

ДИНАМИКА ЗАРЯЖЕННЫХ ПЫЛЕВЫХ ЧАСТИЦ  
В ОГРАНИЧЕННЫХ КЛАСТЕРНЫХ СИСТЕМАХ

© 2022 г. О. С. Ваулина\*

Объединенный институт высоких температур РАН, Москва, Россия

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

Поступила в редакцию 27.01.2022 г.

После доработки 05.02.2022 г.

Принята к публикации 10.02.2022 г.

Представлены результаты численного исследования динамики ограниченных ансамблей заряженных пылевых частиц в потенциальном поле электростатической ловушки. Моделирование выполнялось для кластерных систем, состоящих до тысячи частиц с кулоновским взаимодействием, в широком диапазоне параметров, близких к условиям лабораторных экспериментов в газоразрядной плазме. Выполнено сравнение процессов диффузии частиц в протяженных и ограниченных системах.

*Ключевые слова:* комплексная плазма, динамика заряженных пылевых частиц, ограниченные кластерные ансамбли, процессы диффузии частиц в ограниченных системах

DOI: 10.31857/S0367292122200057

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Броуновское движение в системах взаимодействующих частиц широко распространено в природе и наблюдается, например, в биологических и коллоидных растворах, в плазме продуктов сгорания, в атмосфере Земли и т.д. [1–4]. Однако на настоящий момент аналитические модели для броуновской динамики частиц разработаны только для двух простейших случаев: невзаимодействующие частицы; и одиночная заряженная частица, движение которой ограничено потенциальным полем ловушки. Анализ этих задач не позволяет исследовать влияние числа  $N$  взаимодействующих частиц на характер их броуновского движения. Для этой цели широко используется численное моделирование.

Большинство работ, посвященных численному исследованию свойств комплексной (пылевой) плазмы, опираются на решение уравнений Ланжевена для пылевых частиц с некоторой эффективной температурой  $T$  большей, чем температура  $T_n$  окружающего их нейтрального газа [1–3]. Данное обстоятельство связано с тем, что стохастическая энергия пылевых частиц (их “кинетическая температура”  $T$ ) в таких условиях может достигать  $\sim 0.3$ – $10$  эВ, что значительно выше  $T_n$ . Механизмы “аномального разогрева” пылевых частиц обычно связывают с временными и/или пространственными изменениями их зарядов в объеме неоднородной плазмы [1]. (Флуктуации зарядов пылевых частиц, вызванные случайной

природой ионных и электронных токов, заряжающих эти частицы, присущи любым типам комплексной плазмы.)

Экспериментальный, теоретический и численный анализ теплового движения взаимодействующих пылевых частиц в протяженных и ограниченных ансамблях, формирующихся в газоразрядной плазме, представлены в работах [5–11]. Отметим, что в тлеющих разрядах (как переменного, так и постоянного токов) в центре газоразрядных камер наблюдается некоторое превышение концентрации ионов плазмы над ее электронной концентрацией [12]. Данное обстоятельство приводит к формированию эффективных ловушек для отрицательно заряженных частиц пыли [1–3]. В отличие от плазмы высокочастотного емкостного разряда, где зачастую формируются слоистые пылевые структуры, объемные облака заряженных пылевых частиц обычно наблюдаются в стратах тлеющего разряда постоянного тока, или в индукционных высокочастотных разрядах [1, 13–20].

Тем не менее, несмотря на большое количество работ по исследованию динамики заряженных частиц в потенциальных полях электрических ловушек, ряд вопросов на настоящий момент остается невыясненным. Например, оптимальные условия экспериментов необходимые для определения параметров пылевых частиц (например, их зарядов) и градиентов ловушки, а также сравнение динамических характеристик ча-

стиц для случаев протяженных и ограниченных систем.

В настоящей работе представлены результаты численного исследования динамики ограниченных ансамблей заряженных частиц в потенциальном поле электростатической ловушки. Моделирование проводилось в широком диапазоне параметров близких к условиям лабораторных экспериментов с пылевой плазмой в газовых разрядах.

## 2. ОСНОВНЫЕ ПАРАМЕТРЫ И СООТНОШЕНИЯ

Рассмотрим движение одной заряженной частицы с массой  $M$  и зарядом  $Q$  в поле гармонической ловушки с характерной частотой  $\omega_0 = (Q\alpha/M)^{1/2}$  под воздействием случайной силы  $F_b$ , которая является источником стохастической (тепловой) энергии частиц; здесь  $\alpha \equiv \alpha_x = dE_x/dx$  – величина градиента внешнего электрического поля  $E_x$ , ловушки в направлении оси  $x$ . Средний квадрат отклонений  $\langle x^2(t) \rangle$  такой частицы для одной степени свободы от ее начального положения за время  $t$  и автокорреляционная функция скорости  $\langle V_x(0)V_x(t) \rangle$  могут быть представлены в форме [1, 5]

$$\langle x^2(t) \rangle = \frac{2T}{M\omega_0^2} \left[ 1 - e^{-v_{fr}t/2} \left( \text{ch}(v_{fr}t\psi) + \frac{\text{sh}(v_{fr}t\psi)}{2\psi} \right) \right], \quad (1)$$

$$\langle V_x(0)V_x(t) \rangle = \frac{T}{M} \left[ 1 - e^{-v_{fr}t/2} \left( \text{ch}(v_{fr}t\psi) - \frac{\text{sh}(v_{fr}t\psi)}{2\psi} \right) \right]. \quad (2)$$

Здесь и далее  $T$  – температура частиц в энергетических единицах,  $v_{fr}$  – коэффициент трения частиц,  $\psi = (1 - 4\xi^2)^{1/2}/2$ ,  $\xi = \omega_0/v_{fr}$ , а угловые скобки  $\langle \dots \rangle$  обозначают усреднение по всем отрезкам времени, равным  $t$ . (При условии  $1 < 4\xi^2$ ,  $\psi = (4\xi^2 - 1)^{1/2}/2$ , а функции  $\text{ch}$  и  $\text{sh}$  переходят в  $\cos$  и  $\sin$  соответственно.) С ростом времени при  $t \rightarrow \infty$  величина  $\langle x^2(t) \rangle \rightarrow 2T/(M\omega_0^2)$ .

Формула (2) может быть получена как независимым путем, так и из соотношения

$$\langle V_x(0)V_x(t) \rangle = \frac{1}{2} \frac{d^2 \langle x^2(t) \rangle}{dt^2}. \quad (3)$$

Отметим, что соотношение (3) имеет место как для одной частицы в ловушке, так и для протяженных систем различной конфигурации [5, 6].

Для анализа теплового движения заряженных пылевых частиц удобно использовать отношение

функции массопереноса  $D(t) = \langle x^2(t) \rangle / 2t$  к коэффициенту диффузии  $D_0 = T/(v_{fr}M)$  невзаимодействующих частиц:  $D(t)/D_0$ . Легко увидеть, что на малых временах наблюдения,  $v_{fr}t \ll (1 + \xi)$ , для частицы в ловушке характерен баллистический режим движения ( $\langle x^2(t) \rangle \approx Tt^2/M$ ,  $D(t) = \langle x^2(t) \rangle / 2t \propto t$ ), как и в случае невзаимодействующих частиц, см. рис. 1а. Численный анализ показывает, что максимум функции  $D(t)$  наблюдается в диапазоне времен, соответствующем  $\omega_0 t$  от 1 до 2 вне зависимости от величины  $v_{fr}$  (см. рис. 1б).

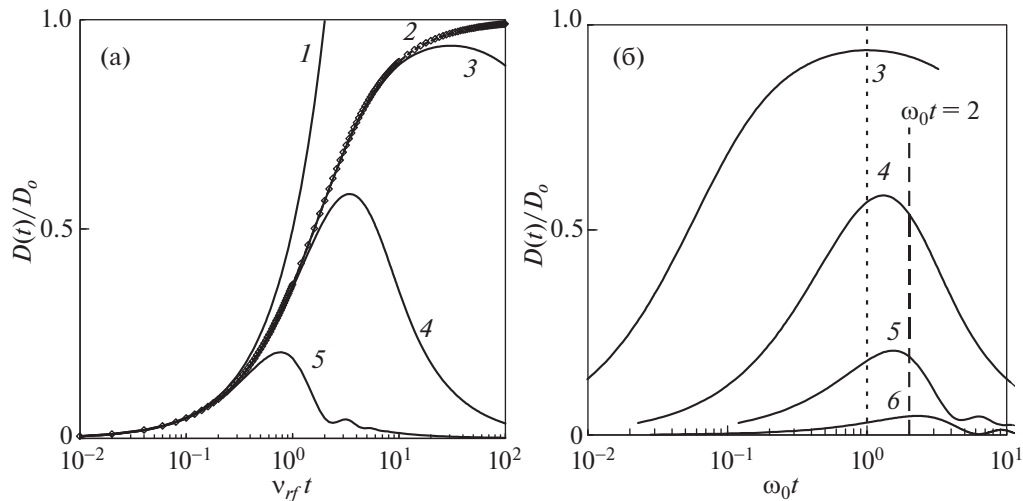
Для описания физических свойств исследуемых структур введем также параметр  $\Gamma = Q^2 n^{1/3} / T \equiv Q^2 / l_p T$ , где  $n = l_p^{-3}$  – концентрация частиц, а  $l_p$  – среднее расстояние между ними. При этом в линейном электрическом поле  $n \approx 3\alpha / (4\pi Q)$ , а  $l_p \approx (4\pi Q / 3\alpha)^{1/3}$ . Тогда для оценки радиуса ограниченной структуры имеет место соотношение  $R \approx (3N / 4\pi n)^{1/3}$ , где  $N$  – число частиц в системе. Реальный (эффективный) радиус ансамбля будет несколько увеличиваться с ростом температуры частиц.

Эволюция среднеквадратичного смещения  $D(t)$  в однородных и протяженных неидеальных системах исследовалась численно в работах [9, 11] для частиц, взаимодействующих посредством экранированного кулоновского потенциала (типа Юкавы)

$$U = Q^2 \exp(-r/l) / r. \quad (4)$$

Здесь  $r$  – расстояние между двумя заряженными частицами,  $\lambda$  – длина экранирования,  $\kappa = l_p / \lambda$  – параметр экранирования, а  $l_p$  – среднее межчастичное расстояние. (Для моделирования таких систем использовались периодические граничные условия [1, 2].)

Анализ численных исследований для протяженных трехмерных систем с экранированным кулоновским потенциалом [9–11], показывает, что при  $\kappa = l_p / \lambda < 6$  за их равновесные характеристики отвечают два безразмерных параметра:  $\Gamma^* = Q^2(1 + \kappa + \kappa^2/2) \exp(-\kappa) / (Tl_p)$  и  $\xi^* = \omega^* / v_{fr}$ ; здесь  $\omega^* = Q[(1 + \kappa + \kappa^2/2) \exp(-\kappa) / (\pi M l_p^3)]^{1/2}$ . Значение данных параметров, совместно с температурой частиц, определяет пространственную корреляцию, точки фазовых переходов и процессы переноса (диффузию, вязкость) в рассматриваемых системах при условии  $20 < \Gamma^* < \Gamma_c^* \approx 106$ ; здесь  $\Gamma_c^*$  соответствует точке их кристаллизации [10, 11]. Отметим, что при  $\kappa < 1$  величина  $\Gamma^* \approx G \equiv Q^2 / l_p T$ , а  $\omega^* = Q / (\pi M l_p^3)^{1/2}$ . Расчеты показывают, что диффузионный режим движения



**Рис. 1.** Зависимость функций  $D(t)/D_0$  от  $v_{fr}t$  (а) и от  $\omega_0t$  (б): 1 – баллистический режим,  $D(t) \propto t$ ; 2 – не взаимодействующие частицы [4, 5]; гармонический осциллятор (1) при различных параметрах  $\xi$ : 3 – 0.033; 4 – 0.38; 5 – 3; 6 – 15.

частиц в таких структурах наблюдается для времен  $t \gg 1/\omega^*$ , когда их коэффициент диффузии  $D(t) \rightarrow D_c = \text{const}$ .

Принимая во внимание ограниченный (конечный) размер структур, исследуемых в настоящей работе, наблюдать диффузионный режим движения частиц возможно только в диапазоне времен  $t_R \gg t \gg 1/\omega_0$ , где величина  $t_R$  определяется размером кластера  $R$ , температурой частиц  $T$  и характерными частотами ( $\omega_0, v_{fr}$ ):

$$t_R \sim R^2 M (\omega_0 + v_{fr}) / T. \quad (5)$$

Результаты моделирования динамики ограниченных ансамблей заряженных частиц в электростатической ловушке представлены в следующем разделе. Расчеты проводились в широком диапазоне параметров  $\xi \sim 0.15-15$ , соответствующих условиям наблюдения пылевых структур в плазме газовых разрядов [1–3]: диаметр частиц  $\sim 1-10$  мкм;  $l_p \sim 500-1000$  мкм;  $T \sim 0.03-10$  эВ; давление буферного газа  $\sim 0.1-0.01$  Торр.

### 3. РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Численное моделирование динамики систем заряженных частиц в линейной и изотропной электростатической ловушке ( $\alpha \equiv \alpha_x = \alpha_y = \alpha_z$ ) выполнялось методом молекулярной динамики Ланжевена. Расчеты проводились для ансамблей, состоящих из  $N = 50, 150, 450$  и  $900$  частиц. Техника моделирования подробно описана в работах [1, 2]. Шаг интегрирования составлял от  $\Delta t \cong (40 \max[\omega_0; v_{fr}])^{-1}$  до  $\Delta t \cong (100 \max[\omega_0; v_{fr}])^{-1}$  в зависимости от начальных условий задачи. Время

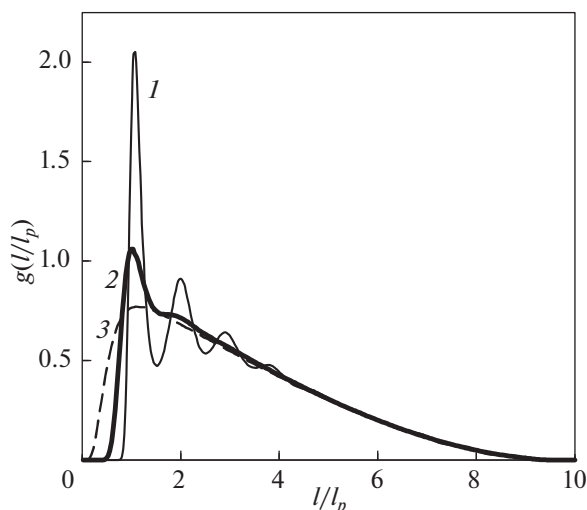
расчетов  $t_c$  после установления равновесия в моделируемых системах варьировалось от  $\sim 10^3 / \min[\omega_0; v_{fr}]$  до  $\sim 10^4 / \min[\omega_0; v_{fr}]$ .

Расчеты проводились для систем частиц с кулоновским взаимодействием в широком диапазоне параметров неидеальности: от  $\Gamma \sim 1$  до  $\Gamma \sim 300$ . Частота ловушки  $\omega_0 = (Q\alpha/M)^{1/2}$  изменялась от  $15$  до  $45 \text{ с}^{-1}$ , что обеспечивало среднее расстояние между частицами  $l_p \sim 500-1000$  мкм. Параметр  $\xi = \omega_0/v_{fr}$  варьировался за счет коэффициента трения частиц  $v_{fr}$  в пределах от  $0.15$  до  $15$ .

Во всех рассмотренных случаях температура частиц не отличалась от заданной, а их функции распределения по скоростям соответствовали распределению Максвелла. При  $t \rightarrow \infty$  среднеквадратичные смещения центра масс исследуемых ансамблей частиц от их начального положения по всем степеням свободы были равны  $\langle x^2(t) \rangle \cong \langle y^2(t) \rangle \cong \langle z^2(t) \rangle \approx T / (NM\omega_0^2)$ .

Парные корреляционные функции  $g(l)$  для ансамблей из  $N = 450$  частиц с различными параметрами  $\Gamma$  показаны на рис. 2. Легко увидеть, что первый пик функций  $g(l)$  для  $\Gamma \geq 0.1$  хорошо соответствует величине  $l_p \cong (4\pi Q/3\alpha)^{1/3}$ , полученной в приближении однородной системы. Кроме того, численное моделирование показало, что для оценки радиуса неидеальных систем при  $\Gamma \geq 1$  может быть использовано соотношение  $R \cong (3N/4\pi n)^{1/3}$ , которое имеет место для однородных систем.

При высоких температурах (см. рис. 3), а также при малых размерах кластеров ( $N \leq 50$ ) корректно идентифицировать диффузионный режим движения частиц весьма затруднительно. Зависи-

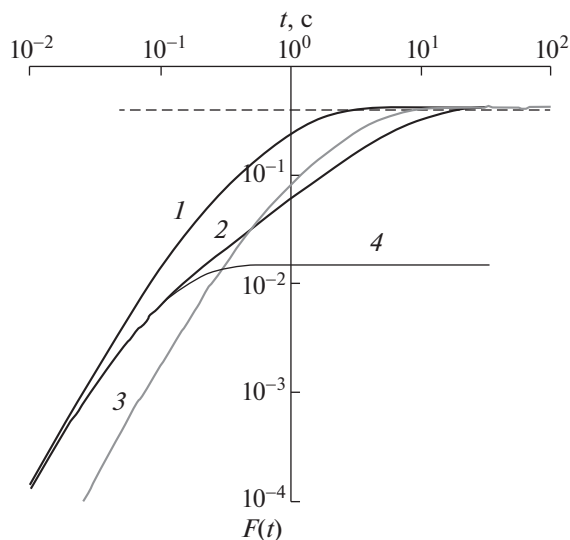


**Рис. 2.** Парная корреляционная функция  $g(l/l_p)$  для ансамблей из  $N = 450$  частиц с различными параметрами  $\Gamma$ : 1 – 100; 2 – 10; 3 – 1. Здесь  $l_p \cong (4\pi Q/3\alpha)^{1/3}$ .

мость отношения  $\langle x^2(t) \rangle / R^2$  для системы из  $N = 150$  частиц с различными температурами и параметрами  $\xi$  показана на рис. 3. Отметим, что на начальных этапах наблюдения (при  $t < \omega_0^{-1}$ ) режим движения частиц был близок к режиму гармонического осциллятора (1). С ростом времени (при  $t > t_R$ ) кривые  $\langle x^2(t) \rangle / R^2$  стремились к своему постоянному значению примерно равному  $2/3$ .

Следует отметить, что при любом количестве и температуре частиц поведение функции  $D(t)$  для времен наблюдения  $t < \omega_0^{-1}$  соответствовало аналитическим решениям для одной частицы (1), см. рис. 4а. При этом выраженный диффузионный режим  $D(t) \cong D_b = \text{const}$  их движения наблюдался только в диапазоне времен  $t_R \gg t \gg \omega_0^{-1}$ , см. рис. 4б.

Нормированные коэффициенты  $D_b^* = D_b(v_{fr} + \omega_0)M/T$  в зависимости от параметра  $\Gamma$ , полученные в наших расчетах для ограниченных систем и усредненные для разных значений  $\xi$ , приведены на рис. 5. Там же для сравнения приведена зависимость  $D_c^* = D_c(v_{fr} + \omega^*)M/T$  от параметра неидеальности  $\Gamma^*$  для протяженных трехмерных структур частиц, взаимодействующих с экранированным кулоновским потенциалом [10]. Легко заметить, что обе зависимости,  $D_b^*(\Gamma)$  и  $D_c^*(\Gamma)$ , аналогичны в пределах ошибки численных расчетов по крайней мере до  $\Gamma^* \leq 100$ . Похожее поведение  $D^*(\Gamma^*)$  было зафиксировано для протяженных квазидвумерных структур частиц, взаимо-



**Рис. 3.** Функция  $F(t) = \langle x^2(t) \rangle / R^2$  для системы из  $N = 150$  частиц с параметрами: 1 –  $\xi \cong 15$ ,  $\Gamma \approx 3$  ( $T = 10$  эВ); 2 –  $\xi \cong 0.47$ ,  $\Gamma \approx 3$  ( $T = 10$  эВ); 3 –  $\xi \cong 15$ ,  $\Gamma \approx 10$  ( $T = 3$  эВ); а также для гармонического осциллятора (1): 4 –  $\xi \cong 0.47$ ,  $T = 10$  эВ. Штриховая линия –  $\langle x^2(t) \rangle / R^2 = 2/3$ .

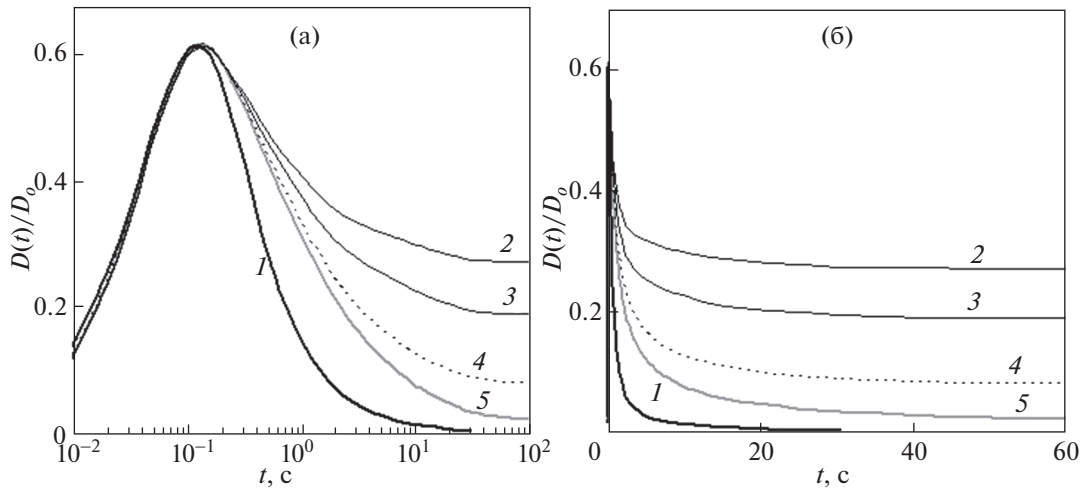
действующих с экранированным кулоновским потенциалом (систем Юкавы) [5, 9].

В заключение подчеркнем, что при любом количестве частиц,  $N$ , в ограниченном ансамбле, измерение функции  $D(t)$  для времен наблюдения  $t < \omega_0^{-1}$  совместно с данными о среднем расстоянии  $l_p$  между частицами (например, путем регистрации  $g(l)$ ) позволяют определить такие параметры пылевых частиц, как их температуру  $T$ , характерные частоты ( $v_{fr}$ ,  $\omega_0$ ), заряд  $Q$ , а также градиент  $\alpha$  поля ловушки. Поиск этих параметров может опираться на процедуру “подгонки” численных и аналитических данных. (Для проверки и/или коррекции результатов определения параметров можно использовать прямые измерения смещений  $\langle x^2(t) \rangle$ , и автокорреляционной функции скоростей  $\langle V_x(0)V_x(t) \rangle$  частиц.)

#### 4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе представлены ансамбли заряженных пылевых частиц в потенциальном поле электростатической ловушки. Моделирование выполнялось для систем, состоящих от пятидесяти до порядка тысячи частиц с кулоновским взаимодействием, в широком диапазоне параметров близких к условиям лабораторных экспериментов в газоразрядной плазме.

Исследована временная зависимость среднеквадратичных смещений отдельных частиц в



**Рис. 4.** Функция  $D(t)/D_0$  для логарифмической шкалы по времени (а) и обычной (б) при  $\xi = 0.47$  для: 1 – гармонического осциллятора (1); и численные расчеты для  $N = 450$  при разных параметрах  $\Gamma$ : 2 – 30; 3 – 60; 4 – 100; 5 – 150.

ограниченных ансамблях. Выполнено сравнение процессов диффузии частиц для протяженных и ограниченных систем.

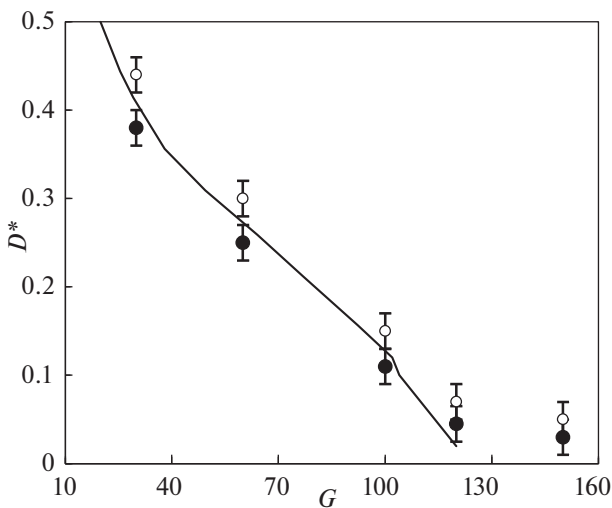
Рассмотрены условия лабораторных экспериментов необходимые для определения характерных параметров пылевых частиц и поля ловушки.

Представлен анализ зависимости формы парной корреляционной функции  $g(l)$  и размеров кластерных систем от температуры и количества частиц. Численное моделирование показало, что

для анализа положения первого пика функций  $g(l)$  и оценки радиуса неидеальных систем при  $\Gamma \geq 1$  могут быть использованы аналитические соотношения, полученные в приближении однородной системы.

Результаты настоящей работы могут быть адаптированы для ограниченных систем частиц с любым типом попарных взаимодействий. Данные исследования будут полезны для разработки методов пассивной диагностики систем, представляющих интерес в физике плазмы, физике полимеров и коллоидных систем и т.д.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-22-00899, <https://rscf.ru/project/22-22-00899/>.



**Рис. 5.** Величина  $D_c^*$  в зависимости от параметра  $\Gamma^*$  для протяженных трехмерных систем Юкавы (сплошная линия) [9, 10]. Символами обозначены результаты наших численных расчетов  $D_b^*$ : (●) – для  $\xi < 0.5$ ; (○) – для  $\xi > 0.5$ . Показаны абсолютные погрешности расчетов ( $\pm 0.02$ ) для различных  $N$  и  $\xi$ .

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ваулина О.С., Петров О.Ф., Фортвов В.Е., Храпак А.Г., Храпак С.А. Пылевая плазма (эксперимент и теория). М.: Физматлит, 2009.
2. Complex and Dusty Plasmas / Eds. Fortov V.E., Morfill G.E. CRC Press, 2010.
3. Ivlev A., Morfill G., Lowen H., Royall C.P. Complex Plasmas and Colloidal Dispersions: Particle-Resolved Studies of Classical Liquids and Solids. Singapore: World Scientific, 2012.
4. Овчинников А.А., Тимашев С.Ф., Белый А.А. Кинетика диффузионно-контролируемых химических процессов. М.: Химия, 1986.
5. Ваулина О.С., Адамович К.Г. // ЖЭТФ. 2008. Т. 133. С. 1091.
6. Ваулина О.С., Адамович К.Г., Петров О.Ф., Фортвов В.Е. // ЖЭТФ. 2008. Т. 134. С. 367.
7. Vaulina O.S., Lysin E.A. // Phys. Plasmas. 2009. V. 16. P. 113702.
8. Фортвов В.Е., Петров О.Ф., Ваулина О.С., Косс К.Г. // Письма в ЖЭТФ. 2013. Т. 97. С. 366.

9. *Vaulina O.S., Drangevski I.E.* // Physica Scripta. 2006. V. T73. P. 577.
10. *Vaulina O.S., Vladimirov S.V.* // Phys. Plasmas. 2002. V. 9. P. 835.
11. *Vaulina O.S., Vladimirov S.V., Petrov O.F., Fortov V.E.* // Phys. Plasmas 2004. V. 11. P. 3234.
12. *Райзер Ю.П.* Физика газового разряда. М.: Наука, 1987.
13. *Fortov V.E., Nefedov E.A., Sinel'shchikov V.A., Usachev A.D., Zobnin A.V.* // Phys. Lett. A. 2000. V. 267. P. 179.
14. *Hebner G.A., Riley M.E., Greenberg K.E.* // Phys. Rev. E. 2002. V. 66. P. 046407.
15. *Thomas H., Morfill G., Demmel V.* // Phys. Rev. Lett. 1994. V. 73. P. 652.
16. *Pieper J.B., Goree J., Quinn R.A.* // Phys. Rev. E. 1996. V. 54. P. 5636.
17. *Melzer A., Homann A., Piel A.* // Phys. Rev. E. 1996. V. 53. P. 2757.
18. *Vaulina O.S., Vasilieva E.V., Petrov O.F., Fortov V.E.* // Physica Scripta 2011. V. 84. P. 025503.
19. *Melzer A., Trottenberg T., Piel A.* // Physics Letters A. 1994. V. 191. P. 301.
20. *Fortov V.E., Nefedov A.P., Sinel'shchikov V.A., Zobnin A.V., Usachev A.D.* // J. Physique IV. 2000. V. 10. P. 399.