

МЕТОДИЧЕСКИЕ ЗАМЕТКИ

О критериях плавления комплексной плазмы

Б.А. Клумов

В настоящей заметке рассматриваются критерии плавления плазменного кристалла, открытого в пылевой плазме в 1994 г. Отдельно рассматриваются критерии плавления трёхмерных (3D) и двумерных систем (2D). В 3D случае указанные критерии базируются на свойствах локального порядка в системе микрочастиц, и параметры порядка конструируются из кумулянтов распределения микрочастиц по различным вращательным инвариантам. Для построения предложенных критериев плавления используется статическая информация о пространственном положении микрочастиц: достаточно всего лишь нескольких мгновенных снимков системы (по которым можно определить координаты микрочастиц), чтобы определить её фазовое состояние. Показывается, что критерии, сконструированные таким образом, хорошо описывают плавление и предплавление трёхмерной комплексной плазмы. Плавление 2D систем изучается на примере системы микрочастиц, взаимодействующих посредством экранированного кулоновского потенциала (потенциала Дебая–Хюккеля или Юкавы). Процессы плавления и кристаллизации в такой системе исследуются методом молекулярной динамики. Рассмотрен ряд новых параметров порядка, характеризующих плавление 2D комплексной плазмы. Предложенные для 2D и 3D комплексной плазмы параметры порядка и критерии плавления могут быть применимы и для других систем.

PACS numbers: 52.27.Lw, 52.65.Yy, 61.72.J–, 64.70.D–

DOI: 10.3367/UFNr.0180.201010e.1095

Содержание

1. Введение (1095).
 2. Плавление трёхмерной комплексной плазмы: эксперимент и моделирование (1096).
 3. Особенности плавления двумерных систем (1102).
 4. Заключение (1107).
- Список литературы (1108).

1. Введение

В последнее время значительно возрос интерес к процессам, происходящим в плазме, содержащей микрочастицы. Такую плазму обычно называют комплексной или пылевой плазмой. Общие представления о комплексной плазме (КП) можно найти, например, в обзоре, опубликованном в УФН [1]. Интерес к пылевой плазме обусловлен, с одной стороны, её широкой распространённостью в природе. С другой стороны, современные лабораторные эксперименты дают возможность проследить за поведением каждой отдельной микрочастицы, что даёт 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 [2–4], для понимания природы гидродинамических неустойчивостей [5], свойств волн кристаллизации [6, 7] и др.

Знание траекторий микрочастиц даёт дополнительное преимущество при изучении плавления и кристаллизации сильнонеидеальных систем, в частности, при построении критериев плавления; данной проблематике и будет посвящена настоящая заметка. Несмотря на то, что обсуждаемые критерии плавления выводятся для комплексной (пылевой) плазмы, область применения таких критериев (на наш взгляд) — значительно шире, и они могут быть использованы для определения фазового состояния самых разных систем, таких, например, как металлические стёкла и расплавы, коллоидные и биологические кристаллы, гранулированные среды и др.

Отметим, что в комплексной (пылевой) плазме в настоящее время технически возможно определить координаты x, y, z для $N \sim 10^5$ микрочастиц за относительно небольшие времена $\tau_s \simeq 1 - 10$ с [8–10]. Наиболее распространённым методом определения координат микрочастиц является сканирование пылевого облака лазерным лучом, предварительно развёрнутым в лазерный лист; при этом толщина лазерного листа должна быть существенно меньше среднего межчастичного расстояния в системе. Процесс сканирования занимает определённое время (определяемое механикой движения видеокамеры с лазерной установкой), которое пока ещё превышает характерные времена фазовых превращений (плавления, кристаллизации) в КП. Но уменьшение этого времени (τ_s) даже на порядок позволит определить не только положение микрочастиц в пространстве, но также и их траектории. Это даст возможность экспериментально исследовать кинетику плавления и кристаллизации

Б.А. Клумов. Max-Planck Institute for Extraterrestrial Physics, Postfach 1312, Giessenbachstrasse 85748, Garching 85741, Germany
Tel. (49 89) 30000-33-96. Fax (49 89) 30000-35-69
E-mail: klumov@mpe.mpg.de

Объединённый институт высоких температур РАН, 127412 Москва, ул. Ижорская 13/19, Российская Федерация
Тел. (495) 485-81-77. E-mail: klumov@ihed.ras.ru

Статья поступила 27 апреля 2010 г., после доработки 22 июня 2010 г.

таких систем, и есть основания надеяться, что это произойдёт уже в ближайшем будущем.

Для двумерной же КП (как и для 2D коллоидных систем) — это уже относительно давно решённый вопрос: видеокамеры высокого разрешения позволяют определять траектории каждой микрочастицы для $N \sim 10^3 - 10^4$ частиц в системе, что даёт возможность экспериментально наблюдать за процессами в системе и, в частности, за фазовыми превращениями (плавлением и кристаллизацией).

Знание индивидуальных траекторий микрочастиц в трёхмерной и двумерной сильнонеидеальной пылевой плазме даёт возможность проверять экспериментально динамические критерии плавления (такие, например, как широко известный критерий Линдемманна, который гласит, что система начинает плавиться, когда отношение среднеквадратичного отклонения частицы к среднему межчастичному расстоянию превышает некий порог¹).

Отметим также, что пока ещё для 3D систем экспериментальная проверка критерия Линдемманна является чрезвычайно сложной задачей, поэтому значительный интерес представляет выработка критериев фазовых превращений (и плавления, в частности), основанных на *статических* характеристиках системы атомов (или микрочастиц), таких, как, например, "мгновенный снимок" (snapshot) координат частиц. Такой "мгновенный снимок" в КП получается, как упоминалось выше, при сканировании пылевого облака лазерным лучом (детали типичного эксперимента можно найти, например, в [1, 8]).

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 $a \simeq 1$ микрон приобретает отрицательный заряд $Z_d/e \sim 10^3$, где e — заряд электрона. Такое высокое значение заряда микрочастицы часто приводит к сильной неидеальности пылевой компоненты (параметр неидеальности Γ определяется как отношение потенциальной энергии взаимодействия между соседними частицами к их температуре: $\Gamma = Z_d^2/(\Delta T_d) > 1$, где Δ — среднее межчастичное расстояние, а T_d — температура микрочастиц). Указанная пылевая компонента может находиться в широком диапазоне фазовых состояний: проявлять себя как газ, жидкость или кристалл. Кристаллическое состояние пылевой компоненты КП (плазменный кристалл) было экспериментально открыто в 1994 г. [13, 14], будучи предсказано теоретически в 1986 г. [15].

Из-за быстрой диффузии электронов на стенки разрядной камеры центральная область газового разряда заряжена положительно, и она является потенциальной ямой (конфайнментом) для отрицательно заряженных микрочастиц. Профиль удерживающего потенциала в центральной области разряда близок к параболическому [16]. В приэлектродной же области

разряда электрическое поле растёт значительно сильнее, чем в центре, и в этом случае конфайнмент может быть описан как жёсткая упругая стенка. Парное взаимодействие между микрочастицами, как правило, можно описать экранированным кулоновским потенциалом (потенциалом Дебая–Хюккеля или Юкавы); наличие нейтрального газа в плазме приводит к торможению частиц. Таким образом, пылевые частицы могут формировать в разряде сильноупорядоченные структуры (часто называемые плазменным кристаллом). Отметим, что наличие контролируемого затухания (очевидно, отсутствующего в атомных системах) позволяет создавать (или менять) различные фазовые состояния у пылевых структур в КП.

В недавних экспериментах, проведённых на борту Международной космической станции (МКС)² [17–19] с трёхмерной ограниченной КП, впервые детально наблюдались процессы кристаллизации и плавления трёхмерного плазменного кристалла. Результаты этих экспериментов (и последующее моделирование 3D комплексной плазмы методом молекулярной динамики) позволили сформулировать критерии плавления таких систем, которые, в частности, обсуждаются в разделе 2.

В разделе 3, на примере системы микрочастиц, взаимодействующих посредством экранированного кулоновского потенциала, обсуждаются особенности плавления двумерной (2D) комплексной плазмы.

2. Плавление трёхмерной комплексной плазмы: эксперимент и моделирование

На рисунке 1 показано несколько мгновенных снимков трёхмерного плазменного кристалла, недавно наблюдавшегося на борту МКС (детали этого эксперимента можно найти в [17]; структурные свойства этой КП обсуждаются в [18, 19]). Указанные снимки показывают, как пылевая подсистема эволюционирует под действием контрольного параметра — низкочастотного поля, подаваемого на нижний электрод. Цвет микрочастиц или степень затемнённости (в печатной версии (ПВ)) определяется локальным порядком (используемая здесь метрика локального порядка — величина q_6 — обсуждается ниже). Кристаллическая (твердотельная) фаза показана красным и оранжевым (светлым) цветом, а слабоупорядоченная (жидкая или стекольная) фаза — синим и светлоселёным (тёмным) цветом, соответственно.

Вставки показывают вариации важных параметров в процессе эволюции КП на борту МКС. На вставке (а) показаны зависимости среднего межчастичного расстояния Δ в системе микрочастиц (красная линия 1) и контрольного параметра (зелёная линия 2) от времени (номера мгновенного снимка). Амплитуда низкочастотного электрического поля сначала повышалась пошагово до определённого уровня, а затем также пошагово уменьшалась до начального значения. Наилучший плазменный кристалл наблюдался при максимальной величине амплитуды поля. Отметим, что гистерезис параметра Δ (конечное значение Δ_{fin} заметно отличается от начального Δ_0 при тех же значениях поля) указывает на эффект памяти в системе микрочастиц, который, по-видимому,

¹ Для двумерных систем используется модифицированный критерий Линдемманна, определяемый из относительного среднеквадратичного смещения ближайших соседей; при плавлении траектории ближайших соседей начинают расходиться [11, 12].

² Для получения однородного плазменного кристалла крайне желательно уменьшить влияние силы тяжести, поэтому такие эксперименты проводятся, как правило, на борту космических аппаратов — в условиях пониженной гравитации.

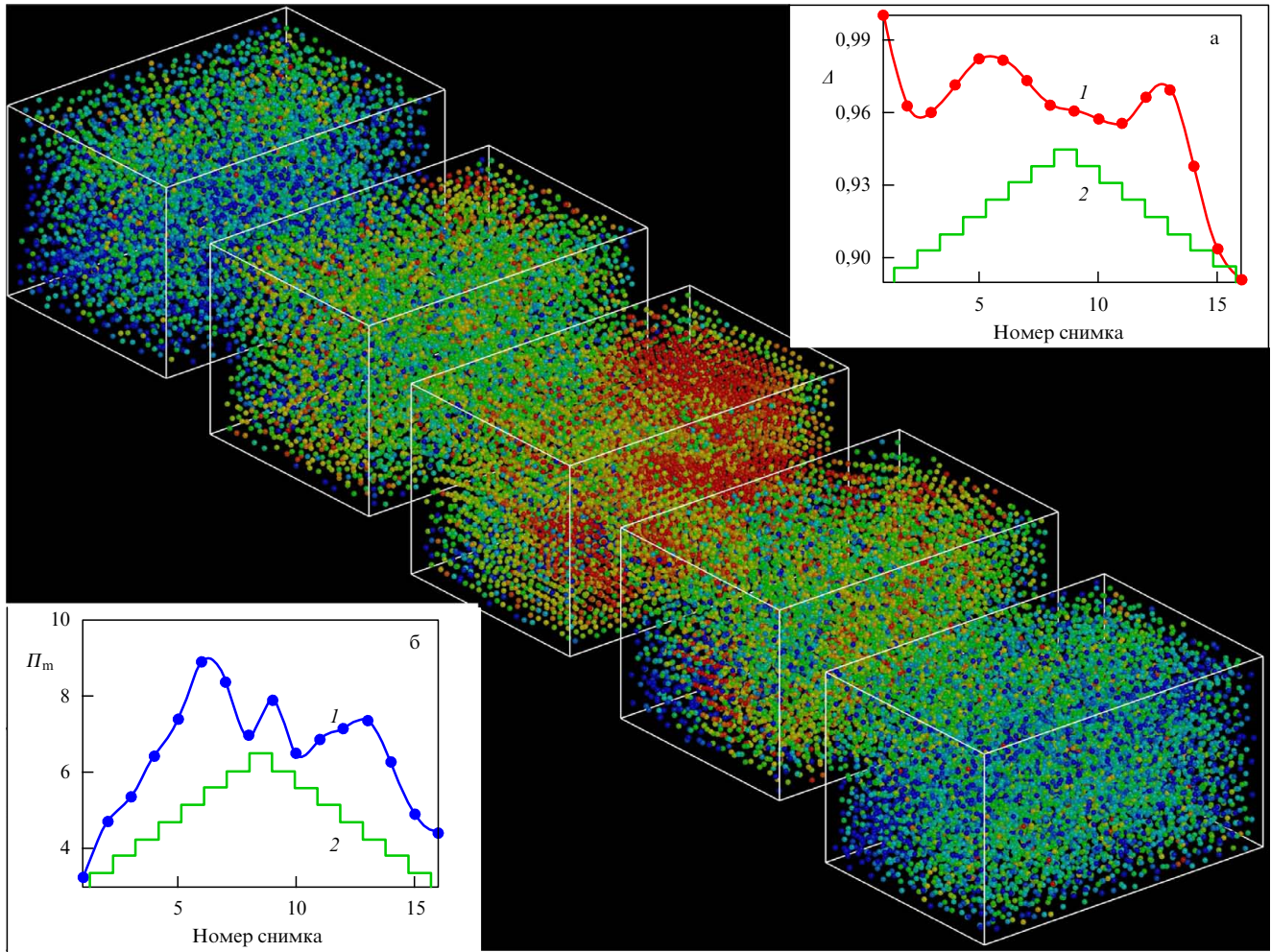


Рис. 1. (В цвете онлайн.) Эволюция плазменного кристалла, полученного на борту МКС (начальное состояние системы микрочастиц показано в верхнем левом углу, конечное — в нижнем правом). Представленные пять мгновенных снимков плазменного кристалла показывают как кристалл эволюционирует под действием контрольного параметра — низкочастотного электрического поля, подаваемого на один из электродов. Цвет или степень затемнённости в печатной версии (ПВ) микрочастиц зависит от величины, определяющей локальный порядок — вращательного инварианта q_6 (см. определение q_6 в тексте). Твёрдотельная фаза имеет оранжевый и красный (наиболее светлый в ПВ) цвет ($q_6 \geq 0,45$); слабоупорядоченная жидкая (стекольная) фаза — голубой и светлоселёный (тёмный в ПВ) ($q_6 \leq 0,4$). На вставке (а) представлены зависимости среднего межчастичного расстояния Δ (красная линия 1) и контрольного параметра (зелёная линия 2) от времени (номера мгновенного снимка). На вставке (б) показана эволюция критерия плавления $\Pi_m = g^{\max}/g^{\min}$, определяемого из парной корреляционной функции $g(r)$ (синяя линия 1); для удобства приведена, как и на вставке (а), зависимость поля от времени (2). Поведение параметров Π_m и q_6 указывает на кристаллизацию системы микрочастиц при увеличении поля и последующее плавление системы при его уменьшении. Зависимость межчастичного расстояния Δ от поля и наличие гистерезиса в поведении Δ указывают на эффекты памяти в системе микрочастиц.

связан с воздействием электрического поля на область конфайнмента³.

На вставке (б) показана зависимость от времени параметра Π_m , характеризующего фазовое состояние системы микрочастиц и определяемого из парной корреляционной функции $g(r)$ [20] следующим образом:

$$\Pi_m = \frac{g^{\max}}{g^{\min}}, \quad (1)$$

³ Возможным механизмом указанного гистерезиса может быть уменьшение заряда микрочастиц (и, соответственно, уменьшение параметра неидеальности Γ) при сжатии системы (области конфайнмента), вызванном усилением низкочастотного поля (контрольного параметра), что приводит к плавлению КП. Плавление КП, в свою очередь, меняет условия в области конфайнмента; различные характерные времена плавления (при сжатии) и кристаллизации (при усилении поля) определяют наблюдаемый эффект.

где $g(r)^{\max}$ и $g(r)^{\min}$ — первый максимум и первый ненулевой минимум парной корреляционной функции, соответственно; $g(r)$ определяется согласно

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

где N/L^3 — плотность микрочастиц в системе, r_{ij} — расстояние между частицами i и j . Для частиц с парным потенциалом взаимодействия Леннарда-Джонса ($\phi(r) \propto (\sigma/r)^{12} - (\sigma/r)^6$) было найдено, что плавление системы наблюдается при $\Pi_m < \Pi_{\text{LJ}}^{\text{cr}}$, а при $\Pi_m > \Pi_{\text{LJ}}^{\text{cr}}$ система находится в кристаллическом состоянии, где $\Pi_{\text{LJ}}^{\text{cr}} \approx 5$.

Величина параметра Π^{cr} зависит от потенциала взаимодействия между микрочастицами, однако увеличение Π_m указывает на рост порядка в системе (на это же

указывает и увеличение параметра q_6). Поведение параметров P_m и q_6 в процессе эволюции плазменного кристалла указывает на кристаллизацию и последующее плавление системы микрочастиц. Отметим, что критерий плавления P_m , несмотря на чрезвычайную простоту, требует знания координат частиц (атомов). Далее мы покажем, что зная координаты частиц можно вывести значительно более детальные критерии плавления, которые основаны на вариациях локального порядка при переходе кристалл–жидкость.

Для определения локального порядка в системе микрочастиц удобно использовать метод локальных вращательных инвариантов, предложенных в пионерской работе [21]. В рамках этого подхода для каждой i -й частицы сначала определяются $N_{nb}(i)$ ближайших соседей. Векторы $\mathbf{r}_{ij}$, соединяющие i -ю частицу с ближайшими соседями ($j=1, \dots, N_{nb}$), позволяют определить локальный ориентационный параметр $q_{lm}(i)$ для каждой микрочастицы:

$$q_{lm}(i) = \frac{1}{N_{nb}(i)} \sum_{j=1}^{N_{nb}(i)} Y_{lm}(\theta_j, \phi_j), \quad (3)$$

где $Y_{lm}(\theta, \phi)$ — сферические гармоники, θ_j, ϕ_j — угловые координаты j -й частицы, определяемые вектором $\mathbf{r}_{ij}$. Используя значения $q_{lm}(i)$, которые зависят от выбора системы координат (и поэтому являются малопривлекательными с точки зрения определения локального ориентационного порядка), для каждой микрочастицы можно вычислить вращательные инварианты второго $q_l(i)$ и третьего $w_l(i)$ рода:

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

$$w_l(i) = \sum_{m_1, m_2, m_3} \begin{pmatrix} l & l & l \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} q_{lm_1}(i) q_{lm_2}(i) q_{lm_3}(i), \quad (5)$$

где

$$\begin{pmatrix} l & l & l \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}$$

— вignerовские $3j$ -символы, причём в последнем уравнении суммирование производится по всем индексам $m_i = -l, \dots, l$, которые удовлетворяют условию: $(m_1 + m_2 + m_3) = 0$. С момента появления работы [21] и по настоящее время этот метод широко используется в физике твёрдого тела для определения фазового состояния различных систем.

Важно отметить, что каждый тип кристаллической решётки имеет свой уникальный набор ориентационных параметров порядка (вращательных инвариантов) q_l и w_l . Это даёт возможность определить наблюдаемую в эксперименте или моделировании твердотельную структуру, сравнивая значения q_l, w_l , вычисленные для каждой частицы, с величинами q_l^{id}, w_l^{id} для идеальных решёток (то есть определить локальный порядок в системе).

Для идентификации кристаллической структуры обычно используют вращательные инварианты q_4, q_6 второго рода и w_4, w_6 третьего рода, которые для совершенных кристаллов достаточно легко вычисляются. Например, у кристаллов с гранецентрированной решёткой (ГЦК или face-centered cubic — fcc), или у кристаллов с гексагональной плотной упаковкой (ГПУ или hexagonal

close packed — hcp), а также у икосаэдрической фазы (ИФ или ico) число ближайших соседей у каждой частицы $N_{nb} = 12$ и указанные инварианты равны соответственно:

1) для гранецентрированной кубической решётки (fcc): $q_4^{fcc} = 0,1909$, $q_6^{fcc} = 0,5745$, $w_4^{fcc} = -0,1593$, $w_6^{fcc} = -0,01316$;

2) для гексагональной плотноупакованной решётки (hcp): $q_4^{hcp} = 0,0972$, $q_6^{hcp} = 0,4847$, $w_4^{hcp} = 0,1341$, $w_6^{hcp} = -0,01244$;

3) для икосаэдрической фазы (ИФ или ico): $q_4^{ico} = 0$, $q_6^{ico} = 0,6633$, $w_4^{ico} = -0,1593$, $w_6^{ico} = -0,1697$.

Высокие значения параметра q_6^{cr} для всех рассмотренных типов кристаллической решётки позволяют изучать начальную стадию кристаллизации (нуклеации) в различных системах (например, [22]), структурные свойства стекольной [10] и кристаллизующейся КП [23]. Отметим, что для слабокоррелированной системы частиц (газ или жидкость) среднее значение $\langle q_6 \rangle \simeq N_{nb}^{-1/2}$ (например, для $N_{nb} = 12$ средняя величина $\langle q_6 \rangle \approx 0,29$), что значительно меньше величин q_6 , характерных для упорядоченных систем ($q_6^{cr} \geq 0,45$).

Для объёмно-центрированной кубической решётки (ОЦК или bcc (body-centered cubic)) число ближайших соседей $N_{nb} = 8$ и вращательные инварианты для этого типа решётки равны соответственно: $q_4^{bcc} = 0,5092$, $q_6^{bcc} = 0,6285$, $w_4^{bcc} = -0,1593$, $w_6^{bcc} = 0,1316$. Для определения кластеров с ОЦК типом симметрии часто бывает важным положение второго слоя ближайших соседей, содержащего 6 частиц; этот слой находится на небольшом расстоянии $(2/\sqrt{3} - 1)\Delta \simeq 0,15\Delta$ от первого слоя. В этом случае $N_{nb} = 14$ и $q_4^{bcc} = 0,0363$, $q_6^{bcc} = 0,510$, $w_4^{bcc} = 0,1593$, $w_6^{bcc} = 0,01316$.

На рисунке 2 представлено распределение микрочастиц на плоскости q_4 – q_6 для рассмотренных выше двух состояний КП — расплава (стекольной фазы) (а) и плазменного кристалла (б). На вставках показано пространственное положение микрочастиц (как и на рис. 1, частицы окрашены согласно величине q_6). Хорошо видно, что плазменный кристалл состоит преимущественно из ГПУ (hcp)-подобных частиц, причём в кристалле присутствует также и ГЦК (fcc)-фаза. Можно показать, что рассмотренный плазменный кристалл содержит и небольшое количество ОЦК (bcc)-фазы [16]. Расплав (с точки зрения локального порядка) представляет собой слабоупорядоченную систему частиц со средним значением $q_6 \simeq 0,4$. Отметим, что эта величина заметно выше, чем у жидкой фазы ($q_6 \simeq 0,29$), так что указанное фазовое состояние системы уместно называть стекольным (с точки зрения статической характеристики — локального порядка). Понятно, что динамика изменения локального порядка позволяет гораздо точнее определить тип фазы и характер фазовых превращений в системе микрочастиц.

В используемых выше результатах космических экспериментов с КП, к сожалению, динамическая информация не столь велика, всего лишь около 20 "мгновенных снимков" (snapshots) плазменного кристалла было получено в эксперименте. Эти снимки содержат 3D координаты микрочастиц и показывают, как КП эволюционирует под действием контрольного параметра (в данном случае таким параметром являлось низкочастотное электрическое поле, подаваемое на один из электродов). Стадия кристаллизации и плавления плазменного кристалла занимает примерно по 10 снимков, и, хотя эти

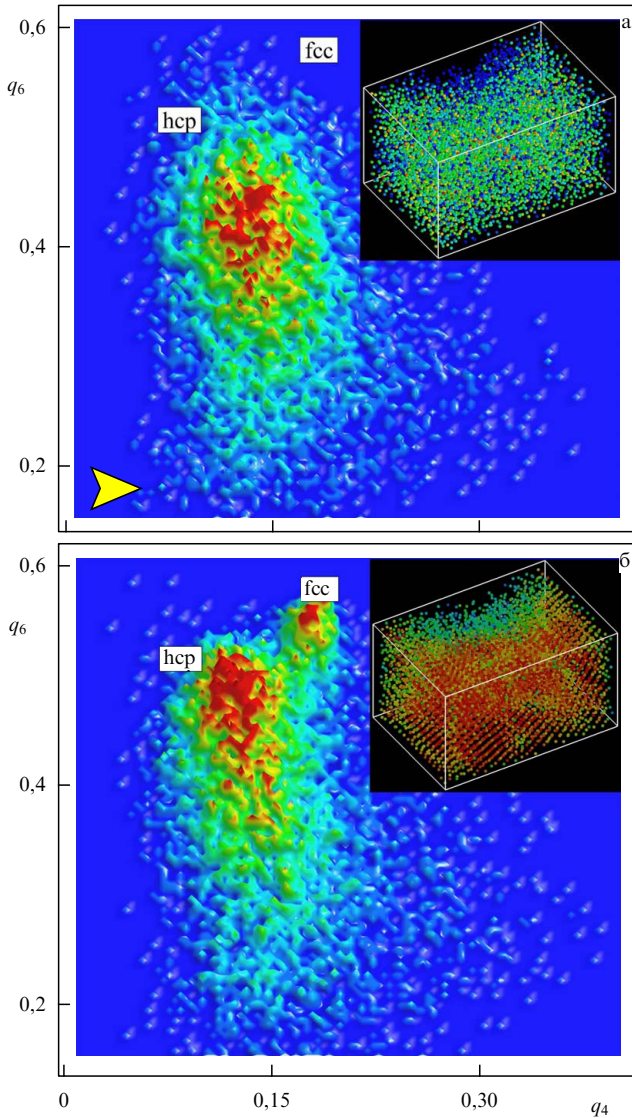


Рис. 2. (В цвете онлайн.) Структурные свойства плазменного кристалла, полученного на борту МКС, на разных стадиях плавления. Представлено распределение микрочастиц на плоскости q_4 – q_6 для двух состояний комплексной плазмы: (а) расплав (стекольная фаза) и (б) плазменный кристалл. Значения параметров локального порядка q_4 и q_6 вычислялись, используя 12 ближайших соседей для каждой микрочастицы для того, чтобы определить ГПУ, ГЦК, ИФ (hcp/fcc/ico) фазы в рассматриваемой системе. Вставки показывают пространственное положение микрочастиц, окрашенных согласно величине q_6 . Хорошо видно, что плазменный кристалл состоит преимущественно из ГПУ-подобных частиц (hcp-like), причём в плазменном кристалле присутствует также и заметное количество ГЦК-фазы (fcc). Расплав (стекольная фаза), с точки зрения локального порядка, представляет собой слабоупорядоченную систему частиц со средним значением $q_6 \approx 0,4$, которое заметно превышает среднее значение $\langle q_6 \rangle$ для неупорядоченной системы ($q_6 \approx 0,29$).

снимки дают важную информацию о структурных изменениях КП на борту МКС, однако их явно недостаточно для детального анализа локального порядка в системе. Поэтому ниже будут использованы результаты численного моделирования методом молекулярной динамики (МД) системы заряженных микрочастиц, взаимодействующих посредством экранированного кулоновского потенциала (системы Юкавы). Отметим, что такое моделирование прекрасно воспроизводит наблюдательные

данные о вариациях локального порядка КП на борту МКС в рассматриваемом эксперименте [18, 19].

В МД расчётах парное взаимодействие микрочастиц будем описывать экранированным кулоновским потенциалом⁴ (потенциалом Дебая–Хюккеля или Юкавы); систему микрочастиц с таким взаимодействием в дальнейшем для краткости будем называть системой Юкавы:

$$\phi(r) = \frac{Z_d}{r} \exp\left(-\frac{r}{\lambda_D}\right), \quad (6)$$

где r — расстояние между частицами, а λ_D — характерная длина экранирования. Поскольку исследуются структурные особенности КП в области фазового перехода кристалл – жидкость, то рассматриваемая КП является сильнонеидеальной. Это означает, что в этой пылевой подсистеме параметр неидеальности

$$\Gamma \equiv \frac{Z_d^2}{T_d \Delta} \geq 1, \quad (7)$$

где T_d — температура микрочастиц, Δ — среднее межчастичное расстояние. Структурный параметр $\kappa = \Delta/\lambda_D$ выбирался близким к наблюдаемым в эксперименте. Для простоты считается, что все микрочастицы имеют фиксированные размер $a \approx 1$ микрон и заряд $Z_d \approx 3 \times 10^3$. Уравнения движения отдельной микрочастицы имеют вид

$$m\ddot{\mathbf{r}}_i = -Z_d \nabla \Phi_c - Z_d \sum \nabla \phi - m\gamma \dot{\mathbf{r}}_i + \mathbf{L}_i. \quad (8)$$

Слагаемые в правой части (8), помимо электростатического взаимодействия частиц, описывают торможение пылевых частиц при их столкновениях с нейтральными атомами и молекулами буферного газа и случайную силу Ланжевена — $\mathbf{L}_i$ (тепловой шум, индуцированный нейтральными атомами), определяемую из

$$\langle \mathbf{L}_i(t) \mathbf{L}_j(t + \tau) \rangle = 2\gamma m k_B T_g \delta_{ij} \delta(\tau) \quad (9)$$

при условии нулевого среднего значения: $\langle \mathbf{L}_i(t) \rangle = 0$, а также взаимодействие микрочастиц с потенциалом Φ_c конфайнмента.

Отметим, что уравнения (8) и (9) описывают так называемый ланжевенский термостат (поскольку на больших временах температуры газа и пылевых частиц сравниваются), который широко применяется при моделировании методом МД самых разных систем.

Система уравнений (8), (9) решалась для $N \approx 40000$ микрочастиц, случайно распределённых в начальный момент времени в кубе размером $L \approx 0,3$ см. 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 растёт для $z > L/2$ с характерным пространственным масштабом $d_w \approx \Delta/3$, не позволяя микрочастицам уходить за пределы расчётной области на расстояния $l > d_w$.

Остальные параметры моделирования были выбраны близкими к экспериментальным: $\kappa \approx 1-3$, давление буферного газа $p_g \approx 10-100$ Па и его температура $T_g \sim 100-1000$ К, плотность материала микрочастиц $\rho_d \approx 1,5$ г см⁻³. Благодаря трению, такая система на

⁴ В [16] измерялся потенциал межчастичного взаимодействия в КП, который оказался близок к потенциалу Юкавы.

больших временах (когда $T_d \approx T_g$) кристаллизуется с параметром неидеальности $\Gamma \sim 10^3 - 10^5$.

Плавление полученного при МД моделировании плазменного кристалла также рассчитывалось методом молекулярной динамики, при этом температура ланжевенского термостата T_g поднималась на небольшую величину $\delta T_g \ll T_d$ и последующий расчёт прекращался, когда система микрочастиц переходила в квазиравновесное состояние с новой температурой $T_g + \delta T_g$.

Особенности локального порядка при плавлении рассмотренной системы Юкавы представлены на рис. 3, где

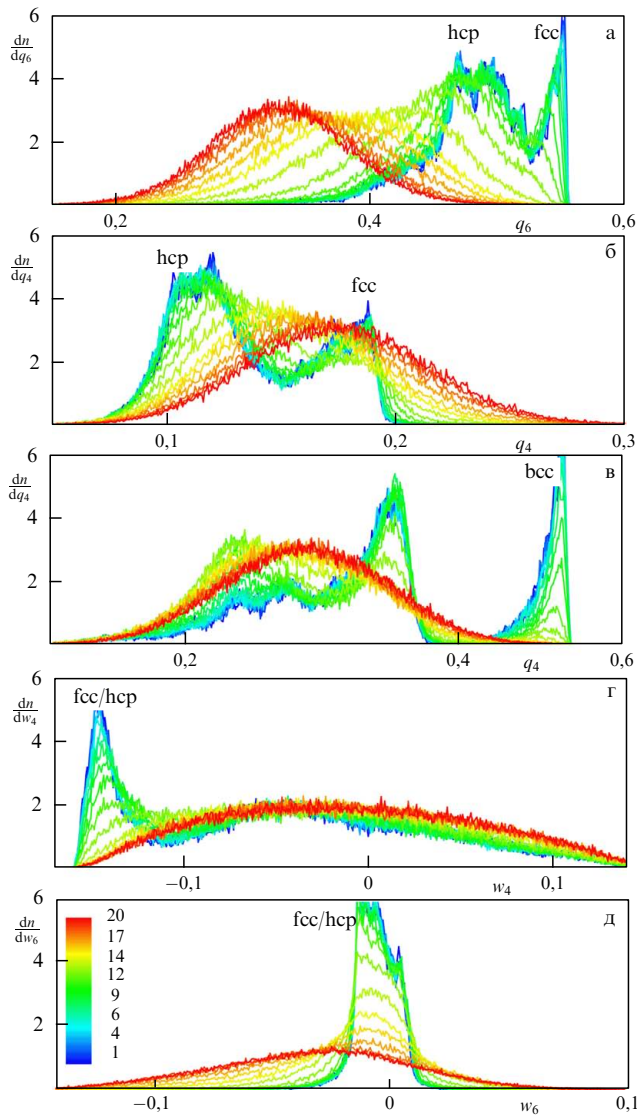


Рис. 3. (В цвете онлайн.) Распределения микрокластеров $dn(q_i)/dq_i$ в зависимости от значений различных вращательных инвариантов q_6 (а), q_4 (б), q_4 (в), w_4 (г) и w_6 (д) на разных стадиях плавления системы Юкавы (для 20-ти снимков). Вращательные инварианты (а, б, г, д) вычислены с 12-ю ближайшими соседями; в случае (в) использовалось 8 ближайших соседей (чтобы определить кластеры бсс). Цвет кривых зависит от температуры системы, которая увеличивается от 1-го к 20-му снимку, охватывая стадии от кристаллической фазы (синий или тёмный цвет: 1-й снимок) до конечной неупорядоченной жидкой фазы (красный или светлый цвет: 20-й снимок). Указаны значения вращательных инвариантов для идеальных решёток: hcp, fcc и bcc. Хорошо видна стадия предплавления: резкое уменьшение fcc (а) и bcc (в) частиц в системе, которая при этом остаётся ещё твердотельной (большинство частиц имеет тип симметрии hcp).

показаны распределения микрокластеров в зависимости от параметров ориентационного порядка — вращательных инвариантов второго (q_4, q_6) и третьего (w_4, w_6) рода на разных стадиях плавления плазменного кристалла. Цвет линий меняется от синего (тёмного) (начальная стадия — плазменный кристалл) до красного (светлого) (пылевая жидкость) при увеличении температуры системы. Пики на указанных распределениях соответствуют различным типам кристаллической решётки, наблюдаемым в рассмотренной системе микрокластеров. Полученный при моделировании плазменный кристалл, главным образом состоит из ГПУ и ГЦК фаз (как и в описанном выше

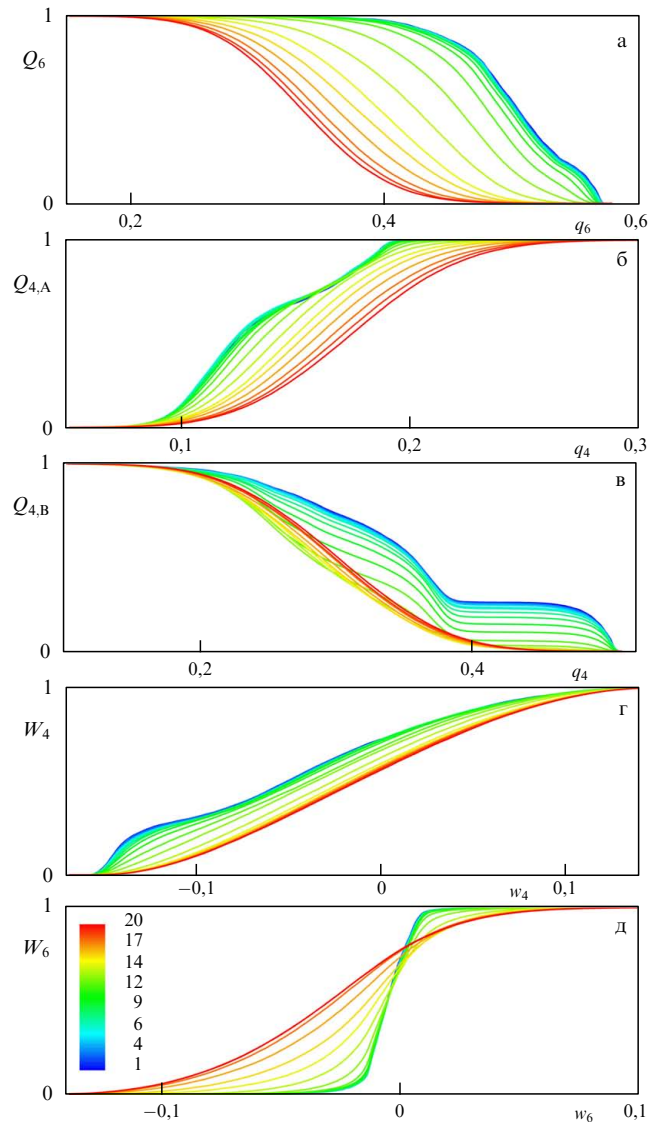


Рис. 4. (В цвете онлайн.) Кумулятивные распределения для гистограмм, представленных на рис. 3, в зависимости от величин вращательных инвариантов q_6 (а), q_4 (б), q_4 (в), w_4 (г) и w_6 (д) на разных стадиях плавления трёхмерной системы Юкавы. Цвет кривых определяется температурой T_d системы микрокластеров (так же, как и на рис. 3), которая увеличивается от 1-го снимка — синяя (самая тёмная) кривая (соответствующее состояние системы — высокоупорядоченный плазменный кристалл) до 20-го снимка — красная (самая светлая) кривая (пылевая жидкость). Сильная зависимость кумулятивных распределений от фазового состояния системы позволяет использовать их для построения параметров порядка, характеризующих плавление и кристаллизацию системы микрокластеров.

космическом эксперименте) с небольшой долей ОЦК кластеров. Повышение температуры приводит, как хорошо видно на рис. 3, к предплавлению системы, т.е. наблюдается исчезновение таких фракций, как ОЦК и ГЦК, при сохранении твердотельной структуры вещества. Дальнейшее повышение температуры приводит к полному плавлению системы.

Кумулятивные распределения (кумулянты нулевого порядка) представленных гистограмм позволяют легко сконструировать параметры порядка, определяющие фазовое состояние системы. Например, для гистограммы 3а, где представлено распределение микрочастиц в зависимости от величины вращательного инварианта q_6 (и вычисленного с $N_{\text{nb}} = 12$, чтобы определить доли ГПУ и ГЦК фракций в системе) естественно определить кумулянт нулевого порядка согласно:

$$Q_6(x) \equiv \frac{1}{N} \int_x^\infty \frac{dn(q_6)}{dq_6} dq_6, \quad (10)$$

где N — полное число частиц в системе. Очевидно, что

$$N = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dn(q_6)}{dq_6} dq_6,$$

где $dn(q_6)/dq_6$ — указанное распределение (рис. 3а). При таком определении кумулянт $Q_6(x)$ зависит от относительной концентрации ГЦК кластеров в системе.

В данном случае параметром порядка может быть, например, производная кумулянта $Q_6(x)$ при $q_6 = q_6^{\text{fcc}}$. Из рисунка 4а хорошо видно, что для кристаллизованной системы такая производная ненулевая, а при плавлении (предплавлении) системы (исчезновении ГЦК частиц) эта производная стремится к нулю. Используя $Q_6(x)$, можно определить ещё один параметр порядка $P_{\text{fcc}} = Q_6(x_b)$, где $x_b \simeq 0,55$ (напомним, что для идеальной решётки $q_6^{\text{fcc}} = 0,5745$). При таком определении P_{fcc} означает относительную долю ГЦК-подобных частиц в системе (аналогично вводится параметр порядка P_{hcp} для описания ГПУ (hcp) фазы). При плавлении системы Юкавы, как мы видим, параметр порядка P_{fcc} стремится к нулю, т.е. сначала исчезает ГЦК фракция, и, соответственно, этот параметр может быть использован для описания предплавления системы микрочастиц. На рисунке 5 показано, как меняется относительная концентрация различных фаз при плавлении системы Юкавы. Хорошо видны стадии предплавления, сопровождающиеся резким падением плотности кластеров ГЦК и ОЦК.

Аналогично, используя указанные кумулятивные распределения, конструируются параметры порядка для ГПУ (hcp) и ОЦК (bcc) фаз. Отметим, что общая идея использования кумулятивных распределений заключается в том, что вместо относительно сложных гистограмм (часть из которых представлена на рис. 3, и которые зачастую имеют несколько пиков, что затрудняет использование их усреднённых характеристик, например, часто используется средняя по распределению величина инварианта $\langle q_6 \rangle$) вводятся сглаженные кумулятивные распределения, которые значительно удобнее использовать для построения параметров порядка.

С этой точки зрения интересно поведение кумулянта $W_6(x)$ для распределения микрочастиц, построенного в зависимости от параметра $w_6(x)$ (см. рис. 3д):

$$W_6(x) \equiv \frac{1}{N} \int_x^\infty \frac{dw_6}{dw_6} dw_6. \quad (11)$$

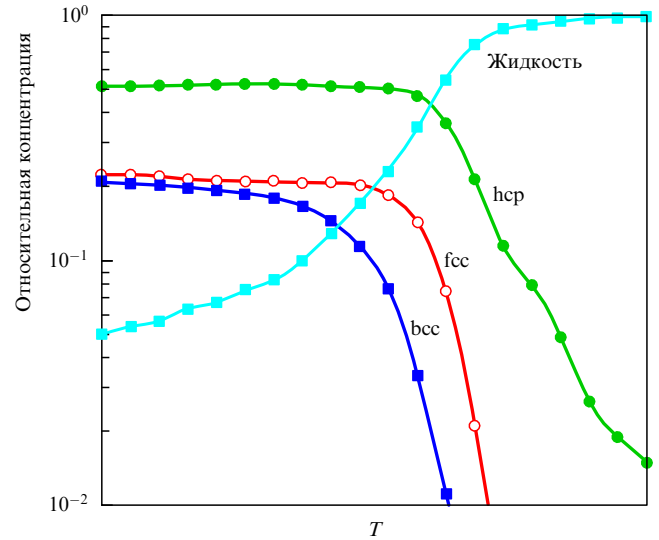


Рис. 5. (В цвете онлайн.) Относительная концентрация различных фаз в системе Юкавы при разных температурах. Хорошо видно исчезновение ГЦК (fcc) и ОЦК (bcc) фаз на стадии предплавления системы.

Данный кумулянт оказался очень чувствителен к фазовому состоянию КП, что хорошо видно на рис. 4д. Для сильноупорядоченной кристаллизованной (solid-like) КП распределение $W_6(x)$ практически не зависит от параметра Γ . Но, как только плазменный кристалл начинает плавиться, происходит резкое изменение зависимости $W_6(x)$. Таким образом, указанное кумулятивное распределение позволяет построить критерий плавления

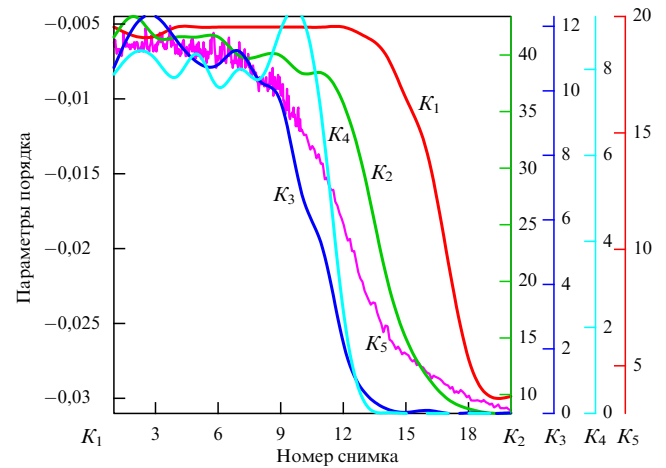


Рис. 6. (В цвете онлайн.) Различные параметры порядка, характеризующие предплавление и плавление трёхмерной системы Юкавы, сконструированные из кумулятивных распределений, представленных на рис. 4, в зависимости от номера снимка (температуры микрочастиц). Представлены параметры порядка, описывающие предплавление системы — исчезновение ГЦК (fcc) (голубая линия — K_4) и ОЦК (bcc) (синяя линия — K_3) и полученные из распределений (а, в) на рис. 4, соответственно. Плавление ГПУ (hcp) фазы (полученное из распределения (а) на рис. 3) определяется параметром порядка P_{hcp} (зелёная линия — K_2). Лиловая линия (K_5) показывает величины параметра P_m для тех же номеров снимков. Вариации параметра $A_{w_6}^m$ (полученного из распределения, представленного на рис. 4д) при плавлении системы показаны красной линией (K_1). Высокая чувствительность параметра $A_{w_6}^m$ к фазовому состоянию системы позволяет использовать его как новый критерий плавления трёхмерных систем.

$A_{w_6}^m$ для трёхмерной КП:

$$A_{w_6}^m \equiv \frac{w_6(W_6 = 0,5)}{w_6^{cr}(W_6 = 0,5)}, \quad (12)$$

где параметр порядка $w_6^{cr}(W_6 = 0,5) \approx -5 \times 10^{-3}$ и определяется из значения w_6 при условии $W_6 = 0,5$ (на высоте кумулятивного распределения).

При таком определении параметра $A_{w_6}^m$ плавление КП начинается при $A_{w_6}^m < 3,4$, что хорошо видно из рис. 6, на котором представлен ряд вышеописанных параметров порядка в зависимости от температуры КП. На рис. 6 также для сравнения приведена зависимость параметра P_m (определяемой из парной корреляционной функции). Отметим, что плавлению плазменного кристалла в новом определении ($A_{w_6}^m \approx 3,4$) соответствует величина $P_m \approx 4,3$, которая существенно меньше, чем при плавлении систем с потенциалом взаимодействия Леннарда–Джонса. Это, в частности, означает, что критерий плавления P_m не является универсальным, а зависит от типа взаимодействия.

Таким образом, в данной заметке предлагаются новые параметры порядка для описания плавления трёхмерной КП. Данные параметры порядка основаны на структурных изменениях (изменениях локального порядка) в системе при плавлении (или кристаллизации). Подчеркнём, что рассмотренные параметры порядка чувствительны к изменению структурных свойств ансамбля микрочастиц, при этом учитывается и влияние малых фракций, таких, как, например, ГЦК или ОЦК фаз, что позволяет описать и *предплавление* КП. Есть основание полагать, что область применения указанного подхода не ограничивается только КП, а может быть распространена также и на другие системы.

3. Особенности плавления двумерных систем

Начиная с пионерских работ [24–27], интерес к процессам, происходящим в сильноупорядоченных (или слабоупорядоченных) двумерных системах, неуклонно растёт. Ультрахолодные атомы (бозе-эйнштейновский конденсат) в оптических решётках и их возможная связь с квантовыми вычислениями [28, 29], квазидвумерные слои углерода (графена) [30, 31], вихревые решётки в планарных сверхпроводниках [32], электроны на поверхности жидкого гелия и квазидвумерные коллоидные системы [33, 34], гранулированные среды [35], двумерные плазменные кристаллы в КП (плоский монослой из микрочастиц) [36] — вот неполный перечень физических объектов, где размерность системы оказывает существенное влияние на её свойства. Особый интерес представляет поведение таких систем вблизи области фазового перехода кристалл–жидкость, где, как хорошо известно, ключевую роль играют структурные дефекты кристаллической решётки.

В этой части мы рассмотрим кинетику структурных дефектов в двумерной (2D) ограниченной КП в области параметров, близкой к фазовому переходу кристалл – жидкость и, как в трёхмерном случае, предложим ряд новых параметров порядка, характеризующих плавление и кристаллизацию таких систем. Дефектами здесь называются все структурные дефекты двумерной кристаллической решётки, т.е. точечные дефекты — дисклинации и парные дефекты — дислокации не выделяются в особую группу. Это связано с тем, что, как будет

показано ниже, кластеризация дефектов, т.е. распределение кластеров по числу входящих в них точечных дефектов, является одним из важнейших параметров исследуемого перехода кристалл – жидкость. Отметим, что исследовать переход кристалл – жидкость экспериментально особенно удобно в коллоидных суспензиях [37] и в комплексной (пылевой) плазме [38, 39]. Поведению подобных систем (например, коллоидным и плазменным кристаллам) посвящена обширная библиография (например, [40–45]). Несмотря на это, кинетика дефектов, механизмы их образования, ассоциации и гибели при плавлении (кристаллизации), а также и структурные свойства кристаллизующихся систем ещё относительно слабо изучены.

Это, отчасти, связано с тем, что, как в коллоидных системах, так и в двумерной КП, число частиц N_{exp} , траектории которых (а, соответственно, и кинетика дефектов) могут быть определены экспериментально (с использованием видеокамер высокого разрешения), обычно невелико: $N_{\text{exp}} \simeq 10^4$. И если в случае трёхмерной КП, как мы видели выше на примере плазменного кристалла, полученного на борту МКС, числа микрочастиц в системе $N_{\text{exp}} \simeq 10^4$ вполне достаточно, чтобы определить фазовое состояние системы, то в двумерном случае это не так, даже если принять во внимание, что число частиц, траектории которых определены, — это только малая часть плазменного кристалла.

В процессе кристаллизации число дефектов сильно уменьшается (обычно доля дефектов в кристаллизующемся плазменном кристалле составляет от нескольких процентов до долей процента от полного числа частиц). Следовательно, для $N_{\text{exp}} \simeq 10^4$ микрочастиц в эксперименте (на сегодняшний день) трудно получить важную статистическую информацию, например, о распределении кластеров из дефектов по размерам, или информацию об ориентационных свойствах кристаллитов и т.д.⁵ Однако такая информация может быть получена в численном эксперименте. В этом разделе, как и выше, при рассмотрении трёхмерного плазменного кристалла, эволюция двумерной КП в области перехода кристалл – жидкость исследуется методом молекулярной динамики на примере простой системы Юкавы. Известно (например, [16]), что потенциал Юкавы хорошо описывает парное взаимодействие пылевых микрочастиц в КП.

В начальный момент времени $N = 1 \times 10^6$ микрочастиц размером $a = 1$ микрон с зарядом $Z_d = 3 \times 10^3$ элементарных зарядов распределяются случайным образом в расчётной области (квадрате с $L_x = L_y = 2 - 10$ см). Остальные параметры МД моделирования выбираются близкими к экспериментальным (структурный параметр $\kappa = \Delta/\lambda_D \simeq 1 - 3$, давление p нейтрального газа, определяющее торможение микрочастиц $p \simeq 0,01 - 1$ Па). Как и в 3D случае, использовался метод МД с ланжевенновским термостатом (см., например, [47]).

Начальное неупорядоченное состояние системы Юкавы выбиралось близким к газовому (параметр неидеальности $\Gamma < 1$). После относительно быстрой термализации в системе микрочастиц устанавливается тем-

⁵ Дополнительная трудность экспериментов с квазидвумерной комплексной плазмой заключается в том, что микрочастицы плазменного кристалла удерживаются от разлёта электрическим полем конфайнмента, которое, как правило, сильнонеоднородно (потенциал ϕ_c конфайнмента близок к параболическому: $\phi_c \propto r^2$), что приводит к неоднородности плазменного кристалла [48].

пература T_d и последующие кинетические процессы образования и гибели дефектов изучаются уже в изотермической системе.

Отметим, что начальная (после термализации системы Юкавы) концентрация точечных дефектов была выбрана сверхравновесной. Это позволило детально исследовать кинетику гибели (аннигиляции) дефектов в ходе дальнейшей эволюции системы Юкавы. Были рассмотрены варианты кристаллизующихся двумерной и квазидвумерной системы Юкавы. В последнем случае МД моделирование проводилось для трёхмерной системы Юкавы, но вариации δz третьей координаты (z) были подавлены ($\delta z \ll \Delta$) вертикальным конфайнментом. В наземных экспериментах с двумерной пылевой плазмой факторами, ограничивающими вертикальное положение микрочастиц, являются гравитация и электрическое поле, резко растущее в приэлектродной области разряда. Не было обнаружено заметного отличия между кинетикой дефектов в 2D и квазидвумерном случаях, поэтому полученные результаты могут быть распространены и на квазидвумерную КП.

Хорошо известно, что в основном состоянии сильно-неидеальная ($\Gamma \gg 1$) двумерная система Юкавы (плазменный кристалл) имеет гексагональную кристаллическую решётку (а каждая микрочастица имеет 6 ближайших соседей, расположенных в вершинах правильного шестиугольника). Структурными дефектами же, как правило, являются частицы, имеющие 5 или 7 ближайших соседей (могут появляться и частицы с 4-мя или 8-ю соседями, но их концентрации обычно незначительны). Точечные дефекты с 5-ю и 7-ю соседями (дислокации) часто объединяются, образуя относительно устойчивую дислокацию (пару дефектов, имеющих 5 и 7 ближайших соседей). При взаимодействии структурные дефекты (в зависимости от их ориентации) аннигилируют (рекомбинируют) или же объединяются, образуя кластеры, состоящие из точечных дефектов. Число дефектов N в таком кластере может быть довольно большим ($N \gg 1$), а сам кластер может иметь сложную фрактальную структуру. Изучение свойств таких кластеров и их связь с плавлением (кристаллизацией) — одна из задач, рассматриваемая в настоящей заметке. Отметим, что здесь не обсуждаются особенности пространственных корреляций при фазовом переходе кристалл–жидкость (последовательное разрушение трансляционного и ориентационного порядков при плавлении), информацию об этом можно найти, например, в недавнем обзоре [33].

На рисунке 7 показаны некоторые важные особенности эволюции кристаллизующейся системы Юкавы при заданной температуре. В левой и правой частях рис. 7 представлены (сверху вниз) распределения дефектов, локальный ориентационный порядок в системе и ориентация доменов, содержащих микрочастицы с 6-ю соседями для начального и конечного состояний двумерной КП (системы Юкавы)⁶. Отметим, что конечное состояние системы неравновесно — концентрация дефектов ещё не является квазистационарной. Для определения ближайших соседей у каждой микрочастицы использовались триангуляция Делоне и последующее разбиение 2D про-

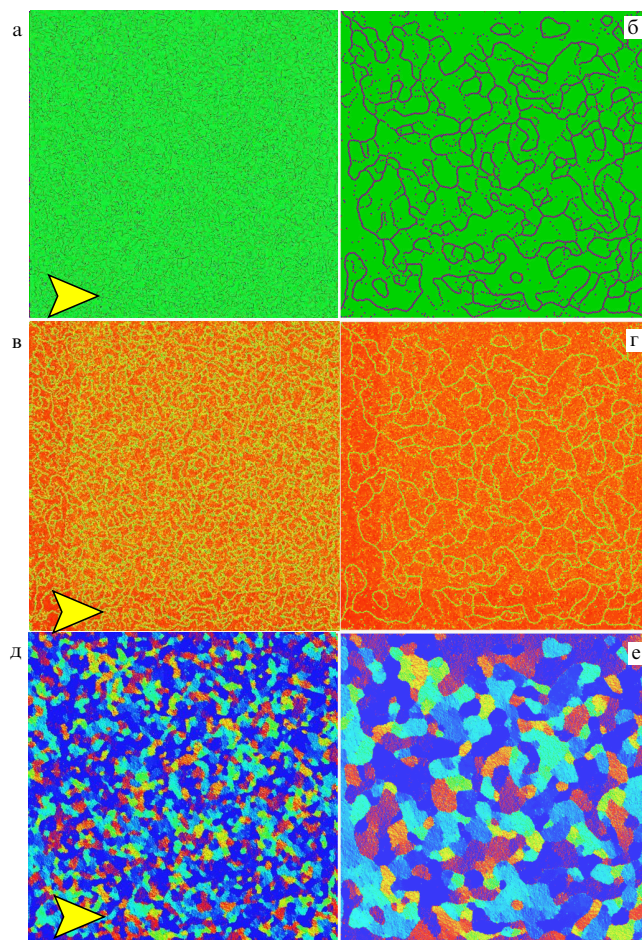


Рис. 7. (В цвете и анимация онлайн.) Кристаллизующаяся изотермическая двумерная система Юкавы. Представлены начальные (а, в, д) и конечные (б, г, е) неравновесные (ещё неустановившиеся) распределения: дефектов (а, б); параметра Ψ_6 , характеризующего локальный ориентационный порядок (в, г), ориентации кристаллитов (д, е), соответственно. Микрочастицы с 6-ю соседями (а, б) отмечены зелёным цветом (фон); структурные дефекты: красным (светлым) отмечены частицы с 7-ю и большим числом ближайших соседей (БС), синим (тёмным) — частицы с 5-ю и меньшим числом БС. Красный цвет (фон) у микрочастиц (в, г) соответствует величине $|\Psi_6| \approx 1$, т.е. почти идеальному гексагональному порядку в системе, искажения ориентационного порядка (жёлтый и зелёный цвета, светло-серый в печатной версии статьи) вызваны наличием структурных дефектов. На рис. 7 (д, е) вариации цвета определяются ориентацией локального гексагона в каждом кристаллите. Границами между соседними кристаллитами являются линейные цепочки кластеров из дефектов. Число частиц в системе $N = 10^6$.

странства методом ячеек Вороного. Локальный ориентационный порядок в системе определяется параметром Ψ_6 , который для k -й частицы имеет вид:

$$\Psi_6(k) \equiv \frac{1}{N_j} \sum_j \exp(6i\theta_{jk}), \quad (13)$$

где θ_{jk} — угол, определяемый линией, соединяющей частицы j, k в фиксированной системе координат (суммирование производится по ближайшим соседям). Для идеальной гексагональной решётки (гексагона) $|\Psi_6| = 1$. Хорошо видно, что кристаллизация рассмотренной системы приводит к образованию поликристаллической структуры, состоящей из кристаллитов (доменов кристаллической решётки) с различной ориентацией, сред-

⁶ Значительно больше деталей указанной эволюции может быть найдено в компьютерной анимации, созданной по результатам этого МД моделирования, представленной в электронной версии статьи на сайте www.ufn.ru.

ний размер которых растёт со временем, причём мелкие кристаллиты исчезают (поглощаются) значительно быстрее крупных. Границами доменов, как правило, являются линейные кластеры, состоящие из структурных дефектов кристаллической решётки. Можно легко оценить число доменов N_D в такой системе из

$$\ln N_D \sim \frac{N_d}{\sqrt{N}}, \quad (14)$$

где N и N_d — число частиц в системе и число дефектов, соответственно.

Уже из этой простой оценки, видно, что для изучения поведения указанных кристаллитов нужно иметь достаточно большое ($N \gg 10^4$) число микрочастиц в системе, которое значительно превышает современные возможности экспериментов с КП ($N_{\text{exp}} \approx 10^4$). Распределение кристаллитов по размерам (или числу частиц в кристаллите) может быть использовано в качестве параметра порядка, характеризующего плавление и кристаллизацию двумерных систем; понятно, что в жидкой фазе средний размер кристаллита стремится к нулю.

Другим важным параметром, характеризующим фазовое состояние двумерной системы Юкавы, является распределение кластеров $W_c(N)$ по числу N , входящих в них дефектов (или распределение кластеров из дефектов по массе). Здесь $W_c(N)$ определено таким образом, что $\sum_i W_c = 1$. Такие распределения как для расплавленной, так и для кристаллизующейся двумерной КП представлены на рис. 8. Отметим значительное отличие между указанными распределениями — для жидкой фазы характерен более пологий спад $W_c(N)$ для больших N , что означает присутствие в системе крупных класте-

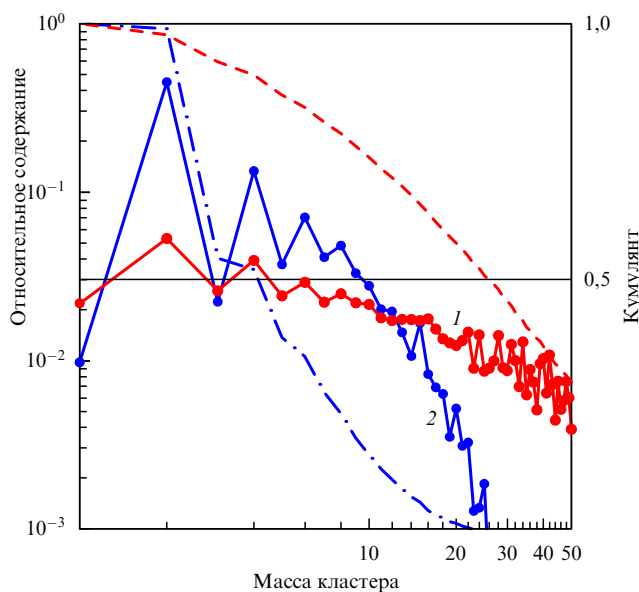


Рис. 8. (В цвете онлайн.) Распределение $W_c(N)$ кластеров, состоящих из структурных дефектов, по массе (числу дефектов N , входящих в кластер) для расплавленной (сплошная красная линия — 1) и кристаллизующейся (сплошная синяя линия — 2) систем Юкавы. Кумулятивные распределения $C_W(N)$ указанных спектров ($C_W(N) = \sum_{i=1}^N W_c$) показаны пунктиром (красным) и штрихпунктиром (синим), соответственно. Отметим сильное отличие между данными распределениями, в частности, для жидкой фазы половина дефектов сосредоточена в кластерах с $N_h < 25$ (где N_h определяется из $C_W(N_h) = 0,5$), в то время как для твердотельной фазы $N_h < 5$. В обоих случаях в системе преобладают парные дефекты (дислокации).

ров (с $N > 100$), а для твердотельной фазы кластеры с $N > 30$ практически отсутствуют.

В обоих случаях в распределении дефектов по размерам преобладают дислокации (дефекты 5–7 с $N = 2$). Кумулятивные распределения $C_W(N)$ ($C_W(N) = \sum_{i=1}^N W_c$) для указанных спектров показаны на рис. 8. Хорошо видно сильное отличие между этими кумулятивными распределениями, в частности, для жидкой фазы половина дефектов сосредоточена в кластерах с массой $N_h < 25$ ($C_W(N_h) = 0,5$), в то время как для твердотельной

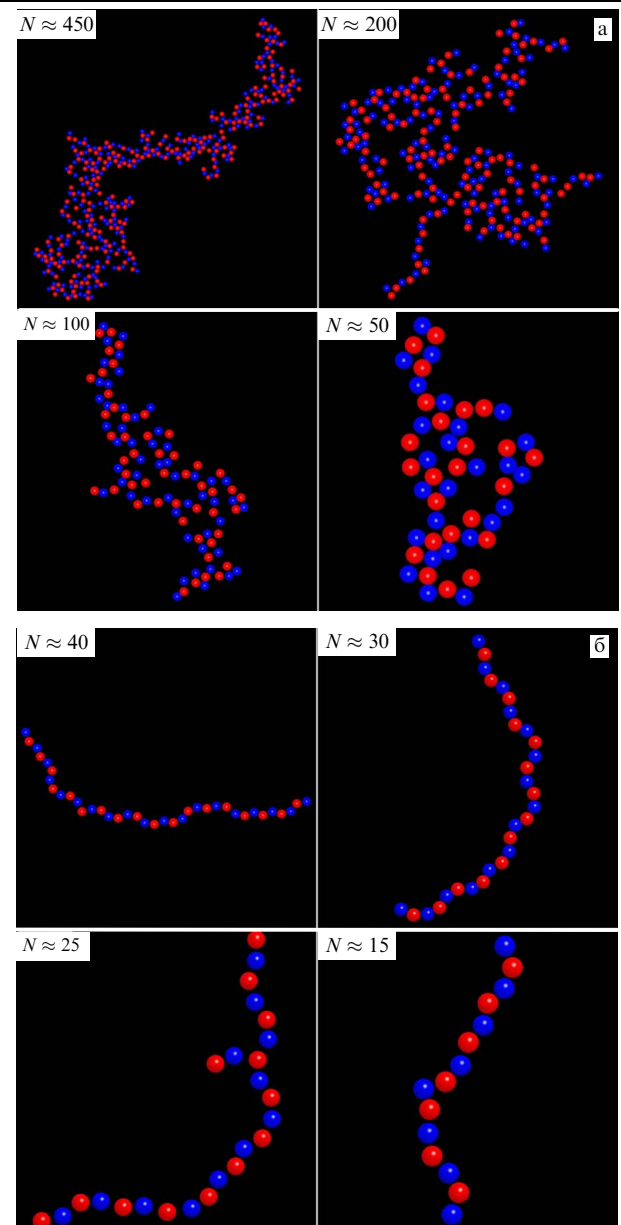


Рис. 9. (В цвете онлайн.) Типичные образцы кластеров, состоящих из точечных дефектов (число дефектов N для каждого кластера указано в верхнем левом углу) в расплавленной (а) и в кристаллизующейся (б) двумерной системе Юкавы. Цвет микрочастиц, входящих в кластеры: красный (чёрный) — для частиц с 7-ю и большим числом ближайших соседей (БС) и синий (серый/белый) — для частиц с 5-ю и меньшим числом БС. Для расплава наблюдается сложная фрактальная структура кластеров; для твердотельной фазы кластеры преимущественно состоят из линейных цепочек дефектов. Это позволяет использовать форму кластера для построения параметра порядка, характеризующего плавление двумерных систем.

фазы $N_h < 5$. В области фазового перехода кристалл–жидкость происходит резкое увеличение параметра N_h . Таким образом, кумулянты распределения дефектов по массе также могут быть использованы как параметры порядка, описывающие плавление двумерной КП.

Рассматривая распределение кластеров по массе, естественно обратить внимание и на их форму. На рисунке 9 показаны типичные образцы кластеров для расплавленной (а) и для кристаллизующейся (б) систем Юкавы. Если ввести фрактальную размерность кластера F : $N(r) \propto r^F$, где зависимость $N(r)$ — число точечных дефектов, принадлежащих данному кластеру в сфере радиуса r ($r = 0$ в центре масс кластера), то хорошо видно, что фрактальная размерность данных кластеров совершенно различна: для жидкой фазы $F \simeq 1,5–1,7$ (в зависимости от массы N кластера), в то время как для кристаллизующейся системы $F \approx 1$. Таким образом, такая метрика, как фрактальная размерность кластеров, состоящих из дефектов, может служить параметром порядка, характеризующим плавление двумерной системы Юкавы. Очевидно, что в области перехода кристалл–жидкость величина F испытывает скачок.

Ещё одной важной характеристикой фазового состояния является смещение i -й микрочастицы $\delta r_i^2(t_0, \tau)$ (относительно начального положения), определяемое из

$$\delta r_i^2(t_0, \tau) = [\mathbf{r}_i(\tau + t_0) - \mathbf{r}_i(t_0)]^2, \quad (15)$$

где $\mathbf{r}_i(t_0)$ — начальное положение i -й частицы. Для двумерных систем, как известно, такое смещение, будучи усреднённым по всем частицам, растёт со временем как для жидкой фазы, так и для кристалла. Можно также отметить предложенный в [11] модифицированный критерий Линдемманна, который учитывает среднее разбегание со временем соседних частиц; темпы такого разбегания существенно отличаются для жидкой и твердотельной фаз. Здесь же мы рассмотрим не эти средние характеристики, а поле смещений $\delta r_i^2(t, \tau)$ и его свойства.

На рисунке 10 представлены характерные поля смещений для кристаллизующейся системы Юкавы. Рисунок 10а показывает эволюцию поля смещения на разных временных шкалах, а рис. 10б — на разных стадиях кристаллизации системы (при заданной величине параметра τ). Видно появление пространственных структур. Это означает, что движение микрочастиц происходит, главным образом, вблизи дефектов, что качественно отличается от подобной картины для расплавленной системы, когда такое поле смещений является значительно более однородным⁷. Отметим, что несмотря на большую подвижность дефектов в такой системе, их температура практически не отличается от температуры основной массы частиц с 6-ю соседями. Этот результат был получен при МД моделировании кристаллизующейся системы Юкавы (с $N = 10^6$) без учёта трения, чтобы исключить эффекты, связанные с ланжевеновским термостатом.

Выше мы рассмотрели некоторые параметры порядка, которые характеризуют плавление и кристаллизацию двумерной КП и связаны со свойствами структурных дефектов. Рассмотрим теперь подробнее кинетику

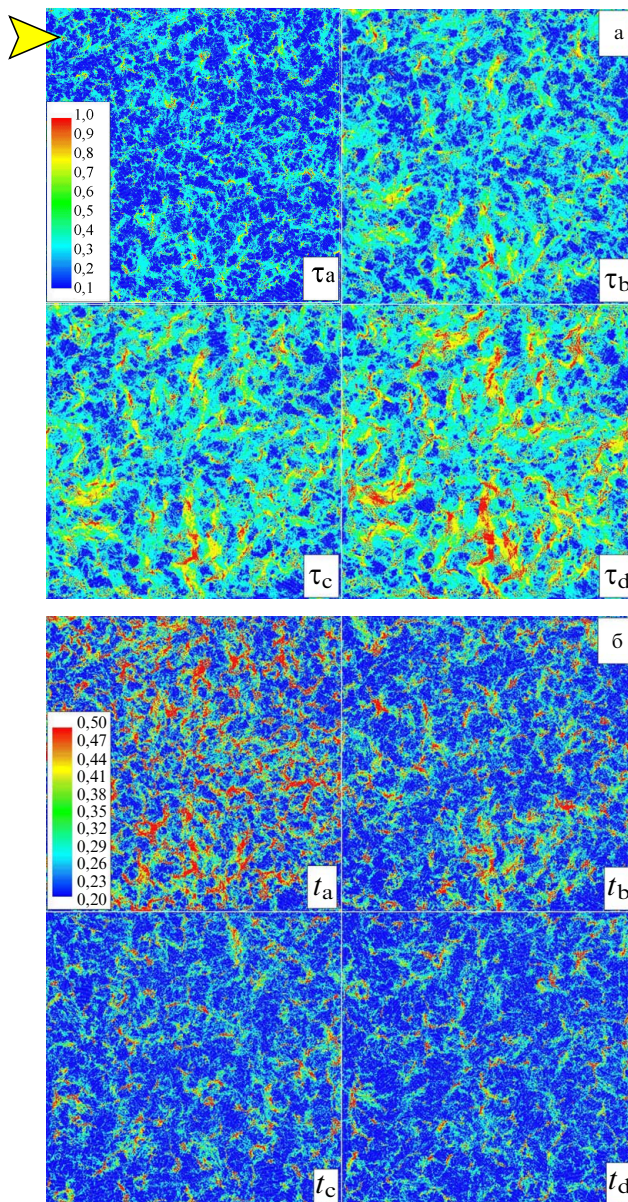


Рис. 10. (В цвете и анимация онлайн.) Поле смещений $\delta r_i^2(t, \tau)$ (нормализованное на межчастичное расстояние) для кристаллизующейся системы Юкавы. Эволюция поля смещения: (а) в разные моменты времени τ ($\tau_a < \tau_b < \tau_c < \tau_d$) при фиксированном t ; (б) на разных стадиях t ($t_a < t_b < t_c < t_d$) кристаллизации системы (при заданной величине параметра τ). Хорошо видно появление пространственных структур (движение микрочастиц происходит главным образом вблизи дефектов), что качественно отличается от подобной картины для расплавленной системы, когда поле смещений является значительно более однородным.

тику дефектов, которая играет исключительно важную роль в физике плавления и кристаллизации. Выше уже было отмечено, что в системе Юкавы в области близкой к фазовому переходу кристалл–жидкость преобладают парные дефекты — относительно устойчивые пары дефектов, состоящие из частиц с 5-ю и 7-ю ближайшими соседями. Описание взаимодействия между такими парными дефектами — один из важных и ещё нерешённых вопросов. Из МД моделирования (анимация прилагается к электронной версии статьи) хорошо видно наличие эффективного притяжения между парными дефектами, а результат взаимодействия зависит от их взаимной ориентации: при одной ориентации парные дефекты

⁷ Для наглядности эволюция поля смещения микрочастиц на разных временных шкалах представлена также в виде компьютерной анимации, помещённой в электронную версию данной статьи на сайте www.ufn.ru.

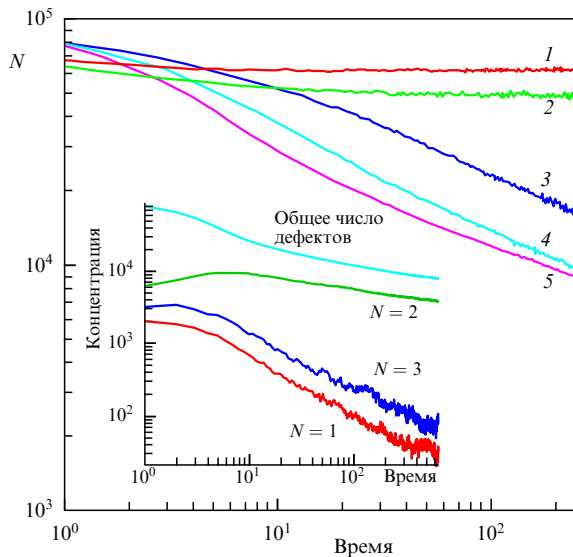


Рис. 11. (В цвете онлайн.) Зависимость числа точечных дефектов в двумерной системе Юкавы от времени при разных температурах T_d микрочастиц: T_d уменьшается от красного цвета (1) к фиолетовому (5). Вставка показывает как исчезают дефекты с разной массой (показана временная эволюция дисклиний ($N=1$), дислокаций ($N=2$) и кластеров с $N=3$) в кристаллизующейся системе Юкавы.

аннигилируют (рекомбинируют), при другой образуют кластер из четырёх дефектов, который, как правило, линейный: 5–7–5–7.

На рисунке 11 показано, как полная концентрация дефектов меняется со временем при разных температурах T_d микрочастиц в двумерной КП. Отметим важный результат: при температуре выше пороговой, некой T_m (которую естественно связать с температурой плавления), концентрация дефектов в системе относительно быстро устанавливается. Можно показать, что также устанавливается и распределение кластеров из дефектов по размерам и другие параметры порядка, описанные выше.

При $T_d < T_m$ характерное время τ_{eq} выхода системы на равновесие (по концентрации дефектов) резко увеличивается, что хорошо видно на рис. 11. По этой причине, в представленных расчётах квазистационарные концентрации дефектов при $T_d < T_m$ не были достигнуты. Дополнительно: дефекты разной массы аннигилируют с разным темпом, что показано на вставке к рис. 11: дисклинии ($N=1$) и кластеры, состоящие из трёх точечных дефектов ($N=3$), рекомбинируют существенно быстрее, чем дислокации ($N=2$).

Это, в частности, означает, что распределение дефектов в кристаллизующейся системе Юкавы меняется со временем. Время установления равновесия в рассмотренной системе τ_{eq} растёт очень сильно с уменьшением температуры T_d (или увеличением параметра неидеальности Γ) так, что уже в подпороговой области легко реализуется ситуация, когда это время значительно превышает характерное время эксперимента. При ещё меньших температурах подвижность дефектов резко снижается и наблюдается эффект закалки дефектов, когда их концентрация сверхравновесна и очень слабо меняется со временем. Поэтому практически все эксперименты с двумерными плазменными кристаллами в КП имеют в качестве объекта кристаллизующуюся, неравновесную систему. Таким образом, кинетика дефектов даёт ещё

один важный параметр порядка — характерное время τ_{eq} . Отметим также, что в качестве параметров порядка можно использовать и различные метрики распределения кластеров $W_c(N)$ по массе, например, параметры $W_c(2)/W_c(4)$ или $W_c(2)/W_c(1)$ и т.д.

На рисунке 12 показано как меняются метрики, характеризующие локальный и ориентационный порядок при разных Γ . Представлены относительная плотность N_6/N микрочастиц с 6-ю соседями (красные сплошные кружки) и кумулянт распределения микрочастиц по параметру $|\Psi_6|$. На вставке показаны распределения Ψ_6 для расплава (синяя сплошная линия) и для кристалла (оранжевая сплошная линия); для кристаллической фазы характерно наличие двух пиков, которые образуются из-за наличия точечных дефектов с 5-ю и 7-ю ближайшими соседями. Кумулянты этих распределений показаны пунктирной линией того же цвета. Видно резкое уменьшение параметров порядка (плавление системы) при $\Gamma < \Gamma_m \sim 150$ (что соответствует температуре микрочастиц $T_m \simeq 6000$ К). Видно, что ориентационный параметр порядка гораздо более чувствителен к изменению Γ , чем параметр N_6/N . Можно легко показать, что изменение $\delta\langle\Psi_6\rangle \propto \delta T_d$ в области $\Gamma \sim 10^3$, где параметр локального порядка N_6/N практически неизменен. Отметим, что поскольку значения данных параметров порядка для $\Gamma > \Gamma_m$ неравновесны, то их величины были вычислены для одного и того же времени релаксации системы Юкавы, взятой с одним и тем же начальным сверхравновесным распределением дефектов в пространстве. При ещё больших значениях Γ наблюдается эффект закалки, описанный выше, при котором начинается спад параметров порядка с ростом Γ . Изменение концентрации структурных дефектов со временем в двумерной КП можно

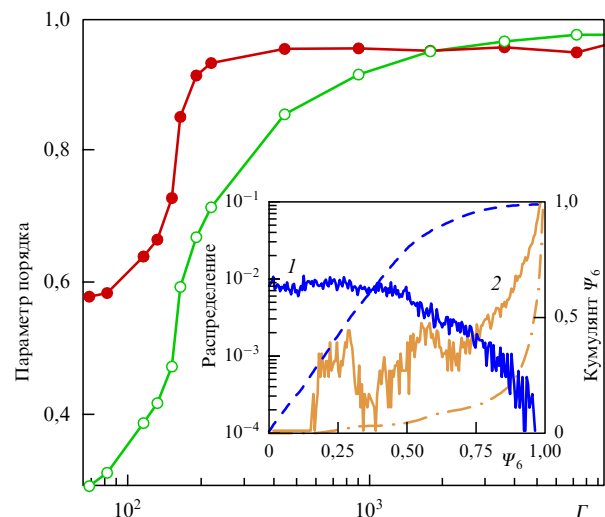


Рис. 12. (В цвете онлайн.) Зависимости параметров порядка от параметра неидеальности Γ для двумерной системы Юкавы. Представлены характеристика локального порядка — относительная плотность N_6/N микрочастиц с 6-ю соседями (красные сплошные кружки) и характеристика ближнего ориентационного порядка — кумулянт распределения функции Ψ_6 (светлые кружки). На вставке показаны распределения Ψ_6 для расплава (синяя кривая 1) и для кристалла (оранжевая кривая 2). Кумулянты этих распределений показаны пунктирной (синей) и штрихпунктирной (оранжевой) линией, соответственно. Видно резкое уменьшение параметров порядка (плавление системы) при $\Gamma < \Gamma_m \sim 150$ (что соответствует температуре микрочастиц $T_m \simeq 6000$ К).

описать используя уравнение баланса:

$$\frac{\partial n_d}{\partial t} = q_d - \alpha_d n_d^2, \quad (16)$$

где n_d — концентрация точечных дефектов в системе, слагаемые $q_d, \alpha_d n_d^2$ описывают образование и гибель этих дефектов. Как было уже отмечено, дефекты разной массы аннигилируют в кристаллизующейся КП с разными темпами, тем не менее, поскольку особенности кластеризации дефектов в такой системе уже более или менее выяснены, такое простое описание кинетики дефектов может быть весьма продуктивным. В уравнении (16) для простоты предполагается, что аннигиляция дефектов происходит при их парных столкновениях, т.е. пренебрегается, например, многочастичными процессами их гибели. В наиболее интересной для нас области фазового перехода концентрация дефектов не очень велика, гибель дефектов определяется, главным образом, аннигиляцией парных дефектов (дислокаций) и, следовательно, это предположение оправдано. В состоянии квазиравновесия концентрация дефектов определяется как $n_d^2 = q_d / \alpha_d$.

На рисунке 13 представлена зависимость квадрата концентрации дефектов n_d^2 в двумерной КП от температуры микрочастиц в области перехода кристалл–жидкость. Прежде всего следует отметить линейный рост параметра n_d^2 в надпороговой области (при $T_d > T_m$, где концентрация дефектов быстро становится квазиравновесной), что означает важную связь между темпом образования и гибели дефектов: $n_d^2 = q_d / \alpha_d \propto (T_d - T_m)$. В подпороговой области при температуре микрочастиц $T_d < T_m$ параметр q_d / α_d сильно уменьшается и характерное время установления квазистационарной концентрации дефектов, как было отмечено выше, резко увеличивается. Темп аннигиляции дефектов, как видно из рис. 11, меняется не очень сильно в области перехода, следовательно, резко падает темп образования дефектов q_d . Параметры q_d и n_d^2 могут быть также использованы как параметры порядка, характеризующие плавление двумерной КП. На рисунке 13 хорошо виден излом в концентрации дефектов при $T_m \simeq 6000$ К (такой темпе-

ратуре микрочастиц соответствует параметр неидеальности $\Gamma_m \simeq 150$). Как и при вычислении параметров порядка (см. рис. 12) для $T < T_m$ концентрация дефектов (будучи неравновесной) вычислялась для одного и того же времени релаксации КП и при одном и том же начальном пространственном распределении дефектов. Квазиравновесные концентрации дефектов при $T < T_m$ не были достигнуты, поскольку требовали очень большого времени вычислений, поэтому значения n_d^2 , указанные на рис. 13, являются сверхравновесными. Отметим, что излом в поведении параметра порядка n_d^2 , наблюдаемый при $T = T_m$, указывает на плавление двумерной КП как на фазовый переход второго рода.

4. Заключение

Рассмотренные в настоящей заметке особенности плавления и кристаллизации КП позволяют предложить ряд новых параметров порядка, характеризующих фазовый переход кристалл–жидкость и вывести новые критерии плавления таких систем.

В случае трёхмерной КП как эксперименты, проведённые недавно на борту космической станции МКС, так и результаты численного моделирования системы Юкавы, упрощенно описывающей взаимодействие между микрочастицами в КП, позволяют вывести такие параметры порядка. Критерии плавления и предплавления трёхмерной КП, как показано здесь, можно вывести из характеристик локального порядка — распределения пылевых микрочастиц в зависимости от величин вращательных инвариантов различного ранга. Кумулянты указанных распределений, будучи чрезвычайно чувствительными к фазовому состоянию КП, позволяют описать переход кристалл–жидкость. С помощью таких кумулянтов легко определить присутствие в системе даже малых фракций различных типов кристаллической решётки. Например, в обсуждаемых выше космических экспериментах наблюдалось предплавление плазменного кристалла, т.е. постепенное исчезновение из системы малых твердотельных фракций — кластеров ГЦК (fcc) и ОЦК (bcc). Важно отметить, что предложенные критерии плавления трёхмерной КП, в отличие от динамических критериев плавления (подобных критерию Линдемана), не требуют знания траекторий частиц: достаточно всего лишь нескольких мгновенных снимков системы, чтобы определить её фазовое состояние.

Плавление и кристаллизация двумерной КП были также рассмотрены на примере эволюции ограниченной системы Юкавы, рассмотренной при разных температурах микрочастиц. Специфика двумерной КП, испытывающей фазовый переход кристалл–жидкость, заключается в том, что для нахождения параметров порядка, описывающих указанный переход, необходимо исследовать поведение относительно больших систем с числом микрочастиц $N > 10^6$, что на сегодняшний день возможно только численно, с использованием методов МД (возможности современных экспериментов с комплексной и коллоидной плазмой, к сожалению, отстают, как минимум, на два порядка (см., например, [50])). Подобные расчёты были проведены и была подробно изучена кинетика дефектов в двумерной КП вблизи области указанного фазового перехода. Найдены важные параметры порядка, описывающие плавление и кристаллизацию двумерных и квазидвумерных систем. Среди них

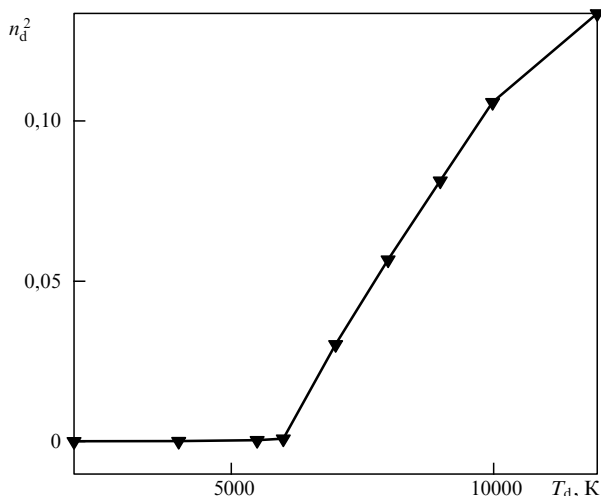


Рис. 13. Зависимость квадрата концентрации дефектов n_d^2 в двумерной системе Юкавы от температуры микрочастиц T_d . Излом в данной зависимости близок к области фазового перехода кристалл–жидкость; температура перехода $T_m \simeq 6000$ К, что соответствует величине $\Gamma \sim 150$.

распределение кластеров дефектов по размерам (массе), которое резко меняется в области фазового перехода и производные от указанного распределения. Важным параметром порядка является и форма кластеров из дефектов; показано, что фрактальная размерность таких кластеров резко меняется в точке фазового перехода. Особенности кинетики дефектов при разных температурах микрочастиц позволяют также ввести ряд новых параметров порядка, таких, например, как концентрация дефектов и характерное время установления квазиравновесной концентрации дефектов, которое резко меняется в области фазового перехода. Это приводит, как правило, к сильной неравновесности экспериментально наблюдаемых двумерных плазменных кристаллов, в частности, к нестационарности пространственных корреляций (например, ориентационного порядка Ψ_6) в системе микрочастиц. Логичнее поэтому называть такие системы кристаллизующимися, а не кристаллизованными.

Предложенные параметры порядка, как мы надеемся, заметно расширяют наши представления о фазовом переходе кристалл–жидкость. Отметим, что применимость предложенных критериев не обязательно ограничивается только комплексной плазмой, а может быть распространена практически на любые системы близкие к фазовому переходу кристалл–жидкость.

Благодарности. Я благодарен всем участникам Семинара по физике твёрдого тела Отделения теоретической физики им. И.Е. Тамма Физического института им. П.Н. Лебедева РАН за проявленный интерес к данной работе и полезное обсуждение на заседании 6 апреля 2010 г. Также хочу выразить глубокую признательность Е.Г. Максимова и С.М. Апенко, чьи замечания и пожелания позволили существенно улучшить данную заметку.

Список литературы

1. Фортон В Е и др. *УФН* **174** 495 (2004) [Fortov V E et al. *Phys. Usp.* **47** 447 (2004)]
2. Morfill G E et al. *Contrib. Plasma Phys.* **44** 450 (2004)
3. Morfill G E et al. *Phys. Scripta* **T107** 59 (2004)
4. Robbins M O, Kremer K, Grest G S *J. Chem. Phys.* **88** 3286 (1988)
5. Morfill G E et al. *Phys. Rev. Lett.* **92** 175004 (2004)
6. Rubin-Zucic M et al. *Nature Phys.* **2** 181 (2006)
7. Клумов Б А, Рубин-Зузиц М, Морфилл Г Е *Письма в ЖЭТФ* **84** 636 (2006) [Klumov B A, Rubin-Zucic M, Morfill G E *JETP Lett.* **84** 542 (2006)]
8. Zucic M et al. *Phys. Rev. Lett.* **85** 4064 (2000)
9. Arp O et al. *Phys. Rev. Lett.* **93** 165004 (2004)
10. Mitic S et al. *Phys. Rev. Lett.* **101** 125002 (2008)
11. Bedanov V M, Gadiyak G V, Lozovik Yu E *Phys. Lett. A* **109** 289 (1985)
12. Zahn K, Maret G *Phys. Rev. Lett.* **85** (17) 3656 (2000)
13. Chu J H, Lin I *Phys. Rev. Lett.* **72** 4009 (1994)
14. Thomas H et al. *Phys. Rev. Lett.* **73** 652 (1994)
15. Ikezi H *Phys. Fluids* **29** 1764 (1986)
16. Konopka U, Morfill G E, Ratke L *Phys. Rev. Lett.* **84** 891 (2000)
17. Ivlev A V et al. *Phys. Rev. Lett.* **100** 095003 (2008)
18. Klumov B et al. *Plasma Phys. Control. Fusion* **51** 124028 (2009)
19. Klumov B A et al. *EPL* (2010) (in press)
20. Raveché H J, Mountain R D, Streett W B *J. Chem. Phys.* **61** 1970 (1974)
21. Steinhardt P J, Nelson D R, Ronchetti M *Phys. Rev. B* **28** 784 (1983)
22. Auer S, Frenkel D *J. Chem. Phys.* **120** 3015 (2004)
23. Клумов Б А, Морфилл Г Е *Письма в ЖЭТФ* **87** 477 (2008), [Klumov B A, Morfill G E *JETP Lett.* **87** 409 (2008)]; *ЖЭТФ* **134** 477 (2008), [*JETP* **107** 908 (2008)]
24. Березинский В Л *ЖЭТФ* **59** 907 (1970) [Berezinskii V L *JETP* **32** 493 (1971)]
25. Kosterlitz J M, Thouless D J *J. Phys. C Solid State Phys.* **6** 1181 (1973)
26. Nelson D R, Halperin B I *Phys. Rev. B* **19** 2457 (1979)
27. Young A P *Phys. Rev. B* **19** 1855 (1979)
28. Пятаевский Л П *УФН* **176** 345 (2006) [Pitaevskii L P *Phys. Usp.* **49** 333 (2006)]
29. Lewenstein M et al. *Adv. Phys.* **56** 243 (2007)
30. Geim A K, Novoselov K S *Nature Mater.* **6** 183 (2007)
31. Морозов С В, Новоселов К С, Гейм А К *УФН* **178** 776 (2008) [Morozov S V, Novoselov K S, Geim A K *Phys. Usp.* **51** 744 (2008)]
32. Guíllamón I et al. *Nature Phys.* **5** 651 (2009)
33. Gasser U J *Phys. Condens. Matter* **21** (20) 203101 (2009)
34. Bowick M J, Giomi L *Adv. Phys.* **58** (5) 449 (2009)
35. Lipowsky P et al. *Nature Mater.* **4** 407 (2005)
36. Shukla P K, Eliasson B *Rev. Mod. Phys.* **81** 25 (2009)
37. Pertsinidis A, Ling X S *Nature* **413** 147 (2001)
38. Thomas H M, Morfill G E *Nature* **379** 806 (1996)
39. Chu J H, Lin I *Phys. Rev. Lett.* **72** 4009 (1994)
40. Woon W-Y, Lin I *Phys. Rev. Lett.* **92** 065003 (2004)
41. Hartmann P et al. *Phys. Rev. E* **72** 026409 (2005)
42. Naidoo K J, Schnitker J J *J. Chem. Phys.* **100** 3114 (1994)
43. Qi W-K et al. *J. Phys. Condens. Matter* **20** 245102 (2008)
44. Reichhardt C, Reichhardt C J O *Phys. Rev. Lett.* **90** 095504 (2003)
45. Couëdel L et al. *Phys. Rev. Lett.* **103** 215001 (2009)
46. Клумов Б А, Морфилл Г Е *Письма в ЖЭТФ* **90** 489 (2009) [Klumov B A, Morfill G E *JETP Lett.* **90** 444 (2009)]
47. Frenkel D, Smit B *Understanding Molecular Simulation: from Algorithms to Applications* (San Diego: Academic Press, 2002)
48. Клумов Б А, Морфилл Г Е *Письма в ЖЭТФ* **85** 604 (2007) [Klumov B A, Morfill G E *JETP Lett.* **85** 498 (2007)]
49. Somer F L (Jr.) et al. *Phys. Rev. Lett.* **79** 3431 (1997)
50. Knapek C A et al. *Phys. Rev. Lett.* **98** 015004 (2007)

On melting criteria for complex plasma

B.A. Klumov

Max-Planck Institute for Extraterrestrial Physics, Postfach 1312, Giessenbachstrasse 85748, Garching 85741, Germany

Tel. (49 89) 30000-33-96. Fax (49 89) 30000-35-69. E-mail: klumov@mpe.mpg.de

Institute of Thermophysics of Extreme States, Joint Institute for High Temperatures, Russian Academy of Sciences,

ul. Izhorskaya 13/19, 125412 Moscow, Russian Federation. Tel. (7-495) 485 81-77. E-mail: klumov@ihed.ras.ru

The present note considers melting criteria for a plasma crystal discovered in dust plasma in 1994. Separate discussions are given to three-dimensional (3D) and two-dimensional (2D) systems. In the 3D case, melting criteria are derived based on the properties of local order in a system of microparticles. The order parameters are constructed from the cumulative distributions of the microparticle histograms as functions of various rotational invariants. The melting criteria proposed are constructed using *static* information on microparticle positions: a few snapshots of the system that allow for the determination of particle coordinates are enough to determine the phase state of the system. It is shown that criteria obtained in this way describe well the melting and premelting of 3D complex plasma. In 2D, a system of microparticles interacting via a screened Coulomb (i.e., Debye–Hückel or Yukawa) potential is considered as an example, using molecular dynamics simulations. A number of new order parameters characterizing the melting of 2D complex plasmas are considered. The order parameters and melting criteria proposed for 2D and 3D complex plasmas can be applied to other systems as well.

PACS numbers: 52.27.Lw, 52.65.Yy, 61.72.J–, 64.70.D–
Bibliography — 50 references
Uspekhi Fizicheskikh Nauk **180** (10) 1095–1108 (2010)

DOI: 10.3367/UFNr.0180.201010e.1095
Received 27 April 2010, revised 22 June 2010
Physics – Uspekhi **53** (10) (2010)