

На правах рукописи

Крючков Никита Павлович

**Элементарные возбуждения и термодинамика простых жидкостей с
модельными межчастичными потенциалами взаимодействия**

Специальность 01.04.07 – Физика конденсированного состояния

АВТОРЕФЕРАТ
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук



Москва – 2019

Работа выполнена в федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего образования «Московский государственный технический университет имени Н.Э. Баумана (национальный исследовательский университет)»

Научный руководитель: **кандидат физико-математических наук
Юрченко Станислав Олегович**

Официальные оппоненты: **Галенко Петр Константинович**
доктор физико-математических наук, профессор, ФГАОУ ВО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина», ведущий научный сотрудник лаборатории многомасштабного математического моделирования

Хуснутдинов Рамиль Миннегаязович
кандидат физико-математических наук, доцент, ФГАОУ ВО «Казанский (Приволжский) федеральный университет», доцент кафедры вычислительной физики и моделирования физических процессов

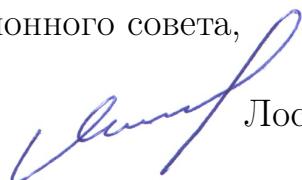
Ведущая организация: Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук (Ioffe Institute)

Защита диссертации состоится «16» октября 2019 г. в 16:00 на заседании диссертационного совета Д 212.141.17, созданного на базе ФГБОУ ВО «Московский государственный технический университет имени Н.Э. Баумана (национальный исследовательский университет)» по адресу: 248000, г. Калуга, ул. Баженова, д. 2, МГТУ имени Н.Э. Баумана, Калужский филиал.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке МГТУ им. Н.Э. Баумана и на сайтах <http://www.bmstu.ru>, <http://www.bmstu-kaluga.ru>

Автореферат разослан «___» _____ 2019 г.

Ученый секретарь диссертационного совета,
кандидат технических наук,
доцент



Лоскутов Сергей Александрович

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность. Концепция коллективных возбуждений играет одну из центральных ролей в современной физике конденсированного состояния, так как позволяет понять природу структурных, механических, электромагнитных и термодинамических свойств конденсированных сред и явлений переноса в них. По этой причине, анализ спектров элементарных возбуждений важен для решения различных проблем физики конденсированного состояния, химической физики, физической химии, физики плазмы, физики мягкой материи и наук о материалах.

В жидкостях отсутствует дальний порядок, но элементарные коллективные возбуждения все еще существуют. В отличие от кристаллов, структура элементарных возбуждений в жидкостях главным образом определяется эффектами ангармонизма и разупорядоченности структуры. При этом, в жидкостях нет малого параметра, связанного с ангармонизмом, что не позволяет применять методы теории возмущений. Более того, в отличие от кристаллов, спектры элементарных возбуждений в жидкостях не обладают периодической структурой в обратном пространстве, что обусловлено потерей трансляционного порядка в жидкостях. В результате необходимо анализировать спектры элементарных возбуждений во всем обратном пространстве, а не только в первой зоне Бриллюэна, как это возможно в случае кристаллов. Упомянутые особенности, стали причиной того, что элементарные возбуждения в жидкостях остаются менее изучены, чем в кристаллах, несмотря на определенные успехи в рамках исследований при помощи методов обобщенной гидродинамики, метода квазикристаллического приближения и его модификаций. Важно отметить, что эти методы в лучшем случае учитывают эффекты ангармонизма феноменологически, что не позволяет изучить роль характера взаимодействия и является их существенным недостатком.

Интерес к спектрам элементарных возбуждений в жидкостях существенно возрос в последние годы в контексте изучения взаимосвязи структурных, динамических и термодинамических свойств в различных жидкостях, в частности в контексте изучения перехода от режима жидко-подобной к газо-подобной динамике (линия Френкеля), а также в контексте экспериментов с неупругим нейтронным и рентгеновским рассеянием.

Значительная доля исследований коллективной динамики проводится с использованием методов молекулярной динамики (МД), которые позволяют легко рассчитать распределение интенсивности спектров элементарных возбуждений как в кристаллах, так и в жидкостях. Существуют различные методы постобработки данных с целью получения дисперсионных зависимостей и установления времени жизни элементарных возбуждений, но систематического сравнения этих методов с оценкой их точности и установлением границ применимости ранее не проводилось. Спектры элементарных возбуждений в жидкостях суще-

ственno ангармоничны, особенно в коротковолновой области, что делает возможным «смешение» и перераспределение спектральных интенсивностей между продольными и поперечными модами. В действительности, это явление наблюдается экспериментально, и даже позволило измерить дисперсионные зависимости, соответствующие поперечным элементарным возбуждениям в жидкостях. Для правильного учета этого явления необходима разработка соответствующих методов анализа, но этот вопрос остается слабо изученным.

Экспериментальные данные являются ключевым элементом при разработке новых расчетных методов. Одним из основных экспериментальных инструментов изучения коллективных возбуждений в конденсированных средах является неупругое нейтронное и рентгеновское рассеяние. Однако, в случае жидкостей оно не способно дать полную информацию о структуре спектров и динамике движения *отдельных частиц*. В связи с этим, особую ценность могут представлять эксперименты с комплексной пылевой плазмой – слабо ионизированным газом, содержащим заряженные конденсированные микрочастицы, чьи индивидуальные траектории могут быть отслежены оптически. Благодаря тому, что (слабодемпфированная) динамика микрочастиц описывается уравнениями Ланжевена, эксперименты с комплексной (пылевой) плазмой представляют мощный инструмент для анализа коллективной динамики в сильно неидеальных многочастичных системах (жидкостях). В частности, при помощи комплексной (пылевой) плазмы экспериментально было изучено: равновесное и неравновесное плавление, микрофизика жидкостей, тепловая активация и распространение фронтов неравновесного плавления, термоакустическая неустойчивость в жидкостях и кинетика кристаллизации. Затухание движения отдельных частиц в комплексной (пылевой) плазме является слабым и, благодаря возможности экспериментального получения жидких состояний, комплексная (пылевая) плазма позволяет экспериментально изучать спектры возбуждений в жидкостях в различных режимах взаимодействия.

Цель диссертационной работы – разработка подходов к расчету спектров элементарных возбуждений с учетом эффектов ангармонизма в классических жидкостях с взаимодействиями различной мягкости и в широком диапазоне параметров состояния.

Научная новизна диссертационной работы:

1. Впервые показано, что анализ спектров элементарных возбуждений в жидкостях на основе модели двух затухающих гармонических осцилляторов позволяет эффективно восстанавливать дисперсионные зависимости в состояниях вдали от линии плавления.
2. Впервые проанализированы различные методы восстановления дисперсионных зависимостей жидкостей вдали от линии плавления, включая анализ положения максимумов, раздельный анализ мод, совместный анализ мод, анализ с учетом теории антикроссинга мод в жидкости. Установлены границы их применимости.

3. Получены новые закономерности изменения положения границы устойчивости поперечных мод в жидкости от параметра неидеальности в широком диапазоне параметров состояния для разных модельных потенциалов взаимодействий, соответствующих: благородным газам, однокомпонентной плазме, ионам или коллоидным частицам на различных интерфейсах.
4. Разработана теория антикроссинга мод в простых жидкостях. Показано, что в простых жидкостях происходит гибридизация продольных и поперечных мод (при их пересечении) с образованием новых низко- и высокочастотных гибридных мод.
5. Систематически рассчитаны термодинамические характеристики двумерных системе Юкавы в широком диапазоне параметров состояния. Рассчитаны фазовые диаграммы двумерных систем Юкавы разной мягкости с дополнительным изотропным дипольным притяжением.
6. Впервые в результате МД моделирования показано, что в системах с эффективными невзаимными парными взаимодействиями могут наблюдаться диссипативные фазовые переходы. Разработан и программно реализован балансовый подход, позволяющий теоретически рассчитывать петли гистерезиса и диссипативные фазовые диаграммы в системах с невзаимными взаимодействиями.
7. Предложен новый модельный потенциал взаимодействий в комплексной (пылевой) плазме, учитывающий плазменные следы и позволяющий выполнять моделирование методом МД как кристаллических, так и жидких состояний. Показано, что предложенная модель взаимодействия позволяет воспроизводить все ключевые особенности теплового активационного поведения комплексной (пылевой) плазмы в экспериментах, в частности распространение фронтов неравновесного плавления и термоакустическую неустойчивость.

Положения, выносимые на защиту:

1. Метод восстановления дисперсионных зависимостей в простых жидкостях в широком диапазоне параметров состояния с учетом эффектов сильного ангармонизма.
2. Результаты измерения зависимости размеров области неустойчивых поперечных мод (в обратном пространстве) в простых жидкостях в широком диапазоне параметров состояния на основе компьютерного моделирования.
3. Результаты расчета термодинамических свойств двумерных систем Юкавы в широком диапазоне параметров состояния, а также фазовых диаграмм двумерных систем Юкавы разной мягкости с дополнительным изотропным дипольным притяжением.

4. Балансовый подход для теоретического поиска стационарных состояний и расчета диссипативных фазовых диаграмм в многочастичных диссипативных системах с невзаимными взаимодействиями.
5. Модель парных взаимодействий микрочастиц в комплексной (пылевой) плазме, учитывающая плазменные следы и применимая для моделирования жидких состояний и активационного теплового поведения.

Методология и методы исследования. Основу решений сформулированных задач составляют современные методы статистической физики, физики конденсированного состояния, химической физики, физики мягкой материи и компьютерного моделирования. Расчеты методом МД выполнены в открытых программных пакетах LAMMPS и HOOMD-Blue. Пост-обработка результатов моделирования и экспериментов выполнена с использованием программных кодов, реализованных на C++/CUDA автором настоящей диссертации.

Достоверность результатов подтверждается корректностью использования методов физики конденсированного состояния и методов вычислительной физики (в частности методов молекулярной динамики); полученные результаты согласуются с ранее известными результатами, представленными в литературе; результаты моделирования методом молекулярной динамики воспроизводимы и устойчивы к изменениям основных параметров. Кроме того, достоверность результатов подтверждается согласием результатов, полученных на основе разных подходов, включающих теоретические, вычислительные и экспериментальные.

Личный вклад автора состоит в подготовке программных кодов для проведения расчетов, подготовке и проведении расчетов, в пост обработке результатов моделирования методом молекулярной динамики, в участии в пост-обработке экспериментальных результатов, разработке теоретических моделей, сопоставлении результатов теории, моделирования и экспериментов и последующем анализе и интерпретации результатов. Все основные результаты получены автором лично, либо при непосредственном участии.

Теоретической значимостью обладает ряд результатов настоящей диссертации. В частности, предложенный метод анализа мод в жидкостях с учетом эффектов ангармонизма, позволяет изучать структуру спектров элементарных возбуждений в жидкостях вдали от линии плавления, а следовательно устанавливать новые закономерности связи различных динамических, термодинамических и транспортных свойств жидкостей. Другим важным результатом является разработанная теория антикроссинга мод в простых жидкостях, которая объясняет структуру дисперсионных зависимостей, их перестройку и формирование гибридных мод, что необходимо для корректного анализа данных экспериментов и моделирования методом МД. Эти результаты важны для понимания физики жидкостей различной природы, от простых жидкостей и сжиженных благородных газов и до жидких металлов, молекулярных и комплексных жидкостей, жидких плазм и других родственных конденсированных

систем. Полученные результаты могут оказаться полезными для дальнейшей разработки теории жидкого состояния. Результаты исследования систем с невзаимными взаимодействиями открывают новые перспективы для понимания динамики открытых неравновесных многочастичных систем, а также сценариев диссипативных фазовых переходов, наблюдавшихся в них. Из-за широкой распространенности подобных систем в природе, данные результаты могут оказаться полезными для междисциплинарных исследований на стыке таких областей как физика, химия, биология, физика мягкой материи, изучение коллективных явлений в мультиагентных системах и активной материи.

Практическая значимость. С практической точки зрения ценностью обладают метод анализа дисперсионных зависимостей в простых жидкостях и балансовый подход к расчету стационарных состояний систем с невзаимными эффективными взаимодействиями. Последний позволяет выполнять построения петель гистерезиса и диссипативных фазовых диаграмм в системах с невзаимными взаимодействиями с существенно более низкими вычислительными затратами, чем при прямом МД моделировании. Практической ценностью обладают результаты расчетов термодинамических параметров двумерных систем Юкавы в широком диапазоне параметров состояния, а также фазовые диаграммы систем Юкавы разной мягкости с дополнительным изотропным дипольным притяжением. Практической ценностью обладает предложенная модель взаимодействий в комплексной (пылевой) плазме, которая позволяет выполнять моделирование методом МД данной системы и воспроизводить все основные явления в экспериментах с комплексной (пылевой) плазмой, связанные с активационным тепловым поведением.

Результат диссертационной работы представляет собой решение актуальной задачи физики конденсированного состояния – разработки новых подходов к анализу спектров элементарных возбуждений в простых жидкостях и экспериментах с кинетическим уровнем разрешения.

Апробация работы. Основные результаты работы были представлены на следующих конференциях, симпозиумах и семинарах: Международная научная школа «Bad Honnef School on Physics of Strongly Coupled Systems» (Germany, Bad Honnef, 2019); Международная конференция «16th Conference of the International Association of Colloid and Interface Scientists» (Netherlands, Rotterdam, 2018); Международная конференция «ФизикА.СПб» (ФТИ им. А.Ф. Иоффе, Санкт-Петербург, 2017, 2018); Международная семинар «Фундаментальные и прикладные проблемы фотоники и физики конденсированного состояния» (МГТУ им. Н.Э. Баумана, Москва, 2018); Международный симпозиум «Progress In Electromagnetics Research Symposium» (ИТМО, Санкт-Петербург, 2017); Международные семинары «Фундаментальные и прикладные проблемы физики мягкой материи» (МГТУ им. Н.Э. Баумана, Москва, 2016); Всероссийская конференция «Проблемы физики твердого тела и высоких давлений» (ИФВД им. Л.Ф. Верещагина РАН, ФИАН, пос. Вишневка, 2016, 2018); Международный симпозиум с элементами научной школы «Комплексная (пылевая) плазма. Меж-

дисциплинарные исследования» (МГТУ им. Н.Э. Баумана, Москва, 2016).

Отдельные результаты работы нашли отражение в учебной дисциплине, читаемой студентам МГТУ им. Н.Э. Баумана: «Физические процессы в микроструктурах».

Публикации. Основные результаты докторской работы опубликованы в 15 научных работах в журналах, рекомендованных ВАК РФ для публикации основных результатов научных работ, в том числе индексируются в Scopus / Web of Science), а также в 2 статьях в сборниках трудов конференций (индексируются Scopus/WoS).

Среди научных изданий, в которых опубликованы результаты докторской – ведущие мировые журналы (входящие в Q1, WoS/Scopus), как Physical Review Letters [1], Soft Matter [2,3], The Journal of Chemical Physics [4-10], Physical Review E [11,12], Langmuir [13], Journal of Physics-Condensed Matter [14].

О высоком интересе научного сообщества и актуальности результатов докторской свидетельствует то, что статья [4] вошла в коллекцию «Editors' Choice 2017» The Journal of Chemical Physics. Всего соискатель имеет 22 научные публикации, индексируемые в Scopus / Web Of Science.

Структура и объем докторской. Докторская состоит из введения, 4 глав и заключения, содержит 168 страниц, 39 рисунков, 9 таблиц. Список литературы включает 300 источников.

СОДЕРЖАНИЕ ДИССЕРТАЦИИ

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 коллективные возбуждения в кристаллах, гармоническое приближение для расчета дисперсионных зависимостей и термодинамических свойств кристаллов. Кратко излагается интерполяционный метод кратчайших графов, демонстрирующий связь спектров возбуждений с парными корреляционными функциями классических кристаллов. В заключении раздела обсуждаются ангармонические эффекты и динамическая устойчивость кристаллов. В разделе 1.2 рассматриваются коллективные возбуждения в жидкостях. Кратко излагается один из теоретических подходов к расчету дисперсионных зависимостей в простых жидкостях. В разделе 1.3 кратко рассматриваются экспериментальные подходы к изучению спектров элементарных возбуждений в конденсированных системах. В завершении главы формулируются цель и задачи докторской.

Глава 2 посвящена изучению элементарных возбуждений в простых двумерных и трехмерных жидкостях в широком диапазоне параметров. В разделе 2.1 приводится описание проводимых расчетов методом МД. В разделе 2.2

анализируется вопрос точности восстановления дисперсионных зависимостей в жидкостях, рассматривается проблема измерения размеров области обратного пространства, соответствующей неустойчивым поперечным модам. На Рис. 1 представлены результаты расчет дисперсионных зависимостей на основе раздельного анализа мод в двумерной жидкости частиц с дипольным отталкиванием. В разделе 2.3 излагается теория антикроссинга мод в простых жидкостях. Показано, что эффекты ангармонизма в жидкостях приводят к возникновению гибридных высокочастотных и низкочастотных мод (вместо продольных и попе-

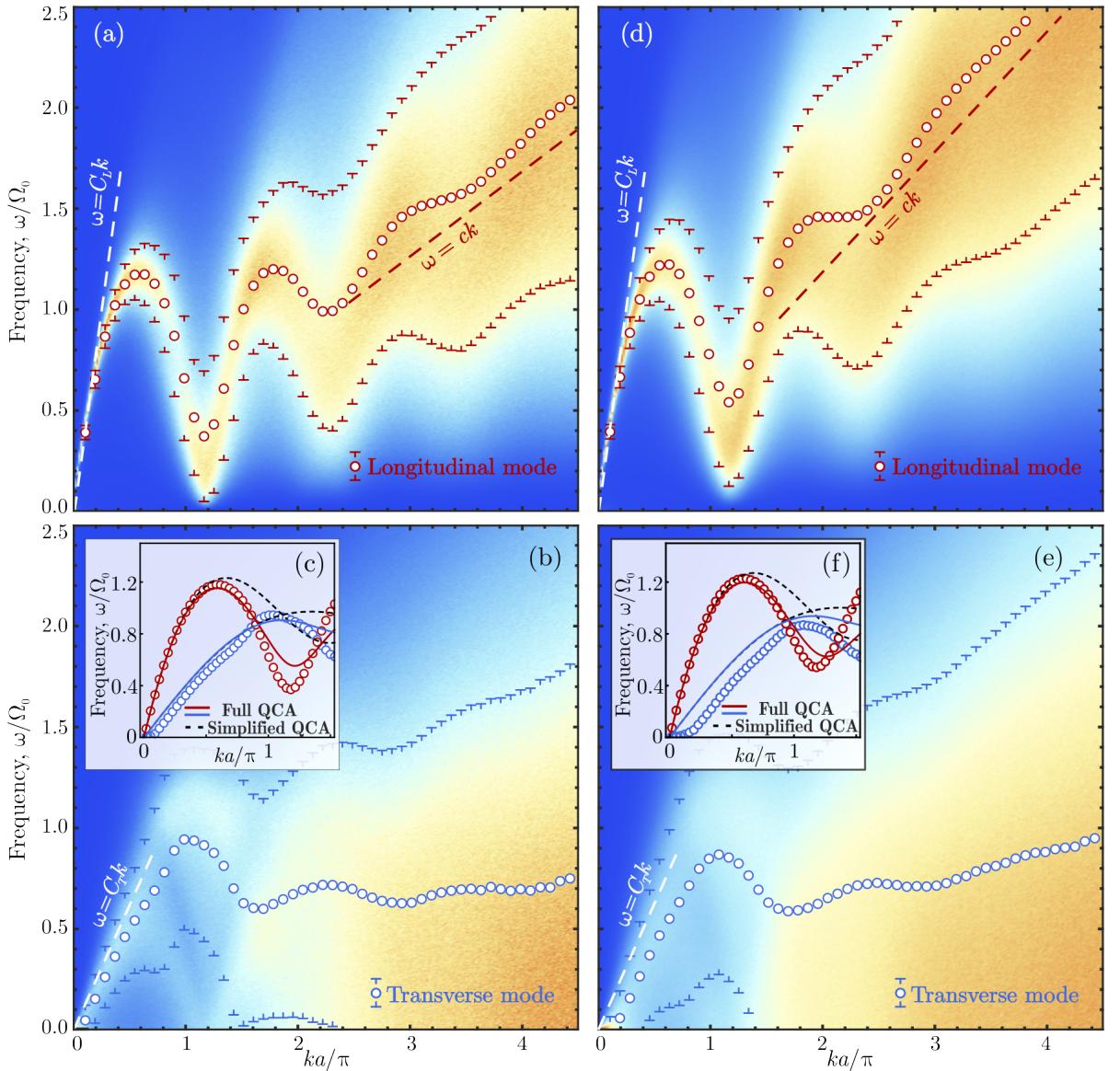


Рис. 1. Спектры элементарных возбуждений в двумерной IPL3 жидкости: при $\Gamma = 56$ а)-с) и $\Gamma = 28$ д)-е). Панели а), д) и с), е) представляют распределения $C_L(q, \omega)$ и $C_{L,T}(q, \omega)$ соответственно в цветовом формате. Круги – значения $\omega_{L,T}(q)$, полученные на основе раздельного анализа мод. Пунктирные красные линии – аппроксимации $\omega_L(q) \simeq \sqrt{2T/m}$. Панели с) и f) – сопоставление данных МД (символы) и QCA дисперсионных зависимостей (линии) [11]

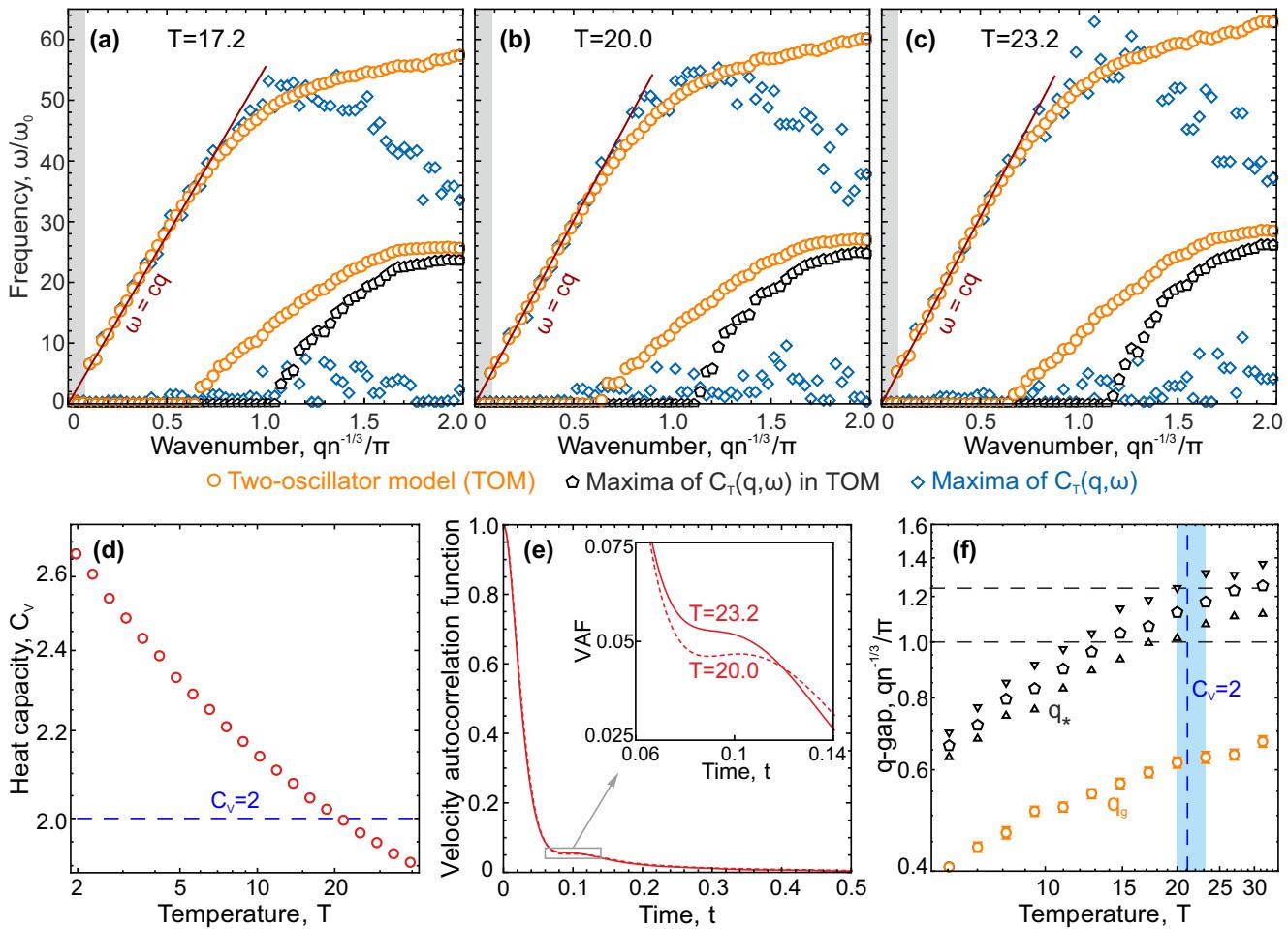


Рис. 2. Динамические и термодинамические свойства 3D жидкости Леннарда-Джонса: а)-с) Дисперсионные соотношения $\omega_{L,T}(q)$. д) Удельная теплоемкость $C_V(T)$. е) Автокорреляционные функции скорости (VAF). ф) Температурные зависимости q_* и q_g , полученные с использованием модели двух осцилляторов (оранжевые круги) и максимумов ее поперечной части $C_T(q,\omega)$ (черные пятиугольники). Черные пунктирные линии – оценка положения границы первой псевдозоны Бриллюэна

речных), что должно корректно учитываться при расчете дисперсионных зависимостей. В разделе 2.4 систематически изучаются коллективные возбуждения в различных двумерных и трехмерных жидкостях на основе моделирования методом МД. Особое внимание уделяется изучению зависимости размеров q_g области в обратного пространстве, соответствующей неустойчивым поперечным модам, от параметра неидеальности. Полученные результаты (в частности Рис. 2) обсуждаются в контексте изучения перехода от состояний с жидкко-подобной к газо-подобной динамике, который известен как кроссовер Френкеля. В разделе 2.5 обобщаются основные результаты главы.

Глава 3 посвящена изучению термодинамических свойств двумерных систем Юкавы. В разделе 3.1 приводится описание проводимых МД расчетов. В разделе 3.2 представлены результаты систематических расчетов термодинамических свойств двумерных систем частиц, взаимодействующих посредством

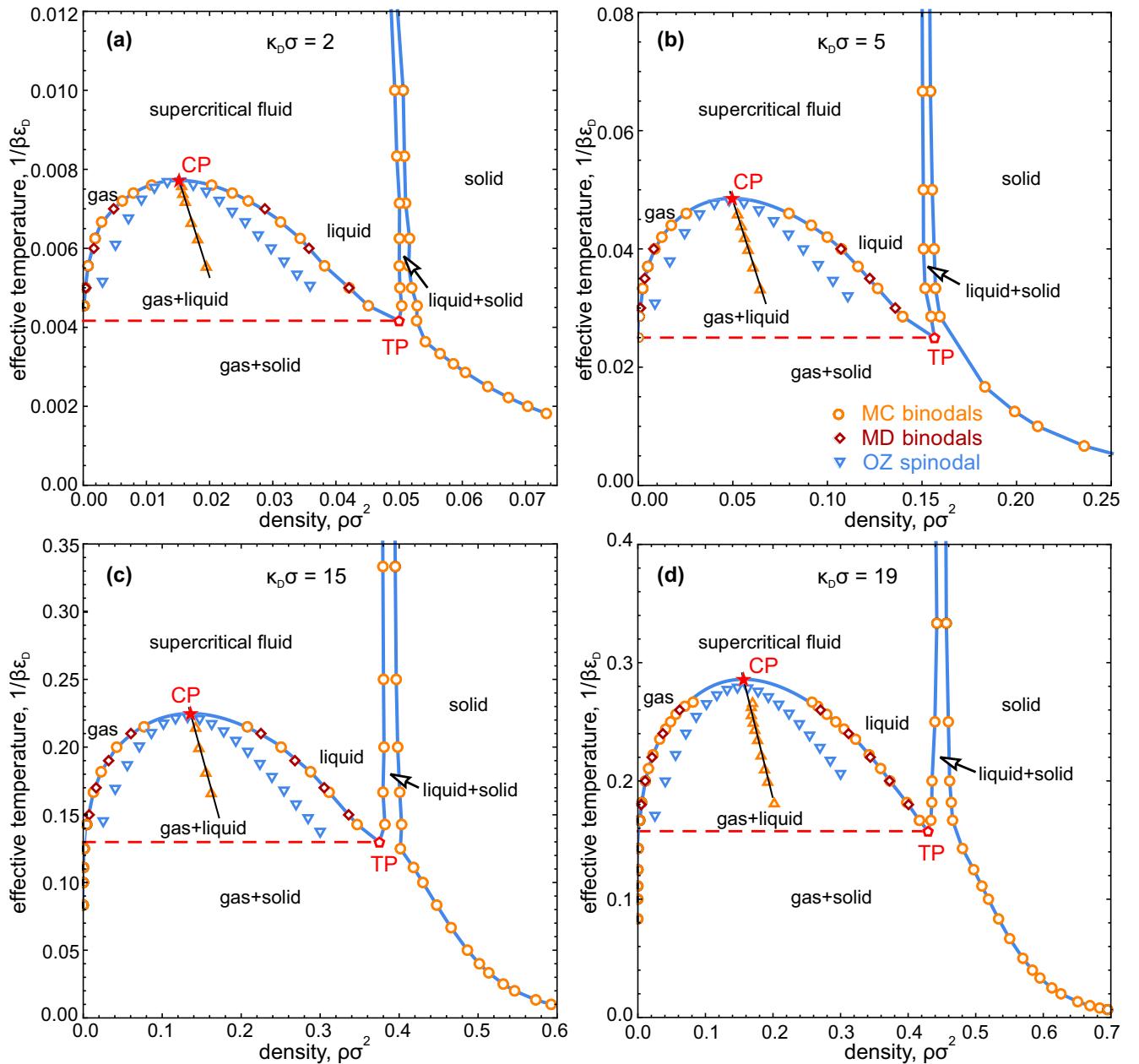


Рис. 3. Фазовые диаграммы двумерной системы Юкавы различной мягкости с дополнительным регулируемым изотропным дипольным притяжением. Сплошные синие линии соответствуют бинодалям, CP и TP указывают на критические и тройные точки, соответственно [4]

потенциала Юкавы, в широком диапазоне параметров состояния. В разделе 3.3 представлены результаты анализа экспериментов с жидкой комплексной (пылевой) плазмы. Показано, что экспериментально полученные спектры элементарных возбуждений в жидкости хорошо согласуются с результатами моделирования методом МД с использованием потенциала Юкавы. В разделе 3.4 представлены результаты расчета фазовых диаграмм для двумерных систем Юкавы с изотропным дипольным притяжением. На Рис. 3 представлены фазовые диаграммы двумерных систем Юкавы различной жесткости с дополнительным изотропным дипольным притяжением, рассчитанные на основе МД и

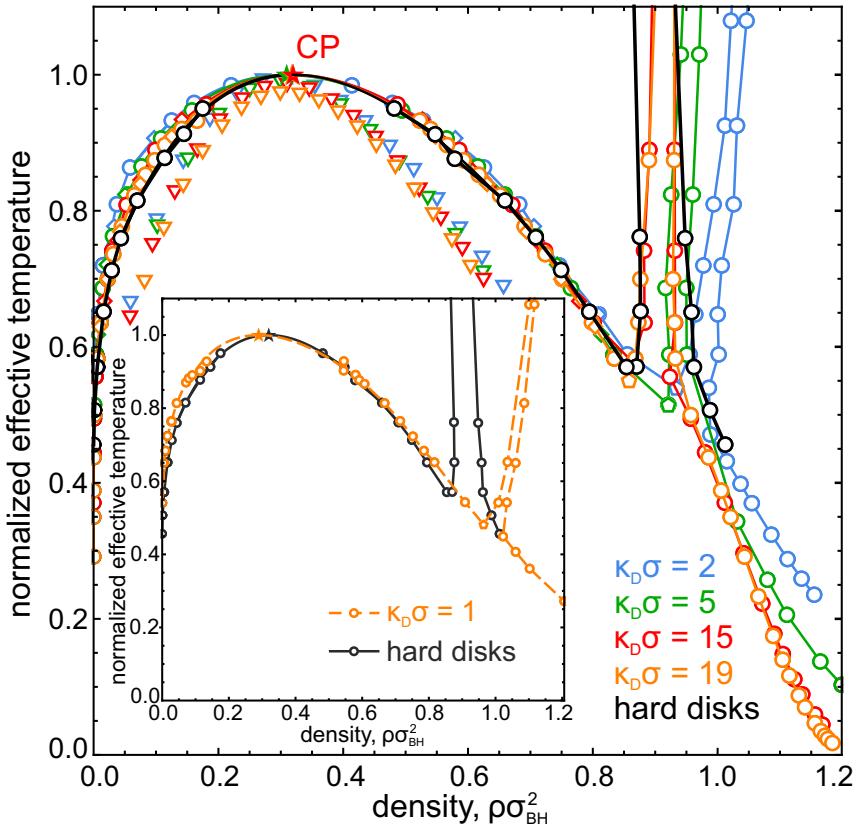


Рис. 4. Нормированные фазовые диаграммы. Цветами представлены фазовые диаграммы с Рис. 3, температуры которых нормированы на свои критические значения, а плотности нормированы с использованием радиуса Баркера-Хендерсона [4]

Монте-Карло. На Рис. 4 представлены диаграммы с Рис. 3 в нормированных координатах: эффективные температуры нормированы на критические температуры соответствующих диаграмм, а плотности нормированы с использованием радиуса Баркера-Хендерсона. В разделе 3.5 обобщаются основные результаты главы.

Глава 4 посвящена рассмотрению комплексной пылевой плазмы, как экспериментальной системы, допускающей измерение спектров элементарных возбуждений в жидкостях. В разделе 4.1 рассматриваются особенности динамики двумерных систем с невзаимными взаимодействиями. Показано, что в системах со скалярной радиально зависимой невзаимностью стационарное состояние системы определяется балансом между мощностями диссипации и энерговыделения из-за невзаимности. Установлено, что в таких системах, результирующие стационарные состояния системы зависят от начальных условий и образуют петли гистерезиса, что свидетельствует о диссипативном фазовом переходе в системе. Предложен простой подход к поиску стационарных состояний. На Рис. 5 представлена временная эволюция систем от разных начальных условий и при разных параметрах термостатирования. На Рис. 6 представлена диссипативная фазовая диаграмма такой системы. В заключении раздела обсуждается, каким образом полученные результаты объясняют ряд особенностей, наблюда-

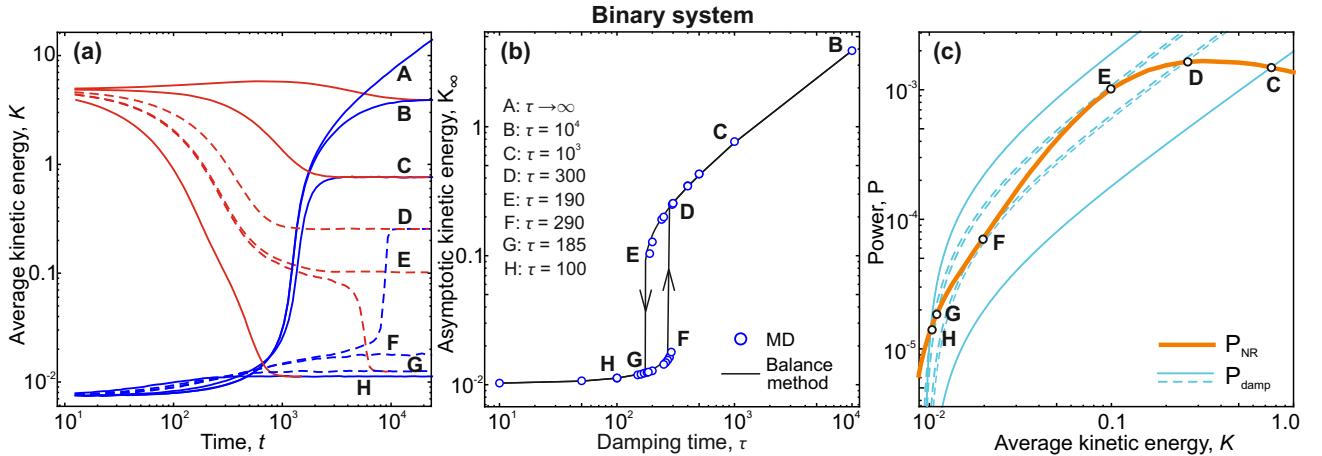


Рис. 5. Бинарная система с радиально-зависимой невзаимностью. а) Временная эволюция средней кинетической энергии $K(t)$ при различных временах затухания τ и начальных состояниях. Пунктирные линии относятся к петле гистерезиса, показанной на панели б). б) Асимптотическая кинетическая энергия K_∞ в зависимости от времен затухания τ . в) Зависимости мощность энерговыделения, обусловленного невзаимностью, P_{NR} (оранжевая линия) и энергообмена с термостатом P_{damp} (светло-голубые линии). Результаты показаны при $T_{th} = 10^{-2}$, время затухания τ указано на панели б) и обозначено буквами А-Н [2]

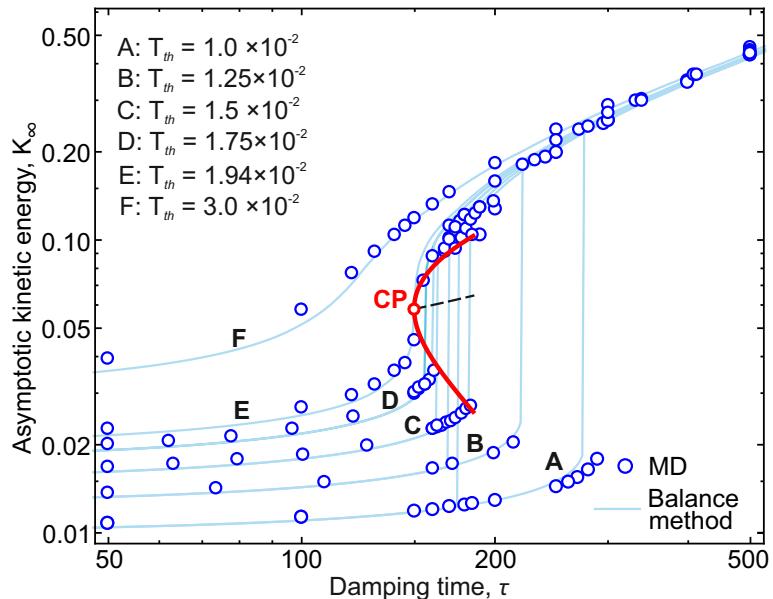


Рис. 6. Диссипативный спинодальный распад в системе с невзаимным эффективным взаимодействием. Асимптотическая энергия K_∞ в зависимости от времени затухания τ при различных температурах термостата T_{th} [2]

емых в экспериментах с комплексной (пылевой) плазмой в земных условиях. В разделе 4.2 предлагается простая модель взаимодействий пылевых частиц в комплексной пылевой плазме, учитывающая плазменные следы и позволяющая выполнять моделирование жидких состояний методами МД. Согласно предло-

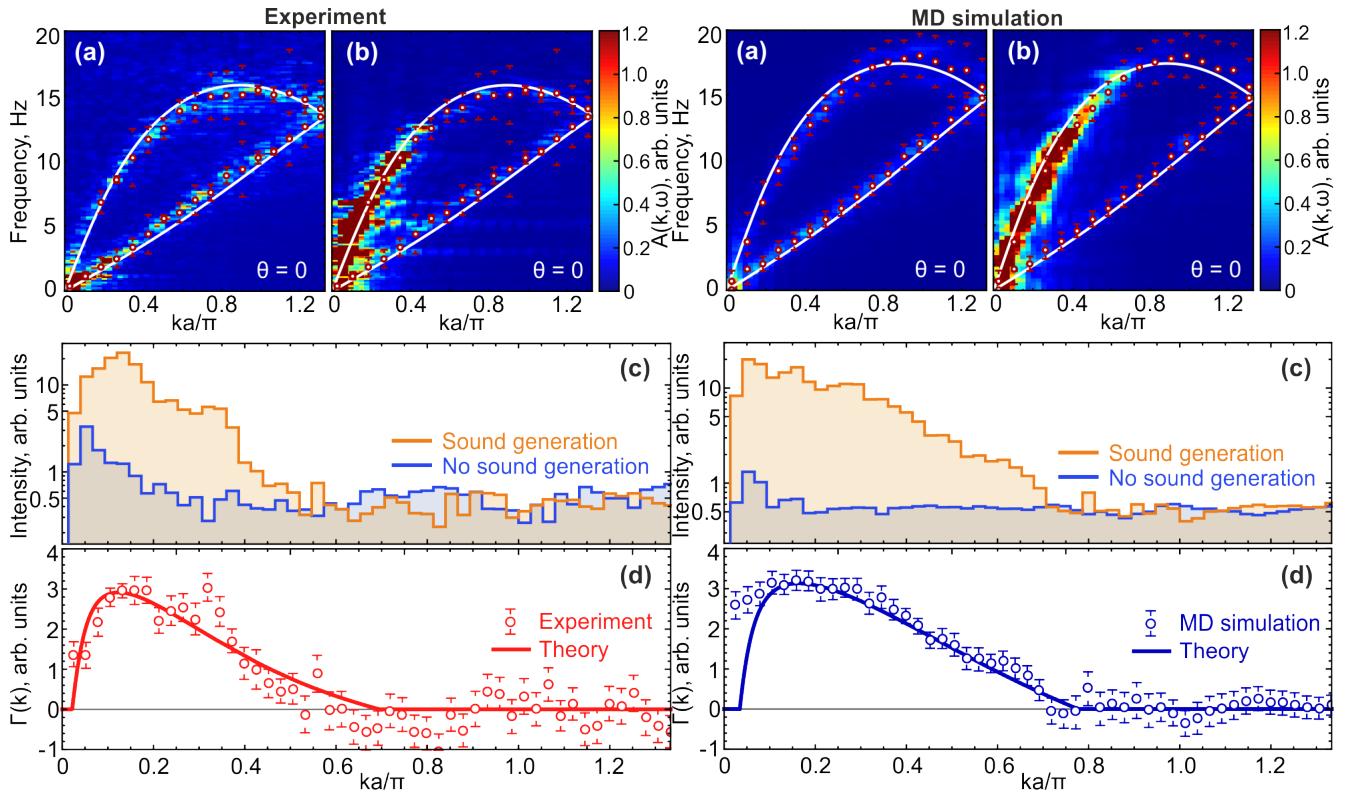


Рис. 7. Термоакустическая неустойчивость: Левая часть – данные эксперимента, правая часть – данные МД, описания совпадают. Спектры элементарных возбуждений в кристалле а) до начала генерации акустических волн б) после начала генерации. с) Интегральные интенсивности спектров флюктуаций $I(k)$. д) Спектр генерируемых акустических волн: символы – данные эксперимента/МД, сплошная линия – теоретический фит [1]

женной модели, взаимодействия частицы 1, находящейся в точке \mathbf{r}_1 и частицы 2 находящейся в точке \mathbf{r}_2 описываются:

$$\varphi(\mathbf{r}) = \epsilon \left[\frac{e^{-r/\lambda_D}}{r/\lambda_D} - q \frac{e^{-r_w/\lambda_D}}{r_w/\lambda_D} \left(1 + b \frac{e^{-r_w/\lambda_D}}{r_w/\lambda_D} \right)^{-1} \right], \quad (1)$$

где $\varphi(\mathbf{r})$ – потенциал частицы 1, в поле частицы 2 и ее плазменного следа, $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ – радиус вектор от частицы 2 к частице 1, $r = |\mathbf{r}|$ – расстояние между частицами, λ_D – длина экранирования Дебая, $\epsilon = Q^2/4\pi\epsilon_0\lambda_D$ – энергетический масштаб взаимодействия ϵ_0 – электрическая постоянная, Q – заряд частиц (как правило полагается, что заряды частиц совпадают), q – относительный заряд плазменного следа (по отношению к Q), $r_w = |\mathbf{r} - h\mathbf{e}_z|$ – расстояние от плазменного следа частицы 2 до частицы 1, \mathbf{e}_z – единичный вектор, направленный в сторону потока плазмы, h – эффективная длина плазменного следа, b – свободный параметр модели. Как правило, параметры плазменных следов имеют следующие значения: $h \sim 0.3\Delta$, где Δ – среднее расстояние между частицами, $q = 0.3$, $b = 0.05...0.1$. Предложенная модель позволяет воспроизводить основные явления, наблюдаемые в экспериментах, в частности термоакустиче-

скую неустойчивость на основе МД моделирования, что показано на Рис. 7. В разделе 4.3 обобщаются основные результаты главы.

В ЗАКЛЮЧЕНИИ обобщаются основные результаты диссертации.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

1. Систематически изучены спектры элементарных возбуждений в различных двумерных и трехмерных жидкостях в широком температурном диапазоне на основе компьютерного моделирования методом МД. Установлено, что метод, основанный на модели двух осцилляторов, позволяет получить наиболее точные и полные результаты для частот и коэффициентов затухания как высокочастотных, так и низкочастотных ветвей спектров возбуждения жидкостей в широком диапазоне термодинамических параметров. Показано, что дисперсионные зависимости, полученные при помощи модели двух осцилляторов, позволяют аналитически восстановить положения максимумов поперечной компоненты данной модели. Установлено, что в коротковолновом пределе наблюдается возврат к режиму индивидуальной динамики отдельных частиц, при котором интенсивности продольных и поперечных мод определяются максвелловскими распределениями скоростей частиц.
2. Разработана теоретическая модель, описывающая явление антикроссинга в жидкостях. Показано, что антикроссинг мод приводит к перераспределению спектров коллективных возбуждений, которое сопровождается образованием гибридных высокочастотных и низкочастотных мод (вместо продольных и поперечных), что должно учитываться при анализе МД и экспериментальных данных.
3. Показано, что совместный анализ мод, или анализ мод с учетом явления антикроссинга, позволяет оценить положение границы q -гар в широком диапазоне температур, далеко за пределами применимости метода восстановления дисперсионных зависимостей, основанного на анализе положения максимумов интенсивностей спектров. Измерены зависимости размеров области q -гар от температуры (параметра неидеальности) в различных двумерных и трехмерных жидкостях.
4. Установлено, что в трехмерных системах Леннарда-Джонса при кроссовере Френкеля, первую псевдозону Бриллюэна покидают не все устойчивые элементарные возмущения, а только непередемптиранные. Динамические и термодинамические критерии линии Френкеля согласуются друг с другом, если их формулировать только для непередемптиранных элементарных возбуждений. Показано, что такое согласие может существенным образом нарушаться в системах с более мягкими взаимодействиями. Более того, динамические и термодинамические критерии принципиально не согласуются друг с другом в случае двумерных жидкостей, что обусловлено более выраженнымми эффектами ангармонизма.

5. Систематически рассчитаны термодинамические свойства двумерных систем Юкавы. Рассчитаны фазовые диаграммы двумерных систем Юкавы с дополнительным индуцированным изотропным дипольным притяжением. Было установлено, что мягкость отталкивания Юкавы значительно влияет на положение критических и тройных точек, а также на поведение кристаллических ветвей бинодалей. В то же время, бинодали и спинодали в области жидкость-газ могут быть сопоставлены с таковыми для системы жестких дисков с дипольным притяжением, демонстрируя универсальность при различной мягкости отталкивания Юкавы.
6. Изучена динамика систем с невзаимными эффективными взаимодействиями между частицами. Получены условия, при выполнении которых система демонстрирует детальное динамическое равновесие, и можно ввести интеграл движения с размерностью энергии (псевдогамильтониан), в противном случае наблюдается нагрев системы. Показано, что в случае радиально-зависимой невзаимности из-за сложного вида зависимости мощностей от средней энергии система может наблюдаться бифуркация стационарных состояний, и диссипативный фазовый переход. Предложен и реализован программно простой балансовый подход, который позволяет рассчитать петли гистерезиса и диссипативную фазовую диаграмму с существенно более низкими вычислительными затратами чем при прямом МД моделировании.
7. Предложена простая модель взаимодействий пылевых частиц в комплексной (пылевой) плазме с учетом плазменных следов, позволяющая выполнять моделирование жидкого состояния методами МД. Показано, что предложенная модель позволяет воспроизводить в МД моделировании широкий круг явлений, наблюдавшихся в экспериментах: активационное и гистерезисное поведение, распространение фронтов неравновесного плавления, термоакустическую неустойчивость.
8. Проанализированы эксперименты с жидкой комплексной (пылевой) плазмой. На основе анализа распределений по скоростям и обратным локальным плотностям показано, что систему с высокой точностью можно рассматривать как термализованную 2D жидкость. На основе анализа спектров элементарных возбуждений установлено, что в экспериментах плазменной жидкостью наблюдается антикроссинг мод. Путем сопоставления результатов с МД моделированием, не учитывающим наличие плазменных следов, показано, что последние важны для термализации системы, но не оказывают существенного влияния на спектры элементарных возбуждений в рассмотренных экспериментальных режимах.

Публикации по результатам диссертации

Статьи в журналах, рекомендованных ВАК для опубликования результатов диссертаций на соискание степени кандидата наук:

1. Thermoacoustic instability in two-dimensional fluid complex plasmas / Nikita P. Kryuchkov, Egor V. Yakovlev, Evgeny A. Gorbunov et al. // Phys. Rev. Lett. 2018. Aug. Vol. 121. P. 075003. (0,38 п.л. / 0,19 п.л.)
2. Kryuchkov N. P., Ivlev A. V., Yurchenko S. O. Dissipative phase transitions in systems with nonreciprocal effective interactions // Soft Matter. 2018. Vol. 14, no. 47. P. 9720–9729. (0,63 п.л. / 0,31 п.л.)
3. Complex crystalline structures in a two-dimensional core-softened system / Nikita P. Kryuchkov, Stanislav O. Yurchenko, Yury D. Fomin et al. // Soft Matter. 2018. Vol. 14. P. 2152–2162. (0,75п.л. / 0,38 п.л.)
4. Phase diagram of two-dimensional colloids with yukawa repulsion and dipolar attraction / Nikita P. Kryuchkov, Frank Smallenburg, Alexei V. Ivlev et al. // The Journal of Chemical Physics. 2019. Mar. Vol. 150, no. 10. P. 104903. (0,56 п.л. / 0,28 п.л.)
5. Onset of transverse (shear) waves in strongly-coupled yukawa fluids / Sergey A. Khrapak, Alexey G. Khrapak, Nikita P. Kryuchkov, Stanislav O. Yurchenko // The Journal of Chemical Physics. 2019. Mar. Vol. 150, no. 10. P. 104503. (0,56 п.л. / 0,28 п.л.)
6. Collective modes of two-dimensional classical coulomb fluids / Sergey A. Khrapak, Nikita P. Kryuchkov, Lukia A. Mistryukova et al. // The Journal of Chemical Physics. 2018. Oct. Vol. 149, no. 13. P. 134114. (0,56 п.л. / 0,28 п.л.)
7. Kryuchkov N. P., Khrapak S. A., Yurchenko S. O. Thermodynamics of two-dimensional Yukawa systems across coupling regimes // The Journal of Chemical Physics. 2017. Vol. 146, no. 13. P. 134702. (0,69 п.л. / 0,34 п.л.)
8. Bizarre behavior of heat capacity in crystals due to interplay between two types of anharmonicities / Stanislav O. Yurchenko, Kirill A. Komarov, Nikita P. Kryuchkov et al. // The Journal of Chemical Physics. 2018. Vol. 148, no. 13. P. 134508. (0,63 п.л. / 0,32 п.л.)
9. Yurchenko S. O., Kryuchkov N. P., Ivlev A. V. Pair correlations in classical crystals: The shortest-graph method // The Journal of Chemical Physics. 2015. Vol. 143, no. 3. P. 034506. (0,56 п.л. / 0,28 п.л.)
10. Practical thermodynamics of Yukawa systems at strong coupling / Sergey A. Khrapak, Nikita P. Kryuchkov, Stanislav O. Yurchenko, Hubertus M. Thomas // The Journal of Chemical Physics. 2015. Vol. 142, no. 19. P. 194903. (0,44 п.л. / 0,22 п.л.)

11. Khrapak S. A., Kryuchkov N. P., Yurchenko S. O. Thermodynamics and dynamics of two-dimensional systems with dipolelike repulsive interactions // Phys. Rev. E . 2018. Vol. 97. P. 022616. (0,81 п.л. / 0,40 п.л.)
12. Flame propagation in two-dimensional solids: Particle-resolved studies with complex plasmas / S. O. Yurchenko, E. V. Yakovlev, L. Couedel et al. // Phys. Rev. E . 2017. Vol. 96. P. 043201. (0,5 п.л. / 0,25 п.л.)
13. Ion-specific and thermal effects in the stabilization of the gas nanobubble phase in bulk aqueous electrolyte solutions / Stanislav O. Yurchenko, Alexey V. Shkirin, Barry W. Ninham et al. // Langmuir. 2016. Vol. 32, no. 43. P. 11245–11255. (0,68 п.л. / 0,34 п.л.)
14. Experimental studies of two-dimensional complex plasma crystals: waves and instabilities / Lenaic Couedel, Vladimir M. Nosenko, Sergei Zhdanov et al. // Uspekhi Fizicheskikh Nauk. 2019. Jan. DOI: 10.3367/UFNe.2019.01.038520. (1,62 п.л. / 0,81 п.л.)
15. Yurchenko S. O., Kryuchkov N. P., Ivlev A. V. Interpolation method for pair correlations in classical crystals // Journal of Physics: Condensed Matter. 2016. Vol. 28, no. 23. P. 235401. (0,5 п.л. / 0,25 п.л.)

Труды конференций (индексируются в Scopus, Web of Science):

16. Improvement of experimental methods for studying dust plasma and colloidal systems / N.P. Kryuchkov, A.Y. Kislov, E.V. Yakovlev et al. // Frontiers in Optics 2016. — Optical Society of America, 2016. P. FTh4C.2. (0,19 п.л. / 0,9 п.л.)
17. Dissipative spinodal decomposition in systems with nonreciprocal effective interactions / N.P. Kryuchkov, L.A. Mistryukova, I.N. Aliev, S.O. Yurchenko // Journal of Physics: Conference Series. 2018. Dec. Vol. 1135. P. 012093. (0,63 п.л. / 0,32 п.л.)

Подписано в печать 03.07.2019

Объем: 1 усл. п. л.

Тираж: 100 экз. Заказ №_____

Отпечатано в типографии «11-й ФОРМАТ»

115230, г. Москва, Варшавское ш., 36

(499)788-78-56 www.autoreferat.ru