

МРНТИ 29.27.35

<https://doi.org/10.26577/JPEOS20261283>

С.К. Коданова^{1,2} , Н.Х. Бастыкова^{1,2*} ,
А.И. Кенжебекова^{1,2} , А.Е. Удербаяева^{1,2} 

¹Институт прикладных наук и информационных технологий, Алматы, Казахстан

²КазНУ имени аль-Фараби, Алматы, Казахстан

*e-mail: bastykova_nuriya@physics.kz

ИССЛЕДОВАНИЯ ТРАНСПОРТНЫХ СВОЙСТВ УГЛЕРОДНЫХ НАНОЧАСТИЦ С ВЫСОКОЙ КОНЦЕНТРАЦИЕЙ В НИЗКОТЕМПЕРАТУРНОЙ ПЛАЗМЕ

В данной работе исследуются транспортные свойства углеродных наночастиц в низкотемпературной плазме с учетом флуктуаций их электрического заряда. Для описания статистических характеристик заряда используется усеченное нормальное распределение, параметры которого определяются методом Монте-Карло на основе моделирования элементарных актов зарядообмена. Динамика системы моделируется методом молекулярной динамики в рамках двумерной сильно коррелированной плазмы с Юкавским потенциалом взаимодействия, что позволяет адекватно учитывать экранирование кулоновских взаимодействий в плазменной среде. Особое внимание уделяется влиянию флуктуаций заряда на транспортные свойства системы при различных значениях параметра связи. Коэффициенты самодиффузии и вязкости рассчитываются с использованием соотношений Эйнштейна и Грина-Кубо на основе анализа среднеквадратичного смещения и временных автокорреляционных функций. Показано, что учет зарядовых флуктуаций приводит к существенным изменениям величин транспортных коэффициентов и их зависимости от параметра связи, особенно в области сильной корреляции. Установлено, что флуктуации заряда могут как усиливать, так и ослаблять процессы переноса в зависимости от статистических характеристик распределения заряда. Полученные результаты подчеркивают важность учета зарядовой динамики при моделировании плотных плазменных систем и могут быть использованы для более точной интерпретации экспериментальных данных в комплексной плазме, а также для уточнения существующих теоретических моделей транспортных процессов.

Ключевые слова: флуктуация заряда, наночастицы, диффузия, вязкость, низкотемпературная плазма.

S.K. Kodanova^{1,2}, N.Kh. Bastykova^{1,2*},
A.I. Kenzhebekova^{1,2}, A.Ye. Uderbayeva^{1,2}

¹Institute of Applied Sciences and Information Technology, Almaty, Kazakhstan

²Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan

*e-mail: bastykova_nuriya@physics.kz

Research of transport properties of carbon nanoparticles with high concentration in low-temperature plasma

In this work, the transport properties of carbon nanoparticles in a low-temperature plasma are investigated with account for fluctuations of their electric charge. The statistical characteristics of the particle charge are described using a truncated normal distribution, the parameters of which are determined via a Monte Carlo approach based on the simulation of elementary charge-exchange processes between nanoparticles and the plasma environment. The system dynamics are modeled using molecular dynamics within the framework of a two-dimensional strongly coupled plasma with a Yukawa interaction potential, which allows for an accurate description of screened Coulomb interactions. Particular attention is paid to the influence of charge fluctuations on the transport properties of the system at different values of the coupling parameter. The self-diffusion and shear viscosity coefficients are evaluated using the Einstein and Green-Kubo relations based on the analysis of the mean-squared displacement and time autocorrelation functions. It is shown that accounting for charge fluctuations leads to significant modifications of the transport coefficients and their dependence on the coupling parameter, especially in the strongly coupled regime. It is found that charge fluctuations may either enhance or suppress transport processes depending on the statistical properties of the charge distribution. The obtained results highlight the importance of incorporating charge dynamics in simulations of dense plasma systems and can

be used for a more accurate interpretation of experimental data in complex plasmas, as well as for the development of improved theoretical models of transport phenomena.

Keywords: charge fluctuation, nanoparticles, diffusion, viscosity, low temperature plasma.

С.К. Коданова^{1,2}, Н.Х. Бастыкова^{1,2*},
А.И. Кенжебекова^{1,2}, А.Е. Үдербаева^{1,2}

¹Қолданбалы ғылымдар және ақпараттық технологиялар институты, Алматы, Қазақстан

²Әл-Фараби атындағы ҚазҰУ, Алматы, Қазақстан

*e-mail: bastykova_nuriya@physics.kz

Төмен температуралы плазмадағы жоғары концентрациясы бар көміртекті нанобөлшектердің тасымалдау қасиеттерін зерттеу

Бұл жұмыста төмен температуралы плазмадағы көміртекті нанобөлшектерінің тасымалдау қасиеттері олардың электр зарядының флуктуацияларын ескере отырып зерттеледі. Бөлшек зарядының статистикалық сипаттамалары қалыпты үлестіру арқылы сипатталады, оның параметрлері нанобөлшектер мен плазмалық орта арасындағы элементар заряд алмасу процестерін модельдеуге негізделген Монте-Карло әдісімен анықталады. Жүйенің динамикасы экрандалған кулондық өзара әрекеттесулерді дұрыс ескеруге мүмкіндік беретін Юкава потенциалы бар екіөлшемді күшті байланысқан плазма шеңберінде молекулалық динамика әдісімен модельденеді. Өртүрлі байланыс параметрі мәндерінде заряд флуктуацияларының жүйенің тасымалдау қасиеттеріне әсеріне ерекше назар аударылады. Өзіндік диффузия және тұтқырлық коэффициенттері орташа квадраттық ығысу мен уақыттық автокорреляциялық функцияларды талдау негізінде Эйнштейн және Грин-Кубо қатынастары арқылы анықталады. Заряд флуктуацияларын ескеру тасымалдау коэффициенттерінің мәндеріне және олардың байланыс параметріне тәуелділігіне, әсіресе күшті корреляция аймағында, елеулі әсер ететіні көрсетілді. Заряд флуктуациялары олардың статистикалық сипаттамаларына байланысты тасымалдау процестерін күшейтуі де, әлсіретуі де мүмкін екені анықталды. Алынған нәтижелер тығыз плазмалық жүйелерді модельдеу кезінде заряд динамикасын ескерудің маңыздылығын көрсетеді және күрделі плазмадағы эксперименттік деректерді дәл түсіндіру үшін, сондай-ақ тасымалдау процестерінің теориялық модельдерін жетілдіру үшін қолданылуы мүмкін.

Түйін сөздер: заряд флуктуациясы, нанобөлшектер, диффузия, тұтқырлық, төмен температуралы плазма.

Введение

В лабораторных условиях наночастицы эффективно формируются в низкотемпературной плазме, содержащей углеродные примеси. Образующиеся частицы, находясь в плазменной среде, приобретают электрический заряд и, в свою очередь, начинают существенно влиять на свойства самой плазмы. Данный эффект усиливается по мере роста размеров и концентрации наночастиц. В ряде экспериментов показано, что в низкотемпературной плазме концентрация наночастиц может достигать значений, сопоставимых с концентрациями электронов и ионов (Petersen et al. 2022). Это обстоятельство определяет актуальность исследования транспортных и структурных характеристик химически активной плазмы, в которой протекают процессы интенсивного образования наночастиц.

Экспериментальные исследования, в частности синтез наночастиц в плазме высокочастотного ёмкостного разряда, демонстрируют, что присутствие наночастиц оказывает заметное

влияние на оптические свойства плазмы, включая интенсивность её свечения, что имеет практическое значение, например, для осветительных устройств. Для корректного описания таких явлений, как светогашение, фотоэмиссия электронов и химическая активность среды, необходимо учитывать не только химический состав частиц, но и их зарядовое состояние и размер. Эти параметры определяются процессами коагуляции, а также относительной динамикой частиц. Согласно экспериментальным данным, плотность наночастиц может достигать величин порядка 10^9 – 10^{11} см⁻³ (Orazbayev, S., et al., 2021), что сопоставимо с плотностью плазменных компонентов. Таким образом, исследование свойств плотной пылевой плазмы представляет собой важную и актуальную научную задачу.

В плазменной среде нано- и микрочастицы приобретают заряд вследствие захвата электронов и ионов на своей поверхности. Поскольку процессы прихода заряженных частиц носят стохастический характер, заряд наночастицы не является постоянным, а флуктуирует во времени

относительно некоторого равновесного значения. Этот эффект особенно значим для наночастиц, для которых средний заряд мал, а вклад отдельных актов зарядки становится существенным. Флуктуации заряда приводят к временным изменениям межчастичных электростатических сил и, как следствие, оказывают влияние на структурные и транспортные свойства системы.

В условиях высокой концентрации наночастиц усиливается межчастичное взаимодействие, что приводит к формированию коррелированного состояния системы. В таких режимах динамика частиц определяется сложными коллективными эффектами и многотельными взаимодействиями, что существенно затрудняет аналитическое описание. В связи с этим для исследования подобных систем широко применяются численные методы, в частности метод Монте-Карло, используемый для моделирования стохастических процессов зарядки, и метод молекулярной динамики, позволяющий анализировать движение частиц и их корреляционные свойства.

На сегодняшний день существует значительное количество работ, посвящённых исследованию транспортных характеристик систем заряженных частиц, таких как коэффициент самодиффузии (Ott & Bonitz, 2009; Ott et al., 2008), сдвиговая вязкость (Saigo. & Hamaguchi, 2002; Donkó et al., 2006; Donkó & Hartmann, 2008) и теплопроводность (Donkó & Hartmann, 2004; Donkó et al., 2009). В физике сильно связанных систем изучение транспортных свойств играет ключевую роль для понимания их микроскопической динамики и макроскопического поведения. Одной из наиболее универсальных моделей является система Юкавы, в которой частицы взаимодействуют посредством экранированного кулоновского потенциала. Такие системы применимы для описания широкого класса физических объектов, включая пылевую плазму, коллоидные суспензии и другие системы мягкой материи (Bastykova et al., 2025). Возможность варьирования параметров связи и экранирования делает их удобным инструментом для изучения процессов переноса в условиях сильных межчастичных корреляций.

Особый интерес представляют двумерные системы Юкавы, в которых снижение размерности приводит к усилению коллективных

эффектов, появлению долговременных корреляций и отклонениям от классических теорий переноса (Donkó et al., 2002; Hartmann et al. 2005; Donkó et al., 2008; Djienbekov et al., 2022). Транспортные коэффициенты, такие как коэффициент самодиффузии и сдвиговая вязкость, являются фундаментальными характеристиками, определяющими перенос массы и импульса.

В настоящей работе флуктуации заряда наночастиц моделируются с использованием метода Монте-Карло, позволяющего воспроизвести стохастическую природу процессов зарядования и временную эволюцию заряда частиц. На основе данного подхода определяются распределение вероятностей заряда, его среднее значение и амплитуда флуктуаций. Далее метод молекулярной динамики применяется для исследования транспортных свойств системы наночастиц с учётом зарядовых флуктуаций. Расчёт транспортных коэффициентов осуществляется с использованием автокорреляционных функций скоростей в рамках теории линейного отклика Грина–Кубо, а также на основе анализа среднеквадратичного смещения частиц.

Распределение нано-размерных частиц по зарядам

Зарядовые флуктуации описываются с использованием различных статистических моделей. Одной из таких моделей является нормальное распределение и его ограниченная форма – усечённое нормальное распределение. Теоретический анализ процесса зарядки показывает, что в стационарном состоянии заряд флуктуирует вокруг равновесного значения, определяемого балансом электронных и ионных потоков (Cui & Goree, 1994). Решения кинетических уравнений для вероятностного распределения заряда демонстрируют, что при типичных параметрах низкотемпературной плазмы распределение заряда близко к нормальному (Matsoukas & Russell, 1995; Sodha et al., 2010). Подобные результаты также получены в более поздних исследованиях, где показано, что стационарные флуктуации заряда могут быть описаны гауссовским распределением вокруг среднего значения заряда (Sheridan & Hayes, 2011).

Использование усечённого нормального распределения в данной работе позволяет учитывать физические ограничения на возможные значения заряда частицы и корректно описывать

его статистические отклонения от равновесного значения. Для описания стохастической природы процессов зарядки вводится безразмерный коэффициент эффективного заряда

$$\alpha = \frac{Q}{Q_0}, \quad (1.1)$$

где Q – мгновенное значение заряда частицы, Q_0 – равновесный заряд частицы при стационарных условиях плазмы. В нашем случае, значение Q_0 получен из данных моделирования Монте-Карло.

Рассмотрим распределение безразмерного эффективного зарядового значения α в диапазоне между $\alpha_{\min}$ и $\alpha_{\max}$ в соответствии со следующим усеченным нормальным распределением

$$F(\alpha, \alpha_{\min}, \alpha_{\max}, \sigma) = A(\alpha, \alpha_{\min}, \alpha_{\max}, \sigma) f(\alpha, \sigma) \quad (1.2)$$

где $f(\alpha, \sigma)$ – нормальное распределение,

$$f(\alpha, \sigma) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(\alpha - \mu)^2}{2\sigma^2}\right), \quad (1.3)$$

здесь μ – среднее значение распределения, σ – стандартное отклонение, характеризующее амплитуду флуктуаций заряда. Поскольку физически заряд частицы не может изменяться произвольно, распределение ограничивается интервалом $\alpha_{\min} \leq \alpha \leq \alpha_{\max}$ и находим коэффициент $A(\alpha_{\min}, \alpha_{\max}, \sigma)$ из условия нормировки

$$A(\alpha_{\min}, \alpha_{\max}, \sigma) \cdot \int_{\alpha_{\min}}^{\alpha_{\max}} f(\alpha, \sigma) d\alpha = 1. \quad (1.4)$$

Среднее значение коэффициента заряда определяется выражением

$$\langle \alpha \rangle = \int_{\alpha_{\min}}^{\alpha_{\max}} F(\alpha, \sigma) d\alpha. \quad (1.5)$$

Учёт зарядовых флуктуаций имеет важное значение для корректного описания структурных и транспортных свойств низкотемпературной плазмы. На рисунке 1 представлены распределения вероятности $f(\alpha, \sigma)$ безразмерного заряда наночастицы в плазме при параметрах неидеальности $\Gamma=50$ и экранировки $\kappa=1$. На рисунке 1, а) показано распределение при малом значении параметра флуктуаций $\sigma=0.0001$. В случае малого значения параметра флуктуаций ($\sigma = 0.0001$, рис. 1а) распределение имеет резко выраженный максимум вблизи $\alpha \approx 1$ и характеризуется крайне малой шириной. Это указывает на высокую степень стабилизации заряда частицы, который определяется стационарным балансом электронного и ионного токов. С увеличением параметра флуктуаций ($\sigma = 0.2, 0.4, 0.6$, рис. 1б) наблюдается последовательное уширение распределения и снижение высоты его максимума. Таким образом, рост параметра σ приводит к усилению стохастической составляющей процесса зарядки, что проявляется в увеличении разброса значений заряда при сохранении его стационарного среднего значения.

На рисунке 2 представлены зависимости безразмерного заряда наночастицы α от параметра ω при фиксированных значениях параметров плазмы $\Gamma=50$ и $\kappa=1$ для различных значений параметра флуктуаций σ . При $\sigma = 0.0001$ наблюдаются малые колебания заряда вблизи стационарного значения $\alpha \approx 1$. Флуктуации имеют регулярный характер и малую амплитуду, что указывает на практически детерминированное поведение системы. С увеличением параметра флуктуаций до $\sigma = 0.2$ колебания становятся более выраженными, возрастает разброс значений α , а структура сигнала приобретает стохастический характер. При $\sigma = 0.4$ и $\sigma = 0.6$ наблюдается дальнейшее усиление флуктуаций, т.е. амплитуда колебаний существенно возрастает, распределение значений заряда расширяется, а временная зависимость приобретает ярко выраженный шумовой характер. Это согласуется с предыдущим анализом функции распределения, чем больше дисперсия, тем шире распределение зарядовых состояний.

Рисунок 1

Распределение вероятности безразмерного заряда наночастицы $f(\alpha, \sigma)$ и $\kappa=1$:

а) $\sigma = 0.0001$; б) $\sigma = 0.2, 0.4, 0.6$

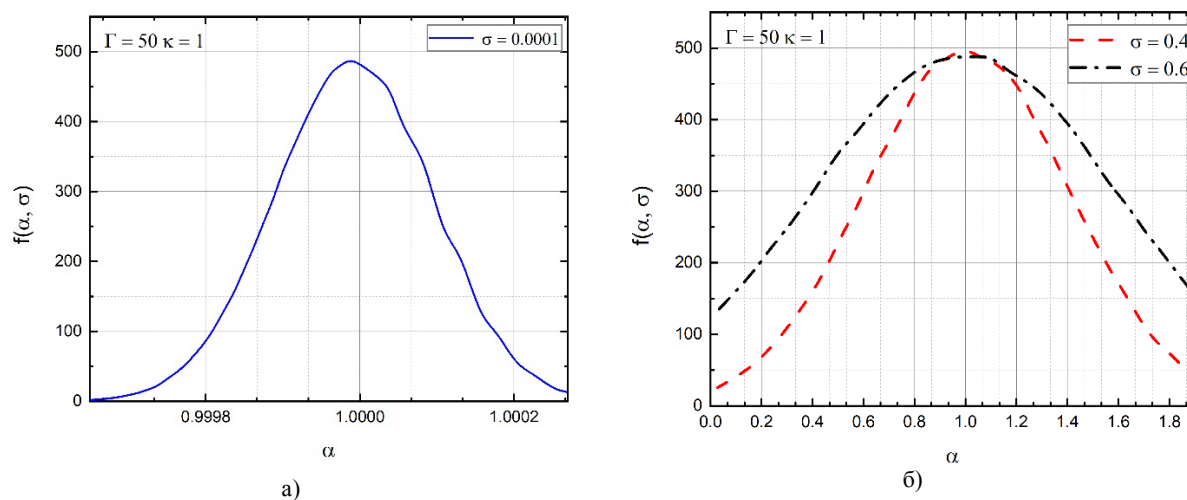
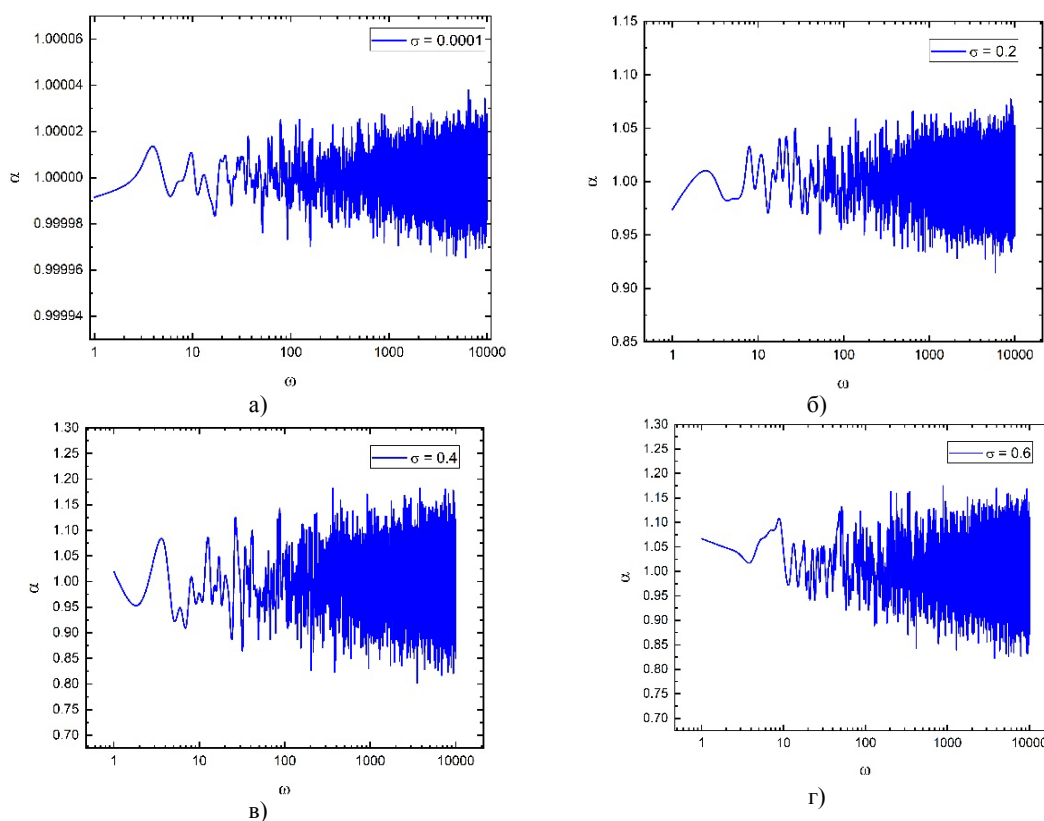


Рисунок 2

Зависимость безразмерного заряда наночастицы α от параметра ω при $\Gamma=50$ и $\kappa=1$ для различных значений параметра флуктуаций: а) $\sigma = 0.0001$, б) $\sigma = 0.2$, в) $\sigma = 0.4$, г) $\sigma = 0.6$



Таким образом, с увеличением параметра σ , характеризующего интенсивность случайных процессов зарядки, происходит рост эффективной «диффузии» в пространстве зарядов. Далее транспортные свойства системы определяются с учётом зарядовых флуктуаций и межчастичного взаимодействия на основе метода равновесной молекулярной динамики (EMD).

Расчет коэффициента вязкости и диффузии углеродных наночастиц

Для определения транспортных характеристик системы использовался метод равновесной молекулярной динамики (EMD). Сдвиговая вязкость рассчитывалась на основе соотношения Грина–Кубо, связывающего макроскопический коэффициент вязкости с временной автокорреляционной функцией касательных компонент тензора напряжений.

Соотношение Грина–Кубо для сдвиговой вязкости в двумерной системе имеет вид:

$$\eta = \frac{1}{Sk_B T} \int_0^\infty C(t) dt, \quad C(t) = \langle P^{xy}(t) P^{xy}(0) \rangle, \quad (6)$$

где S – площадь моделируемой системы, $C(t)$ представляет собой автокорреляционную функцию напряжения (SACF) частиц, а P^{xy} – недиагональный элемент тензора давления:

$$P^{xy} = \sum_{i=1}^N \left[m_i v_{ix} v_{iy} - \frac{1}{2} \sum_{i \neq j}^N \frac{x_{ij} y_{ij}}{r_{ij}} \frac{\partial U(r_{ij})}{\partial r_{ij}} \right], \quad (7)$$

где N – число частиц, а $r_{ij} = |r_i - r_j|$.

Коэффициент диффузии в молекулярно-динамических моделях обычно определяется с использованием среднеквадратичного смещения частиц (MSD) или формулы Грина–Кубо, связывающей диффузию с автокорреляционной функцией скорости. Однако на практике в молекулярно-динамических расчётах чаще используется альтернативный подход, основанный на анализе среднеквадратичного смещения частиц (MSD).

Первый метод основан на соотношении Эйнштейна для диффузии, которое связывает коэффициент диффузии со средним квадратом смещения частиц во времени:

$$D_\alpha = \frac{1}{4} \frac{\partial \text{MSD}(t)}{\partial t^\alpha} \quad (8)$$

где D_α – коэффициент диффузии, $\text{MSD}(t)$ – среднеквадратичное смещение частиц, которое вычисляется по следующей формуле:

$$\text{MSD}(t) = \langle |r(t) - r(0)|^2 \rangle \quad (9)$$

$r(t)$ – радиус-вектор частицы в момент времени t , $\langle \dots \rangle$ – усреднение по ансамблю частиц или по времени.

В целом, MSD обладает низкой зависимостью от времени

$$\text{MSD}(t) \propto t^\alpha, \quad (10)$$

где α – показатель диффузии.

На коротких временных масштабах среднеквадратичное смещение (MSD) демонстрирует квадратичную зависимость от времени, $\text{MSD}(t) \propto t^2$, что соответствует баллистическому режиму. На больших временных масштабах, формально определяемых как $t \rightarrow \infty$, MSD масштабируется линейно со временем, $\text{MSD}(t) \propto t$, что характерно для нормальной диффузии. Однако в экспериментах с двумерной пылевой плазмой наблюдение строго линейной зависимости MSD от времени представляет собой сложную задачу из-за конечного размера кластера пылевых частиц и ограниченной продолжительности измерений.

Между баллистическим и нормальным режимами диффузии на промежуточных временных масштабах может наблюдаться аномальная диффузия, характеризующаяся степенной зависимостью $\text{MSD}(t) \propto t^\alpha$, где $1 < \alpha < 2$ соответствует сверхдиффузии, а $\alpha < 1$ – субдиффузии (Ott, T., et al., 2008). Для характеристики MSD в режиме аномальной диффузии вводится обобщенный коэффициент диффузии D_α , представленный формулой $\text{MSD}(t) = 4D_\alpha t^\alpha + b$.

Результаты и обсуждение

Численное исследование проводилось с использованием равновесных молекулярно-динамических симуляций двумерной системы заряженных частиц. Частицы были ограничены плоской областью моделирования с периоди-

ческими граничными условиями, приложенными вдоль обоих пространственных направлений. Размер вычислительной области определялся соотношением $L/a = \sqrt{\pi N}$, где a обозначает характерное межчастичное расстояние, а N – общее число частиц. Все симуляции проводились с $N = 10\,000$ частицами, что обеспечивает достаточную статистическую точность и подавляет эффекты конечного размера. Для того, чтобы считать все величины размерности времени используется характерное значение времени для плазменных сред – обратное значение плазменной частоты $1/\omega_p = \sqrt{Q^2/(2\pi\epsilon_0 m a^3)}$, где Q – заряд частицы, ϵ_0 – диэлектрическая проницаемость, а m – масса частицы, в данной работе все частицы имеют одинаковую массу равной безразмерной еди-

нице. Все величины размерности энергии обезразмерены на значение кулоновского потенциала, на расстоянии среднего межчастичного расстояния a , то есть $\epsilon = \frac{Q^2}{4\pi\epsilon_0 a}$.

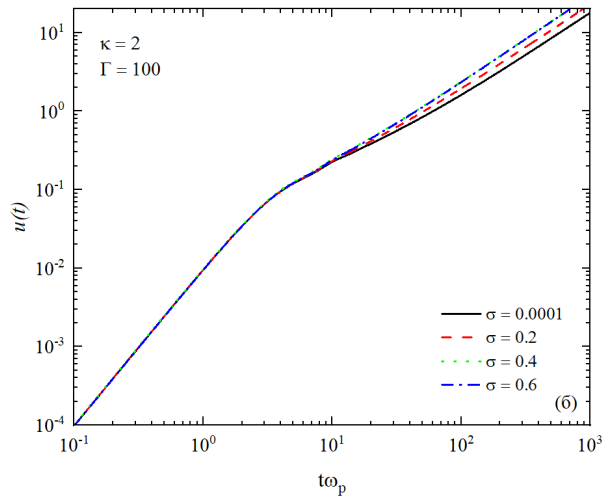
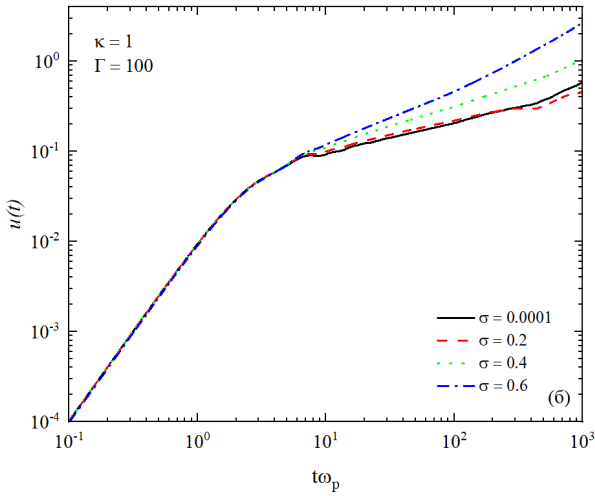
Любую статистическую систему можно охарактеризовать двумя величинами – температурой и плотностью. В данной модели температура определяется за счет параметра связи

$$\Gamma = \frac{Q^2}{4\pi\epsilon_0 a k_B T}, \text{ а плотность системы за счет}$$

параметра экранирования системы $\kappa = \kappa^* a = \kappa^* (\pi n)^{-1/2}$, а значит система при этих двух параметрах однозначно определяется статистически. Единицы скорости же получаются делением характерных длин системы на характерное время $u_0 = a\omega_p$.

Рисунок 3.

Среднеквадратичное смещение наночастиц при различных значениях параметра экранирования κ и параметре связи $\Gamma = 100$: а) $\kappa = 1$ и б) $\kappa = 2$.



На рисунке 3 представлены зависимости среднеквадратичного смещения (MSD) наночастиц от безразмерного времени $t\omega_p$ в логарифмическом масштабе. Расчёты выполнены для различных значений амплитуды флуктуаций заряда σ при параметрах экранирования а) $\kappa = 1$ и б) $\kappa = 2$. Во всех случаях система находится в режиме сильной связи $\Gamma=100$. Временная эволюция MSD демонстрирует два характерных динамических режима. На малых временах $t\omega_p < 1$ наблюдается баллистический режим, при котором MSD масштабируется как $MSD \sim t^2$, что обусловлено инерционным движением час-

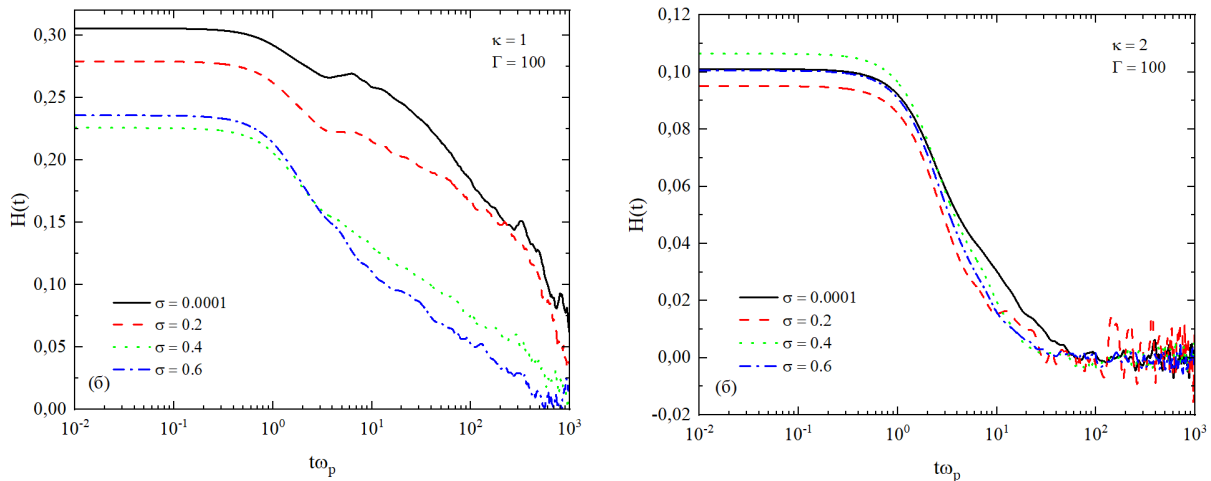
тиц с начальными тепловыми скоростями. С увеличением времени система переходит в диффузионный режим, где MSD линейно зависит от времени, что соответствует установлению стохастического характера движения. Коэффициент самодиффузии определяется из асимптотического поведения MSD при больших временах на основе соотношения Эйнштейна по формуле (8). Анализ влияния флуктуаций заряда σ показывает, что в баллистической области различия между кривыми практически отсутствуют. Это связано с тем, что на ранних стадиях динамика системы определяется начальными

скоростями частиц и не чувствительна к изменению зарядового состояния. В диффузионной области $t\omega_p \gg 1$ наблюдается заметное расхождение кривых. Увеличение амплитуды флуктуаций заряда σ приводит к росту значений MSD по сравнению со случаем постоянного заряда ($\sigma \rightarrow 0$). Это указывает на усиление диффузионной подвижности частиц. Физически данный эффект обусловлен стохастическими вариациями межчастичного взаимодействия, вызванными флуктуациями заряда, что приводит к дополнительной корреляции траекторий частиц и, как следствие, к увеличению коэффициента диффузии. Сравнение результатов для различных параметров экранирования пока-

зывает, что при переходе от $\kappa = 1$ и $\kappa = 2$ сохраняется качественно одинаковое поведение MSD. Это свидетельствует о том, что влияние флуктуаций заряда носит универсальный характер и слабо зависит от длины экранирования. При этом увеличение κ приводит к некоторому изменению наклона кривых в диффузионной области, что отражает модификацию эффективного взаимодействия между частицами. Таким образом, в режиме сильной связи $\Gamma = 100$ флуктуации заряда выступают существенным фактором, определяющим транспортные свойства системы, приводя к усилению диффузии даже в условиях развитых межчастичных корреляций.

Рисунок 4

Зависимость автокорреляционной функции напряжений от времени при различных значениях параметра σ и параметра экранирования κ при $\Gamma = 100$: а) $\kappa = 1$ и б) $\kappa = 2$



Для анализа микроскопических механизмов вязкого переноса были рассчитаны автокорреляционные функции напряжений (SACF). На рисунке 4 представлены зависимости $H(t)$ при параметрах экранирования $\kappa = 1$ и $\kappa = 2$ для различных значений амплитуды флуктуаций заряда σ в режиме сильной связи $\Gamma = 100$. Во всех случаях наблюдается быстрый спад SACF на малых временах $t\omega_p \lesssim 1$, что соответствует потере корреляций вследствие межчастичных взаимодействий. На больших временах характер релаксации зависит от параметров системы: при $\kappa = 1$ затухание происходит медленнее и сопровождается более выраженными корреляциями, тогда как при $\kappa = 2$ наблюдается более быстрый спад функции. Влияние флуктуаций заряда σ проявляется в ускорении релаксации

$H(t)$. С ростом σ автокорреляционная функция убывает быстрее, и её амплитуда снижается по сравнению со случаем почти постоянного заряда ($\sigma \rightarrow 0$). Это указывает на то, что стохастические изменения заряда выступают дополнительным механизмом корреляции напряжений и, соответственно, усиливают диссипацию импульса в системе. При меньшем экранировании $\kappa = 1$ влияние σ выражено сильнее, тогда как при $\kappa = 2$ кривые для различных σ становятся ближе друг к другу, что связано с ослаблением дальнотьюдействующих взаимодействий. Полученные зависимости SACF используются для расчёта коэффициента сдвиговой вязкости в рамках соотношений Грина-Кубо.

На рисунке 5 показан коэффициент диффузии, полученный в результате анализа данных

среднеквадратичного смещения частиц, представленных на рисунках 1 и 2. Различные кривые на графике соответствуют набору значений амплитуды флуктуаций заряда σ в диапазоне от 0.0001 до 0.6. Данные получены методом молекулярной динамики (МД) для двух значений параметра экранирования: $k = 1$ (а) и $k = 2$ (б). При малых значениях параметра связи Γ (область слабого взаимодействия, $\Gamma \approx 1$) коэффициент диффузии имеет большие значения, что соответствует высокой подвижности наночастиц. По мере увеличения Γ значения коэффициента диффузии монотонно уменьшаются, что свидетельствует о снижении подвижности частиц из-за возрастания межчастичных корре-

кций и Юкавского отталкивания. На больших значениях параметра связи ($\Gamma \approx 100$) диффузия стремится к своим минимальным значениям, и система переходит в режим сильной связи с более упорядоченной структурой. Из рисунка 5(а) можно заметить, что при $k = 1$ и $\Gamma > 30$ наблюдается расхождение кривых для разных σ : флуктуации заряда начинают оказывать заметное влияние на диффузионные процессы, в то время как при большем экранировании ($k = 2$, рис. 5б) это влияние менее выражено. Сближение результатов при различных параметрах в широком диапазоне Γ говорит о достоверности полученных МД-данных и устойчивости выбранной модели стохастической зарядки.

Рисунок 5

Коэффициент диффузии наночастиц в зависимости от параметра связи, полученный методом молекулярной динамики при а) $k = 1$ и б) $k = 2$

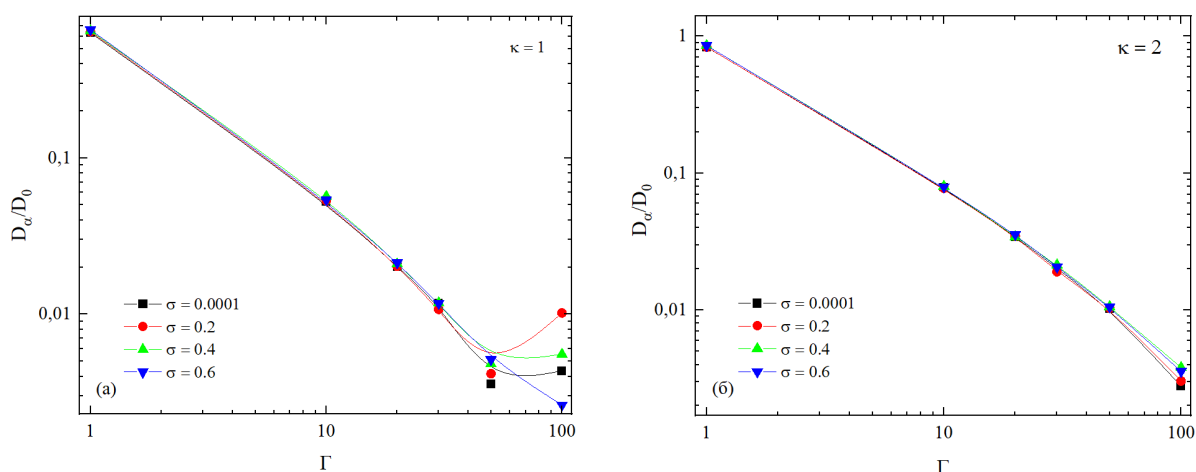
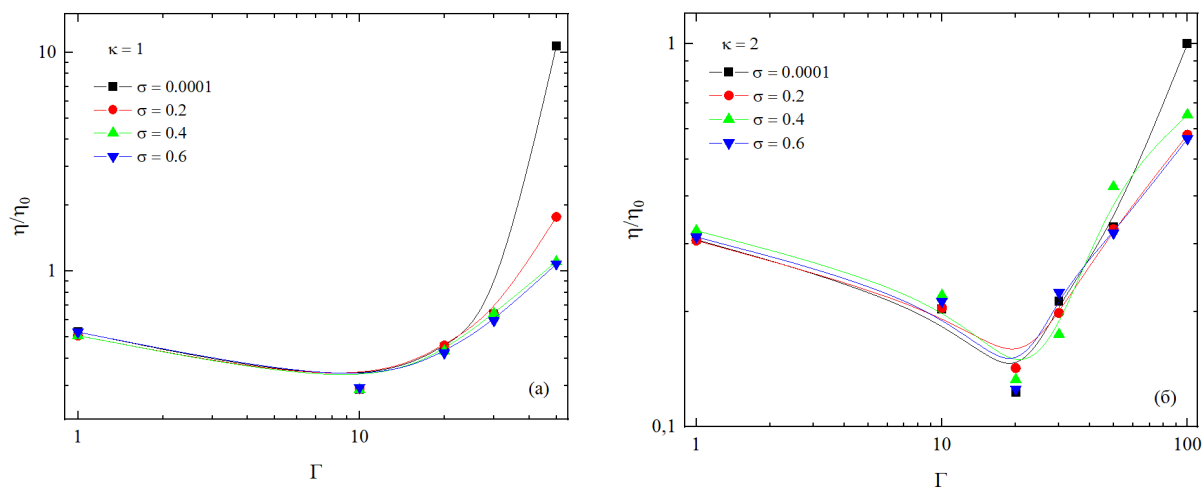


Рисунок 6

Коэффициент вязкости наночастиц в зависимости от параметра связи при а) $k = 1$ и б) $k = 2$



На рисунке 6 показана зависимость приведенной сдвиговой вязкости η/η_0 от параметра связи Γ для различных значений параметра флуктуаций заряда σ при $k = 1$ (а) и $k = 2$ (б). Коэффициент вязкости рассчитан в единицах $\eta_0 = m\nu\omega_p a^2$ на основе интегрирования автокорреляционных функций напряжений в рамках формализма Грина–Кубо. Для всех рассматриваемых случаев зависимость вязкости от параметра связи демонстрирует характерное немонотонное поведение. В области слабой связи (малые Γ) вязкость убывает с ростом интенсивности взаимодействий, что обусловлено доминированием кинетического вклада в перенос импульса. При достижении промежуточных значений параметра связи ($\Gamma \approx 10 \div 20$) наблюдается выраженный минимум. Дальнейшее увеличение Γ приводит к резкому росту вязкости в режиме сильной связи, где определяющую роль начинают играть потенциальные взаимодействия и структурная упорядоченность системы. Влияние параметра флуктуаций заряда σ проявляется наиболее отчетливо при больших значениях Γ . Наблюдается, что увеличение амплитуды флуктуаций σ приводит к росту вязкости, особенно заметному при умеренном экранировании ($k = 1$). Физически это объясняется тем, что наличие стохастического разброса зарядов нарушает идеальную симметрию межчастичного взаимодействия и создает дополнительные «препятствия» для относительного сдвига слоев жидкости, что эффективно увеличивает внутреннее трение. Кроме того, можно заметить, что увеличение параметра экранирования k до 2 (рис. 6б) приводит к смещению минимума вязкости в сторону больших значений Γ . Это указывает на то, что более сильное экранирование потенциала Юкавы расширяет область, в которой кинетический перенос преобладает над потенциальным. Хорошая сходимость результатов для различных σ в области минимума подтверждает надежность используемой модели и статистическую достоверность проведенных молекулярно-динамических расчетов.

Заключение

В работе проведено комплексное исследование транспортных свойств системы углеродных

наночастиц в низкотемпературной плазме с учетом стохастических флуктуаций их заряда. Использование метода Монте-Карло позволило адекватно описать статистическое распределение зарядов частиц и оценить амплитуду их флуктуаций. На основе молекулярно-динамического моделирования установлено, что учет зарядовой нестабильности приводит к заметному изменению динамики частиц и, как следствие, к модификации коэффициентов самодиффузии и вязкости. Показано, что коэффициент диффузии уменьшается с ростом параметра связи, что соответствует усилению корреляций между частицами, тогда как вязкость демонстрирует характерную немонотонную зависимость, отражающую конкуренцию между структурным упорядочением и динамической подвижностью системы. Учет флуктуаций заряда приводит к дополнительному рассеянию энергии и изменению межчастичных взаимодействий, что особенно существенно в области сильной связи. Полученные результаты подчеркивают важность включения эффектов зарядовых флуктуаций в модели комплексной плазмы и могут быть использованы для более точного описания транспортных процессов в реальных плазменных системах, включая лабораторные и астрофизические объекты.

Финансирование

Исследование выполнено при финансовой поддержке Комитета науки Министерства науки и высшего образования Республики Казахстан (грант ИРН AP23488907)

Конфликт интересов

Раскрытие любых финансовых, личных или профессиональных связей, которые могут быть восприняты как оказывающие влияние на проведение исследования. При отсутствии конфликтов следует указать: Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

Вклад авторов

Концептуализация, исследование, написание – подготовка первоначальной версии статьи, Коданова С.К., Бастыкова Н.Х.; Концептуализация, Рамазанов Т.С., Обработка и управление данными, Визуализация, Кенжебекова А.И., Удербоева А. Е.

Литературы

- 1 Bastykova, N. Kh. et al. (2025). Results in Physics, 69, 108136. <https://doi.org/10.1016/j.rinp.2025.108136>
- 2 Cui, C. & Goree, J. (1994). Fluctuations of the charge on a dust grain in a plasma. IEEE Transactions on Plasma Science, 22, 27–31. <https://doi.org/10.1109/27.279018>
- 3 Djienbekov, N. E. et al. (2022). Physical Review E, 106, 065203. <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.106.065203>
- 4 Donkó, Z. & Hartmann, P. (2004). Thermal conductivity of strongly coupled Yukawa liquids. Physical Review E, 69, 016405. <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.69.016405>
- 5 Donkó, Z. & Hartmann, P. (2008). Shear viscosity of strongly coupled Yukawa liquids. Physical Review E, 78, 026408. <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.78.026408>
- 6 Donkó, Z. et al. (2008). Journal of Physics: Condensed Matter, 20, 413101. <https://doi.org/10.1088/0953-8984/20/41/413101>
- 7 Donkó, Z., Goree, J., Hartmann, P. & Liu, B. (2009). Time-correlation functions and transport coefficients of two-dimensional Yukawa liquids. Physical Review E, 79, 026401. <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.79.026401>
- 8 Donkó, Z., Goree, J., Hartmann, P. & Kutasi, K. (2006). Shear viscosity and shear thinning in two-dimensional Yukawa liquids. Physical Review Letters, 96, 145003. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.96.145003>
- 9 Donkó, Z., Kalman, G. J. & Golden, K. I. (2002). Physical Review Letters, 88, 225001. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.88.225001>
- 10 Hartmann, P. et al. (2005). Physical Review E, 72, 026409. <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.72.026409>
- 11 Matsoukas, T. & Russell, M. (1995). Particle charging in low-pressure plasmas. Journal of Applied Physics, 77, 4285–4292. <https://doi.org/10.1063/1.359451>
- 12 Orazbayev, S., Yerlanuly, Y., Utegenov, A., Moldabekov, Z., Gabdullin, M. & Ramazanov, T. (2021). Plasma with carbon nanoparticles: Advances and application. Nanotechnology, 32, 455602. <https://doi.org/10.1088/1361-6528/ac1a40>
- 13 Ott, T. & Bonitz, M. (2009). Is diffusion anomalous in two-dimensional Yukawa liquids? Physical Review Letters, 103, 195001. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.103.195001>
- 14 Ott, T., Bonitz, M., Donkó, Z. & Hartmann, P. (2008). Physical Review E, 78, 026409. <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.78.026409>
- 15 Ott, T., Bonitz, M., Donkó, Z. & Hartmann, P. (2008). Superdiffusion in quasi-two-dimensional Yukawa liquids. Physical Review E, 78, 026409. <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.78.026409>
- 16 Petersen, A., Asnaz, O. H., Tadsen, B. et al. (2022). Decoupling of dust cloud and embedding plasma for high electron depletion in nanodusty plasmas. Communications Physics, 5, 308. <https://doi.org/10.1038/s42005-022-01060-5>
- 17 Saigo, T. & Hamaguchi, S. (2002). Shear viscosity of strongly coupled Yukawa systems. Physics of Plasmas, 9, 1210–1216. <https://doi.org/10.1063/1.1459708>
- 18 Sheridan, T. E. & Hayes, A. (2011). Charge fluctuations for particles on a surface exposed to plasma. Applied Physics Letters, 98, 091501. <https://doi.org/10.1063/1.3560302>
- 19 Sodha, M. S., Mishra, S. K., Misra, S. & Srivastava, S. (2010). Fluctuation of charge on dust particles in a complex plasma. Physics of Plasmas, 17, 073705. <https://doi.org/10.1063/1.3452153>

Сведения об авторах:

Коданова Сандугаш Кулмаганбетовна – кандидат физико-математических наук, профессор, КазНУ имени аль-Фараби, Институт прикладных наук и информационных технологий (Алматы, Казахстан, e-mail: kodanova@physics.kz).

Бастыкова Нурия Хамитбековна (автор для корреспонденции) – PhD, ассоциированный профессор, КазНУ имени аль-Фараби, Институт прикладных наук и информационных технологий (Алматы, Казахстан, e-mail: bastykova_nuriya@physics.kz).

Кенжебекова Акмарал Игилыккызы – PhD, КазНУ имени аль-Фараби, Институт прикладных наук и информационных технологий (Алматы, Казахстан, e-mail: Akmaral.Kenzhebekova@kaznu.kz).

Үдербаева Ақбота Еркебұланқызы – студент 4-го курса бакалавриата по специальности «Киберфизика», КазНУ имени аль-Фараби, Институт прикладных наук и информационных технологий (Алматы, Казахстан, e-mail: uderbaevaakbota16@gmail.com).

Information about the authors:

Kodanova Sandugash Kulmaganbetovna – Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Professor, Farabi University, Institute of Applied Sciences and Information Technologies (Almaty, Kazakhstan, e-mail: kodanova@physics.kz).

Bastykovanuriya Khamitbekovna (corresponding author) – PhD, Associate Professor, Al-Farabi Kazakh National University, Institute of Applied Sciences and Information Technologies (Almaty, Kazakhstan, e-mail: bastykova_nuriya@physics.kz).

Kenzhebekova Akmaral Igilikkyzy – PhD, Al-Farabi Kazakh National University, Institute of Applied Sciences and Information Technologies (Almaty, Kazakhstan, e-mail: Akmaral.Kenzhebekova@kaznu.kz).

Uderbaeva Akbota Erkebulankyzy – is a 4th-year undergraduate student in Cyberphysics at al-Farabi Kazakh National University, Institute of Applied Sciences and Information Technologies (Almaty, Kazakhstan, e-mail: uderbaevaakbota16@gmail.com).

Авторлар туралы мәлімет:

Қоданова Сандуғаш Құлмағанбетқызы – физика-математика ғылымдарының кандидаты, профессор, Әл-Фараби ҚазҰУ, Қолданбалы ғылымдар және ақпараттық технологиялар институты (Алматы, Қазақстан, e-mail: kodanova@physics.kz).

Бастықова Нурия Хамитбекқызы (корреспонденттік автор) – PhD, қауымдастырылған профессор, әл-Фараби атындағы ҚазҰУ, Қолданбалы ғылымдар және ақпараттық технологиялар институты (Алматы, Қазақстан, e-mail: bastykova_nuriya@physics.kz).

Кенжебекова Ақмарал Игілікқызы – PhD, әл-Фараби атындағы ҚазҰУ, Қолданбалы ғылымдар және ақпараттық технологиялар институты (Алматы, Қазақстан, e-mail: Akmaral.Kenzhebekova@kaznu.kz).

Үдербаева Ақбота Еркебұланқызы – "Киберфизика" мамандығы бойынша бакалавриаттың 4-курс студенті, әл-Фараби атындағы ҚазҰУ, қолданбалы ғылымдар және ақпараттық технологиялар институты (Алматы, Қазақстан, e-mail: uderbaevaakbota16@gmail.com).

Отправлено: 09.04.2026

Принято: 10.05.2026