

УДК 537.533

Численное кинетическое моделирование динамических процессов в пылевой плазме

Л. В. Иньков, В. Д. Левченко, Ю. С. Сизов

Институт прикладной математики им. М. В. Келдыша РАН, Москва, Россия

Построена кинетическая PIC-модель пылевой плазмы, учитывающая взаимодействие электронов и ионов с частицами пыли, что позволяет изучать динамику процесса зарядки и механизмы взаимодействия пылинок в плазме. На основе модели разработан 3D3V код. Код тестировался на модельных задачах зарядки пылинки и взаимодействия двух пылинок в плазме. Результаты расчетов хорошо согласуются с теоретическими оценками. Кроме того, исследованы особенности поведения ионов вблизи пылинки. Обнаружены ионы с финитными траекториями.

Математическое моделирование пылевой плазмы — новая область исследований, в которой еще нет устоявшихся подходов. Интерес к этой области объясняется, с одной стороны, новейшими лабораторными экспериментами, выявившими широкий спектр интересных явлений (в том числе пылевые кристаллы), и, с другой стороны, важными техническими приложениями в области промышленного плазменного травления и напыления.

Моделирование пылевой плазмы связано с рядом трудностей, среди которых можно выделить следующие: существенная трехмерность задачи; характерные времена электронов, ионов и пыли отличаются на много порядков; существенная открытость электронов; важная роль столкновений пылинок с ионами и нейтральными частицами.

В данной работе сделана попытка преодолеть эти трудности и построить модель, учитывающую эффекты, необходимые для понимания процессов в пылевой плазме. В описываемой кинетической 3D объектно-ориентированной модели плазмы использованы:

- метод крупных частиц в ячейке (PIC) для электронной плазмы;
- моделирование пылевых частиц методом PIC со сферическим носителем, что позволяет точно вычислять поле вблизи пылинок;

- квазистационарная задача: плазма приходит в равновесие с неподвижными пылинками, после чего пылинки сдвигаются вдоль своего вектора импульса и т. д.;
- нахождение самосогласованного поля из уравнения Пуассона;
- два масштаба по пространству для расчета сил, действующих на частицы;
- два масштаба по времени: большой шаг по времени — для движения частиц на большом расстоянии от пылинки и малый шаг — для описания движения частиц вблизи пылинки;
- инжектирование частиц плазмы через поверхность или по объему.

В данный момент модель реализована в рамках универсального 3D кинетического кода SUR в предположении малого числа пылинок в системе (10—100). В качестве тестовой решаются задачи о зарядке пылинки и взаимодействии двух пылинок в электрон-протонной плазме.

Характерные параметры пылевой плазмы

Пылевая плазма играет важную роль в ряде областей физических исследований, среди которых следует отметить межзвездные молекулярно-пылевые облака, планетарные кольца, пылевые структуры в газовых разрядах и т. д. Однако соотношения параметров плазмы и частиц пыли в этих задачах сильно отличаются, и, по всей видимости, математическое моделирование этих задач потребует различных подходов.

Подход, обсуждаемый в данной работе, применим к задаче о пылевых кристаллах и, возможно, в перспективе к промышленному плазменному травлению. Кратко остановимся на характерных параметрах пылевой плазмы в этих областях.

Впервые в лабораторных условиях плазменно-пылевые кристаллы были получены в 1994 г. в Институте внеземной физики им. М. Планка. Пылевые частицы инжектировались в СВЧ-разряд в аргоновой низкотемпературной слабоионизированной плазме. При этом пылевые частицы образовывали четкую кристаллическую структуру, состоящую из нескольких слоев, в каждом из которых частицы располагались гексагонально, а по слоям — друг под другом.

Для целей численного эксперимента нас интересуют только основные параметры этого разряда: температура электронов $T_e \approx 1\text{--}3$ эВ, концентрация ионов $n_i \approx 10^9$ см⁻³, их температура предполагается близкой к комнатной. Концентрация пыли составляла примерно $n_d \approx 4 \cdot 10^4$ см⁻³, а заряд пылинки $Z_d \approx 10^4$.

Из приведенных параметров можно оценить дебаевский радиус электронов $d_e = \sqrt{T_e / 4\pi n_e e^2} \approx 0,043$ см и ионный дебаевский радиус $d_i \approx d_e / 10 \approx 0,0043$ см. Полный дебаевский радиус определяется из вкладов электронов и ионов по соотношению $1/d^2 = 1/d_e^2 + 1/d_i^2$ и практически совпадает с ионным дебаевским радиусом. Размер инжектируемых пылевых частиц составлял $a \approx 7$ мкм, а расстояние между ними — $\delta \approx 250$ мкм. Таким образом, мы имеем $a \ll d \ll \delta$.

В экспериментах других групп использовался разряд со сходными характеристиками. Размер частиц составлял 10—60 мкм, а расстояние между пылинками — 130—880 мкм. Практически во всех экспериментах соблюдалось соотношение $a < d \ll \delta$.

Несколько другая ситуация наблюдается в экспериментах по плазменному травлению. Здесь имеются два источника пылевых частиц: эрозия электродов

и образование частиц и капель из перенасыщенных паров продуктов травления. Зарождаясь, пылинки имеют размеры порядка десятых и сотых долей микрометра. Затем они быстро растут в результате рекомбинации электронов и ионов, а на поздних стадиях агломерации достигают макроскопических размеров (до 100 мкм). Стоит отметить существенное отличие параметров пылевых структур, наблюдаемых в процессе плазменного травления, от параметров тех, которые получались в экспериментах по пылевым кристаллам: среднее расстояние между частицами пыли $\delta \approx 10$ мкм, в то время как дебаевский радиус составлял примерно 50 мкм. Таким образом, $a \ll \delta \ll d$.

Механизмы взаимодействия пылинок в плазме

В работе [1] описаны следующие механизмы взаимодействия пылевых частиц и условия, при которых они играют существенную роль.

Длинномасштабное отталкивание пылевых частиц. Поле заряда пылевых частиц не экранируется по обычному закону экспоненциального экранирования, что объясняется наличием потока плазменных частиц на пылинку. На большом расстоянии от пылинки потенциал спадает, как $1/r^2$, что создает дополнительное длинномасштабное отталкивание пылевых частиц.

Притяжение из-за бомбардировки пылинок частицами. В присутствии других пылинок поток плазмы на пылинку становится асимметричным. Пылинки взаимно экранируют друг друга, чем и объясняется возникновение силы притяжения между ними.

Притяжение из-за кулоновского рассеяния плазменных потоков. Частицы передают импульс пылинкам не только при столкновении, но и при кулоновском рассеянии. Аналогично предыдущему случаю, взаимное затенение пылевых частиц приводит к возникновению дополнительной силы притяжения.

Притяжение и отталкивание, связанные с потоком нейтралов. Если температура поверхности пылинки отличается от температуры нейтральной компоненты, то при их взаимодействии также происходит передача импульса. Поэтому сказанное выше для ионов применимо и для нейтральных частиц.

Как уже отмечалось, с момента обнаружения плазменно-пылевых кристаллов наблюдается неослабевающий интерес к пылевой плазме. Другой стимул для исследователей в этой области — важные приложения в промышленной электронике. Каждый год появляется большое число статей по экспериментам с пылевой плазмой, накоплен огромный экспериментальный материал. В то же время работы по теоретическому и численному исследованию данного вопроса можно пересчитать по пальцам, что свидетельствует об алгоритмической и вычислительной сложности проблемы.

Как следует из анализа характерных параметров и механизмов взаимодействия пылевых частиц, сложность задачи математического моделирования пылевой плазмы обусловлена следующими фактами:

- существенная открытость системы;
- отличие на порядки характерных времен электронов, ионов и пыли;
- существенная трехмерность проблемы (например, в задаче о пылевых кристаллах);
- важная роль столкновений пылинок с ионами и нейтральными частицами;
- зависимость заряда пылинок от размера и формы, а также от свойств окружающей плазмы, которые могут изменяться со временем, и от наличия по соседству других пылинок;
- распределение пылинок по размерам (а следовательно, по массе и заряду).

Несколько слов о существующих моделях. Работы групп из Лос Аламоса [2] и Айовы [3] по численному моделированию пылевой плазмы, с одной стороны, позволили решить ряд важных проблем (таких, как неустойчивость пылевых акустических волн, для описания которой действительно вполне достаточно рассматривать пылинки как еще один сорт частиц с постоянным зарядом), а с другой стороны, показали невозможность изучения самых важных эффектов без рассмотрения кинетики процесса. Говоря о современном состоянии исследований в области численного моделирования пылевой плазмы, нельзя не отметить работы группы В. Н. Цытовича. Кроме построения качественной теории механизмов взаимодействия пылинок в плазме и получения ряда важных количественных оценок, этой группой было впервые проведено численное кинетическое моделирование пылевой плазмы для случая взаимодействия двух макрочастиц в плазме [4].

В работе [5] была дана классификация существующих моделей пылевой плазмы на основе таких критериев, как способы описания частиц пыли, ионов и электронов, учет столкновений частиц плазмы с пылинками, постоянство/изменяемость заряда пылинки и т. д.

Учитывая вышесказанное, можно понять, каким требованиям должна отвечать модель, адекватно описывающая поведение пылевой плазмы.

Кинетическая модель пылевой плазмы

В данной работе сделана попытка преодолеть трудности математического моделирования пылевой плазмы и построить модель, учитывающую эффекты, необходимые для понимания процессов в задаче о пылевых кристаллах. Для задачи о пылевых кристаллах наиболее существенными являются первые три (из вышеизложенных) механизма взаимодействия пылинок.

Теперь рассмотрим подробно каждый из перечисленных во введении пунктов, отличающих данную модель.

Описание электрон-ионной плазмы. Моделируемая область имеет периодические граничные условия по двум координатам (x и y). По третьей координате (ось z) сверху происходит инжекция частиц плазмы, а снизу частичное отражение поглощения от металлической стенки. Частицы плазмы, как электроны, так и ионы, представлены крупными частицами с прямоугольным формфактором.

Описание пылевых частиц. Взаимодействие пылевой частицы с сеткой моделируется методом PIC со сферическим носителем, причем радиус сферы может изменяться. В качестве формфактора берется гауссиан или любая другая достаточно гладкая функция. Сложность формфактора не оказывает влияния на быстродействие, так как необходимые для расчетов значения пространственных интегралов табулируются до начала расчетов. Это можно сделать следующим образом: соответствующее пылинке сферическое облако вносит в общем случае вклад в плотность заряда в 27 соседних ячейках.

Если мы введем внутри ячейки более мелкую сетку (с шагом $1/N$) и для каждого узла этой сетки посчитаем искомые 27 значений, то получим таблицу из $27 \times N^3$ чисел. Для любой другой точки искомые 27 значений получают линейной интерполяцией.

Индивидуальное описание каждой пылинки позволит исследовать динамику ее зарядки, роста и агломерации.

Два масштаба по пространству. Для того чтобы корректно описать движение частиц вблизи пылинки, используем разные методы расчета полей для разных областей пространства: если частица находится на большом расстоя-

нии от пылевых частиц, то сила, действующая на частицу, вычисляется, как обычно для метода PIC, из значений коллективного самосогласованного поля в ближайших узлах сетки; если же частица находится вблизи какой-нибудь пылинки, то к этой силе прибавляется корректирующий член, связанный с парным взаимодействием частица — пылинка. Ввиду того, что пылинка взвешивается на сетке в виде сферического облака, значительное расхождение в значениях полей будет наблюдаться лишь внутри этой сферы, а корректирующая сила зависит только от расстояния до пылинки.

Такой способ расчета сил сродни известному методу РЗМ (particle-particle-particle-mesh), в котором взаимодействие близких частиц рассчитывается как каждая с каждой, а расчет взаимодействия далеких частиц осуществляется через сетку.

Два масштаба по времени. Если мы хотим посчитать силу притяжения между пылинками, обусловленную, например, кулоновским рассеянием потоков ионов, мы должны достаточно детально описать движение частицы вблизи пылинки с учетом сильно меняющегося вдоль траектории потенциала взаимодействия. С другой стороны, движение на больших расстояниях от пылевых частиц определяется коллективными процессами с характерным временем порядка обратной электронной плазменной частоты $\omega_{p,e}^{-1}$. Поэтому в нашей модели используются два шага по времени: один — для частиц вдали от пылинок (он, как обычно, ограничен сверху условием устойчивости схемы); другой — для частиц вблизи пылинки (в нашей модели большой шаг разбивается на несколько частей так, чтобы частица за малый шаг проходила расстояние порядка радиуса пылинки).

Квазистационарная задача. Скорость пылинок в экспериментах по пылевым кристаллам не превышала нескольких сантиметров в секунду, что на много порядков меньше скорости электронов и ионов, поэтому время, за которое пылинки будут двигаться к положению равновесия, на много порядков больше шага по времени, который имеет порядок $\omega_{p,e}^{-1}$. Один из путей, благодаря которому можно обойти эту проблему, — решение квазистационарной задачи. При этом плазма приходит в равновесие с неподвижными пылинками, после чего последние сдвигаются в направлении своего импульса. Такой подход, по всей видимости, особенно полезен в задаче о плазменном травлении.

Поток на границе. Электроны и ионы постоянно рекомбинируют на поверхности частиц пыли, поэтому если не будет притока заряженных частиц, то вся плазма “упадет” на пылинки. В реальном эксперименте заряженные частицы рождаются за счет СВЧ-поля по всему объему. В нашей модели происходит рождение электронов и ионов в объеме с заданными периодичностью и функциями распределения. При этом для минимизации вносимого шума модельная область разбивается на крупные ячейки, в каждой из которых в случайном месте рождается равное число частиц. В модели также предусмотрена инжекция через поверхность, по которой модельный объем контактирует с объемом “невозмущенной” плазмы.

Реализация модели и первые результаты

Описанная модель реализована в рамках универсального кинетического кода SUR [6] в предположении малого числа пылинок в системе (10—100). Для иллюстрации возможностей программы и в качестве модельных задач были использованы задачи зарядки пылинки, помещенной в электрон-протонную плазму, и взаимодействия двух пылинок в плазме. Вычисления

проводились на Pentium-133 с 64 Mb RAM. Параметры расчетов для неоптимизированного кода приведены в таблице.

Сетка	Число электронов в ячейке	Число ионов в ячейке	Всего частиц	Время на шаг, с
32×32×16	8	8	262 144	6
16×16×16	27	27	221 184	3
16×16×16	64	64	524 288	4,5

В модельных расчетах исследовались процесс зарядки пылинки, а также зависимость параметров зарядки пылинок от радиуса пылинок и крупности модельных частиц (рис. 1). Результаты хорошо согласуются с теоретическими оценками [1]. Равновесный заряд пылинок слабо (логарифмически) зависит от крупности модельных частиц (в широком интервале значений крупности), поэтому можно надеяться, что, несмотря на наличие сильных столкновений частицы — пылинки, PIC-метод адекватно отражает процессы в пылевой плазме. Равновесный заряд пылинок практически линейно зависит от радиуса пылинки.

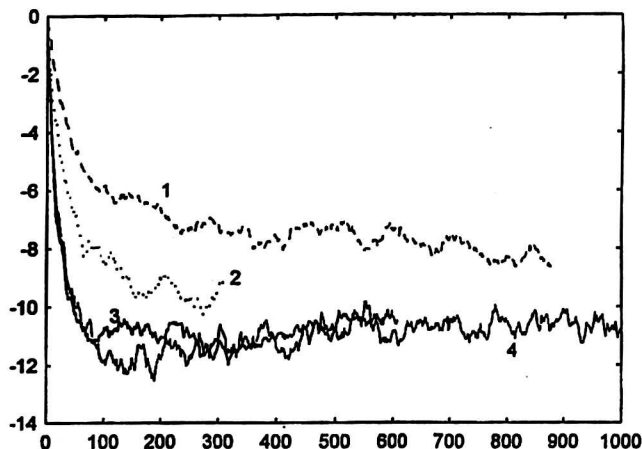


Рис. 1. Зависимость заряда пылинки от времени:

1 и 2 — соответствуют пылинкам с радиусами 0,3 и 0,4 дебаевского радиуса; 3 и 4 — соответствуют пылинкам с радиусом 0,5 и отличаются значением параметра крупности частиц плазмы в 2 раза

В задаче о двух пылинках сила взаимодействия между пылевыми частицами зависит от расстояния. На малых расстояниях преобладает сила электростатического отталкивания. На больших расстояниях максимальный вклад в силу взаимодействия между пылинками, как и ожидалось, дают столкновения ионов с пылинками (рис. 2).

При изучении динамики поведения ионов вблизи пылинки были обнаружены ионы с финитными траекториями (рис. 3). Большая часть таких ионов, как и следовало ожидать, захватывается на начальной стадии зарядки за счет нестационарности потенциала. Некоторые из захваченных ионов имеют тенденцию к выходу на практически круговую орбиту, так что вероятность их ухода или поглощения мала. На поздних стадиях зарядки, когда заряд пылинки практически перестает расти, захват ионов обычно сопровождается уходом с орбиты большого количества ионов.

Итак, изучение динамики поведения частиц в пылевой плазме показывает, что при попадании пыли в плазму следует ожидать обнаружения большого числа интересных кинетических явлений, связанных с взаимовлиянием кол-

лективных плазменных явлений и сильных парных столкновений частицы — пылинки. В частности, пыль может коренным образом изменить параметры многих плазменных неустойчивостей, а также параметры взаимодействия плазмы с мощными короткими лазерными импульсами.

Рис. 2. Зависимость относительного импульса двух пылинок от времени:

1 — суммарное значение;
2—6 — вклады отдельных эффектов: поглощенных ионов (2), рассеянных ионов (3), поглощенных электронов (4), рассеянных электронов (5), экранированной силы электростатического отталкивания (6)

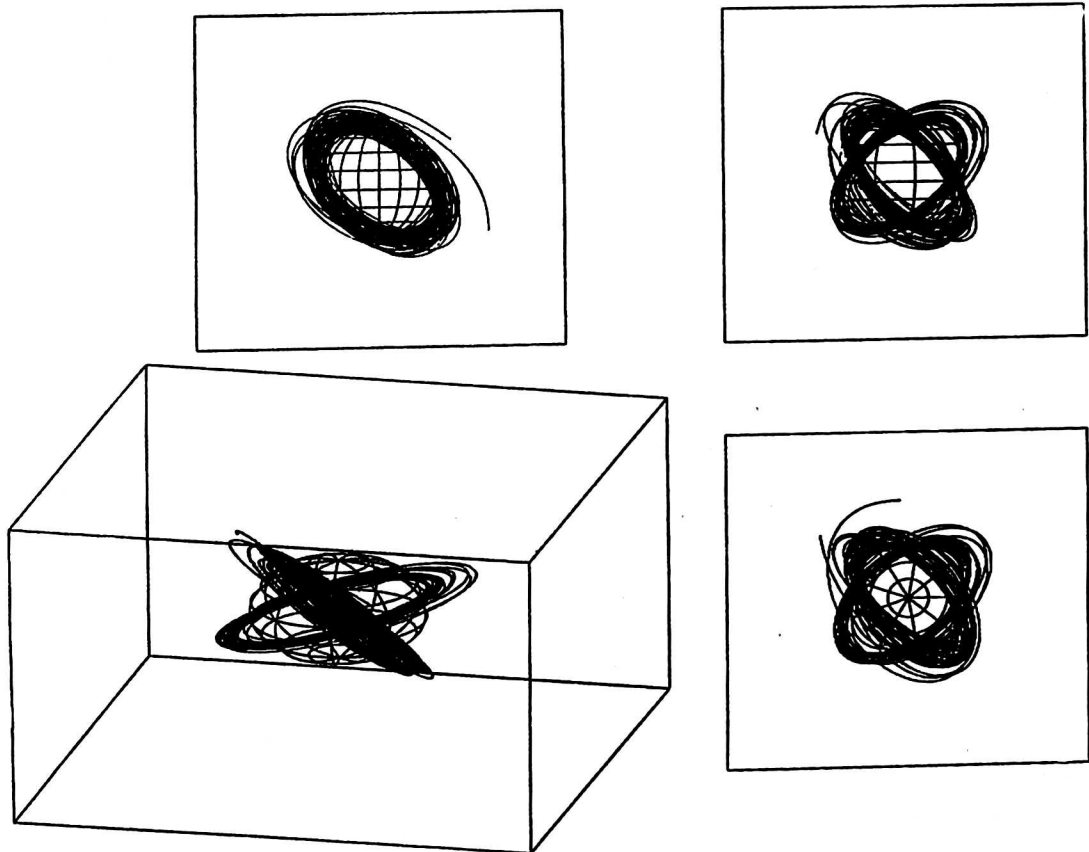
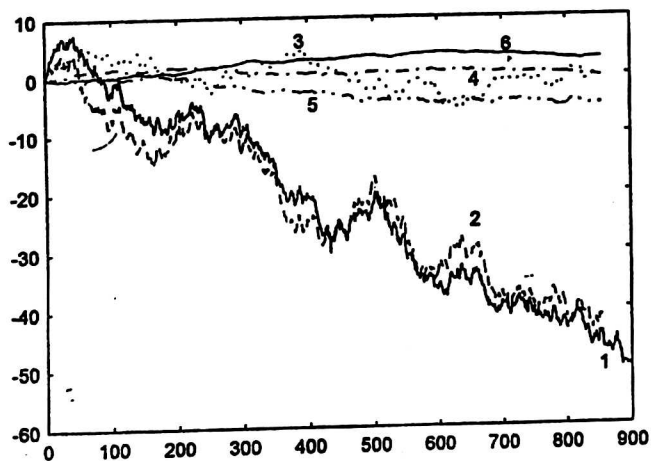


Рис. 3. Траектории двух ионов, захваченных пылинкой

Заключение

Показано, что искажения, связанные с большей столкновительностью макрочастиц в PIC-методе, достаточно малы и что PIC-метод применим для описания пылевой плазмы.

Исследован относительный вклад различных эффектов в силу взаимодействия между пылинками; показано, что при достаточно большом расстоянии преобладающим является эффект, возникающий за счет столкновений ионов с пылинками.

Исследованы особенности поведения ионов вблизи пылинки, обнаружены ионы с финитными траекториями.

Литература

1. Цытович В. Н. Плазменно-пылевые кристаллы, капли и облака // Успехи физических наук. 1997. Т. 167. № 1.
2. Winske D., Murillo M., Selwyn G. Low frequency waves in dusty plasma crystals // Bull. Amer. Phys. Soc., 1997.
3. Otani N., Bhattacharjee A. Debye shielding and particle correlation in strongly coupled dusty plasmas // Phys. Rev. Lett. 1997. № 78. P. 1468.
4. Ходатаев Я. К., Бингхем Р., Тараканов В. П., Цытович В. Н. Механизмы взаимодействия пылевых частиц в плазме // Физика плазмы. 1996. № 22. С. 1028.
5. Иньков Л. В., Левченко В. Д., Сигов Ю. С. // Тез. докл. XXV Звенигородской конф. по физике плазмы и УТС, 178, Звенигород, 2—6 марта, 1998.
6. Иньков Л. В., Левченко В. Д.: Препринт ИПМ им. М. В. Келдыша. № 133. — М., 1995.

Работа поддержана грантом Министерства науки России, № 01.99.00.07938.

Numerical kinetic simulation of dusty plasma dynamics

I. V. Inkov, V. D. Levchenko, Yu. S. Sigov

Keldysh Institute of Applied Mathematics Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia

Full kinetic particle-in-cell model of dusty plasma has been built. It takes into account the collisions of electrons and ions with dust grains. This permits to study the dynamics of grain charging and mechanisms of interaction between grains. The model is implemented in a frame of 3D kinetic object oriented code. As an illustration test problems of grain charging and two grain interaction were solved. The results were in a good agreement with theoretical predictions. In addition, the ions with finite trajectories were detected. This work is partly supported by Russian Ministry of Science, grant N 01.99.00.07938.