

О ВЛИЯНИИ ПЫЛЕВЫХ ЧАСТИЦ НА СВОЙСТВА НИЗКОТЕМПЕРАТУРНОЙ ПЛАЗМЫ

М. А. Олеванов, Ю. А. Манкелевич**, Т. В. Рахимова*

*Научно-исследовательский институт ядерной физики им. Д. В. Скobelевына
Московского государственного университета им. М. В. Ломоносова
119899, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 15 июля 2002 г.

Проведен численный расчет параметров низкотемпературной плазмы в присутствии пылевых частиц с помощью самосогласованного решения уравнений баланса между рождением и гибеллю электронов и ионов в сочетании с методом молекулярной динамики для прямого моделирования процессов в окрестности макрочастиц. Исследованы связь зарядов макрочастиц с давлением нейтрального газа, а также зависимость параметров низкотемпературной плазмы от концентрации пылевых частиц в объеме. Показано, что уже при сравнительно небольших концентрациях пыли характеристики и состав плазмы могут заметно меняться по отношению к невозмущенному присутствием пыли случаю.

PACS: 52.20.Hv, 52.25.Vy

1. ВВЕДЕНИЕ

В последние годы процессы, протекающие в пылевой плазме, вызывают огромный интерес, и в данном направлении ведутся активные исследования. К наиболее изучаемым явлениям относятся процессы самоорганизации, протекающие в плазменно-пылевых системах; образование пылевых кристаллов [1–7] и фазовые переходы газ–жидкость [8–13]; развитие неустойчивостей в пылевых облаках [11, 14]; взаимодействия макрочастиц, которые могут приводить к образованию пылевых кластеров. Понимание динамики перечисленных выше процессов представляет большой фундаментальный интерес как для физики плазмы, так и для физики конденсированных систем. Однако наряду с чисто теоретическим интересом исследование этих процессов в последние годы приобрело огромное практическое значение. Это прежде всего связано с бурным развитием микротехнологии и технологий получения новых материалов в плазмохимических реакторах.

Так как использование пылевой плазмы рассматривается как один из эффективных способов

синтеза наночастиц с уникальными физическими свойствами, понимание механизмов взаимодействия макрочастиц оказывается определяющим условием для создания необходимой технической базы. Основным фактором, приводящим к возникновению сильного межчастичного взаимодействия, выступает накопление макрочастицами значительных электрических зарядов, которые в зависимости от условий могут достигать $Z \sim 10^3\text{--}10^4$ зарядов электрона. Обычно благодаря большой подвижности электронов этот заряд отрицателен, однако ряд эффектов, таких как вторичная электронная эмиссия и фотоэмиссия [15], может приводить к накоплению положительного заряда. Тем не менее, вопреки тому что макрочастицы аккумулируют большие одноименные статические заряды, наличие плазмы приводит к появлению дополнительных сил притяжения, которые и создают возможность процессов самоорганизации и роста кластеров. В литературе предлагается широкий набор моделей, описывающих подобные процессы [16–18].

В связи с тем, что разряды постоянного тока находят широкое применение в технологии осаждения тонких пленок с заданными свойствами, наряду с процессами межпылевого взаимодействия особый интерес представляет влияние макрочастиц на микро- и макроскопические характеристики плаз-

*E-mail: olevanov_m@mtu-net.ru

**E-mail: ymankelevich@mics.msu.su

мы. Наличие частиц в плазме может существенно изменить ее свойства за счет появления дополнительного источника гибели, а иногда и рождения электронов и ионов. Наряду с этим пыль может оказывать заметное влияние на химический и зарядовый состав плазмы, а также на скорости протекающих там реакций.

Целью настоящей работы является численное исследование влияния задаваемых извне факторов, таких как концентрация пыли в объеме, давление нейтрального газа, скорость ионизации внешним источником, на макроскопические и микроскопические характеристики плазмы, а именно на концентрации ионов и электронов в плазме, на заряды пылевых частиц, на скорость рекомбинации и на функцию распределения по энергиям частиц плазмы. Важным фактором, который нужно учитывать при построении адекватной модели плазмы с пылевыми частицами, является то, что компоненты системы нельзя рассматривать независимо друг от друга, так как все параметры отдельных подсистем — ионной, электронной и пылевой, — а также протекающие в них процессы оказывают сильное взаимное влияние друг на друга. Таким образом, при заданном наборе значений внешних факторов система в конечном итоге оказывается в состоянии некоторого динамического равновесия, которое может смещаться в ту или иную сторону при изменении внешних условий.

Большое количество взаимовлияющих факторов и процессов приводит к тому, что в описанной выше постановке задача является очень комплексной и сложно поддающейся аналитическому исследованию. Ситуация осложняется еще и тем, что, как показывает практика, уравнения, описывающие динамику системы, оказываются сильно нелинейными. В этой связи развитие численных методов моделирования подобных систем имеет большое практическое значение.

Численные расчеты уже давно и широко используются в качестве инструмента для исследования протекающих в пылевой плазме процессов [18–25]. Одним из наиболее часто используемых подходов является диффузионно-дрейфовое приближение, где плотности и потоки заряженных частиц находятся из решения системы уравнений, состоящей из уравнения Пуассона, уравнений непрерывности и уравнения Больцмана для определения функции распределения частиц плазмы. Данный подход был применен в работе [19] для расчетов заряда пылевых частиц, плазменных потоков на поверхность отдельной пылинки, распределения концентраций ионов и электронов в окрестностях макрочастицы, а также дру-

гих параметров в плазме несамостоятельного разряда, протекающего в гелии при атмосферном давлении. Тот же самый подход был использован в работе [20] для аналогичных расчетов в плазме азота при атмосферном давлении. Основным критерием применимости этого подхода является условие малости длины свободного пробега ионов и электронов по сравнению с характерными размерами макрочастиц и областью заметного нарушения квазинейтральности, размер которой можно оценить радиусом Дебая. К недостаткам данного подхода следует отнести необходимость привлечения дополнительных соображений для выбора граничных условий на поверхности пылевой частицы и на границе расчетной ячейки.

Другим часто используемым подходом является метод молекулярной динамики, основная идея которого состоит в непосредственном решении уравнений движения для ионов и электронов в самосогласованном поле, создаваемом плазмой и зарядом, накопленным на пылевых частицах. Преимуществом данного метода является то, что решение поставленной задачи ведется «из первых принципов», не требуя привлечения каких-либо дополнительных априорных допущений. Однако при реализации этого подхода появляются сложности другого рода, связанные с огромными вычислительными затратами, возникающими из-за необходимости проведения расчетов для большого числа частиц. Эти сложности приводят к тому, что для проведения реальных расчетов приходится вводить различные упрощенные модели взаимодействия, ограничивающие количество участвующих в них частиц. Описанный метод применялся в [21] для определения характера экранировки пылевых частиц; в [22] для проверки границ применимости приближения ограниченных орбит с учетом взаимодействия ионов и атомов нейтрального газа; в [23, 24] для расчета динамики плазмы в окрестности пылевой частицы при наличии потока ионов. Наряду с упомянутыми выше основными методами расчетов в некоторых работах [25] использовались также и комбинированные методы, объединяющие гидродинамическое описание для одной из подсистем с методом Монте-Карло для описания другой подсистемы.

В настоящей работе мы провели численное моделирование процессов в плазменно-пылевой системе, выбрав в качестве инструмента метод молекулярной динамики. Объектом исследования стала плазма несамостоятельного разряда в гелии в присутствии некоторого количества пыли. Принятая модель была ориентирована на то, чтобы изучить осо-

бенности эволюции системы к состоянию динамического равновесия в зависимости от внешних условий. Поэтому основным принципом, которым мы руководствовались при ее построении, было то, что все величины, характеризующие состояние системы, должны достигать своих равновесных значений естественным путем. В частности, мы отказались от какого-либо принудительного управления числом частиц в расчетной ячейке, так же как и от контроля ее электронейтральности.

2. ОПИСАНИЕ ЧИСЛЕННОЙ МОДЕЛИ

Исходным состоянием системы была однородная плазма несамостоятельного разряда в гелии. В качестве механизмов, контролирующих процессы рождения и гибели заряженных частиц, были взяты ионизация внешним источником и электрон-ионная рекомбинация в объеме плазмы. Следует отметить, что под несамостоятельным разрядом мы подразумеваем не только классический несамостоятельный разряд высокого давления, контролируемый внешним пучком электронов с энергией в сотни килоэлектронвольт, но и квазинесамостоятельные разряды пониженного давления, типа разрядов с убегающими электронами.

Выбранный источник ионизации обеспечивал постоянную скорость рождения заряженных частиц в единице объема $Q = 10^{15} \text{ см}^{-3} \cdot \text{с}^{-1}$. Равновесные значения концентраций ионов и электронов определялись балансом между скоростью рождения и гибели. В нашей модели константа гибели частиц была подобрана так, чтобы в невозмущенном присутствием пыли случае концентрации ионов и электронов были равны $n_0 = 10^9 \text{ см}^{-3}$. Ионы имеют массу 4 и предполагаются однозарядными.

Равновесная температура ионов определяется взаимодействием с нейтральным газом и примерно равна комнатной температуре $T_i = 0.025 \text{ эВ}$. Температура электронов значительно выше и задается внешним электрическим полем. Вообще говоря, электрическое поле является одним из внешних факторов, определяющих динамику системы, и само по себе исследование его влияния на процесс зарядки пылевых частиц, а также на прочие процессы, протекающие в пылевой плазме, может представлять отдельный интерес. Однако опыт показывает, что, поскольку температура электронов является одним из основных параметров, характеризующих процессы в плазменно-пылевой системе, основная роль электрического поля как раз состоит в определении величи-

ны именно этого внутреннего параметра. Все остальное влияние может рассматриваться лишь как дополнительная поправка к температурному фактору. В нашей модели поле все время остается постоянным, и ему соответствует температура электронов $T_e = 2.5 \text{ эВ}$. В качестве равновесной функции распределения заряженных частиц по скоростям принято распределение Максвелла.

Далее в объем плазмы вводится некоторое количество пыли. В нашей модели принято, что все макрочастицы имеют сферическую форму и одинаковый радиус $a = 10 \text{ мкм}$. Такой размер частиц является типичным для многих экспериментов, и его можно рассматривать как некоторую усредненную величину. Концентрация пылевых частиц n_d в процессе вычислений меняется в широких пределах, от 10^2 см^{-3} до 10^7 см^{-3} , являясь одной из внешних характеристик системы. Изначально пылевые частицы не заряжены.

После появления макрочастиц система переходит в новое состояние динамического равновесия. Динамику перехода системы в новое состояние можно описать системой уравнений

$$\begin{aligned} \frac{dn_e}{dt} &= Q - \beta n_i n_e - \beta_{ed} n_d n_e, \\ \frac{dn_i}{dt} &= Q - \beta n_i n_e - \beta_{id} n_d n_i, \\ \frac{dZ_d}{dt} &= \beta_{id} n_d n_i - \beta_{ed} n_d n_e. \end{aligned} \quad (1)$$

Здесь n_e , n_i , n_d — концентрации электронов, ионов и макрочастиц, Q — скорость ионизации, β — константа скорости электрон-ионной рекомбинации, Z_d — заряд пылевых частиц, β_{ed} , β_{id} — эффективные константы скорости гибели электронов и ионов на поверхности макрочастиц. В качестве комментария к приведенной выше системе уравнений необходимо сделать два замечания. Во-первых, все параметры, которые входят в систему, представляют собой величины, усредненные по объему. Это важно иметь в виду при расчете концентраций ионов и электронов, так как в окрестности пылевых частиц их величины испытывают очень сильные возмущения и заметно отклоняются от своих средних значений. Во-вторых, константы скорости гибели электронов и ионов на поверхности макрочастиц в процессе эволюции системы константами не являются, а определяются зарядом пылевых частиц и плазменными потоками на их поверхность.

Таким образом, для решения системы (1) необходимо знать потоки заряженных частиц на поверх-

ность пыли для любого момента времени. В нашей модели для вычисления этих потоков используется алгоритм, основанный на методе молекулярной динамики. Предполагается, что все макрочастицы обладают одинаковыми размером и формой. Тогда, если не принимать во внимание флуктуации, вызванные присутствием по соседству других частиц пыли, течение процессов в окрестности каждой частицы, а именно, ее зарядку и воздействие на окружающую плазму, можно считать одинаковым. В этих условиях исследование динамики системы можно проводить, выбрав в качестве представителя какую-нибудь одну пылинку. В нашей модели пылевая частица находится в центре расчетной ячейки, которая так же, как и сама частица, имеет сферическую форму. Выбор именно такой геометрии продиктован свойствами симметрии задачи.

Радиус ячейки L выбран равным 60 мкм, что в 6 раз превышает радиус самой частицы. Однако, с точки зрения задания граничных условий, это соотношение не является оптимальным, и было бы желательно его увеличить еще больше. При начальных концентрациях ионов и электронов $n_0 = 10^9 \text{ см}^{-3}$ в ячейке выбранного размера оказывается приблизительно 1800 частиц, но, поскольку число электронов и ионов в ячейке не фиксировано и определяется соотношением скоростей их рождения и гибели, в процессе расчетов оно в зависимости от условий может колебаться от нескольких сотен до десятков тысяч.

Электроны и ионы либо попадают в ячейку вместе с потоком через ее внешнюю границу, либо рождаются непосредственно в объеме ячейки. Рождение частиц в объеме ячейки смоделировано как случайный процесс, вероятность которого в единицу времени определяется скоростью ионизации. Распределение рожденных частиц по пространству ячейки однородно, а в качестве их начального распределения по скоростям принято максвелловское распределение. Условия на внешней границе ячейки мы обсудим чуть позже. Уменьшение числа частиц плазмы может происходить за счет их поглощения на поверхности пылевой частицы, из-за рекомбинации в объеме ячейки, а также благодаря уходу частиц через внешнюю границу расчетной области.

Траектории заряженных частиц внутри расчетной ячейки находились прямым интегрированием системы уравнений движения:

$$\begin{aligned} \mathbf{v}_k(t + \tau) &= \mathbf{v}_k(t) + \frac{\mathbf{F}_k(t)}{m_k} \tau, \\ \mathbf{r}_k(t + \tau) &= \mathbf{r}_k(t) + \mathbf{v}_k(t) \tau + \frac{\mathbf{F}_k(t)}{m_k} \frac{\tau^2}{2}. \end{aligned} \quad (2)$$

Здесь \mathbf{r}_k — радиус-вектор частицы k относительно центра ячейки, \mathbf{v}_k — скорость частицы, m_k — масса частицы, \mathbf{F}_k — сила, действующая на частицу, τ — шаг по времени. Величина шага по времени на каждой итерации пересчитывалась. Критерием пересчета служило то, что наиболее быстрая частица из находящихся в расчетной области за следующую итерацию должна пройти расстояние, много меньшее размера пылинки, которое в данном случае выступает в роли характерного масштаба длины: $\tau \ll a/v_{max}$.

Рассмотрим теперь силы, под действием которых происходит движение частиц. Их можно записать в виде

$$\mathbf{F}_k = \frac{Z_d q_k \mathbf{r}_k}{r_k^3} + \sum_{i \neq k}^N \frac{q_i q_k \mathbf{r}_{ik}}{r_{ik}^3} + \mathbf{f}_{k0}. \quad (3)$$

В этом выражении первый член описывает взаимодействие частицы k с зарядом, аккумулированным пылинкой. Здесь q_k — заряд микрочастицы, равный $+e$ для ионов и $-e$ для электронов, \mathbf{r}_k — расстояние до центра пылевой частицы. Второй член описывает взаимодействие ионов и электронов между собой. Здесь \mathbf{r}_{ik} — расстояние между частицами i и k . Последний член в (3) выражает взаимодействие микрочастицы k с атомами нейтрального газа.

Поскольку при расчете сил приходится учитывать парные взаимодействия электронов и ионов между собой, а число участников этого взаимодействия очень велико, мы приходим к необходимости использовать дополнительные соображения, которые могли бы сократить объем вычислений. Среди наиболее популярных методов очень часто используется отбор частиц по принципу их вхождения в сферу взаимодействия [26]. То есть при расчете силы, действующей на выбранную частицу, учитываются лишь вклады ее ближайших соседей, находящихся от нее на расстоянии, не превышающем радиус взаимодействия. Однако в нашем случае данный подход неприменим по ряду причин. В качестве характерного размера, ограничивающего зону отбора ближайших соседей, выступает радиус Дебая, который для выбранных условий имеет значение $\lambda_d \approx 40$ мкм. Во-первых, размер соответствующей области превосходит размер пылевой частицы и по порядку величины сопоставим с размером расчетной ячейки. Таким образом, некоторый выигрыш может получиться только при заметно более высоких концентрациях заряженных частиц в ячейке. Во-вторых, применение данного подхода невозможно из-за того, что накопленный на пылевой частице

заряд приводит к столь значительному перераспределению концентраций ионов и электронов в окрестности макрочастицы, что неучт вклада объемного заряда этих областей по принципу непопадания в сферу взаимодействия приведет к огромной вычислительной ошибке.

Учитывая приведенные выше соображения, мы выбрали другой путь, основанный на использовании особенностей геометрии задачи. Распределение плотности частиц в ячейке носит сферически-симметричный характер, поэтому электрическое поле также обладает сферической симметрией и в любой точке ячейки в среднем направлено к ее центру. Если через выбранную точку провести сферу с центром в середине ячейки, то по теореме Гаусса величина электрического поля будет определяться только зарядом, сосредоточенным внутри выделенной сферы:

$$\tilde{Q} = (Z_d + N_i - N_e)e. \quad (4)$$

Здесь Z_d — заряд пылинки, N_i , N_e — полное число ионов и электронов, попавших внутрь сферы.

Рассмотрим теперь подробнее механизм взаимодействия заряженных частиц с атомами нейтрального газа. Данные о сечениях взаимодействия были взяты из работы [27].

Для электронов в гелии частота упругих столкновений аппроксимируется следующей зависимостью:

$$\frac{\nu_{e0}}{P} [10^9 \text{ Торр}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}] = \\ = \begin{cases} 2.4 \frac{T_e [\text{эВ}]}{4}, & T_e < 4 \text{ эВ}, \\ 2.4, & T_e \geq 4 \text{ эВ}. \end{cases} \quad (5)$$

Здесь ν_{e0} — частота упругих столкновений, P — давление нейтрального газа, T_e — температура электронов. Вкладом неупругих столкновений в случае электронов можно пренебречь, так как он становится существенным при более высоких значениях температуры.

При описании взаимодействия ионов с атомами нейтрального газа в нашей модели мы учли поляризационный механизм взаимодействия и резонансную перезарядку. Сечение поляризационного взаимодействия имеет вид

$$\sigma_{pol} = 2\sqrt{2}\pi a_0^2 \sqrt{\frac{\alpha}{a_0^3} \frac{2I_H}{m_i v^2}}. \quad (6)$$

Здесь $a_0 = 0.529 \cdot 10^{-8}$ см — первый боровский радиус, $I_H = 13.6$ эВ — потенциал ионизации атома

водорода, m_i — масса иона, v — его скорость, α — поляризуемость нейтрального атома. Для атома гелия в основном состоянии $\alpha/a_0^3 = 1.39$.

Сечение резонансной перезарядки дается выражением

$$\sigma_{res} = \pi a_0^2 \frac{I_H}{I} \ln^2 \left(\frac{100v_0}{v} \sqrt{\frac{I}{I_H}} \right). \quad (7)$$

Здесь $I = 24.6$ эВ — потенциал ионизации атома гелия, $v_0 = 2.19 \cdot 10^8$ см/с — скорость электрона на первой боровской орбите, v — скорость иона.

Учитывая (6) и (7), выражение для частоты столкновений ионов с атомами нейтрального газа можно записать в виде

$$\nu_{i0} = (\sigma_{pol} + \sigma_{res}) n_0 v. \quad (8)$$

Здесь $n_0 = P/kT_0$ — концентрация атомов нейтрального газа, $kT_0 = 0.025$ эВ — его температура, P — давление, v — скорость отдельно взятого иона.

Процесс взаимодействия частиц плазмы с нейтральным газом носит характер случайных столкновений. В каждом столкновении полностью теряется направленная скорость частицы, а также происходит передача части энергии нейтральному атому. В нашей модели мы учитываем данное взаимодействие путем добавления эффективной силы трения, которая выше была обозначена как \mathbf{f}_{k0} . Этот путь в нашем случае оказывается более предпочтительным по сравнению со статистическим способом описания, т. е. со способом случайной генерации столкновений в ячейке. Дело в том, что при учете взаимодействия с нейтральными атомами основным фактором, который оказывает наиболее сильное влияние на эволюцию системы, является потеря энергии ионов, которую они приобретают в поле пылевой частицы при столкновениях. В результате ионы оказываются в потенциальной ловушке, и их траектории становятся финитными. С течением времени каждый ион будет испытывать все новые столкновения, продолжая терять энергию, и в конечном итоге окажется на поверхности макрочастицы. При статистическом описании столкновений нам бы пришлось проследить траектории всех таких ионов, даже тех, которые должны покинуть расчетную область. Кроме того, времена их финитного движения могут оказаться очень значительными по сравнению с временами, на которых возможно реально смоделировать динамику системы. Именно поэтому мы и выбрали модель, в которой столкновения представляются не дискретными событиями, а распределенным во врем-

мени воздействием. Формулу для эффективной силы трения можно записать в виде

$$\mathbf{f}_{k0} = -\nu_{k0} \max \left(0, 1 - \frac{T_0}{\varepsilon_k} \right) \mu \mathbf{v}_k. \quad (9)$$

Здесь ν_{k0} — частота столкновений с атомами нейтрального газа, T_0 — его температура, ε_k — кинетическая энергия частицы, μ — приведенная масса, \mathbf{v}_k — скорость частицы. Второй сомножитель в (9) введен для того, чтобы учесть эффективность передачи энергии при столкновениях. Этот сомножитель необходим, поскольку при моделировании движения отдельно взятой частицы невозможно отделить энергию, приобретенную во внешних полях, от ее тепловой энергии. Между тем, если частица термализована, передача энергии нейтральному газу должна прекратиться.

Учитывая (4) и (9), перепишем выражение (3) для силы, действующей на микрочастицу, в виде

$$\mathbf{F}_k = \frac{\tilde{Q} q_k \mathbf{r}_k}{r_k^3} - \nu_{k0} \max \left(0, 1 - \frac{T_0}{\varepsilon_k} \right) \mu \mathbf{v}_k. \quad (10)$$

Для практической реализации алгоритма подсчета силы расчетная область была поделена на сферические слои. Величина \tilde{Q} и, соответственно, величина электрического поля в каждом слое пересчитывалась на каждом временном шаге, а сила, действующая на отдельно взятую частицу, определялась по ее попаданию в тот или иной слой.

Обсудим теперь граничные условия на внешней поверхности ячейки. Для поддержания баланса числа частиц в расчетной области необходимо знать потоки ионов и электронов через внешнюю границу внутрь ячейки. До тех пор пока пылинка не накопит значительного заряда, эти потоки будут такими же, как и в случае невозмущенной присутствием пыли плазмы. Число частиц, попадающих в ячейку в единицу времени, таким образом, будет определяться средними концентрациями ионов и электронов, n_e и n_i , а также площадью внешней поверхности ячейки. Функция распределения частиц по скоростям изотропна и предполагается максвелловской. Для определения невозмущенного присутствием пыли потока запускается предварительный расчет без макрочастицы в расчетной области. В условиях равновесия потоки частиц вовне и внутрь ячейки совпадают, поэтому взамен каждой выбывшей частицы в произвольном месте на границе ячейки случайным образом создается новая частица, имеющая составляющую скорости, направленную внутрь ячейки. Далее в процессе моделирования ведется подсчет числа

электронов и ионов, попадающих на внешнюю границу. После того как была набрана приемлемая статистика и потоки определены с достаточной точностью, частоты рождения электронов и ионов сохраняются для дальнейшего использования в алгоритме, который случайным образом моделирует приток электронов и ионов внутрь расчетной области через ее внешнюю поверхность.

По мере зарядки пылевой частицы на границе расчетной области создается ощущимый потенциал, который приводит к невозможности дальнейшего использования частот рождения электронов и ионов, найденных в невозмущенном случае. Данная проблема может быть решена путем простого увеличения размеров ячейки, однако, как уже говорилось выше, существует чисто техническое ограничение на максимальное число частиц, движение которых можно просчитать методом молекулярной динамики. Учитывая этот факт, мы использовали дополнительные соображения для корректировки потоков через внешнюю границу, а также вида функции распределения по скоростям для попадающих в ячейку частиц.

Для решения проблемы в нашей модели действует следующая процедура. Прежде всего для электронов и ионов находится сфера, имеющая радиус \tilde{L} , за пределами которой плазму можно считать невозмущенной. В качестве критерия предполагается, что на границе сферы средняя кинетическая энергия частиц должна иметь тот же порядок величины, что и потенциальная энергия взаимодействия с макрочастицей. Этот критерий можно записать в виде:

$$T_{i,e} \sim |e\varphi(L)| \exp \left(-\frac{\tilde{L} - L}{\lambda_d} \right). \quad (11)$$

Здесь $T_{i,e}$ — температуры ионов и электронов, которые являются мерой их кинетической энергии, $\varphi(L)$ — потенциал на границе расчетной ячейки, λ_d — эффективный радиус экранирования. Необходимость использования эффективного радиуса экранирования вместо обычного радиуса Дебая связана с тем, что в силу больших значений заряда, накапленного макрочастицей, экранировка перестает носить линейный характер. Для нахождения величины λ_d мы используем уравнение

$$\varphi(L) = \frac{Z_d}{L} \exp \left(-\frac{L}{\lambda_d} \right). \quad (12)$$

Здесь L — радиус расчетной ячейки, Z_d — заряд макрочастицы, $\varphi(L)$ — значение потенциала на границе ячейки, которое находится в процессе моделирования. Как показывают расчеты, величина λ_d в

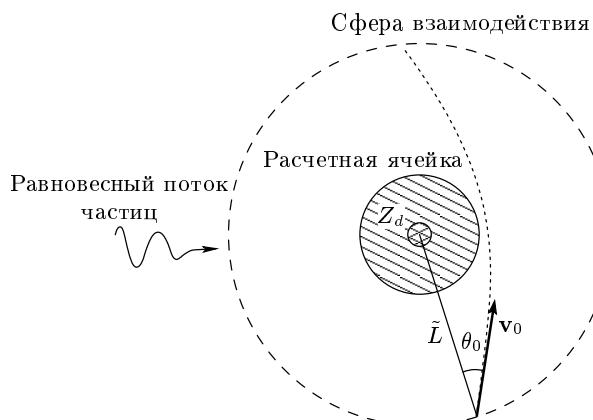


Рис. 1.

отличие от радиуса Дебая может достигать нескольких сотен микрон. Пересчет $\tilde{\lambda}_d$ и \tilde{L} проводится на каждом временном шаге.

После того как размер области, за пределами которой плазма может считаться равновесной, превышает размер расчетной ячейки, вступает в силу алгоритм корректировки потоков на внешней границе. Частицы рождаются на границе сферы \tilde{L} с частотой, соответствующей условиям в невозмущенной плазме. Их положение в пространстве, направление движения и величина скорости задаются случайным образом. Для каждого добавляемого электрона или иона расчетная ячейка со всеми находящимися там частицами представляется заряженным шаром, в поле которого происходит его движение. Если забыть на время о взаимодействии с нейтральным газом, то вопрос о том, попадет ли рожденная частица внутрь расчетной ячейки и, если да, то с какими параметрами, имеет простое решение, которое получается из законов сохранения момента импульса и энергии. Если обозначить скорость рожденной частицы v_0 , а угол между направлением вектора скорости и нормалью к поверхности сферы \tilde{L} как θ_0 (см. рис. 1), то условие попадания в расчетную ячейку имеет вид

$$\frac{\tilde{L}v_0}{Lv} \sin \theta_0 < 1. \quad (13)$$

В приведенном выше соотношении v обозначает скорость, с которой частица попадает в расчетную ячейку:

$$v = \sqrt{v_0^2 \pm \frac{2e[\varphi(\tilde{L}) - \varphi(L)]}{m}}. \quad (14)$$

Здесь знак «+» соответствует ионам, а знак «-» — электронам. Если подкоренное выражение оказывается отрицательным (это может иметь место для

электронов), это также означает, что частица не достигнет поверхности расчетной ячейки. Описанная выше проверка проводится для каждого нового электрона или иона, и он появляется в расчетной области только при выполнении условия (13).

Предлагаемый алгоритм корректировки позволяет учесть отклонение потоков от их равновесных величин, происходящее из-за того, что ячейка не является электронейтральной. Однако, помимо данного фактора, существуют также дополнительные потоки, связанные с влиянием взаимодействия заряженных частиц с нейтральным газом. Это относится прежде всего к ионам, которые, находясь в сфере \tilde{L} , могут испытать неупругое столкновение, что неминуемо приведет в конечном итоге к их попаданию в расчетную ячейку. Данная возможность учитывается бросанием дополнительного жребия для каждого иона. Вероятность столкновения можно оценить как

$$p \sim \frac{2\tilde{L}\nu_{i0} \cos \theta_0}{v_0}. \quad (15)$$

Испытавший столкновение ион попадает в ячейку с тепловой скоростью.

Вернемся теперь к системе уравнений (1) и перепишем ее в виде

$$\begin{aligned} n_e(t + \tau) &= n_e(t) + \\ &+ [Q - \beta n_i(t)n_e(t)]\tau - dN_e n_d, \\ n_i(t + \tau) &= n_i(t) + \\ &+ [Q - \beta n_i(t)n_e(t)]\tau - dN_i n_d, \\ Z_d(t + \tau) &= Z_d(t) + dN_i - dN_e. \end{aligned} \quad (16)$$

Здесь dN_i и dN_e — количества ионов и электронов, поглощенных макрочастицей на временном интервале τ . Таким образом, запуская процедуру расчета и проводя прямой подсчет числа частиц, поглощаемых поверхностью пылинки в единицу времени, мы можем в динамике проследить эволюцию системы к состоянию равновесия. Изменение усредненных концентраций ионов и электронов с течением времени, в свою очередь, приводит к изменению потоков заряженных частиц через внешнюю границу внутрь расчетной ячейки, так как величина этих потоков пропорциональна n_e и n_i . Учитывая данный фактор, мы получаем полностью замкнутое и самосогласованное решение поставленной задачи.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ

Используя описанный выше подход, мы провели численное моделирование динамики процессов в

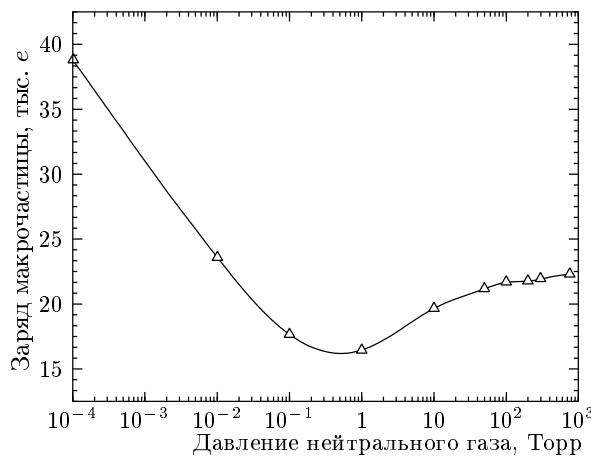


Рис. 2. Зависимость заряда макрочастиц от давления нейтрального газа: $Q = 10^{15} \text{ см}^{-3} \cdot \text{с}^{-1}$, $n_0 = 10^9 \text{ см}^{-3}$, $n_d = 10^3 \text{ см}^{-3}$, $T_e = 2.5 \text{ эВ}$, $T_i = 0.025 \text{ эВ}$, $a = 10 \text{ мкм}$

плазменно-пылевой системе при изменении давления нейтрального газа и концентрации пыли в объеме при постоянном значении параметра E/P .

Зависимость накапленного отдельной пылевой частицей заряда от давления нейтрального газа приведена на рис. 2. Параметры расчетов были следующими: $Q = 10^{15} \text{ см}^{-3} \cdot \text{с}^{-1}$; невозмущенные присутствием пыли концентрации ионов и электронов n_i , $n_e = 10^9 \text{ см}^{-3}$, $n_d = 10^3 \text{ см}^{-3}$, $T_e = 2.5 \text{ эВ}$, $T_i = 0.025 \text{ эВ}$. Радиус макрочастицы $a = 10 \text{ мкм}$, размер расчетной ячейки $L = 60 \text{ мкм}$. Давление менялось от 10^{-4} до 760 Торр. Из графика видно, что абсолютная величина заряда ведет себя немонотонно и резко уменьшается в 2 раза при изменении давления до приблизительно 1 Торр; далее наблюдается небольшой рост, после чего заряд достигает значения насыщения и практически не меняется при изменении давления вплоть до атмосферного.

Анализируя полученную зависимость, мы приходим к выводу, что резкое уменьшение абсолютной величины заряда при увеличении давления от 10^{-4} до 1 Торр объясняется тем, что в окрестности частицы растет число неупругих столкновений ионов с атомами нейтрального газа, в результате чего ионы оказываются в потенциальной яме и, продолжая терять энергию в последующих столкновениях, рано или поздно попадают на поверхность макрочастицы, увеличивая тем самым поток положительного заряда. Размер области, в которой ионы, испытав столкновение, оказываются в потенциальной ловушке, можно оценить, приравняв энергию взаимодействия с макрочастицей к их средней тепловой энергии. С по-

следующим ростом давления длина свободного пробега ионов уменьшится настолько, что, попадая в сферу взаимодействия, практически каждый ион испытает столкновение и будет захвачен пылевой частицей. Это означает, что сечение взаимодействия ионов с макрочастицей с некоторого момента перестает расти и определяется размером области взаимодействия. Таким образом, мы приходим к пониманию того факта, что в широком диапазоне давлений заряд макрочастицы остается практически неизменным. На рис. 2 это хорошо видно.

Используя полученный результат, оценим размер области взаимодействия ионов с макрочастицей. Для этой цели возьмем поток электронов, полученный в приближении ограниченных орбит, и приравняем его к газокинетическому потоку ионов на поверхность сферы, попадая в которую ион оказывается в ловушке. Заметим сразу, что использование приближения ограниченных орбит для электронов является оправданным, так как сечение их взаимодействия с атомами нейтрального газа мало и длина свободного пробега намного превышает размер области, в которой взаимодействие с макрочастицей оказывает заметное влияние на траектории движения. Запишем окончательное выражение:

$$2\sqrt{2}n_e v_{T_e} a^2 \exp\left(-\frac{e|\phi_0|}{T_e}\right) = 2\sqrt{2}n_i v_{T_i} \tilde{\lambda}^2. \quad (17)$$

Здесь v_{T_i} , v_{T_e} — тепловые скорости ионов и электронов, n_i , n_e — средние концентрации заряженных частиц, ϕ_0 — потенциал поверхности макрочастицы, a — радиус пылевой частицы, $\tilde{\lambda}$ — размер области взаимодействия. Выражая $\tilde{\lambda}$ из (17), получим оценку

$$\tilde{\lambda} = a \sqrt{\frac{1}{1+P} \sqrt{\frac{m_i T_e}{m_e T_i}}} \exp\left(-\frac{Z_d e^2}{2T_e a}\right). \quad (18)$$

Здесь $P = Z_d n_d / n_e$ — безразмерный параметр, характеризующий относительный аккумулированный на пылевых частицах заряд в условиях динамического равновесия. Подставляя в полученное выражение значения параметров, приведенные выше, а также $Z_d \approx 20000$, и учитывая, что при концентрациях пыли $n_d = 10^3 \text{ см}^{-3}$ значение $P \ll 1$, получим $\tilde{\lambda} \approx 165 \text{ мкм}$. Эта величина заметно превышает дебаевский радиус экранирования в плазме, который для тех же условий равен $\lambda_d \approx 40 \text{ мкм}$.

Параметры системы, для которых мы привели оценку $\tilde{\lambda}$, являются типичными для большинства экспериментов с плазменно-пылевыми кристаллами, и, как показывают результаты этих экспериментов [1–7], характерный размер постоянной решетки

в кристаллах имеет порядок 100–300 мкм. С точки зрения построения теории образования кристаллических структур в плазме данный факт приводит к большим сложностям, так как наблюдаемая постоянная решетки значительно превосходит предполагаемый радиус взаимодействия, оценкой для которого служит радиус Дебая. Эта нестыковка послужила причиной тому, что механизмы экранирования в пылевой плазме стали предметом особого внимания.

Величина $\tilde{\lambda}$, которую мы оценили, имеет важный физический смысл. Она представляет собой не что иное, как размер макроатома, ядром которого является пылевая частица, а роль электронного облака играет облако ионов, находящихся в потенциальной ловушке. Тогда на процесс образования пылевого кристалла можно взглянуть с несколько иной точки зрения, т. е. рассматривать в качестве строительного материала для кристаллической структуры именно упомянутые выше атомы. Данный подход отличается от традиционного. В обычном рассмотрении плазма считается лишь фактором, ответственным за экранировку потенциала взаимодействия макрочастиц. Получаемый при этом кристалл оказывается чисто кулоновским. В отличие от традиционного подхода рассматриваемый в настоящей работе вариант предполагает возможность существования кристаллов со свободной границей. Помимо того, можно утверждать, что взаимодействие ионов с атомами нейтрального газа, которое полностью игнорируется в традиционной модели, на самом деле может оказаться основным фактором при описании механизмов самоорганизации в плазменно-пылевой системе. Если вернуться к результатам экспериментов, можно заметить, что полученное нами значение $\tilde{\lambda}$ как раз соответствует наблюдаемым межчастичным расстояниям в пылевых кристаллах, и, хотя кристаллы со свободной границей пока еще не получены, плазменно-пылевые капли действительно наблюдались [16].

Продолжая обсуждение рис. 2, заметим, что изменение равновесного заряда макрочастиц с ростом давления нейтрального газа является немонотонным. Это можно объяснить тем, что при увеличении давления ионы в окрестности пылевой частицы начинают испытывать множественные столкновения, теряя при этом энергию, набранную в ускоряющем поле частицы. Это приводит к ослаблению потока положительного заряда на ее поверхность. С точки зрения описания системы мы имеем дело с необходимостью перехода к гидродинамическому приближению, в то время как при низких давлениях можно использовать приближение ограниченных ор-

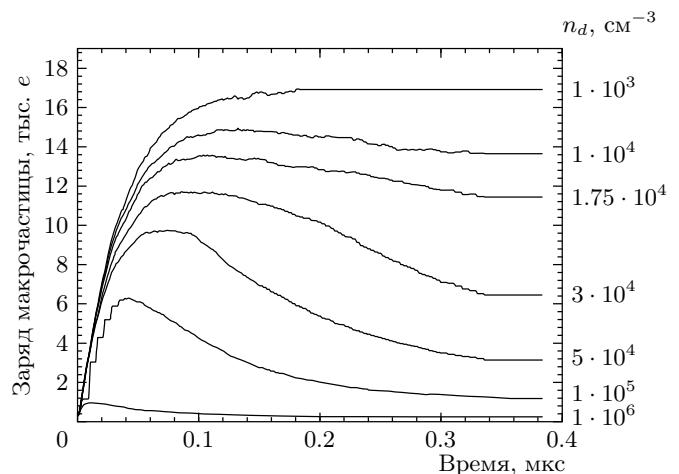


Рис. 3. Зависимость заряда макрочастиц от времени при различных концентрациях пыли. В начальный момент времени все частицы не заряжены: $Q = 10^{15} \text{ см}^{-3} \cdot \text{с}^{-1}$, $n_0 = 10^9 \text{ см}^{-3}$, $P = 1 \text{ Торр}$, $T_e = 2.5 \text{ эВ}$, $T_i = 0.025 \text{ эВ}$, $a = 10 \text{ мкм}$

бит. Однако резкое изменение заряда в начале кризиса показывает, что использование данного приближения даже при достаточно низком давлении может приводить к заметной ошибке, так как даже отдельные столкновения в окрестности макрочастицы приводят к захвату ионов и их падению на ее поверхность.

Перейдем теперь к анализу эволюции системы при различном содержании пыли в объеме. На рис. 3 изображено семейство кривых, представляющих динамику изменения заряда макрочастицы с течением времени при различных концентрациях пылевых частиц. Моделирование проводилось для тех же значений параметров, что и в предыдущем случае, но при фиксированной величине давления нейтрального газа $P = 1 \text{ Торр}$. Концентрация пыли менялась в пределах от 10^1 до 10^7 см^{-3} . На графике вдоль оси абсцисс отложено время, прошедшее с момента попадания незаряженных частиц пыли в объем, заполненный ионизированным газом. Значение давления для моделирования динамики системы было выбрано неслучайно, поскольку оно соответствует переходной области между приближением ограниченных орбит и гидродинамическим режимом. Численные расчеты для этого диапазона параметров представляют особый интерес, так как аналитические методы в данном случае оказываются наименее пригодными.

На рис. 3 видно, что развитие процессов, приводящее к установлению состояния динамического равновесия, протекает по-разному при различ-

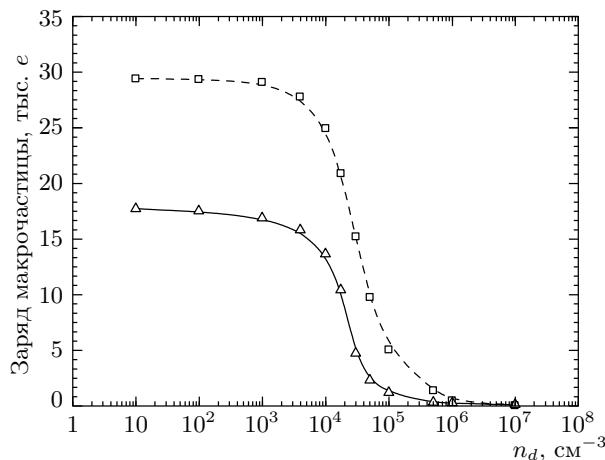


Рис. 4. Зависимость заряда макрочастиц в состоянии равновесия от концентрации пыли. Сплошная линия — результат моделирования, штриховая — результат расчета в приближении ограниченных орбит

ном количестве макрочастиц в объеме. При малых концентрациях пыли выход заряда на стационарное значение имеет вид обычного релаксационного процесса с характерным временем зарядки порядка 0.1 мкс. Однако с ростом концентрации макрочастиц вид кривой меняется. Сначала абсолютная величина заряда достигает некоторого максимума, а потом уменьшается до некоторого стационарного значения. Скорость выхода системы в стационарное состояние растет с увеличением концентрации пыли в объеме.

Изменение динамики зарядки можно объяснить, проанализировав развитие процессов в системе с точки зрения установления баланса между рождением и гибелю заряженных частиц в плазме. Поскольку электроны обладают большей подвижностью и энергиями по сравнению с ионами, скорость их рекомбинации на поверхности макрочастиц при достаточно больших концентрациях пыли значительно превышает скорость гибели ионов. Это приводит к тому, что равновесие между рождением и гибелю электронов в объеме наступает намного раньше, чем для ионов, а их поток на поверхность макрочастиц перестает меняться. Как следствие, появляется характерный максимум на графике зарядки, так как равновесие для ионов устанавливается медленнее и поток ионов на поверхность пылинки продолжает расти еще какое-то время.

На рис. 4 и 5 приведены зависимости величины заряда пылевых частиц Z_d , а также средних концентраций электронов и ионов в состоянии динами-

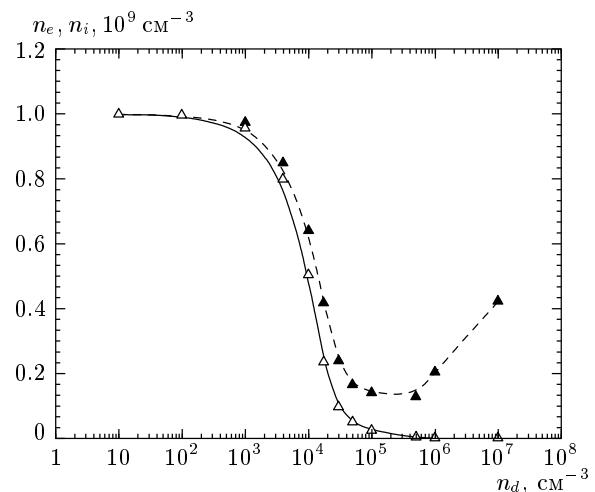


Рис. 5. Зависимость средних концентраций ионов (сплошная линия) и электронов (штриховая) в состоянии равновесия от концентрации пыли

ческого равновесия от концентрации макрочастиц в объеме. Концентрации ионов и электронов выражены в относительных единицах. За единицу принята равновесная концентрация при отсутствии пыли $n_{i0}, n_{e0} = 10^9 \text{ см}^{-3}$. Из графиков видно, что с ростом количества пыли заряд макрочастиц, а также установившиеся значения n_e и n_i изменяются практически синхронно. Это подтверждает мысль о том, что в реальных условиях состояния пылевой и плазменной подсистем являются сильно связанными. Влияние большого количества пыли в объеме на динамику системы проявляется, начиная с концентраций $n_d \sim 10^4 \text{ см}^{-3}$, при этом наблюдается резкое падение накопленного пылевыми частицами заряда, а также уменьшается степень ионизации. Подобное поведение системы ранее наблюдалось в экспериментах по исследованию динамики зарядки пылевых частиц [28].

В процессе моделирования соблюдение условия квазинейтральности, $n_e + Z_d n_d = n_i$, численной схемой специально не контролировалось, однако результаты вычислений показывают, что система сама приходит в состояние, в котором это условие почти точно выполняется. Некоторое отклонение от соблюдения условия в приведенной выше форме наблюдается лишь при очень высоких концентрациях пыли $n_d \sim 10^7 \text{ см}^{-3}$. Это является следствием того, что размер расчетной ячейки становится сравнимым со средними расстояниями между частицами пыли, и мы оказываемся практически у границы применимости предложенной схемы. Это связано со следу-

ющим соображением. Условие квазинейтральности и симметрия задачи предполагают, что пространство, заполненное макрочастицами можно разбить на электроннейтральные ячейки, в которых в стационарном состоянии поддерживается баланс между рождением и гибелю частиц плазмы. Объем такой ячейки можно оценить как $V \sim n_d^{-1}$. Поскольку все пространство заполнено такими ячейками, средний поток частиц плазмы через границу каждой ячейки можно считать нулевым. Приведенная оценка V может быть использована как оценка размеров расчетной ячейки, при которых оправдано применение периодических граничных условий в различных численных моделях. Использование радиуса Дебая для такой оценки может приводить к большим ошибкам, так как в случае пылевых частиц задача расчета экранирования выходит за рамки линейного приближения.

В нашей модели при малых концентрациях пыли размер ячейки, в которой должно соблюдаться условие квазинейтральности, намного превосходит размер самой расчетной области. Поэтому в таком режиме баланс рождения и гибели частиц регулируется потоками с внешней границы ячейки и стоком на поверхность макрочастицы. Однако при увеличении концентрации макрочастиц объем ячейки V становится сравнимым с размером расчетной области, и роль потоков с внешней границы ослабевает. При этом на первый план выступают процессы ионизации и рекомбинации в самой расчетной области. Таким образом, уравнения (1), описывающие баланс рождения и гибели частиц в системе в усредненном по объему виде, должны уступить место полностью статистическому описанию этих процессов. В нашей модели второй режим реализован путем генерации соответствующих событий с учетом их вероятности. В последнем случае соотношение квазинейтральности соблюдается для самой расчетной области, однако при этом возможны заметные флуктуации заряда, что мы реально и наблюдали.

Вернемся к анализу изменения концентраций носителей с ростом количества пыли в объеме. На рис. 5 видно, что, начиная со значения $n_d \sim 10^5 \text{ см}^{-3}$, содержание положительных ионов растет. Это происходит потому, что в данных условиях пыль является основным механизмом рекомбинации для частиц плазмы, но в связи с уменьшением абсолютной величины отрицательного заряда, накопленного макрочастицами, сечение рекомбинации ионов на макрочастицах заметно уменьшается. В целом же концентрация электронов уменьшается настолько, что система переходит в

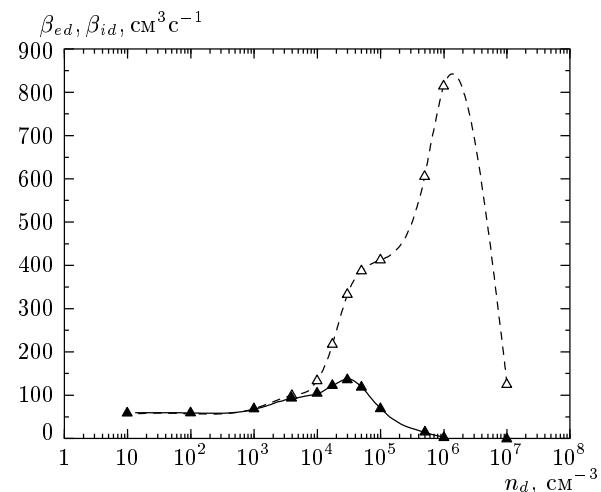


Рис. 6. Зависимость констант скорости рекомбинации ионов (сплошная линия) и электронов (штриховая) на поверхности макрочастицы, β_{ed} , β_{id} , от концентрации пыли

состояние чисто ионной двухкомпонентной плазмы. Роль легкой компоненты играют положительно заряженные ионы газа, а тяжелую представляют отрицательно заряженные макрочастицы. Данное соображение может оказаться полезным при построении кинетического описания системы в случае высокого содержания пыли в объеме.

На рис. 6 изображены зависимости констант скорости рекомбинации ионов и электронов на макрочастицах в условиях динамического равновесия от концентрации пыли. Для расчета β_{ed} и β_{id} использовались уравнения (1) с нулевой левой частью и значениями n_e и n_i , полученными в результате моделирования. Тогда для β_{ed} и β_{id} можно записать:

$$\begin{aligned}\beta_{ed} &= \frac{Q - \beta n_i n_e}{n_d n_e}, \\ \beta_{id} &= \frac{Q - \beta n_i n_e}{n_d n_i}.\end{aligned}\quad (19)$$

В целом зависимость оказывается довольно немонотонной. Это говорит о том, что существуют различные режимы эволюции системы к состоянию равновесия, устанавливающиеся в зависимости от относительной роли различных факторов. При малом содержании пыли в объеме равновесие между рождением и гибелю ионов и электронов поддерживается за счет электрон-ионной рекомбинации. Это приводит к тому, что концентрации носителей практически одинаковы, а значит, константы скорости рекомбинации на пылевых частицах также равны друг другу. Данный вывод следует из условия ра-

венства потоков ионов и электронов на поверхность макрочастиц. Увеличение роли рекомбинации на пылевых частицах становится заметным, начиная с концентраций $n_d \sim 10^4 \text{ см}^{-3}$. Это выражается в том, что графики на рис. 5 расходятся.

С точки зрения динамики зарядки макрочастиц возможна конкуренция двух процессов, задающих путь системы к состоянию равновесия и имеющих разные характерные времена релаксации. Первый соответствует установлению равенства потоков ионов и электронов на поверхность макрочастицы, второй приводит к достижению баланса рождения и гибели частиц плазмы. Ситуация, когда равновесие потоков на поверхность макрочастицы устанавливается заметно позже, чем баланс между скоростями рождения и гибели, реализуется при концентрациях пыли $n_d \gtrsim 10^5 \text{ см}^{-3}$. В данных условиях абсолютная величина заряда пылевых частиц уменьшается, приводя к быстрому увеличению константы скорости гибели электронов на макрочастицах и к уменьшению аналогичной константы для ионов. При дальнейшем увеличении количества пыли константа скорости гибели электронов проходит через максимум и также начинает уменьшаться. Это связано с тем, что существующий источник ионизации не в состоянии дольше поддерживать растущую скорость ухода электронов из объема. Таким образом, поток электронов на поверхность отдельных макрочастиц уменьшается.

Анализируя приведенные графики, можно заметить, что константы скорости рекомбинации на макрочастицах не являются постоянными величинами, зависящими только от особенностей взаимодействия макрочастиц и частиц плазмы, а определяются состоянием системы в целом, которое задается набором внешних факторов, таких как скорость ионизации или концентрация макрочастиц в объеме плазмы. Этот результат является следствием открытости системы. Следует также отметить, что по своей величине константы скорости рекомбинации на пылевых частицах на много порядков превосходят константу скорости электрон-ионной рекомбинации. В наших модельных расчетах значение этой константы было принято равным $\beta = 10^{-3} \text{ см}^3 \cdot \text{с}^{-1}$, что, вообще говоря, продиктовано вычислительными соображениями, так как число частиц, участвующих в моделировании, не может быть сделано чрезмерно большим. Для реальных условий в гелии константа скорости электрон-ионной рекомбинации имеет порядок $\beta = 10^{-8} \text{--} 10^{-9} \text{ см}^3 \cdot \text{с}^{-1}$. Рассмотрим, как это отразится на параметрах системы в состоянии динамического равновесия. Для этой цели решим систему уравнений (1) в стационарном случае относитель-

но n_e и n_i и запишем асимптотическое поведение концентраций при малых значениях n_d :

$$\begin{aligned} n_e &\approx n_0 - \frac{\beta_{ed}}{\beta} n_d, \\ n_i &\approx n_0 - \frac{\beta_{id}}{\beta} n_d. \end{aligned} \quad (20)$$

При $\beta \sim 10^{-8} \text{ см}^3 \cdot \text{с}^{-1}$ и $\beta_{id} \approx \beta_{ed} \sim 10^2 \text{ см}^3 \cdot \text{с}^{-1}$ отношение $\beta_{ed}/\beta \sim 10^{10}$. Равновесные концентрации заряженных частиц при тех же условиях будут равны $n_0 \approx 10^{11} \text{ см}^{-3}$. Полученные нами оценки говорят о том, что уже минимальное содержание пыли в объеме около 10^2 см^{-3} должно приводить к резкому падению концентраций заряженных частиц, а роль объемной рекомбинации в процессе установления динамического равновесия должна стать малой на фоне процессов гибели на поверхности макрочастиц.

Однако полученный нами вывод находится в резком противоречии с результатами ряда экспериментов. Зависимость величины тока несамостоятельно разряда в гелии от концентрации пыли, приведенная в [19], показывает, что заметное уменьшение количества носителей наступает лишь при концентрациях пыли порядка 10^4 см^{-3} . Это говорит о том, что электрон-ионная рекомбинация, рассмотренная в нашей модели в качестве основного фактора, ответственного за баланс рождения и гибели заряженных частиц, является далеко не единственным вариантом, и на практике могут быть реализованы и другие возможности. В частности, в уравнения баланса следует добавить диффузионные и дрейфовые потоки заряженных частиц. Задача при этом перестанет быть пространственно однородной, и для проведения расчетов потребуется учитывать особенности геометрии конкретного эксперимента.

Подводя итог обсуждению характеристик системы в состоянии равновесия, сравним полученные нами результаты с результатами аналогичных расчетов, проведенных в рамках приближения ограниченных орбит. Это может представлять интерес, поскольку последнее приближение активно используется в различных приложениях. На рис. 4 зависимость заряда макрочастиц, полученная в приближении ограниченных орбит изображена штриховой линией. Из графиков видно, что при давлении нейтрального газа 1 Торр рассчитанные значения зарядов различаются почти в два раза. Это еще раз доказывает, что взаимодействие частиц плазмы с атомами нейтрального газа является существенным фактором, влияющим на динамику системы, и при по-

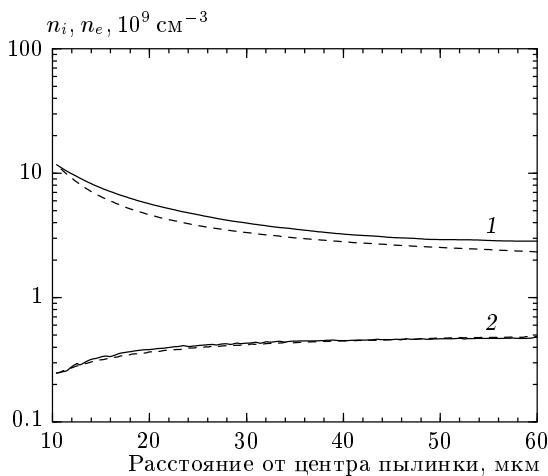


Рис. 7. Зависимость концентраций ионов (1) и электронов (2) в окрестности пылевой частицы от расстояния до ее центра; $n_d = 10^4 \text{ см}^{-3}$, $P = 1 \text{ Торр}$. Сплошные линии соответствуют распределению плотностей, полученных в результате численного эксперимента, штриховые — равновесному распределению концентраций

строении моделей его нельзя исключать из рассмотрения.

Рассмотрим теперь процессы в непосредственной окрестности макрочастицы. На рис. 7 представлены усредненные по времени распределения концентраций ионов и электронов в зависимости от расстояния до центра отдельно взятой пылинки. Давление нейтрального газа $P = 1 \text{ Торр}$, концентрация пыли в объеме $n_d = 10^4 \text{ см}^{-3}$. На том же графике для сравнения изображены зависимости плотностей заряженных частиц от расстояния, заданные Больцмановским распределением. Из рисунка видно, что кривые, полученные статистическим путем, и кривые, рассчитанные теоретически, находятся в довольно хорошем согласии. Однако, для того чтобы ионные кривые до некоторой степени совпали, нам пришлось взять в качестве параметра распределения не равновесную температуру $T_i = 0.025 \text{ эВ}$, а среднюю кинетическую энергию ионов непосредственно у поверхности макрочастицы $\bar{\epsilon}_i = 1.0 \text{ эВ}$. Это означает, что разогрев ионов в поле макрочастицы играет важную роль при описании динамики системы и использование для этой цели параметров невозмущенной присутствием пыли плазмы оказывается неоправданным. Для электронов хорошее согласие теоретической кривой с данными численного эксперимента было получено при использовании значения их равновесной температуры $T_e = 2.5 \text{ эВ}$.

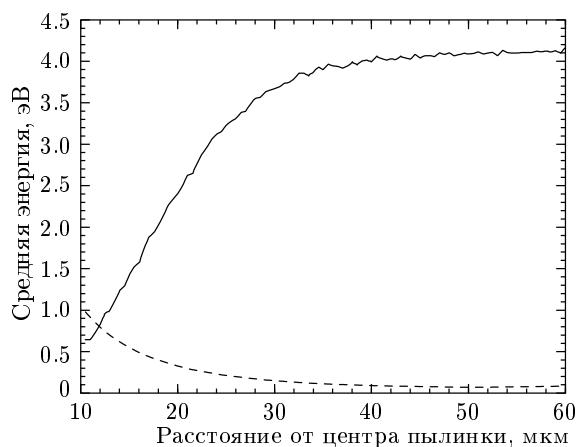


Рис. 8. Зависимость средних кинетических энергий электронов (сплошная линия) и ионов (штриховая) в окрестности пылевой частицы от расстояния до ее центра: $n_d = 10^4 \text{ см}^{-3}$, $P = 1 \text{ Торр}$

Нужно также отметить еще одну особенность распределения концентраций заряженных частиц. Сравнение рис. 7 и рис. 5 показывает, что значение концентрации электронов на границе расчетной области практически совпадает с соответствующим среднеобъемным значением, представленным на рис. 5, в то время как концентрация ионов примерно в 1.7 раза превышает свое значение в невозмущенной полем макрочастицы области. Это не случайно и связано с тем, что расстояние от центра макрочастицы, за пределами которого плазму можно считать невозмущенной, значительно превышает размеры расчетной ячейки. В этой связи наблюдаемое отклонение концентраций ионов может служить дополнительным подтверждением необходимости введения в численную схему процедуры коррекции потоков заряженных частиц со стороны внешней границы расчетной области, а также иллюстрирует эффективность ее работы.

На рис. 8 изображены распределения средних кинетических энергий ионов и электронов при тех же условиях. Эти данные так же, как и распределения концентраций были накоплены статистически за некоторый период времени, в течение которого система уже находилась в состоянии динамического равновесия. При этом в каждой выборке вычислялись средние арифметические значения кинетической энергии частиц, оказавшихся на одинаковом удалении от центра расчетной ячейки. На рисунке хорошо видно, что по мере приближения к поверхности макрочастицы энергия ионов растет, в то время как энергия электронов уменьшается. На-

ми также были получены значения энергий ионов и электронов, поглощаемых на поверхности макрочастиц. При тех же параметрах системы они равны $\bar{\varepsilon}_{ed} = 5.12$ эВ, $\bar{\varepsilon}_{id} = 1.05$ эВ. Мы видим, что для электронов значение $\bar{\varepsilon}_{ed}$ оказывается в несколько раз больше значения усредненной кинетической энергии непосредственно у поверхности макрочастицы. Это означает, что наличие поглощения на поверхности макрочастиц оказывает огромное влияние на функцию распределения по энергиям тех частиц, которые остались в объеме. В целом происходит заметное охлаждение энергетического спектра электронов по сравнению с невозмущенным присутствием пыли случаем. Так как с ростом количества пыли в объеме накопленный ею отрицательный заряд уменьшается, потенциальный барьер может быть преодолен электронами с меньшими энергиями. Это означает, что эффект охлаждения функции распределения электронов при увеличении количества пыли в объеме должен проявляться с большей силой. Данный эффект действительно имел место в проведенных расчетах и выражался в том, что граница области заметного отличия усредненной кинетической энергии электронов от ее невозмущенного значения при увеличении n_d постепенно удалялась от поверхности макрочастицы. Таким образом, учет данного фактора является совершенно необходимым при описании кинетики плазмы и процессов переноса в присутствии пылевых частиц даже при сравнительно небольших концентрациях пыли.

В целом, анализ полученных данных говорит о том, что динамическое равновесие в системе осуществляется путем достижения сложного баланса между различными процессами, а пути, по которым система приходит к равновесию, могут сильно различаться в зависимости от комбинации внешних факторов. Самосогласованный подход, развитый в настоящей работе, оказывается подходящим инструментом для решения подобных задач. Однако для более полного и адекватного описания процессов он нуждается в дальнейшем усовершенствовании. В частности, становится очевидной необходимость включить в ряд принимаемых во внимание динамических процессов эволюцию функций распределения частиц плазмы по энергиям. Это в свою очередь может повлечь изменение сечений взаимодействия и скоростей реакций в многокомпонентной плазме. Таким образом, дальнейшие исследования в этой области представляют глубокий интерес, и мы планируем и далее развивать это направление.

Работа выполнена при частичной поддержке РФФИ (гранты 01-02-17726, 00-15-96554), а также NATO SFP 974354.

ЛИТЕРАТУРА

1. J. H. Chu, J. B. Du, and I. Lin, *J. Phys. D* **27**, 296 (1994).
2. J. H. Chu and I. Lin, *Phys. Rev. Lett.* **72**, 4009 (1994).
3. H. Thomas, G. E. Morfill, V. Demmel et al., *Phys. Rev. Lett.* **73**, 652 (1994).
4. A. Melzer, T. Trittenberg, and A. Piel, *Phys. Lett. A* **191**, 301 (1994).
5. J. B. Pieper, J. Goree, and R. A. Quinn, *J. Vac. Sci. Technol. A* **14**(2), 519 (1996).
6. А. П. Нефедов, О. Ф. Петров, В. Е. Фортов, УФН **167**, 1215 (1997).
7. M. Zuzic, A. V. Ivlev, J. Goree et al., *Phys. Rev. Lett.* **85**, 4064 (2000).
8. H. H. Hwang and M. J. Kushner, *J. Appl. Phys.* **82**, 2106 (1997).
9. G. Praburam and J. Goree, *Astrophys. J.* **441**, 830 (1995).
10. D. Samsonov and J. Goree, *J. Vac. Sci. Technol. A* **17**, 2835 (1999).
11. D. Samsonov and J. Goree, *Phys. Rev. E* **59**, 1047 (1999).
12. G. E. Morfill, H. M. Thomas, U. Konopka et al., *Phys. Rev. Lett.* **83**, 1598 (1999).
13. J. Goree, G. E. Morfill, V. N. Tsytovich, and S. V. Vladimirov, *Phys. Rev. E* **59**, 7055 (1999).
14. О. С. Ваулина, А. П. Нефедов, О. Ф. Петров, В. Е. Фортов, ЖЭТФ **118**, 1325 (2000).
15. J. Goree, *Plasma Sources Sci. Technol.* **3**, 400 (1994).
16. В. Н. Цытович, УФН **167**, 57 (1997).
17. Ю. А. Манкелевич, М. А. Олеванов, Т. В. Рахимова, ЖЭТФ **121**, 1288 (2002).
18. V. A. Schweigert, I. V. Schweigert, A. Melzer et al., *Phys. Rev. Lett.* **80**, 5345 (1998).
19. В. В. Иванов, А. Ф. Паль, Т. В. Рахимова и др., ЖЭТФ **115**, 2020 (1999).

20. А. Ф. Паль, А. О. Серов, А. Н. Старостин и др., ЖЭТФ **119**, 272 (2001).
21. Я. К. Ходатаев, Р. Бингхем, В. П. Тараканов и др., Физика плазмы **22**, 1028 (1996).
22. А. В. Зобнин, А. П. Нефедов, В. А. Синельщиков, В. Е. Фортов, ЖЭТФ **118**, 554 (2000).
23. S. A. Maiorov, S. V. Vladimirov, and N. F. Cramer, Phys. Rev. E **63**, 017401 (2000).
24. S. A. Maiorov, S. V. Vladimirov, and N. F. Cramer, Phys. Rev. E **63**, 045401(R) (2001).
25. T. J. Sommer, M. S. Barnes, J. H. Keller et al., Appl. Phys. Lett. **59**, 638 (1991).
26. Д. В. Хеерман, *Методы компьютерного эксперимента в теоретической физике*, Наука, Москва (1990).
27. Ю. П. Райзер, *Физика газового разряда*, Наука, Москва (1987).
28. A. Barkan, N. D'Angelo, and R. I. Merlin, Phys. Rev. Lett. **73**, 3093 (1994).