

# Molekulardynamik–Simulationen staubiger (komplexer) Plasmen

M. Bonitz<sup>1</sup>, V. Golubnychiy<sup>1</sup>, H. Fehske<sup>2</sup>, H. Kersten<sup>3</sup>, S. Kosse<sup>3</sup>, and A. Melzer<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Christian–Albrechts–Universität zu Kiel, <sup>2</sup>Ernst–Moritz–Arndt–Universität Greifswald, <sup>3</sup>Institut für Niedertemperaturplasmaphysik Greifswald

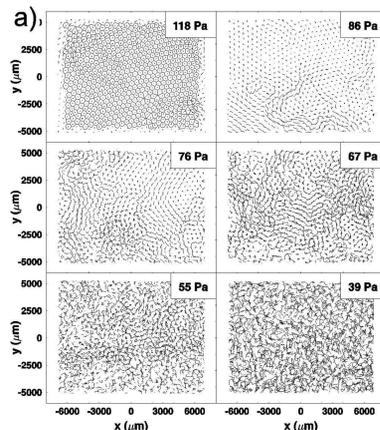


## Motivation

Das derzeit große Interesse an staubigen Plasmen begründet sich u.a. durch deren Relevanz in astrophysikalischen Situationen als auch bei Prozeß- und Laborplasmen [Kersten et al. 2003]. Mit Laborexperimenten zu diesen Plasmen wurden in den letzten Jahren unterschiedliche Fragestellungen, u.a. zu Struktur, Ladungsmessungen, Phasenübergängen, Wellen oder Defekten und Transportphänomenen, bearbeitet.

Aufgrund der äußerst heterogenen Zusammensetzung staubiger Plasmen (Staubpartikel, Ionen, Elektronen, Neutralteilchen) und den daraus resultierenden komplexen Wechselwirkungen sowie stark separierten Energie-, Orts-, Zeit- und Massenskalen versagen traditionelle analytische und numerische Zugänge bei der theoretischen Beschreibung. Eine geschlossene theoretische Beschreibung bzw. ein universell anwendbarer numerischer Zugang fehlt bislang.

In diesem Beitrag wird ein Kooperationsprojekt zwischen Greifswalder und Kieler Plasmaphysikern vorgestellt. Das Ziel ist die Berechnung von Ladungs- und Paarverteilungen, das Studium der Thermodynamik, des Transports und des Verhaltens des Plasmasystems bei externer Anregung durch äußere elektromagnetische Felder (Laser), sowie die Untersuchung des kollektiven Anregungsspektrums von Plasmawellen, von Selbstorganisationsphänomenen und Phasenübergängen von mesoskopischen Plasmen in Fallen mit Hilfe von MD–Simulationen. Hierbei liefern die vor Ort durchgeführten Experimente notwendige Eingabeparameter für numerischen Rechnungen und bilden gleichzeitig den entscheidenden Test für die Güte der bei der Simulationen verwendeten Approximationen.



Experimentell beobachteter Schmelzprozeß eines Plasmakristalls aus Staubteilchen. Durch Reduktion des Gasdruckes der Entladung geht der Plasmakristall vom festkörperähnlichen Zustand in einen flüssigkeitsähnlichen Zustand über [Melzer et al. 1996].

## Staubiges Plasma

besteht aus:

- Staubteilchen  $d \Rightarrow \Gamma_d$ ,
- positiven Ionen  $i \Rightarrow \Gamma_i$
- Neutralteilchen (Atome, Moleküle)  $n$
- Elektronen  $e \Rightarrow \Gamma_e$

( $\Gamma = \langle E_{pot} \rangle / \langle E_{kin} \rangle$ )

Probleme:

- starke Korrelationen zwischen den Staubteilchen  $\Gamma_d \gg 1$ , mögliche Zustände: gasähnlich, flüssig, kristallin
- Wechselwirkung  $V_d$  (nicht isotrop, abgeschirmt durch Elektronen und Ionen) zwischen den Staubteilchen ist nicht exakt bekannt
- komplizierte Wechselwirkung zwischen den Staubteilchen und den Ionen, Elektronen und Neutralteilchen
- Multiskalenproblem durch große Massenunterschiede  $m_d \gg m_{i,n} \gg m_e$  und unterschiedliche Relaxationszeitskalen  $t_d \gg t_{i,n} \gg t_e$

⇒ kinetische Theorie versagt bei starker Kopplung ⇐

## Mikroskopische Beschreibung staubiger Plasmen

klassische Newtonschen Bewegungsgleichungen für alle Teilchenimpulse

$$\frac{d}{dt} \vec{p}_{aj}(t) = q_{aj}(t) \left[ \vec{E}(\vec{r}_{aj}, t) + \frac{1}{c} \vec{v}_{aj}(t) \times \vec{B}(\vec{r}_{aj}, t) \right] + \vec{F}_{aj}^{NE}(\vec{r}_{aj}, t) \quad (1)$$

Bewegungsgleichung für die zeitabhängige Ladung jedes Staubteilchens

$$\frac{d}{dt} q_{aj}(t) = \sum_{b=1}^M I_j^b(\vec{r}_j, t) + I_j^{ext} \quad (2)$$

$\vec{F}^{NE}$ –nichtelektrische Kräfte,  $I^b$ –Ströme durch die Teilchensorte  $b$ ,  $I^{ext}$ –externe Ströme

3D–Maxwell–Gleichungen für das zeit- und ortsabhängige elektromagnetische Feld

$$\text{rot} \vec{B}(\vec{r}, t) = \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{E}(\vec{r}, t)}{\partial t} + 4\pi \left[ \vec{j}(\vec{r}, t) + \vec{j}^{ext}(\vec{r}, t) \right] \quad (3a)$$

$$\text{div} \vec{B}(\vec{r}, t) = 0 \quad (3b)$$

$$\text{rot} \vec{E}(\vec{r}, t) = -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{B}(\vec{r}, t)}{\partial t} \quad (3c)$$

$$\text{div} \vec{E}(\vec{r}, t) = 4\pi \left[ \rho(\vec{r}, t) + \rho^{ext}(\vec{r}, t) \right] \quad (3d)$$

Ladungsdichte und -strom

$$\rho(\vec{r}, t) = \sum_{i=j}^M q_{aj}(t) \delta[\vec{r} - \vec{r}_j(t)] + \rho_e + \rho_i \quad (4a)$$

$$\vec{j}(\vec{r}, t) = \sum_{j=1}^M q_{aj}(t) \vec{v}_j(t) \delta[\vec{r} - \vec{r}_j(t)] + \vec{j}_e + \vec{j}_i \quad (4b)$$

Ladungsdichte und -strom der Elektronen und Ionen

$$\rho_{e,i}(\vec{r}, t) = q_{e,i} \int d\vec{v} f_{e,i}(\vec{r}, \vec{v}, t) \quad (5a)$$

$$\vec{j}_{e,i}(\vec{r}, t) = q_{e,i} \int d\vec{v} \vec{v} f_{e,i}(\vec{r}, \vec{v}, t) \quad (5b)$$

Vereinfachte Dynamik der Elektronen und Ionen bestimmt durch kinetische Gleichung

$$\left( \frac{\partial}{\partial t} + \vec{v}_{e,i} \frac{\partial}{\partial \vec{r}} + q_{e,i}(\vec{r}, t) \left[ \vec{E}(\vec{r}, t) + \frac{1}{c} \vec{v}_{e,i} \times \vec{B}(\vec{r}, t) \right] \right) f_{e,i}(\vec{r}, \vec{v}, t) = I_{e,i}(\vec{r}, \vec{v}, t) \quad (6)$$

mit den Gl. (1)–(6) folgt für das staubige Plasma

- selbstkonsistentes mikroskopisches System
- externer Input lediglich  $I^b$ ,  $I^{ext}$ ,  $\vec{F}^{NE}$
- beschreibt schwache und starke Kopplung der Staubteilchen
- enthält Fluktuationen der Staubteilchen
- schwache und starke Felder berücksichtigt

## Ausgewählte Literatur

- H. Kersten et al., Int. J. Mass. Spectr. **223–224**, 313 (2003).
- A. Melzer et al., Phys. Rev. E **53**, 2757 (1996).
- A.V. Zobnin et al., Plasma Phys. Reports **26**, 415 (2000).

## Physikalische Größen und Eigenschaften

- **Thermodynamische Eigenschaften:** Zustandsgleichung, Ladungsverteilungsfunktionen, Energie etc., Einfluß zusätzlicher äußerer elektrischer und magnetischer Felder.
- **Paarverteilung der Staubteilchen  $g_d(\vec{r})$  und ternäre Korrelationsfunktion:** Diese zentralen Größen sollen direkt aus den Simulationen gewonnen werden und zum einen mit theoretischen Modellen (wie HNC u.ä.), zum anderen mit experimentell, aus gemessenen Teilchentrajektorien bestimmten Paarverteilungen verglichen werden. Die Kenntnis von  $g_d(\vec{r})$  erlaubt wichtige Rückschlüsse auf die Wechselwirkung  $V_d(\vec{r})$  zwischen den Staubpartikeln.
- **Dynamische und Transporteigenschaften:** Diffusionskoeffizient, Leitfähigkeit, Beweglichkeit etc. Daneben sollen der dynamische Strukturfaktor und das kollektive Anregungsspektrum (Dispersion, Dämpfung) von longitudinalen und transversalen Wellen, insbesondere *ion/dust acoustic waves*, Schermoden und Phononen im gesamten Kopplungsparameterbereich berechnet werden.
- **Selbstorganisationsphänomene in staubigen Plasmen:** Mikroskopische Simulation der Herausbildung effektiver attraktiver Wechselwirkungen zwischen gleichgeladenen Partikeln, der Bildung von staubfreien Zonen (*voids*) und anderer unikalereffekte in staubigen Plasmen.
- **Mesoskopische komplexe Plasmen in Fallen:** Berechnung der Grundzustandseigenschaften (z.B. Schalenkonfiguration), von Phasenübergängen (z.B. Schmelzparameter) und der Eigenmoden. Weiterhin soll das Systemverhalten bei externer Anregung durch elektromagnetische Felder bzw. Laserpulse sowie bei Änderung der Teilchenzahl untersucht werden.

## Arbeitsprogramm des Projektes

1. • Schaffung des Grundgerüsts des MD–Programms und Modellierung der Staub–Wechselwirkung durch ein Yukawa–Potential mit konstanter inverser Abschirmlänge
 
$$V_d(r_{ij}) = \frac{q_i q_j}{r_{ij}} e^{-\kappa r_{ij}}, \quad \kappa = \sqrt{\sum_{a=e,i} \frac{4\pi n_a z_a^2 e^2}{k_B T_a}}$$
  - Tests für ein monodisperses System (alle Staubteilchen sollen den selben Durchmesser und damit die selbe Ladung besitzen); Variation von Dichte bzw. Ladung
  - Simulationen für mesoskopische und makroskopische Staubsysteme und Vergleich mit den Experimenten; Simulation verschiedener realer experimenteller Geometrien, wie auch externer elektrischer Feld–Verteilungen, wie sie in den geplanten Experimenten Verwendung finden
2. • Verbesserung der Behandlung der Ladung der Staubteilchen; Zulassen von Ladungsfluktuationen, Kopplung an die Elektronen- und Ionenströme, Gl. (2) einbeziehen (verwenden von gut bekannte Approximationen für stationäre Ströme [Zobnin et al. 2000])
  - Simulation einer dünnen vertikalen Schicht (periodische Randbedingungen in der Ebene senkrecht zu  $\vec{z}$ ) ⇒ Beschreibung realistischer Höhenverteilung der Staubeigenschaften in den Experimenten
  - Untersuchung des interessanten Problems von Nichtpotential–Kräften, die aus räumlichen Gradienten der mittleren Ladung herrühren
  - Berücksichtigung von Dipolkräften (und höherer Multipolbeiträge) in der Staubwechselwirkung
3. • Berücksichtigung dynamischer Effekte der Ionen und Elektronen; durch Anregung kollektiver Moden, z.B. Plasmaschwingungen der Elektronen bzw. von Ion–akustischen Instabilitäten wird auch die Staub–Wechselwirkung modifiziert
  - Ersetzen des (statisch abgeschirmten) Yukawa–Potentials durch ein dynamisch abgeschirmtes Potential (bestimmt durch die dynamische dielektrische Funktion der Elektronen und Ionen); Verwenden von Modellausdrücken für die dielektrische Funktion
  - Lösen der kinetischen Gleichung Gl. (6)