

Неоднородное распределение заряженных частиц в аэрозолях и продуктах сгорания

Драган Г.С., Коськин Е.В.

Одесский национальный университет

Предложен аналитический метод определения равновесного состояния линейной цепочки большого числа идентичных точечных частиц, взаимодействующих между собой посредством парного потенциала. В качестве характеристики, определяющей состояние равновесия, была использована функция смещения, показывающая отклонение каждой частицы от ее положения в случае базисного однородного распределения по длине. Было получено уравнение на функцию смещения, где задача о нахождении этой функции основывалась на условии баланса сил, действующих на все частицы со стороны ближайших соседей и всех остальных частиц цепочки. Найдена функция линейной плотности непосредственно из функции смещения. Предложенный метод нахождения равновесного состояния имеет преимущество над методом ближайших соседей, так как позволяет более точно определить равновесную конфигурацию цепочки.

Ключевые слова: парное взаимодействие, линейная цепочка, нелокальное взаимодействие, дымовая плазма, аэрозоль.

Запропоновано аналітичний метод визначення рівноважного стану лінійного ланцюжка великого числа ідентичних точкових частинок, взаємодіючих між собою за допомогою парного потенціалу. Як характеристику, що визначає стан рівноваги, було використано функцію зсуву, яка показує відхилення кожної частинки від її положення у випадку базисного однорідного розподілу по довжині. Було отримано рівняння на функцію зсуву, де задача про знаходження цієї функції ґрунтувалася на умові балансу сил, що діють на всі частинки з боку найближчих сусідів та всіх інших частинок ланцюжка. Знайдено функцію лінійної щільності безпосередньо з функції зсуву. Запропонований метод знаходження рівноважного стану має перевагу над методом найближчих сусідів, тому що дозволяє більш точно визначити рівноважну конфігурацію ланцюжка.

Ключові слова: парна взаємодія, лінійний ланцюжок, нелокальна взаємодія, димова плазма, аерозоль.

Упорядоченные пространственные структуры конденсированных частиц в низкотемпературной плазме давно привлекают внимание исследователей [1–6], тем не менее вопрос о механизмах их возникновения до сих пор остается дискуссионным [7]. В первых работах [8–10] предполагалось, что причиной формирования структур является электростатический заряд на поверхности частиц, который вызывает их кулоновское взаимодействие. Дальнейшие исследования показали, что в пылевой плазме [11] важную роль играют также силы ионного ветра и силы гидродинамического происхождения. Особенно существенную роль эти силы играют в процессе формирования войдов — сферических полостей в плазменных кристаллах, которые были обнаружены и исследованы экспериментально [12–16]. В дымовой плазме равновесные упорядоченные структуры могут возникать так же, как и в газоразрядной пылевой

плазме, но причиной их появления является результирующее взаимодействие сил кулоновского происхождения и диффузионной силы неравновесных носителей заряда [5]. В обоих случаях имеет место неравномерное распределение частиц на границе облака, а также на внутренней границе войда. Именно поэтому представляет интерес задача о нахождении распределения плотности конденсированных заряженных частиц в пылевой плазме внутри и на границах пылевого облака, что позволит описать процессы формирования войдов, а также изучить механизмы их образования в пылевой и дымовой плазме.

Постановка одномерной задачи. Существуют методы, позволяющие описывать поведение систем, состоящих из большого числа взаимодействующих частиц, с помощью которых удается объяснять макроскопические свойства этих систем на основе микроскопических

параметров, определяющих элементарные взаимодействия между частицами. Среди этих методов явно выделяются гидродинамические, статистической физики и молекулярной динамики. При низкой температуре, когда тепловая энергия движения частиц намного меньше их потенциальной энергии взаимодействия, частицы с характерным типом потенциала парного взаимодействия склонны к структурированию в кластеры или кристаллы. В таких системах частицы закреплены в узлах решетки и совершают случайное блуждание из узла в узел с вероятностью, нелинейно зависящей от соотношения энергии перескока к температуре. Из результатов наблюдений макроскопических структурированных систем таких, как плазменные кристаллы [15], видно, что пылинки не совершают перескоков на протяжении всего времени эксперимента. Это свидетельствует о неприменимости методов статистической физики для глобального описания подсистемы пылевых частиц и невозможности использования нелокальных уравнений для корреляционных функций. В связи с этим оказывается удобным использование методов молекулярной динамики, с помощью которых удастся смоделировать равновесную конфигурацию системы и наблюдать специфические эффекты самоорганизации частиц в ней. Однако это численное решение уравнений движения не объясняет причины и критерии существования полученных упорядоченных структур. Поэтому для их анализа необходим соответствующий аналитический подход.

В большинстве работ, посвященных исследованию образования войдов, результаты были получены из решения соответствующих гидродинамических задач численными методами [17, 18]. Во всех этих случаях на границе войда наблюдалось уплотнение частиц, вызванное, очевидно, поверхностными эффектами. Например, в работах [18, 19] наблюдалось заметное повышение плотности пылевых частиц на границе войда. В работе [20] было показано, что линейная неустойчивость плотности частиц в пылевой плазме может быстро разрастись и превратиться в войд. Наряду с тем, распределение частиц в пылевом облаке может быть описано не в терминах понятия плотности, а с помощью более общего понятия — равновесной функции смещения $\mathbf{u}(\mathbf{r})$, определяющей отклонение всех частиц дисперсной системы от любой заданной базисной конфигурации. Распределение плотности частиц, как будет показано ниже, будет однозначно выражаться через функцию смещения. Что касается условия стабильного существования войда, то его уплотненная внутренняя

оболочка должна служить жестким каркасом, противодействующим сжатию со стороны внешних частиц.

Любое межчастичное взаимодействие в конденсированной среде можно задать с помощью модельного (классические кристаллы: потенциалы Леннарда-Джонса, Морзе, Тоды, Ми и т.д.) или эффективного (плазменные кристаллы, коллоидные системы: потенциал Дебая-Хюккеля) парного потенциала взаимодействия $\Phi(x)$. Поэтому вопрос об условии существования войда сводится к поиску метода, позволяющего с помощью известного парного потенциала взаимодействия получить зависимость потенциальной энергии кристалла от радиуса войда, которая в итоге должна привести к наличию локального минимума потенциальной энергии кристалла при ненулевом радиусе войда.

В настоящей работе предложен метод нахождения равновесного состояния одномерной системы идентичных точечных частиц, взаимодействующих между собой посредством парного потенциала. Несмотря на то, что для этого случая возникновение войда маловероятно из-за отсутствия взаимодействия между частицами в направлении, перпендикулярном к направлению сжатия, практические результаты, касающиеся образования войда, имеют смысл после обобщения метода на двух- и трехмерный случаи.

Рассмотрим одномерную квазистатистическую систему, состоящую из N одинаковых частиц, для которых среднеквадратичное смещение от состояния равновесия незначительно по отношению к среднему расстоянию между частицами. Необходимо найти равновесное распределение частиц в системе и учесть вклад краевых эффектов в постановке задачи, связанных с конечным размером цепочки.

Потенциальную энергию такой системы в отсутствии внешнего поля можно приближенно представить в виде суммы парных взаимодействий, где частицы влияют друг на друга только посредством парного потенциала с энергией взаимодействия между j -й и i -й частицами, равной $\Phi(x_j - x_i)$, которая является четной функцией:

$$W = 0,5 \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^N \Phi(x_j - x_i). \quad (1)$$

Тогда сила, действующая на каждую из частиц, будет равна:

$$F(x_i) = \sum_{\substack{j=1 \\ i \neq j}}^N f(x_j - x_i), \quad i = 1 \dots N. \quad (2)$$

$$\text{где } f(x_j - x_i) = \frac{d\Phi(x_j - x_i)}{d(x_j - x_i)}.$$

Выражение (2) описывает силу, действующую на i -ю частицу со стороны всех остальных частиц. Такая система может находиться в состоянии равновесия, когда результирующая всех сил, действующая на каждую частицу, будет равна нулю. Результатом устойчивого состояния равновесия будет некоторое распределение частиц в пространстве, причем в общем случае это распределение будет неравномерным. Записав N выражений для $F(x_i)$ и приравняв их к нулю, получим систему N уравнений с N неизвестными для x_i . Решение системы алгебраических уравнений позволит определить координату каждой частицы и таким образом найти распределение частиц в пространстве. Однако в случае большого числа частиц в двух- и трехмерном пространстве данные методы являются нерациональными, в связи с необходимостью решения $\sim N$ (в общем случае нелинейных) уравнений, что значительно усложняет процессы вычислений. В таком случае необходимо перейти от дискретного распределения частиц к непрерывному, сведя задачу к поиску одной характеристической функции. В непрерывном случае, когда расстояние между соседними частицами намного меньше размеров системы, основной характеристикой, определяющей распределение частиц по оси цепочки, является функция смещения $u(x)$, показывающей отклонение i -й частицы от ее положения в случае некоторого базисного (однородного) распределения по длине. Линейная плотность частиц $n(x)$, как будет показано ниже, может выражаться через функцию смещения.

При построении уравнения для $u(x)$ необходимо учесть баланс сил не только при взаимодействии с ближайшими соседями, но и со всеми остальными частицами. В противном случае краевые эффекты, связанные с обрывом цепочки, учесть не удастся, а уравнение на функцию смещения примет классический вид: $u''(x) = 0$. Для того, чтобы оценить вклад всех остальных частиц в баланс сил, действующих на выбранную частицу, запишем выражение (2) в терминах базисного распределения и функции смещения:

$$F(\tilde{x}_i + u(x_i)) = \sum_{\substack{j=1 \\ i \neq j}}^N f(\tilde{x}_j - u(\tilde{x}_j)) - \tilde{x}_i - u(\tilde{x}_i), i = 1 \dots N, \quad (3)$$

где $\tilde{x}_i = \tilde{x}_1 + (i - 1)d$, $x_1 = a$, $x_N = b$ — координаты частиц в случае базисного (однородного) распределения по длине, для которого среднее расстояние между частицами равно d . Ниже будет показано, что этот параметр определяется для цепочки частиц с закрепленными и свободными концами.

Для вывода уравнения для функции смещения запишем выражение (3), выделяя из соответствующей суммы взаимодействие i -й частицы с соседними и приравнявая силы к нулю:

$$\begin{aligned} & \sum_{j=1}^{i-2} f(\tilde{x}_j - u(\tilde{x}_j)) - \tilde{x}_i - u(\tilde{x}_i) + \\ & + \sum_{j=i+2}^N f(\tilde{x}_j - u(\tilde{x}_j)) - \tilde{x}_i - u(\tilde{x}_i) + \\ & + f(\tilde{x}_{i-1} - u(\tilde{x}_{i-1})) - \tilde{x}_i - u(\tilde{x}_i) + \\ & + f(\tilde{x}_{i+1} - u(\tilde{x}_{i+1})) - \tilde{x}_i - u(\tilde{x}_i) = 0. \end{aligned} \quad (4)$$

В случае, когда среднее расстояние между частицами намного меньше размеров системы и края цепочки закреплены, можно перейти от суммирования в вышеуказанном выражении к интегрированию, записав уравнение баланса в виде:

$$\begin{aligned} & d^{-1} \int_a^{x-2d+u(x-2d)} f(y+u(y)) - x - u(x) dy + \\ & + d^{-1} \int_{x+2d+u(x+2d)}^b f(y+u(y)) - x - u(x) dy + \\ & + f(u(x-d) - u(x) - d + f(u(x+d) - u(x) + d)) = 0. \end{aligned} \quad (5)$$

Выражение (5) можно упростить, если положить, что $u(x) < d$ и учесть $f(-x) = -f(x)$:

$$\begin{aligned} & \int_a^{x-2d} f(y+u(y)) - x - u(x) dy + \\ & + \int_{x+2d}^b f(y+u(y)) - x - u(x) dy + \\ & + d^3 \cdot f'(d) u''(x) = 0. \end{aligned} \quad (6)$$

Полученное уравнение позволяет найти функцию смещения частиц в одномерной системе при известных краевых условиях. Здесь и далее будем использовать случай закрепленных концов: $u(a) = u(b) = 0$.

Теперь выясним, как функция смещения $u(x)$ связана с локальной плотностью частиц $n(x)$. Для этого используем очевидное положение: во сколько раз увеличится расстояние между двумя соседними (по отношению к средней) частицами, во столько раз уменьшится средняя плотность вещества в окрестности середины этого интервала:

$$\frac{x_{i+1} - x_{i-1}}{\tilde{x}_{i+1} - \tilde{x}_{i-1}} = \frac{n_0}{n(x_i)}$$

Из этого выражения в приближении малых смещений получим:

$$n(x) = \frac{n_0}{1 + u(x+d) - u(x-d) / 2d}$$

Решение поставленной задачи для цепочки частиц с парным потенциалом взаимодействия типа Морзе. Применим предложенную теорию на случай модельного межчастичного потенциала Морзе, которым могут быть хорошо аппроксимированы межчастичные взаимодействия в кристаллических телах:

$$\Phi(x) = E[e^{-2\alpha(|x|-\sigma)} - 2e^{-\alpha(|x|-\sigma)}],$$

где E – глубина потенциальной ямы; σ – равновесное расстояние между двумя частицами; α – варьирует ширину потенциальной ямы. Этот потенциал не имеет особенности в нуле, но обладает минимумом, характерным для большинства межчастичных взаимодействий.

Прежде, чем решать задачу с потенциалом Морзе, упростим уравнение (6), положив функцию смещения в подынтегральном выражении равной нулю. Введем для удобства новые переменные: $x = td$, $q = \alpha d$, $p = \sigma\alpha$, $u = vd$, $a = 0$, $b = L$, $L/d = N$, где L – длина цепочки; N – число частиц в цепочке. Тогда после простого интегрирования безразмерная функция смещения для $N \gg 1$ примет вид:

$$v(t) = [0,25e^{-2(q(N-t)-p)} - 2e^{-(q(N-t)-p)} - 0,25e^{-2(qt-p)} + 2e^{-(qt-p)} - C_1] / Aq + C_2t;$$

$$C_1 = 2e^p - 0,25 e^{2p};$$

$$C_2 = (4 e^p - 0,5 e^{2p}) / ANq^2. \quad (7)$$

В случае незакрепленных концов цепочки необходимо найти соответствующее среднее межчастичное расстояние d из условия минимума потенциальной энергии цепочки (1). Но принимая во внимание тот факт, что сама функция смещения была найдена в нулевом приближении, учет ее в выражении (1) оказывается бессмысленным. Поэтому потенциальная энергия цепочки примет вид:

$$W = \frac{N}{2} \sum_{k=1}^N \Phi(kd). \quad (8)$$

Для потенциала Морзе в пределе $N \gg 1$ и в терминах p , q потенциальная энергия после суммирования примет вид:

$$W = \frac{EN}{2} \left(\frac{e^{2p}}{1-e^{-2q}} - \frac{2e^p}{1-e^{-q}} \right). \quad (9)$$

Минимум функции (9) для области $q > 0$ определяет равновесное среднее безразмерное межчастичное расстояние q :

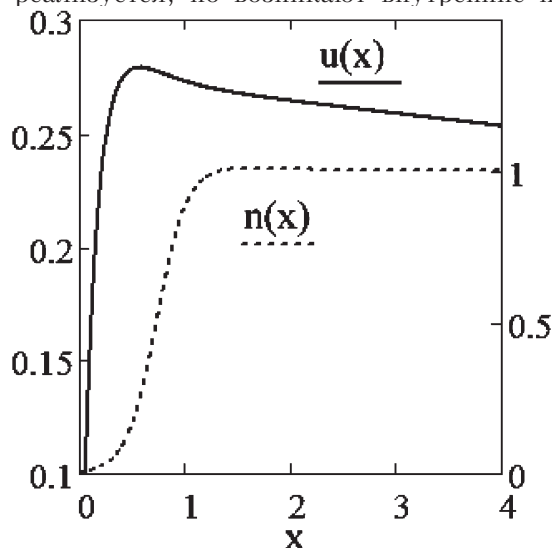
$$q(p) = \ln(2) - \ln(e^p - 2 - \sqrt{e^{2p} - 4e^p}), \quad p > 2\ln(2). \quad (10)$$

Если $p < 2 \ln(2)$, то $q = 0$, что соответствует коллапсу системы.

На рисунке изображены функция смещения и плотности для цепочки из $N = 100$ атомов меди в отсутствии внешнего натяжения. Для меди параметры потенциала Морзе будут равны: $E = 0,3429$ эВ, $\alpha = 0,13588$ нм⁻¹, $\sigma = 0,2866$ нм [21]. Тогда $p = 3,886$, а среднее расстояние между частицами из условия минимума (9) равно $q = 3,844$, что почти совпадает с p .

Функция смещения меняет знак с «+» на «-» при переходе через середину цепочки, что указывает на появление дополнительного сжатия свободной цепочки, связанного с ее конечным размером.

Результаты. С помощью условия баланса сил парного взаимодействия между частицами в линейной цепочке было выведено уравнение на функцию смещения $u(x)$ (6), имеющее в общем случае нелинейные и нелокальные особенности. Поиск этой функции по определению эквивалентен нахождению координат равновесного положения частиц в цепочке для случая дискретного распределения. С помощью приближений, которые пришлось ввести для упрощения математических расчетов, функции смещения и линейной плотности частиц были найдены в нулевом приближении для межчастичного потенциала взаимодействия типа Морзе. Обнаружено, что для свободной цепочки атомов меди функция смещения положительная на первой половине ее длины и отрицательная на второй. Это объясняется тем, что в однородном случае средняя сила, действующая со стороны всей цепочки на ее отдельные частицы, направлена внутрь. Таким образом, поверхностное натяжение в свободной цепочке Морзе для меди не реализуется, но возникают внутренние на-



Зависимость функции смещения и плотности частиц в системе.

пряжения, о которых свидетельствует линейный наклонный участок функции смещения. Из анализа выражения (10) видно, что равновесное среднее межчастичное расстояние в свободной цепочке всегда меньше положения минимума парного потенциала, но быстро к нему стремится при его увеличении. Если $0 < p < 2/\ln(2)$, то равновесное среднее межчастичное расстояние равно нулю, что свидетельствует о коллапсе цепочки, состоящей из большого числа точечных частиц.

Дальнейшее обобщение предложенного метода для двух- и трехмерного случая может быть осуществлено с целью объяснения внутренних краевых эффектов в кристаллах (в частности, плазменных), приводящих к образованию устойчивых полостей — войдов.

Список литературы

1. Thomas H. et al. // Phys. Rev. Lett. — 1994. — Vol. 73. — P. 652.
2. Nefedov A.P. et al. PKE-Nefedov : Plasma crystal experiments on the international space station // New J. Phys. — 2003. — Vol. 5, № 3. — P. 33.1–33.10.
3. Vishnyakov V.I., Dragan G.S. // Phys. Rev. — 2005. — E 71, 016411.
4. Vishnyakov V.I., Dragan G.S. // Phys. Rev. — 2006. — E 74, 036404.
5. Vishnyakov V.I., Dragan G.S. // Phys. Rev. — 2006. — E 73, 026403.
6. Fortov V.E. et al. // Phys. Usp. — 2004. — Vol. 74. — P. 495.
7. Proceedings of the Fifth International Conference on Physics of Dusty Plasmas, Ponta Delgada, Azores, May 18–23, 2008.
8. Ikezi H. // Phys. Fluids. — 1986. — Vol. 29. — P. 1764.
9. Chu J.H., Lin I. // Phys. Rev. Lett. — 1994. — 72, 4009.
10. Dragan G.S. // Proc. Sci. Techn. Meet. of Comecon Member Countries, Alma-Ata, USSR, 25–31 Oct., 1982. — Moscow : Institute of High Temperatures of the USSR Academy of Sciences (IVTAN), 1984. — P. 191.
11. Ivlev A.V., Zhdanov S.K., Khrapak S.A., Morfill G.E. // Phys. Rev. — 2005. — E 71, 016405.
12. Morfill G.E. // Phys. Rev. Lett. — 2006. — 83, 1598.
13. Chinese Science Bulletin. — 2004. — Vol. 49, № 24. — P. 2575–2580.
14. Dahiya R.P. // Phys. Rev. Lett. — 2002. — 89, 125001.
15. Molotkov V.I. et al. // Proc. II Intern. Conf. on Physics of Dusty and Buring Plasmas, Odessa, Ukr., 26–30 Aug., 2007. — P. 97.
16. Mikikian M., Boufendi L. // Phys. Plasmas. — 2004. — Vol. 11. — P. 3733–3737.
17. Tsyтович V.N., Vladimirov S.V., Morfill G.E., Goree J. // Phys. Rev. — 2001. — E 63, 056609.
18. Jovanovic D., Shukla P.K. // Phys. Lett. A. — 2003. — Vol. 308. — P. 369–374.
19. Akdim M. R., Goedheer W. J. // Phys. Rev. — 2001. — E 65, 015401.
20. Avinash K., Bhattacharjee A., Hu S. // Phys. Rev. Lett. — 2003. — 90, 075001.
21. Girifalco L. A., Weizer V. G. // Phys. Rev. — 1959. — Vol. 114. — P. 687.

Поступила в редакцию 28.09.2009

Nonhomogeneous Distribution of Aerosol Charged Particles and Combustion Products

Dragan G.S., Koskin Y.V.

Odessa National University

The analytical method of equilibrium condition definition for large number of identical point particles is proposed. The particles interact among themselves by means of pair potential. The bias function as the equilibrium status characteristic definition is applied. The function exhibits each particle arrangement deviation in a case of basic homogeneous length distribution. The equation on bias function is obtained. The task about the function determination is based on the forces that effect all particles from the direction of nearest neighbours and all other particles series equilibrium condition. The function of linear density is directly considered from bias function. The proposed method of equilibrium condition definition has advantage over a method of the nearest neighbours because it allows to define an equilibrium series configuration more precisely.

Key words: pair interaction, linear chain, non-local interaction, smoke plasma, aerosol.

Received 28 September, 2009