

# МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИНАМИКИ СИЛЬНОВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ МАКРОЧАСТИЦ В СЛАБОИОНИЗОВАННОЙ ПЛАЗМЕ

*О. С. Ваулина, С. А. Храпак\**

*Институт теплофизики экстремальных состояний Российской академии наук  
127412, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 7 августа 2000 г.

Методом молекулярной динамики изучено динамическое поведение неидеальной системы частиц, взаимодействующих посредством кулоновского экранированного потенциала. Исследовано поведение коэффициента самодиффузии частиц в зависимости от параметра неидеальности. Обсуждаются условия кристаллизации такой системы и возможность применения критерия кристаллизации, основанного на динамических характеристиках системы.

PACS: 52.25.Uy, 52.25.Zb, 82.70.Db

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Пылевая плазма представляет собой ионизованный газ, содержащий частицы конденсированного вещества (пылевые частицы), которые либо самопроизвольно образуются в плазме в результате различных процессов, либо вводятся в плазму извне. Иногда эту плазму называют коллоидной или плазмой с конденсированной дисперсной фазой. Пылевые частицы приобретают в плазме электрический заряд, взаимодействуют с электрическим и магнитным полями, а кулоновское взаимодействие между частицами может приводить к сильной неидеальности системы пылевых частиц.

Одной из причин проявляемого в настоящее время интереса к физике пылевой плазмы является подтвержденная экспериментально возможность кристаллизации сильнонеидеальной системы пылевых частиц в различных типах плазмы. На сегодняшний день формирование упорядоченных структур пылевых частиц было обнаружено в плазме радиочастотного разряда [1–4], положительном столбе тлеющего разряда постоянного тока [5, 6], термической плазме атмосферного давления [7, 8]. Обладая целым рядом уникальных свойств, плазменно-пылевые кристаллы являются незаменимым инструментом как при

исследовании свойств сильнонеидеальной плазмы, так и при исследовании фундаментальных свойств кристаллов.

Принято считать, что пылевые частицы в плазме взаимодействуют друг с другом посредством экранированного кулоновского потенциала (потенциала Юкавы)

$$U(r) = Z_d^2 e^2 \exp(-r/\lambda_D)/r, \quad (1)$$

где  $Z_d$  — зарядовое число пылевых частиц,  $\lambda_D$  — длина экранировки (соответствующий радиус Дебая). Неидеальность пылевой плазмы характеризуют обычно параметром неидеальности  $\Gamma_d$ , равным отношению потенциальной энергии кулоновского взаимодействия между соседними частицами к их кинетической энергии, характеризуемой температурой частиц  $T_d$ :

$$\Gamma_d = Z_d^2 e^2 / b T_d, \quad (2)$$

где  $b = n_d^{-1/3}$  характеризует среднее расстояние между частицами. Заряд пылевых частиц  $Z_d$  в плазмах различной природы может быть очень большим. Например, в газоразрядной плазме низкого давления заряд можно оценить как

$$Z_d \sim -a T_e / e^2,$$

что для радиуса частицы  $a \sim 1$  мкм и температуры электронов  $T_e \sim 1$  эВ дает  $Z_d \sim -10^3$  элементарных

\*E-mail: skhrapak@mail.ru

зарядов. Поэтому неидеальности подсистемы пылевых частиц достичь значительно легче, чем неидеальности электрон-ионной подсистемы, несмотря на то что концентрация частиц обычно намного ниже концентраций электронов и ионов.

Свойства неидеальных систем частиц, взаимодействующих посредством потенциала (1), активно исследуются с помощью численного моделирования. Существенное внимание уделяется фазовым диаграммам таких систем (в том числе условиям кристаллизации) [9–12], поведению частиц, находящихся в поле внешних сил различного рода [13–15], динамике формирования упорядоченных структур [8, 16], дисперсионным свойствам систем [17]. В такого рода численных расчетах используются обычно два метода: метод молекулярной динамики и метод броуновской динамики. Метод молекулярной динамики основан на интегрировании обратимых уравнений движения частиц с учетом взаимодействия между ними. Метод броуновской динамики основан на решении стохастических уравнений Ланжевена для эволюции положений частиц. Первый из методов позволяет адекватно моделировать процессы в атомных системах. С другой стороны, в системах пылевой плазмы (а также в коллоидных растворах) макроскопические частицы находятся в вязкой среде, столкновения с атомами или молекулами которой играют существенную роль.

Существующие в настоящее время результаты по исследованию динамического поведения частиц, взаимодействующих посредством потенциала Юкавы [9, 18, 19], не дают полной картины динамики пылевых частиц в плазме. Так, в работе [9] использовался метод молекулярной динамики, тем самым пренебрегалось взаимодействием со средой. В работе [19] изучались динамические свойства системы вблизи точки кристаллизации, а в работе [18] исследовалась динамика и структурные свойства двумерной системы. Кроме того, объектом интереса в последних двух работах были частицы, взвешенные в жидкости (коллоидные растворы), вязкость которой на много порядков превышает вязкость буферного газа в пылевой плазме. Отсутствие количественных результатов в теории затрудняет анализ современных экспериментальных результатов [20, 21], полученных при исследовании неидеальных плазменно-пылевых систем.

Данная работа посвящена систематическому исследованию трехмерной динамики сильно взаимодействующих макрочастиц в слабоионизованной плазме с помощью метода молекулярной динамики, учитывающего взаимодействие частиц со средой. Изу-

чена зависимость коэффициента самодиффузии частиц от силы взаимодействия между ними и вязкости среды. Рассмотрен вопрос о возможности использования динамического критерия плавления, предложенного в работе [19]. Обсуждается вопрос об условиях кристаллизации в пылевой плазме.

## 2. МОДЕЛЬ

В данной работе для учета взаимодействия частиц с окружающей средой использовался подход, применявшийся нами ранее для исследования динамических процессов в пылевой плазме [8, 22, 23]. Взаимодействие со средой учитывается введением в уравнения движения так называемой ланжевенской силы, которая представляется в виде двух слагаемых, одно из которых описывает систематическое трение со стороны среды, а другое — передачу импульса при отдельных столкновениях с атомами или молекулами среды.

Необратимые нормированные уравнения движения пылевых частиц в проекции на декартову координатную ось  $x$  имеют вид

$$\dot{X}_k = (4\pi\Gamma_d)^{-1/2}V_k, \quad (3)$$

$$\begin{aligned} \dot{V}_k = & \sum_{j \neq k} (\Gamma_d/4\pi)^{1/2} \frac{1 + KR_{kj}}{R_{kj}^3} \times \\ & \times \exp(-KR_{kj})(\mathbf{R}_{kj} \cdot \mathbf{e}_x) - \theta V_k + \sqrt{2\theta}\xi(\tau), \end{aligned} \quad (4)$$

где  $X_k$  и  $V_k$  — безразмерные координата и скорость  $k$ -ой пылевой частицы,  $\tau$  — безразмерное время,  $\mathbf{R}_{kj} = \mathbf{R}_k - \mathbf{R}_j$  ( $R_{kj} = |\mathbf{R}_{kj}|$ ),  $\mathbf{e}_x$  — единичный вектор в направлении оси  $x$ ,  $K = b/\lambda_D$  — структурный параметр,  $\theta = \eta/\omega_{pd}$  — отношение частоты трения среды к плазменной пылевой частоте,  $\xi(\tau)$  — дельта-коррелированный гауссов белый шум:

$$\langle \xi(\tau) \rangle = 0, \quad \langle \xi(\tau)\xi(\tau') \rangle = \delta(\tau - \tau'). \quad (5)$$

В качестве единицы расстояния используется среднее расстояние между частицами  $b$ , а в качестве единиц времени и скорости соответственно обратная плазменно-пылевая частота

$$\omega_{pd}^{-1} = (4\pi Z_d^2 e^2 n_d / m_d)^{-1/2}$$

и тепловая скорость пылевых частиц

$$v_{Td} = (T_d/m_d)^{1/2}.$$

Суммирование в правой части (4) проводится по всем пылевым частицам, кроме рассматриваемой.

В общем случае, согласно уравнениям (3) и (4), поведение системы пылевых частиц определяется тремя безразмерными параметрами  $\Gamma_d$ ,  $K$  и  $\theta$ . В пределе  $\theta = 0$  реализуется стандартный метод молекулярной динамики. В этом случае система характеризуется только параметром неидеальности и структурным параметром. Отметим, что в стандартном методе молекулярной динамики из-за свободного обмена между потенциальной и кинетической энергиями для поддержания постоянной температуры системы приходится использовать периодическую перенормировку скоростей частиц. В то же время в модифицированном методе молекулярной динамики температура системы, определяемая параметрами ланжевеновской силы, поддерживается постоянной, не требуя коррекции во время расчета.

Использованный в работе метод молекулярной динамики состоял в решении уравнений (3) и (4) в трех измерениях для каждой из частиц и анализе траекторий их движения. Расчетная область представляла собой куб со стороной  $L = 5b$ . Для моделирования однородной пространственно-протяженной плазмы на границах расчетной области накладывались периодические граничные условия. Для сокращения времени расчета потенциал взаимодействия между частицами обрезался на расстояниях больших  $3.75b$ , что является стандартной процедурой при исследовании систем, взаимодействующих посредством потенциала (1) при не слишком малой величине структурного параметра  $K$ . Обрезание потенциала взаимодействия не приводит к существенной погрешности при  $K \gtrsim 1$ . В то же время при моделировании систем с  $K \lesssim 1$  необходим учет и более дальних взаимодействий, что может быть реализовано с помощью соответствующего алгоритма [12].

Процедура численного эксперимента выглядела следующим образом: в начальный момент частицы располагались случайным образом в пределах вычислительной области; затем, благодаря взаимодействию между ними, начинался процесс самоорганизации; после достижения равновесной для заданных  $\Gamma_d$ ,  $K$  и  $\theta$  конфигурации системы частиц в память компьютера записывались данные о последовательных положениях частиц с целью последующего анализа. Шаг по времени варьировался при различных параметрах системы, но не превышал  $\eta/20$  для корректного моделирования броуновского движения. Полное время счета составляло не менее  $2 \cdot 10^5$  шагов по времени.

В качестве величины, характеризующей динамическое поведение системы, часто используется их коэффициент самодиффузии, определяемый как

$$D(t) = \langle \mathbf{r}(t) - \mathbf{r}(0) \rangle^2 / 6t,$$

где  $\mathbf{r}(t)$  — зависящая от времени траектория отдельной частицы, а  $\langle \dots \rangle$  означает усреднение по ансамблю. Для взаимодействующих частиц принято вводить два коэффициента [19]: коротковременный  $D_S$  и длинновременный  $D_L$ , определяя их как

$$D_S = \lim_{t \rightarrow 0} D(t), \quad D_L = \lim_{t \rightarrow \infty} D(t).$$

Отметим, что диффузионный характер движения частиц проявляется на временах, больших по сравнению с обратной частотой трения среды  $\eta^{-1}$ , и предел  $t \rightarrow 0$  следует понимать так, что время достаточно мало, но в то же время велико по сравнению с  $\eta^{-1}$ . В случае не слишком большой объемной доли частиц  $b \gg a$  принято считать [19], что коротковременный коэффициент диффузии совпадает с обычным коэффициентом диффузии невзаимодействующих броуновских частиц

$$D_S = D_0 = v_{Td}^2 / \eta.$$

Из-за взаимодействия между частицами  $D_L$  оказывается меньше  $D_S$ . Так, в предельном случае кристаллической структуры  $D_L \rightarrow 0$ , поскольку смещение частиц, находящихся в узлах решетки, ограничено. Тем самым отношение  $D_L/D_0$  представляет адекватной величиной для исследования влияния неидеальности на динамическое поведение системы сильновзаимодействующих частиц, вплоть до ее кристаллизации.

### 3. РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ

Расчеты были проведены для параметров плазмы и частиц, типичных для условий экспериментов в газоразрядной пылевой плазме. Рассмотрим, например, аргоновую плазму с электронной температурой  $T_e \sim 1$  эВ и комнатной температурой ионов и нейтралов ( $\sim 0.03$  эВ) и с пылевой компонентой со следующими характеристиками: радиус частиц  $a = 5$  мкм, их концентрация  $n_d \approx 5 \cdot 10^4$ , плотность материала частиц  $\rho = 1.5$  г/см<sup>3</sup>. В этих условиях при характерных концентрациях плазмы  $n_e \sim 10^8$ – $10^9$  см<sup>-3</sup> величина структурного параметра лежит в диапазоне  $K \sim 2$ – $7$ , а в характерной для экспериментов области давлений 3–300 Па параметр  $\theta$  лежит в диапазоне  $\theta \sim 0.02$ – $2$ . Исходя из этих оценок, в данной работе расчеты были проведены для двух значений структурного параметра  $K = 2.42$  и  $K = 4.84$  и набора значений параметра  $\theta$ : 0.03, 0.1,

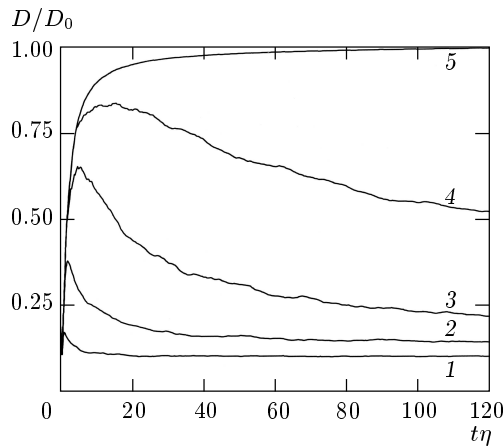


Рис. 1. Зависимость отношения коэффициента диффузии  $D$  взаимодействующих частиц к коэффициенту диффузии не взаимодействующих броуновских частиц  $D_0$  от времени (в обратных временах торможения  $\eta^{-1}$ ) для  $K = 4.84$ ,  $\Gamma_d = 554.7$  и различных величинах параметра  $\theta = 0.05$  (1), 0.15 (2), 0.45 (3), 1.33 (4). Кривая 5 — точное решение для не взаимодействующих броуновских частиц

0.3, 0.83 и 2.5 (для  $K = 2.42$ ) и  $\theta = 0.017, 0.05, 0.15, 0.45$  (для  $K = 4.84$ ). Параметр неидеальности  $\Gamma_d$  варьировался изменением температуры системы  $T_d$ .

### 3.1. Временная зависимость коэффициента диффузии

На рис. 1 представлена зависимость отношения коэффициента диффузии  $D(t)$  взаимодействующих частиц к коэффициенту диффузии не взаимодействующих броуновских частиц  $D_0$  от времени (в обратных временах торможения  $\eta^{-1}$ ) для  $K = 4.84$ ,  $\Gamma_d = 554.7$  и различных величинах параметра  $\theta$ . Кривая 5 представляет собой точное решение уравнения Ланжевена при отсутствии взаимодействия между частицами:

$$\frac{D(t)}{D_0} = 1 - \frac{1 - \exp(-\eta t)}{\eta t}, \quad (6)$$

так что на больших по сравнению с обратной частотой трения временах ( $\eta t \gg 1$ )  $D(t) = D_0$ , в то время как на малых временах ( $\eta t \ll 1$ ) проявляется баллистический характер движения частицы  $\langle \Delta r^2(t) \rangle \approx 3v_T^2 t^2$  и  $D(t) \sim t$ . При наличии взаимодействия характер поведения величины  $D(t)$  на малых временах остается тем же. Затем она достигает максимума, значение коэффициента диффузии в котором разумно использовать при определении коротковременного коэффициента самодиффузии  $D_S$ .

Заметим, что коэффициент  $D_S$  оказывается меньше  $D_0$  и стремится к последнему при увеличении вязкости среды. Далее с ростом времени коэффициент диффузии стремится к постоянному значению  $D_L < D_S$ , которое и соответствует стандартному определению коэффициента самодиффузии взаимодействующих частиц. В последующем изложении основное внимание уделяется именно характеру поведения коэффициента  $D_L$ , поскольку именно он может быть определен экспериментально при исследованиях пылевой плазмы [20, 21]. Кроме того, в его определении не содержится такого произвола, как, например, при определении  $D_S$ .

### 3.2. Влияние неидеальности на поведение $D_L$

На рис. 2а, б представлена зависимость коэффициента самодиффузии  $D_L$  взаимодействующих частиц от величины параметра неидеальности  $\Gamma_d$  для двух значений структурного параметра  $K$  и при различных значениях параметра  $\theta$ . Обсудим некоторые особенности поведения отношения  $D_L$ . Отметим, во-первых, что при увеличении неидеальности системы коэффициент  $D_L$  монотонно уменьшается, а при некотором значении  $\Gamma_d$  резко уменьшается на несколько порядков величины. Данный скачок, по-видимому, является индикатором фазового перехода жидкость—кристалл в системе пылевых частиц. Так, для  $K = 2.4$  коэффициент диффузии претерпевает скачок при  $\Gamma_d \sim 180$ , а для  $K = 4.8$  при  $\Gamma_d \sim 750$ . При этом оказывается, что при заданном  $K$  и различных значениях  $\theta$  коэффициент диффузии претерпевает скачок при одних и тех же величинах параметра неидеальности. Следовательно, условия кристаллизации системы определяются только двумя параметрами,  $\Gamma_d$  и  $K$ , и не зависят от величины параметра  $\theta$ .

Обращает на себя внимание то, что ход зависимости  $D_L$  от  $\Gamma_d$ , приведенный на рис. 2 в логарифмических координатах, является практически прямолинейным при приближении к точке кристаллизации. Это можно объяснить, если по аналогии с молекулярными жидкостями представить коэффициент диффузии в виде

$$D_L = \frac{\Delta^2}{6\tau_0} \exp\left(-\frac{W}{T_d}\right),$$

где в рассматриваемом случае  $\Delta$  характеризует среднее расстояние между частицами,  $\tau_0$  — характерный период колебаний частицы в «оседлом» состоянии, а  $W$  — энергетический барьер, преодолеваемый частицей при переходе между соседними «оседлыми» со-

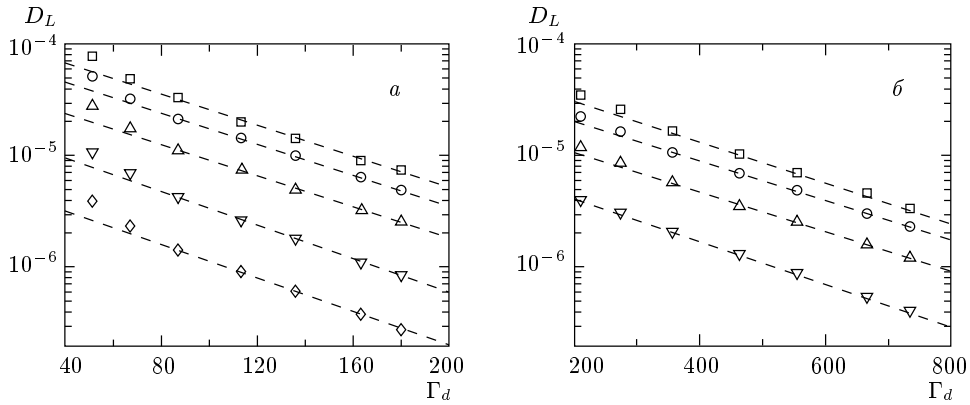


Рис. 2. Зависимость коэффициента самодиффузии  $D_L$  (условные единицы) от параметра неидеальности  $\Gamma_d$  при  $K = 2.42$  (а) и  $4.84$  (б). Обозначения:  $\theta = 0.03$  ( $\square$ ),  $0.1$  ( $\circ$ ),  $0.3$  ( $\triangle$ ),  $0.83$  ( $\nabla$ ) и  $2.5$  ( $\diamond$ ) (для  $K = 2.42$ ) и  $\theta = 0.017$  ( $\square$ ),  $0.05$  ( $\circ$ ),  $0.15$  ( $\triangle$ ),  $0.45$  ( $\nabla$ ) (для  $K = 4.84$ ). Штрихи — результаты аппроксимации

Результаты аппроксимации зависимости  $D_L$  от  $\Gamma_d$  соотношением  $D_L = A \exp(-B\Gamma_d)$

$K$	$\theta$	$A \cdot 10^{-5}$	$B \cdot 10^{-2}$	$B^* \cdot 10^{-2}$
2.4	0.03	12.9	1.6	2.9
	0.1	8.6	1.6	2.8
	0.3	4.6	1.6	2.9
	0.83	1.9	1.7	3.1
	2.5	0.65	1.7	3.1
4.8	0.017	7.1	0.42	3.0
	0.05	4.5	0.40	2.9
	0.15	2.4	0.40	2.9
	0.45	0.96	0.43	3.1

стояниями. Разумно предположить, что  $W/T_d \sim \Gamma_d$ , и аппроксимировать коэффициент самодиффузии зависимостью типа  $D_L = A \exp(-B\Gamma_d)$ . Здесь  $A$  также может зависеть от  $\Gamma_d$  (как и от  $K$  и  $\theta$ ). Результаты аппроксимации приведены в таблице, а также показаны штрихами на рис. 2. Отметим, что для заданного значения  $K$  величины параметра  $B$  близки между собой независимо от  $\theta$ .

### 3.3. Кривая кристаллизации в расчетах методом молекулярной динамики

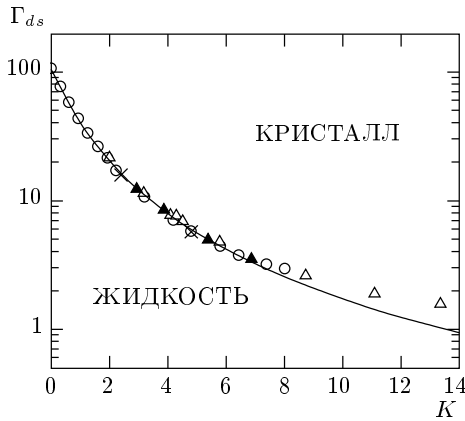
Одним из фундаментальных вопросов, возникающих при исследовании свойств пылевой плазмы, является вопрос об условиях кристаллизации подсистемы пылевых частиц. Из простейшей и наиболее

изученной модели неидеальной плазмы — модели однокомпонентной плазмы — известно, что при  $\Gamma \gtrsim 1$  в системе появляется ближний порядок, а при  $\Gamma \approx 106$  однокомпонентная плазма кристаллизуется [24]. Модель однокомпонентной плазмы не может претендовать на адекватное описание свойств пылевой плазмы, прежде всего из-за пренебрежения эффектами экранировки. Тем не менее, именно рассуждения, основанные на качественных результатах модели однокомпонентной плазмы, привели Икези [25] к выводу о возможности кристаллизации пылевой подсистемы в неравновесной газоразрядной плазме. Он предположил, что условием кристаллизации пылевых частиц в плазме может быть условие вида

$$\Gamma_{ds} = \frac{Z_d^2 e^2}{b T_d} \exp\left(-\frac{b}{\lambda_D}\right) \gtrsim 106. \quad (7)$$

Вопрос об условиях кристаллизации системы частиц с взаимодействием Юкавы были исследованы с помощью численного моделирования методом молекулярной динамики [10–12]. Результаты моделирования показывают, что фазовый переход пылевой компоненты из жидкостного в кристаллическое состояние описывается в терминах двух безразмерных параметров  $\Gamma_d$  и  $K$ . При этом величина параметра  $\Gamma_{ds}$ , необходимая для кристаллизации, не определяется простым условием типа (7), а имеет более сложную зависимость от  $K$ .

На рис. 3 представлены данные по расчету кривой кристаллизации в модели Юкавы в координатах  $(K, \Gamma_{ds})$  [10–12]. Видно, что критерий (7) не выполняется. В то же время удается ввести эмпирическое



**Рис. 3.** Данные по численному расчету методом молекулярной динамики кривой кристаллизации в модели Юкавы в координатах  $(K, \Gamma_{ds})$ .  $\blacktriangle$  — [10],  $\triangle$  — [11],  $\circ$  — [12]. Крестики соответствуют значениям  $\Gamma_{ds}$ , при которых происходит скачок коэффициента диффузии в представленных в данной работе расчетах

условие кристаллизации [26]

$$\Gamma_{ds}(1 + K + K^2/2) \approx 106, \quad (8)$$

совпадающее в пределах ошибки расчета с результатами численного моделирования по крайней мере вплоть до  $K \lesssim 6$ . Равенству в выражении (8) соответствует кривая, показанная на рис. 3.

На рис. 3 крестиками отмечены также те значения  $\Gamma_{ds}$ , при которых происходит скачкообразное изменение величины  $D_L$  в представленных в данной работе расчетах для  $K = 2.4$  и  $K = 4.8$ . Полученные данные хорошо коррелируют с другими расчетами. Тем самым, резкий скачок коэффициента диффузии действительно является индикатором кристаллизации системы. Кроме того, расчеты действительно подтверждают, что условия кристаллизации не зависят от параметра  $\theta$  (вязкости среды). Однако граничное значение  $D_L/D_0$ , при котором происходит резкий скачок, зависит от  $\theta$ .

Отметим, что часто при определении  $\Gamma_d$  и  $K$  используется другая нормировка, а именно, вместо характерного расстояния между пылевыми частицами  $n_d^{-1/3}$  выбирается радиус Вигнера—Зейтца

$$\rho = (4\pi n_d/3)^{-1/3}.$$

Определенные таким образом параметр неидеальности  $\Gamma'_d$  и параметр  $K'$  связаны с  $\Gamma_d$  и  $K$  простыми соотношениями:

$$K' \approx K/1.612, \quad \Gamma'_d \approx 1.612\Gamma_d.$$

Например, условием кристаллизации однокомпонентной плазмы в этих обозначениях будет  $\Gamma' \gtrsim 172$ .

### 3.4. Нормировка параметра неидеальности и плазменно-пылевой частоты

Отметим, что условие (8) может быть получено с помощью простого, хотя и нестрогого, подхода [26]. Именно, рассмотрим цепочку частиц, взаимодействующих посредством потенциала (1). Характерная частота тепловых колебаний частиц в такой цепочке может быть записана как [27]

$$\omega_0 \sim \omega_{pd}^* = \omega_{pd} \left(1 + K + \frac{K^2}{2}\right)^{1/2} \exp\left(-\frac{K}{2}\right). \quad (9)$$

Тепловое смещение частиц относительно положения равновесия

$$\langle \delta u^2 \rangle \sim T_d/m_d \omega_0^2$$

на кривой кристаллизации должно удовлетворять условию Линдемана

$$\langle \delta u^2 \rangle/b^2 = \text{const},$$

откуда получаем, что

$$\Gamma_d \left(1 + K + \frac{K^2}{2}\right) \exp(-K) = \Gamma_d^* = \text{const} \quad (10)$$

на кривой кристаллизации. Используя в качестве значения константы величину, известную из модели однокомпонентной плазмы ( $K \rightarrow 0$ ), получим в точности условие (8).

Приведенные выше рассуждения позволяют предположить, что параметры  $\Gamma_d^*$  и  $\omega_{pd}^*$  могут служить параметрами подобия для сильнонеидеальных систем, взаимодействующих посредством потенциала (1). Проведенное моделирование подтверждает это предположение. На рис. 4 представлена зависимость отношения  $D_L/D_0$  от модифицированного параметра неидеальности  $\Gamma_d^*$  для набора одинаковых значений  $\theta^* = \eta/\omega_{pd}^*$  при двух различных величинах структурного параметра. Из рисунка следует, что зависимости  $D_L/D_0$  от  $\Gamma_d^*$  для сильнонеидеальной системы практически совпадают при одинаковых значениях параметра  $\theta^*$ , но существенно различны  $K$ . Тем самым, динамическое поведение системы сильновзаимодействующих частиц целиком определяется набором двух параметров  $\Gamma_d^*$  и  $\theta^*$ . Более того, заметим, что аппроксимация зависимости  $D_L$  от  $\Gamma_d^*$  формулой

$$D_L = A \exp(-B^* \Gamma_d^*)$$

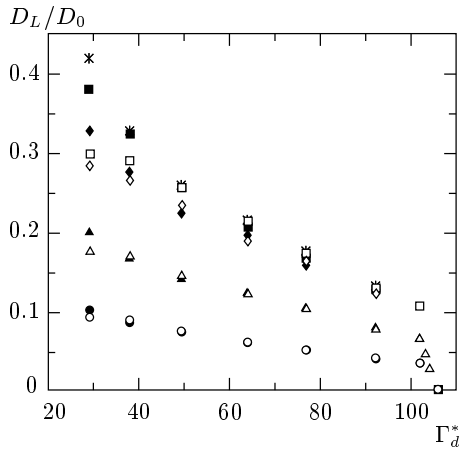


Рис. 4. Зависимость отношения  $D_L/D_0$  от величины нормированного параметра неидеальности  $\Gamma_d^*$ ;  $\theta^* = 0.044$  ( $\circ$ ),  $0.13$  ( $\triangle$ ),  $0.4$  ( $\diamond$ ),  $1.2$  ( $\square$ ) и  $3.6$  ( $*$ ) для  $K = 2.4$ ;  $\theta^* = 0.044$  ( $\bullet$ ),  $0.13$  ( $\blacktriangle$ ),  $0.4$  ( $\blacklozenge$ ) и  $1.2$  ( $\blacksquare$ ) для  $K = 4.8$

дает практически одинаковые значения  $B^*$  как для различных значений структурного параметра, так и для различных значений  $\theta$  (см. таблицу).

### 3.5. Критерии кристаллизации

Существуют различные феноменологические критерии кристаллизации системы взаимодействующих частиц, нашедшие свое применение и в физике пылевой плазмы. Наиболее известен критерий Линдемана [28], согласно которому твердая фаза плавится, если отношение среднеквадратичного смещения частицы к среднему межчастичному расстоянию достигает  $\sim 0.1$  (это число может варьироваться от  $\sim 0.05$  до  $\sim 0.2$  для различных физических систем). Другим критерием является постоянство величины первого максимума жидкостного структурного фактора [29], который на линии кристаллизации достигает значения  $\sim 3.0$  (это число также варьируется от 2.85 до 3.2 в различных расчетах). В качестве простого критерия кристаллизации в терминах бинарной корреляционной функции рассматривается отношение ее минимального и максимального значений. Кристаллизация происходит при значении этого отношения, равном 0.2. Простой динамический критерий плавления, близкий по духу критерию Линдемана, был предложен в работе [19]. Он гласит, что кристаллизация происходит, когда отношение коэффициентов диффузии пылевой частицы  $D_L/D_0$  уменьшается до значения  $\sim 0.1$ .

Проведенное моделирование показывает, что граничное значение  $D_L/D_0$ , при котором происходит резкий скачок коэффициента самодиффузии (кристаллизация), увеличивается с увеличением  $\theta^*$ . При этом обращает на себя внимание, что во всех расчетах, начиная с  $\theta^* \sim 0.5$  (и по крайней мере вплоть до  $\theta^* = 3.6$ ), отношение  $D_L/D_0$  вблизи точки кристаллизации постоянно и близко к 0.1.

Тем самым динамический критерий кристаллизации оказывается справедливым лишь для случая не слишком малых значений  $\theta^*$  ( $\theta^* \gtrsim 0.5$ ). В то же время при меньших  $\theta^*$  отношение  $D_L/D_0$  в точке кристаллизации может быть существенно меньшим, и, следовательно, критерий нарушается. Заметим в связи с этим, что эксперименты и расчеты, проведенные в работе [19] для обоснования рассматриваемого критерия, были выполнены применительно к условиям коллоидных растворов, вязкость в которых (а следовательно и величина  $\theta^*$ ), как правило, на много порядков превышает вязкость буферного газа в условиях, характерных для экспериментов с пылевой плазмой. Тем самым применение динамического критерия плавления к пылевой плазме ограничено областью не слишком низких давлений. Поскольку при исследовании лабораторной пылевой плазмы часто приходится иметь дело с ситуацией, когда  $\omega_{pd} \gg \eta$ , т. е.  $\theta \ll 1$ , рассмотренный критерий кристаллизации должен применяться с осторожностью.

## 4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе модифицированный метод молекулярной динамики применен для исследования динамического поведения пылевых частиц, взаимодействующих посредством потенциала Юкавы. Основное внимание уделено изучению зависимости коэффициента самодиффузии пылевых частиц  $D_L$  от силы взаимодействия между ними при параметрах плазмы, типичных для современных лабораторных экспериментов в слабоионизованной газоразрядной плазме.

Основные результаты можно сформулировать следующим образом. Обнаружено, что коэффициент самодиффузии  $D_L$  испытывает резкий скачок (уменьшается на несколько порядков величины) при определенном значении параметра неидеальности  $\Gamma_d$ . Этот скачок может служить индикатором фазового перехода в системе пылевой плазмы. Значение параметра неидеальности, при котором происходит скачок (фазовый переход), существенным образом зависит от структурного параметра  $K$ , но не зависит

в пределах точности численного эксперимента от величины параметра  $\theta$ . Оказывается возможным сконструировать из трех независимых безразмерных параметров  $\Gamma_d$ ,  $K$  и  $\theta$  два параметра,  $\Gamma_d^*$  и  $\theta^*$ , которые полностью определяют динамическое поведение сильнонеидеальной системы пылевых частиц. Показано, что зависимость  $D_L$  от  $\Gamma_d^*$  может быть с хорошей точностью аппроксимирована выражением

$$D_L = A \exp(-B^* \Gamma_d^*),$$

где  $B^* \approx 3.0 \cdot 10^{-2}$ . Указано также на то, что применимость динамического критерия кристаллизации, предложенного в работе [19], в действительности ограничена областью не слишком малых значений  $\theta^*$  и, следовательно, не слишком малых давлений ( $\theta^* \gtrsim 0.5$ ).

Полученные результаты могут быть использованы как при анализе недавно полученных экспериментальных результатов [20, 21], так и при разработке методов диагностики пылевой плазмы, основанных на определении динамического поведения системы пылевых частиц.

## ЛИТЕРАТУРА

1. J. H. Chu and L. I, Phys. Rev. Lett. **72**, 4009 (1994).
2. H. Thomas, G. E. Morfill, and V. Demmel et al., Phys. Rev. Lett. **73**, 652 (1994).
3. A. Melzer, T. Trottenberg, and A. Piel, Phys. Lett. A **191**, 301 (1994).
4. Y. Hayashi and K. Tachibana, Jap. J. Appl. Phys. **33**, L804 (1994).
5. В. Е. Фортов, А. П. Нефедов, В. М. Торчинский и др., Письма в ЖЭТФ **64**, 86 (1996).
6. А. М. Липаев, В. И. Молотков, А. П. Нефедов и др., ЖЭТФ **112**, 2030 (1997).
7. В. Е. Фортов, А. П. Нефедов, О. Ф. Петров и др., Письма в ЖЭТФ **63**, 176 (1996).
8. Y. K. Khodataev, S. A. Khrapak, A. P. Nefedov, and O. F. Petrov, Phys. Rev. E **57**, 7086 (1998).
9. M. O. Robbins, K. Kremer, and G. S. Grest, J. Chem. Phys. **88**, 3286 (1988).
10. E. J. Meijer and D. Frenkel, J. Chem. Phys. **94**, 2269 (1991).
11. M. J. Stevens and M. O. Robbins, J. Chem. Phys. **98**, 2319 (1993).
12. S. Hamaguchi, R. T. Farouki, and D. H. E. Dubin, Phys. Rev. E **56**, 4671 (1997).
13. H. Totsuji, T. Kishimoto, Y. Inoue et al., Phys. Lett. A **221**, 215 (1996).
14. В. В. Жаховский, В. И. Молотков, А. П. Нефедов и др., Письма в ЖЭТФ **66**, 392 (1997).
15. О. М. Белоцерковский, И. Е. Захаров, А. П. Нефедов и др., ЖЭТФ **115**, 819 (1999).
16. А. П. Нефедов, О. Ф. Петров, Я. К. Ходатаев, С. А. Храпак, ЖЭТФ **115**, 837 (1999).
17. D. Winske, M. S. Murillo, and M. Rosenberg, Phys. Rev. E **59**, 2263 (1999).
18. H. Lowen, J. Phys.: Cond. Matt. **4**, 10105 (1992).
19. H. Lowen, T. Palberg, and R. Simon, Phys. Rev. Lett. **70**, 1557 (1993).
20. А. П. Нефедов, О. Ф. Петров, С. А. Храпак и др., ТВТ **36**, 141 (1998).
21. G. E. Morfill, H. M. Thomas, U. Konopka, and M. Zuzic, Phys. Plasmas **6**, 1769 (1999).
22. О. С. Ваулина, А. П. Нефедов, О. Ф. Петров, С. А. Храпак, ЖЭТФ **115**, 2067 (1999).
23. O. S. Vaulina, S. A. Khrapak, A. P. Nefedov, and O. F. Petrov, Phys. Rev. E **60**, 5959 (1999).
24. S. Ishimaru, Rev. Mod. Phys. **54**, 1017 (1982).
25. H. Ikezi, Phys. Fluids **29**, 1764 (1986).
26. О. С. Ваулина, С. А. Храпак, ЖЭТФ **117**, 326 (2000).
27. F. Melandso, Phys. Plasmas **3**, 3890 (1996).
28. F. A. Lindemann, Z. Phys. **11**, 609 (1910).
29. J. P. Hansen and L. Verlet, Phys. Rev. **184**, 151 (1969).