

# ДИНАМИКА ФОРМИРОВАНИЯ СКАЧКОВ В СИСТЕМАХ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ

*И. И. Лисина\**, *О. С. Ваулина\*\**

*Объединенный институт высоких температур Российской академии наук  
125412, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 10 марта 2017 г.

Представлены результаты численных исследований динамики двух одноименно заряженных частиц во внешнем электрическом поле. Выполнен подробный анализ процессов формирования «скачков» (т. е. спонтанной смены позиций) частиц в устойчивом квазиравновесном состоянии системы. Обнаружено, что с ростом температуры частиц происходит существенное изменение как динамических, так и структурных свойств моделируемых систем вблизи некоторого критического параметра неидеальности.

DOI: 10.7868/S0044451017080193

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Вопросы о применимости теории скачков к описанию процессов массопереноса в жидкости или в твердом теле (кристаллической структуре) обсуждаются на протяжении нескольких последних десятилетий [1–5] и вызывают значительный интерес в различных областях науки и техники (физике плазмы, биологии, физике полимеров и т. д.) [1–9]. В рамках данной теории считается, что блуждание некоторой «активной» частицы по узлам реальной (для твердого тела) или воображаемой (в случае жидкости) кристаллической решетки после большого числа скачков описывается уравнением диффузии с коэффициентом диффузии  $D$ , который имеет экспоненциальную зависимость от температуры  $T$  частиц:

$$D = D_0 \exp(-Q/T), \quad (1)$$

где  $D_0$  — коэффициент диффузии, а величина  $Q$  определяется энергией активации скачков. Применимость такого подхода неоднократно обсуждалась в литературе [2–9]. Проверка корректности аппроксимации (1) для сильно коррелированных жидкостных сред с различными типами взаимодействия между частицами системы была выполнена в численных работах [10–12]. Результаты упомянутых ра-

бот показывают, что для моделируемых систем с эффективным параметром неидеальности  $\Gamma^*$  в диапазоне от  $\Gamma_c^*/2$  до  $\Gamma_c^*$  соотношение (1) хорошо описывает температурную зависимость коэффициента диффузии частиц; здесь  $\Gamma_c^*$  — величина параметра  $\Gamma^*$  на линии плавления кристаллической объемно-центрированной решетки. (Для систем с кулоновским взаимодействием величина  $\Gamma^* \equiv \Gamma = Q^2/(Tl_d)$ ,  $Q$  — заряд частиц,  $l_d$  — среднее межчастичное расстояние,  $T$  — температура частиц в энергетических единицах.)

Тем не менее непосредственное наблюдение скачков даже в случае моделируемых многочастичных (протяженных) систем весьма затруднительно. Что касается реальных экспериментов (например, в пылевой плазме) с малым количеством частиц, то зачастую спонтанная смена позиций этих частиц происходит за время, значительно меньшее доступного физически, что вызывает трудности для корректной фиксации зависимости количества таких скачков от времени современными средствами диагностики. Само присутствие скачков в монослойной радиальной системе, состоящей из семи заряженных пылевых частиц, недавно наблюдалось как при численном моделировании, так и в реальных экспериментах, выполненных в плазме ВЧ-разряда [13].

В настоящей работе динамика формирования скачков в системах заряженных частиц рассматривается на примере двух частиц, взаимодействующих с кулоновским потенциалом  $\varphi = Q/l$  (где  $l$  — расстояние между частицами) для условий близких к условиям лабораторных экспериментов в газоразрядной

\* E-mail: irina.lisina@mail.ru

\*\* E-mail: olga.vaulina@bk.ru

плазме. Анализ таких малоразмерных двухчастичных систем позволяет получить качественную картину особенностей динамики скачков в протяженных системах, поскольку большинство из существующих теоретических и численных моделей, используемых для исследования физических характеристик неидеальных сред, опирается на приближение парного взаимодействия.

## 2. РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Численное исследование структурных и динамических свойств систем, состоящих из двух идентичных заряженных частиц массой  $M$  и зарядом  $Q$ , взаимодействующих с кулоновским потенциалом, выполнялось методом молекулярной динамики Ланжевена. Техника моделирования подробно описана в работах [5, 6].

Заряженные частицы находились в поле силы тяжести  $Mg$ , скомпенсированном внешним электрическим полем  $E(r, z)$  ловушки с цилиндрической симметрией с радиальной составляющей  $E_r = \beta_r r$  и вертикальной составляющей  $E_z = E_z^0 + \beta_z z$ . Здесь  $r \equiv (x^2 + y^2)^{1/2}$  — радиальная координата,  $z$  — вертикальная координата (по оси, параллельной силе тяжести),  $\beta_r$  и  $\beta_z$  — величины градиентов электрического поля, а значение  $E_z^0$  определяется балансом сил, действующих в системе. Отношение величин градиентов внешнего электрического поля  $\beta_r/\beta_z$  изменялось от 1.5 до 3. В соответствии с теорией [14–17] для случая двух идентичных частиц при  $\beta_r > \beta_z$  наблюдалась их вертикальная конфигурация (см. рис. 1).

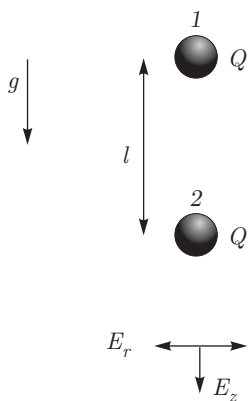


Рис. 1. Вертикальная конфигурация двух взаимодействующих частиц в электрическом поле ловушки  $E = E(z, r)$  с цилиндрической симметрией

Величина параметра масштабирования  $\xi = \omega/\nu$  варьировалась в диапазоне от  $\approx 1/3$  до 3, характерном для условий лабораторных экспериментов в газоразрядной плазме [5, 6]; здесь  $\omega = Q(l_d^3 M)^{-1/2}$ , а  $\nu$  — коэффициент трения частицы за счет ее столкновений с нейтральными частицами окружающего газа. Шаг интегрирования составлял  $\Delta t \approx (80 \max[\omega; \nu])^{-1}$ , время расчетов после установления равновесного состояния  $t_c$  системы варьировалось в пределах от  $\sim 10^5/\nu$  до  $\sim 10^6/\nu$ .

В результате численных исследований наблюдалось формирование «скачков» частиц, заключающихся в спонтанной смене их позиций в процессе существования устойчивой вертикальной конфигурации системы.

Траектории частиц за время  $t \approx 1000/\nu$  и их вертикальные смещения за время  $t \approx 10000/\nu$  для цилиндрической ловушки с  $\beta_r/\beta_z = 1.5$  при различных параметрах неидеальности  $\Gamma = Q^2/(Tl_d)$  показаны на рис. 2. Скачок в системе заряженных частиц — это процесс, имеющий случайную природу. Для его возникновения необходимы удобное расположение, стечение направлений движения и абсолютных значений скоростей частиц. Следует отметить, что спонтанная смена позиций частиц в системе, состоящей из двух частиц, обычно происходит за время, много меньшее  $t_l \approx (\max[\omega; \nu])^{-1}$ , а их частота  $N/(vt) \ll 1$ ; здесь  $N/(vt)$  — количество скачков в единицу времени ( $N(t)/t \approx \text{const}$ ) за время торможения, равное  $1/\nu$ . При этом величина  $N/(vt)$  существенно уменьшается с ростом параметра  $\Gamma$  и/или с ростом коэффициента трения частиц  $\nu$  (см. рис. 3). Указанные обстоятельства могут привести к трудностям корректной фиксации количества таких скачков современными средствами диагностики в условиях реальных экспериментов.

Было обнаружено, что с ростом температуры частиц (с уменьшением параметра  $\Gamma$ ) происходило существенное изменение структурных и динамических свойств моделируемой системы вблизи некоторого критического параметра  $\Gamma \approx \Gamma_0$ , см. табл. 1.

Так, например, функциональная зависимость количества скачков  $N/t$  от параметра неидеальности,  $N/t(\Gamma)$ , как в области  $\Gamma > \Gamma_0$ , так и в области  $\Gamma < \Gamma_0$  имела выраженный экспоненциальный характер (см. рис. 3), однако с разными коэффициентами такой аппроксимации:

$$\frac{N}{vt} \approx A_c \exp\left(-\frac{B_c \Gamma}{\Gamma_0}\right) \quad \text{при } \Gamma > \Gamma_0, \quad (2a)$$

$$\frac{N}{vt} \approx A_l \exp\left(-\frac{B_l \Gamma}{\Gamma_0}\right) \quad \text{при } \Gamma < \Gamma_0. \quad (2b)$$

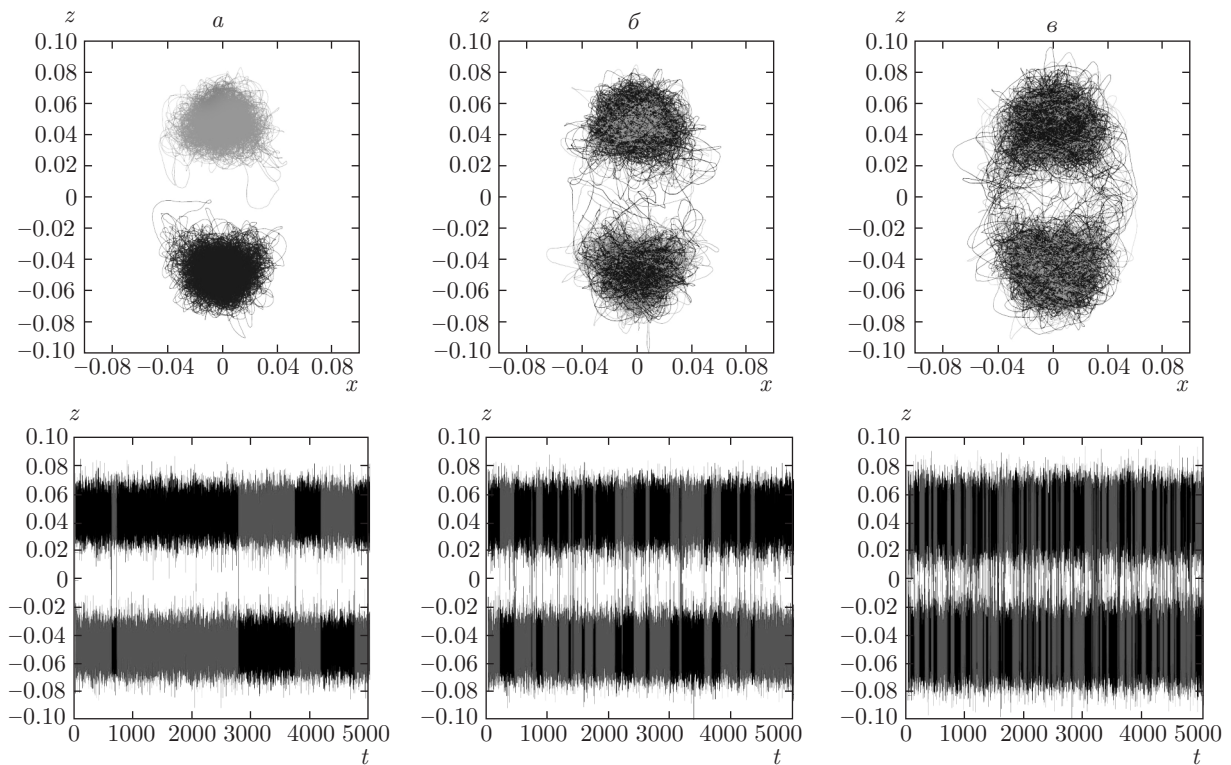


Рис. 2. Иллюстрации траекторий частиц за время  $t \approx 1000/\nu$  (верхний ряд) и их вертикальных смещений за время  $t \approx 10000/\nu$  (нижний ряд) для системы при  $\beta_r/\beta_z = 1.5$  и  $\Gamma = 40$  (а), 32 (б), 24 (в). Траектории частиц отмечены разными цветами

Таблица 1. Параметр  $\Gamma_0$  и коэффициенты аппроксимаций (2а), (2б) для  $\xi = 1$  при различных отношениях  $\beta_r/\beta_z$

$\beta_r/\beta_z$	$\Gamma_0$	$B_c$	$B_l$	$A_c$	$A_l$
3	$3.750 \pm 0.125$	$2.14 \pm 0.05$	$1.69 \pm 0.05$	0.41	0.265
2	$8.50 \pm 0.25$	$2.95 \pm 0.05$	$2.48 \pm 0.05$	0.395	0.23
1.5	$20.8 \pm 0.5$	$4.07 \pm 0.05$	$3.56 \pm 0.05$	0.26	0.163

Коэффициенты аппроксимаций (2а), (2б) представлены в табл. 1 для  $\xi = 1$  при различных отношениях  $\beta_r/\beta_z$ . Зависимости коэффициентов  $B_c = -\Gamma_0 \ln(N/(\nu t)/A_c)/\Gamma$  и  $B_l = -\Gamma_0 \ln(N/(\nu t)/A_l)/\Gamma$ , найденных путем обработки численных данных  $N/t$ , от отношения  $\Gamma/\Gamma_0$  для  $\xi = 1$  представлены на рис. 4.

Зависимости коэффициентов  $B_c$  и  $B_l$  от  $\Gamma/\Gamma_0$  для случая  $\beta_r/\beta_z = 2$  при разных параметрах масштабирования  $\xi$  показаны на рис. 5. Легко увидеть, что значения  $B_c$  и  $B_l$  изменяются в пределах численной ошибки и соответствуют значениям, указанным в табл. 1. Коэффициенты  $A_c$  и  $A_l$  аппроксимаций (2а), (2б) для  $\beta_r/\beta_z = 2$  при различных  $\xi$  даны в табл. 2; ошибка указанных значений не превышает

3%. Было обнаружено, что отношение коэффициентов  $A_c/A_l$  практически не зависит от параметра  $\xi$ , при этом их величина пропорциональна  $\xi^* = \xi(\xi+1)$ , см. табл. 1.

В заключение отметим, что при  $\Gamma < \Gamma_0$  наблюдалось изменение (уменьшение) наиболее вероятного расстояния между двумя частицами системы  $l_{dm}$ , которое соответствует максимуму парной корреляционной функции  $g(l)$ . Функции  $g(l/l_0)$  для  $\beta_r/\beta_z = 2$  при различных параметрах  $\Gamma$  показаны на рис. 6; здесь  $l_0$  — наиболее вероятное межчастичное расстояние  $l_{dm}$  при  $\Gamma > \Gamma_0$ . Зависимости  $l_{dm}/l_0$  от отношения  $\Gamma/\Gamma_0$  для различных  $\beta_r/\beta_z$  представлены на рис. 7.

Таблица 2. Коэффициенты  $A_c$  и  $A_l$  (2a), (2b) для  $\beta_r/\beta_z = 2$  при различных  $\xi$

$\xi$	$A_c$	$A_l$	$A_c/A_l$	$\xi^* = \xi(\xi + 1)$	$A_c/\xi^*$	$A_l/\xi^*$
3	2.27	1.334	1.7	12	5.29	9.0
1.77	0.9	0.525	1.71	4.9	5.45	9.33
1	0.395	0.23	1.72	2	5.07	8.7
0.5	0.145	0.086	1.69	0.75	5.18	8.72
0.333	0.08	0.047	1.7	0.444	5.55	9.45

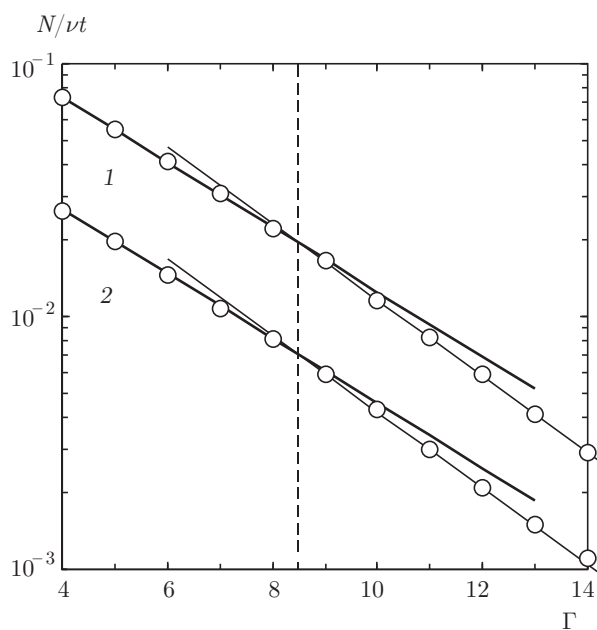


Рис. 3. Зависимости отношения  $N/(\nu t)$  от  $\Gamma$  для  $\beta_r/\beta_z = 2$  при  $\xi = 1$  (1), 0.5 (2). Символы — результаты численных расчетов. Жирные кривые — аппроксимация (2b), тонкие кривые — аппроксимация (2a). Коэффициенты аппроксимаций (2a), (2b) представлены в табл. 1, 2

### 3. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Выполнены численные исследования динамики двух одноименно заряженных частиц в электрическом поле ловушки с цилиндрической симметрией. Расчеты выполнялись для кулоновского взаимодействия частиц при различных коэффициентах трения и соотношениях величин градиентов (вертикального и радиального) внешнего электрического поля.

Подробно исследованы процессы формирования «скачков» частиц, заключающихся в спонтанной смене их позиций, в условиях существования устойчивой вертикальной конфигурации системы. Обна-

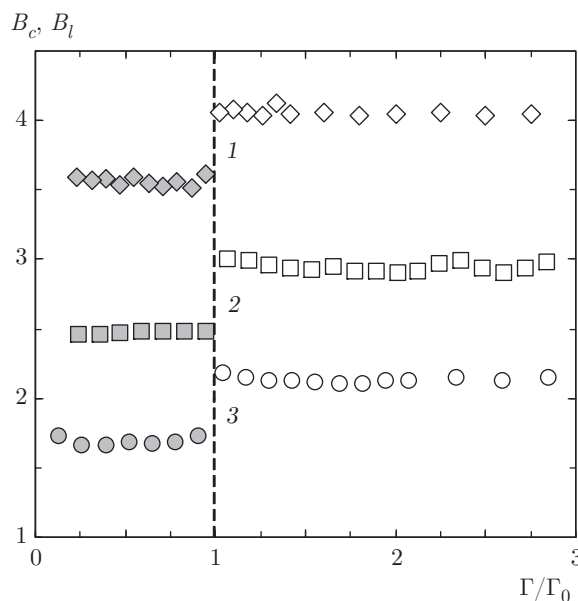


Рис. 4. Зависимости коэффициентов  $B_c$  (белые символы) и  $B_l$  (серые символы) от отношения  $\Gamma/\Gamma_0$  для  $\xi = 1$  при различных  $\beta_r/\beta_z = 1.5$  (1), 2 (2), 3 (3)

ружено, что с ростом температуры частиц происходит существенное изменение структурных и динамических свойств моделируемой системы вблизи некоторого критического параметра неидеальности  $\Gamma = \Gamma_0$ . Так, например, при  $\Gamma < \Gamma_0$  наблюдалось изменение (уменьшение) наиболее вероятного межчастичного расстояния, а также изменение функциональной зависимости количества скачков,  $N/t$ , от величины параметра неидеальности системы. Следует отметить, что как в области  $\Gamma > \Gamma_0$ , так и в области  $\Gamma < \Gamma_0$  функция  $N/t$  имела выраженный экспоненциальный характер,  $N/t \propto \exp(-B\Gamma)$ , однако значение коэффициента  $B$  существенно изменялось:  $B = B_c$  при  $\Gamma > \Gamma_0$ ,  $B = B_l$  при  $\Gamma < \Gamma_0$ , при этом  $B_c > B_l$ .

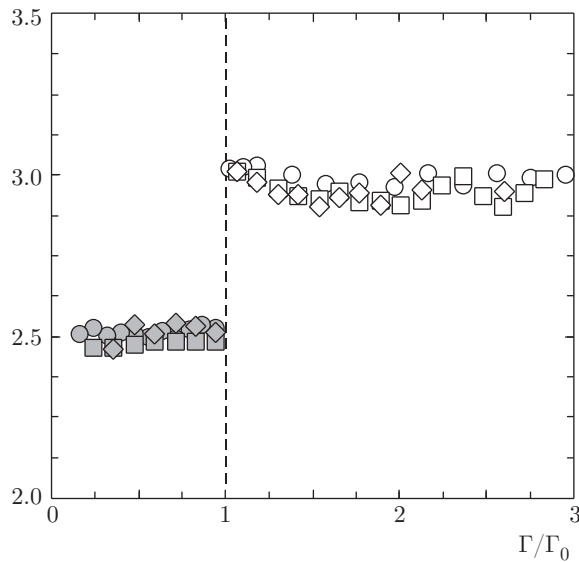


Рис. 5. Зависимости коэффициентов  $B_c$  (белые символы) и  $B_l$  (серые символы) от отношения  $\Gamma/\Gamma_0$  для  $\beta_r/\beta_z = 2$  при различных  $\xi = 3$  ( $\circ$ ),  $1$  ( $\square$ ),  $0.333$  ( $\diamond$ )

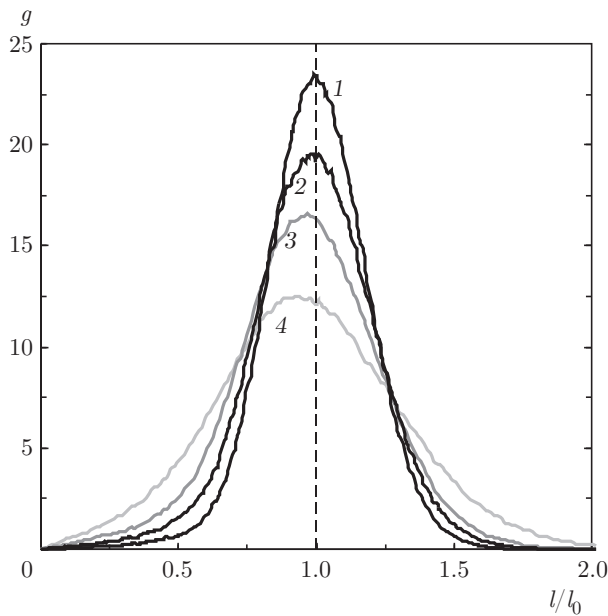


Рис. 6. Функция  $g(l/l_0)$  для  $\beta_r/\beta_z = 2$  при различных  $\Gamma = 13.5$  (1),  $10$  (2),  $7.5$  (3),  $4$  (4)

Предполагается, что особенности, наблюдаемые вблизи  $\Gamma \approx \Gamma_0$ , могут быть обусловлены формированием амплитудной неустойчивости в двухчастичной системе (подобной той, что вызывает плавление протяженных систем частиц). Данный вопрос требует отдельного рассмотрения.

Результаты настоящей работы могут быть полезны для качественного анализа динамики про-

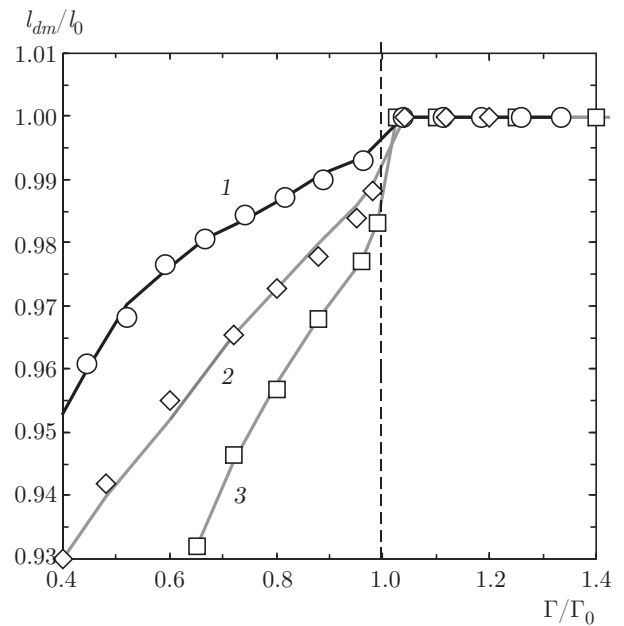


Рис. 7. Зависимости  $l_{dm}/l_0$  от отношения  $\Gamma/\Gamma_0$  для различных  $\beta_r/\beta_z = 1.5$  (1),  $2$  (2),  $3$  (3). Сплошные линии соответствуют  $\xi = 3$ , символы —  $\xi = 1/3$

тяженных систем, которые представляют интерес в физике плазмы, медицине, биологии, физике полимеров и коллоидных систем.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ (грант № 16-08-00594), а также Программы Президиума РАН и Министерства образования и науки России (гранты №№ СП-4993.2015.1, МК-2930.2017.8). Авторы благодарят Е. А. Лисина и Э. А. Саметова за помощь в обсуждении результатов работы.

### ЛИТЕРАТУРА

1. С. Чандрасекар, *Стохастические проблемы в физике и астрономии*, Мир, Москва (1967).
2. Г. Эйринг, С. Г. Лин, С. М. Лин, *Основы химической кинетики*, Мир, Москва (1983).
3. W. K. Warburton and D. Turnbull, *Diffusion in Solids*, North-Holland, Amsterdam (1975).
4. С. Бретшнейдер, *Свойства газов и жидкостей*, Химия, Москва (1986).
5. О. С. Ваулина, О. Ф. Петров, В. Е. Фортов, А. Г. Храпак, С. А. Храпак, *Пылевая плазма (эксперимент и теория)*, Физматлит, Москва (2009).

6. *Complex and Dusty Plasmas*, ed. by V. E. Fortov and G. E. Morfill, CRC Press (2010).
7. *Photon Correlation and Light Beating Spectroscopy*, ed. by H. Z. Cummins and E. R. Pike, Plenum, New York (1974).
8. В. Pullman, *Intermolecular Interactions: from Diatomics to Biopolymers*, Wiley Intersci., Chichester (1978).
9. А. А. Овчинников, С. Ф. Тимашев, А. А. Белый, *Кинетика диффузионно-контролируемых химических процессов*, Химия, Москва (1986).
10. O. S. Vaulina and S. V. Vladimirov, *Plasma Phys.* **9**, 835 (2002).
11. O. S. Vaulina and I. E. Drangevski, *Phys. Scripta T* **73**, 577 (2006).
12. О. С. Ваулина, К. Г. Адамович, *ЖЭТФ* **133**, 1091 (2008).
13. К. Г. Косс, О. Ф. Петров, М. И. Мясников, К. Б. Стаценко, М. М. Васильев, *ЖЭТФ* **149**, 1 (2016).
14. О. С. Ваулина, К. Г. Адамович, И. Е. Дранжевский, *Физика плазмы* **31**, 562 (2005).
15. O. S. Vaulina, X. G. Adamovich, and S. V. Vladimirov, *Phys. Scripta* **79**, 035501 (2009).
16. О. С. Ваулина, И. И. Лисина, К. Г. Косс, *Физика плазмы* **39**, 455 (2013).
17. I. I. Lisina and O. S. Vaulina, *Europhys. Lett.* **103**, 55002 (2013).