

УДК 533.9

**МОДЕЛИРОВАНИЕ СИСТЕМЫ МНОГИХ КУЛОНОВСКИХ ЧАСТИЦ, СОДЕРЖАЩЕЙ МНОГОЗАРЯДНЫЕ ИОНЫ**

А. Н. Ткачев, С. И. Яковленко

*Проведено моделирование динамики многих кулоновских частиц для случая, когда положительные тяжелые частицы являются многозарядными ионами. Показано, что в этом случае (как и для случая плазмы с зарядами частиц равными по модулю) имеют место две стадии релаксации. Быстрая, динамическая релаксация обусловлена перемешиванием фазовых траекторий системы частиц на части энергетической поверхности в фазовом пространстве. Медленная, кинетическая стадия обусловлена потерей временной симметрии численного решения.*

Моделирование динамики многих кулоновских частицы (ДМКЧ) позволило обнаружить необычные свойства этих динамических систем (см. обзоры [1 – 4]). В частности, было показано, что релаксация системы кулоновских частиц к термодинамическому равновесию происходит в течение двух радикально отличающихся этапов. На первом этапе имеет место динамическая релаксация, обусловленная перемешиванием фазовых траекторий частиц на части энергетической поверхности в фазовом  $\Gamma$ -пространстве [3 – 7]. При этом движение частиц носит обратимый характер (не теряется временная симметрия решения). На втором этапе имеет место кинетическая релаксация. Кинетическая релаксация не описывается динамическими уравнениями. Для того, чтобы она имела место, необходима потеря временной симметрии движения частиц. Потеря временной симметрии может иметь место как в результате накопления ошибок в численном решении динамических уравнений, так и за счет специально организованного в программе, внешнего (по отношению к динамическим уравнениям) стохастического воздействия на систему частиц [1 – 4].

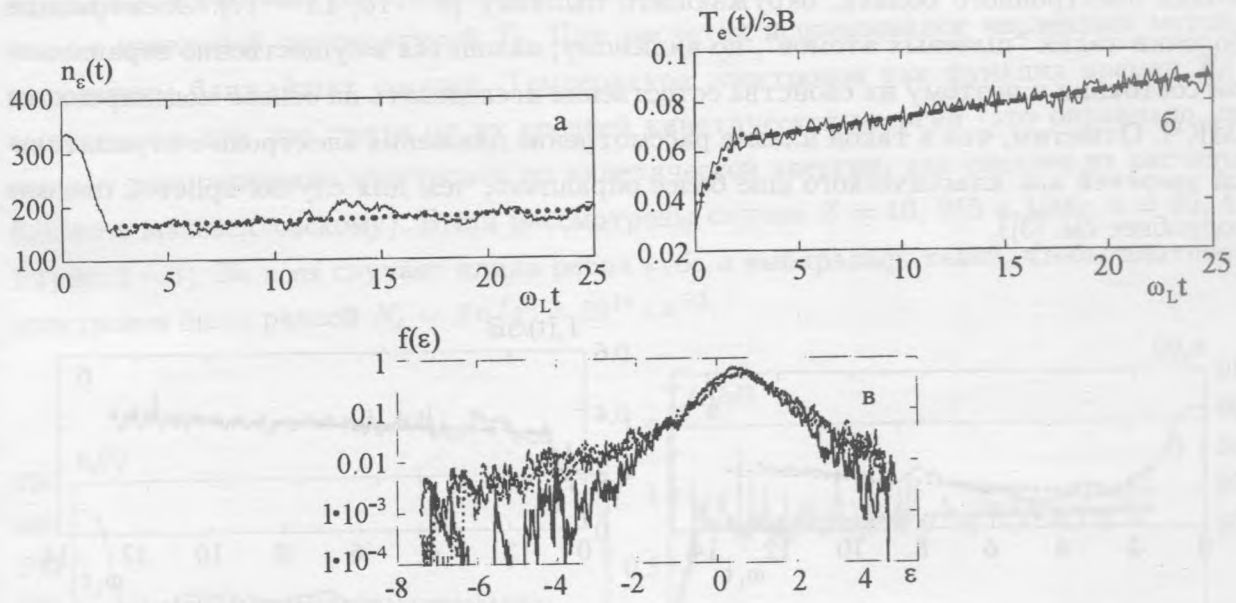


Рис. 1. Характеристики релаксации системы кулоновских частиц при  $Z = 10$ ,  $n = 90$ : а) зависимость от времени числа электронов, имеющих отрицательную полную энергию. Пунктирная прямая соответствует линейной зависимости, аппроксимирующей стадию кинетической релаксации:  $n_{in}[1+(t-t_n)/\tau_n]$ . В этом расчете  $n_{in} = 164$ ,  $\omega_L t_n = 2.51$ ,  $\omega_L \tau_n = 166$ ; б) зависимость от времени температуры электронов. Пунктирная прямая соответствует линейной зависимости, аппроксимирующей стадию динамической релаксации:  $T_{oin}[1+t/\tau_{Td}]$ . В этом расчете:  $T_0 = 0.0286$  эВ,  $T_{oin} = 0.0391$  эВ,  $\omega_L \tau_{Td} = 3.18$ . Штриховая прямая соответствует линейной зависимости, аппроксимирующей стадию кинетической релаксации:  $T_{in}(1+(t-t_d)/\tau_k)$ . В этом расчете  $T_{in} = 0.065$  эВ,  $\omega_L t_d = 2.5$ ,  $\omega_L \tau_k = 50$ ; в) функция распределения электронов по полной энергии для различных временных интервалов. Функция распределения получена усреднением по временным промежуткам длительностью  $1.57/\omega_L$ . Сплошная, пунктирная и штриховая кривые – соответственно для усреднения в начале, середине и конце расчета.

Представляет интерес моделирование ДМКЧ в том случае, когда некоторые частицы являются многократно заряженными ионами [8 – 10]. Такая ситуация имеет место в так называемой пылевой плазме, где существенную роль играют заряженные частицы микронных размеров (см. литературу в [11, 12] и работы [13, 14]). Обычно свойства такой плазмы моделируют, задавая из дополнительных соображений некоторый потенциал взаимодействия между заряженными пылинками. При попытках выяснить физику взаимодействия пылинок объектом исследования должна быть, в первую очередь, ди-

намика электронного облака, окружающего пылинку [8 – 10, 15 – 17]. Электронные оболочки таких "пылевых атомов", по-видимому, находятся в существенно неравновесном состоянии и поэтому их свойства естественно исследовать на основе моделирования ДМКЧ. Отметим, что в такой плазме рассмотрение движения электрона с отрицательной энергией как классического еще более оправдано, чем для случая простой плазмы (подробнее см. [3]).

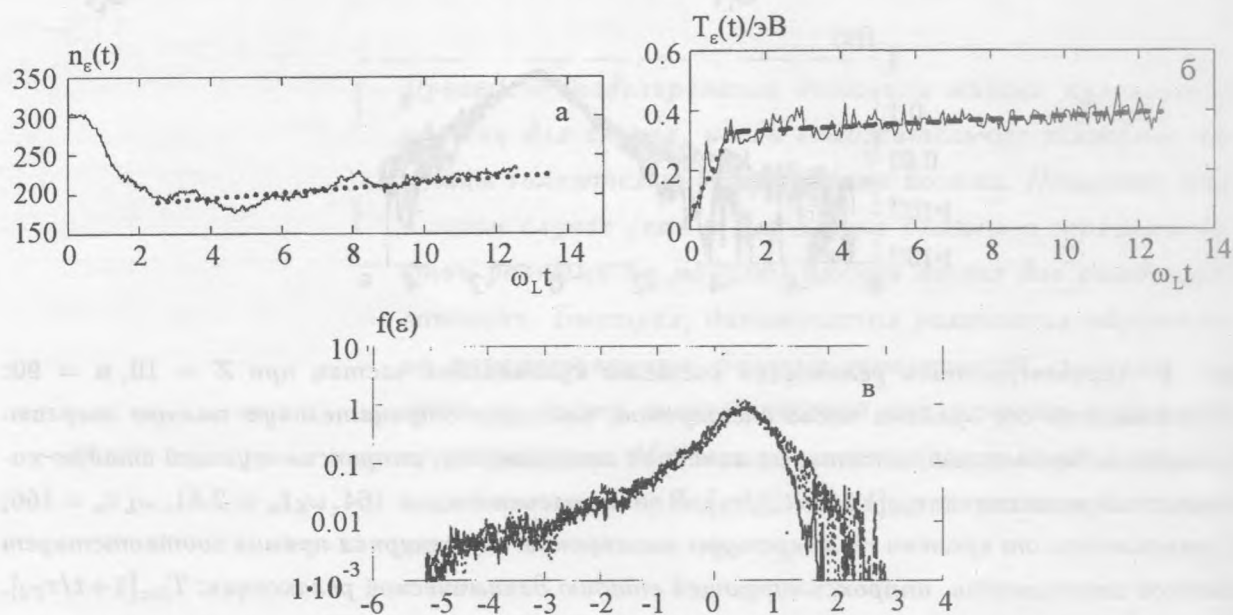


Рис. 2. То же, что на рис. 1 для  $Z = 255$ ,  $n = 4$ . Параметры аппроксимирующих линейных зависимостей  $n_{in} = 191$ ,  $\omega_L t_n = 1.57$ ,  $\omega_L \tau_n = 61$ ,  $T_0 = 0.0286$  эВ,  $T_{0in} = 0.0464$  эВ,  $T_{in} = 0.328$  эВ,  $\omega_L t_d = 1.26$ ,  $\omega_L \tau_{Td} = 0.18$ ,  $\omega_L \tau_k = 57$ . Функция распределения получена усреднением по временным промежуткам длительностью  $3.14/\omega_L$ .

В данной работе представлены результаты моделирования системы кулоновских частиц, в которой положительные частицы являются многократно заряженными ионами.

Расчеты проводились в той же постановке задачи, что и в работах, отраженных в обзорах [1 – 4]. Для моделирования ДМКЧ рассматривалось численное решение уравнений Ньютона для  $n$  ионов и  $Zn$  электронов, помещенных в куб с длиной ребра  $a$ . Здесь  $Z$  – заряд ионов. Масса ионов бралась равной массе химического элемента с номером  $Z$ . Полагалось, что частицы являются заряженными проницаемыми сферами небольшого диаметра  $r_0 = 0.05a/(Zn)^{1/3}$ . Считалось, что стенки куба отражают электроны и ионы

зеркально. Начальное распределение электронов по скоростям задавалось максвелловским с начальной температурой  $T_0$ . При расчетах использовался численный метод с выделением ближайших соседей. Температура электронов как функция времен  $T_e(t)$  вычислялась как две трети от их средней кинетической энергии (это оправдано, поскольку распределение электронов по кинетической энергии, как следует из расчетов, близко к максвелловскому). Были рассмотрены случаи  $Z = 10, 255$  и  $1000$ ;  $n = 90, 4$  и  $1$  (рис. 1 – 3). Во всех случаях длина ребра куба  $a$  выбиралась такой, чтобы плотность электронов была равной  $N_e = Zn/a^3 = 10^{14} \text{ см}^{-3}$ .

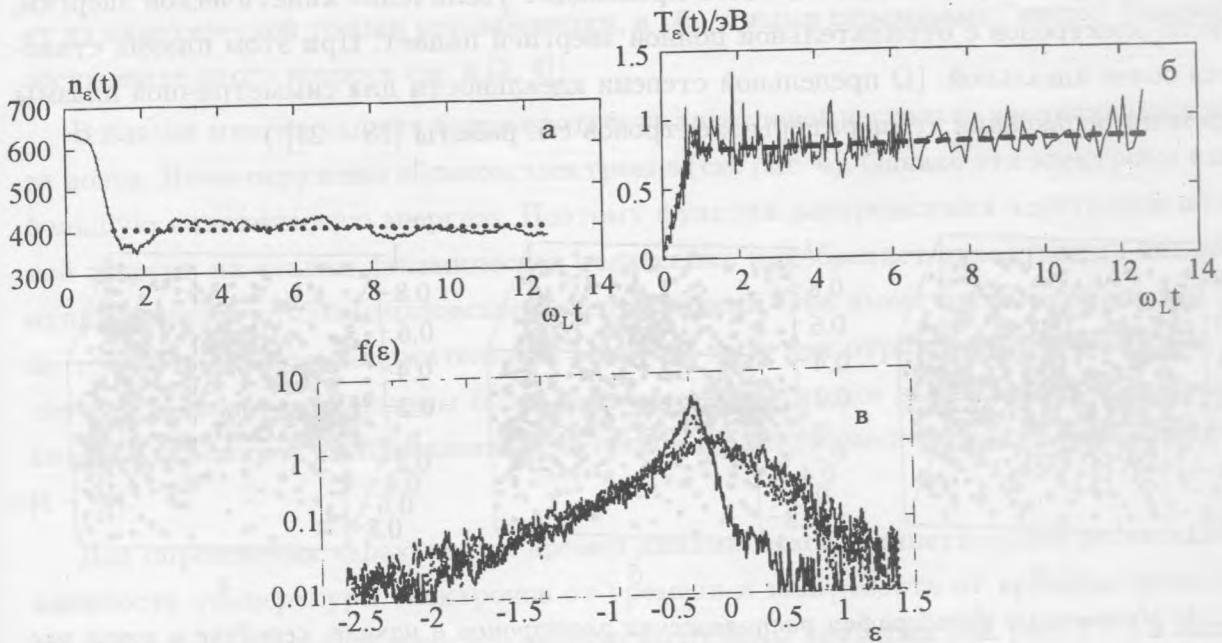


Рис. 3. То же, что на рис. 1 для  $Z = 1000, n = 11$ . Параметры аппроксимирующих линейных зависимостей  $n_{in} = 405, \omega_L t_n = 1.23, \omega_L \tau_n = 760, T_0 = 0.0286 \text{ эВ}, T_{0in} = 0.0112 \text{ эВ}, T_{in} = 0.787 \text{ эВ}, \omega_L t_d = 0.97, \omega_L \tau_{Td} = 0.01, \omega_L \tau_k = 134$ . Функция распределения получена усреднением по временным промежуткам длительностью  $1.57/\omega_L$ .

Расчеты показывают, что, как и для рассматривавшейся нами ранее симметричной плазмы (когда заряды положительных и отрицательных частиц равны по модулю), имеют место две стадии релаксации. Быстрая, динамическая релаксация на временах  $0 < \omega_L t \sim 1$  обусловлена перемешиванием фазовой траектории системы частиц на части энергетической поверхности в  $\Gamma$ -пространстве. Медленная, кинетическая стадия при  $\omega_L t > 2$  обусловлена потерей временной симметрии численного решения. Здесь

$\omega_L = (4\pi e^2 N_e / m_e)^{1/2}$  – ленгмюровская частота. Тот факт, что кинетическая стадия обусловлена именно потерей временной симметрии, достаточно убедительно продемонстрировано в работах [5 – 10].

На стадии динамической релаксации  $0 < \omega_L t < 2$  число электронов, имеющих отрицательную полную энергию  $n_\epsilon$ , резко падает. Дело в том, что вначале кинетическая энергия электронов мала. Хотя число электронов с отрицательной энергией велико, их потенциальная энергия также мала. В результате динамического перемешивания фазовой траектории в  $\Gamma$ -пространстве часть электронов приобретает сравнительно большую отрицательную энергию. За счет этого происходит увеличение кинетической энергии, и число электронов с отрицательной полной энергией падает. При этом плазма становится более идеальной. (О предельной степени идеальности для симметричной плазмы и времени релаксации температуры электронов см. работы [18 – 21].)

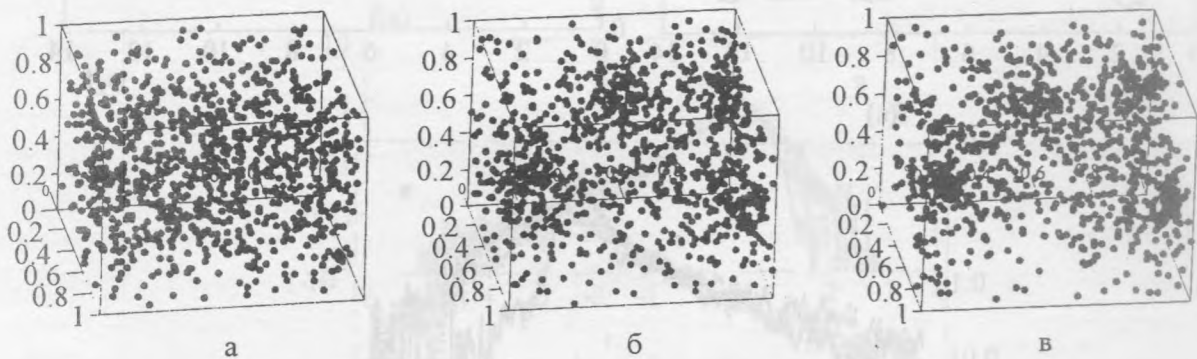


Рис. 4. Мгновенные фотографии расположения электронов в начале, середине и конце расчета, представленного на рис. 2 ( $Z = 255$ ,  $n = 4$ ).

Характерным временем динамической релаксации является величина, обратная известному показателю Ляпунова, характеризующему экспоненциальную расходимость изначально близких траекторий в  $\Gamma$ -пространстве. Для системы многих кулоновских частиц он слабо зависит от плотности и температуры электронов и составляет величину  $L \approx 2.4\omega_L$ . Это согласуется с характерным временем изменения  $T_e$  на стадии динамической релаксации (рис. 1 – 3).

В результате динамической релаксации система кулоновских частиц попадает в метастабильное состояние, которое характеризуется почти постоянной температурой электронов  $T_e$  (см. рис. 1 – 3). Для прямой демонстрации метастабильности установившегося состояния в работах [3, 4, 8 – 10] была вычислена матрица  $W(t, \epsilon, \epsilon')$ , дающая

среднее по расчету число переходов из энергетической точки  $\epsilon$  в энергетическую точку  $\epsilon'$  за временной интервал  $t$ . Расчеты показывают, что в установившемся состоянии она симметрична. Иначе говоря, в этом состоянии (далеком от термодинамического равновесия) имеет место детальный баланс переходов.

Наличие метастабильного состояния нельзя объяснить предположением, что эффективность обмена энергией при столкновениях электронов по каким-либо причинам оказывается намного ниже, чем это принято в кинетической теории. Переходы из одного энергетического интервала в другой происходят достаточно часто. Однако переходы "вниз" по энергии компенсируются не дальнейшими переходами "вниз", как это следует из кинетической теории рекомбинации, а обратными переходами "вверх" (подробное обсуждение этого вопроса см. в [3, 4]).

В плазме многозарядных ионов плотность электронов несколько увеличивается вблизи ионов. Ионы окружены облаком электронов (см. рис. 4). Однако эти электроны имеют большую кинетическую энергию. Поэтому функция распределения электронов по полной энергии на стадии динамической релаксации приобретает характерный вид, резко отличающийся от больцмановского распределения. Она имеет экспоненциальный спад не только в области положительных энергий, но и при отрицательных энергиях. Для случая симметричной плазмы было найдено аналитическое выражение для функции, к которой стремится распределение электронов на динамической стадии релаксации (см. [1 - 4]).

Для определения характерных времен динамической и кинетической релаксации зависимость температуры электронов от времени и зависимость от времени числа электронов с отрицательной энергией аппроксимированы прямыми (см. рис. 1 - 3 и подписи к ним). Расчеты позволяют выявить качественный характер зависимости релаксационных характеристик от заряда тяжелых частиц.

Характерное время роста температуры на динамической стадии релаксации  $\tau_{Td}$  уменьшается с ростом  $Z$  (примерно как  $\tau_{Td} \propto Z^{-3/2}$ ). В соответствии с уменьшением времени рекомбинации с ростом  $Z$  несколько вырастает температура начальной стадии кинетической релаксации  $T_{in}$  (примерно как  $T_{in} \propto Z^{1/2}$ ). Время же кинетической релаксации температуры наоборот растет с  $Z$  (хотя и медленно, примерно как  $\tau_k \propto \ln(Z + \text{const})$ ). Зависимость от времени числа электронов с отрицательной энергией  $n_e(t)$  оказывается существенно немонотонной. Поэтому ее аппроксимация линейной зависимостью даже на кинетической стадии релаксации в общем случае неадекватна. Например, для  $Z = 1000$  аппроксимация дает не рост, а падение числа связанных

электронов во времени, хотя ясно, что на достаточно большом промежутке времени на стадии кинетической релаксации их число должно в среднем расти со скоростью  $\propto Z^3$ .

Как уже неоднократно отмечалось, в метастабильном состоянии имеет место существенное замораживание рекомбинации (наиболее подробное обсуждение см. в [3 – 7]). Для случая частиц с большим зарядом замораживание рекомбинации оказывается еще сильнее, чем для случая симметричной плазмы, поскольку согласно имеющимся кинетическим моделям скорость рекомбинации должна расти  $\propto Z^3$ . Рассмотрение показывает, что, например, для случая  $Z = 255$  метастабильное состояние релаксирует, по крайней мере, в тысячу раз медленнее, чем это следует из кинетической теории [8 – 10].

Итак, расчеты ДМКЧ, моделирующие многозарядную частицу, окруженную облаком электронов, показывают, что в такой системе формируется метастабильное состояние, далекое от термодинамического равновесия. Аналогичное состояние было обнаружено нами ранее для плазмы однозарядных ионов [1 – 5]. Однако для многозарядных частиц неравновесный характер метастабильного состояния выражен ярче. Функция распределения электронов по полной энергии радикально отличается от больцмановской для большого интервала отрицательных энергий; замораживание рекомбинации выражено намного сильнее.

Для детального сопоставления с ситуацией, имеющей место в пылевой плазме, необходимо решить вопрос о механизме внешней стохастизации движения электронов, приводящем к кинетической релаксации в реальных экспериментах. Это зависит от конкретных условий. В термоэмиссионной плазме основной механизм стохастизации может быть связан с неупругим взаимодействием электронов и пылинок; прилипанием и эмиссией. Рассмотрение этих вопросов выходит за рамки данной работы.

#### ЛИТЕРАТУРА

- [1] Майоров С. А., Ткачев А. Н., Яковленко С. И. УФН, **164** (3), 298 (1994).
- [2] Mayorov S. A., Tkachev A. N., and Yakovlenko S. I. *Physica Scripta*, **51**, 498 (1995).
- [3] Ткачев А. Н., Яковленко С. И. Изв. ВУЗов, Физика, **41** (1), 47 (1998).
- [4] Yakovlenko S. I. *Physics of Vibrations*, **6** (4), 267 (1998).
- [5] Ткачев А. Н., Яковленко С. И. Письма ЖТФ, **23** (17), 68 (1997).
- [6] Ткачев А. Н., Яковленко С. И. ДАН, **359** (6), 765 (1998).
- [7] Яковленко С. И. Краткие сообщения по физике ФИАН, N 3, 13 (1999).

- [8] Ткачев А. Н., Яковленко С. И. Препринт ИОФАН N 8, М., 1997.
- [9] Ткачев А. Н., Яковленко С. И. ЖТФ, **69** (1), 53 (1999).
- [10] Ткачев А. Н., Яковленко С. И. Краткие сообщения по физике ФИАН, N 6, 9 (1999).
- [11] Фортвов В. Е., Якубов И. Т. Неидеальная плазма, М., Энергоатомиздат, 1994.
- [12] Цытович Н. Н. УФН, **167** (1), 57 (1997).
- [13] Фортвов В. Е., Нефедов А. П., Петров О. Ф. и др. ЖЭТФ, **111** (2), 467 (1997).
- [14] Фортвов В. Е., Филинов В. С., Нефедов А. П. и др. ЖЭТФ, **111** (3), 889 (1997).
- [15] Ткачев А. Н., Яковленко С. И. Письма ЖТФ, **25** (1), 52 (1999).
- [16] Яковленко С. И. Письма ЖТФ, **25** (16), 83 (1999); Краткие сообщения по физике ФИАН, N 9, 3 (1999).
- [17] Яковленко С. И. Письма ЖТФ, **26** (2000) (в печати); Краткие сообщения по физике ФИАН, N 9, 10 (1999).
- [18] Ткачев А. Н., Яковленко С. И. Письма ЖТФ, **21** (22), 90 (1995).
- [19] Ткачев А. Н., Яковленко С. И. Краткие сообщения по физике ФИАН, N 1 - 2, 39 (1996).
- [20] Ткачев А. Н., Яковленко С. И. Изв. ВУЗов, Физика, **39** (10), 3 (1996).
- [21] Ткачев А. Н., Яковленко С. И. ЖТФ, **67** (8), 42 (1997).
- [22] Ткачев А. Н., Яковленко С. И. ЖЭТФ, **67** (8), 42 (1997).

Институт общей физики РАН

Поступила в редакцию 28 апреля 2000 г.