

УДК 533.9

ДЕБАЕВСКАЯ КВАЗИМОЛЕКУЛА

С. И. Яковленко

Рассмотрена электронейтральная система из двух положительных зарядов небольшого размера, окруженных общим облаком электронов, распределенных по Больцману, моделирующая взаимодействие макрочастиц в пылевой плазме. Показано, что электронные оболочки поляризуются так, что силы притяжения пылинок в дебаевской квазимолекуле преобладают над силами отталкивания их одноименных зарядов, что имеет место вплоть до расстояний, равных размеру пылинок. Сделан вывод о том, что метастабильные пылевые жидкости и кристаллы не могут иметь место в том случае, когда электронные облака заряженных частиц распределены по Больцману.

Плазма, в которой существенную роль играют заряженные частицы микронных размеров (так называемая пылевая плазма) интересна с точки зрения как фундаментальных, так и прикладных исследований [1 – 4]. Ввиду большого заряда, который могут приобретать мелкодисперсные частицы, пылевая плазма становится существенно неидеальной уже при сравнительно малой плотности этих частиц. В такой плазме могут образовываться плазменно-пылевые кристаллы, капли и облака.

При теоретическом рассмотрении пылевой плазмы в первую очередь объектом исследования должны быть пылинки, окруженные облаками электронов. Такая пылинка является аналогом атома в кинетике газов. Оболочка такого пылевого атома может поляризоваться. Из общих соображений ясно, что на достаточно больших расстояниях между одноименно заряженными пылинками (ядрами пылевых атомов) поляризационные силы притяжения должны преобладать над силами отталкивания. По аналогии с ситуацией, имеющей место при взаимодействии обычных атомов, естественно предположить, что на близких расстояниях начинают преобладать уже силы отталкивания

одноименно заряженных пылинок. Это должно приводить к существованию устойчивых пылевых молекул, а также жидких и кристаллических структур из пылинок, окруженных электронными облаками.

По-видимому, смена притяжения отталкиванием на расстояниях порядка дебаевского радиуса действительно имеет место в экспериментах, иначе бы пылевые структуры не могли образовываться. Однако в данной работе показано, что возможно только притяжение пылинок, если распределение электронов в облаке, окружающем пылинку, термодинамически равновесно. Отсюда следует вывод, что существование реальных пылевых структур обусловлено неравновесным состоянием их электронных облаков.

Заряд, окруженный облаком электронов, распределенных по Больцману, ранее нами назван дебаевским атомом [5] в отличие от томас-фермиевского атома, в котором электроны вырождены. В данной работе рассмотрена система из двух зарядов, окруженных общим облаком электронов, распределенных по Больцману. Такую систему было бы естественно называть двухатомной дебаевской молекулой. Однако, как уже сказано выше, такая система является неустойчивой. В атомной физике и в теории атомных столкновений в таких случаях используют термин квазимолекула. Соответственно, будем называть рассматриваемые пылинки в облаке электронов, распределенных по Больцману, дебаевской квазимолекулой.

Исходные уравнения. Потенциал φ и напряженность поля \mathbf{E} как в дебаевском атоме, так и в дебаевской квазимолекуле описываются уравнением Пуассона и распределением Больцмана для электронов $N_e = N_{e0} \exp(\varphi)$. Соответственно, исходные уравнения имеют вид

$$(\nabla \mathbf{E}) = -\exp(\varphi); \quad \mathbf{E} = -\nabla \varphi, \quad (1)$$

где ∇ – гамильтонов векторный оператор.

Мы здесь используем безразмерные уравнения: длина измеряется в дебаевских радиусах $r_D = (T_e/4\pi e^2 N_{e0})^{1/2}$, где N_{e0} – плотность свободных электронов в отсутствие внешнего поля; e – заряд электрона; T_e – температура электронов; потенциал измерен в единицах T_e/e ; напряженность поля – в T_e/er_D .

Если, например, ориентироваться на условия экспериментов [3], в которых $N_{e0} = 2.5 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-3}$, $T_e = 0.146 \text{ эВ} = 1700 \text{ К}$, для характерных величин имеем: $r_D = 0.002 \text{ см}$, $T_e/e = 0.146 \text{ В}$, $T_e/er_D = 80 \text{ В/см}$. При среднем радиусе пылинки $r_0 = 0.4 \text{ мкм}$ ($r_0/r_D = 0.02$) и ее заряде $Z_p e = 500e$ имеем напряженность поля на поверхности частицы $E_0 = Z_p e/r_0^2 = 4.5 \cdot 10^4 \text{ В/см}$ ($E_0 er_D/T_e = 550$).

Рассмотрение дебаевского атома и дебаевской квазимолекулы с формальной точки зрения отличается лишь геометрией задачи. При рассмотрении дебаевского атома [5], ориентируясь на сферически симметричное электронное облако, удалось обойтись решением одномерного уравнения Пуассона (1). При рассмотрении дебаевской квазимолекулы будем считать задачу симметричной относительно оси z , соединяющей ядра. Тогда достаточно рассмотреть двумерное уравнение (1).

Отметим также, что основная цель рассмотрения дебаевской молекулы состоит в том, чтобы найти зависимость результирующей электростатической силы, действующей на пылинки, от расстояния между ними.

Граничные условия и метод решения. Для решения двумерного уравнения Пуассона (1) использовался пакет программ ПОТЕНЦИАЛ. Он был создан для моделирования процесса экстракции ионов из плазмы через систему электродов при лазерном разделении изотопов [6, 7] (см. также [8]). В частности, эти программы по заданным положениям и потенциалам произвольно расположенных проводящих электродов прямоугольного сечения вычисляют пространственное распределение потенциала φ , плотности электронов N_e и напряженности электрического поля \mathbf{E} .

В пакете программ ПОТЕНЦИАЛ задача Пуассона решается методом установления в виде, близком к изложенному в [9]. Для пространственной аппроксимации производных автоматически строится существенно неоднородная сетка. Критерием установления служит стабилизация интеграла от напряженности поля по поверхностям с заданными потенциалами.

Соответственно, при рассмотрении дебаевской молекулы заряженные пылинки моделировались малыми проводящими электродами, имеющими форму шайбы (см. рис. 1). Для этого Ю. И. Сыцько модифицировал пакет программ ПОТЕНЦИАЛ с тем, чтобы имелась возможность решать уравнение Пуассона не только в плоской, но и в цилиндрической геометрии. Граничные условия задавались потенциалом φ_0 на этих электродах-шайбах. Кроме того, задавалось нулевое значение потенциала на поверхности, удаленной достаточно далеко от пылинок-электродов.

После решения задачи о пространственном распределении потенциала и напряженности поля проводилась обработка результатов с использованием системы Mathcad. Целью обработки результатов было нахождение заряда на электроде Z_p и электростатической силы $F(d)$, действующей на электрод, где d – расстояние между центрами электродов. Потенциальная энергия взаимодействия электродов $U(d)$ (т.е. терм дебаевской квазимолекулы) находилась интегрированием: $U(d) = \int_d^\infty F(x) dx$.



Рис. 1. Геометрия, в которой решалось уравнение Пуассона.

Заряд вычислялся по теореме Гаусса как поток вектора напряженности поля через поверхность электрода. Сила воздействия электрического поля на электрод определялась интегрированием электрического давления $E^2/8\pi$ на поверхность проводника. Напомним, что сила этого давления всегда направлена так, что стремится удалить заряды с поверхности проводника.

Результаты расчетов. В обсуждаемых ниже расчетах рассматривалась цилиндрическая область радиусом $4r_D$ и высотой $8r_D$. Диаметр и высота электродов, моделирующих пылинки, были взяты равными некоторой величине r_0 , причем размер r_0 был достаточно мал $r_D/r_0 = 50$. Расстояние между электродами варьировалось в диапазоне $d = 2r_0 - 1.5r_D$. Результаты расчетов приводятся для случая больших зарядов электродов $Z_p \gg 10$.

Распределение потенциала φ и плотности электронов $n_e \equiv \exp(\varphi)$ имеют вид (см. рис. 2), который качественно можно угадать заранее. Электроны концентрируются у поверхности электродов, в значительной мере экранируя их заряд. Однако заметная доля электронов скапливается на середине оси дебаевской квазимолекулы. Это обусла-

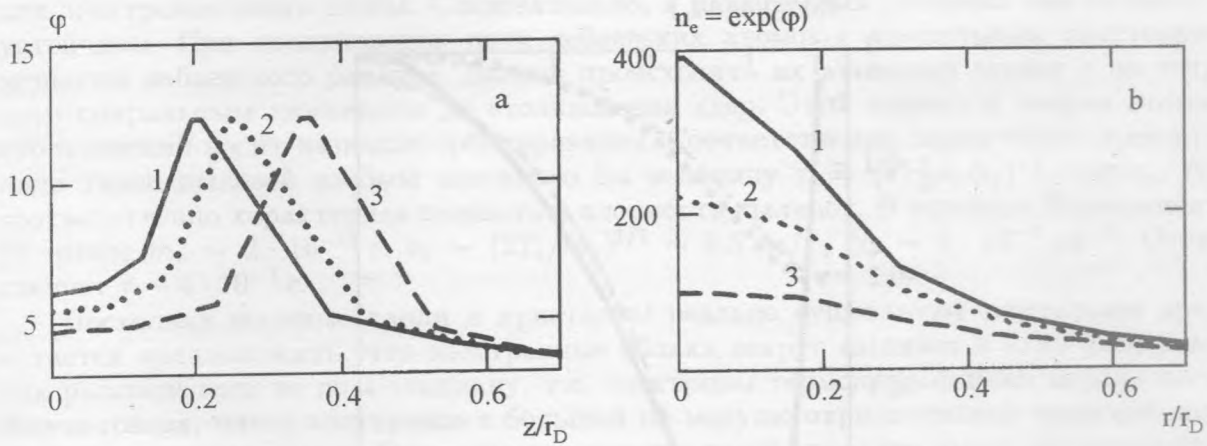


Рис. 2. Зависимость потенциала φ (а) от расстояния z до центра дебаевской молекулы вдоль оси, соединяющей ядра, и плотности электронов $n_e = \exp(\varphi)$ (б) от расстояния r до центра дебаевской молекулы по перпендикуляру к оси, соединяющей ядра (см. рис. 1). $d = 0.4r_D$ (1), $d = 0.5r_D$ (2), $d = 0.7r_D$ (3).

вливает эффективное притяжение ядер. При этом оказывается, что притяжение имеет место во всем диапазоне рассмотренных состояний.

Расчеты показали, что заряды электродов Z_p пропорциональны потенциалу φ_0 на них, а суммарная сила воздействия на электрод со стороны другого электрода и электронного облака пропорциональна квадрату напряжения и, соответственно, заряда: $F(r) \propto \varphi_0^2 \propto Z_p^2$. Это позволило выразить силу и энергию взаимодействия ядер через некоторые универсальные функции: $F(d) = f(d/r_D) \cdot (Z_p e / r_D)^2$, $U(d) = u(d/r_D) \cdot (Z_p^2 e^2 / r_D)$. Универсальные функции $f(x)$ и $u(x)$ представлены на рис. 3. Множители $(Z_p e / r_D)^2$ и $Z_p^2 e^2 / r_D$ определяют силу и потенциальную энергию взаимодействия точечных зарядов на расстоянии, равном дебаевскому радиусу.

Заключение. Зависимость силы и энергии взаимодействия пылинок в дебаевской квазимолекуле от расстояния между ними универсальна при $d > 5r_0$. При меньших расстояниях результаты зависят от конкретной формы электродов. Однако интерес представляют именно большие расстояния между ядрами $d \gg 2r_0$, которые имеют место в известных пылевых структурах.

Из результатов расчетов следует, что, по крайней мере, на расстояниях, существенно превышающих размеры пылинки, преобладают силы притяжения. Этот факт име-

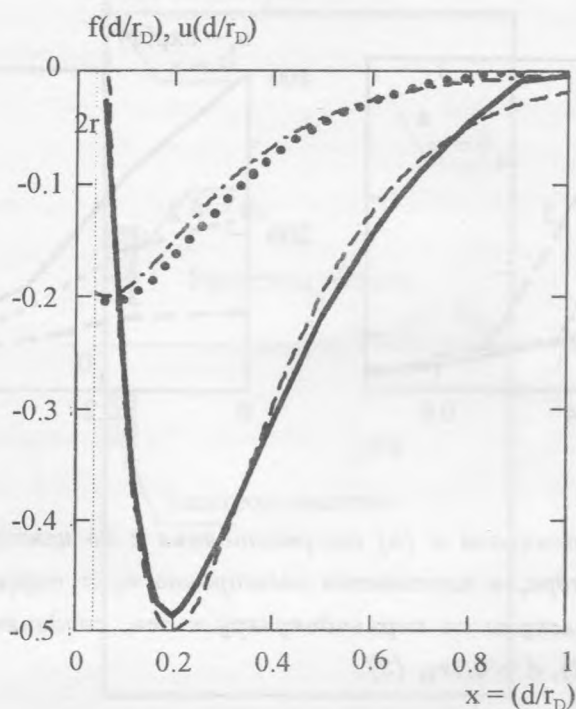


Рис. 3. Универсальные функции, характеризующие зависимость силы (сплошная кривая) и потенциальной энергии (точечная кривая) взаимодействия ядер дебаевской квазимолекулы от расстояния между ними. Пунктирная кривая соответствует функции $0.5[\exp(-10(x - 0.2)) - 2\exp(-5(x - 0.2))]$, аппроксимирующей силу. Штрих-пунктирная кривая соответствует функции $0.05[\exp(-10(x - 0.2)) - 4\exp(-5(x - 0.2))]$, аппроксимирующей потенциальную энергию (терм).

ет естественное объяснение. Плотность электронов дебаевского атома резко растет по мере приближения к его ядру (подробнее см. [5]). Поэтому при сближении ядер все большее количество электронов скапливается в центре молекулы. Сила притяжения ядер к этим электронам, скопившимся на оси молекулы, преобладает над силой кулоновского расталкивания ядер. Отметим, что это принципиально отличает дебаевскую квазимолекулу от реальной молекулы, в которой движение электронов описывается не классическими, а квантовыми законами. Дело в том, что в силу квантово-механического принципа неопределенности плотность электронов в реальных атомах не растет бесконечно вблизи атомного ядра. В частности, если использовать томас-фермиевское, а не больцмановское распределение электронов, силы притяжения на малых расстояниях

между ядрами сменяются силами отталкивания.

Оценки показывают, что в пылевых структурах квантово-механические эффекты для электронов очень слабы. Следовательно, в равновесных условиях они не были бы устойчивы. При столкновении двух дебаевских атомов с прицельным расстоянием, меньшим дебаевского радиуса, должен происходить их взаимный захват с последующим спиральным движением до столкновения ядер. Этот эффект в теории атомных столкновений носит название орбитирования. Соответственно, характерное время распада такой пылевой плазмы составило бы величину $\tau = (\pi r_D^2 v_p N_p)^{-1}$, где v_p , N_p — соответственно характерная скорость и плотность пылинок. В условиях экспериментов [3] имеем $m_p \sim 2 \cdot 10^{-12}$ г, $v_p \sim (2T_e/m_p)^{1/2} \sim 0.5$ см/с, $N_p \sim 5 \cdot 10^{-7}$ см⁻³. Отсюда следует $\tau \sim 4 \cdot 10^{-3}$ с.

Поскольку пылевые капли и кристаллы реально существуют длительное время, остается предположить, что электронные облака вокруг пылинок в этих экспериментах распределены не по Больцману, т.е. электроны термодинамически неравновесны. Иначе говоря, число электронов с большой по модулю отрицательной энергией должно быть аномально мало. Отметим, что именно такой характер имеет метастабильное распределение, полученное моделированием динамики многих кулоновских частиц [5, 10 – 12].

Автор благодарен Ю. И. Сыцько за модернизацию пакета программ ПОТЕНЦИАЛ.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Фортов В. Е., Якубов И. Т. Неидеальная плазма. М., Энергоатомиздат, 1994.
- [2] Цытович В. Н. УФН, **167**, N 1, 57 (1997).
- [3] Фортов В. Е., Нефедов А. П., Петров О. Ф. и др. ЖЭТФ, **111**, N 2, 467 (1997).
- [4] Фортов В. Е., Филинов В. С., Нефедов А. П. и др. ЖЭТФ, **111**, N 3, 889 (1997).
- [5] Ткачев А. Н., Яковленко С. И. Препринт ИОФАН N 8, М., 1997.
- [6] Голятина Р. И., Сыцько Ю. И., Яковленко С. И. Краткие сообщения по физике ФИАН, N 7, 3 (1997).
- [7] Golyatina R. I., Syts'ko Yu. I., Yakovlenko S. I. Laser Physics, **8**, N 4, 860 (1998).
- [8] Яковленко С. И. Квантовая электроника, **25**, no. 11, 971 (1998); Laser and Particle Beams, **16**, N 4, 541 (1998).
- [9] Syts'ko Yu. I., Yakovlenko S. I. Laser Physics, **6**, N 5, 989 (1996).
- [10] Майоров С. А., Ткачев А. Н., Яковленко С. И. УФН, **164**, N 3, 297 (1994).
- [11] Mayorov S. A., Tkachev A. N., Yakovlenko S. I. Physica Scripta, **51**, 498 (1995).
- [12] Ткачев А. Н., Яковленко С. И. Изв. ВУЗов, Физика, **41**, N 1, 47 (1998).