

Національна академія наук України  
Інститут теоретичної фізики ім. М. М. Боголюбова  
Національна академія наук України  
Інститут теоретичної фізики ім. М. М. Боголюбова

Кваліфікаційна наукова  
праця на правах рукопису

Тимчишин Віталій Богданович

УДК 538.9

## ДИСЕРТАЦІЯ

Статистичний опис систем з кулонівським типом взаємодії

01.04.02 — теоретична фізика

104 — фізика та астрономія

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

Дисертація містить результати власних досліджень. Використання ідей, результатів і текстів інших авторів мають посилання на відповідне джерело

---

(підпис, ініціали та прізвище здобувача)

Науковий керівник Лев Богдан Іванович, доктор фіз.-мат. наук,  
професор, член-кореспондент НАН України

Київ — 2017



## АНОТАЦІЯ

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

Дисертація на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук (доктора філософії) 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.

Дисертація розпочинається загальним оглядом проблеми знаходження вільної енергії у системі частинок, що взаємодіють. Це питання доволі важливе, адже на даний момент відомо зовсім небагато модельних систем взаємодіючих частинок, для яких в точності може бути розрахована функція розподілу в термодинамічній границі. Що ж до опису рівноважних станів, то існує всього кілька результатів отриманих у рамках рівноважної статистичної механіки. Як наслідок, виник цілий ряд підходів до знаходження вільної енергії у таких системах: колективних змінних, інтегральних перетворень, функціональної та статистичної теорії поля.

У цій дисертації використовується альтернативний підхід, що дозволяє розвинути теорію функціоналу густини з куди більш простою структурою, — перетворення Хаббарда-Стратоновича. Він надає можливість включити вклад далекодіючих кореляцій між флуктуаціями у загальний потенціал. Важливим результатом застосування даного підходу є загальний вид для віль-

ної енергії системи та, зокрема, вираз для ентропійної складової. Останній вбирає в себе таку важливу особливість системи як статистика, якій вона підкоряється (наприклад Фермі-Дірака, Бозе-Ейнштейна чи Максвелла-Больцмана).

Надалі у дисертації по чергово розглядаються питання потенціальної та кінетичної складових вільної енергії системи. Зокрема, більша частина прикладних результатів, представлених у дисертації, ґрунтується на спеціально розробленому методі обрахунку потенціальної енергії частинки у ґратці Браве, що для кулонівського потенціалу являє собою модифікацію сумування Евальда. Важливою особливістю представленого підходу є те, що він дозволяє порівнювати вільні енергії двох систем частинок, упорядкованих у ґратку Браве, незважаючи на “катастрофічність” потенціалу. Такий результат досягається завдяки виокремленню потенційно розбіжних доданків у такому вигляді, що вони не залежать від типу ґратки, а лише від середньої густини частинок. Варто відзначити, що запропонований підхід до обчислення потенціальної складової вільної енергії може бути застосований не лише до систем з кулонівським міжчастинковим потенціалом, а й до будь-яких інших.

Розроблені методи надалі застосовуються до електронів на поверхні рідкого гелію та порошинок у запиленій плазмі. Для початку, вклад кінетичної складової у вільну енергії допускається нехтовно малим, тобто розглядається статична задача.

В першій з розглянутих систем електрони розташовані на поверхні діелектрика (рідкого гелію) та мають тільки два ступені свободи. Внаслідок квантових ефектів вони “плавають” над поверхнею гелію на досить великій відстані, приблизно  $76 \text{ \AA}$ . Електронний “шар” вважається двовимірним, а вплив гелію розглядається як “корекція” міжелектронного потенціалу без розгляду впливу окремих атомів гелію, що робить цю систему привабливою для теоретичних досліджень. З експериментальних та теоретичних дослі-

джень відомо, що вони можуть існувати у формі рідини або кристалу Вігнера, а також піддаватися фазовому переходу, який проявляється в ступені їх упорядкованості (перехід рідина-тверде тіло).

Вищезгаданий плоский “шар” електронів проявляє цілий ряд цікавих властивостей з точки зору структурної реорганізації. У ряді робіт, наприклад, було продемонстровано структурний перехід решітки Вігнера від трикутної до квадратної. Також існують теоретичні моделі та експериментальні дані, що однорідний розподіл електронної щільності не завжди стабільний, тобто існують критичні значення параметрів, при яких утворюються просторові структури, а саме періодичні деформації та багатоелектронні лунки. Проте, ці структури можуть бути розглянуті окремо від кристалізації Вігнера, оскільки їх характерний розмір значно більший, ніж період вігнерівської ґратки.

В розрахунках використовується вираз для міжчастинкового потенціалу, що не є чисто кулонівським. Такий підхід більш точно відповідає реальним експериментам, оскільки більшість з них виконується з умовах дії зовнішнього електричного поля, що притискає електрони до поверхні гелію зі значною силою. Оскільки вони не можуть проникнути крізь цю поверхню внаслідок квантових ефектів, то виштовхуються назад. Таким чином поверхня деформується, а це, у свою чергу, змінює потенціал взаємодії між електронами. Як наслідок, повний вираз для міжчастинкового потенціалу формується з доданку, що враховує взаємодію електронів як заряджених частинок, та доданку, відповідального за капілярну взаємодію.

В отриманий вираз для вільної енергії входить відстань локалізації електрона на поверхні рідкого гелію. Останнє дає можливість провести мінімізацію вільної енергії по цьому параметру та знайти температуро-залежний вираз для відстані локалізації. Цей результат є надзвичайно важливим з точки зору можливої експериментальної перевірки. Якщо ж у отриманому виразі перейти до границі  $T \rightarrow 0$ , то рівняння перейде у вже відоме, що

служує непрямим доказом коректності розвиненої теорії.

Досліджуючи вираз для вільної енергії електрона на поверхні рідкого гелію, можна отримати певні обмеження на умови існування вігнерівського кристалу. В дисертації отримується вираз  $E^2/T \geq 2100 \text{ dyn/cm} \cdot K$ , який цілком відповідає інтуїтивним уявленням про те, що для утворення вігнерівського кристалу температура в системі повинна бути достатньо низькою, а значення напруженості електричного поля достатньо високим. Цей результат також може бути підданий експериментальній перевірці.

Ще однією статичною системою, до якої застосовується розвинений апарат для обчислення вільної енергії, є пиловий кристал у плазмі. Відомо, що поглинання пилинкою зарядів з плазми виливається в особливий тип екранування, яке може значною мірою відрізнитися від дебаївського. А саме, ефективний потенціал пилинки може мати подібну до кулонівської асимптотику і приводити до особливого розподілу плазмових частинок навколо порошинки. В дисертації розв'язується задача знаходження типу ґратки, що формується у порошинками у плазматичному середовищі. В якості першого наближення, обирається міжчастинковий потенціал у формі екранованого кулонівського потенціалу, але сама відстань екранування покладається значно більшою за характерні параметри ґратки.

У дисертації отримується вираз вільної енергії для пилового кристалу та проводиться його мінімізація за параметрами ґратки. Мінімізація при цьому відбувається за дещо модифікованою схемою. Очевидно, що відображення між множиною всіх можливих значень параметрів (вектори трансляції) та всіх можливих решіток Браве не є бієкцією. Це швидше сюр'єкція — одна ґратка може бути описана різними наборами параметрів (різні вектори трансляції). Це викликає розбіжність при застосуванні стандартних методів мінімізації: внаслідок втрат точності при заокругленні, такі алгоритми часто надають перевагу довшим векторам трансляції, хоча ті можуть описувати ту саму ґратку.

Для подолання даної проблеми в дисертації пропонується підхід, заснований на введенні додаткових обмежень на числові значення параметрів, що дозволяє досягнути відповідності один-до-одного між їх значеннями та параметрами ґратки. Мінімізація на множині обмежених параметрів дає можливість виявити тип ґратки, що мала б утворитися порошинками в плазмі. Результатом такої мінімізації є гексагональна щільноупакована ґратка. Це співпадає з відомими на сьогоднішній день експериментальними даними.

Поряд зі статичними системами в дисертації розглядається динамічна — порошинки у плазмі, за умов плавлення пилового кристалу коли кінетична складова робить вагомий вклад у вільну енергію. Поляризація довколишньої плазми, зумовлена потоком електронів та іонів, що поглинаються пилинкою, може викликати зменшення (або навіть зникнення) тертя порошинки. Оскільки відомо, що пилинки у плазмі набувають певного (залежного від їх параметрів) заряду, що залишається сталим у часі, то в більшості випадків потоки електронів та іонів покладаються сталими.

У дисертації порошинки в плазмі розглядаються без припущення про сталість потоків, незмінним покладається лише загальний заряд порошинки. Справедливість цієї моделі виправдовується значною різницею у коефіцієнтах дифузії електронів та іонів — у перших він куди вищий, а отже флуктуація у потоці іонів, що може привести до зміни заряду порошинки, тут же буде “продубльована” електронами. Інтуїтивно може здаватися, що прийняття до уваги такого ефекту не може змінити поведінку системи. Проте, у дисертації демонструється, що таке врахування флуктуацій приводить до значних якісних змін функції розподілу імовірності для швидкості.

Перш за все виявлено, що наявність флуктуацій у потоці зарядів приводить до значного “розмиття” функції розподілу імовірності. Обчислюючи кінетичну енергію порошинки, було виявлено, що в даній моделі вона значно зростає. Цей ефект надзвичайно важливий, адже з експериментальних даних відомо про аномально високу кінетичну енергію пилинок у плазмі.

Іншими словами: в дисертації пропонується пояснення принаймні частини аномальної кінетичної енергії порошинок.

Окрім вищезгаданого “розмиття” функції розподілу імовірності, виявлено бістабільність у розподілі швидкостей та визначено умови її виникнення. Цей ефект також дуже цікавий, адже з урахуванням принципу максимальної затримки він дає можливість говорити про виникнення гістерезису у системі. Ефект гістерезису та зростання кінетичної енергії частинок можуть бути перевірені експериментально.

Підбиваючи підсумки виконаної роботи: 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.

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

**Список публікацій здобувача:**

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*.

## ANNOTATION

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

Thesis for candidate's degree (Doctor of Philosophy) in physics, specialty 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.

Thesis start with a general description of free energy calculation problem for a system of interacting particles. This problem is of high importance since at the moment for only few model systems analytical expression of probability distribution function in thermodynamical limit has been calculated. Regarding equilibrium states, there is only a small number of results obtained in terms of equilibrium statistical mechanics. As a consequence, a number of approaches for free energy calculation emerged: collective variables, integral transformations, functional and statistical field theory.

In following thesis an alternative approach is used — Hubbard-Stratonovich transformation. It allows the development of a much more simple density functional theory. By this approach long-range correlations between fluctuations can be included into the general potential. Important result obtained by this approach is general expression for free energy of the system, particularly the summand related to entropy. The latter comprises such an inherent system's property like its statistics (e.g. Fermi-Dirac, Bose-Einstein, Maxwell-Boltzmann).

General consideration is followed by consideration of potential and kinetic parts of free energy in more details. Particularly, most of concrete results, presented in the thesis, are based on specially developed method of potential energy calculation for particle in a Bravais lattice. For ordinary Coulomb potential this method may be reduced to modified Ewald's summation. Presented approach has important feature: it allows comparing free energies of two systems of particles ordered in Bravais lattice despite the potential being "catastrophic". This result is achieved due to isolation of potentially divergible summands in a form including mean particles' density only but independent of lattice type. One may notice, presented approach for potential energy calculation is still valid for potentials different from the Coulomb one.

Developed methods are further applied to electrons on the liquid helium surface and grains in dusty plasma. First three chapters of the thesis consider statical problem thus neglecting contribution of the kinetic energy.

First, electrons on the dielectric surface (namely liquid helium) are considered. They have two degrees of freedom only and thus are more simple to analyze. Due to quantum effects electrons are "floating" over the helium surface, approximately  $76 \text{ \AA}$  above it. As existing models and experimental data suggest, one may omit considering interaction between electrons and individual helium atoms, rather treat influence of the bulk helium as correction of inter-electron potential. Besides, same data suggests, electrons can be safely treated as two-dimensional system and may exist in form of liquid or Wigner crystal. Moreover, they can undergo phase transition between this two states.

Mentioned flat layer of electrons exhibits the whole variety of interesting effects in terms of structural reorganization. For example, numerous works demonstrate phase transition between two types of Wigner crystal's lattice—triangular and square. Besides, there exist theoretical models and experimental data that suggest uniform electron distribution on the helium surface to be not always stable. Thus, critical values of parameters appear, at which different spati-

al structures like periodic deformations and multi-electron dimples are formed. But these structures can be treated separately from Wigner crystallization since their characteristic distance is much greater than Wigner lattice constants. In this thesis their influence is disregarded since the system is treated at scales comparable to translation vectors of the lattice.

Inter-electron potential used in this thesis is different from pure Coulomb and takes capillary interaction and dielectric polarization into account. This approach is in better correspondence with experimental data, since the latter is obtained in the presence of an external electric field that presses electrons against the liquid helium surface. Due to quantum effects electrons can't just get through the surface and are "pushed back". This leads to deformation of the surface that in its turn results in altered interaction between electrons. Thus, the final expression for the electron-electron interaction is formed by a summand that takes into account their interaction as charged particles and a summand comprising capillary interaction.

In this thesis an expression for free energy is obtained. It explicitly contains the localization distance of the electron. This allows us to minimize free energy with respect to the electron's localization distance and obtain its temperature-dependent expression. The obtained result is very important by means of experimental verification. If one takes the limit  $T \rightarrow 0$ , the obtained expression transforms into the already known one. This is an indirect evidence of the correctness of the developed theory.

Further consideration of the obtained free energy expression leads to certain restrictions on conditions under which a Wigner crystal is formed. In this thesis the inequality  $E^2/T \geq 2100 \text{ dyn/cm} \cdot K$  is obtained. From the qualitative point of view it is in complete agreement with physical intuition — a Wigner crystal is formed if the temperature of the system is sufficiently low and the external pressing field is sufficiently large (the latter means the attraction force due to capillary interaction is strong enough). This result can be experimentally verified as well.

The developed approach for free energy analysis can be applied not only to two-

dimensional systems, but three dimensional as well. One more physical system considered in thesis are grains in dusty plasma, particularly dust crystal. It is known, absorption of electrons and ions by macro-particles leads to specific type of screening that may significantly differ from the Debye one. Thus, effective potential of the grain may have asymptotic similar to  $1/r$  and this leads to peculiar distribution of plasma particles around the macro-particle. In thesis the problem of finding type of lattice, formed by grains in plasmatic environment, is considered. As a first approximation, screened Coulomb potential is used as inter-particle potential, but screening distance supposed to be much greater than any parameter of the lattice.

Free energy of the dust crystal in plasma is considered in thesis. Its expression is minimized with respect to lattice parameters. Procedure of minimization is performed by specifically modified scheme. It is known, that mapping between set of all possible lattice parameters (translation vectors) and all possible Bravais lattices is not a bijection. It is rather surjection— one lattice can be described in terms of different parameters (different translation vectors). Most cases this leads to divergence when performing minimization by means of conventional methods— due to rounding errors many algorithms start preferring longer translation vectors, despite they may describe the same lattice.

To solve this problem, approach based on adding additional constrictions on translation vectors is proposed. This method allows to achieve one-to-one correspondence between lattice parameters and lattice type. Minimization on set on parameters with constrictions taken into account allows to predict lattice type for grains in dusty plasma. Prediction obtained in thesis is hexagonal closed packing, HCP. It coincides with known experimental data and results of numerical simulation.

Together with static systems, dynamical one is considered in the thesis. That's again grains in dusty plasma, but under conditions of dust crystal melting. The latter means, we cannot neglect kinetic part of free energy any more, moreover it

becomes the “main contributor”. It is known, grain in plasmatic environment starts absorbing electrons and ions from its surroundings. Emerging flux of charged particles leads to polarization of enviroing plasma and this, in its turn, to decrease (or even vanishing) of friction force. Experiments show that particles tend to have constant charge (depending on their size and other parameters), thus most theoretical models assume constant flux of electrons and ions.

In the thesis assumption on constant flux of charged particles is avoided, but only the total charge of the grain is supposed to be invariable. Correctness of this model is justified by the significant difference between diffusion coefficients of electrons and ions. Electrons have much higher mobility, thus it is expected, that fluctuations in ion flux are immediately “mirrored” by electrons. This leads to constant particle charge, but at the same time fluxes are non-constant. Intuitively it seems like nothing changes. In the thesis it is shown that taking mentioned fluctuations into account leads to significant qualitative changes in velocity distribution.

First of all, it was discovered, that fluctuation of fluxes leads to notable “smearing” of probability distribution function for velocity. This leads to increase of total kinetic energy of the particle within considered model. It means, presented approach may explain, at least partially, anomalously 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.

**List of publications:**

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*.

## ЗМІСТ

<b>Вступ</b>		<b>19</b>
<b>Розділ 1</b>	<b>Статистичний опис систем з кулонівським типом взаємодії</b>	<b>27</b>
1.1	Вступ . . . . .	27
1.2	Статична поведінка системи частинок з кулонівською взаємодією . . . . .	29
1.3	Статистична сума. Перетворення Хаббарда-Стратоновича . . . . .	30
1.4	Внутрішня енергія частинок у ґратці Браве . . . . .	34
1.4.1	Потенціальна енергія системи частинок у термінах густини розподілу . . . . .	35
1.4.2	Функція розподілу густини частинок за заданою ґраткою Браве . . . . .	37
1.4.3	Потенціальна енергія частинки в термінах оберненої ґратки . . . . .	43
1.5	Застосування розробленого формалізму до “катастрофічних потенціалів” . . . . .	45
1.5.1	Обчислення потенціальної енергії частинки в ґратці Браве для екранованої кулонівської взаємодії . . . . .	46
1.5.2	Потенціальна енергія електрона в ґратці Браве . . . . .	49
1.5.3	Покращення збіжності для потенціальної енергії частинок з кулонівським потенціалом взаємодії . . . . .	54
1.6	Висновки до розділу 1 . . . . .	58
<b>Розділ 2</b>	<b>Електрони на поверхні рідкого гелію</b>	<b>60</b>
2.1	Вступ . . . . .	60
2.2	Відстань локалізації для електрона у вігнерівському кристалі . . . . .	62



	17
2.2.1	Вільна енергія електронів на поверхні рідкого гелію . . . . . 63
2.2.2	Міжелектронний потенціал на поверхні рідкого гелію . . . . . 66
2.2.3	Температуро-залежна відстань локалізації для електро- на на поверхні рідкого гелію. . . . . 68
2.3	Порівняння потенціальної енергії для квадратної та трикутної ґраток . . . . . 69
2.4	Висновки до розділу 2 . . . . . 73
<b>Розділ 3</b>	<b>Пиловий кристал у запо рошеній плазмі . . . . . 76</b>
3.1	Вступ . . . . . 76
3.2	Визначення параметрів ґратки для пилового кристала у запо- рошеній плазмі . . . . . 77
3.2.1	Особливості чисельної мінімізації параметрів ґратки . . . . . 78
3.2.2	Результати та їх обговорення . . . . . 80
3.3	Висновки до розділу 3 . . . . . 81
<b>Розділ 4</b>	<b>Динамічна поведінка кулонівської системи . . . . . 82</b>
4.1	Вступ . . . . . 82
4.2	Сучасні проблеми фізики запо рошеної плазми . . . . . 83
4.3	Рух зарядженої броунівської частинки з точки зору теорії ви- падкових процесів. . . . . 85
4.4	Поведінка броунівської частинки у плазмовому середовищі . . . . . 91
4.4.1	Флуктуації заряду . . . . . 92
4.4.2	Динамічна сила тертя для пилової частинки . . . . . 96
4.4.3	Функція розподілу імовірності для швидкості пилинок . . . . . 97
4.5	Деякі питання чисельних розрахунків . . . . . 98
4.6	Результати . . . . . 100
4.7	Висновки до розділу 4 . . . . . 105
<b>Висновки</b>	<b>107</b>

<b>Список використаних джерел</b>	<b>110</b>
<b>Додаток А Список публікацій здобувача за темою дисертації та відомості про апробацію результатів дисертації</b>	<b>120</b>

## ВСТУП

**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 різноманітність 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 дозволив розвинути теорію функціоналу густини з куди більш простою структурою. Цей метод надає можливість включити вклад далекодіючих 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 пиловому 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 кулонівським 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 пилінки.

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

*Предметом дослідження* в силу різноманіття фізичних реалізацій таких систем стали загорошена 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.

**Перший розділ** присвячено статистичному опису системи з кулонівським типом взаємодії. Тут демонструється застосування наближення Хаббарда-Стратоновича для обчислення статистичної суми. У розділі показано,

що для багатьох квантових систем у даному наближенні основною різницею з класичними є ентропійна складова. Також розглядається потенціальна енергія частинок, що впорядковані у ґратку Браве. Особливу увагу приділено кулонівському потенціалу та приведено спосіб обчислення потенціальної енергії системи заряджених частинок. Використовуючи простір оберненої ґратки та функцію розподілу ймовірності для однієї частинки отримано вирази, які можуть дозволити уникнути розбіжностей при аналізі систем з кулонівським типом взаємодії. Загалом, як підсумок, варто відзначити, що даний розділ увібрав у себе весь математичний апарат і відсилки до отриманих тут результатів будуть по мірі необхідності виникати у наступних розділах.

**У другому розділі** проведено дослідження поведінки електронів на поверхні рідкого гелію. При цьому використовується математичний апарат, який було побудовано у попередньому розділі для знаходження потенціальної складової вільної енергії. Оскільки у такій системі значну роль починає відігравати ентропійна складова, то в цьому розділі її було обчислено з застосуванням непертурбаційного методу заснованого на представленні Хаббарда-Стратоновича для статистичної суми (застосування рівнянь попереднього розділу до двовимірної системи фермі-часток). Завдяки отриманим виразам знайдено відстань локалізації електронів на поверхні рідкого гелію.

**У третьому розділі** як фізичну систему для апробації представленого матапарату було вибрано пиловий кристал у плазмі. Тут досліджено питання про ґратку з мінімальним значенням вільної енергії. Оскільки рівняння доволі складні, то аналіз було проведено з застосуванням чисельних методів. У розділі продемонстровано можливий підхід для уникнення проблем мінімізації пов'язаних з неоднозначністю представлення ґратки векторами трансляції.

**У четвертому розділі** основну увагу присвячено кінетичній енергії порошків у запиленій плазмі. Тут відбувається перехід від опису статичної

системи до опису динамічної— з'являється випадкова складова у сили, що діє на частинку. Така складова може виникати внаслідок взаємодії макроскопічних часток з середовищем (поглинання частинкою електронів та іонів) і має особливе значення при дослідженні пилових кристалів чи окремих пилинок у запыошеній плазмі. Оскільки сталість заряду пилинки не означає відсутності флуктуацій стікаючих на неї електронів та іонів, то можна очікувати, що це ялось вплине на її поведінку. У даному розділі аналізується такий вплив на функцію розподілу частинок за швидкостями та, з огляду на отримані результати, передбачаються можливі ефекти пам'яті у такій системі (наявність гістерезису).

Дисертація закінчується **Висновками, Списком використаної Літератури**.

**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 експериментальними даними;
4. продемонстровано значний вплив флуктуацій стоку іонів та електронів на розподіл швидкостей та енергію порошинок у запыошеній плазмі — відповідний розподіл буде відмінним від гаусового;



5. виявлено бістабільність у розподілі швидкостей та визначено умови її виникнення, а також передбачено можливість існування гістерезису в 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 запырошеній 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 порошинку, 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.

# РОЗДІЛ 1

## СТАТИСТИЧНИЙ ОПИС СИСТЕМ З КУЛОНІВСЬКИМ ТИПОМ ВЗАЄМОДІЇ

### 1.1 Вступ

Метою даного розділу є розгляд проблем статистичного описання систем з кулонівським типом взаємодії, а також розвиток всього необхідного математичного апарату для подальшого застосування до аналізу фізичних систем.

Розділ відкривається параграфом 1.2, який окреслює сучасний стан досліджень систем з кулонівським типом взаємодії та надає мотивацію для використання підходу заснованого на наближенні Хаббарда-Стратоновича. Далі у параграфі 1.3 будується загальна статистична модель для опису взаємодіючих частинок, ґрунтуючись на вищезгаданому наближенні Хаббарда-Стратоновича.

Безпосереднє застосування до конкретної системи можна буде побачити на прикладі двовимірної системи взаємодіючих фермі-частинок (частина 2.2.1), а саме електронів на поверхні рідкого гелію. В межах же даного розділу фізична система конкретизуватись не буде. Але, звичайно ж, буде зроблено певні припущення про систему, що аналізується, і вони будуть становити обмеження на квантові системи, які можна розглядати запропонованим способом.

Основна робота пов'язана з розрахунком потенціальної енергії проводиться у параграфі 1.4. Там буде розвинено формалізм, суттєво необхідний для розуміння розділів 2 та 3 в тій їх частині, що відноситься до обчислення потенціальної енергії. Спочатку енергія системи записується через функцію

розподілу густини частинок (частина 1.4.1), дана функція переписується в термінах одночастинкової функції розподілу з урахуванням симетрії (дещо нагадує формфактор у КТП, частина 1.4.2), а для останньої вибирається найбільш природній вигляд у частині 1.4.2.1.

Окреслений підхід відомий тим, що дозволяє враховувати вплив граничних ефектів для скінченних кластерів частинок [9, 10]. Параграф завершується частиною 1.4.3, де все це агрегується у єдиний вираз для потенціальної енергії, з усе ще довільним міжчастинковим потенціалом.

Найбільш цікавим для розгляду потенціалом є екранований кулонівський потенціал (звичайний кулонівський потенціал розглядається як його частковий випадок). Тож у параграфі 1.5 спочатку формується відповідний вираз для потенціальної енергії (частина 1.5.1), а згодом проводить серйозне покращення збіжності відповідного виразу (частина 1.5.3). Отримане рівняння у певному смислі еквівалентне сумуванню Евальда — та ж ідея розбиття на дві суми по гратці та оберненій гратці; та ж сама швидкість збіжності.

Проте сумування Евальда включає деякі довільні константи, що підбираються експериментально в залежності від ґратки для досягнення кращої продуктивності. Спосіб вибору цих параметрів може значно відрізнитися у різних роботах [11–18]. У цій дисертації буде представлено ряд без будь-яких “вільних змінних”, тобто з “вбудованими” параметрами, уже налаштованими для найбільшої продуктивності у межах розглянутої задачі. Як буде показано у параграфі 3.2.1, для практичних застосувань достатньо менше 1000 доданків, а з урахуванням симетрій їх кількість може бути ще значно зменшена.

Результати параграфів 1.3 та 1.4, в принципі, застосовні як до дво- так і тривимірних систем. Але, щоб уникнути самоповторень протягом всього параграфу 1.4, буде розглянуто тільки тривимірний випадок як куди більш складний. Результати для двовимірного випадку буде надано в розділі 2 з вказівками звідки береться різниця у виразах.

## 1.2 Статична поведінка системи частинок з кулонівською взаємодією

Системи частинок, з кулонівським типом взаємодії, як-то різні види плазми, розчини електролітів, колоїдні частинки, електронний газ у твердих тілах і тому подібне, широко представлені як у природі, так і лабораторних умовах. Серед згаданих систем цілий ряд володіє здатністю “самозбиратися” в різноманітні структури, зокрема розчини поверхнево-активних речовин, колоїдів та порошинки в запиленій плазмі. Постійна зацікавленість у цих системах підтримується їх застосуванням до вивчення найрізноманітніших явищ у науці [19–21].

Однією з перепон на шляху до статистичного опису систем з кулонівським типом взаємодії є висока концентрація частинок [22]. Однак, саме при зростанні концентрації спостерігаються переходи між кристалічними фазами з різними симетріями та явища подібні до плавлення [1, 23, 24]. Окрім того, запорошені плазми як і колоїдні розчини можуть слугувати в якості середовища для експериментальних досліджень класичних рідин та твердих тіл [24–32], оскільки і прямі вимірювання [33, 34], і теоретичні розрахунки [35] вказують на кулонівську природу взаємодії у цих випадках. Теоретичне описання подібних систем є однією з ключових проблем фізики.

Оскільки традиційні методи статистичної механіки незастосовні до неоднорідних систем з кулонівським типом взаємодії, то подібні задачі виявляються доволі складними. Виникає необхідність застосовувати особливі підходи, що дозволяють брати до уваги неоднорідність розподілу частинок. Ці методи повинні включати в себе певну процедуру, яка дозволила б знайти домінуючий вклад у функцію розподілу та уникнути розбіжності вільної енергії при безмежному зростанні об’єму системи. На даний час відомо лише кілька систем взаємодіючих частинок, для яких можна точно порахувати статистичну суму в термодинамічній границі [36–39]. Що ж до опису

рівноважних станів, то на даний момент існує зовсім небагато результатів отриманих у рамках рівноважної статистичної механіки. Проте, відомі результати можна куди простіше отримати в термінах колективних змінних та інтегральних перетворень [40]. Більше того, такий підхід робить можливим отримання вільної енергії класичної плазматичної системи з точністю до будь-якого порядку. З використанням функціональної та статистичної теорії поля було отримано мезоскопічний опис впорядкованих структур, що здатні до “самозбирання” [41]. У цьому розділі і надалі буде використовуватися альтернативний підхід [42], який приводить до теорії функціоналу густини з порівняно простою структурою. Цей метод дає можливість включити вклад далекодіючих кореляцій між флуктуаціями у загальний потенціал. Загалом відомо, що флуктуації можуть мати певний вплив на стабільність періодичної структури [30, 31]. Зокрема, методи теорії поля вказують, що вони можуть чинити стабілізуючий вплив на періодичну структуру. Одним зі способів описання просторово-неоднорідних розподілів у системі взаємодіючих частинок — новий нестандартний метод, запропонований у [43, 44], який передбачає застосування представлення Хаббарда-Стратоновича для функції розподілу [45]. Пізніше цей метод було розширено та застосовано до систем з кулонівським типом взаємодії для розрахунку функції розподілу частинок [42]. Важливо, що цей розв’язок немає розбіжностей у термодинамічній границі.

### **1.3 Статистична сума. Перетворення Хаббарда-Стратоновича**

Перейдемо до загального розгляду неоднорідної системи взаємодіючих частинок [3, 44]. До кінця даного параграфу ні система, ні потенціал взаємодії не будуть вказуватися в явному вигляді, щоб зберегти загальність та розширюваність теорії.

Відомо, що макроскопічні стани системи добре описуються числами

заповнення. Додатково можна допустити, що гамільтоніан має наступний вигляд:

$$H = \sum_s \varepsilon_s n_s + \frac{1}{2} \sum_{s,s'} V_{ss'} n_s n_{s'}. \quad (1.1)$$

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  $n_s$  є числом заповнення для стану  $s$ . Також надалі нехтуються квантові кореляції, що дещо звужує клас можливих систем до квазікласичних.

Таким чином статистична сума матиме наступний вигляд:

$$Z = \sum_{\{n_s\}} \exp(-\beta H),$$

де підсумовування проводиться по всіх можливих станах  $\{n_s\}$  системи.

Тепер можна застосувати деякі властивості гаусових інтегралів по допоміжних полях, тобто перетворення Хаббарда-Стратоновича [45, 46]:

$$\exp\left(\frac{\nu^2}{2\vartheta} \sum_{s,s'} \omega_{ss'} n_s n_{s'}\right) = \int_{-\infty}^{\infty} D\varphi \exp\left(\nu \sum_s n_s \varphi_s - \frac{\vartheta}{2} \sum_{s,s'} \omega_{ss'}^{-1} \varphi_s \varphi_{s'}\right),$$

де  $D\varphi = \prod_s d\varphi_s / \sqrt{\det(2\pi\beta\omega_{ss'})}$ . Якщо ж внести числа заповнення до введеного поля, то зникне залежність від їх другого порядку, а статистична функція набуде вигляду:

$$Z = \int_{-\infty}^{\infty} D\varphi \exp\left[\sum_s (i\varphi_s - \beta\varepsilon_s) n_s - \frac{1}{2\beta} \sum_{s,s'} (V_{ss'}^{-1} \varphi_s \varphi_{s'})\right].$$

Рівняння Коші дає можливість зафіксувати число частинок для канонічного ансамблю

$$\frac{1}{2\pi i} \oint \xi^{\sum_s n_s - N - 1} d\xi = 1,$$

що приводить до  $N$ -частинкової функції розподілу

$$Z_N = \frac{1}{2\pi i} \oint d\xi \int D\varphi \exp \left[ -\frac{1}{2\beta} \sum_{s,s'} V_{ss'}^{-1} \varphi_s \varphi_{s'} - (N+1) \ln \xi \right] \times \\ \times \prod_s \sum_{\{n_s\}} [\xi \exp(i\varphi_s - \beta\varepsilon_s)]^{n_s}.$$

Тепер якщо виконати сумування по числах заповнення:

$$Z_N = \frac{1}{2\pi i} \oint d\xi \int D\varphi \exp[-\beta F(\varphi, \xi)], \\ \beta F(\varphi, \xi) = \frac{1}{2} \sum_{s,s'} V_{ss'}^{-1} \varphi_s \varphi_{s'} + \delta \sum_s \ln(1 - \delta \xi e^{-\beta\varepsilon_s + i\varphi_s}) + (N+1) \ln \xi. \quad (1.2)$$

Тут тип статистики включає в себе  $\delta$  — воно рівне  $+1$  для частинок Бозе-Ейнштейна,  $0$  для Максвела-Больцмана і  $-1$  для статистики Фермі-Дірака.

Рівняння (1.2) являє собою вираз для вільної енергії в представленні допоміжного поля і з хімічною активністю  $\xi = \exp(\beta\mu)$ . Воно містить всю інформацію про можливі стани системи та відповідає послідовності рівноважних станів у відповідності з їх ваговими коефіцієнтами. Очевидно, що істотний інтерес становить асимптотичне значення функції розподілу, але при цьому дуже бажано уникнути теорії збурень. Для цього область визначення продовжується до комплексної площини, та застосовується метод перевалу.

При цьому домінуючий внесок роблять стани, що відповідають умові екстремуму

$$\frac{\delta \beta F}{\delta \varphi} = \frac{\delta \beta F}{\delta \xi} = 0.$$

Варіація (1.2) дає вираз для станів пов'язаних з сідловою точкою

$$\frac{1}{\beta} \sum_{s'} V_{ss'}^{-1} \varphi_{s'} - \frac{i\xi e^{-\beta\varepsilon_s + i\varphi_s}}{1 - \delta \xi e^{-\beta\varepsilon_s + i\varphi_s}} = 0; \quad (1.3a)$$

$$\sum_s \frac{\xi e^{-\beta\varepsilon_s + i\varphi_s}}{1 - \delta \xi e^{-\beta\varepsilon_s + i\varphi_s}} = N + 1. \quad (1.3b)$$



Для конкретного стану вираз

$$f_s = \frac{\xi e^{-\beta\varepsilon_s + i\varphi_s}}{1 - \delta\xi e^{-\beta\varepsilon_s + i\varphi_s}}, \quad (1.4)$$

з (1.3b) можна розглядати як середнє число заповнення. Таким чином можуть бути отримані стани, що відповідають сідловій точці (їх можна інтерпретувати як термодинамічно стійкі розподіли).

Рівняння (1.3a) містить обернену матрицю, що доволі незручно, адже проблема її знаходження, навіть для відносно простих потенціалів, є доволі складною математичною задачею сама по собі [44, 47, 48]. На щастя, цього можна уникнути, якщо використати (1.4) та виконати обернене перетворення

$$\begin{aligned} \varphi_s &= i\beta \sum_{s'} V_{ss'} f_{s'}, \\ \frac{1}{2\beta} \sum_{s,s'} V_{ss'}^{-1} \varphi_s \varphi_{s'} &= -\frac{\beta}{2} \sum_{s,s'} V_{ss'} f_s f_{s'}. \end{aligned}$$

Тоді вільна енергія запишеться

$$\beta F[f, \xi] = -\frac{\beta}{2} \sum_{s,s'} V_{ss'} f_s f_{s'} - \delta \sum_s \ln(1 + \delta f_s) + (N + 1) \ln \xi(f). \quad (1.5)$$

У термінах канонічного ансамблю з рівняння (1.4) можна записати

$$\begin{aligned} \ln \xi(f) &= \frac{1}{N} \sum_s f_s [\beta(\varepsilon_s + E_s) + \ln f_s - \ln(1 + \delta f_s)], \\ E_s &= \sum_{s'} V_{ss'} f_{s'}, \end{aligned}$$

і підставити останній вираз у вільну енергію (1.5), щоб переписати рівняння для неї без хімічного потенціалу

$$F[f] = \sum_s f_s \varepsilon_s + \frac{1}{2} \sum_{s,s'} V_{ss'} f_s f_{s'} + \underbrace{\frac{1}{\beta} \sum_s [f_s \ln f_s - (f_s + \delta) \ln(1 + \delta f_s)]}_{F_{ent}}. \quad (1.6)$$

Перші два доданки в (1.6) є кінетичною та потенціальною енергіями відповідно, а останній — це внесок обумовлений ентропією  $F_{ent}$  (повинна дорівнювати нулю, якщо  $T = 0$ ).

На завершення поточного параграфу варто провести короткий тест отриманих результатів. Якщо розглянути великий канонічний ансамбль з фіксованим хімічним потенціалом, то можна отримати з (1.4)

$$f_s = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_s - \mu_s)} - \delta}, \quad (1.7)$$

що є узагальненням відомого розподілу з хімічним потенціалом

$$\mu_s = \mu - E_s.$$

Очевидно, що наближення “сідлової точки” та “середнього поля” еквівалентні в цьому випадку. Якщо ж розглядається ідеальний газ ( $\mu_s \equiv \mu$ ), то можна одразу отримати класичні статистичні розподіли, що також слугує непрямою перевіркою представленої теорії.

Оглядаючись назад, можна коротко підсумувати результати даного параграфу. На початку було поставлено задачу знайти загальний вираз для вільної енергії в наближенні середнього поля. Як такий може розглядатися рівняння (1.6) (і в деякому сенсі (1.7), яке може бути використане для отримання функції розподілу частинок у великому канонічному ансамблі). Крім того, було отримано певні обмеження на клас систем, які можуть бути розглянуті в межах побудованого формалізму: особлива форма гамільтоніана (1.1) і незначні квантові крос-кореляції.

#### 1.4 Внутрішня енергія частинок у ґратці Браве

Розглянемо нескінченну ґратку Браве з відомими параметрами, у вузлах якої розташовано частинки що взаємодіють одна з одною з потенціалом  $V(|\vec{r} - \vec{r}'|)$ . Надалі буде показано, як можна використати трансляційну симетрію для отримання в деяких випадках більш зручних виразів для потенціальної енергії.

### 1.4.1 Потенціальна енергія системи частинок у термінах густини розподілу

Нехай  $\mathbb{V}$  позначає підмножину з розбиття  $\mathbb{R}^3$  на домени, що містять строго одну частинку (відносно положення частинки в кожному домені вважається віддаленим від його стінок).

Класичним прикладом такого розбиття можуть слугувати комірки Вігнера-Зейца. Але подальші викладки часто вимагають проводити інтегрування по  $\mathbb{V}$  і використовувати комірки Вігнера-Зейца стає незручно через складну їх форму. Для уникнення даної проблеми використовується той факт, що всі решітки Браве у тривимірному просторі можна розглядати як побудовані з паралелепіпедів на векторах трансляції. Таким чином надалі буде використовуватися в якості області інтегрування  $\mathbb{V}$  паралелепіпед як на рисунку 1.1. Додатковою перевагою такого вибору є те, що всі домени однакові і відно-

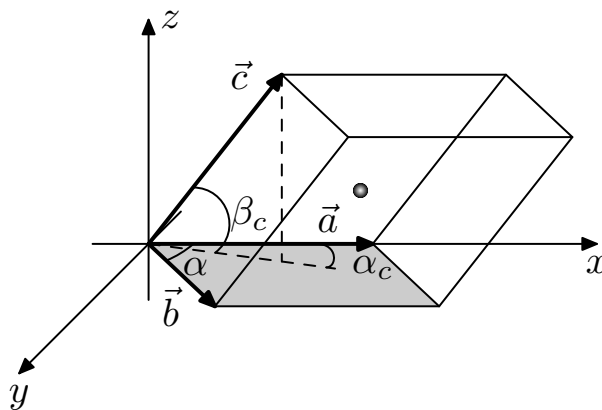


Рис. 1.1: Одна комірка  $\mathbb{V}$  з розбиття  $\mathbb{R}^3$ . Вектори  $\vec{a}$ ,  $\vec{b}$  і  $\vec{c}$  є базовими векторами ґратки Браве. Кут між  $\vec{a}$  і  $\vec{b}$  покладається рівним  $\alpha$ . Кут між вектором  $\vec{c}$  та площиною  $XY$  —  $\beta_c$ , а між його проекцією на  $XY$  та  $\vec{a}$  —  $\alpha_c$ . В центрі домена показано частинку.

сне положення частинки у них теж співпадає.

Отже, потенціальну енергію частинки, локалізованої поблизу вузла ґратки Браве, можна записати у вигляді (надалі кінетична енергія нехтується,

оскільки частинки вважаються сильно локалізованими, а значить потенціальна енергія повинна бути значно більшою)

$$F_{int} = \iiint_{\mathbb{V}} \iiint_{\mathbb{R}^3} V(|\vec{r} - \vec{r}'|) \rho(\vec{r}) \rho(\vec{r}') d\vec{r}' d\vec{r}, \quad (1.8a)$$

$$F_s = \iiint_{\mathbb{V}} \iiint_{\mathbb{V}} V(|\vec{r} - \vec{r}'|) \rho(\vec{r}) \rho(\vec{r}') d\vec{r}' d\vec{r}, \quad (1.8b)$$

$$F_{sp} = F_{int} - F_s + F_{ent}. \quad (1.8c)$$

Тут  $F_{sp}$  (від англ. *single particle*) — вільна енергія однієї частинки в ґратці,  $F_{ent}$  (від англ. *entropy*) — ентропійний вклад. Протягом даного розділу ця частина вільної енергії буде вважатись нехтовною, так як розглядатиметься класична фізична система в якій частинки сильно локалізовані. Доданок  $F_{ent}$  вказано виключно для сумісності з наступним розділом 2, що дозволить не повторювати рівняння (1.8) ще раз.

Потенціальна енергія взаємодії у (1.8) представлена як  $F_{int} - F_s$ . Таке “розщеплення”, з математичної точки зору, — просто ще один спосіб сказати, що область інтегрування повинна бути  $\mathbb{R}^3 \setminus \mathbb{V}$ . Якщо розкрити обидва доданки та застосувати  $\iiint_{\mathbb{R}^3 \setminus \mathbb{V}} = \iiint_{\mathbb{R}^3} - \iiint_{\mathbb{V}}$ , то областю інтегрування по змінній  $\vec{r}'$  виявиться  $\mathbb{R}^3 \setminus \mathbb{V}$ .

З фізичної точки зору доданок  $F_{int}$  (від англ. *interaction*, подальші посилення 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 посилення на нього як на “енергію самодії”) як енергія взаємодії частинки з самою собою. Іншими словами, оскільки частинки локалізовані поблизу вузла ґратки, то можна виділити деяку “частину простору”  $\mathbb{V}$  навколо нього, і, як було сказано вище,  $\mathbb{V}$  міститиме строго одну частинку. Тож проводячи інтегрування по області  $\mathbb{R}^3 \setminus \mathbb{V}$  можна отримати енергію взаємодії частинки в  $\mathbb{V}$  з усіма іншими.

Дуже хороше інтуїтивне представлення про область інтегрування  $\mathbb{R}^3 \setminus \mathbb{V}$

можна отримати через аналогію з дискретним випадком. Щоб обчислити кулонівську енергію для  $i$ -ї частинки, обчислюють  $\sum_{j \neq i} q_i q_j / r_{ij}$ . Інтегрування по  $\mathbb{R}^3 \setminus \mathbb{V}$  в певному сенсі аналогічне запису  $j \neq i$  для дискретного випадку.

Звичайно, виникає питання про доцільність представлення потенціальної енергії взаємодії у формі двох доданків  $F_{int}$  (1.8a) та  $F_s$  (1.8b). Крім суто технічної зручності (як буде видно з подальших розрахунків), таке “розщеплення” має ще одну перевагу. Грунтуючись на фізичному характері потенціалу що розглядається, можна у кожному конкретному випадку приймати рішення компенсувати самодію чи ні. Звичайно, що для кулонівського потенціалу самодію слід безумовно компенсувати — потенціальна енергія системи рівна нулю, якщо в ній присутня тільки одна частинка (трохи пізніше цей випадок буде розглянуто у параграфі 1.5). З іншого боку, для ефективних потенціалів, що викликані впливом частинок на оточуюче середовище, може мати смисл не компенсувати самодію, бо навіть у відсутності інших частинок дана може впливати на середовище і цим викликати зміну вільної енергії системи. Хорошим прикладом такого потенціалу є капілярна взаємодія. Якщо частинка деформує поверхню, то цим уже робить певний внесок у вільну енергію системи незалежно від наявності інших частинок (розглядається далі в параграфі 1.5.2). Звичайно ж, деформації створені одними частинками впливають на деформації створені іншими, а це, в свою чергу, викликає появу ефективного притягання між ними. Але в той же час частинка взаємодіє і з “власною” деформацією поверхні, а це вже може розглядатися як “самодія”.

#### 1.4.2 Функція розподілу густини частинок за заданою граткою

##### Браве

У рівнянні (1.8) 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  $\rho_{\text{sp}}$  (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 одночастинковою функцією розподілу ймовірності (дещо аналогічна форм-фактору у КТП).

Необхідне перетворення можна зробити ґрунтуючись на векторах оберненої ґратки, якщо виконати наступний розклад:

$$\rho(\vec{r}) = \sum_{\vec{k} \in \mathbb{Z}^3} \rho_{\vec{k}} \mathfrak{f}_{\vec{k}}(\vec{r}), \quad (1.9a)$$

$$\rho_{\vec{k}} = \bar{\rho} \iiint_{\mathbb{V}} \mathfrak{f}_{\vec{k}}(\vec{r}) \rho_{\text{sp}}(\vec{r}) d\vec{r}, \quad (1.9b)$$

$$\mathfrak{f}_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{2\pi i(\vec{k}^T \hat{G} \vec{r})}, \quad (1.9c)$$

$$\hat{G} = \begin{pmatrix} \frac{1}{a} & \frac{\cot(\alpha)}{a} & -\frac{\cot(\beta_c) \sin(\alpha - \alpha_c)}{a \sin(\alpha)} \\ 0 & \frac{\csc(\alpha)}{b} & -\frac{\cot(\beta_c) \sin(\alpha_c)}{b \sin(\alpha)} \\ 0 & 0 & \frac{\csc(\beta_c)}{c} \end{pmatrix}. \quad (1.9d)$$

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. Щоб отримати краще інтуїтивне розуміння, як застосовувати (1.9) для обчислення  $\rho$  за відомим конкретним  $\rho_{\text{sp}}$ , можна звернутися до параграфу 1.4.2.1.

Оскільки (1.9) виглядає на даному етапі дещо штучно, то подальші викладки присвячено дослідженню властивостей розкладу по  $\mathfrak{f}_{\vec{k}}(\vec{r})$  в просторі оберненої ґратки та зв'язку цього розкладу з рядами Фур'є.

Нехай функція  $g(\vec{r})$  визначена для куба з 1-ним ребром  $\mathbb{U} \equiv [0; 1] \times$

$[0; 1] \times [0; 1]$  (від англ. *Unit cube*). Тоді цю ж функцію можна виразити в термінах рядів Фур'є

$$\begin{aligned} g(\vec{r}) &= \sum_{\vec{k} \in \mathbb{Z}} g_{\vec{k}} e^{2\pi i(\vec{k}^T \vec{r})}, \\ g_{\vec{k}} &= \iiint_{\mathbb{U}} g(\vec{r}) e^{2\pi i(\vec{k}^T \vec{r})} d\vec{r}. \end{aligned} \quad (1.10)$$

Якщо розглянути детальніше  $\hat{G}$  (1.9d), то вона задає взаємно однозначне відображення з  $\mathbb{V}$  у  $\mathbb{U}$ , а  $\hat{G}^{-1}$  — задає зворотнє відображення (можна звернутись до рис. 1.1 за додатковими геометричними міркуваннями)

$$\hat{G}^{-1} = \begin{pmatrix} a & b \cos(\alpha) & c \cos(\alpha_c) \cos(\beta_c) \\ 0 & b \sin(\alpha) & c \sin(\alpha_c) \cos(\beta_c) \\ 0 & 0 & c \sin(\beta_c) \end{pmatrix} \quad (1.11)$$

Приведені рівності (1.10) будуть вірними в тому числі коли  $g(\vec{r}) = \rho_{\text{sp}}(\hat{G}^{-1}\vec{r})$ . Оскільки відомо, що для  $\forall \vec{r} \in \mathbb{V} : \rho_{\text{sp}}(\hat{G}^{-1}\hat{G}\vec{r}) = \rho_{\text{sp}}(\vec{r})$ , то можна відразу записати

$$\rho_{\text{sp}}(\vec{r}) = \sum_{\vec{k} \in \mathbb{Z}^3} g_{\vec{k}} e^{2\pi i(\vec{k}^T \hat{G}\vec{r})}. \quad (1.12)$$

Так само достатньо просто переписати друге рівняння з (1.10)

$$g_{\vec{k}} = \iiint_{\mathbb{V}} \rho_{\text{sp}}(\hat{G}^{-1}\vec{r}) e^{2\pi i\vec{k}^T \hat{G}\hat{G}^{-1}\vec{r}} \frac{d(\hat{G}^{-1}\vec{r})}{J[\hat{G}^{-1}\vec{r}]}, \quad (1.13)$$

тут  $J$  — якобіан.

Очевидно, що якобіан  $J[\hat{G}^{-1}\vec{r}] = abc \sin(\alpha) \sin(\beta_c) = 1/\bar{\rho}$  і по своїй суті є об'ємом комірки  $\mathbb{V}$  або оберненою середньою густиною частинок. Якщо перепозначити  $g_{\vec{k}}$  як  $\rho_{\vec{k}}$  в (1.12) та (1.13), провести заміну змінної в (1.13)  $\hat{G}^{-1}\vec{r} \rightarrow \vec{r}$ , а також позначити показник експоненти в (1.13) як  $f_{\vec{k}}$ , то можна відразу отримати рівняння (1.9). Крім того, отриманий результат означає,

що всі властивості рядів Фур'є можуть бути очевидним чином перенесені на розклад (1.9).

Оскільки (1.9) тісно пов'язані з рядом Фур'є, то від  $\rho(\vec{r})$  можна очікувати періодичної поведінки при її продовженні з  $\mathbb{V}$  до  $\mathbb{R}^3$ . Використовуючи рівняння (1.9d) можна безпосередньою перевіркою переконатись, що якщо  $l \in \mathbb{Z}$ ,  $m \in \mathbb{Z}$  та  $n \in \mathbb{Z}$ :

$$\hat{G}(\vec{r} + l\vec{a} + m\vec{b} + n\vec{c}) = \hat{G}\vec{r} + l\vec{e}_x + m\vec{e}_y + n\vec{e}_z,$$

де  $\vec{e}_x$ ,  $\vec{e}_y$ ,  $\vec{e}_z$  — одиничні вектори вздовж координатних осей. Що ж стосується (1.9c), то

$$f_{\vec{k}}(\vec{r} + l\vec{a} + m\vec{b} + n\vec{c}) = f_{\vec{k}}(\vec{r})$$

і від (1.9a)

$$\rho(\vec{r} + l\vec{a} + m\vec{b} + n\vec{c}) = \rho(\vec{r}).$$

Останнє рівняння вказує на зв'язок між  $\rho$  і  $\rho_{sp}$  як це представлено на рис. 1.2.

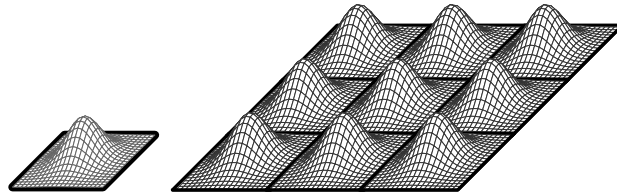


Рис. 1.2: Двовимірна аналогія переходу від одночастинкової функції густини імовірності  $\rho_{sp}(\vec{r})$  до багаточастинкової  $\rho(\vec{r})$ . Функція  $\rho(\vec{r})$  задана на всьому  $\mathbb{R}^2$  за допомогою двовимірного аналога рівняння (1.9).

Тобто представлений розклад і справді є варіацією на тему рядів Фур'є для  $\rho_{sp}$  і при цьому  $\rho$  періодична вздовж векторів  $\vec{a}$ ,  $\vec{b}$  і  $\vec{c}$ . Таким чином, можна розглядати  $\rho(\vec{r})$  як функцію на  $\mathbb{R}^3$  яка “складається” з одночастинкових розподілів “розташованих у вузлах ґратки. Що, власне, і демонструє рис. 1.2. А оскільки  $\rho$  має ту ж симетрію, що і ґратка Браве та являє собою локально хороше наближення для  $\rho_{sp}$ , то саме на цю функцію варто спиратись як на розподіл імовірностей для всієї решітки.



Надалі отримані рівняння можуть бути застосовані різними способами — від знаходження потенціальної енергії для відомої ґратки Браве і до мінімізації  $F_{\text{sp}}$  по параметрах  $\hat{G}$ , що дозволяє встановити, які ґратки можуть бути сформовані за певних умов. Цей тип аналізу буде пізніше застосований до пилового кристалу (параграф 3.2).

**1.4.2.1 Обчислення функції розподілу  $\rho$  для гаусової одночастинкової функції розподілу  $\rho_{\text{sp}}$ .** Як уже згадувалось, особливий інтерес представляє випадок, коли частинки сильно локалізовані, тобто їх координати достатньо добре визначені. Але так як температура у системі відрізняється від нуля, то можна очікувати, що позиція кожної конкретної частинки буде флюктувати поблизу свого рівноважного положення. Таким чином, замість вказувати конкретну точку, позицію частинки варто описувати одночастинковою функцією розподілу ймовірності  $\rho_{\text{sp}}$  (дещо аналогічна форм-фактору у КТП, див. параграф 1.4.2).

Звичайно, в такому випадку функції розподілу ймовірності можуть залежати від вибраної фізичної системи. Але для сильно локалізованих частинок варто очікувати функцію у вигляді достатньо вузького піку, що в границі переходить у дельта-функцію. Беззаперечно, що найбільш широковідомим представником такого класу функцій є гаусіана

$$\rho_{\text{sp}}(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi s^2)^{d/2}} e^{-r^2/(2s^2)}, \quad (1.14)$$

де  $s$  — дисперсія, або, за фізичним змістом, відстань локалізації частинки, а що  $d$  — розмірність простору.

Варто зазначити, що розмірність простору відноситься лише до способу локалізації частинок. Наприклад, частинки можуть бути розміщені в одній площині і тоді  $d = 2$ , але при цьому вони можуть взаємодіяти через тривимірний кулонівський потенціал. в подальшому це рівняння буде використано як у дво- так і тривимірному представленні.

Таке особливе ставлення до гаусівського розподілу пояснюється двома речами. 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 відхиляється від вузла ґратки.

Також одразу можна зробити припущення, що “гаусіана” (1.14) дуже “гостра” й області локалізації частинок не перекриваються. А це, в свою чергу, означає, що  $s$  набагато менше, ніж будь-які інші характерні розміри в цій системі.

Таким чином можна вважати, що  $\rho_{\vec{k}}(\vec{r})$  рівне нулю, а точніше мізерно мале, всюди в  $\mathbb{R}^3 \setminus \mathbb{V}$ . Це дає право змінити межі інтегрування в (1.9b) на нескінченні

$$\rho_{\vec{k}} = \bar{\rho} \iiint_{\mathbb{R}^3} \rho_{\text{sp}}(r) e^{2\pi i (g_{\vec{k}} z + g'_{\vec{k}} x + g''_{\vec{k}} y)} d\vec{r},$$

тут  $g_{\vec{k}}$ ,  $g'_{\vec{k}}$  та  $g''_{\vec{k}}$  отримано з (1.9c) та (1.9d):

$$\begin{aligned} g_{\vec{k}} &= \frac{k_x \sin(\alpha_c - \alpha)}{a \tan(\beta_c) \sin(\alpha)} - \frac{k_y \sin(\alpha_c)}{b \tan(\beta_c) \sin(\alpha)} + \frac{k_z}{c \sin(\beta_c)}, \\ g'_{\vec{k}} &= \frac{k_x}{a}, \\ g''_{\vec{k}} &= -k_x \frac{\cot(\alpha)}{a} + \frac{k_y}{b \sin(\alpha)}. \end{aligned}$$

Якщо записати рівняння (1.9c) в сферичних координатах

$$\mathbf{f}_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{2\pi i r (g_{\vec{k}} \cos(\theta) + [g'_{\vec{k}} \cos(\varphi) + g''_{\vec{k}} \sin(\varphi)] \sin(\theta))},$$

і підставити (1.14), то результатом інтегрування стане

$$\rho_{\vec{k}} = \bar{\rho} e^{-2\pi^2 s^2 (g_{\vec{k}}^2 + g'_{\vec{k}}^2 + g''_{\vec{k}}^2)}.$$

Безпосередньою перевіркою можна переконатись, що більш компактним записом останньої рівності буде (1.15)

$$\rho_{\vec{k}} = \bar{\rho} e^{-2\pi^2 s^2 \vec{k}^T \hat{G} \hat{G}^T \vec{k}}. \quad (1.15)$$

Введена константа  $s$  означає дисперсію представленого розподілу. З фізичної точки зору, її можна розглядати як відстань локалізації. В подальших викладках у даному розділі вона відіграватиме суто технічну роль, але знаходження відстані локалізації та порівняння з класичним виразом є одним з основних результатів розділу 2.

### 1.4.3 Потенціальна енергія частинки в термінах оберненої ґратки

Останнє що залишилось зробити — записати вираз для потенціальної енергії в термінах одночастинкової функції розподілу густини ймовірності. По суті це означає, що рівняння (1.8а) та (1.9) необхідно зібрати в одну систему.

Для початку потрібно виконати деякі перетворення над (1.8а). Якщо звернути увагу, що інтеграл по  $\vec{r}'$  має безмежні границі інтегрування, то рівняння може бути переписане наступним чином:

$$F_{int} = \iiint_{\mathbb{V}} \iiint_{\mathbb{R}^3} V(|\vec{r}'|) \rho(\vec{r}) \rho(\vec{r} + \vec{r}') d\vec{r}' d\vec{r}. \quad (1.16)$$

Тепер, якщо підставити  $\rho(\vec{r})$  з рівняння (1.9а), а також звернути увагу, що згідно з (1.9с)  $f_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{r}') = f_{\vec{k}}(\vec{r}) f_{\vec{k}}(\vec{r}')$  і ввести позначення

$$V_{\vec{k}} = \bar{\rho} \iiint_{\mathbb{R}^3} f_{\vec{k}}(\vec{r}') V(|\vec{r}'|) d\vec{r}',$$

то можна записати наступне

$$F_{int} = \frac{1}{\bar{\rho}} \sum_{\vec{k} \in \mathbb{Z}^3} \rho_{\vec{k}} V_{\vec{k}} \sum_{\vec{k}' \in \mathbb{Z}^3} \rho_{\vec{k}'} \iiint_{\mathbb{V}} f_{\vec{k}}(\vec{r}) f_{\vec{k}'}(\vec{r}) d\vec{r}.$$

Останнє рівняння можна спростити, якщо виконати інтегрування по  $\vec{r}$ . Згідно параграфу 1.4.2, очікується ортогональність функцій  $f_{\vec{k}}$ . Іншими словами, з (1.9с) можна зробити висновок  $f_{\vec{k}}(\vec{r})f_{\vec{k}'}^*(\vec{r}) = f_{\vec{k}-\vec{k}'}(\vec{r})$ , а це, в свою чергу, приводить до рівняння

$$\iiint_{\mathbb{V}} f_{\vec{k}}(\vec{r})f_{\vec{k}'}^*(\vec{r})d\vec{r} = abc \sin(\alpha) \sin(\beta_c)\delta_{\vec{k},\vec{k}'},$$

де  $\delta_{\vec{k},\vec{k}'} = \delta_{k_x,k'_x}\delta_{k_y,k'_y}\delta_{k_z,k'_z}$  — добуток трьох дельт Кронекера.

Відзначивши, що  $abc \sin(\alpha) \sin(\beta_c) = 1/\bar{\rho}$ , де  $\bar{\rho}$  — середня густина частинок (пам'ятаючи що в  $\mathbb{V}$  міститься строго одна частинка і залучаючи геометричні міркування згідно з рис. 1.1) можна отримати (1.17а).

$$F_{int} = \frac{1}{\bar{\rho}^2} \sum_{\vec{k} \in \mathbb{Z}^3} |\rho_{\vec{k}}|^2 V_{\vec{k}}, \quad (1.17a)$$

$$V_{\vec{k}} = \bar{\rho} \iiint_{\mathbb{R}^3} f_{\vec{k}}(\vec{r}') V(|\vec{r}'|) d\vec{r}'. \quad (1.17b)$$

Перш ніж рухатися далі, варто звернути увагу на одну важливу деталь. Отримані рівняння доволі корисні, оскільки вони дозволяють мати справу з “катастрофічними” потенціалами, наприклад кулонівським. Можна помітити, що для будь-якого спадаючого з відстанню потенціалу тільки

$$\frac{1}{\bar{\rho}^2} |\rho_0|^2 V_0 = 4\pi\bar{\rho} \int_0^{\infty} V(r)r^2 dr,$$

може бути розбіжним, і то лише якщо потенціал “катастрофічний”.

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). Порівняння можна досягнути кількома способами: розглядати різницю енергій двох ґраток Браве, вимірювати

енергію ґратки від  $V_0|\rho_0|^2/\bar{\rho}^2$ , або розглядати випадок коли простір заповнено рівномірно розподіленим зарядом протилежного знаку (еквівалентно прирівнюванню до нуля вказаного доданку).

По суті рівняння (1.17), (1.9) та (1.8) є кінцевою метою даного параграфу. Вони дають уявлення про енергію частинки в ґратці Браве та дозволяють порівнювати дві ґратки з однаковою густиною частинок навіть для “катастрофічних” потенціалів. Надалі розвинений формалізм буде застосовано до кулонівського потенціалу (параграф 1.5) та капілярної взаємодії (параграф 1.5.2). Вони обидва використовують  $\rho$  отримані з гаусівської функції розподілу ймовірності  $\rho_{sp}$  в параграфі 1.4.2.1.

### **1.5 Застосування розробленого формалізму до “катастрофічних потенціалів”**

Після розробки загального формалізму, необхідно перейти до його безпосереднього застосування. Очевидно, що найбільш цікавим прикладом є кулонівський потенціал, адже з одного боку це надзвичайно поширений вид міжчастинкової взаємодії, а з іншого — можливість перевірити розроблений формалізм на прикладі “катастрофічного” потенціалу.

Зокрема, в параграфі 3.2 буде розглянуто формування кристалу з порошинок у запиленій плазмі, а розділ 2 повністю присвячено поведінці електронів на поверхні рідкого гелію. В обох випадках ми маємо справу з кулонівським потенціалом — екранованим для порошинок і звичайним для електронів. Останнє буде розглядатися як частковий випадок екранованого кулонівського потенціалу з радіусом екранування що наближається до нескінченності.

Таким чином, подальші викладки спрямовані на знаходження  $F_{int} - F_s$  для екранованого кулонівського потенціалу з використанням методів викладених у параграфі 1.4. Розгляд фізики цих двох систем буде відкладено до

параграфу 3.2 та розділу 2 відповідно.

### 1.5.1 Обчислення потенціальної енергії частинки в ґратці Браве для екранованої кулонівської взаємодії

Екранований кулонівський потенціал можна представити у вигляді

$$V(r) = \frac{q^2 e^{-r/\lambda_D}}{r}, \quad (1.18)$$

де  $\lambda_D$  — дебаївська відстань екранування.

Тепер можна розглянути рівняння (1.9c) і (1.9d) в сферичних координатах

$$\begin{aligned} f_{\vec{k}}(\vec{r}) &= e^{2\pi i r (g_{\vec{k}} \cos(\theta) + g'_{\vec{k}} \cos(\varphi - \delta\varphi_{\vec{k}}) \sin(\theta))}, \\ g_{\vec{k}} &= \frac{k_x \sin(\alpha_c - \alpha)}{a \tan(\beta_c) \sin(\alpha)} - \frac{k_y \sin(\alpha_c)}{b \tan(\beta_c) \sin(\alpha)} + \frac{k_z}{c \sin(\beta_c)}, \\ g'_{\vec{k}} &= \sqrt{\frac{k_x^2}{a^2} + \left( \frac{k_y}{b \sin(\alpha)} - k_x \frac{\cot(\alpha)}{a} \right)^2}, \end{aligned}$$

і записати  $V_{\vec{k}}$  з (1.17b)

$$V_{\vec{k}} = \bar{\rho} \int_0^{\infty} dr V(r) r^2 \int_0^{\pi} d\theta \sin(\theta) \underbrace{\int_0^{2\pi} d\varphi e^{2\pi i r (g_{\vec{k}} \cos(\theta) + g'_{\vec{k}} \cos(\varphi - \delta\varphi_{\vec{k}}) \sin(\theta))}}_{I(\theta)}.$$

Інтегруючи по  $\varphi$  можна отримати

$$I(\theta) = 2\pi e^{2\pi i g_{\vec{k}} r \cos(\theta)} J_0 \left( 2\pi g'_{\vec{k}} r \sin(\theta) \right),$$

а підставивши останній вираз в рівняння для  $V_{\vec{k}}$

$$V_{\vec{k}} = 2\pi \bar{\rho} \int_0^{\infty} V(r) r^2 \int_0^{\pi} e^{2\pi i g_{\vec{k}} r \cos(\theta)} J_0 \left( 2\pi g'_{\vec{k}} r \sin(\theta) \right) \sin(\theta) d\theta dr.$$

Оскільки на даному етапі розглядається екранований кулонівський потенціал (1.18), то це означає, що інтеграл по  $r$  збіжний. При цьому виявля-

ються надзвичайно корисними наступні співвідношення [49]

$$\int_0^{\infty} e^{-\alpha x} J_{\nu}(\beta x) x^{\nu+1} dx = \frac{2\alpha(2\beta)^{\nu} \Gamma(\nu + \frac{3}{2})}{\sqrt{\pi}(\alpha^2 + \beta^2)^{\nu+3/2}}, \quad \text{Re}(\alpha) > |\text{Im}(\beta)|, \text{Re}(\nu) > -1,$$

що разом з рівнянням для  $V_{\vec{k}}$  дозволяють отримати

$$V_{\vec{k}} = \int_0^{\pi} \frac{2\pi\bar{\rho}q^2 (1/\lambda_D - 2\pi i g_{\vec{k}} \cos(\theta)) \sin(\theta) d\theta}{\left( (1/\lambda_D - 2\pi i g_{\vec{k}} \cos(\theta))^2 + (2\pi g'_{\vec{k}} \sin(\theta))^2 \right)^{3/2}}.$$

Якщо ж виконати заміну змінної  $t = \cos(\theta)$ , то виявиться, що можна проінтегрувати останній вираз і по  $t$

$$V_{\vec{k}} = \frac{4\pi\bar{\rho}q^2}{1/\lambda_D^2 + 4\pi^2 g_{\vec{k}}^2 + 4\pi^2 g'_{\vec{k}}{}^2}.$$

Отриманий результат еквівалентний наступному рівнянню

$$V_{\vec{k}} = \frac{4\pi\bar{\rho}q^2}{1/\lambda_D^2 + 4\pi^2 \vec{k}^T \hat{G} \hat{G}^T \vec{k}}, \quad (1.19)$$

що може бути перевірено безпосередньою підстановкою виразів для  $g_{\vec{k}}$  і  $g'_{\vec{k}}$  та виконанням ряду алгебраїчних перетворень.

Останнє рівняння (1.19) для  $V_{\vec{k}}$  разом з рівнянням (1.15) для  $\rho_{\vec{k}}$  є ключем до отримання виразу для  $F_{int}$  з (1.17a)

$$F_{int} = \sum_{\vec{k} \in \mathbb{Z}^3} e^{-4\pi^2 s^2 \vec{k}^T \hat{G} \hat{G}^T \vec{k}} \frac{4\pi\bar{\rho}q^2}{1/\lambda_D^2 + 4\pi^2 \vec{k}^T \hat{G} \hat{G}^T \vec{k}}. \quad (1.20)$$

У порівнянні зі способом обчислення цієї енергії, що передбачає безпосереднє сумування енергій взаємодії даної частинки з кожною іншою, даний ряд має кращу збіжність. Можна звернути увагу, що для великих значень параметру  $\lambda_D$  перші доданки розкладу (1.20) поведуться як  $\sim 1/|\vec{k}|^2$ . Тоді як подібний ряд, записаний з більш простих міркувань, буде поводити себе як  $\sim 1/|\vec{k}|$ . На жаль, отримана поведінка все ще не достатньо хороша, щоб можна було обмежитись невеликим числом доданків — доводиться брати їх

достатню кількість щоб “почала діяти експонента”. У параграфі 1.5.3 буде показано як можна досягнути покращення збіжності при деяких достатньо розумних припущеннях.

Раніше, у розділі 1.4, уже згадувалось, що для отримання результату в випадку кулонівського потенціалу необхідно коректно скомпенсувати самодію. Подальші викладки буде присвячено обчисленню цієї величини.

Для початку можна розглянути рівняння (1.8b) і доповнити його припущенням, що  $\rho_{sp}$  являє собою функцію з одним “дуже гострим” піком. Це дозволить змінити границі інтегрування на нескінченні, адже значення функції стане нехтовно малим за границями домену в якому знаходиться частинка. Застосовуючи такий же підхід як для (1.16) можна отримати

$$F_s = \iiint_{\mathbb{R}^3} \iiint_{\mathbb{R}^3} V(|\vec{r}'|) \rho_{sp}(\vec{r}) \rho_{sp}(\vec{r} + \vec{r}') d\vec{r}' d\vec{r}. \quad (1.21)$$

Перш за все, якщо виконати деякі математичні перетворення над (1.14) (в декартовій системі координат), то можна записати наступне

$$\rho_{sp}(\vec{r}) \rho_{sp}(\vec{r} + \vec{r}') = \frac{1}{8\pi^3 s^6} e^{-[\vec{r} + \vec{r}'/2]^2/s^2 - \vec{r}'^2/(4s^2)}.$$

Якщо ж підставити даний вираз у (1.21), то виявиться, що він достатньо просто інтегрується по  $\vec{r}$ . Отриманий результат можна представити у сферичній системі координат і виконати інтегрування по кутах. В такому випадку результатом стане (1.22).

$$F_s = \frac{1}{2\sqrt{\pi} s^3} \int_0^\infty e^{-r'^2/(4s^2)} V(r') r'^2 dr', \quad (1.22)$$

Отримане рівняння (1.22) все ще надто загальне, так як ні в якій мірі не прив'язане до потенціалу міжчастинкової взаємодії. Оскільки даний розділ присвячено роботі з кулонівським потенціалом, то можна скористатися явним виразом для  $V$  з (1.18), підставити його в (1.22), а потім, користуючись



визначенням доповненої функції помилок [50]

$$\operatorname{erfc}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_x^{\infty} e^{-t^2} dt, \quad (1.23)$$

провести інтегрування. В результаті буде отримано вираз

$$F_s = \frac{q^2}{\sqrt{\pi}s} \left( 1 - \frac{s\sqrt{\pi}}{\lambda_D} e^{s^2/\lambda_D^2} \operatorname{erfc}(s/\lambda_D) \right). \quad (1.24)$$

Для того, щоб краще зрозуміти поведінку  $F_s$ , варто звернутися до наближення  $s \ll \lambda_D$ . Таке припущення виглядає більш ніж розумно, оскільки вже було сказано, що  $s$  нехтовне у порівнянні з іншими характерними відстанями в системі. Оскільки відомо, що  $\operatorname{erfc}(x \rightarrow 0) \sim 1 - 2x/\sqrt{\pi}$ , то наближена форма (1.24)

$$F_s = \frac{q^2}{\sqrt{\pi}s} - \frac{q^2}{\lambda_D}.$$

Варто звернути увагу на наступний факт: ряд для  $F_{int}$  має два “види розбіжності”. В одному випадку розбіжність виникає при  $s \rightarrow 0$ , а в іншому при  $\lambda_D \rightarrow \infty$ . При розгляді  $F_{int} - F_s$  перший вид розбіжності буде закомпенсовано, тоді як для другий не може бути скомпенсований в принципі, а лише виділений в окремий доданок. Останній, на щастя, не залежить від геометрії ґратки, а отже не впливає на порівняння ґраток з однаковою середньою густиною частинок. Більш детально дані питання розглянуто у наступному параграфі 1.5.3.

## 1.5.2 Потенціальна енергія електрона в ґратці Браве

Система, вибрана для розгляду, суттєво двовимірна. А отже, для початку, необхідно привести аналоги формул (1.17)

$$F_{int} = \frac{1}{\rho^2} \sum_{\vec{k} \in \mathbb{Z}^2 \setminus \{\vec{0}\}} |\rho_{\vec{k}}|^2 V_{\vec{k}}, \quad (1.25a)$$

$$V_{\vec{k}} = \bar{\rho} \iint_{\mathbb{R}^2} \mathfrak{f}_{\vec{k}}(\vec{r}') V(|\vec{r}'|) d\vec{r}', \quad (1.25b)$$

$$\rho_{\vec{k}} = \bar{\rho} \iint_{\mathbb{S}} \mathfrak{f}_{\vec{k}}(\vec{r}) \rho_{\text{sp}}(\vec{r}) d\vec{r}, \quad (1.25c)$$

$$\mathfrak{f}_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{2\pi i(\vec{k}^T \hat{G} \vec{r})}, \quad (1.25d)$$

$$\hat{G} = \begin{pmatrix} 1/a & -\cot(\alpha)/a \\ 0 & \csc(\alpha)/b \end{pmatrix}. \quad (1.25e)$$

По суті різниця полягає у зміні сум  $\sum_{\mathbb{Z}^3} \rightarrow \sum_{\mathbb{Z}^2 \setminus \{\vec{0}\}}$  та інтегралів  $\iiint_{\mathbb{R}^3} \rightarrow \iint_{\mathbb{R}^2}$ , а також у використанні “скороченої” матриці  $\hat{G}$ . Нульовий член при сумуванні оминається, оскільки надалі енергія буде відраховуватися від нього аналогічно як у [3]. Такий підхід, дещо еквівалентний перенормуванню у КТП, дозволяє уникнути розбіжностей при обчисленнях. Роль області інтегрування  $\mathbb{S}$  в даному випадку відіграє паралелограм як на рисунку 1.3.

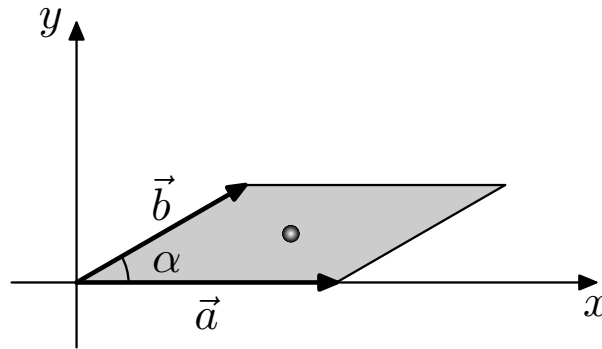


Рис. 1.3: Одна комірка з розбиття простору. Вектори  $\vec{a}$  та  $\vec{b}$  — це базисні вектори ґратки Браве. Кут між ними вважається рівним  $\alpha$ . Область інтегрування  $S$  виділено сірим кольором. Також показано одну частинку в центрі комірки.

Виконання розрахунків як в параграфі 1.4.2.1 з двовимірною гаусовою густиною  $d = 2$  (1.14) приводить до результату аналогічного (1.15)

$$\rho_{\vec{k}} = \bar{\rho} e^{-2\pi^2 s^2 \vec{k}^T \hat{G} \hat{G}^T \vec{k}}, \quad (1.26)$$

де  $\bar{\rho}$  — двовимірна середня щільність частинок.

Дещо більш складним виявляється обчислення  $V_{\vec{k}}$  і результати навіть для кулонівської взаємодії будуть відрізнятися від (1.19). Для початку зауважимо, що для сферично-симетричних потенціалів  $V(|\vec{r}|)$  інтегральне перетворення, що переводить його в  $V_{\vec{k}}$  виглядає простіше

$$V_{\vec{k}} = \bar{\rho} \int_0^{\infty} dr V(r) r \underbrace{\int_0^{2\pi} d\varphi e^{2\pi i r (g_{\vec{k}} \cos(\varphi - \delta\varphi_{\vec{k}}))}}_{I(r)},$$

конкретний вираз для  $\delta\varphi_{\vec{k}}$  приводити немає змісту, адже він не впливає на результати інтегрування, а от для  $g_{\vec{k}}$  рівняння виглядає наступним чином

$$g_{\vec{k}} = \sqrt{\frac{k_x^2}{a^2} + \left( \frac{k_y}{b \sin(\alpha)} - k_x \frac{\cot(\alpha)}{a} \right)^2} = \sqrt{\vec{k}^T \hat{G} \hat{G}^T \vec{k}}.$$

Виконуючи інтегрування по  $\varphi$  через модифіковані функції Бесселя першого роду [50]

$$I_0(x) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\pi} e^{x \cos(\theta)} d\theta,$$

і відзначивши, що  $J_0(ix) = I_0(x)$  [50], можна отримати

$$V_{\vec{k}} = 2\pi\bar{\rho} \int_0^{\infty} J_0 \left( 2\pi r \sqrt{\vec{k}^T \hat{G} \hat{G}^T \vec{k}} \right) V(r) r dr.$$

Тепер можна перейти безпосередньо до обчислення потенціальної енергії. Для зручності використовується лінійність інтегрального перетворення по відношенню до потенціалу, а отже капілярна та кулонівська взаємодії можуть бути розглянуті окремо.

Тож для початку буде розглянуто  $V^{(\text{coulomb})}(r)$  з (2.5). Відомо, що якщо  $a > 0$  і  $y > 0$  [49]

$$\int_0^{\infty} \frac{x J_0(yx) dx}{\sqrt{x^2 + a^2}} = \frac{e^{-ay}}{y},$$

а отже одразу можна записати  $V_{\vec{k}}$  для кулонівської взаємодії між електронами

$$V_{\vec{k}}^{(\text{coulomb})} = \frac{\bar{e}^2 \bar{\rho}}{\sqrt{\vec{k}^T \hat{G} \hat{G}^T \vec{k}}} - \frac{\varepsilon \bar{e}^2 \bar{\rho} e^{-4\pi d \sqrt{\vec{k}^T \hat{G} \hat{G}^T \vec{k}}}}{\sqrt{\vec{k}^T \hat{G} \hat{G}^T \vec{k}}}. \quad (1.27)$$

У цьому рівнянні перший доданок відповідає за просту кулонівську взаємодію, а другий за кулонівську взаємодію за рахунок поляризації підкладки.

Для того, щоб розглянути капілярну взаємодію зручно скористатися наступною рівністю. Відомо що для  $a > 0$  і  $b > 0$  [49]

$$\int_0^{\infty} x J_0(ax) K_0(bx) dx = \frac{1}{a^2 + b^2}. \quad (1.28)$$

Таким чином проводячи інтегрування буде отримано

$$V_{\vec{k}}^{(\text{cap})} = -\frac{\bar{e}^2 E^2}{\sigma} \frac{\bar{\rho}}{1/l_0^2 + 4\pi^2 \vec{k}^T \hat{G} \hat{G}^T \vec{k}}. \quad (1.29)$$

Використовуючи (1.25) та вирази для  $V_{\vec{k}}^{(\text{cap})}$  і  $V_{\vec{k}}^{(\text{coulomb})}$  вдається сформулювати остаточний вираз для потенціальної енергії

$$F_{int} = \bar{\rho} \bar{e}^2 \sum_{\vec{k} \in \mathbb{Z}^2 \setminus \{\vec{0}\}} \left( \frac{1 - \varepsilon e^{-4\pi d \sqrt{\vec{k}^T \hat{G} \hat{G}^T \vec{k}}}}{\sqrt{\vec{k}^T \hat{G} \hat{G}^T \vec{k}}} - \frac{E^2}{\sigma (1/l_0^2 + 4\pi^2 \vec{k}^T \hat{G} \hat{G}^T \vec{k})} \right) \times e^{-4\pi^2 s^2 \vec{k}^T \hat{G} \hat{G}^T \vec{k}}.$$

Ми очікуємо, що щільність часток може бути в межах  $\bar{\rho} = 10^9 \text{ cm}^{-2} \dots 10^3 \text{ cm}^{-2}$  [51], а значить середня відстань між ними  $L$  повинна бути порядку  $\sim 10^{-4} \dots 10^{-2} \text{ cm}$ . З іншого боку ми можемо очікувати, що  $d \sim 0.1 \text{ cm}$  [52], а  $l_0 \sim 1.1 \text{ cm}$  [53]. В такому випадку можна виконати наближення і переписати останнє рівняння

$$F_{int} = \bar{\rho} \bar{e}^2 \sum_{\vec{k} \in \mathbb{Z}^2 \setminus \{\vec{0}\}} \left( \frac{1}{\sqrt{\vec{k}^T \hat{G} \hat{G}^T \vec{k}}} - \frac{E^2}{\sigma (4\pi^2 \vec{k}^T \hat{G} \hat{G}^T \vec{k})} \right) e^{-4\pi^2 s^2 \vec{k}^T \hat{G} \hat{G}^T \vec{k}}. \quad (1.30)$$

На даний момент уже відомий вираз для енергії міжчастинкової взаємодії (1.30). Але, як було згадано у розділі 3, є один компенсаційний доданок

$F_s$  (1.8b) який треба врахувати. Він повинен виключити кулонівську самодію з загального виразу для енергії.

Записавши двовимірний аналог (1.21)

$$F_s = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} V(|\vec{r}'|) \rho_{SP}(\vec{r}) \rho_{SP}(\vec{r} + \vec{r}') d\vec{r}' d\vec{r},$$

можна провести інтегрування у термінах доповненої функції помилок (1.23).

В результаті буде отримано

$$F_s = \frac{\sqrt{\pi} \bar{e}^2}{2s} \left( 1 - \varepsilon e^{d^2/s^2} \operatorname{erfc} \left( \frac{d}{s} \right) \right),$$

або наближено

$$F_s = \frac{\sqrt{\pi} \bar{e}^2}{2s}. \quad (1.31)$$

Рівняння (1.30) та (1.31) є кінцевою метою даного параграфу та будуть використовуватись надалі. На завершення варто звернути увагу на те, що вираз для  $F_s$  призначений лише для компенсації самодії кулонівського потенціалу. У параграфі 1.4.1 було згадано, що ґрутуючись на фізичному характері потенціалу що розглядається, необхідно у кожному конкретному випадку приймати рішення про компенсацію самодії. Звичайно ж, для кулонівського потенціалу самодію слід компенсувати — потенціальна енергія кулонівської системи рівна нулю, якщо в ній присутня тільки одна частинка. На противагу, для капілярної взаємодії варто не компенсувати самодію, бо навіть у відсутності інших частинок дана може впливати на середовище і цим викликати зміну вільної енергії системи. Якщо частинка деформує поверхню, то цим уже робить певний внесок у вільну енергію системи незалежно від наявності інших частинок. Звичайно ж, деформації створені одними частинками впливають на деформації створені іншими, а це, в свою чергу, викликає появу ефективного притягання між ними. Але в той же час частинка взаємодіє і з “власною” деформацією поверхні, а це вже може розглядатися як “самодія”.

### 1.5.3 Покращення збіжності для потенціальної енергії частинок з кулонівським потенціалом взаємодії

Якщо детальніше розглянути рівняння (1.20) для  $F_{int}$ , то можна звернути увагу, що воно містить вирази  $s^2 \hat{G} \hat{G}^T$ . Компоненти матриці  $\hat{G} \hat{G}^T$  в (1.20) пропорційні до різних добутоків обернених відстаней у ґратці, наприклад  $1/a^2$ ,  $1/(ab)$  і такі інші (більш детально (1.9d)). Так як  $s \ll a$ ,  $s \ll b$  та  $s \ll c$  (припущення про “гостру гаусіану”), то очікується, що  $\left| s^2 \hat{G} \hat{G}^T \right| \ll 1$ . Це означає, що показник експоненти “починає діяти” лише для доданків з дуже великим значенням  $|\vec{k}|$ . Подальші викладки присвячено покращенню збіжності (1.20) в припущенні, що ґратка не надто вироджена.

Перш за все, рівняння для  $F_{int}$  зручно переписати наступним чином

$$F_{int} = \frac{2\bar{\rho}q^2}{\pi} e^{s^2/\lambda_D^2} \int_{2\pi s}^{\infty} \mathfrak{s} e^{-s^2/(2\pi\lambda_D)^2} \sum_{\vec{k} \in \mathbb{Z}^3} e^{-s^2 \vec{k}^T \hat{G} \hat{G}^T \vec{k}} d\mathfrak{s}.$$

Щоб переконатися, що наведений вираз рівний (1.20), достатньо провести інтегрування по  $\mathfrak{s}$ .

Насамперед варто звернути увагу на середню відстань, розраховану зі щільності частинок

$$l = \frac{1}{\sqrt[3]{\bar{\rho}}},$$

а також ввести припущення, що решітка, яка розглядається, не надто сильно вироджена. Іншими словами, надалі буде вважатися, що дана ґратка може бути описана як деяка не надто значна “деформація” кубічної решітки.

Як виявляється, змінна  $\mathfrak{s}$  під час інтегрування приймає значення як значно менші за середня відстань, так і набагато більші. Тож для подальших наближень було б зручно розглядати ці випадки окремо. Для цього інтеграл можна робити на два: один від  $2\pi s$  до  $l$ , а другий від  $l$  до нескінченності.

В припущенні, що ґратка не надто сильно вироджена можна вважати, що кути  $\alpha$  і  $\beta_c$  не повинні істотно відрізнятися від  $\pi/2$ . Таким чином, значення

виразів  $\mathfrak{s}^2 \hat{G} \hat{G}^T$  повинні бути менші за 1 для першого інтеграла і більші для другого. Якщо це так, то було б зручно виконати інтегрування для другого інтеграла, адже в кінцевому підсумку буде отримано ряд, який сходиться набагато краще ніж (1.20).

$$F_{int} = \frac{2\bar{\rho}q^2}{\pi} e^{\mathfrak{s}^2/\lambda_D^2} \int_{2\pi\mathfrak{s}}^l \mathfrak{s} e^{-\mathfrak{s}^2/(2\pi\lambda_D)^2} \underbrace{\sum_{\vec{k} \in \mathbb{Z}^3} e^{-\mathfrak{s}^2 \vec{k}^T \hat{G} \hat{G}^T \vec{k}}}_{\Theta(0; \mathfrak{s}^2 \hat{G} \hat{G}^T)} d\mathfrak{s} +$$

$$+ 4\pi\bar{\rho}q^2 \sum_{\vec{k} \in \mathbb{Z}^3} \frac{e^{\mathfrak{s}^2/\lambda_D^2 - l^2(1/[2\pi\lambda_D]^2 + \vec{k}^T \hat{G} \hat{G}^T \vec{k})}}{1/\lambda_D^2 + 4\pi^2 \vec{k}^T \hat{G} \hat{G}^T \vec{k}}.$$

Відкритим поки що залишається питання з приводу першого інтеграла. Для початку можна зауважити, що  $\hat{G}$  з (1.9d) згідно з критерієм Сильвестра [54] є додатно визначеною матрицею. Очевидно, що  $\hat{G}^T$ , а також добуток  $\hat{G} \hat{G}^T$  також повинні бути додатно визначеними матрицями. Так як  $\mathfrak{s}$  приймає тільки додатні значення, то і  $\mathfrak{s}^2 \hat{G} \hat{G}^T$  додатно визначена. Це означає, що виділена сума в останньому рівнянні — це багатовимірна тета-функція Рімана [55] в точці  $z = 0$ ; відповідно, надалі вона буде позначатися належним чином  $\Theta(0; \mathfrak{s}^2 \hat{G} \hat{G}^T)$ .

З властивостей тета-функції можна використати модулярне перетворення [55]

$$\Theta(z; \hat{A}) = \frac{\pi^{d/2}}{\sqrt{\det \hat{A}}} \Theta(\hat{A}^{-1}z; \hat{A}^{-1}),$$

де  $d$  — це розмірність простору (3 в даному випадку). Таким чином отримується

$$\Theta(0; 2\pi^2 \mathfrak{s}^2 \hat{G} \hat{G}^T) = \frac{\pi^{3/2}}{\mathfrak{s}^3 \det \hat{G}} \Theta(0; \hat{G}^{-1T} \hat{G}^{-1} / \mathfrak{s}^2).$$

Тут було використано той факт, що  $\det \hat{G} = \det \hat{G}^T$  і що множення на  $\mathfrak{s}^2$  еквівалентне множенню на діагональну матрицю, у якій всі ненульові елементи рівні  $\mathfrak{s}^2$ .

Якщо використати явний вираз для  $\hat{G}^{-1}$  з (1.11), а також зауважити, що

$$\det \hat{G} = \frac{1}{abc \sin(\alpha) \sin(\beta_c)} = \bar{\rho}, \quad (1.32)$$

то вираз для  $F_{int}$  перепишеться наступним чином

$$F_{int} = 2\sqrt{\pi}q^2 e^{s^2/\lambda_D^2} \sum_{\vec{k} \in \mathbb{Z}^3} \underbrace{\int_{2\pi s}^l e^{-s^2/(2\pi\lambda_D)^2 - |\hat{G}^{-1}\vec{k}|^2/s^2} \frac{d\mathfrak{s}}{\mathfrak{s}^2}}_{I(\vec{k})} + 4\pi\bar{\rho}q^2 \sum_{\vec{k} \in \mathbb{Z}^3} \frac{e^{s^2/\lambda_D^2 - l^2(1/[2\pi\lambda_D]^2 + |\hat{G}^T\vec{k}|^2)}}{1/\lambda_D^2 + 4\pi^2\vec{k}^T\hat{G}\hat{G}^T\vec{k}}.$$

Для спрощення виразу тепер необхідно проінтегрувати  $I(\vec{k})$ . Але, оскільки результат надзвичайно складний, то спочатку буде розумно ввести деякі допоміжні функції

$$\phi(L) = \frac{e^{-L^2/(2\pi\lambda_D)^2}}{L} + \frac{1}{2\sqrt{\pi}\lambda_D} \operatorname{erf}\left(\frac{L}{2\pi\lambda_D}\right),$$

$$f_\alpha(L) = e^{\alpha|\hat{G}^{-1}\vec{k}|/(\pi\lambda_D)} \operatorname{erfc}\left[\frac{|\hat{G}^{-1}\vec{k}|}{L} + \frac{\alpha L}{2\pi\lambda_D}\right],$$

а вже потім представити результат інтегрування в термінах цих функцій

$$I(\vec{k} = 0) = \phi(2\pi s) - \phi(l),$$

$$I(\vec{k} \neq 0) = \sqrt{\pi} \frac{f_{-1}(l) - f_{-1}(2\pi s)}{|4\hat{G}^{-1}\vec{k}|} + \sqrt{\pi} \frac{f_{+1}(l) - f_{+1}(2\pi s)}{|4\hat{G}^{-1}\vec{k}|}.$$

Варто звернути увагу на наступне співвідношення, що впливає безпосередньо з виразу (1.24) для  $F_s$

$$F_s = 2\sqrt{\pi}q^2 e^{s^2/\lambda_D^2} \phi(2\pi s).$$

Так, віднімання  $F_s$  від  $F_{int}$  просто означає нехтування цього доданку.



Інші доданки можна наблизити, якщо взяти до уваги  $s \ll l \ll \lambda_D$ . По-перше, варто знехтувати всіма членами, що містять  $l/\lambda_D$  і  $s/\lambda_D$  в  $f$ . По-друге, відомо, що  $\operatorname{erfc}(x \rightarrow \infty) \sim e^{-x^2}/(x\sqrt{\pi})$  [56], а отже  $f_\alpha(l) \gg f_\alpha(2\pi s)$ . Таким чином, можна знехтувати всі доданки  $f$  з аргументами  $2\pi s$ . Крім того, для спрощення викладок використовується все те ж саме наближення  $\operatorname{erfc}(x \rightarrow \infty) \sim e^{-x^2}/(x\sqrt{\pi})$ , а малі величини в показнику експоненти нехтуються. Для того, щоб зробити всю процедуру наближення більш строгою та прозорою варто звернути увагу, що  $\forall \vec{k} \in \mathbb{Z}^3 \setminus \vec{0} : |\hat{G}^{-1}\vec{k}|/l \geq 1$  і, таким чином,

$$|\hat{G}^{-1}\vec{k}|^2/l^2 \geq |\hat{G}^{-1}\vec{k}|/l \gg |\hat{G}^{-1}\vec{k}|/\lambda_D,$$

що приводить до наступних рівнянь

$$\begin{aligned} \phi(l) &\approx \frac{1}{2\sqrt{\pi}\lambda_D}, \\ I(\vec{k} \neq 0) &\approx \frac{l}{2|\hat{G}^{-1}\vec{k}|^2} e^{-|\hat{G}^{-1}\vec{k}|^2/l^2}. \end{aligned}$$

Щоб отримати перше рівняння було використано тотожність  $\operatorname{erf}(x) = 1 - \operatorname{erfc}(x)$ .

Об'єднуючи все вищесказане, можна записати остаточне наближення для потенціальної енергії зарядженої частинки в ґратці Браве

$$F_{int} - F_s = \frac{\sqrt{\pi}q^2}{l} \sum_{\vec{k} \neq 0} \frac{e^{-\vec{k}^T \hat{G}^{-1T} \hat{G}^{-1} \vec{k} / l^2}}{\vec{k}^T \hat{G}^{-1T} \hat{G}^{-1} \vec{k} / l^2} + \frac{q^2}{\pi l} \sum_{\vec{k} \neq 0} \frac{e^{-l^2 \vec{k}^T \hat{G} \hat{G}^T \vec{k}}}{l^2 \vec{k}^T \hat{G} \hat{G}^T \vec{k}} + 4\pi \bar{\rho} q^2 \lambda_D^2. \quad (1.33)$$

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 (1.33) 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”.

Рівняння (1.33) має ще одну особливість. Кулонівська взаємодія далекодіюча і, маленька у порівнянні з усіма іншими відстанями у ґратці, відстань локалізації  $s$  не повинна відігравати ніякої ролі у наближенні. І справді, в отриманому рівнянні вона повністю відсутня. При цьому може значно відрізнятись поведінка близькодіючих взаємодій, або ефективних взаємодій, для яких не потрібно компенсувати  $F_s$  (наприклад 1.5.2) і там уже можна очікувати значного впливу  $s$ .

## 1.6 Висновки до розділу 1

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

У **параграфі 1.2** проводиться короткий огляд сучасного стану досліджень систем з кулонівським типом взаємодії.

**Параграф 1.3** розпочинається з порівняно короткого розрахунку вільної енергії для неоднорідної системи взаємодіючих частинок. Використовуючи рівняння Хаббарда-Стратоновича вдається уникнути необхідності в складних розрахунках з застосуванням обернених операторів. Отримане рівняння (1.6) надзвичайно загальне і може бути застосоване до цілого ряду різноманітних фізичних систем без специфікації міжчастинкового потенціалу та розмірності системи.

У **параграфі 1.4** основну увагу було присвячено трансляційній симетрії, що дозволило досягнути певного спрощення для потенціальної енергії ви-

разів (1.9) і (1.17). Можна помітити, що для будь-якого “катастрофічного” потенціалу у цих виразах є лише один розбіжний доданок. Але цей доданок не містить жодної інформації про “геометрію решітки” і залежить лише від середньої щільності частинок. А це означає, що тепер можна порівнювати дві ґратки з однаковою середньою щільністю частинок, навіть якщо міжчастинковий потенціал є “катастрофічними”. Також при такому підході всі потенціали діляться на дві групи: ті, що включають самодію (часто ефективних взаємодій через середовище) і ті, які вимагають її компенсації.

Надалі у **параграфі 1.5** було розглянуто два важливі випадки — екрановану та неекрановану кулонівські взаємодії. Обидва випадки є прикладами дуже поширеної взаємодії у природі, а останній навіть являє собою “катастрофічний” потенціал. Зокрема, отримані вирази дозволяють отримати такий вид наближення для потенціальної енергії частинки у ґратці Браве, який базується на взаємодії з рівномірно розподіленим у просторі зарядом і містить скінченні поправки на точковість цього розподілу. Цей результат дає можливість для мінімізації потенціальної енергії ґратки без ризику отримати розбіжності в процесі обчислень.

## РОЗДІЛ 2

### ЕЛЕКТРОНИ НА ПОВЕРХНІ РІДКОГО ГЕЛІЮ

#### 2.1 Вступ

Серед систем з кулонівським типом взаємодії значної уваги заслуговують електрони на поверхні діелектрика [57, 58]. Уже доволі давно було передбачено можливість існування таких двовимірних систем [57–59] і майже одразу отримано експериментальне підтвердження [60]. Навіть більше, першу експериментальну реалізацію вігнерівського кристалу, який було передбачено у відомій роботі [61], вдалося отримати в системі електронів на поверхні рідкого гелію [62]. Також важливо зауважити, що дослідження даної системи несуть в собі не лише академічний інтерес, але і можуть мати практичні застосування. Наприклад, в роботі [63] пропонується використовувати електрони на поверхні діелектрика для виконання квантових обчислень.

Сучасні дослідження в області низькорозмірних електронних систем в основному ґрунтуються на квантовій теорії поля [64] та теорії скейлінгу [65]. Наприклад, перенесення електронів у гетероструктурах та особливості їх поведінки на поверхні рідкого гелію були вивчені в рамках квантової теорії поля у роботі [66]. Альтернативний підхід з застосуванням теорії скейлінгу було розроблено в [67]. Тим не менше, ці моделі є доволі складними для аналізу і вимагають багато обчислень. Тож було б дуже бажано створити просту квазікласичну модель типу [23, 44], яка могла б бути ефективною при описі властивостей низькорозмірних електронних систем.

Електрони, розташовані на поверхні діелектрика, мають тільки два ступені свободи [51, 68] і можуть існувати у формі рідини або кристалу Ві-

гнера [61, 62, 69]. Також було теоретично й експериментально показано, що електрони на поверхні рідкого гелію можуть піддаватися фазовому переходу, який проявляється в ступені їх упорядкованості [62, 70] (перехід рідина-тверде тіло). Крім того відомо, що електрони “плавають” над поверхнею гелію на досить великій відстані, приблизно  $76 \text{ \AA}$ , внаслідок квантових ефектів [51]. Як результат, електронний “шар” вважається майже двовимірним, а вплив гелію розглядається як “корекція” міжелектронного потенціалу без розгляду впливу окремих атомів гелію [51–53, 71], що робить цю систему привабливою для теоретичних досліджень.

Згаданий плоский “шар” електронів проявляє цілий ряд цікавих властивостей з точки зору структурної реорганізації. В роботі [53], наприклад, досліджено структурний перехід решітки Вігнера від трикутної до квадратної. А в [71] було показано, а згодом і експериментально підтверджено [52], що однорідний розподіл електронної щільності не завжди стабільний, тобто існують критичні значення параметрів, при яких утворюються просторові структури, а саме періодичні деформації та багатоелектронні лунки. Але ці структури можуть бути розглянуті окремо від кристалізації Вігнера, оскільки їх характерний розмір значно більший, ніж період вігнерівської ґратки.

Відповідно, надалі в цьому розділі система електронів 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 [53, 59]. Запропонований спрощений підхід підтверджується тим фактом, що сили, які керують самоорганізацією, повинні діяти на масштабах довжини значно більших ніж розмір молекул; як наслідок багато конкретних деталей міжчастинкової взаємодії не є необхідними для вивчення загальних особливостей фаз.

Даний розділ надалі організовано наступним чином. Спочатку, результа-

ти загальної статистичної моделі для опису взаємодіючих частинок, заснованої на наближенні Хаббарда-Стратоновича (частина 1.3), застосовуються до розгляду двовимірної системи взаємодіючих фермі-частинок (частина 2.2.1) з метою отримання виразу для ентропійної частини вільної енергії.

У параграфі 2.2 вводиться уже конкретний вигляд для потенціалу міжелектронної взаємодії (частина 2.2.2), до нього застосовуються методи розділу 1 для знаходження потенціальної енергії частинки в ґратці, і, нарешті, знаходиться температуро-залежна відстань локалізації (частина 2.2.3) та порівнюється з відомим результатом для  $T = 0$ .

Завершується розділ доволі коротким параграфом 2.3 в якому енергія трикутної ґратки представляється як поправка до енергії квадратної та проводиться порівняння їх “енергетичної вигідності”, а також висновками 2.4, де перелічуються основні отримані результати.

## 2.2 Відстань локалізації для електрона у вігнерівському кристалі

У попередньому розділі 1 розглядалось питання про потенціальну енергію частинки в ґратці Браве. При цьому всі викладки проводились не вказуючи конкретної фізичної системи. У даному розділі всі ці результати буде застосовано до опису електронів на поверхні рідкого гелію. Результатом стане оцінка відстані локалізації електрона, яка може бути експериментально перевірена, а також передбачення умов фазового переходу при утворенні вігнерівського кристалу.

У цьому розділі будуть розглянуті електрони на поверхні рідкого гелію, а також розраховано відстань локалізації для них та проведено порівняння з виразами отриманими в інших роботах. Для досягнення цієї мети необхідно мінімізувати вільну енергію одночасткових  $F_{sp}$  по  $s$  (відстань локалізації, параграф 2.2.3). Але насамперед необхідно визначитись з міжелектронним потенціалом, знайти явний вираз для  $F_{sp}$  — вільної енергії одного електрона в

гратці Браве, а потім екстремізувати дане значення для отримання бажаного результату. Наступні параграфи дотримуються даного порядку.

### 2.2.1 Вільна енергія електронів на поверхні рідкого гелію

Розроблений вище формалізм надзвичайно загальний, тож для його практичного застосування варто перейти до більш конкретного випадку. У даному параграфі за мету ставиться дві речі: розглянути приклад використання рівнянь з параграфу 1.3 та обчислити вклад ентропії у вільну енергію для електронів на поверхні рідкого гелію, щоб використовувати надалі.

Електрони на поверхні рідкого гелію мають тільки два ступені свободи [51, 68]. Тож надалі можна покласти  $\delta = -1$  (фермі-частинки) і  $d = 2$  (система двовимірна). В результаті рівняння (1.6) запишеться

$$\begin{aligned} \beta F[\mu] = & \int \cdots \int \frac{d\vec{p} d\vec{r}}{(2\pi\hbar)^2} \frac{\beta \vec{p}^2}{2m} \frac{1}{e^{\beta(\vec{p}^2/(2m) - \mu(\vec{r}))} + 1} + \\ & + \frac{\beta}{2} \int \cdots \int \frac{d\vec{p} d\vec{r} d\vec{p}' d\vec{r}'}{(2\pi\hbar)^2 (2\pi\hbar)^2} \frac{V(|\vec{r} - \vec{r}'|)}{(e^{\beta(\vec{p}^2/(2m) - \mu(\vec{r}))} + 1)(e^{\beta(\vec{p}'^2/(2m) - \mu(\vec{r}'))} + 1)} - \\ & - \int \cdots \int \frac{d\vec{p} d\vec{r}}{(2\pi\hbar)^2} \left( \frac{\ln(e^{\beta(\vec{p}^2/(2m) - \mu(\vec{r}))} + 1)}{e^{\beta(\vec{p}^2/(2m) - \mu(\vec{r}))} + 1} \frac{\ln(e^{-\beta(\vec{p}^2/(2m) - \mu(\vec{r}))} + 1)}{e^{-\beta(\vec{p}^2/(2m) - \mu(\vec{r}))} + 1} \right). \end{aligned}$$

Знак інтеграла  $\int \cdots \int$  тут означає, що інтегрування проводиться по всьому фазовому простору.

Оскільки останній вираз доволі складний, то виникає необхідність якось його спростити. У першому наближенні можна припустити, 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 [51]. Тож застосування квадратичної форми для дисперсії виглядає цілком розумним.

Використовуючи останнього рівняння і вводячи теплову довжину

$$\lambda_T = \sqrt{2\pi^2\hbar^2\beta/m}, \quad (2.1)$$

з (1.7) можна отримати наступний вираз

$$\rho(\vec{r}) = \iint \frac{d\vec{p}}{(2\pi\hbar)^2} \frac{1}{e^{\beta(\vec{p}^2/(2m) - \mu(\vec{r}))} + 1} = \frac{\pi}{\lambda_T^2} \ln \left( 1 + e^{\beta\mu(\vec{r})} \right), \quad (2.2)$$

який пов'язує між собою хімічний потенціал  $\mu(\vec{r})$  і щільність частинок  $\rho(\vec{r})$ .

Повертаючись до спрощення рівняння для вільної енергії. Перші два доданки можуть бути легко проінтегровані, якщо звернути увагу, що

$$\frac{1}{e^x + 1} = \frac{e^{-x}}{1 + e^{-x}},$$

але останній доданок доведеться інтегрувати в термінах спеціальних функцій, а саме дилогарифма [72]

$$\text{Li}_2(z) = - \int_0^z \frac{\ln(1-z)}{z} dz.$$

Якщо згадати, що

$$\frac{1}{1 + e^x} = 1 - \frac{1}{1 + e^{-x}},$$

то можна отримати

$$\begin{aligned} \beta F[\mu] = & \frac{m^2}{8\pi^2\hbar^4\beta} \int \dots \int d\vec{r} d\vec{r}' V(|\vec{r} - \vec{r}'|) \ln \left( 1 + e^{\beta\mu(\vec{r})} \right) \ln \left( 1 + e^{\beta\mu(\vec{r}')} \right) + \\ & + \frac{m}{2\pi\hbar^2\beta} \iint d\vec{r} \left[ \beta\mu(\vec{r}) \ln \left( 1 + e^{\beta\mu(\vec{r})} \right) - \frac{\beta^2\mu^2(\vec{r})}{2} - \text{Li}_2 \left( -e^{-\beta\mu(\vec{r})} \right) - \frac{\pi^2}{6} \right], \end{aligned}$$

а цей вираз надалі ще більше спростити.

Перш за все, варто скористатися тотожністю Ландена [72]

$$\text{Li}_2(1-z) + \text{Li}_2\left(1 - \frac{1}{z}\right) = -\frac{1}{2} \ln^2(z), \quad z \in \mathbb{C} \setminus ]-\infty; 0],$$



з  $z = 1 + e^{-\beta\mu(\vec{r})}$  і розкласти  $\ln^2(1 + e^{-\beta\mu(\vec{r})})$ . Це приводить до наступного рівняння

$$\beta F[\mu] = \frac{m^2}{8\pi^2\hbar^4\beta} \int \dots \int d\vec{r} d\vec{r}' V(|\vec{r} - \vec{r}'|) \ln(1 + e^{\beta\mu(\vec{r})}) \ln(1 + e^{\beta\mu(\vec{r}')}) + \frac{m}{2\pi\hbar^2\beta} \iint d\vec{r} \left[ \text{Li}_2\left(\frac{1}{1 + e^{\beta\mu(\vec{r})}}\right) - \frac{\pi^2}{6} + \frac{1}{2} \ln^2(1 + e^{\beta\mu(\vec{r})}) \right].$$

В останньому рівнянні можна провести інтегрування по імпульсах і, беручи до уваги (2.2) та (2.1), отримати

$$F[\rho] = \frac{1}{2} \int \dots \int d\vec{r} d\vec{r}' V(|\vec{r} - \vec{r}'|) \rho(\vec{r}) \rho(\vec{r}') + \frac{\lambda_T^2}{2\pi\beta} \iint d\vec{r} \rho^2(\vec{r}) + \frac{\pi}{\beta\lambda_T^2} \iint d\vec{r} \left[ \text{Li}_2\left(e^{-\pi^{-1}\lambda_T^2\rho(\vec{r})}\right) - \frac{\pi^2}{6} \right]. \quad (2.3)$$

Варто звернути увагу, що для випадку статистики Бозе буде втрачено ефект бозе-конденсації у зв'язку з таким інтегруванням. Але оскільки надалі ці рівняння будуть використані для Фермі-частинок, то можна не надавати цьому значення.

Відомо, що електрони на поверхні рідкого гелію можуть існувати у формах як “рідини”, так і кристалу Вігнера [61, 62, 69]. Особливий інтерес надалі становитиме випадок їх сильної локалізації, тобто “кристалічний”. В такому випадку перший доданок в (2.3) виявляється пов'язаним з  $F_{int}$  та  $F_s$  у (1.8с), а останні два відповідають  $F_{ent}$ .

Якщо ж використати одночастинкову функцію розподілу ймовірності як у (1.14) з  $d = 2$ , то можна досягнути певного спрощення для  $F_{ent}$ . Для розрахунку вкладу на одну частинку виконується заміна  $\rho(\vec{r}) \rightarrow \rho_{sp}(\vec{r})$ . Далі передостанній доданок безпосередньо інтегрується, а для останнього виконується наближення

$$\text{Li}_2\left(e^{-\pi^{-1}\lambda_T^2\rho_{sp}(\vec{r})}\right) \approx \begin{cases} 0, & r \leq s, \\ \pi^2/6, & r > s, \end{cases}$$

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

$$F_{\text{sp}} = \frac{1}{2} \int \cdots \int d\vec{r} d\vec{r}' V(|\vec{r} - \vec{r}'|) \rho_{\text{sp}}(\vec{r}) \rho(\vec{r}') + \underbrace{\frac{\lambda_T^2}{8\pi^2 s^2 \beta} - \frac{\pi^4 s^2}{6\beta \lambda_T^2}}_{F_{\text{ent}}}. \quad (2.4)$$

Рівняння (2.4) та (2.3) являють собою бажаний результат даного параграфу. Спосіб їх отримання по-суті являє собою приклад застосування більш широкого формалізму розробленого раніше у параграфі 1.3. Пізніше ці вирази будуть використані при мінімізації вільної енергії.

### 2.2.2 Міжелектронний потенціал на поверхні рідкого гелію

Основною метою даного параграфу — представити явний вид міжчастинкового потенціалу для електронів на поверхні рідкого гелію. У присутності зовнішнього поля електрони притискаються до поверхні гелію зі значною силою. Але вони не можуть проникнути через цю поверхню, оскільки виштовхуються назад через квантові ефекти [51, 73, 74]. Таким чином виникає деформація поверхні, а вона, у свою чергу, змінює потенціал взаємодії між електронами. Задача знаходження явного виразу для цього потенціалу вирішується шляхом додавання до кулонівської взаємодії ефективної капілярної взаємодії. Останню для двох електронів на поверхні рідкого гелію було розраховано в [53].

В підсумку, згідно з [51, 52, 74] міжелектронний потенціал складається з двох частин — взаємодії пов'язаної з зарядом частинок та через деформацію поверхні рідкого гелію. Першу складову можна записати наступним чином:

$$V^{(\text{coulomb})}(r) = \frac{\bar{e}^2}{r} - \frac{\varepsilon \bar{e}^2}{\sqrt{r^2 + (2d)^2}}, \quad (2.5)$$

$$\varepsilon = \frac{\varepsilon_s - \varepsilon_{He}}{\varepsilon_s + \varepsilon_{He}}.$$

Тут  $\varepsilon_s$  і  $\varepsilon_{He}$  є діелектричними сталими для підкладки та рідкого гелію відповідно,  $r$  — відстань між двома електронами, а  $d$  — товщина плівки гелію.

Неважко бачити, що перший доданок пов'язаний зі звичайним кулонівським відштовхуванням, тоді як другий є результатом поляризації підкладки. Можна зауважити, що другий доданок відсутній у [53], а отже приведений потенціал містить додаткове притягання. Тим не менше, воно здійснює дуже незначний вплив на поведінку електронів, оскільки значно уступає кулонівському відштовхуванню. Тож для утворення стабільних структур повинна існувати додаткова значно сильніша притягуюча взаємодія. Такою виявляється ефективна взаємодія пов'язана з деформацією поверхні рідкого гелію.

Відомо, що у присутності зовнішнього електричного поля на електрони може діяти сила направлена перпендикулярно поверхні рідкого гелію що перевищує гравітаційну на багато порядків. З іншого боку, навіть при таких умовах частинки не можуть просто пройти крізь поверхню через квантові ефекти [51, 52, 73, 74]. Це пов'язано з тим, що гелій має повністю заповнену електронну оболонку і в рідині для додаткових електронів більше “немає місця”. Таким чином можна зробити висновок, що електрони в таких умовах діятимуть на поверхню гелію зі значною силою.

Розглядаючи систему електронів як двовимірну, можна ввести ефективну капілярну взаємодію згідно з [53]

$$V^{(\text{cap})}(r) = -\frac{\bar{e}^2 E^2}{2\pi\sigma} K_0(r/l_0), \quad (2.6)$$

де  $eE$  — сила, що діє на кожен електрон у зовнішньому полі (у даному випадку це електричне поле, перпендикулярне до поверхні),  $\sigma$  — поверхневий натяг рідкого гелію,  $r$  — відстань між частинками,  $K_0$  є модифікованою функцією Бесселя, а  $l_0 = \sqrt{\sigma/g\rho_{He}}$  [53] — капілярна довжина, яка залежить тільки від властивостей середовища.

Отож остаточний вираз для міжелектронної взаємодії набуває вигляду

$$V(r) = \frac{\bar{e}^2}{r} - \frac{\varepsilon\bar{e}^2}{\sqrt{r^2 + (2d)^2}} - \frac{\bar{e}^2 E^2}{2\pi\sigma} K_0(r/l_0). \quad (2.7)$$

Вираз (2.7) буде використовуватися надалі, але для зручності іноді роз-

рахунки будуть проводитись для частин (2.5) та (2.6) окремо.

### 2.2.3 Температуро-залежна відстань локалізації для електрона на поверхні рідкого гелію.

З математичної точки зору така задача еквівалентна знаходженню розв'язків для рівняння

$$\frac{\partial F_{\text{sp}}(s)}{\partial s} = 0.$$

Останнє згідно з (1.8с) може бути записано як

$$\frac{\partial F_{\text{int}}}{\partial s} - \frac{\partial F_s}{\partial s} + \frac{\partial F_{\text{ent}}}{\partial s} = 0,$$

а використовуючи (2.4), (1.30) та (1.31)

$$\begin{aligned} \bar{\rho} \bar{e}^2 s \sum_{\vec{k} \in \mathbb{Z}^2 \setminus \{\vec{0}\}} \left( \frac{2E^2}{\sigma} - 8\pi^2 \sqrt{\vec{k}^T \hat{G} \hat{G}^T \vec{k}} \right) e^{-4\pi^2 s^2 \vec{k}^T \hat{G} \hat{G}^T \vec{k}} + \\ + \frac{\sqrt{\pi} \bar{e}^2}{2s^2} - \frac{\lambda_T^2}{4\pi^2 s^3 \beta} - \frac{\pi^4 s}{3\beta \lambda_T^2} = 0. \end{aligned}$$

Для знаходження виразу для  $s$  в залежності від значень інших параметрів буде достатньо навіть порівняно грубого наближення. Тож для апроксимації буде проведено заміну сумування по  $\vec{k}$  на інтегрування. В результаті після всіх спрощень можна отримати

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

Розв'язком останнього рівняння служить вираз

$$s^2 = \frac{3\hbar^2 \beta^2 \bar{e}^2 E^2}{4\pi^3 \sigma m} \left( 1 - \sqrt{1 - \frac{16\sigma^2 \pi^4}{3\bar{e}^4 E^4 \beta^2}} \right). \quad (2.8)$$

Якщо температура прямує до невеликих значень  $T \rightarrow 0$ , тобто  $\beta \rightarrow \infty$ , то (2.8) спрощується до

$$s = \sqrt{\frac{2\pi\sigma\hbar^2}{m\bar{e}^2 E^2}}. \quad (2.9)$$

Цей результат не відрізняється від класичного, що представлений, наприклад, в [51].

Розглянувши (2.8) більш ретельно, можна виявити деякі цікаві закономірності. Наприклад, розв'язок існує якщо

$$\frac{E^2}{T} \geq \frac{4\sigma\pi^2k}{\sqrt{3}\bar{e}^2} \approx 2100 \frac{\text{dyn}}{\text{cm} \cdot \text{K}}. \quad (2.10)$$

Рівність (2.10) з фізичної точки зору можна трактувати наступним чином: ґратка не утворюється якщо температура  $T$  занадто висока або поле  $E$  занадто слабе. Це твердження повністю узгоджується з фізичною інтуїцією. Для наочності відповідна фазова діаграма представлена на рисунку 2.1.

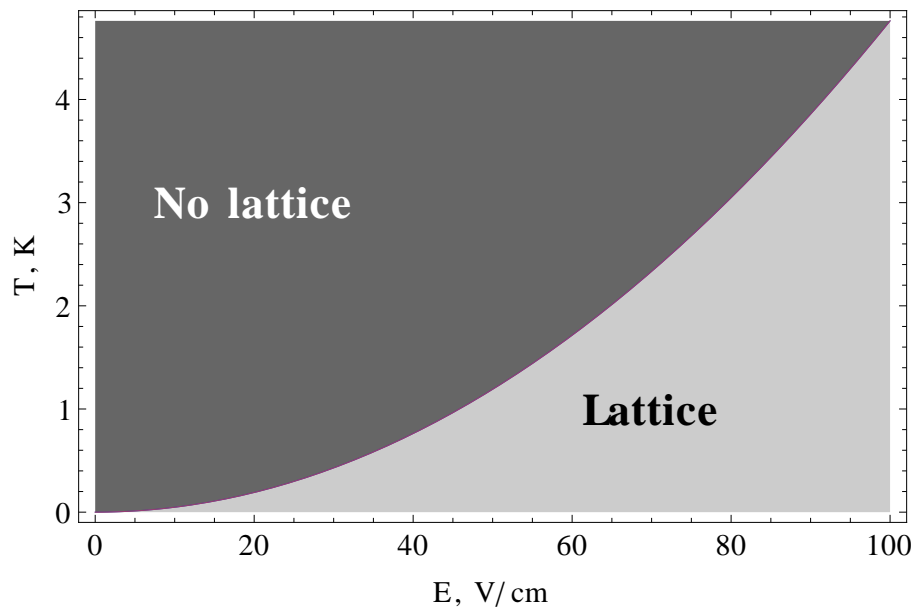


Рис. 2.1: Плавлення вігнерівського кристалу.

### 2.3 Порівняння потенціальної енергії для квадратної та трикутної ґраток

У попередньому параграфі 1.5.2 було знайдено вираз для вільної енергії для довільної двовимірної ґратки Браве. Але основний інтерес становлять два види таких ґраток: квадратна та трикутна (шестикутна). У цьому пара-

графі буде отримано рівняння, що описують їх вільні енергії. Після отримання конкретних виразів буде проведено порівняння цих ґраток між собою і досліджено можливий фазовий перехід між ними.

Більш простою для аналізу виявляється квадратна решітка. Для початку зручно зафіксувати середню міжелектронну відстань  $L$  (див. рис. 1.3). Для квадратної ґратки очевидно, що  $a = b = L$ , а кут між векторами  $\alpha = \pi/2$ . Звідси між  $L$  і середньою щільністю часток  $\bar{\rho}$  існує просте співвідношення  $\bar{\rho} = 1/L^2$ . Виконуючи деякі спрощення можна з легкістю записати вираз для матриці  $\hat{G}$  для квадратної ґратки

$$\hat{G}_{\square} = \begin{pmatrix} 1/L & 0 \\ 0 & 1/L \end{pmatrix}, \quad (2.11)$$

де  $\square$  позначає тип ґратки.

Аналогічні розрахунки можна провести для трикутної ґратки. З рис. 1.3 геометричними міркуваннями отримується  $\alpha = \pi/6$ , а також  $a = \sqrt{3}b$ . Але для подальшого аналізу дуже бажано, щоб як квадратна так і трикутна решітки мали однакову середню щільність електронів. Для цього необхідно ввести додаткове припущення  $L^2 = ab \sin(\alpha)$ . Виконуючи всі необхідні підстановки, рівняння запишеться

$$\hat{G}_{\Delta} = \begin{pmatrix} 1/(L\sqrt[4]{12}) & -\sqrt[4]{3}/(L\sqrt{2}) \\ 0 & \sqrt[4]{12}/L \end{pmatrix}.$$

Але останнє рівняння доволі незручне для подальших маніпуляцій, особливо для наближення нескінченної суми за формулою Ейлера-Маклорена, яка буде використовуватись далі. Тож для подальших обчислень необхідно перейти до певного наближення. Таким наближенням стане розклад трикутної ґратки в околі квадратної.

Для початку можна звернути увагу, що для обох ґраток будуть цілком однаковими вирази для  $F_s$  та  $F_{\text{ent}}$  однакові для обох ґраток. Таким чином

$$F_{\text{sp}}^{\square} - F_{\text{sp}}^{\triangle} = F_{\text{int}}^{\square} - F_{\text{int}}^{\triangle}.$$

Якщо зауважити, що згідно (1.30) на потенціальну складову можна дивитися як на наступну суму

$$F_{\text{int}} = \sum_{\vec{k} \in \mathbb{Z}^2 \setminus \{\vec{0}\}} f_{\text{int}} \left( \vec{k}^T \hat{G} \hat{G}^T \vec{k} \right),$$

то, застосувавши теорію функцій багатьох змінних до  $F_{\text{int}}$  як функції  $\hat{G}$ , негайно отримується наступне наближення

$$F_{\text{int}}^{\triangle} \approx F_{\text{int}}^{\square} + \sum_{\vec{k} \in \mathbb{Z}^2 \setminus \{\vec{0}\}} \left. \frac{df_{\text{int}}(x)}{dx} \right|_{x=\vec{k}^T \hat{G}_{\square} \hat{G}_{\square}^T \vec{k}} \vec{k}^T \left( \hat{G}_{\triangle} \hat{G}_{\square}^T + \hat{G}_{\square} \hat{G}_{\triangle}^T - 2\hat{G}_{\square} \hat{G}_{\square}^T \right) \vec{k},$$

яке є по суті розкладом в ряд Тейлора з точністю до першого порядку.

Наступним спостереженням можна спростити задачу ще більше. Матриця  $\hat{G}_{\square}$  має надзвичайно просту форму і може бути замінена на промасштабовану одиничну матрицю  $\hat{1}/L$ . Даний факт дозволяє вже досягнути певного спрощення

$$F_{\text{sp}}^{\triangle} - F_{\text{sp}}^{\square} \approx \frac{1}{L} \sum_{\vec{k} \in \mathbb{Z}^2 \setminus \{\vec{0}\}} \left. \frac{df_{\text{int}}(x)}{dx} \right|_{x=k^2/L^2} \vec{k}^T \left( \hat{G}_{\triangle} + \hat{G}_{\triangle}^T - \frac{2}{L} \right) \vec{k}.$$

Дуже корисним буде зауваження, що  $\hat{G}_{\triangle} + \hat{G}_{\triangle}^T$  — симетрична матриця, а також що для кожного вектора індексів  $\vec{k} = \{k_x \neq 0, k_y \neq 0\}$  у сумі будуть присутні всі доданки з векторами  $\{\pm k_x, \pm k_y\}$ . Воно дозволяє позбутись недіагональних елементів для матриці  $\hat{G}_{\triangle} + \hat{G}_{\triangle}^T$ . Також прямою підстановкою можна переконатись у зникненні недіагональних елементів для випадку коли одна з компонент вектора  $\vec{k}$  рівна нулю. Якщо ж до всього вищесказаного додати, що від заміни місцями  $k_x \Leftrightarrow k_y$  значення виразу не зміниться в силу

того що похідна по  $f$  залежить лише від модуля вектора індексів, а не його напрямку, то рівняння стає взагалі простим

$$F_{\text{sp}}^{\Delta} - F_{\text{sp}}^{\square} \approx \frac{2}{L} \sum_{\vec{k} \in \mathbb{Z}^2 \setminus \{\vec{0}\}} \left. \frac{df_{\text{int}}(x)}{dx} \right|_{x=k^2/L^2} k^2 \left( \text{Sp}(\hat{G}_{\Delta}) - \frac{1}{L} \right).$$

Прямою підстановкою неважко переконатися, що вираз у дужках більший за нуль, а отже більш енергетично вигідна ґратка буде визначатися знаком суми по  $k$ . Таким чином остаточно визначається, що трикутна ґратка реалізуватиметься в системі за умови

$$\frac{1}{L^2} \sum_{\vec{k} \in \mathbb{Z}^2 \setminus \{\vec{0}\}} \left. \frac{df_{\text{int}}(x)}{dx} \right|_{x=k^2/L^2} k^2 < 0.$$

Тут збережено множник  $1/L^2$  задля того, щоб розмірністю усього виразу залишилася “енергія”.

На жаль, останнє рівняння все ще занадто складне для аналізу. Тож для більшої зручності його варто замінити на перший член у наближенні Ейлера-Маклорена. Іншими словами, суму буде змінено на інтеграл, який зручно виписати в полярній системі координат (по куту виконано інтегрування)

$$\frac{2\pi}{L^2} \int_1^{\infty} \left. \frac{df_{\text{int}}(x)}{dx} \right|_{x=k^2/L^2} k^3 dk < 0.$$

Виникнення третьої степені у модуля  $k$  пов’язано з якобіаном полярної системи координат. Також варто пояснити нижню межу інтегрування — це уособлення того факту, що сумування проводилось без нуля, тобто по множині  $\mathbb{Z}^2 \setminus \{\vec{0}\}$ .

Надалі виконуючи заміну змінних та відкидаючи всі сталі множники нарешті отримується

$$L^2 \int_{1/L^2}^{\infty} \frac{df_{\text{int}}(x)}{dx} x dx < 0.$$



Якщо ж тепер скористатися рівнянням (1.30) та провести необхідні диференціювання та інтегрування, то в результаті буде отримано

$$\frac{\bar{e}^2}{L} \left( \left[ \frac{E^2 L}{4\pi^2 \sigma} - 1 \right] e^{-4\pi^2 s^2 / L^2} - \frac{L}{2\sqrt{\pi} s} \operatorname{erfc} \left( \frac{2\pi s}{L} \right) + \frac{E^2 L}{4\pi^2 \sigma} \Gamma \left( 0; \frac{4\pi^2 s^2}{L^2} \right) \right) < 0.$$

Тут враховано, що  $\bar{\rho} = 1/L^2$ . Надалі для зручності множник  $\bar{e}^2/L$  буде опускатися, оскільки ця величина завжди додатна і не впливає на знак нерівності. Також це дозволить працювати з безрозмірними величинами, що несе у собі додаткову зручність.

В параграфі 2.2.3 було отримано рівняння для відстані локалізації електронів (2.8), яке при низьких температурах  $T \rightarrow 0$  переходить у класичний вираз (2.9). Останній можна підставити у нерівність, що розглядається, для отримання залежності між напруженістю зовнішнього поля та густиною частинок при яких реалізується трикутна ґратка. Щоб уникнути надто громіздких розрахунків для початку можна записати з (2.9), що  $s = \alpha/E$ , та не розкривати вираз для  $\alpha$ . При цьому можна одразу оцінити, що  $\alpha \approx 0.7 \times 10^{-4} \sqrt{dyn}$ .

Безпосередньо чисельними методами можна перевірити, що при всіх  $L = 10^{-4} \text{ cm} \dots 10^{-1} \text{ cm}$  та  $E = 0 \sqrt{dyn} \dots 10 \sqrt{dyn}$  другий доданок виявляється домінантним. Таким чином можна стверджувати, що за експериментальних умов, що можуть бути досягненні, завжди повинна реалізуватися трикутна ґратка.

## 2.4 Висновки до розділу 2

У цьому розділі було застосовано загальний формалізм для опису системи взаємодіючих частинок, заснований на перетворенні Хаббарда-Стратоновича, до системи електронів на поверхні рідкого гелію.

Оскільки за мету даного розділу ставилося дослідження електронів на поверхні рідкого гелію, то отримані у параграфі 1.3 рівняння негайно за-

стосовуються до двовимірної системи Фермі-частинок у **параграфі 2.2**. В результаті отримується вираз для вільної енергії (2.3), але без використання явного виду потенціалу  $V$ . Варто зазначити, що аналогічними розрахунками можна отримати результати для систем з іншою кількістю розмірностей та, навіть, бозе-частинок. Але в останньому випадку внаслідок виконаних наближень втрачаються ефекти пов'язані з бозе-конденсацією.

Після представлення міжчастинкового потенціалу (2.7) до нього застосовуються методи розроблені у параграфі 1.5.3, звичайно ж у припущенні, що частинки формують одну з ґраток Браве. В результаті формули (1.30) та (1.31), які є ключовими для знаходження потенціальної енергії у представленій системі, та вираз для ентропії, знайдений у наближенні Хаббарда-Стратоновича, формують довершений вираз для вільної енергії даної системи.

І нарешті, в останній частині параграфу, досягається його мета — отримується температуро-залежний вираз для відстані локалізації (2.8), що при прямуванні температури до нуля переходить у вже відоме рівняння (2.9). Як побічний продукт також отримується певне обмеження на можливі параметри при яких існує вігнерівський кристал (2.10). Отримані результати важливі з тієї точки зору, що можуть бути перевірені експериментально.

Останній **параграф 2.3** присвячений аналізу вільної енергії ґратки Браве. Але в даному розділі не проводиться пошуку глобального мінімуму по всіх можливих ґратках (що можливо лише чисельно), а натомість аналітично порівнюється дві найбільш імовірні ґратки. Такий підхід дозволяє продемонструвати можливості розробленого формалізму з точки зору представлення вільної енергії однієї ґратки, як певну поправку до енергії іншої (нестрого кажучи, розкласти енергію однієї ґратки в околі іншої).

Отримані результати вказують, що за тих значень напруженостей електричного поля та густини частинок, що досягаються на типовому експерименті, повинна спостерігатися трикутна ґратка. Такий результат не є

несподіванкою, адже така ґратка забезпечує найбільш рівномірний розподіл частинок по площині.

## РОЗДІЛ 3

### ПИЛОВИЙ КРИСТАЛ У ЗАПОРОШЕНІЙ ПЛАЗМІ

#### 3.1 Вступ

Існує багато систем класу м'якої матерії, таких як порошинки у запиленій плазмі, колоїди в різноманітних розчинах і т.д., які проявляють ефекти самоорганізації та перебудови у кристалоподібні структури за певних умов. Часто міжчастинковий потенціал є далекодіючим та подібний до кулонівського. Звичайно ж, такий клас потенціалів приводить до розбіжностей (через це вони дістали назву “катастрофічні”) та значно ускладнює аналіз [9, 75–77]. Але з іншого боку, згадані системи частинок неабияк цікаві у зв'язку з їх широким застосуванням до вивчення широкого кола явищ з різноманітних галузей науки [19–21].

Судячи з усього, найбільш складною проблемою для розгляду кулонівських систем є їх поведінка при високих концентраціях частинок [22]. При зростанні концентрації можна спостерігати явища схожі до кристалізації та фазові переходи між ґратками з різними типами симетрій [1, 23, 24, 78, 79].

Метою даного розділу є перевірка придатності розробленого у розділі 1 формалізму на прикладі конкретної фізичної системи. В основу методу було покладено класичні системи в яких частинки розташовуються у вузлах ґратки Браве. Тож в якості фізичної реалізації потрібної системи вибрані порошинки у запиленій плазмі. Це пов'язано як зі значною кількістю ефектів, що можуть спостерігатися в такому середовищі, так і з тим, що заповнена плазма в певному сенсі може слугувати моделлю для вивчення класичних флюїдів, твердих тіл та колоїдів [24–32, 80].

Користуючись рівняннями, отриманими у розділі 1, можна перейти до

проблеми утворення пилового кристала у запорошеній плазмі (параграф 3.2). При цьому отриманий вираз для потенціальної енергії буде мінімізовано чисельними методами для визначення параметрів ґратки, що повинна спостерігатися на експерименті. А відомі експериментальні дані [78] та результати комп'ютерного моделювання [79] можуть слугувати в даному випадку для верифікації отриманих результатів.

Наприкінці розділу можна коротко ознайомитись з отриманими результатами у висновках 3.3.

### **3.2 Визначення параметрів ґратки для пилового кристала у запорошеній плазмі**

Запорошена плазма, поряд з колоїдними розчинами, може слугувати чудовим модельним середовищем для експериментального дослідження класичних рідин і твердих тіл [24–32, 80]. Тож дослідження особливостей її поведінки надзвичайно важливе та багате різноманітними фізичними ефектами. Наприклад відомо, що порошинки взаємодіють між собою і навіть демонструють самоорганізацію у вигляді утворення та плавлення пилових кристалів [1, 23, 24, 78, 79].

Надалі буде проведено розгляд цієї системи з застосуванням методів, які було розроблено в розділі 1.4. У першому наближенні буде розумно припустити, що порошинки взаємодіють лише як заряджені частинки (екранований кулонівський потенціал). Отримане рівняння (1.33) дозволяє розрахувати енергію будь-якої решітки просто підставивши правильну матрицю  $\hat{G}$  та виконання підсумовування. Але набагато цікавіше знайти ґратку з мінімальною потенціальною енергією при сталій щільності частинок  $\bar{\rho}$ . Адже отриманий результат може бути перевірений експериментально.

### 3.2.1 Особливості чисельної мінімізації параметрів ґратки

Обидві суми в (1.33) дуже добре збігаються, а це зручно для чисельних розрахунків. Таким чином, сумування було обмежено  $|\vec{k}| \leq 4$ . Ця границя знаходиться експериментально: брати до уваги більше доданків не має змісту — розрахований тип ґратки та значення вільної енергії практично не змінюється при збільшенні кількості доданків.

Також варто згадати ще одну особливість. Пошук решітки з мінімальною енергією не вимагає розрахунку повного виразу для  $F_{int} - F_s$ . Достатньо мінімізувати лише доданки з  $\hat{G}$ . Крім того, вони обидва містять  $q/l$ , яке можна винести за дужки, а отже результати мінімізації не залежать від заряду частинок.

Мінімізацію було проведено за допомогою стандартної функції FindMinimum в Wolfram Mathematica v.9. Рівняння (1.33) використовується як функціонал для мінімізації. При цьому наступним способом фіксується густина частинок. Приймається

$$\frac{1}{l^3} = \bar{\rho} = \frac{1}{abc \sin(\alpha) \sin(\beta_c)},$$

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 (1.33).

Перш ніж перейти до результатів, необхідно зробити ще одне зауваження. Відображення між множиною всіх можливих значень параметрів (вектори трансляції) та всіх можливих решіток Браве не є бієкцією. Це швидше сюр'єкція — одна ґратка може бути описана різними наборами параметрів (різні вектори трансляції). Алгоритми мінімізації через це часто плутаються, тож додатково доводиться вводити обмеження, що роблять відповідність між ґраткою та векторами трансляції однозначною.

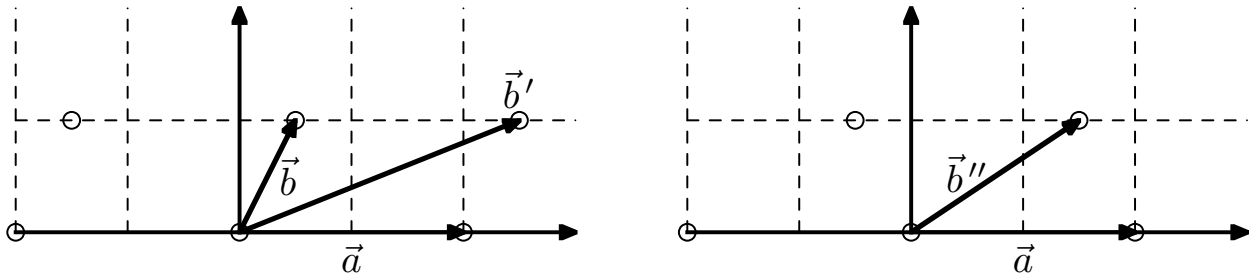


Рис. 3.1: Одна і та ж сама ґратка Браве в різних представленнях. Її трансляційна симетрія пов'язана з векторами  $\vec{a}$  і  $\vec{b}$ . Зліва показано різний вибір другого вектора трансляції, яким може бути як  $\vec{b}$  так і  $\vec{b}'$ . Використовуючи віддзеркалення відносно осі ординат, можна показати, що справа зображено ту саму ґратку що і зліва. Таким чином виявляється, що і  $\vec{b}''$  також є можливим вибором вектора трансляції. При виконанні чисельної мінімізації, використовуються додаткові обмеження, що дозволяють обійти цю невизначеність.

Рисунок 3.1 показує як виглядає невизначеність при виборі параметрів для опису решітки у двовимірному випадку. Незавжди бачити, що проблему можна усунути, якщо покласти проекцію  $\vec{b}$  на  $\vec{a}$  меншою ніж половина  $\vec{a}$ . В термінах параметрів це може бути виражено як

$$0 \leq \cot(\alpha) \leq \frac{1 + \delta a}{2}. \quad (3.1)$$

Обмеження для тривимірного випадку є наразі більш складними. Але вони можуть бути отримані аналогічними міркуваннями як і (3.1). Насправді (3.1) повинні залишатися в силі для тривимірного випадку. Необхідно тільки додати аналогічні рівняння для  $\vec{c}$ . У попередньому випадку виникла умова, щоб проекція  $\vec{b}$  на  $\vec{a}$  була меншою за  $|\vec{a}|/2$ . Вектор  $\vec{c}$  повинен проектуватися одночасно і на  $\vec{a}$  і на  $\vec{b}$ , а його проекції повинні бути менші половини довжин цих векторів відповідно. Останнє приводить до наступних нерівностей

$$0 \leq \frac{\cot(\beta_c)}{(1 + \delta a)} \sin(\alpha_c) \leq \frac{(1 + \delta b)^2 \sin^2(\alpha)}{2};$$

$$0 \leq \frac{\cot(\beta_c)}{(1 + \delta b)} (\cos(\alpha_c) - \cos(\alpha)) \leq \frac{(1 + \delta a)^2 \sin^2(\alpha)}{2}.$$

Якщо врахувати вираз для  $\bar{\rho}$ , то легко переконатись, що приведені рівняння не що інше як  $0 \leq (\vec{c} \cdot \vec{a}) \leq |\vec{a}|/2$  і  $0 \leq (\vec{c} \cdot \vec{b}) \leq |\vec{b}|/2$ .

### 3.2.2 Результати та їх обговорення

Результати виконаної мінімізації потенціальної енергії краще за все представити у вигляді рисунка 3.2.

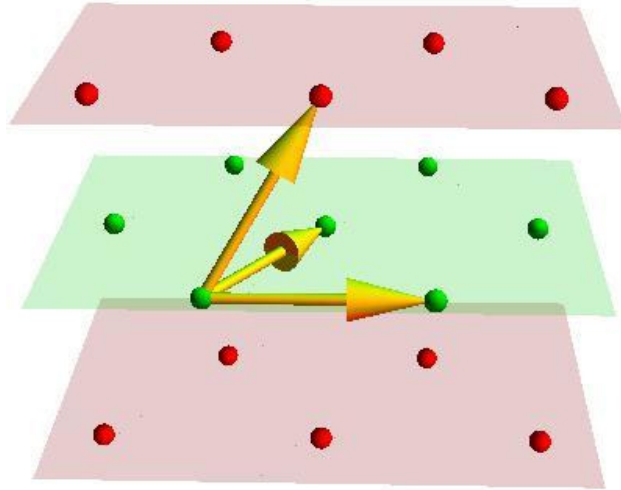


Рис. 3.2: Частина ґратки отриманої в результаті мінімізації потенціальної енергії. Неважко бачити, що отримана тривимірна структура складається з плоских гексагональних (трикутних) ґраток, які чергуються. Єдина різниця між цими ґратками — зсув: частинки з однієї площини проєктуються на порожні місця на іншій. Також показано вектори трансляції.

Якщо розглянути рисунок 3.2, то можна звернути увагу, що отриманий результат дуже схожий на компактну гексагональну упаковку (НСР). Така упаковка повинна складатися з плоских трикутних ґраток, що по чергово зміщені одна відносно одної, що, власне, і спостерігається. В такому випадку



можна перевірити, чи справді отримана ґратка є гексагональною щільноупакованою ґраткою шляхом порівняння їх параметрів.

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

Результати, приведені в таблиці, вказують, що отримана ґратка дійсно ГЦУ. Це відповідає експериментальним даним і результатам іншого комп'ютерного моделювання [78, 79].

### 3.3 Висновки до розділу 3

У даному розділі (**параграф 3.2**) було використано загальний формалізм для обчислення енергії частинки, що знаходиться в вузлі ґратки Браве (розділ 1), для знаходження кристалічної структури, яка може формуватися у запиленій плазмі з порошинок — пилового кристала. По суті, задача зводиться до мінімізації раніше отриманої (1.33). На жаль, не існує ніяких хороших наближення для тета-функції, тож в результаті доводиться виконувати мінімізацію чисельними методами. Результати, отримані в 3.2, вказують, що умові мінімуму потенціальної енергії відповідає гексагональна щільна упаковка. Це збігається з результатами чисельного моделювання [79] і реальними експериментами [78].

## РОЗДІЛ 4

### ДИНАМІЧНА ПОВЕДІНКА КУЛОНІВСЬКОЇ СИСТЕМИ

#### 4.1 Вступ

Зв'язок теорії плазми з великою кількістю розділів теоретичної фізики та математики (термодинаміка, статистична механіка, теорія випадкових процесів, і т. ін.) забезпечує постійний інтерес зі сторони фізиків-теоретиків до дослідження явищ, що в ній відбуваються. З іншого боку сучасний рівень техніки дозволяє порівняно легко ставити експерименти в даній області, що надає можливість ефективно перевіряти теоретичні передбачення.

Останнім часом особливу цікавість викликають дослідження запорошеної плазми. Це пояснюється як великою кількістю виявлених ефектів, які на даний момент потребують більш детального дослідження (формування і плавлення пилових кристалів, поширення пилових акустичних хвиль, існування просторових доменів, вільних від пилових частинок (воїдів), аномально велика кінетична енергія порошинок у запиленій плазмі, особливості екранування, які можуть приводити до значного зменшення сили динамічного тертя, або навіть від'ємного тертя, і т. ін.), так і великою кількістю прикладних задач.

Даний розділ має за мету дослідити статистичні характеристики динаміки броунівської частинки в запорошеній плазмі. Зокрема, надалі поставлено наступні задачі: перевірити, чи впливають флуктуації повного заряду частинки на її функцію розподілу імовірності для швидкості. Якщо так, то чи можуть бути вони знехтувані у порівнянні з флуктуаціями стоку зарядів. З'ясувати, чи можливий гістерезис в такій системі. Якщо так, то чи може він бути виявлений експериментально. Обчислити енергію броунівських части-

нок у плазмовому середовищі. Перевірити, чи можуть досліджувані ефекти бути відповідальними за аномально високу кінетичну енергію броунівських частинок.

Надалі розділ організовано наступним чином. Параграф 4.2 задає мотивацію для поставлених задач та містить в собі огляд сучасного стану досліджуваних феноменів.

При виконанні обчислень було застосовано доволі специфічний математичний апарат, такий як теорія стохастичних диференціальних рівнянь. Щоб полегшити сприйняття даного розділу, параграф 4.3 містить всю необхідну інформацію (за виключенням хіба що строгих математичних доведень, які можна знайти у літературі представлений в кінці дисертації) пов'язану з цим апаратом.

Основні аналітичні результати буде отримано у параграфі 4.4. Вид отриманих рівнянь дозволяє при виконанні чисельних розрахунків значно прискорювати процес. Тож у параграфі 4.5 проводиться огляд відповідних методів та їх застосування.

Розділ завершується представленням результатів чисельного моделювання (параграф 4.6) та висновками 4.7.

## **4.2 Сучасні проблеми фізики запорошеної плазми**

Різноманіття цікавих явищ, що експериментально спостерігаються в запорошеній плазмі (формування і плавлення пилових кристалів, поширення пилових акустичних хвиль, існування просторових доменів, вільних від пилових частинок (воїдів), і т.ін.), спричинило інтенсивне вивчення статистичних та кінетичних властивостей пилової динаміки в плазмовому середовищі. Зокрема було показано, що зарядження пилинки зарядами з плазми виливається в особливе екранування пилинки, яке може значною мірою відрізнятися від дебаївського екранування [81–86]. А саме, ефектив-

ний потенціал пилінки може мати подібну до кулонівської асимптотику й особливий розподіл плазмових частинок навколо пилінки може викликати значне зменшення сили динамічного тертя (або навіть від'ємне тертя) [87–94]. Цей ефект може бути кандидатом на пояснення аномально високої кінетичної температури пилинок, що спостерігається в експериментах з запиленою плазмою [21, 28, 95], разом з іншими механізмами нагрівання частинки як то флуктуаційний механізм запропонований в [96], або зменшення сили в напрямку руху частинки внаслідок бомбардування, зумовленого особливими властивостями профілю заряду [97].

Очевидно, що у випадку зменшеного (або навіть від'ємного) тертя, динаміка порошинки може значною мірою відрізнитися від такої в газах та рідинах [23]. Приклад такого незвичного броунівського руху пилінки у випадку плазми без зіткнень дано в [23, 97]. Протилежний випадок плазми з великою кількістю зіткнень розглянуто в [1, 2].

Головною рисою броунівського руху в системі з залежним від швидкості коефіцієнтом тертя є те, що стаціонарний розподіл відрізняється від максвеллівського розподілу. Крім того, при деяких умовах, визначених параметрами плазми та розмірами пилінки, функція розподілу має максимум, що відповідає ненульовій швидкості. Це означає, що в такому випадку середня кінетична енергія скоріше визначається швидкістю, що відповідає максимуму функції розподілу, ніж її дисперсією.

Як було згадано вище, зменшення (або навіть зникнення) тертя пилінки, викликане особливою поляризацією довколишньої плазми пов'язаною зі зміною екранування пилінки, зумовленого потоком заряджених частинок плазма-пилінка. Цей висновок слідує з обчислень ефективного потенціалу пилінки, беручи до уваги поглинання електронів та іонів пилінками [28, 87–94]. Основним припущенням таких обчислень є те, що потоки зарядів, які підтримують заряд пилінки, строго фіксовані. Очевидно, що це наближення, оскільки там виникають флуктуації потоків електронів та іонів

у напрямку пилінки та пов'язані з ними флуктуації заряду [29, 98–106] викликані флуктуаціями густини частинок і електричного поля в довколишній плазмі. Крім того, у зв'язку з випадковим характером поглинання (або розсіяння) плазмових частинок пилінкою, можуть також виникати флуктуації коефіцієнту релаксації. Це, у свою чергу, генерує флуктуації неекранованої частини ефективного потенціалу  $i$ , таким чином, флуктуації коефіцієнту тертя. Останні можуть привести до якісних змін функції розподілу імовірності для швидкості. Як буде показано нижче, можуть спостерігатися два різних максимуми функції розподілу, а це означає, що у розглянутій системі може виникати індукований шумом фазовий перехід.

### 4.3 Рух зарядженої броунівської частинки з точки зору теорії випадкових процесів.

Розглянемо деяку фізичну систему, що описується диференціальним рівнянням:

$$\frac{dX_t}{dt} = f_k(X_t) = [h(X_t) + k g(X_t)]. \quad (4.1)$$

Індекс  $t$  у даному свідчить про те, що  $X$  є функцією від  $t$ . З фізичної точки зору це означає, що йдеться про деякий протяжний у часі процес.

Взагалі кажучи  $X_t$  може бути по різному інтерпретоване в залежності від того, яка система описується рівнянням (4.1). У випадку броунівського руху — це миттєва швидкість, при дослідженні екологічних систем — число особин у популяції, а хімічних реакцій — концентрація речовини в даний момент часу... У даному розділі можна обмежитись чисто математичним підходом і не заглиблюватися в проблеми фізичної інтерпретації даного рівняння та конкретного виду функцій  $f$  і  $g$ , оскільки ці питання будуть розглянуті у наступних розділах.  $k$  надалі вважається деяким безрозмірним параметром системи.

Тепер припустимо, що  $k$  флуктує в околі деякого середнього значення  $\lambda$ .

Навіть більше: флуктуації  $k$  — білий шум інтенсивністю  $\sigma$ . Тоді:

$$\frac{dX_t}{dt} = [h(X_t) + \lambda g(X_t)] + \sigma g(X_t) \xi(t) = f_\lambda(X_t) + \sigma g(X_t) \xi(t), \quad (4.2)$$

де  $\xi(t)$  — білий шум.

Вибір білого шуму з множини всіх можливих випадкових процесів не-випадковий. Це пов'язано з його особливими властивостями. За означенням білий шум — це випадковий процес для якого мають місце наступні рівності:

$$K_\xi(t_1, t_2) = \sigma^2 \delta(t), \quad (4.3)$$

$$C_\xi(\nu) = \frac{\sigma^2}{2\pi}. \quad (4.4)$$

Рівняння (4.3) — це вираз для кореляційної функції. З фізичної точки зору те що кореляційна функція є фактично дельта-функцією означає, що розглядається процес без пам'яті. В той самий час рівняння (4.4) означає, що спектр цього процесу — стала величина. Такий процес не тяжіє до більш швидких чи більш повільних змін — його поведінка непередбачувана.

Перш ніж перейти до більш детального розгляду рівняння (4.2) та його розв'язку необхідно зробити невеликий відступ. Всі приведені нижче викладки справедливі тільки якщо функції  $f$  і  $g$  задовольняють умови Ліпшица.

Деяка функція  $S \xrightarrow{F} T$  вважається такою, що задовольняє умовам Ліпшица, якщо

$$\forall x \in S : \forall y \in T : \exists L \in \mathbb{R} : \|F(x) - F(y)\|_T \leq L \|x - y\|_S$$

Тут індекси  $S$  та  $T$  означають метрики у відповідних просторах. Надалі вважається, що всі необхідні умови задовольняються. Для найбільш цікавого випадку запиленої плазми доведення буде приведено нижче.

За означенням білого шуму можна формально записати:  $\xi(t) = dW_t/dt$ .  $W_t$  — деякий вінерів процес. Таким чином ми бачимо, що початкове рівняння

може бути записано у двох формах: диференційній та інтегральній.

$$dX_t = f_\lambda(X_t)dt + \sigma g(X_t)dW_t \quad (4.5)$$

$$X_t = X_{t_0} + \int_{t_0}^t f_\lambda(X_s)ds + \sigma \int_{t_0}^t g(X_s)dW_s \quad (4.6)$$

Оскільки надалі нас більше цікавитиме інтегральна форма, бо від неї можна перейти до рівняння Фоккера-Планка, що описує розподіл імовірності величини  $X_t$ , то зупинимось детальніше на її розгляді.

В правій частині рівняння (4.6) присутні два інтеграли. Перший з них можна розглядати як інтеграл Рімана. Значно більший інтерес становить другий інтеграл, оскільки він береться по випадковому процесу. Через це він не може бути розглянутий як інтеграл Рімана, Лебега чи Стільтьєса. Таким чином виникає нове поняття “стохастичний інтеграл”.

Для означення цього поняття можна слідувати означенню Іто, або означенню Стратоновича:

$$\int_{t_0}^t \vec{H}^{tr}(\vec{Y}_s) d\vec{Y}_s = \lim_{\delta_n \rightarrow 0} \sum_{i=1}^n \vec{H}^{tr}(\vec{Y}_{t_{i-1}}) (\vec{Y}_{t_i} - \vec{Y}_{t_{i-1}}) \quad (4.7)$$

$$\int_{t_0}^t \vec{H}^{tr}(\vec{Y}_s) d\vec{Y}_s = \lim_{\delta_n \rightarrow 0} \sum_{i=1}^n \vec{H}^{tr}\left(\frac{\vec{Y}_{t_{i-1}} + \vec{Y}_{t_i}}{2}\right) (\vec{Y}_{t_i} - \vec{Y}_{t_{i-1}}) \quad (4.8)$$

Можна звернути увагу на те, що означення, записані вище, більш ніж просто схожі на означення інтегралу Рімана. Будь  $\vec{Y}_{t_i}$  не випадковим процесом, а “достатньо хорошою” функцією — (4.7) і (4.8) співпали б між собою та з означенням інтегралу Рімана.

Як бачимо (4.7) і (4.8) відрізняються тільки точкою в якій береться значення підінтегральної функції. Тим не менше — це доволі значна різниця, оскільки отримані таким чином результати повністю відрізняються. Фізично це означає, що у випадку інтегралу Іто вплив на стан системи має її поведінка тільки до моменту  $\vec{Y}_{t_{i-1}}$ , а у випадку інтеграла Стратоновича —

$(\vec{Y}_{t_{i-1}} + \vec{Y}_{t_i})/2$ . Звідси випливає, що інтеграл Іто описує випадок процесу з нульовою пам'яттю, а інтеграл Стратоновича — процес з як завгодно короткою, але ненульовою пам'яттю.

Використовуючи правило диференціювання Іто можна отримати рівняння Фоккера-Планка для кожного з інтегралів [107, 108]:

$$\begin{aligned}\partial_t \rho(y, t|x) &= -\partial_y f_\lambda(y) \rho(y, t|x) + \frac{\sigma^2}{2} \partial_{yy} g^2(y) \rho(y, t|x) \\ \partial_t \rho(y, t|x) &= -\partial_y [f_\lambda(y) + \frac{\sigma^2}{2} g'(y)g(y)] \rho(y, t|x) + \frac{\sigma^2}{2} \partial_{yy} g^2(y) \rho(y, t|x)\end{aligned}$$

Одразу зазначимо, що нас цікавитимуть стаціонарні розв'язки цих рівнянь, тобто ми не розглядатимемо перехідних процесів і вважатимемо, що минуло достатньо часу, щоб у системі встановився відповідний розподіл імовірностей. Таким чином розв'язуватимемо його в припущенні  $\partial_t \rho(y, t|x) = 0$ . Для початку розглянемо випадок інтегралу Іто:

$$\begin{aligned}0 &= -\partial_y f_\lambda(y) \rho(y, t|x) + \frac{\sigma^2}{2} \partial_{yy} g^2(y) \rho(y, t|x) \\ J &= -\partial_y f_\lambda(y) \rho(y, t|x) + \frac{\sigma^2}{2} \partial_{yy} g^2(y) \rho(y, t|x)\end{aligned}$$

Позначивши:  $q(y) = g^2(y)p_s(y)$ , отримуємо:

$$J = -\frac{f_\lambda(y)}{g^2(y)} q(y) + \frac{\sigma^2}{2} \frac{dq}{dy}$$

Враховуючи виконану заміну отримуємо:

$$\frac{f_\lambda(y)}{g^2(y)} q(y) = \frac{\sigma^2}{2} \frac{dq}{dy} \Rightarrow q(y) = C \cdot \exp \left[ \frac{2}{\sigma^2} \int^y \frac{f_\lambda(u)}{g^2(u)} du \right]$$

Діючи методом варіації сталої припускаємо, що  $C$  — функція  $y$ , тоді:

$$\begin{aligned}\frac{\sigma^2}{2} \frac{dC'(y)}{dy} \exp \left[ \frac{2}{\sigma^2} \int^y \frac{f_\lambda(u)}{g^2(u)} du \right] - J &= 0 \Rightarrow \\ \Rightarrow C'(y) &= \frac{2J}{\sigma^2} \int^y \exp \left[ \frac{2}{\sigma^2} \int^z \frac{f_\lambda(u)}{g^2(u)} du \right] dz\end{aligned} \tag{4.9}$$



Підставляючи  $C$  і спрощуючи вирази отримаємо:

$$q(y) = N \exp \left[ \frac{2}{\sigma^2} \int^y \frac{f_\lambda(u)}{g^2(u)} du \right] - \frac{2J}{\sigma^2} \int^y \exp \left[ \frac{2}{\sigma^2} \int_z^y \frac{f_\lambda(u)}{g^2(u)} du \right] dz$$

Або те ж саме:

$$p_s(y) = \frac{N}{g^2(y)} \exp \left[ \frac{2}{\sigma^2} \int^y \frac{f_\lambda(u)}{g^2(u)} du \right] - \frac{2J}{\sigma^2 g^2(y)} \int^y \exp \left[ \frac{2}{\sigma^2} \int_z^y \frac{f_\lambda(u)}{g^2(u)} du \right] dz$$

Як відомо, умова нормування:

$$\int_{b_1}^{b_2} p_s(y) dy = 1$$

Звідси можна знайти  $N$ :

$$N = \frac{\left( 1 + \int_{b_1}^{b_2} \frac{2J}{\sigma^2 g^2(y)} \int^y \exp \left[ \frac{2}{\sigma^2} \int_z^y \frac{f_\lambda(u)}{g^2(u)} du \right] dz dy \right)}{\left( \int_{b_1}^{b_2} \exp \left[ \frac{2}{\sigma^2} \int^y \frac{f_\lambda(u)}{g^2(u)} du \right] dy \right)}$$

Сталу  $J$  можна отримати з крайових умов.

Особливо цікавий випадок, коли  $J = 0$ . Тоді рівняння спрощується:

$$p_s(y) = \frac{N}{g^2(y)} \exp \left[ \frac{2}{\sigma^2} \int^y \frac{f_\lambda(u)}{g^2(u)} du \right]$$

$$N^{-1} = \int_{b_1}^{b_2} \frac{1}{g^2(y)} \exp \left[ \frac{2}{\sigma^2} \int^y \frac{f_\lambda(u)}{g^2(u)} du \right] dy$$

Заміною  $f_\lambda(y) \rightarrow f_\lambda(y) + (\sigma^2/2) g'(y)g(y)$  можна отримати аналогічний ре-

зультат для інтеграла Стратоновича:

$$\begin{aligned}
 p_s(y) &= \frac{N}{g^2(y)} \exp \left[ \frac{2}{\sigma^2} \int^y \frac{f_\lambda(u) + (\sigma^2/2) g'(u)g(u)}{g^2(u)} du \right] - \\
 &\quad - \frac{2J}{\sigma^2 g^2(y)} \int^y \exp \left[ \frac{2}{\sigma^2} \int_z^y \frac{f_\lambda(u) + (\sigma^2/2) g'(u)g(u)}{g^2(u)} du \right] dz \\
 N &= \frac{\left( 1 + \int_{b_1}^{b_2} \frac{2J}{\sigma^2 g^2(y)} \int^y \exp \left[ \frac{2}{\sigma^2} \int_z^y \frac{f_\lambda(u) + (\sigma^2/2) g'(u)g(u)}{g^2(u)} du \right] dz dy \right)}{\left( \int_{b_1}^{b_2} \exp \left[ \frac{2}{\sigma^2} \int^y \frac{f_\lambda(u) + (\sigma^2/2) g'(u)g(u)}{g^2(u)} du \right] dy \right)}
 \end{aligned}$$

А для випадку  $J = 0$ :

$$p_s(y) = \frac{N}{g^2(y)} \exp \left[ \frac{2}{\sigma^2} \int^y \frac{f_\lambda(u) + (\sigma^2/2) g'(u)g(u)}{g^2(u)} du \right] \quad (4.10)$$

$$N^{-1} = \int_{b_1}^{b_2} \frac{1}{g^2(y)} \exp \left[ \frac{2}{\sigma^2} \int^y \frac{f_\lambda(u) + (\sigma^2/2) g'(u)g(u)}{g^2(u)} du \right] dy \quad (4.11)$$

Підвищена увага до випадку  $J = 0$  пояснюється фізичним смислом задачі, що розглядається далі. З математичної точки зору цей випадок виникає, коли на границі виконуються так звані природні умови в класифікації Гіхмана-Скорихода [109] (аналогічний вигляд мають ці умови також в класифікації Феллера [110], що підкреслює їх важливість). Особливість цих умов в тому, що вони описують випадок, коли відсутній потік імовірності через границю. В даній роботі природнім умовам приділяється значна увага оскільки надалі йдеться про функцію розподілу імовірності для швидкості<sup>1</sup>. Оскільки швидкість не може бути менше нуля, або більше нескінченності, то очевидно, що якщо вважати нуль та нескінченність границями, то на них виконуватимуться природні умови.

<sup>1</sup>Тут і далі під швидкістю будемо розуміти її абсолютну величину.

#### 4.4 Поведінка броунівської частинки у плазмовому середовищі

Традиційний формалізм нерівноважного броунівського руху використовує феноменологічні вирази для коефіцієнтів тертя та дифузії. Зазвичай залежність від швидкості цих коефіцієнтів постулюється і таким чином вноситься значний рівень непевності в застосування таких моделей до реальних систем. Навіть більше, у випадку нерівноважної системи, як було показано вище, існує кілька видів рівняння Фоккера-Планка, які можуть бути пов'язані з нелінійним рівнянням Ланжевена [1, 23]. Стохастична динаміка звичайної броунівської частинки описується в термінах швидкості, що задовольняє рівняння Ланжевена (зادля простоти тут і надалі ми розглядаємо одновимірний випадок).

$$\dot{v} = -\gamma v + \delta f(t), \quad (4.12)$$

де  $\gamma$ — коефіцієнт тертя  $\delta f(t) = (1/M)\delta F(t)$ ,  $\delta F(t)$ — це випадкова сила, що враховує непостійний вплив середовища на броунівську частинку,  $M$ — маса частинки. В цієї сили наступні статистичні властивості:  $\langle \delta f(t) \rangle = 0$  і  $\langle \delta f(t) \delta f(t_0) \rangle = \sigma^2 \delta(t - t_0)$ , що відповідає випадку білого шуму. Тут  $\sigma$ — інтенсивність білого шуму.

Можна звернути увагу на те, що записані умови не співпадають з даним раніше означення білого шуму (4.3) і (4.4). Тим не менше можна показати, що насправді обидві пари умов еквівалентні [109–112].

Функція розподілу  $\rho(v, t)$  броунівської частинки задовольняє в такому випадку загальновідоме рівняння Фоккера-Планка [107]

$$\frac{\partial \rho(v, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial v} \left\{ \gamma v \rho(v, t) + D \frac{\partial \rho}{\partial v} \right\}, \quad (4.13)$$

де  $D = \sigma^2/2$ .

Якщо залежність сили тертя від швидкості довільна, і сила Ланжевена  $\delta F(v, t)$ , то необхідно використовувати нелінійне рівняння Ланжевена

$$\dot{v} = f(v) + \delta f(v, t),$$

де  $f(v) = F(v)/M$ ,  $F(v)$ — це сила, що діє на частинку яка рухається в середовищі включаючи тертя. Якщо сила Ланжевена залежить в кожній точці від швидкості як  $\delta f(v, t) = g(v)\delta f(t)$ , то рівняння для функції розподілу броунівської частинки може бути записане як [1, 107]

$$\frac{\partial \rho(v, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial v} \left\{ -f(v)\rho(v, t) + \frac{\partial}{\partial v} [D(v)\rho(v, t)] \right\}. \quad (4.14)$$

Тут  $D(v) = (\sigma^2/2)g^2(v)$ .

Розв'язок рівняння Фоккера-Планка (4.14) у випадку значних часів еволюції зберігає фундаментальну властивість, а саме, воно редукується до стаціонарного розв'язку, який може бути інтерпретований як “рівноважний” розв'язок для нерівноважної системи, що розглядається. Такий стаціонарний розв'язок узгоджується з Н-теоремою в загальному смислі [113].

#### 4.4.1 Флуктуації заряду

З фізичної точки зору очевидно, що число електронів та іонів, що поглинаються порошинкою було б більш природно вважати випадковими величинами, ніж константою. Тому надалі буде поставлено питання про вплив даних флуктуацій на поведінку порошинки в запорошеній плазмі. Звичайно одразу ж виникає питання про те, які величини будуть флуктувати та чи можна впливом флуктуацій одних величин знехтувати в порівнянні з впливом флуктуацій інших.

Очевидно, що якщо вважати випадковою величиною кількість електронів та іонів, що поглинаються порошинкою в одиницю часу, то це означає, що  $S_e$  та  $S_i$  флуктують. А значить флуктує і величина  $\alpha$ , оскільки вона виражається як [90, 94]:

$$\alpha = - \sum_{j=i,e} \frac{e_j S_j}{q k_D^2 D_j}$$

Тим не менше  $\alpha$  не єдина величина, що флуктуватиме внаслідок флукту-

ацій  $S_e$  та  $S_i$ . Відомо також, що

$$q(t) = \int_0^t e_e S_e + e_i S_i,$$

або краще в диференційній формі:

$$\frac{dq}{dt} = e_i S_i + e_e S_e.$$

Останнє рівняння виражає зміну заряду порошинки за одиницю часу.

Тим не менше в більшості моделей [87–94] допускається

$$e_e S_e = -e_i S_i,$$

що фактично означає незмінність заряду в часі. В такому випадку, очевидно, виникає необхідність перевірити, чи допускаються флуктуації  $\alpha$  в таких моделях, а також, наскільки значний вклад у вид функції розподілу імовірності для швидкості вносять флуктуації заряду та чи можна ними знехтувати.

Перш ніж відповісти на перше питання, введемо деякі перепозначення:

$$\begin{aligned} A_i &= \frac{-1}{k_D^2 D_i} \\ A_e &= \frac{-1}{k_D^2 D_e} \\ \alpha &= \frac{1}{q} [A_i (e_i S_i) + A_e (e_e S_e)] \end{aligned}$$

Тепер припустимо, що  $S_i$  флюктує в околі деякого середнього значення:

$$S_i(t) = S_{i0} + \sigma \xi(t)$$

$\xi(t)$ — білий шум. При чому явно покладемо:

$$S_e(t) = S_{e0} - \sigma \xi(t),$$

та

$$S_{e0} + S_{i0} = 0.$$

Тоді (і тільки тоді), очевидно, виконується наступна рівність:

$$S_i + S_e = S_{i0} + \sigma\xi(t) + S_{e0} - \sigma\xi(t) = S_{i0} + S_{e0} = 0$$

Виходячи з означення для  $S_i$  та  $S_e$ :

$$\frac{dq}{dt} = e_i S_i(t) + e_e S_e(t) = 0$$

Тим не менше, вираз для  $\alpha$  являє собою лінійну комбінацію з різними коефіцієнтами, тобто попри те, що заряд залишається в такій моделі сталим,  $\alpha$  — флюктує:

$$\begin{aligned} \alpha &= \frac{1}{q} [A_i(e_i S_{i0} + \sigma\xi(t)) + A_e(e_e S_{e0} - \sigma\xi(t))] = \\ &= \frac{1}{q} [\{A_i(e_i S_{i0}) + A_e(e_e S_{e0})\} + \{A_i - A_e\}\sigma\xi(t)] = \\ &= \frac{1}{q} [\alpha_0 + \sigma_a \xi(t)]. \end{aligned}$$

Тут  $\sigma_a = (A_i - A_e)\sigma$ .

Фізично дані умови означають, що якщо внаслідок флуктуацій потоків величина заряду порошинки стане відмінною від  $q$ , то існують процеси, що спробують повернути величину її заряду назад до значення  $q$ . Також його можна інтерпретувати в термінах часів релаксації: час релаксації сумарного потоку заряду значно менший, ніж час релаксації потоку частинок. Математичний же смисл даних умов полягає в тому, що  $q$  та  $\alpha$  являють собою функції, в які входять різні лінійні комбінації  $e_e S_e$  та  $e_i S_i$  і, відповідно, тожжна рівність однієї з них нулю зовсім нічого не каже про іншу. Разом з тим необхідно зауважити, що якби  $D_e$  та  $D_i$  були рівними, то разом з флуктуаціями заряду зникли б і флуктуації  $\alpha$ .

Такі допущення непогано узгоджуються з експериментальними даними, які вказують на існування деякого стійкого середнього значення заряду. Тим не менше виникає природне бажання розглянути протилежний випадок, коли немає такої компенсації, тобто  $S_i$  та  $S_e$  флюктують незалежно. В такому

випадку:

$$S_e(t) = S_{e0} + \sigma_e \xi_e(t)$$

$$S_i(t) = S_{i0} + \sigma_i \xi_i(t)$$

$$\begin{aligned} \alpha &= \frac{1}{q(t)} [A_i(e_i S_{i0} + \sigma_i \xi_i(t)) + A_e(e_e S_{e0} + \sigma_e \xi_e(t))] = \\ &= \frac{1}{q(t)} [\{A_i(e_i S_{i0}) + A_e(e_e S_{e0})\} + \{A_i \sigma_i \xi_i(t) + A_e \sigma_e \xi_e(t)\}] = \\ &= \frac{1}{q(t)} [\alpha_0 + \sigma \xi(t)] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{dq}{dt} &= (e_i S_{i0} + \sigma_i \xi_i(t)) + (e_e S_{e0} + \sigma_e \xi_e(t)) = \\ &= (e_i S_{i0} + e_e S_{e0}) + (\sigma_i \xi_i(t) + \sigma_e \xi_e(t)) = \\ &= \sigma_i \xi_i(t) + \sigma_e \xi_e(t) = \sigma_q \xi_q(t) \end{aligned}$$

Очевидно, що  $\xi_q(t)$  та  $\xi(t)$  — два незалежних білих шуми з інтенсивностями  $\sigma_q$  та  $\sigma$ . Але в такому випадку флуктуації заряду не можна розглядати як білий шум, оскільки випадковий процес, що описує поведінку заряду, є інтегралом випадкового процесу, що описує зміну потоків частинок на пилінку:

$$q(t) = q + \int_0^t \sigma_q \xi_q(\tau) d\tau$$

Останній доданок являє собою інтеграл білого шуму. Відомо, що за деяких умов (інтегровність кореляційної функції процесу та його математичного сподівання) випадкові процеси можна інтегрувати. Зокрема білий шум підпадає під це правило. Результатом інтегрування білого шуму є так званий червоний шум [108–112]. На відміну від білого шуму його спектральна функція не є сталою, а змінюється як  $1/\omega^2$ , тобто процес прагне до повільних коливань, а не швидких. Тоді як спектр білого шуму — константа, тобто в такому процесі можна виділити як швидкі, так і повільні зміни. Крім того дисперсія червоного шуму — скінченна величина, хоча і зростає з часом, а дисперсія білого шуму — нескінченність, що прямо впливає з його означення.

ння [108]. Також таке припущення погано узгоджується з експериментальними даними, оскільки в такому випадку значення заряду стає з часом все менш і менш визначеним (дисперсія зростає), тобто чим довше порошок перебуває в плазмовому середовищі, тим менш точно можна передбачити величину її заряду. В експерименті все відбувається з точністю до навпаки: чим довше частинка перебуває в плазмі — тим точніше виконується співвідношення (4.15)

#### 4.4.2 Динамічна сила тертя для пилової частинки

Перейдемо до більш детального розгляду сили, що діє на частинку в плазмовому середовищі. Згідно з [90, 94], якщо позначити:

$$f_1(\tilde{v}) = \frac{i}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{dx}{\tilde{v}^2(\mu_1 - \mu_2)d} \left\{ 2i\tilde{v} \frac{t+d}{t+1} (\mu_1 - \mu_2) + \right. \\ \left. + \mu_1 \left[ i\mu_1 \frac{t+d}{t+1} - x \right] \ln \frac{\mu_1 - \tilde{v}}{\mu_1 + \tilde{v}} - \mu_2 \left[ i\mu_2 \frac{t+d}{t+1} - x \right] \ln \frac{\mu_2 - \tilde{v}}{\mu_2 + \tilde{v}} \right\}$$

$$g_1(\tilde{v}) = \frac{i}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{dx}{\tilde{v}^2(\mu_1 - \mu_2)d} \left\{ \mu_1 x \ln \frac{\mu_1 - \tilde{v}}{\mu_1 + \tilde{v}} - \mu_2 x \ln \frac{\mu_2 - \tilde{v}}{\mu_2 + \tilde{v}} \right\}$$

$$f_2(v) = 6\pi r \eta v$$

$$\mu_{1,2} = \frac{i \left[ x^2(1+d) + \frac{t+d}{t+1} \right]}{-2xd} \pm \\ \pm \frac{\sqrt{4x^2d(1+x^2) - \left[ x^2(1+d) + \frac{t+d}{t+1} \right]^2}}{-2xd}$$

$$\tilde{v} = \frac{v}{D_i k_D}, d = \frac{D_i}{D_e}, t = \frac{T_i}{T_e}$$



то сила, що діє на броунівську частинку в плазмі записується:

$$\tilde{F}(v) = q^2 k_D^2 \left( f_1 \left( \frac{v}{D_i k_D} \right) - \alpha g_1 \left( \frac{v}{D_i k_D} \right) \right)$$

Тут  $T_i, D_i, T_e, D_e$  — температури та коефіцієнти дифузії іонної та електронної компонент відповідно.  $\alpha$  — безрозмірна величина, що характеризує стік іонів та електронів на частинку, а  $q$  — заряд частинки [90, 94]:

$$q = -\frac{T_e r_0}{e} \ln \left( \frac{\mu_e}{\mu_i} \right) \quad (4.15)$$

Також вважаємо, що завжди виконується співвідношення Ейнштейна:

$$\frac{D_{(i, e)}}{\mu_{(i, e)}} = \frac{T_{(i, e)}}{e}$$

Вираз для повної сили, що діє на частинку в такому випадку запишеться:

$$F(v) = \tilde{F}(v) - f_2(v) = q^2 k_D^2 \left( f_1 \left( \frac{v}{D_i k_D} \right) - \alpha g_1 \left( \frac{v}{D_i k_D} \right) \right) - f_2(v)$$

#### 4.4.3 Функція розподілу імовірності для швидкості пилинок

Згідно попереднього розділу вважатимемо, що параметр  $\alpha$  флюктує в околі деякого середнього значення  $\lambda$ , як білий шум інтенсивності  $\sigma$ . В такому випадку функції  $f$  і  $g$  записуються:

$$f_\lambda(v) = q^2 k_D^2 \left( f_1 \left( \frac{v}{D_i k_D} \right) - \lambda g_1 \left( \frac{v}{D_i k_D} \right) \right) - f_2(v) \quad (4.16)$$

$$g(v) = -q^2 k_D^2 g_1 \left( \frac{v}{D_i k_D} \right) \quad (4.17)$$

Та для початку необхідно перевірити умови Ліпшица, щоб встановити, чи працює обраний математичний апарат у даному конкретному випадку.

Згідно з [90, 94] інтеграл, який входить в  $f_1$  всюди сходиться на проміжку  $[0, \infty)$  і в нулі поводитья як лінійна функція. Відповідно так само поводитья  $f_1$ . Далі неважко перевірити, що на нескінченності  $f_1$  прямує до нуля. Таким чином можна зробити висновок про те, що повна сила поводитья

аналогічно, оскільки отримується з  $f_1$  лінійним перетворенням. Враховуючи також неперервність  $F$  можна зробити висновок, що дійсно існує лінійна функція, яка на будь-якому проміжку більша за  $F$ , а отже умова Ліпшица виконується.

Наступний крок — вибір означення стохастичного інтеграла: за Іто, або за Стратоновичем. Згідно теореми Вонга-Закаї [108] інтеграл Стратоновича відповідає випадку, коли випадковий процес не є справжнім білим шумом, а може бути представлений як послідовність нормальних випадкових процесів, що сходяться до білого шуму. Цей варіант більш фізичний, оскільки в реальних умовах важко знайти процес, який дійсно є білим шумом. Таким чином надалі будемо використовувати інтеграл Стратоновича і відповідне рівняння Фоккера-Планка.

Як уже згадувалося вище, оскільки для модуля швидкості можна записати:  $0 < v < \infty$ , то можна зробити висновок, що потік імовірності через границі відсутній. Цей випадок відповідає природнім умовам в класифікації Гіхмана-Скорохода. Математично це означає:  $J = 0$ . Наклавши ці умови можна одержати розв'язок стохастичного рівняння (4.1). Цей розв'язок вже було отримано вище (4.10), (4.11).

На жаль складність виразу для повної сили, що діє на броунівську частинку не дає можливості записати розв'язок у явному вигляді, але він може бути отриманий методом математичного моделювання.

#### 4.5 Деякі питання чисельних розрахунків

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  $T = T_e = T_i$ . Типова лабораторна плазма не відповідає цим вимогам (зазвичай  $T_e/T_i \sim 100$ ), але вони були вибрані з ілюстративною метою.

Оскільки обчислення, що необхідно виконати надзвичайно складні, то було б бажано як можна більше спростити всі вирази. Оскільки ключове місце у всіх обчисленнях посідає вираз для сили, то перш за все необхідно забезпечити його достатньо швидке обчислення. Для початку зауважимо, що  $t = 1$ , а  $d \sim 10^{-5}$ . Враховуючи це можна провести ряд спрощень:

$$\mu_1 = \frac{x^2 + 1/2}{\tilde{v}xd}$$

$$\mu_2 = -\frac{x(x^2 + 1)}{\tilde{v}(x^2 + 1/2)}$$

Чисельні розрахунки вказують, що відхилення значень, отриманих за допомогою даного наближення, від значень отриманих без будь-яких наближень нехтовно мале.

Чисельні розрахунки виконувалися в пакеті Wolfram Mathematica 5.0. Відомою проблемою цих та подібних розрахунків є обчислення інтегралів, особливо зі змінною верхньою границею. Значні проблеми виникають, коли підінтегральна функція має складний вигляд і при обчисленнях виникають сумніви у збіжності інтеграла (інтеграл при цьому може бути збіжним), що призводить в кращому разі до значного уповільнення обчислень.

Для уникнення подібної ситуації можна піти наступним шляхом: перепишемо вираз для сили наступним чином

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

$$\frac{d}{d\tilde{v}} (\tilde{v}^2 g_1(\tilde{v})) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{\tilde{v}^2 (2x^4 + x^2) dx}{x^6 + (\tilde{v}^2 + 2)x^4 + (\tilde{v}^2 + 1)x^2 + \tilde{v}^4/4}$$

Як бачимо, тепер для отримання необхідних нам величин необхідно виконати зайве інтегрування, але при цьому значно зростає швидкість обчи-

слень, оскільки всі підінтегральні функції мають вигляд поліном поділити на поліном. Результати практичних випробувань показали, що обчислення за такою схемою виконуються на порядок (!) швидше.

Щоб ще більше прискорити роботу й уникнути зайвої витрати часу можна скористатися тим фактом, що при побудові графіку нам будуть потрібні значення інтегралу з усіма можливими значеннями верхньої межі, що лежать на деякому проміжку. Таким чином якщо обчислювати значення цього інтегралу методом трапецій, то можна використовувати тимчасову змінну для збереження суми всіх попередніх трапецій і при отриманні кожної наступної площі додавати її до цієї змінної, а результат вносити в масив. Таким чином за один прохід можна затабулювати всі необхідні значення інтегралу.

#### 4.6 Результати

Розгляньмо результати чисельних розрахунків функції розподілу пилинок для різних розмірів пилинок і температурі плазми.

У випадку  $\sigma_\alpha = 0$  (немає флуктуацій потоку зарядів) функція розподілу схожа на гаусіану з максимумом не в нулі, а при певному значенні швидкості, що залежить від температури плазми та розмірів пилінки (деталі можна знайти в [1, 2]).

Очевидно, в таких випадках середня кінетична енергія пилінки визначається швидкістю, що відповідає максимумові функції розподілу. Ця швидкість відрізняється від звичайної теплової швидкості. Її значення визначається енергетичним балансом між енергією одержаною пилінкою внаслідок взаємодії з довколишньою плазмою (особливо в результаті дії сили, викликаной поляризацією) і дисипації енергії пилінки в пружних зіткненнях з нейтралами та частинками плазми. У випадку флуктуючого параметру  $\alpha$  (флуктуації потоків зарядів) якісно поведінка функції розподілу для пилінки може сильно змінитися (Рис. 4.1–5). Тут  $E_{particle}$ — середня кінетична енергія

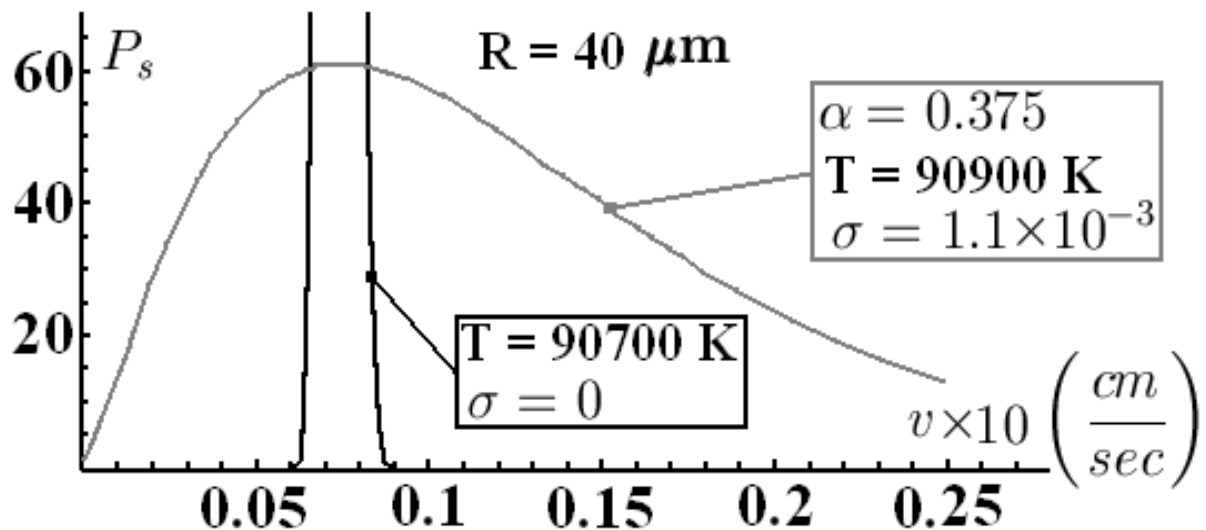


Рис. 4.1: Порівняння функції розподілу імовірності  $\rho(v)$  обчисленої з та без флуктуацій  $\alpha$ .

пилінки (у випадку зі зміною температури, як розглядуваний нижче, енергія пилінки може відрізнятись від оціненої).

Ми бачимо, що флуктуації потоку зарядів викликають значне розпливання функції розподілу по швидкостях (Рис. 4.3), але основною зміною є виникнення додаткового максимуму функції розподілу для  $v \neq 0$  (Рис. 4.3, 4.2). Обчислення також показують, що при переході від одно-пікового до дво-пікового розподілу при фіксованій густині пилинок може існувати гістерезис (Рис. 5).

Як видно з цього графіка, ми можемо спостерігати наступні якісно різні розподіли:

1. одно-піковий розподіл з максимумом при  $v = 0$  (низькі температури);
2. дво-піковий розподіл, коли одному з них відповідає  $v = 0$  (середні температури);
3. одно-піковий розподіл з максимумом при  $v \neq 0$  (високі температури).

Очевидно, що при деяких значеннях температури обидва максимуми стають однакової висоти, а в структурі може спостерігатись біфуркація.

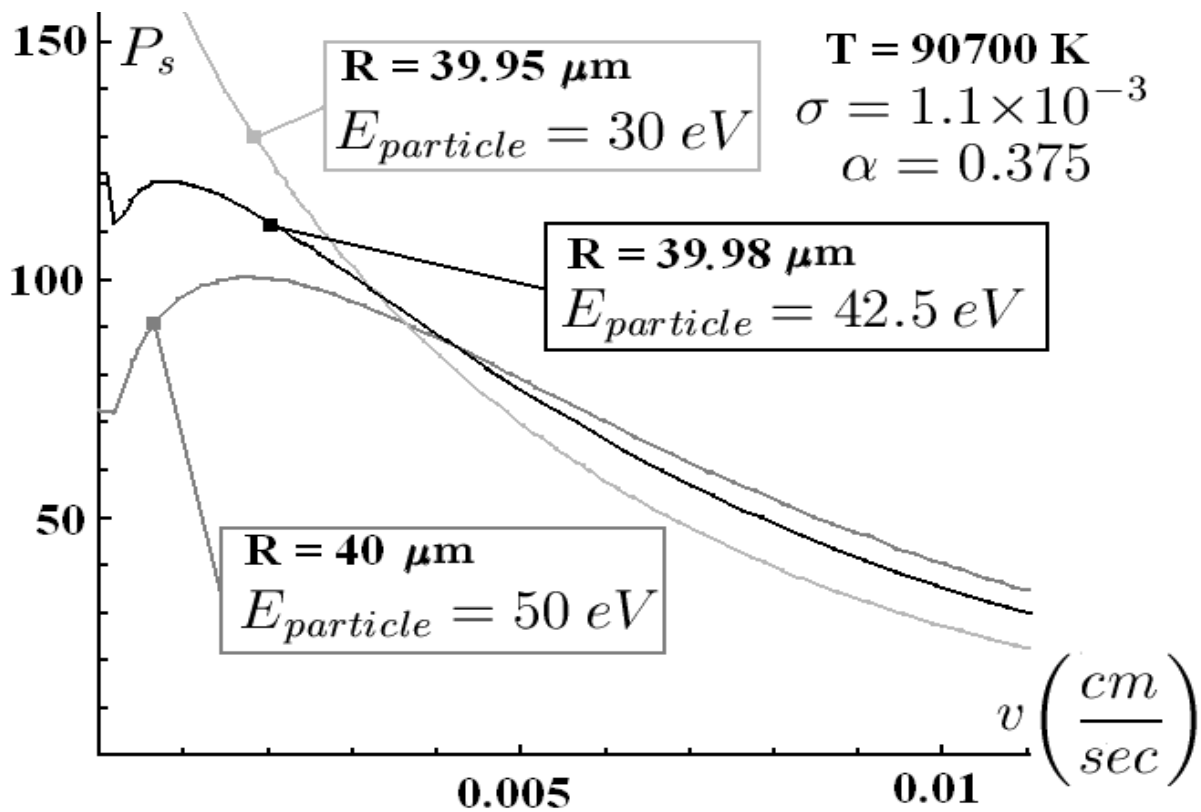


Рис. 4.2: Функція розподілу імовірності  $\rho(v)$  для різних розмірів частинок ( $\alpha = 0.375$ ,  $\sigma_{\alpha}^2 = 1.2 \times 10^{-6}$ )

Такі властивості типові для систем з гістерезисом і це дає привід очікувати, що у розглядуваній системі також спостерігатиметься гістерезис у поведінці функції розподілу.

Як було згадано вище, у відповідності з фундаментальними принципами індукованого шумом фазового переходу [108, 114] якісні зміни функції розподілу (утворення дво-пікового розподілу з одно-пікового і навпаки) вказують на наявність фазового переходу між різними макроскопічними станами [108]. В розглядуваному 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 впли-

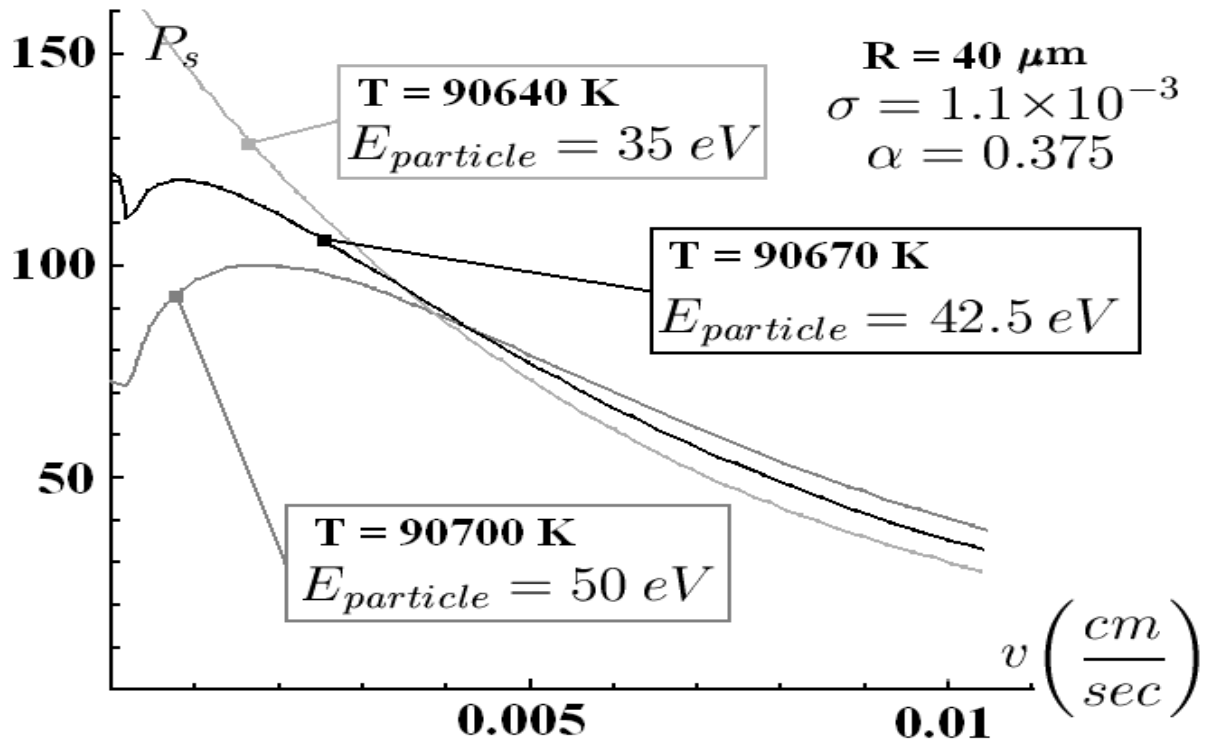


Рис. 4.3: Функція розподілу імовірності  $\rho(v)$  для різних температур плазми ( $\alpha = 0.375$ ,  $\sigma_\alpha^2 = 1.2 \times 10^{-6}$ )

вом флуктуацій на стан системи поблизу порогу нестабільності (умови руху без тертя). А саме, флуктуації параметру  $\alpha$  приводять до звичайного розподілу 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 запыленій плазмі.

Поява гістерезису за умов повільної зміни температури може бути виправдана принципом максимальної затримки [115]. При рості температури, найімовірніша швидкість частинки рівна нулю, аж до раптового стрибка при певній температурі ( $T_2$ ), а потім продовжує неперервно рости. Якщо

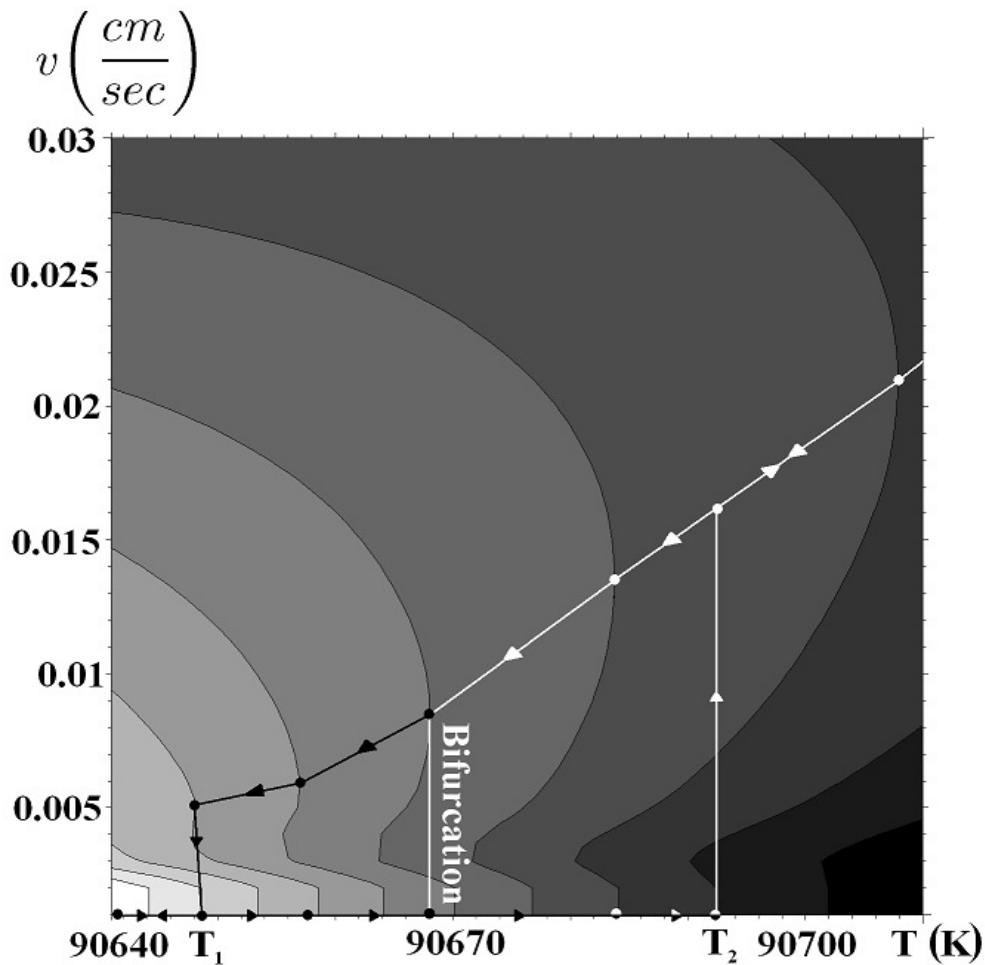


Рис. 4.4: Залежність функції розподілу імовірності пилінки від  $v$  і  $T$  (яскравість графіка пропорційна значенню функції розподілу імовірності).

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 впливає 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 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.

#### 4.7 Висновки до розділу 4

У даному розділі було досліджено поведінку порошинки в запиленій плазмі та виявлено зміни в її динаміці, викликані флуктуаціями кількості іонів та електронів, що стікають на порошинку, при сталому загальному заряді частинки.

**Параграф 4.2** присвячено загальному огляду проблем запорошеної плазми та постановці задачі для розділу 4.

Розв'язок поставленої задачі передбачає використання доволі специфічного математичного апарату — стохастичних диференціальних рівнянь. Тож **параграф 4.3** надає всю необхідну інформацію щодо методів, які будуть надалі застосовуватися.

Аналітичні розрахунки було виконано в **параграфі 4.4**. Зокрема, отримано вираз для функції розподілу ймовірності для швидкості порошинки в плазмовому середовищі. Отримані результати свідчать про значний вплив флуктуацій стоку зарядів на динамічну поведінку пилінки. Також було виявлено, що вплив флуктуацій сумарного заряду пилової частинки на вид її функції розподілу імовірності для швидкості може розглядатися вже як поправка вищого порядку поряд з впливом флуктуацій стоків.

Оскільки отримані результати надзвичайно складні в аналітичному представленні, то для їх ілюстрації доводиться застосовувати особливі чисельні методи. У **параграфі 4.5** розроблено покращений алгоритм розрахунку функції розподілу імовірності для швидкості.

Результати чисельного моделювання представлено у **параграфі 4.6**. Моделюючи різні умови в запорошеній плазмі, було передбачено існування гістерезису для найбільш імовірної швидкості пилової частинки в системі, а також отримано вигляд відповідної петлі гістерезису. Представлені резуль-

тати дозволяють експериментально перевірити існування вказаних ефектів.

## 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 темпера-

тури; 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 за-порошеній 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 ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ**

- [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*.
- [9] Bilotsky, Y. (2013, December). On calculation of lattice energy in spatially

- confined domains. *Advances in Materials Science and Applications 2*, 127–137.
- [10] Bilotsky, Y. and M. Gasik (2015). A new approach for modelling lattice energy in finite crystal domains. In *Journal of Physics: Conference Series*, Volume 633, pp. 012014. IOP Publishing.
- [11] Brooks, B. R., R. E. Brucoleri, and B. D. Olafson (1983). States, dj; swaminathan, s.; karplus, m. *J. comput. Chem 4*(2), 187–217.
- [12] Darden, T., D. York, and L. Pedersen (1993). Particle mesh ewald: An  $n \log(n)$  method for ewald sums in large systems. *The Journal of chemical physics 98*(12), 10089–10092.
- [13] Nijboer, B. and F. De Wette (1957). On the calculation of lattice sums. *Physica 23*(1-5), 309–321.
- [14] Kolafa, J. and J. W. Perram (1992). Cutoff errors in the ewald summation formulae for point charge systems. *Molecular Simulation 9*(5), 351–368.
- [15] Perram, J. W., H. G. Petersen, and S. W. De Leeuw (1988). An algorithm for the simulation of condensed matter which grows as the  $3/2$  power of the number of particles. *Molecular Physics 65*(4), 875–893.
- [16] Rycerz, Z. and P. Jacobs (1992). Ewald summation in the molecular dynamics simulation of large ionic systems: the cohesive energy. *Molecular simulation 8*(3-5), 197–213.
- [17] Heyes, D. and W. Smith (1987). Information quarterly for computer simulation of condensed phases. *Informal Newsletter 25*, 57.
- [18] York, D. and W. Yang (1994). The fast fourier poisson method for calculating ewald sums. *The Journal of Chemical Physics 101*(4), 3298–3300.
- [19] Fortov, V., A. Ivlev, S. Khrapak, A. Khrapak, and G. Morfill (2005). Complex (dusty) plasmas: Current status, open issues, perspectives. *Physics Reports 421*(1–2), 1–103.
- [20] Löwen, H. (1994). Melting, freezing and colloidal suspensions. *Physics Reports 237*(5), 249–324.

- [21] Morfill, G., H. Thomas, U. Konopka, and M. Zuzic (1999). The plasma condensation: Liquid and crystalline plasmas. *Physics of Plasmas (1994-present)* 6(5), 1769–1780.
- [22] Helfand, E. and F. H. Stillinger Jr (1968). Critical solution behavior in a binary mixture of gaussian molecules. ii. *The Journal of Chemical Physics* 49(3), 1232–1242.
- [23] Lev, B. I. and A. G. Zagorodny (2009). Structure formation in system of brownian particles in dusty plasma. *Phys. Lett.* 373(12-13), 1101–1104.
- [24] Thomas, H., G. Morfill, V. Demmel, J. Goree, B. Feuerbacher, and D. Möhlmann (1994). Plasma crystal: Coulomb crystallization in a dusty plasma. *Physical Review Letters* 73(5), 652.
- [25] Chu, J. and I. Lin (1994). Direct observation of coulomb crystals and liquids in strongly coupled dusty plasmas. *Physical review letters* 72(25), 4009.
- [26] Vladimirov, S., S. Khrapak, M. Chaudhuri, and G. Morfill (2008). Superfluidlike motion of an absorbing body in a collisional plasma. *Physical review letters* 100(5), 055002.
- [27] Ikezi, H. (1986). Coulomb solid of small particles in plasmas. *Physics of Fluids (1958-1988)* 29(6), 1764–1766.
- [28] Melzer, A., A. Homann, and A. Piel (1996, March). Experimental investigation of the melting transition of the plasma crystal. *Phys.Rev.E* 53(3), 2757–2766.
- [29] Sitenko, A. G., A. G. Zagorodny, and V. N. Tsytovich (2005, September). Fluctuation phenomena in dusty plasmas. *AIP Conf. Proc.* 345(1), 311–318.
- [30] Brazovskii, S. (1975). Phase transition of an isotropic system to an inhomogeneous state. *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* 68, 175–185.
- [31] Lev, B. and H. Yokoyama (2003). Selection of states and fluctuation under the first order phase transitions. *International Journal of Modern Physics B* 17(27), 4913–4933.



- [32] Totsuji, H., T. Kishimoto, and C. Totsuji (1997). Structure of confined yukawa system (dusty plasma). *Physical review letters* 78(16), 3113.
- [33] Crocker, J. C. and D. G. Grier (1996). When like charges attract: the effects of geometrical confinement on long-range colloidal interactions. *Physical review letters* 77(9), 1897.
- [34] Aveyard, R., B. Binks, J. Clint, P. Fletcher, T. Horozov, B. Neumann, V. Paunov, J. Annesley, S. Botchway, D. Nees, et al. (2002). Measurement of long-range repulsive forces between charged particles at an oil-water interface. *Physical review letters* 88(24), 246102.
- [35] Netz, R. R. (1999). Debye-hückel theory for interfacial geometries. *Physical Review E* 60(3), 3174.
- [36] Ruelle, D. (1969). *Statistical Mechanics: Rigorous Results*. World Scientific.
- [37] Ishihara, A. (1971). *Statistical Physics*. Academic Press, New York.
- [38] Huang, K. (1963). *Statistical Mechanics*. John Wiley, New York.
- [39] Baxter, R. J. (2007). *Exactly solved models in statistical mechanics*. Courier Corporation.
- [40] Ortner, J. (1999). Equation of states for classical coulomb systems: Use of the hubbard-schofield approach. *Physical Review E* 59(6), 6312.
- [41] Ciach, A. (2008). Universal sequence of ordered structures obtained from mesoscopic description of self-assembly. *Physical Review E* 78(6), 061505.
- [42] Lev, B. and A. Zagorodny (2011). Statistical description of coulomb-like systems. *Physical Review E* 84(6), 061115.
- [43] Bilotsky, Y. and B. Lev (1984). Statistical description of coulomb-like systems. *Teor. Math. Fiz.* 60(120).
- [44] Lev, B. I. and A. Y. Zhugaevych (1998, Jun). Statistical description of model systems of interacting particles and phase transitions accompanied by cluster formation. *Phys. Rev. E* 57, 6460–6469.
- [45] Stratonovich, R. (1957). On a method of calculating quantum distribution functions. In *Soviet Physics Doklady*, Volume 2, pp. 416.

- [46] Hubbard, J. (1959, Jul). Calculation of partition functions. *Phys. Rev. Lett.* 3, 77–78.
- [47] Edwards, S. F. and A. Lennard (1962). Exact statistical mechanics of a one-dimensional system with coulomb forces. ii. the method of functional integration. *J. Math. Phys.* 3, 778.
- [48] Samuel, S. (1978, Sep). Grand partition function in field theory with applications to sine-gordon field theory. *Phys. Rev. D* 18, 1916–1932.
- [49] Gradshteyn, I. and I. Ryzhik (1980). *Tables of Integrals, Series, and Products*. Academic Press, New York.
- [50] Bateman, H., A. Erdélyi, W. Magnus, F. Oberhettinger, and F. G. Tricomi (1981). *Higher transcendental functions*, Volume 2. Malabar, Krieger.
- [51] Edelman, V. (1980). Levitating electrons. *Uspekhi Fizicheskikh Nauk* 130(4), 675–706.
- [52] Koutsoumpos, S. (2010). *Surface State Electron Dynamics on Deformed Liquid Helium Films*. Ph. D. thesis, Konstanz.
- [53] Haque, M., I. Paul, and S. Pankov (2003). Structural transition of a wigner crystal on a liquid substrate. *Physical Review B* 68(4), 045427.
- [54] Bellman, R., R. E. Bellman, R. E. Bellman, and R. E. Bellman (1970). *Introduction to matrix analysis*, Volume 960. SIAM.
- [55] Bellman, R. (2013). *A brief introduction to theta functions*. Courier Corporation.
- [56] Abramowitz, M. and I. A. Stegun (1964). *Handbook of mathematical functions: with formulas, graphs, and mathematical tables*. Number 55. Courier Corporation.
- [57] Cole, M. W. (1970). Properties of image-potential-induced surface states of insulators. *Phys. Rev. B* 2, 4239.
- [58] Cole, M. W. and M. H. Cohen (1969). Image-potential-induced surface bands in insulators. *Phys. Rev. Lett.* 23, 1238.

- [59] Shikin, V. B. (1970). Motion of helium ions near a vapour-liquid surface. *Sov. Phys. JETP* 31, 939.
- [60] Williams, F. I. B., R. S. Crandall, and A. H. Willis (1971). Surface states of electrons on liquid helium. *Phys. Rev. Lett.* 26, 7.
- [61] Wigner (1934). On the interaction of electrons in metals. *Phys. Rev.* 46, 1002.
- [62] Grimes, C. and G. Adams (1976). Observation of two-dimensional plasmons and electron-ripplon scattering in a sheet of electrons on liquid helium. *Physical Review Letters* 36(3), 145.
- [63] Platzman, P. M. and M. I. Dykman (1999). Quantum computing with electrons floating on liquid helium. *Science* 284, 1967.
- [64] Zinn-Justin, J. (1996). *Quantum field theory and critical phenomena*. Clarendon Press.
- [65] Thouless, D. J. (1974). Electrons in disordered systems and the theory of localization. *Phys. Rep.* 13, 93.
- [66] Datta, S. (1995). *Electronic transport in mesoscopic systems*. Cambridge University Press.
- [67] Monarkha, Y. P. and K. Kono (2004). *Two-dimensional Coulomb liquids and solids*. Springer.
- [68] T. Ando, A. Fowler, and F. Stern (1982). Electronic properties of two-dimensional systems. *Rev. Mod. Phys.* 54, 437.
- [69] Platzman, P. M. and H. Fukuyama (1974). Phase diagram of the two-dimensional electron liquid. *Phys. Rev. B* 10, 3150.
- [70] Kosterlitz, J. M. and D. J. Thouless (1973). Ordering, metastability and phase transition in two-dimensional systems. *J. Phys. C* (6), 1181.
- [71] Gor'kov, L. and D. Chernikova (1973). Concerning the structure of a charged surface of liquid helium. *Soviet Journal of Experimental and Theoretical Physics Letters* 18, 68.

- [72] Bateman, H., A. Erdélyi, W. Magnus, F. Oberhettinger, and F. G. Tricomi (1953). *Higher transcendental functions*, Volume 1. McGraw-Hill, New York.
- [73] Lambert, D. K. (1979). *Electrons on the surface of liquid helium*. Ph. D. thesis, Lawrence Berkeley Laboratory.
- [74] Skachko, I. (2006). *Phase diagram of a 2-dimensional electron system on the surface of liquid helium*. Ph. D. thesis, Rutgers, The State University of New Jersey.
- [75] Kantorovich, L. and I. Tupitsyn (1999). Coulomb potential inside a large finite crystal. *Journal of Physics: Condensed Matter* 11(32), 6159.
- [76] Buhler, J. and R. E. Crandall (1990). On the convergence problem for lattice sums. *Journal of Physics A: Mathematical and General* 23(12), 2523.
- [77] Borwein, D., J. Borwein, R. Shail, and I. Zucker (1988). Energy of static electron lattices. *Journal of Physics A: Mathematical and General* 21(7), 1519.
- [78] Klumov, B., G. Joyce, C. R ath, P. Huber, H. Thomas, G. Morfill, V. Molotkov, and V. Fortov (2010). Structural properties of 3d complex plasmas under microgravity conditions. *EPL (Europhysics Letters)* 92(1), 15003.
- [79] Klumov, B. A. and G. Morfill (2009). Structural properties of complex (dusty) plasma upon crystallization and melting. *JETP letters* 90(6), 444–448.
- [80] Melzer, A., T. Trottenberg, and A. Piel (1994). Experimental determination of the charge on dust particles forming coulomb lattices. *Physics Letters A* 191(3), 301–308.
- [81] Filippov, A. V., A. G. Zagorodny, A. F. Pal', and A. N. Starostin (2005). Screening of a grain in plasma with the external source of ionization. *JETP Lett.* 81, 180–185.
- [82] Zagorodny, A. G., A. V. Filippov, A. Momot, A. F. Pal', and A. Starostin (2006, 12). Effective grain potential in a plasma with external sources of ionization. *Problems of Atomic Science and Technology* (6), 99.

- [83] Filippov, A. V., A. G. Zagorodny, A. I. Momot, A. F. Pal', and A. N. Starostin (2007a, February). Charge screening in a plasma with an external ionization source. *JETP*. 104(1), 147–161.
- [84] Filippov, A. V., A. G. Zagorodny, A. I. Momot, A. F. Pal', and A. N. Starostin (2007b, December). Kinetic description of the screening of the charge of macroparticles in a nonequilibrium plasma. *JETP Lett.* 86(12), 761–766.
- [85] Khrapak, S. V., B. A. Klumov, and G. E. Morfill (2008, June). Electric potential around an absorbing body in plasmas: Effect of ion-neutral collisions. *Phys. Rev. Lett.* 100(22), 225003.
- [86] Chaudhuri, M., S. A. Khrapak, R. Kompaneets, and G. E. Morfill (2010). Shielding of a small charged particle in weakly ionized plasmas. *IEEE TRANSACTIONS ON PLASMA SCIENCES* 38, 818.
- [87] Khrapak, S. V., S. A. Zhdanov, A. V. Ivlev, and G. E. Morfill (2007). Drag force on an absorbing body in highly collisional plasmas. *J. Appl. Phys.* 101(3), 033307.
- [88] Vladimirov, S. V., S. A. Khrapak, M. Chaudhuri, and G. E. Morfill (2008, February). Superfluidlike motion of an absorbing body in a collisional plasma. *Phys. Rev. Lett.* 100(5), 055002.
- [89] Filippov, A. V., A. G. Zagorodny, A. F. Pal', et al. (2008, September). Screening of a moving charge in a nonequilibrium plasma. *JETP Lett.* 88(1), 24–30.
- [90] Filippov, A. V., A. G. Zagorodny, A. I. Momot, et al. (2009, March). Screening of moving charge in nonequilibrium plasma. *JETP* 108(3), 497–515.
- [91] Chaudhuri, M., S. A. Khrapak, and G. E. Morfill (2007). Electrostatic potential behind a macroparticle in a drifting collisional plasma: Effect of plasma absorption. *Phys. Plasmas* 14(2), 022102.
- [92] Chaudhuri, M., S. A. Khrapak, and G. E. Morfill (2008). Ion drag force on

- a small grain in highly collisional weakly anisotropic plasma: Effect of plasma production and loss mechanisms. *Phys. Plasmas* 15(5), 053703.
- [93] Khrapak, S. A., M. Chaudhuri, and G. E. Morfill (2009). Ion drag force in collisional plasmas. *IEEE TRANSACTIONS ON PLASMA SCIENCES* 37(4 PART 1), 487–493.
- [94] Zagorodny, A. G., A. V. Filippov, A. I. Momot, A. F. Pal', and A. N. Starostin (2007). Macroparticle screening in weakly ionized plasma. *Journal of Physical Studies* 11(2), 158–164.
- [95] Fortov, V. E., A. V. Ivlev, S. A. Khrapak, et al. (2005, December). Complex (dusty) plasmas: Current status, open issues, perspectives. *Phys. Rep.* 421(1-2), 1–103.
- [96] Quinn, R. A. and J. Goree (2000, March). Single-particle langevin model of particle temperature in dusty plasmas. *Phys. Rev. E* 61(3), 3033–3041.
- [97] Trigger, S. A. and A. G. Zagorodny (2004). Brownian motion of grains and negative friction. *Cond. Matter Phys.* 7(3(39)), 629–638.
- [98] Cui, C. and J. Goree (1994, April). Fluctuations of the charge on a dust grain in a plasma. *IEEE Trans. Plasma Sei.* 22(2), 151–158.
- [99] Sitenko, A. G., A. G. Zagorodny, Y. I. Chutov, et al. (1996). Statistical properties and relaxation of dusty plasmas. *Plasma Phys. Contr. Fusion* 38(12A), A105–A120.
- [100] Matsoukas, T. and M. Russel (1997, January). Fokker-planck description of particle charging in ionized gases. *Phys. Rev. E* 55(1), 991–994.
- [101] Tsyтович, V. N. and U. De Angelis (2002, June). Kinetic theory of dusty plasmas. iv. distribution and fluctuations of dust charges. *Phys. Plasmas* 9(6), 2497.
- [102] Shukla, P. K. and A. A. Mamun (2002). *Introduction to dusty Plasma Physics*. Institute of Physics Publishing.
- [103] Bystrenko, O., T. Bystrenko, and A. Zagorodny (2004, August). Charge

- fluctuations of a dust grain embedded in a weakly ionized gas. a brownian dynamics study. *Phys. Lett. A* 329(1-2), 83–87.
- [104] Zagorodny, A. G. (2005). Fluctuations in dusty plasmas: description and numerical simulation. *Ukr. J. Phys.* 50(2), 205–208.
- [105] Maiorov, S. A., S. V. Vladimirov, and N. F. Cramer (2002). Calculation of the grain charge fluctuations in a dusty plasma. *Plasma Phys. Rep.* 28(11), 946–952.
- [106] De Angelis, U. et al. (2006, December). Fluctuations in dusty plasmas. *Plasma Phys. Contr. Fusion* 48(12 B), B91–B97.
- [107] van Kampen, N. G. (1990). *Stochastic processes in physics and chemistry*. North-Holland, Amsterdam.
- [108] Horsthemke, W. and R. Lefever (1984). *Noise-induced transitions*. New York: Springer-Verlag.
- [109] Гихман, И. И. and Скороход, А. В. (1965). *Введение в теорию случайных процессов*. М.: “Мир”.
- [110] Феллер, В. (1964). *Введение в теорию вероятностей и ее приложения*. М.: “Мир”.
- [111] Тихонов, В. И. (1966). *Статистическая радиотехника*. М.: “Сов. Радио”.
- [112] Дуб, Дж. Л. (1956). *Вероятностные процессы*. М.: ИЛ.
- [113] Klimontovich, Y. L. (1995). *Theory of Open System*. Dordrecht: Kluwer A. Publication.
- [114] Арнольд, В. И. (1990). *Теория катастроф*. М.: “Наука”.
- [115] Poston, T. and I. Stuart (1978). *Catastrophe Theory and its Applications*. London: Pitman.

## Додаток А

**Список публікацій здобувача за темою дисертації та відомості про апробацію результатів дисертації**

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

- [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*.

Викладені результати представлялися на спільному семінарі відділів теорії та моделювання плазмових процесів та синергетики Інституту теоретичної фізики НАН України ім. М.М. Боголюбова (Київ, 2015), семінарі відділу синергетики Інституту теоретичної фізики НАН України ім. М.М. Боголюбова (Київ, 2017 р.), конференції молодих вчених “Сучасні проблеми теоретичної фізики” (Інститут теоретичної фізики НАН України ім. М.М. Боголюбова, Київ, 21–23 грудня 2010 р.), “Ізінгівських читаннях” (Інститут фізики конденсованих систем НАН України, Львів, 5–7 травня 2015 р.), міжнародній конференції “EMN Melbourne meeting” (Мельбурн, Австралія, 10–14 жовтня 2016 р.).