

МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМ. Н.Э. БАУМАНА
Лаборатория "Мягкой материи", кафедра "Физика"
Лаборатория "Терагерцевая техника", НОЦ "Фотоника и ИК-техника"



Крючков Н.П., Юрченко С.Ю.

Исследование фазовой диаграммы коллоидной системы во
внешнем вращающемся поле

22 сентября 2016 г.

Большой интерес привлекают системы частиц, допускающих проведение экспериментов с кинетическим уровнем разрешения, которые позволяют моделировать процессы реальных молекулярных систем.

Пылевая плазма – прекрасный пример подобных систем. Позволяет наблюдать процессы кристаллизации, плавления, нуклеации и пр.

Существенным недостатком таким систем является отсутствие притягивающей ветви потенциала \Rightarrow невозможность наблюдения переходов типа жидкость – газ.

Коллоидные системы во внешних вращающихся электрических полях

Электростатическое взаимодействие коллоидных частиц может быть описано в форме:

$$\beta u_{yuk}(r) = \beta \epsilon_{yuk} \frac{-\kappa(r - \sigma)}{r/\sigma}$$

$$\beta \epsilon_{yuk} = \frac{Z^2}{(1 + \kappa\sigma/2)^2} \frac{l_B}{\sigma}$$

$$Z_{\text{eff}} = \frac{4\sigma}{l_B} \frac{(1 + \kappa\sigma)^2}{1 + \kappa\sigma}$$

Потенциал, обусловленный внешним вращающимся электрическим полем, может быть представлен в виде:

$$u_{\text{dip}} = \frac{\epsilon_{\text{dip}}(E)}{r^3}$$

Полный потенциал взаимодействия коллоидных частиц:

$$u_{\text{tot}}(r) = u_{\text{yuk}}(r) + u_{\text{dip}}(r)$$

Построение фазовой диаграммы методом MD

Построение линий бинодали

Фитирование профиля плотности

$$\rho(z) = \frac{\rho_l + \rho_v}{2} - \frac{\rho_l - \rho_v}{2} \tanh\left(\frac{2(z - l)}{d}\right)$$

Восстановление линий спинодали

Вычисление профиля давления

$$p_N(z) = \rho(z) k_B T - \frac{1}{2A} \left\langle \sum_{i \neq j} |z_{ij}| \frac{1}{r_{ij}} \frac{\partial U}{\partial r_{ij}} \Theta(z_i, z_j) \right\rangle$$

$$p_T(z) = \rho(z) k_B T - \frac{1}{2A} \left\langle \sum_{i \neq j} \frac{x_{ij}^2}{|z_{ij}|} \frac{1}{r_{ij}} \frac{\partial U}{\partial r_{ij}} \Theta(z_i, z_j) \right\rangle$$

Фитирование профиля давления

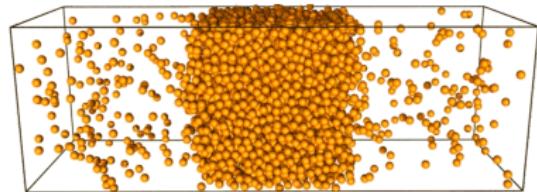
$$p_N(z) - p_T(z) = \operatorname{sech}^2(Z) [(a - b)(1 + \tanh^2(Z)) - 2(a + b)\tanh(Z)], \quad Z = \frac{2(z - h)}{d}$$

Комбинируя профиль плотности и давления можно получить выражение:

$$p_N(z) - p_T(z) = f(\rho).$$

J. Chem. Phys. 128, 114708 2008

Иллюстрация конфигурации системы



Параметры настоящего моделирования

$$N = 2.5 \cdot 10^5,$$

$$R_c = 25 \rho_0^{-1/2}$$

$$L_x = 500, \rho_0^{-1/2}$$

$$L_z = 2500, \rho_0^{-1/2}$$

Построение линии спинодали на основе решения уравнения Орнштейна-Цернике

Уравнение Орнштейна-Цернике

$$h(|\mathbf{r}|) = c(|\mathbf{r}|) + \rho \int_{\mathbf{R}^2} h(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) c(\mathbf{r}') d\mathbf{r}', \quad g(r) = h(r) + 1$$

Замыкающее соотношение РY

$$c(r) = \exp(-\beta U(r))(1 + \Gamma(r)) - \Gamma(r) - 1, \quad \Gamma(r) = h(r) - c(r)$$

Замыкающее соотношение HNC

$$c(r) = \exp(-\beta U(r) + \Gamma(r)) - \Gamma(r) - 1$$

Условие термодинамической самосогласованности

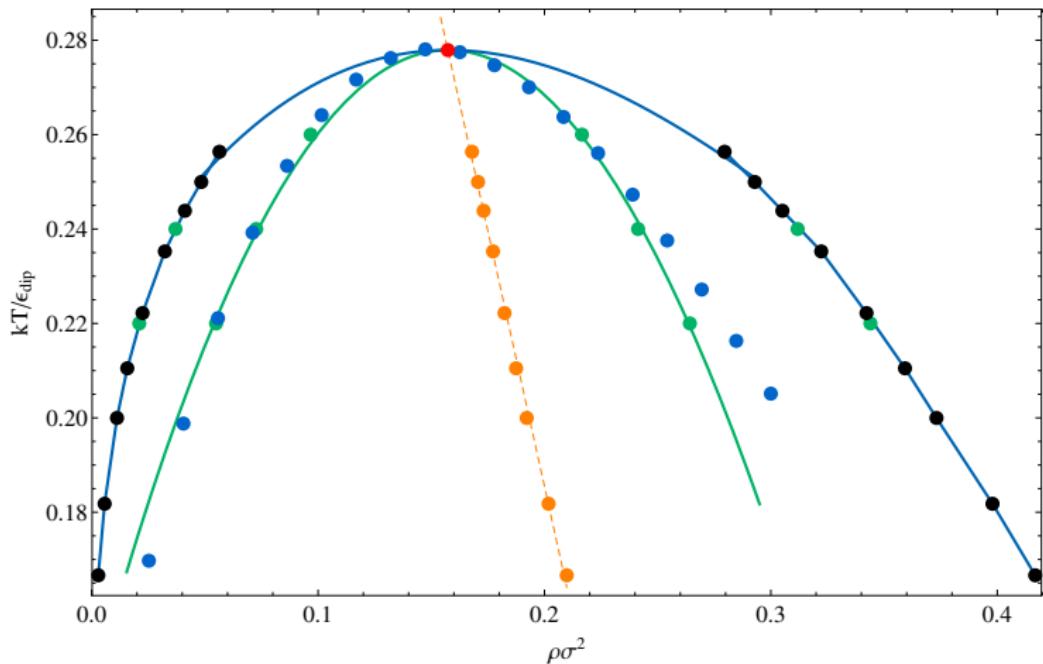
$$1 - \rho \int c(r) d\mathbf{r} = \frac{\partial \beta P^v}{\partial \rho}$$

$$\beta P^v = \rho - \frac{\beta \rho^2}{4} \int r \frac{dU}{dr} g(r) d\mathbf{r}$$

Замыкающее соотношение RY

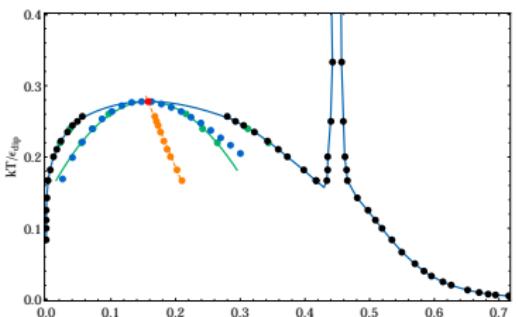
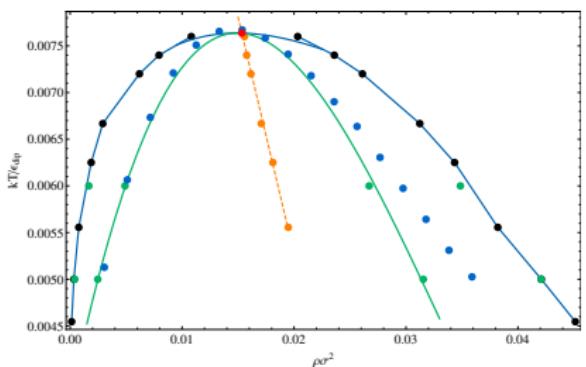
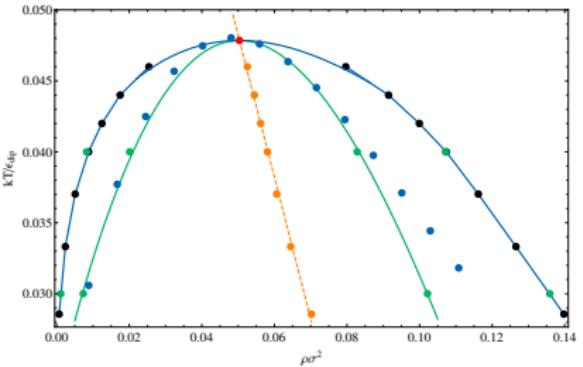
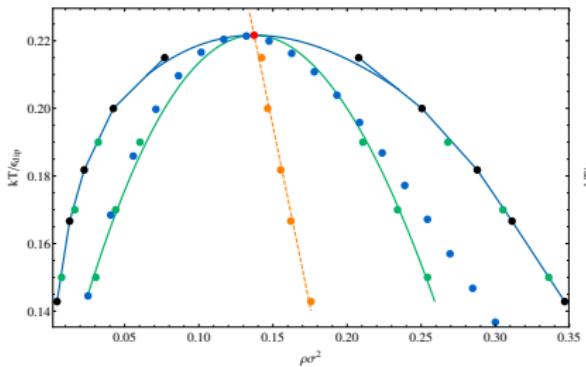
$$c(r) = \exp(-\beta U(r)) \left[1 + \frac{\exp(\Gamma(r)f(r)) - 1}{f(r)} \right] - \Gamma(r) - 1, \quad f(r) = 1 - \exp(-\alpha r)$$

Фазовая диаграмма для $\kappa\sigma = 19$



Фазовая диаграмма в области жидкость-газ для параметров $\kappa\sigma = 19$. Черные точки – положение бинодали (MC моделирование, термодинамическое интегрирование), зеленые точки – положение бинодали и спинодали (MD, восстановление на основе профиля плотности и давления), синие точки – положение спинодали, полученное на основе решения уравнения OZ-PY.

Фазовые диаграммы для других значений $\kappa\sigma$



Результаты:

- Исследовано поведение коллоидных систем во внешних вращающихся полях.
- Получены фазовые диаграммы для разных значений $\kappa\sigma$.
- Показана возможность перехода жидкость - газ в подобных системах.
- Выполнено построение линий спинодали в области жидкость-газ для различных $\kappa\sigma$.

План дальнейших исследований:

- Постановка серии оригинальных экспериментов с коллоидными системами во внешних вращающихся полях.
- Экспериментальное исследование фазовых диаграмм подобных систем.
- Сопоставление данных оригинальных экспериментов и результатов компьютерного моделирования.

Спасибо за внимание!