

## ФОРМИРОВАНИЕ УПОРЯДОЧЕННЫХ СТРУКТУР МАКРОЧАСТИЦ В КЛАССИЧЕСКОЙ ТЕРМИЧЕСКОЙ ПЛАЗМЕ: ЭКСПЕРИМЕНТ И КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

*В. Е. Фортон, В. С. Филинов, А. П. Нефедов,*

*О. Ф. Петров, А. А. Самарян, А. М. Лунаев*

*Научно-исследовательский центр теплофизики импульсных воздействий  
Российской академии наук  
127412, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 17 июля 1996 г.,  
после переработки 3 октября 1996 г.

Проведено сопоставление результатов экспериментальных измерений упорядоченных структур макрочастиц  $\text{SeO}_2$  в термической плазме при атмосферном давлении и температуре около 1700 К с результатами численных расчетов методом Монте-Карло для модели Юкавы. Излагаются некоторые особенности проведения эксперимента, включая диагностику упорядоченных структур макрочастиц. Обсуждается теоретическая модель, описывающая поведение равновесной системы заряженных макрочастиц в плазме и эффективный потенциал взаимодействия между ними. Отмечается неплохое совпадение экспериментальных и численных результатов и рассматриваются возможные причины полученных расхождений.

### 1. ВВЕДЕНИЕ

Плазма с макрочастицами (часто такую плазму называют пылевой, аэрозольной или плазмой с конденсированной дисперсной фазой) характеризуется тем, что частицы (их размеры могут варьироваться от сотых долей микрона до нескольких десятков микрон) эффективно взаимодействуют с электронами и ионами и поэтому существенно влияют на свойства плазмы. При вводе или возникновении частиц в плазме, например в результате конденсации, они заряжаются потоками электронов и ионов, а также путем эмиссии электронов. Последний процесс может привести к положительному электрическому заряду, при этом частицы, эмитирующие электроны, могут повысить концентрацию электронов в газовой фазе и ее электропроводность. Если же частицы захватывают электроны, то возникает противоположный эффект [1–4].

Одним из параметров для описания плазмы является так называемый параметр взаимодействия  $\gamma_p$ , который является отношением средней кулоновской энергии частиц к их средней тепловой энергии. Специфика плазмы с макрочастицами заключается в том, что заряд частиц  $Z_p$  может иметь чрезвычайно большие величины (порядка  $10^2$ – $10^5$  зарядов электрона). В результате параметр взаимодействия  $\gamma_p$ , который зависит от  $Z_p^2$ , может намного превышать единицу, что означает возникновение сильнонеидеальной плазмы. Теоретические расчеты равновесных свойств такой плазмы показывают, что при определенных условиях сильная межчастичная корреляция приводит к возникновению упорядоченных структур в расположении макроскопических частиц, аналогичных

структурам в жидкости или твердом теле [5]. Электроны и ионы при этом остаются идеальным газом, как и в дебаевской плазме.

Детальное рассмотрение упорядоченных структур, включая условия их формирования, проведено в рамках модели однокомпонентной плазмы и модели Юкавы [5–7].

Для однокомпонентной плазмы потенциал взаимодействия частиц  $U(r)$  является кулоновским, а термодинамика плазмы характеризуется параметром  $\gamma_p$  в виде

$$\gamma_p = (Z_p e)^2 / \langle r \rangle k T_g.$$

Здесь  $T_g$  — температура плазмы,  $\langle r \rangle = (4\pi n_p / 3)^{-1/3}$  — среднее расстояние между частицами,  $n_p$  — концентрация частиц. В модели Юкавы рассматривается эффект экранировки фоном зарядов, что приводит к потенциалу взаимодействия типа Дебая–Хюккеля. Влияние экранировки определяется отношением  $\kappa = \langle r \rangle / r_D$  ( $r_D$  — радиус Дебая). При  $\langle r \rangle / r_D \rightarrow 0$  модель однокомпонентной плазмы является предельным случаем модели Юкавы.

Отметим, что в этих моделях рассматривается классическая квазинейтральная, пространственно неограниченная плазма, для которой путем численного моделирования получены критические значения параметра межчастичного взаимодействия, соответствующие фазовым переходам [8, 9]. Так, в однокомпонентной плазме трехмерная система формирует регулярную кристаллическую структуру для значений  $\gamma_p$ , больших  $\gamma_c = 171$ . При малых величинах  $\gamma_p$  ( $\gamma_p < 4$ ) состояние плазмы является «газообразным» [8].

Одни из первых экспериментальных наблюдений кристаллических структур относятся к системе заряженных частиц железа и алюминия микронных размеров, удерживаемых определенной конфигурацией переменного и статического электрических полей [10]. В более поздних исследованиях были обнаружены кулоновские кристаллы для атомных ионов в ловушках различных типов, например, в ловушке Пеннинга [11]. Для макроскопических частиц с большим отрицательным зарядом ( $\sim 10^4 e$ ) кристаллические состояния наблюдались при их вводе в пограничный слой объемного заряда высокочастотного разряда [12], в котором устанавливалось равновесие между гравитационными и электростатическими силами [13–16].

Практически во всех известных экспериментальных работах упорядоченные структуры наблюдались в облаке объемного заряда, содержащем от сотен до нескольких тысяч заряженных частиц. Потенциал взаимодействия частиц, вид которого оказывает существенное влияние на фазовые переходы в плазме, может при этом значительно отличаться от потенциала взаимодействия в классической квазинейтральной плазме. Для плазменных образований такого типа также теоретически предсказано значительное влияние граничных условий на фазовое состояние плазмы [17]. Так, например, в сферической ловушке облако частиц разделяется на сферические слои. Вместо резких фазовых переходов происходит постепенная эволюция системы из состояния жидкости, характеризуемого ближним порядком, в промежуточное, характеризуемое существованием жидкой и твердой фаз, и, окончательно, в твердое состояние [18].

Для системы макрочастиц в пограничном слое высокочастотного разряда кристаллические структуры наблюдались, когда  $2.1 \cdot 10^4 < \gamma_p < 1.6 \cdot 10^5$  при  $0.6 \leq \kappa \leq 4.8$  [14] или  $\gamma_p \sim 10^6$  при  $\kappa \sim 9.8$  [16]. Численные же расчеты в рамках модели Юкавы показывают, что для кристаллизации требуется  $\gamma_p \approx 99$  при  $\kappa = 0.7$ ,  $160 < \gamma_p < 850$  при  $1 < \kappa < 5$  и  $\gamma_p = 4.8 \cdot 10^4$  при  $\kappa = 10$  [9, 19]. В [20] такой значительный отрыв в величине

$\gamma_p$  (примерно два порядка) объясняется броуновским движением частиц. Соответствующие модельные расчеты приводят к  $\gamma_p \approx 1.6 \cdot 10^4$  при  $\kappa = 4$ . Тем не менее, остаются значительные ( $\sim 10$  раз) отличия в величине  $\gamma_p$ , что приписывается возмущающему действию внешнего высокочастотного поля.

Таким образом, изучение фазовых переходов в системах частиц, удерживаемых в ловушках, требует учета как влияния внешних полей, так и выбора адекватного потенциала взаимодействия частиц. Все эти факторы настолько усложняют задачу численного моделирования фазовых переходов в таких системах, что к настоящему времени здесь можно говорить лишь об отдельных успехах.

В данной работе экспериментально и теоретически исследуется возникновение упорядоченной структуры в системе заряженных макрочастиц, находящихся в практически ламинарном потоке слабоионизованной термической плазмы при атмосферном давлении и температуре порядка двух тысяч градусов [21]. Теоретический анализ проводится на основе численных расчетов, выполненных методом Монте-Карло для модели Юкавы. Достаточно большие размеры плазменного образования (его объем  $\sim 10$  см<sup>3</sup>, что соответствует числу макрочастиц порядка  $10^8$  при их концентрации  $\sim 10^7$  см<sup>-3</sup>), однородность, отсутствие внешних электрических и магнитных полей позволили уменьшить влияние граничных условий на фазовые переходы в плазме и тем самым корректно выполнить анализ экспериментальных результатов в рамках модели Юкавы.

## 2. ЭФФЕКТИВНОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ МАКРОЧАСТИЦ В ПЛАЗМЕ

Проблема корректного построения эффективного псевдопотенциала взаимодействия макрочастиц в низкотемпературной плазме является наиболее трудной и до настоящего времени не решена. Аналогичная проблема возникает и в теории суспензий заряженных частиц [22, 23]. Многие теоретические работы начинают исследование свойств таких систем в рамках так называемой «примитивной» модели. В данной модели взаимодействие между заряженными макрочастицами описывается с помощью кулоновского потенциала твердых сфер, для которого имеем  $V_{mm}(r) = \infty$  для  $r \leq 2R_p$ , а при  $r > 2R_p$

$$V_{mm}(r) = \frac{(Z_p e)^2}{r}, \quad (1)$$

где  $Z_p$  — заряд макрочастицы,  $2R_p$  — ее характерный размер.

Взаимодействие макрочастиц с микрочастицами (электронами и ионами) описывается потенциалом, для которого при  $r \leq R_p + \sigma_\alpha$  имеем  $V_{mc}(r) = \infty$ , а при  $r > R_p + \sigma_\alpha$

$$V_{mc}(r) = \frac{(Z_p q_\alpha) e^2}{r}, \quad (2)$$

где  $q_\alpha e$  — заряд микрочастицы сорта  $\alpha$ ,  $\sigma_\alpha$  — ее характерный размер (например:  $\alpha = 1$  и  $q_\alpha = -1$  для электронов,  $\alpha = 2$  и  $q_\alpha > 0$  для ионов).

Взаимодействие между микрочастицами описывается потенциалом, для которого при  $r \leq \sigma_\alpha + \sigma_\gamma$  имеем  $V_{\alpha\gamma}(r) = \infty$ , а при  $r > \sigma_\alpha + \sigma_\gamma$

$$V_{\alpha\gamma}(r) = \frac{(q_\alpha q_\gamma) e^2}{r}. \quad (3)$$

Концентрации макрочастиц, электронов и ионов  $n_p$ ,  $n_1$  и  $n_2$  должны удовлетворять условию электронейтральности

$$Z_p n_p + q_2 n_2 = q_1 n_1. \tag{4}$$

Благодаря сильной зарядовой и плотностной асимметрии  $Z_p \gg q_1$ ,  $Z_p \gg q_2$ ,  $q_1 \approx q_2$ ,  $n_p \ll n_1$  и  $n_p \ll n_2$ ,  $n_2 q_2 \ll n_1 q_1$ , а также сильному взаимодействию между частицами, «примитивная» модель весьма трудна как для построения последовательной аналитической теории, так так и для численных исследований. В настоящее время надежда на успех теоретических исследований связана с переходом к эффективным псевдопотенциалам взаимодействия между макрочастицами, возникающим в результате усреднения (интегрирования) по координатам микрочастиц. Одним из наиболее естественных способов введения эффективных псевдопотенциалов взаимодействия между макрочастицами является введение эффективного гамильтониана с помощью выражения [24]

$$H_{eff} = -kT \ln \left\langle \exp \left( -\frac{H}{kT} \right) \right\rangle, \tag{5}$$

где  $H$  — полный гамильтониан «примитивной» модели,  $k$  — постоянная Больцмана, скобки  $\langle \rangle$  обозначают каноническое усреднение по координатам и импульсам микрочастиц. Эффективный гамильтониан  $H_{eff}$  может иметь следующий вид:

$$H_{eff} = K_m + U_{mm} (\{R_j\}) + F ([\rho_c(r); \{R_j\}]), \tag{6}$$

где  $K_m$  — кинетическая энергия макрочастиц,

$$U_{mm} (\{R_j\}) = \sum_{i < j} V_{mm} (|R_i - R_j|/2R)$$

— потенциальная энергия взаимодействия макрочастиц с помощью потенциала (1),  $\{R_j\}$  — набор координат, описывающий конфигурацию макрочастиц. В данном выражении функционал  $F$  описывает свободную энергию микрочастиц во внешнем поле макрочастиц. Известно [23], что  $F$  может быть представлена как функционал локальной плотности заряженных микрочастиц  $\rho_c(r)$ , параметрически зависящей от позиций макрочастиц  $\{R_j\}$ . Функционал  $F$  может быть представлен в виде суммы четырех членов в виде

$$F = F_{id} + F_{ext} + F_{cc} + F_{cor}, \tag{7}$$

где

$$F_{id} = kT \int dr \rho_c(r) [\ln (\lambda_c^3 \rho_c(r)) - 1], \tag{8}$$

$$F_{ext} = \int dr \rho_c(r) V_{ext} (r, \{R_j\}) = \sum_j \int dr \rho_c(r) V_{mc} (|r - R_j|), \tag{9}$$

$$F_{cc} = \frac{(q_1 e)^2}{2} \int dr' dr \frac{\rho_c(r) \rho_c(r')}{|r - r'|} \tag{10}$$

и  $\lambda_c$  — тепловая длина волны микрочастиц,  $F_{ext}$  описывает взаимодействие микро- и макрочастиц, а  $F_{cc}$  — вклад среднего поля, возникающий благодаря кулоновскому отталкиванию между электронами. К сожалению, явное выражение для члена  $F_{cor}$ , описывающего корреляцию макрочастиц, неизвестно, поэтому в литературе используются различные приближения. Достаточно надежным приближением является выражение

$$F_{cor} = kT \int dr \rho_c(r) \Psi_{OCP}^{exc}(T, \rho_c(r)) \quad (11)$$

где  $\Psi_{OCP}^{exc}(T, \rho_c(r))$  — удельный вклад в свободную энергию для модели однокомпонентной плазмы, который известен из расчетов методом Монте-Карло. Очевидно, что функционал  $F$  нелинейно зависит от координат  $\{R_j\}$ .

В работах [24, 25] для минимизации функционала  $F$  и нахождения эффективно-го потенциала взаимодействия между макрочастицами использован численный метод Карпаринелло. Результаты этих вычислений показали, что в широком диапазоне температур и плотностей в правой части уравнения (6) два слагаемых, зависящие от координат макрочастиц и описывающие многочастичные взаимодействия, могут быть надежно аппроксимированы суммой попарно аддитивных членов, каждый из которых в свою очередь хорошо аппроксимируется потенциалом Юкавы. Таким образом, в качестве эффективных парных потенциалов, описывающих взаимодействие между макрочастицами, можно использовать экранированный кулоновский потенциал типа Дебая-Хюккеля, в котором характерный масштаб экранировки и параметр взаимодействия имеют более сложные зависимости от плотности и температуры, чем в дебаевском случае. Эти зависимости различны для разных фазовых состояний системы [7, 24–26].

В силу последнего обстоятельства последовательное исследование фазовой диаграммы требует весьма тщательных и обширных расчетов. Более целесообразны, по-видимому, ориентировочные численные прикидки в сочетании с сопоставлением и анализом экспериментальных данных. В настоящей работе для условий проведенного эксперимента принята модель, в которой макрочастицы взаимодействуют с помощью экранированного кулоновского потенциала (дебаевская модель или модель Юкавы):

$$U(r) = \frac{(Z_p e)^2 \exp(-r/r_D)}{r} \quad (12)$$

Обоснованность применения модели Юкавы подтверждается и анализом экспериментальных данных, выполненным в [21].

### 3. КРИТЕРИИ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ

Для определения перехода системы в кристаллическое состояние в литературе [7, 23, 25–32] используются различные феноменологические критерии. Наиболее известен критерий Линдемана [26–28], по которому твердая фаза плавится, если отношение среднеквадратичного смещения частицы к среднему межчастичному расстоянию начинает превышать 0.1 (хотя иногда это число варьируется для разных физических систем между 0.05 и 0.2). Другие критерии были сформулированы в работах [29–32]. Например, было обнаружено, что на линии кристаллизации первый максимум жидкостного структурного фактора  $S(\mathbf{q})$ ,

$$S(\mathbf{q}) = 1 + n_p \int dr [g(r) - 1] \exp(-i(\mathbf{q}\mathbf{r})), \quad (13)$$

постоянен и равен 2.85. Здесь  $g(r)$  — бинарная корреляционная функция, которая представляет вероятность нахождения частицы на расстоянии  $r = |\mathbf{r}|$ .

В качестве простого критерия кристаллизации в терминах бинарной корреляционной функции рассматривалось отношение минимального  $g_{min}$  и максимального  $g_{max}$  ее значения [27–29]:

$$R_g = \frac{g_{min}}{g_{max}}. \quad (14)$$

Переход из жидкого в кристаллическое состояние соответствовал значению этого параметра равному 0.2.

#### 4. ЭКСПЕРИМЕНТ

Экспериментальный стенд, включавший генератор плазмы и средства диагностики для определения параметров частиц и газа, подробно описан в [21, 33]. Источник плазмы (двухфакельная пропан-воздушная горелка типа Меккера) создавал ламинарную струю плазмы с однородными распределениями ее параметров (температуры, концентрации электронов и ионов) в области внутреннего факела. Давление продуктов сгорания — атмосферное. Диаметр плазменной струи — 25 мм, ее скорость  $V_g$  варьировалась в пределах 2–3 м/с. Концентрация электронов и ионов в плазме лежала в диапазоне  $10^9$ – $10^{11}$  см $^{-3}$ , температуры электронов и ионов равны:  $T_i = T_e = T_g$ . Измерения температуры частиц спектрометрическим методом [34] показали, что она близка к температуре газа ( $T_p = T_g$ ).

Изучалась слабоионизованная термическая плазма с макрочастицами  $\text{CeO}_2$ . Выбор двуокиси церия в качестве материала для макрочастиц определялся как химической инертностью  $\text{CeO}_2$ , так и низкой работой выхода термоэлектронов ( $\sim 2.75$  эВ [35]) с поверхности разогретых частиц  $\text{CeO}_2$ . Частицы порошка двуокиси церия содержали примеси соединений щелочных металлов. Как результат, спектральные измерения в плазменной струе обнаружили присутствие атомов натрия с низким потенциалом ионизации. Таким образом, основными компонентами плазмы были заряженные частицы  $\text{CeO}_2$ , электроны и однократно заряженные ионы  $\text{Na}^+$ .

Для изучения кулоновских упорядоченных структур в плазме необходимы данные как о заряде частиц, так и об основных параметрах плазмы. В эксперименте определялись размеры частиц, их концентрация, температура плазмы, локальные концентрации электронов и ионов натрия [21, 33, 36–38].

Диагностика плазмы проводилась как зондовыми, так и оптическими методами. Концентрация  $n_i$  положительных ионов щелочных металлов измерялась методом электрического зонда [36, 37]. Для определения локальной концентрации электронов  $n_e$  использовался метод, основанный на измерении тока  $I$  и продольной напряженности электрического поля  $E$  в плазме [36]. Температура газа и концентрация атомов щелочных металлов измерялись традиционными методами: обобщенным методом обращения и методом полного поглощения [33].

Для определения среднего (заутеровского) диаметра  $D_p$  и концентрации макрочастиц  $n_p$  в струе плазмы применялся оригинальный лазерный метод [38]. Метод основан на измерениях экстинкции (ослабления излучения) в дисперсной среде при малых углах рассеяния и предназначен для определения характеристик частиц в диапазоне размеров

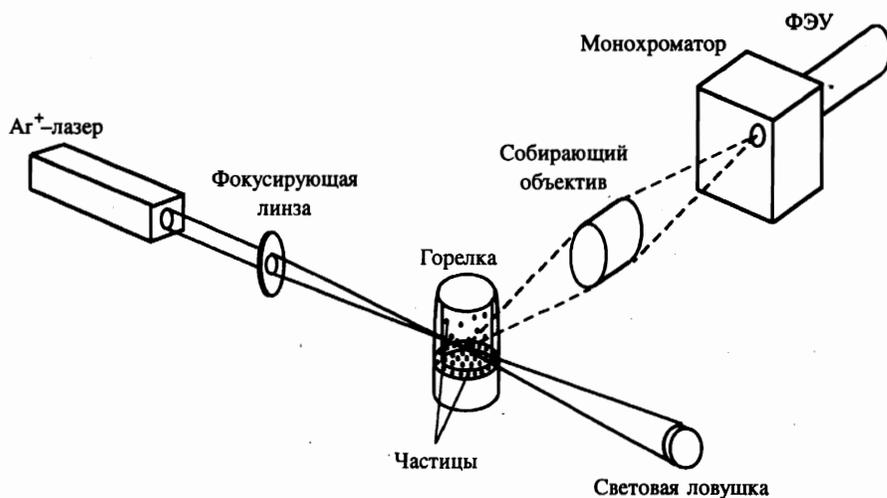


Рис. 1. Схема оптических измерений пространственных структур макрочастиц

0.5–15 мкм. При ошибке измерений экстинкции около 2%, погрешность восстановления размеров частиц составляла около 3%, концентрации — 10%.

Для измерений пространственного расположения макрочастиц применялся лазерный времяпролетный счетчик [21]. Измерительный объем времяпролетного счетчика формировался путем фокусировки пучка аргонового лазера ( $\lambda = 0.488$  мкм) в заданной области плазменной струи (рис. 1). Импульсы рассеяния от отдельных частиц преобразовывались ФЭУ в электрические сигналы. Полученные сигналы обрабатывались для расчета корреляционной функции  $g(r)$ , где  $r = V_p t$ . Здесь  $V_p$  — средняя скорость частиц ( $V_p \approx V_g$ ) и  $t$  — время. Бинарная корреляционная функция  $g(r)$  использовалась в дальнейшем для анализа пространственных структур частиц.

В измерениях с частицами  $\text{SeO}_2$  концентрация частиц  $n_p$  варьировалась в пределах  $(0.2\text{--}5.0) \cdot 10^7 \text{ см}^{-3}$ , температура плазмы  $T_g$  — в пределах 1700–2200 К. Как следствие, концентрация ионов  $n_i$  изменялась от  $0.4 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-3}$  до  $4.0 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-3}$ , концентрация электронов  $n_e$  — от  $2.5 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-3}$  до  $8 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-3}$ . Средний диаметр  $D_p$  частиц  $\text{SeO}_2$  — около 0.8 мкм.

Измерения пространственных структур макрочастиц сравнивались с результатами, полученными для аэрозольной струи при комнатной температуре. В этом случае во внутренний факел горелки подавался только воздух с частицами  $\text{SeO}_2$ . Такая система моделирует плазму со случайным (хаотическим) пространственным расположением макрочастиц («газообразная» плазма).

На рис. 2 показаны типичные бинарные корреляционные функции  $g(r)$  для частиц  $\text{SeO}_2$  в аэрозольной струе при комнатной температуре ( $T_g \approx 300$  К) и в плазме ( $T_g = 2170$  К и  $T_g = 1700$  К). Хорошо видно, что корреляционные функции  $g(r)$  для аэрозольной струи и для плазмы при температуре  $T_g = 2170$  К и концентрации частиц  $n_p = 2.0 \cdot 10^6 \text{ см}^{-3}$  практически не отличаются (рис. 2а, б). Следовательно, частицы в плазме являются слабодействующими и образование упорядоченных структур оказывается невозможным. Это также подтверждается независимыми диагностическими

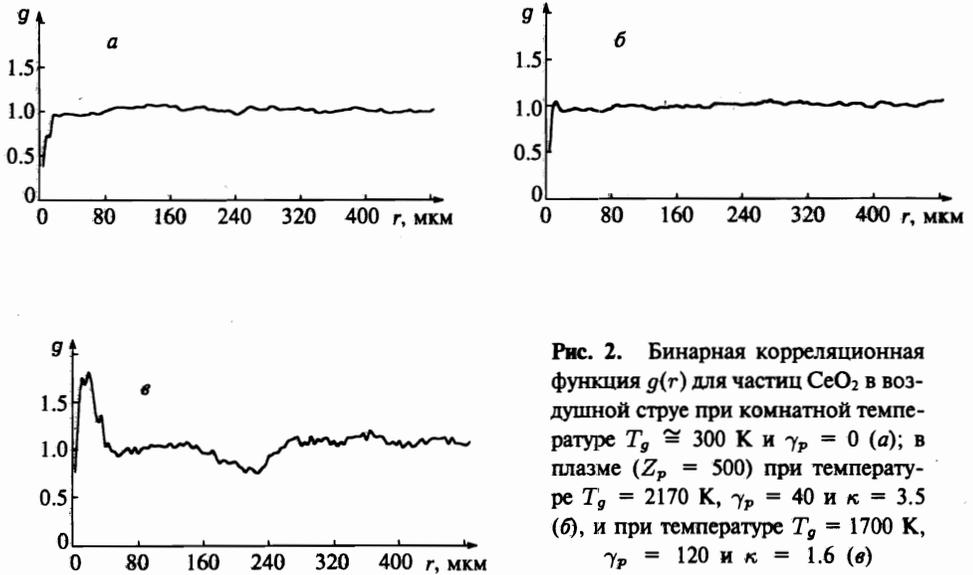


Рис. 2. Бинарная корреляционная функция  $g(r)$  для частиц  $\text{CeO}_2$  в воздушной струе при комнатной температуре  $T_g \cong 300$  К и  $\gamma_p = 0$  (а); в плазме ( $Z_p = 500$ ) при температуре  $T_g = 2170$  К,  $\gamma_p = 40$  и  $\kappa = 3.5$  (б), и при температуре  $T_g = 1700$  К,  $\gamma_p = 120$  и  $\kappa = 1.6$  (в)

кими (зондовыми и оптическими) измерениями в плазме. Так, рассчитанные из результатов измерений значения параметра взаимодействия  $\gamma_p$  и параметра  $\kappa = \langle r \rangle / r_D$ , учитывающего дебаевскую экранировку, составляют соответственно 40 и 3.5.

При температуре плазмы около 1700 К и концентрации частиц  $\text{CeO}_2$  порядка  $10^7 \text{ см}^{-3}$  анализ бинарной корреляционной функции  $g(r)$  обнаружил ближний порядок, характерный для жидкости (рис. 2в). Таким образом, частицы формируют упорядоченную структуру [21]. В этих условиях концентрация ионов ( $n_i = 4.2 \cdot 10^9 \text{ см}^{-3}$ ) примерно на порядок ниже концентрации электронов ( $n_e = 7.2 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-3}$ ). Заряд частиц, полученный из условия квазинейтральности в виде  $Z_p n_p = n_e$  ( $n_i \ll n_e$ ), был положительным и составлял величину около  $10^3 e$  с точностью до коэффициента 2, что может быть объяснено термоэмиссией электронов с поверхности частиц [1, 2, 35]. Полученные из диагностических измерений значения параметров  $\gamma_p$  и  $\kappa$  имеют величины  $> 120$  и 1.6 соответственно, что относится к системе сильновзаимодействующих частиц. Согласно критерию [2, 7, 19] это означает, что происходит фазовый переход газ — жидкость.

## 5. ЧИСЛЕННЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

Численное моделирование плазмы с макрочастицами было проведено с помощью метода Монте-Карло (ММК) [39]. Для расчетов были выбраны следующие характерные параметры плазмы с частицами  $\text{CeO}_2$ : концентрация макрочастиц  $n_p = 5.0 \cdot 10^7 \text{ см}^{-3}$ , концентрация электронов  $n_e = 7.2 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-3}$ , концентрация ионов  $n_i = 0.42 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-3}$ , температура плазмы  $T_g = 1700$  К. Радиус Дебая  $r_D$  и среднее расстояние  $\langle r \rangle$  между частицами при этом составили соответственно 11 мкм и 17 мкм. Концентрация электронов и ионов в плазме примерно на три порядка больше концентрации макрочастиц, поэтому при моделировании плазмы проведение расчетов возможно лишь после введе-

ния эффективного потенциала взаимодействия между макрочастицами, который возникает, как об этом упоминалось выше, после усреднения по положениям электронов и ионов. При этом необходимо помнить, что вопрос о виде эффективного потенциала окончательно не решен, однако в настоящее время наиболее достоверным эффективным потенциалом является дебаевский потенциал (12).

При расчетах в качестве единицы длины удобно выбрать радиус Дебая  $r_D$ , зависящий от концентрации электронов и ионов плазмы, тогда (12) преобразуется к виду

$$U(r) = \frac{(Z_p e)^2 \exp(-r)}{r_D r}, \quad (15)$$

где введено безразмерное расстояние  $r = r/r_D$  от макрочастицы.

Параметр неидеальности  $\Gamma_p = Z_p^2 e^2 / k T_g r_D$  может быть представлен в виде  $\Gamma_p = \gamma_p \langle r \rangle / r_D$ . В характерных условиях эксперимента при  $\langle r \rangle = 17$  мкм и  $r_D = 11$  мкм получаем:  $\gamma_p \cong 120$ ,  $\Gamma_p = \gamma_p \langle r \rangle / r_D \cong 185$ , если  $Z_p = 500$ , а  $T_g = 1700$  К.

В качестве альтернативной модели для анализа и сопоставления численных и экспериментальных результатов была выбрана модель однокомпонентной плазмы, в которой макрочастицы взаимодействуют с помощью кулоновского потенциала (1) на однородном компенсационном фоне противоположного заряда. Как известно из литературы [5, 8], модель однокомпонентной плазмы достаточно подробно исследована с помощью метода Монте-Карло. В связи с этим представляется целесообразным провести сравнение численных результатов для обеих моделей. При этом необходимо отметить существование подобия в модели однокомпонентной плазмы, при котором все результаты зависят лишь от одного безразмерного параметра  $\gamma_p$ . В то же время в дебаевской модели результаты зависят от двух безразмерных параметров, а именно, параметров  $\gamma_p$  и  $\kappa = \langle r \rangle / r_D$ . Численные расчеты в рамках дебаевской модели были проведены для двух величин  $\kappa = 1.0$  и  $2.0$ . Эти значения соответствуют условиям эксперимента и позволяют проанализировать тенденции в изменении рассчитываемых величин для сравнения с результатами однокомпонентной модели плазмы.

При расчетах методом Монте-Карло обычно рассматривают конечное число частиц  $N$ , помещенное в ячейку размера  $L$  с периодическими граничными условиями. В настоящих расчетах, исходя из быстродействия доступных компьютеров и разумного времени счета (одна точка — сутки), было решено ограничиться значением  $N = 125$ . Таким образом, размер ячейки  $L$ , который также удобно измерять в радиусах Дебая, равнялся

$$\frac{L}{r_D} = \left( \frac{N}{n_p r_D^3} \right)^{1/3} = \left( \frac{4\pi}{3} N \right)^{1/3} \frac{\langle r \rangle}{r_D}. \quad (16)$$

В процессе расчетов для  $\kappa = 1.0$  и  $2.0$  величины  $L/r_D$  были равны 8.05 и 16.1 соответственно, а параметр взаимодействия изменялся в широких пределах. Анализ численных результатов начнем с рассмотрения бинарных корреляционных функций  $g(r)$ , полученных в рамках однокомпонентной модели. На рис. 3 представлены  $g(r)$  для макрочастиц при изменении параметра  $\gamma_p$  от 1 до 140 [8]. Отметим, что в рамках этой модели кристаллизация происходит при  $\gamma_p = 171$ , а бинарная корреляционная функция  $g(r)$  для  $\gamma_p = 171$  удовлетворяет отмеченным выше критериям кристаллизации.

Результаты расчетов  $g(r)$  для модели Юкавы при аналогичных значениях параметра  $\Gamma_p$  для значений  $\kappa = 1$  и  $2$  представлены на рис. 4 и 5. Сопоставление и анализ рис. 3, 4 и 5 показывают, что  $g(r)$  в рамках дебаевской модели ближе аналогичным  $g(r)$ ,

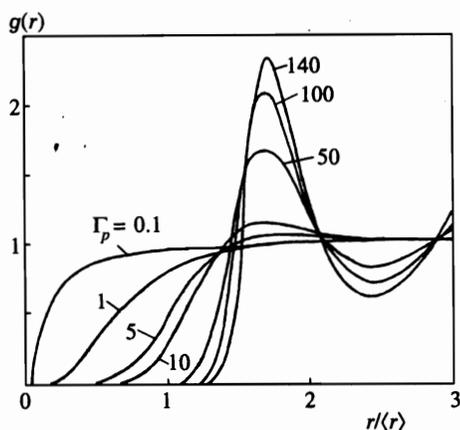


Рис. 3. Бинарные корреляционные функции  $g(r)$  для однокомпонентной модели плазмы при различных значениях  $\Gamma_p$

полученным в рамках однокомпонентной модели, при  $\kappa = 1$ , что естественно, так как при  $r_D \rightarrow \infty$  дебаевская модель переходит в модель однокомпонентной плазмы. Увеличение параметра  $\Gamma_p$  до 1000 при  $\kappa = 1$  (что существенно превосходит значения  $\Gamma_p$ , полученные в условиях эксперимента) не приводит согласно отмеченным критериям к кристаллизации макрочастиц. Об этом свидетельствует отношение  $R_g > 0.2$  и поведение вычисленного структурного фактора на рис. 6. Максимальное значение  $S(q)$  для  $\Gamma_p = 1000$  меньше 2.5, в то время как, согласно [29], на линии кристаллизации  $S(q)$  должно достигать 2.85.

Сложность сопоставления полученных численных результатов для  $g(r)$  с экспериментальными заключается в том, что перетяжка лазерного пучка имеет диаметр всего в несколько раз меньше межчастичного расстояния. Поэтому используемый метод диагностики упорядоченных структур в плазме позволяет получить информацию не о самой корреляционной функции, а лишь о корреляционной функции, усредненной по измерительному объему, сформированному фокусировкой лазерного луча.

Для оценки эффективного размера  $d_{eff}$ , учитывающего диаметр лазерной перетяжки, примем во внимание то обстоятельство, что на расстоянии меньше  $d_{eff}$  от данной частицы, вероятность найти другую частицу обращается в нуль. Это справедливо при условии  $d_{eff} \gg D$  для невзаимодействующих частиц. Поэтому для оценки  $d_{eff}$  использовались результаты измерений корреляционной функции для частиц  $\text{SeO}_2$  в воздушной струе (рис. 2б). Эффективный размер  $d_{eff}$  находился по интервалу, в пределах которого значения корреляционной функции равны нулю. Согласно нашим оценкам, размер  $d_{eff}$  области усреднения составляет примерно 5 мкм.

Для перехода к соответствующим усредненным корреляционным функциям необходимо от плотности вероятности перейти к распределениям вероятности, полученным методом Монте-Карло, для чего  $g(r)$  необходимо домножить на объем сферического слоя толщины  $dr$ . Выполнив интегрирование по сферическому слою толщины  $d_{eff}$  и поделив результат на его объем, получим усредненные корреляционные функции  $\langle g(r) \rangle$ . Полученные функции представлены на рис. 7. На этом же рисунке представлена экспериментальная бинарная корреляционная функция (линия  $\delta$ ), полученная в приведенных выше условиях эксперимента (рис. 2в). Сопоставление этих рисунков демонстрирует достаточно хорошее согласие численных и экспериментальных результатов.

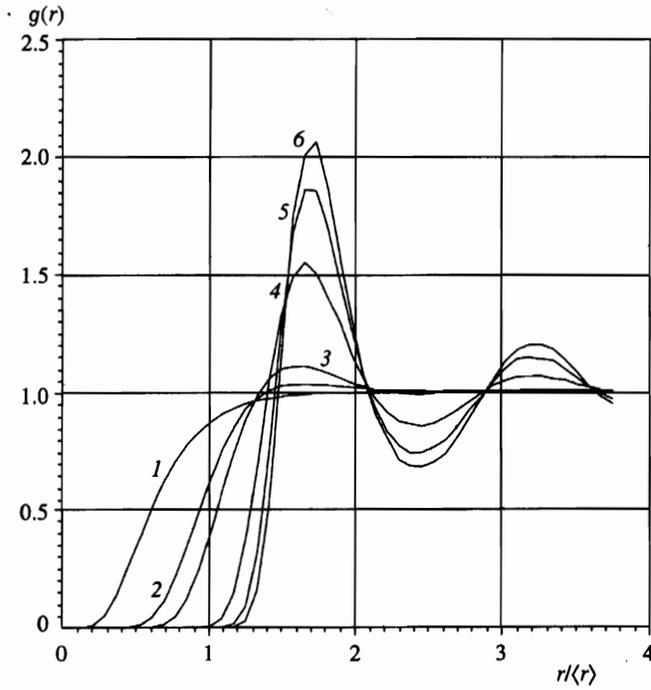


Рис. 4. Бинарные корреляционные функции  $g(r)$  для дебаевской модели плазмы при  $\kappa = 2$ .  $\Gamma_p = 1.5$  (1), 7.5 (2), 15 (3), 75 (4), 150 (5), 210 (6)

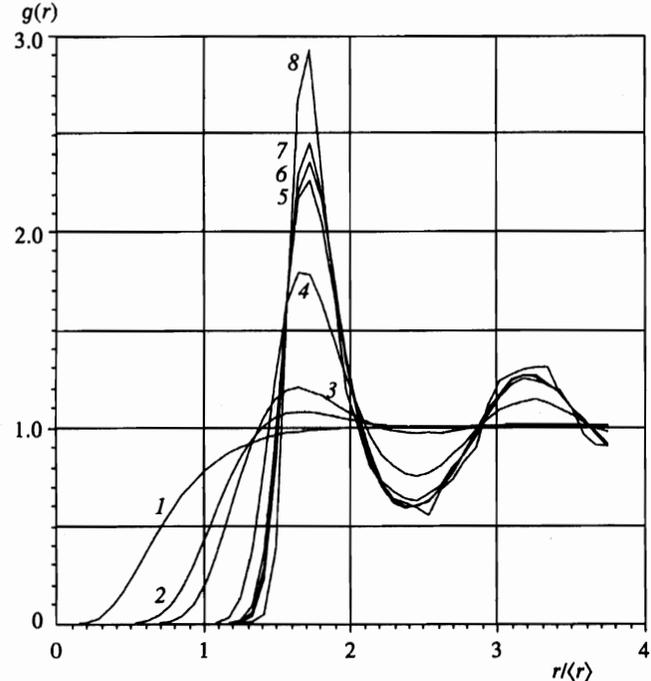


Рис. 5. Бинарные корреляционные функции  $g(r)$  для дебаевской модели плазмы при  $\kappa = 1$ .  $\Gamma_p = 1.5$  (1), 7.5 (2), 15 (3), 75 (4), 150 (5), 185 (6), 210 (7), 1000 (8)

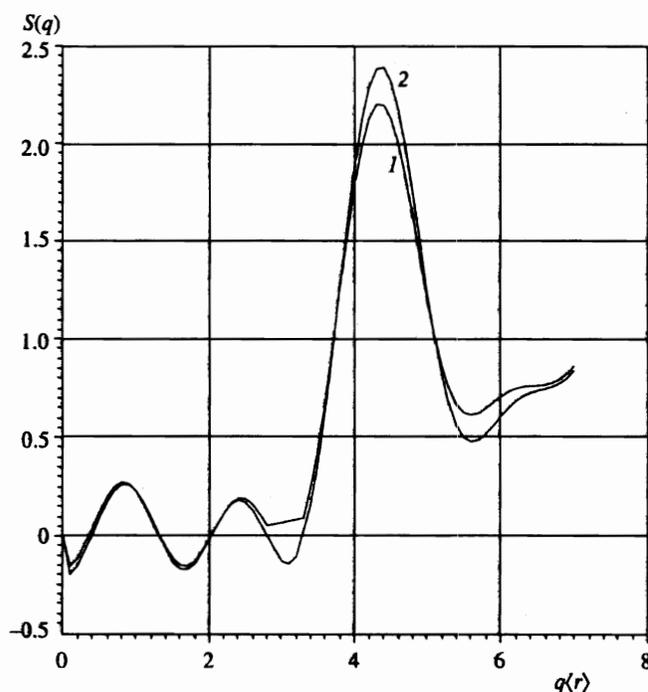


Рис. 6. Структурный фактор для дебаевской модели плазмы с макрочастицами при  $\kappa = 1$ .  $\Gamma_p = 216$  (1), 1000 (2)

Полученные результаты согласуются также с результатами расчетов бинарных корреляционных функций, проведенных в [9, 39]. Отличия, в частности уширение экспериментально полученной корреляционной функции, могут быть обусловлены сосуществованием областей с хаотическим расположением частиц и областей упорядоченных структур (доменов). В последних частицы могут располагаться на расстояниях, меньших  $\langle r \rangle$  [40].

## 6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе проведено сопоставление результатов экспериментальных измерений пространственно-упорядоченных структур макрочастиц в объеме термической плазмы с результатами численных расчетов методом Монте-Карло для модели Юкавы. Формирование упорядоченных структур макрочастиц наблюдалось в плазме, состоящей из положительно заряженных частиц  $\text{CeO}_2$  микронных размеров, эмитированных ими электронами и однократно заряженных ионов натрия при атмосферном давлении и температуре около 1700 К. Анализ теоретических и экспериментальных бинарных корреляционных функций  $g(r)$  показал, что последние хорошо согласуются после усреднения теоретических  $g(r)$  по измерительному объему, сформированному фокусировкой лазерного луча. Численные результаты также подтверждают, что в условиях эксперимента не наступает кристаллизация макрочастиц в плазме. В то же время явно наблюдается

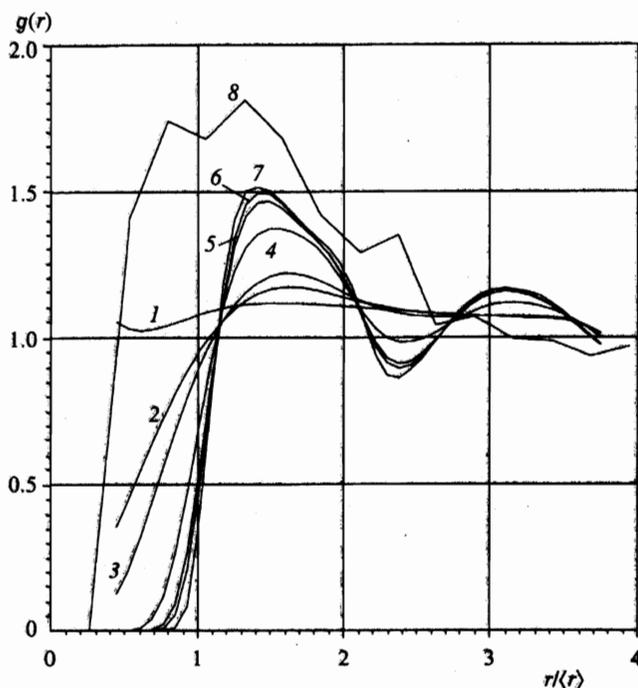


Рис. 7. Усредненные теоретические и экспериментальные бинарные корреляционные функции  $g(r)$  для дебаевской модели плазмы при  $\kappa = 1$ .  $\Gamma_p = 1.5$  (1), 7.5 (2), 15 (3), 75 (4), 150 (5), 216 (6) 1000 (7); 8 — экспериментальная бинарная корреляционная функция

фазовый переход газ — жидкость и происходит пространственное упорядочение макро-частиц, связанное с сильным межчастичным взаимодействием. Это следует из анализа рассчитанных корреляционных функций и проверки выполнения рассмотренных выше двух критериев кристаллизации ( $R_g < 0.2$  и  $S(q) > 2.85$ ).

Данная работа выполнена при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 95-02-04561), а также в рамках программы INTAS-RFBR (грант № 95-1335).

## Литература

1. M. S. Sodha and S. Guha, *Adv. Plasma Phys.* **4**, 219 (1971).
2. В. Е. Фортгов, И. Т. Якубов, *Неидеальная плазма*, Энергоатомиздат, Москва (1994), с. 282.
3. T. M. Sugden and B. A. Thrush, *Nature* **168**, 703 (1951).
4. K. E. Shuler and J. Weber, *J. Chem. Phys.* **22**, 491 (1954).
5. S. Ichimaru, *Rev. Mod. Phys.* **54**, 1017 (1982).
6. H. Ikezi, *Phys. Fluids* **29**, 1764 (1986).
7. M. O. Robbins, K. Kremer, and G. S. Grest, *J. Chem. Phys.* **88**, 3286 (1988).
8. W. L. Slattery, G. D. Doolen, and H. E. DeWitt, *Phys. Rev. A* **21**, 2087 (1980).
9. R. T. Farouki and S. Hamaguchi, *Appl. Phys. Lett.* **61**, 2973 (1992).

10. R. F. Wuerker, H. Shelton, and R. V. Langmuir, *J. Appl. Phys.* **30**, 342 (1959).
11. S. L. Gilbert, J. J. Bollinger, and D. J. Wineland, *Phys. Rev. Lett.* **60**, 2022 (1988).
12. T. Trottenberg, A. Melzer, and A. Piel, *Plasma Sources Sci. Technol.* **4**, 450 (1995).
13. J. H. Chu and L. I, *Phys. Rev. Lett.* **72**, 4009 (1994).
14. H. Thomas, G. E. Morfill, V. Demmel et al., *Phys. Rev. Lett.* **73**, 652 (1994).
15. Y. Hayashi and K. Tachibana, *Jap. J. Appl. Phys.* **33**, L804 (1994).
16. A. Melzer, T. Trottenberg, and A. Piel, *Phys. Lett. A* **191**, 301 (1994).
17. A. Rahman and J. P. Schiffer, *Phys. Rev. Lett.* **57**, 1133 (1986).
18. D. H. E. Dubin and T. M. O'Neil, *Phys. Rev. Lett.* **60**, 511 (1988).
19. M. J. Stevens and M. O. Robbins, *J. Chem. Phys.* **98**, 2319 (1992).
20. X. H. Zheng and J. C. Earnshaw, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 4214 (1995).
21. В. Е. Форттов, А. П. Нефедов, О. Ф. Петров и др., *Письма в ЖЭТФ* **63**, 176 (1996).
22. P. Meaking and A. T. Skjeltop, *Adv. Phys.* **42**, 1 (1993).
23. H. Lowen, *Phys. Reports* **237**, 249 (1994).
24. H. Lowen, P. A. Madden, and J. P. Hansen, *Phys. Rev. Lett.* **68**, 1081 (1992); *J. Chem. Phys.* **98**, 3275 (1993).
25. H. Lowen and G. Kramposthuber, *Europh. Lett.* **23**, 673 (1993).
26. E. J. Meijer and D. Frenkel, *J. Chem. Phys.* **94**, 2269 (1991).
27. F. A. Lindemann, *Z. Phys.* **11**, 609 (1910).
28. A. R. Ubbelohde, *The Molten State of Matter*, J. Wiley Chicester (1978).
29. J. P. Hansen and L. Verlet, *Phys. Rev.* **184**, 151 (1969).
30. H. Lowen, T. Palberg, and R. Simon, *Phys. Rev. Lett.* **70**, 1557 (1993).
31. A. V. Indrani and S. Ramaswamy, *Phys. Rev. Lett.* **73**, 360 (1994).
32. M. Fuchs, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 1490 (1995).
33. А. Б. Кондратьев, А. П. Нефедов, О. Ф. Петров, А. А. Самарян, *Тепл. выс. темп.* **32**, 452 (1994).
34. А. Р. Nefedov, О. F. Petrov, and O. S. Vaulina, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer.* **54**, 453 (1995).
35. В. С. Фоменко, *Эмиссионные свойства материалов*, Наук. Думка, Киев (1981), с. 164.
36. В. Ф. Косов, В. И. Молотков, А. П. Нефедов, *Тепл. выс. темп.* **29**, 633 (1991).
37. М. С. Бенилов, *Тепл. выс. темп.* **26**, 993 (1988).
38. О. С. Ваулина, А. П. Нефедов, О. Ф. Петров и др., *Журн. прикл. спектр.* **63**, 133 (1996).
39. В. М. Замалин, Г. Э. Норман, В. С. Филинов, *Метод Монте-Карло в статистической термодинамике*, Наука, Москва (1977).
40. V. E. Fortov, A. P. Nefedov, O. F. Petrov et al., *Phys. Lett. A* **219**, 89 (1996).