

# Влияние конфайнмента на кристаллизацию пылевой плазмы в узких каналах

Б. А. Клумов, Г. Морфилл<sup>1)</sup>

*Max-Planck-Institut für Extraterrestrische Physik, D-85740 Garching, Germany*

Поступила в редакцию 6 марта 2008 г.

Методом молекулярной динамики исследуются трехмерные квазиравновесные конфигурации комплексной (пылевой) плазмы в узких каналах в зависимости от вида удерживающего потенциала (конфайнмента). Динамика микрочастиц описывается в рамках ланжевеновского термостата с учетом парного взаимодействия между заряженными частицами, которое описывалось экранированным кулоновским потенциалом (потенциалом Юкавы). Рассмотрены два вида конфайнмента: параболический и жесткая упругая стенка. Показано, что конфайнмент сильно влияет на кристаллизацию и локальный порядок микрочастиц в рассматриваемой системе, в частности, обнаружено появление новой квазикристаллической фазы, индуцированной конфайнментом – жесткой стенкой.

PACS: 52.27.Lw, 61.20.Ja, 64.60.Cn

В последние годы сильно вырос интерес к процессам, происходящим в плазме, содержащей микрочастицы. Такую плазму обычно называют комплексной (complex plasmas) или пылевой плазмой (dusty plasmas) (см., например, [1–5]). Интерес к пылевой плазме обусловлен, с одной стороны, ее широкой распространенностью в природе. Межзвездные облака, газопылевые скопления, планетные кольца [6], атмосферы комет [7], ионосферы [8] и магнитосферы планет (например, в ионосфере Земли – это серебристые облака [9]) – все эти объекты в той, или иной степени, являются комплексной плазмой. С другой стороны, возможность наблюдения за поведением каждой отдельной микрочастицы дает описание свойств ансамбля пылевых частиц на самом подробном, кинетическом уровне. Это делает пылевую плазму привлекательным инструментом для изучения различных фундаментальных проблем физики, например, для изучения фазовых переходов [5], для понимания природы гидродинамических неустойчивостей [10], свойств волн кристаллизации [11, 12] и др. Одной из таких проблем является поведение заряженных микро- и наночастиц в узких каналах в случае, когда межчастичное расстояние сопоставимо с шириной канала: в этом случае влияние стенок на состояние микрочастиц может быть исключительно важным (см., например, [13]). Особенности течения заряженных жидкостей в капиллярах [14], исследование фазовых переходов, индуцированных наличием конфайнмента (см., например, [15, 16]), физика на-

ножидкостей [17], проницаемость ионных каналов в биофизике [18], влияние конфайнмента на состояние гранулированных сред (см., например, [19]) – вот неполный перечень проблем, в которых исследования комплексной плазмы могут быть крайне информативны.

В лабораторных условиях комплексную/пылевую плазму традиционно получают при добавлении микрочастиц в слабоионизированную газоразрядную плазму инертных газов пониженного давления. Рекомбинация электронов и ионов на поверхности пылевых частиц приводит к их быстрой зарядке, величина заряда зависит от размера частицы и параметров плазмы, например, для типичного радиочастотного разряда в аргоне частица размером 1 мкм приобретает отрицательный заряд  $Z_d/e \sim 10^3$ , где  $e$  – заряд электрона. Такой высокий заряд микрочастицы часто приводит к сильной неидеальности пылевой компоненты, которая может находиться в широком диапазоне фазовых состояний: проявлять себя как газ, жидкость или кристалл. Кристаллическое состояние пылевой компоненты комплексной плазмы (так называемый плазменный кристалл) было экспериментально открыто в 1994 г. [20, 21], будучи предсказано теоретически в 1986 г. [22].

Из-за быстрой диффузии электронов на стенки разрядной камеры центральная область разряда заряжена положительно и является потенциальной ямой для отрицательно заряженных микрочастиц. Профиль удерживающего потенциала (конфайнмента)  $\Phi_c$  вблизи центра можно считать параболическим:  $\Phi_c(x) \propto (x - x_c)^2$ , где  $x_c$  – центр разрядной

<sup>1)</sup> G.E. Morfill.

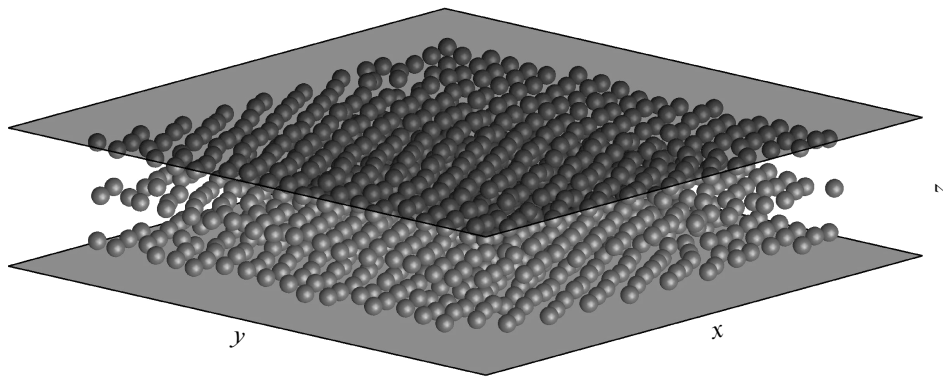


Рис.1. Геометрия рассматриваемой задачи. В начальный момент времени  $N$  микрочастицы с зарядом  $Z_d$  случайным образом распределены в пространстве между двумя плоскостями. Конфайнмент ограничивает  $z$  координату микрочастицы:  $0 \leq z \leq L_z$ , в плоскости  $x - y$  частицы распределены в области  $(L_x \times L_y)$ :  $0 \leq x, y \leq L_{x,y}$

области<sup>2)</sup>. Удерживающий потенциал измерялся, например, в [23], где было показано, в частности, что конфайнмент близок к параболическому в центральной области разряда. В приэлектродной области разряда электрическое поле растет значительно сильнее, чем в объеме, а конфайнмент близок к жесткой стенке (hard wall).

В настоящей работе нас будет интересовать, главным образом, локальный порядок микрочастиц в трехмерных узких каналах для разных видов удерживающего потенциала: параболического и жесткой стенки. Парное взаимодействие микрочастиц будем описывать экранированным кулоновским потенциалом (потенциалом Юкавы):  $\phi(r) = (Z_d/r) \exp(-r/\lambda_D)$ , где  $r$  – расстояние между частицами, а  $\lambda_D$  – характерная длина экранирования (отметим, что в [23] измерялся потенциал межчастичного взаимодействия, он оказался близок к потенциалу Юкавы). Поскольку исследуются особенности кристаллизации пылевой подсистемы, то рассматриваемая комплексная плазма находится в сильносвязанном состоянии (strongly coupled). Это означает, что параметр неидеальности пылевой подсистемы  $\Gamma = Z_d^2 \exp(-\kappa)/T_d \Delta \gg 1$ , где  $T_d$  – температура микрочастиц,  $\kappa = \Delta/\lambda_D$  – так называемый структурный параметр.

В [24] было рассмотрено влияние конфайнмента на равновесные конфигурации пылевой компоненты комплексной плазмы (парное взаимодействие между пылинками описывалось потенциалом Юкавы) в узких каналах в двумерной (2D) геометрии. В частности, было показано, что конфайнмент сильно влия-

ет на локальный порядок микрочастиц в системе; например, наличие конфайнмента – жесткой стенки индуцирует переход микрочастиц в стекловое состояние (glassy state) при больших значениях  $\Gamma$  из-за повышенной концентрации микрочастиц у стенки, в то время как для параболического конфайнмента наблюдается плазменный кристалл. Здесь мы рассматриваем подобную задачу, но уже в трехмерной геометрии.

Поведение ансамбля микрочастиц в узких 3D каналах исследуется методом молекулярной динамики (MD). Для простоты считается, что все микрочастицы имеют фиксированный заряд  $Z_d$ , парное взаимодействие пылевых частиц, как уже было сказано, описывается потенциалом Юкавы. Уравнение движения индивидуальной микрочастицы имеет вид

$$m\ddot{\mathbf{r}}_i = -Z_d \nabla \Phi_c - Z_d \sum \nabla \phi - m\gamma \dot{\mathbf{r}}_i + \mathbf{L}_i. \quad (1)$$

Слагаемые в правой части (1), помимо электростатического взаимодействия частиц, описывают торможение пылевых частиц при их столкновениях с нейтральными атомами и молекулами буферного газа (neutral drag) и случайную силу  $\mathbf{L}_i$  Ланжевена (тепловой шум, индуцированный нейтральными частицами), определяемую из  $\langle \mathbf{L}_i(t) \mathbf{L}_j(t+\tau) \rangle = 2\gamma m k_B \delta_{ij} \delta(\tau)$  при условии  $\langle \mathbf{L}_i(t) \rangle = 0$ , а также взаимодействие микрочастиц с потенциалом  $\Phi_c$  конфайнмента.

Система (1) решалась для  $N = 16000$  микрочастиц, которые в начальный момент времени были случайно распределены в узком канале. Рис.1 иллюстрирует геометрию рассматриваемой задачи. Конфайнмент ограничивает положение микрочастиц вдоль оси  $z$  ( $0 \leq z \leq L_z$ ), а в плоскости  $x - y$  частицы расположены в области  $0 \leq x, y \leq L_{x,y}$ . На боковых гранях ( $x = \{0, L_x\}$ ,  $y = \{0, L_y\}$ ) использовались периодические граничные условия. Рассматри-

<sup>2)</sup> Дополнительно для удержания пылевой компоненты могут использоваться различные приспособления, например, металлические кольца, особая топология электродов и др.

вались два варианта конфайнмента, который являлся либо параболическим,  $\Phi_c(z) \propto (z - L_z/2)^2$ , либо жесткой упругой стенкой  $\Phi_c(z) \propto \exp(\frac{z-L_z}{\Delta_w})$  при  $z > L_z$  и  $\Phi_c(z) \propto \exp(-z/\Delta_w)$  для  $z < 0$ , где пространственный масштаб  $\Delta_w$  определяет жесткость стенки, в настоящих расчетах использовалась величина  $\Delta_w \simeq \Delta/3$ .

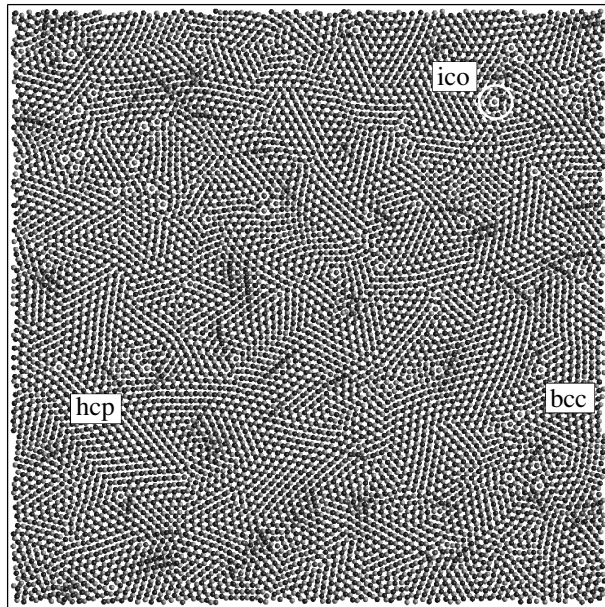


Рис.2. Кристаллизация микрочастиц, взаимодействующих посредством потенциала Юкавы, в узком канале (вид сверху) в случае параболического конфайнмента. Микрочастицы формируют три слоя АВС. Частицы каждого слоя имеют свой цвет: А – черный, В – серый, С – белый. Видно, что слой С практически полностью экранируется слоем А; доминирующим типом кристаллической решетки в данном случае является hcr. Заметна также и bcc-фаза. Небольшое ( $\sim 1\%$ ) число кластеров обладает икосаэдрической (ico) симметрией (fivefold symmetry)

Известно, что в термодинамическом пределе неограниченная система частиц, парное взаимодействие которых описывается потенциалом Юкавы, в зависимости от параметра неидеальности  $\Gamma$  и структурного параметра  $\kappa$  может иметь только два типа кристаллической решетки: гранцентрированная кубическая (fcc, для больших  $\kappa$ ) и объемноцентрированная кубическая (bcc, для малых  $\kappa$ ) (см., например, [5]). В неравновесной системе Юкавы возможно образование гексагональной плотноупакованной фазы (hcr, см., например, [12]). Это связано с тем, что энергетически цены образования фаз hcr и fcc очень близки [25]. Для идентификации fcc/hcr/bcc-типов решетки достаточно знать положение

трех АВС близлежащих слоев кристалла. В этом случае тип образовавшейся кристаллической решетки может быть определен визуально. Поэтому здесь рассматривается поведение системы Юкавы, которая на стадии установления состоит из трех слоев.

Некоторые результаты моделирования системы Юкавы представлены на рис.2 и 3. На них показано

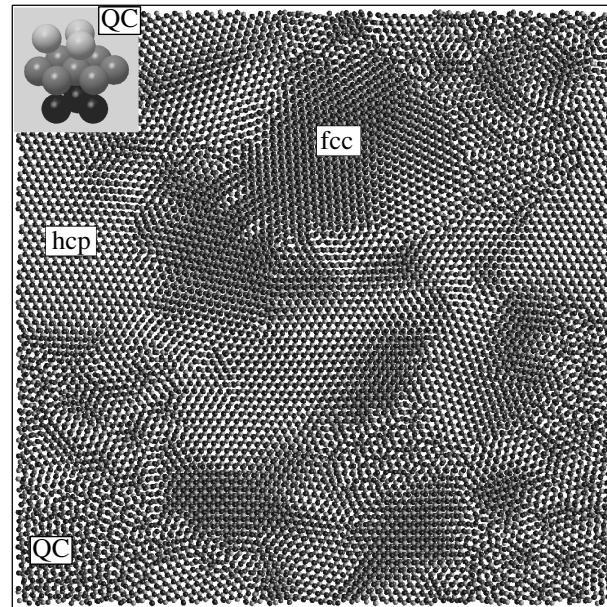


Рис.3. Кристаллизация микрочастиц в узком канале в случае конфайнмента – жесткой стенки. Хорошо видно присутствие областей, имеющих hcr и fcc типы кристаллической решетки. Видно заметное число кластеров, имеющих квазикристаллическую (QC) фазу. На вставке показана элементарная ячейка QC-фазы, которая является искаженной hcr/fcc элементарной ячейкой

положение микрочастиц в плоскости  $x - y$  (показаны все три слоя частиц) для разных видов конфайнмента. Параметры системы, используемые в вычислениях, приводятся ниже: размер и заряд микрочастицы  $a \simeq 1 \mu\text{м}$ ,  $Z_d/e \simeq 3 \cdot 10^3$ ,  $\kappa \simeq 2 \div 3$ , плотность нейтрального газа  $\rho_g \sim 10^{-7} \text{ г/см}^3$ . Рис.2 соответствует случаю параболического конфайнмента, рис.3 – случаю конфайнмента – жесткой стенки. Оба варианта показывают квазистационарную кристаллическую фазу системы Юкавы при значении параметра неидеальности  $\Gamma \sim 10^4$ . В обоих случаях цвет частицы соответствует определенному слою (color-coded by  $z$ ). Видно, что параболический конфайнмент приводит в основном к образованию кристаллитов с расположением слоев АВА (третий слой экранирован первым), что характерно для hcr- или bcc-фазы. Относительно небольшое число кластеров ( $\sim 1\%$ ) обладает икосаэд-

рической симметрией; микрочастица из центрального слоя имеет 5 соседей у границы системы (fivefold symmetry). Отметим, что указанный тип решетки индуцирован конфайнментом. В случае, если конфайнмент – жесткая упругая стенка (рис.3), хорошо видны области с расположением слоев АВА (hcr/bcc-фазы) и АВС (видны частицы третьего слоя). Заметная часть пылевых частиц имеет гранцентрированную (fcc) кристаллическую решетку и гексагональную плотноупакованную (hcr). Очень интересным представляется появление новой квазикристаллической (QC) фазы для случая конфайнмента – жесткой стенки. Элементарная ячейка указанной фазы показана на вставке к рис.3 и представляет собой hcr/fcc-фазу, искаженную вращением верхнего и нижнего слоев относительно среднего слоя.

На рис.4 представлено распределение плотности частиц и их интегральное число в каждом слое для

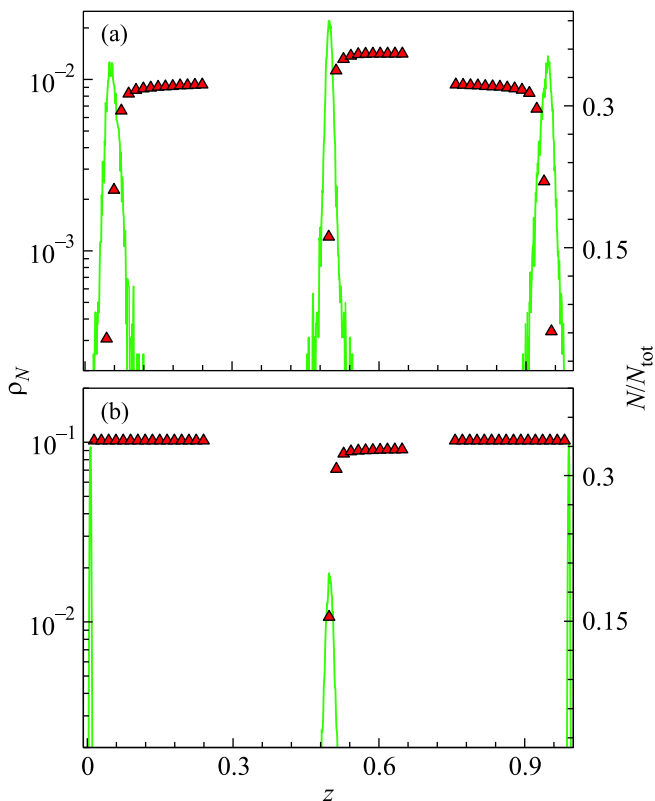


Рис.4. Относительная плотность микрочастиц  $\rho_N$  в зависимости от безразмерной координаты  $\tilde{z} \equiv z/L_z$  для двух типов конфайнмента: параболического (а) и жесткой упругой стенки (b). Также представлены интегральное число частиц  $N/N_{tot}$  в каждом слое и зависимость  $N/N_{tot}(\tilde{z})$  (светлый треугольник)

рассмотренных двух видов конфайнмента. Видно, что как и в 2D случае [24], для случая конфайнмента – жесткой стенки концентрация микрочастиц у

гранич больше, чем в центре. Для параболического конфайнмента ситуация обратная. Такое распределение плотности является основной причиной указанных особенностей кристаллизации.

На рис.5 представлена парная корреляционная функция  $g(r)$  (усредненная по всем частицам в слое,

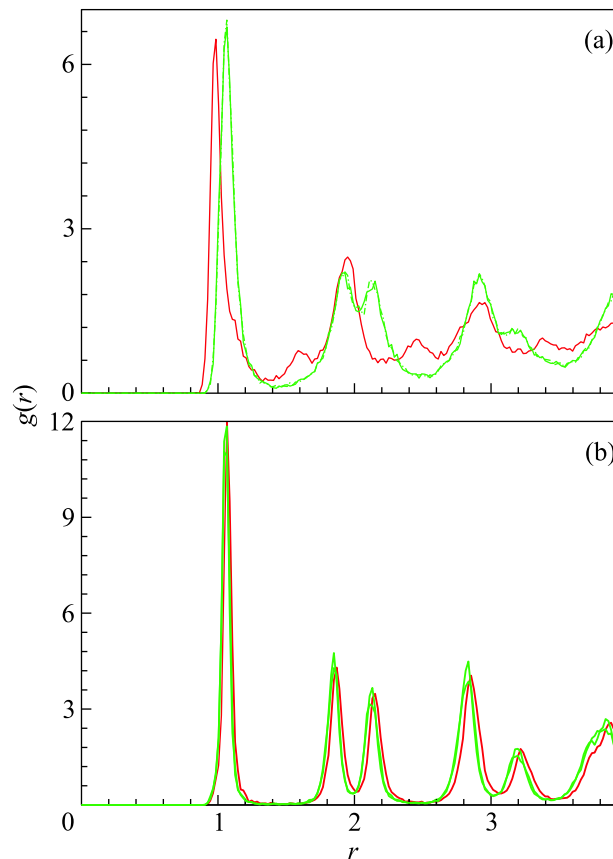


Рис.5. Парная корреляционная функция  $g(r)$  трехслойной системы Юкавы для разных видов конфайнмента: параболического (а) и жесткой стенки (b). Показаны распределения  $g(r)$  для центрального слоя (сплошная линия). Для верхнего и нижнего слоев (пунктир, штрих-пунктир) парные корреляционные функции практически идентичны для обоих видов конфайнмента

нормированная радиальная плотность микрочастиц (radial distribution function)) рассмотренной трехслойной системы микрочастиц Юкавы для разных видов конфайнмента: параболического (а) и жесткой стенки (b). Показаны распределения  $g(r)$  для центрального слоя (сплошная линия). Для верхнего и нижнего слоев (пунктир, штрих-пунктир) парные корреляционные функции практически идентичны для обоих видов конфайнмента. Отметим сильное отличие  $g(r)$  центрального слоя от соседних в случае параболического конфайнмента. По сдвигу первого максимума  $g(r)$  хорошо видно, что концентра-

ция частиц в центральном слое выше, чем в соседних слоях для случая параболического конфайнмента. На рис.6 представлена зависимость плотности микро-

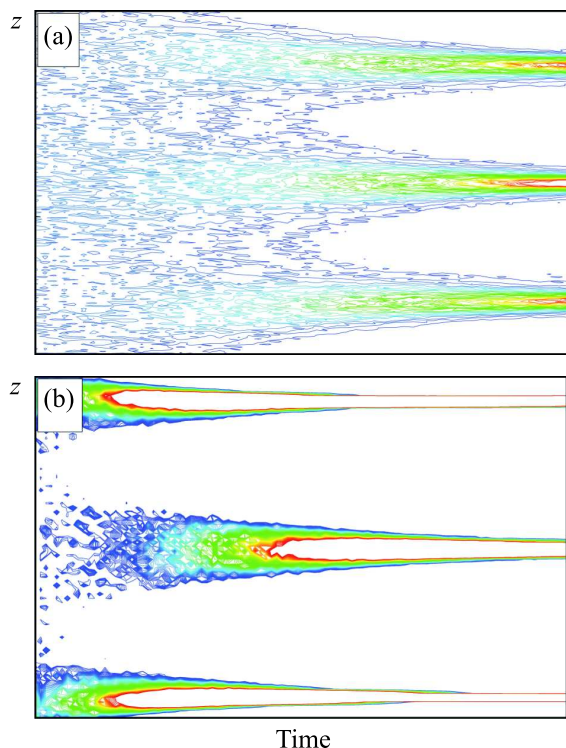


Рис.6. Пространственно-временная ( $z - t$ ) зависимость относительной плотности микрочастиц в узком канале для разных видов конфайнмента: параболического (a) и жесткой стенки (b)

частиц от времени для параболического конфайнмента (a) и конфайнмента – жесткой стенки (b). В обоих случаях видно формирование трех слоев из первоначально случайного распределения микрочастиц, причем в случае конфайнмента – жесткой стенки сначала кристаллизуются частицы у границы ( $z = 0, L_z$ ), для параболического же конфайнмента все три слоя формируются практически одновременно. Таким образом, вид конфайнмента оказывает заметное влияние на локальный порядок и тип кристаллической решетки у системы микрочастиц, взаимодействующих посредством потенциала Юкавы, в узких каналах. Отметим, что конфайнмент приводит к появлению новых типов кристаллической решетки (гранецентрированная, квазикристаллическая и икосаэдрическая фазы), отсутствующих на фазовой диаграмме системы Юкавы.

В настоящей работе с использованием метода молекулярной динамики численно исследовалось влияние удерживающего потенциала (конфайнмента) на поведение/кристаллизацию системы частиц Юкавы

в трехмерных узких каналах. Рассмотрены случаи конфайнмента – параболического и жесткой стенки, реализующие модели “мягкого” и “жесткого” удерживающих потенциалов. Указанные виды конфайнмента приводят к разному поведению плотности микрочастиц у границ, что, в свою очередь, оказывает сильное влияние на локальный порядок и тип кристаллической решетки в такой системе, в частности, в случае конфайнмента – жесткой стенки наблюдается появление новой стабильной квазикристаллической фазы. Таким образом подтверждается принципиальная возможность контроля над поведением/течением комплексной плазмы в узких каналах, что может быть крайне важным при исследовании/использовании микро/наножидкостей и наноматериалов.

1. V.N. Tsytovich, Phys. Usp. **40**, 53, (1997).
2. P.K. Shukla and A.A. Mamun, *Introduction to Dusty Plasmas Physics*, IOP, 2002.
3. V.E. Fortov et al., Phys. Usp. **47**, 447 (2004).
4. S.V. Vladimirov and K. Ostrikov, Phys. Rep. **393**, 175 (2004).
5. V.E. Fortov et al., Phys. Rep. **421**, 1 (2005).
6. M. Horanyi et al., Rev. Geophys. **42**, RG4002 (2004).
7. B.A. Klumov, S.V. Vladimirov, and G.E. Morfill, JETP Lett. **85**, 478 (2007).
8. B.A. Klumov, S.I. Popel, and G.E. Morfill, JETP **100**, 152 (2005).
9. B.A. Klumov, S.V. Vladimirov, and G.E. Morfill, JETP Lett. **82**, 632 (2005).
10. G.E. Morfill et al., Phys. Rev. Lett. **92**, 175004 (2004).
11. M. Rubin-Zuzic et al., Nature Physics **2**, 181 (2006).
12. B.A. Klumov, M. Rubin-Zuzic, and G.E. Morfill, JETP Lett. **84**, 542 (2006).
13. L.W. Teng, P.S. Tu, L.I., Phys. Rev. Lett. **90**, 245004 (2003).
14. R.D. Deegan et al., Nature **389**, (6653), 827 (1997).
15. H.K. Christenson, J. Phys.: Condens. Matter. **13**, R95-R133 (2001).
16. C. Alba-Simionesco et al., J. Phys.: Condens. Matter. **18**, R15-R68 (2006).
17. L.A. Pozhar, Phys. Rev. E **61**, 1432 (2000).
18. D.A. Doyle et al., Science **280**, 69, 5360 (1998).
19. M.G. Clerck et al., Nature Physics, doi:10.1038/nphys884 (2008).
20. J.H. Chu, L.I., Phys. Rev. Lett. **72**, 4009 (1994).
21. H. Thomas et al., Phys. Rev. Lett. **73**, 652 (1994).
22. H. Ikezi, Phys. Fluids **29**, 1764 (1986).
23. U. Konopka, G. Morfill, and L. Ratke, Phys. Rev. Lett. **84**, 891 (2000).
24. B.A. Klumov and G.E. Morfill, JETP Lett. **85**, 498 (2007).
25. S. Hamaguchi, R.T. Farouki, and D.H.E. Dubin, Phys. Rev. E **56**, 4671 (1997).