

УДК 533.9

РАСЧЕТ КИНЕТИЧЕСКОЙ ЭНЕРГИИ МАКРОЧАСТИЦ В ПЛАЗМЕ

А. М. Игнатов, С. А. Майоров, С. А. Тригер¹, П. П. Дж. М. Шрам²

В работе на основе численного моделирования исследуется временная зависимость кинетической энергии пылинок, первоначально покоившихся. Моделирование проводилось по двум методикам – методом молекулярной динамики и методом частиц в ячейке. Получено значительное превышение кинетической энергии макрочастиц по сравнению с энергией тяжелой компоненты – ионов.

Пылевая плазма является объектом интенсивных экспериментальных и теоретических исследований последних лет [1 – 3]. В настоящей работе исследовалась двухтемпературная плазма, состоящая из холодных ионов и горячих электронов. Температура электронов определяется энергокладом от внешнего источника (СВЧ излучение, разряд, фотоионизация и т.д.). Ионы же находятся в тепловом равновесии с холодными атомами буферного газа. Представляет интерес вопрос о кинетической энергии заряженных макрочастиц в такой плазме. Многие экспериментальные данные (см., напр., [4, 5]), а также недавнее рассмотрение на основе кинетической теории [6], говорят об их значительной кинетической энергии, превосходящей кинетическую энергию тяжелой компоненты – ионов.

В настоящей работе на основе численного моделирования рассчитывалась временная зависимость кинетической энергии пылинок, первоначально покоившихся. Моделирование проводилось по двум методикам. Первая – это метод молекулярной динамики (МД). Решались уравнения Ньютона для системы точечных заряженных частиц, помещенных

¹Институт высоких температур РАН, г. Москва, Россия.

²Технический университет, г. Эйнховен, Нидерланды.

в куб с упруго отражающими стенками. Тяжелая частица с большим зарядом помещалась в центр куба. Учитывалось взаимодействие каждой частицы со всеми остальными. Вторая методика – метод частиц в ячейке. В центр ячейки также помещалась тяжелая макрочастица. Рассматривались случаи макрочастицы как бесконечно малой – точечный заряженный центр, так и конечного размера – с условием поглощения на ней. Решались уравнения Ньютона для системы точечных заряженных частиц, помещенных в куб со стенками, отражающими по закону Максвелла. Учитывалось только взаимодействие макрочастицы с частицами плазмы.

Моделирование методом МД из первых принципов (*ab initio*) является наиболее точной методикой исследований и широко используется при решении разнообразных плазменных задач [7]. Однако большой объем требуемых вычислений обычно не позволяет проводить расчеты с реальными параметрами. В данной работе исследовались системы, состоящие лишь из нескольких тысяч частиц, и выбиралось уменьшенное в сто раз отношение масс ионов и электронов. Рассмотрим полностью ионизованную плазму, состоящую из ионов с массой m_i , положительным зарядом e и электронов с массой m_e , зарядом $-e$. Рассматривается временная эволюция системы из n_e электронов и n_i ионов, заключенных в куб, в центре которого находится точечный отрицательный заряд $Q = Z_0e < 0$, обладающий большой массой. Число ионов, электронов и заряд макрочастицы выбирались такими, чтобы в целом система являлась электронейтральной: $n_i - n_e + Z_0 = 0$. Использовались как периодические, так и зеркальные граничные условия. Траектории частиц определяются путем решения уравнений Ньютона

$$d^2r_k/dt^2 = F_k/m_k, \quad F_k = \frac{q_k Q (r_k - r_g)}{(r_k - r_g)^3} + \sum_{l \neq k}^{n_p} f_{kl}, \quad k = 1, 2, \dots, n_p, \quad (1)$$

здесь $r_k(t)$ – радиус-вектор k -ой частицы с массой m_k и зарядом q_k , $r_g(t)$ – радиус-вектор макрочастицы с зарядом Q , n_p – общее число частиц. Сила кулоновского взаимодействия f_{kl} при расстояниях между частицами менее r_0 принималась равной силе взаимодействия однородно заряженных взаимно проницаемых сфер диаметром r_0 [7]. Такая модификация кулоновской силы на близких расстояниях устраняет особенность потенциала в нуле и уменьшает жесткость уравнений, обусловленную близкими соударениями. Значение r_0 выбиралось значительно меньше характерного межчастичного расстояния: $r_0 \ll N^{-1/3}$, в приведенном расчете полагалось $r_0 = 0.025 \cdot N^{-1/3}$. Проводились дополнительные расчеты для оценки влияния r_0 на рассчитываемые характеристики. Уравнения (1), включая уравнения движения для макрочастицы, решались прямым методом типа частица-частица [7]. Для повышения точности решения и уменьшения

объема вычислений использовалась вычислительная схема с выделением ближайших соседей [8].

Для МД расчета была выбрана плазма гелия с $z = 1$, $N_i = 2 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-3}$. Температура электронов $T_e = 1 \text{ эВ}$, ионов $T_i = 0.025 \text{ эВ}$. Время расчета было равно $t_0 = 3.5 \cdot 10^{-8} \text{ с}$, что значительно больше времени ионного ленгмюровского периода $6.7 \cdot 10^{-9} \text{ с}$. Ионный дебаевский радиус при таких параметрах плазмы в единицах характерного межионного расстояния равен $r_{Di} N_i^{1/3} = 1.06$, электронный – $r_{De} N_e^{1/3} = 6.6$. Начальное распределение электронов и ионов по координатам выбиралось равновероятным в объеме куба. Распределение по скоростям соответствовало распределению Максвелла на бесконечности. В зависимости от начального расстояния до макрочастицы распределение Максвелла по модулю скорости сдвигалось на величину энергии взаимодействия с макрочастицей. Распределение по направлениям скорости выбиралось изотропным. Таким образом формировалось начальное распределение без связанных частиц. Для получения лучшей статистики за ограниченное время расчета масса электронов выбиралась в 100 раз больше реальной. На рис. 1 приведены зависимости от времени кинетической энергии макрочастицы массы 10^4 а.е.м. , бесконечно малого размера и с отрицательным зарядом $Q = -300 e$. Число ионов в системе было равно 1500, электронов – 1200, т.е. с учетом заряженного центра система была нейтральной. Из рисунка видно, что кинетическая энергия макрочастицы растет и значительно превышает температуру ионов $T_i = 0.025 \text{ эВ}$. Период осцилляций энергии коррелирует с ионным ленгмюровским периодом. Для сравнения на графике точками и пунктиром нанесены результаты аналогичных расчетов методом частиц (см. ниже).

В пылевой плазме важную роль играют процессы зарядки макрочастиц и их конечный размер. Для оценки влияния этих факторов можно использовать менее трудоемкий с точки зрения вычислительных затрат метод – частиц в ячейке [7]. Его отличие от описанного выше метода МД состоит в более экономном способе вычисления сил, действующих на частицы (естественно, за счет их огрубления). Вследствие этого появляется возможность проводить расчеты с большим числом частиц и рассматривать эволюцию системы в течение более длительного промежутка времени. Траектории электронов и ионов в настоящей работе определялись путем решения уравнений Ньютона с вычислением силы в двух модификациях:

$$d^2 r_k / dt^2 = F_k / m_k, \quad F_k = \frac{q_k Q r_{kg}}{r_{kg}^3}, \quad k = 1, 2, \dots, n_p. \quad (2)$$

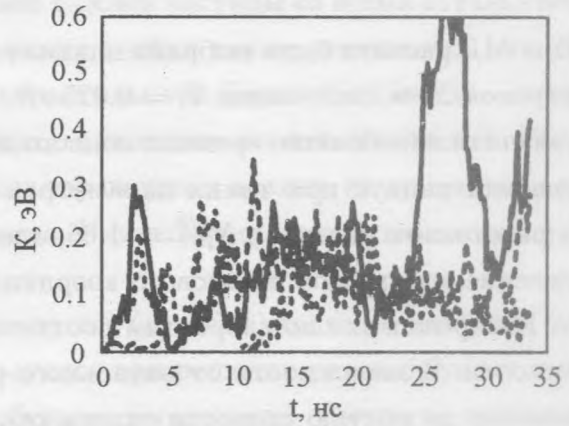
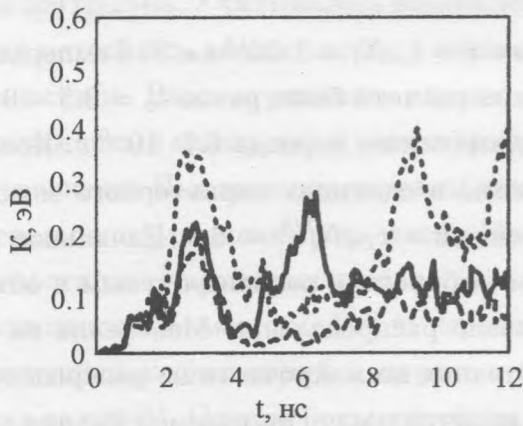


Рис. 1. Расчеты методом МД и частиц в ячейке.

Рис. 2. Расчеты методом частиц в ячейке для бесконечно малой макрочастицы.

$$d^2r_k/dt^2 = F_k/m_k, F_k = \frac{q_k Q r_{kg}}{r_{kg}^3} + q_k \frac{r_{kg}}{r_{kg}^3} \sum_{n_l < r_{kg}}^{n_p} q_l, k = 1, 2, \dots, n_p. \quad (3)$$

Здесь $r_{kg} = r_k - r_g$. В (2) учитываются только силы взаимодействия подвижных частиц с макрочастицей. Вычисляемое при такой силе распределение соответствует бинарному приближению, не учитывающему экранирования заряда макрочастицы. В (3) дополнительно учитывается экранирующее влияние ион-электронного облака, окружающего макрочастицу. Суммирование в (3) ведется по частицам, расположенным ближе к макрочастице, чем рассматриваемая k -ая частица. Сила, действующая на макрочастицу, определялась по третьему закону Ньютона и для нее также решались уравнения движения.

В начальный момент времени в центр куба помещалась тяжелая макрочастица заданного размера, поглощающая все падающие на нее частицы плазмы. Взамен поглощенной частицы в объеме вбрасывалась другая частица. При отражении от стенок куба использовались термостатирующие граничные условия. Такая постановка задачи позволяет самосогласованно учитывать флуктуации заряда макрочастицы и ее конечный размер. Естественно, что в случае бесконечно малой макрочастицы поглощение на ней отсутствует. Методом частиц в ячейке исследовалась плазма с теми же параметрами, что и в МД расчете. Менялось число частиц в системе, исследовались различные граничные условия и были проведены более длительные расчеты по сравнению с МД расчетами.

Вначале приведем результаты моделирования такой же системы, как и в предыдущем МД расчете. На рис. 1 пунктиром и штрихованными кривыми представлены зависимости от времени кинетической энергии макрочастицы при всех параметрах расчетов, совпадающих с параметрами МД расчета. Отличие их заключается в способе вычисления сил. Пунктир – сила вычислялась без учета экранирования (2), штрихованная кривая – сила вычислялась с учетом экранирования (3).

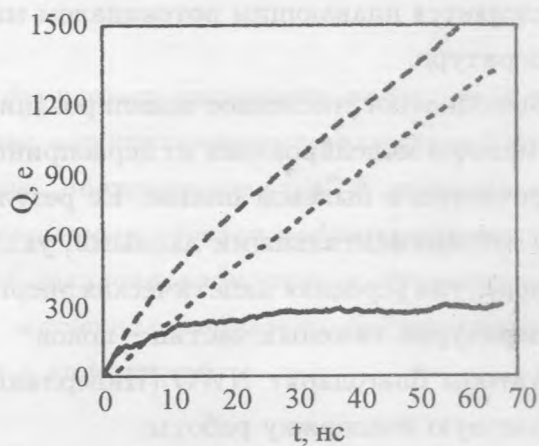
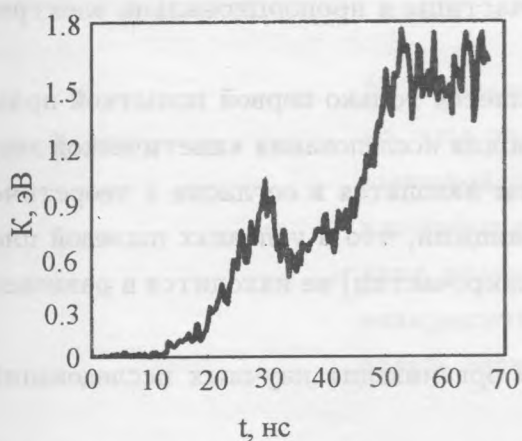


Рис. 3. Расчет методом частиц в ячейке для макрочастицы конечного размера.

Рис. 4. Расчет методом частиц в ячейке для макрочастицы конечного размера.

На рис. 2 представлены результаты более длительных расчетов, аналогично рис. 1 прорисованы зависимости кинетической энергии макрочастицы от времени. Пунктир – расчет для системы из 1500 ионов и 1200 электронов без учета экранирования, штрихованная кривая – с экранированием, сплошная кривая – для системы из 8000 ионов и 7700 электронов с учетом экранирования, помещенных в куб с термостатирующими стенками и точечным зарядом в центре $Q = -300 e$.

На рис. 3 и 4 представлены результаты расчетов для поглощающей сферы радиуса $rN_i^{1/3} = 0.25$. Рассматривалась система из 12000 ионов, 11700 электронов, помещенных в куб с термостатирующими условиями отражения на стенках и поглощающими граничными условиями на сфере. Начальный заряд макрочастицы полагался равным нулю. На рис. 3 приведена зависимость кинетической энергии макрочастицы от времени. На рис. 4 приведены зависимости от времени отрицательного заряда макрочастицы (сплошная кривая), числа поглощенных электронов (точки) и числа поглощенных ионов (пунктир). Заряд макрочастицы формируется при этом самосогласованно – в результате равенства

в среднем по времени потоков электронов и ионов. Характер поведения кинетической энергии макрочастицы сохраняется и для макрочастицы конечного размера.

Характерный период, наблюдаемый в расчетах, коррелирует с ионным ленгмюровским периодом 6.7 нс. Во всех расчетах кинетическая энергия в среднем значительно превышает температуру тяжелой компоненты. Объяснение этого факта состоит, видимо, в том, что кинетическая энергия макрочастицы определяется не температурой тяжелых частиц, а энергией падающих на поверхность ионов, которая, в свою очередь, определяется плавающим потенциалом макрочастицы и пропорциональна электронной температуре.

Выполненное численное моделирование является только первой попыткой применения методов моделирования из первопринципов для исследования кинетической энергии макрочастиц в пылевой плазме. Ее результаты находятся в согласии с теоретическими и экспериментальными данными, указывающими, что в условиях пылевой плазмы температура (средняя кинетическая энергия макрочастиц) не находится в равновесии с температурой тяжелых частиц – ионов.

Авторы благодарят NWO (Нидерландская организация научных исследований) за финансовую поддержку работы.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Цытович В. Н. УФН, **167**, N 1, 57 (1997).
- [2] Игнатов А. М. Физика плазмы, **22**, 648 (1996); **24**, N 8, 731 (1998).
- [3] Trigger S. A. and Schram P. P. J. M. J. Phys. D: Appl. Phys., **32**, 234 (1999).
- [4] Melzer A., Noman A., and Piel A. Phys. Rev., **E53**, 3137 (1996).
- [5] Morfill G. E., Thomas H. M., Konopka U., and Zuzic M. Phys. Plasmas, **5**, 1 (1999).
- [6] Zagorodny A., Schram P. P. J. M., and Trigger S. A. Phys. Rev. Lett., in press.
- [7] Хокни Р., Иствуд Дж. Численное моделирование методом частиц. М., Мир, 1987.
- [8] Майоров С. А., Ткачев А. Н., Яковленко С. И. УФН, **164**, N 3, 297 (1994).