Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)» Физтех-школа Фундаментальной и Прикладной Физики Кафедра физики высоких плотностей энергии

Направление подготовки / специальность: 03.04.01 Прикладные математика и физика (магистратура)

Направленность (профиль) подготовки: Физика высоких плотностей энергии

ВЛИЯНИЕ ТЕПЛОВОГО ДВИЖЕНИЯ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ НА ИХ ДИНАМИКУ В ЭЛЕКТРОМАГНИТНОМ ПОЛЕ

(магистерская диссертация)

Студент: Саметов Эдуард Александрович

(подпись студента)

Научный руководитель: Ваулина Ольга Станиславовна, д-р физ.-мат. наук

(подпись научного руководителя)

Консультант (при наличии):

(подпись консультанта)

Москва 2019

Содержание:

Введение
Глава 1. Моделирование5
1.1. Основные уравнения5
1.2. Блок-схема программы6
1.3. Проверка результатов программирования6
Глава 2. Влияние тепловых флуктуаций на движение ансамбля заряженных частиц в
электромагнитном поле8
2.1. Введение
2.2. Поведение ансамбля частиц в постоянном электромагнитном поле
2.3. Результаты численного моделирования и их обсуждение14
2.4. Заключение
Глава 3. Влияние магнитного поля на динамику движения заряженных частиц в
кластерных системах
3.1. Введение
3.2. Основные уравнения23
3.3. Результаты численного моделирования и их обсуждение
3.4. Заключение
Заключение и выводы по дипломной работе
Список литературы40

Введение

Тепловое (броуновское) движение в системах взаимодействующих частиц широко распространено в природе [1-6]. Особый интерес вызывает влияние теплового движения заряженных частиц на их динамику во внешних магнитных и электрических полях [7-12].

Исследования теплового движения взаимодействующих пылевых частиц в протяженных и ограниченных ансамблях, формирующихся в газоразрядной плазме без магнитного поля, представлены в различных работах [13-19]. Эксперименты по изучению динамики пылевых частиц в магнитном поле описаны в работах [20-23]. Влияние теплового движения ограниченного облака заряженных частиц ($N \le 500$) на их динамику в постоянных электрических и магнитных полях недавно исследовалось численно [11, 12].

Значительный рост интереса к изучению динамики заряженных частиц во внешних электромагнитных полях, наблюдаемый в настоящее время, по большей части связан с проблемами эффективности энергетических установок для Управляемого Термоядерного Синтеза [24-26], а также с развитием плазменных методов переработки Отработанного Ядерного Топлива (ОЯТ) и Радиоактивных Отходов (РАО) [27-31].

Отметим также, что присутствие внешних электрических и магнитных полей в существующих энергетических установках может значительно влиять на процессы массопереноса и энергетического обмена в плазме. Данное влияние необходимо учитывать, как в процессе конструирования эффективных энергетических установок, так и при выборе оптимальных режимов их работы.

Целью дипломной работы являлось теоретическое и численное исследование влияние теплового движения частиц на их динамику в постоянном электромагнитном поле.

В ходе выполнения дипломной работы:

 – был разработан пакет программ для моделирования динамики заряженных частиц во внешних эклектических и магнитных полях и анализа численных данных;

изучены особенности движения ансамбля заряженных частиц в электрическом и магнитном полях;

 исследован спектр тепловых колебаний заряженных частиц в постоянном электромагнитном поле;

 получены новые теоретические и численные данные о влиянии теплового движения частиц на их динамику в постоянном электромагнитном поле.

Основной вклад соискателя на степень магистра в выполнении работы:

1) разработка программ для моделирования динамики заряженных частиц во внешних электрических и магнитных полях методом Ланжевена и анализа численных данных;

2) проведение численных расчетов по задачам диплома;

3) анализ численных данных;

4) численное и аналитическое исследование спектральной плотности для тепловых смещений частиц в постоянном электромагнитном поле.

Диплом состоит из четырех глав.

В Главе 1 представлено описание программ, разработанных для моделирования динамики заряженных частиц методом Ланжевена и анализа численных данных.

В Главе 2 Представлены результаты численных исследований динамики заряженных частиц в ограниченном облаке, находящемся в постоянном пространственно однородном электромагнитом поле. Расчеты выполнялись для ионов с различными массами в широком диапазоне параметров исследуемых систем. Рассмотрено влияние тепловых флуктуаций частиц на их регулярное движение в электромагнитном поле. Предложены аналитические оценки для анализа величины данного эффекта.

В Главе 3 приведены результаты численного и аналитического исследований влияния постоянного магнитного поля на динамику теплового движения заряженных частиц в изотропной электростатической ловушке. Моделирование выполнялось для кластерных систем частиц с кулоновским взаимодействием в широком диапазоне их параметров. Выполнен анализ спектральной плотности смещений частиц и процессов массопереноса в моделируемых ансамблях.

Глава 1. Моделирование

1.1. Основные уравнения

Для исследования динамики заряженных частиц во внешнем электрическом и магнитном полях моделируется система ионов в буферном газе. Подобные системы описываются уравнениями Ланжевена – стохастическими дифференциальными уравнениями. Рассмотрим уравнения движения для N_p частиц, принимая во внимания парное межчастичное взаимодействие F_{int} , суммарную силу $F_{ext} = (eZ_pE_{ext} + eZ_p[\bar{v}_k \times \bar{B}])$ внешнего электрического и магнитного полей, действующих на частицу и случайную силу F_{run}

$$m_{p} \frac{d^{2} \vec{l}_{k}}{dt^{2}} = \sum_{j} F_{\text{int}}(l) \Big|_{\vec{l} = |\vec{l}_{k} - \vec{l}_{j}|} \frac{\vec{l}_{k} - \vec{l}_{j}}{\left|\vec{l}_{k} - \vec{l}_{j}\right|} - m_{p} v_{fr} \frac{d\vec{l}_{k}}{dt} + \vec{F}_{run} + \vec{F}_{ext}, \qquad (1.1)$$

где l_k – положение *k*-той частицы, l – межчастичное расстояние, m_p – масса частицы, $v_{\rm fr}$ – коэффициент трения, а $F_{\rm int}(l) = -eZ_p \partial \varphi / \partial l$. При расчетах изменение импульса частицы за счет $F_{\rm run}$ за время Δt бралось

$$\Delta \mathbf{V}_{j} = \psi_{j} \sqrt{2T_{p} v_{jr} \Delta t / m_{p}} , \qquad (1.2)$$

где ψ_j - некоторая случайная величина, распределенная по нормальному закону с дисперсией $\sigma = 1, T_p$ – температура частиц [32].

Для решения дифференциальных уравнений использовалась схема численного интегрирования – leapfrog scheme [33]:

$$\vec{\mathbf{v}}_{i}\left(t + \frac{\Delta t}{2}\right) = \vec{\mathbf{v}}_{i}\left(t - \frac{\Delta t}{2}\right) + \frac{F_{i}(t)}{m}\Delta t$$

$$\vec{r}_{i}\left(t + \Delta t\right) = \vec{r}_{i}\left(t\right) + \vec{\mathbf{v}}_{i}\left(t + \frac{\Delta t}{2}\right)\Delta t$$
(1.3)

Схема имеет второй порядок точности, чего вполне достаточно для метода Ланжевена, а выигрыш во времени по сравнению с более точными схемами играет немаловажную роль в выборе. При изучении ансамбля заряженных частиц было важно следить за системой как за единым целым, то есть за центром масс. Для этого использовались известные из классической механики формулы:

$$\vec{\mathbf{L}} = \frac{\sum_{j} m_{p} \vec{l}_{j}}{\mathbf{N}_{p} m_{p}} , \qquad (1.4)$$
$$\vec{\mathbf{V}} = \frac{\sum_{j} m_{p} \vec{v}_{j}}{\mathbf{N}_{p} m_{p}}$$

где \vec{L} , \vec{V} – координата и скорость центра масс соответственно. Помимо этого, немаловажным параметром, описывающим систему, был коэффициент диффузии, рассчитываемый через среднеквадратичное смещение частиц:

$$D(t) = \frac{\left\langle \left(x(t) - x(0) \right)^2 \right\rangle_N}{2t}, \qquad (1.5)$$

где $<>_N$ - усреднение по ансамблю.

1.2. Блок-схема программы

Основная часть программы изображена в виде блок-схемы на Рис. 1.1.

1.3. Проверка результатов программирования

На первоначальном этапе при рассмотрении двухчастичной системы проверялись соответствия задаваемой температуры величине кинетической энергии частиц и конфигураций частиц при различных соотношениях между градиентами поля с полученными аналитически.

В дальнейшем при анализе движения ансамбля частиц следили за согласием между распределением скоростей исследуемых частиц и функцией Максвелла с полушириной соответствующей их температуре.



Рис. 1.1. Блок-схема программы.

Глава 2. Влияние тепловых флуктуаций на движение ансамбля заряженных частиц в электромагнитном поле

2.1. Введение

Значительный рост интереса к исследованиям динамики заряженных частиц во внешних электромагнитных полях, наблюдаемый в настоящее время, по большей части связан с проблемами эффективности энергетических установок для Управляемого Термоядерного Синтеза (УТС) [24-26], а также с развитием плазменных методов переработки Отработанного Ядерного Топлива (ОЯТ) и Радиоактивных Отходов (РАО) [27-31].

Одной из важных технологических проблем эффективности установок УТС является проблема "первой стенки" (т.е. границы пристеночной плазмы, которая принимает на себя поток нейтронов, протонов, атомов и ионов гелия и трития и электро-магнитное излучение) и связанное с ней образование большого количества пыли.

Другой актуальной задачей атомной энергетики является переработка ОЯТ и РАО, необходимая для перехода к замкнутому топливному циклу с целью более полного вовлечения ресурсов и снижения экологической нагрузки на окружающую среду. В настоящее время для ее решения применяются водно-экстракционные методы переработки, а также разрабатываются технологии нового поколения, например, такие как пирохимическая или плазменная [27-31]. Рассматриваемые в представляемой работе вопросы являются важными именно для плазменных методов переработки ОЯТ или РАО. Метод плазменной сепарации ОЯТ предполагает преобразование вещества в низкотемпературную плазму с последующим пространственным разделением ионов по массам в электрическом и магнитном полях. В этом случае ионы движутся в условиях компенсированного объемного заряда, что снимает ограничения на величину ионного тока и позволяет достигнуть производительностей, представляющих интерес для промышленного применения.

Следует также отметить, что наличие электромагнитных полей может значительно влиять на процессы массопереноса и энергетического обмена в плазме. Данное влияние необходимо учитывать, как в процессе конструирования эффективных энергетических установок, так и при выборе оптимальных режимов их работы.

В настоящей главе рассмотрены особенности движения ансамблей заряженных частиц в постоянном пространственно однородном электромагнитном поле и представлен анализ влияния тепловых флуктуаций на их динамику. Вычисления выполнялись для однозарядовых ионов (ионов с зарядовым числом Z = +1) с атомной массой $M_1 = 240$ а.е. и $M_2 = 150$ а.е., моделирующих уран и продукты его деления [29, 30]. Величина индукции магнитного поля *B* изменялась в пределах от 250 Гс до 1000 Гс. Коэффициент трения ионов v за счет их столкновений с нейтралами окружающего газа варьировался в пределах от ~ 8000 с⁻¹ до 80000 с⁻¹, что соответствовало давлению буферного газа (такого, как аргон или гелий) ~ 1мТор и ~ 10мТор, соответственно [34]. Отметим, что этот тип газа при близких давлениях может применяться в качестве рабочего для установок плазменного разделения компонентов ОЯТ или РАО [29, 35, 36]. (Еще раз подчеркнем, что исследование динамики частиц разной массы могут быть полезны с точки зрения поиска оптимальных условий пространственного разделения ионов ОЯТ или РАО.)

2.2. Поведение ансамбля частиц в постоянном электромагнитном поле

Как уже упоминалась выше, основные трудности разработки установок для плазменной сепарация ОЯТ касаются вопросов, связанных с поиском оптимальных условий для эффективного пространственного разделения ионов по массам [27-30].

Для анализа влияния внешнего электрического поля $\mathbf{E} = [E_x; E_y; E_z]$ на смещения частиц в постоянном магнитном поле с индукцией $B = B_y$ под действием случайной броуновской силы $\mathbf{F}_b = [F_{bx}; F_{by}; F_{bz}]$ запишем систему уравнений движения частицы с зарядом Q и массой M в виде:

$$dV_x/dt = -\nu V_x + QE_x/M - QB V_z/M + F_{bx}/M, \qquad (2.1a)$$

$$dV_z/dt = -vV_z + QE_z/M + QB V_x/M + F_{bz}/M, \qquad (2.16)$$

$$dV_{\nu}/dt = -\nu V_{\nu} + QE_{\nu}/M + F_{b\nu}/M.$$
 (2.1B)

Здесь v – коэффициент трения частиц, определяющий их эффективную частоту столкновений с нейтралами буферного газа, $V_x = dx/dt$, $V_y = dy/dt$, $V_z = dz/dt$ – скорость частиц на одну степень свободы.

Отметим, что корреляторы броуновской силы подчиняются уравнениям:

 $< F_{bx} > = < F_{bz} > \equiv 0, < F_{bx} F_{bz} > = 0, < F_{bx} V_{z} > = < F_{bz} V_{x} > \equiv 0, < F_{bx} z > = < F_{bz} x > \equiv 0, < F_{bx} z > \equiv 0, < F_{bx} v_{z} > = < F_{bz} V_{x} > \equiv 0.$ (Угловые скобки <> обозначают усреднение по времени при $t \rightarrow \infty$).

В случае $E_y = E_z = 0$, $E_x = E$ аналитическое решение задачи (1а)-(1б) для начальных условий (при t = 0: x = y = 0, $\langle dx/dt \rangle = \langle dy/dt \rangle = 0$) можно записать в виде

$$x(t) = \frac{QE}{M(\omega^{2} + v^{2})} \left[vt + \frac{\omega^{2} - v^{2}}{\omega^{2} + v^{2}} \{1 - e^{-vt} \cos(\omega t)\} - \frac{2\omega v}{\omega^{2} + v^{2}} e^{-vt} \sin(\omega t) \right],$$
(2.2a)

$$z(t) = \frac{QE}{M(\omega^2 + v^2)} \left[\omega t - \frac{2\omega v}{\omega^2 + v^2} \{1 - e^{-v} \cos(\omega t)\} - \frac{\omega^2 - v^2}{\omega^2 + v^2} e^{-v} \sin(\omega t) \right], \quad (2.26)$$

где $\omega = QB/M$ – циклотронная частота.

Отметим, что наличие $E_y \neq 0$ никак не влияет на эффективность разделения ионов, также как и наличие $E_z \neq 0$, которое способно только ускорить уход частиц на стенки установки при условии $(E_z^2 + E_x^2)^{1/2} > E$.

В первом приближении влияние тепловых флуктуаций частиц на их движение в плоскости ортогональной магнитному полю можно оценить как

$$x(t) = x_0(t) \pm (2D_{\perp}t)^{1/2},$$
 (2.3a)

$$z(t) = z_0(t) \pm (2D_{\perp}t)^{1/2}, \qquad (2.36)$$

где x(t), z(t) – смещения частиц при $T \neq 0$, $x_0(t)$, $z_0(t)$ – смещения частиц при T = 0, а D_{\perp} – коэффициент поперечной диффузии в теории парных столкновений Таунсенда [37, 38]:

$$D_{\perp} = D_0 / (1 + \omega^2 \tau^2). \tag{2.4}$$

Здесь $D_0 = T/Mv$ – коэффициент диффузии без магнитного поля, T – температура частиц в энергетических единицах, а $\tau = 1/v$ – среднее время свободного пролёта (время торможения). Зависимость D_{\perp} от ω/v показана на Рис. 2.1. (Коэффициент продольной диффузии D_{\parallel} частиц в направлении параллельном действующему магнитному полю равен D_0 .)

Следует отметить, что в теоретических работах поиск коэффициентов продольной и поперечной диффузии заряженных частиц в магнитном поле обычно опирается на вычисление обобщенных тензоров [37, 38] для слабонеидеальных сред с параметром неидеальности $\Gamma = Q^2/(l_d T) < 1$; здесь $l_d = n^{-1/3}$, а n - концентрация заряженных частиц.



Рис. 2.1. Зависимость D_{\perp} / D_0 от ε = ω/ν (2.4).

Результаты решения (2.1а) - (2.1б) представлены на Рис. 2.2а, Рис. 2.26, Рис. 2.3а, Рис. 2.3б. Поскольку x = 0; y = 0; z = 0 - координаты "вброса" исследуемых ионов (т.е. источника сепарируемого вещества), можно допустить, что воображаемая стенка установки при $E_y = 0$ находиться на плоскости ортогональной магнитному полю $B = B_y$ на расстоянии $L = \max[x; z]$ от источника сепарируемого вещества; при этом сам ион (или центр масс ансамбля частиц) располагается от источника на расстоянии равном $(x^2 + z^2)^{1/2}$ (при $E_y = 0$).

Легко увидеть, что время t_c достижения ионами воображаемой стенки при vt >>1 обратно пропорционально величине $QE/M(\omega^2+v^2)$, см. (2.2a),(2.26) и Рис. 2.2a, 2.26.

Зависимости z(x) для ионов массой $M_1 = 240$ а.е. и $M_2 = 150$ а.е. для задачи (2.1а) -(2.1б) при B = 450 Гс и B = 900 Гс показаны на Рис. 2.3а и Рис. 2.3б, соответственно. Данные рисунки иллюстрируют, что эффективное разделение ионов массой M_1 и M_2 при внешнем магнитном поле B = 450 Гс и комнатной температуре ($T \approx 0.025$ эВ) может наблюдаться только для установок с размерами x = L > 50 см. С ростом магнитного поля до B = 900 Гс эффективность разделения ионов различной массы будет расти за счет снижения величины поперечного коэффициента диффузии $D_{\perp}(2.4)$, см. Рис. 2.36.



Рис. 2.2. Зависимость x(vt) и z(vt) для ионов массой M_1 (**a**) и M_2 (**б**) при B = 450 Гс, $E_y = E_z = 0$, $E_x \equiv 0.45$ В/см, $v \approx 80000$ с⁻¹. Жирные линии решения для T = 0. Тонкими линиями показано отклонение траекторий частиц за счет их теплового движения при комнатной температуре $T \approx 0.025$ _ЭB, см. (2.3a), (2.36).

Зависимость z(x) для ионов массой M_1 и M_2 для задачи (2.1a) - (2.1б) при $v \cong 80000$ с⁻¹, B = 450 Гс, $E_y = E_z = 0$ и разных E_x (от 0.1 В/см до 10 В/см) показаны на Рис. 2.4а и Рис. 2.4б. Легко увидеть, что с ростом $E = E_x$ (при E >> 0.45 В/см) наблюдаются существенные изменения в поведении функции z(x). При этом в обратном случае, при E << 0.45 В/см, функция z(x) практически не изменяется.

Таким образом, было получено, что эффективность разделения ионов с различной массой растет с ростом величины магнитного поля B и падает с ростом величины электрического поля E. Отметим, что эффективность разделения ионов будет уменьшаться с возможным ростом их температуры, а также принимая во внимание наличие возмущений облака ионов в момент их "вброса" в установку по разделению ОЯТ.

Численное исследование разделения ионов ОЯТ для одиночных заряженных частиц массы $M_1 = 240$ а.е. и $M_2 = 150$ а.е. в постоянном магнитном поле величиной $B \sim 1000$ Гс и внешнем электрическом поле со сложным пространственным профилем было представлено для v = 0 в работах [29, 30]. В данных работах тепловое движение частиц не учитывалось, а угловой разброс за счет возмущения параметров при "вбросе" отдельной частицы составлял ~ 4÷5 градусов.

Здесь следует отметить, что пренебрежение частотой столкновений ионов с нейтралами буферного газа, v, заметно искажает представление об их динамике во внешнем электромагнитном поле. Зависимость z(x) для ионов массой M_1 и M_2 при различных коэффициентах трения показана на Рис. 2.5.



Рис. 2.3. Зависимость z(x) для ионов массой M_1 (кривые 1; 2) и M_2 (кривые 3; 4) для $E_y = E_z$ =0, $E_x \equiv 0.45$ В/см и $v \cong 80000$ с⁻¹ при: (**a**) - B = 450 Гс; (**б**) - B = 900 Гс. Жирные линии решения для T = 0. Тонкими линиями (2 и 3) показано отклонение траекторий частиц за счет их теплового движения при $T \cong 0.025$ эВ, см. (2.3а), (2.36).



Рис. 2.4. Зависимость z(x) для задачи $E_y = E_z \equiv 0, B = 450$ Гс, $v \approx 80000$ с⁻¹ при $E_x = 10$ В/см (а) и $E_x = 0,1$ В/см (б) с параметрами: 1 - M_1 , $E_x = 0.45$ В/см; 2 - M_2 , $E_x = 0.45$ В/см; 3 - M_1 , $E_x = 10$ В/см; 4 - M_2 , $E_x = 10$ В/см; 5 - M_1 , $E_x = 0,05$ В/см; 6 - M_2 , $E_x = 0,05$ В/см.

В заключении данного параграфа приведем простую оценку эффективного радиуса тепловых флуктуаций частиц $R_1 = |x(t) - x_0(t)| = |z(t) - z_0(t)| = (2D_{\perp}t)^{1/2}$ на расстоянии $L = \max[x; z]$ от источника сепарируемого вещества. Для случая $vt \gg 1$, время достижения воображаемой стенки, расположенной на расстоянии L, можно оценить как $t_c \cong L(QE \max[v; \omega] / M(\omega^2 + v^2))^{-1}$, см. (2.2a),(2.26). Зависимость $R_1(v)$ для $L \cong 50$ см и ионов массой M_1 и M_2 при $E_y = E_z \equiv 0$, $E_x = 0.45$ В/см и $v \cong 80000$ с⁻¹ показана на Рис. 2.6 в диапазоне v от 10^3 с⁻¹ до 10^5 с⁻¹, который соответствует давлению буферного газа (такого, как аргон или гелий) ~ 0.1 мТор и ~ 10 мТор, соответственно.

2.3. Результаты численного моделирования и их обсуждение

Численное исследование диффузии заряженных частиц выполнялось методом молекулярной динамики Ланжевена. Техника моделирования подробно описана в работе [32]. Расчеты выполнялись для однозарядовых ионов с атомной массой $M_1 = 240$ а.е. и M_2

= 150 а.е. в широком диапазоне параметров, соответствующих рабочим параметрам существующих установок по разделению ОЯТ. Величина индукции магнитного поля *B* изменялась в пределах от 250 Гс до 1000 Гс, коэффициент трения частиц v варьировался в пределах от ~ 8000 с⁻¹ до 80000 с⁻¹, температура ионов полагалась равной комнатной $T \cong 0.025$ эВ и T = 0.05 эВ, а величина внешнего электрического поля *E* изменялась в диапазоне от ~ 0.25 В/см до ~ 1 В/см. Время расчетов *t_c* варьировалось в пределах от ~ 25/v до ~ 500/v.

Для имитации вброса ОЯТ некоторое количество частиц $N \sim 500\text{-}1000$, взаимодействующих с кулоновским потенциалом, размещались случайным (равномернораспределенным) образом в кубической области соответствующего объема с начальной концентрацией n_o от 10^8 см⁻³ до 10^{10} см⁻³. Шаг интегрирования составлял от $\Delta t \cong (80 \text{ max}[\omega; v])^{-1}$ до $\Delta t \cong (4000 \text{ max}[\omega; v])^{-1}$ в зависимости от начальных условий задачи.



Рис. 2.5. Зависимость z(x) для ионов массой M_1 (кривые 1; 2; 3) и M_2 (кривые 4; 5; 6) для задачи $E_y \equiv E_z = 0, E_x = 0.45$ В/см, B = 450 Гс при v: (кривые 1,4) - 8000 с⁻¹; (кривые 2, 5) - 800 с⁻¹; (кривые 3, 6) - 0.



Рис. 2.6. Зависимость $R_1(v)$ на расстоянии $L \cong 50$ см для задачи $E_y = E_z \equiv 0, E_x = 0.45$ В/см и $v \cong 80000$ с⁻¹ с параметрами: 1 - M_1 , B = 450 Гс; 2 - M_2 , B = 450 Гс; 3- M_1 , B = 900 Гс; 4 - M_2 , B = 900 Гс.

Зависимость смещений частиц от времени x(vt) и z(vt) для случая одного иона массой M_1 и M_2 представлены на Рис. 2.7а и Рис. 2.76, соответственно. Тонкими линиями показаны траектории частиц, полученные путем численного моделирования при $T \cong 0.025$ эВ. Пунктирными линиями обозначены аналитические оценки отклонений траекторий частиц за счет их теплового движения по формулам (2.3а), (2.36). Легко заметить, что аналитические соотношения достаточно хорошо соответствуют результатам численного моделирования такой задачи.

В результате моделирования ансамблей из 500-1000 заряженных частиц было получено, что вне зависимости от их температуры движение центра масс анализируемых систем соответствовало аналитическому решению задачи для одной частицы при T = 0, см. (2.2a), (2.2б). Зависимости z(x) для ансамблей, состоящих из N = 500 ионов массой M_1 и M_2 , показаны на Рис. 2.8.

Координаты частиц *z*, *x* для задачи с параметрами $E_y = E_z = 0$, $E_x \equiv 0.45$ В/см при $T \cong 0.025$ эВ, B = 450 Гс и $v \cong 80000$ с⁻¹, полученные в результате численного моделирования для ансамбля из 500 ионов массой M_1 и 500 ионов массой M_2 при $n_o \cong 10^{10}$ см⁻³, представлены на Рис. 2.9а, 2.96 для случая одинакового положения центра масс данных ансамблей в направлении **x** ($x \cong 5$ см). Окружности с малым радиусом R_1 на данных

рисунках иллюстрируют тепловое отклонение частиц от центра масс исследуемых ансамблей по формулам (2.3а), (2.3б): $R_1 \equiv (2D_{\perp}t)^{1/2}$. Численное моделирование показало, что в области ограниченной такими окружностями содержится около 60-70% анализируемых частиц. Окружности с большим радиусом $R_2 = 2R_1$ содержат ~ 95±2% частиц ансамблей. Взаимное расположение частиц на воображаемой стенке, находящейся на расстоянии $x \sim 5$ см от места их "вброса", проиллюстрировано на Рис. 2.9в и Рис. 2.9г.



Рис. 2.7. Зависимости x(vt), z(vt) для одной заряженной частицы массой M_1 (**a**) и M_2 (**б**) для задачи с параметрами: B = 450 Гс, $E_y = E_z \equiv 0$, $E_x = 0.45$ В/см, $v \cong 80000$ с⁻¹. Жирные линии - аналитические решения для T = 0 (2а)-(2б). Тонкими линиями показаны траектории частиц, полученные в численном моделировании. Пунктирными линиями обозначены аналитические оценки отклонения траекторий частиц за счет их теплового движения при $T \cong 0.025$ эВ (2.3а) - (2.36).



Рис. 2.8. Зависимость z(x) для ионов массой M_1 (кривая 1) и M_2 (кривая 2) для задачи: N = 500, $E_y = E_z \equiv 0$, $E_x = 0.45$ В/см, B = 450 Гс, $v \approx 80000$ с⁻¹. Линиями обозначены решения для T = 0 (2.2a) - (2.2б). Символы - результаты моделирования для центра масс ансамбля из 500 частиц при $T \approx 0.025$ эВ.

Регистрируемые отклонения от аналитических оценок R_1 , см. (2.3a) - (2.3б), могут "хвостов" объясняться как влиянием высокоэнергетических Максвелловского распределения температуры частиц, так и возможным возмущением параметров системы в момент их "вброса". Проверка последнего предположения проиллюстрирована на Рис. 2.10а, 2.10б. Легко заметить, что в условиях численного эксперимента возмущением параметров системы в момент "вброса" частиц не оказывает заметного влияния на динамику "рассеяния" их ансамбля. Можно предположить, что величина эффективного радиуса R₂ = 2R₁ (содержащего ~ 95% исследуемых частиц) определяется наиболее вероятной кинетической энергией частиц, пропорциональной $\propto 2T$, и суммарным смещением частиц ~ $\{x(t)^2 + z(t)^2\}^{1/2}$.



Рис. 2.9. Координаты *z*, *x* для ионов массой M_1 (белые символы) и M_2 (серые символы) для задачи с параметрами: $E_y = E_z \equiv 0$, $E_x = 0.45$ В/см, B = 450 Гс, $v \approx 80000$ с⁻¹, полученные в результате численного моделирования для ансамбля из 500 частиц массой M_1 и 500 частиц массой M_2 при $T \approx 0.025$ эВ.



Рис. 2.10. Координаты *z*, *x* ионов массой M_1 (белые символы) и M_2 (серые символы) для задачи с параметрами: $E_y = E_z \equiv 0$, $E_x = 0.45$ В/см, B = 900 Гс, $v \cong 80000$ с⁻¹, полученные в результате численного моделирования для ансамбля из 500 частиц массой M_1 и 500 частиц массой M_2 на различных расстояниях от точки их "вброса" для: (**a**) - $T \cong 0.025$ эВ; (**б**) - T = 0. Сплошные линии - аналитические решения задачи (2.2а) - (2.2б) для T = 0. Для частиц массой M_1 показаны окружности с эффективным радиусом $R_2 = 2(2D_{\perp}t)^{1/2}$.

2.4. Заключение

В настоящей главе представлены результаты исследования особенностей движения ансамблей заряженных частиц в постоянном пространственно однородном электромагнитном поле. Расчеты выполнялись для ионов, имитирующих ионы урана и продукты его деления, с различными массами в широком диапазоне параметров, соответствующих рабочим условиям в существующих установках по разделению ОЯТ.

В результате численного моделирования динамики различных ансамблей частиц было получено, что вне зависимости от их температуры движение центра масс исследуемых систем соответствует аналитическому решению задачи для одной частицы с температурой T = 0.

Впервые рассмотрено влияние тепловых флуктуаций частиц на их движение в постоянном электромагнитом поле. Предложены аналитические оценки для анализа величины эффективного радиуса тепловых флуктуаций частиц. Предложенные соотношения были проверены путем численного моделирования задачи.

Показано, что пренебрежение частотой столкновений ионов с нейтралами буферного газа существенно влияет на корректность анализа их динамики во внешнем электромагнитном поле.

В заключение отметим, что полученные результаты могут использоваться при выборе оптимальных рабочих параметров энергетических установок для эффективного разделения ОЯТ. Кроме того, представленные результаты могут быть полезными для качественного анализа поведения слабонеидеальной пылевой плазмы в пристеночной области установок УТС, а также для анализа поведения заряженных частиц любой массы и зарядов в постоянном электромагнитном поле.

Глава 3. Влияние магнитного поля на динамику движения заряженных частиц в кластерных системах

3.1. Введение

В настоящей главе представлены аналитические и численные исследования спектральной плотности тепловых смещений и процессов массопереноса для ограниченных ансамблей заряженных частиц в электростатической ловушке под воздействием постоянного магнитного поля.

Отметим, что в обычных тлеющих разрядах (как переменного, так и постоянного токов) в отсутствие магнитного поля, B = 0, в центре газоразрядных камер наблюдается некоторое превышение концентрации ионов над электронной концентрацией [34]. Данное обстоятельство приводит к формированию эффективных ловушек для отрицательно заряженных частиц (например, для частиц пыли [5, 6]). В плазме с магнитным полем, $B \neq a$ 0, в центре газоразрядной камеры ситуация может быть обратной (за счет «замагничивания» электронов плазмы), т.е. могут существовать условия для удержания положительно заряженных частиц и/или ионов. Так, например, наличие электростатических ловушек для положительно заряженных ионов в установках по разделению компонентов ОЯТ может возникать за счет «замагничивания» электронов на осях камер разрядов зеркального (отражательного) типа, которые обычно используются для данных целей [27-31].

Во втором разделе данной главы представлены уравнения движения заряженной броуновской частицы в поле электростатической ловушки, а также аналитические приближения для ее спектра колебаний в отсутствии и при наличии магнитного поля.

В третьем разделе приводятся результаты численного моделирования для систем, состоящих до 1000 заряженных частиц, взаимодействующих по закону Кулона. Вычисления выполнялись для частиц различных масс, *M*, и зарядов, *Q*, в широком диапазоне температур, *T*, и при различных коэффициентах трения частиц, v, за счет их столкновений с нейтралами буферного газа.

3.2. Основные уравнения

Уравнения движения для одной частицы с массой M и зарядом Q в постоянном электрическом поле ловушки $\mathbf{E} = [E_x, E_y, E_z]$ и в магнитном поле с индукцией $B = B_y$ (направленном по оси **y**) под воздействием случайной силы $\mathbf{F}_b = [F_{bx}, F_{by}, F_{bz}]$, которая является источником стохастической (тепловой) энергии частиц, могут быть представлены в виде:

$$dV_y/dt = -vV_y - \omega_t^2 y + F_{by}/M, \qquad (3.1)$$

$$dV_x/dt = -\nu V_x - \omega_t^2 x + \omega_B V_z + F_{bx}/M, \qquad (3.2)$$

$$dV_z/dt = -vV_z - \omega_t^2 z - \omega_B V_x + F_{bz}/M.$$
(3.3)

Здесь *у*, *х*, *z* – смещения частицы от ее равновесного положения, $V_y = dy/dt$, $V_x = dx/dt$, $V_z = dz/dt$, v - коэффициент трения заряженных частиц за счет их столкновений с нейтралами окружающего газа, $\omega_t = (Q\alpha/M)^{1/2}$ – характерная частота ловушки, $\omega_B = QB/M$ – циклотронная частота, а α – величина градиента внешнего электрического поля **E**.

Корни характеристического уравнения при $\omega_B = 0$ для (1) имеют хорошо известный вид

$$\lambda^*_{1,2} = -\nu/2 \pm i(\omega_t^2 - \nu^2/4)^{1/2}.$$
(3.4)

Корни характеристического уравнения для системы (3.2) - (3.3) можно записать в виде

$$\lambda_{1,2} = -\Psi_1 \pm i \,\Omega_1,\tag{3.5a}$$

$$\lambda_{3,4} = -\Psi_2 \pm i \,\Omega_2,\tag{3.56}$$

где $\Psi_1 = \nu(1 + D_1/\sqrt{2})/2$, $\Psi_2 = \nu(1 - D_1/\sqrt{2})/2$, $\Omega_1 = (\omega_B + \nu D_2/\sqrt{2})/2$, $\Omega_2 = (\omega_B - \nu D_2/\sqrt{2})/2$,

$$D_{1} = \left[\left(\left(1 - \left(\omega_{B} / \nu \right)^{2} - 4 \left(\omega_{t} / \nu \right)^{2} \right)^{2} + 4 \left(\omega_{B} / \nu \right)^{2} \right)^{1/2} + 1 - \left(\omega_{B} / \nu \right)^{2} - 4 \left(\omega_{t} / \nu \right)^{2} \right]^{1/2},$$
(3.6a)

$$D_{2} = \left[\left(1 - \left(\omega_{B} / \nu \right)^{2} - 4 \left(\omega_{t} / \nu \right)^{2} \right)^{2} + 4 \left(\omega_{B} / \nu \right)^{2} \right]^{1/2} - 1 + \left(\omega_{B} / \nu \right)^{2} + 4 \left(\omega_{t} / \nu \right)^{2} \right]^{1/2}.$$
(3.6b)

Средний квадрат отклонений $\langle y(t)^2 \rangle$ частицы в направлении **у** от ее начального положения и автокорреляционная функция $\langle y(t^*)y(t^*+t) \rangle$) могут быть представлены в форме [14, 15, 39, 40]:

$$\left\langle y(t)^{2} \right\rangle = \frac{2T}{M\omega_{t}^{2}} \left[1 - \exp\left(-\frac{vt}{2}\right) \left(\cos(vt\psi) + \frac{\sin(vt\psi)}{2\psi} \right) \right], \qquad (3.7)$$

$$\left\langle y(t^*)y(t^*+t)\right\rangle = \frac{2T}{M\omega_t^2} \left[\exp\left(-\frac{vt}{2}\right) \left(\cos(vt\psi) + \frac{\sin(vt\psi)}{2\psi} \right) \right].$$
(3.8)

Здесь и далее T – температура частиц в энергетических единицах, $\psi = (4\xi^2 - 1)^{1/2}/2$, $\xi = \omega_t/v$, а угловые скобки, < >, обозначают усреднение по всем отрезкам времени, равным t. Причем при $t \to 0$: $\langle y(t^*)^2 \rangle = 2T/(M\omega_t^2)$, $\langle y(t)^2 \rangle = 0$; а при $t \to \infty$: $\langle y(t^*)^2 \rangle = 0$ и $\langle y(t)^2 \rangle = 2T/(M\omega_t^2)$.

Для подробного анализа особенностей теплового движения взаимодействующих частиц можно воспользоваться спектральной характеристикой случайных процессов, а именно, спектральной плотностью смещений частиц. В общем случае спектральная плотность определяется как преобразование Фурье от корреляционной функции физических характеристик анализируемого процесса, а для случайного процесса является косинус - преобразованием Фурье для соответствующей корреляционной функции [39-41]. Таким образом, спектральная плотность, $G_3(\omega)$, для случайных смещений частицы в ловушке в направлении **у** ($\omega_B = 0$), т.е. спектральная плотность классического затухающего осциллятора, может быть записана как [39-41]:

$$G_{9}(\omega) = \frac{2T}{M\omega_{t}^{2}} \frac{v\omega_{t}^{2}}{\omega^{4} + (v^{2} - 2\omega_{t}^{2})\omega^{2} + \omega_{t}^{4}}.$$
(3.9)

Следует отметить, что в отличие от других характеристик системы (параметра неидельности, коэффициентов тепло- и массопереноса, среднеквадратичных смещений частиц и т.д.) информация о спектральной плотности тепловых смещений частиц позволяет анализировать спектр частот собственных колебаний в исследуемых системах. Это, в свою очередь, дает возможность оценить реакцию системы на кратковременные или периодические внешние возмущения, а также позволяет определить характер и тип потенциала взаимодействия между частицами среды.

Рассмотрим решения задачи для системы уравнений (3.2) - (3.3) (при $\omega_B \neq 0$). Любое решение F(t) для задачи (3.2) - (3.3) можно представить в виде суперпозиции

$$F(t) = C_0 + \sum_{i=1}^{4} C_i \exp(\lambda_i t) .$$
(3.10)

При этом, для функции $\langle x(t)^2 \rangle$ величина $C_0 = 2T/(M\omega t^2)$. Для поиска коэффициентов C_i (*i*=1,2,3,4) используются начальные условия задачи: F(0) = 0, dF(0)/dt = 0, $d^2F(0)/dt^2 = 2T/M$, $d^3F(0)/dt^3 = 0$.

Тогда для коэффициентов Сі можно записать следующую систему уравнений

$$\sum_{i=1}^{4} C_i = -\frac{2T}{M\omega_t^2},$$
(3.11a)

$$\sum_{i=1}^{4} \lambda_i C_i = 0, \qquad (3.116)$$

$$\sum_{i=1}^{4} \lambda_i^2 C_i - \frac{2T}{M} = 0, \qquad (3.11B)$$

$$\sum_{i=1}^{4} \lambda_i^{3} C_i = 0.$$
 (3.11r)

Откуда

$$C_1 = -\frac{2T}{M\omega_t^2} \frac{\omega_t^2 (\lambda_2 + \lambda_3 + \lambda_4) - \lambda_2 \lambda_3 \lambda_4}{(\lambda_1 - \lambda_2)(\lambda_1 - \lambda_3)(\lambda_1 - \lambda_4)} , \qquad (3.12a)$$

$$C_{2} = -\frac{2T}{M\omega_{t}^{2}} \frac{-\omega_{t}^{2}(\lambda_{1}+\lambda_{3}+\lambda_{4})+\lambda_{1}\lambda_{3}\lambda_{4}}{(\lambda_{1}-\lambda_{2})(\lambda_{2}-\lambda_{3})(\lambda_{2}-\lambda_{4})},$$
(3.126)

$$C_{3} = -\frac{2T}{M\omega_{t}^{2}} \frac{\omega_{t}^{2}(\lambda_{1} + \lambda_{2} + \lambda_{4}) - \lambda_{1}\lambda_{2}\lambda_{4}}{(\lambda_{1} - \lambda_{3})(\lambda_{2} - \lambda_{3})(\lambda_{3} - \lambda_{4})},$$
(3.12b)

$$C_4 = -\frac{2T}{M\omega_t^2} \frac{-\omega_t^2 (\lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3) + \lambda_1 \lambda_2 \lambda_3}{(\lambda_1 - \lambda_4)(\lambda_2 - \lambda_4)(\lambda_3 - \lambda_4)}.$$
(3.12r)

Используя значения λ_i (3.5a), (3.5б), в предположении $D_1^2 \ll D_2 \omega_B/(v\sqrt{2})$ и (v^2 - $D_1^2/2$)<<2 $\omega_{1,2}$ (где $\omega_1 = (\Psi_1^2 + \Omega_1^2)^{1/2}$, а $\omega_2 = (\Psi_2^2 + \Omega_2^2)^{1/2}$), формулы (3.12a) - (3.12г) можно представить в виде

$$C_1 \simeq -\frac{2T}{M\omega_t^2} \frac{\omega_t^2 - \omega_2^2}{\omega_B v D_2 / \sqrt{2}} \frac{\lambda_2}{(\lambda_1 - \lambda_2)} \equiv -B_1 \frac{2T}{M\omega_t^2} \frac{\lambda_2}{(\lambda_1 - \lambda_2)} , \qquad (3.13a)$$

$$C_2 \simeq -\frac{2T}{M\omega_t^2} \frac{\omega_t^2 - \omega_2^2}{\omega_B v D_2 / \sqrt{2}} \frac{\lambda_2}{(\lambda_2 - \lambda_1)} \equiv -B_1 \frac{2T}{M\omega_t^2} \frac{\lambda_1}{(\lambda_2 - \lambda_1)} , \qquad (3.136)$$

$$C_{3} \cong -\frac{2T}{M\omega_{t}^{2}} \frac{\omega_{1}^{2} - \omega_{t}^{2}}{\omega_{B}vD_{2}/\sqrt{2}} \frac{\lambda_{2}}{(\lambda_{2} - \lambda_{1})} \equiv -B_{2}\frac{2T}{M\omega_{t}^{2}}\frac{\lambda_{4}}{(\lambda_{3} - \lambda_{4})}, \qquad (3.13B)$$

$$C_{3} \cong -\frac{2T}{M\omega_{t}^{2}} \frac{\omega_{1}^{2} - \omega_{t}^{2}}{\omega_{B}\nu D_{2}/\sqrt{2}} \frac{\lambda_{2}}{(\lambda_{2} - \lambda_{1})} \equiv -B_{2}\frac{2T}{M\omega_{t}^{2}}\frac{\lambda_{3}}{(\lambda_{4} - \lambda_{3})}.$$
(3.13r)

Здесь
$$B_1 = \sqrt{2} (\omega_t^2 - \omega_2^2) / (D_2 \omega_B v), B_2 = \sqrt{2} (\omega_1^2 - \omega_t^2) / (D_2 \omega_B v).$$

Отметим, что упомянутые выше условия $(D_1^2 \ll D_2 \omega_B/(v\sqrt{2}) \ u \ (v^2 - D_1^2/2) \ll 2\omega_{1,2})$ выполняются, когда $(\Psi_{1,2})^2 \ll (\Omega_{1,2})^2$.

Тогда средние квадраты отклонений, $\langle x(t)^2 \rangle \equiv \langle z(t)^2 \rangle$, частицы в системе, описанной уравнениями (3.2) - (3.3), в направлениях **х** и **z** от ее положения равновесия и автокорреляционная функция, $\langle x(t^*)x(t^*+t) \rangle \equiv \langle z(t^*)z(t^*+t) \rangle$ (при $\omega_B \neq 0$ и ($\Psi_{1,2}$)² << ($\Omega_{1,2}$)²) могут быть представлены как:

$$\left\langle x(t)^{2} \right\rangle = \frac{2T}{M\omega_{t}^{2}} \left(B_{1} \left[1 - \exp(-\frac{v_{1}t}{2}) \left(\cos(v_{1}t\psi_{1}) + \frac{\sin(v_{1}t\psi_{1})}{2\psi_{1}} \right) \right] + B_{2} \left[1 - \exp(-\frac{v_{2}t}{2}) \left(\cos(v_{2}t\psi_{2}) + \frac{\sin(v_{2}t\psi_{2})}{2\psi_{2}} \right) \right] \right),$$
(3.14)

$$\left\langle x(t^{*})x(t^{*}+t)\right\rangle = \frac{2T}{M\omega_{t}^{2}} \left(B_{1} \left[\exp(-\frac{v_{1}t}{2}) \left(\cos(v_{1}t\psi_{1}) + \frac{\sin(v_{1}t\psi_{1})}{2\psi_{1}} \right) \right] + B_{2} \left[\exp(-\frac{v_{2}t}{2}) \left(\cos(v_{2}t\psi_{2}) + \frac{\sin(v_{2}t\psi_{2})}{2\psi_{2}} \right) \right] \right),$$
(3.15)

где $\psi_1 = (4\xi_1^2 - 1)^{1/2}/2, \ \xi_1 = \omega_1/\nu_1, \ \psi_2 = (4\xi_2^2 - 1)^{1/2}/2, \ \xi_2 = \omega_2/\nu_2, \ a < x(t^*)^2 > \equiv < z(t^*)^2 > = 2T/(M\omega_t^2).$ Здесь $\nu_1 = \Psi_1, \ \nu_2 = \Psi_2, \ \omega_1 = (\Psi_1^2 + \Omega_1^2)^{1/2}, \ \omega_2 = (\Psi_2^2 + \Omega_2^2)^{1/2}, \ B_1 = \sqrt{2}(\omega_t^2 - \omega_2^2)/(D_2\omega_B\nu), \ a \ B_2 = \sqrt{2}(\omega_1^2 - \omega_t^2)/(D_2\omega_B\nu).$ При этом спектральная плотность, $G_{\mathfrak{IM}}(\omega)$, для случайных смещений частицы в направлениях **х** и/или **z** в постоянном магнитном поле имеет вид:

$$G_{\mathcal{DM}}(\omega) = \frac{2T}{M\omega_{t}^{2}} \left[\frac{B_{1}v_{1}\omega_{1}^{2}}{\omega^{4} + (v_{1}^{2} - 2\omega_{1}^{2})\omega^{2} + \omega_{1}^{4}} + \frac{B_{2}v_{2}\omega_{2}^{2}}{\omega^{4} + (v_{2}^{2} - 2\omega_{2}^{2})\omega^{2} + \omega_{2}^{4}} \right],$$
(3.16)

При $\omega_B \to 0$ уравнения (3.14) - (3.16) переходят в соотношения (3.7) - (3.9). Иллюстрация зависимости спектральной плотности смещений $G(\omega) \equiv G_{_{3M}}(\omega)$ от $\omega' v$ для различных ω_B / v представлена на Рис.3.1.



Рис. 3.1. Нормированные спектральные плотности $f^*(\omega) = G(\omega)/(2T/M\omega_t^2 v)$ (12) при ω_t / $v \approx 61.4$ для различных соотношений ω_B /v: **1** – 0.015; **2** – 1.5; **3** – 15. Символами показаны функции $f^*(\omega)$ для ω_t / $v \approx 61.4$ при $\omega_B = 0$ (3.9).

Для анализа физических свойств однородных структур заряженных частиц (которые можно характеризовать постоянной концентрацией *n*) обычно используется параметр неидеальности $\Gamma = Q^2 n^{1/3} / T$, отражающий отношение энергии взаимодействия между частицами системы к их температуре. При этом в линейном электрическом поле

величина концентрации частиц, *n*, может быть получена из уравнения Пуассона: $n \cong 3\alpha/(4\pi Q)$, и, соответственно, для среднего межчастичного расстояния имеет место соотношение: $l_p \cong (4\pi Q/3\alpha)^{1/3}$ [40].

Для оценки радиуса ограниченной структуры в первом приближении можно использовать соотношение: $R \cong (3N/4\pi n)^{1/3}$, где N – число частиц. Реальный (эффективный) радиус ансамбля будет расти с ростом температуры частиц [40].

Следует отметить, что для диагностики параметров ограниченных и протяженных систем в лабораторных экспериментах зачастую используется анализ поведения среднего квадрата отклонений частиц от их начального положения (например, функции $\langle x(t)^2 \rangle$ в отсутствии магнитного поля, $\omega_B = 0$) [5, 15]. В случае ограниченных систем такие измерения позволяют найти величину среднеквадратичного отклонения $2T/(M\omega_t^2)$ при $t \rightarrow \infty$. Откуда при наличии информации о среднем квадрате скорости анализируемых частиц, T/M, легко определить значение характерной частоты ловушки ω_t .

Данные о коэффициенте трения частиц, v, в этом случае могут быть получены путем анализа максимума функции $\langle x(t)^2 \rangle$, или путем «подгонки» численных и экспериментальных данных [5, 15]. Тем не менее, тепловые флуктуации в реальных системах могут сильно исказить величину восстановляемого коэффициента *v*. Добавим также, что такая процедура хороша только для систем, имеющих одну характерную частоту ω_i . При наличии двух, или более гармоник (характерных частот) в исследуемой системе простой анализ функций $\langle x(t)^2 \rangle$ становиться затруднительным. Тем не менее, исследование спектральных характеристик анализируемой системы позволяют легко решить данную задачу.

В заключение данного параграфа следует отметить, что уравнения типа (3.1) - (3.3) могут использоваться для анализа движения центра масс любого ограниченного ансамбля частиц с попарным взаимодействием, а также для отдельной частицы в системе, состоящей из N – частиц, в том случае, когда влиянием межчастичного взаимодействия можно пренебречь (Γ <<1).

3.3. Результаты численного моделирования и их обсуждение

Численное моделирование динамики систем заряженных частиц в электростатической ловушке выполнялось методом молекулярной динамики Ланжевена. Расчеты проводились для ансамблей, состоящих из N = 50; 500 и 1000 частиц. Техника моделирования подробно описана в работах [5, 6].

Шаг интегрирования составлял от $\Delta t \cong (40 \max[\omega_t; \omega_B; v])^{-1}$ до $\Delta t \cong (100 \max[\omega_t; \omega_B; v])^{-1}$ в зависимости от начальных условий задачи. Время расчетов t_c после установления равновесия в моделируемых системах варьировалось от ~ $10^3/\min[\omega_t; v]$ до ~ $10^4/\min[\omega_t; v]$.

Расчеты проводились для систем частиц с кулоновским взаимодействием в широком диапазоне их параметров неидеальности: от $\Gamma \sim 0.1$ до $\Gamma \sim 100$. Значение параметра $\xi = \omega / v$ варьировалось от ~ 1 до ~ 70, отношение ω_B / v - от ~ 0.25 до ~ 25.

Во всех рассмотренных случаях моделируемые системы являлись устойчивыми. Температура частиц не отличалась от заданной, а их функции распределения по скоростям соответствовали распределению Максвелла. При этом при $t \to \infty$, значения среднеквадратичного смещения центра масс системы от его начального положения составляли: $\langle x^2 \rangle \cong \langle y^2 \rangle \cong \langle z^2 \rangle \cong 2T/(NM\omega_t^2)$.

Парные корреляционные функции g(l) для ансамблей из N = 500 частиц с различными параметрами Γ показаны на Рис. 3.2. В качестве нормировки величины g(l), представленной на этих рисунках, использовалось предположение однородной концентрации частиц равной $n \cong 3\alpha/(4\pi Q)$. Легко увидеть, что первый пик функций g(l) для $\Gamma \ge 0.1$ хорошо соответствует величине $l_p \cong (4\pi Q/3\alpha)^{1/3}$, полученной в приближении однородной системы, а для оценки радиуса неидеальных систем может быть использовано соотношение $R \cong (3N/4\pi n)^{1/3}$. Следует подчеркнуть, что перечисленные выше характеристики (g(l), l_p , R) не зависели от величины индукции магнитного поля B.



Рис. 3.2. Парная корреляционная функция $g(l/l_p)$ для ансамблей из N = 500 частиц с различными параметрами Г: 1 - 90; 2 - 9; 3 - 0.9; 4 - 0.09. Здесь $l_p \cong (4\pi Q/3\alpha)^{1/3}$.

Численные исследования показали, что вне зависимости от параметра неидеальности, Г, и числа частиц, *N*, в моделируемых ансамблях спектральные плотности смещений их центра масс хорошо соответствуют предлагаемым аналитическим соотношениям (3.9), (3.16).

Нормированные спектральные плотности $f^*(\omega) = NG(\omega)/(2T/M\omega_t^2 v)$, полученные для различных параметров задачи (ω_t / v , ω_B / v , Γ , N), а также аналитические решения (3.9), (3.16) показаны на Рис. 3.3, 3.4. (Вычисления спектральной плотности проводились на основе численных расчетов смещений x(t), y(t) и z(t) при помощи процедуры «N-D fast Fourier transform» в пакете прикладных программ MATLAB.)

Следует отметить, что величина $(\Psi_{1,2})^2 << (\Omega_{1,2})^2$ для $\omega_B/\nu \cong 1.5$, $\omega_t/\nu \cong 6.14$ (см. Рис. 3.4a), а $(\Psi_{1,2})^2 \cong 0.25$ $(\Omega_{1,2})^2$ для $\omega_B/\nu \cong 1.5$, $\omega_t/\nu \cong 1$ (Рис. 3.4б). Тем не менее, для обоих случаев получены хорошие совпадения между численными и аналитическими результатами.



Рис. 3.3. Нормированные спектральные плотности, $f^*(\omega) = NG(\omega)/(2T/M\omega_t^2 v)$, для центра масс системы частиц при их смещениях вдоль магнитного поля ($\omega_B = 0$), полученные путем численного моделирования (серые линии), и из аналитического решения задачи (3.9) (черные линии), для $\omega_t / v \cong 6.14$, N=50, $\Gamma=90$ (**a**) и $\omega_t / v \cong 1$, N=1000, $\Gamma=45$ (**б**).



Рис. 3.4. Нормированные спектральные плотности, $f^*(\omega)$, для центра масс системы частиц при их смещениях в плоскости ортогональной магнитному полю ($\omega_B/\nu \cong 1.5$), полученные путем численного моделирования (серые линии), и из аналитического решения задачи (3.16) (черные линии), для $\omega_t/\nu \cong 6.14$, N=50, $\Gamma=90$ (**a**) и $\omega_t/\nu \cong 1$, N=1000, $\Gamma=45$ (**6**).

Численные исследования также показали, что отклонения формы спектральных распределений для отдельных частиц ансамбля от аппроксимирующих функций (3.9), (3.16) наблюдаются при Г > 0.1.

С ростом величины Г характерная частота спектра смещается в сторону меньших частот относительно частоты колебаний центра масс системы как для смещений частиц вдоль магнитного поля ($\omega_B = 0$) [40] (см. Рис. 3.5), так и для смещений в плоскости ортогональной магнитному полю ($\omega_B / v \neq 0$), см. Рис. 3.6. Можно предположить, что данное обстоятельство связано с уменьшением коэффициента диффузии частиц с ростом параметра Г, которое, в свою очередь, происходит за счет роста эффективной диссипации в сильно коррелируемых системах [14, 15, 43].



Рис. 3.5. Нормированные спектральные плотности $f^*(\omega)$ для отдельных частиц ансамбля (серые линии), состоящего из N = 50 частиц, при их смещениях вдоль магнитного поля ($\omega_B = 0$) для $\omega_t / v \cong 6.14$ и различных параметрах Г: (**a**) – 0.2; (**б**) – 4.5. Черными линиями показаны аналитические функции для центра масс системы.



Рис. 3.6. Нормированные спектральные плотности $f^*(\omega)$ для отдельных частиц ансамбля (серые линии), состоящего из N = 50 частиц, при их смещениях в плоскости ортогональной магнитному полю ($\omega_B / v \cong 1.5$) для $\omega_t / v \cong 6.14$ и различных параметрах Г: (**a**) – 0.2; (**б**) – 4.5. Черными линиями показаны аналитические функции для центра масс системы.

Отношение среднеквадратичных отклонений, деленные на время ($D_{xz} = (\langle \Delta x^2 \rangle + \langle \Delta z^2 \rangle)/4t$, $D_y = \langle \Delta y^2 \rangle/2t$), к величине коэффициента диффузии невзаимодействующих частиц в идеальных системах, $D_o = T/vM$, от vt для систем с различными параметрами ω_t/v , N, Γ , ω_B/v показаны на Рис. 3.7 для смещений частиц в направлении магнитного поля (**y**) и в плоскости ортогональной магнитному полю [**x**; **z**].

Отметим, что на начальных этапах наблюдения (при vt > 0.75) режим движения частиц был близок к диффузионному, т.е. значения $\langle x^2 \rangle \cong \langle y^2 \rangle \cong \langle z^2 \rangle$ были практически пропорциональны времени наблюдения t. С ростом времени (с ростом vt) значения $\langle x^2 \rangle \cong$ $\langle y^2 \rangle \cong \langle z^2 \rangle$ стремились к постоянной величине примерно равной $R^2/3$; здесь $R = (3N/4\pi n)^{1/3}$, а $n = 3\alpha/(4\pi Q)$.



Рис. 3.7. Зависимость $D^* = D_{xz}/D_o$ (светло серая линия) и $D^* = D_y/D_o$ (темно серая линия) от vt при $\omega_t /v \cong 6.14$ для отдельных частиц систем с параметрами: (**a**) - N = 50, $\Gamma \approx 4.5$, $\omega_B/v \cong 1.5$; (**b**) - N = 50, $\Gamma \approx 45$, $\omega_B/v \cong 1.5$; (**b**) - N = 50, $\Gamma \approx 4.5$, $\omega_B/v \cong 24$; (**г**) - N = 500, $\Gamma \approx 4.5$, $\omega_B/v \cong 1.5$. Штриховой линией показан диффузионный режим.

При этом длительность участков с динамикой отдельных частиц, близкой к диффузионному режиму движения, а также время выхода функций D_{xz}/D_o и D_y/D_o на свое постоянное значение, увеличивались с ростом числа частиц N и величины параметра Γ , см. Рис. 3.76, 3.7г. Первое обстоятельство отражает влияние размера системы, $R \cong (3N/4\pi n)^{1/3}$, на время достижения отдельной частицы ее границ, второе определяется влиянием температуры частиц на скорость их теплового движения.

С ростом параметра Г величина отношений D_{xz}/D_o и D_y/D_o для диффузионного режима движения частиц незначительно уменьшалась (см. Рис. 3.7а, 3.7б), а при росте ω_B величина D_{xz} уменьшалась, а значение D_y оставалось практически неизменным (см. Рис. 3.7в). Последнее обстоятельство определяется отношением характерных частот ω_B/ω_t для анализируемых систем. Так, при $(\omega_B/\omega_t)^2 >> 1$ (см. Рис. 3.7в) определяющее влияние на диффузионное движение в системе играет величина ω_B [11], а при $(\omega_B/\omega_t)^2 << 1$ (см. Рис. 3.7а) – значение ω_t .

С ростом числа частиц N величина отношений D_{xz}/D_o и D_y/D_o для диффузионного режима движения частиц росла, см. Рис. 3.7а, 3.7г. Это объясняется тем, что число частиц на границах в более объемной системе (с большим радиусом R) меньше по отношению к их общему числу; таким образом, возвращающая сила ловушки будет оказывать меньшее влияние на систему частиц.

В заключение отметим, что большинство иллюстраций, представленных на Рис. 3.4, 3.6, 3.7, относятся к случаю $\omega_B/v \sim 1$, за исключением данных, показанных на Рис. 3.7в для $\omega_B/v >> 1$. (Напомним, что для случая $\omega_B/v \ll 1$ распознавание гармоник спектральной плотности $f^*(\omega)$, вызванных наличием магнитного поля не представляется возможным, см. Рис. 3.1.)

Ситуация, когда $\omega_B/\nu > 1$, или $\omega_B/\nu >> 1$, легко реализуется в установках по разделению компонентов ОЯТ для ионов отработанного ядерного топлива [12, 28, 29, 43].

Что касается пылевой плазмы, то в большинстве существующих экспериментов по изучению динамики пылевых частиц в магнитном поле *B* величина отношения $\omega_B/v \ll 1$, поскольку используются достаточно крупные (тяжелые) частицы при небольшом значении приложенного поля, $B \leq 2500$ Гс [20, 22]. Исключение составляют эксперименты, описанные в работе [23], где исследовалось влияние магнитных полей 4000 - 40000 Гс на плазменно-пылевые облака в радиочастотном разряде для частиц диаметром

от 0.1µм до 10µм; в качестве буферного газа использовался аргон Ar с давлением $P \sim 0.01$ Тор. При этом наблюдаемые динамические явления практически не зависели от диаметра d пылевых частиц. Последнее обстоятельство косвенно подтверждается результатами наших расчетов для случая $\omega_B/v \sim 1$, см. Рис. 3.7.

В рассматриваемых экспериментах [23] при B = 40000 Гс значение ω_B будет сравнимо с величиной v ($\omega_B \sim v$) для частиц диаметром d < 0.4 µм. А в предположение водорода H_2 в качестве буферного газа, соотношение $\omega_B \sim v$ будет наблюдаться для частиц с размерами d < 2µм. Здесь для оценок отношения ω_B/v использовались: соотношение для зарядового числа пылевых частиц Z $\approx (1.1 \pm 0.25)$ T_e [эВ] d [µм], где T_e – температура электронов, принятая равной З эВ [5]; и величина коэффициента трения частиц $v \approx C$ $P[\text{Top}]/(\rho$ [г.см⁻³]d [µм]), где ρ – плотность материала частиц, а C – коэффициент, зависящий от типа буферного газа ($C \approx 2000$ для Ar и $C \approx 450$ для H_2) [44].

3.4. Заключение

Выполнено аналитическое и численное исследование динамики ансамблей заряженных частиц в электростатической ловушке под воздействием постоянного магнитного поля. Представлены корни характеристического уравнения, позволяющие анализировать спектр частот колебаний в исследуемых системах частиц.

Предложены аналитические соотношения для спектральной плотности смещений центра масс исследуемых систем. Данные соотношения проверены путем численного моделирования для кластеров с различным количеством частиц в широком диапазоне параметров анализируемых систем.

Численные исследования показали, что вне зависимости от параметра неидеальности, Г, и числа частиц, *N*, в моделируемых ансамблях спектральные плотности смещений их центра масс хорошо соответствуют рассмотренным аналитическим соотношениям, а характерные частоты для центра масс могут быть получены путем решения системы уравнений для одной заряженной частицы. Отметим, что решение уравнений движения (3.1) - (3.3) при заданной частоте трения v зависит только от относительных значений параметров: ω/v , ω_B/v . Таким образом, полученные результаты справедливы для частиц любой массы и зарядов (например, для случая пылевой плазмы, для ионов сепарируемого вещества ОЯТ и т.д.).

Детально исследованы особенности процессов массопереноса и диффузионного режима движения заряженных частиц в ограниченных (кластерных) ансамблях. Выполнен анализ динамики частиц в зависимости от их числа, температуры и величины магнитного и электрического поля.

Результаты настоящей главы применимы для ограниченных систем при любом типе попарных взаимодействий и могут быть полезны для разработки новых методов диагностики физических характеристик таких систем, а также для анализа условий формирования различных кластеров, которые представляют интерес в физике плазмы, в физике полимеров и коллоидных систем и т.д.

Заключение и выводы по дипломной работе

Целью дипломной работы являлось теоретическое и численное исследование влияние теплового движения частиц на их динамику в постоянном электромагнитном поле. (Диплом состоит из трех глав.)

В ходе выполнения дипломной работы: был разработан пакет программ для моделирования динамики заряженных частиц во внешних электрических и магнитных полях и анализа численных данных; изучены особенности движения ансамбля заряженных частиц в электрическом и магнитном полях; исследован спектр тепловых колебаний заряженных частиц в постоянном электромагнитном поле; получены новые теоретические и численные данные о влиянии теплового движения частиц на их динамику в постоянном электромагнитном поле.

В качестве основных результатов дипломной работы можно отметить новые аналитические и численные данные о:

 влиянии тепловых флуктуаций частиц на их регулярное движение в электромагнитном поле, включая аналитические оценки для анализа величины данного эффекта;

2) влиянии постоянного магнитного поля на динамику теплового движения заряженных частиц в изотропной электростатической ловушке, включая анализ спектральной плотности смещений частиц и процессов массопереноса в моделируемых ансамблях, а также аналитическое соотношение для спектральной плотности смещений центра масс исследуемых систем.

Результаты настоящей работы применимы для ограниченных систем при любом типе попарных взаимодействий и могут быть полезны для разработки новых методов диагностики физических характеристик таких систем, а также для анализа условий формирования различных кластеров, которые представляют интерес в физике плазмы, медицине, биологии, физике полимеров и коллоидных систем. Кроме того, полученные результаты могут использоваться для выбора оптимальных рабочих параметров энергетических установок для эффективного разделения ОЯТ, а также могут быть полезными для качественного анализа поведения слабонеидеальной пылевой плазмы в пристеночной области установок УТС.

Список литературы

- Photon Correlation and Light Beating Spectroscopy / Edited by Cummins H.Z. and Pike E.R., Plenum, New York (1974).
- 2. Я. И. Френкель, Кинетическая теория жидкостей, Наука, Ленинград (1975).
- R. Balescu, Equilibrium and Nonequilibrium Statistical Mechanics, Wiley Interscience, Chichester (1975).
- 4. А.А. Овчинников, С.Ф. Тимашев, А.А. Белый, Кинетика диффузионноконтролируемых химических процессов, Химия, Москва (1986).
- 5. О.С. Ваулина, О.Ф. Петров, В.Е. Фортов, А.Г. Храпак, С.А. Храпак, Пылевая плазма эксперимент и теория), Физматлит, Москва (2009).
- 6. Complex and Dusty Plasmas / Edited by Fortov V.E. and Morfill G.E., CRC Press (2010).
- 7. Y. P. Raizer, V. I. Kisin, and J. E. Allen, Gas Discharge Physics, Springer, Berlin, Heidelberg (2011).
- 8. J. I. Jiménez-Aquino, R. M. Velasco and F. J. Uribe, Phys. Rev. E 77, 051105 (2008).
- 9. L. J. Hou, Z. L. Mišković, A. Piel and P. K. Shukla, Phys. Plasmas 16, 053705 (2009).
- 10. B. Farokhi, M. Shahmansouri and P. K. Shukla, Phys. Plasmas 16, 063703 (2009).
- 11. О. С. Ваулина, Е.А. Лисин, Э.А. Саметов, ЖЭТФ 152, 1144 (2017).
- 12. E. A. Sametov, R. A. Timirkhanov and O. S. Vaulina, Phys. Plasmas 24, 123504 (2017).
- 13. О.С. Ваулина, К.Г. Адамович, ЖЭТФ 133, 1091 (2008).
- 14. О.С. Ваулина, К.Г. Адамович, О.Ф. Петров, В.Е. Фортов, ЖЭТФ 134, 367 (2008).
- О.С. Ваулина, Е.А. Лисин, А.В. Гавриков, О.Ф. Петров, В.Е. Фортов, ЖЭТФ 137, 751 (2010).
- 16. O. S. Vaulina, E. A. Lisin, Physics of plasmas 16, 113702 (2009).
- 17. В.Е. Фортов, О.Ф. Петров, О.С. Ваулина, К. Г. Косс, Письма в ЖЭТФ 97, 366 (2013).

- 18. G.A. Hebner, M.E. Riley, and K.E. Greenberg, Phys. Rev. E. 66, 046407 (2002).
- 19. O. S. Vaulina and I. E. Drangevski, Phys. Scripta 73, 577 (2006).
- М. М. Васильев, Л. Г. Дьячков, С. Н. Антипов, О. Ф. Петров, В. Е. Фортов, Письма в ЖЭТФ 86, 414 (2007).
- 21. L.G. D'yachkov, O.F. Petrov, V.E. Fortov, Contributions to Plasma Physics 49, 134 (2009).
- 22. V. Yu. Karasev, E. S. Dzlieva, A. Yu. Ivanov, A. I. Eikhval'd, Phys. Rev. E 74, 066403 (2006).
- 23. N. Sato, G. Uchida and T. Kaneko, Phys. Plasmas 8, 1786 (2001).
- 24. R. F. Post, Rev. Mod. Phys. 28, 338 (1956).
- 25. L.A. Artsimovich, Controlled thermonuclear reactions, Gordon and Breach, New York, (1964).
- 26. R. Aymar, P. Barabaschi and Y. Shimomura, Plasma Phys. Controlled Fusion 44, 519 (2002).
- 27. А.В. Тимофеев, Физика плазмы 33, 971 (2007).
- B. P. Cluggish, F. A. Anderegg, R. L. Freeman, J. Gilleland, T.J. Hilsabeck, R.C. Isler, Plasma Phys. 12, 057101 (2005).
- Н. А. Ворона, А. В. Гавриков, А. А. Самохин, В. П. Смирнов, Ю. С. Хомяков, Ядерная Физика и Инжиниринг 5, 944 (2014).
- В. П. Смирнов, А. А. Самохин, Н. А. Ворона, А. В. Гавриков, Физика Плазмы 39, 523 (2013).
- В.Б. Юферов, А.М. Егоров, В.О. Ильичева, С.В. Шарый, К.И. Живанков, Вопросы атомной науки и техники (Серия: Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение) 101, 148 (2013).
- A. Ivlev, H. Löwen, G. Morfill, and C. P. Royall, Complex Plasmas and Colloidal Dispersions: Particle-Resolved Studies of Classical Liquids and Solids (World Scientific, Singapore, 2012).

- 33. *C. K. Birdsall and A. B. Langdon*, Plasma Physics via Computer Simulations, McGraw-Hill Book Company (1985)
- 34. Райзер Ю.П., Физика газового разряда, Наука, Москва (1987).
- B. P. Cluggish, F. A. Anderegg, R. L. Freeman, J. Gilleland, T. J. Hilsabeck, R. C. Isler,
 W. D. Lee, A. A. Litvak, R. L. Miller, T. Ohkawa, S. Putvinski, K. R. Umstadter, and D.
 L. Winslow, Plasma Phys. 12, 057101 (2005).
- 36. E.B. Hooper, Adv Electronics Electron Phys. 27, 295 (1969).
- 37. J.S. Townsend, Philos. Mag. 25, 459 (1938).
- 38. Karmeshu, Physics of Fluids (1958-1988) 17, 1828 (1974).
- 39. S. Chandrasekhar, Rev. Mod. Phys. 15, 1 (1943).
- 40. Ваулина О.С., Саметов Э. А., ЖЭТФ154, 407 (2018).
- 41. А.А. Воронов, Теория автоматического управления. Часть 2, Высш. шк., Москва (1986).
- 42. А.А. Щегольков, Молодежный научно-технический вестник 8, 24 (2013).
- 43. O. S. Vaulina, E. A. Lisin, E. A. Sametov, R. A. Timirkhanov, Plasma and Fusion Research 13, 1406125 (2018)
- 44. Е.М. Лифшиц, Л.П. Питаевский, Физическая кинетика, Наука, Москва (1979).

Публикации по теме диплома

- E.A. Sametov, R.A. Timirkhanov, O.S. Vaulina, «Influence of thermal fluctuations on dynamics of charged particles in electromagnetic fields», Physics of Plasmas 24, 123504 (2017)
- О.С. Ваулина, Е.А. Лисин, Э.А. Саметов, «Процессы диффузии для ограниченного ансамбля заряженных частиц в постоянном магнитном поле», ЖЭТФ 152, 1144 (2017)
- 3. О.С. Ваулина, Э.А. Саметов, «Спектральные и структурные характеристики для кластерных систем заряженных броуновских частиц», ЖЭТФ 154, 407 (2018)
- O.S. Vaulina, E.A. Lisin, E.A. Sametov, R.A. Timirkhanov, «Thermal motion of charged particles in confined ensemble under constant electromagnetic field», Plasma and Fusion Research 13, 1406125 (2018).
- О.С. Ваулина, Э.А. Саметов, «Влияние магнитного поля на спектральные характеристики теплового движения заряженных частиц в изотропной ловушке», Физика Плазмы 45, 258 (2019)
- 6. О.С. Ваулина, Э.А. Саметов, «Влияние магнитного поля на динамику движения заряженных частиц в кластерных системах», ЖЭТФ 155, 947 (2019)
- Э.А. Саметов, О. С. Ваулина, Е.А. Лисин, «Диффузия в ограниченном ансамбле заряженных частиц в постоянном магнитном поле», Труды 60-й Всероссийской научной конференции МФТИ (2017)
- E.A. Sametov, O.S. Vaulina, E.A. Lisin, R.A. Timirkhanov, «Influence of thermal motions on dynamics and diffusion of charged particles in the constant magnetic fields», XXXIII International Conference on Equations of State for Matter Book of Abstracts (2018)
- E.A. Sametov, O.S. Vaulina, «Dynamics of charged particles in restricted systems», Scientific–Coordination Workshop on Non-Ideal Plasma Physics Book of Abstracts (2018)
- Э.А. Саметов, О.С. Ваулина, «Спектральные характеристики теплового движения заряженных частиц в изотропной ловушке в присутствии магнитного поля», Труды 61-й Всероссийской научной конференции МФТИ (2018)