

ДИНАМИКА ФОРМИРОВАНИЯ УПОРЯДОЧЕННЫХ СТРУКТУР В ТЕРМИЧЕСКОЙ ПЛАЗМЕ С МАКРОЧАСТИЦАМИ

А. П. Нефедов, О. Ф. Петров*, Я. К. Ходатаев, С. А. Храпак*

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

Поступила в редакцию 6 мая 1998 г.

Методом молекулярной динамики проведено моделирование процесса формирования упорядоченных структур заряженных макрочастиц в термической плазме атмосферного давления. Результаты численных расчетов сопоставляются с экспериментальными данными. Показано, что упорядоченная структура макрочастиц, обнаруженная экспериментально, далека от стационарного состояния, поскольку время существования плазмы в эксперименте оказывается меньше характерного времени формирования структуры.

1. ВВЕДЕНИЕ

Одной из главных причин значительного интереса, проявляемого в последнее время к физике пылевой плазмы (плазмы с макрочастицами), является образование упорядоченных структур макрочастиц, обнаруженное недавно экспериментально [1–9]. Упорядочение принято объяснять сильным электрическим взаимодействием между заряженными макрочастицами. Большинство экспериментов по формированию и исследованию упорядоченных структур макрочастиц было проведено в плазме высокочастотного (ВЧ) разряда [1–4]. Упорядоченные структуры были также получены в ламинарной струе термической плазмы атмосферного давления при температуре около 1700 К [5, 6], в стратифицированном тлеющем разряде постоянного тока [8, 9] и в двойном электрическом слое [7].

В данной работе изучается динамика формирования упорядоченных структур макрочастиц в экспериментах с термической плазмой. Экспериментальный стенд, использующийся нами при изучении упорядоченных структур в термической плазме, подробно описан в [6]. Он включает генератор плазмы (двухфакельная пропан-воздушная горелка типа горелки Меккера), создающий ламинарную струю плазмы с однородным распределением ее параметров (температуры, концентрации электронов и ионов) в области внутреннего факела, систему подачи макрочастиц, а также обширную систему диагностики, позволяющую измерять концентрации электронов n_e и ионов n_i , температуру плазмы T_g , радиус R_d и концентрацию макрочастиц n_d . Помимо этого реализован метод корреляции фотонов для детального исследования динамических характеристик системы макрочастиц. Для измерений пространственного расположения макрочастиц применялся лазерный времяпролетный счетчик, позволяющий получать бинарную корреляционную функцию.

*E-mail: ipdustpl@redline.ru

Условия описываемого эксперимента значительно отличаются от условий экспериментов в газовом разряде, что позволяет надеяться на получение новых представлений о процессах самоорганизации макрочастиц в плазме. Во-первых, благодаря термоэлектронной эмиссии макрочастицы приобретают положительный заряд. Другая важная черта, характеризующая систему термической плазмы с макрочастицами, — относительная простота получения однородных условий в плазме и применение широкого набора диагностических средств для определения параметров как плазмы, так и самих макрочастиц. Наконец, в отличие от экспериментов с газовым разрядом, рассматриваемая система не стационарна по своей сути. Дело в том, что бинарная корреляционная функция измеряется на высоте 35 мм над срезом горелки. Принимая во внимание скорость плазменной струи (≈ 5 м/с), мы получим для времени существования плазмы $t_{ft} \approx 7$ мс. Таким образом, экспериментальные данные некорректно сравнивать с расчетами для стационарных условий (например, с методом Монте-Карло). Необходимо смоделировать сам процесс формирования упорядоченной структуры. В данной работе исследуется временная эволюция бинарной корреляционной функции. Расчеты проводятся методом молекулярной динамики. Результаты расчета сравниваются с результатами, полученными в ходе эксперимента. Обсуждаются также вопросы о зарядке и динамическом поведении системы макрочастиц.

2. МОДЕЛЬ

Чтобы численное моделирование было корректным, необходимо провести анализ основных физических процессов, влияющих на динамику формирования упорядоченных структур макрочастиц. В условиях эксперимента расположенные хаотически нейтральные частицы, попадая в область плазмы, нагреваются до температуры окружающего газа, приобретают электрический заряд и начинают взаимодействовать. Простейшая оценка времени термализации дает (см. также [6])

$$\tau_{th} = \left[\pi R_d^2 n_g \sqrt{\frac{8T_g}{\pi m_g}} \frac{2m_g}{m_d} \right]^{-1}, \tag{1}$$

где m_d — масса макрочастиц, n_g и m_g — плотность и масса нейтральной компоненты. Для условий эксперимента (см. таблицу) время термализации имеет величину $\tau_{th} \approx 5 \cdot 10^{-6}$ с. Это время значительно меньше времени существования плазмы, следовательно можно считать, что нагрев макрочастиц происходит практически мгновенно.

Таблица

Параметры, использованные при моделировании

$T_g = 1700$ К	$P = 1$ атм	$Z_d = 500$
$n_e = 7 \cdot 10^{10}$ см $^{-3}$	$n_i = 4 \cdot 10^{10}$ см $^{-3}$	$n_d = 5 \cdot 10^7$ см $^{-3}$
$l = 17$ мкм	$\lambda_d = 11$ мкм	$R_d = 0.4$ мкм
$m_d = 1.6 \cdot 10^{-12}$ г	$\nu_{fr} = 9.6 \cdot 10^4$ с $^{-1}$	$\Gamma_c = 150$
$\Gamma_d = 30$	$N = 200$	$\tau_s = 0.3$ мкс

В условиях эксперимента заряд макрочастицы определяется поглощением электронов и ионов плазмы, а также эмиссией электронов с поверхности макрочастицы за счет процесса термоэлектронной эмиссии. Динамика зарядки определяется уравнением

$$\frac{dZ_d}{dt} = I_e^- + I_i^+ - I_e^+, \quad (2)$$

где I_e^- — поток эмиттированных электронов, I_i^+ и I_e^+ — потоки поглощенных ионов и электронов соответственно. Используем выражения для потоков в случае термоэmissionной зарядки из работы [10]:

$$I_e^+ = \pi R_d^2 n_e \sqrt{\frac{8T_g}{\pi m_e}} \left[1 + \frac{Z_d e^2}{R_d T_g} \right], \quad I_i^+ = \pi R_d^2 n_i \sqrt{\frac{8T_g}{\pi m_i}} \exp\left(-\frac{Z_d e^2}{R_d T_g}\right), \quad (3)$$

$$I_e^- = 2\pi R_d^2 \left(\frac{m_e T_g}{2\pi \hbar^2}\right)^{3/2} \sqrt{\frac{8T_g}{\pi m_e}} \left[1 + \frac{Z_d e^2}{R_d T_g} \right] \exp\left(-\frac{W_e}{T_g}\right) \exp\left(-\frac{Z_d e^2}{R_d T_g}\right), \quad (4)$$

где $n_{e(i)}$ и $m_{e(i)}$ — концентрация и масса электронов (ионов), Z_d — заряд макрочастицы, W_e — работа выхода электрона. Из уравнений (3) легко видеть, что

$$\frac{I_e^+}{I_i^+} \geq \sqrt{\frac{m_i}{m_e}} \gg 1,$$

так что поглощением ионов можно пренебречь. Равновесный заряд макрочастиц при этом определяется выражением $I_e^- = I_e^+$, что дает для условий эксперимента ($T_g = 1700$ К, $R_d = 0.4$ мкм, $n_e = 7 \cdot 10^{10}$ см⁻³, $W_e = 2.1$ эВ) величину $Z_d \approx 550$. Уравнение (2) в принципе может быть решено численно для определения времени, характеризующего зарядку макрочастиц. Мы же для оценки характерного времени зарядки воспользуемся простым выражением $\tau_{ch} = Z_d / I_e^+$, которое дает $\tau_{ch} \approx 4 \cdot 10^{-9}$ с. Это время более чем на три порядка меньше времени существования плазмы. В силу этого мы можем считать, что и зарядка происходит практически мгновенно. Более того, приведенная оценка показывает, что заряд макрочастиц будет «следить» за их температурой, поскольку $\tau_{ch} \ll \tau_{th}$.

Еще одна проблема корректного моделирования системы макрочастиц в плазме состоит в недавно обнаруженном экспериментально явлении сильного отрыва температуры макрочастиц, соответствующей их хаотическому движению, от температуры нейтральной компоненты [11–13]. Было показано, что при определенных условиях кинетическая температура макрочастиц в газоразрядной плазме может в тысячи раз превышать температуру нейтрального газа, несмотря на высокую эффективность диссипации энергии путем трения о нейтральную компоненту в слабоионизованной плазме. Процессы, приводящие к такой неравновесности, в настоящее время неизвестны. Поэтому возникла необходимость исследования динамических характеристик системы макрочастиц применительно к условиям эксперимента с термической плазмой. Для этого на базе серийного коррелятора «Malvern» был реализован метод корреляции фотонов [14]. Суть метода состоит в исследовании автокорреляционной функции рассеянного системой макрочастиц лазерного излучения. При определенных условиях [14, 15] анализ автокорреляционной функции рассеянного излучения позволяет получить информацию о величине коэффициента диффузии макрочастиц и, следовательно, об их кинетической температуре.

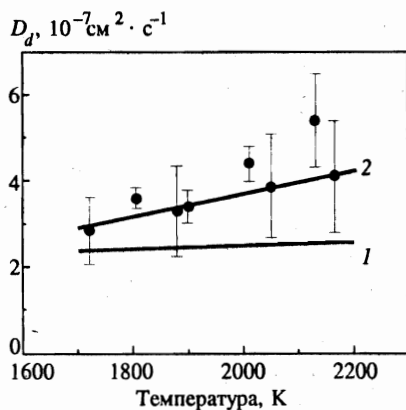


Рис. 1. Зависимости коэффициента диффузии заряженных макрочастиц D_d от температуры. Кривые — результаты теоретического расчета (1 — гидродинамический режим, 2 — свободно-молекулярный режим)

Схема реализации метода корреляции фотонов подробно описана в [16]. Здесь мы кратко остановимся на основных результатах проведенных измерений. Измерения проводились в широком диапазоне параметров плазмы (концентраций ионов, электронов и макрочастиц) и показали слабое влияние изменения этих параметров на динамические характеристики системы макрочастиц. На рис. 1 представлена зависимость величины коэффициента диффузии макрочастиц от температуры. Для сравнения приведены также две кривые, рассчитанные теоретически. Кривая 1 соответствует гидродинамическому режиму $\lambda_{fp} \ll R_d$ (λ_{fp} — длина свободного пробега молекул воздуха) и определяется формулой

$$D_d = \frac{T_g}{6\pi\eta R_d},$$

где η — вязкость среды. Кривая 2 соответствует обратному свободно-молекулярному режиму ($\lambda_{fp} \gg R_d$) и рассчитана по формуле (см., например, [16])

$$D_d = \frac{3T_g^{3/2}}{8PR_d^2(2\pi m_g)^{1/2}},$$

где P — давление газа. В условиях эксперимента $\lambda_{fp} \approx 0.8-1.1$ мкм, т.е. $\lambda_{fp} \sim R_d$, и, следовательно, реализуется режим, промежуточный между гидродинамическим и свободно-молекулярным. Тем не менее рис. 1 демонстрирует, что кривая 2 (свободно-молекулярный режим) лучше описывает результаты эксперимента. Таким образом, эксперимент показал, что ансамбль заряженных макрочастиц в исследуемых условиях ведет себя как обычный коллектив броуновских частиц с коэффициентом диффузии, рассчитанным в рамках свободно-молекулярного приближения.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ

Моделирование проводилось методом молекулярной динамики с использованием кода KARAT [17]. Для каждой макрочастицы решалось двумерное уравнение движения с учетом взаимодействия между макрочастицами, силы трения со стороны нейтральной

компоненты и случайной силы, возникающей благодаря толчкам молекул окружающего газа (броуновской силы):

$$m_d \frac{d^2 \mathbf{r}_k}{dt^2} = \sum_{j \neq k} \Phi(r) \Big|_{r=|\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_j|} \frac{\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_j}{|\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_j|} - m_d \nu_{fr} \frac{d\mathbf{r}_k}{dt} + \mathbf{F}_{br}. \quad (5)$$

Здесь ν_{fr} — частота трения, вычисляемая, в соответствии с разд. 2, по формуле, справедливой для свободно-молекулярного режима:

$$\nu_{fr} = \frac{8PR_d^2}{3m_d} \sqrt{\frac{2\pi m_g}{T_g}}$$

(см. также [16]), \mathbf{F}_{br} — случайная броуновская сила, $\Phi(r)$ записывается в предположении, что потенциал взаимодействия между макрочастицами является дебаевским, в виде

$$\Phi(r) = -Z_d e \frac{\partial \phi_d}{\partial r} = \frac{Z_d^2 e^2}{r^2} \left[1 + \frac{r}{\lambda} \right] \exp\left(-\frac{r}{\lambda}\right), \quad (6)$$

где λ — длина экранирования. В начальный момент заряженные макрочастицы (зарядка происходит практически мгновенно) располагались случайным образом в вычислительной области, представляющей из себя квадрат со стороной L_0 . Для моделирования бесконечной системы использовались периодические граничные условия, позволяющие избежать краевых эффектов и фиксировать плотность макрочастиц. Двумерная плотность макрочастиц выбиралась так, чтобы среднее межчастичное расстояние l совпадало с полученным в реальном трехмерном эксперименте $l = (4\pi n_d/3)^{-1/3}$. Взаимодействие между макрочастицами, описываемое экранированным кулоновским потенциалом (6), ограничивалось на очень малых расстояниях, чтобы избежать слишком малого шага по времени на начальном этапе вычислений, так что $\Phi(r) = \Phi(l_0)$ при $r < l_0$ ($l_0 = 0.3l$). В представленных вычислениях, величина шага по времени составляла $\tau_s = 0.03/\nu_{fr}$. При этом за время счета просчитывалось 250000 шагов по времени. Именно поэтому мы были вынуждены использовать двумерную геометрию с относительно малым числом частиц ($N = 200$). Больше число частиц потребовало бы слишком большого вычислительного времени. Тем не менее, поскольку исследовалась система с не слишком большим параметром неидеальности Γ_c , так что радиус корреляции не превосходил нескольких l , данного числа частиц было вполне достаточно для получения достоверных результатов.

Параметры, использованные при моделировании, представлены в таблице. Они соответствуют условиям реального эксперимента [5, 6], а также параметрам, использованным при численных расчетах данной системы методом Монте-Карло [18]. Кулоновский параметр взаимодействия Γ_c , а также параметр взаимодействия с учетом экранирования Γ_d вычислялись следующим образом:

$$\Gamma_c = \frac{Z_d^2 e^2}{lT_g}, \quad \Gamma_d = \frac{Z_d^2 e^2}{lT_g} \exp\left(-\frac{l}{\lambda}\right). \quad (7)$$

Отметим, что в силу значительной концентрации и относительно большой величины заряда макрочастиц, концентрации ионной и электронной компонент оказываются существенно разными. Проблема определения радиуса экранирования для такой

системы требует специального анализа, лежащего за рамками данной публикации. В наших вычислениях он определялся равным электронному дебаевскому радиусу $\lambda_d = \sqrt{T_g/4\pi e^2 n_e}$, так что экранировкой ионами пренебрегалось.

Перейдем теперь к основным результатам численного моделирования. Оно показало, что после релаксации система приходит в состояние, которое можно условно назвать жидкообразным. Это находится в согласии с величинами параметров неидеальности Γ_c и Γ_d . На рис. 2а-г представлена временная эволюция бинарной корреляционной функции $R(r)$, которую мы рассчитывали, исходя из положений частиц в определенный момент времени. Рисунок 2д получен усреднением $R(r)$ по времени, что возможно, поскольку в диапазоне времен $40 \text{ мс} < t < 70 \text{ мс}$ система достигает равновесного состояния и парная корреляционная функция практически не изменяется во времени. При построении бинарной корреляционной функции шаг по r выбирался равным 0.1l. Для сравнения на рис. 2 приведена также корреляционная функция, полученная непосредственно в эксперименте (штриховая кривая).

Анализ рис. 2 позволяет качественно описать процесс упорядочения макрочастиц. Вначале происходит разлет тех частиц, расстояние между которыми мало, при этом формируется область, где бинарная корреляционная функция равна нулю (рис. 2а, б). Этот процесс быстр по времени, поскольку сила отталкивания между частицами резко увеличивается с уменьшением расстояния между ними. Затем появляется ярко выраженный первый максимум бинарной корреляционной функции (рис. 2в). Далее первый максимум увеличивается с течением времени и одновременно начинают формироваться пики более высоких порядков (рис. 2г). Корреляционная функция стационарного состояния (рис. 2д) характеризуется несколькими ярко выраженными максимумами, что характерно для систем с ближним порядком. В этом смысле выше мы назвали конечное состояние системы жидкообразным.

Определение времени формирования упорядоченной структуры остается до определенной степени произвольным. Очевидно, оно зависит от того, какой пространственный масштаб корреляций нас интересует. Чем больше расстояние, на котором парная корреляционная функция приближается к своей окончательной форме, тем большее время для этого необходимо. Так, например, в нашем случае можно сказать, что для формирования первых трех пиков необходимо время $t_f \approx 35 \text{ мс}$. Можно ввести также время формирования первого максимума бинарной корреляционной функции t_1 . По сути это есть время, необходимое для появления любого ближнего порядка в системе. Численный расчет показывает, что для наших условий $t_1 \approx 5 \text{ мс}$.

Как было отмечено во Введении, особенностью рассматриваемого эксперимента являлось конечное время существования плазмы, составлявшее $t_{ft} \approx 7 \text{ мс}$. В соответствии с результатами численного моделирования это означает, что структура, диагностируемая в эксперименте, находится в процессе своего формирования и, следовательно, измеряется парная корреляционная функция, не соответствующая стационарному состоянию. Тем не менее, время существования плазмы оказывается вполне достаточным для появления в системе ближнего порядка.

Рисунки 2а-д позволяют сравнить форму экспериментальной бинарной корреляционной функции с расчетной. Отметим два обстоятельства. Во-первых, экспериментальная корреляционная функция имеет лишь один пик. Этот факт вполне согласуется с результатами моделирования. Действительно, рис. 2г показывает, что при $t = 7 \text{ мс}$ первый максимум уже близок к своему окончательному виду, в то время как пики более высоких порядков только начинают формироваться. Таким образом, наличие только

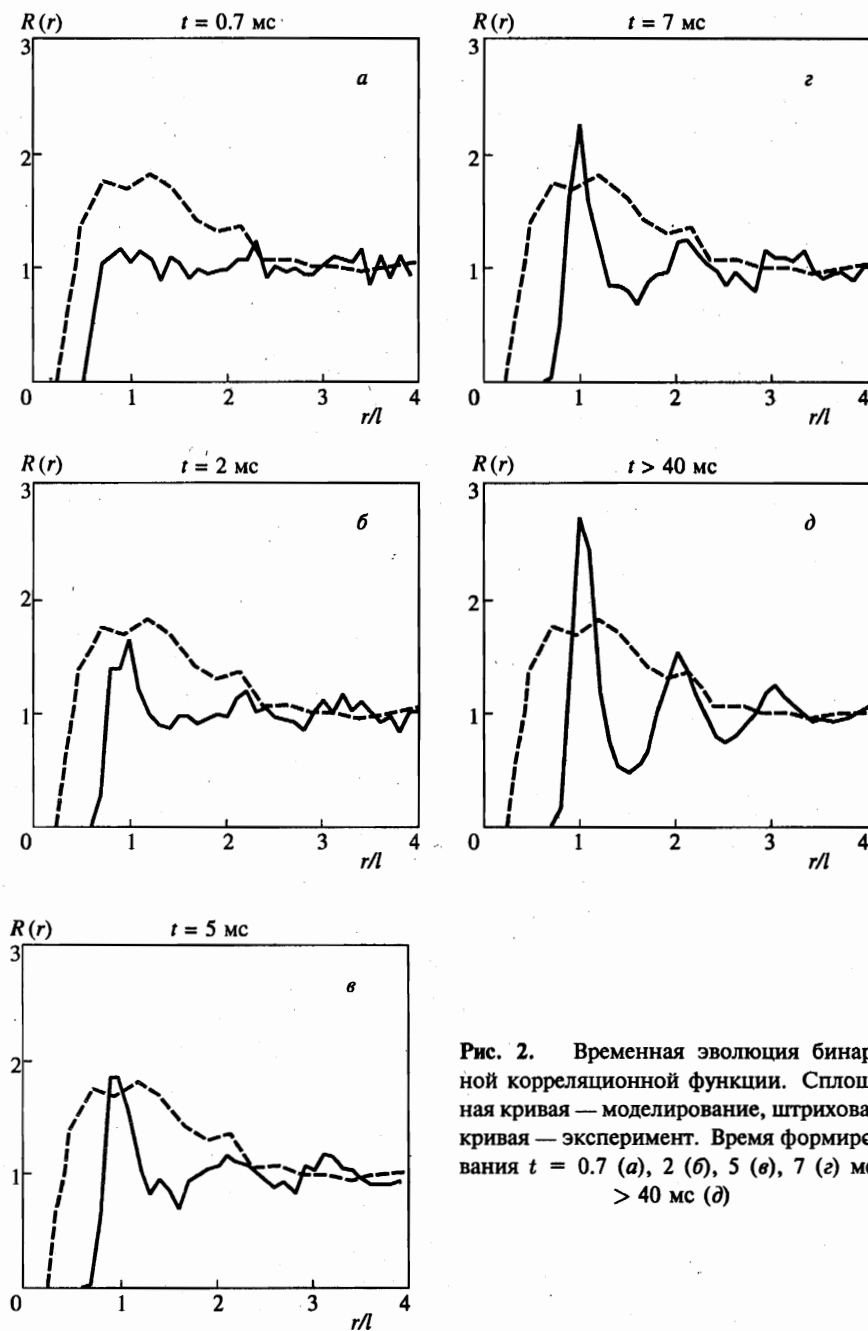


Рис. 2. Временная эволюция бинарной корреляционной функции. Сплошная кривая — моделирование, штриховая кривая — эксперимент. Время формирования $t = 0.7$ (а), 2 (б), 5 (в), 7 (г) мс, > 40 мс (д)

одного пика объясняется тем, что за время существования плазмы процесс упорядочения не успевает полностью завершиться. Во-вторых, первый максимум экспериментальной корреляционной функции значительно уширен (почти в пять раз) по сравнению с расчетным. Одна из возможных причин такого уширения, связанная с особенностями использования лазерного времяпролетного счетчика, обсуждается в работе [18]. Другой причиной уширения, в принципе, могли бы служить стохастические флуктуации зарядов макрочастиц [19]. Однако, как показывают численные оценки, частота этих флуктуаций $\sim \tau_{ch}^{-1}$ велика, а амплитуда $\delta Z_d/Z_d \sim 10^{-2}$ настолько мала, что, по-видимому, они не могут объяснить наблюдаемый эффект. Окончательный ответ на вопрос о причинах уширения максимума автокорреляционной функции требует дальнейших исследований. Проведенный в данной работе численный расчет позволяет лишь утверждать, что оно никак не связано с процессом формирования упорядоченных структур, вызванным электростатическим взаимодействием между макрочастицами.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Моделирование процесса упорядочения заряженных макрочастиц в термической плазме атмосферного давления применительно к условиям экспериментов [5, 6] потребовало рассмотрения ряда процессов. Мы показали, что зарядка макрочастиц, имеющая место при введении их в область плазмы, происходит за очень короткое (по сравнению с другими характерными временами) время. Методом корреляции фотонов изучалось динамическое поведение макрочастиц. Результаты численного моделирования, представленные в данной работе, показывают, что формирование упорядоченных структур может быть объяснено электростатическим взаимодействием между макрочастицами. Конечное время существования плазмы объясняет наличие только одного максимума экспериментальной корреляционной функции, поскольку структура находится в процессе формирования.

Данная работа была выполнена при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 98-02-16825) и INTAS-RFBR (проект № 95-1335).

Литература

1. J. H. Chu and Lin I, Phys. Rev. Lett. **72**, 4009 (1994).
2. H. Thomas, G. E. Morfill, V. Demmel et al., Phys. Rev. Lett. **73**, 652 (1994).
3. Y. Hyashi and K. Tachibana, Jap. J. Applied Phys. **33**, L804 (1994).
4. A. Melzer, T. Trottenberg, and A. Piel, Phys. Lett. A **191**, 301 (1994).
5. В. Е. Фортов, А. П. Нефедов, О. Ф. Петров и др., Письма в ЖЭТФ **63**, 176 (1996).
6. В. Е. Фортов, А. П. Нефедов, О. Ф. Петров и др., ЖЭТФ **111**, 467 (1997).
7. A. Barkan and R. L. Merlino, Phys. Plasmas **2**, 3261 (1995).
8. В. Е. Фортов, А. П. Нефедов, В. М. Торчинский и др., Письма в ЖЭТФ **64**, 86 (1996).
9. V. E. Fortov, A. P. Nefedov, V. M. Torchinsky et al., Phys. Lett. A **229**, 317 (1997).
10. M. Sodha and S. Guha, Advances in Plasma Physics **4**, 219 (1971).
11. H. Thomas and G. E. Morfill, Nature (London) **379**, 806 (1996).

12. A. Melzer, A. Homann, and A. Piel, Phys. Rev. E **53**, 2757 (1996).
13. J. B. Pieper and J. Goree, Phys. Rev. Lett. **77**, 3137 (1996).
14. P. N. Pusey and R. J. A. Tough, in *Dynamic Light Scattering: Application of Photon Correlation Spectroscopy*, ed. by R. Pecora, Plenum, New York (1985).
15. K. Shatzel, *Advances in Colloid and Interface Science* **46**, 309 (1993).
16. А. П. Нефедов, О. Ф. Петров, С. А. Храпак и др., ТВТ **36**, 141 (1998).
17. V. Tarakanov, *User manual for code KARAT*, BRA inc. (1992).
18. В. Е. Фортгов, В. С. Филинов, А. П. Нефедов и др., ЖЭТФ **111**, 889 (1997).
19. C. Cui and J. Goree, IEEE Trans. on Plasma Sci. **22**, 151 (1994).