*(1 + \xi^{-1})} + \frac{0.11}{1 + \xi^{-1}} + 0.75. \quad (21)$$

Сравнение соотношения (21) с численными данными для различных параметров масштабирования ξ показано на рис. 4. Легко увидеть хорошее соответствие предлагаемой аппроксимации результатам численного расчета коэффициентов теплопроводности.

Далее обсудим два дополнительных (не менее важных) результата проведенных исследований, которые могут быть полезны для развития новых методов диагностики пылевой компоненты комплексной плазмы (включая выбор условий для корректного определения коэффициентов теплоемкости и теплопроводности по экспериментальным данным о движении пылевых частиц), а также для разработки новых методик восстановления упомянутых тепловых коэффициентов для слабо коррелированных неидеальных систем без дополнительных предположений о форме потенциала межчастичного взаимодействия.

Первый результат заключается в исследовании связи между кинетической частью χ_{KK} коэффициента теплопроводности и коэффициентом диффузии D . Так, было получено, что с уменьшением эффективного параметра неидеальности при $\Gamma^* < 2$ отношение кинетической части нормированного коэффициента теплопроводности $\chi_{KK}/k_B n$ к коэффициенту диффузии D в исследуемых системах стремится к величине близкой к коэффициенту теплоемкости идеальной системы при постоянном давлении $C_P \approx 2$ ($\chi_{KK}/k_B n D \rightarrow C_P$, см. рис. 5). При этом с уменьшением параметра Γ^* величина кинетической части χ_{KK} коэффициента теплопроводности приближается к его полному значению χ : $\chi_{KK} \rightarrow \chi$, что позволяет проводить простое экспериментальное определение данного коэффициента

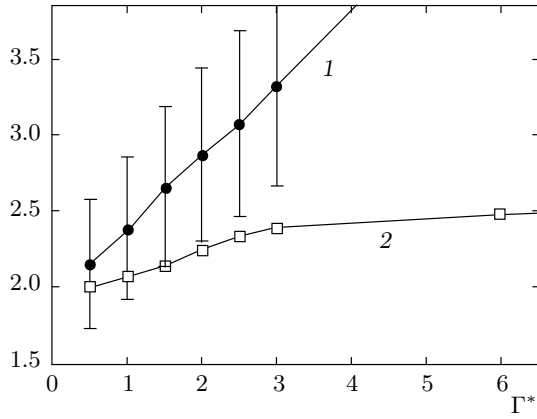


Рис. 5. Отношения $\chi/k_B n D$ (кривая 1) и $\chi_{KK}/k_B n D$ (кривая 2) в зависимости от параметра Γ^* для слабо коррелированных систем

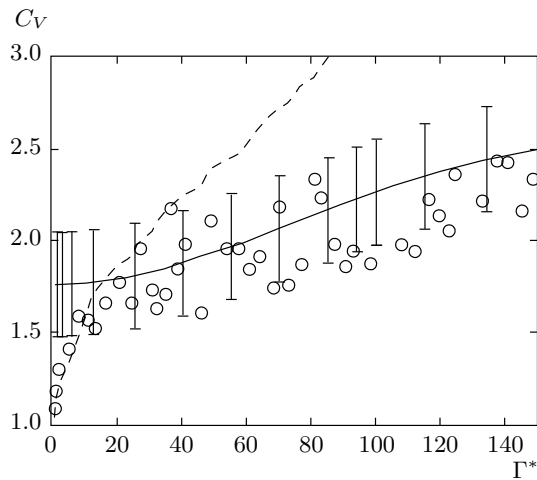


Рис. 6. Коэффициенты теплоемкости C_V , полученные путем численных расчетов: сплошная линия — аппроксимация (15), точки — численный расчет по теории флуктуаций (16), штриховая линия — уравнение (22)

(при $\Gamma^* < 2$) на основе прямых измерений скоростей частиц, не опираясь на какую-либо информацию о форме потенциала их межчастичного взаимодействия.

Второй результат — это численные данные о коэффициенте теплоемкости C_V неидеальных систем, полученные при помощи метода флуктуаций (16). На рис. 6 представлено сравнение результатов вычисления коэффициентов теплоемкости C_V , полученных различными методами моделирования. Там же показано сравнение величины C_V с разностью

$\chi_{KK}/k_B n D - 1$. Можно легко заметить, что ранее предложенная аппроксимация (15) хорошо описывает результаты расчетов теплоемкости системы с параметрами $\Gamma^* > 10$, а также то, что величина коэффициента теплоемкости при постоянном объеме составляет для слабо коррелированных систем с параметрами $\Gamma^* < 20$

$$C_V \approx \frac{\chi_{KK}}{k_B n D} - 1. \quad (22)$$

Указанное обстоятельство позволяет определять величину коэффициента теплоемкости C_V в таких системах, не опираясь на предварительную информацию о потенциале межчастичного взаимодействия.

В заключение данного раздела обсудим правомерность использования соотношений Грина–Кубо (7) и (8) для рассматриваемых диссипативных систем, движение частиц в которых описывается уравнениями Ланжевена в форме (17). Здесь следует учесть, что один из наиболее известных выводов данных соотношений опирается на расчеты функций Грина, описывающих отклик гамильтоновой системы на единичный точечный источник (т. е. на ее возмущение в форме δ -функции). При этом как для слабо возмущенной гамильтоновой системы, так для системы, описываемой уравнениями Ланжевена в форме (17) функции Грина идентичны по форме [1, 3]. Простое качественное объяснение данного обстоятельства можно получить путем несложного преобразования уравнения для возмущенной гамильтоновой системы и уравнения Ланжевена (17) в хорошо известное уравнение Фоккера–Планка [3, 23]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}}{M} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} - \frac{\partial U}{\partial \mathbf{r}} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} = \\ = \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \gamma M \left(\frac{\mathbf{p}}{M} f + T \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} \right), \quad (23) \end{aligned}$$

где \mathbf{p} — импульс частиц, $f = f(t, \mathbf{r}, \mathbf{p})$ — функция распределения, $\gamma = \nu_{fr}$ для чисто диссипативного уравнения Ланжевена, $\gamma = \omega$ для гамильтоновой системы, ω — характерная частота, зависящая от обобщенной восприимчивости данной системы и определяющая время ее релаксации к состоянию равновесия [1, 3, 23]. Уравнение Фоккера–Планка широко используется для анализа обычной диффузии частиц, процессов релаксации, приводящих к установлению равновесной температуры, в теории стохастических процессов и т. д. [23].

Отметим также, что вычисление корреляторов потоков и кинетических коэффициентов (включая

теплопроводность) для отдельных компонент в многокомпонентной плазме является традиционным [13, 23–25]. Одна из ряда причин целесообразности данного подхода связана с возможностями диагностики многокомпонентных сред в реальных экспериментах. Результаты существующих экспериментов по измерению коэффициентов теплопроводности «отдельной» пылевой компоненты плазмы как ее отдельной компоненты и их сравнение с выполненными численными расчетами (которое в полной мере демонстрирует корректность используемого подхода) приведены в разд. 6.

6. СРАВНЕНИЕ ЧИСЛЕННЫХ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАННЫХ

Сравнение результатов расчетов коэффициентов теплопереноса, полученных в данной работе (теплопроводности и температуропроводности) в двумерных диссипативных системах Юкавы, с существующими численными данными представлены на рис. 1, 2. Возможные причины различий между равновесными и неравновесными методами моделирования задачи подробно рассматриваются в разд. 3 настоящей работы.

Здесь мы остановимся на сравнении наших результатов с результатами моделирования трехмерных равновесных систем. В данном случае отсутствие выраженного минимума зависимости $\chi^*(\Gamma^*)$ для $2D$ -систем (в отличие от результатов, полученных для $3D$ -систем, см. рис. 1) легко объяснить, полагая, что в системах различной размерности коэффициенты температуропроводности θ (а не коэффициенты теплопроводности χ) должны иметь близкие температурные зависимости [2]. Такое предположение подтверждается представленными результатами моделирования двумерной задачи. Легко увидеть (см. рис. 2, кривые 2, 3), что поведение зависимости $\theta^*(\Gamma^*)$ является близким для равновесных $2D$ - и $3D$ -систем и практически одинаковым с точностью до погрешности численного моделирования нашей задачи.

Сравнение численных расчетов коэффициента $\theta^*(\Gamma^*)$ с использованием аппроксимации (21) и расчетов по формуле (13), предлагаемой в теории молекулярных жидкостей, с экспериментальными данными работы [17] представлено на рис. 7 для следующих параметров упомянутых экспериментов: $r_p = 450 \pm 50$ мкм, $\nu_{fr} \approx 30$ Гц. (Здесь мы приняли во внимание различную нормировку коэф-

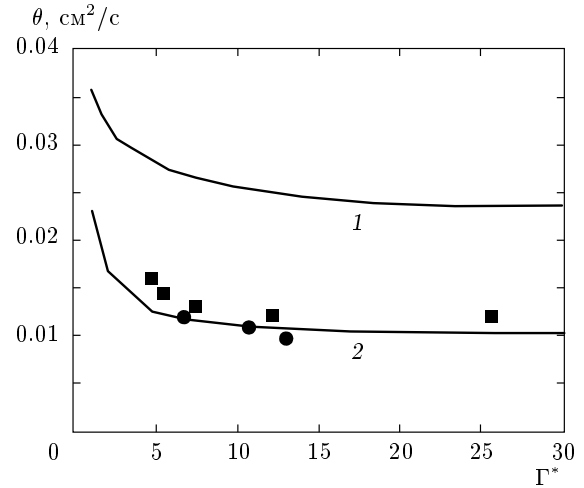


Рис. 7. Функция $\theta(\Gamma^*)$ для экспериментов [17] (символы) и численные данные, полученные для условий экспериментов (линии): 1 — уравнение (13): $3D$, $\omega^* = 7.7 \pm 0.8$ Гц, $\xi \approx 0.25$; 2 — уравнение (21): $2D$, $\omega^* = 10.9 \pm 1.1$ Гц, $\xi \approx 0.35$

фициентов ω^* для систем с разной размерностью: $\omega^* = 7.7 \pm 0.8$ Гц для $3D$ -систем и $\omega^* = 10.9 \pm 1.1$ Гц для $2D$ -структур, см. разд. 2.) Легко увидеть, что предлагаемая аппроксимация (21) находится в хорошем согласии с рассматриваемыми экспериментальными данными, в отличие от соотношения (13).

В экспериментах в приэлектродной плазме ВЧ-разряда [18] было обнаружено, что коэффициент теплопроводности в сильно коррелированных двумерных жидкостных пылевых системах вблизи точки их кристаллизации имеет постоянное значение. Чтобы объяснить этот «нетривиальный» результат, авторы работы [18] предположили, что главную роль в условиях наблюдаемых экспериментов играло рассеяние фононов (например, вследствие динамической неоднородности системы [26]). Однако представленные здесь результаты (см. рис. 1, 2) позволяют сформулировать другую причину для наблюдаемого явления, которая заключается во влиянии размерности системы (исследуемого квазидвумерного пылевого монослоя) на температурную зависимость коэффициента теплопроводности. Следует отметить, что для параметров упомянутых экспериментов ($r_p \approx 660$ мкм, $\omega^* \approx 17$ Гц, $\nu_{fr} \approx 0.87$ Гц, $\Gamma^* \sim 100 \dots 150$ [18]) величина $c_p \theta = \chi/\rho$, рассчитанная из аппроксимации (21), находится в диапазоне от 6.4 до 7.0 мм²/с и это хорошо согласуется с результатами ее экспериментального определения $c_p \theta \approx 9$ мм²/с [18].

7. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Получены новые данные о коэффициентах теплопереноса (теплопроводности и температуропроводности) в двумерных диссипативных системах Юкавы. Вычисления были выполнены на основе соотношений Грина–Кубо для равновесных систем с параметрами, близкими к условиям лабораторных экспериментов с пылевой плазмой. Влияние диссипации (внутреннего трения) на процессы теплопереноса в неидеальных системах исследовалось впервые. Было получено, что величина коэффициентов теплопереноса полностью определяется двумя безразмерными параметрами Γ^* и ξ . Предложены новые аппроксимации для коэффициента теплопроводности.

Представленные результаты находятся в хорошем соответствии с результатами численного моделирования равновесных трехмерных систем без диссипации, а также с существующими экспериментальными данными.

Было найдено, что с уменьшением эффективного параметра неидеальности $\Gamma^* < 2$ значение кинетической части коэффициента теплопроводности χ_{KK} приближается к его полному значению χ , а величина коэффициента теплоемкости $C_V \approx \chi_{KK}/k_B n D - 1$ для $\Gamma^* < 20$. Это позволяет проводить простое экспериментальное определение упомянутых коэффициентов для слабо коррелированных систем на основе прямых кинетических измерений скоростей частиц, не опираясь на предварительную информацию о виде потенциала их межчастичного взаимодействия.

Можно предположить, что результаты представленного исследования могут быть легко обобщены на случай двумерных систем с широким кругом изотропных парных потенциалов, которые удовлетворяют условию (4). Представленные результаты могут быть также полезны для разработки новых методов пассивной диагностики и развития существующих экспериментальных методик исследования разнообразных неидеальных систем, таких как, например, пылевая плазма, биологические и медицинские растворы, полимеры и другие коллоидные системы.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ (грант № 10-08-00389-а) и Программы Президиума РАН.

ЛИТЕРАТУРА

1. H. Z. Cummins and E. R. Pike, *Photon Correlation and Light Beating Spectroscopy*, Plenum, New York (1974).
2. N. H. March and M. P. Tosi, *Introduction to Liquid State Physics*, World Sci., London (1995).
3. A. A. Ovchinnikov, S. F. Timashev, and A. A. Belyy, *Kinetics of Diffusion Controlled Chemical Processes*, Nova Science Publ., Commack, New York (1989).
4. *Complex and Dusty Plasmas: From Laboratory to Space*, ed. by V. E. Fortov and G. E. Morfill, CRC Press, Boca Raton, FL (2010).
5. S. V. Vladimirov, K. Ostrikov, and A. A. Samarian, *Physics and Applications of Complex Plasmas*, Imperial College, London (2005).
6. T. Saigo and S. Hamaguchi, *Phys. Plasmas* **9**, 1210 (2002).
7. H. Ohta and S. Hamaguchi, *Phys. Plasmas* **7**, 4506 (2000).
8. O. S. Vaulina and I. E. Drangevski, *Phys. Scripta* **73**, 577 (2006).
9. O. S. Vaulina, X. G. Adamovich, O. F. Petrov et al., *Phys. Rev. E* **77**, 066404 (2008).
10. B. Liu, J. Goree, and O. S. Vaulina, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 015005 (2006).
11. G. Faussurier and M. S. Murillo, *Phys. Rev. E* **67**, 046404 (2003).
12. Z. Donko and P. Hartmann, *Phys. Rev. E* **69**, 016405 (2004).
13. Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский, *Теоретическая физика*, т. 10. *Физическая кинетика*, Физматлит, Москва (2002).
14. T. Shimada, T. Murakami, S. Yukawa et al., *Phys. Soc. Jpn.* **69**, 3150 (2000).
15. V. H. Ernst, E. H. Hauge, and J. M. J. van Leeuwen, *Phys. Rev. Lett.* **25**, 1254 (1970).
16. S. Nunomura, D. Samsonov, S. Zhdanov et al., *Phys. Rev. Lett.* **95**, 025003 (2005).
17. V. E. Fortov, O. S. Vaulina, O. F. Petrov et al., *Phys. Rev.* **75**, 026403 (2007).
18. V. Nosenko, S. Zhdanov, A. V. Ivlev et al., *Phys. Rev. Lett.* **100**, 025003 (2008).
19. S. Hamaguchi, R. T. Farouki, and D. H. E. Dubin, *Phys. Rev. E* **56**, 4671 (1997).

20. O. S. Vaulina, X. G. Koss, Yu. V. Khrustalyov et al., *Phys. Rev. E* **82**, 056411 (2010).
21. K. M. Blundell and S. J. Blundell, *Concepts in Thermal Physics*, Oxford, Oxford Univ. Press (2009).
22. N. B. Vargaftik, *Tables on the Thermophysical Properties of Liquids and Gases*, Wiley, New York (1975).
23. Д. А. Франк-Каменецкий, *Лекции по физике плазмы*, Атомиздат, Москва (1964).
24. Ю. П. Райзер, *Физика газового разряда*, Наука, Москва (1987).
25. *Энциклопедия низкотемпературной плазмы*, Вводный том 3, под ред. В. Е. Фортova, Наука/Интерпериодика, Москва (2000).
26. C. Reichhardt and C. J. O. Reichhardt, *Phys. Rev. Lett.* **90**, 095504 (2003).