

Структурные свойства комплексной (пылевой) плазмы при кристаллизации и плавлении

Б. А. Клумов⁺*, Г. Е. Морфилл⁺

⁺Max-Planck-Institut für Extraterrestrische Physik, Garching, Germany

*ОИВТ РАН, Ижорская 13, Москва, Россия

Поступила в редакцию 11 августа 2009 г.

Методом молекулярной динамики исследуется изменение локального порядка ограниченной комплексной (пылевой) плазмы при ее кристаллизации и плавлении. Динамика микрочастиц рассматривается в рамках ланжевеновского термостата, парное взаимодействие между заряженными частицами описывается экранированным кулоновским потенциалом (потенциалом Юкавы) с конфайнментом – жесткой упругой стенкой. Показано, что начало кристаллизации такой системы сопровождается образованием кластеров с гексагональной плотной упаковкой (hcp), заметная часть которых впоследствии трансформируется в гранецентрированную кубическую фазу (fcc). Образовавшийся при кристаллизации плазменный кристалл состоит из метастабильной hcp-фазы, fcc-кластеров и небольшой доли кластеров, имеющих объемно-центрированную кубическую (bcc) кристаллическую решетку. При повышении температуры термостата, начиная с некоторого порогового значения, наблюдается резкое уменьшение fcc/bcc-кластеров, что является важным индикатором начала плавления плазменного кристалла.

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

В последнее время значительно вырос интерес к процессам, происходящим в плазме, содержащей микрочастицы. Такую плазму обычно называют комплексной или пылевой плазмой (см., например, [1, 2]). Интерес к пылевой плазме обусловлен, с одной стороны, ее широкой распространенностью в природе. Межзвездные облака, газопылевые скопления, планетные кольца [3], атмосферы комет [4], ионосферы и магнитосферы планет – все эти объекты в той или иной степени являются комплексной плазмой, при этом пылевые частицы часто оказывают определяющее влияние на состояние системы, в которой они находятся. Например, образующиеся в запыленной холодной верхней атмосфере Земли серебристые облака [5] являются пылевыми структурами, которые определяют ионизационные свойства мезосферы. Пылевые выбросы (ejecta), образующиеся при высокоскоростном столкновении между телами Солнечной системы, дают важную информацию о химическом составе ударника и мишени [6], и т.д. С другой стороны, современные лабораторные эксперименты дают возможность проследить за поведением каждой отдельной микрочастицы, что 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 [7, 8], для

понимания природы гидродинамических неустойчивостей [9], свойств волн кристаллизации [10] и др. Одной из таких важных проблем является изменение локального порядка пылевой компоненты комплексной плазмы при ее плавлении или кристаллизации, которая и будет обсуждаться в настоящей статье. Отметим, что в настоящее время технически возможно определить x, y, z координаты для $N \sim 10^5$ микрочастиц за характерное время $\tau_s \simeq 1 \div 10$ с [11–13], которое пока превышает характерные времена указанных фазовых превращений в комплексной плазме. Уменьшение τ_s на порядок позволит экспериментально исследовать кинетику плавления и кристаллизации комплексной плазмы, и мы надеемся, что это произойдет уже в ближайшем будущем.

В лабораторных условиях комплексную (пылевую) плазму традиционно получают при добавлении микрочастиц в слабоионизированную низкотемпературную газоразрядную плазму инертных газов пониженного давления. Рекомбинация электронов и ионов на поверхности микрочастиц приводит к их быстрой зарядке; величина заряда зависит от размера частицы и параметров плазмы, например, для обычного радиочастотного разряда в аргоне частица размером $a \simeq 1$ мк 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 мо-

жет находиться в широком диапазоне фазовых состояний: проявлять себя как газ, жидкость или кристалл. Кристаллическое состояние пылевой компоненты комплексной плазмы (плазменный кристалл) было экспериментально открыто в 1994 г. [14, 15], будучи предсказано теоретически в 1986 г. [16].

Из-за быстрой диффузии электронов на стенки разрядной камеры центральная область газового разряда заряжена положительно и является потенциальной ямой (конфайнментом) для отрицательно заряженных микрочастиц. Профиль удерживающего потенциала в центральной области разряда близок к параболическому [17]. В приэлектродной же области разряда электрическое поле растет значительно сильнее, чем в центре, и в этом случае конфайнмент может быть описан как жесткая упругая стенка.

В настоящей работе нас будет интересовать, главным образом, изменение локальных свойств трехмерной комплексной плазмы в процессе ее кристаллизации/плавления. Парное взаимодействие микрочастиц описывается, для простоты, экранированным кулоновским потенциалом¹⁾ (потенциалом Дебая-Хюккеля или Юкавы):

$$\phi(r) = (Z_d/r) \exp(-r/\lambda_D), \quad (1)$$

где r – расстояние между частицами, а λ_D – характерная длина экранирования. Поскольку исследуются особенности кристаллизации/плавления, то рассматриваемая комплексная плазма является сильно-неидеальной. Это означает, что параметр неидеальности указанной пылевой подсистемы

$$\Gamma \equiv \frac{Z_d^2}{T_d \Delta} \exp(-\kappa) \gg 1, \quad (2)$$

где T_d – температура микрочастиц, Δ – среднее межчастичное расстояние, $\kappa = \Delta/\lambda_D$ – структурный параметр. Поведение ансамбля микрочастиц исследуется методом молекулярной динамики (МД). Для простоты считается, что все микрочастицы имеют фиксированный размер $a \approx 1$ мк и заряд $Z_d \approx 3 \cdot 10^3$. Уравнения движения отдельной микрочастицы имеют вид

$$m\ddot{\mathbf{r}}_i = -Z_d \nabla \Phi_c - Z_d \sum \nabla \phi - m\gamma \dot{\mathbf{r}}_i + \mathbf{L}_i. \quad (3)$$

Слагаемые в правой части (3), помимо электростатического взаимодействия частиц, описывают торможение пылевых частиц при их столкновениях

¹⁾ В [17] измерялся потенциал межчастичного взаимодействия в комплексной плазме, который оказался близок к потенциалу Юкавы.

с нейтральными атомами и молекулами буферного газа и случайную силу \mathbf{L}_i Ланжевена (тепловой шум, индуцированный нейтралами), определяемую из $\langle \mathbf{L}_i(t) \mathbf{L}_j(t + \tau) \rangle = 2\gamma m k_B \delta_{ij} \delta(\tau)$, при условии нулевого среднего значения $\langle \mathbf{L}_i(t) \rangle = 0$, а также взаимодействие микрочастиц с потенциалом Φ_c конфайнмента. Система (3) реализует так называемый ланжевенский термостат, поскольку на больших временах температуры газа и пылевых частиц сравниваются.

Система (3) решалась для $N = 8000$ микрочастиц, случайно распределенных в начальный момент времени в кубе размером L . Конфайнмент ограничивает положение микрочастиц вдоль оси z ($-L/2 \leq z \leq L/2$). На боковых гранях куба использовались периодические граничные условия. Электрическое поле конфайнмента экспоненциально растет для $|z| > L/2$ с характерным пространственным масштабом $d_w \simeq \Delta/3$, не позволяя микрочастицам уходить за пределы расчетной области на расстояния $l > d_w$. Остальные параметры моделирования были выбраны близкими к реальным экспериментам: $\kappa \simeq 1 \div 3$, давление буферного газа $p_g \simeq 10 \div 100$ Па и его температура $T_g \sim 100 \div 1000$ К, плотность микрочастиц $\rho_d \approx 1.4$ г/см³. Благодаря трению, такая система на больших временах (когда $T_d \approx T_g$) кристаллизуется с параметром неидеальности $\Gamma \sim 10^3 \div 10^5$.

Для определения локального порядка в системе микрочастиц удобно использовать метод локальных вращательных инвариантов [18]. В рамках этого подхода для каждой i -той частицы сначала определяются $N_b(i)$ ближайших соседей, для нахождения которых обычно используются методы симплексов Делоне и ячеек Вороного (Voronoi cell), при этом N_b обычно не превышает числа $N_m \simeq \frac{4}{3} \pi r_m^3 \frac{N}{V}$, где $V = L^3$ – объем, занимаемый микрочастицами, N – полное число частиц в системе, r_m – расстояние до первого минимума парной корреляционной функции $g(r)$, определяемой из

$$g(r) = \frac{L^3}{N^2} \left\langle \sum_i^N \sum_{j \neq i}^N \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{ij}) \right\rangle. \quad (4)$$

Векторы \mathbf{r}_{ij} , соединяющие i -частицу с ближайшими соседями ($j=1, N_b$), позволяют определить локальный ориентационный параметр $q_{lm}(i)$ для каждой микрочастицы:

$$q_{lm}(i) = \frac{1}{N_b(i)} \sum_{j=1}^{N_b(i)} Y_{lm}(\theta_j, \phi_j), \quad (5)$$

где $Y_{lm}(\theta, \phi)$ – сферические гармоники, θ, ϕ – угловые координаты j -й частицы, определяемые вектором \mathbf{r}_{ij} .

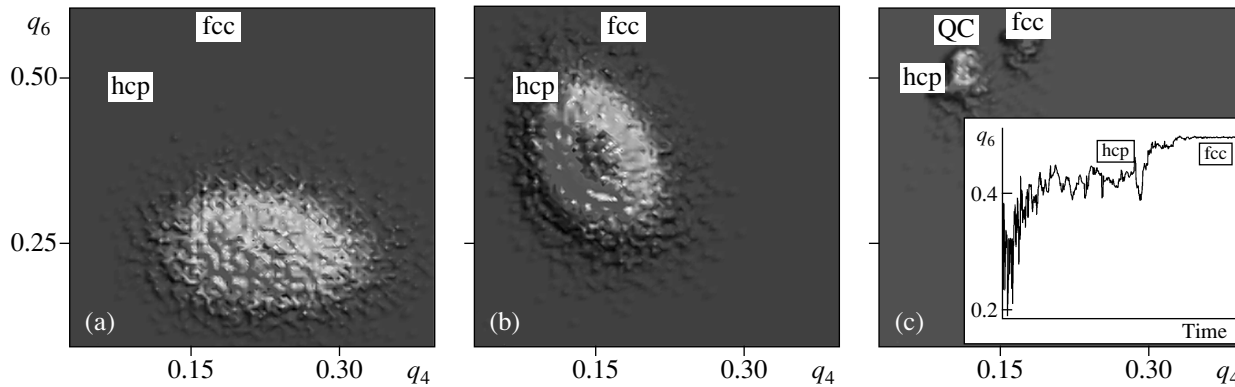


Рис.1. (Color online) Распределение микрокластеров на плоскости вращательных инвариантов q_4 – q_6 , демонстрирующее структурные свойства ограниченной системы Юкавы на разных стадиях кристаллизации: начальное некоррелированное состояние ансамбля частиц (а), стекольное состояние большинства частиц, появление предвестников кристаллизации – hcp-подобных кластеров (б), практически полная кристаллизация системы микрокластеров (с). Вставка показывает временную эволюцию параметра q_6 для характерной fcc-подобной микрокластеры. Вращательные инварианты q_4 , q_6 вычислены с $N_b = 12$

Используя значения $q_{lm}(i)$, которые зависят от выбора системы координат (и поэтому являются мало пригодными с точки зрения определения локального ориентационного порядка), для каждой микрокластеры можно вычислить вращательные инварианты второго рода $q_l(i)$ рода, определяемые из

$$q_l(i) = \left(\frac{4\pi}{(2l+1)} \sum_{m=-l}^{m=l} |q_{lm}(i)|^2 \right)^{1/2}. \quad (6)$$

Важно отметить, что каждый тип кристаллической решетки имеет свой уникальный набор q_l . Это дает возможность определить наблюдаемую кристаллическую структуру, сравнивая рассчитанные значения q_l для каждой микрокластеры с величинами q_l^{id} для идеальных решеток.

Для идентификации кристаллической структуры обычно используют вращательные инварианты второго рода q_4 , q_6 , которые для совершенных кристаллов fcc/hcp/ico/bcc могут быть вычислены достаточно легко (см., например, [18, 19]). Для кластеров fcc/hcp/ico число ближайших соседей у каждой частицы $N_b = 12$ и указанные инварианты равны соответственно: для гранецентрированной кубической решетки (fcc): $q_4^{\text{fcc}} = 0.1909$, $q_6^{\text{fcc}} = 0.5745$; для гексагональной плотноупакованной фазы (hcp): $q_4^{\text{hcp}} = 0.0972$, $q_6^{\text{hcp}} = 0.4847$; для икосаэдрической фазы (ico): $q_4^{\text{ico}} = 0$, $q_6^{\text{ico}} = 0.6633$.

Высокие значения параметра q_6^{cr} для всех рассмотренных типов кристаллической решетки позволяют изучать начальные стадии нуклеации/кристаллизации в различных системах [20]. Отметим, что для слабокоррелированной системы

частиц (газ/жидкость) среднее значение $\langle q_6 \rangle \simeq N_b^{-1/2}$ и значительно меньше q_6^{cr} , например, для $N_b = 12$ величина $\langle q_6 \rangle \approx 0.29$.

Для объемно-центрированной кубической решетки (bcc) в случае $N_b = 8$ (то есть когда рассматриваемая кристаллическая решетка является простой кубической (simple cubic)) $q_4^{\text{sc}} = 0.5092$, $q_6^{\text{sc}} = 0.6285$. Для определения кластеров bcc часто бывает важным положение второй оболочки, находящейся на небольшом расстоянии $((2/\sqrt{3}-1)\Delta \simeq 0.15\Delta)$ от первой. В этом случае $N_b = 14$ и $q_4^{\text{bcc}} = 0.0363$, а $q_6^{\text{bcc}} = 0.510$.

На рис.1 представлены распределения микрокластеров на плоскости $q_4 - q_6$ (вычисленных для $N_b = 12$) на разных стадиях кристаллизации ограниченной системы Юкавы. Представлены начальное некоррелированное состояние ансамбля частиц (а), промежуточное стекольное состояние (б) и практически полная кристаллизация системы микрокластеров (с). Таким образом, если рассматривать кристаллизацию ограниченной системы Юкавы на плоскости $q_4 - q_6$, то указанные распределения демонстрируют универсальный путь, который система микрокластеров проходит в процессе кристаллизации. При этом кристаллизованная система Юкавы состоит, главным образом из hcp и fcc кластеров (с заметным преобладанием hcp фазы) и относительно незначительной фракцией, состоящей из bcc кластеров. Вставка на рис.1с показывает типичную зависимость от времени параметра q_6 для микрокластеры, ставшей в процессе кристаллизации fcc-подобной частицей, то есть кинетику образования fcc-частицы. Хорошо видно начальное некоррелированное ($q_6 < 0.4$) поведение микро-

частицы (частица часто меняет ближайших соседей на этой стадии), затем микрочастица превращается в hcp-подобную частицу (ближайшие соседи уже не меняются, а только меняется их конформация), и затем наблюдается трансформация hcp-частицы в fcc-подобную частицу.

Более детальное распределение частиц в зависимости от величины только одного вращательного инварианта q_6 на разных стадиях кристаллизации представлено на рис.2. Отметим образование стабильной

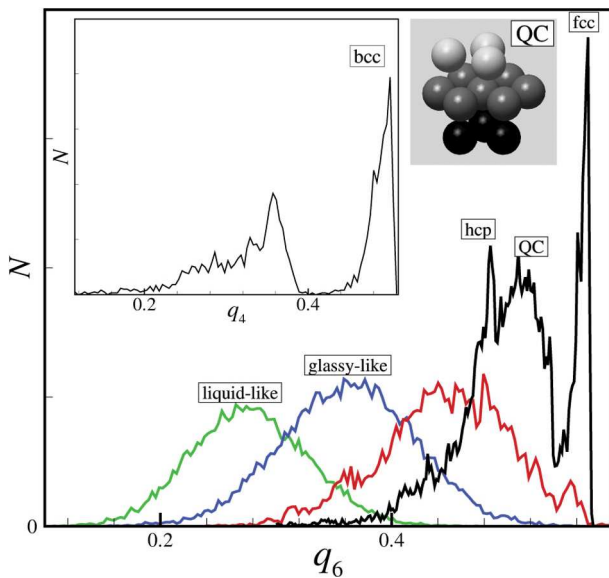


Рис.2. (Color online) Распределение частиц в зависимости от величины вращательного инварианта q_6 на разных стадиях кристаллизации. Показаны начальное некоррелированное состояние, слабокоррелированное стекловидное состояние, начало кристаллизации и конечное состояние – практически полная кристаллизация системы микрочастиц. В последнем случае, пик распределения между hcp и fcc типами решеток ($q_6 \approx 0.52$) соответствует стабильной квазикристаллической (QC) фазе (12 ближайших соседей QC фазы представлены на вставке). Параметр q_6 вычислен для $N_b = 12$. На вставке также представлено распределение микрочастиц в зависимости от параметра q_4 , вычисленного для $N_b = 8$. Пик распределения при $q_4 \approx 0.5$ указывает на наличие bcc кластеров в системе

квазикристаллической фазы (QC) (соответствующий пик в указанном распределении находится между hcp и fcc типами решеток с $q_6 \approx 0.52$, а тип QC решетки является торсионной модификацией hcp или fcc фазы, впервые обнаруженной в [19], представлен на вставке к рис.2). На другой вставке к рис.2 представлено распределение микрочастиц в зависимости от параметра q_4 , вычисленного для $N_b = 8$, демон-

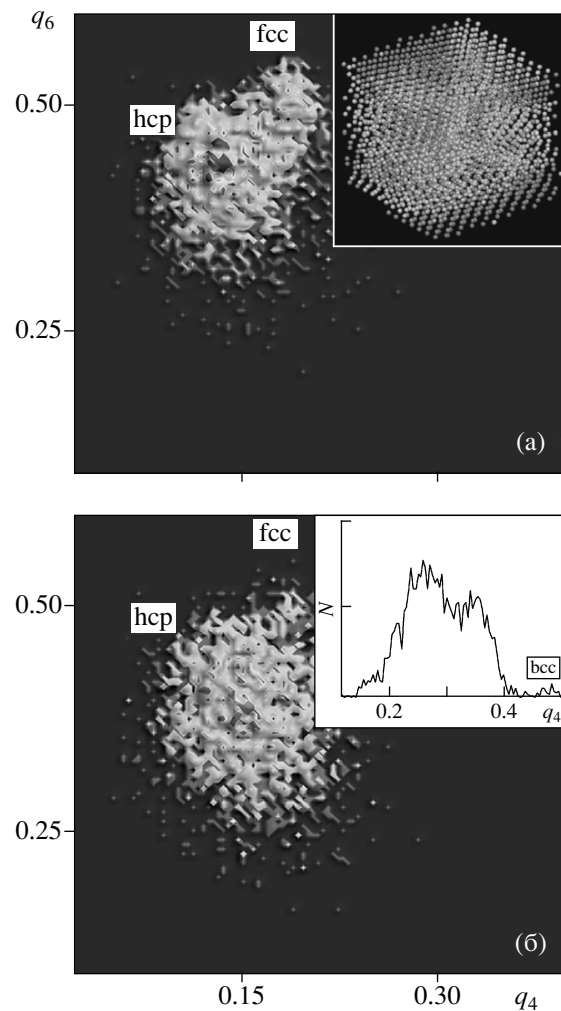


Рис.3. (Color online). Распределение микрокластеров на плоскости вращательных инвариантов q_4 – q_6 , отражающее структурные свойства ограниченной системы Юкавы на разных стадиях плавления: начальная стадия плавления – начало исчезновения кластеров fcc (а), стекловидное состояние системы микрокластеров (б). Вращательные инварианты q_4 и q_6 вычислены с $N_b = 12$. На вставке к (а) показана кристаллизованная система Юкавы, цвет микрокластеры зависит от величины q_6 (изменение цвета от зеленого к красному соответствует вариациям $q_6 \sim 0.45 \div 0.57$). На вставке к (б) представлено распределение микрокластеров в зависимости от параметра q_4 , вычисленного для $N_b = 8$, указывающее на практически полное исчезновение bcc фазы в системе

стрирующее наличие bcc фазы в кристаллизованной системе Юкавы.

Плавление полученного при MD моделировании плазменного кристалла также рассчитывалось методом молекулярной динамики, при этом температура ланжевенновского термостата T_g поднималась на небольшую величину, $\delta T_g \ll T_d$, и последующий рас-

чет прекращался, когда система микрочастиц переходила в квазиравновесное состояние с новой температурой $T_g + \delta T_g$. Некоторые особенности локального порядка при плавлении системы Юкавы представлены на рис.3а, б. На рис.3а показана начальная стадия плавления плазменного кристалла (см. рис.1с). При незначительном увеличении температуры термостата T_g (или уменьшении параметра неидеальности Γ) fcc и bcc кластеры практически полностью исчезают (см. рис.3б и вставку на рис.3). Таким образом, концентрация fcc/bcc частиц в системе может рассматриваться как новый важный параметр, чувствительный к началу фазового перехода – плавления системы. Еще одной важной особенностью кристаллизации/плавления такой системы является наличие гистерезиса на плоскости $q_4 - q_6$: маршруты плавления и кристаллизации не совпадают. При плавлении величина q_6 уменьшается без заметного изменения параметра q_4 , в отличие от кристаллизации, когда растут и q_6 , и q_4 .

В настоящей работе были исследованы вариации локального порядка ограниченной системы Юкавы на разных стадиях кристаллизации и плавления. Показано, что в случае конфайнмента – жесткой упругой стенки, на начальной стадии кристаллизации образуются hcr-подобные кластеры, заметная часть из которых трансформируется на более поздней стадии кристаллизации в fcc-подобные кластеры. Более того, кластеры fcc образуются только из кластеров hcr. Обсуждение кинетики образования fcc фазы выходит за рамки данной статьи и будет обсуждаться в последующих публикациях. Наблюдается также незначительное количество bcc кластеров в кристаллизованной системе Юкавы. При начале плавления плазменного кристалла первыми исчезают fcc и bcc фазы при незначительном уменьшении параметра неидеальности Γ . Это означает, что концентрация fcc/bcc кластеров может быть использована как аль-

тернативный и важный индикатор фазового перехода (плавления) в ограниченной системе Юкавы.

1. P. K. Shukla and A. A. Mamun, *Introduction to Dusty Plasmas Physics*, IOP, 2002.
2. V. E. Fortov et al., *Phys. Rep.* **421**, 1 (2005).
3. M. Horanyi et al., *Rev. Geophys.* **42**, RG4002 (2004).
4. B. A. Klumov, S. V. Vladimirov, and G. E. Morfill, *JETP Lett.* **85**, 478 (2007).
5. B. A. Klumov, S. I. Popel, and R. Bingham, *JETP Lett.* **72**, 364 (2000); B. A. Klumov, S. I. Popel, and G. E. Morfill, *JETP* **100**, 152 (2005); B. A. Klumov, S. V. Vladimirov, and G. E. Morfill, *JETP Lett.* **82**, 632 (2005).
6. V. E. Fortov et al., *Phys. Usp.* **166**, 391 (1996); B. A. Klumov et al., *Phys. Usp.* **48**(7), (2005).
7. G. Morfill et al., *Contrib. Plasma Phys.* **44**, 450 (2004); G. Morfill et al., *Phys. Scripta T* **107**, 59 (2004).
8. M. O. Robbins et al., *J. Chem. Phys.* **88**, 3286 (1988).
9. G. Morfill et al., *Phys. Rev. Lett.* **92**, 175004 (2004).
10. M. Rubin-Zuzic et al., *Nature Physics* **2**, 181 (2006); B. A. Klumov, M. Rubin-Zuzic, and G. E. Morfill, *JETP Lett.* **84**, 542 (2006).
11. M. Zuzic et al., *Phys. Rev. Lett.* **85**, 4064 (2000).
12. O. Arp et al., *Phys. Rev. Lett.* **93**, 165004 (2004).
13. S. Mitic et al., *Phys. Rev. Lett.* **101**, 125002 (2008).
14. J. H. Chu and L. I., *Phys. Rev. Lett.* **72**, 4009 (1994).
15. H. Thomas et al., *Phys. Rev. Lett.* **73**, 652 (1994).
16. H. Ikezi, *Phys. Fluids* **29**, 1764 (1986).
17. U. Konopka, G. Morfill, and L. Ratke, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 891 (2000).
18. P. J. Steinhardt, D. R. Nelson, and M. Ronchetti, *Phys. Rev. B* **28**, 784 (1983).
19. B. A. Klumov and G. E. Morfill, *JETP Lett.* **85**, 498 (2007); **87**, 477 (2008); *JETP* (2008).
20. S. Auer and D. Frenkel, *J. Chem. Phys.* **120**, 3015 (2004).