

АНАЛИЗ ПАРНОЙ КОРРЕЛЯЦИИ МАКРОЧАСТИЦ В ПЫЛЕВОЙ ПЛАЗМЕ: ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И ЭКСПЕРИМЕНТ

О. С. Ваулина, О. Ф. Петров, В. Е. Фортос*

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

Поступила в редакцию 29 августа 2003 г.

Выполнен анализ парной корреляции в системах макрочастиц, взаимодействующих с различными типами изотропных потенциалов. Показано, что при определенных условиях поведение парной корреляционной функции исследуемых систем определяется эффективным параметром неидеальности, а ее затухание с расстоянием имеет степенную асимптотику. С уменьшением параметра неидеальности ниже некоторого критического значения скорость ослабления парной корреляции макрочастиц резко возрастает. Приведены результаты экспериментального исследования формы парной корреляционной функции для жидкостных пылевых структур, формирующихся в приэлектродном слое высокочастотного емкостного разряда. Анализ численных и экспериментальных результатов показывает, что динамика плавления анализируемых систем имеет характер, близкий к топологическому фазовому переходу.

PACS: 52.27.Gr, 52.27.Lw, 82.70.Dd

1. ВВЕДЕНИЕ

Лабораторная пылевая плазма представляет собой частично ионизованный газ, содержащий заряженные пылевые частицы микронных размеров. Микронные пылевые частицы в плазме могут приобретать значительный отрицательный или положительный заряд (порядка 10^3 – $10^5 e$) и формировать квазистационарные плазменно-пылевые структуры, подобные жидкости или твердому телу [1–5]. Такие плазменно-пылевые структуры являются незаменимым инструментом и при изучении свойств сильно неидеальной плазмы, и с точки зрения более глубокого понимания явлений самоорганизации вещества в природе. Исследования свойств неидеальной пылевой плазмы могут сыграть существенную роль в развитии новых феноменологических моделей для жидкостных систем. Особое значение таких исследований определяется тем, что в теории жидкости (благодаря сильному межчастичному взаимодействию) отсутствует малый параметр, который можно было бы использовать для аналитического описания ее состояния и термодинамических характеристик, как это возможно в случае газов [6–10].

Равновесные свойства жидкости полностью описываются набором функций плотности вероятности $g_s(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_s)$ нахождения частиц в точках $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_s$. В случае изотропного парного взаимодействия физические свойства жидкости (такие как давление, плотность энергии, сжимаемость) определяются бинарной корреляционной функцией $g(r) = g_2(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|)$ [6–9]. Парная корреляционная функция может быть представлена в виде [10]

$$g(r) = \exp(-[U(r)/T] + N(r) + B(r)), \quad (1)$$

где $U(r)$ — потенциальная энергия парного взаимодействия, T — кинетическая энергия хаотического (теплового) движения частиц, $N(r)$ — определяется функциями $g_1(\mathbf{r}_1)$ и $g(r)$, а $B(r)$ учитывает влияние корреляции более высоких порядков и является сложной интегральной функцией от $g_s(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_s)$ при $s > 2$. В наиболее распространенном гиперцепном приближении полагают $B(r) = 0$, а для определения $N(r)$ используют соотношение Орнштейна–Цернике [9, 10]. Однако существующие численные исследования показывают неудовлетворительность гиперцепного приближения даже в случае слабой неидеальности исследуемых систем [9–13]. Только учет корреляции более высоких порядков (вычисление функции $B(r) \neq 0$) дает результаты, совпада-

*E-mail: industpl@redline.ru

ющие с данными численного моделирования [10]. Таким образом, определение вида $g(r)$ в общем случае требует информации не только о типе потенциала парного взаимодействия, но и о поведении корреляционных функций $g_s(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_s)$ при $s > 2$ или использования каких-либо аппроксимаций для этих функций.

В отличие от реальных жидкостей и газов лабораторная пылевая плазма является хорошей экспериментальной моделью для изучения физических свойств неидеальных систем, поскольку благодаря своему размеру пылевые частицы могут быть сняты видеокамерой, что значительно упрощает применение прямых бесконтактных методов для их диагностики. Принято считать, что пылевые частицы в плазме взаимодействуют друг с другом посредством экранированного кулоновского потенциала (типа потенциала Юкавы)

$$\varphi = \varphi_c \exp(-r/\lambda), \quad (2)$$

где r — расстояние, λ — радиус экранирования, $\varphi_c = eZ_p/r$ — кулоновский потенциал, а Z_p — заряд макрочастиц. Данное предположение хорошо согласуется как с результатами измерений сил взаимодействия между двумя пылевыми частицами [14], так и с численными расчетами структуры экранирующего облака [15] только на небольших расстояниях от частицы $r < 5\lambda$. С ростом r экранировка ослабевает, а асимптотическое поведение потенциала φ при $r \gg \lambda_D$ определяется степенной функцией [16]

$$\varphi \approx eZ_p a_p / r^2.$$

Упомянутые исследования [14–16] относятся к случаю уединенных пылевых частиц в плазме. В настоящий момент окончательно неясно, как влияют на форму потенциала межчастичного взаимодействия наличие других частиц в плотном пылевом облаке и процессы ионизации газа, которые могут происходить как в самом пылевом облаке, так и за его пределами, столкновения электронов (ионов) с нейтралами окружающего газа и множество других факторов. Таким образом, реальные потенциалы взаимодействия между пылевыми частицами в плазме неизвестны, как и для многих других физических задач, требующих учета сил межчастичного взаимодействия.

Определение параметров, отвечающих за состояние системы взаимодействующих частиц, является важной задачей как для физики неидеальной пылевой плазмы, так и для других областей естественных наук. Так, например, в работах [17, 18] были най-

дены два безразмерных параметра, которые отвечают за процессы массопереноса и фазовое состояние в диссипативных системах Юкавы (при $\kappa = r_p/\lambda < 6$). Это эффективный параметр неидеальности

$$\Gamma^* = \Gamma \{ (1 + \kappa + \kappa^2/2) \exp(-\kappa) \}^{1/2}$$

и параметр масштабирования

$$\xi = \nu_{fr}^{-1} e Z_p \{ (1 + \kappa + \kappa^2/2) \exp(-\kappa) n_p / \pi m_p \}^{1/2},$$

здесь n_p — концентрация частиц, $\Gamma = (Z_p e)^2 / T r_p$ — кулоновский параметр неидеальности, ν_{fr} — коэффициент трения пылевых частиц, а $r_p = n_p^{-1/3}$ — среднее межчастичное расстояние. Проверка соответствия данной численной модели условиям лабораторных экспериментов в пылевой плазме газовых разрядов различных типов была выполнена в работах [19–21]. Экспериментальные исследования показали, что динамика пылевых частиц в анализируемой плазме может быть описана двумя основными параметрами Γ^* и ξ , однако определение параметров потенциала межчастичного взаимодействия возможно лишь при наличии дополнительной информации о его форме.

Поведение парной корреляционной функции отражает фазовое состояние системы. Так, например, в жидкостных неидеальных системах появляется ближний порядок в расположении частиц, а для кристаллических решеток функция $g(r)$ имеет дальний порядок. Численное моделирование показывает, что для систем Юкавы ($\kappa < 6$) эффективный параметр Γ^* полностью определяет форму бинарной корреляционной функции $g(r)$ (и, соответственно, возникновение дальнего и ближнего порядков) от $\Gamma^* < 1$ до точки ее кристаллизации, где при $\Gamma^* \rightarrow 106$ формируется объемноцентрированная кубическая (ОЦК) кристаллическая структура. Таким образом, было отмечено, что пространственная корреляция макрочастиц в трехмерных системах Юкавы при $\kappa < 6$ зависит только от отношения второй производной φ'' парного потенциала $\varphi(r)$ в точке среднего межчастичного расстояния r_p к температуре частиц T . При этом как процесс кристаллизации–плавления ($\Gamma^* \approx 102$ – 106), так и формирование регулярных кластеров макрочастиц ($\Gamma^* \approx 22$ – 25) происходят при определенных значениях эффективных параметров Γ^* , близких к некоторым фиксированным величинам [17, 18]. Логично предположить, что при определенных условиях данное свойство выполняется для более широкого круга потенциалов, описывающих парные взаимодействия в системах

частиц. Для проверки данного предположения в настоящей работе был проведен анализ парных корреляционных функций и условий фазовых переходов в системах с различными типами радиальных отталкивающих потенциалов.

В некоторых физических системах наблюдаются топологические фазовые переходы между низкотемпературной и высокотемпературной фазами [22–30]. Топологический фазовый переход в большей степени характерен для систем низкой пространственной размерности. Такой переход имеет характер своеобразного «плавления» при котором в низкотемпературной фазе существуют позиционная жесткость, исчезающая при температурах $T > T_m$, при которых продолжает существовать ориентационная жесткость, которая также разрушается с дальнейшим ростом температуры $T > T_0 > T_m$. Физические особенности такого фазового перехода связаны с образованием топологических дефектов кристаллической решетки (дислокаций и дисклинаций) и в двумерных системах описываются теорией, которая основана на предположении, что таяние твердого тела происходит путем перехода кристалла в изотропную жидкость через промежуточную гексатическую жидкую фазу [22]. Данная теория хорошо подтверждается как экспериментальными исследованиями квазидвумерных неидеальных систем, так и последними численными расчетами протяженных двумерных систем частиц, взаимодействующих с различными типами парных потенциалов [23–30]. Наличие топологического сценария плавления в реальных физических системах, представляющих собой единственный слой макрочастиц, часто проявляется в формировании топологических возбуждений (вихрей и «антивихрей»), свойственных ограниченными двумерными системам [22]. Экспериментальное изучение топологических переходов затрудняется тем фактом, что в реальных физических системах различные, достаточно малые возмущения придают им квазидвумерный характер и иногда маскируют характерные качественные изменения [23–26]. Тем не менее наличие ближнего ориентационного порядка наблюдается не только в экспериментальных плазменно-пылевых системах, представляющих собой несколько пылевых слоев (от 4 до 10), но и в моделируемых трехмерных жидкостных структурах. Анализ трехчастичной корреляции макрочастиц, взаимодействующих с экранированным потенциалом (2), показывает, что с ростом эффективного параметра неидеальности (при $\Gamma^* > 25$) в моделируемых системах наблюдается формирование регулярных кластеров [31]. Данный результат хоро-

шо согласуется с данными численного эксперимента [17]. Причиной наблюдаемых качественных изменений могут быть топологические дефекты трехмерной решетки, а сам переход может быть обусловлен существованием двух различных фаз жидкости, аналогично топологическому фазовому переходу в двумерных системах.

Для анализа ориентационного порядка обычно используют автокорреляционные погранично-угловые функции $g_6(t)$ и статические пространственные корреляционные функции $(g_6(r), g(r))$ [23–30]. Универсальность поведения корреляционных функций для топологических фазовых переходов в двумерных системах была установлена Костерлицем и Таулессом [22], которые нашли, что в высокотемпературной фазе их зависимость от расстояния r имеет вид экспоненциального затухания, а в низкотемпературной — степенного. Таким образом, наличие двух фаз жидкости должно проявляться в различном ослаблении корреляции с ростом межчастичного расстояния. В настоящей работе приведены результаты численного исследования пространственной асимптотики парной корреляции взаимодействующих макрочастиц в широком диапазоне параметров неидеальности, а также представлен анализ экспериментальных бинарных корреляционных функций для жидкостных пылевых структур, формирующихся в приэлектродном слое высокочастотного емкостного разряда.

2. ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

2.1. Параметры численной задачи

Корректное моделирование транспорта макрочастиц в пылевой плазме требует применения метода молекулярной динамики, основанного на решении системы обыкновенных дифференциальных уравнений с силой Ланжевена F_{br} . Данная сила учитывает случайные толчки окружающих молекул газа или другие случайные процессы, приводящие к установлению равновесной (стационарной) кинетической температуры T пылевых частиц, характеризующей энергию их стохастического (теплового) движения [32–34]. Для моделирования микроскопических процессов в однородных протяженных облаках взаимодействующих макрочастиц используют периодические граничные условия и наряду со случайными силами F_{br} , которые являются источником теплового движения частиц, учитывают силы парного межчастичного взаимодействия F_{int} [17–21]:

$$m_p \frac{d^2 \mathbf{l}_k}{dt^2} = \sum_j F_{int}(l) \Big|_{l=|\mathbf{l}_k - \mathbf{l}_j|} \frac{\mathbf{l}_k - \mathbf{l}_j}{|\mathbf{l}_k - \mathbf{l}_j|} - m_p v_{fr} \frac{d\mathbf{l}_k}{dt} + \mathbf{F}_{br}, \quad (3)$$

$$F_{int}(l) = -eZ_p \frac{\partial \varphi}{\partial l},$$

где $\mathbf{l} = |\mathbf{l}_k - \mathbf{l}_j|$ — межчастичное расстояние, m_p — масса частицы, v_{fr} — коэффициент трения пылевых частиц, характеризующий их столкновения с нейтралами окружающего газа [35, 36], φ — потенциал, определяющий энергию межчастичного взаимодействия ($U(r) \sim eZ_p \varphi(r)$). Расчеты были выполнены для потенциала Юкавы с $\kappa = 2.4$ и 4.8 . Выбор величины λ определялся условием корректного моделирования динамики таких систем — размер счетной ячейки $R \gg \lambda$ [37]. В наших расчетах $R \approx 5n_p^{-1/3} > (12-24)\lambda$. Дополнительные вычисления были проведены для различных комбинаций степенных и экспоненциальных функций, часто используемых для моделирования отталкивания в кинетике взаимодействующих частиц [34, 38, 39]:

$$\varphi = \varphi_c b (r_p/r)^n, \quad (4)$$

$$\varphi = \varphi_c \{a \exp(-\kappa_1 r/r_p) + b \exp(-\kappa_2 r/r_p)\}, \quad (5)$$

$$\varphi = \varphi_c \{a \exp(-\kappa_1 r/r_p) + b (r_p/r)^n\}. \quad (6)$$

Здесь a , b , κ_1 , κ_2 и n — некоторые параметры. Для физики пылевой плазмы кроме потенциала (2) особый интерес представляют две последние модели (5) и (6) (последняя при $n = 1$), которые позволяют учесть эффект ослабления экранирования с увеличением расстояния между макрочастицами [14–16]. Данные модели также применяются для учета отталкивания атомов в ковалентных металлах [38, 39] или в физике полимеров [34, 38].

Для анализа парной корреляции в системах частиц, взаимодействующих с различными типами изотропных отталкивающих потенциалов (4)–(6), трехмерные уравнения движения (3) решались для различных эффективных параметров, введенных по аналогии с параметрами, полученными для систем Юкавы, а именно, для эффективных параметров неидеальности

$$\Gamma^* = (Z_p^* e)^2 / T r_p, \quad (7)$$

и параметра масштабирования

$$\xi = \omega^* / v_{fr}, \quad (8)$$

где характерная частота столкновений между макрочастицами задавалась соотношением

$$\omega^* = eZ_p^* (n_p / \pi m_p)^{1/2}, \quad (9)$$

а эффективный заряд частиц Z_p^* определялся как

$$Z_p^* e = \{Z_p e \varphi'' / 2n_p\}^{1/2}. \quad (10)$$

Отметим, что эффективный заряд частиц не имеет особого физического смысла, а использование обозначения (10) позволяет сохранять введенные параметры Γ^* , ξ и ω^* в неизменном виде для всех типов анализируемых потенциалов взаимодействия.

Расчеты проводились для 125 независимых частиц в центральной счетной ячейке, при этом полное число частиц, учитывающихся при расчете парного взаимодействия, достигало приблизительно 3000. Потенциал межчастичного взаимодействия обрезался на расстояниях $L_{cut} = 4l_p$. Для проверки независимости результатов расчета от числа частиц и длины обрезания потенциала были выполнены дополнительные тестовые расчеты для 512 актуальных частиц при $L_{cut} = 7l_p$ в системах с $\Gamma^* = 1.5, 17.5, 25, 49$ и 92 . Подробное описание процедуры численного эксперимента дано в работах [18, 21]. Величина параметра масштабирования ξ варьировалась в пределах приблизительно от 0.04 до 3.6, типичных для условий экспериментов в плазме газовых разрядов. Величина эффективного параметра Γ^* менялась в пределах от 1 до 110.

Численные расчеты показали, что эффективный параметр Γ^* полностью отвечает за процессы формирования порядка в анализируемых системах макрочастиц и их фазовое состояние в моделируемых системах, если выполняется эмпирическое условие дальнего действия:

$$2\pi |\varphi'(r_p)| > |\varphi''(r_p)| r_p, \quad (11)$$

которое в первом (линейном) приближении определяет условия, при которых сила парного межчастичного взаимодействия на среднем межчастичном расстоянии больше характерной силы, возникающей при столкновениях макрочастиц.

2.2. Формирование упорядоченных структур в диссипативных системах макрочастиц, взаимодействующих с различными типами изотропных отталкивающих потенциалов

Для анализа формирования порядка в моделируемых системах использовались парная корреляционная функция $g(r)$ и структурный фактор $S(q)$. Парные корреляционные функции для систем Юкавы в широком диапазоне параметров Γ^* представлены на рис. 1а, б. Иллюстрация сравнения данных функций с функциями $g(r)$, рассчитанными для разных

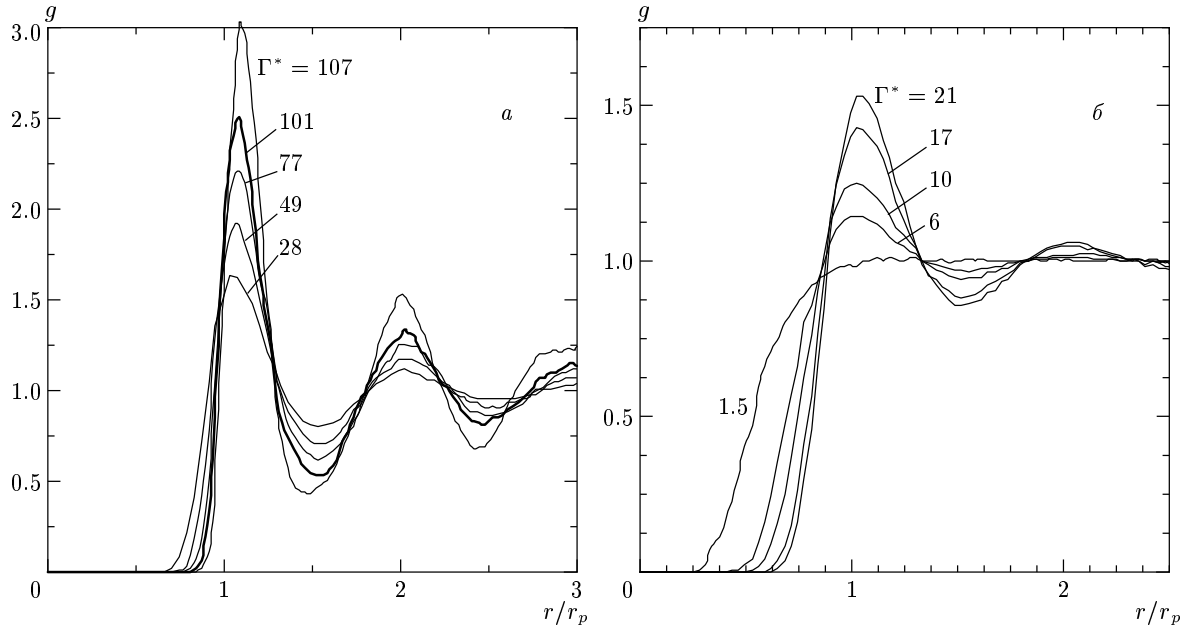


Рис. 1. Иллюстрация парных корреляционных функций $g(r/r_p)$ для систем Юкавы ($\kappa < 6$) при различных параметрах неидеальности Γ^* , указанных на рис. а и б

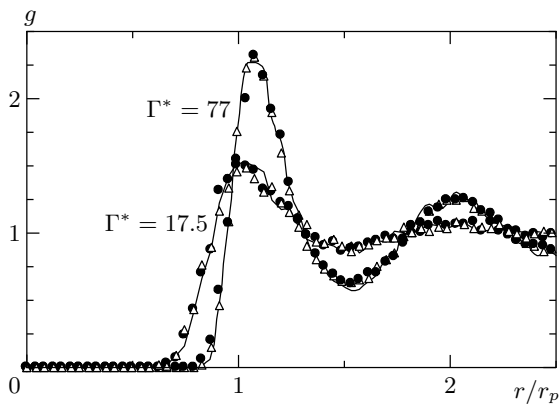


Рис. 2. Иллюстрация сравнения парных корреляционных функций $g(r/r_p)$ для различных модельных потенциалов и параметров ξ и Γ^* : для $\Gamma^* = 77$: сплошная линия — $\xi = 0.14$, $\varphi/\varphi_c = \exp(-4.8r/r_p)$; Δ — $\xi = 0.14$, $\varphi/\varphi_c = 0.1 \exp(-2.4r/r_p) + \exp(-4.8r/r_p)$; \bullet — $\xi = 1.22$, $\varphi/\varphi_c = \exp(-4.8r/r_p) + 0.05r_p/r$; для $\Gamma^* = 17.5$: сплошная линия — $\xi = 1.22$, $\varphi/\varphi_c = \exp(-2.4r/r_p)$; Δ — $\xi = 1.22$, $\varphi/\varphi_c = 0.1 \exp(-2.4r/r_p) + \exp(-4.8r/r_p)$; \bullet — $\xi = 0.14$, $\varphi/\varphi_c = 0.05(r_p/r)^3$

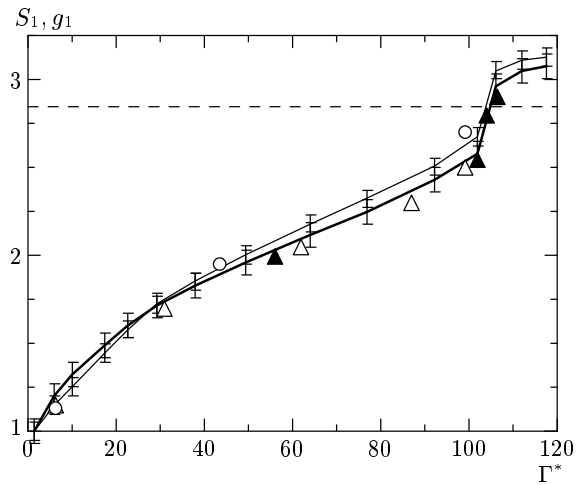


Рис. 3. Зависимости от Γ^* первых максимумов структурного фактора S_1 (тонкая линия) и парной корреляционной функции g_1 (толстая линия), \blacktriangle — величина g_1 в дисперсионной модели Юкавы ($v_{fr} = 0$) [40], Δ — g_1 в модели ОКП [10], \circ — величина S_1 в модели ОКП [10]. Даны интервалы абсолютных отклонений для различных $\xi = 0.04-3.60$ и различных потенциалов, подчиняющихся условию (11)

модельных потенциалов, подчиняющихся эмпирическому условию (11), показана на рис. 2 для двух

параметров Γ^* при различных ξ . Зависимости величины первых максимумов (g_1, S_1) функций $g(r)$,

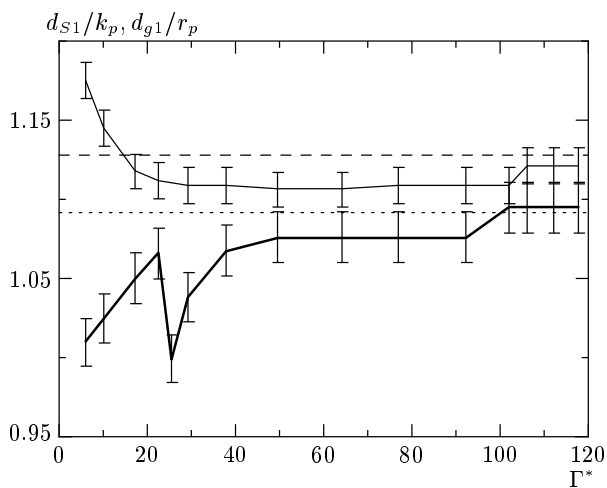


Рис. 4. Зависимости относительного положения от Γ^* максимума S_1 d_{S1}/k_p (тонкая линия) и относительного положения максимума g_1 d_{g1}/r_p (толстая линия). Штриховыми линиями обозначены положения максимумов корреляционных функций для ОЦК-решетки. Даны интервалы абсолютных отклонений для различных $\xi = 0.04-3.6$ и различных потенциалов, подчиняющихся условию (11)

$S(q)$ и их положений ($r = d_{g1}, q = d_{S1}$) от величины Γ^* приведены на рис. 3, 4. На данных рисунках также указаны интервалы абсолютных отклонений представленных величин для различных параметров масштабирования $\xi = 0.04-3.6$ и различных потенциалов, подчиняющихся условию (11). Для сравнения результатов расчета парной корреляции частиц в диссипативных системах ($v_{fr} \neq 0$) с решением обратимых уравнений движения для дисперсионных систем Юкавы ($v_{fr} = 0$) и с результатами, полученными в рамках модели однокомпонентной плазмы (ОКП), на рис. 3 показаны значения максимумов функций $g(r), S(q)$, найденные в работах [10, 40].

Таким образом, численные исследования показали, что пространственная корреляция макрочастиц в моделируемых системах не зависит от трения (v_{fr}) и полностью определяется величиной эффективного параметра Γ^* от газообразного состояния системы ($\Gamma^* \sim 1$) до точки ее кристаллизации ($\Gamma^* \approx 102-104$), где для всех анализируемых случаев наблюдалось формирование ОЦК-структуры. Положение первых максимумов корреляционных функций (g, S) для кристаллической структуры соответствовало ОЦК-решетке ($d_{g1} \approx r_1 = (3\sqrt{3}/4n_p)^{1/3}$, $d_{S1} \approx q_1 = 2\pi(\sqrt{2}n_p)^{1/3}$, $k_p = 2\pi(n_p)^{1/3}$, см. рис. 4). Резкое увеличение (скачки) величины пер-

вых максимумов $g(r)$ и $S(q)$ от 2.65 до 3.1 наблюдались в диапазоне изменения нормированного параметра неидеальности Γ^* от точки кристаллизации $\Gamma_{jump}^* \approx 102-104$ до точки плавления системы $\Gamma_m^* \approx 106-107$ (рис. 3). Таким образом, величина $\Gamma_{jump}^* \approx 104.5 (\pm 2)$ может являться критерием фазового превращения жидкостной системы в объемно-центрированную кубическую решетку.

Поскольку величина $\Gamma_{jump}^* \approx 104.5 (\pm 2\%)$ не зависит от вязкости окружающего газа, данный критерий находится в согласии с результатами расчетов кристаллизации систем Юкавы методами молекулярной динамики, не учитывающими трение частиц [40-42]. Отклонения результатов этих расчетов от $\Gamma_{jump}^* \approx 104.5$ варьируются в пределах $\pm 5\%$ и могут быть связаны с различием в численных методах, используемых для анализа системы (разного числа частиц, шага интегрирования и т. д.), а также выбором величины Γ^* либо в точке плавления, либо в точке кристаллизации системы. Следует отметить, что полученная величина $\Gamma_{jump}^* \approx 104.5 (\pm 2\%)$ находится в согласии с результатами теоретической работы [43], где для параметра неидеальности на линии фазового перехода в модели ОКП приводится значение $105 (\pm 3\%)$, которое удовлетворяет расчетам в рамках различных критериев фазовых переходов жидкость-кристалл (кристаллизация) [44] и кристалл-жидкость (плавление) [45].

В заключение отметим, что поскольку форма исследуемых корреляционных функций $g(r)$, подчиняющихся условию (11), определяется величиной эффективного параметра Γ^* , методы восстановления потенциала межчастичного взаимодействия из измерений структурного фактора, основанные на применении гиперцепного приближения (где используются прямые функциональные связи между $g(r), S(q)$ и $\varphi(r)$ [8-10]), не пригодны для анализируемых систем. Следует также добавить, что полученный результат может объяснить широкое распространение различных феноменологических критериев кристаллизации и плавления, устанавливающих конкретные значения величины максимумов корреляционных функций или отношений их максимальных и минимальных (при $r \neq 0$) значений на линиях фазовых переходов вне зависимости от типа потенциала межчастичного взаимодействия. Так, например, используя подобие парных корреляционных функций (см. разд. 2.3) и результаты расчета их максимумов g_1 (см. рис. 3), легко получить известное отношение g_1 и первого минимума $g(r)$, близкое к 5 на линии кристаллизации системы.

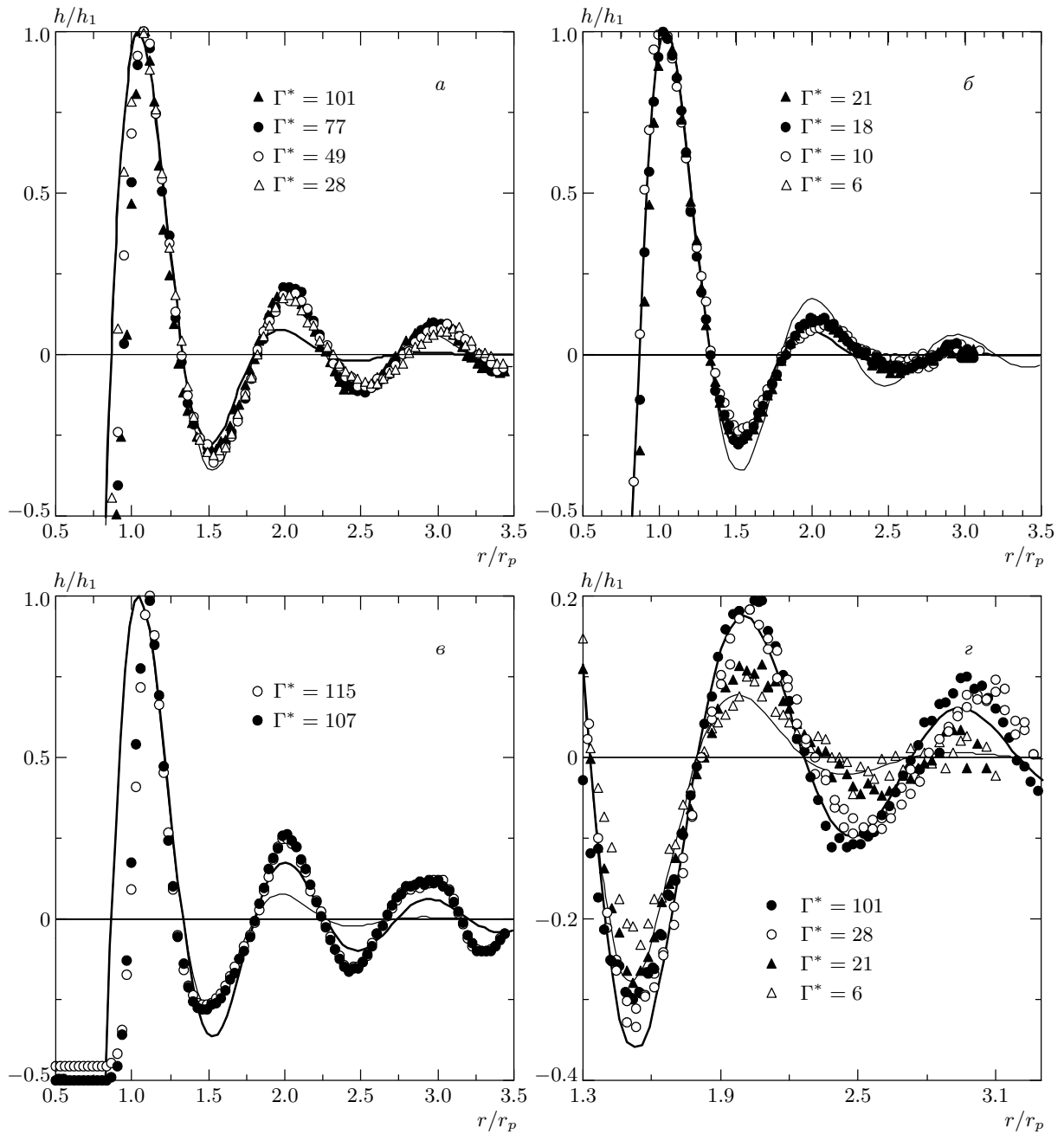


Рис. 5. Иллюстрация нормированных парных корреляционных функций $h(r/r_p)/h_1$ для систем Юкавы при различных параметрах неидеальности Γ^* , указанных на рисунках, а также аппроксимации (12) и (13) (толстая и тонкая линии соответственно) и увеличенный фрагмент (г) для сравнения результатов расчета при различных параметрах Γ^*

2.3. Парная корреляция макрочастиц в жидкостных системах и формирование пылевых кластеров

Для того чтобы исследовать асимптотику ослабления парной корреляции между частицами в мо-

делируемых системах с ростом расстояния между ними, корреляционные функции $h(r) = (g(r) - 1)$ были нормированы на величину их максимума $h_1 = \max(h(r))$. Результаты такой операции приведены на рис. 5а-г для различных параметров неидеальности Γ^* исследуемых систем. Анализ результа-

тов расчетов показывает, что выраженные максимумы $h(r)$ в моделируемых системах начинают появляться при $\Gamma^* > 3-5$. С ростом Γ^* от 28 до 102 пространственное поведение нормированной корреляционной функции $h(r)/h_1$ определяется эффективным параметром неидеальности Γ^* (см. разд. 2.2), а ее затухание с расстоянием имеет степенную асимптотику и на расстояниях, больших среднего межчастичного $r > r_p$, может быть аппроксимировано функцией (см. рис. 5а)

$$h(r/r_p)/h_1 \approx (\beta r_p/r)^{2.75} \sin(2\pi\beta(r/r_p + \beta - 1)), \quad (12)$$

где $\beta \approx 1.07$. С уменьшением эффективного параметра неидеальности ниже его критического значения $\Gamma^* \sim 21$ скорость ослабления парной корреляции резко увеличивается и может быть задана экспоненциальной функцией (см. рис. 5б):

$$h(r/r_p)/h_1 \approx \exp\{2.75(\beta - r/r_p)\} \times \sin(2\pi\beta(r/r_p + \beta - 1)). \quad (13)$$

Выбор аппроксимаций для парной корреляционной функции затрудняется тем фактом, что высокочастотные тепловые флуктуации, вызванные стохастическим движением макрочастиц, оказывают существенное влияние на регистрируемую величину $h(r)/h_1$, особенно с ростом r , когда погрешность, вызванная этими флуктуациями, становится сравнимой с $h(r)/h_1$ (см. рис. 5г). При этом подгонка численных данных более удачной функцией вряд ли имеет практическое приложение, поскольку измерения корреляционных функций для пылевой подсистемы в реальных экспериментах подвержены дополнительным стохастическим изменениям, вносимым как флуктуациями параметров окружающей плазмы, так и шумами, возникающими за счет средств и методов диагностики. Тем не менее обнаружены достаточно существенные качественные отличия в пространственной асимптотике парных корреляционных функций для слабо ($\Gamma^* \leq 21$) и сильно коррелированных ($\Gamma^* \geq 28$) систем. В случае сильно неидеальных систем ($\Gamma^* \geq 28$) затухание парной корреляции с расстоянием имеет степенную асимптотику (12), а с уменьшением эффективного параметра неидеальности ниже некоторого критического значения $\Gamma^* \sim 21$ скорость ослабления корреляционной функции может быть описана экспоненциальным законом (13). Необходимо отметить, что полученный результат отличается от результатов экспериментальных исследований [30], где для парной корреляции монослоя частиц в гексатической и изотропной фазах жидкости было найдено

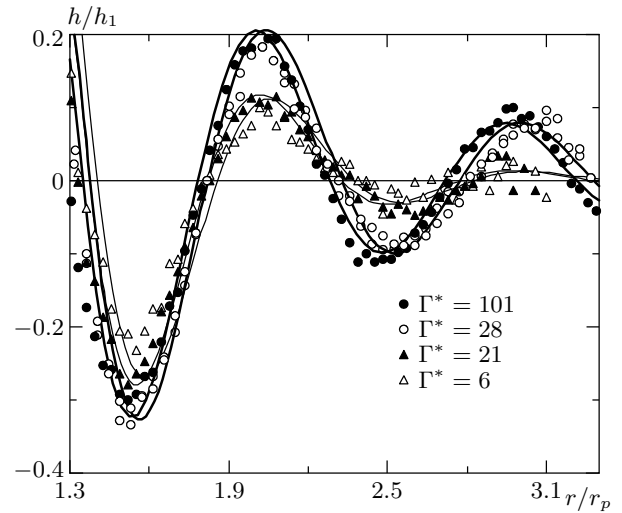


Рис. 6. Иллюстрация функций $h(r/r_p)/h_1$ для систем Юкавы при различных параметрах Γ^* и их аппроксимации (14) и (15) (толстая и тонкая линии соответственно). Сдвиг кривых при различных параметрах Γ^* обусловлен изменением положения максимума g_1 парной корреляционной функции (см. рис. 4)

экспоненциальное ослабление функции $g(r)$ с ростом межчастичного расстояния, степенная аппроксимация была получена только для случая кристаллической фазы. Данное отличие может быть связано с существенно двумерным характером исследуемого монослоя (в отличие от решаемой здесь трехмерной задачи). Поведение корреляционной функции в кристаллической фазе, полученное при моделировании трехмерных систем взаимодействующих частиц, показано на рис. 5д. Легко увидеть, что в данном случае скорость ослабления парной корреляции значительно ниже ее затухания в системах жидкостного типа.

Поиск более точных аппроксимаций $g(r)$ путем подгонки численных данных более удачной функцией не имеет особого физического смысла. Однако такие аппроксимации могут быть полезны при расчете термодинамических характеристик жидкостных систем (давления, плотности энергии, сжимаемости и т. д.), которые определяются бинарной корреляционной функцией $g(r)$ [9, 10]. Аппроксимирующие функции для кривых $g(r)$ на расстояниях меньших среднего межчастичного r_p (при $0 \leq r \leq r_p$) были подробно исследованы в работе [10]. В качестве аппроксимаций $h(r)$ на расстояниях $r \geq r_p$ могут быть предложены следующие функции (см. рис. 6):

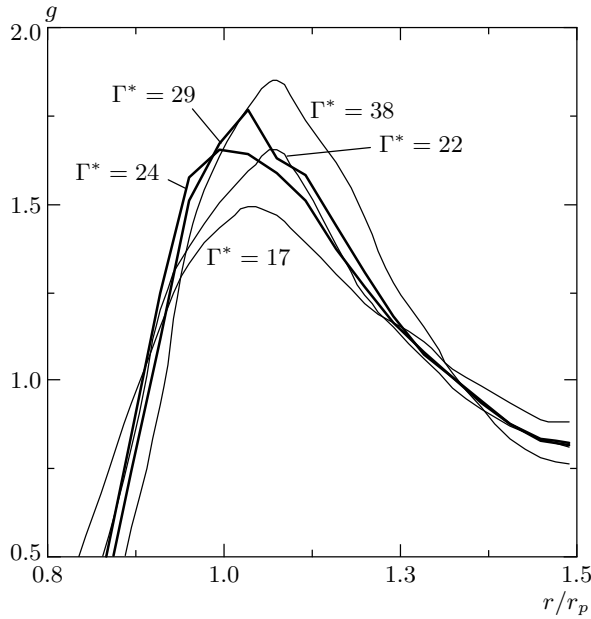


Рис. 7. Иллюстрация поведения максимума парной корреляционной функции для $\Gamma^* \approx 17-40$. Толстые линии — $\Gamma^* = 24$ и 29

$$h(r/r_p)/h_1 \approx (\beta r_p/r)^{2.5} \times (\sin(2\pi d_{g1}(r/r_p + \beta - 1)) + 0.1)/g_1, \quad (14)$$

$$28 \leq \Gamma^* \leq 102,$$

$$h(r/r_p)/h_1 \approx \exp\{2.25(\beta - r/r_p)\} \times (\sin(2\pi d_{g1}(r/r_p + \beta - 1)) + 0.1)/g_1, \quad (15)$$

$$4 \leq \Gamma^* \leq 21.$$

Данные функции учитывают сдвиг кривых парной корреляции $g(r)$ при изменении положения их максимума g_1 в зависимости от эффективного параметра Γ^* (см. рис. 4).

Отличие, обнаруженное в пространственной асимптотике парных корреляционных функций при различных параметрах неидеальности анализируемых систем, можно сопоставить с данными численных экспериментов [17, 31]. Так, например, в работе [17] представлены результаты наблюдения формирования групп отдельных макрочастиц (кластеров) для эффективного параметра неидеальности $\Gamma^* \approx 22-24$. Данное явление сопровождалось резким уменьшением коэффициента диффузии D и изменением положения первого максимума корреляционной функции $g(r)$ (см. рис. 4), а анализируемая система в этой точке качественно изменяла свои характеристики, по крайней мере, в том, что касается ее аналогий с твердым телом. Поведение

максимума функции $g(r)$ вблизи $\Gamma^* \approx 22-24$ для трехмерных систем Юкавы проиллюстрировано на рис. 7. Критическая величина $\Gamma^* \approx 23.5$ соответствовала условию обнаружения одной частицы в сфере радиуса Вигнера-Зейтца

$$a_{VZ} = (4\pi n_p/3)^{-1/3}$$

($g(r) = 0$ при $r < a_{VZ}$), а длина свободного пробега макрочастиц при их столкновениях между собой

$$r_{p-p} \approx (3\Gamma/\omega^{*2}m_p)^{1/2}$$

была близка к величине a_{VZ} ($r_{p-p} \approx a_{VZ}$).

Несколько позднее формирование регулярных кластеров макрочастиц с ростом эффективного параметра неидеальности (для $\Gamma^* > 22-24$) было выявлено в численных и лабораторных экспериментах путем анализа трехчастичных корреляционных функций [31]. Сечения трехчастичных корреляционных функций $g_3(r_{12}, r_{23}, r_{31})$ ($r_{ij} = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$), рассчитанных при фиксированной величине r_{12} , равной наиболее вероятному межчастичному расстоянию d_{g1} ($r_{12} = d_{g1}$), для различных Γ^* показаны на рис. 8а, б, в. Для представления данных сечений в наглядном виде (удобном для сравнения) они были нормированы на величину максимума функции $g_3(r_{12}, r_{23}, r_{31})$: черный цвет соответствует единице, белый цвет — $g_3 = 0$.

Появление регулярных пылевых кластеров может говорить о том, что с ростом параметра неидеальности анализируемые системы приобретают ориентационную жесткость, т. е. начинают формироваться ближний ориентационный порядок в расположении макрочастиц на расстояниях, больших средних межчастичных (см. рис. 8а). Можно предположить, что причиной наблюдаемых качественных изменений являются топологические дефекты трехмерной кристаллической структуры, приводящие к существованию двух различных фаз жидкости (изотропной и имеющей ближний ориентационный порядок), аналогично топологическому фазовому переходу в двумерных системах. Последнее обстоятельство может являться причиной того, что с ростом параметра неидеальности Γ^* динамика моделируемой системы приобретает аналогию с твердым телом и может рассматриваться в рамках «теории» скачков, разработанной для молекулярных жидкостей [6]. Суть данной теории состоит в том, что молекулы такой жидкости находятся в равновесном («оседлом») состоянии в течение времени, необходимого для сообщения им энергии (энергии активации), достаточной для разрыва потенциальных связей с соседними

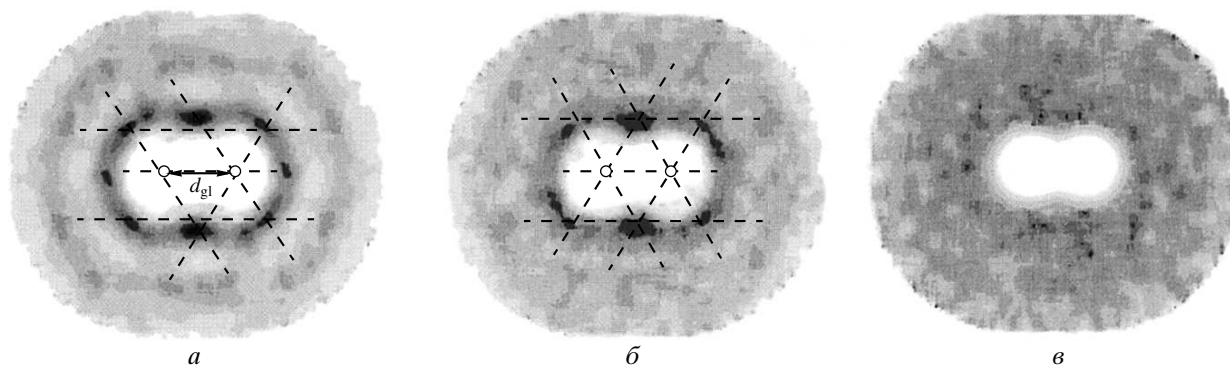


Рис. 8. Иллюстрация сечений трехчастичных корреляционных функций g_3 , полученных в результате численного моделирования для разных параметров $\Gamma^* = 37.5$ (а), 17.5 (б), 1.5 (в)

молекулами и перехода в новое «оседлое» состояние в окружении других молекул. Соответствие динамики систем Юкавы данной теории для $\Gamma^* > 40-50$ подтверждается результатами численного моделирования [17]. Окончательное выявление природы наблюдаемых эффектов нуждается в дополнительных исследованиях, устанавливающих количественные характеристики ориентационных процессов (средние времена существования определенной ориентации в расположении макрочастиц, величину топологической энтропии, скорости изменения автокорреляционных функций и т. д.) и их зависимость от параметра неидеальности анализируемых структур.

3. ЭКСПЕРИМЕНТ

Схема установки по изучению парной корреляции макрочастиц в пылевой плазме, удерживаемой в приэлектродном слое ВЧ-разряда, приведена на рис. 9. Эксперименты проводились в аргоне

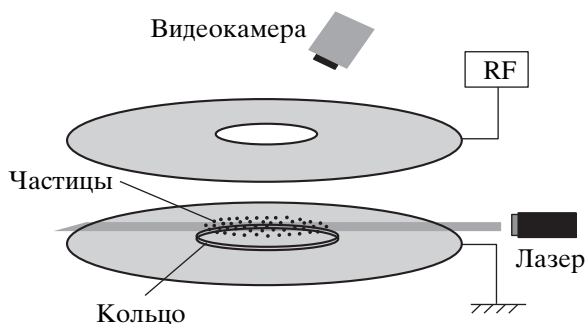


Рис. 9. Схема установки для экспериментов в емкостном ВЧ-разряде

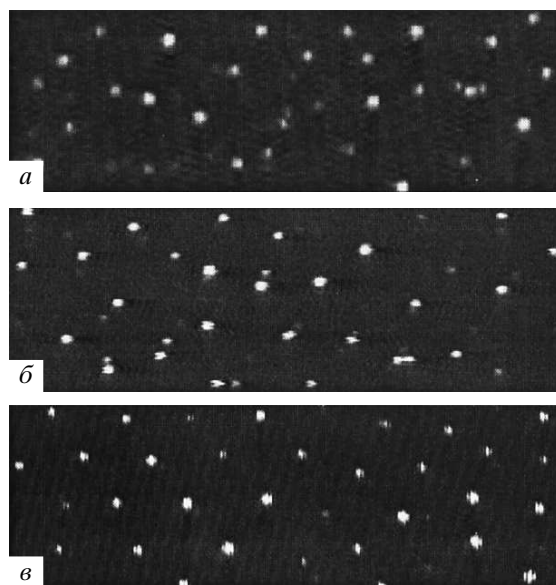


Рис. 10. Видеоизображение частиц пылевого облака в приэлектродном слое разряда для различных экспериментов: а — $P = 3$ Па, $W = 10$ Вт; б — $P = 3$ Па, $W = 2$ Вт; в — $P = 7$ Па, $W = 10$ Вт

с давлением $P = 2-10$ Па при мощности разряда $W \approx 2-10$ Вт. В качестве пылевой компоненты использовались монодисперсные частицы меламинформальдегида с радиусом $a_p \approx 1.7$ мкм и плотностью $\rho_p \approx 1.5$ г·см⁻³. В условиях экспериментов пылевые частицы формировали от четырех до десяти плоских слоев. Для диагностики макрочастиц пылевое облако подсвечивалось лазерным ножом (толщиной приблизительно 200–300 мкм), после чего снималось на видеопленку с помощью ПЗС-камеры (частота кадров 25 с⁻¹). В качестве источника подсветки

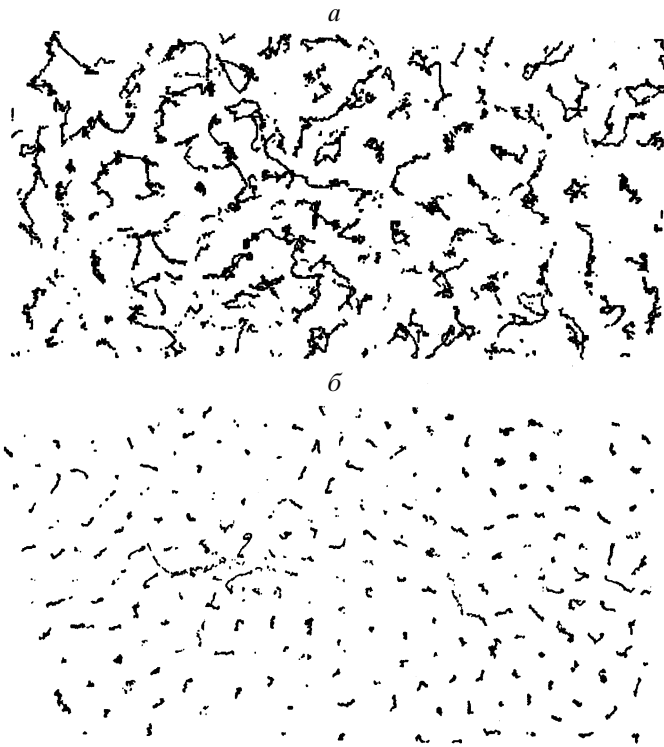


Рис. 11. Траектории движения макрочастиц за время усреднения парной корреляционной функции t для различных экспериментов: $a - P = 3$ Па, $W = 10$ Вт; $b - P = 7$ Па, $W = 10$ Вт

ки использовался гелий-неоновый лазер. Фрагменты видеоизображения частиц, регистрируемых в освещенном пылевом слое, показаны на рис. 10 для различных условий экспериментов.

Видеозапись обрабатывалась при помощи специальной компьютерной программы, позволяющей идентифицировать положение и смещение отдельных частиц в пылевых структурах. Во всех анализируемых случаях наблюдаемые структуры являлись квазистационарными системами жидкостного типа. Среднее межчастичное расстояние r_p в пылевых структурах изменялось от 260 до 350 мкм. Следует отметить, что поскольку анализируемые пылевые структуры представляли собой несколько слоев макрочастиц, формирование выраженных крупномасштабных пылевых вращений, аналогичных описанным в работах [24, 25], не наблюдалось ни в одном из рассмотренных случаев. Траектории движения макрочастиц в течение времени усреднения парных корреляционных функций (приблизительно 1–2 с) представлены на рис. 11.

В результате обработки видеозаписей были получены парные $g(r)$ и трехчастичные корреляцион-

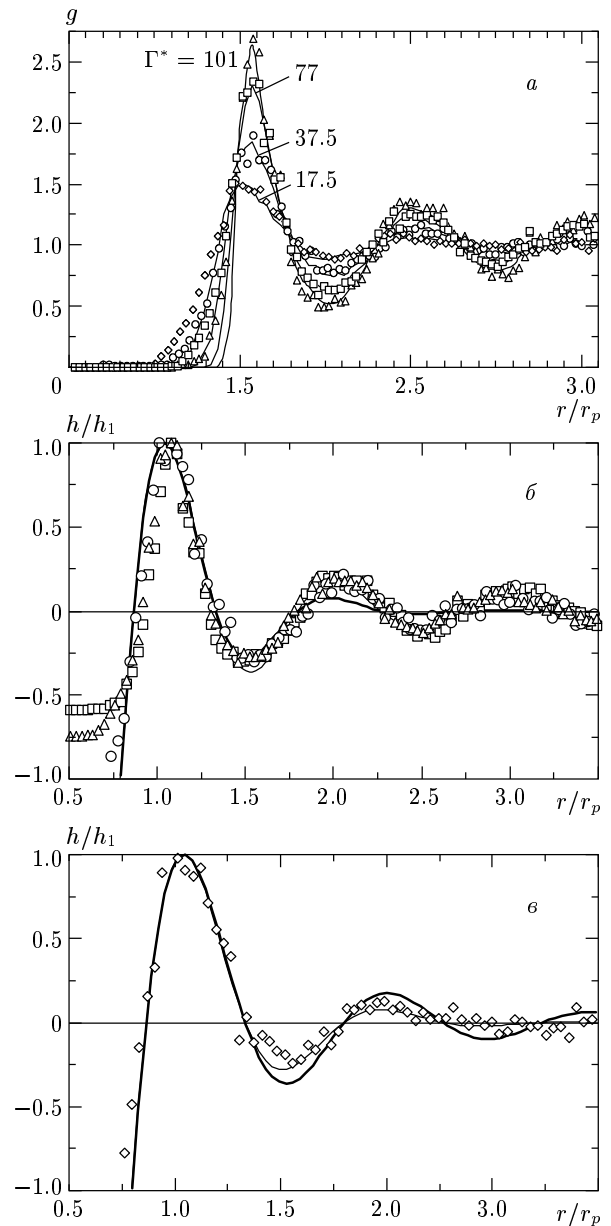


Рис. 12. Парные корреляционные функции $g(r/r_p)$ (а) и нормированные функции $h(r/r_p)/h_1$ (б, в), измеренные в экспериментах: $\diamond - P = 3$ Па, $W = 10$ Вт; $\circ - P = 3$ Па, $W = 2$ Вт; $\triangle - P = 7$ Па, $W = 10$ Вт. Функции $g(r/r_p)$, полученные в результате моделирования для разных Γ^* , показаны на рис. 12а сплошными линиями. Сплошными линиями на рис. 12б, в даны аппроксимации (12) и (13) (толстая и тонкая линия, соответственно)

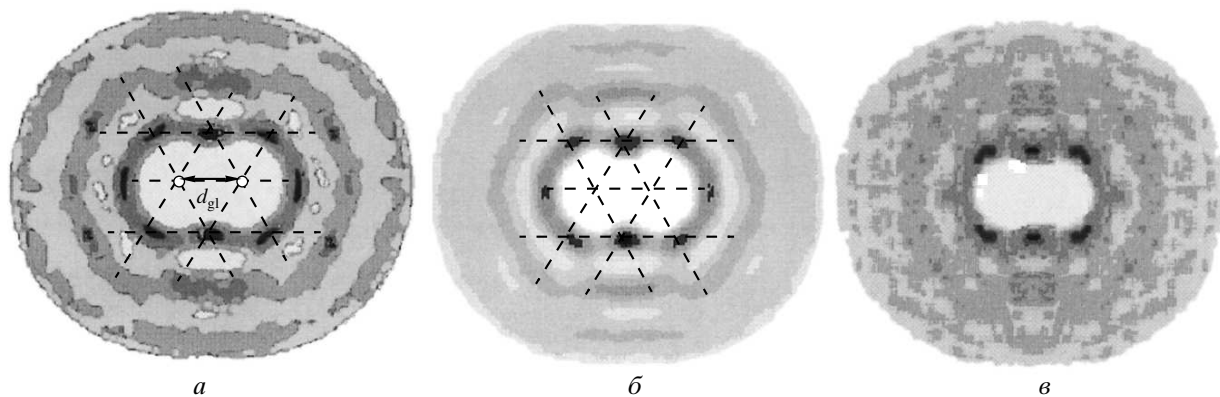


Рис. 13. Иллюстрация измеренных сечений трехчастичных корреляционных функций g_3 для различных экспериментов: $a - P = 7$ Па, $W = 10$ Вт; $b - P = 3$ Па, $W = 2$ Вт; $c - P = 3$ Па, $W = 10$ Вт

ные функции $g_3(r_{12}, r_{23}, r_{31})$, усредненные в течение $t \approx 1-2$ с при неизменных экспериментальных условиях. Парные корреляционные функции $g(r/r_p)$ приведены на рис. 12а для различных давлений P газа и мощности разряда W . На рис. 12б, в показаны экспериментальные функции $h(r)/h_1$, которые сравниваются с аппроксимациями (12), (13), полученными в процессе численного эксперимента. Легко видеть, что, несмотря на отличие реальных экспериментальных условий от параметров моделируемой однородной задачи, наблюдается хорошее согласие между формами измеренных парных корреляционных функций и функций $g(r)$, соответствующих моделируемым системам с $\Gamma^* \approx 17.5$ и $\Gamma^* > 37$. При этом в последнем случае (для $\Gamma^* > 37$) затухание пространственной корреляции макрочастиц также имеет степенной характер, а для случая $\Gamma^* \approx 17.5$ оно близко к экспоненциальной функции.

Несмотря на различие между параметрами однородной трехмерной задачи и условиями экспериментов, хорошее согласие наблюдается также между измеренными трехчастичными функциями и функциями, полученными путем численного моделирования (см. рис. 8). Сечения измеренных трехчастичных корреляционных функций $g_3(r_{12}, r_{23}, r_{31})$ при фиксированной величине r_{12} , равной наиболее вероятному межчастичному расстоянию d_{g1} ($r_{12} = d_{g1}$), определяемому по положению максимума экспериментальных функций $g(r)$, показаны на рис. 13. Сравнение приведенных на рисунке результатов, полученных для различных параметров разряда, показывает, что в регистрируемых пылевых структурах наблюдается формирование ближнего ориентационного порядка макрочастиц, которое отражается в по-

явлении максимумов $g_3(r_{12}, r_{23}, r_{31})$ в узлах гексагональных кластеров, показанных на рис. 13а, б штриховыми линиями. По мере роста максимума парной корреляционной функции величина этих максимумов, расположенных на расстояниях r близких к d_{g1} , растет, а также появляются новые максимумы на расстояниях $r \approx 2d_{g1}$ (см. рис. 13а).

Таким образом, анализ пространственной корреляции макрочастиц позволяет предположить, что форма парных корреляционных функций для экспериментально наблюдаемых пылевых структур также не зависит от типа парного потенциала межчастичного взаимодействия, а при $\Gamma^* \approx 22-24$ в анализируемых пылевых структурах происходит фазовый переход в изотропную жидкость, сходный по своим характеристикам с топологическим фазовым переходом в двумерных системах. Последнее предположение может быть подкреплено дополнительными экспериментальными исследованиями автокорреляционных и пространственных функций для погранично-угловой корреляции макрочастиц ($g_6(t)$, $g_6(r)$), а также измерениями топологической энтропии.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Выполнен численный анализ корреляционных функций для протяженных трехмерных систем макрочастиц, взаимодействующих с различными типами изотропных потенциалов. Показано, что для широкого круга радиальных отталкивающих потенциалов межчастичного взаимодействия форма парной корреляционной функции $g(r)$ определяется величиной эффективного параметра Γ^* , что исключает возможность восстановления вида и параметров

данных потенциалов путем обращения $g(r)$. Результаты исследований показывают, что для учета парной корреляции частиц, взаимодействующих с рассмотренным кругом потенциалов (а, соответственно, для расчета ряда термодинамических характеристик жидкостных систем), нет необходимости в проведении сложных вычислений для поиска подходящих пространственных замыканий. Парная корреляционная функция для таких систем может быть легко аппроксимирована функцией, зависящей от двух безразмерных параметров (Γ^* и r/r_p), причем формы этой функции при $r/r_p > 1$ будут существенно различны только в случаях слабо коррелированных ($\Gamma^* < 22$) и сильно неидеальных ($\Gamma^* > 28$) структур.

Было получено, что поведение нормированной корреляционной функции $h(r)/h_1 = (g(r) - 1)/(g_1 - 1)$ для жидкостных систем с $\Gamma^* \geq 28$ и $\Gamma^* \leq 22$ имеет слабую зависимость от величины параметра неидеальности на расстояниях близких или больших среднего межчастичного расстояния ($r \geq r_p$). На данных расстояниях $h(r)/h_1$ может быть аппроксимирована произведением гармонической функции на некоторую функцию, описывающую затухание пространственной корреляции макрочастиц. В случае сильно коррелированных систем ($\Gamma^* \geq 28$) затухание парной корреляции с расстоянием имеет степенную асимптотику, а с уменьшением эффективного параметра неидеальности ниже некоторого критического значения $\Gamma^* \approx 22$ скорость ослабления корреляционной функции может быть описана экспоненциальным законом. Экспериментальный анализ парной корреляции макрочастиц в жидкостных пылевых структурах, формирующихся в приэлектродном слое высокочастотного емкостного разряда, показывает хорошее согласие с результатами численных исследований. Изменение скорости затухания парной корреляционной функции, зарегистрированное как в численном, так и в лабораторном экспериментах может быть обусловлено существованием двух различных фаз жидкости: изотропной и имеющей ближний ориентационный порядок. Данное предположение подтверждается наблюдением формирования регулярных кластеров макрочастиц.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ (грант № 01-02-16658) и INTAS (грант № 01-0391). Авторы благодарят А. В. Чернышева, А. В. Гаврикова и И. А. Шахову за предоставленные видеозаписи экспериментов.

ЛИТЕРАТУРА

1. J. Chu and R. I., Phys. Rev. Lett. **72**, 4009 (1994).
2. H. Thomas, G. Morfitt, V. Demmer et al., Phys. Rev. Lett. **73**, 652 (1994).
3. A. Merzer, T. Trottenberg, and A. Pier, Phys. Lett. A **191**, 301 (1994).
4. В. Е. Фортов, А. П. Нефедов, В. М. Торчинский и др., Письма в ЖЭТФ **64**, 86 (1996).
5. А. М. Липаев, В. И. Молотков, А. П. Нефедов и др., ЖЭТФ **112**, 2030 (1997).
6. Яа. I. Frenkel, *Kinetic Theory of Liquid*, Oxford University Press, Oxford (1976).
7. Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский, *Статистическая физика*, Наука, Москва (1979).
8. Р. Балеску, *Равновесная и неравновесная статистическая механика*, Наука, Москва (1978).
9. N. K. Airawadi, Phys. Rep. **57**, 241 (1980).
10. S. Ichimaru, Rev. Mod. Phys. **54**, 1017 (1982).
11. H. J. Raverche and R. D. Mountain, J. Chem. Phys. **57**, 3987 (1972).
12. H. J. Raverche and R. D. Mountain, J. Chem. Phys. **57**, 4999 (1972).
13. S. Wang and J. A. Crumhansr, J. Chem. Phys. **56**, 4287 (1972).
14. U. Konopka, G. E. Morfitt, and R. Ratke, Phys. Rev. Lett. **84**, 891 (2000).
15. J. E. Daugherty, R. K. Porteous, M. D. Kirgore et al., J. Appl. Phys. **72**, 3934 (1992).
16. J. E. Allen, Phys. Scripta **45**, 497 (1992).
17. O. S. Vaulina and S. V. Vladimirov, Phys. Plasma **9**, 835 (2002).
18. O. S. Vaulina, S. V. Vladimirov, O. F. Petrov et al., Phys. Rev. Lett. **88**, 245002 (2002).
19. V. E. Fortov, O. S. Vaulina, O. F. Petrov et al., Phys. Rev. Lett. **90**, 245005 (2003).
20. О. С. Ваулина, О. Ф. Петров, В. Е. Фортов и др., Физ. плазмы **29**, 698 (2003).
21. В. Е. Фортов, О. С. Ваулина, О. Ф. Петров и др., ЖЭТФ **124**, 798 (2003).
22. J. M. Kosterlitz and D. J. Thouless, J. Phys. C **6**, 1181 (1973).

23. H. M. Thomas and G. E. Morfill, *Nature (London)* **379**, 806 (1996).
24. G. E. Morfill, H. M. Thomas, and M. Zuzic, in *Adv. Dusty Plasma*, ed. by P. K. Shukla, D. A. Mendis, and T. Desai, Word Scientific Publishing Co., Singapore (1997), p. 99.
25. L. I, W. T. Juan, C. H. Chiang et al., in *Adv. Dusty Plasma*, ed. by P. K. Shukla, D. A. Mendis, and T. Desai, Word Scientific Publishing Co., Singapore (1997), p. 143.
26. W. T. Juan, M. H. Chen, and L. I., *Phys. Rev. E* **64**, 016402 (2001).
27. K. Bagchi, Y. C. Andersen, and W. Swope. *Phys. Rev. Lett.* **76**, 255 (1996).
28. A. Jaster, *Europhys. Lett.* **42**, 277 (1998).
29. K. Zahn and G. Marlet, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 3656 (2000).
30. A. H. Marcus and S. A. Rice, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 2577 (1996).
31. O. S. Vaulina, O. F. Petrov V. E. Fortov et al., submitted to *Phys. Rev. Lett.*
32. В. В. Жаховский, В. И. Молотков, А. П. Нефедов и др., *Письма в ЖЭТФ* **66**, 392 (1997).
33. О. С. Ваулина, А. П. Нефедов, О. Ф. Петров и др., *ЖЭТФ* **118**, 1319 (2000).
34. А. А. Овчинников, С. Ф. Тимашев, А. А. Белый, *Кинетика диффузионно-контролируемых химических процессов*, Химия, Москва (1986).
35. Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский, *Физическая кинетика*, Наука, Москва (1979).
36. N. A. Fuchs, *The Mechanics of Aerosols*, Dover, New York (1964).
37. R. T. Farouki and S. Hamaguchi, *Phys. Lett.* **61**, 2973 (1992).
38. *Молекулярные взаимодействия от двухатомных молекул до биополимеров*, под ред. Б. Пюльмана, Мир, Москва (1981).
39. I. M. Torrens, *Interatomic Potentials*, New York-London (1972).
40. M. O. Robbins, K. Kremer, and G. S. Grest, *J. Chem. Phys.* **88**, 3286 (1992).
41. E. J. Meijer and D. Frenkel, *J. Chem. Phys.* **94**, 2269 (1991).
42. S. Hamaguchi, R. T. Farouki, and D. H. E. Dubin, *Phys. Rev. E* **56**, 4671 (1997).
43. W. L. Slattery, G. D. Doollen, and H. E. DeWitt, *Phys. Rev. A* **21**, 2087 (1980).
44. E. L. Plooloc and J. P. Hansen, *Phys. Rev. A* **8**, 3110 (1973).
45. H. M. Van Horn, *Phys. Lett. A* **28**, 707 (1969).