

Расчет термодинамических величин заряженных структур микрочастиц в электродинамических ловушках

Д. С. Лапицкий, В. С. Филинов, Л. М. Василяк, Р. А. Сыроватка,
Л. В. Депутатова, В. И. Владимиров, В. Я. Печеркин

В рамках статистической теории жидкого состояния вещества с помощью метода броуновской динамики рассчитаны термодинамические величины сильнонеидеальной кулоновской структуры микрочастиц, которая удерживалась линейной ловушкой Пауля в воздухе при атмосферном давлении. Для расчета использовался кулоновский потенциал межчастичного взаимодействия и полученные в расчете парные коррелятивные функции кулоновской структуры. Рассчитаны средний параметр межчастичного взаимодействия (параметр неидеальности Γ), внутренняя энергия кулоновской структуры и ее давление на ловушку. Обнаружено, что с ростом размеров частиц и их зарядов данные величины в среднем уменьшаются за счет увеличения равновесных средних межчастичных расстояний в электродинамической ловушке. В процессе выхода на стационарное состояние также происходит уменьшение энергии и давления за счет увеличения среднего межчастичного расстояния при частичном упорядочивании частиц кулоновской системы.

Ключевые слова: заряженные частицы, электродинамическая ловушка, переменное электрическое поле, кулоновские структуры, уравнения состояния вещества.

Введение

Заряженные микрочастицы часто присутствуют во многих энергетических установках, где могут играть как положительную, так и отрицательную роль. В последнем случае актуально создание эффективных методов очистки газа от взвешенных микрочастиц. Обычно для очистки

воздуха от пылевых частиц чаще всего применяют т. н. НЕРА-фильтры, НЕРА-фильтры, устройства, использующие эффект коагуляции, а также электрофильтры с осадительным электродом [1–4]. Авторами работы предложен принципиально новый способ захвата и удаления частиц из газового потока с помощью электродинамических ловушек [5–8]. Примеры таких ловушек и условия удержания частиц представлены в работах [9–12].

Захваченные ловушкой частицы могут представлять собой сильно коррелированные кулоновские системы одноименно заряженных микрочастиц, где потенциальная энергия межчастичного взаимодействия превосходит их среднюю кинетическую энергию. Для повышения эффективности захвата и удержания кулоновских систем в ловушках актуальной задачей является изучение свойств этих систем.

В данной работе с помощью метода броуновской динамики и статистической теории жидкого состояния [13] рассчитаны термодинамические величины сильно неидеальной кулоновской структуры, удерживаемой в линейной ловушке Пауля в воздухе при атмосферном давлении. Изучена динамика внутренней энергии кулоновской системы, ее давление на ловушку, а также рассчитан параметр неидеальности Γ . Показано, что с ростом размеров частиц и их зарядов данные величины в среднем уменьшаются за счет увеличе-

Лапицкий Дмитрий Сергеевич, старший научный сотрудник, к.ф.-м.н.
 Филинов Владимир Сергеевич, главный научный сотрудник, д.ф.-м.н.
 Василяк Леонид Михайлович, главный научный сотрудник, д.ф.-м.н.
 Сыроватка Роман Александрович, научный сотрудник.
 Депутатова Лидия Викторовна, старший научный сотрудник, к.т.н.
 Владимиров Владимир Иванович, старший научный сотрудник.
 Печеркин Владимир Яковлевич, старший научный сотрудник, к.ф.-м.н.
 Тел. 8 (495) 484-24-29.
 E-mail: dmitrucho@yandex.ru; vladimir_filinov@mail.ru; vasilyak@ihed.ras.ru; syrovatkara@ihed.ras.ru; dlv@ihed.ras.ru; vld@ihed.ras.ru; vpcherkin@yandex.ru
 Объединенный институт высоких температур РАН (ОИВТ РАН).
 Россия, 125412, Москва, ул. Ижорская, 13, стр. 2.
 Статья поступила в редакцию 10 июля 2017 г.

© Лапицкий Д. С., Филинов В. С., Василяк Л. М., Сыроватка Р. А., Депутатова Л. В., Владимиров В. И., Печеркин В. Я., 2017

ния равновесных средних межчастичных расстояний в электродинамической ловушке.

Моделирование динамики заряженных частиц в ловушке Пауля

Схема линейной ловушки Пауля представлена на рис. 1. В работе рассматривалась ловушка, состоящая из четырех цилиндрических электродов, расположенных параллельно центральной оси u .

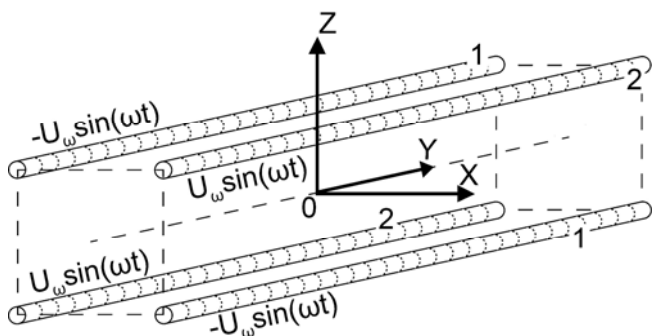


Рис. 1. Схема линейной ловушки Пауля.

Расстояние между электродами 1 и 2 составляло 2 см. Радиус электродов ловушки составлял $R_1 = 1,5$ мм, длина электродов $L = 10$ см. На электроды ловушки подавалось переменное напряжение $U_\omega \sin(\omega t)$ со сдвигом по фазе на π между соседними электродами, как показано на рис. 1, где $\omega = 2\pi f$, f – частота переменного напряжения, $f = 50$ Гц, $U_\omega = 5$ кВ – амплитуда переменного напряжения.

Движение частиц описывалось броуновской динамикой, в которой для описания временной

эволюции кулоновской системы частиц использовались стохастические уравнения Ланжевена [11]:

$$m_p \frac{d^2 r_i}{dt^2} = F_t(r_i) + F_{int}(r_i) - 6\pi\eta r_p \frac{dr_i}{dt} + F_g + F_{br},$$

где m_p – масса частицы, r_i – радиус-вектор частицы, $F_t(r_i)$ – сила взаимодействия заряженных частиц с электродами ловушки, $F_{int}(r_i)$ – кулоновская сила межчастичного взаимодействия, η – динамическая вязкость среды (18,2 мкПа из [14]), F_g – сила тяжести, F_{br} – стохастические дельта-коррелированные силы, учитывающие столкновения микрочастиц и частиц газа.

Было проведено несколько независимых расчетов при температуре окружающей среды $T = 300$ К с 4 типами частиц с плотностью 3990 кг/м³, но различных радиусов r_p и зарядов q_p : 1) $r_p = 1$ мкм и $q_p = 2750$; 2) $r_p = 1$ мкм и $q_p = 3250$ е; 3) $r_p = 2$ мкм и $q_p = 11000$ и 4) $r_p = 2$ мкм и $q_p = 13000$ е (здесь е – заряд электрона).

Расчет начинался с того, что в центр ловушки инжектировались 10 000 заряженных частиц. На рис. 2 представлена кулоновская структура заряженных частиц, удерживаемых в ловушке, спустя 0,26 секунды после инжекции. Синим кольцом и синей точкой отмечены область и центральная частица, для которых рассчитывались парные коррелятивные функции $g(r)$, характеризующие плотность вероятности нахождения двух частиц на расстоянии r друг от друга. Типичные функции $g(r)$ и их изменение во времени проиллюстрированы на рис. 3. С течением времени первый пик $g(r)$, характеризующий расстояние до «ближайшего соседа», смещается на большее расстояние, что сказывается на временном поведении энергии и давления.

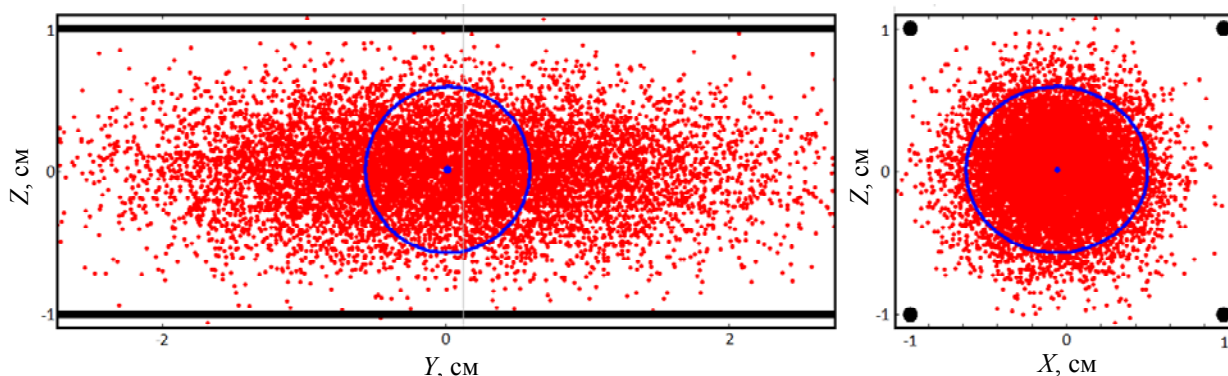


Рис. 2. Кулоновская структура из 10 000 заряженных частиц ($r_p = 1$ мкм) с зарядом $q_p = 3250$ е спустя 0,26 секунды после инжекции. Слева – вид сбоку, справа – вид с торца. Черные линии и точки – электроды ловушки.

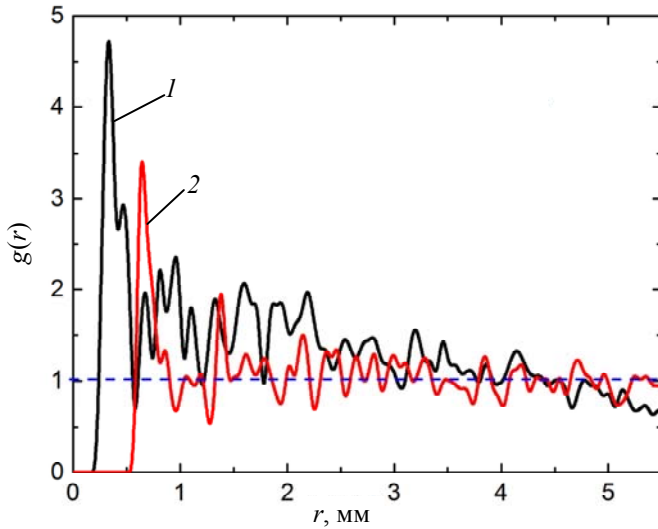


Рис. 3. Парные коррелятивные функции частиц радиуса $r_p = 1$ мкм с $q_p = 3250e$ в начале расчета (кривая 1) и спустя 0,26 секунды (кривая 2).

Для расчета внутренней энергии E и давления P системы частиц обычно используются следующие формулы статистической теории жидкого состояния вещества [13]:

$$E = N \left\{ \frac{3}{2} kT + \frac{2\pi}{v} \int_0^{\infty} \Phi(r) g(r) r^2 dr \right\} \quad (1)$$

$$P = \frac{kT}{v} \left\{ 1 - \frac{2\pi}{3vkT} \int_0^{\infty} \frac{d\Phi(r)}{dr} g(r) r^3 dr \right\},$$

где $\Phi(r)$ – кулоновский потенциал межчастичного взаимодействия, N – полное число частиц в рассмотренной сфере объема V , $v = V/N$ – объем на одну частицу.

В энергии кулоновской структуры надо учесть кинетическую и гравитационную потенциальную энергии частиц $U = E + \sum_i \left(\frac{m\tilde{v}_i^2}{2} + mgh_i \right)$,

где \tilde{v}_i – скорость движения частицы, g – ускорение свободного падения, h_i – высота частицы относительно оси y на рис. 1. Однако заметим, что в данных условиях средняя потенциальная кулоновская энергия межчастичного взаимодействия на одиннадцать порядков превосходит термическую энергию kT , а также, примерно, на три порядка превосходит кинетическую энергию движения частиц $\sum_i \frac{m\tilde{v}_i^2}{2}$ и потенциальную гравитационную энергию $\sum_i mgh_i$, поэтому главный вклад в полную энергию и давление дают вторые слагаемые в правых частях формул (1) (т. е. $U \approx E$).

На рис. 4 отображена динамика энергии (а) и давления (б) кулоновских систем, состоящих из частиц разного размера. Из анализа рис. 4 следует, что параметр неидеальности Γ , равный отношению средней энергии межчастичного взаимодействия на одну частицу к температуре, т. е. $\Gamma = U/kT$, равен, примерно, 10^9 , что свидетельствует о сильно неидеальном характере данных кулоновских систем.

Временные осцилляции энергии и давления на рис. 4 являются следствием воздействия на структуру переменного электрического поля электродинамической ловушки. После инжекции частиц в процессе выхода на стационарную пространственную конфигурацию среднее расстояние между ними возрастает, из-за чего энергия их межчастичного взаимодействия уменьшается. Это вызывает падение полной энергии системы.

Со временем кулоновская система в среднем стабилизируется, и частицы начинают совершать в основном колебательные движения около положения равновесия. В результате энергия и давление, осциллируя, стремятся к асимптотическому значению, относительно которого в дальнейшем совершают осцилляции (см. рис. 4).

Из анализа рис. 4 следует также, что с ростом размера частицы, а, следовательно, и ее заряда, энергия кулоновской структуры и ее давление на ловушку уменьшаются за счет увеличения средних межчастичных расстояний.

Возникновению кристаллической структуры заряженных частиц при таком параметре неидеальности препятствует периодическое воздействие электрического поля ловушки на кулоновскую структуру микрочастиц.

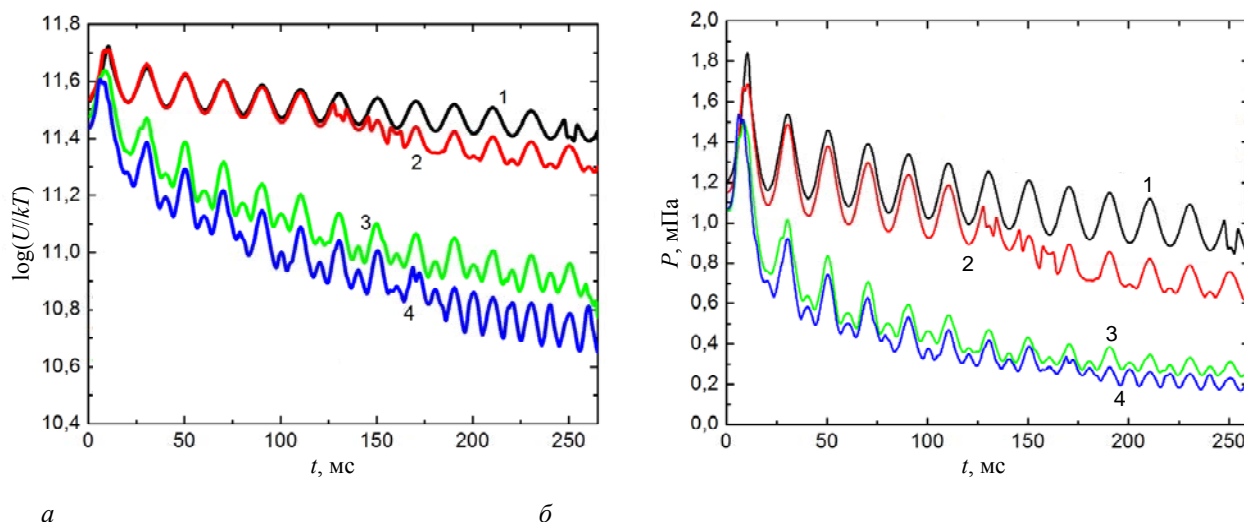


Рис. 4. Динамика энергии (а) и давления (б) кулоновских систем, состоящих из частиц разного размера. Общие параметры: кривая 1 – $r_p = 1 \text{ мкм}$, $q_p = 2750 \text{ e}$; 2 – $r_p = 1 \text{ мкм}$, $q_p = 3250 \text{ e}$; 3 – $r_p = 2 \text{ мкм}$, $q_p = 11000 \text{ e}$; 4 – $r_p = 1 \text{ мкм}$, $q_p = 13000 \text{ e}$.

Заключение

В работе с помощью метода броуновской динамики выполнено моделирование поведения сильно неидеальной кулоновской структуры микрочастиц в электродинамической ловушке. В рамках статистической теории жидкого состояния вещества проведен расчет энергии, давления, парных коррелятивных функций и параметра неидеальности. Исследовано временное поведение данных величин. Показано, что давление на ловушку кулоновской структуры одноименно заряженных микрочастиц находится в диапазоне от долей до нескольких мПа, при этом параметр неидеальности системы примерно равен $\Gamma \sim 10^9$. Как оказалось, с ростом размера частицы, а следовательно, и ее заряда, энергия кулоновской структуры и ее давление на ловушку уменьшается за счет увеличения средних межчастичных расстояний. В процессе выхода на стационарное состояние энергия и давление кулоновской структуры также уменьшаются за счет упорядочивания частиц, приводящем к увеличению средних межчастичных расстояний.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 15-08-02835.

ЛИТЕРАТУРА

1. Spyros N. P., Anthony S. W., John S. S. // J. Phys. Chem. 1995. Vol. 99. P. 9646.
2. John H. S., Spyros N. P. Atmospheric Chemistry and Physics: From Air Pollution to Climate Change. – New York: Wiley, 2006.
3. Bruce T. D. // Annual Review of Astronomy and Astrophysics. 2003. Vol. 41. P. 241.
4. Pramod Kulkarni, Paul A. B., Klaus W. Aerosol Measurement: Principles, Techniques and Applications. – New York: Wiley, 2011.
5. Lapitsky D. S., Filinov V. S., Vasilyak L. M., Syrovatka R. A., Deputatova L. V., Vladimirov V. I. and Pecherkin V. Ya. // EPL. 2015. Vol. 110. P. 15001.
6. Лапицкий Д. С., Сыроватка Р. А., Василяк Л. М., Филинов В. С., Депутатова Л. В., Владимиров В. И., Печеркин В. Я. // Прикладная физика. 2015. № 6. С. 88.
7. Lapitsky D. S. // J. Phys.: Conf. Ser. 2016. Vol. 747. P. 012037.
8. Лапицкий Д. С., Печеркин В. Я., Филинов В. С., Василяк Л. М., Владимиров В. И., Депутатова Л. В., Сыроватка Р. А. Способ удаления заряженных микрочастиц из газового потока Патент РФ № 2612292 от 06.03.2017.
9. Lapitsky D. S., Filinov V. S., Deputatova L. V., Vasilyak L. M., Vladimirov V. I. and Pecherkin V. Ya. // Contrib. Plasma Phys. 2013. Vol. 53. No. 4–5. P. 450.
10. Vasilyak L. M., Vladimirov V. I., Deputatova L. V., Lapitsky D. S., Molotkov V. I., Pecherkin V. Ya., Filinov V. S., Fortov V. E. // NJP. 2013. Vol. 15. P. 043047.
11. Lapitsky D. S., Filinov V. S., Deputatova L. V., Vasilyak L. M., Vladimirov V. I., Pecherkin V. Ya. // High Temp. 2015. Vol. 53. No. 1. P. 1.
12. Лапицкий Д. С. // Прикладная физика. 2015. № 6. С. 21.
13. Фишер И. З. // УФН. 1953. Т. 51. С. 71.
14. Tsilingiris P. // Energy Conversion and Management. 2008. Vol. 49. P. 1098.

Calculation of thermodynamic properties of a structure of charged microparticles in electrodynamic traps

D. S. Lapitsky, V. S. Filinov, L. M. Vasilyak, R. A. Syrovatka, L. V. Deputatova, V. I. Vladimirov, and V. Ya. Pecherkin

Joint Institute for High Temperatures, Russian Academy of Sciences
Bld 2, 13 Izhorskaya str., Moscow, 125412, Russia

E-mail: dmitrucho@yandex.ru; vladimir_filinov@mail.ru; vasilyak@ihed.ras.ru; syrovatkara@ihed.ras.ru; dlv@ihed.ras.ru; vld@ihed.ras.ru; vpecherkin@yandex.ru

Received July 10, 2017

By combining the brownian dynamics and statistical theory of liquid state, the thermodynamic properties of a strongly coupled Coulomb structure in the linear Paul trap were calculated. Time evolution of internal energy, pressure, coupling parameter and pair distribution functions of the Coulomb structure have been carried out.

Keywords: charged particles, electrodynamic trap, alternating electric field, oscillations, Coulomb systems, equations of state.

REFERENCES

1. N. P. Spyros, S. W. Anthony and S. S. John, *J. Phys. Chem.* **99**, 9646 (1995).
2. H. S. John and N. P. Spyros, *Atmospheric Chemistry and Physics: From Air Pollution to Climate Change* (Wiley, New York, 2006).
3. T. D. Bruce, *Annual Review of Astronomy and Astrophysics* **41**, 241 (2003).
4. Pramod Kulkarni, A. B. Paul and W. Klaus, *Aerosol Measurement: Principles, Techniques and Applications* (Wiley, New York, 2011).
5. D. S. Lapitsky, V. S. Filinov, L. M. Vasilyak, R. A. Syrovatka, L. V. Deputatova, V. I. Vladimirov and V. Ya. Pecherkin, *EPL* **110**, 15001 (2015).
6. D. S. Lapitsky, R. A. Syrovatka, L. M. Vasilyak, V. S. Filinov, L. V. Deputatova, V. I. Vladimirov, V. Ya. Pecherkin, *prikl. Fiz.*, No. 6, 88 (2015).
7. D.S. Lapitsky, *J. Phys.: Conf. Ser.* **747**, 012037 (2016).
8. D. S. Lapitsky, V. Ya. Pecherkin, V. S. Filinov, L. M. Vasilyak, V. I. Vladimirov, L. V. Deputatova, and R. A. Syrovatka, RF Patent No. 2612292, June 03, 2017.
9. D. S. Lapitsky, V. S. Filinov, L. V. Deputatova, L. M. Vasilyak, V. I. Vladimirov and V. Ya. Pecherkin, *Contrib. Plasma Phys.* **53** (4-5), 450 (2013).
10. L. M. Vasilyak, V. I. Vladimirov, L. V. Deputatova., D. S. Lapitsky, V. I. Molotkov, V. Ya. Pecherkin, V. S. Filinov and V. E. Fortov, *NJP.* **15**, 043047 (2013).
11. D. S. Lapitsky, V. S. Filinov, L. V. Deputatova, L. M. Vasilyak, V. I. Vladimirov, and V. Ya. Pecherkin, *High Temp.* **53**, 1 (2015).
12. D. S. Lapitsky, *Prikl. Fiz.*, No. 6, 21 (2015).
13. I. Z. Fisher, *Sov. Phys. Usp.* **51**, 71 (1953).
14. P. Tsilingiris, *Energy Conversion and Management* **49**, 1098 (2008).