

УДК 533.9+536.7

БРОУНОВСКОЕ ДВИЖЕНИЕ НЕУПРУГОЙ ЧАСТИЦЫ В ИДЕАЛЬНОМ ГАЗЕ

С. А. Майоров, А. М. Игнатов, С. А. Тригер¹

В работе на основе численного моделирования исследуются кинетические характеристики броуновского движения неупругой частицы в идеальном газе. Рассматривается случай трехмерного движения при различных граничных условиях для взаимодействия атомов с броуновской частицей. Получены функции распределения по скоростям броуновской частицы. Моделирование проводилось методом молекулярной динамики.

Данная работа является развитием численных исследований кинетических характеристик пылевой частицы в плазме и газе [1, 2]. В работе [1] рассматривалась задача о наборе кинетической энергии заряженной пылинкой, находящейся в плазме. В работе [2] изучалось одномерное броуновское движение частицы в идеальном газе при различных условиях взаимодействия сталкивающихся с ней атомов. Многие экспериментальные данные, а также недавнее рассмотрение на основе кинетической теории [3, 4], говорят о значительной кинетической энергии пылевой частицы в плазме, превосходящей кинетическую энергию тяжелых компонент – атомов и ионов. Различие температур между броуновскими частицами и окружающим газом может также возникать в кинетике нейтральных открытых систем при наличии неупругих столкновений [4 – 7]. Поэтому представляет интерес численное моделирование динамики незаряженной броуновской частицы, поглощающей при столкновениях атомы окружающего нейтрального газа. Ниже приводятся результаты такого моделирования на основе метода молекулярной динамики.

¹Гумбольдт университет, г. Берлин, Германия; Институт высоких температур РАН, г. Москва, Россия.

В работе [2] на основе численного моделирования рассмотрено несколько модельных задач, начиная с простейшей – плоской частицы (листа), находящейся в бесконечно глубокой и узкой потенциальной яме и подвергающейся толчкам со стороны атомов идеального газа. Рассчитывалась зависимость кинетической энергии пылинок от времени и строилась функция распределения (ФР) частицы по скоростям. Рассмотрены различные законы взаимодействия броуновской частицы с атомами газа: упругое столкновение, условие прилипания, а также и более сложные граничные условия – ”мягкая” и ”демоническая” частицы. Под мягкой частицей понимается частица, которая при столкновении поглощает массу и импульс, а затем теряет массу без потери скорости. Такое условие может использоваться для моделирования реального неупругого взаимодействия при отсутствии адсорбции атомов на поверхности пылинок. Под демонической частицей (по аналогии с демоном Максвелла) понимается частица, которая поглощает и теряет массу и импульс по некоторым логическим правилам. Этот случай не реализуется в термодинамическом равновесии, но модель такого типа может описывать ситуацию в открытой неравновесной системе, кроме того, она может рассматриваться как полезная теоретическая модель.

Некоторые формулы и оценки. Рассмотрим случай равновесного газа атомов массы m , с числовой плотностью N и температурой T , имеющих максвелловское распределение по скоростям V вдоль выделенного направления и кинетическую энергию K :

$$\begin{aligned} f_M(V) &= (m/2\pi T)^{1/2} \exp(-mV^2/2T) \\ f_M(K) &= (4K/\pi T^3)^{1/2} \exp(-K/T). \end{aligned} \quad (1)$$

Здесь и далее температуру будем измерять в энергетических единицах. Для краткости броуновскую частицу (макрочастицу, пылинку) с массой M далее будем называть частицей.

Средние характеристики сталкивающихся со стенкой атомов. Сталкивающиеся со стенкой атомы имеют следующую ФР по нормальной к поверхности компоненте скорости V :

$$f_j(V) = (2mV/T) \exp(-mV^2/2T). \quad (2)$$

Средняя кинетическая энергия движения в нормальном к поверхности направлении сталкивающихся со стенкой атомов равна T , в отличие от средней кинетической энергии атомов в объеме $T/2$ в расчете на одну степень свободы. Это обстоятельство обусловлено тем, что частота столкновений с поверхностью у атома пропорциональна его

скорости (2). Соответственно, в трехмерном случае средняя кинетическая энергия атомов в объеме равна $3T/2$, а средняя кинетическая энергия сталкивающихся со стенкой атомов равна $2T$. Плотность потока атомов на стенку равна $J_M = (T/2\pi m)^{1/2}N$, отношение средней скорости падающих на стенку атомов $V_J = (9\pi T/8m)^{1/2}$ к средней скорости атомов в единице объема $V_0 = (8T/\pi m)^{1/2}$ равно $3\pi/8$, наиболее вероятная скорость атомов в единице объема $V_M = (2T/m)^{1/2}$ [8]. Часто также используется значение характерной тепловой скорости $V_T = (T/m)^{1/2}$, которая соответствует энергии $T/2$.

Рост массы частицы. При определенных условиях пылинка может поглощать все попадающие в нее атомы. Такая ситуация, помимо пылевой плазмы, может реализоваться также и в межзвездной среде [9]. Скорость роста массы сферической пылинки

$$\frac{\partial M}{\partial t} = mJS, \quad (3)$$

где $S = 4\pi R^2$ – площадь ее поверхности, R – радиус, J – плотность потока атомов на поверхность. Переписывая уравнение (3) в виде $\frac{\partial M}{\partial t} = \frac{M}{\tau_M}$, получаем, что характерное время роста массы $\tau_M = M/mJS$. Если учесть зависимость радиуса пылинки от ее массы при постоянной плотности вещества пылинки, то решение (3) дает линейное по времени увеличение радиуса пылинки.

Время набора энергии. Оценим характерное время τ_T набора первоначально покоившейся пылинкой энергии того же порядка, что и энергия атомов равновесного газа. Суммируя квадраты импульса попавших в пылинку атомов и учтя, что их средний квадрат импульса в равновесном газе равен $4mT$, получаем

$$\tau_T = 3M/4mJS = 3\tau_M/4. \quad (4)$$

Характерные времена набора энергии τ_T и роста массы τ_M для пылинок совпадают с точностью до множителя порядка единицы. Неравновесность газа и отражение атомов приводят лишь к незначительной вариации этой константы. Это же время определяет время выхода температуры пылевой компоненты на стационарное значение, а также длину свободного пробега и частоту столкновений броуновской частицы.

Отметим, что из-за большого отношения масс частицы и атомов движение броуновской частицы представляет собой не ломаную, а практически гладкую кривую (величина угла излома траекторий из-за одного соударения с атомом имеет порядок $\sqrt{m/M}$). Время столкновения частицы можно определить так, как это делается в физике плазмы, где столкновение также состоит из множества слабых бинарных соударений. Оно

определяется обычно как среднее время, за которое частица поворачивает на прямой угол $\pi/2$.

Взаимодействие атомов с поверхностью броуновской частицы. Постановка граничных условий для описания взаимодействия броуновской частицы с атомами идеального газа подробно классифицирована ранее [2], поэтому ограничимся кратким перечислением используемых моделей. Итак, рассмотрим несколько типов граничных условий для задачи моделирования броуновского движения пылинки в идеальном газе.

Модель упругой частицы – зеркальное отражение атомов. В определенных условиях поверхность твердого тела может упруго отражать падающие на нее атомы. Это наиболее простая и достаточно исследованная модель. Но зеркальное отражение реализуется только для хорошо обработанных поверхностей [8] и такая ситуация не характерна для пылевой среды и пылевой плазмы в частности. Форма поверхности пылинок напоминает цветную капусту и даже при упругом взаимодействии атом в процессе отражения может сталкиваться с пылинкой несколько раз.

Модель диффузного отражения. В модели шероховатых сфер частица упруго отражает падающие на нее атомы, меняя только их направление [8]. Отметим, что такая ситуация не реализуется в условиях пылевой плазмы из-за неупругого характера взаимодействия атомов с поверхностью при высоких температурах. Наиболее близкой к реальности в пылевой среде является модель шероховатой сферы с частичной аккомодацией энергии и введением доли зеркально отраженных атомов. Но такая модель сложна и использует аппроксимирующие параметры – коэффициент аккомодации энергии и долю зеркально отраженных атомов.

Модель поглощающей (липкой) частицы. Частица в такой модели поглощает все попадающие в нее атомы. Масса и скорость частицы после акта поглощения атома определяются из законов сохранения массы и импульса:

$$M' = m + M,$$

$$V' = (mv + MV)/(m + M). \quad (5)$$

Но даже при хорошей абсорбции частица поглощает не все попадающие в нее атомы и необходимо учитывать обратный процесс – потерю массы. Ниже мы рассмотрим идеализированный предельный случай поглощения всех неупруго сталкивающихся с частицей атомов. Соответствующее такой модели кинетическое уравнение было получено и рассмотрено в [5, 6], а его общее решение найдено в [7].

Модель неупругой частицы постоянной массы может использоваться для описания реального неупругого взаимодействия при отсутствии абсорбции. В этом случае массу и скорость частицы после столкновения будем определять из законов сохранения массы и импульса в двухстадийном процессе.

На первой стадии происходит неупругое поглощение атома, на второй стадии частица теряет этот атом. Для описания первой стадии будем использовать модель липкой частицы (5).

На второй стадии, при потере массы

$$M'' = M' - m$$

рассмотрим две модели для определения скорости частицы после потери массы.

Предполагая при потере массы сохранение частицей скорости

$$V'' = V', \quad (6)$$

получаем модель мягкой частицы.

Для демонической частицы, которая аналогично демону Максвелла поглощает и теряет массу и импульс по некоторым логическим правилам, могут быть построены теоретические модели. Так, в открытой системе пылинка подвергается воздействию неравновесных потоков различной природы, и закон испускания не соответствует условию взаимности. Поэтому и реальная пылинка также может быть частицей демонического типа.

Предполагая сохранение частицей при потере массы всей кинетической энергии (частицы и залипшего атома, движущихся как целое), получаем значение для модуля скорости:

$$V'' = V'(1 + m/M)^{1/2}. \quad (7)$$

Это модель демонической частицы, которая при потере массы сохраняет энергию, но скорость ее после акта потери массы увеличивается. Эффективная сила ускорения из-за потери массы для массивной частицы в этом случае по порядку величины сравнима со средней ланжевеновской силой.

Модель поглощающей (липкой) частицы с пренебрежением роста массы. Частица в такой модели поглощает все попадающие в нее атомы, однако, из-за малости отношения масс атомов и броуновской частицы пренебрегается увеличением массы. Масса

и скорость частицы после акта поглощения атома определяются из законов сохранения массы и импульса, выполненных приближенно:

$$M' = M,$$

$$V' = (m\nu + MV)/M. \quad (8)$$

Такая модель была использована в кинетической теории [3, 4] и ее аналитические следствия будут проверены ниже с помощью вычислительного эксперимента.

Результаты моделирования. Рассмотрим случай трехмерного движения, когда атомы помещены в куб и могут свободно перемещаться в нем, сталкиваясь с поверхностью куба и поверхностью частицы. Положим массу атомов m и их числовую плотность N равными единице, броуновскую частицу представим в виде сферы радиуса R с массой M , которая сосредоточена в ее центре. Она может либо так же как и атомы свободно перемещаться внутри куба, либо удерживаться внешней силой вблизи его центра.

При численном моделировании приходится ограничивать число частиц в кубе и, как показывают расчеты, возможно значительное влияние граничных условий при приближении частицы к стенке куба. Чтобы избежать этого влияния, которого нет в реальных системах с очень большим числом частиц, будем использовать модель локализованной частицы. В ней полагается, что на частицу действует сила, пропорциональная ее отклонению от центра куба. Глубина потенциальной ямы выбиралась значительно больше, чем температура газа, поэтому частица из-за теплового движения незначительно отклонялась от центра куба. Будем полагать, что удерживающая частицу в центре сила действует только на частицу, а на атомы – не действует. Отметим, что модель локализованной (ограниченной в пространственном передвижении) частицы, может быть применена для изучения поведения частицы, левитирующей в ионном потоке катодного слоя [10].

В расчетах рассматривались только центральные удары, т.е. полагался равным нулю прицельный параметр, и не учитывалось вращение макрочастиц (в пылевой плазме оно может играть важную роль [9]).

При моделировании использовались рассмотренные выше различные граничные условия, описывающие возможные законы столкновений атомов с поверхностями броуновской частицы и куба. Результаты расчетов представлены на рис. 1 и 2.

На рис. 1 представлены результаты расчетов ФР по кинетической энергии частицы с массой $M = 100$ (при массе атомов $m = 1$). Графики построены в линейном (а)

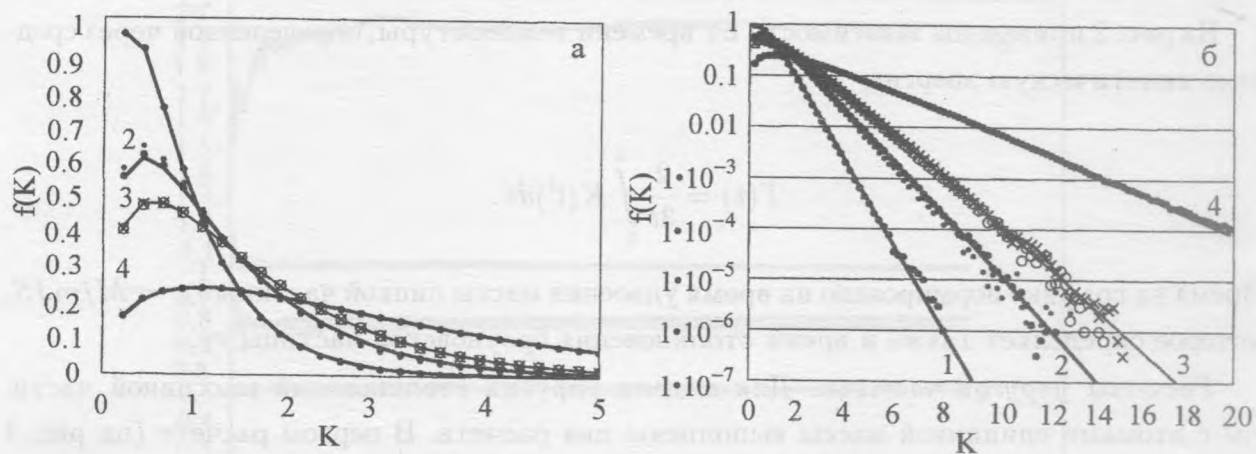


Рис. 1. а. Функции распределения $f(K)$ по кинетической энергии массивной ($M = 100$) броуновской частицы, сталкивающейся с 500 атомами единичной массы, которые помещены в куб с зеркальными или термостатирующими стенками при $T = 1$. Сплошные кривые 1, 2, 3, 4 – распределения Максвелла при $T = 1/2, 4/5, 1, 2$. Выполнены расчеты, различающиеся граничными условиями: (1) столкновения броуновской частицы с атомами упругое. Броуновская частица свободно перемещается внутри куба. Взаимодействие атомов с поверхностью куба – зеркальное отражение ФР практически совпадает с равновесной при $T = 1$, x – результаты расчета. (2) то же самое, но частица находится в параболической потенциальной яме глубины 100. ФР практически совпадает с равновесной при $T = 1, 0$ – результаты расчета. (3) столкновения броуновской частицы с атомами неупругое (модель липкой частицы), расчет без потенциальной ямы. Рассчитанная ФР (маленькие точки близки к кривой 2) близка к максвелловской с $T = 0.7544$. (4) то же самое, но в параболическом потенциале глубины 100. Рассчитанная ФР (большие точки вблизи кривой 2) близка к максвелловской с температурой $T = 4/5$ (в расчете получено значение $T = 0.787$). (5) столкновения броуновской частицы с атомами неупругое (модель мягкой частицы). Масса увеличивается на единицу, затем теряется с сохранением скорости. Рассчитанная ФР (точки вблизи кривой 1) практически совпадает с равновесной ФР при $T = 0.5$. б) То же самое в логарифмическом масштабе и большем энергетическом диапазоне.

и логарифмическом (б) масштабах. Сплошные кривые 1, 2, 3, 4 на графике представляют ФР Максвелла (1) для броуновской частицы с температурой $T = 1/2, 4/5, 1, 2$

соответственно.

На рис. 2 приведены зависимости от времени температуры, определенной через среднюю кинетическую энергию

$$T(t) = \frac{2}{3t} \int_0^t K(t') dt'.$$

Время на графике нормировано на время удвоения массы липкой частицы $\tau_m = M/mJS$, которое определяет также и время столкновения броуновской частицы τ_T .

Расчеты упругой частицы. Для модели упругих столкновений массивной частицы с атомами единичной массы выполнены два расчета. В первом расчете (на рис. 1 символы \times вблизи сплошной кривой 3 – ФР Максвелла при $T = 1$) частица свободно перемещается внутри куба, зеркально отражаясь от его стенок, атомы также зеркально отражаются от стенок и упруго от поверхности частицы. Во втором расчете (символы o вблизи сплошной кривой 3) частица находится в параболическом потенциале, удерживающем ее вблизи центра куба, атомы упруго отражаются от поверхности частицы, а от стенок они отражаются в виде максвелловского потока. В приведенных двух расчетах частица испытала соответственно $N_{st} = 2719423$ и 2738747 соударений с атомами, средняя кинетическая энергия которых (в лабораторной системе координат, связанной со стенками) была $\langle K \rangle = 1.956$ и 1.961 . Отметим, что эти значения несколько ниже 2 (средней кинетической энергии сталкивающихся со стенкой атомов при $T = 1$) из-за того, что при движении частица замечает атомы в объеме, средняя кинетическая энергия которых $3/2$. Температура частиц, вычисленная в этих расчетах как две трети от средней кинетической энергии, была равна $T_g = 0.9969$ и 0.9977 . В обоих расчетах полученные в численных экспериментах распределения частиц по кинетической энергии являются максвелловскими с очень хорошей точностью. Графики ФР, построенные в линейном (а) и логарифмическом (б) масштабах демонстрируют совпадение с максвелловским распределением во всей области, в том числе и в области больших энергий. Отличие между этими двумя расчетами наблюдается только в области экспоненциально малых хвостов ФР в и не имеет даже заметных систематических отклонений от равновесного распределения. Таким образом, есть основание утверждать, что как у свободной, так и локализованной массивной частицы устанавливается максвелловское распределение с температурой, равной температуре атомов идеального газа. На рис. 2 случаям упругих соударений отвечают практически совпадающие кривые 1 и 2.

Расчеты липкой локализованной частицы. Простейшая модель липкой частицы не

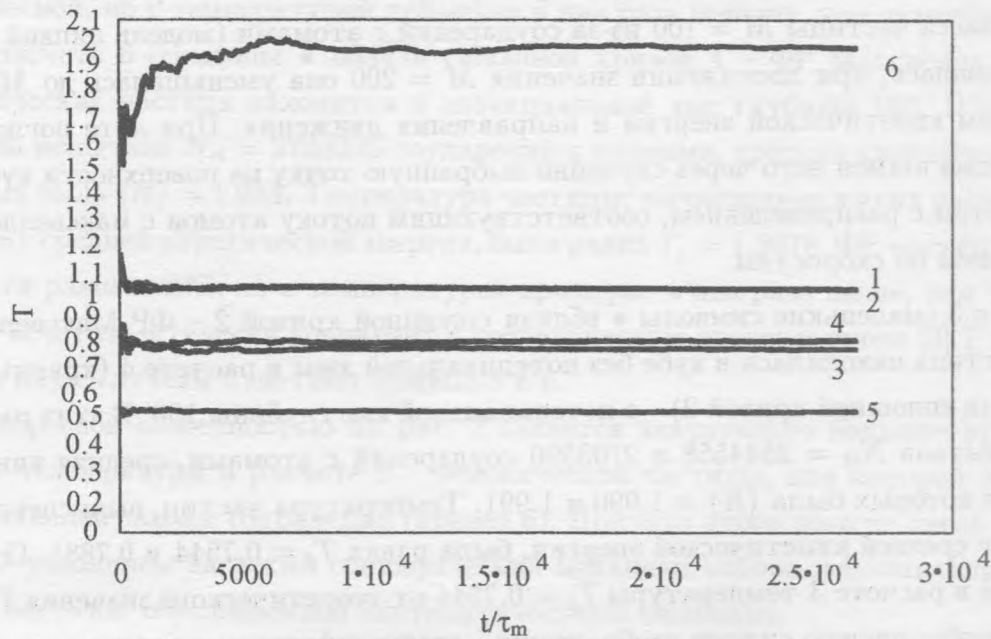


Рис. 2. Зависимости от времени средней температуры броуновской частицы; температура вычисляется как две трети от интеграла по времени от кинетической энергии, деленного на время. Кривые 1 – 6 соответствуют расчетам 1 – 6.

позволяет в вычислительном эксперименте получить ФР из-за того, что число столкновений частицы пропорционально двоичному логарифму времени. Для вычисления гладкой ФР необходимо усреднение, по крайней мере, тысячи времен набора энергии τ_T , соответственно, частица тысячу раз должна удвоить свою массу, а для этого необходим розыгрыш примерно 2^{1000} соударений с атомами, что невозможно как из-за ограниченных вычислительных ресурсов, так и с точки зрения здравого смысла – во Вселенной нет такого количества атомов.

Но даже вычисление на компьютере с неограниченной мощностью 2^{1000} соударений с атомами не позволит получить гладкую ФР. Дело в том, что каждое последующее столкновение липкой частицы занимает примерно в два раза больше времени, чем предыдущее. Но вклад от столкновений пропорционален их длительности, соответственно, первое столкновение войдет в ФР с весом 2^{-1000} , а последнее – с весом 2^{-1} . Фактически в ФР будут представлены два-три последних столкновения, доля остальных составит порядка 10% (подробнее см. [2]).

По этой причине, для расчета характеристик неупругой частицы с увеличивающей-

ся массой использовалась процедура (7) перенормировки массы с сохранением энергии. Начальная масса частицы $M = 100$ из-за соударений с атомами (модель липкой частицы) увеличивалась, при достижении значения $M = 200$ она уменьшалась до $M = 100$ с сохранением кинетической энергии и направления движения. При акте поглощения частицей атома взамен него через случайно выбранную точку на поверхности куба влетал новый атом с распределением, соответствующим потоку атомов с максвелловским распределением по скоростям.

В расчете 3 (маленькие символы • вблизи сплошной кривой 2 – ФР Максвелла при $T = 4/5$) частица находилась в кубе без потенциальной ямы в расчете 4 (крупные символы • вблизи сплошной кривой 2) – в потенциальной яме глубины 100. В этих расчетах частица испытала $N_{st} = 2644558$ и 2703590 соударений с атомами, средняя кинетическая энергия которых была $\langle K \rangle = 1.990$ и 1.991 . Температура частиц, вычисленная как две трети от средней кинетической энергии, была равна $T_g = 0.7544$ и 0.7881 . Отличие вычисленной в расчете 3 температуры $T_g = 0.7544$ от теоретического значения $T = 4/5$ [6, 7] видимо обусловлено силами изображения – взаимодействием с поверхностью куба, которая для атомов является термостатирующей в обоих расчетах. Расчет же частицы в параболическом потенциале дает значение $T_g = 0.7881$, что практически совпадает с теоретическим $T = 4/5$.

На рис. 2 этим двум случаям отвечают две близкие кривые 3 и 4.

Расчеты неупругой локализованной частицы постоянной массы. Рассмотрим результаты расчетов неупругой частицы, находящейся в глубокой потенциальной яме, при условии потери ими массы после неупругого столкновения. Используются две модели для описания способа потери массы частицей после неупругого соударения – модель мягкой частицы (6) и модель демонической частицы (8), которая после соударения имеет массу и скорость, определяемую по приближенно выполненным законам сохранения – в пренебрежении массы атома по сравнению с массой частицы. Этим моделям отвечают расчеты 5 и 6 соответственно.

В расчете 5 (символы • вблизи сплошной кривой 1 – ФР Максвелла при $T = 1/2$) мягкая частица находится в потенциальной яме глубины 100. Атомы после неупругого соударения теряются частицей без потери скорости и вбрасываются с поверхности куба. Другой механизм вбрасывания поглощенных атомов – равновероятно внутри куба – практически не меняет кинетических характеристик. В этом расчете число соударений частицы с атомами $N_{st} = 2700605$, средняя кинетическая энергия которых была $\langle K \rangle = 1.991$, вычисленная температура частиц $T_g = 0.4937$. ФР частицы по энергии является

равновесной, но с температурой примерно в два раза меньше, чем температура газа.

В расчете 6 (символы \bullet вблизи сплошной кривой 4 – ФР Максвелла при $T = 2$) демоническая частица находится в потенциальной яме глубины 100. В этом расчете частица испытала $N_{st} = 2720225$ соударений с атомами, средняя кинетическая энергия которых была $\langle K \rangle = 1.983$. Температура частицы, вычисленная в этих расчетах как две трети от средней кинетической энергии, была равна $T_g = 1.9978$. ФР частицы по энергии является равновесной, но с температурой примерно в два раза выше, чем температура газа. Расчет практически совпадает с теоретическим предсказанием [3] $T = 2$. На рис. 2 этим двум случаям отвечают кривые 5 и 6.

Интересной особенностью на рис. 2 является значительно большее время установления температуры в расчете 6 – демонической частицы, для которой приближенно выполняющей законы сохранения (кривая 6). Причина этого пока не очень ясна, но она служит указанием на некий специфический механизм набора дополнительной кинетической энергии, обусловленной систематическими ошибками.

Выполненное численное моделирование показывает, что для неупругой броуновской частицы, находящейся в равновесном идеальном газе, устанавливается максвелловское (равновесное) распределение по энергии поступательного движения, но с температурой, отличающейся от температуры газа. На основе численного моделирования установлено, что при наличии поглощения атомов точный учет законов сохранения, включая рост массы, играет важную роль в процессе установления распределения по импульсам для броуновских частиц. Рассмотрены и классифицированы новые граничные условия, в частности наиболее адекватные физической ситуации.

Показано, что в условиях пылевой среды функция распределения пылинок по скоростям является максвелловской (равновесной), но температура пылинок, понимаемая как характеристика направленного поступательного движения (пропорциональная средней кинетической энергии макрочастиц), при неупругом взаимодействии атомов идеального газа с поверхностью пылинки не равна температуре газа. Получено хорошее качественное и количественное согласие с теоретическими результатами [3 – 7].

Работа выполнена при финансовой поддержке N.W.O. (Нидерландская организация научных исследований) и проекта Sfb 555 Deutsche Forschung gemeinschaft (Германия).

ЛИТЕРАТУРА

- [1] И г н а т о в А. М., М а й о р о в С. А., Т р и г г е р С. А., Ш р а м П. П. Дж. Краткие сообщения по физике ФИАН, N 7, 7 (2000).

- [2] Майоров С. А. Краткие сообщения по физике ФИАН, N 1, 17 (2001).
- [3] Zagorodny A., Schram P. P. J. M., and Trigger S. A. Phys. Rev. Lett., **84**, no. 16, 3594 (2000).
- [4] Schram P. P. J. M., Sitenko A. G., Trigger S. A., and Zagorodny A. G. Phys. Rev. E, **63**, 016403 (2000).
- [5] Trigger S. A. Abstract (O3.5 p. 25) of IV European Workshop on Dusty and Colloidal Plasmas, 3 – 5 June 2000, Costa da Caparica, Portugal; Contr. Pl. Phys., 2000, accepted.
- [6] Ignatov A. M. and Trigger S. A. URL address: arxiv.org/abs/physics/0006072.
- [7] Ignatov A. M., Trigger S. A., Ebeling W., and Schram P. P. J. M. Phys. Lett., 2000, submitted.
- [8] Берд Г. Молекулярная газовая динамика. М., Мир, 1981.
- [9] Спитцер Л. Физические процессы в межзвездной среде. М., Мир, 1981.
- [10] Майоров С. А., Владимиров С. В., Крамер Н. Ф. Phys. Rev. E, **63**, no. 1 (2001); Владимиров С. В., Крамер Н., Майоров С. А. Краткие сообщения по физике ФИАН, N 9, 33 (2000).

Институт общей физики РАН

Поступила в редакцию 14 марта 2001 г.