

# АНАЛИЗ ПРОЦЕССОВ МАССОПЕРЕНОСА В НЕИДЕАЛЬНЫХ ДИССИПАТИВНЫХ СИСТЕМАХ (ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ)

*О. С. Ваулина, К. Г. Адамович\**

*Институт высоких температур Российской академии наук  
125412, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 28 сентября 2007 г.

Представлены результаты численного исследования процессов массопереноса для протяженных квазидвумерных и трехмерных неидеальных диссипативных систем. Для описания парного взаимодействия между частицами в системах использовались изотропные отталкивающие потенциалы, которые представляли собой различные комбинации степенных и экспоненциальных функций. Расчеты проводились для параметров, соответствующих условиям экспериментов в лабораторной пылевой плазме. Показано, что динамика частиц в неидеальных жидкостных системах на малых временах наблюдения близка к эволюции тепловых колебаний в узлах кристаллических решеток.

PACS: 52.27.Gr, 52.27.Lw, 82.70.Dd

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Задачи, связанные с процессами массопереноса в диссипативных системах взаимодействующих частиц, представляют значительный интерес в различных областях науки и техники (гидродинамика, физика плазмы, медицинская промышленность, физика и химия полимеров и т. д.) [1–9]. Применение гидродинамических подходов позволяет получить успешное описание процессов массопереноса только в случае взаимодействий ближнего порядка. Когда силы межчастичного взаимодействия не столь малы, как в газах, не удается построить корректное кинетическое уравнение. К разработке приближенных моделей для описания жидкого состояния вещества существуют два основных подхода, один из которых (более фундаментальный) опирается на общие положения статистической физики. Другой подход (теория «скачков») основан на аналогиях между жидкостью и твердым телом. Для анализа транспортных характеристик систем взаимодействующих макрочастиц и проверки существующих полуэмпирических приближений также широко применяют компьютерное моделирование динамики частиц для различных модельных потенциалов их взаимодействия.

Для моделирования процессов переноса обычно используют методы молекулярной динамики, основанные на интегрировании обратимых уравнений движения частиц, или на решении уравнений Ланжевена, учитывающих необратимость исследуемых процессов [5].

Диффузия является основным процессом массопереноса, который определяет энергетические потери (диссипацию) в системе частиц и их динамические характеристики, такие как фазовое состояние, условия распространения волн и формирования неустойчивостей. В случае малых отклонений исследуемой системы от состояния статистического равновесия коэффициент диффузии  $D$  описывается соотношением, которое является частным случаем формул Грина–Кубо:

$$D = \int_0^{\infty} \langle V(0)V(t) \rangle dt / m, \quad (1)$$

где  $\langle V(0)V(t) \rangle$  — автокорреляционная функция скоростей  $V$  частиц,  $t$  — время,  $m$  — размерность системы. Коэффициент диффузии может быть также получен путем анализа теплового переноса частиц через единичную площадку среды при  $t \rightarrow \infty$ :

$$D = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\langle (\Delta l)^2 \rangle_N}{2mt}, \quad (2)$$

\*E-mail: Xeniya.Adamovich@gmail.ru

где  $\Delta l = \Delta l(t)$  — смещение отдельной частицы за время  $t$ ,  $\langle \rangle_N$  — усреднение по ансамблю, состоящему из  $N$  частиц, а  $\langle \rangle_t$  — усреднение по всем отрезкам времени длительностью  $t$  за полное время измерений. При выводе соотношений (1), (2) не делается предположений о характере теплового движения, поэтому они справедливы как для газов, так и для жидкостей и твердых тел. Однако в случае неидеальных сред расчет коэффициента диффузии при помощи этих формул не допускает аналитических решений. Простое решение,  $D \equiv D_0 = T/\nu_{fr}M$ , известное как соотношение Эйнштейна, можно получить только для не взаимодействующих между собой («броуновских») частиц; здесь  $M$  и  $T$  — масса и температура частицы, а  $\nu_{fr}$  — коэффициент трения, определяющий эффективную частоту обмена энергией между макрочастицей и нейтралами окружающего газа.

Существующий уровень экспериментальной физики диктует необходимость выхода за пределы диффузионного приближения, и современные методы моделирования, основанные на теории стохастических процессов, допускают такую возможность. В частности, для анализа процессов переноса при физически малых временах описание в рамках макроскопической кинетики может оказаться недостаточным. Исследование процессов массопереноса на малых временах наблюдения имеет особую важность для изучения быстрых процессов (таких как распространение ударных волн, импульсных воздействий или движение фронта химических превращений в конденсированных средах [5, 10]), а также для анализа транспортных характеристик сильно диссипативных неидеальных сред (таких как коллоидные растворы, плазма продуктов сгорания, ядерно-индуцируемая пылевая плазма при атмосферном давлении [2, 11, 12]), где корректное измерение коэффициентов диффузии макрочастиц требует постановки длительных экспериментов.

## 2. ПРОЦЕССЫ МАССОПЕРЕНОСА В НЕИДЕАЛЬНЫХ СРЕДАХ

Рассмотрим характер движения частиц в однородной среде. Смещение  $j$ -й частицы,  $x_j = x_j(t)$ , вдоль одной оси в такой среде под воздействием некоторых внешней  $F$  и случайной  $F_{ran}$  сил можно найти из уравнения Ланжевена:

$$M \frac{d^2 x_j}{dt^2} = -M \nu_{fr} \frac{dx_j}{dt} + F + F_{ran}. \quad (3)$$

Для удобства анализа зависимости процессов массопереноса от времени  $t$  введем следующие обозначения:

$$D_{G-K}(t) = \int_0^t \langle V_x(0)V_x(t) \rangle dt, \quad (4a)$$

$$D_{msd}(t) = \langle \langle x_j^2 \rangle_N \rangle_t / 2t, \quad (4b)$$

где  $V_x(t) = dx_j/dt$  — скорость  $j$ -й частицы. В случае малых отклонений системы от состояния статистического равновесия, с ростом времени  $t \rightarrow \infty$  обе функции ( $D_{G-K}(t)$  и  $D_{msd}(t)$ ) должны стремиться к одинаковому постоянному значению  $D = \lim_{t \rightarrow \infty} D(t)$ , которое и соответствует стандартному определению коэффициента диффузии частиц.

В пренебрежении межчастичным взаимодействием ( $F = 0$  для броуновских частиц) автокорреляционную функцию скоростей можно найти, используя преобразование Лапласа или формальное решение задачи (3), учитывая, что  $\langle F_{ran}V_x(0) \rangle = 0$ :

$$\langle V_x(0)V_x(t) \rangle = \frac{T}{M} \exp(-\nu_{fr}t). \quad (5)$$

Функция эволюции массопереноса  $D_{G-K}(t)$  (4a) в этом случае будет иметь вид

$$D_{G-K}(t) = D_0 (1 - \exp(-\nu_{fr}t)). \quad (6a)$$

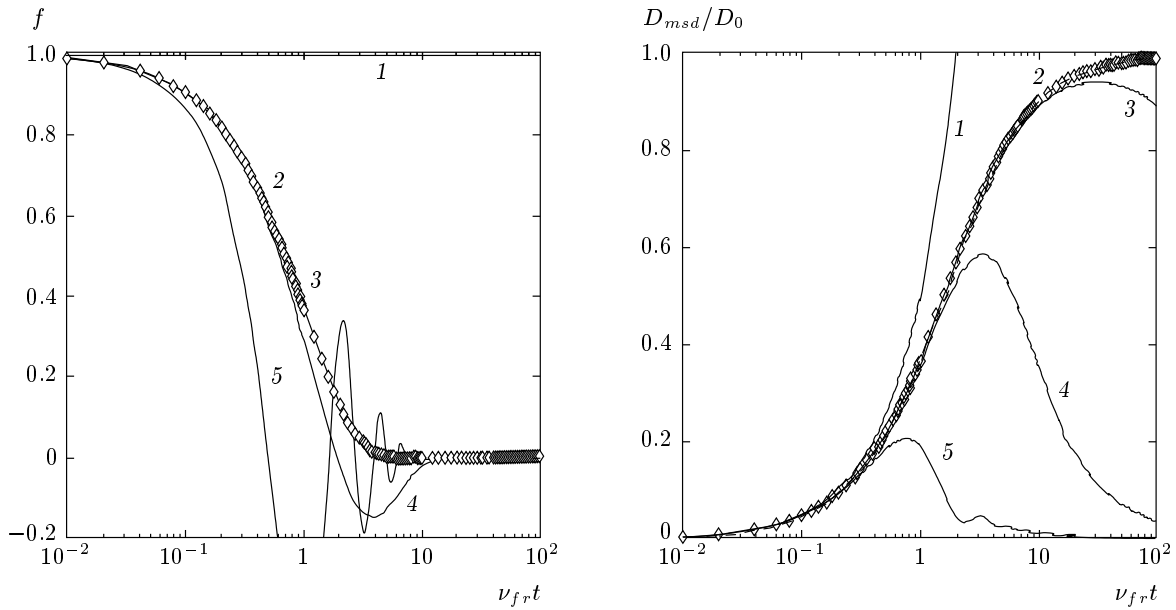
Для поиска среднего квадрата смещения  $j$ -й частицы уравнение (3) домножается на величину  $x_j$ . Тогда, в отсутствие корреляции между медленным смещением частицы и «быстрым» стохастическим воздействием ( $\langle F_{ran}x_j \rangle = 0$ ), для однородной среды ( $M \langle (dx_j/dt)^2 \rangle \equiv T$ ,  $\langle (\Delta l)^2 \rangle = m \langle x_j^2 \rangle$ ) совместное решение уравнений (3) и (4b) можно записать в виде [5]

$$D_{msd}(t)/D_0 = 1 - (1 - \exp(-\nu_{fr}t)) / \nu_{fr}t. \quad (6b)$$

Таким образом, для броуновской частицы с ростом времени  $t \rightarrow \infty$  (при  $\nu_{fr}t \gg 1$ ) функция  $D_{G-K}(t) = D_{msd}(t) \rightarrow D_0$ , в то время как на малых временах ( $\nu_{fr}t \ll 1$ ) проявляется баллистический характер ее движения:

$$\langle x^2 \rangle \equiv \langle x_j^2 \rangle \approx \frac{Tt^2}{M}, \quad D_{msd}(t) = \frac{\langle x^2 \rangle}{2t} \propto t.$$

Аналитическое решение уравнения (3) можно также получить для частицы в идеальном кристалле, если возвращающую силу  $F = -M\omega_c^2 x_j$ , действующую на частицу в узле такой воображаемой кристаллической решетки, можно характеризовать



**Рис. 1.** Зависимости функций  $f(t)$  и  $D_{msd}(t)/D_0$  от  $\nu_{fr}t$ : 1 — баллистический режим ( $f(t) = 1$ ,  $D_{msd}(t) \propto t$ ); 2 — броуновские частицы (5), (66); гармонический осциллятор (7), (86) при различных параметрах  $\xi_c$ : 0.033 (3), 0.38 (4), 2 (5)

одной характерной частотой  $\omega_c$ . При этом формальное решение уравнения (3) для автокорреляционной функции скоростей дает

$$\langle V_x(0)V_x(t) \rangle = \frac{T}{M} \exp\left(-\frac{\nu_{fr}t}{2}\right) \left( \text{ch}(\nu_{fr}t\psi) - \frac{\text{sh}(\nu_{fr}t\psi)}{2\psi} \right), \quad (7)$$

а совместное решение уравнений (3) и (4а), (4б) можно записать в виде

$$\frac{D_{G-K}(t)}{D_0} = \frac{\exp(-\nu_{fr}t/2)}{\psi} \text{sh}(\nu_{fr}t\psi), \quad (8a)$$

$$\frac{D_{msd}(t)}{D_0} = \frac{1}{2\xi_c^2\nu_{fr}t} \left\{ 1 - \exp\left(-\frac{\nu_{fr}t}{2}\right) \times \left( \text{ch}(\nu_{fr}t\psi) + \frac{\text{sh}(\nu_{fr}t\psi)}{2\psi} \right) \right\}, \quad (8б)$$

где

$$\psi = (1 - 8\xi_c^2)^{1/2}/2, \quad \xi_c = \omega_c/\nu_{fr}.$$

Иллюстрация нормированных автокорреляционных функций  $f(t) = M \langle V_x(0)V_x(t) \rangle / T$  и функций эволюции процессов переноса ( $D_{G-K}(t), D_{msd}(t)$ ) на малых временах наблюдения для различных параметров  $\xi_c$  приведена на рис. 1. Легко увидеть, что на малых временах наблюдения ( $\nu_{fr}t \ll 1 + \xi_c$ )

для частицы в узле кристаллической решетки также характерен баллистический режим движения ( $\langle x^2 \rangle \approx Tt^2/M$ ,  $D_{msd}(t) = \langle x^2 \rangle / 2t \propto t$ ), как и в случае невзаимодействующих частиц.

Для частицы в узле кристаллической решетки с ростом времени наблюдения ( $\nu_{fr}t \gg 1$ ) функция  $D_{G-K}(t) = D_{msd}(t) \rightarrow 0$ , поскольку среднеквадратичное отклонение  $\langle (\Delta r)^2 \rangle$  такой частицы от ее положения равновесия становится постоянным и соответствует отклонению гармонического осциллятора  $\langle (\Delta l)^2 \rangle = mT/M\omega_c^2$ .

Для жидких сред точные аналитические соотношения для функций  $\langle V_x(0)V_x(t) \rangle$ ,  $D_{G-K}(t)$  и  $D_{msd}(t)$  получить невозможно. Тем не менее, следует отметить одну особенность, которая, как можно предположить, будет иметь место и для частиц в жидкости. Эта особенность заключается в связях между перечисленными функциями

$$D_{G-K}(t) = \frac{d\{tD_{msd}(t)\}}{dt} \equiv \frac{1}{2} \frac{d\langle x^2 \rangle}{dt}, \quad (9a)$$

$$\langle V_x(0)V_x(t) \rangle = \frac{d^2\{tD_{msd}(t)\}}{dt^2} \equiv \frac{1}{2} \frac{d^2\langle x^2 \rangle}{dt^2}, \quad (9б)$$

которые нетрудно найти из решения задачи как для броуновских частиц ((5), (6а), (6б)), так и для частиц в идеальном кристалле (см. (7), (8а), (8б)).

Эволюция среднеквадратичного смещения  $D_{msd}(t)$  в неидеальных системах исследовалась

численно в работе [13] для частиц, взаимодействующих посредством экранированного кулоновского потенциала (типа Юкавы):

$$U = (eZ)^2 \exp(-r/\lambda)/r. \quad (10)$$

Здесь  $r$  — расстояние между двумя частицами с зарядом  $eZ$ ,  $e$  — заряд электрона,  $\lambda$  — длина экранирования,  $\kappa = l_p/\lambda$ ,  $l_p$  — среднее межчастичное расстояние, которое для двумерных систем равно обратному корню из поверхностной плотности частиц, а для трехмерных структур — обратному кубическому корню из их объемной концентрации. В результате моделирования задачи были получены характерные частоты для объемно-центрированной кубической решетки,

$$\omega_c = \omega_{bcc} \approx 2eZ \exp\left(-\frac{\kappa}{2}\right) \times \left[ \left(1 + \kappa + \frac{\kappa^2}{2}\right) / (l_p^3 M \pi) \right]^{1/2},$$

и для квазидвумерной решетки гексагонального типа,

$$\omega_c = \omega_h \approx 1.16\omega_{bcc}.$$

Было также показано, что данные частоты отвечают за среднее время «оседлой жизни» частиц ( $t_a \approx 2/\omega_c$ ) в неидеальных жидкостных системах и определяют протекание процессов массопереноса на временах наблюдения  $t < t_a$ . Принимая во внимание соотношения (9а) и (9б), нетрудно предположить, что на указанных временах наблюдения поведение функций  $\langle V_x(0)V_x(t) \rangle$  и  $D_{G-K}(t)$  в жидкостных системах Юкавы также будет близко к поведению данных функций, описывающих эволюцию тепловых колебаний частиц в узлах соответствующих кристаллических решеток.

Сравнительный анализ численных исследований для двумерных и трехмерных систем с экранированным кулоновским потенциалом [13–15] показывает, что при  $\kappa = l_p/\lambda < 6$  за равновесные характеристики таких систем отвечают два безразмерных параметра:

$$\Gamma^* = \frac{a_1 (eZ)^2 (1 + \kappa + \kappa^2/2) \exp(-\kappa)}{T l_p}, \quad \xi = \frac{\omega^*}{\nu_{fr}}.$$

Здесь

$$\omega^* = eZ \left[ \frac{a_2 (1 + \kappa + \kappa^2/2) \exp(-\kappa)}{\pi M l_p^3} \right]^{1/2},$$

$a_1 = a_2 \equiv 1$  для трехмерной системы;  $a_1 = 1.5$ ,  $a_2 = 2$  для случая двумерной задачи. Значения данных параметров совместно с температурой частиц

определяют пространственную корреляцию, точки фазовых переходов и процессы переноса (диффузию, вязкость) в рассматриваемых системах при следующем условии:  $10-20 < \Gamma^* < \Gamma_c^* \approx 100-104$ , где  $\Gamma_c^*$  — точка кристаллизации системы ( $\Gamma_c^* \approx 102-104$  для трехмерных систем [15],  $\Gamma_c^* \approx 98-100$  для квазидвумерных [14]).

Результаты численного исследования динамики трехмерных систем макрочастиц, взаимодействующих с различными типами парных изотропных потенциалов, приведены в работе [16]. Данные потенциалы представляли собой различные комбинации степенных и экспоненциальных функций, используемые для моделирования отталкивания в кинетике взаимодействующих частиц [5]:

$$U = U_c \left[ b_1 \exp\left(-\kappa_1 \frac{r}{l_p}\right) + b_2 \left(\frac{l_p}{r}\right)^n \exp\left(-\kappa_2 \frac{r}{l_p}\right) \right]. \quad (11)$$

Здесь  $b_1, b_2, \kappa_{1(2)} = l_p/\lambda_{1(2)}, n$  — варьируемые параметры,  $U_c = (eZ)^2/r$  — кулоновский потенциал. С точки зрения исследования свойств пылевой плазмы особый интерес представляет экранированный кулоновский потенциал (10) ( $b_1 = 1, b_2 = 0, \kappa_1 = l_p/\lambda$ ), а также потенциалы, моделирующие ослабление экранирования с увеличением расстояния от частицы, прогнозируемое в ряде теоретических и экспериментальных работ [17–20]. Так, например, считается, что на больших расстояниях от пылевой частицы,  $r \gg \lambda$ , поведение потенциала имеет степенную асимптотику  $U \propto r^{-2}$  [19] или  $U \propto r^{-3}$  [20], а соответственно, параметры потенциала в соотношении (11) равны  $\kappa_1 = l_p/\lambda, \kappa_2 = 0, n = 1-2, b_1 \gg b_2$ .

Было отмечено, что процессы массопереноса и пространственная корреляция макрочастиц в таких системах определяются отношением второй производной  $U''$  парного потенциала  $U(r)$  в точке среднего межчастичного расстояния  $r = l_p$  к температуре частиц  $T$ , если имеет место эмпирическое условие [16]

$$2\pi > \frac{|U'(l_p)|l_p}{|U(l_p)|} > 1. \quad (12)$$

При этом пространственная корреляция частиц не зависела от трения ( $\nu_{fr}$ ) и определялась величиной эффективного параметра  $\Gamma^* = M l_p^2 U''/2T$  в диапазоне от  $\Gamma^* \sim 10$  вплоть до точки кристаллизации системы ( $\Gamma^* \sim 102-104$ ), где для всех анализируемых случаев наблюдалось формирова-

ние ОЦК-структуры с характерной частотой осцилляций частиц

$$\omega_c^2 = \omega_{bcc}^2 \equiv 2|U''(l_p)|/\pi M. \quad (13a)$$

Можно предположить, что характерную частоту осцилляций частиц, взаимодействующих с потенциалами, удовлетворяющими уравнениям (11), (12), в решетке гексагонального типа можно представить по аналогии с частотой, найденной для квазидвумерных систем Юкавы [13, 14]:

$$\omega_c^2 = \omega_h^2 \equiv 2.7|U''(l_p)|/\pi M. \quad (13b)$$

Поведение автокорреляционных функций скоростей частиц,  $\langle V_x(0)V_x(t) \rangle$ , и функций  $D_{msd}(t)$ ,  $D_{G-K}(t)$ , описывающих эволюцию процессов массопереноса, для квазидвумерных и трехмерных жидкостных систем с потенциалами взаимодействия (11) исследуется численно в следующей части настоящей работы.

### 3. ПАРАМЕТРЫ ЧИСЛЕННОЙ ЗАДАЧИ

Расчеты выполнялись методом молекулярной динамики Ланжевена, основанным на решении системы обыкновенных дифференциальных уравнений (состоящей из  $N_p$  уравнений движения, где  $N_p$  — количество частиц) с силой Ланжевена  $\mathbf{F}_{ran}$ , которая является источником стохастического («теплового») движения частиц с заданной кинетической температурой  $T$ . При этом учитывались силы парного межчастичного взаимодействия  $\mathbf{F}_{int}$  и внешние силы  $\mathbf{F}_{ext}$ . Техника моделирования подробно описана в работе [21]. Уравнения движения имели вид

$$M \frac{d^2 \mathbf{l}_k}{dt^2} = \sum_j F_{int}(l)|_{l=|\mathbf{l}_k - \mathbf{l}_j|} \frac{\mathbf{l}_k - \mathbf{l}_j}{|\mathbf{l}_k - \mathbf{l}_j|} + \mathbf{F}_{ext} - M \nu_{fr} \frac{d\mathbf{l}_k}{dt} + \mathbf{F}_{ran}. \quad (14)$$

Здесь  $F_{int}(l) = -\partial U/\partial l$ , а  $l = |\mathbf{l}_k - \mathbf{l}_j|$  — межчастичное расстояние. Для анализа равновесных характеристик в системах частиц, взаимодействующих с потенциалами (11), трехмерные уравнения движения (14) решались для разных эффективных параметров, введенных по аналогии с параметрами, найденными для систем Юкавы, а именно, для эффективного параметра неидеальности

$$\Gamma^* = a_1 l_p^2 U''(l_p)/2T \quad (15)$$

и параметра масштабирования

$$\xi = |a_2 U''(l_p)|^{1/2} (2\pi M)^{-1/2} \nu_{fr}^{-1}, \quad (16)$$

где  $a_1 = a_2 \equiv 1$  для трехмерных систем, и  $a_1 = 1.5$ ,  $a_2 = 2$  для двумерного случая.

Расчеты проводились для однородной трехмерной системы и для квазидвумерной системы, моделирующей протяженный пылевой слой. Величина параметра масштабирования варьировалась в пределах от  $\xi \approx 0.04$  до  $\xi \approx 3.6$ , типичных для условий экспериментов в плазме газового разряда. Величина эффективного параметра  $\Gamma^*$  менялась от 10 до 120.

В первом случае для моделирования протяженной однородной системы внешние силы отсутствовали ( $|\mathbf{F}_{ext}| \equiv 0$ ) и задавались периодические граничные условия по всем трем направлениям  $x$ ,  $y$ ,  $z$ . Основные расчеты были выполнены для 125 независимых частиц в центральной счетной ячейке, представляющей собой куб с ребром  $L$ . Выбор длины ячейки  $L$  (и, соответственно, числа частиц) определялся условием корректного моделирования динамики системы:

$$L \gg \frac{l_p |U(l_p)|}{|U'(l_p)| l_p - |U(l_p)|}.$$

Полное число частиц при расчете парного взаимодействия достигало 3000. Потенциал межчастичного взаимодействия обрезался на расстоянии  $L_{cut} \approx 4l_p$ , которое определялось из условия слабого возмущения электронейтральности системы:  $U'(L_{cut})L_{cut}^2 \ll (eZ)^2$ . Для проверки независимости результатов расчета от числа частиц и длины обрезания потенциала были выполнены дополнительные тестовые вычисления для 512 независимых частиц при  $L_{cut} = 7l_p$  в системах с  $\Gamma^* = 1.5, 17.5, 25, 49, 92$ . Отклонение между результатами данных расчетов не превышало численной ошибки и находилось в пределах  $\pm(1-3)\%$ .

Во втором случае расчеты проводились для однородного протяженного монослоя частиц при периодических граничных условиях в двух выбранных направлениях  $x$  и  $y$ , а в направлении оси  $z$  учитывалось действие силы тяжести  $Mg$ , скомпенсированное линейным электрическим полем  $E_z = \beta z$  ( $|\mathbf{F}_{ext}| \equiv F_{ext}^z = Mg - eZ\beta z$ ). Здесь  $\beta$  — величина градиента электрического поля, а  $F_{ext}^x = F_{ext}^y \equiv 0$ . Число независимых частиц в счетной ячейке  $N_p$  варьировалось от 256 до 1024, в зависимости от числа частиц длина обрезания потенциала  $L_{cut}$  менялась от  $5l_p$  до  $25l_p$ . Величина градиента  $\beta$  электрического поля  $E_z$ , ограничивающего пылевой слой в направлении оси  $z$ , варьировалась от  $\sim 10^{-2}$  В/см<sup>2</sup> до  $\sim 10^2$  В/см<sup>2</sup>. Какой-либо ощутимой зависимости динамики макрочастиц от величины градиента  $\beta$  поля и

количества независимых частиц  $N_p$ , принятых для расчетов, в процессе моделирования обнаружено не было.

#### 4. РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Иллюстрации поведения автокорреляционных функций скоростей частиц  $\langle V_x(0)V_x(t) \rangle$  и функций  $D_{msd}(t)$ ,  $D_{G-K}(t)$ , полученных в численных экспериментах для квазидвумерных и трехмерных жидкостных систем с различными потенциалами взаимодействия (11), показаны на рис. 2–4 для разных параметров  $\xi$  и  $\Gamma^*$  в зависимости от времени (в обратных временах торможения  $\nu_{fr}^{-1}$ ).

Кривая 1, представленная на рис. 2, 3, является точным решением уравнения Ланжевена в отсутствие взаимодействия между частицами (5), (6а), (6б). Легко увидеть, что при наличии взаимодействия поведение функций  $\langle V_x(0)V_x(t) \rangle$ ,  $D_{msd}(t)$ ,  $D_{G-K}(t)$  на временах  $\nu_{fr}t \ll 1$  соответствует режиму движения, характерному для броуновских частиц. Затем функции  $D_{msd}(t)$  и  $D_{G-K}(t)$  достигают своих максимумов  $D_{msd}^{max}$  и  $D_{G-K}^{max}$ . При этом ни относительная величина  $D_{msd}^{max}/D_0$ ,  $D_{G-K}^{max}/D_0$ , ни положение  $t_{max}\nu_{fr}$  этих максимумов практически не зависят от параметра  $\Gamma^*$  и определяются величиной параметра масштабирования  $\xi$  как для трехмерной задачи, так и для моделируемой двумерной системы. Данное обстоятельство было отмечено ранее для функций  $D_{msd}(t)$  в работах [14–16]. Легко увидеть (см. рис. 3, 4), что с ростом времени  $t \rightarrow \infty$  как функция  $D_{msd}(t)$ , так и функция  $D_{G-K}(t)$  стремятся к одному и тому же постоянному значению  $D$ , которое соответствует стандартному определению коэффициента диффузии частиц, как одного из основных коэффициентов переноса.

Нормированные коэффициенты  $D^* = D(\nu_{fr} + \omega^*)M/T$  в зависимости от параметра неидеальности  $\Gamma^*$  для квазидвумерных систем с различными парными потенциалами межчастичного взаимодействия представлены на рис. 5. Легко увидеть, что значение нормированного коэффициента  $D^*$  для рассматриваемых систем определяется величиной эффективного параметра  $\Gamma^*$ . Небольшое различие между коэффициентами диффузии для слабо диссипативных ( $\xi > 0.3$ ) и слабо дисперсионных ( $\xi < 0.25$ ) квазидвумерных структур наблюдалось в диапазоне  $\Gamma^*$  от 6 до 97. Для указанного диапазона параметров  $\Gamma^*$  отклонение коэффициентов диффузии от их среднего значения составляет менее 7%. Эти отли-

чия заметно растут с ростом  $\Gamma^* > 100$ . Подобные отклонения были отмечены как для квазидвумерных систем Юкавы, так и для трехмерных систем с различными типами парных потенциалов [14–16]. Отметим, что полученные функции  $D^*(\Gamma^*)$  имеют две особые точки, одна из которых является точкой перегиба ( $\Gamma^* \approx 98$ –108) и может отражать наличие фазового перехода между гексатической фазой и жидкостью. Вторая особая точка (точка резкого изменения  $D$ ) находится вблизи  $\Gamma^* \approx 153$ –165, где величина  $D \rightarrow 0$ , а анализируемая система трансформируется в твердое тело с идеальной решеткой. Аналогичное поведение  $D^*(\Gamma^*)$  было зафиксировано для квазидвумерных систем макрочастиц, взаимодействующих с экранированным кулоновским потенциалом (систем Юкавы) [14]. Величина среднего коэффициента диффузии (значения  $D^*$ , усредненные для различных  $Z$ ,  $\kappa$ ,  $\nu_{fr}$  и  $\beta$ ) для исследуемых квазидвумерных систем с потенциалами типа (11) показана на рис. 6, где также представлена зависимость  $D^*(\Gamma^*)$  для трехмерных систем [15, 16].

Напомним, что в рамках полуэмпирической теории «скачков», разработанной для молекулярных жидкостей, аналитическое соотношение для коэффициента диффузии молекул можно представить в виде [1, 9]

$$D = \frac{d^2}{2m\tau_0} \exp\left(-\frac{W}{T}\right), \quad (17)$$

где  $d$  — среднее расстояние между молекулами,  $\tau_0$  — характерное время, определяющее частоту их переходов из одного «оседлого» состояния в другое,  $W$  — энергетический барьер, преодолеваемый при этих переходах. Экспоненциальная зависимость  $D$  от температуры  $T$  молекулярных жидкостей подтверждается экспериментально. Аналогичная температурная зависимость для коэффициента тепловой диффузии  $D$  макрочастиц была найдена для трехмерных диссипативных систем с различными типами потенциалов и для квазидвумерных структур с экранированным кулоновским взаимодействием в работах [14–16], где было показано, что для сильно неидеальных жидкостных систем коэффициент диффузии может быть представлен в виде

$$D \approx \frac{T\Gamma_c^*}{12\pi(\xi + 1)\nu_{fr}M} \exp\left(-3\frac{\Gamma_c^*}{\Gamma^*}\right), \quad (18)$$

где  $\Gamma_c^*$  — точка кристаллизации рассматриваемой структуры ( $\Gamma_c^* = 102$  для трехмерной задачи и  $\Gamma_c^* = 98$  для квазидвумерного случая). Было получено [14–16], что для параметров  $\Gamma^*$  в диапазоне от 50 до 100 ошибка аппроксимации результатов расчета коэффициента  $D$  по формуле (18) не превышает

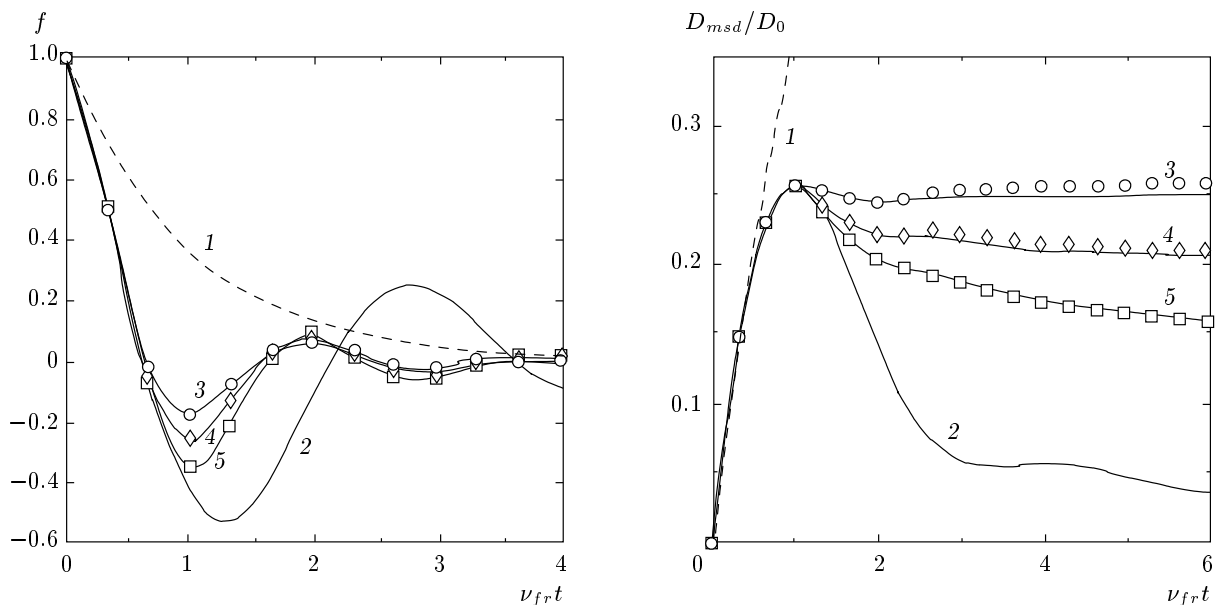


Рис. 2. Зависимости  $f(t)$  и  $D_{msd}(t)/D_0$  от  $tv_{fr}$  для броуновских частиц (1), гармонического осциллятора при  $\xi_c = 1.53$  (2), а также результаты численного моделирования квазидвумерной задачи для  $\xi = 0.93$  ( $\xi_c = 1.53$ ) при разных параметрах  $\Gamma^* = 12$  (3), 27 (4), 56 (5) и при различных потенциалах  $U$ :  $U/U_c = \exp(-4r/l_p)$  (сплошные линии),  $0.1 \exp(-2r/l_p) + \exp(-4r/l_p)$  (o),  $\exp(-4r/l_p) + 0.05l_p/r$  ( $\diamond$ ),  $0.05(l_p/r)^3$  ( $\square$ )

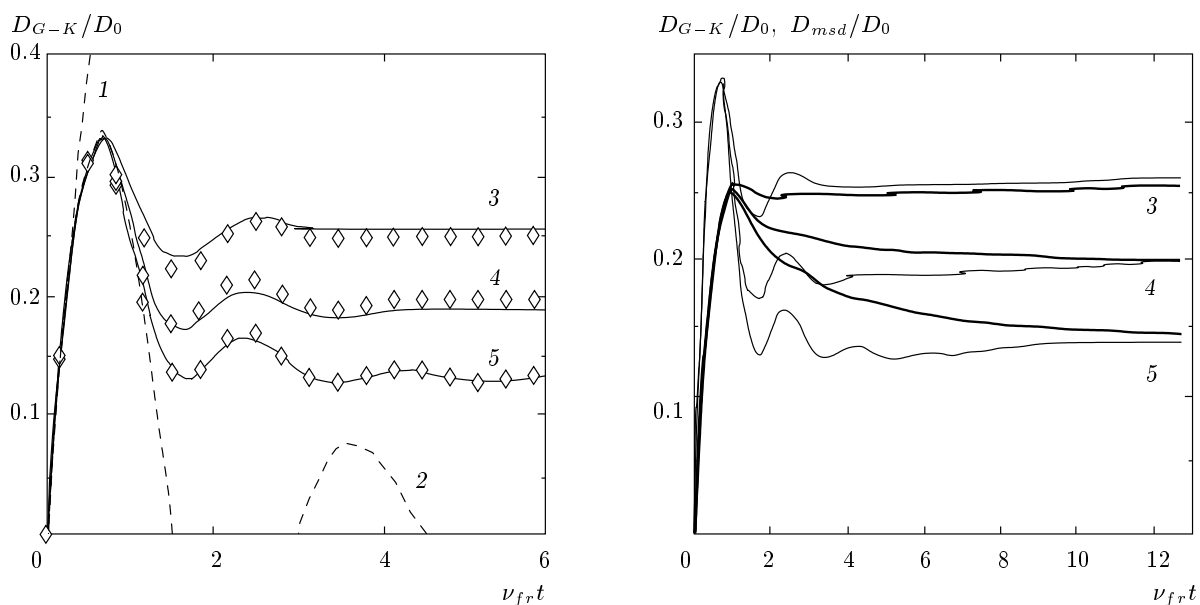


Рис. 3. Зависимости отношения  $D_{G-K}/D_0$  от  $tv_{fr}$  (штриховые линии) для броуновских частиц (1) и для гармонического осциллятора (2) при  $\xi_c = 1.53$ , а также результаты численного моделирования квазидвумерной задачи (для  $\xi = 0.93$ ,  $\xi_c = 1.53$ ) при разных параметрах  $\Gamma^* = 12$  (3), 27 (4), 56 (5). Тонкие линии —  $D_{G-K}(t)/D_0$  (по уравнению (4а)),  $\diamond$  —  $D_{G-K}(t)/D_0$  (по уравнению (9а)), жирные линии —  $D_{msd}(t)/D_0$  (по уравнению (4б))

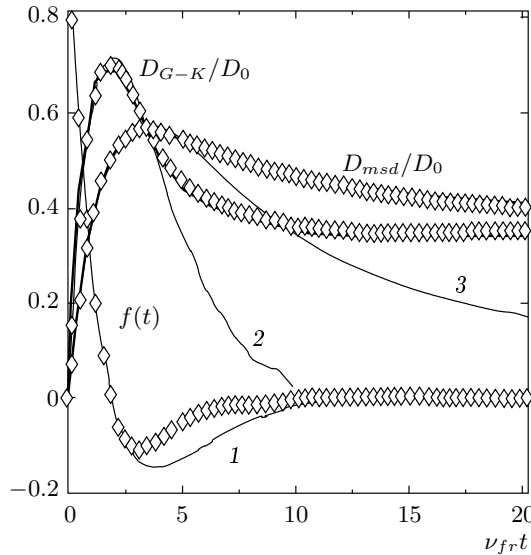


Рис. 4. Зависимости функций  $f$  (1),  $D_{G-K}/D_0$  (2),  $D_{msd}/D_0$  (3) от  $t\nu_{fr}$  для гармонического осциллятора (тонкие линии) при  $\xi_c = 0.19$ , а также результаты численного моделирования трехмерной задачи для  $\xi = 0.19$  ( $\xi_c = 0.38$ ) и  $\Gamma^* = 27$  при различных потенциалах  $U$ :  $U/U_c = \exp(-2.4r/l_p)$  (жирные линии),  $\exp(-4.8r/l_p) + 0.05l_p/r$  ( $\diamond$ )

5–10 % как для трехмерных, так и для двумерных систем. С уменьшением  $\Gamma^*$  до 30, точность аппроксимации (18) уменьшается до 35 %. Аппроксимация результатов расчетов коэффициентов диффузии для трехмерных и квазидвумерных систем соотношением (18) показана на рис. 6.

Сравнение эволюции процессов массопереноса в анализируемых жидкостных трехмерных и квазидвумерных протяженных системах с поведением функций  $\langle V_x(0)V_x(t) \rangle$ ,  $D_{msd}(t)$ ,  $D_{G-K}(t)$ , полученных для гармонического осциллятора (7), (8а), (8б), показывает хорошее согласие для времен наблюдения  $\nu_{fr}t \leq 1/\xi$ . Таким образом, время активизации скачков  $\tau_0$  (среднее время «оседлой жизни» частиц между скачками) в моделируемых системах практически не зависело от температуры, а определялось частотой колебания частиц в «оседлом» состоянии:  $\tau_0 \approx 2/\omega_c$ . Расчеты также показывают, что систему взаимодействующих частиц можно характеризовать постоянными значениями коэффициентов переноса только на временах  $t \gg \tau_0$ , в отличие от системы броуновских частиц, для которых функции  $D_{msd}(t)$  {или  $D_{G-K}(t)$ }  $\rightarrow D_0$  при  $t \gg \nu_{fr}^{-1}$ .

Анализ поведения функций  $\langle V_x(0)V_x(t) \rangle$ ,  $D_{msd}(t)$ ,  $D_{G-K}(t)$  на малых временах наблюдения

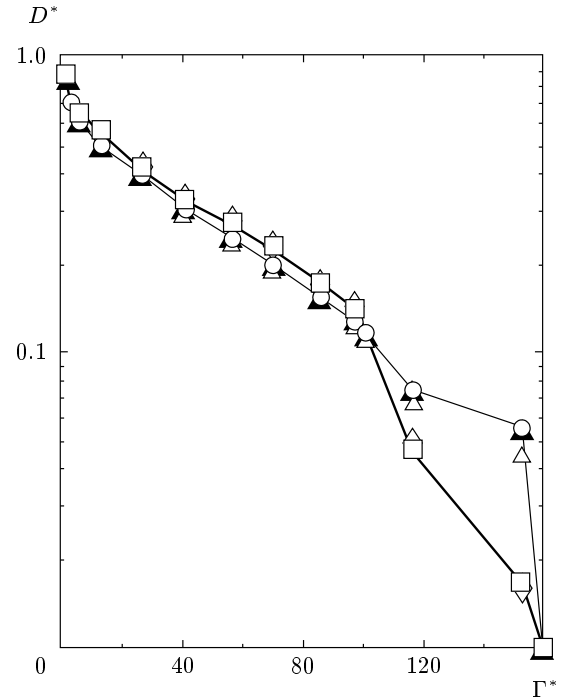


Рис. 5. Нормированное значение  $D^*$  в зависимости от  $\Gamma^*$  для различных потенциалов  $U$ :  $U/U_c = \exp(-4r/l_p) + 0.05l_p/r$  (темные символы),  $U/U_c = 0.05(l_p/r)^3$  (светлые символы), и для разных значений  $\xi = 1.86$  ( $\diamond$ ,  $\blacklozenge$ ),  $0.93$  ( $\square$ ),  $0.23$  ( $\circ$ ),  $0.12$  ( $\triangle$ ,  $\blacktriangle$ ). Сплошные линии построены по усредненным данным расчета  $D^*$  для систем Юкавы для значений  $\xi < 0.25$  (жирная линия),  $\xi > 0.3$  (тонкая линия)

может быть полезен для пассивной диагностики параметров пылевой компоненты в неидеальной плазме в случае локального статистического равновесия пылевой подсистемы. Поскольку все указанные функции связаны между собой соотношениями (9а), (9б) и имеют однозначную зависимость от таких параметров макрочастиц, как их температура  $T$ , характерная частота  $\omega_c$  и коэффициент трения  $\nu_{fr}$ , измерение любой из этих функций ( $\langle V_x(0)V_x(t) \rangle$ ,  $D_{msd}(t)$ ,  $D_{G-K}(t)$ ) позволяет одновременно восстановить все перечисленные параметры пылевой компоненты ( $T$ ,  $\omega_c$ ,  $\nu_{fr}$ ) путем наилучшего согласования между данными эксперимента и аналитическими функциями, полученными для гармонического осциллятора. В свою очередь, информация о величинах  $T$  и  $\omega_c$  позволяет легко найти параметр неидеальности анализируемой системы  $\Gamma^*$  по формулам (15), (16).



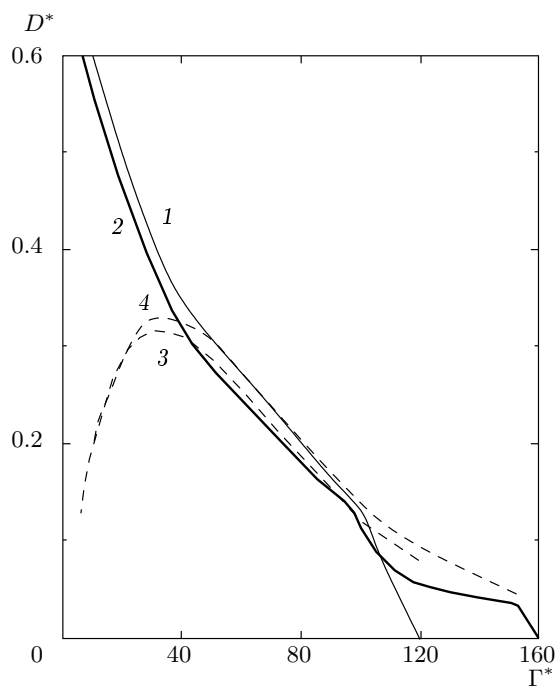


Рис. 6. Нормированное значение  $D^*$  в зависимости от параметра  $\Gamma^*$  для трехмерных систем [15, 16] (1), квазидвумерных систем (усредненных) (2), 3 — аппроксимация (18) двумерной задачи при  $\Gamma_c^* = 98$ , 4 — аппроксимация (18) трехмерной задачи при  $\Gamma_c^* = 102$

## 5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Представлены результаты численного моделирования процессов массопереноса на малых временах наблюдения для протяженных квазидвумерных и трехмерных неидеальных диссипативных систем макрочастиц, взаимодействующих посредством различных изотропных парных потенциалов, которые представляли собой разные комбинации степенных и экспоненциальных функций, наиболее часто используемые для моделирования отталкивания в кинетике взаимодействующих частиц.

Расчеты проводились в широком диапазоне параметров, соответствующих условиям экспериментов в лабораторной пылевой плазме. Было получено, что эволюция среднеквадратичного смещения частиц на малых временах наблюдения соответствует колебаниям кристаллической решетки с частотой, пропорциональной второй производной парного потенциала межчастичного взаимодействия. Данные результаты хорошо соответствуют теории «скачков», построенной на аналогиях между жидким и твердым состоянием среды. Приведены оценки для характер-

ных частот колебаний частиц ( $\omega_c$ ) в трехмерных кубических решетках гранцентрированного типа и в двумерных гексагональных кристаллических структурах. Показано, что данные частоты отвечают за среднее время «оседлой жизни» частиц ( $\tau_0 \approx 2/\omega_c$ ) в неидеальных жидкостных системах и определяют протекание процессов массопереноса на временах наблюдения  $t < \tau_0$ .

Представленные результаты можно использовать для пассивной диагностики параметров пылевой компоненты в плазме, а также для численного исследования протекания быстрых процессов при физически малых временах, не достаточных для их описания в рамках макроскопической кинетики.

Работа выполнена при частичной поддержке РФФИ (грант № 07-08-00290), Программы Президиума РАН и Фонда содействия отечественной науке.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Я. И. Френкель, *Кинетическая теория жидкостей*, Наука, Ленинград (1975).
2. *Photon Correlation and Light Beating Spectroscopy*, ed. by H. Z. Cummins and E. R. Pike, Plenum, New York (1974).
3. R. Balescu, *Equilibrium and Nonequilibrium Statistical Mechanics*, Wiley Interscience, Chichester (1975).
4. N. K. Ailawadi, *Phys. Rep.* **57**, 241 (1980).
5. А. А. Овчинников, С. Ф. Тимашев, А. А. Белый, *Кинетика диффузионно-контролируемых химических процессов*, Химия, Москва (1986).
6. H. M. Thomas and G. E. Morfill, *Nature (London)* **379**, 806 (1996).
7. А. А. Жуховицкий, Л. А. Шварцман, *Физическая химия*, Металлургия, Москва (1987).
8. Д. К. Белашенко, *Явления переноса в жидких металлах и полупроводниках*, Атомиздат, Москва (1970).
9. Я. И. Френкель, *Введение в теорию металлов*, Наука, Москва (1958).
10. Р. Додд, Дж. Эйлбек, Дж. Гиббон, Х. Моррис, *Солитоны и нелинейные волновые уравнения*, Мир, Москва (1988).
11. А. П. Нефедов, О. Ф. Петров, С. А. Храпак и др., *ТВТ* **36**, 141 (1998).

12. V. Fortov, A. Nefedov, V. Vladimirov et al., Phys. Lett. A **258**, 305 (1999).
13. О. С. Ваулина, О. Ф. Петров, В. Е. Фортов, ЖЭТФ **127**, 1153 (2005).
14. O. S. Vaulina and I. E. Drangevski, Phys. Scripta T **73**, 577 (2006).
15. O. S. Vaulina and S. V. Vladimirov, Phys. Plasmas **9**, 835 (2002).
16. O. S. Vaulina, S. V. Vladimirov, O. F. Petrov, and V. E. Fortov, Phys. Plasmas **11**, 3234 (2004).
17. U. Konopka, L. Ratke, and H. M. Thomas, Phys. Rev. Lett. **79**, 1269 (1997).
18. J. E. Daugherty, R. K. Porteous, M. D. Kilgore, and D. B. Graves, J. Appl. Phys. **72**, 3934 (1992).
19. J. E. Allen, Phys. Scripta **45**, 497 (1992).
20. D. Montgomery, G. Joyce, and R. Sugihara, Plasma Phys. **10**, 681 (1968).
21. О. С. Ваулина, О. Ф. Петров, В. Е. Фортов и др., Физика плазмы **29**, 698 (2003).