

УДК 533.9

## РАСЧЕТ ДИНАМИКИ МАКРОЧАСТИЦ В ПЛАЗМЕННОМ ПОТОКЕ

С. В. Владимиров<sup>1</sup>, Н. Крамер<sup>1</sup>, С. А. Майоров

*Путем численного моделирования методом частиц в ячейке исследуется временная зависимость заряда пылинки. Выявлено определяющее влияние флуктуаций заряда пылинки и ионной фокусировки позади нее на рост ее кинетической энергии в параболическом потенциале. Эта модель описывает случай левитации заряженных пылинок в потоке ионов, формирующемся в приэлектродном слое.*

Пылевая плазма является объектом интенсивных экспериментальных и теоретических исследований последних лет [1 – 5]. В настоящей работе исследовалась двухтемпературная плазма, состоящая из холодных ионов и горячих электронов. Температура электронов определяется энерговкладом от внешнего источника (СВЧ излучение, разряд, фотоионизация и т.д.). Ионы же находятся в тепловом равновесии с холодными атомами буферного газа. В приэлектродном слое ионы имеют значительную направленную скорость, сравнимую или даже превышающую скорость звука. Пылинка при равенстве сил гравитации и силы увлечения со стороны ионов в среднем неподвижна (левитирует). Интересен вопрос о наборе кинетической энергии левитирующей макрочастицы (раскачке), находящейся в потоке ионов. Последние экспериментальные данные указывают на наличие механизма раскачки пылинки и ухода ее из потенциальной ямы [6]. Кроме того, многие экспериментальные данные (см., напр., [1 – 3]), а также недавнее рассмотрение на основе кинетической теории [3], говорят о возможности значительного превышения средней кинетической энергии пылинок температуры тяжелой компоненты – ионов.

<sup>1</sup>Университет Сиднея, г. Сидней, Австралия.

В настоящей работе на основе численного моделирования рассчитывалась временная зависимость кинетической энергии пылинки, находящейся в потоке ионов, с учетом самосогласованной модели зарядки макрочастицы. В начальный момент времени в центр вычислительной ячейки помещалась тяжелая макрочастица, которая полагалась покоящейся и нейтральной. Решались уравнения Ньютона для системы точечных, заряженных частиц, помещенных в куб с термостатирующими стенками, отражающими по закону Максвелла. Учитывалось только взаимодействие макрочастицы плазмы и влияние экранирования.

Расчеты показали, что после зарядки макрочастица в ионном потоке начинает качиваться и набирает значительную энергию, превышающую температуры ионов, электронов и кинетическую энергию направленного движения ионов в потоке. При отсутствии направленного движения ионов наблюдается обычное броуновское движение макрочастицы, но со средней энергией, большей температуры тяжелых частиц – ионов [4].

Моделирование методом молекулярной динамики (МД) основывается на первых принципах (*ab initio*) и является наиболее точной методикой исследований для многих плазменных задач [7]. Однако большой объем требуемых вычислений обычно не позволяет проводить расчеты с реальными параметрами плазмы. Поэтому в подавляющей части численных кодов используются различные упрощающие допущения, как физического характера, так и в вычислительной схеме.

Рассмотрим систему многих частиц, состоящую из однократно заряженных ионов с массой  $m_i$ , положительным зарядом  $e$  и электронов с массой  $m_e$ , зарядом  $-e$ . Пусть в ней имеется  $n_e$  электронов и  $n_i$  ионов и они заключены в куб, в котором также находится поглощающее сферическое тело радиуса  $R$  с зарядом  $Q = Z_0 e < 0$ , обладающее большой массой  $m_g \gg m_i \gg m_e$ . Число ионов и электронов выбирались такими, чтобы система в среднем по времени являлась электронейтральной:  $n_i - n_e + \langle Z_0 \rangle = 0$ . Здесь  $\langle Z_0 \rangle$  является средним по времени зарядом макрочастицы, который определяется как сумма зарядов частиц плазмы, коснувшихся ее (условие прилипания). Метод МД заключается в расчете и изучении временной эволюции такой системы. Траектории частиц определяются путем решения уравнений Ньютона:

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

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  $Q$ ,  $\mathbf{r}_{kg} = \mathbf{r}_k - \mathbf{r}_g$ ,  $f_{kl}$  – сила кулоновского взаимодействия. Уравнения (1), совместно с уравнениями движения для макрочастицы, интегрировались численно методом Рунге–Кутты четвертого порядка [7].

В пылевой плазме заряд макрочастицы экранируется окружающей плазмой, поэтому число частиц в моделируемой системе должно быть во много раз больше, чем заряд макрочастицы. Поэтому, если не использовать метод крупных частиц, то требуется проводить расчеты систем из многих тысяч частиц. Кроме того, помимо большого отношения масс ионов и электронов в задаче о наборе энергии макрочастицей возникает новый фактор, увеличивающий требуемое время расчета – это большое отношение массы макрочастицы к массе ионов. Для уменьшения 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:

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

В уравнениях (2) при расчете траекторий частиц плазмы в поле макрочастицы учитывается экранирующее влияние ион-электронного облака, окружающего макрочастицу. Суммирование в (2) ведется по частицам, расположенным ближе к макрочастице, чем рассматриваемая  $k$ -ая частица. Сила, действующая на макрочастицу, определялась по третьему закону Ньютона, кроме того, добавлялась сила, пропорциональная отклонению макрочастицы от центра куба. Такая модель позволяет учесть нахождение макрочастицы в точке равновесия сил гравитации, линейно меняющегося электрического поля приэлектродного слоя и силы увлечения со стороны ионного потока. Уравнения движения макрочастицы, помимо электрических и гравитационных сил, учитывают также передачу импульса от попавших в нее электронов и ионов. Для определения степени адекватности модели проводились расчеты и сравнение результатов, получаемых методом МД (1) и частиц в ячейке (2) [4].

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 полагалось изотропным. Таким способом формировалось начальное распределение без связанных частиц. 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 частиц плазмы от стенок куба использовались термостатирующие граничные условия.

Такая постановка задачи позволяет самосогласованно рассчитывать флуктуации заряда макрочастицы и их влияние на ее кинетические характеристики.

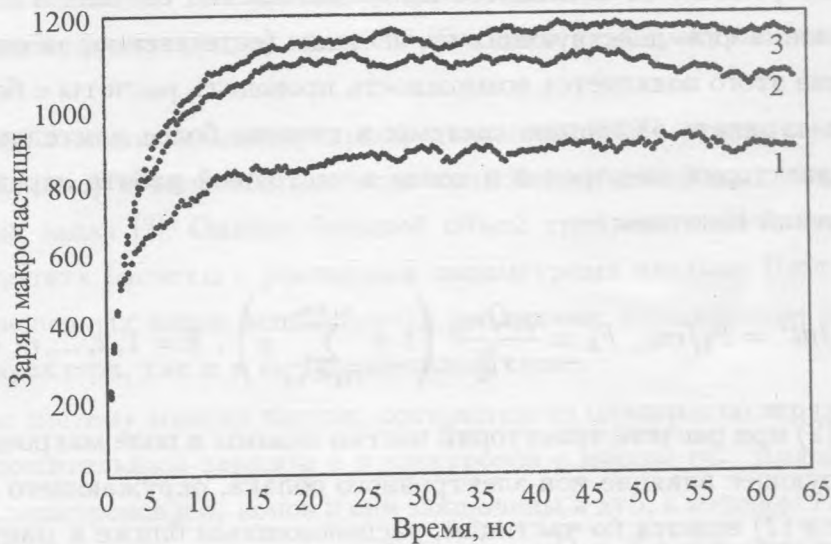


Рис. 1. Расчеты процесса зарядки макрочастицы. Кривая 1 – случай покоящейся плазмы, 2 – дозвуковой поток  $M^2 = 0.6$ , 3 – сверхзвуковой поток  $M^2 = 2.4$ .

Для расчета была выбрана плазма гелия с  $z = 1$ ,  $N_i = 2 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-3}$  и реальными значениями масс электронов и ионов. Температура электронов  $T_e = 1 \text{ эВ}$ , ионов  $T_i = 0.025 \text{ эВ}$ , кинетическая энергия ионов в потоке была равна  $0.5 \text{ эВ}$  и  $2 \text{ эВ}$ , что соответствует случаям дозвукового ( $M^2 = 0.6$ ) и сверхзвукового ( $M^2 = 2.4$ ) потоков. Здесь  $M = V_0/c_s$  – число Маха,  $V_0$  – скорость потока,  $c_s$  – скорость звука. Была выбрана макрочастица с массой равной  $10^4 \text{ а.е.м.}$  и диаметром  $d = 1 \text{ мкм}$ . Время расчета было равно  $t_0 = 6.5 \cdot 10^{-8} \text{ с}$ , что значительно больше времени ионного ленгмюровского периода

$6.7 \cdot 10^{-9}$  с. Ионный дебаевский радиус при таких параметрах плазмы в единицах характерного межоионного расстояния равен  $r_{Di}N_i^{1/3} = 1.06$ , электронный –  $r_{De}N_i^{1/3} = 6.6$ . Число ионов в системе для приведенных расчетов было равно 5000 при заряде макрочастицы порядка тысячи. Число электронов в системе выбиралось таким, чтобы с учетом заряда макрочастицы система в среднем по времени была нейтральной.

Отметим, что параболический потенциал введен для описания динамики макрочастицы вблизи точки равновесия сил и не действует на электроны и ионы – только на макрочастицу. Глубина потенциальной ямы – 20 В, период гармонических колебаний макрочастицы с заданной массой в этом потенциале равен  $2.2 \cdot 10^{-9}$  с.

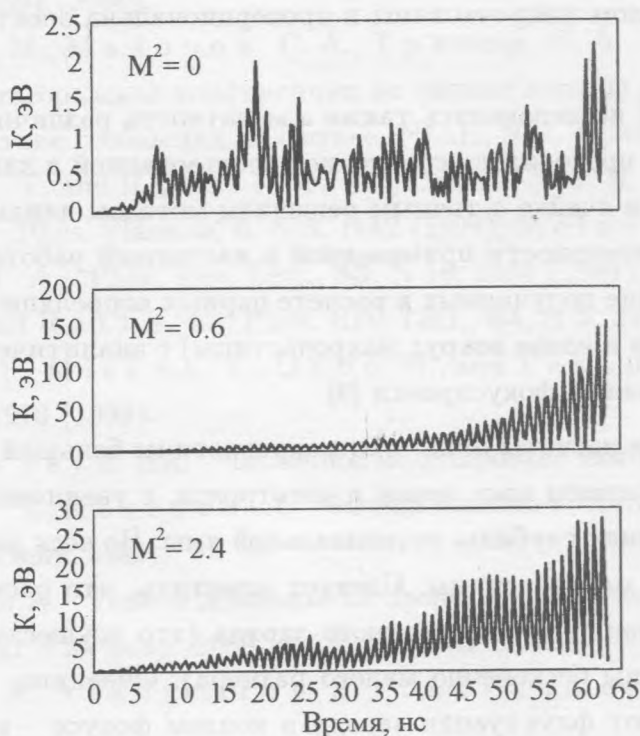


Рис. 2. Кинетическая энергия первоначально покоившейся макрочастицы в параболическом потенциале, удерживающем макрочастицу в центре вычислительной ячейки.

На рис. 1 представлены зависимости заряда макрочастицы от времени для трех случаев: плазмы без направленного движения ионов  $M^2 = 0$ , при дозвуковом потоке ионов с  $M^2 = 0.6$  и сверхзвуковом потоке с  $M^2 = 2.4$ .

На рис. 2 для этих же трех случаев приведены зависимости кинетической энергии макрочастицы от времени.

Первоначально покоившаяся макрочастица из-за столкновений с ионами и электронами плазмы приобретает энергию и начинает раскачиваться в параболическом потенциале вблизи точки равновесия. Из рис. 2 видно, что энергия макрочастицы растет и в среднем по периоду кинетическая энергия значительно превышает температуру ионов  $T_i = 0.025 \text{ эВ}$  для всех трех расчетов. Период осцилляций совпадает, естественно, с периодом гармонических осцилляций в заданном параболическом потенциале.

В расчетах с покоящейся плазмой кинетическая энергия в среднем значительно превышает температуру тяжелой компоненты. Объяснение этого факта состоит 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 [4].

Отметим, что в [4] исследовались также адекватность различных вычислительных моделей, в частности, проводилось сравнение использованной в данной работе модификации метода частиц в ячейке с точным решением методом динамики многих частиц. Подтверждением правомерности примененной в настоящей работе методики (2) является хорошее совпадение получаемых в расчете парных корреляционных функций (распределений электронов и ионов вокруг макрочастицы) с аналитическими результатами [8] и МД расчетами ионной фокусировки [9].

Проводились также расчеты динамики макрочастицы большей массы, с модельным (уменьшенным) отношением масс ионов и электронов, с увеличенным числом частиц, при различных значениях глубины потенциальной ямы. Во всех расчетах при наличии потока шла раскачка макрочастицы. Следует отметить, что раскачка макрочастицы происходила и в случае ее фиксированного заряда (это осуществлялось выбором заряженной макрочастицы бесконечно малого размера). Очевидно, в этом случае определяющую роль играют флуктуации заряда в ионном фокусе – кильватерном хвосте макрочастицы.

Выполненные расчеты являются первой попыткой (известной авторам) численного моделирования динамики макрочастиц в приэлектродном слое. Результаты находятся в согласии с теоретическими и экспериментальными данными, указывающими, что в условиях пылевой плазмы температура (средняя кинетическая энергия) пылинок не находится в равновесии с температурой тяжелых частиц – ионов или атомов буферного газа. Результаты моделирования при наличии ионного потока согласуются с экспериментами, в которых наблюдалась раскачка пылинок в приэлектродном слое.

Авторы благодарят Австралийский исследовательский совет (ARC) за финансовую поддержку работы, а один из авторов (С. А. М.) – также и Нидерландскую организацию научных исследований (NWO) за частичную финансовую поддержку работы.

## ЛИТЕРАТУРА

- [1] Цытович В. Н. УФН, **167**, N 1, 57 (1997).
- [2] Benkadda S., Tsytoovich V. N., and Vladimirov S. V. Phys. Rev. E, **60**, N 4, 4708 (1999).
- [3] Zagorodny A., Schram P. P. J. M., and Trigger S. A. Phys. Rev. Lett., **84**, N 16, 3594 (2000).
- [4] Игнатов А. М., Майоров С. А., Триггер С. А., Шрам П. Тезисы докладов 27 Звенигородской конференции по физике плазмы и УТС, 21 – 25 февр. 2000, с. 185; Краткие сообщения по физике ФИАН, N 7, 7 (2000).
- [5] Mutsoukas T. and Russel M. Phys. Rev. E, **55**, N 1, 55 (1997); Lapenta G. Phys. Plasmas, **6**, N 5, 1442 (1999); Melzer A., Schweiger V. A., and Piel A. Phys. Rev. Lett., **83**, N 16, 3194 (1999); Конопка У., Морфил Г. Е., and Ratke L. Phys. Rev. Lett., **84**, N 5, 891 (2000).
- [6] Nunomura S., Misawa T., Ohno N., and Takamura S. Phys. Rev. Lett., **83**, N 10, 1970 (1999).
- [7] Хокни Р., Иствуд Дж. Численное моделирование методом частиц. М., Мир, 1987; Бэдсел Ч., Ленгтон А. Физика плазмы и численное моделирование. М., Энергоатомиздат, 1989.
- [8] Майоров С. А. Тезисы докладов 27 Звенигородской конференции по физике плазмы и УТС, 21 – 25 февр. 2000. с. 186; Физика плазмы, N 7, с. 669 (2000).
- [9] Maiorov S. A., Vladimirov S. V., and Cramer N., Phys. Rev. E. (in press).