И. И. Файрушин^{*}, О. Ф. Петров, М. М. Васильев

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

> Поступила в редакцию 27 сентября 2019 г., после переработки 11 октября 2019 г. Принята к публикации 11 октября 2019 г.

С применением метода молекулярной динамики смоделирован процесс воздействия силы светового давления на ограниченную область двумерной системы пылевых макрочастиц. Проведен анализ динамики пылевых макрочастиц в квазидвумерной структуре: траекторий частиц, их среднеквадратичного смещения, кинетической энергии при разных значениях параметра неидеальности и мощности лазерного излучения. Показано, что, изменяя мощность излучения, можно влиять на процессы самодиффузии и величину хаотической скорости движения частиц. Исследование проведено для разных начальных значений параметра неидеальности невозмущенной пылевой подсистемы. Выявлено, что в результате межчастичного взаимодействия происходит увеличение кинетической энергии частиц как в области воздействия, так и за ее пределами.

DOI: 10.31857/S0044451020030189

1. ВВЕДЕНИЕ

В последние десятилетия исследованию систем сильновзаимодействующих пылевых частиц в плазме газового разряда посвящено большое количество работ. Пылевая плазма является уникальным объектом исследования процессов переноса, самоорганизации, фазовых переходов на кинетическом уровне [1–10]. Результаты данных исследований могут быть полезны для самых разных областей науки, от физики конденсированного состояния до астрофизики, а также для многих технологических приложений [1, 2]. Особое место занимают работы, посвященные изучению динамических процессов в плазменно-пылевых системах, протекающих в условиях внешних воздействий [3–7]. Кроме того, являясь открытыми и диссипативными, системы пылевых частиц в газовом разряде представляют интерес для исследователей, работающих в области физики неравновесных систем. Поиск новых закономерностей в этой области придает значительный импульс для развития представлений о физических явлениях в

^{*} E-mail: fairushin_ilnaz@mail.ru

таких системах. Работа внешних сил может приводить к направлено-хаотическому движению отдельных частиц системы, которые в этом случае приобретают специфическую динамику и могут быть интерпретированы как так называемые активные частицы, или активная материя (active matter) [11].

Системы пылевых частиц в низкотемпературной плазме могут иметь самые разнообразные пространственные конфигурации, что существенно отражается на их характеристиках [12–16]. Особое внимание следует обратить на квазидвумерные системы, которые обладают рядом уникальных свойств, например, особым характером протекания фазовых переходов [16, 17]. Кроме того, такие системы оказываются достаточно простыми для их диагностики. Экспериментально квазидвумерные системы реализуются в плазме высокочастотного емкостного разряда низкого давления [1]. Внешние воздействия на плазменно-пылевые системы могут реализовываться посредством магнитных [18] и электрических [17, 19] полей или же в результате воздействия лазерного излучения [20]. В случае лазерного воздействия могут проявляться силы светового давления, фотофоретический эффект — нагрев частиц, обусловленный поглощением ими лазерного излучения

[21], фотоэффект, эрозия поверхности частиц, деформация и разрушение частиц [22]. Все перечисленные эффекты могут влиять на динамику частиц в плазменно-пылевой структуре.

Однако для экспериментов с плазменно-пылевыми структурами, сформированными полимерными частицами (в частности частицами меламин-формальдегида), не поглощающими лазерное излучение, и при длинах волн воздействующего излучения в видимом диапазоне, лежащих ниже красной границы фотоэффекта для данного вещества, воздействие лазерного излучения можно рассматривать как действие на частицы силы светового давления. В рамках экспериментальных исследований динамики одиночных пылевых частиц меламинформальдегида, не поглощающих лазерное излучение, также ограничиваются рассмотрением лишь действия силы светового давления [4]. Стоит отметить, что влияние светового давления направленного лазерного излучения на динамические характеристики малоразмерных плазменно-пылевых кластеров исследовалось численно и экспериментально в работах [23,24].

Сочетание экспериментальных исследований плазменно-пылевых систем с их моделированием, например методом молекулярной динамики, позволяет проверять теоретические представления о физических процессах, что предоставляет более широкие возможности в выборе параметров рассматриваемого объекта и характера внешних воздействий. Кроме того, это позволяет проводить диагностику такой системы без внесения в нее возмущений.

2. ОПИСАНИЕ МОДЕЛИ И ПОЛУЧЕННЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

Целями данной работы являлись моделирование методом молекулярной динамики поведения пылевых частиц при внешнем воздействии на них лазерного излучения и исследование процесса самодиффузии в квазидвумерной плазменно-пылевой системе. Взаимодействие частиц осуществлялось через потенциал Юкавы. Длина волны излучения лазера предполагалась находящейся в зеленой области видимого спектра, поэтому воздействие лазера рассматривалось лишь как действие силы светового давления на макрочастицы в области излучения. Данная зона охватывала центральную область системы шириной в шесть средних межчастичных расстояний. При моделировании предполагалось, что частицы имеют одинаковый размер и состав. Начальное расположение частиц равномерное. Потенциалом взаимодействия выбран потенциал Юкавы,

$$\varphi(r) = \frac{Z_d}{r} \exp\left(-\frac{r}{\lambda_D}\right),\tag{1}$$

где Z_d — заряд частиц, r — расстояние между частицами, λ_D — дебаевский радиус экранирования, который брался равным среднему межчастичному расстоянию, что соответствует параметрам моделирования подобных систем и близко к реальным экспериментам [1]. Уравнение движения *i*-й частицы записывается в следующем виде:

$$m\ddot{\mathbf{r}}_{i} = -Z_{d} \sum \nabla \varphi - m\gamma \dot{\mathbf{r}}_{i} + \mathbf{L}_{i} + \mathbf{F}_{laser} + \mathbf{F}_{conf}.$$
 (2)

Здесь $m\gamma \dot{\mathbf{r}}_i$ — сила трения, действующая на макрочастицу со стороны нейтралов, \mathbf{L}_i — случайная сила, определяющая термостат Ланжевена, \mathbf{F}_{conf} — сила со стороны границы области, благодаря которой частицы удерживаются в ее пределах, \mathbf{F}_{laser} — сила светового давления, действующая на частицы в выделенном направлении [4]. Величина данной силы определяется интенсивностью лазерного излучения и оптическими характеристиками вещества макрочастиц [4]:

$$F_{laser} = q \frac{n \pi r_d^2 I_{laser}}{c}.$$
 (3)

Здесь q — поправочный коэффициент, зависящий от формы частицы и показателя преломления ее вещества, n — показатель преломления среды, окружающей частицы, r_d — радиус частицы пыли, I_{laser} интенсивность лазерного излучения, c — скорость света. Мощность излучения в области воздействия можно с большой точностью полагать распределенной равномерно [7]. Предполагалось, что силы, ортогональные плоскости системы, уравновешивают друг друга и могут быть исключены из рассмотрения.

Двумерная область, ограниченная потенциальной ловушкой радиусом 50 мм, заполнялась частицами в количестве 2048, с межчастичным расстоянием 1000 мкм и радиусом частиц 10 мкм. Заряд на частицах принимался равным 10000 зарядов электрона, что соответствует данным многих работ, см., например, [5]. Определение параметра неидеальности осуществлялось путем анализа парной корреляционной функции с помощью методики, изложенной в работе [25].

На рис. 1 показано, как меняются положения частиц в зависимости от отсутствия или наличия



Рис. 1. Траектории частиц в системе с параметром неидеальности невозмущенной системы $\Gamma = 156$, полученные в течение 10 с без воздействия (*a*) и при воздействии (*b*) лазерного излучения

лазерного воздействия. Вблизи границ исследуемой области воздействие лазерного излучения приводит к вихревому характеру движения частиц.

Были получены зависимости среднеквадратичного смещения частиц от времени в разных областях системы в двух взаимно перпендикулярных направлениях ($\langle \Delta x(t)^2 \rangle$ и $\langle \Delta y(t)^2 \rangle$), при разных значениях мощности воздействующего лазерного излучения и разных параметрах неидеальности невозмущенной пылевой подсистемы. При определении $\langle \Delta x(t)^2 \rangle$ в зоне воздействия лазерного излучения учитывалось направленное движение частиц вдоль оси x с некоторой поступательной скоростью.

Полученные данные были использованы для расчета коэффициента самодиффузии в системе частиц:

$$D \equiv \lim_{t \to \infty} \frac{\langle \Delta l^2 \rangle}{2t},\tag{4}$$

где

$$\langle \Delta l^2 \rangle = \langle \Delta x(t)^2 \rangle + \langle \Delta y(t)^2 \rangle.$$

Все расчеты проводились после установления стационарного режима (спустя 100 с) после начала действия лазерного излучения.

На зависимостях среднеквадратичного смещения частиц от времени в зоне облучения системы при значении параметра неидеальности невозмущенной системы $\Gamma = 156$ (рис. 2a) можно отметить наличие баллистического участка (наклон с асимптотикой t^2) с выходом на плато, т.е. частицы остаются запертыми в ловушках, образованных электрическими полями и ближайшими соседями. Это происходит при отсутствии лазерного излучения или при его малой мощности. Рост мощности лазерного излучения приводит к тому, что поведение временной зависимости среднеквадратичного смещения характеризуется исчезновением выхода на плато. Это означает, что частицы преодолевают потенциальную ловушку, в которой изначально находились, и переходят в диффузионный режим (наклоны с асимптотиками соответственно $t^{3/2}$ и t). При $\Gamma = 104$ и $\Gamma = 35$ (соответственно $t^{3/2}$ и t). переход из баллистического режима в диффузионный происходит даже в отсутствие лазерного излучения. Это объясняется тем, что система изначально находилась в жидком состоянии.

Рассмотрим более детально причину усиления диффузионного процесса при воздействии лазерного пучка на квазидвумерную систему пылевых частиц в плазме. Сила светового давления, воздействующая на макрочастицы, приводит к возникновению области их неоднородного распределения. Потенциал Юкавы (1) является отталкивательным, поэтому возникновение областей с пониженной концентрацией частиц приводит к тому, что в эти области устремятся частицы из областей с большей плотностью. Данные частицы будут набирать дополнительную кинетическую энергию и станут более подвижны, чем частицы вне возмущенной области системы. Увеличение же кинетической энергии частиц вне области распространения излучения (рис. 3) происходит благодаря взаимодействию частиц, и эта



Рис. 2. (В цвете онлайн) Зависимости среднеквадратичного смещения частиц от времени в зоне облучения системы при значениях параметра неидеальности невозмущенной системы $\Gamma = 156$ (*a*), 104 (*b*), 35 (*b*) и при мощностях воздействующего лазерного излучения от P = 0 до P = 1080 мВт. Штриховыми линиями показаны участки наклона кривых, соответствующие баллистическому (t^2) , переходному $(t^{3/2})$ и диффузионному (t) режимам



Рис. 3. Зависимости кинетической энергии хаотического движения частиц в зоне (кривые 1) и вне зоны (кривые 2) облучения при различных мощностях воздействующего лазера и при $\Gamma = 156$ (a), 104 (b), 35 (e)

энергия не успевает рассеиваться в окружающий буферный газ. Данное обстоятельство, в частности, приводит к тому, что при $\Gamma = 104$ и максимальной мощности лазерного излучения в системе возникает фазовый переход типа кристалл-жидкость. Необходимо отметить, что благодаря рассмотрению всей системы целиком вместе с ее границами становится возможным выявлять эффекты, связанные с изменением концентраций частиц в разных областях. Указанные особенности не могут быть выявлены, если рассматривать систему с периодическими граничными условиями.

Зависимости коэффициентов диффузии от параметров неидеальности Γ_a , рассчитанных для области лазерного воздействия, во всех трех случаях в пределах погрешностей ведут себя монотонно (рис. 4). С ростом значения Γ_a коэффициент диффузии уменьшается, что согласуется с результатами других исследований [26, 27].

Стоит отметить, что коэффициент диффузии в системе частиц зависит не только от хаотической составляющей скорости их движения, но и от скорости поступательного движения отдельных частиц в разных направлениях. Возникновение поступательной составляющей скорости отдельных частиц обусловлено образованием потенциальных ям (каналов), по которым частицам наиболее энергетически выгодно двигаться. Отметим, что возникновение данных каналов наиболее ярко проявляется при максимальных значениях параметра неидеальности исходной системы. Таким образом, для корректного определения коэффициента диффузии в системе частиц с внешним воздействием необходимо анализировать движение каждой отдельной частицы, чтобы иметь возможность учитывать направленную составляющую скорости.

На рис. 3*є* видно, что при малом параметре неидеальности воздействующее излучение не сразу приводит к формированию направленного движения, а существует некоторое критическое значение мощности. Так, при $\Gamma = 35$ формирование течения начинается лишь при мощности излучения 400 мВт, в то время как при $\Gamma = 156$ явно выраженного порога не наблюдалось. Движение макрочастиц под действием лазерного пучка оказывается менее выраженным, чем их тепловое (хаотическое) движение, и проявляется слабо.

3. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

С помощью метода молекулярной динамики проведено моделирование воздействия светового давления лазерного излучения на квазидвумерную пылевую систему с характеристиками, соответствующими экспериментально наблюдаемым в плазме ВЧ-разряда. Численные эксперименты выполнены



Рис. 4. Зависимости коэффициента диффузии в зоне облучения от параметра неидеальности Γ_a , рассчитанного для этой же области, при $\Gamma = 156$ (*a*), 104 (*б*), 35 (*e*)

для разных значений параметров неидеальности пылевой подсистемы. Обнаружено ускорение диффузии макрочастиц в области лазерного облучения, причем оно происходит тем интенсивнее, чем больше исходный параметр неидеальности. Так, при Г = 156 и мощности излучения 1200 мВт значение средней кинетической энергии частиц в области лазерного воздействия более чем в два раза превышает исходную. В случае $\Gamma = 35$ при тех же условиях увеличение средней кинетической энергии частиц в области воздействия не превышает 30%. Выявлено, что в результате взаимодействия макрочастиц происходит увеличение их кинетической энергии не только в области воздействия, но и за ее пределами. Здесь также наблюдается более интенсивный рост средней кинетической энергии при больших значениях параметра неидеальности. Данные процессы напрямую зависят от мощности излучения и начальных параметров системы. Показано, что в проявлении данных особенностей в процессах диффузии при направленном внешнем воздействии важную роль играет пространственная ограниченность квазидвумерной плазменно-пылевой системы.

ЛИТЕРАТУРА

- Complex and Dusty Plasmas, ed. by V. E. Fortov and G. E. Morfill, CRC Press, Boca Raton, USA (2010).
- R. E. Boltnev, M. M. Vasiliev, E. A. Kononov et al., Sci. Rep. 9, 3261 (2019).
- Ф. М. Трухачёв, М. М. Васильев, О. Ф. Петров и др., Вестник ОИВТ 1, 26 (2018).
- B. Liu, J. Goree, V. Nosenko, and L. Boufendi, Phys. Plasmas 10, 9 (2003).
- О. С. Ваулина, А. Ю. Репин, О. Ф. Петров и др., ЖЭТФ 129, 1118 (2006).
- О. С. Ваулина, О. Ф. Петров, А. В. Гавриков и др., Физика плазмы 33, 311 (2007).
- Н. А. Ворона, А. В. Гавриков, А. С. Иванов и др., ЖЭТФ 132, 941 (2007).
- V. Nosenko and J. Goree, Phys. Rev. Lett. 93, 155001-1 (2004).

- V. E. Fortov, O. F. Petrov, O. S. Vaulina et al., Phys. Rev. Lett. 109, 055002 (2012).
- A. Gavrikov, I. A. Shakhova, A. S. Ivanov et al., Phys. Lett. A 336, 378 (2005).
- C. Bechinger, R. D. Leonardo, H. Löwen et al., Rev. Mod. Phys. 88, 045006 (2016).
- Н. Н. Антонов, А. В. Гавриков, А. С. Иванов и др., ЖЭТФ 141, 1222 (2012).
- В. Е. Фортов, О. Ф. Петров, О. С. Ваулина и др., Письма в ЖЭТФ 97, 366 (2013).
- 14. О. Ф. Петров, М. М. Васильев, Йе Тун и др., ЖЭТФ 147, 372 (2015).
- K. R. Sütterlin, A. Wysocki, C. Räth et al., Plasma Phys. Control. Fusion 52, 124042 (2010).
- 16. O. F. Petrov, M. M. Vasiliev, O. S. Vaulina et al., Europhys. Lett. 111, 45002 (2015).
- D. Samsonov, S. K. Zhdanov, R. A. Quinn et al., Phys. Rev. Lett. 92, 255004 (2004).
- 18. M. M. Vasiliev, L. G. D'yachkov, S. N. Antipov et al., Europhys. Lett. 93, 15001 (2011).
- 19. G. I. Sukhinin, A. V. Fedoseev, M. V. Salnikov et al., Phys. Rev. E 95, 063207 (2017).
- 20. К. Г. Косс, О. Ф. Петров, М. И. Мясников и др., ЖЭТФ 150, 111 (2016).
- 21. K. Arkar, M. M. Vasiliev, and O. F. Petrov, J. Phys.: Conf. Ser. 1147, 012113 (2019).
- 22. Т. И. Морозова, С. И. Копнин, С. И. Попель, Вопросы атомной науки и техники 82, 84 (2012).
- **23**. Е. А. Лисин, О. С. Ваулина, ЖЭТФ **142**, 1077 (2012).
- 24. E. A. Lisin, R. A. Timirkhanov, O. S. Vaulina et al., New J. Phys. 15, 053004 (2013).
- O. S. Vaulina and I. E. Dranzhevski, Phys. Scripta 73, 577 (2006).
- 26. O. S. Vaulina, X. G. Adamovich, O. F. Petrov et al., Phys. Rev. E 77, 066403 (2008).
- 27. O. S. Vaulina, X. G. Adamovich, O. F. Petrov et al., Phys. Rev. E 77, 066404 (2008).