

УДК 536.6:533.9

Маренков В.І., Кучерський А.Ю.

*Одеський національний університет імені І.І. Мечникова
вул. Дворянська, 2, 65026 Одеса, Україна
maren0@ukr.net*

Статистична концепція розгляду і апроксимація Томаса Фермі в теорії властивостей гетерогенних плазмових систем

Запропоновано нову статистичну концепцію визначення електрофізичних параметрів гетерогенних плазмових систем (ГПС) засновану на осередненні термодинамічних параметрів за ансамблем миттєвих квазінейтральних чарунок плазми, що утримують макрочастинки у послідовні моменти часу. Розмір чарунки узагальнює поняття довжини екранування Дебая на випадок ГПС і дає можливість незводжувальну проблему далекосяжної кулонової взаємодії в підсистемі макрочастинок плазми перевести в ранг ефективної одночастинкової електрстатичної задачі. На основі спряження розв'язків для самоузгодженого електрстатичного потенціалу зовні- та всередині індивідуальних макрочастинок (МЧ) одержано трансцендентне рівняння для рівноважного електрохімічного потенціалу ГПС. Квантові поправки для електронів МЧ враховано у рамках квазікласичного наближення Томаса-Фермі. Визначено роль поляризаційних ефектів та проведено комп'ютерну симуляцію електрофізичних характеристик для широкого спектру визначальних параметрів ГПС з частинками металів в об'ємі.

В сучасних енерго- та ресурсозберігаючих технологіях широке впровадження знайшли гетерогенні плазмові системи (ГПС) з високим питомим ентальпійним вмістом (МГД- та ЕГД генератори [1], порошкова металургія [2], плазмове закалювання та обробка поверхонь [3], технологічне та енергетичне горіння в дисперсному виді [4], контрольована абляція та зменшення гідродинамічного опору космічних апаратів [5], властивості ерозивного факелу при взаємодії потужного лазерного випромінювання з речовиною [6], тощо). Сюди долучаються також проблеми прецизійного контролю при плазмовому напиленні електронних схем [7], фундаментальні дослідження в області опису електронних властивостей плазми твердого тіла з макроскопічними включеннями [8], новітні фулерен-технології (проблеми отримання та модифікації властивостей фулеренів, фулеритів, нанотрубок [9] і т.і.), обширне коло проблем моделювання властивостей та поведінки відкритих плазмових систем в умовах дії джерел термостату (фундаментальні та прикладні дослідження “dusty plasm’и” [10]). Область температур і тисків, у якій, як підсистеми ГПС, співіснують іонізований газ та конденсована дисперсна фаза, є добре дослідженою для однофазних систем (класична газова плазма, рідина, тверде тіло), але наявність багатозв'язної поверхні розділу фаз та кулонівської дальності у неупорядкованій ГПС

надзвичайно ускладнюють, а найчастіше унеможливають застосування осереднення властивостей та отримання характеристик ГПС за класичними схемами. Оскільки, з одного боку, індивідуальні макрочастинки КДФ виступають у ролі структурних елементів плазмового середовища, а з іншого – самі є макроскопічними підсистемами ГПС з характеристиками, що їх визначено як власними, так і параметрами оточуючого плазмового середовища. З огляду на дану обставину, на передньому плані постає проблема самоузгодженого статистичного опису властивостей ГПС на основі даних щодо “речовинних” параметрів макророзключень (частинок КДФ) та контрольованих параметрів термодинамічного стану (температури та тиску).

Розробка концептуального підґрунтя теоретичного опису термодинамічних властивостей ГПС з використанням принципу локальної термодинамічної рівноваги (ЛТР) та квазікласичної апроксимації для дисперсійного рівняння електронного компоненту макрочастинок визначає мету та окреслює основний напрямок досліджень і ланцюжок завдань, що склали підґрунтя наукового доробку і знайшли вирішення у роботі:

- 1) Запропоновано статистичне формулювання проблеми квазінейтральності ГПС засноване на понятті статистичних чарунок електронейтральності плазми; 2) В рамках ергодичної гіпотези, шляхом осереднення параметрів плазми за ансамблем чарунок ГПС, визначено функціональні залежності її електрофізичних характеристик від визначальних термодинамічних параметрів: температури, злічених концентрацій компонентів газової- та конденсованої фаз, електронних та діелектричних характеристик речовини макророзключень, тощо; 3) Визначено структуру локального максвелівського поля в околі індивідуальних макрочастинок КДФ, проаналізовано його вплив на ефективну роботу виходу електронів з поверхні макрочастинок; 4) Проблему самоузгодженого впливу електронних та діелектричних характеристик речовини макророзключень на властивості ГПС вирішено з використанням принципу локальної термодинамічної рівноваги (ЛТР) для просторових областей сумірних з розмірами чарунок; 5) В узагальненому варіанті розбудованого підходу розглянуто роль поляризаційних ефектів та їх внесок в електрофізичні характеристики стаціонарної ГПС у зовнішньому електричному полі.

1.Квазінейтральність гетерогенних плазмових систем.

У неупорядкованих системах з кулонівською взаємодією квазінейтральність в об’ємі зумовлена наявністю кулонівських кореляцій у русі зарядів. При певній густині структурних елементів, що несуть на собі електричний заряд, їх вільний рух видозмінюється таким чином, що в просторових областях значно менших загальної протяжності системи, спостерігається компенсація позитивних та негативних зарядів і здійснюється електростатичне екранування: в лагранжових координатах виділеного заряду напруженість електричного поля спадає з відстанню значно швидше ніж напруженості кулонівського поля створеного уєднаним зарядом. В газовій плазмі просторовим масштабам розділення зарядів служить довжина Дебая – відстань на якій самоузгоджений потенціал заряду в плазмі зменшується в e -разів порівняно з кулоновим. У гетерогенних плазмових системах макрочастинки КДФ мають суттєвий власний об’єм, гео-

метричні розміри якого є сумірними або перевищують значення радіусу Дебая для компонентів газової підсистеми. В цьому випадку виникає необхідність узагальнення поняття масштабу просторового розділення зарядів в ГПС. Таке узагальнення природнім чином здійснюється в рамках статистичного чарункового підходу [11] шляхом введення поняття миттєвої чарунки електронейтральності для індивідуальної макрочастинки КДФ. Згідно [11], електронейтральна чарунка C_ξ^z – це просторова область, центр якої співпадає з центром КЧ, а обмежувачу поверхню утворює множина кінцевих точок радіус-векторів, проведених з центру КЧ в різноманітних напрямках, причому довжини (модулі) цих векторів є щонайменшими з можливих і такі, що значення похідної миттєвого самоузгодженого потенціалу $\frac{\partial\varphi(\vec{r})}{\partial\vec{r}}$ за напрямком \vec{r} в точках простору, ними визначених, співпадають з осередненими за часом максвелівськими значеннями самоузгодженого потенціалу для відповідних точок простору, зайнятого плазмовою системою, в лабораторній (ейлеровій) системі координат. Записуючи для миттєвої конфігурації зарядів системи рівняння Пуасона в координатах виділеної макрочастинки, та проводячи його статистичне осереднення за ансамблем реалізацій системи, представленим у вигляді множини миттєвих чарунок, у які виділена КЧ попадає в послідовні моменти часу (у плазмі без поля – рис.:1,а); або в ГПС з електричним полем та стаціонарним струмом в об’ємі, що підтримуються джерелами термостату – рис.1,б)), незводжувальну проблему взаємодії мікрополів і зарядів ГПС, трансформуємо в ефективну електростатичну задачу про розподіл осередненого об’ємного електростатичного заряду та самоузгодженого потенціалу в статистичній чарунці електронейтральності – осередненій за ансамблем реалізацій ГПС електронейтральній області плазми C_ξ^z , яка має форму сфери для плазми без поля (рис.1, д)), та витягнутого впродовж поля сфероїда (рис.1,е)) для стаціонарного плазмового середовища в умовах дії джерел термостату. Ланцюжок перетворень чарунок 1,в) – 1,г) – 1,д) дає якісне уявлення щодо послідовних етапів статистичного осереднення заряду та потенціалу у сферично-симетричному випадку. Послідовність осереднення для миттєвих чарунок іншої геометрії має аналогічний характер, але форма результуючої осередненої чарунки несе на собі відбиток симетрії у розподілі імпульсів вільних зарядів ГПС. Так, у необмеженій плазмі з однорідним максвеловим полем в об’ємі C_ξ^z має форму витягнутого впродовж напрямку зовнішнього поля \vec{E}_0 сфероїда обертання (рис. 1е)). В необмеженій рівноважній плазмі на обмежувачій статистичну чарунку електронейтральності C_ξ^z поверхні похідна потенціалу за радіусом обертається до нуля, а сама чарунка внаслідок ізотропії системи буде сферично симетричною (див. рис.1в)). В плазмі зі стаціонарним струмом в об’ємі, який підтримується дією джерел термостату, чарунка має сфероїдальну форму (рис.1г)). Внаслідок значної різниці мас електронів, іонів та макрочастинок (маса електрона m_e є на порядки величин меншою маси іонів та КЧ), відносні зміщення “швидких” частинок – електронів, та “тяжких” –

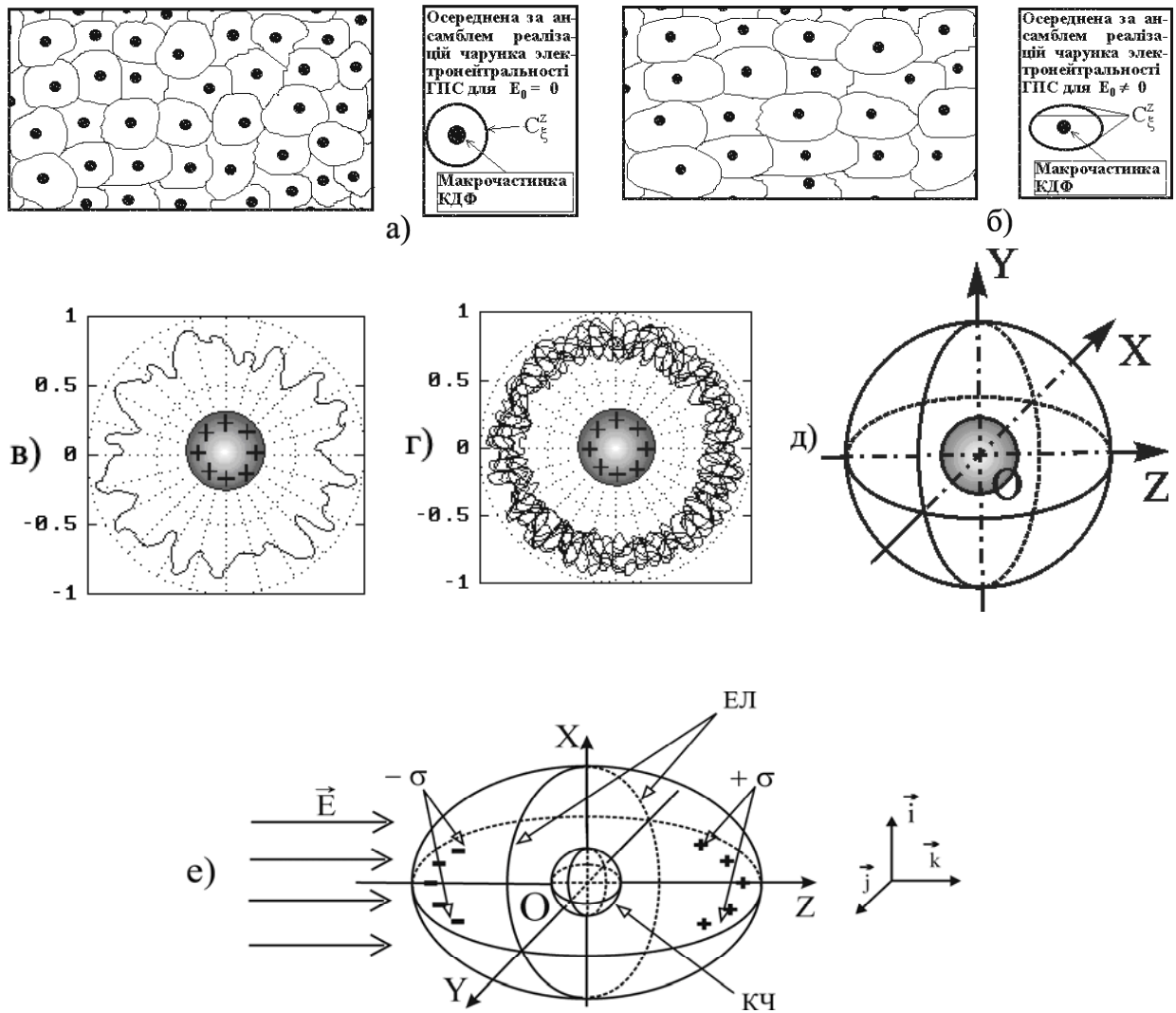


Рис. 1. Послідовні етапи та кінцеві результати статистичного осереднення миттєвих електронейтральних чарунк в рівноважній - а) та стаціонарній – ГПС; - б), у якій осереднені струм та розподіли мікрополів підтримуються за рахунок дії джерел термостату. в), г), д) – ланцюжок осереднення чарунки C_ξ для сферичної макрочастинки в ізотропній системі; е) – кінцева форма осередненої електронейтральної чарунки C_ξ^z у плазмі зі струмом: \vec{E} – максвелівське електричне поле в стаціонарній ГПС, σ – поляризаційні заряди на межі C_ξ^z при наявності електричного поля в об'ємі ГПС, $HOYZ$ – лагранжові координати індивідуальної КЧ, EL – екваторіальна лінія чарунки.

іонів та макрочастинок КДФ, виявляються в $\sqrt{m_i/m_e}$ разів більшими, і, як результат, ексцентриситет чарунки буде знехтливо малим, тобто її форма практично залишиться сферичною. Пояснюється це тим, що у впровадженнях плазмових систем у сучасні високотемпературні технології регулярна складова осередненої швидкості зарядів плазми в лабораторній системі координат (їх дрейфова швидкість, що нею визначено внески заряджених компонентів ГПС в густину струму) ϵ , зазвичай, набагато меншою теплової швидкості електронів та іонів, і незначні зміщення центральної макрочастинки в чарунці у напрямку зовнішнього поля завжди з достатньою точністю «відстежуються» легкими

компонентами її електрон-іонної атмосфери. Отже, за рахунок значної розбіжності в часах релаксації електрон-іонного компоненту ГПС та підсистеми макрочастинок КДФ, кожна з індивідуальних КЧ (при умові малості змін у функціях розподілу електронів та іонів за імпульсами) в дрейфуючій лагранжовій системі координат, пов'язаній з окремою КЧ, екранується таким же чином, як і в плазмі без поля, тобто коли дрейфова складова модуля їх осередненої швидкості (якою власне і визначається струм провідності) є незначною порівняно з тепловою. В цьому випадку, ґрунтуючись на принципі локальної термодинамічної рівноваги (ЛТР) [12] вплив зовнішнього електричного поля на електрон-іонні процеси в ГПС враховується через перенормування умов Неймана-Діріхле на зовнішній межі сферичної чарунки та на поверхні центральної макрочастинок, що дає можливість, у рамках узагальненої теорії, аналізувати поляризаційні ефекти та нерівноважну іонізацію в стаціонарній ГПС з електричним струмом в об'ємі. Відповідні рівняння наведено у розділі 3. Окремим пунктом у розбудованому підході стоїть визначення розміру електронейтральних чарунок плазмової системи, тобто, фактично, проблема визначення масштабу просторових кулонівських мікронеоднорідностей ГПС. У рівноважній плазмі з ансамблем ідентичних макрочастинок, як це випливає з принципу симетрії, об'єм чарунки S_{ξ}^z співпадає з питомим об'ємом, що припадає в системі на одну КЧ. В більш складних випадках (полідисперсна КДФ, дія зовнішніх джерел, тощо) – визначається шляхом мінімізації функціоналу вільної енергії Гельмгольца системи за розміром чарунок [12].

Загалом, застосування статистичної концепції щодо опису іонізації та мікроструктури ГПС полягає в наступному: а) за рахунок існування в плазмовій системі підсистем зі значним розходженням часів релаксації, та маючи на увазі кулонову дальню дію і кореляції зарядів в об'ємі, виділити в областях локальної термодинамічної рівноваги для індивідуальних КЧ миттєві електронейтральні чарунки щонайменшого, з можливих, розміру, та відстежувати у часі еволюцію параметрів КЧ і її найближчого оточення (протиіонів) в окремій чарунці електронейтральності; б) після осереднення за часом, тобто за ансамблем миттєвих чарунок, у які індивідуальна КЧ попадає в послідовні моменти часу, перейти до ефективної електростатичної задачі визначення зарядової рівноваги КЧ та осереднених параметрів ГПС в статистичній електронейтральній чарунці S_{ξ}^z ; в) використовуючи закони збереження та кінетики, записати для ЛТР-чарунок ГПС замкнену систему рівнянь, що пов'язують визначальні параметри плазмової системи (температуру, злічені концентрації частинок компонентів газової та конденсованої фаз, параметри окремих структурних елементів і т.і.) з її електрофізичними характеристиками в рівновазі або в стаціонарних станах, у яких усталені значення термодинамічних параметрів підтримуються дією джерел термостату; г) для осередненої чарунки певного розміру, що утримує індивідуальну КЧ, пов'язати електронні та діелектричні параметри речовини макрочастинок з осередненим рівнем електрохімічного потенціалу (рівнем Фермі) електронів плазми; д) отримати узагальнене аналітичне рівняння іонізації ГПС, що

пов'язує її визначальні термодинамічні параметри з рівнем Фермі електронного компоненту та просторовим масштабом кулонівських неоднорідностей в об'ємі.

2. Врахування зміни роботи виходу електронів з поверхні макрочастинок у плазму у наближенні Томаса-Фермі для електронів провідності.

Зазвичай зміни енергії Фермі $E_F^0 = F^0 - E_c^0$ для внутрішніх електронів частинок КДФ, що контактують з плазмовим середовищем і в результаті набувають певного заряду $z \cdot e$ (e - заряд протона, z - зарядове число), не враховуються, оскільки втрата або надлишок сумарного числа електронів КЧ за рахунок процесів прилипання чи нейтралізації іонів на або термоемісії з поверхні макрочастинки є знехтливо малими, порівняно з їх середньою кількістю в зоні провідності металевої КЧ [13]. В квазікласичному наближенні Томаса-Фермі густина електронів провідності буде [14]

$$n_e^0 = \frac{1}{3\pi^2} \left(\frac{2m_e}{\hbar^2} \right)^{3/2} \cdot (E_F^0)^{3/2}. \quad (1)$$

Для достатньо великих частинок загальне число електронів у зоні провідності металевої КЧ $n_e^0 \cdot V_p \gg z$ (V_p - власний об'єм макрочастинки). В області нанорозмірів КДФ ця нерівність значно послаблюється, оскільки число втрачених або набутих частинкою у плазмі електронів при її власному розмірі $r_p \leq 10^{-9}$ м стає порівнюваним з їх загальним утриманням у зоні провідності КЧ. Таким чином в області нанорозмірів КДФ виникає необхідність врахування перерозподілу електронного компоненту у власному об'ємі індивідуальних КЧ. Розподіл об'ємного заряду та самоузгодженого потенціалу всередині окремої КЧ дефінується рівнянням Пуасона-Фермі (РПФ) [12], у якому локальне значення густини об'ємного заряду визначається у рамках апроксимації Томаса-Фермі для електронного компоненту КДФ [15]

$$\frac{\partial^2 \phi^i(r)}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \cdot \frac{\partial \phi^i(r)}{\partial r} = - \frac{4\pi e}{\epsilon_p} \cdot [n_i^0 - n_e(r)], \quad (2)$$

n_i^0 - іонна концентрація (покладається незмінною при перерозподілі електронів в об'ємі КЧ); ϵ_p - діелектрична проникність речовини макрочастинок. В плазмі "без поля" межові умови Діріхле-Неймана для РПФ (2) записуються у виді

$$\phi^i(0) = \phi_0^i; \quad \left. \frac{\partial \phi^i}{\partial r} \right|_{r=0} = 0. \quad (3)$$

Потенціальна електростатична енергія електронів в самоузгодженому полі зарядів плазми $[-e \cdot \phi^i(r)]$ за модулем є завжди набагато меншою енергії Фермі E_F^0 електронів зони провідності частинок, і права частина РПФ допускає лінеаризацію за степенями $\Phi^i = \frac{e \cdot \phi^i}{E_F^0}$ - безрозмірного "внутрішнього" потенціалу

КЧ. З врахуванням (1), кінцеву форму задачі Коши для потенціалу Φ^i запишемо

$$\frac{\partial^2 \Phi^i}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \cdot \frac{\partial \Phi^i}{\partial r} = \tilde{\kappa}_F^2 \cdot (\Phi^i + \tilde{\alpha}); \quad \Phi^i(0) = \Phi_0^i, \quad [\Phi^i(0)]' = 0. \quad (4)$$

$$\kappa_F = \sqrt{\frac{2}{\varepsilon_p \cdot \pi} \cdot \left(\frac{2m_e}{\hbar^2}\right)^{3/2} \cdot (E_F^0)^{1/2} \cdot \left(1 + \frac{F - F^0}{E_F^0}\right)^{1/2}},$$

$$\tilde{\alpha} = \left[\frac{2}{3} \cdot \left(1 + \frac{F - F^0}{E_F^0}\right) - \left(1 + \frac{F - F^0}{E_F^0}\right)^{-1/2} \right].$$

Тут Φ^i – відраховується від рівня енергії дна зони провідності металу E_c^0 ; ε_p – діелектрична проникність речовини КЧ; κ_F – значення оберненої довжини Фермі електронного компоненту макрочастинок; F та F^0 – відповідно збурене та незбурене значення рівня Фермі електронів провідності КЧ відраховані відносно рівня вакууму; $\tilde{\alpha}$ - відносний зсув енергетичних рівнів електронів КЧ за рахунок взаємодії з самоузгодженим полем плазми.

Рівняння Пуасона-Больцмана, що дефінує розподіл “зовнішнього”, нормованого на теплову енергію самоузгодженого потенціалу $\Phi^e = \frac{e \cdot \Phi^e}{kT}$ в об’ємі чарунки $C'_\xi = C_\xi^z \setminus V_p$ поза власним об’ємом макрочастинок, має вид, аналогічний (2)

$$\frac{\partial^2 \Phi^e(r)}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \cdot \frac{\partial \Phi^e(r)}{\partial r} = -\frac{4\pi e}{\varepsilon_G} \cdot [n_i(r) - n_e(r)], \quad (5)$$

ε_G – діелектрична проникність буферного газу. В області визначальних параметрів ГПС, де $\Phi^e < 1$, тобто для слабкоіонізованих систем, інтеграл рівняння (5) з межовими умовами Неймана для потенціалу на поверхні частинки (для $r = r_p$) та на поверхні чарунки (при $r = r_c$), і вибором нульового рівня потенціалу на її зовнішній межі

$$\left. \frac{\partial \Phi^e}{\partial r} \right|_{r=r_p} = -\frac{z \cdot e^2}{\varepsilon_G \cdot r_p^2}; \quad \left. \frac{\partial \Phi^e}{\partial r} \right|_{r=r_c} = 0; \quad \Phi^e(r_c) = 0 \quad (6)$$

має вид

$$\Phi^e(r) = \frac{\alpha}{\kappa \cdot r} \cdot \{ \kappa r_c \cdot ch[\kappa(r_c - r)] - sh[\kappa(r_c - r)] - \kappa r \}. \quad (7)$$

В (7) використано позначення: $\kappa = \sqrt{\frac{4\pi e^2}{kT} \cdot (n_{e0} + n_{i0})}$ – обернена довжина

Дебая для електронів та іонів ГПС на межі чарунки; $\alpha = (n_{e0} - n_{i0}) \cdot (n_{e0} + n_{i0})^{-1}$ - параметр відносного внеску КДФ в іонізацію газової фази. Спряження розв’язків РПФ – (2) та РПБ – (5), на поверхні індивідуальної частинки, отриманих для найпростішої модельної системи – плазмозоля, утвореного зависю ідентичних емітуючих макрочастинок в високотемпературному буферному газі [16], дає можливість безпосередньо отримати аналітичне рівняння для невідомо-

мого рівня електрохімічного потенціалу плазмової системи F . При цьому зазначимо, що обезрозмірений потенціал Φ^i (тобто, фактично електростатична енергія електронів у самоузгодженому електростатичному полі зарядів ГПС у межах власного об'єму індивідуальної КЧ) відраховується від значень рівнів енергії електронів у незбуреній речовині КЧ. Так, в центрі макрочастинки рівень дна зони провідності, як і всі інші, зміщується в енергетичному просторі відносно незбуреного рівня рівня дна зони провідності E_c^0 (а значить і відносно рівня вакууму) на $\left\{ e \cdot \varphi^i(0) \cdot [E_F^0]^{-1} \right\} \equiv \Phi_0^i$ безрозмірних одиниць енергії, що їх визначено енергією Фермі речовини КДФ. Таким чином, в умові спряження розв'язків "внутрішньої" та зовнішньої задач Коши для самоузгодженого потенціалу Φ

$$\Phi^i(r_p) = \frac{kT}{E_F^0} \cdot \Phi^e(r_p) + C_1. \quad (8)$$

Константа C_1 визначається різницею початкових рівнів відліку безрозмірного потенціалу для "внутрішніх" і "зовнішніх" електронів у чарунці в енергетичній шкалі: в об'ємі КЧ потенціальна енергія електронів відраховується від дна зони провідності E_c^0 , для електронів зовні КЧ – від рівня вакууму. Отже у рівнянні (8)

$$C_1 = \tilde{E}_c^0 \equiv E_c^0 \cdot (E_F^0)^{-1}. \quad (9)$$

Підставляючи розв'язок рівняння (4) і вирази (7) та (9) в умову спряження потенціалів на поверхні макрочастинки (8), після деяких перетворень та спрощень, кінцево отримаємо трансцендентне рівняння щодо невідомого рівня електрохімічного потенціалу (рівня Фермі) електронного компоненту плазмозоля F

$$\frac{\varepsilon_p^{-1} \cdot th(\kappa_F r_p)}{\kappa_F r_p - tk(\kappa_F r_p)} \cdot \left\{ 1 + \frac{\chi_p \cdot [\chi_c \cdot sh(\chi_c - \chi_p) - ch(\chi_c - \chi_p) + 1]}{\chi_c \cdot ch(\chi_c - \chi_p) - sh(\chi_c - \chi_p) - \chi_p} \right\} = 1 + \frac{\tilde{\alpha} - 1 - \tilde{W}^0}{\tilde{\Phi}_p^e}. \quad (10)$$

Окрім означених раніше, в рівняння (10) входять величини

$$\chi_c = \kappa \cdot r_c; \quad \chi_p = \kappa \cdot r_p; \quad \tilde{\Phi}_p^e = \frac{e\varphi^e(r_p)}{E_F^0}, \quad (9)$$

відповідно: безрозмірні радіуси чарунки та макрочастинки, і потенціал поверхні КЧ, нормований на енергію Фермі речовини КДФ. Такий масштаб енергетичної шкали обрано для узгодження даних обчислювального експерименту в рамках "внутрішньої" та "зовнішньої" електростатичних задач щодо визначення розподілів самоузгодженого потенціалу плазми шляхом розв'язку відповідних рівнянь Пуассона (рівняння (2) та (5)).

Отримане рівняння пов'язує визначальні термодинамічні параметри плазмозолю: температуру, зліченну концентрацію частинок КДФ, їх розмір, електронні та діелектричні константи речовини макрочастинок з його електрофізичними характеристиками у станах термоіонізаційної рівноваги: середнім за ансамблем реалізацій системи зарядом окремих КЧ, загальним рівнем іонізації га-

Таблиця 1
Експериментальні значення параметрів металевих
макрочастинок з ансамблю КДФ

№	Метал	Хімічн. символ	$T_{пл}$, К	$T_{кит}$, К	W^0 , eВ	A ; $\rho \cdot 10^{-3}$, кг/м ³	E_F^0 , eВ
1	Титан	₂₂ Ti	1881	3659	3.95	47.8800; 4.505	5.3831
2	Ванадій	₂₃ V	2190	3665	4.12	50.9415; 5.960	6.2247
3	Хром	₂₄ Cr	2150	2945	4.58	51.9961; 7.18-7.20	6.9519
4	Залізо	₂₆ Fe	1811	3145	4.31	55.8470; 7.874	7.0491
5	Цирконій	₄₀ Zr	2124	4613	3.90	91.2240; 6.450	4.4494
6	Ніобій	₄₁ Nb	2742	5073	3.99	92.9064; 8.570	5.3124
7	Молібден	₄₂ Mo	2993	4973	4.30	95.9400; 10.220	5.8475
8	Паладій	₄₆ Pd	1827	3273	4.80	106.4200; 12.020	6.0803
9	Гафній	₇₂ Hf	2503	5173	3.53	178.4900; 13.310	4.6101
10	Тантал	₇₃ Ta	3269	5623	4.12	180.9479; 16.654	5.3045
11	Вольфрам	₇₄ W	3693	5953	4.54	183.8500; 19.350	5.8007
12	Реній	₇₅ Re	3553	5900	5.00	186.2070; 21.020	6.0780
13	Осмій	₇₆ Os	3318	5300	4.70	190.2000; 22.570	6.2837
14	Іридій	₇₇ Ir	2720	4653	5.27	192.2200; 22.420	6.2120
15	Платина	₇₈ Pt	2045	4100	5.32	195.0800; 21.450	5.9724

зової фази, розподілами локального електростатичного поля в околі індивідуальних макрочастинок. Таким чином воно фактично є рівнянням стану плазмозоля, представленим в термінах електрофізичних параметрів. Електрофізичні параметри плазмозолів та їх залежності можуть бути безпосередньо розраховані на основі розв'язку рівняння (8) для електрохімічного потенціалу електронного компоненту плазми F .

Визначальні параметри незбуреної речовини КДФ для завдань комп'ютерної симуляції характеристик плазмозолів, утворених металевим конденсатом ідентичних сферичних КЧ, обирались із таблиці 1, побудованої на основі експериментальних даних наведених у довіднику [17].

В таблиці 2 представлено 3D-графіки параметричних залежностей рівня Фермі, зарядового числа та електронної концентрації в плазмозолях утворених частинками тугоплавких металів: платини, вольфраму, цирконію, ренію, танталу, осмію, тощо в високотемпературному буферному газі (аргоні). В комп'ютерному експерименті температурний інтервал зависі металевого конденсату в високотемпературному буферному газі лімітувався температурою співіснування газової та конденсованої фаз ($T_{пл}$ або $T_{кит}$) для відповідної речовини КДФ, див. табл.1). Вихідні термодинамічні параметри плазмозолів та межі їх зміни наведено у верхньому рядку таблиці 2, причому можливі значення

електронних та діелектричних параметрів речовини КДФ в рамках комп'ютерної симуляції і проведеного обчислювального експерименту охоплюють весь можливий інтервал значень для металевих макрочастинок [20]. Одиниці виміру вихідних термодинамічних параметрів плазмозолів у площинах їх означення (горизонтальні площини на 3D- графіках) відносні, і, в залежності від обраного інтервалу зміни, координатна сітка впродовж відповідної вісі, обирається в звичайному, або логарифмічному масштабі. Для всіх графіків в таблиці 2 крок у відносному масштабі складає 0.02, тобто значення координати вузла “j” визначається за формулою: $x_j = [x_{\min} + 0.02 \cdot (x_{\max} - x_{\min}) \cdot (j - 1)]$, $j = 1, 2, 3, \dots, 51$.

З графіків видно, що іонізація нанорозмірних плазмозолів є суттєво залежною від температури ГПС, концентрації КЧ у плазмозолі, власного геометричного розміру макрочастинок, рівня Фермі (роботи виходу) та енергії Фермі речовини КЧ (що нею, в рамках апроксимації Томаса-Фермі, визначено концентрацію носіїв у зоні провідності металевих КЧ, і яка узгоджено змінюється зі зміною умов в оточуючій частинку плазмі). Значення фіксованих термодинамічних параметрів у першому, другому та третьому стовбцях табл. 2, обрано близькими до відповідних значень металів: платини, вольфраму та цирконію з метою проведення числових оцінок рівня іонізації та зарядових чисел у плазмолях утворених завсями КДФ з даних матеріалів у високотемпературному буферному газі. Як показує аналіз даних комп'ютерного експерименту, подібний характер залежностей рівня Фермі електронів та їх зліченної концентрації в газовій фазі плазмозолу проявляється в обширній області визначальних параметрів плазми. Звертає на себе увагу наявність вираженого мінімуму за температурою для зарядових чисел КЧ та зліченної концентрації електронів у газовій фазі плазмозолу (другий та третій стовбці в таблиці 2). Фізично, зменшення іонізації КДФ і газу при зростанні температури плазми зумовлюється на поверхні індивідуальних КЧ конкуренцією потоків електронів емісії та прилипання, що переходять у газову фазу, або долучаються до ансамблю колективізованих електронів КЧ.

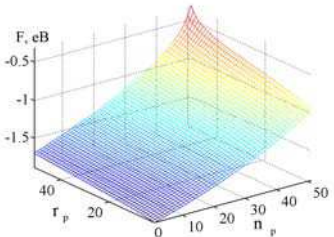
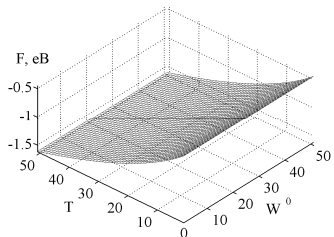
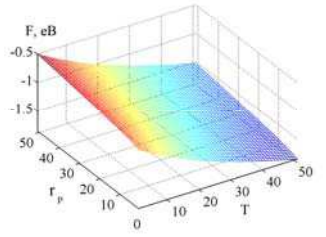
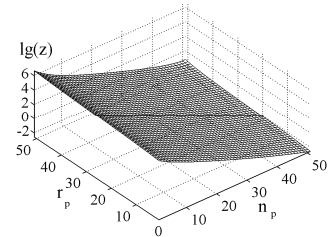
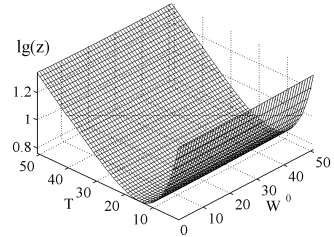
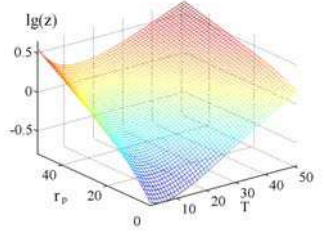
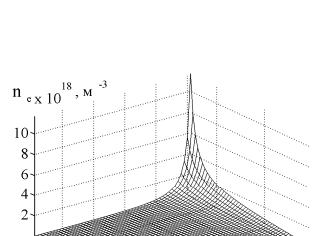
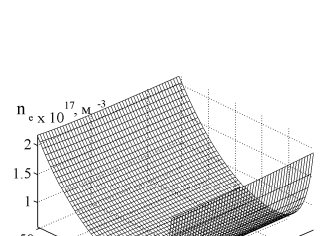
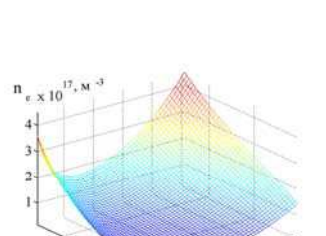
3. Гетерогенна плазма в електричному полі зарядів термостату: роль поляризаційних ефектів.

В стаціонарних режимах функціонування плазмових установок за рахунок дії зовнішніх (по відношенню до плазмового об'єму) джерел: енергії, імпульсу, маси та електричного заряду, в просторовій області, зайнятій плазмовим робочим тілом, встановлюються стаціонарні розподіли локальних термодинамічних параметрів та їх градієнтів. Нехтуючи змінами останніх у малих за геометричними розмірами областях, які, ґрунтуючись на принципі локальної термодинамічної рівноваги (ЛТР) Кубо [18], з достатнім ступенем точності можна вважати локально-рівноважними, проблему визначення електрофізичних властивостей ГПС у межах обраного інтервалу відносної точності апроксимації можна вирішувати на основі рівняння стану для кожної з областей ЛТР окремо, з використанням даних щодо профілю градієнтів осереднених параметрів плазми, які дефінуються джерелами термостату (зовнішніми джерелами). Для керуван-

ня, оптимізації та діагностики електрон-іонних процесів у промислових та лабораторних установках зазвичай використовують “накладення” на плазмовий об’єм електромагнітних полів, створених зовнішніми джерелами [19]. Наявність стаціонарних полів градієнтів термодинамічних параметрів, зокрема максвелівського електростатичного поля в ГПС зі струмом, супроводжується дисипацією енергії та генерацією ентропії в об’ємі ГПС, локальні стаціонарні зна-

Таблиця 2

Електрофізичні параметри плазмозолів, утворених наночастинками тугоплавких металів у високотемпературному газовому середовищі

Електрофізичний параметр	Визначальні термодинамічні параметри плазмозолів [20, С.99-569]		
плазмозолу як функція від геометричного розміру КЧ r_p і концентрації n_p	Платина ($T_{пл.} = 2045$ К); $W^0 = 5.32$ еВ; $E_F^0 = 5.97$ еВ $n_p \in [10^{10}, 10^{20}] \text{ м}^{-3}$; $r_p \in [5 \cdot 10^{-10}, 5 \cdot 10^{-7}] \text{ м}$ $T = 2000$ К.	Вольфрам ($T_{пл.} = 3693$ К); $W^0 = 4.54$ еВ; $E_F^0 = 5.80$ еВ; $r_p = 5 \cdot 10^{-8} \text{ м}$, $n_p = 10^{16} \text{ м}^{-3}$, $W \in [1.5, 6.5] \text{ еВ}$ $T \in [1000, 3000] \text{ К}$	Цирконій ($T_{пл.} = 2125$ К); $F^0 = 3.90$ еВ; $E_F^0 = 4.45$ еВ $r_p \in [5 \cdot 10^{-10}, 5 \cdot 10^{-7}] \text{ м}$ $T \in [1000, 3000] \text{ К}$ $n_p = 10^{17} \text{ м}^{-3}$
Рівень Фермі електронів плазмової системи F , еВ			
Зарядове число макрочастинок плазмозолу z			
Локальна концентрація електронів в газовій фазі плазмозолів на межах електронейтральних чарунок C_{ξ}^z			

чення рівня якої в областях ЛТР, як, власне, і інших термодинамічних потенціалів, підтримуються за рахунок тепловідводу крізь поверхню, що нею виділено плазмову систему. Оскільки релаксаційні процеси та граничні ефекти лежать поза областю нашого розгляду, в подальшому покладаємо ГПС необмеженою системою, у якій за рахунок дії зовнішніх джерел реалізується ЛТР та існують (в лабораторній системі відліку) стаціонарні поля термодинамічних параметрів та їх градієнтів, такі, що для просторових масштабів сумірних з розмірами областей ЛТР з достатнім запасом точності можуть розглядатись як однорідні за просторовими координатами. В такому наближенні, кожна з осереднених за ансамблем реалізацій системи електронейтральних чарунок (див. рис. 1, е)), центр якої суміщено з центром лагранжевих координат макрочастинки, буде знаходитись під дією максвелівського електростатичного поля плазми, причому його значення на границі C_{ξ}^z , у відповідності з означенням чарунок, будуть співпадати з осередненим за об'ємом значенням \vec{E} в лабораторній системі відліку. Таким чином, інтегральні характеристики ГПС, зокрема максвелові значення електрофізичних параметрів поляризованої зовнішнім полем ГПС, у рамках запропонованого підходу природно (через граничні умови ефективної електростатичної задачі) пов'язуються з локальними розподілами значень термодинамічних параметрів плазмової системи у межах об'ємних кулонових мікронеоднорідностей - електронейтральних чарунках C_{ξ}^z .

Литература:

1. *Marenkov V.I.* Polarization Influence on the Aerosol Plasma Ionization // Journal of Aerosol Science. –2001. – Vol.32, Suppl. 1. – P. S995 - S996.
2. *Keizer J.* Statistical Thermodynamics of Nonequilibrium Processes by Springer. – Verlag New-York Inc. – 1987. – 608 p.
3. *Marenkov V.I.* Coulomb Inhomogeneities in Dusty Plasma Systems. – Physics of Liquid Matter: Modern Problem. // Abstracts of PLM MP, Kyiv. – September 14-19, 2001. – P.1-9.
4. *Marenkov V.I.* Connection of the particles charges with their size distribution in dusty plasma systems. // AAAR2002 Annual Conference. – Oktober 7-11, 2002. – North Carolina, USA. – PD5 – 08.
5. *Маренков В.И.* Границы применимости моделей гетерогенных плазменных систем. // Дисперсные системы. XX научная конференция стран СНГ, 23-27 сент. 2002 г., Одесса, Украина / Тез. докл. – Одесса: Астропринт, 2002. – С.192 – 194.
6. *Marenkov V.I.* Correlation energy and Coulomb microinhomogeneities of heterogeneous plasma systems. – CMD 18-2000, Montreux, Switzerland. – 2000, P. 419.
7. *Маренков В.И.* Электрофизические характеристики плазмы с макрочастицами конденсированной дисперсной фазы и атомами щелочных металлов в газовой фазе // Физика аэродисперсных систем. – 1998. – Вып. 37. – С. 128-143.

8. *Маренков В.І.* Пасивний електростатичний зонд у запиленій плазмі // Фізика аеродисперсних систем. – 2001. – № 38. – С. 286 -295.
9. *Marenkov V.I.* Physical modelling of ionization processes in dense high-temperature plasmasol // Journal of Molecular Liquids. – 2003. – V.105, №. 2. – P. 299-305.
10. *Marenkov, V.I.* Manifestation of polarization effects in dusty plasma // Journal of Molecular Liquids. –2005. –V.120, №. 2. – P.181-184.
11. *Маренков В.І. Кучерський А.Ю.* Розмірні та поляризаційні ефекти і самоорганізація наночастинок в поцесах плазмового наплення мікросхем. // Нанорозмірні системи: Будова, властивості, технології, НАНСИС-2007, 21-23 листопада 2007, Київ / Тез. докл. – НАН, 2007. – С. 61.
12. *Marenkov V.I.* Physical Modelling of Ionization Processes in Dense High-Temperature Plasmasol// Journal of Molecular Liquids. – 2003. – V. 105, №. 2. – P. 299 - 305.
13. *Маренков В.І.* Самоузгоджений електростатичний потенціал в мікрошпацинах металевих зразків. // Нанорозмірні системи: Будова, властивості, технології, НАНСИС-2007, 21-23 листопада 2007, Київ. / Тез. докл. – НАН, 2007. – С. 494.
14. *Marenkov V.I., Naboka O.M.* Statistical Averages of Macroparticles Electric Charge in Heterogeneous Plasma Systems. // Statistical Physics 2005: Modern Problems and New Applications, Annual Conference in Ukraine, August 28 - 30, 2005, Lviv, Ukraine / Book of Abstracts. – Lviv, 2005. – P.152.
15. *Marenkov V.I.* Statistical Cell-Like Model in the Heterogeneous Plasma System Theory // 3-rd International Conference Physics of Liquid Matter: Modern Problems, PLM MP, May 27-31, 2005, Kyiv, Ukraine / Abstracts. – Kyiv, 2005. – P. 32.
16. *Маренков В.І., Чапський Є.О., Кучерський А.Ю.* Кулонівська енергія квазі-нейтральної чарунки пилової плазми в умовах зовнішнього електричного поля // Диспесные системы XXII, Научная конференция стран СНГ 18-28 сентября 2006 года, Одесса Украина / Тезисы докладов. – Астропринт, Одесса, 2006. – С. 231 - 232.
17. *Marenkov V.I.* Electrophysical Parameters of Metallic Nano-Particles in Dusty Plasma Systems // PARTEC-2004 Conference, Nueremberg, Germany. – 2004. – P. 5.
18. *Кубо Р.* Статистическая механика. – М.: Мир. – 1967. – 452 с.
19. *Marenkov V.I.* Polarization effects in dusty plasmas // Ionic Soft Matter: Novel trends in theory and applications, 14-17 April 2004, Lviv, Ukraine. – P.17.
20. *Физические величины: Справочник / Под ред. И.С.Григорьева, Е.З. Мейлихова.* – М.: Энегоатомиздат, 1991. – 1232 с.

Маренков В.И., Кучерский А.Ю.

Статистическая концепция рассмотрения и аппроксимация Томаса Ферми в теории свойств гетерогенных плазменных систем

АННОТАЦИЯ

Предложена новая статистическая концепция определения электрофизических параметров гетерогенных плазменных систем (ГПС), основанная на усреднении термодинамических параметров по ансамблю, мгновенных квазинейтральных ячеек плазмы, содержащих макрочастицы в последовательные моменты времени. Размер ячейки обобщает понятие длины экранирования Дебая на случай ГПС и дает возможность неприводимую проблему кулоновского дальнего действия в подсистеме макрочастиц плазмы перевести в ранг эффективной одночастичной электростатической задачи. На основе сопряжения решений для самосогласованного электростатического потенциала вне- и внутри индивидуальных макрочастиц (МЧ) получено трансцендентное уравнение для равновесного электрохимического потенциала ГПС. Квантовые поправки электронов МЧ учтены в рамках квазиклассического приближения Томаса-Ферми. Определена роль поляризационных эффектов и проведена компьютерная симуляция электрофизических характеристик для широкого спектра определяющих параметров ГПС с частицами металлов в объеме.

Marenkov V.I., Kuchersky A.Y.

Statistical concept review and the Thomas Fermi approximation in the theory of plasma properties of heterogeneous systems

SUMMARY

The new statistical theory for the determination of electro-physical parameters in heterogeneous plasma (HGP) is proposed. It is based on the averaging of the thermodynamic parameters on the ensemble of momentary quasi - neutral cells, containing macro-particles (MP) in sequential time moments. The size of a cell generalizes the Debye screening length for HGP. Due to this the many-particle problem is reduced to the effective single-particle one. The join of solutions inside and outside a macro-particle (MP) leads to the transcendent equation for the equilibrium electrochemical potential. The quantum corrections for the dispersion equation for electrons of MP are taken into account with the help of the Thomas-Fermi approximation. The role of polarization effects is clarified. The computer simulation of electro-physical characteristics for a wide set of control parameters of HGP is carried out.