

НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ  
ІНСТИТУТ ТЕОРЕТИЧНОЇ ФІЗИКИ ІМ. М. М. БОГОЛЮБОВА НАН УКРАЇНИ

**Тимчишин Віталій Богданович**

УДК 538.9

**Статистичний опис систем з кулонівським типом взаємодії**

01.04.02 — теоретична фізика

Автореферат  
дисертації на здобуття наукового ступеня  
кандидата фізико-математичних наук

Київ — 2017

Дисертацією є рукопис.

Робота виконана в відділі синергетики Інституту теоретичної фізики ім. М. М. Боголюбова НАН України.

Науковий керівник: доктор фіз.-мат. наук, член-кор. НАН України, професор  
**Лев Богдан Іванович**,  
Інститут теоретичної фізики ім. М. М. Боголюбова НАН  
України, завідувач відділу синергетики.

Офіційні опоненти: доктор фіз.-мат. наук, член-кор. НАН України, професор  
**Головко Мирослав Федорович**,  
Інститут фізики конденсованих систем НАН України,  
головний науковий співробітник відділу теорії м'якої  
речовини;  
доктор фіз.-мат. наук, професор  
**Герасимов Олег Іванович**,  
Одеський державний екологічний університет, завідувач  
кафедри загальної та теоретичної фізики.

Захист відбудеться «12» жовтня 2017 р. о 11 годині на засіданні спеціалізованої  
вченої ради Д 26.191.01 Інституту теоретичної фізики ім. М. М. Боголюбова  
НАН України за адресою: вул. Метрологічна 14-б, м. Київ, 03143, Україна.

З дисертацією можна ознайомитись у бібліотеці Інституту теоретичної фі-  
зики ім. М. М. Боголюбова НАН України за адресою: вул. Метрологічна 14-б,  
м. Київ, 03143, Україна.

Автореферат розісланий «31» серпня 2017 р.

Вчений секретар  
спеціалізованої вченої ради Д 26.191.01  
доктор фіз.-мат. наук

В. Є. Кузьмичев

## ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

**Актуальність теми.** Є багато систем, що можуть бути умовно названі “м’якою матерією”. До них, зокрема, відносяться: порошинки в запиленій плазмі, колоїди в різних розчинниках, розчини поверхнево-активних речовини і т.п., які демонструють ефекти самоорганізації та перебудови в різноманітні структури за певних умов. Також виявляється, що не дивлячись на всю різно-рідність фізичних реалізацій, часто явища самоорганізації вдається описати подібним чином в рамках єдиного математичного апарату. Це лише додає ваги відповідним дослідженням, адже розв’язавши задачу для, наприклад, плазми, можна аналогічними методами підійти до теорії колоїдів та перевірити, чи можуть там спостерігатися подібні ефекти.

Часто міжчастинковий потенціал у таких системах виявляється далекодіючим та схожим на кулонівський. Як правило, цей вид потенціалів викликає розбіжності при обчисленні потенціальної енергії (ось чому їх часто називають “катастрофічними”). Це додає додаткової складності задачі, адже традиційні методи статистичної механіки незастосовні до неоднорідних систем з кулонівським типом взаємодії. В такому випадку необхідні особливі підходи, що дозволяють брати до уваги неоднорідність розподілу частинок. В тому числі, ці методи повинні включати в себе відповідну процедуру, що дозволить знайти домінуючий вклад у функцію розподілу та уникнути розбіжності вільної енергії при безмежному зростанні об’єму системи.

На даний момент відомо зовсім небагато модельних систем взаємодіючих частинок, для яких в точності може бути розрахована статистична сума в термодинамічній границі. Що ж до опису рівноважних станів, то зараз існує всього кілька результатів отриманих у рамках рівноважної статистичної механіки. Проте, відомі результати можна куди простіше отримати в термінах колективних змінних та інтегральних перетворень. Більше того, такий підхід робить можливим отримання вільної енергії класичної плазматичної системи з точністю до будь-якого порядку.

Окрім вищезгаданого, існують також підходи з застосуванням методів теорії поля для визначення статистичної суми. З їх допомогою вдалось отримати послідовність впорядкованих структур у рамках мезоскопічного опису самозбирання. Така велика кількість розроблених підходів та методів свідчить про важливість даної теми та зацікавленість у ній наукової спільноти. Отож, не буде перебільшенням сказати, що будь-які досягнення у подоланні згаданих математичних труднощів можуть вплинути на загальний розвиток цілого ряду теорій.

В рамках даної дисертації розглянуто альтернативний підхід, що дозволить розвинути теорію функціоналу густини з куди більш простою структу-

рою. Цей метод надає можливість включити вклад далекодючих кореляцій між флуктуаціями у загальний потенціал. Загалом, вплив флуктуацій на стабільність періодичної структури вже розглядався у ряді інших робіт. Як результат, виник новий спосіб описання просторово-неоднорідних розподілів у системі взаємодіючих частинок, який передбачає застосування представлення Хаббарда-Стратоновича для функції розподілу. В дисертації цей апарат було застосовано для дослідження поведінки періодичних структур, утворених пилінками у запорошеній плазмі та електронами на поверхні рідкого гелію.

Розглядаючи питання про вільну енергію частинки “м’якої матерії”, може також виникнути проблема впливу стохастичної складової на поведінку системи. Хорошим прикладом є випадкове поглинання порошинкою в плазмі іонів та електронів, або броунівський рух у колоїді. З одного боку все це приводить до появи цікавих фізичних ефектів, але з іншого — значно ускладнює відповідні математичні рівняння. Дослідження таких стохастичних впливів мають важливе значення, адже можуть виявити нові ефекти, чи особливості самоорганізації, які раніше залишались непоміченими.

Підсумовуючи вищесказане: для статистичного опису систем з кулонівським типом взаємодії є надзвичайно важливими розробка та застосування нових математичних підходів. Це дозволить якщо не одразу описати, то принаймні створити інструмент, що з незначними модифікаціями може бути застосований для розгляду цілого ряду фізичних систем.

**Зв’язок роботи з науковими, програмами, планами, темами.** Дисертаційна робота виконувалась в Інституті теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова НАН України в рамках держбюджетних науково-дослідних робіт “Формування структур та нерівноважні процеси у відкритих системах”, № 0113U001093, і “Мікроскопічні та феноменологічні моделі фундаментальних фізичних процесів у мікро- та макросвіті”, № 0112U000056.

При виконанні роботи автор досліджував вільну енергію частинок у системах з кулонівським типом взаємодії та використовував процедуру її мінімізації для виявлення можливих типів самоорганізації у системі. При цьому було розглянуто такі питання як кінетична складова вільної енергії для частинок у нелінійному середовищі з урахуванням впливу стохастичних факторів, а саме функцію розподілу порошинок по швидкостях у запиленій плазмі при врахуванні стохастичності стоку іонів та електронів. Також значну увагу присвячено питанням збіжності при обчисленні потенціальної складової вільної енергії в уже сформованому пилітовому кристалі або кристалі Вігнера. У роботі розглянуто як суттєво класичну систему — самоорганізацію пилинок у запорошеній плазмі, так і квантову — електрони на поверхні рідкого гелію.

**Мета та задачі дослідження.** Основною метою дисертаційної роботи було:

1. дослідити питання пов’язані з вільною енергією у системах з кулонів-

- ським типом взаємодії;
2. перевірити, чи можна уникнути проблем пов'язаних з розбіжністю потенціальної складової вільної енергії аналізуючи частинки впорядковані у ґратку Браве в термінах оберненої ґратки та одночастинкової функції розподілу ймовірності;
  3. побудувати вираз для вільної енергії електронів на поверхні рідкого гелію та знайти відстань локалізації для них;
  4. аналогічним способом дослідити застосовність такого математичного апарату до знаходження ґратки з мінімальною вільною енергією у пиловому кристалі;
  5. розглянути вплив флуктуацій стоку іонів та електронів на кінетичну складову вільної енергії порошинки у запиленій плазмі за умови сталості загального заряду пилинки.

*Об'єктом дослідження* була вільна енергія частинок у системі з кулонівським типом взаємодії.

*Предметом дослідження* в силу різноманіття фізичних реалізацій таких систем стали запорошена плазма як представник суттєво класичних систем та електрони на поверхні рідкого гелію як представник квантових.

*Методи дослідження.* У дисертації для знаходження ентропійної складової вільної енергії використано аналітичний непертурбаційний метод заснований на представленні Хаббарда-Стратоновича для статистичної суми у вигляді функціонального інтеграла над двома допоміжними полями, що відповідають притяганню та відштовхуванню. Для аналізу ж потенціальної складової застосовано представлення у термінах оберненої ґратки та функцію розподілу ймовірності для координати однієї частинки (дещо схоже до форм-фактора у квантовій теорії поля). Також в одному з випадків, коли особливо важливою стає кінетична складова, останню проаналізовано за допомогою апарату стохастичних диференціальних рівнянь.

**Наукова новизна отриманих результатів.** У дисертаційній роботі одержано такі нові результати:

1. розроблено підхід до обчислення потенціальної енергії в системі частинок упорядкованих у ґратку Браве в межах якого вдалось виділити всі розбіжності в один доданок однаковий для ґраток з однаковою середньою густиною частинок, що дозволяє їх порівнювати;
2. отримано вираз для вільної енергії двовимірної системи ферміонів та вираз для температурно-залежної відстані локалізації для електронів на поверхні рідкого гелію (при  $T = 0$  рівняння переходить у вже відоме);
3. чисельною мінімізацією знайденої вільної енергії отримано параметри ґратки, що повинна спостерігатися у пиловому кристалі (результат — гексагональна щільноупакована ґратка), співпадає з відомими експери-

ментальними даними;

4. продемонстровано значний вплив флуктуацій стоку іонів та електронів на розподіл швидкостей та енергію порошинок у запиленій плазмі— відповідний розподіл буде відмінним від гаусового;
5. виявлено бістабільність у розподілі швидкостей та визначено умови її виникнення, а також передбачено можливість існування гістерезису у розподілі швидкостей у системі порошинок;

**Практичне значення отриманих результатів.** Розвинені методи та одержані результати можуть внести вклад в пояснення аномально високої кінетичної енергії порошинок у запиленій плазмі; математичний апарат, застосований для знаходження потенціальної енергії може бути використаний при порівнянні різних ґраток, а при незначних модифікаціях— обчисленні сталої Маделунга.

**Особистий вклад здобувача.** Результати, що представлені у дисертації, отримані здобувачем особисто.

У роботі [1] здобувачеві належить розрахунок стаціонарної функції розподілу імовірності для швидкості броунівських частинок у нерівноважній запо-рошеній плазмі. Також здобувачем виявлено значний вплив флуктуацій стоку іонів та електронів на розподіл швидкостей та енергію порошинок.

У роботі [2] здобувачем було показано можливість стохастизації потоку електронів та іонів, що стікають на порошок, при збереженні її повного заряду сталим та запропоновано відповідну модель. Знайдено, що за певних умов у системі порошинок в запиленій плазмі спостерігається гістерезис.

У роботі [3] здобувачеві належить розрахунок виразу для температурозалежної відстані локалізації для електрона на поверхні рідкого гелію та умов утворення Вігнерівського кристалу.

У роботі [4] здобувачеві належить розрахунок розподілу електронів на поверхні рідкого гелію з урахуванням їх взаємодії зі стінками, що обмежують систему.

У роботі [5] здобувачеві належить розробка математичного апарату для опису потенціальної енергії тривимірної системи частинок упорядкованих у ґратку Браве, ідея порівняння ґраток завдяки виділенню однакового розбіжного доданку у виразах для вільної енергії ґраток та передбачення типу ґратки, утвореної порошинками в плазмі.

**Апробація результатів дисертації.** Викладені результати доповідались на спільному семінарі відділів теорії та моделювання плазмових процесів та синергетики Інституту теоретичної фізики НАН України ім. М.М.Боголюбова (Київ, 2015), на семінарі відділу синергетики Інституту теоретичної фізики НАН України ім. М.М.Боголюбова (Київ, 2017 р.), на конференції молодих вчених “Сучасні проблеми теоретичної фізики” (Інститут теоретичної фізики

НАН України ім. М.М. Боголюбова, Київ, 21–23 грудня 2010 р.), на “Ізінгівських читаннях” (Інститут фізики конденсованих систем НАН України, Львів, 5–7 травня 2015 р.), на міжнародній конференції “EMN Melbourne meeting” (Мельбурн, Австралія, 10–14 жовтня 2016 р.).

**Публікації.** Результати дисертації опубліковані у п’яти журнальних статтях [1–5], тезах конференцій [6, 7], а також у електронному препринті [8].

**Структура дисертації.** Дисертаційна робота складається зі вступу, чотирьох розділів основної частини, загальних висновків та списку використаних джерел. Загальний обсяг дисертації — 119 сторінок. Робота містить 10 рисунків.

## ОСНОВНИЙ ЗМІСТ РОБОТИ

У **вступі** обґрунтовано актуальність теми дисертаційної роботи, визначено мету, об’єкт і предмет дослідження, показано зв’язок роботи з державними науковими програмами, розкрито наукову новизну, теоретичне і практичне значення одержаних результатів, наведено відомості про особистий внесок здобувача, апробацію та публікації результатів роботи.

**Перший розділ** дисертації присвячено статистичному опису системи з кулонівським типом взаємодії. Тут проводиться розвиток математичного апарату, що буде надалі застосовано при розгляді конкретних фізичних систем. Найважливішим же результатом стане вираз для вільної енергії такої системи, з урахуванням проблем розбіжностей, що пов’язані з характером міжчастинкового потенціалу.

В рамках першого розділу використовується підхід Хаббарда–Стратоновича, що дозволяє включити вклад далекодючих кореляцій між флуктуаціями у загальний потенціал. В роботі припускається наступний вигляд гамільтоніана (в термінах чисел заповнення)  $H = \sum_s \varepsilon_s n_s + (1/2) \sum_{s,s'} V_{ss'} n_s n_{s'}$ . Тут  $\varepsilon_s$  — адитивна складова енергії частинок (зазвичай це кінетична енергія, але також може бути енергія частинки в зовнішньому полі),  $s$  вказує на стан частинки,  $V_{ss'}$  — енергія взаємодії між частинками в станах  $s$  і  $s'$ , а  $n_s \in \{0, 1\}$  є числом заповнення для стану  $s$ . Також надалі нехтуються квантові кореляції, що дещо звуужує клас можливих систем.

Запишемо статистичну суму  $Z = \sum_{\{n_s\}} \exp(-\beta H)$ . Виконуючи перетворення Хаббарда–Стратоновича та сумування по числах заповнення, можна продовжити область визначення до комплексної площини та врахувати, що домінуючий внесок роблять стани, які відповідають умові екстремуму  $\delta\beta F/\delta\varphi = \delta\beta F/\delta\xi = 0$ . Таким чином вираз для станів пов’язаних з сідловою

точкою буде мати вигляд

$$\frac{1}{\beta} \sum_{s'} V_{ss'}^{-1} \varphi_{s'} - \frac{i\xi e^{-\beta\varepsilon_s + i\varphi_s}}{1 - \delta\xi e^{-\beta\varepsilon_s + i\varphi_s}} = 0; \quad \sum_s \underbrace{\frac{\xi e^{-\beta\varepsilon_s + i\varphi_s}}{1 - \delta\xi e^{-\beta\varepsilon_s + i\varphi_s}}}_{f_s} = N + 1. \quad (1)$$

Для конкретного стану вираз  $f_s$  з (1) можна розглядати як середнє число заповнення. Отримані стани відповідають сідловій точці та їх можна інтерпретувати як термодинамічно стійкі розподіли.

Знаходження оберненої матриці з (1) є доволі складною математичною задачею. Щоб цього уникнути використовується  $f_s$  та виконується обернене перетворення. Тоді вільна енергія запишеться в термінах канонічного ансамблю

$$F[f] = \sum_s f_s \varepsilon_s + \frac{1}{2} \sum_{s,s'} V_{ss'} f_s f_{s'} + \underbrace{\frac{1}{\beta} \sum_s [f_s \ln f_s - (f_s + \delta) \ln(1 + \delta f_s)]}_{F_{ent}}. \quad (2)$$

Перші два доданки в (2) є кінетичною та потенціальною енергіями відповідно, а останній — це внесок обумовлений ентропією  $F_{ent}$  (повинна дорівнювати нулю якщо  $T = 0$ ).

В рамках дисертації особливу увагу присвячується необмеженим системам, з частинками впорядкованими у ґратку Браве. Розрахунок потенціальної складової вільної енергії за умов, що потенціал на нескінченності веде себе подібно до кулонівського, вимагає спеціального підходу. В якості такого підходу пропонується особливим чином модифіковане сумування Евальда.

Для початку система розбивається на паралелепіпеди, що мають в якості ребер вектори трансляції ґратки Браве, а в їх центрі міститься частка (рисунк 1). Отже, потенціальну енергію частинки, локалізованої поблизу вузла ґратки Браве, можна записати у вигляді  $F_{sp} = F_{int} - F_s + F_{ent} + F_k$ . Тут  $F_{sp}$  (від англ. *single particle*) — вільна енергія однієї частинки в ґратці,  $F_{ent}$  (від англ. *entropy*) — ентропійний вклад, а  $F_k$  (від англ. *kinetic energy*) — кінетична енергія. Останні дві складові  $F_{ent}$  та  $F_k$  в даному розділі не розглядаються, але їм буде надано належної уваги у наступних трьох розділах вже у застосунку до конкретних фізичних систем. Потенціальна енергія взаємодії представлена як  $F_{int} - F_s$ , де  $F_{int} = \iiint_{\mathbb{V}} \iiint_{\mathbb{R}^3} V(|\vec{r} - \vec{r}'|) \rho(\vec{r}) \rho(\vec{r}') d\vec{r}' d\vec{r}$  та  $F_s = \iiint_{\mathbb{V}} \iiint_{\mathbb{V}} V(|\vec{r} - \vec{r}'|) \rho(\vec{r}) \rho(\vec{r}') d\vec{r}' d\vec{r}$ . Таке “розщеплення”, з математичної точки зору, — просто ще один спосіб сказати, що область інтегрування повинна бути  $\mathbb{R}^3 \setminus \mathbb{V}$ . З фізичної точки зору доданок  $F_{int}$  (від англ. *interaction*,



подальші посилання на нього як на “енергію взаємодії”) розглядається як енергія взаємодії частинки з усіма іншими, в тому числі і з самою собою, а доданок  $F_s$  (від англ. *self-interaction*, подальші посилання на нього як на “енергію самої частинки”) як енергія взаємодії частинки з самою собою.

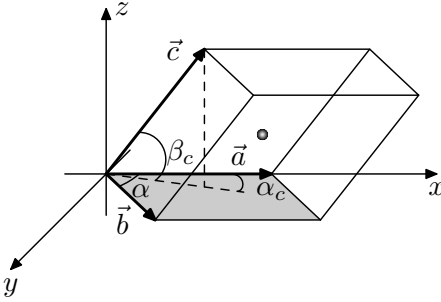


Рис. 1: Одна комірка  $\mathbb{V}$  з розбиття  $\mathbb{R}^3$ . Вектори  $\vec{a}$ ,  $\vec{b}$  і  $\vec{c}$  є базисними векторами ґратки Браве. Кут між  $\vec{a}$  і  $\vec{b}$  покладається рівним  $\alpha$ . Кут між вектором  $\vec{c}$  та площиною  $XY$  —  $\beta_c$ , а між його проекцією на  $XY$  та  $\vec{a}$  —  $\alpha_c$ . В центрі домени показано частинку.

У рівнянні для вільної енергії активно використовується функція розподілу ймовірностей  $\rho$  для всього  $\mathbb{R}^3$ . Для подальших розрахунків було б зручно виразити її в термінах одночасткової функції розподілу ймовірності  $\rho_{sp}$  (від англ. *single particle*). Фізичний зміст останньої полягає у тому, що оскільки температура у системі відрізняється від нуля, і положення кожної конкретної частинки буде флюктувати поблизу вузла ґратки, то замість точки простору, позиція частинки буде описуватись одночастковою функцією розподілу ймовірності (дещо аналогічна форм-фактору у КТП). Необхідне перетворення можна зробити ґрунтуючись на векторах оберненої ґратки, якщо виконати наступний розклад  $\rho(\vec{r}) = \sum_{\vec{k} \in \mathbb{Z}^3} \rho_{\vec{k}} f_{\vec{k}}(\vec{r})$ , де  $\rho_{\vec{k}} = \bar{\rho} \int_{\mathbb{V}} f_{\vec{k}}(\vec{r}) \rho_{sp}(\vec{r}) d\vec{r}$ , а, власне, розклад ведеться по базису  $f_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{2\pi i(\vec{k}^T \hat{G} \vec{r})}$ , де матриця  $\hat{G}$  виражається

$$\hat{G} = \begin{pmatrix} 1/a & -\cot(\alpha)/a & -\cot(\beta_c) \sin(\alpha - \alpha_c)/(a \sin(\alpha)) \\ 0 & \csc(\alpha)/b & -\cot(\beta_c) \sin(\alpha_c)/(b \sin(\alpha)) \\ 0 & 0 & \csc(\beta_c)/c \end{pmatrix}.$$

Тут  $\bar{\rho}$  — середня щільність частинок. Також можна помітити, що всі вектори розглядаються як вектори-стовпці. Всю інформацію про параметри ґратки включає в себе матриця  $\hat{G}$  (від англ. *Geometry*). Неважко бачити, що рядки  $\hat{G}$  є компонентами базисних векторів оберненої ґратки.

Відзначивши, що  $abc \sin(\alpha) \sin(\beta_c) = 1/\bar{\rho}$ , де  $\bar{\rho}$  — середня густина частинок та виконуючи ряд перетворень можна отримати  $F_{int} = \sum_{\vec{k} \in \mathbb{Z}^3} |\rho_{\vec{k}}|^2 V_{\vec{k}}/\bar{\rho}^2$ , де  $V_{\vec{k}} = \bar{\rho} \int_{\mathbb{R}^3} f_{\vec{k}}(\vec{r}') V(|\vec{r}'|) d\vec{r}'$ . Тут варто відзначити, що для “катастрофічних” потенціалів, наприклад кулонівського, розбіжним може виявитися лише один

єдиний доданок при  $|\vec{k}| = 0$ . Але цей доданок не містить інформації про “геометрію решітки” — він залежить виключно від середньої щільності частинок. А це і означає, що можна порівнювати дві ґратки з однаковою середньою густиною частинок, навіть якщо потенціал між частинками є “катастрофічним” (дещо подібно до перенормування в квантовій теорії поля).

Функцію  $\rho_{\text{sp}}(\vec{r})$  можна вибирати по-різному. В дисертації використовується гаусіана  $\rho_{\text{sp}}(\vec{r}) = e^{-r^2/(2s^2)}/(2\pi s^2)^{d/2}$ , яка в границі  $s \rightarrow 0$  переходить у дельта-функцію. Тут  $s$  — дисперсія, або, за фізичним змістом, відстань локалізації частинки, а  $d$  — розмірність простору локалізації частинок. Також, такий вибір  $\rho_{\text{sp}}$  фізично обґрунтований. По-перше, цей розподіл справедливий для основного стану квантового гармонічного осцилятора, що є найпростішим наближенням для квантової частинки, яка коливається біля рівноважного положення. По-друге, це нормальний розподіл і його застосування виглядає достатньо розумним у класичному випадку, коли частинка випадковим чином віхиляється від вузла ґратки.

Використовуючи гаусіану в якості функції локалізації та обираючи в якості міжчастинкового потенціалу екранований кулонівський потенціал  $V(r) = q^2 e^{-r/\lambda_D}/r$ , де  $\lambda_D$  — дебаївська відстань екранування, можна отримати після ряду перетворень

$$F_{\text{int}} = \sum_{\vec{k} \in \mathbb{Z}^3} \frac{4\pi\bar{\rho}q^2 e^{-4\pi^2 s^2 \vec{k}^T \hat{G} \hat{G}^T \vec{k}}}{1/\lambda_D^2 + 4\pi^2 \vec{k}^T \hat{G} \hat{G}^T \vec{k}}; \quad F_s = \frac{q^2}{\sqrt{\pi}s} \left( 1 - \frac{s\sqrt{\pi}}{\lambda_D} e^{s^2/\lambda_D^2} \text{erfc}(s/\lambda_D) \right).$$

При великих  $\lambda_D$  (потенціал наближається до кулонівського) та малих  $s$  (сильно локалізована частинка) можна провести деякі спрощення, якщо допустити, що ґратка не сильно вироджена та ввести  $l = 1/\sqrt[3]{\bar{\rho}}$  — середню відстань між частинками

$$F_{\text{int}} - F_s = \frac{\sqrt{\pi}q^2}{l} \sum_{\vec{k} \neq 0} \frac{e^{-\vec{k}^T \hat{G}^{-1} \hat{G}^{-1} \vec{k}/l^2}}{\vec{k}^T \hat{G}^{-1} \hat{G}^{-1} \vec{k}/l^2} + \frac{q^2}{\pi l} \sum_{\vec{k} \neq 0} \frac{e^{-l^2 \vec{k}^T \hat{G} \hat{G}^T \vec{k}}}{l^2 \vec{k}^T \hat{G} \hat{G}^T \vec{k}} + 4\pi\bar{\rho}q^2 \lambda_D^2. \quad (3)$$

Останній доданок, очевидно, дорівнює енергії взаємодії частинки з зарядом, що рівномірно розподілений у всьому просторі. Всі решту доданки — поправки на точковість зарядів і включають в себе всю інформацію про геометрію решітки.

Варто звернути увагу, що в отриманому виразі тільки один доданок прямує до нескінченності при  $\lambda_D \rightarrow \infty$  і що він ні в якій мірі не залежить від параметрів решітки. Це означає, що (3) може бути використаний для порівняння різних ґраток навіть при розгляді кулонівського потенціалу без екранування. Для цього достатньо відмірювати енергію від  $4\pi\bar{\rho}q^2 \lambda_D^2$  як від “нульового рівня”.

Ще одна особливість рівняння (3): кулонівська взаємодія далекодіюча і відстань локалізації  $s$  (маленька у порівнянні з усіма іншими відстанями у ґратці) не повинна відігравати ніякої ролі у наближенні. І справді, в отриманому рівнянні вона повністю відсутня.

Таким чином у даному розділі було представлено загальний формалізм для опису системи взаємодіючих частинок заснований на перетворенні Хаббарда-Стратоновича та розвинуто математичний апарат для розрахунку потенціальної енергії кулонівської системи, що дозволяє уникати розбіжностей при порівнянні вільних енергій двох систем частинок упорядкованих в ґратки Браве.

**Другий розділ** дисертації присвячено дослідженню двовимірної системи фермі-часток з міжчастинковим потенціалом кулонівського типу методами розвиненими у попередньому розділі. Більш конкретно, досліджується поведінка електронів на поверхні рідкого гелію. Для дослідження кристалізації та визначення відстані локалізації електрона система буде розглядатися як двовимірна з певним ефективним міжчастинковим потенціалом взаємодії. В першу чергу до уваги береться пряме кулонівське відштовхування та взаємодія внаслідок поляризації підкладки, а основний вклад у притягання робить взаємодія пов'язана з деформацією поверхні гелію.

Для початку у рівнянні (2) покладається  $\delta = -1$  (фермі-частинки) і  $d = 2$  (система двовимірна). Також у пршому наближенні припускається, що  $\varepsilon_s = \varepsilon(p) = p^2/(2m)$ . Насправді, в присутності зовнішнього поля, закон дисперсії повинен трохи відрізнятись. Але відомо, що система Фермі-частинок, яка буде розглядатися далі, сильно вироджена, тож застосування квадратичної форми для дисперсії виглядає цілком розумним.

Далі, вводячи теплову довжину  $\lambda_T = \sqrt{2\pi^2\hbar^2\beta/m}$ , та розглядаючи все в термінах великого канонічного ансамблю, можна отримати наступний вираз  $\rho(\vec{r}) = (\pi/\lambda_T^2) \ln(1 + e^{\beta\mu(\vec{r})})$ , який пов'язує між собою хімічний потенціал  $\mu(\vec{r})$  і щільність частинок  $\rho(\vec{r})$ .

Все це дозволяє провести цілий ряд спрощень у (2) з застосуванням тотожності Ландена

$$F[\rho] = \frac{1}{2} \int \dots \int d\vec{r} d\vec{r}' V(|\vec{r} - \vec{r}'|) \rho(\vec{r}) \rho(\vec{r}') + \frac{\lambda_T^2}{2\pi\beta} \iint d\vec{r} \rho^2(\vec{r}) + \frac{\pi}{\beta\lambda_T^2} \iint d\vec{r} \left[ \text{Li}_2 \left( e^{-\pi^{-1}\lambda_T^2\rho(\vec{r})} \right) - \frac{\pi^2}{6} \right]. \quad (4)$$

Варто звернути увагу, що для випадку статистики Бозе буде втрачено ефект бозе-конденсації у зв'язку з виконаним в процесі перетворень інтегруванням по імпульсах. Однак, надалі ці рівняння будуть використані для Фермі-частинок, тож можна не надавати цьому значення.

Якщо ж використати одночастинкову функцію розподілу ймовірності у вигляді гаусіани з  $d = 2$ , то можна досягнути певного спрощення для  $F_{\text{ent}}$ . Для розрахунку вкладу на одну частинку виконується заміна  $\rho(\vec{r}) \rightarrow \rho_{\text{sp}}(\vec{r})$ . Далі передостанній доданок безпосередньо інтегрується, а для останнього виконується наближення  $\text{Li}_2(\dots) \approx 0$  для малих  $r \leq s$  та  $\text{Li}_2(\dots) \approx \pi^2/6$  для великих  $r > s$ , яке є безпосереднім наслідком припущення про “гостроту” гаусіани та того, що  $s$  відіграє роль відстані локалізації. Як наслідок, вільна енергія в перерахунку на одну частинку записується

$$F_{\text{sp}} = \frac{1}{2} \int \dots \int d\vec{r} d\vec{r}' V(|\vec{r} - \vec{r}'|) \rho_{\text{sp}}(\vec{r}) \rho(\vec{r}') + \underbrace{\frac{\lambda_T^2}{8\pi^2 s^2 \beta} - \frac{\pi^4 s^2}{6\beta \lambda_T^2}}_{F_{\text{ent}}}. \quad (5)$$

Далі постає питання щодо виразу для потенціальної енергії. Відомо, що у присутності зовнішнього поля електрони притискаються до поверхні гелію зі значною силою, але не можуть проникнути крізь поверхню через квантові ефекти. Так виникає деформація поверхні, яка вносить вклад у вільну енергію системи

$$V(r) = \frac{\bar{e}^2}{r} - \frac{\varepsilon \bar{e}^2}{\sqrt{r^2 + (2d)^2}} - \frac{\bar{e}^2 E^2}{2\pi\sigma} \text{K}_0(r/l_0). \quad (6)$$

Тут  $\varepsilon$  і  $\varepsilon_{He}$  є діелектричними сталими для підкладки та рідкого гелію відповідно,  $r$  – відстань між двома електронами,  $d$  – товщина плівки гелію,  $eE$  – сила, що діє на кожен електрон у зовнішньому полі (у даному випадку це електричне поле, перпендикулярне до поверхні),  $\sigma$  – поверхневий натяг рідкого гелію,  $\text{K}_0$  є модифікованою функцією Бесселя, а  $l_0 = \sqrt{\sigma/g\rho_{He}}$  – капілярна довжина, яка залежить тільки від властивостей середовища. Неважко бачити, що перший доданок пов’язаний зі звичайним кулонівським відштовхуванням, тоді як другий є результатом поляризації підкладки. Останній доданок якраз являє собою ефективну “капілярну взаємодію”.

Підставляючи (6) та (5) у рівняння першого розділу, а також виконуючи деяко грубе наближення, пов’язане з заміною сумування на інтегрування, можна отримати наступне

$$\frac{\partial F_{\text{sp}}}{\partial s} = \frac{\bar{e}^2 E^2}{4\sigma\pi s} - \frac{\lambda_T^2}{4\pi^2 \beta s^3} - \frac{\pi^4 s}{3\beta \lambda_T^2}.$$

Якщо при цьому вимагати  $\partial F_{\text{sp}}(s)/\partial s = 0$ , тобто щоб реалізувався екстремум вільної енергії, ми отримаємо

$$s^2 = \frac{3\hbar^2 \beta^2 \bar{e}^2 E^2}{4\pi^3 \sigma m} \left( 1 - \sqrt{1 - \frac{16\sigma^2 \pi^4}{3\bar{e}^4 E^4 \beta^2}} \right), \quad (7)$$

що є температурно-залежним виразом для відстані локалізації електрона.

Якщо температура прямує до невеликих значень  $T \rightarrow 0$ , тобто  $\beta \rightarrow \infty$ , то (7) спрощується до  $s = \sqrt{(2\pi\sigma\hbar^2)/(m\bar{e}^2 E^2)}$ , що є відомим результатом, а отже в граничному випадку дана теорія переходить у вже відому.

Розглянувши (7) більш ретельно, можна виявити деякі цікаві закономірності. Наприклад, розв'язок існує якщо

$$\frac{E^2}{T} \geq \frac{4\sigma\pi^2 k}{\sqrt{3}e^2} \approx 2100 \frac{\text{dyn}}{\text{cm} \cdot \text{K}}. \quad (8)$$

Рівність (8) з фізичної точки зору можна трактувати наступним чином: гратка не утворюється якщо температура  $T$  занадто висока або поле  $E$  занадто слабе. Це твердження повністю узгоджується з фізичною інтуїцією.

Як підсумок, у цьому розділі було застосовано загальний формалізм для опису системи взаємодіючих частинок, заснований на перетворенні Хаббарда-Стратоновича, до системи електронів на поверхні рідкого гелію. При цьому отримано температурно-залежний вираз для відстані локалізації (7), що при прямуванні температури до нуля переходить у вже відоме рівняння. Як побічний продукт також отримується певне обмеження на можливі параметри при яких існує вігнерівський кристал. Отримані результати важливі з тієї точки зору, що можуть бути перевірені експериментально.

**Третій розділ** дисертації присвячено тривимірній системі зі взаємодією кулонівського типу. Тут розглядається проблема утворення пилового кристала у запорошеній плазмі. При цьому отриманий вираз для потенціальної енергії мінімізується чисельними методами для визначення параметрів ґратки, що повинна спостерігатися на експерименті.

Обидві суми в (3) дуже добре збігаються, достатньо обмежитись  $|\vec{k}| \leq 4$ . Цю границю знайдено експериментально: збільшення кількості доданків не змінює параметри передбаченої ґратки. Варто зауважити, що достатньо мінімізувати лише доданки з  $\hat{G}$ , а якщо винести за дужки  $q/l$ , то його теж можна не враховувати при мінімізації.

Мінімізацію було проведено за допомогою стандартної функції FindMinimum в Wolfram Mathematica v.9. Рівняння (3) використовується як функціонал для мінімізації та в ньому фіксується густина частинок. Приймається  $1/l^3 = \bar{\rho} = 1/abc \sin(\alpha) \sin(\beta_c)$ , додатково допускається  $a = l(1 + \delta a)$  і  $b = l(1 + \delta b)$ , а також  $c$  виражається через інші параметри, щоб зберегти сталою щільність заряду. При виконанні такої процедури можна помітити, що  $l$  скорочується в знаменнику та у показнику експоненти (3).

Тут варто зробити ще одне зауваження. Відображення між множиною всіх можливих значень параметрів (вектори трансляції) та всіх можливих решіток

Браве не є біскцією і одна гратка може бути описана різними наборами параметрів (різні вектори трансляції), що разом з помилками округлення призводить до неправильної роботи багатьох алгоритмів мінімізації. Проблему можна усунути поклавши  $0 \leq (\vec{b} \cdot \vec{a}) \leq |\vec{a}|/2$ ,  $0 \leq (\vec{c} \cdot \vec{a}) \leq |\vec{a}|/2$  і  $0 \leq (\vec{c} \cdot \vec{b}) \leq |\vec{b}|/2$ , що і було використано при мінімізації.

Отриманий результат — компактна гексагональна упаковка (НСР). Така упаковка повинна складатися з плоских трикутних ґраток, що по чергово зміщені одна відносно одної, що, власне, і спостерігається. Переконалися в такому висновку можна шляхом порівняння отриманих параметрів з параметрами ГЦУ (таблиця 1).

Параметр	Обчислене значення	Гексагональна щільна упаковка (ГЦУ)
$\alpha$	$\approx 1.04717$	$\pi/3 \approx 1.0472$
$\alpha_c$	$\approx 0.523589$	$\pi/6 \approx 0.5236$
$\beta_c$	$\approx 0.955205$	$\arcsin(\sqrt{2/3}) \approx 0.9553$
$a$	$\approx 1.122462$	$\sqrt[6]{2} \approx 1.12246$
$b$	$\approx 1.122462$	$\sqrt[6]{2} \approx 1.12246$

Таблиця 1

### Порівняння параметрів ґратки з гексагональною щільною упаковкою та отриманих чисельною мінімізацією

У даному розділі було використано загальний формалізм для знаходження кристалічної структури, яка може формуватися у запиленій плазмі з порошків — пилового кристала. По суті, задача зводиться до мінімізації раніше отриманої (3). На жаль, не існує ніяких хороших наближень для тета-функції, тож доводиться звертатись до чисельних методів. Їх результати вказують, що умові мінімуму потенціальної енергії відповідає гексагональна щільна упаковка. Це збігається з іншими опублікованими результатами чисельного моделювання та реальними експериментами.

Останній, **четвертий розділ**, присвячено випадку, коли основну роль в системі починає відігравати кінетична енергія. Предметом дослідження знову стає поведінка порошків у запиленій плазмі. Тільки цього разу розглядаються умови, коли енергія броунівського руху починає відігравати домінуючу роль.

У припущенні, що електрони куди більш рухливі за іони ( $D_e \gg D_i$ ), але при цьому їх температура приблизно рівна ( $T_i \approx T_e$ ), сила, що діє на частинку в плазмовому середовищі, може бути записана

$$F = q^2 k_D^2 (f_1(\vec{v}) - \alpha g_1(\vec{v})) - f_2(v), \quad f_2(v) = 6\pi r \eta v$$

$$f_1(\tilde{v}) = \frac{-1}{\pi \tilde{v}^2} \int_0^{\tilde{v}} \int_0^{\infty} \frac{v^2 x^4 dx dv}{x^6 + (v^2 + 2)x^4 + (v^2 + 1)x^2 + v^4/4}.$$

Типова лабораторна плазма не відповідає цим вимогам (зазвичай  $T_e/T_i \sim 100$ ), такі параметри були вибрані з ілюстративною метою. Тут заряд частинки  $q = -(T_e r_0 / e) \ln(\mu_e / \mu_i)$ , а  $\alpha = -\sum_{j=i,e} (e_j S_j) / (q k_D^2 D_j)$  — важлива для подальших розрахунків безрозмірна величина.

Очевидно, що число електронів та іонів, що поглинаються порошиною було б більш природно вважати випадковими величинами, ніж константою. З іншого боку відомо, що загальний заряд частинки залишається приблизно сталим. Проте ці твердження не протирічать одне одному. Оскільки  $D_e \gg D_i$ , то флуктуації потоку іонів  $S_i$  викликать доволі швидко “відповідь” електронів у вигляді такої зміни  $S_e$ , щоб заряд  $q$  залишився сталим. Однак в  $q$  та  $\alpha$  входять різні лінійні комбінації  $e_e S_e$  та  $e_i S_i$ : тотожна рівність однієї з них константі зовсім нічого не каже про іншу. Якби ж  $D_e$  та  $D_i$  були рівними, то разом з флуктуаціями заряду зникли б і флуктуації  $\alpha$ .

Надалі, користуючись методами теорії випадкових процесів, можна записати рівняння Фоккера-Планка та розв’язати його чисельними методами. Заради простоти ми розглянемо рівноважну плазму з фіксованими коефіцієнтами дифузії  $D_e = 2580 \text{ cm}^2/\text{sec}$ ,  $D_i = 0.0542 \text{ cm}^2/\text{sec}$ ,  $D_0 = 0.016 \text{ cm}^2/\text{sec}$ ,  $\mu_i = 2.094 \text{ V}/(\text{cm}^2 \cdot \text{sec})$ ,  $\mu_e = 9.98 \cdot 10^4 \text{ V}/(\text{cm}^2 \cdot \text{sec})$ ,  $\eta = 2.27 \cdot 10^{-4} \text{ 1}/(\text{cm} \cdot \text{sec})$ , що відповідає аргоновій плазмі при  $T_n = 300 \text{ K}$  ( $T_n$  — температура нейтральної компоненти),  $\alpha = 0.375$ . Всі обчислення було виконано в припущенні  $T = T_e = T_i$ .

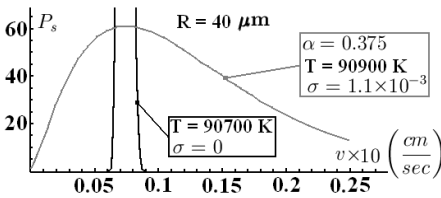


Рис. 2: Порівняння функції розподілу імовірності  $\rho(v)$  обчисленої з та без флуктуацій  $\alpha$ .

Розглянемо результати чисельних розрахунків функції розподілу пилинок для різних розмірів пилинок і температури плазми. У випадку  $\sigma_\alpha = 0$  (немає флуктуацій потоку зарядів) функція розподілу схожа на гаусіану з максимумом не в нулі (деталі можна знайти в [1, 2]). Очевидно, в таких випадках середня кінетична енергія пилінки визначається швидкістю, що відповідає максимумі функції розподілу. Ця швидкість від-

різняється від звичайної теплової швидкості. Її значення визначається енергетичним балансом між енергією одержаною пилінкою внаслідок взаємодії з довколишньою плазмою (особливо в результаті дії сили, викликаної поляризацією) і дисипації енергії пилінки в пружних зіткненнях з нейтралами та

частинками плазми.

У випадку флюктууючих потоків зарядів ( $\alpha$ ) вигляд функції розподілу для пилінки може сильно змінитися (Рис. 2–5,  $E_{particle}$  — середня кінетична енергія пилінки). Ми бачимо, що флюктуації потоку зарядів викликають значне

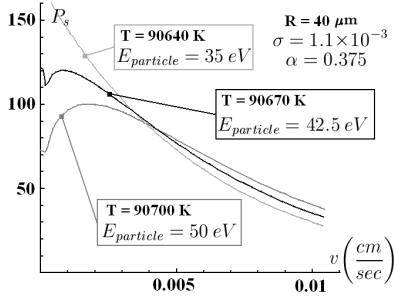


Рис. 3: Функція розподілу імовірності  $\rho(v)$  для різних температур плазми ( $\alpha = 0.375$ ,  $\sigma_\alpha^2 = 1.2 \times 10^{-6}$ )

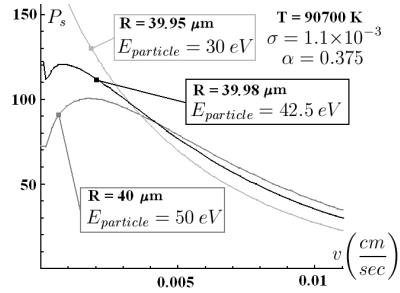


Рис. 4: Функція розподілу імовірності  $\rho(v)$  для різних розмірів частинки ( $\alpha = 0.375$ ,  $\sigma_\alpha^2 = 1.2 \times 10^{-6}$ )

розпливання функції розподілу по швидкостях (Рис. 3), але основною зміною є виникнення додаткового максимуму функції розподілу для  $v \neq 0$  (Рис. 3, 4). Обчислення показують, що при переході від одно-пікового до дво-пікового розподілу при фіксованій густині пилюнок може існувати гістерезис (Рис. 5).

Очевидно, що при деяких значеннях температури обидва максимуми стають однакової висоти, а в структурі може спостерігатися біфуркація. Такі властивості типові для систем з гістерезисом і це дає привід очікувати, що у системі яка розглядається також спостерігатиметься гістерезис у поведінці функції розподілу.

Як було згадано вище, у відповідності з фундаментальними принципами індукованого шумом фазового переходу якісні зміни функції розподілу (утворення дво-пікового розподілу з одно-пікового і навпаки) вказують на наявність фазового переходу між різними макроскопічними станами. В розглянутому випадку параметр порядку (значення екстремуму) відповідає різним середнім значенням кінетичної енергії. Таким чином, у випадку бістабільного розподілу (однакові значення екстремумів) ми можемо очікувати на зміни в пиловій підсистемі.

Було б природно зробити висновок, що така поведінка пов'язана з впливом флюктуацій на стан системи поблизу порогу нестабільності (умови руху без тертя). А саме, флюктуації параметру  $\alpha$  приводять до звичайного розпо-



ділу пилинок, або до розподілу швидкостей в системі з від'ємним тертям. В такому випадку система отримує енергію від плазми. Отже, маємо картину схожу на таку як у випадку бістабільної системи. Оскільки перехід до дво-пікової функції розподілу пов'язаний зі зміною середньої кінетичної енергії, ми можемо припустити, що такий перехід повинен супроводжуватися формуванням пилової структури. Поведінка функції розподілу може бути хорошим індикатором індукованого шумом фазового переходу в запиленій плазмі.

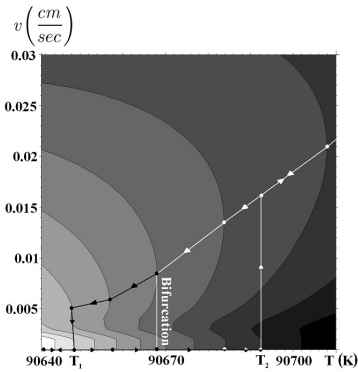


Рис. 5: Залежність функції розподілу імовірності пилинки від  $v$  і  $T$  (яскравість графіка пропорційна значенню функції розподілу імовірності).

в поведінці пилової структури, в залежності від температури. Підхід, запропонований тут, бере до уваги імовірні переходи між різними станами системи викликаними дисипацією енергії та з залежною від швидкості взаємодією з середовищем.

Поява гістерезису за умов повільної зміни температури може бути виправдана принципом максимальної затримки. При рості температури, найімовірніша швидкість частинки рівна нулю, аж до раптового стрибка при певній температурі ( $T_2$ ), а потім продовжує неперервно рости. Якщо система охолоджується починаючи з температури вище  $T_2$ , то можна спостерігати зворотній процес, за винятком того, що “стрибок” відбудеться при  $T_1$ ,  $T_1 < T_2$ , а саме: швидкість частинки поступово зменшується, доки температура не досягне  $T_1$ , а потім різко змінюється на нуль. Як випливає з графіка 5, швидкість, що відповідає локальному максимуму, зростає з ростом температури. Отже, флуктуації потоків зарядів на пилінку можуть сильно впливати на розподіл по швидкостях і у випадку зменшеного тертя приводити до гістерезису

## ВИСНОВКИ

Дисертацію присвячено теоретичному дослідженню вільної енергії у системах з кулонівським типом взаємодії.

У **першому розділі** розвивається математичний апарат для використання у наступних розділах. Особлива увага надається ґраткам Браве, утвореним частинками, що взаємодіють через кулоноподібний потенціал. В таких випадках часто спостерігаються розбіжності у виразах для потенціальної енергії.

Розроблений підхід дозволяє виконувати порівняння вільних енергій ґраток з однаковою середньою густиною частинок, уникаючи при цьому проблеми розбіжності. Основними його результатами є:

1. знайдено вираз для вільної енергії системи взаємодіючих частинок з застосуванням підходу Хаббарда-Стратоновича;
2. розроблено підхід до обчислення потенціальної складової вільної енергії в системі частинок упорядкованих у ґратку Браве у межах якого вдалось виділити всі розбіжності в один доданок, однаковий для ґраток з однаковою середньою густиною частинок, що дозволяє їх порівнювати.

У наступних двох розділах вищезгадані результати застосовуються до двох статичних фізичних систем. Зокрема, **другий розділ** присвячено електронам на поверхні рідкого гелію та проблемі їх упорядкування в кристал Вігнера. Його результати:

1. отримано вираз для температурно-залежної відстані локалізації для електронів на поверхні рідкого гелію; при  $T = 0$  рівняння переходить у вже відоме;
2. отримано певні обмеження на умови існування вігнерівського кристалу в залежності від напруженості електричного поля та температури; результати можуть бути перевірені експериментально;
3. порівняно вільні енергії квадратної та трикутної ґраток, показано, що в такій системі варто очікувати формування трикутної.

Тему статичних систем частинок з кулонівським типом взаємодії продовжує **третій розділ**. Тут розглядається утворення пилового кристалу в запорошеній плазмі. Основною метою розділу є чисельна мінімізація вільної енергії та знаходження таким чином типу ґратки, що повинна реалізуватися на експерименті.

1. розроблено метод, що дозволяє уникнути значного падіння точності розрахунків через неоднозначність представлення ґратки Браве векторами трансляції;
2. чисельною мінімізацією знайденої вільної енергії отримано параметри ґратки, що повинна спостерігатися у пиловому кристалі (результат — гексагональна щільноупакована ґратка, співпадає з відомими експериментальними даними).

У **четвертому розділі** розглянуто систему з переважаючою кінетичною частиною вільної енергії. А саме досліджується вплив на кінетичну енергію та функцію розподілу по швидкостях порошинок у плазмовому середовищі таких стохастичних факторів як різна кількість поглинутих іонів та електронів за одиницю часу. Результати даного дослідження можуть бути коротко перелічені:

1. знайдено функцію розподілу ймовірності для швидкості броунівської

частинки в нерівноважній плазмі з урахуванням флуктуацій стоку електронів та іонів на цю частинку;

2. виявлено бістабільність у розподілі швидкостей та визначено умови її виникнення;
3. передбачено можливість існування гістерезису у системі порошинок у запиленій плазмі.

Підбиваючи підсумки виконаної роботи, можна відзначити, що отримані результати є вкладом в пояснення таких явищ як аномально висока кінетична енергія порошинок у плазмі, тип ґратки пилового кристалу, а також передбачення залежності відстані локалізації електрона на поверхні рідкого гелію від температури.

### СПИСОК ОПУБЛІКОВАНИХ ПРАЦЬ ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ

- [1] Lev, B. I., V. B. Tymchyshyn, and A. G. Zagorodny (2009). Brownian particle in nonequilibrium plasma. *Cond. Matter Phys.* 12(4), 593–602.
- [2] Lev, B. I., V. B. Tymchyshyn, and A. G. Zagorodny (2011, January). Influence of charging current fluctuations on the grain velocity distribution in weakly-ionized plasmas. *Phys. Lett. A* 375(3), 593–597.
- [3] Lev, B. I., V. P. Ostroukh, V. B. Tymchyshyn, and A. G. Zagorodny (2014). Statistical description of the system electrons on the liquid helium surface. *The European Physical Journal B* 87(11), 1–13.
- [4] Lev, B., V. Ostroukh, V. Tymchyshyn, and A. Zagorodny (2015). Electron distribution on a deformed liquid-helium surface. *UJP* 60(3), 247–252.
- [5] Lev, B., V. Tymchyshyn, and A. Zagorodny (2017). Potential energy analysis for a system of interacting particles arranged in bravais lattice. *UJP* 62(3), 217–229.
- [6] Lev, B., V. Tymchyshyn, J.-H. Kim, and A. Zagorodny (2016). Structure formation in dusty plasma. EMN Melbourne meeting Program and Abstract (10–14 October 2016, Melbourne, Australia).
- [7] Lev, B., V. Tymchyshyn, and A. Zagorodny (2011). Influence of charging current on the grain velocity in plasmas. III Young Scientists Conference “Modern Problems of Theoretical Physics” Program and Abstracts (21–23 December 2011, Bogolyubov Institute for Theoretical Physics, Kyiv).
- [8] Lev, B. I., V. B. Tymchyshyn, and A. G. Zagorodny (2015, May). Free energy analysis for a system of interacting particles arranged in Bravais lattice. *ArXiv e-prints*.

## АНОТАЦІЯ

Тимчишин В.Б. Статистичний опис систем з кулонівським типом взаємодії.  
— Рукопис.

Дисертація на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.02 — теоретична фізика. — Інститут теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова НАН України. — Київ, 2017.

У дисертації наведено результати теоретичних досліджень систем з кулонівським типом взаємодії, зокрема розглянуто як статичну задачу, на прикладі електронів на поверхні рідкого гелію та запиленої плазми, так і динамічну, коли важливим стає вклад у вільну енергію кінетичної складової, на прикладі порошинок у плазмі.

Розглянуто систему взаємодіючих частинок, для потенціальної складової вільної енергії розроблено особливий підхід, що дозволяє порівнювати вільні енергії двох систем частинок, упорядкованих у ґратку Браве, незважаючи на “катастрофічність” потенціалу.

**Ключові слова:** кулонівський потенціал, підхід Хаббарда-Стратоновича, вільна енергія, заповнена плазма, електрони на поверхні гелію, відстань локалізації, вігнерівський кристал, розбіжність.

## АННОТАЦИЯ

Тымчишин В.Б. Статистическое описание систем с кулоновским типом взаимодействия. — Рукопись.

Диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.02 — теоретическая физика. — Институт теоретической физики им. Н.Н. Боголюбова НАН Украины. — Киев, 2017 г.

В диссертационной работе приведены результаты теоретических исследований систем с кулоновским типом взаимодействия, в частности рассмотрены как статическая задача на примере электронов на поверхности жидкого гелия и запылённой плазмы, так и динамическая, когда существенным становится вклад в свободную энергию кинетической составляющей, на примере пылинок в плазме.

Рассмотрено систему взаимодействующих частиц, для потенциальной составляющей свободной энергии разработан особый подход, позволяющий сравнивать свободные энергии двух систем частиц, упорядочённых в решётку Браве, несмотря на “катастрофичность” потенциала.

**Ключевые слова:** кулоновский потенциал, подход Хаббарда-Стратоновича, свободная энергия, запылённая плазма, электроны на поверхности гелия, состояние локализации, вигнеровский кристалл, расхождение.

## ANNOTATION

Tymchyshyn V.B. Statistical description of systems with coulomb-like interaction. — Manuscript.

Thesis for the Doctor of Philosophy degree (Candidate of science in Physics and Mathematics) in speciality 01.04.02 — theoretical physics. — Bogolyubov Institute for Theoretical Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine. — Kyiv, 2017.

The thesis contains theoretical study results of systems with coulomb-like interaction, particularly, using the cases of electrons on the liquid helium surface and grains in dusty plasma, the statical problem was considered, as well as the dynamical one (when kinetic energy becomes important), using the case of dusty plasma.

The system of interacting particles was considered and, using Hubbard-Stratonovich approach, its free energy was calculated. The expression obtained comprises entropic, kinetic, and potential parts. The last two are scrutinized throughout the thesis, including development of a special method for potential energy calculation that takes into account the “catastrophicity” of the interparticle potential. Developed method allows comparing two Bravais lattices with equal mean particle density without running into divergence of the series representing potential energy.

Two static and one dynamic systems are considered. The first are electrons on the liquid helium surface and grains in dusty plasma. For electrons a special interparticle potential is considered. It comprises effects caused by particles being charged and by the presence of the external pressing field. Obtained equation contains localization distance thus leaving the possibility of minimization with this parameter. As result a temperature-dependent expression for localization distance of the electron is obtained (when  $T \rightarrow 0$  it is transformed to the well-known one). Besides, conditions of Wigner crystal existence can be obtained, namely  $E^2/T \geq 2100 \text{ dyn/cm} \cdot K$ . Both results can be verified experimentally.

Free energy of the dust crystal is minimized with regard to the Bravais lattice parameters. This procedure is performed with modified scheme, since default algorithms in mathematical packages are often confused with different representations of the same lattice. Since the lattice can be described with infinitely many triples of translation vectors, rounding errors may lead to longer translation vectors be viewed as preferable, but in fact they describe the same lattice.

This problem is solved by introducing additional restrictions on the lattice parameters. This removes the ambiguity in lattice representation by translational vectors. With restrictions obtained and expression for the free energy minimization over the space of admissible parameters is performed. The result is lattice type that should emerge in dusty plasma when conditions allow dust crystal formation —

hexagonal close packing. This is in agreement with known experimental data and numerical simulations performed by different approaches.

Together with static systems, current thesis considers a dynamic one — grains in dusty plasma at conditions corresponding to dust crystal melting, e.g. kinetic part of free energy becomes significant. Specific polarization of the surrounding plasma associated with the modification of the grain screening due to plasma-particle fluxes may cause the reduction (or even vanishing) of the grain friction. This conclusion follows from the calculations of the effective grain potentials with regard to electron and ion absorption by grains. The basic assumption of such calculations is that charging currents maintaining the grain charge are strictly fixed. Obviously, this is an approximation, since there occur fluctuations of electron and ion fluxes towards the grain and related grain charge fluctuations caused by the particle density and electric-field fluctuations in the surrounding plasma.

In thesis assumption about electron and ion currents is relaxed. It is still supposed the total charge of the grain is constant, but instead of setting both currents constant it is only supposed they are equal and may synchronously change in time. The last assumption is justified by significant difference between electron and ion diffusion coefficients. If ion flux fluctuates this can be immediately “mirrored” by electron flux due to their much higher diffusion coefficient and thus keeping the total charge of the grain constant.

First of all, it was found that taking fluctuations of electron and ion currents into account results in significant broadening of probability distribution function. The latter leads to significant increase in mean velocity of the grain. This effect is of great importance since it may contribute to abnormally high kinetic energy of grains in dusty plasma.

Except mentioned “smearing” of probability distribution function, the bistability in velocity distribution was found. This effect is interesting due to perfect delay principle, the latter leads to conclusion, hysteresis is possible in this system. The hysteresis and increase in kinetic energy of the grain can be verified experimentally.

To conclude: obtained results contribute to interpretation of abnormally high kinetic energy of grains in dusty plasma, lattice type of dust crystal and prediction of electron’s temperature-dependent localization distance on the liquid helium surface.

**Keywords:** Coulomb potential, Hubbard-Stratonovich approach, free energy, dusty plasma, electrons on the liquid helium surface, localization distance, Wigner crystal, divergence.

Тимчишин Віталій Богданович

Статистичний опис систем з кулонівським типом взаємодії

(Автореферат дисертації на здобуття наукового ступеня кандидат фізико-математичних наук (доктор філософії))

---

Зам.— 5

Формат 60 x 84/16

Обл.—вид. арк.— 1.42

Підписано до друку 10.08.2017 р.

тираж 100 прим.

---

Поліграфічна дільниця ІТФ ім. М.М.Боголюбова НАН України,  
вул. Метрологічна 14-б, м. Київ, 03143, Україна