

01;04

Электронные облака заряженных макрочастиц

© А.Н. Ткачев, С.И. Яковленко

Институт общей физики РАН,
117942 Москва, Россия

(Поступило в Редакцию 13 октября 1997 г.)

На основе уравнения Пуассона получено выражение для характеристик дебаевского электронного облака вокруг многократно заряженной частицы. Показано, что предельный размер дебаевского облака (при бесконечно большом заряде частиц) в зависимости от геометрии задачи колеблется от 0.7 до 2.2 дебаевского радиуса. Проведено моделирование из первопринципов динамики многих электронов, движущихся вокруг неподвижного заряженного центра. Показано, что устанавливается метастабильное состояние, релаксирующее по крайней мере в тысячу раз медленнее, чем это следует из кинетической теории. Расчеты показывают, что в этом метастабильном состоянии (далеком от термодинамического равновесия) имеет место детальный баланс переходов электронов из состояния с одной энергией в другое. Распределение электронов по кинетической энергии имеет при этом максвелловский вид, а распределение по полной энергии радикально отличается от больцмановского и близко к тому, которое было установлено нами ранее для плазмы однозарядных ионов. Получено распределение потенциала вокруг неподвижного заряда в метастабильной плазме.

Введение

Рассмотрение плазмы, в которой существенную роль играют заряженные частицы микронных размеров (так называемой пылевой плазмы), представляет интерес как фундаментального, так и прикладного характера [1,2]. Ввиду большого заряда, который могут приобретать макрочастицы, такая плазма становится существенно неидеальной уже при сравнительно малой плотности этих частиц. Неидеальная плазма микрочастиц в отличие от обычной неидеальной плазмы релаксирует довольно медленно, она может быть получена и поддерживаться в неравновесном состоянии сравнительно простыми средствами (например, с помощью газовой горелки или ВЧ разряда). При этом могут образовываться плазменно-пылевые кристаллы, капли и облака. Исследования такой плазмы представляют фундаментальный интерес, поскольку адекватная теория неидеального состояния отсутствует.

Пылевая плазма часто получается в технологических процессах по производству микроразрядных схем. Ее свойства необходимо знать в связи с прикладными вопросами, в частности, для того, чтобы снизить количество бракованной продукции.

В этой работе мы рассмотрим некоторые вопросы, связанные формированием электронных облаков вокруг частиц большого заряда. При этом будут использованы как аналитические методы, так и моделирование динамики многих частиц (ДМЧ) из первопринципов [3–5]. Дальнейшее рассмотрение ограничено простым случаем, когда в плазме нет других положительно заряженных ионов, кроме микрочастиц. В конкретных оценках мы часто будем ориентироваться на параметры плазмы в экспериментах [6].

Дебаевский атом

1) Одномерные модели. Заряд, окруженный облаком электронов распределенных по Больцману, мы будем ниже называть дебаевским атомом в отличие от томас-фермиевского атома, в котором электроны вырождены. Потенциал φ и напряженность поля \mathbf{E} в дебаевском атоме описываются распределением Больцмана и уравнением Пуассона

$$N_e = N_{e0} \exp(\varphi), \quad \operatorname{div}(\mathbf{E}) = -\exp(\varphi),$$

$$\mathbf{E} = -\operatorname{grad}(\varphi). \quad (1)$$

В этом разделе мы используем безразмерные уравнения: длина измеряется в дебаевских радиусах $r_D = (T_e/4\pi e^2 N_{e0})^{1/2}$, где N_{e0} — плотность свободных электронов; e — заряд электрона; T_e — температура электронов, потенциал измерен в единицах T_e/e ; напряженность поля — в T_e/er_D .

В одномерном (т.е. плоском, цилиндрически симметричном или сферически симметричном) случае уравнения (1) принимают вид

$$\frac{1}{r^k} \frac{d}{dr} \left(r^k \frac{d}{dr} \varphi \right) = \exp(\varphi), \quad E = \frac{d}{dr} \varphi,$$

$$\varphi(a_0) = 0, \quad E(a_0) = 0, \quad (2)$$

$k = 0, 1, 2$ соответственно для плоского, цилиндрически симметричного и сферически симметричного случаев.

Граничные условия выбраны исходя из того, что на границе атома $r = a_0$ напряженность поля и потенциал должны обратиться в нуль. На самом деле задается напряженность поля E_0 или потенциал φ_0 на поверхности микрочастицы. Значение a_0 определяется через заданную величину на основе решения уравнений (2). Ориентируясь, например, на условия экспериментов [6],

положим $N_{e0} = 2.5 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-3}$, $T_e = 0.146 \text{ eV} = 1700 \text{ K}$. Соответственно $r_D = 0.002 \text{ cm}$, $T_e/e = 0.146 \text{ V}$, $T_e/er_D = 82 \text{ V/cm}$. При среднем радиусе $r_0 = 0.4 \mu\text{m}$ ($r_0/r_D = 0.02$) и заряде микрочастицы $Z = 500$ имеем напряженность поля на поверхности частицы $E_0 = Ze/r_0^2 = 4.5 \cdot 10^4 \text{ V/cm}$ ($E_0er_D/T_e = 550$). Отметим, что величина $E_0r_0 = 1.8 \text{ V}$ ($E_0r_0e/T_e = 12.3$), вообще говоря, не равна потенциалу φ_0 на поверхности частицы, связь E_0 и φ_0 определяется из решения уравнений (2).

2) Плоская модель. Плоская геометрия реализуется в тех случаях, когда радиус микрочастицы намного превосходит дебаевский радиус. Кроме того, эта модель интересна тем, что результаты получаются в явном аналитическом виде.

Пусть координата $x = r$ направлена вправо перпендикулярно заряженной плоскости и отсчитывается от нее. Ввиду того что при $k = 0$ уравнения (2) не содержат явной зависимости от координаты, можно заменой переменных свести уравнение второго порядка для потенциала как функции координаты к уравнению первого порядка для поля как функции потенциала (ср. с задачей об экранировании плоского заряда плазмой [7]). Интегрируя это уравнение, а затем уравнение для потенциала, получаем явные выражения для зависимости потенциала и поля от координаты

$$\varphi(x) = \ln \left\{ 1 + \left[\text{tg} \left(\frac{a_0 - x}{\sqrt{2}} \right) \right]^2 \right\},$$

$$E(\varphi) = \sqrt{2(\exp(\varphi) - 1)}. \quad (3)$$

Здесь $\varphi_0 = \ln(E_0^2/2 + 1)$, $a_0 = \sqrt{2} \arctg \sqrt{\exp(\varphi_0) - 1}$ — соответственно потенциал на плоскости и координата границы атома. Например, в условиях экспериментов [6] при $E_0 = 552.2$ имеем $\varphi_0 = 11.94$, $a_0 = 2.21$. Отметим, однако, что в [6] радиус частицы меньше дебаевского радиуса, а плоская геометрия дает несколько завышенные значения a_0 (см. ниже).

3) Сферически и цилиндрически симметричная модели. Сферический случай, как правило, реализуется в экспериментах. Цилиндрическая задача интересна в связи с возможностью исследования взаимодействия нагретых тонких проволок.

Зависимость напряженности поля и потенциала от координаты r определяется численным решением уравнений (2). Как отмечалось выше, граничное условие задается радиусом r_0 и зарядом Z частицы. Например, в условиях экспериментов [6] при $E_0 = 552.2$, $r_0 = 0.022$ в сферически симметричном случае имеем $\varphi_0 = 10.18$, $a_0 = 0.8556$.

Определяемую численными решениями зависимость граничного значения потенциала φ_0 , и размера дебаевского облака a_0 от напряженности поля на поверхности микрочастицы E_0 иллюстрирует рис. 1. Видно, что размер облака растет с ростом заряда частицы $Z \sim E_0$, однако этот рост, как и в плоском случае, резко замедляется вблизи предельного размера. Предельный размер

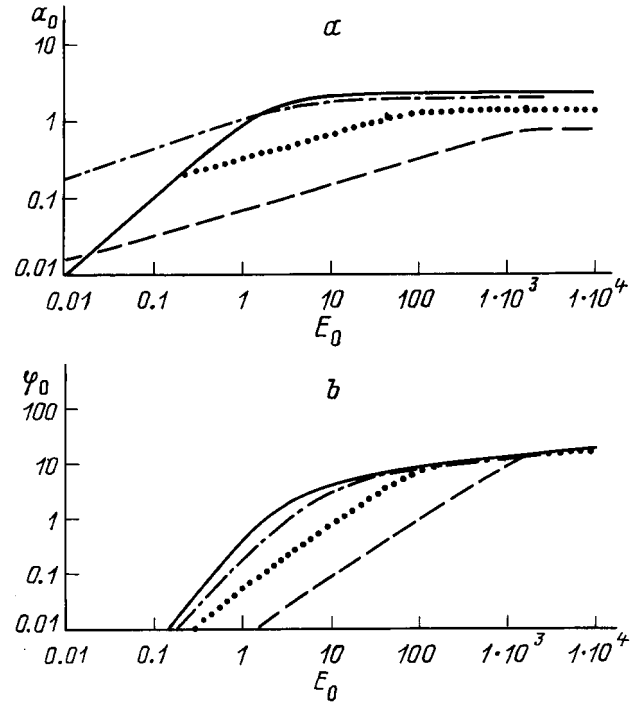


Рис. 1. Зависимость размера дебаевского облака a_0 (а) и потенциала φ_0 (б) на поверхности микрочастицы от напряженности поля E_0 на поверхности микрочастицы (безразмерные величины): сплошные кривые — плоская геометрия; штрихпунктир — цилиндрическая геометрия ($r_0 = 0.1$, предельное значение $a_0 = 1.95$); пунктир-сферическая геометрия ($r_0 = 0.1$, $a_0 = 1.34$); штриховые кривые — сферическая геометрия ($r_0 = 0.01$, $a_0 = 0.746$).

несколько растет с увеличением радиуса частицы, но величина $a_0 - r_0$ меньше предельного размера плоского дебаевского облака $\pi/2^{1/2} = 2.221$.

При достаточно большом заряде микрочастицы потенциал на ней φ_0 не зависит от ее радиуса r_0 и пропорционален логарифму ее заряда при любой геометрии задачи. Основная масса электронов при большом Z сосредоточена вблизи поверхности микрочастицы, и поэтому связь потенциала с напряженностью поля при $E_0 \gg 1$ соответствует плоскому случаю (3). При небольшой величине E_0 также для любой геометрии имеет место линейная зависимость от E_0 размера атома и потенциала на поверхности частицы.

Отметим, что имеется некоторая несогласованность модели дебаевского атома при рассмотрении заряженной частицы в бесконечном объеме. За границей облака $r > a_0$ потенциал и поле равны нулю, но плотность электронов нулю не равна, что приводит к нарушению квазинейтральности при рассмотрении на основе этой модели бесконечного объема. Этим фактом можно пренебречь для поля внутри атома $r < a_0$, если плотность электронов так много больше, чем на периферии. При ДМЧ моделировании электронный газ ограничен размерами рассматриваемого "ящика".

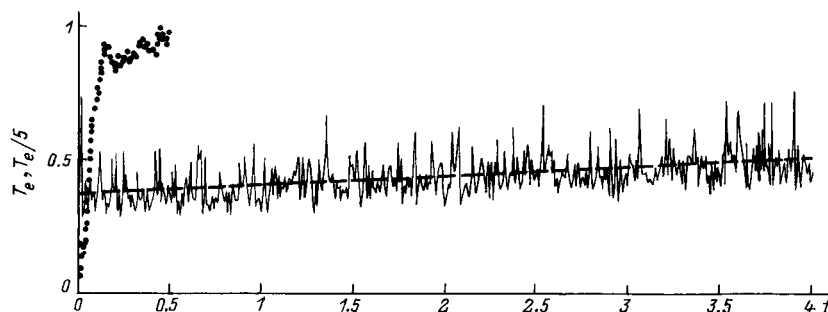


Рис. 2. Зависимость температуры электронов (в eV) от времени (в ленгмюровских периодах). Сплошная кривая — обычный расчет, пунктир — расчет с перестановкой скоростей различных электронов через интервалы $t_f = 0.01$ (для этой кривой масштаб температуры увеличен в 5 раз), штриховая — $0.3662 + 0.0344 \cdot t$.

Моделирование многозарядного электронного облака из первопринципов

1) **Метастабильное состояние.** Для исследования плазмы микрочастиц естественно привлечь методы моделирования из первопринципов, подытоженные в [3–5]. Рассматривалось численное решение уравнений Ньютона для n электронов, помещенных в куб с длиной ребра a . Считалось, что стенки куба отражают электроны зеркально. Одна бесконечно тяжелая частица зарядом $Z = n = 256$ (полагалось, что это заряженная проникающая сфера радиусом $r_0 = 0.01a/n^{1/3} = 2.1 \cdot 10^{-7}$ см) была помещена в центр куба. Начальное распределение частиц считалось максвелловским с температурой $T_0 = 0.03$ eV. Время измеряется в ленгмюровских периодах $T_L = 2\pi / (4\pi e^2 N_e / m_e)^{1/2}$.

Как и ранее [3–5], расчеты показали, что за время ~ 0.1 устанавливается метастабильное состояние. Электроны в этом состоянии распределены по Максвеллу с температурой несколько выше начальной T_0 . Метастабильное состояние характеризуется почти постоянной температурой $T_e = 0.42$ eV (рис. 2), определяемой здесь как две трети кинетической энергии. Распределение электронов в области отрицательных полных энергий не растет, как это должно было бы иметь место при больцмановском распределении, а падает (рис. 3, *a*). Для плазмы частиц одинакового заряда ранее нами было найдено выражение, хорошо описывающее результаты всех численных расчетов (микрорезонансное распределение [3–5]).

Для демонстрации метастабильности установившегося состояния была вычислена матрица $W(t, \varepsilon, \varepsilon')$, дающая среднее по расчету число переходов из энергетической точки ε в энергетическую точку ε' за временной интервал t . Расчеты показывают, что в установившемся состоянии она симметрична (рис. 3, *b*). Иначе говоря, в этом состоянии (далеком от термодинамического равновесия) имеет место детальный баланс переходов. Этот факт, наряду с фактом сильной заморозки релаксационных процессов (см. ниже) позволяет считать установившееся состояние метастабильным. Наличие метастабильного

состояния нельзя объяснить предположением, что эффективность обмена энергией при столкновениях электронов по каким-либо причинам оказывается намного ниже, чем это принято в кинетической теории. Переходы из одного энергетического интервала в другой происходят достаточно часто. Однако переходы "вниз" по энергии компенсируются не дальнейшими переходами "вниз", как это следует из кинетической теории рекомбинации, а обратными переходами "вверх" (наиболее подробное обсуждение этого вопроса см. в [5]).

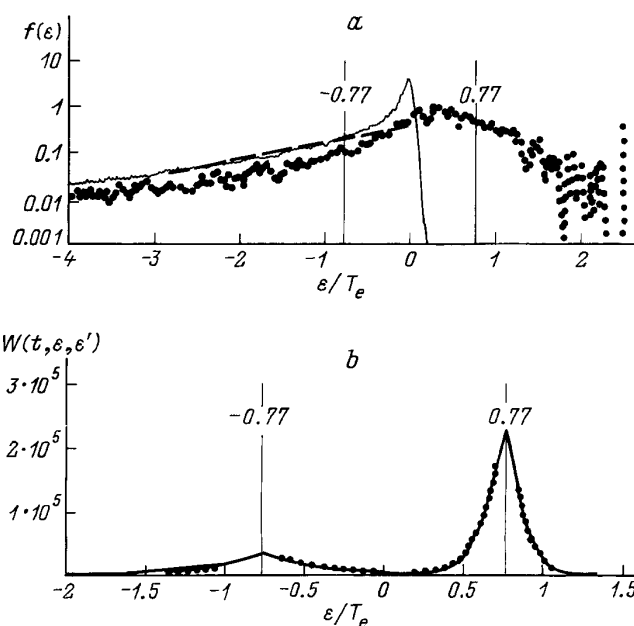


Рис. 3. Функция распределения (*a*) и числа прямых и обратных переходов (*b*) в зависимости от энергии: *a* — сплошная кривая — распределение электронов по потенциальной энергии, пунктир — по полной энергии, штриховая кривая — экспоненциальная функция $C \exp(0.23x)$, аппроксимирующая спадание распределения по потенциальной энергии; *b* — число прямых переходов $\varepsilon_1 \rightarrow \varepsilon$, $\varepsilon_2 \rightarrow \varepsilon$ (сплошные кривые) и обратных переходов в зависимости от энергии $\varepsilon \rightarrow \varepsilon_1$, $\varepsilon \rightarrow \varepsilon_2$, точки $\varepsilon_1 = -0.77T_e$ и $\varepsilon_2 = 0.77T_e$ отмечены вертикальными прямыми, переходы рассмотрены за интервал $\Delta t = 0.5$ и усреднены по всему времени расчета.

Когда на динамическую систему оказывается достаточно сильное стохастическое воздействие, происходит релаксация к термодинамическому равновесию [3–5]. Например, при перестановке скоростей различных электронов через интервалы времени $t_f \ll 1$ имеет место интенсивный рекомбинационный нагрев свободных электронов (рис. 2). Это, в частности, доказывает, что метастабильное состояние, несмотря на детальный баланс переходов, не является термодинамически равновесным. В частности, его существование нельзя объяснить сдвигом термодинамического равновесия в сторону повышенной ионизации за счет упругих столкновений электронов со стенками, вопреки точки зрения, проводимой в [8,9], (критику [8,9] см. в [5,10,11] и цитируемых там работах).

2) О степени замедления релаксации. Расчетное время эволюции системы на много превышает время рекомбинации, определяемое кинетической теорией. Однако рекомбинационная релаксация почти незаметна. Остановимся на этом подробнее. Согласно кинетической теории, время изменения плотности электронов за счет тройной рекомбинации определяется выражением $\tau_{\text{rec}} = 0.57\gamma^{9/2}/\Lambda(\gamma)Z^3$. Здесь $\gamma = (2e^2N_e)^{1/3}/T_e$ — параметр, характеризующий степень идеальности плазмы; время измеряется, как и выше, в T_L ;

$$\Lambda(\gamma) = \begin{cases} \frac{1}{2} \ln \left(1 + \frac{9}{4\pi\gamma^3} \right), & \gamma < 0.2373 \\ 2, & \gamma \geq 0.2373 \end{cases}$$

— кулоновский логарифм (используемое выражение для кулоновского логарифма учитывает результаты ДМЧ моделирования для значений $\gamma > 0.24$ [12]).

При тройной рекомбинации имеет место нагрев электронов и скорость рекомбинационного нагрева определяется характерным временем $\tau_{T_e} = \tau_{\text{rec}}/(1+b)$, где $b = \varepsilon^*/T_e(0)$; ε^* — энергия, выделяющаяся на акт рекомбинации (подробнее см. [11,13]).

Из результатов ДМЧ моделирования следует, что время увеличения температуры электронов вдвое составляет $\tau_2 = 11$, в то время как время рекомбинации, получаемое на основе кинетической теории $\tau_{\text{rec}} = 0.026$, т.е. в четыреста раз меньше. На самом деле отличие результатов ДМЧ расчетов от кинетической теории (заморозка рекомбинации) еще существеннее, поскольку $\tau_{T_e} \ll \tau_{\text{rec}}$. Если, например, взять в качестве энерговыделения на акт рекомбинации энергию, соответствующую радиусу частицы $\varepsilon^* = 170$ eV (соответственно $b = 470$), получаем отличие времени нагрева в ДМЧ расчетах от результата кинетической теории $\tau_2/\tau_{T_e} = 1.3 \cdot 10^5$. Если исходить из вида распределения по полной энергии на рис. 3, a и положить $\varepsilon^* \sim 10T_e(0)$, то $\tau_2/\tau_{T_e} = 2 \cdot 10^3$.

3) Распределение потенциала. Для моделирования пространственного распределения потенциала в метастабильном состоянии вместо больцмановского распределения будем использовать экспоненциально спадающую зависимость $N_e = N_{e0} \exp(-e\varphi/\varepsilon_0)$ (ср. с микрополевым распределением [3–5]). Скорость

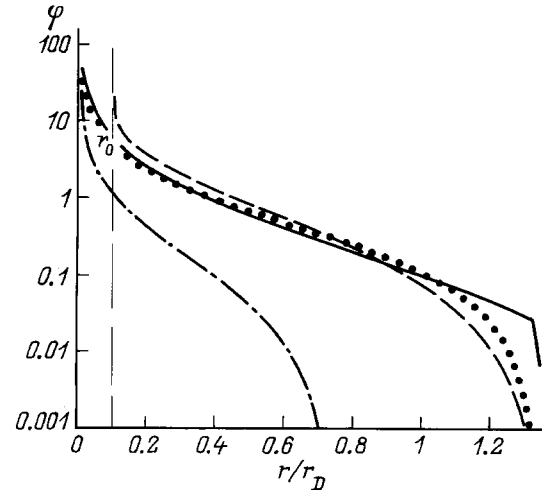


Рис. 4. Распределение потенциала по радиусу: сплошная кривая — ДМЧ расчет ($r_0 = 0.01$, $a/2 = 1.35$); пунктир — недебаевская модель с экспоненциально спадающей зависимостью плотности электронов от потенциальной энергии ($r_0 = 0.01$, $a_0 = 1.35$); штриховая — дебаевская модель ($r_0 = 0.1$, $a_0 = 1.35$); штрихпунктир — дебаевская модель ($r_0 = 0.01$; $a_0 = 0.75$).

спадания характеризуется величиной ε_0 . Измеряя потенциал в единицах ε_0/e , расстояние — в единицах $r_m = (\varepsilon_0/4\pi e^2 N_{e0})^{1/2}$ и напряженность поля — в ε_0/er_m , приходим к системе уравнений, отличающейся от (2) лишь заменой знака в экспоненте.

Решение этой системы в плоском случае дает

$$x(\varphi) = a(\varphi_0) - a(\varphi), \quad E(\varphi) = \sqrt{2(1 - \exp(-\varphi))},$$

где

$$a(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2}} \ln \left[\frac{\exp(-\varphi)}{2 - \exp(-\varphi) - 2\sqrt{1 - \exp(-\varphi)}} \right].$$

Отметим, что в этом случае координата границы электронного облака $a_0 = a(\varphi_0)$ в отличие от случая дебаевского облака может быть сколь угодно большой, размер облака линейно растет с ростом потенциала на частице $a_0 = a(\varphi_0) = (1/2) \ln(2)\varphi_0 = 0.347\varphi_0$ при $\varphi_0 \gg 1$.

В сферически симметричном и цилиндрически симметричном случаях, как и для случая дебаевского облака, соответствующие зависимости находятся путем численного интегрирования уравнений, аналогичных (2).

Сопоставление результатов ДМЧ моделирования с дебаевской и недебаевской моделью электронного облака показывает, что расчетам лучше соответствуют недебаевская модель (рис. 4). Это естественно, поскольку распределение плотности в глубине дебаевского облака радикально отличается от результатов ДМЧ расчетов (экспоненциальный спад вместо экспоненциального роста). Если взять $a_0 = a/2$, то дебаевская модель дает резкое увеличение потенциала на расстоянии $r_0 = 0.1$,

что не согласуется с ДМЧ расчетами. Если же наоборот, взять r_0 соответствующим наименьшему расстоянию ДМЧ расчета, то радиус дебаевского облака окажется значительно меньше $a/2$.

Модель же, основанная на экспоненциально спадающей зависимости, хорошо описывает область близких и средних расстояний, несколько отличаясь от результатов ДМЧ расчетов на периферии. Это отличие, по-видимому, связано с тем, что экспоненциальный спад не совсем точно характеризует область малых значений потенциала (рис. 3, *a*).

Заключение

Итак, ДМЧ расчеты, моделирующие многозарядную частицу, окруженную облаком электронов, показывают, что такая система формирует метастабильное состояние, далекое от термодинамического равновесия. Аналогичное состояние было обнаружено нами ранее для плазмы однозарядных ионов [3–5]. Однако для многозарядной частицы заморозка рекомбинации выражена намного сильнее. Особый интерес представляет то, что в метастабильном состоянии, далеком от термодинамического равновесия, имеет место детальное равновесие переходов электронов между состояниями с различными значениями энергий. Возможно, формирование плазменно-пылевых кристаллов капель и облаков имеет место для метастабильного состояния. Впрочем, этот вопрос нуждается в дополнительном исследовании, включающем в себя рассмотрение взаимодействия дебаевских атомов.

Список литературы

- [1] *Фортон В.Е., Якубов И.Т.* Неидеальная плазма. М.: Энергоатомиздат, 1994. 368 с.
- [2] *Цытович Н.Н.* // УФН. 1997. Т. 167. № 1. С. 57–99.
- [3] *Майоров С.А., Ткачев А.Н., Яковленко С.И.* // УФН. 1994. Т. 164. № 3. С. 297–307.
- [4] *Mayorov S.A., Tkachev A.N., Yakovlenko S.I.* // Phys. Scripta. 1995. Vol. 51. P. 498–516.
- [5] *Ткачев А.Н., Яковленко С.И.* // Изв. вузов. Физика. 1997. Т. 40. № 12.
- [6] *Фортон В.Е., Нефедов А.П., Петров О.Ф.* и др. // ЖЭТФ. 1997. Т. 111. Вып. 2. С. 467–477.
- [7] *Сивухин Д.В.* // Вопросы теории плазмы / Под ред. М.А. Леонтовича. М.: Атомиздат, 1964. Вып. 4.
- [8] *Игнатов А.М., Коротченко А.И., Макаров В.П.* и др. // УФН. 1995. Т. 165. № 1. С. 113–117.
- [9] *Рухадзе А.А.* // Кр. сообщ. по физике ФИАН СССР. 1995. № 9–10. С. 40.
- [10] *Майоров С.А., Ткачев А.Н., Яковленко С.И.* // УФН. 1995. Т. 165. № 1. С. 117–118.
- [11] *Ткачев А.Н., Яковленко С.И.* // Кр. сообщ. по физике ФИАН. 1996. № 9–10. С. 3.
- [12] *Майоров С.А., Ткачев А.Н., Яковленко С.И.* // Изв. вузов. Физика. 1992. Т. 35. № 2. С. 10.
- [13] *Ткачев А.Н., Яковленко С.И.* // Квантовая электрон. 1993. Т. 20. № 2. С. 111–112.