

# МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ МАССОПЕРЕНОСА НА МАЛЫХ ВРЕМЕНАХ НАБЛЮДЕНИЯ В НЕИДЕАЛЬНЫХ ДИССИПАТИВНЫХ СИСТЕМАХ

*O. C. Ваулина\*, О. Ф. Петров, В. Е. Фортов*

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

Поступила в редакцию 11 августа 2004 г.

Представлены результаты численного моделирования процессов массопереноса на малых временах наблюдения для протяженных квазидвумерных и трехмерных неидеальных диссипативных систем макрочастиц, взаимодействующих посредством экранированного кулоновского потенциала. Расчеты проводились для параметров, соответствующих условиям экспериментов в лабораторной пылевой плазме. Показано, что эволюция среднеквадратичного смещения макрочастиц на малых временах наблюдения в неидеальных жидкостных системах близка к эволюции тепловых колебаний частиц в узлах кристаллических решеток.

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

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Задачи, связанные с процессами массопереноса в диссипативных системах взаимодействующих частиц, представляют значительный интерес в различных областях науки и техники (гидродинамика, физика плазмы, медицинская промышленность, физика и химия полимеров и т. д.) [1–9]. Основная проблема при изучении физических свойств таких систем связана с отсутствием аналитической теории жидкости, которая могла бы объяснить ее термодинамические свойства, давать уравнение состояния, описывать явления тепло- и массопереноса и т. д. [7–10]. Разработка приближенных моделей для описания жидкого состояния вещества опирается на два основных подхода. Первый — полуэмпирический метод определения взаимосвязи параметров жидкости друг с другом и со свойствами исходных кристаллов, который опирается на аналогии между кристаллическим и жидким состоянием вещества [7–10]. Второй подход основан на полном статистическом расчете свойств неидеальных сред методом молекулярной динамики с использованием модельных данных об энергии взаимодействия частиц [11, 12]. Такое моделирование позволяет изу-

чать различные физические явления (фазовые переходы, тепловую диффузию макрочастиц, динамику приближения системы к равновесному состоянию и т. д.). Численное моделирование динамики неидеальных систем имеет огромную значимость в теории жидкости, поскольку благодаря сильному межчастичному взаимодействию в таких системах отсутствует малый параметр, который можно было бы использовать для аналитического описания ее состояния и термодинамических характеристик, как это возможно в случае газа.

Хорошей экспериментальной моделью для изучения свойств неидеальных систем является лабораторная пылевая плазма, которая представляет собой слабо ионизованный газ с макрочастицами дисперсной фазы микронных размеров (пылевыми частицами) [13–17]. Пылевая плазма является распространенным природным объектом, а также достаточно часто образуется в результате различных технологических процессов. Микронные пылевые частицы в плазме могут приобретать значительный электрический заряд и формировать квазистационарные пылевые структуры, подобные жидкости или твердому телу. В зависимости от условий эксперимента такие структуры могут быть близки к однородным трехмерным системам или иметь сильно неизо-

---

\*E-mail: vaul@ihed.ras.ru

тропный одномерный или квазидвумерный характер, как, например, «цепочки» макрочастиц, наблюдаемые в плазме тлеющего разряда постоянного тока [16, 17], или отдельные пылевые слои (обычно от одного до десяти) в приэлектродной области высокочастотного разряда [13–15]. В отличие от реальных жидкостей, макрочастицы в плазме могут быть сняты видеокамерой, что значительно упрощает применение прямых бесконтактных методов диагностики и дает возможность изучения физических свойств неидеальных систем на кинетическом уровне. Такие исследования могут сыграть существенную роль как для проверки существующих, так и для разработки новых аналитических моделей строения жидкости.

Большая часть численных исследований пылевой плазмы базируется на модели экранированного кулоновского потенциала:

$$U = (eZ)^2 \exp(-l/\lambda)/l, \quad (1)$$

где  $l$  — расстояние между частицами,  $\lambda$  — длина экранирования, а  $eZ$  — заряд макрочастицы в единицах элементарных зарядов электрона  $e$ . Свойства неидеальных систем макрочастиц, взаимодействующих с экранированным потенциалом, также представляют значительный интерес для анализа различных кинетических процессов в молекулярной биологии, химии полимеров и т. д. [2, 5]. Два безразмерных параметра, которые отвечают за процессы массопереноса и фазовое состояние в системах с экранированным кулоновским потенциалом при параметрах экранирования  $\kappa = l_p/\lambda < 6\text{--}7$ , были найдены в работах [18–20]. (Здесь  $l_p$  — среднее межчастичное расстояние, которое для двумерных систем равно обратному корню из поверхностной плотности частиц, а для трехмерных структур — обратному кубическому корню из их объемной концентрации.) Первый из них — эффективный параметр неидеальности, отвечающий за фазовое состояние системы взаимодействующих частиц:

$$\Gamma^* = \frac{a(Ze)^2}{Tl_p} \left\{ \left( 1 + \kappa + \frac{\kappa^2}{2} \right) \exp(-\kappa) \right\}^{1/2}. \quad (2)$$

Второй — параметр масштабирования, который отвечает за «скейлинг» динамических процессов в диссипативных системах и представляет собой отношение характерной частоты  $\omega^*$  рассеяния энергии в жидкостных системах (при движении заряженных макрочастиц в направлении смещения центра масс системы) к эффективной частоте  $v_{fr}$  их столкновений с нейтралами окружающего газа (характеризу-

ющей скорость обмена энергией между нейтралами и пылевой частицей [2, 5, 21, 22]):

$$\xi \equiv \frac{\omega^*}{v_{fr}} = \frac{eZ}{v_{fr}} \left\{ b \left( 1 + \kappa + \frac{\kappa^2}{2} \right) \frac{\exp(-\kappa)}{l_p^3 \pi M} \right\}^{1/2}. \quad (3)$$

Здесь  $M$  и  $T$  — масса и температура пылевой частицы, а величины коэффициентов  $a$  и  $b$  зависят от размерности задачи. Для однородной трехмерной системы  $a \equiv b = 1$ , а в случае решения квазидвумерной задачи, моделирующей протяженный пылевой слой,  $a = 1.5$ ,  $b = 2$ . Данные коэффициенты введены для удобства описания транспортных характеристик жидкостных систем (таких как коэффициенты диффузии  $D$  и парные корреляционные функции  $g(l)$ ), которые с учетом предлагаемой нормировки при одинаковых величинах параметров  $\Gamma^*$  и  $\xi$  имеют близкие значения. С ростом параметра  $\Gamma^*$  до величины  $\Gamma_m^* \approx 106$  ( $\kappa < 6$ ) в трехмерной системе формируется объемно-центрированная кристаллическая структура, а двумерная система кристаллизуется в структуру с решеткой гексагонального типа.

Диффузия макрочастиц является основным процессом массопереноса, который определяет энергетические потери (диссипацию) в плазменно-пылевых системах и их динамические характеристики, такие как фазовое состояние, условия распространения волн и формирования пылевых неустойчивостей. Теория диффузии в жидкостях развивалась в двух направлениях, одно из которых (более фундаментальное) опирается на общие положения статистической физики. Другой подход (теория «скачков») основан на аналогиях между жидкостью и твердым телом. 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 молекулами и перехода в окружение других молекул в новое оседлое состояние. Таким образом, можно полагать, что диффундирующая (активная) частица способна занимать энергетически эквивалентные места в узлах некоторой воображаемой решетки и мигрировать, совершая прыжок (скакок) в одно из эквивалентных мест. Случайное блуждание активной частицы по узлам «решетки» после большого числа скачков описывается уравнениями макроскопической диффузии (с некоторым постоянным коэффициентом  $D$ , не зависящим от времени), т. е. применимы законы Фика [2, 5]. Однако существующий уровень экспериментальной физики диктует необходимость выхода за пределы диф-

фузионного приближения, и современные методы моделирования, основанные на теории стохастических процессов, допускают такую возможность. В частности, для анализа процессов переноса при физически малых временах описание в рамках макроскопической («фикновской») кинетики может оказаться недостаточным. Исследование процессов массопереноса на малых временах наблюдения имеет особую важность для изучения быстрых процессов (таких как распространение ударных волн, импульсных воздействий или движение фронта химических превращений в конденсированных средах [5, 23]), а также для анализа транспортных характеристик слабо дисперсионных ( $\xi \gg 1$ ) неидеальных сред (таких как коллоидные растворы, плазма продуктов сгорания, ядерно-индуцируемая пылевая плазма при атмосферном давлении [2, 24, 25]), где корректное измерение коэффициентов диффузии макрочастиц требует постановки длительных экспериментов.

## 2. ПРОЦЕССЫ МАССОПЕРЕНОСА ЧАСТИЦ В НЕИДЕАЛЬНЫХ СРЕДАХ

Применение гидродинамических подходов позволяет получить успешное описание процессов массопереноса только в случае взаимодействий ближнего порядка. Когда силы межчастичного взаимодействия не столь малы, как в газах, построение корректного кинетического уравнения терпит неудачу. Фундаментальные теории диффузии в жидкостях основаны на том, что плотность числа частиц каждого из компонентов рассматриваемой системы является гидродинамической переменной, медленно изменяющейся в пространстве и во времени. Такие системы находятся в состоянии статистического равновесия и их можно характеризовать определенным набором физических параметров, например, концентрацией, кинетической температурой и давлением, которые могут испытывать лишь небольшие флуктуации около своего среднего равновесного значения. В статистической физике такое состояние описывают при помощи различных распределений Гиббса в зависимости от типа контакта системы с окружающей средой (термостатом), запрещающего или разрешающего обмен с ней энергией или частицами, а для анализа равновесных флуктуаций и коэффициентов переноса используют формулы Найквиста, функции Грина и флюктуационно-диссипативную теорему [21, 26].

В случае малых отклонений исследуемой систем

мы от состояния статистического равновесия коэффициент диффузии  $D$  частиц описывается соотношением, которое является частным случаем формул Грина–Кубо [2]:

$$D = \int_0^\infty \langle V(0)V(t) \rangle dt / m, \quad (4)$$

где  $\langle V(0)V(t) \rangle$  — автокорреляционная функция скоростей  $V$  частиц,  $t$  — время,  $m = 2$  или  $m = 3$ , соответственно, для двумерной или трехмерной систем. Для исследования эволюции процесса массопереноса во времени,  $D(t)$ , интегрирование автокорреляционной функции скоростей частиц в соотношении (4) выполняется для конечного интервала времени:

$$D(t) = \int_0^t \langle V(0)V(t) \rangle dt / m.$$

Коэффициент диффузии взаимодействующих частиц может быть также получен путем анализа теплового переноса частиц через единичную площадку в однородной среде при  $t \rightarrow \infty$ :

$$D = \lim_{t \rightarrow \infty} D(t), \quad (5)$$

где эволюция процесса массопереноса во времени  $D(t)$  определяется следующим соотношением [5]:

$$D(t) = \frac{\langle \langle (\Delta l)^2 \rangle_N \rangle_t}{2mt}. \quad (6)$$

Здесь  $\Delta l = \Delta l(t)$  — смещение отдельной частицы за время  $t$ ,  $\langle \rangle_N$  — усреднение по ансамблю, состоящему из  $N$  частиц, а  $\langle \rangle_t$  — усреднение по всем отрезкам времени длительностью  $t$  за полное время измерений. Необходимость последнего определяется требованием корректного определения средних характеристик для жидкостных систем в соответствии с теорией «скачков». Так, в работе [18] было показано, что динамическое поведение сильно неидеальных систем не является эргодическим, а усреднение по ансамблю

$$\langle \{ \Delta l(t) \}^2 \rangle_N \approx \langle \langle \{ \Delta l(t) \}^2 \rangle_N \rangle_t$$

только при  $\Gamma^* < 40\text{--}50$ .

Отметим, что при выводе соотношений (4)–(6) не делается предположений о характере теплового движения, поэтому они справедливы как для газов, так и для жидкостей и твердых тел. Однако в большинстве случаев расчет коэффициента диффузии при помощи этих соотношений не допускает аналитических решений. Простое решение

$D \equiv D_0 = T_p/v_{fr}M$ , известное как соотношение Эйнштейна, можно получить только для невзаимодействующих («броуновских») частиц. Здесь следует отметить, что величина  $f = v_{fr}M$  (обычно называемая коэффициентом трения макрочастиц) не зависит от плотности материала пылевой частицы, а определяется ее размерами, относительной скоростью движения, условиями аккомодации нейтралов на ее поверхности и числом Кнудсена Kn, которое для сферической частицы равно отношению длины свободного пробега нейтралов  $l_n$  к ее радиусу  $a_p$  [2, 5, 21, 22]. В гидродинамическом режиме ( $\text{Kn} \ll 1$ ) величина  $f = 6\pi\eta a_p$ , где  $\eta$  — вязкость окружающего газа.

В рамках полуэмпирической теории скачков аналитическое соотношение для коэффициента диффузии молекул можно представить в виде [1, 9]

$$D = \frac{d^2}{2m\tau_0} \exp\left(-\frac{W}{T}\right), \quad (7)$$

где  $d$  — среднее расстояние между молекулами,  $\tau_0$  — характерное время, определяющее частоту их переходов из одного «оседлого» состояния в другое, а  $W$  — энергетический барьер, преодолеваемый при этих переходах. Экспоненциальная зависимость  $D$  от температуры  $T$  молекулярных жидкостей подтверждается экспериментально. Аналогичная температурная зависимость для коэффициента тепловой диффузии  $D$  макрочастиц была найдена для диссипативных систем с экранированным потенциалом в работах [18, 27], где было показано, что для сильно неидеальных жидкостных структур коэффициент диффузии может быть представлен в виде

$$D \approx \frac{T\Gamma^*}{12\pi(\xi+1)v_{fr}M} \exp\left(-3\frac{\Gamma^*}{\Gamma_c^*}\right), \quad (8)$$

где  $\Gamma_c^* = 102$  — точка кристаллизации. Для параметров  $\Gamma^*$  в диапазоне от 50 до 102 ошибка аппроксимации результатов расчета  $D$  формулой (8) не превышает 5–10 % как для трехмерных, так и для двумерных систем.

Как уже было сказано, в случае жидких сред точное аналитическое соотношение для функции  $D(t)$ , описывающей эволюцию процессов массопереноса во времени, получить невозможно. В пренебрежении межчастичным взаимодействием средний квадрат смещения  $j$ -й частицы на одну степень свободы при воздействии некоторой случайной силы  $F_{run}$  можно найти из уравнения Ланжевена, представленного в виде [18]

$$M \frac{d^2x_j^2}{dt^2} = -Mv_{fr} \frac{dx_j^2}{dt} + 2M \left( \frac{dx_j}{dt} \right)^2 + 2x_j F_{run}. \quad (9)$$

Тогда в отсутствие корреляции между медленным смещением частицы и «быстрым» стохастическим воздействием ( $\langle F_{run}x_j \rangle = 0$ ) для однородной среды ( $M\langle(dx_i/dt)^2\rangle \equiv T$ ,  $\langle(\Delta l)^2\rangle = m\langle x_j^2 \rangle$ ) совместное решение уравнений (6) и (9) можно записать в виде [5]

$$\frac{D(t)}{D_0} = 1 - \frac{1 - \exp(-v_{fr}t)}{v_{fr}t}. \quad (10)$$

Таким образом, для невзаимодействующих частиц на больших по сравнению с обратной частотой трения временах ( $v_{fr}t \gg 1$ ) функция  $D(t) = D_0$ , в то время как на малых временах ( $v_{fr}t \ll 1$ ) проявляется баллистический характер движения частицы:  $\langle x_j^2 \rangle \approx Tt^2/M$  и  $D(t) = \langle x_j^2 \rangle / 2t \propto t$ .

Рассмотрим движение макрочастицы в узле воображаемой кристаллической решетки. Если возвращающую силу  $F_r = -M\omega_c^2 x_j$ , действующую на частицу в этой решетке, можно характеризовать одной характерной частотой  $\omega_c$ , уравнение движения частицы в поле действия такой силы можно преобразовать к виду

$$M \frac{d^2x_j^2}{dt^2} - Mv_{fr} \frac{dx_j^2}{dt} - \\ - 2M\omega_c^2 x_j^2 + 2M \left( \frac{dx_j}{dt} \right)^2 + 2x_j F_{run}. \quad (11)$$

В отсутствие корреляции между смещением  $x_j$  и случайной силой ( $\langle F_{run}x_j \rangle = 0$ ) для однородной среды ( $M\langle(dx_i/dt)^2\rangle \equiv T$ ,  $\langle(\Delta l)^2\rangle = m\langle x_j^2 \rangle$ ) совместное решение уравнений (6) и (11) можно записать в виде

$$\frac{D(t)}{D_0} = \frac{1}{2\xi^{*2}v_{fr}t} \left\{ 1 - \exp\left(-\frac{v_{fr}t}{2}\right) \times \right. \\ \left. \times \left( \operatorname{ch} \frac{v_{fr}t\sqrt{1-8\xi^{*2}}}{2} + \right. \right. \\ \left. \left. + \operatorname{sh} \frac{v_{fr}t\sqrt{1-8\xi^{*2}}}{2} \frac{1}{\sqrt{1-8\xi^{*2}}} \right) \right\} \\ \text{при } \xi^* = \frac{\omega_c}{v_{fr}} < \frac{\sqrt{2}}{4}, \quad (12a)$$

$$\frac{D(t)}{D_0} = \frac{1}{2\xi^{*2}v_{fr}t} \left\{ 1 - \exp\left(-\frac{v_{fr}t}{2}\right) \times \right. \\ \left. \times \left( \cos \frac{v_{fr}t\sqrt{8\xi^{*2}-1}}{2} + \right. \right. \\ \left. \left. + \sin \frac{v_{fr}t\sqrt{8\xi^{*2}-1}}{2} \frac{1}{\sqrt{8\xi^{*2}-1}} \right) \right\} \\ \text{при } \xi^* = \frac{\omega_c}{v_{fr}} > \frac{\sqrt{2}}{4}. \quad (12b)$$

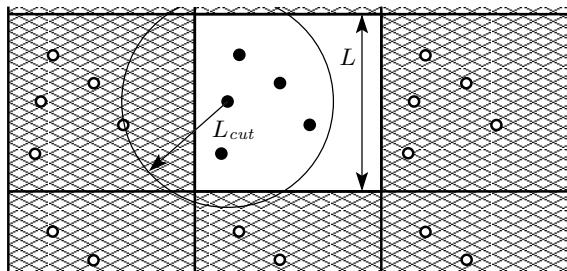


Рис. 1. Иллюстрация численного моделирования с использованием периодических граничных условий

Легко увидеть, что на малых временах наблюдения ( $v_{fr}t \ll 1 + \xi^*$ ) для частицы в узле кристаллической решетки также характерен баллистический режим движения ( $\langle (x_j^2) \rangle \approx Tt^2/M$ ,  $D(t) = \langle x_j^2 \rangle /2t \propto t$ ), как и в случае невзаимодействующих частиц. Иллюстрация процессов массопереноса на малых временах наблюдения для различных параметров  $\xi^*$  (решения (10), (12а) и (12б)) приведена на рис. 1.

Для частицы в узле кристаллической решетки с ростом времени наблюдения ( $v_{fr}t \gg 1$ ) функция  $D(t) = \langle (\Delta l)^2 \rangle /2t \rightarrow 0$ , поскольку среднеквадратичное отклонение  $\langle (\Delta l)^2 \rangle$  такой частицы от ее положения равновесия становится постоянным и соответствует отклонению гармонического осциллятора

$$\langle (\Delta l)^2 \rangle = mT/M\omega_c^2. \quad (13)$$

Для определения частоты  $\omega_c$ , характеризующей отклонение частицы от ее равновесного положения в кристаллических решетках различных типов, чаще всего используют либо квазигармоническое приближение, либо аппроксимацию Эйнштейна [28, 29]. Данные приближения основаны на расчетах частоты колебаний отдельной частицы в условиях, когда положение остальных частиц остается фиксированным. Частоты, полученные такими методами, не имеют аналитической зависимости от параметров потенциала межчастичного взаимодействия ( $Z$  и  $\lambda$ ) и нуждаются в дополнительной подгонке, чтобы описать результаты существующих численных расчетов фазовых диаграмм для систем с экранированным парным взаимодействием. Для этого используют различные аппроксимации численных данных линейными, квадратичными или кубическими функциями на разных (достаточно коротких) участках фазовой диаграммы [19, 28, 29]. Простое соотношение для характерной частоты колебаний частиц  $\omega_c = \omega_{bcc}$ , которая определяет линию плавления объемно-центрированной кубической решетки (в соот-

ветствии с критерием Линдемана) и не требует эмпирической аппроксимации численных данных, было предложено в работе [19]:

$$\omega_{bcc}^2 \approx \frac{(2eZ)^2 \exp(-\kappa)}{l_p^3 M \pi} \left( 1 + \kappa + \frac{\kappa^2}{2} \right). \quad (14)$$

В этой работе учитывалась вероятность межчастичных столкновений  $\sim N_{cn}/4\pi$ , где  $N_{cn}$  — количество пар ближайших соседей отдельной частицы (расположенных вместе с ней на одной прямой), которые обеспечивают ее устойчивое положение в узле кристаллической решетки. (Для объемно-центрированной кубической решетки  $N_{cn} = 4$ .) Там же предполагалось, что возвращающая сила  $F_r$ , действующая на частицу в центре кубической ячейки, пропорциональна удвоенной второй производной потенциала межчастичного взаимодействия в точке  $l = l_p$ . Для характерной частоты колебаний макрочастиц  $\omega_c = \omega_h$  в квазидвумерной решетке гексагонального типа такого соотношения ранее предложено не было. Если следовать логике упомянутой работы [19], то с учетом вероятности межчастичных столкновений в плоской гексагональной ячейке  $\sim 3/2\pi$  можно предположить, что  $\omega_h^2 \approx 1.5\omega_{bcc}^2$ . Такое предположение хорошо согласуется с результатами вычислений величины  $\langle (\Delta l)^2 / l_p^2 \rangle$  на линии плавления двумерных структур [30]. Однако в квазидвумерной структуре частицы имеют дополнительную степень свободы, которая позволяет им смещаться перпендикулярно плоскости решетки. Такие флюктуации не приводят в действие возвращающие силы в плоскости кристалла, а, соответственно, уменьшают вероятность эффективных столкновений на величину порядка  $3N_t/(2\pi)^3$ , где  $N_t = 4$  — число возможных комбинаций для одновременного смещения трех частиц (расположенных на одной прямой) ортогонально плоскости решетки. Таким образом, для оценки характерной частоты колебаний макрочастиц в квазидвумерной решетке гексагонального типа может быть предложена следующая аппроксимация:

$$\begin{aligned} \omega_h^2 &\approx 6(1 - \pi^{-2}) \frac{(eZ)^2 \exp(-\kappa)}{l_p^3 M \pi} \left( 1 + \kappa + \frac{\kappa^2}{2} \right) \approx \\ &\approx 5.4 \frac{(eZ)^2 \exp(-\kappa)}{l_p^3 M \pi} \left( 1 + \kappa + \frac{\kappa^2}{2} \right). \end{aligned} \quad (15)$$

### 3. ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ ТРАНСПОРТНЫХ ПРОЦЕССОВ В ПЫЛЕВОЙ ПЛАЗМЕ

Для анализа транспортных характеристик систем взаимодействующих макрочастиц обычно используют два известных численных алгоритма: метод Монте-Карло и метод молекулярной динамики. В отличие от метода Монте-Карло, разработанного для вычисления равновесных величин, метод молекулярной динамики позволяет описать приближение исследуемой системы к состоянию равновесия, поэтому он является незаменимым инструментом при изучении процессов тепло- и массопереноса, распространения волн и динамики формирования неустойчивостей.

Метод молекулярной динамики опирается на решение системы обыкновенных дифференциальных уравнений, уравнений движения частиц в поле различных сил. В рамках данного подхода можно выделить метод молекулярной динамики, основанный на интегрировании обратимых уравнений движения частиц (МОД), и метод броуновской динамики (или динамики Ланжевена), основанный на решении уравнений Ланжевена и учитывающий необратимость исследуемых процессов (МБД). В первом случае (МОД) во внимание принимаются только упругие взаимодействия частиц в пренебрежении диссипацией (трением) и другими процессами обмена энергией между частицами и внешней средой (термостатом). Движение частиц в такой системе не является устойчивым (по Ляпунову), а для поддержания их равновесной температуры применяют процедуры перенормировки расчетных данных через определенное число шагов интегрирования. Такой подход позволяет адекватно моделировать процессы в атомных системах и неприемлем для анализа движения макрочастиц в лабораторной плазме, где диссипация, обусловленная столкновениями с атомами или молекулами газа, играет значительную роль. В отличие от МОД, метод броуновской динамики учитывает потери кинетической энергии частиц за счет сил трения, а равновесное состояние системы с постоянной температурой поддерживается за счет ее обмена энергией с термостатом. Данный обмен задается случайной силой  $F_{run}$ , согласованной с силами трения в рассматриваемой системе при помощи флюктуационно-диссипативной теоремы [26]. Особое значение МБД при моделировании динамики макрочастиц в пылевой плазме состоит в том, что уравнения Ланжевена позволяют

учесть взаимодействия пылевых частиц с «частицами термостата», которые поддерживают статистическое равновесие в рассматриваемой системе. Такое равновесие наблюдается во многих экспериментальных ситуациях, где регистрируются максвелловские распределения скоростей пылевых частиц. При этом МБД позволяет учитывать процессы обмена энергией между макрочастицами и внешней средой не только за счет их столкновений с молекулами окружающего газа, а также за счет других стохастических процессов, например, за счет флюктуаций заряда макрочастиц, которые приводят к росту их кинетической температуры  $T$  относительно температуры газа [31, 32].

Для моделирования равновесных микроскопических процессов в однородных протяженных облаках взаимодействующих макрочастиц наряду со случайными силами  $F_{run}$ , которые являются источником теплового движения частиц, в системе из  $N_p$  уравнений движения ( $N_p$  — количество частиц) учитывают силы парного межчастичного взаимодействия  $F_{int}$ :

$$M \frac{d^2 \mathbf{l}_k}{dt^2} = \sum_j F_{int}(l)|_{l=|\mathbf{l}_k - \mathbf{l}_j|} \frac{\mathbf{l}_k - \mathbf{l}_j}{|\mathbf{l}_k - \mathbf{l}_j|} - M v_{fr} \frac{d\mathbf{l}_k}{dt} + \mathbf{F}_{run}. \quad (16)$$

Здесь  $F_{int}(l) = \partial U / \partial l$ , а  $l = |\mathbf{l}_k - \mathbf{l}_j|$  — межчастичное расстояние. В условиях локального термодинамического равновесия среднее значение случайной силы  $\langle F_{run} \rangle = 0$ , а автокорреляционная функция,

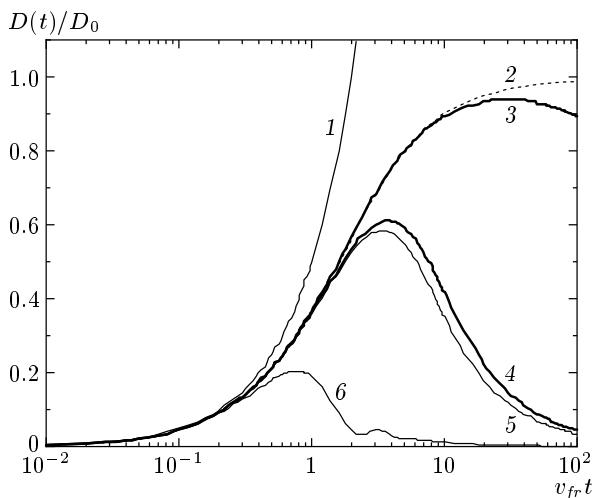
$$\langle F_{run}(0) F_{run}(t) \rangle = 6 T M v_{fr} \delta(t),$$

описывает дельта-коррелированный гауссов процесс [2, 5]. Здесь  $\delta(t)$  — дельта-функция. Для моделирования таких стохастических процессов могут быть использованы случайные приращения импульса макрочастиц,

$$p_{run}^x = (2 T v_{fr} \Delta t M)^{1/2} \psi,$$

где  $p_{run}^x$  — приращение импульса на одну степень свободы,  $\psi$  — некоторая случайная величина, распределенная по нормальному закону со среднеквадратичным отклонением, равным 1, а  $\Delta t$  — шаг интегрирования уравнений движения (16) по времени. Для корректного моделирования случайных сил шаг интегрирования  $\Delta t$  должен удовлетворять условию:  $\Delta t \ll \max(v_{fr}, \omega^*)$ .

Для изучения равновесных процессов в протяженных трехмерных пылевых системах обычно используют периодические граничные условия в направлениях осей  $x$ ,  $y$  и  $z$ , которые позволяют поддерживать постоянными число частиц и их среднюю



**Рис. 2.** Иллюстрация процессов массопереноса на малых временах наблюдения. Зависимость функции  $D(t)/D_0$  от  $t v_f r$ : 1 — баллистический режим ( $D(t) \propto t$ ), 2 — невзаимодействующие частицы (10), а также решение задачи для гармонического осциллятора при различных параметрах  $\xi^*$ : 3 — 0.033 (12a), 4 — 0.33 (12a), 5 — 0.38 (126), 6 — 2 (126)

кинетическую энергию. Такие условия реализуются путем моделирования 27-и идентичных кубических ячеек, пространственное положение частиц в которых поддерживается аналогичным их положению в центральной ячейке на каждый момент времени счета (см. рис. 2). При пересечении любой границы центральной ячейки частица возвращается обратно со скоростью выхода из объема, но с зеркально противоположной стороны. В такой постановке исследованию подлежит микроскопический транспорт частиц, вызываемый случайными силами, сбалансированными процессами диссипации и силами межчастичного взаимодействия. Для моделирования динамики макрочастиц в протяженных пылевых слоях, формирующихся, например, в приэлектродном слое плазмы емкостного высокочастотного разряда, используют периодические граничные условия только по двум выбранным направлениям (9 счетных ячеек), а по оставшейся оси обычно рассматривается действие сбалансированных внешних сил.

Процедура численного эксперимента состоит в том, что на начальный момент счета частицы располагаются случайным образом в пределах центральной ячейки, затем, благодаря взаимодействию между ними, начинается процесс самоорганизации. После достижения конфигурации системы частиц, равновесной для заданных параметров задачи, в па-

мять компьютера записываются данные о последовательных положениях частиц с целью их последующего анализа. Анализ динамических характеристик (скоростей и смещений частиц) проводят только для центральной ячейки.

При расчете сил межчастичного взаимодействия учитываются все частицы полной системы из 27-и (или 9-и, в случае решения двумерной задачи) ячеек, которые попадают в зону действия парного потенциала. При этом межчастичное взаимодействие часто обрезается на некотором расстоянии  $l = L_{cut}$ , которое определяется условием слабого возмущения электронейтральности системы. Для систем с экранированным кулоновским потенциалом это условие можно представить в виде

$$\frac{Z_{L_{cut}}}{Z} \sim \left( \frac{L_{cut}}{l_p} \right)^3 \exp \left( -\frac{L_{cut}}{\lambda} \right) \ll 1,$$

где  $Z_{L_{cut}}$  — величина нескомпенсированного заряда в моделируемой системе. Откуда размер счетной ячейки  $L$  для корректного моделирования динамики макрочастиц в системах с экранированным кулоновским потенциалом определяется условием  $L \gg \lambda$  [33]. Для проведения большинства расчетов используют такие параметры задачи, при которых длина  $L_{cut}$  не превышает  $(4-8)l_p$ , что соответствует числу «независимых» частиц (в центральной ячейке) от 64 до 512. При этом обрезание потенциала взаимодействия не приводит к существенной погрешности при параметрах экранирования  $\kappa = l_p/\lambda > 1$ . При моделировании систем с  $\kappa < 1$  необходим учет и более дальних взаимодействий, что может быть реализовано с помощью соответствующего алгоритма, суть которого состоит в моделировании бесконечной системы путем построения большого числа трансляционных ячеек [29]. Данный метод разработан для изучения свойств кристаллов и далеко не всегда приемлем для моделирования динамики жидкостных систем, где отсутствует дальний порядок в расположении частиц.

Следует подчеркнуть, что обрезание потенциала на радиусе  $L_{cut}$  является необходимым условием для устойчивого состояния моделируемой системы, содержащей большое, но все же конечное число частиц. В ином случае в этой системе всегда можно найти такую точку, по одну сторону от которой будет находиться большее число частиц, чем по другую. Таким образом, действие электрических сил в этой точке окажется нескомпенсированным, а рассматриваемая система частиц неустойчивой. Поскольку радиус обрезания потенциала конечен, моделируемые системы имеют избыточную положительную энергию

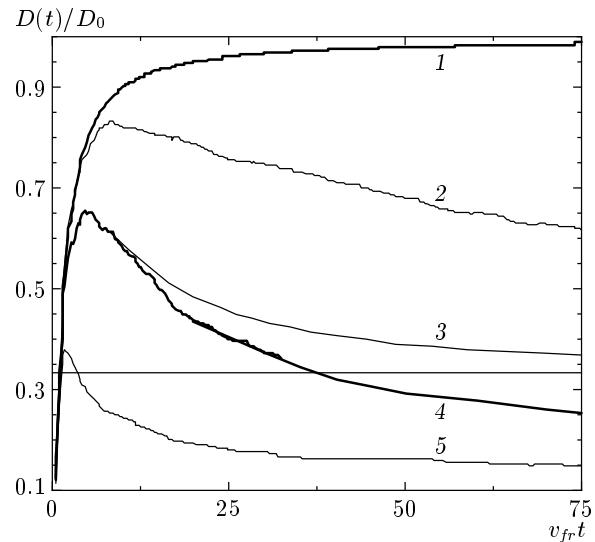
(благодаря нескомпенсированному заряду) [33]. При этом рассматриваемая задача эквивалентна случаю удержания частиц в ловушке, созданной внешними электрическими полями или другими потенциальными силами, которые обеспечивают нахождение постоянного числа частиц  $N_p$  внутри «сосуда» объемом  $V$  и поддерживают в нем давление  $P$ .

#### 4. РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ЭВОЛЮЦИИ ПРОЦЕССОВ МАССОПЕРЕНОСА МАКРОЧАСТИЦ НА МАЛЫХ ВРЕМЕНАХ НАБЛЮДЕНИЯ В ДВУМЕРНЫХ И ТРЕХМЕРНЫХ СИСТЕМАХ

Исследование процессов массопереноса проводилось для двух случаев: для однородной трехмерной системы и для квазидвумерной системы, моделирующей протяженный пылевой слой. Величина параметра масштабирования варьировалась в пределах от  $\xi \approx 0.04$  до  $\xi \approx 3.6$ , типичных для условий экспериментов в плазме газовых разрядов. Величина эффективного параметра  $\Gamma^*$  менялась от 10 до 120.

В случае трехмерной задачи основные расчеты были выполнены для 125 независимых частиц в центральной счетной ячейке, при этом полное число частиц при расчете парного взаимодействия достигало 3000. Параметр экранирования задавался равным  $\kappa = 2.4$  и  $\kappa = 4.8$ . Выбор величины  $\lambda$  определялся условием корректного моделирования динамики таких систем ( $L \gg \lambda$ ). 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 вычисления для 512 независимых частиц при  $L_{cut} = 7l_p$  в системах с  $\Gamma^* = 1.5, 17.5, 25, 49$  и 92. Разброс между результатами данных расчетов не превышал численной ошибки и находился в пределах  $\pm(1\text{--}3)\%$ .

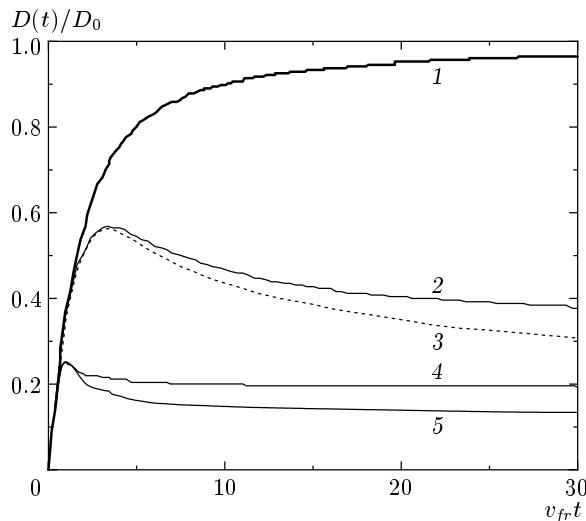
Для моделирования протяженного однородного слоя макрочастиц периодические граничные условия задавались в двух выбранных направлениях ( $x$  и  $y$ ), а в направлении оси  $z$  учитывалось действие силы тяжести  $Mg$ , скомпенсированное линейным электрическим полем  $E_z = \beta z$ , где  $\beta$  — величина градиента электрического поля ( $eZ_p E_z = Mg$ ). Число независимых частиц в счетной ячейке  $N_p$  варьировалось от 50 до 1000, параметр экранирования  $\kappa$  задавался равным 2 и 4. В зависимости от числа частиц длина обрезания потенциала  $L_{cut}$  менялась от  $5l_p$  до  $25l_p$ . Величина градиента  $\beta$  электрическо-



**Рис. 3.** Зависимости отношения  $D(t)/D_0$  от  $v_f r t$  для невзаимодействующих частиц (1), а также для трехмерных систем ( $\kappa = 4.8$ ) при различных значениях  $\xi$  и  $\Gamma^*$ : 2 —  $\xi = 0.04$ ,  $\Gamma^* = 77$ ; 3 —  $\xi = 0.14$ ,  $\Gamma^* = 30$ ; 4 —  $\xi = 0.14$ ,  $\Gamma^* = 77$ ; 5 —  $\xi = 0.41$ ,  $\Gamma^* = 77$

го поля  $E_z$ , ограничивающего пылевой слой в направлении оси  $z$ , варьировалась от  $\sim 100$  В/см<sup>2</sup> до  $\sim 10^{-2}$  В/см<sup>2</sup>. Какой-либо ощутимой зависимости динамики макрочастиц от величины градиента  $\beta$  поля и количества независимых частиц  $N_p$ , принятых для расчетов, в процессе моделирования обнаружено не было.

Зависимости функции  $D(t)/D_0$  от времени (в обратных временах торможения  $v_f^{-1}$ ), полученные путем численного моделирования для трехмерных и двумерных систем, представлены на рис. 3, 4 для различных параметров  $\xi$  и  $\Gamma^*$ . Кривая 1 на этих рисунках является точным решением уравнения Ланжевена при отсутствии взаимодействия между частицами (10). Легко увидеть, что при наличии взаимодействия поведение функции  $D(t)$  на временах наблюдения  $t v_f \ll 1$  соответствует баллистическому режиму движения частиц. Затем функция  $D(t)$  достигает максимума  $D_{max}$ , значение которого можно использовать для анализа процессов массопереноса на малых временах наблюдения. При этом ни величина  $D_{max}/D_0$ , ни положение  $t_{max} v_f$  максимума отношения  $D(t)/D_0$  практически не зависят от параметра  $\Gamma^*$  и определяются величиной параметра масштабирования  $\xi$  как для трехмерной задачи, так и для моделируемой двумерной системы. Данное обстоятельство было отмечено ранее в работах [18, 20].

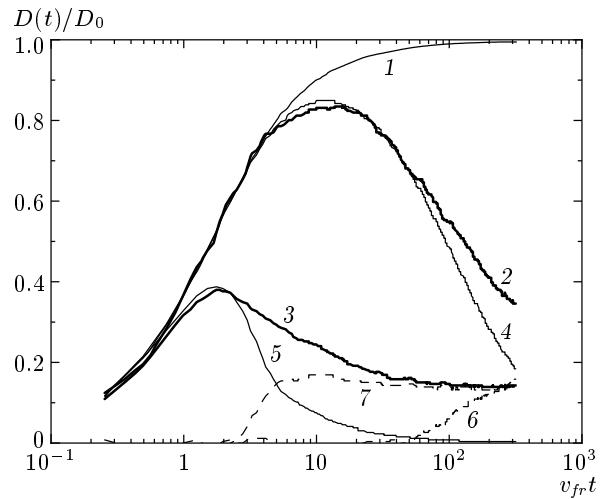


**Рис. 4.** Зависимости отношения  $D(t)/D_0$  от  $tv_{fr}$  для невзаимодействующих частиц (1), а также для квазидвумерных систем ( $\kappa = 2$ ) при различных значениях  $\xi$  и  $\Gamma^*$ : 2 –  $\xi = 0.93$ ,  $\Gamma^* = 27$ ; 3 –  $\xi = 0.93$ ,  $\Gamma^* = 56$ ; 4 –  $\xi = 0.23$ ,  $\Gamma^* = 27$ ; 5 –  $\xi = 0.23$ ,  $\Gamma^* = 56$

С ростом времени  $t \rightarrow \infty$  функция  $D(t)$  стремится к своему постоянному значению  $D = \lim_{t \rightarrow \infty} D(t)$ , которое соответствует стандартному определению коэффициента диффузии частиц как одного из основных коэффициентов переноса.

Сравнение эволюции процессов массопереноса в анализируемых жидкостных ( $\Gamma^* < 102$ ) трехмерных и квазидвумерных протяженных системах с поведением функции  $D(t)/D_0$  для гармонического осциллятора в узлах кристаллической решетки проиллюстрировано на рис. 5–7. Соотношение между параметром масштабирования  $\xi = \omega^*/v_{fr}$  и отношением  $\xi^* = \omega_c/v_{fr}$ , представленное в подписях к этим рисункам, для трехмерных задач определяется как  $\xi^*/\xi = 2$ , а для квазидвумерных систем –  $\xi^*/\xi \approx 1.63$ . Для анализа трехмерной задачи в качестве характерной частоты колебаний частиц использовалась величина  $\omega_c = \omega_{bcc}$  (14), соответствующая частоте колебаний макрочастиц в объемно-центрированной кубической решетке. Характерная частота колебаний частиц в двумерной решетке гексагонального типа  $\omega_h = \omega_h \approx 1.15\omega_{bcc}$  была получена путем подгонки результатов численного решения квазидвумерной задачи и аналитических решений (12a), (12b). Данная частота хорошо соответствует приближению (15), в силу которого величина  $\omega_h \approx 1.16\omega_{bcc}$ .

Было обнаружено, что во всех анализируемых

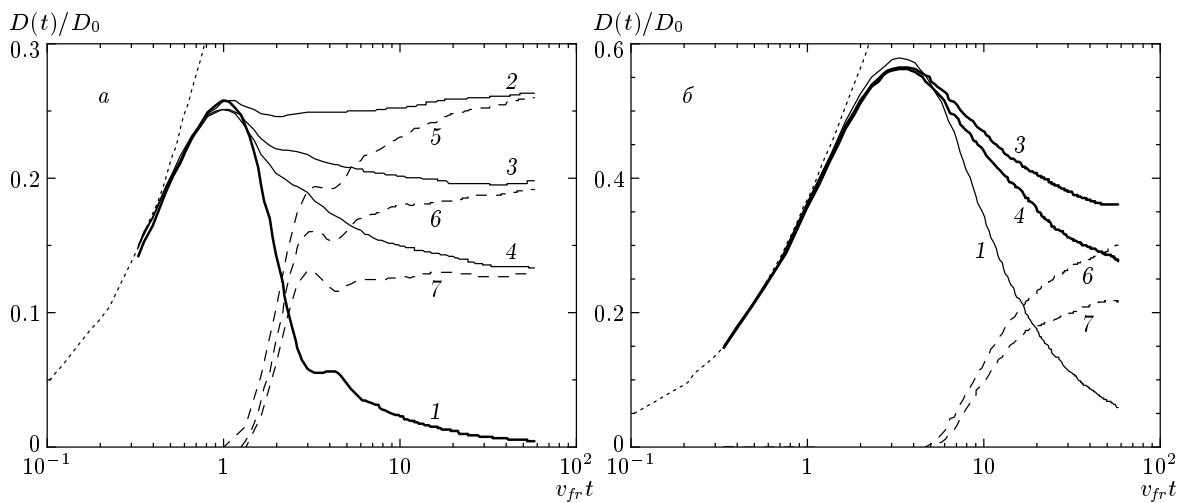


**Рис. 5.** Зависимости  $D(t)/D_0$  от  $tv_{fr}$  для невзаимодействующих частиц (1), для трехмерных систем ( $\kappa = 4.8$ ) при  $\Gamma^* = 80$ ,  $\xi = 0.04$  (2), 0.41 (3), а также для гармонического осциллятора с  $\xi^* = 0.08$  (4), 0.82 (5). Кривые 6 и 7 представляют собой разницу между численным решением трехмерной задачи (кривыми 2 и 3) и решением, полученным для гармонического осциллятора с соответствующим  $\xi^*$  (соответственно кривыми 4 и 5)

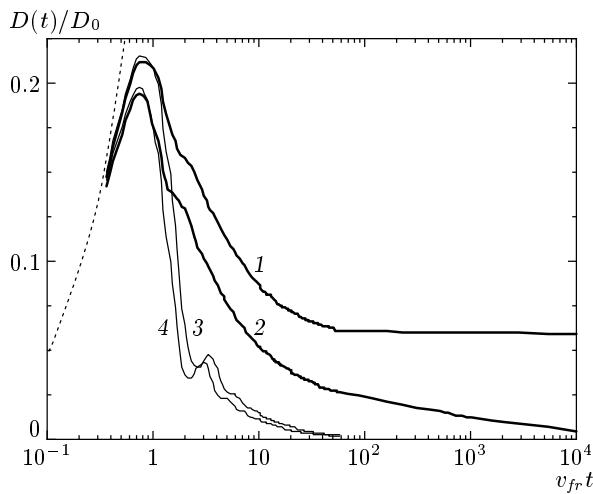
случаях на временах наблюдения  $tv_{fr} \leq 2/\xi^*$  функции  $D(t)$ , рассчитанные для протяженных систем, хорошо соответствовали решениям (12a), (12b), полученным для гармонического осциллятора. Таким образом, время активизации скачков  $t_a$  (среднее время «оседлой жизни» частиц между скачками) в моделируемых системах практически не зависело от температуры и определялось частотой колебания частиц в «оседлом» состоянии:  $t_a \approx 2/\omega_c$ .

Различия между гармоническим решением (кривая 4) и результатами расчета для протяженной кристаллической квазидвумерной системы (кривая 2) с параметрами  $\xi = 1.3$  и  $\Gamma^* = 115$  показаны на рис. 7. Легко увидеть, что численное решение для протяженной кристаллической системы стремится к нулю существенно медленнее, чем аналитическое решение для идеального гармонического осциллятора. Данное обстоятельство может быть связано с возбуждением более низких мод колебаний решетки, обусловленных влиянием дальних соседей в протяженной системе.

Зависимость величины максимума  $D_{max}$  функции  $D(t)$  и его положения  $t_{max}v_{fr}$  от параметра  $\xi^*$  приведена на рис. 8 для протяженных систем макрочастиц и для одномерного осциллятора. Поскольку уравнения (12a), (12b) не допускают аналитического



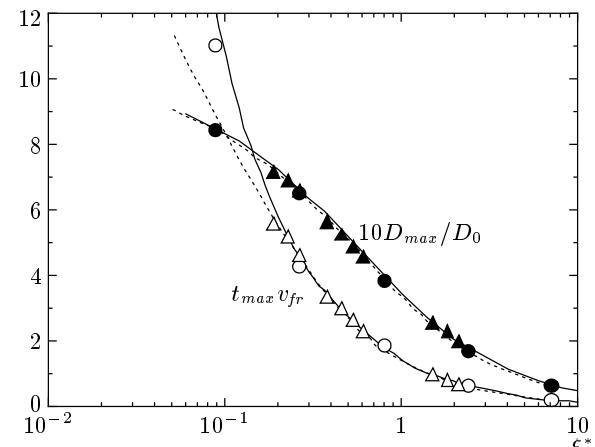
**Рис. 6.** Зависимости  $D(t)/D_0$  от  $tv_{fr}$  для квазидвумерных систем ( $\kappa = 4$ ) при  $\xi = 0.93$  (а),  $0.23$  (б) для  $\Gamma^* = 12$  (2),  $27$  (3),  $56$  (4). Кривые 5, 6 и 7 представляют собой разницу между численным решением квазидвумерной задачи (кривыми 2, 3 и 4) и решением, полученным для гармонического осциллятора (кривая 1). Отношение  $D(t)/D_0$  для невзаимодействующих частиц обозначено пунктирной линией



**Рис. 7.** Зависимости  $D(t)/D_0$  от  $tv_{fr}$  для квазидвумерных систем ( $\kappa = 4$ ) при  $\xi = 1.14$ ,  $\Gamma^* = 100$  (1) и  $\xi = 1.3$ ,  $\Gamma^* = 115$  (2). Кривые 3 и 4 получены для гармонического осциллятора с соответствующими  $\xi^*$ . Отношение  $D(t)/D_0$  для невзаимодействующих частиц обозначено пунктирной линией

решения, решение этих уравнений проводилось методом простых итераций. Эмпирическая аппроксимация численных данных удобными аналитическими функциями дает для зависимости величины максимума  $D_{max}$  от параметра  $\xi^*$  следующее соотношение:

$$D_{max} \approx D_0 / (1 + 2\xi^*), \quad (17)$$



**Рис. 8.** Зависимости  $D_{max}/D_0$  (•, ▲) и  $t_{max}v_{fr}$  (○, △) от величины  $\xi^*$  для квазидвумерной ( $\triangle, \blacktriangle$ ) и трехмерной ( $\circ, \bullet$ ) задач. Сплошные линии — решение задачи для гармонического осциллятора, пунктирные — аппроксимации (17) и (18), соответственно, для  $D_{max}/D_0$  и  $t_{max}v_{fr}$

а для положения  $t_{max}$  этого максимума:

$$t_{max}v_{fr} \approx \frac{4\sqrt{2}}{\pi(1 + 8\sqrt{2}\xi^*)}. \quad (18)$$

Предлагаемые соотношения с точностью до 5 % описывают данные моделирования (см. рис. 7) для двумерных и трехмерных систем, а также численное решение задачи движения одномерного осциллято-

ра на участке изменения  $\xi^*$  от 0.2 до 10. Таким образом, в ходе численных исследований было получено, что процессы массопереноса на малых временах наблюдения определяются величиной параметра  $\xi^* = \omega_c/v_{fr}$  (величина и положение максимума функции  $D(t)/D_0$  зависят только от величины параметра  $\xi^*$ , и при равных  $\xi^*$  имеют одни и те же значения как для двумерных, так и для трехмерных систем). Величина же коэффициента диффузии макрочастиц  $D = \lim_{t \rightarrow \infty} D(t)$  зависит от параметров  $\xi = \omega^*/v_{fr}$  и  $\Gamma^*$  (см. (8)), а, соответственно, с ростом времени динамические характеристики системы (функция  $D(t)/D_0 \rightarrow D/D_0$ ) перестают определяться характерной частотой колебания макрочастиц  $\omega_c$  в узлах кристаллической решетки этой системы в ее твердом состоянии.

Эволюция исследуемых функций  $D(t)$  иллюстрирует динамику приближения моделируемой системы к состоянию статистического равновесия в случае ее малых отклонений от этого состояния. Расчеты показывают, что систему взаимодействующих частиц можно характеризовать постоянными значениями коэффициентов переноса только на временах  $t \gg 2\omega_c^{-1}$ , в отличие от системы броуновских частиц, для которых функция  $D(t) \rightarrow D_0$  при  $t \gg v_{fr}^{-1}$ . Анализ поведения  $D(t)$  для малых времен наблюдения может быть полезен как для самостоятельной оценки параметров  $\xi$  или  $\xi^*$ , которые содержат информацию о потенциале межчастичного взаимодействия, так и при восстановлении температуры  $T$  макрочастиц, если разрешение измерительного прибора не допускает корректного определения их спектра скоростей.

В заключение отметим, что разница, обнаруженная в отношении  $\xi^*/\xi$  для случая двумерных и трехмерных систем, позволяет объяснить заниженные (примерно на 40–50 %) значения параметров масштабирования  $\xi \sim 0.4–0.5$ , которые были получены путем сравнения результатов моделирования трехмерной задачи и данных экспериментальных измерений величины  $D_{max}$  максимума функции  $D(t)$  для единственного пылевого слоя, формирующегося в приэлектродной области высокочастотного разряда, в работе [34]. Отметим, что величина параметра  $\xi$ , измеренная двумя другими способами (путем анализа парных корреляционных функций  $g(l)$  и коэффициентов диффузии  $D$  макрочастиц), с точностью до 5 % соответствовала величине 0.66. Ошибка состояла в том, что при обращении результатов измерений ( $D_{max}$  и  $t_{max}$ ) предполагалось, что отношение  $\xi^*/\xi$  для пылевого слоя равняется 2, как и для случая трехмерных систем (соответственно, характер-

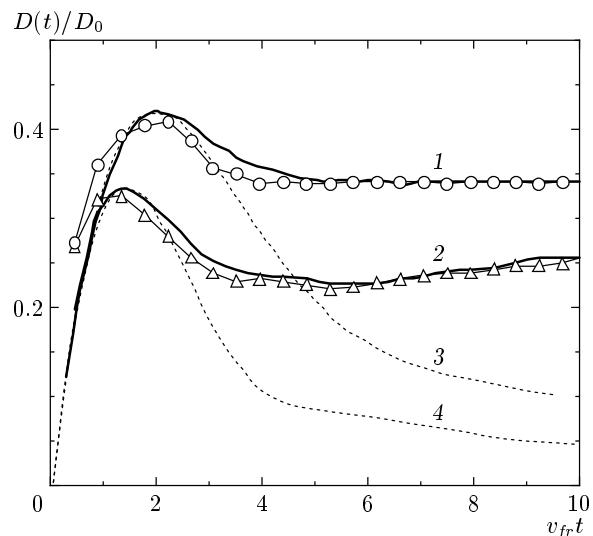


Рис. 9. Данные измерений функции  $D(t)/D_0$  для трехмерных пылевых структур в разряде постоянного тока,  $\xi \approx 0.36$ ,  $\Gamma^* \approx 20$  (1), для пылевого слоя,  $\xi \approx 0.66$ ,  $\Gamma^* \approx 35$ , в приэлектродной области высокочастотного разряда (2) [34]. Решение задачи для гармонического осциллятора при  $\xi^* = 2\xi$  в случае трехмерного облака макрочастиц (3), при  $\xi^* \approx 1.63\xi$  для квазидвумерного пылевого слоя (4). Результаты численного моделирования функции  $D(t)/D_0$  для двумерной ( $\xi = 0.66$ ,  $\Gamma^* = 35$ ) и трехмерной ( $\xi = 0.36$ ,  $\Gamma^* = 20$ ) жидкостных систем показаны жирными линиями

ная частота  $\omega_h$  в двумерной решетке гексагонального типа полагалась приблизительно равной  $\sqrt{2}\omega_{bcc}$ . Для иллюстрации на рис. 9 приведены данные измерений функции  $D(t)/D_0$  для трехмерных пылевых структур в тлеющем разряде постоянного тока (кривая 1) и для пылевого слоя, формирующегося в приэлектродной области высокочастотного разряда (кривая 2), представленные в работе [34]. Значения параметров  $\xi$  и  $\Gamma^*$ , восстановленных в этой работе из измерений  $g(l)$  и  $D$ , для условий данных экспериментов приведены в подписи к рисунку. Легко увидеть, что поведение экспериментальных кривых  $D(t)/D_0$  на временах наблюдения  $tv_{fr} \leq 2/\xi^*$  хорошо согласуются с решениями (12а), полученными для гармонического осциллятора при значениях  $\xi^* = 2\xi$  (в случае трехмерного облака макрочастиц) и при  $\xi^* \approx 1.63\xi$  (для квазидвумерного пылевого слоя). На рис. 9 также представлены функции  $D(t)/D_0$ , полученные в результате численного моделирования квазидвумерной структуры (с параметрами  $\xi = 0.66$ ,  $\Gamma^* = 35$ ) и трехмерной жидкостной системы (с параметрами  $\xi = 0.36$ ,  $\Gamma^* = 20$ ). Различия на начальном

участке представленных кривых связаны с шумами, вносимыми процедурой измерения [34].

## 5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе представлены результаты численного моделирования процессов массопереноса на малых временах наблюдения для протяженных квазидвумерных и трехмерных неидеальных диссипативных систем макрочастиц, взаимодействующих посредством экранированного кулоновского потенциала. Расчеты проводились в широком диапазоне параметров, соответствующих условиям экспериментов в лабораторной пылевой плазме. Было получено, что эволюция среднеквадратичного смещения частиц на малых временах наблюдения соответствует колебаниям кристаллической решетки с частотой, пропорциональной второй производной парного потенциала межчастичного взаимодействия. Данные результаты хорошо соответствуют теории скачков, построенной на аналогиях между жидким и твердым состояниями среды. Приведены оценки для характерных частот колебаний частиц ( $\omega_c$ ) в трехмерных кубических решетках гранецентрированного типа и в двумерных гексагональных кристаллических структурах. Показано, что данные частоты отвечают за среднее время оседлой жизни частиц ( $t_a \approx 2/\omega_c$ ) в неидеальных жидкостных системах и определяют протекание процессов массопереноса на временах наблюдения  $t < t_a$ .

Представленные результаты можно использовать для пассивной диагностики параметров потенциала межчастичного взаимодействия в слабо дисперсионных пылевых структурах, а также для численного исследования протекания быстрых процессов при физически малых временах, не достаточных для их описания в рамках макроскопической кинетики.

Работа выполнена при частичной поддержке РФФИ (грант № 04-02-16362), фонда INTAS (грант № 01-0391), фонда CRDF (грант № RU-P2-2593-MO-04), Программы Президиума РАН и Фонда содействия отечественной науке.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Я. И. Френкель, *Кинетическая теория жидкостей*, Наука, Ленинград (1975).

2. *Photon Correlation and Light Beating Spectroscopy*, ed. by H. Z. Cummins and E. R. Pike, Plenum, New York (1974).
3. R. Balescu, *Equilibrium and Nonequilibrium Statistical Mechanics*, Wiley Interscience, Chichester (1975).
4. N. K. Ailawadi, Phys. Rep. **57**, 241 (1980).
5. А. А. Овчинников, С. Ф. Тимашев, А. А. Белый, *Кинетика диффузионно-контролируемых химических процессов*, Химия, Москва (1986).
6. H. M. Thomas and G. E. Morfill, Nature (London) **379**, 806 (1996).
7. А. А. Жуховицкий, Л. А. Швацман, *Физическая химия*, Металлургия, Москва (1987).
8. Д. К. Белащенко, *Явления переноса в жидкостях металлах и полупроводниках*, Атомиздат, Москва (1970).
9. Я. И. Френкель, *Введение в теорию металлов*, Наука, Москва (1958).
10. А. В. Горшков, Прикладная физика № 6, 65 (1999).
11. Г. Г. Петрик, З. Р. Гаджиева, Б. Е. Тодоровский, Химия и компьютерное моделирование. Бутлеровские сообщения. Приложение к специвыпуску № 10, 301 (2002).
12. D. A. Young and B. J. Alder, Phys. Rev. A **3**, 364 (1971).
13. J. Chu and L. I., Phys. Rev. Lett. **72**, 4009 (1994).
14. H. Thomas, G. Morfill, V. Demmel et al., Phys. Rev. Lett. **73**, 652 (1994).
15. A. Melzer, T. Trittenberg, and A. Piel, Phys. Lett. A **191**, 301 (1994).
16. А. П. Нефедов, О. Ф. Петров, В. И. Молотков и др., Письма в ЖЭТФ **72**, 313 (2000).
17. А. М. Липаев, В. И. Молотков, А. П. Нефедов и др., ЖЭТФ **112**, 2030 (1997).
18. O. S. Vaulina and S. V. Vladimirov, Plasma Phys. **9**, 835 (2002).
19. O. S. Vaulina, S. V. Vladimirov, O. F. Petrov et al., Phys. Rev. Lett. **88**, 245002 (2002).
20. O. S. Vaulina, I. E. Dranzhevsky, and O. F. Petrov, in *Contributions of 31<sup>st</sup> EPS Conf. Plasma Phys.*, London (2004), Vol. 286, p. 1.039.
21. Е. М. Лишшиц, Л. П. Питаевский, *Физическая кинетика*, Наука, Москва (1979).

- 22.** N. A. Fuchs, *The Mechanics of Aerosols*, Dover, New York (1964).
- 23.** Р. Додд, Дж. Эйлбек, Дж. Гиббон, Х. Моррис, *Солитоны и нелинейные волновые уравнения*, Мир, Москва (1988).
- 24.** А. П. Нефедов, О. Ф. Петров, С. А. Храпак и др., ТВТ **36**, 141 (1998).
- 25.** V. Fortov, A. Nefedov, V. Vladimirov et al., Phys. Lett. A **258**, 305 (1999).
- 26.** Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский, *Статистическая физика*, ч. 2, Наука, Москва (1978).
- 27.** О. С. Ваулина, С. А. Храпак, ЖЭТФ **119**, 264 (2001).
- 28.** M. O. Robbins, K. Kremer, and G. S. Grest, J. Chem. Phys. **88**, 3286 (1988).
- 29.** S. Hamaguchi, R. T. Farouki, and D. H. E. Dubin, Phys. Rev. E **56**, 4671 (1997).
- 30.** X. H. Zheng and J. C. Earnshaw, *Advances in Dusty Plasma*, ed. by P. K. Shukla, D. A. Mendis, and T. Desai, World Scientific, Singapore (1997).
- 31.** В. В. Жаховский, В. И. Молотков, А. П. Нефедов и др., Письма в ЖЭТФ **66**, 392 (1997).
- 32.** O. S. Vaulina, S. A. Khrapak, O. F. Petrov, and A. P. Nefedov, Phys. Rev. E **60**, 5959 (1999).
- 33.** R. T. Farouki and S. Hamaguchi, Appl. Phys. Lett. **61**, 2973 (1992).
- 34.** О. С. Ваулина, О. Ф. Петров, В. Е. Фортов и др., Физика плазмы **29**, 698 (2003).