

Об определении межчастичного потенциала взаимодействия в пылевой плазме по парной корреляционной функции

Е. М. Апфельбаум⁺¹⁾, Б. А. Кдумов^{+*}, А. Г. Храпак⁺, Г. Е. Морфилл^{+*}

⁺Объединенный институт высоких температур РАН, 125412 Москва, Россия

^{*}Max-Planck-Institut für Extraterrestrische Physik, D-85740 Garching, Germany

Поступила в редакцию 18 июня 2009 г.

После переработки 20 июля 2009 г.

Методом молекулярной динамики исследуется влияние конфайнмента на парную корреляционную функцию микрочастиц, взаимодействующих посредством экранированного кулоновского потенциала (потенциала Юкавы). Полученные данные используются для решения обратной задачи – восстановления потенциала межчастичного взаимодействия. Показано, что для сильнонеидеальной системы (с параметром неидеальности $\Gamma > 1$) такое восстановление, по-видимому, невозможно. В случае $\Gamma \leq 1$ восстановление возможно, если конфайнмент не приводит к сильной неоднородности системы микрочастиц.

PACS: 52.27.Lw, 92.60.Mt, 94.20.–y

В последние годы значительно вырос интерес к процессам, происходящим в плазме, содержащей микрочастицы. Такую плазму обычно называют комплексной (complex plasmas) или пылевой (dusty plasmas) плазмой (см., например, [1]). Интерес к такой плазме обусловлен, с одной стороны, ее широкой распространенностью в природе. Межзвездные облака, газопылевые скопления, планетные кольца [2], атмосферы комет, ионосферы [3] и магнитосферы планет (например, в ионосфере Земли – это серебристые облака [4]) – все эти объекты в той, или иной степени, являются комплексной плазмой. С другой стороны, возможность наблюдения за поведением каждой отдельной микрочастицы позволяет описывать свойства ансамбля пылевых частиц на самом детальном, кинетическом уровне. Это делает пылевую плазму привлекательным инструментом для изучения различных фундаментальных проблем физики, например, для изучения фазовых переходов [1], для понимания природы гидродинамических неустойчивостей [5] и др.

В лабораторных условиях комплексную/пылевую плазму традиционно получают при добавлении микрочастиц в слабоионизованную газоразрядную плазму инертных газов пониженного давления. Рекомбинация электронов и ионов на поверхности пылевых частиц приводит к их быстрой зарядке, величина заряда зависит от размера частицы и параметров плазмы, например, для типичного радиочастотного разряда в аргоне частица размером 1 мкм приобретает

отрицательный заряд $Z_d \sim 10^3 e$, где e – заряд электрона. Такой высокий заряд микрочастицы часто приводит к сильной неидеальности пылевой компоненты, которая может находиться в широком диапазоне фазовых состояний: проявлять себя как газ, жидкость или кристалл (см., например, [1]). Парное взаимодействие микрочастиц играет при этом ключевую роль. Обычно взаимодействие микрочастиц в комплексной плазме описывается экранированным кулоновским потенциалом (потенциалом Дебая-Хюккеля или Юкавы)

$$U(r) = (Z_d/r) \exp(-r/\lambda_D), \quad (1)$$

где r – расстояние между частицами, а λ_D – характерная длина экранирования. Экспериментально определить потенциал межчастичного взаимодействия, анализируя траектории сталкивающихся микрочастиц, удалось, на сегодняшний день, только в [6], где было показано, что указанный потенциал оказался близок к потенциалу Юкавы. Вместе с тем, существует теоретический метод восстановления парного потенциала взаимодействия по парной корреляционной функции [7–9]. Этот метод успешно применялся к простым жидкостям [10], металлам [11] и продолжает использоваться для построений модельных потенциалов различных сред [12]. Он, однако, обладает рядом недостатков, о которых будет сказано ниже. Тем не менее, представляется интересным использовать его для восстановления потенциала в пылевой плазме, которая, в отличие от других сред, удерживается полем ловушки (конфайнмента),

¹⁾e-mail: apfel_e@mail.ru

и выяснить, при каких параметрах плазмы восстановление вообще возможно.

В настоящей работе, используя метод молекулярной динамики (МД), исследуется влияние конфайнмента на радиальную плотность микрочастиц $g(r)$ (парную корреляционную функцию) и на эффективный парный потенциал, восстановленный из $g(r)$. Для простоты рассматривается двумерная система частиц, взаимодействующая посредством потенциала Юкавы. В этом случае $g(r)$ определяется из формулы

$$g(r) = \frac{S}{N^2} \left\langle \sum_i^N \sum_{j \neq i}^N \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{ij}) \right\rangle. \quad (2)$$

Здесь S – площадь изучаемой системы, N – число частиц. Угловые скобки означают усреднение по ансамблю. В случае численного моделирования – это усреднение по квазиравновесным конфигурациям, генерируемым методом МД [13]. Отметим, что парная корреляционная функция может быть легко измерена в экспериментах с комплексной плазмой. В дальнейшем, используя зависимость $g(r)$, решается обратная задача (см., например, [9]) и восстанавливается потенциал межчастичного взаимодействия.

Для решения обратной задачи, как будет показано ниже, важно, чтобы взаимодействие между частицами было слабым, то есть комплексная плазма должна быть в слабонеидеальном состоянии. Это означает, что параметр неидеальности (связи) пылевой подсистемы $\Gamma \equiv (Z_d^2 / \Delta T) \exp(-\kappa) \sim 1$, где T – кинетическая температура микрочастиц, Δ – среднее межчастичное расстояние, а $\kappa = \Delta / \lambda_D$ – структурный параметр. Для двумерного случая очевидно, $\Delta = (S / \pi N)^{1/2}$. Всюду далее температура измеряется в энергетических единицах.

Для простоты считается, что все микрочастицы имеют фиксированный заряд, $Z_d \sim 3 \cdot 10^3 e$, парное взаимодействие пылевых частиц описывается экранированным кулоновским потенциалом при значениях структурного параметра $\kappa \simeq 1 \div 3$ (характерных для экспериментов с комплексной плазмой). Уравнения движения

$$m \ddot{\mathbf{r}}_i = -Z_d \nabla \Phi_c - Z_d \sum \nabla U - m \gamma \dot{\mathbf{r}}_i + \mathbf{L}_i \quad (3)$$

решались для $N = 4000$ микрочастиц с массой m в двумерной геометрии (плоский монослой). Слагаемые в правой части (3) описывают взаимодействие микрочастиц с электрическим полем конфайнмента ($\nabla \Phi_c$), электростатическое взаимодействие между пылевыми частицами и торможение микрочастиц при столкновениях с нейтральными атомами и молекулами буферного газа. \mathbf{L}_i описывает силу Ланже-

вена (тепловой шум, индуцированный нейтральными частицами), которая определяется из

$$\langle \mathbf{L}_i(t) \mathbf{L}_j(t + \tau) \rangle = 2\gamma m \delta_{ij} \delta(\tau) \quad (4)$$

при условии $\langle \mathbf{L}_i(t) \rangle = 0$. Использовались периодические граничные условия на боковых краях ($x = \{0, L_x\}$), а в поперечном направлении ($y = \{0, L_y\}$) микрочастицы удерживаются потенциалом конфайнмента, который является, либо параболическим ($\Phi_c(y) \propto (y - L_y/2)^2$), либо жесткой упругой потенциальной стенкой ($\Phi_c(y) \propto \exp((y - L_y)/\Delta_w)$ при $y > L_y$ и $\Phi_c(y) \propto \exp(-y/\Delta_w)$ для $y < 0$, где пространственный масштаб Δ_w определяет жесткость стенки. В настоящих расчетах использовалась величина $\Delta_w \simeq \Delta/3$.

На рис.1 представлена $g(r)$ для двух видов конфайнмента и разных значений параметра связи $\Gamma = 1, 3, 10$. Видно заметное влияние конфайнмента на парную корреляционную функцию $g(r)$ для указан-

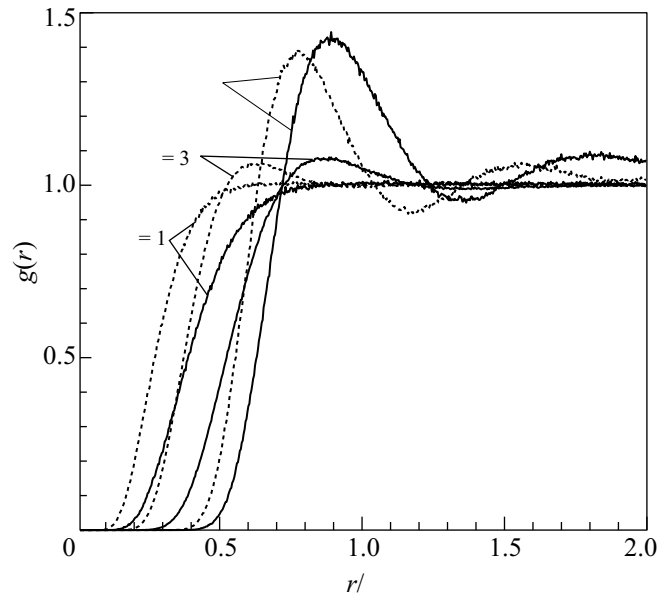


Рис.1. Парная корреляционная функция $g(r)$, рассчитанная методом молекулярной динамики, для нескольких значений параметра неидеальности $\Gamma = 1, 3, 10$ и двух видов конфайнмента: параболического (пунктирные линии) и упругой жесткой стенки (сплошные линии)

ных значений параметра связи Γ . Это связано с тем, что в случае параболического потенциала межчастичное расстояние минимально в центре системы ($y \simeq L_y/2$) и увеличивается к границам ($y \rightarrow \{0, L_y\}$). В случае же конфайнмента в форме жесткой стенки межчастичное расстояние не меняется в объеме и заметно уменьшается только у границ, поэтому плот-

ность микрочастиц и распределение плотности различно для рассмотренных видов поля ловушки. Отметим, что на этот эффект было указано в [14].

Парная корреляционная функция $g(r)$ может быть использована для восстановления потенциала межчастичного взаимодействия (в рассматриваемом случае – потенциала Юкавы). Это связано с тем, что ее можно представить в виде (см., например, [15])

$$g(r) = \exp(-U(r)/T) + \omega(\{g\}). \quad (5)$$

Здесь $U(r)$ – парный потенциал, T – температура, ω – так называемый термический потенциал. Он является функционалом от $g(r)$, что отмечено зависимостью в фигурных скобках. Его можно выразить через сумму неприводимых майеровских диаграмм. Один из методов вычисления $g(r)$ заключается в замене точного функционала на приближенную функцию $\omega(\{g\}) \rightarrow \omega(g)$. Этот прием лежит в основе метода интегральных уравнений теории жидкости [13, 15]. В этом случае уравнение, связывающее g и ω , называется уравнением замыкания (или замыканием). Заметим, что помимо $g(r)$ вводят еще и прямую корреляционную функцию $c(r)$, которая связана с $h(r) = g(r) - 1$ уравнением Орнштейна-Цернике (ОЦ) [13]:

$$h(r) = c(r) + (h \circ c). \quad (6)$$

В (6) символ \circ означает свертку. Из разложения Майера можно получить уравнение замыкания в форме

$$\omega(r) = h(r) - c(r) + B[h(r), c(r)], \quad (7)$$

где B – так называемый бридж-функционал. Именно его заменяют на некоторую приближенную функцию. Уравнения (5)–(7) образуют систему интегральных уравнений, которая решается итерационно. Как видно из (5), решение обратной задачи – тривиально, если известен бридж-функционал B (и, соответственно, ω). В этом случае потенциал равен [16]

$$U(r)/T = \omega(g(r), c(r)) - \ln(g(r)). \quad (8)$$

При достаточно низких плотностях частиц n соотношение (8) может привести к истинному потенциалу. Это связано с тем, что при $n \rightarrow 0$

$$g(r, n, T) \rightarrow \exp(-U(r)/T). \quad (9)$$

При этом влияние термического потенциала $\omega(r)$ невелико. Однако при увеличении плотности влияние термического потенциала начинает превалировать, что приводит к заведомо неправильному виду восстановленного по формуле (8) потенциала [17]. Дополнительно отметим, что, за исключением случая

очень разреженного газа, $g(r) = 0$ на некоем отрезке $r < r_0$, где r_0 – некоторое конечное расстояние. Поэтому формула (8), очевидно, неприменима для этих r .

Для преодоления проблемы больших плотностей был предложен итеративный метод решения, основанный на формуле (8), который формулируется следующим образом [7]. На первом шаге выбирается $\omega(r) = 0$. По известной из измерений или моделирования корреляционной функции $g_{\text{ex}}(r)$ строится начальный потенциал

$$U_0 = -T \ln[g_{\text{ex}}(r)], \quad \omega_0(r) = 0. \quad (10)$$

Используя U_0 , рассчитывается новая корреляционная функция g_0 . Это можно сделать путем численного моделирования либо МД методом, либо методом Монте-Карло. Применяя формулу (8) к g_0 , можно найти термический потенциал на следующем шаге:

$$\omega_1(r) = \ln(g_0(r)) + U_0(r)/T. \quad (11)$$

После подстановки $\omega_1(r)$ в (5), получаем

$$U_1(r) = U_0(r)/T - T \ln[g_{\text{ex}}(r)/g_0(r)] \quad (12)$$

В общем случае [7] парный потенциал $U(r)$ на $k + 1$ шаге определяется из:

$$U_{k+1}(r) = U_k(r) - T \ln[g_{\text{ex}}(r)/g_k(r)], \quad (13)$$

где g_k – парная корреляционная функция на шаге k , полученная численным моделированием системы частиц, взаимодействующих посредством парного потенциала U_k . Итерации прекращаются при достижении необходимой точности: $|U_{k+1} - U_k| < \epsilon$.

Отметим, что более сложная методика, хотя и аналогичная (13), была рассмотрена в работе [8], в которой начальный термический потенциал $\omega_0(r)$ полагался равным термическому потенциалу в системе твердых сфер. В основе такого выбора термического потенциала лежит идея о том, что при больших плотностях жидкости описываются одним универсальным бридж-функционалом [8, 15]. Как следствие, в схеме (13) появляются слагаемые, связанные с прямой корреляционной функцией $c(r)$, которая меняется при итерациях. Поскольку $c(r)$ однозначно связана с $g(r)$ уравнением ОЦ, то присутствие $c(r)$ не меняет схему (13) и позволяет точнее контролировать итерации.

В общем случае функционал $B(r)$ (как и $\omega(r)$) не является однозначно обратимым. Поэтому различные потенциалы могут приводить к одинаковым

функциям $g(r)$ [18, 19]. Несмотря на возможную неоднозначность обратной задачи, методы, предложенные в [7, 8], как уже говорилось выше, активно используются для восстановления потенциала взаимодействия в реальных системах [9–12].

Схема (13) использовалась для расчета потенциала взаимодействия в комплексной (пылевой) плазме [20], причем парная корреляционная функция $g(r)$ определялась из эксперимента. В указанном эксперименте пылевая компонента находилась в сильно-неидеальном состоянии: величина параметра связи варьировалась в пределах: $\Gamma \simeq 30 \div 50$. В [20] было, в частности, показано, что особенностью восстановленного парного потенциала является наличие притяжения.

Одной из возможных причин указанного притяжения, как считалось, может быть поле ловушки, которое в случае пылевой плазмы обычно является параболическим. Электрическое поле конфайнмента удерживает отрицательно заряженные микрочастицы в объеме газоразрядной камеры. Следует заметить, что система во внешнем поле, вообще говоря, является неоднородной. То есть для однородной системы $g(r)$ является функцией от расстояния между двумя частицами, а для неоднородной (во внешнем поле) – функцией от координат каждой из частиц (см., например, [13, 17]). Однако, если форма этого внешнего поля – в нашем случае это поле конфайнмента – такова, что поле заметно отлично от нуля только у стенок ячейки, то внутри ловушки мы можем считать эту систему однородной.

Парные корреляционные функции, представленные на рис.1, использовались, следуя (13), для определения парного межчастичного потенциала взаимодействия. На рис.2 представлены восстановленные парные потенциалы для рассмотренных двух типов конфайнмента (параболического и жесткой упругой стенки) при разных значениях параметра Γ . Отметим, что для обоих видов конфайнмента восстановленный потенциал содержит слабое притяжение, эффективность которого сильно падает с уменьшением параметра связи Γ . Сильное отличие восстановленных потенциалов от исходного, по-видимому, означает невозможность такого восстановления, по крайней мере для параметра неидеальности ($\Gamma > 1$). Однако при слабом (газовом) взаимодействии ($\Gamma \leq 1$) рассматриваемый метод дает потенциал, близкий к исходному в случае конфайнмента – жесткой стенки. Это связано с тем, что указанный потенциал не приводит к появлению неоднородности в системе. В случае же параболического конфайнмента, индуцированное им электрическое поле приводит к сильной

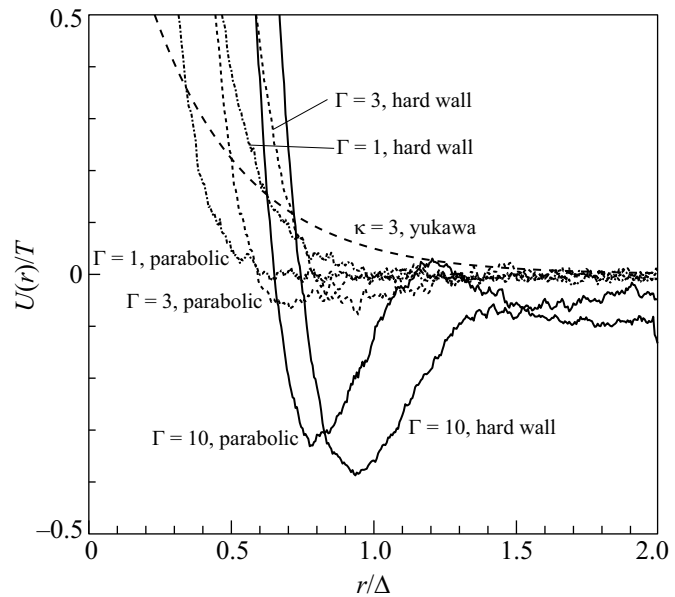


Рис.2. Восстановленные потенциалы $U(r)$ для двух видов конфайнмента и разных значений параметра связи Γ . Также представлен исходный потенциал межчастичного взаимодействия (потенциал Юкавы)

неоднородности плотности частиц (в нашем случае вдоль y). В этом случае восстановленный потенциал также сильно отличается от исходного.

В настоящей работе методом молекулярной динамики исследовалось влияние конфайнмента на парную корреляционную функцию $g(r)$ для сильно- и слабонеидеальной системы Юкавы. Показано, что потенциал ловушки значительно влияет на $g(r)$ в рассмотренном диапазоне параметров неидеальности ($\Gamma \sim 1 \div 10$). Полученная $g(r)$ использовалась для решения обратной задачи – восстановления потенциала межчастичного взаимодействия. Восстановленные потенциалы значительно отличаются от исходного потенциала (Юкавы), причем указанное отличие увеличивается с ростом параметра неидеальности Γ , что, по-видимому, делает невозможным восстановление межчастичного потенциала в комплексной плазме для $\Gamma > 1$. При $\Gamma \leq 1$ парный эффективный потенциал, по-видимому, можно восстановить, если конфайнмент не приводит к сильной неоднородности системы частиц.

Работа выполнена при поддержке грантов Российского фонда фундаментальных исследований # 08-08-00351, # 08-02-00444, # 09-03-00081 и гранта Партнерской группы ОИВТ и МРЕ.

1. V. E. Fortov et al., Phys. Rep. **421**, 1 (2005).
2. M. Horanyi et al., Rev. Geophys. **42**, RG4002 (2004).

3. B. A. Klumov, S. I. Popel, and G. E. Morfill, *JETP* **100**, 152 (2005).
4. B. A. Klumov, S. V. Vladimirov, and G. E. Morfill, *JETP Lett.* **82**, 632 (2005).
5. G. E. Morfill et al., *Phys. Rev. Lett.* **92**, 175004 (2004).
6. U. Konopka, G. E. Morfill, and L. Ratke, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 891 (2000).
7. W. Shommers, *Phys. Rev. A* **28**, 3599 (1983).
8. L. Reatto, D. Levesque, and J. J. Weis, *Phys. Rev. A* **33**, 3451 (1986).
9. A. Lyubartsev and A. Laaksonen, *Phys. Rev. E* **52**, 3730 (1995).
10. Y. Rosenfeld and G. Kahl, *J. Phys.: Cond. Matter* **9**, L89 (1997).
11. S. Munejiri, F. Shimojo, K. Hoshino, and M. Watabe, *J. Phys.: Cond. Matter* **9**, 3303 (1997).
12. Д. К. Белашенко, *Компьютерное моделирование жидких и аморфных веществ*, М.: Наука, 2005.
13. Р. Балеску, *Равновесная и неравновесная статистическая механика*, т. 1., М: Мир, 1978.
14. B. A. Klumov and G. E. Morfill, *JETP Lett.* **85**, 498 (2007).
15. Г. Н. Саркисов, *УФН* **169**, 625 (1999).
16. M. D. Johnson, P. Hutchinson, and N. H. March, *Proc. R. Soc. A* **282**, 283 (1964).
17. E. M. Apfelbaum, *J. Phys. A: Math. Theor.* **42**, 214024 (2009).
18. Д. К. Белашенко, *ЖФХ* **78**, 1621 (2004).
19. D. K. Belashchenko and B. R. Gelchinski, *J. Non-Crystalline Solids* **353**, 3515 (2007).
20. E. M. Apfelbaum, *Phys. Plasmas* **14**, 123703 (2007).