

Részecskeszimulációs módszerek alkalmazása az alacsonyhőmérsékletű plazmafizikában

Application of Particle Simulation Methods in Low-temperature Plasma Physics

DONKÓ Zoltán, DSc

Magyar Tudományos Akadémia Szilárdtestfizikai és Optikai Kutatóintézete (MTA-SZFKI)
H-1121 Budapest, Konkoly Thege Miklós út 29-33.
email: donko@sunserv.kfki.hu, <http://plasma.szfki.kfki.hu/~zoli>

ABSTRACT

The application of particle simulation techniques in low-temperature plasma physics is reviewed and illustrated with examples: (i) Monte Carlo simulations used for description of nonequilibrium charged particle transport in low-pressure gas discharges, and (ii) Molecular Dynamics simulations of strongly-coupled many-particle systems formed in dusty plasma liquids.

ÖSSZEFOGLALÓ

A cikk részecskeszimulációra alapuló számítógépes modellezési módszerek egyes alkalmazásait mutatja be az alacsonyhőmérsékletű plazmafizika területén. Példákkal illusztrálja (i) a töltött részecskék mozgásának Monte Carlo típusú leírását elektromos térben, valamint (ii) komplex plazmákban létrehozott plazmafolyadékok, mint erősen kölcsönható sokrészecske-rendszerek molekuladinamikai szimulációját.

Kulcsszavak: nemegyensúlyi transzport, Monte Carlo szimuláció, komplex plazmák, molekuladinamikai szimuláció, kollektív jelenségek

1. BEVEZETÉS

Az Univerzum látható anyagának túlnyomó része plazma állapotban található. A természetben és laboratóriumi körülmények között előállított plazmákra jellemző részecskesűrűség és részecskeenergia rendkívül tág határok között változik. A plazmák egyes típusainak leírásához természetesen különböző matematikai megközelítés használható. Egyes esetekben a részecske típusú leírás előnyösen alkalmazható, az ehhez a körhöz tartozó módszerek alkalmazhatósági lehetőségei, a számítástechnikai eszközök fejlődésének köszönhetően egyre bővülnek.

A mesterségesen előállított plazmák egyes típusai gyakorlati szempontból is igen jelentősek. Ilyenek például a kis ionizáltsági fokú ködfénykisülések, amelyek széleskörűen alkalmazhatók fényforrásokban, integrált áramkörök gyártásának technológiai lépéseiben, gázlézerekben. Ezen gázkisülések elemi folyamatok szintjén való megértése a tudományos ismeretek megszerzésén kívül az alkalmazások szempontjából is rendkívül fontos. Az alacsony nyomású ködfénykisülések esetében e célra hatékonyan alkalmazható a töltött részecskék mozgásának *Monte Carlo* típusú leírása, amellyel egyes részecskék pályája és ütközési folyamatai követhetők.

A plazmák legtöbb típusában a részecskék kölcsönhatásából származó (potenciális) energia általában több nagyságrenddel kisebb a hőmozgásból adódó kinetikus energiánál, a plazmák egyes típusaiban azonban fordított helyzet is előállhat. Ilyen, ún. *erősen csatolt* (potenciális energia által dominált, nemideális) plazmákra példa a neutroncsillagok köpenyében, fehér törpe csillagokban, óriásbolygók belsejében található anyagállapot. Mesterségesen létrehozott erősen csatolt plazmákra példaként említhetők a csapdában tárolt ionok. További fontos rendszerek a komplex (poros) plazmák, amelyekben az elektronok, ionok és semleges gázatomok (molekulák) mellett nanométer – mikrométer méretű részecskék is jelen vannak. Ilyen rendszerekre aszt-

rofizikai példaként a csillagközi por, az üstökösök csóvjaja, egyes bolygók gyűrűi említhetők. A porrészecskék elektromosan töltötté válhatnak, így a plazma többi összetevőjével kölcsönhatásba kerülnek és azokhoz hasonlóan reagálnak a külső elektromos és mágneses térre. Mivel a (viszonylag) nagy méretű porrészecskék nagy töltést vehetnek fel, így a porrészecskék gyakran erősen csatolt rendszert alkotnak, plazmakristályok keletkezhetnek. Az erősen csatolt plazmák termodinamikai jellemzői, transzportjelenségei és kollektív gerjesztései hatékonyan tanulmányozhatók *molekuladinamikai szimuláció* alkalmazásával.

2. ELEKTRONOK MOZGÁSÁNAK LEÍRÁSA GYENGÉN IONIZÁLT PLAZMÁKBAN

A töltéshordozók mozgásának leírása a gázkisülési modellek alapja. A következőkben először olyan alacsony ionizációs fokú plazmák esetét vizsgáljuk, amelyekben elhanyagolható a töltött részecskék közötti direkt kölcsönhatás (pl. elektron-elektron ütközések) és ennek köszönhetően csak a töltött részecskék (elektronok vagy ionok) transzportját kell leírni a semleges gázban. A legegyszerűbb esetet a homogén és stacionárius E elektromos térerősséggel jellemzett, végtelen kiterjedésű tér esete jelenti. Ilyen körülmények között a részecskék mozgása jól jellemezhető a transzportegyütthatókkal: a mozgékonyssággal, valamint a diffúziós együtthatókkal. A homogén és stacionárius elektromos tér, valamint a végtelen kiterjedésű vizsgált tartomány feltételezésének köszönhetően a részecskék mozgása az elektromos térrel egyensúlyban van, a transzportegyütthatók az E/n redukált elektromos térerősség függvényei [1]. Ezt az *egyensúlyi*, vagy *hidrodinamikai transzport* esetének nevezzük, amelynek matematikailag megfogalmazott feltétele, hogy az egyes ütközések között az elektromos térerősség térben ne változzon lényegesen: $\lambda (dE/dx) \ll E$, illetve időben: $v^{-1}(dE/dt) \ll E$, ahol λ az ütközési szabad úthossz, v pedig az ütközési frekvencia. Laboratóriumi gázkisülések esetében – az előbbi feltételezésekkel ellentétben – a vizsgált térrész mindig véges: fém és/vagy dielektrikum falak határolják, továbbá sok esetben a térerősség térben és időben változik.

Townsend kisülésekben (ahol ugyan homogén és stacionárius elektromos tér van jelen) a katódból kilépő elektronoknak bizonyos út megtételére szükségük van ahhoz, hogy felvegyék az adott E/n redukált elektromos térerősségnek megfelelő sebességet [2]. Ezután transzportjuk egyensúlyi jellegűvé válik, egészen addig, amíg az anód közelébe jutnak, az ugyanis az elektronokat abszorbeálja és emiatt az anód környezetében a sebességeloszlás függvényük alakja torzul az egyensúlyihoz képest. A helyzet tovább bonyolódik a hidegkatódú ködfénykisülések katódja közelében, ahol a számottevő töltéssűrűség hatására térben gyorsan változó elektromos térerősség van jelen, $(dE/dx)\lambda \sim E$, így nem teljesül a hidrodinamikai transzport feltétele. Ködfénykisülésekben a hidrodinamikai közelítés a negatív fény létét sem tudja magyarázni, ez ugyanis egy olyan tartomány, ahol az elektromos térerősség közel nulla, az ionizáció és a gerjesztés foka viszont jelentős, a katód sötétteréből beinjektált gyors elektronoknak köszönhetően. Megállapíthatjuk tehát, hogy a nagy elektromos térerősség-gradiens és az elektródák jelenléte a töltéshordozók mozgásában külön-külön is nemegyensúlyi (nemhidrodinamikai) effektusokat eredményeznek. Hasonló viselkedéshez vezethet az elektromos térerősség időbeli gyors változása. A nemegyensúlyi transzport leírására lényegében két alternatíva kínálkozik: a *Boltzmann egyenlet* megoldása, illetve a *Monte-Carlo típusú részecskeszimulációs* módszerek alkalmazása.

A Boltzmann-egyenlet – mely általános alakjában egy, a 6-dimenziós fázistérben felírt folytonossági egyenlet – megoldása általános esetben (3-dimenziós, időfüggő probléma) igen nehéz (gyakran reménytelen) feladat. Stacionárius megoldást keresve, illetve a térbeli dimenziószámot csökkentve (pl. 1-dimenziós, vagy hengerszimmetrikus rendszert feltételezve) az egyenlet egyszerűbb alakra hozható. Megoldására azonban ezekben az esetekben is igen bonyolult numerikus módszereket használnak [3]. Míg a Boltzmann-egyenlet a részecskék eloszlásfüggvényével manipulál, addig az alternatívát jelentő Monte-Carlo (MC) szimuláció egyes részecskék követésén alapul, és a sokaságra jellemző paramétereket az egyes részecskék jellemzőinek átlagolásával adja meg. Ily módon a szimuláció alkalmazásával valós képet kaphatunk a lejátszódó folyamatokról, egyszerűen vizsgálható az események statisztikája. A vizsgált részecske követéséhez a Monte-Carlo szimulációban egyidejűleg kell integrálni a részecske $\mathbf{r}(t)$ trajektóriáját megadó mozgásegyenletet két ütközés között:

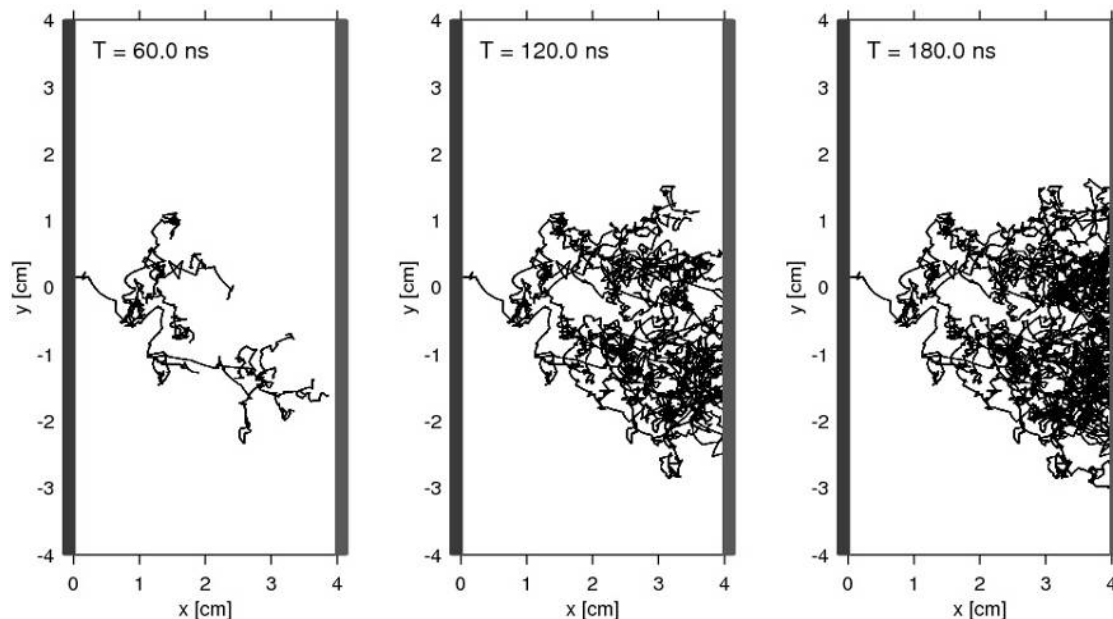
$$m \frac{d^2 \mathbf{r}(t)}{dt^2} = q \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) \quad (1)$$

és a következő ütközés helyének meghatározására szolgáló egyenletet:

$$\int_{s_0}^{s_1} n \sigma[\varepsilon(s)] ds = -\ln(1 - R_{01}), \quad (2)$$

ahol q és m a részecske töltése és tömege, s_0 és s_1 az előző és a következő ütközés pozíciója a részecske pályája mentén, σ az ütközési folyamatok hatáskeresztmetszeteinek összege, amely az ϵ részecskeenergia függvénye, és R_{01} a $[0,1)$ intervallumon egyenletes eloszlású véletlenszámot jelöl. Az utóbbi egyenletet s_1 -re kell megoldani, a trajektóriaszakasz elején generált R_{01} véletlenszámmal. A szabad úthossz befutása után a részecske különböző ütközési folyamatokban vehet részt. Az egyes folyamatok bekövetkezésének valószínűsége arányos az ütközési energiánál vett megfelelő hatáskeresztmetszet-értékekkel. (Elektronok esetében a figyelembe vett ütközési folyamatok általában a rugalmas szórás, az atomok gerjesztése és ionizációja.)

A Monte Carlo szimuláció működésének illusztrálására az 1. ábra egy elektronlavina (ionizációkkal történő elektronsokszorozódás) időbeli fejlődését mutatja. A szimuláció paraméterei: argon gáz 41.1 Pa nyomáson, 4 cm elektródávolság, 200 V feszültség. A lavina egy, a katódból (ábrán bal oldali elektródából) kilépő elektron hatására indul meg.



1. ábra

*Egy elektronlavina növekedése az idő függvényében:
pillanatképek az elektronok trajektóriáinak Monte Carlo szimulációjából.*

*A katód minden esetben a bal oldali ($x = 0$ cm),
az anód a jobb oldali ($x = 4$ cm) elektróda. A vonalak az egyes elektronok pályáit mutatják, a törések ütközési folyamatokat jelölnek, az elágazások ionizációs folyamatoknak felelnek meg*

Az elektronlavinák pontos leírása alapvető fontosságú a gázkisülésfizika egyik legalapvetőbb jelenségének, a gáz átütésének, elektromos vezető állapotba kerülésének tanulmányozásánál. Az átütési folyamat lényege (első közelítésben) ugyanis az, hogy az elektronlavinákban keletkezett pozitív ionok a katód felületére érve onnan újabb elektronokat válthatnak ki, és így az idő függvényében, makroszkopikus szinten is egy önfenntartó töltéssokszorozódási folyamat alakul ki. A Monte Carlo szimuláció a gázok átütésének vizsgálatában mára elterjedt módszerré vált. Emellett az eljárás fontos szerepet kap kifejlett ködfénykisülések szimulációjánál is, ahol többnyire egy folyadékmodellel együtt alkalmazzák. Az ilyen, ún. *hibrid* modellekben [4-6] a Monte Carlo szimulációt a gyors, az elektromos téreloszlással nem egyensúlyban lévő elektronok mozgásának és ütközési folyamatainak leírására és így a pontos ionizációs forrásfüggvény meghatározására használják, mely aztán bemenő adatként szolgál a lassú elektronokat és az ionokat leíró folyadékmodell számára. A Monte Carlo szimuláció ugyancsak fontos szerepet kap az ún. Particle-in-Cell (PIC) szimulációs módszerben [7], amely többek között gázkisülések önkonzisztens leírására alkalmazható. Ütközéses plazmák szimulációja esetében a PIC módszerben a Monte Carlo módszer alapján határozható meg az egyes részecskék ütközésének pozíciója és az ütközések típusa.

3. ERŐSEN CSATOLT PLAZMAFOLYADÉKOK SZIMULÁCIÓJA

Erősen csatolt plazmák alatt olyan tulajdonságokkal bíró rendszereket értünk, ahol az elektromosan töltött részecskék kölcsönhatásából származó potenciális energia (lényegesen) felülmúlja a kinetikus energiát. Coulomb-kölcsönhatást feltételezve és a potenciális energiát egy karakterisztikus a távolság mellett számítva, a potenciális és kinetikus energia $E_{\text{kin}} \sim kT$ hányadosaként definiálható *csatolási paraméter*:

$$\Gamma = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q^2}{akT}, \quad (3)$$

ahol q a részecskék töltése, a pedig a *Wigner-Seitz sugár* (amely 3 dimenzióban az egy részecskére eső térfogatnak megfelelő gömb sugara, kétdimenziós rendszerek esetében pedig az egy részecskéhez tartozó kör alakú tartomány sugara). Erősen csatolt plazmákról $\Gamma \gg 1$ esetében beszélünk [8]. Az erősen csatolt plazmák különböző számú komponensből állhatnak, amelyek jellemzői több paraméter tekintetében eltérhetnek. A legegyszerűbb esetet az *egykomponensű plazmák* jelentik, amelyekben csak egyféle töltött részecskét kell explicit módon figyelembe venni a modellben, ezen komponens töltését rendszerint egy ellentétes töltésű részecskéből álló, elkent háttér semlegesíti. Amennyiben ez a háttér nem polarizálható (sűrűségeloszlása egyenletes), a plazma részecskéi között Coulomb-kölcsönhatás érvényesül. Polarizálható háttér esetében a részecskék töltését a háttér leárnyékolja, így kölcsönhatásukat a Yukawa-potenciál írja le. A Yukawa-kölcsönhatással jellemezhető rendszerek közé tartoznak a *poros plazmák*, amelyekben az atomi méretekhez képest makroszkópikus részecskék számottevő töltést vehetnek fel, és a háttérplazmán belül egy erősen csatolt rendszert hozhatnak létre. A töltött porrészecskék közötti taszítást a plazma mikroszkópikus összetevői leárnyékolják és így a részecskék kölcsönhatásából származó potenciális energia:

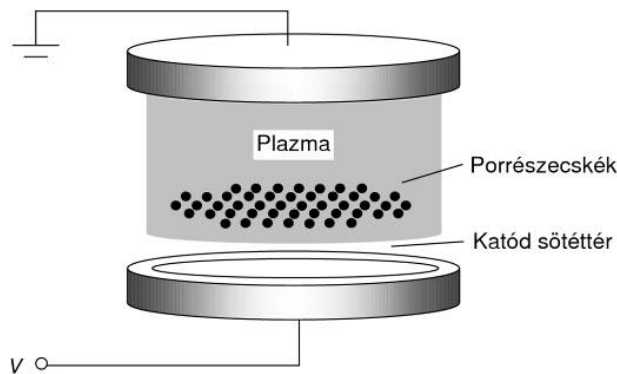
$$\varphi(r) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q^2 \exp(-r/\lambda_D)}{r}, \quad (4)$$

ahol λ_D a Debye-hossz. A Wigner-Seitz sugár és a Debye-hossz hányadosaként határozható meg a dimenziótlan árnyékolási paraméter: $\kappa = a / \lambda_D$. Poros plazmák laboratóriumi körülmények között is előállíthatók gázki-sülésekben (2. ábra). A rádiófrekvenciásan táplált elektróda (illetve egyenfeszültségű táplálás esetén a katód) a kisülés alján helyezkedik el. A kisülésbe egy speciális adagoló segítségével mikrométer mérettartományba eső részecskéket juttatnak. A porrészecskéket a vertikálisan rájuk ható két legfontosabb erő, a gravitáció és a katód sötéttérben lévő potenciáeloszlásból és por negatív töltéséből adódó, „felfelé” irányuló elektrosztatikus erő tartja egyensúlyban. Az utóbbi években behatóan tanulmányozták a rendszer statikus és dinamikus tulajdonságait a kristályos- és folyadékállapotban [9-10].

A következőkben vázoljuk az erősen csatolt sokrészecske-rendszerek molekuladinamikai leírásának lényegét. Molekuladinamikai szimuláció során nagy számú ($j = 1, 2, \dots, N$) részecske mozgását vizsgáljuk, ami a részecskék egymás közötti kölcsönhatásának és külső hatásokból származó erőknek a következménye. A j -edik részecske mozgásegyenlete:

$$m_j \frac{d^2 \mathbf{r}_j}{dt^2} = \sum_{i \neq j} \mathbf{F}_{ij}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j, t) + \mathbf{F}_{\text{ext},j}(\mathbf{r}_j, t), \quad (5)$$

ahol m_j a részecske tömege, F_{ij} a j -edik részecskére a i -edik részecske által gyakorolt erő, továbbá F_{ext} az esetleges külső hatás(ok)ból származó erő. A szimulációkban a részecskék sebességét és pozícióját diszkrét időpillanatokban ismerjük, amelyeket a szimuláció Δt időlépése választ el egymástól. A szimuláció időlépéseiben meg kell keresni az összes lehetséges részecskepárt, minden részecskére meg kell határozni a rá ható eredő erőt, majd kiszámítani a sebesség és a pozíció megváltozását a Δt időlépés alatt. Viszonylag kis számú részecskéből álló, véges rendszer esetén a szimuláció a vázolt algoritmus szerint egyszerűen megvalósítható. A *periodikus határfeltétellel leírt, végtelen kiterjedésű rendszerek* ugyancsak egyszerű esetet jelentenek abban az esetben, ha a kölcsönhatási potenciál rövid hatótávolságú és így egy bizonyos R távolságon kívül elhanyagolható. *Hosszú hatótávolságú* (pl. a Coulomb-kölcsönhatásból származó) erőknél véges kölcsönhatási tartomány nem adható meg, a részecskékre ható erő kiszámításához a részecskék összes periodikus képét figyelembe kell venni. A példaként bemutatott esetben kihasználjuk a Yukawa-potenciál exponenciális levágását.



2. ábra

Kétdimenziós poros plazma előállítása alacsony nyomású gázkisülésben. A vertikális összetartás (ami a gravitációból származó erő mellett a kisülés paramétereitől függ) beállításával elérhető, hogy a töltött porrészecskék egy síkban helyezkedjenek el.

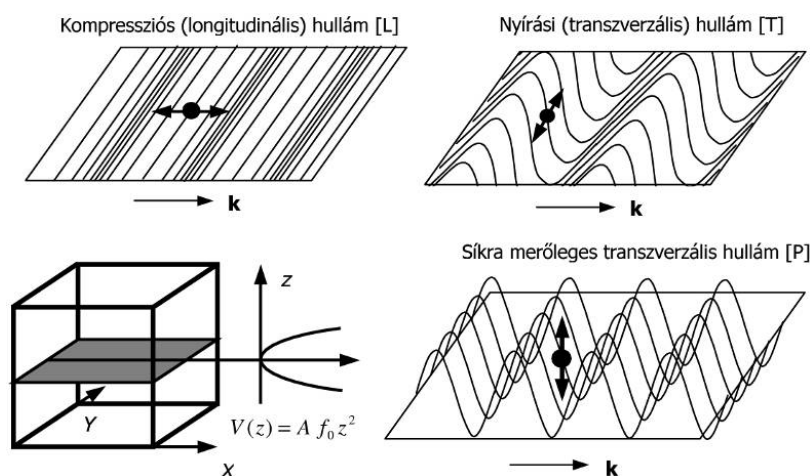
A molekuladinamikai szimuláció módszere lehetőséget ad az erősen csatolt plazmák strukturális és termodinamikai jellemzőinek kiszámítására, valamint dinamikus (kollektív) jelenségeinek vizsgálatára. Itt a továbbiakban egy kvázi-2-dimenziós (egy külső, 1-dimenziós parabolikus potenciál által összetartott) töltésréteg kollektív gerjesztéseire kapott eredményeket [11] mutatjuk be. A 3. ábra a vizsgált rendszerben kialakuló lehetséges hullámokat szemlélteti. A termikusan gerjesztett kollektív módusok spektrumait a longitudinális $\lambda(k,t)$, valamint a transzverzális síkbeli $\tau(k,t)$ és síkra merőleges $\pi(k,t)$ áramfluktuációk,

$$\lambda(k,t) = k \sum_{j=1}^N v_{jx} \exp(ikx_j), \quad \tau(k,t) = k \sum_{j=1}^N v_{jy} \exp(ikx_j), \quad \pi(k,t) = k \sum_{j=1}^N v_{jz} \exp(ikx_j) \quad (6)$$

Fourier transzformációjával kapjuk meg (példaként az L módot véve):

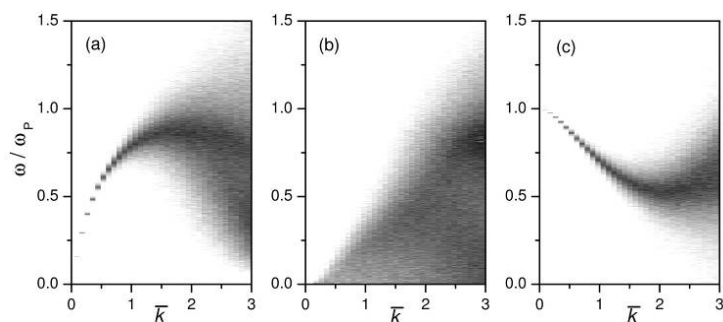
$$L(k, \omega) = \frac{1}{2\pi N} \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} |F\{\lambda(k,t)\}|^2, \quad (7)$$

ahol k a hullámszám, T pedig a jelregisztrátum ideje.



3. ábra

Kvázi-2-dimenziós töltésrétegben kialakuló hullámok (kollektív gerjesztések) típusai. A modellben a rendszer összetartását a Z irányban ható parabolikus potenciál biztosítja.



4. ábra

Kvazi-2- dimenziós töltésrétegben fellépő kollektív gerjesztések energiataralma a frekvencia – hullámszám síkon, $\Gamma = 100$, $\kappa = 0.27$ mellett.

ω_p a névleges 2 dimenziós plazmafrekvencia, $\bar{k} = (ka)$ a normalizált hullámszám [11].

(a) L módus, (b) T módus, (c) P módus.

A gerjesztéseket a sötét tartományok jelzik, amelyek egyben a diszperziós relációkat is kijelölik.

A színskála logaritmikus, csak kvalitatív információt kíván közölni.

A 4. ábra a három (L, T és P) kollektív módushoz tartozó áramfluktuáció spektrumokat mutatja az (ω, k) síkon, $\Gamma = 100$ és $\kappa = 0.27$ mellett (mely paramétereknél a rendszer folyadékállapotban van). A sötét szín azt a tartományt jelzi, ahová a módusok energiája koncentrálódik. Ezen tartományok elhelyezkedése jelöli ki a diszperziós relációkat. A longitudinális L módus $\omega \propto k^{1/2}$ kváziakusztikus viselkedést mutat, kis hullámszámok melletti lineáris szakasszal (amelynek szélessége κ növelésével növekszik). A P módus optikai diszperziót mutat: $k \rightarrow 0$ esetén véges frekvenciát kapunk, amelynek értékét a parabolikus potenciál amplitúdója szabja meg ($k = 0$ esetén a teljes réteg együtt rezeg a külső potenciálvölgyben). A hullámszám növekedésével ω csökken, majd $\bar{k} \approx 2.1$ fölött enyhén növekszik. A síkbeli transzverzális T módus spektrumában a gerjesztések csak egy bizonyos k_{\min} hullámszám fölött jelennek meg, ami a folyadékállapotú rendszerekre jellemző tulajdonság. Az L és P módusokhoz képest az energia eloszlása a T módusban sokkal kevésbé koncentrált, ami a gerjesztések rövid élettartamára utal. A T módus akusztikus jellegű diszperziót mutat [11].

Az ismertetett kutatásokat az OTKA és az MTA támogatja (OTKA-T-48389 and MTA/OTKA-90/46140).

HIVATKOZÁSOK

- [1] L. C. Pitchford, J. P. Boeuf, P. Segur, and E. Marode, "Non-Equilibrium Electron Transport: A Brief Overview", Proceedings of the Sixth International Swarm Seminar" (1990)
- [2] G. Malović, A. Strinić, S. Živanov, D. Marić, and Z. Lj. Petrović, "Measurements and analysis of excitation coefficients and secondary electron yields in Townsend dark discharges", Plasma Sources Science and Technology 12, S1-S7 (2003)
- [3] D. Loffhagen and R. Winkler, "Spatiotemporal relaxation of electrons in non-isothermal plasmas", J. Phys. D: Appl. Phys. 34, 1355-1366 (2001)
- [4] A. Bogaerts, R. Gijbels, and W. J. C. Goedheer, "Hybrid Monte Carlo-fluid model of a direct current glow discharge", J. Appl. Phys. 78, 2233-2241 (1995);
- [5] A. Fiala, L. C. Pitchford, and J.-P. Boeuf, "Two-dimensional, hybrid model of low-pressure glow discharges", Phys. Rev. E 49, 5607-5622 (1994)
- [6] Z. Donkó, "Hybrid model of a rectangular hollow cathode discharge", Phys. Rev. E 57, 7126-7137 (1998)
- [7] C. K. Birdsall, "Particle-in Cell Charged-Particle Simulations, Plus Monte Carlo Collisions With Neutral Atoms, PIC-MCC", IEEE Trans. Plasma Science 19, 65-85 (1991)
- [8] G. J. Kalman, K. B. Blagoev, and M. Rommel (editors), "Strongly Coupled Coulomb Systems", (Plenum Press:NY) 1998
- [9] H. Thomas, G. E. Morfill, and V. G. E. Demmel, "Plasma Crystal: Coulomb Crystallization in a Dusty Plasma", Phys. Rev. Lett. 73, 652-655 (1994)
- [10] S. Nunomura, D. Samsonov, and J. Goree, "Transverse waves in a two-dimensional screened-Coulomb crystal (dusty plasma)", Phys. Rev. Lett. 84, 5141-5144 (2000)
- [11] Z. Donkó, P. Hartmann, and G. J. Kalman, "Collective modes of quasi-two-dimensional Yukawa liquids", Phys. Rev. E 69, 065401 (2004)