

УДК 533.9.01

К.Н. Джумагулова*, Р.У. Машеева
 НИИЭТФ, КазНУ им. аль-Фараби, Казахстан, г. Алматы
 *E-mail: dzhumagulova.karlygash@gmail.com

Динамические характеристики и коэффициент диффузии пылевой компоненты плазмы сложного состава

Аннотация. Автокорреляционная функция скоростей пылевых частиц вычислена методом ланжевеновой динамики. Было указано, что их колебания затухают быстрее с увеличением параметра трения. Зависимость коэффициента диффузии пылевых частиц от коэффициента трения для разных значений различных параметров была получена соотношением Грина-Кубо и среднеквадратичным смещением. Была показана справедливость соотношения Эйнштейна на меньших значениях параметра связи.

Ключевые слова: пылевая плазма, автокорреляционная функция, метод ланжевеновой динамики.

Введение

Сейчас многие физики знают, что такое так называемая пылевая плазма. Это плазма, которая содержит твердые частицы, размер которых намного больше, чем размер атомов. Пылевая плазма часто встречается в природе, особенно в астрофизических объектах, таких, как планетарные кольца, кометные хвосты. Кроме того, в земных условиях пылевая плазма формируется во многих установках, использующих плазменные технологии. В таких установках пыль образуется при распылении поверхности стенок плазменными потоками, а также при образовании реактивных радикалов в рабочих газах, что приводит к конденсации и последующему спеканию пылевых частиц (зерен) [1-3]. Много работы проводится по устранению вредных эффектов влияния пылевой плазмы в плазменных установках и по ее практическому применению. Спектр практических применений может быть достаточно широким, это – микроэлектроника, медицина, химический катализ.

В связи с вышеупомянутым, изучение фундаментальных свойств пылевой плазмы особенно важно. Значительное внимание уделяется численным методам. Метод ланжевеновой динамики нашел широкое применение в изучении свойств пылевой плазмы.

Метод ланжевеновой динамики и автокорреляционная функция скоростей пылевых частиц

Метод ланжевеновой динамики нашел широкое применение в изучении свойств пылевой плазмы. Этот метод описывался в работах [4-6]. Моделирование пылевых частиц по пространственно-временным траекториям было выполнено на основе следующих уравнений:

$$m_d \frac{d^2 \vec{r}_i}{dt^2} = \sum_j F_{\text{int}}(r) \Big|_{r=|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \frac{\vec{r}_i - \vec{r}_j}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} - m_d \nu_{fr} \frac{d\vec{r}_i}{dt} + \vec{F}_{br}(t), \quad (1)$$

здесь $F_{\text{int}}(r) = -\partial\Phi(r)/\partial r$ – сила, которая налагается на i -частицу в результате взаимодействия с j -частицей, $r = |\vec{r}_i - \vec{r}_j|$ – расстояние между двумя зернами, $\vec{F}_{br}(t)$ – случайная сила, которая появляется в результате взаимодействия с нейтралами, ν_{fr} – коэффициент трения, зависит от давления буферной плазмы, m_d – масса пылевой частицы.

Потенциал Юкава выбран как потенциал взаимодействия; в безразмерном виде он записывается так:

$$\Phi(R) = \frac{\Gamma}{R} e^{-kR}, \quad (2)$$

здесь $\Gamma = (Z_d e)^2 / (a k_b T_d)$ – параметр связи, $k = a/\lambda$ – параметр экранировки, $a = \left(\frac{3}{4\pi m_d} \right)^{1/2}$ – среднее расстояние между пылевыми частицами.

Набор из 1024 пылевых частиц разбрасывается случайным образом внутри 3D кубической решетки. Время берется в единицах, обратных частоте пылевой компоненты $\omega_d = \left(\frac{4\pi n_d Z_d^2 e^2}{m_d} \right)^{1/2}$.

Число временных шагов $N_t = 30000$. Некоторые выполненные тесты временных характеристик показывают надежность этих параметров. Безразмерный параметр трения $\theta = \nu_f / w_d$. Моделирование было выполнено для системы пылевых частиц согласно обычной схеме [5-7].

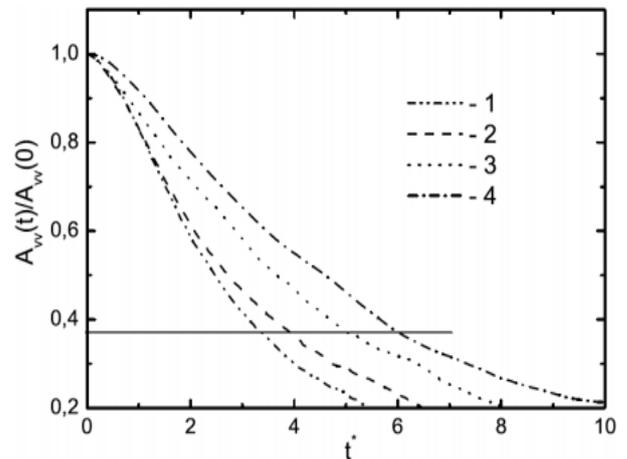
Автокорреляционная функция скоростей частиц (АФС) – один из важных динамических характеристик системы:

$$A_{vw}(t) = \langle \vec{v}(t)\vec{v}(0) \rangle, \quad (3)$$

где скобки означают усреднение по ансамблю и различным начальным моментам времени. Автокорреляционная функция скоростей демонстрирует затухание, что характеризуется временем затухания τ [7]. Известно, что с увеличением значения параметра связи и уменьшением параметра экранировки временное затухание τ уменьшается [7, 8].

На рис. 1 представлены автокорреляционные функции скоростей, полученные на основе ланжевеновой динамики при различных значениях κ и θ , при постоянных значениях других параметров. Там же отложена линия, где автокорреляционная функция уменьшается в e раз. Как

видно из рисунка, время затухания увеличивается с уменьшением θ и увеличением параметра экранировки.



1) $\theta=0.05, \kappa=0.1$, 2) $\theta=0.05, \kappa=0.5$, 3) $\theta=0.05, \kappa=2$, 4) $\theta=0.001, \kappa=2$. Здесь $t^* = t\omega_d$

Рисунок 1 – АФС, полученные для разных κ и θ при $\Gamma=1$

Сравнения с результатом МД моделирования [8, 9] даны на рисунке 2. На рисунке видно, что при одинаковых Γ и κ , но разных θ , осцилляции быстрее затухают с увеличением θ . На рис. 3 представлены те же автокорреляционные функции скоростей, но сфокусированные на первом затухании.

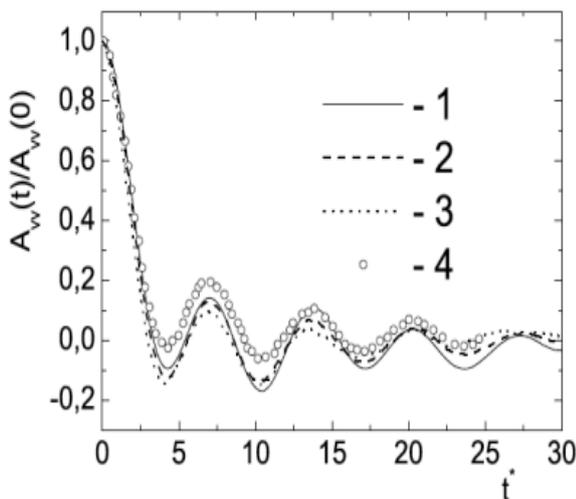


Рисунок 2 – АФС, полученные для разных θ при $\Gamma=50$ и $\kappa=0.1$

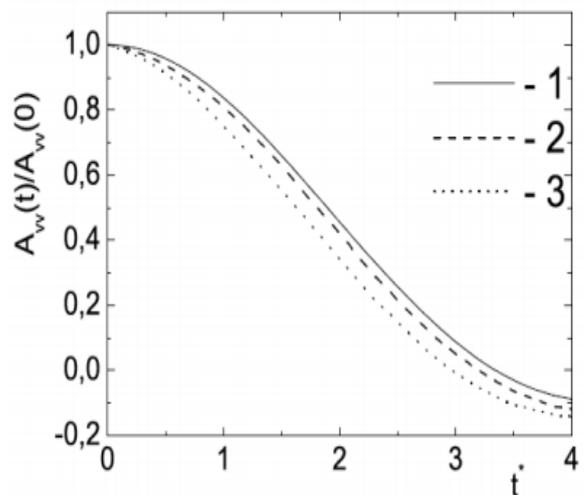


Рисунок 3 – АФС из рисунка 2 на первом затухании

Коэффициент диффузии

На основе полученных значений микросостояний можно получить коэффициент диффузии на основе известного соотношения, связывающего коэффициент диффузии со среднеквадратичным смещением частиц

$$D_{msd} = \lim_{t \rightarrow \infty} (\langle \vec{r}(0) - \vec{r}(t) \rangle^2 / 6t) \quad (4)$$

С другой стороны, коэффициент переноса можно вычислить соотношением Грина-Кубо, для коэффициента диффузии в трехмерном случае он запишется так:

$$D_{G-K} = \frac{1}{3} \int_0^{\infty} A_v(t) dt, \quad (5)$$

здесь $A_v(t)$ – автокорреляционная функция скоростей (3).

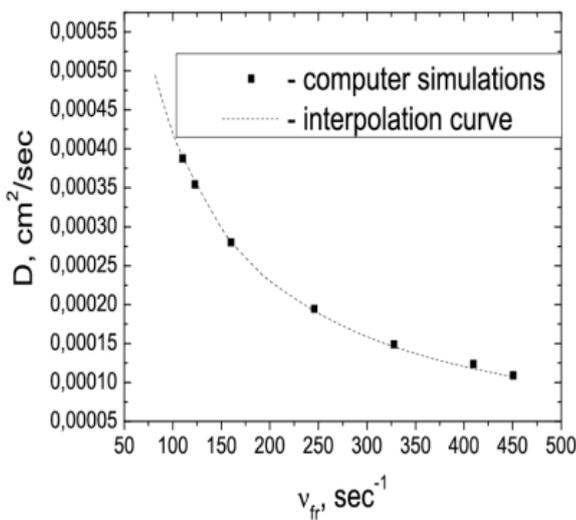
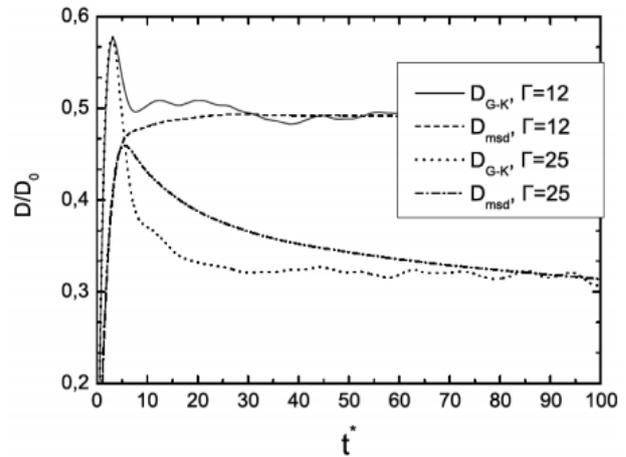


Рисунок 5 – Коэффициент диффузии для $\Gamma=80$

На рис. 4 дана временная эволюция $D_{msd} = \lim_{t \rightarrow \infty} (\langle \vec{r}(0) - \vec{r}(t) \rangle^2 / 6t)$ и $D_{G-K} = \frac{1}{3} \int_0^{\infty} A_v(t) dt$, в единицах $D_0 = k_B T (\nu_f m_d)$ (соотношение Эйнштейна для коэффициента диффузии невзаимодействующих частиц в жидкости). Как видно из рисунка 4, D_{G-K} сходится быстрее, чем D_{msd} . На рис. 5, 6 даны зависимости коэффициента диффузии от коэффициента трения ν_{fr} , полученные с помощью уравнения (5) для $Z_d = 5000$, $\kappa=2$ и разных параметров Γ .



Здесь $t^* = t\omega_d$.

Рисунок 4 – Приведенные значения $D(t)/D_0$ при разных значениях параметра связи Γ

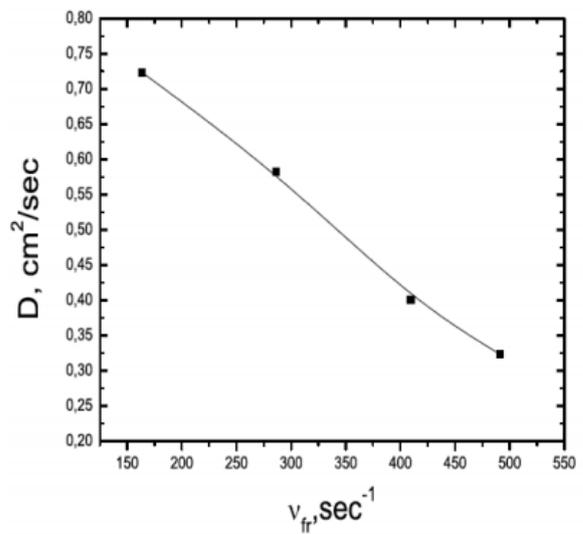


Рисунок 6 – Коэффициент диффузии для $\Gamma=0.1$

Здесь коэффициент диффузии дан в размерном виде. При $\Gamma=80$ получена следующая интерполированная формула, которая совпадает с компьютерным моделированием:

$$D = \frac{0.24k_B T_d}{(\nu_f + 20)m_d} \quad (6)$$

Для других значений Γ и Z_d выполнено компьютерное моделирование, и в следующей работе будет представлена обобщенная формула для широкой области параметров.

Для $\Gamma=0.1$ зависимость обратно пропорциональна коэффициенту трения и имеет значения, которые близки к D_0 . Например, при давлении $P=70$ Па, $m_d=1.72 \cdot 10^{-11}$ г, $k_B T = 2.8 \cdot 10^{-9}$ эрг, $\nu_f = 286 \text{ sec}^{-1}$ коэффициент диффузии равен $D_0=0.58 \text{ cm}^2/\text{sec}$. Вычисления указывают, что $D/D_0 = 1$ при $\Gamma < 0.2$ с большой точностью для широкой области ν_f . Этот факт доказывает правильность соотношения Эйнштейна для малых параметра связи.

Литература

- 1 Fortov V.Ye., Khrapak A.G., Khrapak S.A., Molotkov V.I. and Petrov O.F. Complex plasmas // UFN – 2004. – Vol.174. – P. 495-544.
- 2 Tsytoich V.N. and Winter J. On the role of dust in fusion devices // UFN – 1998. – Vol. 168. – P. 899-912.
- 3 Boufendi L. and Bouchoule A. Particle nucleation and growth in a low-pressure argon-silane discharge // Plasma Sources Sci. Technol. – 1994. – Vol.3. – P.262-273.
- 4 Vaulina O.S., Adamovich X.G., Petrov O.F.,

Fortov V.E. Evolution of the mass-transfer processes in nonideal dissipative systems. I: Numerical simulation // Phys.Rev.E – 2008. – Vol.77. – P.066403(6).

5 Ramazanov T.S. and Dzhumagulova K.N. Shear viscosity of dusty plasma obtained on the basis of the Langevin dynamics // Contr. Plasma Phys. – 2008. – Vol.48. – P. 357-362.

6 Baimbetov F.B., Ramazanov T.S., Dzhumagulova K.N., Kadyrsizov E.R., Petrov O.F., and Gavrikov A.V. Modelling of dusty plasma properties by computer simulation methods // J.Phys.A: Math. And Gen. – 2006. – Vol.39. – P.4521-4525.

7 Hansen J.-P., and McDonald I.R. Theory of simple liquids. – New York: Academic Press, 1976. – 326 p.

8 Donk'о Z. and Nyiri B. Molecular dynamics calculation of the thermal conductivity and shear viscosity of the classical one-component plasma // Phys.Plasmas – 2000. – Vol.7. – P.45(10).

9 Donk'о Z. and Hartmann P. Thermal conductivity of strongly coupled Yukawa liquids // Phys.Rev.E. - 2004. - Vol.69. - P. 016405(12).

К.Н. Dzhumagulova, R.U. Masheeva

Velocity autocorrelation functions and diffusion coefficient of dusty component in complex plasmas

In this article the velocity autocorrelation functions of dusty particles were calculated by the Langevin dynamics. It was indicated that their oscillations decay more rapidly with increase in the friction parameters. The dependencies of the dusty particles diffusion coefficient on the friction coefficient at the different values of various parameters were obtained by the Green-Kubo relation and mean square displacements. The validity of the Einstein formula at small values of coupling parameter was shown.

Түйін сөздер: тозаң плазмасы, автокорреляциялық функция, Ланжевен динамикасының әдісі.

К.Н. Жұмағұлова, Р.У. Машеева

күрделі құрамды плазманың тозаңды бөлігінің диффузия коэффициенті және динамикалық сипаттамалары

Бұл мақалада тозаңды бөлшектердің жылдамдықтарының автокорреляциялық функциясы ланжевендік динамика әдісі арқылы есептелді. Олардың тербелісі үйкеліс коэффициенті өскен сайын тезірек сөнетіні көрсетілді. Тозаңды бөлшектердің диффузия коэффициентінің әртүрлі параметрлерінің әртүрлі мәндерінде алынған үйкеліс коэффициентіне тәуелділігі Грин-Кубо және орташа квадраттық ауытқу әдісімен алынды. Байланыс параметрінің кіші мәнінде Эйнштейннің қатынасы дұрыс екендігі көрсетілді.

Keywords: dusty plasma, autocorrelation function, method lanzhevenovoy dynamics.