

Пространственная неоднородность системы зарядов в электростатической ловушке

Капитанов Иван Б02-210и

Шерхалов Денис Б02-204и

21 мая 2024

Аннотация

В данной работе была смоделирована и изучена система заряженных частиц во внешнем симметричном электростатическом поле, называемом параболической электростатической ловушкой. Был изучен вывод системы на равновесие в зависимости от параметров поля, были изучены некоторые неоднородные характеристики полученных в системе подсистем.

1. Методы и техника расчёта

Система, которую мы рассматриваем в работе принято называть *пылевой плазмой*. Она состоит из микроскопических заряженных частиц, взаимодействующих между собой. Согласно экспериментальным исследованиям, данная система может приходить в положение равновесия, которое называется *плазменно-пылевым кристаллом*. Систему мы погрузим во внешнее электростатическое поле.

Для изучения данной системы, мы будем считать все частицы – пылинки – одинаковыми по массе и заряду. Систему будем моделировать в программе LAMMPS. В качестве потенциала взаимодействия между частицами был взят экранированный кулоновский потенциал Юкавы.

$$U(r_{ij}) = \frac{q^2}{r_{ij}} \exp(-\kappa r_{ij})$$

В центре системы была расположена электростатическая ловушка, действующая на все частицы. Потенциал, создаваемый электростатической ловушкой был выбран таким:

$$\varphi_{trap}(r_i) = \frac{1}{2} [\alpha(x_i^2 + y_i^2) + \beta z_i^2]$$

$$\mathbf{E}_{trap}(\mathbf{r}_i) = -\text{grad } \varphi(r_i) = -[\alpha(\mathbf{r}_{xi} + \mathbf{r}_{yi}) + \beta \mathbf{r}_{zi}]$$

где α и β – параметры электрического поля, связанные соотношением $\beta = 10^5 \cdot \alpha$.

Внешнее поле на LAMMPS мы реализовали так:

```
variable      fx atom x*${alpha}*(-1)
variable      fy atom y*${alpha}*(-1)
variable      fz atom z*${betta}*(-1)
variable      phi atom (1/2)*(${alpha}*(x^2+y^2)+${betta}*z^2)
fix           2 all efield v_fx v_fy v_fz potential v_phi
```

Помимо прочего, мы использовали обрезку потенциала на расстоянии 0.1 см для ускорения расчётов (на таком расстоянии взаимодействие составляет 0.005%). Так же мы использовали термостат Ленжавена для избавления системы от лишних осцилляций [1, 2]

Важно упомянуть, что мы рассматривали систему без периодических граничных условий, была смоделирована 1000 частиц.

2. Результаты

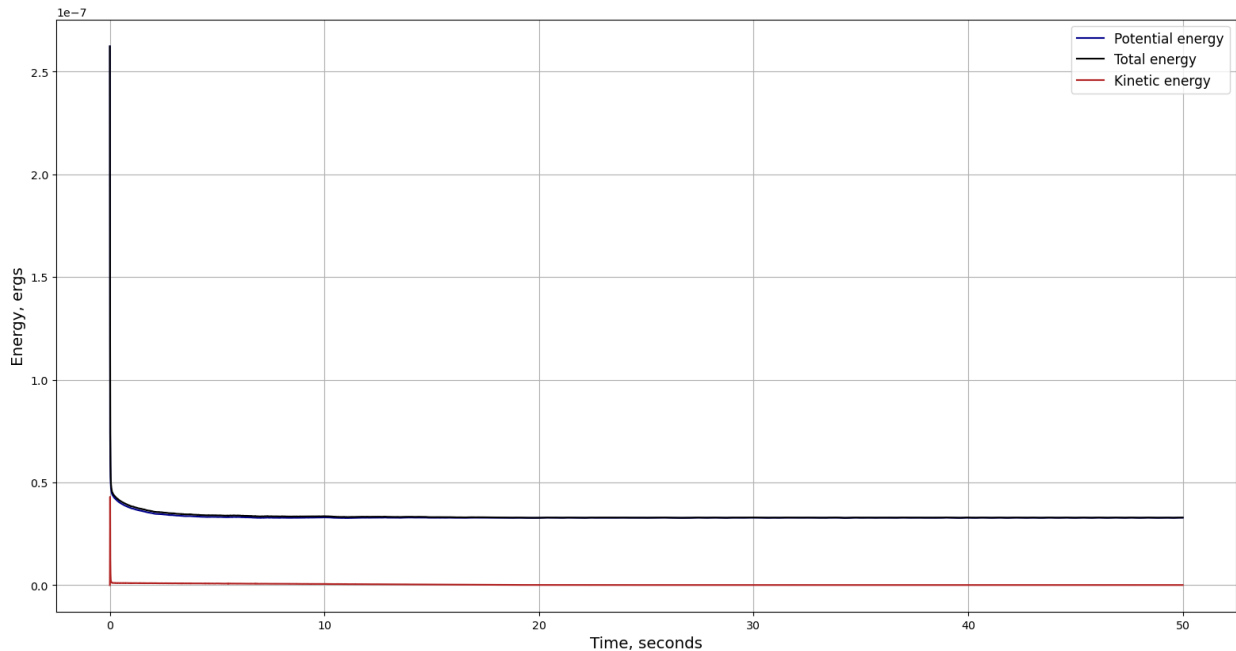
2.1. Вывод системы на положение равновесия

Мы запустили несколько моделей, в которых положение частиц генерировалось случайным образом, в результате чего наблюдали, как они стремятся образовать собой приплюснутое вдоль Oz облако, при этом, многие из них улетаели за границу модели. Исходя из увиденного, а также из анализа потенциалов в модели мы предположили, что равновесная структура должна иметь форму эллипсоида с длиной полуосей

$$a_x = a_y = 10^5 a_z,$$

После этого мы сгенерировали частицы так, чтобы они изначально образовывали вышеупомянутый эллипсоид. Подвергнув систему 40 секундам воздействия термостата Ленжавена, мы получили систему в положении равновесия около $T = 300$ К без масштабных осцилляций. В результате чего мы смогли убедиться в том, что система действительно стремится стать сплюснутым вдоль Oz эллипсоидом, фактически вырождающимся в круг радиуса 0.5 см на плоскости xOy с центром в начале координат.

Рис. 1: Зависимость энергии системы от времени

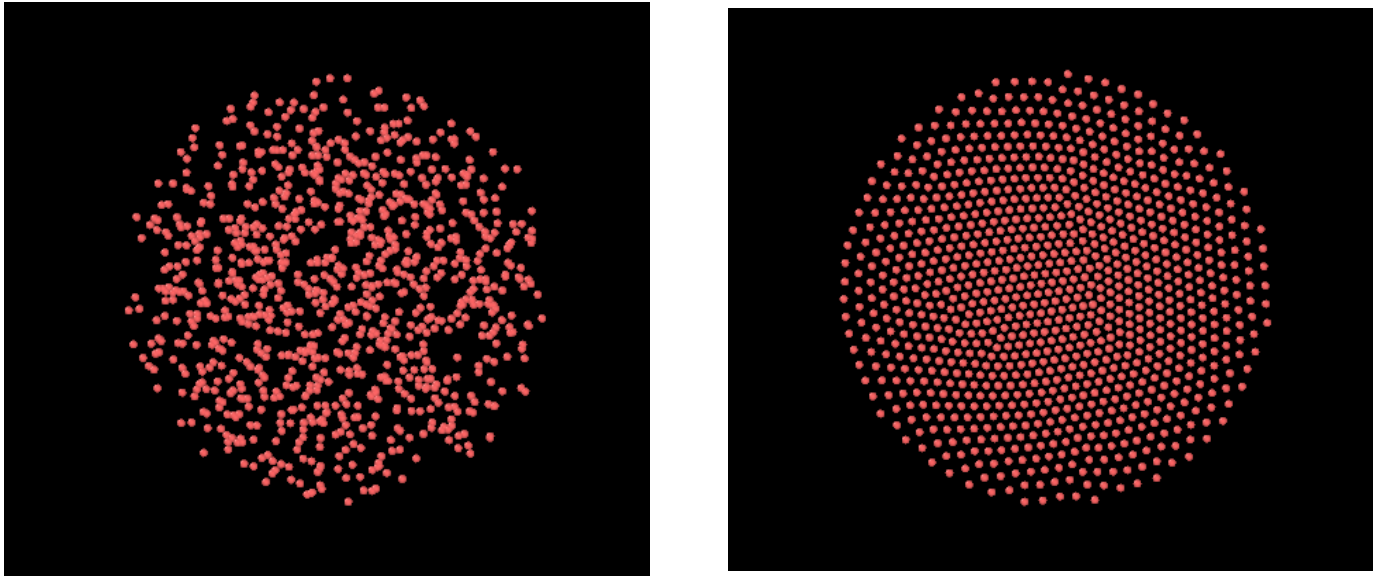


Как видно из графика потенциальной энергии от времени, система действительно оказывается в положении равновесия, от которого лишь немного отклоняется.

Анализ. Каким образом было угадано положение равновесия системы мы описали выше. Теперь же сравним полученный результат с результатами других работ. В модели [3], анализировавшейся учёными, полученная учёными конфигурация частиц в положении равновесия совпадает с нашей.

В работе [4] учёные провели эксперимент, в котором исследовали поведение системы пылинок в электроразряде. В их работе равновесным состоянием тоже оказалась равномерно заполненная пылинками круговая структура.

Рис. 2: Визуализация начального и равновесного состояния системы в программе Ovito



2.2. Пространственная неоднородность свойств

Наша система является цилиндрически симметричной. Теперь, отсчитывая от положения равновесия, изучим дальнейшую эволюцию системы, разбив её на отдельные подсистемы: пять концентрических цилиндров радиусами 1 см, 2 см, 3 см, 4 см, 5 мм. Начиная со второго по радиусу цилиндры являются полыми.

Изучая только частицы в каждой из полученных подсистем, вычислим далее среднюю кинетическую энергию частиц в каждой подсистеме, парную корреляционную функцию, среднеквадратичное отклонение частиц от положений равновесия, автокорреляционные функции скорости.

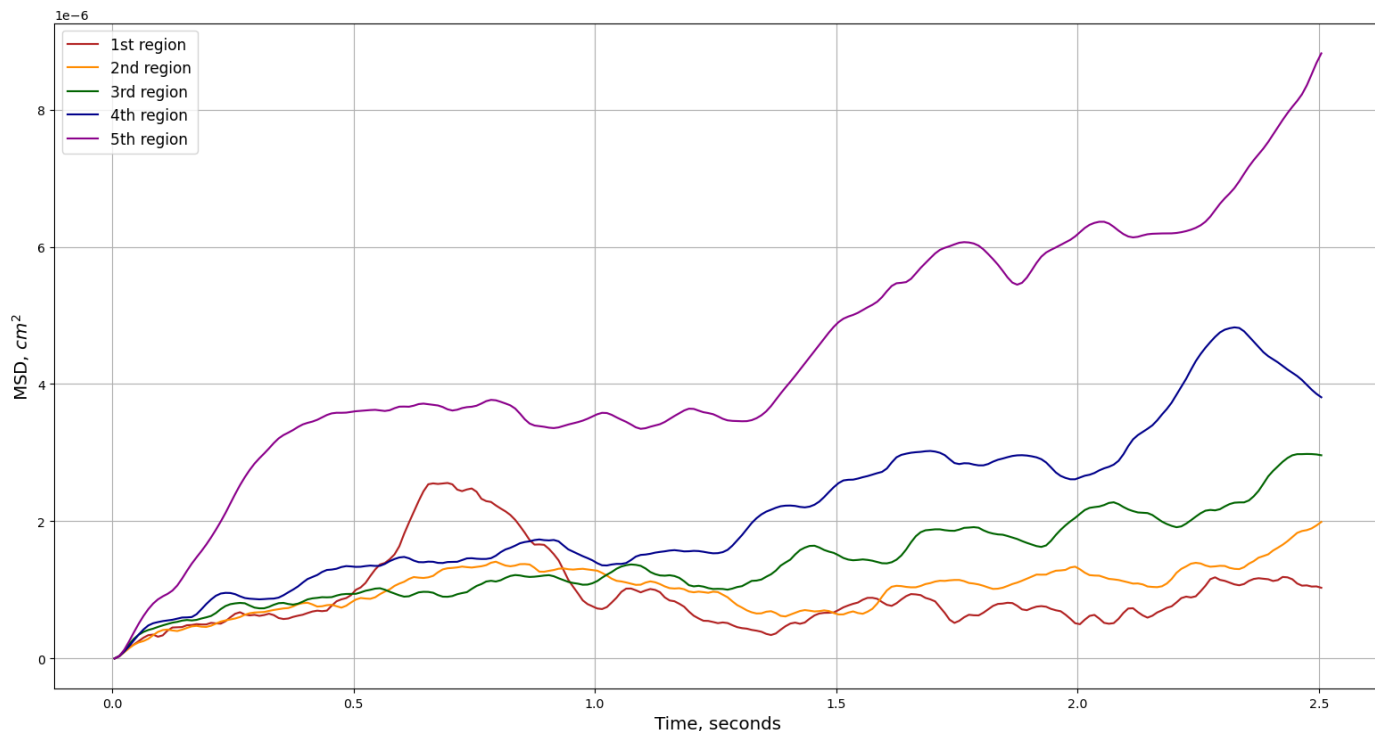
Средняя кинетическая энергия. Как можно видеть из полученных данных, кинетическая энергия вначале уменьшается с ростом расстояния от центра, однако на краях возрастает, что согласуется с исследованием в работе [4] и свидетельствует о неоднородности, а также о том, что сохраняется малая "дышащая мода". Полученный результат и является результатом неоднородности моделируемой системы.

Таблица 1: Средняя кинетическая энергия частиц в зависимости от расстояния от центра

R , см	0.05	0.15	0.25	0.35	0.45
$\langle E_k \rangle$, 10^{-14} эрг	6.4	6.1	6.1	6.0	6.3

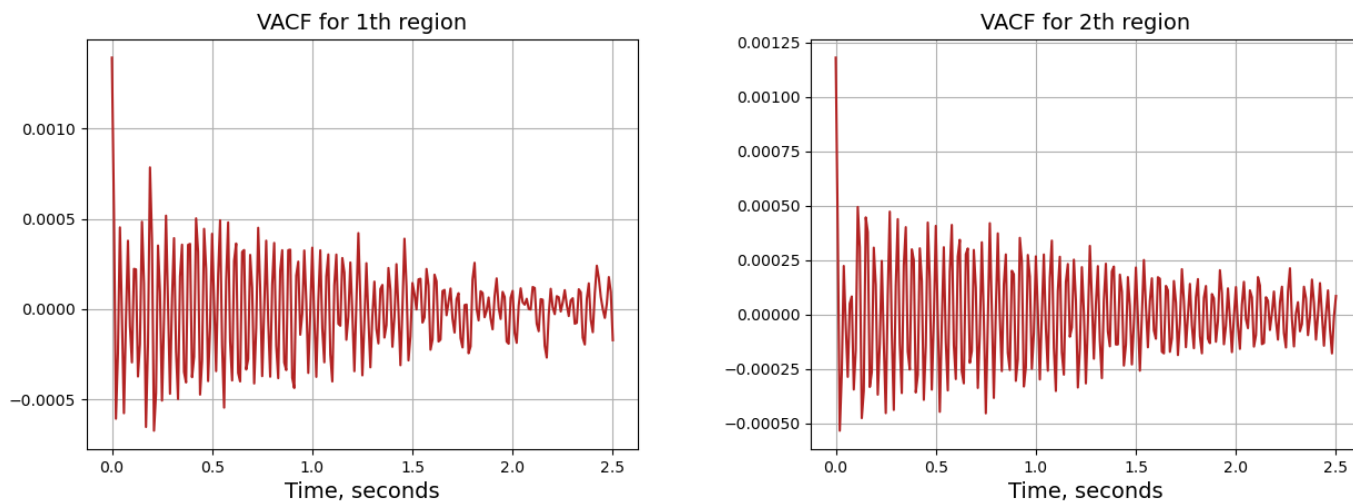
Среднеквадратичное отклонение. Мы построили среднеквадратичное отклонение частиц в зависимости от расстояния от центра – MSD увеличивается, и, как видно, результат согласуется с работой [4].

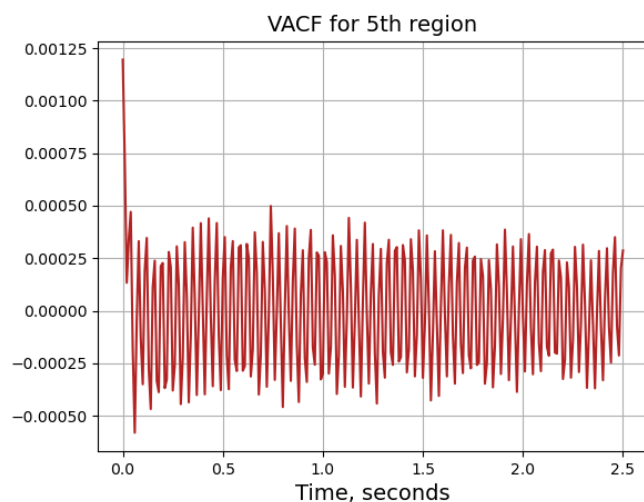
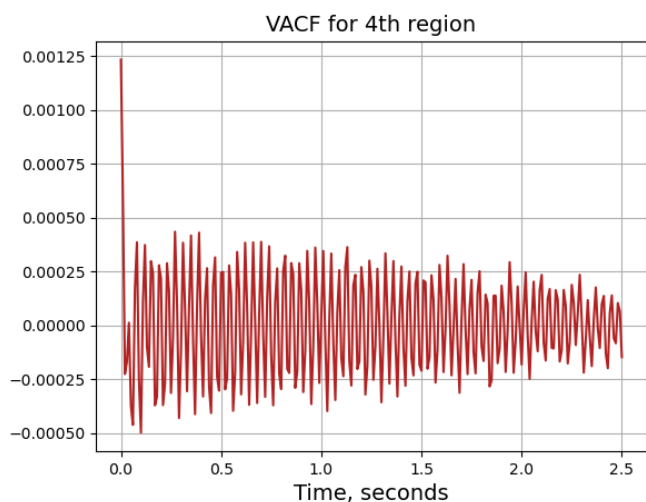
Рис. 3: Среднеквадратичное отклонение



Автокорреляционные функции скорости (VACF). Были получены графики для автокорреляционной функции скорости в зависимости от расстояния от центра. Они согласуются с полученными в экспериментальной работе [5]. Как видно из графиков, ближе к центру система имеет функцию, характерную для кристалла, тогда как ближе к краям система имеет вид, больше напоминающий газ, что в очередной раз свидетельствует о пространственной неоднородности системы.

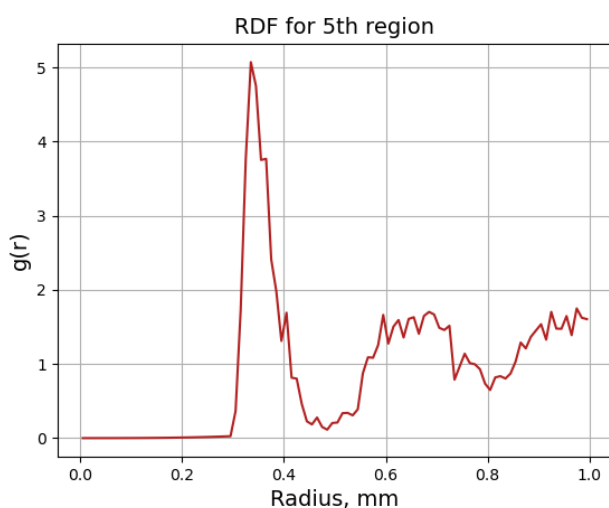
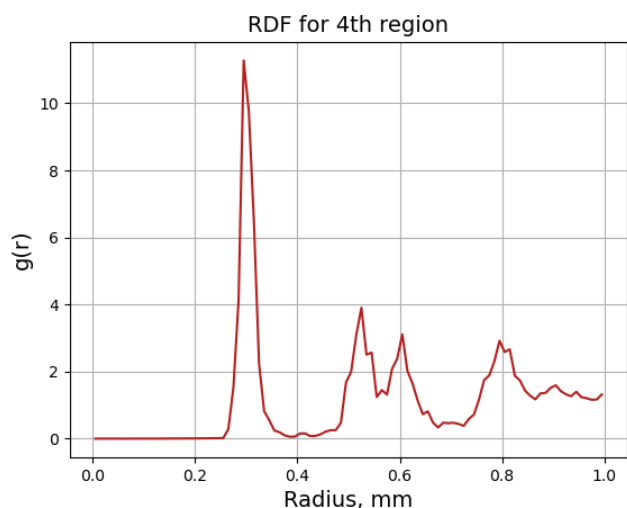
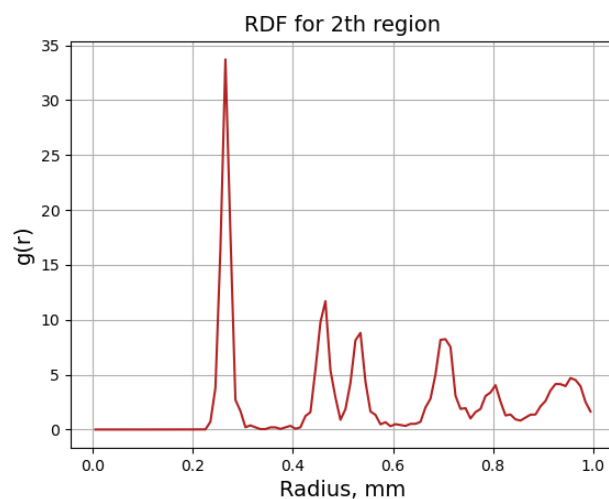
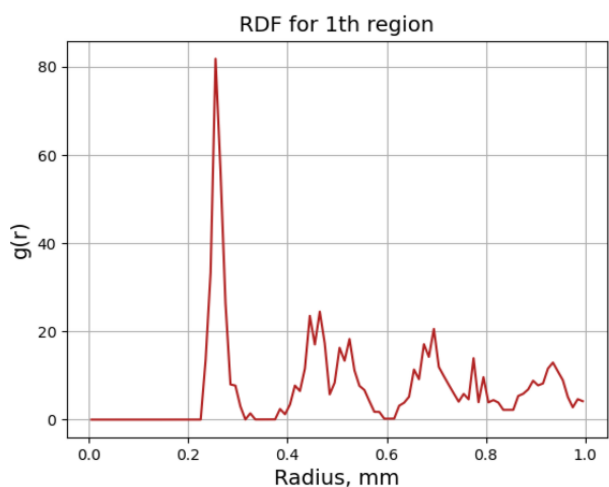
Рис. 4: Графики автокорреляционных функций скорости для разных областей системы





Парные корреляционные функции (RDF). По результатам построения RDF были получены графики. Они хорошо согласуются с результатами работы [6]. Как из них видно, ближе к центру график выглядит как характерный для твёрдого тела [6], тогда как ближе к краям график выглядит как характерный для жидкого тела [7], что в очередной раз свидетельствует о пространственной неоднородности в системе.

Рис. 5: Графики парных корреляционных функций для разных областей системы



3. Выводы

В рамках нашей работы мы исследовали интересную пространственно неоднородную структуру плазменно-пылевого кристалла с помощью метода молекулярной динамики. Мы изучили вывели систему на положение равновесия, после чего в равновесном состоянии исследовали неоднородную структуру системы, вычислив среднюю кинетическую энергию, среднеквадратичное отклонение, автокорреляционные функции скорости и парные корреляционные функции в зависимости от расстояния до центра системы.

Благодаря данной работе мы отработали навыки использования LAMMPS, изучив более необычную систему, чем потенциал Леннарда-Джонса.

Интересным продолжением данной работы, на наш взгляд, является изучение системы, в которой частицы, как в реальной системе, обладали бы различными зарядами.

4. Литература.

- [1] [D. S. Lemons, A. Gythiel. On the Theory of Brownian Motion](#)
- [2] [Б.А. Клумов. О критериях плавления комплексной плазмы](#)
- [3] [А.В. Тимофеев, В.С. Николаев, В.П. Семёнов. Неоднородность структурных и динамических характеристик пылевой плазмы в газовом разряде](#)
- [4] [Experimental Observation of a Dusty Plasma Crystal in the Cathode Sheath of a DC Glow Discharge Plasma](#)
- [5] [Ankit Dhaka, P. Bandyopadhyay, P. V. Subhash, A. Sen. Experimental validation of the analytic model for the temporal decay of the density auto-correlation function in a strongly coupled dusty plasma](#)
- [6] [R. A. Quinn, C. Cui, J. Goree, J. B. Pieper, H. Thomas, G. E. Morfill. Structural analysis of a Coulomb lattice in a dusty plasma](#)
- [7] [John G. Kirkwood, Elizabeth Monroe Boggs. The Radial Distribution Function in Liquids](#)
- [8] [Robert L. Merlino. Experimental Investigations of Dusty Plasmas](#)