

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Объединенный
институт высоких температур Российской академии наук (ОИВТ РАН)

На правах рукописи

УДК 533.9

Николаев Владислав Сергеевич

**Динамические свойства и фазовые переходы
в неоднородных плазменно-пылевых системах**

1.3.9 – Физика плазмы

ДИССЕРТАЦИЯ

на соискание ученой степени

кандидата физико-математических наук

Научный руководитель

к. ф.-м. н.

Тимофеев Алексей Владимирович

Москва – 2022

Оглавление

Введение	5
Глава 1. Обзор литературы	13
1.1. Пылевая плазма и упрощенная модель для ее описания	13
1.2. Структурные свойства юкавовских кластеров	16
1.3. Динамические свойства и плавление в юкавовских кластерах из малого числа частиц	17
1.4. Неоднородность структурных свойств систем заряженных частиц в удерживающей ловушке	20
1.5. Экспериментальные исследования пространственной неоднород- ности плазменно-пылевых систем	21
1.6. Теория динамики кристаллической решетки применительно к юка- вовским системам	22
1.7. Критерии плавления плазменно-пылевых кристаллов	24
1.8. Критерий плавления систем из ограниченного числа частиц	25
1.9. О сценариях плавления плазменно-пылевого монослоя в лабора- торном эксперименте	26
1.10. Невзаимность сил, действующих между пылевыми частицами	28
1.11. Метод молекулярной динамики применительно к плазменно-пыле- вым системам	30
Глава 2. Аналитическая теория неоднородности динамических свойств систем заряженных частиц в параболическом конфай- нменте	33
2.1. Пространственная неоднородность динамических характеристик упорядоченной системы заряженных частиц в ловушке	33
2.1.1. Модель взаимодействия частиц	33

2.1.2.	Амплитуда тепловых колебаний частиц в пространствен- но неоднородной системе	34
2.1.3.	Пространственная неоднородность параметров Линдеман- на и неидеальности	36
2.2.	Обсуждение полученных результатов	37
2.3.	Сопоставление с экспериментальными данными	38
2.4.	Выводы ко второй главе	40
Глава 3. Методика численного моделирования систем заряжен-		
ных частиц в конфайнменте		
3.1.	Модель взаимодействия пылевых частиц друг с другом и с окру- жающей плазмой	41
3.2.	Границы применимости используемых моделей взаимодействия частиц	45
3.3.	Вывод системы заряженных частиц в ловушке на равновесие и последующее усреднение характеристик	46
3.4.	Расчет локальных значений структурных и динамических пара- метров системы	47
3.5.	Выводы к третьей главе	49
Глава 4. Неоднородность динамических свойств квазиодномер-		
ных, квазидвумерных и трехмерных систем заряженных ча-		
стиц в конфайнменте		
4.1.	Неоднородность структурных свойств цепочечных, квазидвумер- ных и трехмерных систем заряженных частиц под влиянием па- раболического конфайнмента	50
4.1.1.	Неоднородность структурных свойств цепочечной системы	51
4.1.2.	Неоднородность структурных свойств квазидвумерной и трехмерной систем	53

4.2.	Неоднородность динамических свойств цепочечных, квазидвумерных и трехмерных систем заряженных частиц под влиянием параболического конфайнмента	56
4.2.1.	Неоднородность динамических свойств цепочечной системы	56
4.2.2.	Неоднородность динамических свойств квазидвумерной и трехмерной систем	60
4.3.	Сопоставление результатов с экспериментальными данными	66
4.4.	Выводы к четвертой главе	69
Глава 5. Неоднородность фазового состояния плазменно-пылевого монослоя с учетом невзаимных эффектов		70
5.1.	Пространственная неоднородность свойств монослоя с учетом невзаимных эффектов	71
5.2.	Сосуществование фаз и сценарий плавления в юкавовском монослое	79
5.3.	Сценарий развития неустойчивости связанных мод в пространственно неоднородном монослое	87
5.4.	Сравнение полученных результатов с экспериментом	98
5.5.	Выводы к пятой главе	98
Заключение		101
Список литературы		104

Введение

Актуальность темы исследования.

Актуальность исследования плазменно-пылевых систем заключается в том, что понимание их свойств необходимо для совершенствования технологических процессов (технологий термоядерного синтеза, травления микросхем). Пылевая плазма широко распространена в природе (атмосфере Земли, межпланетной среде). Ее уникальные свойства в лабораторных установках обуславливают возможность проведения аналогий с классическим конденсированным веществом и активной материей.

В последние десятилетия особое внимание при экспериментальном исследовании плазменно-пылевых систем уделяется их структурным и фазовым превращениям под воздействием изменения параметров плазмы и внешних факторов, таких как внешние электрические и магнитные поля, градиенты температуры, лазерное излучение. При этом теоретическое описание таких превращений затруднено в связи с многопараметрическим характером задачи о поведении пылевых частиц, обусловленным особенностями взаимодействия самих пылевых частиц и их влиянием на параметры окружающей плазмы.

Одним из важных факторов, определяющих свойства плазменно-пылевых систем, является конфайнмент, препятствующий разлету одноименно заряженных пылевых частиц. Развитие модели, описывающей влияние конфайнмента на динамические свойства и сценарий фазовых переходов в системах заряженных частиц, — важная фундаментальная задача, результаты решения которой применимы не только к пылевой плазме, но и к другим системам заряженных частиц: однокомпонентной и коллоидной плазме, антивеществу, ионам в ловушках. Глубокое понимание динамических свойств и фазовых переходов в плазменно-пылевых системах обосновывает возможность их дальнейшего использования в качестве наглядной модели конденсированного вещества и мягкой материи.

Степень разработанности темы исследования.

Внешний конфайнмент влияет как на структурные, так и на динамические свойства плазменно-пылевых систем. Основными свойствами, допускающими теоретический расчет и измерение в эксперименте, являются плотность частиц, концентрация точечных дефектов, транспортные и спектральные характеристики. Среди основных способов теоретического расчета указанных свойств можно выделить аналитические подходы и численные методы решения уравнений движения заряженных пылевых частиц, аналогичные методу классической молекулярной динамики.

В работах Тоцуджи [1, 2, 3] для квазидвумерной системы из частиц, взаимодействующих по потенциалу Юкавы в параболическом конфайнменте, продемонстрирована пространственная неоднородность плотности системы: за счет действия ловушки расстояние между частицами увеличивается к краю структуры. Этот результат позднее объяснен на основании решения вариационной задачи в работах Хеннинга и др. [4, 5], получено аналитическое выражение для радиального профиля плотности. Клумовым [6] проведен анализ радиальных профилей плотности частиц при различных величинах константы экранировки юкавовского потенциала. Также Клумовым отмечена возможность использования локальной концентрации точечных дефектов в качестве индикатора степени упорядоченности произвольной области системы.

Влияние конфайнмента на динамические свойства до сих пор рассмотрено только в работе Тоцуджи [2], где показано, что среднеквадратичное смещение частиц от исходных положений в расплавленной квазидвумерной системе частиц растет со временем существенно быстрее в периферийных областях структуры.

Детальный экспериментальный анализ пространственной неоднородности пылевых структур проведен для ряда условий в квазиодномерных [7] и квазидвумерных [8] системах. Монотонное уменьшение плотности от центра к краю системы подтверждается результатами измерений. Обнаружено различие вели-

чины средней кинетической энергии пылевых частиц в центре и на краю структуры [8].

Цели и задачи диссертационной работы:

1. Развитие аналитической теории, описывающей пространственную неоднородность динамических характеристик систем заряженных частиц в параболической электростатической ловушке в квазигармоническом приближении;

2. Анализ пространственного распределения динамических и спектральных характеристик в системе заряженных частиц в конфайнменте при помощи методов численного моделирования в широком диапазоне температур;

3. Разработка локального критерия плавления для количественного анализа процесса неоднородного плавления в системах из конечного числа заряженных частиц в параболическом конфайнменте;

4. Анализ сценариев плавления плазменно-пылевых систем под влиянием их пространственной неоднородности и невзаимности сил, действующих между пылевыми частицами в определенных условиях лабораторного эксперимента;

5. Анализ сценария развития неустойчивости связанных мод в пространственно неоднородном плазменно-пылевом монослое при помощи численных методов решения уравнений движения пылевых частиц.

Научная новизна.

В работе при помощи аналитических подходов, основанных на квазигармоническом приближении теории динамики кристаллической решетки, и численных методов, основанных на решении уравнений движения пылевых частиц, развивается теория неоднородности динамических свойств, в том числе амплитуды и характерных частот тепловых колебаний частиц, параметров Линдемана и неидеальности, в системах заряженных частиц в параболическом конфайнменте, в том числе в плазменно-пылевых структурах. Эта теория дополняет работы по неоднородности структурных свойств, в том числе плотности, межчастичного расстояния в таких системах [2, 4, 6].

Показано, что параметр флуктуации межчастичного расстояния, исполь-

зубый в качестве индикатора степени упорядоченности кластеров из конечного числа частиц с парным потенциалом взаимодействия [9, 10], может быть адаптирован в локальном приближении и для систем зарядов в центральной удерживающей ловушке. В диссертации демонстрируется, что в таких системах данный параметр имеет неоднородный радиальный профиль. Локальное значение параметра может использоваться для определения условий плавления произвольно выбранной подсистемы.

Проведен анализ сценария развития неустойчивости связанных мод [11] в плазменно-пылевом монослое в условиях, характерных для лабораторного эксперимента. Показано, что критерии для развития неустойчивости также носят локальный характер: она возникает в наиболее плотной области монослоя и затухает в разреженной, что может приводить к интересному явлению — сосуществованию более плотной расплавленной подсистемы с разреженной упорядоченной.

Хорошим показателем научной новизны является ежегодный конкурс на соискание медалей Российской академии наук с премиями для молодых ученых России и для студентов вузов России за лучшие научные работы. Часть из представленных в диссертации результатов была отмечена медалью в области физико-технических проблем энергетики в 2018 году.

Теоретическая и практическая значимость.

Теоретическая значимость работы заключается в детальном анализе влияния эффектов конечности размеров и удерживающего конфайнмента на динамические свойства и фазовые превращения систем заряженных частиц. Важным вопросом, имеющим широкую значимость, является развитие локального критерия плавления, позволяющего независимо определять условия плавления областей системы в локальном приближении.

Практическая значимость работы состоит в применимости полученных результатов к экспериментальным исследованиям плазменно-пылевых систем и других систем заряженных частиц: однокомпонентной и коллоидной плазмы,

антивещества, ионов в ловушках. Предлагаемый подход к рассмотрению таких систем как систем принципиально неоднородных стимулирует дальнейшие академические исследования фазовых переходов в таких системах и прикладные исследования способов удержания систем заряженных частиц.

Положения, выносимые на защиту.

В диссертации рассматриваются динамические свойства и фазовые переходы в системах заряженных частиц в параболической ловушке с учетом присущей таким системам структурной неоднородности. Обосновывается локальный подход к расчету их характеристик. На защиту выносятся следующие положения:

1. Функциональная связь между локальным значением плотности и амплитудой тепловых колебаний частиц в пространственно неоднородной системе сильно экранированных зарядов в параболическом конфайнменте.

2. Пространственная неоднородность динамических характеристик — амплитуды и характерной частоты тепловых колебаний частиц, параметра Линдемана — в системе сильно экранированных зарядов в параболическом конфайнменте.

3. Локальный подход к рассмотрению систем сильно экранированных зарядов в параболическом конфайнменте, в том числе локальный критерий плавления таких систем, основанный на расчете параметра флуктуации межчастичного расстояния для выделенной области системы.

4. Режим развития неустойчивости связанных мод в плазменно-пылевом монослое, при котором неустойчивость локализована в центре структуры, не затрагивает ее внешние оболочки и существенно изменяет ее динамические свойства по сравнению с классическим юкавовским монослоем.

5. Два режима стационарного сосуществования областей в упорядоченном и неупорядоченном состоянии в плазменно-пылевом монослое, в том числе режим, в котором плотная расплавленная центральная область сосуществует с разреженной и упорядоченной периферией системы.

Методология и методы исследования. Применяются аналитические подходы, основанные на теории динамики кристаллической решетки в квазигармоническом приближении. Компьютерное моделирование выполняется в программном пакете LAMMPS и при помощи самостоятельно разработанного кода на ведомственных суперкомпьютерах. Обработка данных, полученных по результатам компьютерного моделирования, ведется при помощи самостоятельно подготовленных алгоритмов разбиения структуры на подсистемы с последующим усреднением интересующих величин в этих подсистемах. На каждом этапе обработки данных производится проверка сходимости рассчитываемых величин и оценка ошибки усреднения.

Степень достоверности и апробация результатов.

Результаты, полученные при помощи аналитических подходов и методов компьютерного моделирования, находятся в согласии с известными экспериментальными данными. Основные результаты диссертации докладывались на следующих конференциях: Российские симпозиумы «Фундаментальные основы атомистического многомасштабного моделирования» (Новый Афон, Абхазия, 2015, 2016, 2018), Научные конференции МФТИ (Москва, Россия, 2014-2021), International Conferences on Equations of State for Matter (Эльбрус, Россия, 2016, 2018, 2022), International Conferences on Interaction of Intense Energy Fluxes with Matter (Эльбрус, Россия, 2017, 2019), Scientific-Coordination Workshop on Non-Ideal Plasma Physics (Москва, Россия, 2016-2019, 2021), International Workshop Complex Systems of Charged Particles and Their Interactions with Electromagnetic Radiation (Москва, Россия, 2016-2019, 2022), 8th International Conference on the Physics of Dusty Plasmas (Прага, Чехия, 2017), International Conference on Plasma Science & Applications (Лакхнау, Индия, 2019), 47th EPS Conference on Plasma Physics (онлайн, 2021).

Работа получила награду Best Student Poster Award на 8th International Conference on the Physics of Dusty Plasmas (Прага, Чехия, 2017), награду Young Achiever's Award на International Conference on Plasma Science & Applications

(Лакхнау, Индия, 2019). Часть результатов удостоена медали Российской академии наук для студентов вузов в области физико-технических энергетике в 2018 году.

Публикации. Материалы диссертации опубликованы в 43 печатных работах, из них 10 статей в рецензируемых журналах и 33 тезиса докладов. Статьи в рецензируемых журналах:

1. V. S. Nikolaev, A. V. Timofeev. Screening length in dusty plasma crystals // J. Phys.: Conf. Ser. 2016. Vol. 774, no. 1. P. 012172.

2. И. С. Самойлов, В. П. Баев, А. В. Тимофеев, Р. Х. Амиров, А. В. Кириллин, В. С. Николаев, З. В. Бедрань. Пылевая плазма в тлеющем разряде гелия в диапазоне температур 5–300 К // ЖЭТФ. 2017. Т. 151, № 3. С. 582-591.

3. V. S. Nikolaev, A. V. Timofeev. Dependence of average inter-particle distance upon the temperature of neutrals in dusty plasma crystals // J. Phys.: Conf. Ser. 2018. Vol. 946, no. 1. P. 012146.

4. А. В. Тимофеев, В. С. Николаев. Влияние параметров тлеющего разряда на среднее межчастичное расстояние в плазменно-пылевых структурах в диапазоне температур от криогенных до комнатной // ЖЭТФ. 2019. Т. 155, № 2. С. 356-370.

5. V. S. Nikolaev, A. V. Timofeev. Inhomogeneity of a harmonically confined Yukawa system // Phys. Plasmas. 2019. Vol. 26, no. 7. P. 073701.

6. V. S. Nikolaev, A. V. Timofeev. Influence of ion shadowing effect on average inter-particle distance in dusty plasma crystals // J. Phys.: Conf. Ser. 2019. Vol. 1147, no. 1. P. 012109.

7. V. S. Nikolaev, A. V. Timofeev. Inhomogeneity of a one-dimensional Yukawa system in a trap // J. Phys.: Conf. Ser. 2020. Vol. 1556, no. 1. P. 012077.

8. А. В. Тимофеев, В. С. Николаев, В. П. Семенов. Неоднородность структурных и динамических характеристик пылевой плазмы в газовом разряде // ЖЭТФ. 2020. Т. 157, № 1. С. 180-188.

9. V. S. Nikolaev, A. V. Timofeev. Nonhomogeneity of phase state in a dusty

plasma monolayer with nonreciprocal particle interactions // Phys. Plasmas. 2021. Vol. 28, no. 3. P. 033704.

10. Д. А. Колотинский, В. С. Николаев, А. В. Тимофеев. Влияние структурной неоднородности и невзаимных эффектов во взаимодействии макрочастиц на динамические свойства плазменно-пылевого монослоя // Письма в ЖЭТФ. 2021. Т. 113, № 9. С. 514-522.

Личный вклад автора. Все представленные в диссертации результаты получены лично автором. Постановка задач, вошедших в диссертационную работу, выполнена под руководством А. В. Тимофеева. Выводы и положения, выносимые на защиту, сформулированы лично автором.

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения, пяти глав, заключения, списка сокращений и библиографии. Общий объем диссертации 115 страниц включая 30 рисунков. Библиография включает 125 наименований на 12 страницах.

Глава 1

Обзор литературы

В данной главе представлен обзор результатов, доступных в академических источниках и необходимых для понимания содержания данной диссертации. Общий обзор плазменно-пылевых систем приведен в разделе 1.1. Свойства одного из типов плазменно-пылевых структур — т. н. юкавовских кластеров — подробно рассмотрены в разделах 1.2, 1.3. Теоретические и экспериментальные исследования неоднородности систем заряженных частиц в конфайнменте обсуждаются в разделах 1.4, 1.5. В разделе 1.6 приводятся основные положения теории динамики кристаллической решетки, необходимой для анализа динамических характеристик рассматриваемых в диссертации систем. Следующие разделы главы 1.7—1.9 посвящены обсуждению критериев плавления в пылевых системах и механизмов плавления плазменно-пылевого монослоя, который подробно исследуется в рамках диссертации. Затем в разделе 1.10 рассматриваются причины невзаимного характера сил, действующих между пылевыми частицами в условиях лабораторных экспериментов. В конце главы приводится краткий обзор используемых в диссертации методов компьютерного моделирования (пункт 1.11).

1.1. Пылевая плазма и упрощенная модель для ее описания

Помещенные в низкотемпературную плазму пылевые частицы околомикронных размеров приобретают большой электрический заряд вследствие отличия в подвижности ионов и электронов плазмы [12, 13, 14, 15, 16, 17]. Электростатическое взаимодействие между заряженными пылевыми частицами в условиях лабораторного эксперимента обуславливает высокую степень неиде-

альности системы [18]. Для характеристики степени неидеальности может использоваться параметр неидеальности, определенный как

$$\Gamma = \frac{Q^2/\Delta}{kT}, \quad (1.1)$$

где Q - заряд пылевой частицы, Δ - характерное расстояние между пылевыми частицами, k - константа Больцмана, T - “температура” пылевых частиц, соответствующая их средней кинетической энергии в пересчете на частицу.

В пылевой плазме величина Γ может достигать нескольких десятков тысяч [19]. В широком диапазоне параметров становится возможным образование структур, напоминающих по своим свойствам конденсированные системы. Эти структуры доступны для прямого наблюдения при помощи методов видеомикроскопии, что стимулирует интерес к исследованию широкого спектра процессов [20, 21, 22]. Изучаются особенности взаимодействия частиц [23, 24], структурные свойства пылевых систем [25, 26, 27], волновые и транспортные процессы [28, 29, 30, 31], сценарии развития неустойчивостей [32] и фазовые превращения [33, 34, 35]. Проводится аналогия между плазменно-пылевыми системами и активным веществом [36, 37]. Пылевые структуры исследуются в широком диапазоне температур разрядного газа — от криогенных до комнатной [38, 39, 40, 41, 42, 43, 44, 45].

При теоретическом описании плазменно-пылевых систем в первом приближении можно принять, что пылевые частицы взаимодействуют друг с другом по парному экранированному кулоновскому потенциалу [13]:

$$V(r) = \frac{Q^2}{\Delta} \exp(-\kappa\Delta), \quad (1.2)$$

где κ — константа экранировки. Экранированный кулоновский потенциал описывает взаимодействие слабо заряженных частиц в плазме. Он может быть выведен аналитически в результате линеаризации уравнения Пуассона за счет разложения по малому параметру больцмановской экспоненты, содержащей величину концентраций ионов и электронов плазмы. Однако заряд пылевых ча-

стиц в общем случае достаточно велик и может достигать сотен тысяч элементарных, что не позволяет выполнить линеаризацию уравнения Пуассона. Тем не менее, как показывают экспериментальные расчеты сил, действующих между пылевыми частицами, в общем случае в широком диапазоне параметров такой потенциал применим, если использовать эффективные величины заряда частиц и константы экранировки [46, 47, 48, 49].

По математической форме экранированный кулоновский потенциал эквивалентен юкавовскому [50]. Информация о структурных свойствах, дисперсионных соотношениях и фазовой диаграмме для юкавовских систем часто переносится на экспериментальные плазменно-пылевые структуры. Известно, что трехмерные юкавовские кристаллы могут иметь объемноцентрированную или гранецентрированную кубические решетки в зависимости от величины температуры и степени неидеальности системы, а двумерные юкавовские кристаллы имеют треугольную решетку [51, 52]. Такие структуры встречаются и в плазменно-пылевом эксперименте [53]. Фазовая диаграмма юкавовских систем подробно исследована как аналитически, так и при помощи методов компьютерного моделирования [54, 55].

В то же время, принципиальная ограниченность экспериментальных пылевых структур в размерах определяет их важное отличие от “бесконечных” юкавовских систем. Для удержания одноименно заряженных частиц с одинаковым значением заряда от разлета требуется действие ловушки, или конфайнмента [1]. Базовым приближением для математического описания ловушки является центральный параболический профиль потенциальной энергии частицы:

$$U_{\text{trap}} = \frac{1}{2}\alpha Qd^2, \quad (1.3)$$

где α — параметр ловушки, d — расстояние между частицей и геометрическим центром ловушки. Такое приближение применимо при не слишком большом удалении от центра ловушки. Совместный учет экранированного кулоновского

потенциала и центральной параболической ловушки при описании взаимодействия пылевых частиц является широко используемым подходом для теоретического моделирования экспериментальных пылевых структур [2, 27]. В следующих частях обзора литературы обсуждаются результаты, полученные в рамках такого модельного подхода, и открытые вопросы, рассматриваемые в рамках диссертации.

1.2. Структурные свойства юкавовских кластеров

Структурные свойства систем заряженных частиц в удерживающей электростатической ловушке зависят как от числа частиц в системе, так и от степени экранировки потенциала взаимодействия частиц.

В системах из достаточно малого числа частиц, так называемых юкавовских шарах, реализуется оболочечная структура со строго определенным числом частиц на оболочках [56]. При этом населенности оболочек демонстрируют слабую зависимость от величины константы экранировки [57]. Обнаруживаются “магические” конфигурации населенностей оболочек, при которых кластер является наиболее устойчивым [58].

С увеличением числа частиц в трехмерных системах происходит переход от ярко выраженной оболочечной структуры к организованной в кристаллическую решетку центральной области, окруженной сферическими оболочками [59]. Тип решетки в центре системы зависит от степени экранировки потенциала: для слабо экранированного потенциала решетка объемноцентрированная кубическая, для сильно экранированного — гранецентрированная кубическая. С ростом числа частиц в двумерной системе в центральной области появляется подсистема с треугольной решеткой, в то время как периферийные области остаются организованными в кольцевые оболочки [2].

Для данной диссертации именно системы из достаточно большого числа частиц (несколько сотен и более) представляют наибольший интерес. В отличие

от малых систем, они могут проявлять макроскопические свойства и характеризоваться непрерывными величинами, такими, как плотность, модуль упругости и т. д.

Отметим, что в двумерных системах переход к макроскопическому характеру свойств происходит при гораздо меньшем числе частиц (около 50), чем в трехмерных структурах (около 10000) [28, 60].

1.3. Динамические свойства и плавление в юкаковских кластерах из малого числа частиц

При исследовании динамических свойств систем из конечного числа юкаковских частиц распространенным является подход, основанный на анализе нормальных мод колебаний частиц [57, 61, 62, 63]. Для проведения анализа нормальных мод записывается выражение для полной потенциальной энергии системы:

$$E = \frac{1}{2}\alpha Q \sum_{i=1}^N d_i^2 + Q^2 \sum_{i<j}^N \frac{\exp(-\kappa\Delta_{ij})}{\Delta_{ij}}, \quad (1.4)$$

затем составляется динамическая матрица с элементами

$$A_{\beta,\gamma,ij} = \frac{\partial^2 E}{\partial r_{\beta,i} \partial r_{\gamma,j}}, \quad (1.5)$$

где $r_{\beta,i}$ обозначает x -, y - или z -координату i -ой частицы.

Нормальные моды являются набором собственных значений и векторов динамической матрицы. Они дают исчерпывающую информацию о спектре колебаний частиц в системе в квазигармоническом приближении. В плазменно-пылевых экспериментах спектр нормальных мод пылевой структуры может быть получен из данных о скорости каждой пылевой частицы на последовательных кадрах видеоряда [64, 65].

С ростом числа частиц в системе число доступных нормальных мод колебаний в общем случае увеличивается в одномерных, двумерных и трехмерных кластерах. При этом в системе с не экранированным кулоновским потенциалом

три моды сохраняют свою частоту независимо от числа частиц [66, 62]: моды, связанные с вращением системы как целого, с колебанием центра масс относительно геометрического центра ловушки, и так называемая “дышащая” мода, выраженная в однородном радиальном расширении и сжатии всей системы. В случае экранированного кулоновского потенциала частота “дышащей” моды все так же не зависит от числа частиц, но монотонно возрастает с увеличением степени экранировки потенциала [67].

Швейгертом и Питерсом на примере двумерной системы из заряженных кулоновских частиц [62] показано, как по результатам анализа нормальных мод может быть получена плотность колебательных состояний в системе и рассчитана амплитуда тепловых колебаний частиц. С использованием критерия Линдемманна делается вывод о наличии в системе двух температур плавления, связанных с внутриоболочечным и межоболочечным разупорядочением. При этом расчет параметра Линдемманна ведется относительно среднего межчастичного расстояния в системе, то есть без учета пространственной неоднородности структуры. Тем не менее, отмечается, что именно увеличение плотности в центральной области при добавлении частиц в систему приводит к повышению верхней частоты спектра возбуждений структуры.

Позднее Мельцером [64] проведено подробное экспериментальное исследование нормальных мод в квазидвумерной системе пылевых частиц. Определена частота “дышащей” моды, построена плотность колебательных состояний системы. По результатам расчета дивергенции и ротора поля собственных векторов в каждой отдельной нормальной моде обнаружено, что различные моды могут проявлять свойства либо волн сжатия, либо волн сдвига в “бесконечной” двумерной юкавовской материи. Из этого делается вывод о возможности предельного перехода от юкавовских кластеров к непрерывным двумерным кристаллам.

Бедановым и Питерсом [68] при исследовании достаточно большой системы ($N = 230$) кулоновских частиц в параболическом конфайнменте методом молекулярной динамики (МД) обнаружено отличие амплитуд колебаний частиц,

расположенных на различных оболочках структуры. Наибольшие значения амплитуд колебаний соответствовали частицам, расположенным на средних оболочках. Обсуждается связь между величиной амплитуды тепловых колебаний и температурой плавления оболочки.

Плавление как двумерных [69, 70], так и трехмерных юкавовских кластеров [71] из малого числа частиц происходит по одному сценарию: сначала с увеличением температуры становится возможным относительное вращение оболочек, теряется ориентационный порядок между соседними оболочками, в то время как в самих оболочках сохраняется внутренняя структура. Затем с дальнейшим повышением температуры начинают происходить прыжки атомов между оболочками, и разрушается позиционный порядок. Шиффер [60] обратил внимание на то, что в трехмерной системе кулоновских частиц температура плавления, имеющего признаки фазового перехода первого рода, монотонно уменьшается с ростом числа частиц в системе. Конгом [69] было продемонстрировано для достаточно небольшой двумерной системы ($N = 300$), что температура плавления различных оболочек структуры может отличаться.

Несмотря на то, что динамические свойства и сценарии плавления кулоновских и юкавовских систем, прежде всего из малого числа частиц, детально исследованы, особенности динамических характеристик в достаточно больших системах, особенно под влиянием конфайнмента, не обсуждались. В то же время, от них зависит и возможность предельного перехода от конечных систем к непрерывным кристаллам [64]. Этот вопрос особенно актуален по той причине, что из-за действия конфайнмента структурные свойства систем из большого числа частиц становятся пространственно неоднородными.

1.4. Неоднородность структурных свойств систем заряженных частиц в удерживающей ловушке

Пространственное распределение плотности частиц в системах из достаточно большого числа заряженных частиц под влиянием конфайнмента подробно исследовано. Первыми внимание на неоднородный радиальный профиль плотности в системе сильно экранированных частиц обратили Тоцуджи с коллегами [2]: с удалением от центра плотность частиц падает, расстояние между ближайшими соседями — растет. Объяснение параболической формы радиального профиля плотности получено посредством минимизации полной потенциальной энергии системы с использованием вариационного метода.

В дальнейшем Хеннингом и др. [4] на основании непрерывной модели плазмы и теории среднего поля вариационная задача для распределения плотности частиц в системе заряженных частиц решена полностью, в том числе с учетом корреляционных поправок [5]. Показано, что в пределе отсутствия экранировки, соответствующем классическому кулоновскому потенциалу взаимодействия частиц, радиальный профиль плотности является однородным. Учет экранировки приводит к качественному изменению структурных свойств системы: плотность частиц в этом случае спадает к периферии по параболическому закону. В общем случае, аналитическая зависимость плотности n от радиального расстояния r может быть выражена следующим образом:

$$n(r) = \frac{\alpha N}{4\pi(N-1)Q^2} \left(c - \frac{\kappa^2 r^2}{2} \right) \Theta(R-r), \quad (1.6)$$

где N — число частиц в структуре, R — радиус структуры, Θ — функция Хевисайда, c — константа, задаваемая соотношением

$$c = 3 + \frac{R^2 \kappa^2}{2} \frac{3 + \kappa R}{1 + \kappa R}. \quad (1.7)$$

Следующий шаг по анализу неоднородности структурных свойств систем заряженных частиц в конфайнменте был сделан Клумовым [6]. Им исследовано влияние величины константы экранировки на форму радиального профиля

плотности частиц в системе. Показано, что по форме радиального профиля можно однозначным образом восстановить значение константы экранировки, что указывает на возможность использования данных о структуре экспериментальной пылевой системы для определения параметров окружающей плазмы.

Теоретические исследования структурной неоднородности подтверждаются экспериментальными работами, которые обсуждаются в следующем разделе.

1.5. Экспериментальные исследования пространственной неоднородности плазменно-пылевых систем

Несмотря на то, что структурная неоднородность систем заряженных частиц в параболическом конфайнменте исследована как численно, так и аналитически, применимость разработанных подходов к описанию экспериментальных данных продемонстрирована в небольшом числе работ. Отдельного упоминания заслуживают работы, в которых проведено измерение радиальных профилей основных характеристик пылевых систем.

Лиу и Гори [7] проведены измерения межчастичных расстояний в квазиодномерной цепочке пылевых частиц в плазме высокочастотного разряда. Оценка заряда пылинок составляет $Q = 7600 e$, значения дебаевского радиуса экранировки — $\lambda_D = 0.86$ мм. Измерена частота колебаний уединенной частицы относительно центра электростатической ловушки. Наблюдаемая система принципиально неоднородна, градиент межчастичного расстояния составляет $\partial\Delta/\partial r \approx 0.01$.

Квазидвумерная система из пылевых частиц — плазменно-пылевой монослой — исследована Харипрасадом и др. [8] в приэлектродном слое тлеющего разряда постоянного тока. Построены парные корреляционные функции для различных областей структуры, показано, что межчастичное расстояние возрастает на 20% от центра к периферии системы. Продemonстрирована и неоднородность радиального профиля амплитуды тепловых колебаний пылевых ча-

стиц относительно равновесных положений. Описан следующий эффект: средняя кинетическая энергия (“температура”) пылевых частиц в центральной области экспериментального монослоя в ~ 3 раза выше, чем на краю структуры, что обуславливает меньшую степень неидеальности центральной подсистемы. Этот эффект является достаточно неожиданным с учетом того, что плотность в центре пылевой структуры заметно выше, чем на периферии.

Доступные экспериментальные данные позволяют провести проверку полученных в данной диссертации теоретических результатов.

1.6. Теория динамики кристаллической решетки применительно к юкавовским системам

Для развития аналитической теории, описывающей пространственную неоднородность динамических характеристик юкавовских систем в конфайнменте, в данной диссертации будет использоваться подход, основанный на теории динамики кристаллической решетки в квазигармоническом приближении. В рамках этого подхода для расчета амплитуды тепловых флуктуаций частиц относительно их положений равновесия может использоваться эйнштейновская частота, квадрат которой соответствует среднему квадрату частоты фононов в системе [72]:

$$\omega_E^2 = \langle \omega^2 \rangle. \quad (1.8)$$

Эйнштейновская частота также является характерной частотой колебаний частицы относительно положения равновесия в условиях, когда все остальные частицы в структуре “заморожены”, неподвижны. Так как решетка юкавовской системы является изотропной, в трехмерном случае потенциальная яма, в которой находится частица, также изотропна. Для определения эйнштейновской частоты в юкавовском кристалле тогда можно записать [51, 72]:

$$m\omega_E^2 = \frac{1}{3} \nabla^2 \sum_{j \neq i} V(\Delta_{ij}) = \frac{1}{3} \kappa^2 \sum_{j \neq i} V(\Delta_{ij}), \quad (1.9)$$

так как $\nabla^2 V = \kappa^2 V$. m — масса частицы, ∇ — трехмерный оператор Лапласа.

Величина ω_E^2 для удобства может быть выражена через потенциальную энергию в расчете на частицу

$$V_s = \frac{1}{2N} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^N V(\Delta_{ij}) \quad (1.10)$$

следующим образом [54]:

$$m\omega_E^2 = \frac{2}{3}\kappa^2 V_s. \quad (1.11)$$

Амплитуда тепловых колебаний в классическом пределе квазигармонического приближения для описания колебаний частиц может быть представлена как [54]

$$\langle u^2 \rangle = \frac{kT}{m} \sum_{\mathbf{q}, p} \frac{1}{\omega^2(\mathbf{q}, p)} = \frac{3k_B T}{m} \langle \omega^{-2} \rangle, \quad (1.12)$$

где суммирование ведется по волновым векторам \mathbf{q} и поляризациям p . В предположении, что все частоты фононных колебаний являются равными, что соответствует эйнштейновскому приближению, можно записать:

$$\left\langle \frac{1}{\omega^2} \right\rangle = \frac{1}{\langle \omega^2 \rangle}. \quad (1.13)$$

Тогда

$$\langle u^2 \rangle = \frac{3kT}{m\omega_E^2}. \quad (1.14)$$

Это приближение для расчета амплитуды тепловых колебаний будет использоваться в рамках диссертации. Ошибка, к которой приводит эйнштейновское приближение, определяется произведением $\langle \omega^2 \rangle \langle \omega^{-2} \rangle$, которое в бесконечных юкавовских системах лежит в пределах от 2 до 4 в зависимости от величины $\kappa\Delta$ [54]. Тем не менее, это не является критичным для решаемой в рамках диссертации задачи, так как требуются аналитические соотношения, выведенные с точностью до постоянного коэффициента.

1.7. Критерии плавления плазменно-пылевых кристаллов

Существенная часть диссертации посвящена не только изучению неоднородности динамических свойств систем заряженных частиц в конфайнменте, но и дальнейшему исследованию сценария плавления плазменно-пылевого монослоя. Особенности этого сценария напрямую проистекают из пространственной неоднородности характеристик системы. Для анализа процесса плавления в принципиально неоднородной системе необходим локальный индикатор фазового состояния.

При исследовании фазовых переходов в пылевых структурах в плазме широко используются критерии, основанные на парной корреляционной функции $g(r)$, структурном факторе $S(k)$ и ориентационной корреляционной функции $g_6(r)$. Соответствующие критерии в основном являются эмпирическими: например, критерий, опирающийся на парную корреляционную функцию, определяет точку плавления системы по отношению первого максимума функции g_1 к ее минимуму g_{min} при $r \neq 0$. Считается, что при плавлении это отношение равно 5 [19]. При использовании в качестве индикатора фазового состояния структурного фактора анализируется величина первого максимума функции, которая при кристаллизации достигает величины 2.85 [73].

Клумовым [74] предложено использовать локальные параметры порядка, к примеру, параметр локального ориентационного порядка Ψ_6 для двумерных систем, при определении параметров фазовых переходов в плазменно-пылевых структурах. Такой подход позволяет обойтись без информации о временной динамике частиц в системе.

Обсуждаемые критерии фазовых переходов наиболее хорошо подходят для однородных протяженных систем. В кластерах из малого числа частиц ограниченность размера системы в общем случае может влиять на асимптотику корреляционных функций, а высокая концентрация дефектов, вызванная искажением геометрии решетки из-за формы кластера, — на величину параметров

порядка.

Одним из распространенных критериев плавления, допускающих применение в локальном приближении, в том числе в малых системах, является критерий Линдемманна [75]. Согласно нему, при достижении величины амплитуды тепловых колебаний частицы 10 – 15 % от расстояния до ее ближайших соседей происходит плавление решетки. Пороговое отношение амплитуды тепловых колебаний к межчастичному расстоянию может варьироваться в широких пределах и определяется независимо для различных систем, в основном на основании сравнения с другими критериями. Несмотря на простоту расчета параметра Линдемманна, он не является универсальным. В частности, он не демонстрирует сходимости для двумерных систем, в связи с чем не применим для однослойных пылевых структур [76].

1.8. Критерий плавления систем из ограниченного числа частиц

Альтернативой критерию Линдемманна является критерий, основанный на параметре флуктуации межчастичных расстояний, или параметре Берри [9, 10]. Этот параметр определяется следующим образом:

$$IDF = \frac{2}{N(N-1)} \sum_{i < j} \frac{\sqrt{\langle \Delta_{ij}^2 \rangle - \langle \Delta_{ij} \rangle^2}}{\langle \Delta_{ij} \rangle}. \quad (1.15)$$

Также эта характеристика может быть определена как флуктуация длин химических связей в системе.

Впервые этот параметр был использован в расчетах методом Монте-Карло кластеров из атомов аргона [9]. Ключевое отличие флуктуации межчастичных расстояний от параметра Линдемманна заключается в том, что она рассчитывается с учетом взаимного расположения пар атомов, а не положений отдельного атома относительно соответствующего узла кристаллической решетки. Тем не

менее, эти параметры часто путают друг с другом.

Критическое значение параметра Берри, при котором происходит разрушение позиционного порядка в кластерах конечного размера, составляет около 0.1. Жоу и др. [10] показано, что IDF является более чувствительным индикатором плавления для систем из малого числа частиц, чем среднеквадратичное отклонение частиц от положения равновесия. Кроме того, этот параметр не требует исключения из расчета вращения системы как целого, что может быть особенно актуально в случае применения к системам пылевых частиц в плазме.

Отдельно отметим, что в работе Жоу и др. [10] показана возможность использовать IDF для определения процесса радиально неоднородного плавления в наночастицах, в которых может наблюдаться поверхностное предплавление.

В работах Мельцера, Бонитца, Баумгартнера и др. [76, 57, 77, 78, 79] параметр флуктуации межчастичных расстояний успешно используется для трехмерных юкаковских кластеров в параболическом конфайнменте. При этом он рассчитывается для всей системы и позволяет определить температуру, при которой скачкообразно меняются населенности оболочек кластера, характерные для его основного состояния.

1.9. О сценариях плавления плазменно-пылевого монослоя в лабораторном эксперименте

В связи с тем, что в диссертации рассматриваются особенности сценария плавления монослоя из заряженных частиц в параболическом конфайнменте, необходимо понимать, какие режимы плавления наблюдаются в лабораторном плазменно-пылевом эксперименте. Актуальным является вопрос о природе и типе различных режимов плавления монослоя.

Ивлевым и др. [80] предложено условно классифицировать механизмы плавления двумерных пылевых кристаллов в плазме, разделяя их на механиз-

мы общего типа и специфичные для плазмы. Механизмы общего типа, которые могут как равновесными, так и неравновесными, представлены в любой классической системе с парным потенциалом взаимодействия между частицами, при условии, что взаимодействие может быть описано в терминах гамильтониана. В свою очередь, механизмы, специфичные для плазмы, проявляются именно в пылевой плазме и являются принципиально неравновесными процессами, протекающими в термодинамически открытой негамильтоновой системе.

Нетривиальной является проблема определения критических параметров фазового перехода даже для равновесных механизмов, проявляющихся в гамильтоновых системах. Одним из вариантов протекания плавления двумерной системы является переход Березинского — Костерлица — Таулеса [81, 82, 83] который фактически включает в себя два непрерывных фазовых перехода с участием промежуточной гексатической фазы. Переход Березинского — Костерлица — Таулеса не относится к переходам первого или второго рода, а выделяется в особый тип топологических фазовых переходов. Его проявление в плазменно-пылевом монослое подтверждается экспериментальными работами и теоретическими исследованиями методами компьютерного моделирования. В то же время, в ряде условий лабораторного эксперимента подтверждается наличие и другого режима плавления по механизму межзеренных границ [84].

Проведены также экспериментальные исследования неравновесных режимов плавления двумерного монослоя из пылевых частиц, в частности, под действием сдвиговых напряжений, вызванных интенсивным воздействием лазерного излучения на пылевые частицы [80].

Не меньший интерес вызывают механизмы плавления, характерные именно для пылевой плазмы. Речь, прежде всего, идет о плавлении монослоя под действием экспоненциального развития неустойчивости связанных мод (НСМ) [11, 85, 86, 87]. В данном случае энергия, приводящая к интенсивному движению пылевых частиц в монослое и его последующему плавлению, поступает в систему за счет взаимодействия пылинок с потоком разрядной плазмы. Явление конвер-

сии энергии окружающей среды в энергию собственного движения позволяет в данном случае провести аналогию между плазменно-пылевыми системами и активным веществом.

Характерным индикатором НСМ является резонансное связывание вертикального и горизонтального движений пылевых частиц и формирование так называемой гибридной моды, на частоте которой и совершают колебания пылевые частицы [88]. Частота гибридной моды того же порядка, что и частота, с которой частицы колеблются в поле удерживающей вертикальной ловушки. Для запуска механизма плавления, обусловленного НСМ, чаще всего меняется давление газа в разрядной трубке, что влияет на величину коэффициента вязкого трения пылевых частиц в газе и на скорость диссипации энергии в системе [89].

Может быть показано, что фазовый переход по механизму НСМ является неравновесным фазовым переходом второго рода [80], для которого роль управляющего параметра играет частота вертикального конфайнмента, удерживающего пылевые частицы. С теоретической точки зрения, исследование режима НСМ в пылевом монослое часто ведется в рамках упрощенной модели точечного ионного фокуса [85, 86, 80, 90, 29, 91]. Эта модель описывает невзаимность сил, действующих между пылевыми частицами, которая и приводит к возникновению НСМ.

1.10. Невзаимность сил, действующих между пылевыми частицами

Одной из уникальных особенностей плазменно-пылевых систем является эффективное невыполнение при определенных условиях третьего закона Ньютона для взаимодействия пылевых частиц. Невыполнение выражается в нарушении симметрии действия и противодействия между частицами. Причин нарушения взаимности сил, действующих между частицами, может быть несколько

ко: действие сил затенения ионами и нейтралами [92, 93], “реактивная сила” (*rocket force*) [94] или эффект ионного фокуса [53, 95, 96, 97, 98, 99]. В последнем случае эффективная невзаимность сил взаимодействия между пылевыми частицами обусловлена передачей импульса от ионов пылевой компоненте и при определенных условиях может быть описана в рамках кильватерного потенциала. Он описывает взаимодействие в пылевой подсистеме, но рассчитывается с учетом вклада ионной подсистемы, которая является анизотропной вследствие эффектов ионной фокусировки в условиях плазменно-пылевых экспериментов.

При этом простых аналитических выражений для описания кильватерного потенциала не получено. По этой причине при теоретическом анализе часто используется упрощенная модель т. н. точечного ионного фокуса (*ion focus*) [85, 86, 80, 90, 29, 91]. В рамках этой модели в кильватере каждой пылевой частицы на фиксированном расстоянии от нее размещается виртуальный точечный заряд противоположного знака и с нулевой массой. Этот заряд не действует на “родительскую” частицу и на другие виртуальные заряды, при этом с соседними пылевыми частицами он взаимодействует. В связи с этим взаимодействие пылевых частиц в рамках такого модельного подхода становится невзаимным, а динамика системы — негамильтоновой. Такая упрощенная модель позволяет проиллюстрировать невзаимные эффекты и описать динамику пылевого монослоя на качественном уровне, однако параметры этой модели не допускают расчета через напрямую измеряемые в эксперименте параметры плазменно-пылевой системы. В данной диссертации будут, в том числе, показаны результаты, для получения которых используется не модель точечного ионного фокуса, а распределение электростатического потенциала вокруг пылевой частицы, рассчитанное другими авторами на основании прямого моделирования кинетики ионов.

Учет невзаимных эффектов при описании плазменно-пылевого монослоя позволяет объяснить широкий набор доступных экспериментальных данных, в том числе неравновесное плавление монослоя, вызванное НСМ, которое обсуж-

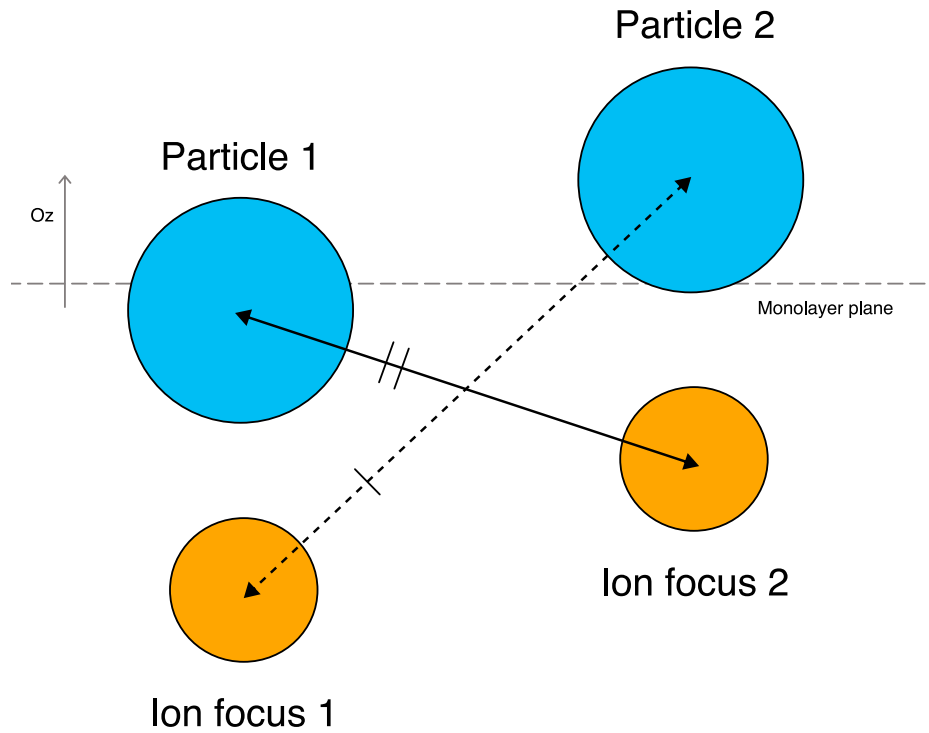


Рис. 1.1. Иллюстрация не взаимного характера взаимодействия пылевых частиц в рамках модели ионного фокуса.

далось выше [80]. В рамках модели ионного фокуса НСМ обусловлена тем, что расстояние между областью ионного фокуса произвольной частицы 1 и соседней частицей 2 в общем случае отличается от расстояния между областью ионного фокуса частицы 2 и частицей 1. Этот геометрический эффект проиллюстрирован на Рис. 1.1. Он приводит к резонансному связыванию горизонтального и вертикального движения соседних частиц и разогреву движения при достаточно слабом вертикальном конфайнменте.

1.11. Метод молекулярной динамики применительно к плазменно-пылевым системам

Метод МД [100, 101, 102] широко используется для исследования атомарных и макроскопических дисперсных систем. Он основывается на численном решении системы дифференциальных уравнений движения частиц рассматриваемой системы в форме второго закона Ньютона для каждой отдельной части-

цы:

$$m_i \frac{d^2 r_i}{dt^2} = F_i(r_1, \dots, r_N), \quad (1.16)$$

где m_i , r_i и F_i — масса, координата и сила, действующая на i -тую частицу, соответственно.

Для расчета сил, действующих на частицы, необходимо знать потенциал взаимодействия частиц в аналитическом или численном виде $U(r_1, \dots, r_N)$:

$$F_i = -\frac{\partial U(r_1, \dots, r_N)}{\partial r_i} \quad (1.17)$$

Для численного решения уравнений движения частиц могут использоваться различные схемы интегрирования. Одной из самых распространенных является скоростной алгоритм Верле:

$$\begin{aligned} v_i(t + \Delta t) &= v_i(t) + \frac{F_i}{m_i} \frac{\Delta t}{2}, \\ r_i(t + \Delta t) &= r_i(t) + v_i(t + \Delta t) \Delta t, \\ v_i(t + \Delta t) &= v_i\left(t + \frac{\Delta t}{2}\right) + \frac{F_i(t + \frac{\Delta t}{2})}{m_i} \frac{\Delta t}{2}. \end{aligned} \quad (1.18)$$

Важной концепцией для расчетов методом молекулярной динамики является термостатирование, которое позволяет регулировать температуру модельной системы и исследовать ее фазовую диаграмму. Под температурой понимается величина, определяемая средней кинетической энергией частиц в соответствии с классическим соотношением, например, для трехмерной системы:

$$NkT = (2/3) \sum m v_i^2 / 2, \quad (1.19)$$

где v_i — скорость i -той частицы. Распространенными являются термостаты Берендсена, Андерсена, Нозе-Гувера, Ланжевена и др.

При моделировании пылевых систем в плазме с использованием метода решения уравнений движения пылевых частиц, аналогичного методу классической молекулярной динамики, термостат Ланжевена обретает физический

смысл [103]. При использовании термостата Ланжевена в выражение для силы, действующей на пылевую частицу, добавляются следующие слагаемые:

$$F_{Lang} = -m\gamma\mathbf{v}_i + \mathbf{L}_i, \quad (1.20)$$

где γ — аналог коэффициента вязкого трения пылевой частицы в разрядном газе, \mathbf{L}_i — изотропная случайная сила, имеющая нормальное распределение и действующая на частицу за счет столкновений с атомами нейтрального газа.

Модель, включающая в себя экранированный кулоновский потенциал и ланжевенские слагаемые, является широко распространенной для моделирования пылевых систем в плазме [74, 25, 104, 105, 106, 107]. Она может расширяться за счет учета дополнительных эффектов и сил, в том числе флуктуаций заряда пылевых частиц, сил ионного увлечения, ионного фокуса, термофореза и т. д. В рамках данной диссертации в качестве основного дополнительного эффекта учитывается центральный удерживающий параболический потенциал, влияющий на структурные и динамические свойства пылевой подсистемы.

Глава 2

Аналитическая теория неоднородности динамических свойств систем заряженных частиц в параболическом конфайнменте

В данной главе развивается аналитическая теория неоднородности систем заряженных частиц, взаимодействующих по сильно экранированному кулоновскому потенциалу в поле центральной параболической ловушки. Для вывода аналитических соотношений используются положения теории динамики кристаллической решетки в квазигармоническом приближении, что определяет границы применимости развиваемой модели. Проводится анализ пространственного распределения амплитуды тепловых колебаний частиц в системе, параметров неидеальности и Линдемманна. Предсказания теоретической модели сравниваются с результатами эксперимента по изучению свойств плазменно-пылевого монослоя [8]. Представленная теоретическая модель является развитием работ [2, 4, 5]. Результаты, представленные в данной главе, опубликованы в [108, 109].

2.1. Пространственная неоднородность динамических характеристик упорядоченной системы заряженных частиц в ловушке

2.1.1. Модель взаимодействия частиц

Для исследования неоднородности плотности и фазового состояния плазменно-пылевого монослоя в данной главе мы опираемся на упрощенную модель взаимодействия частиц, использованную в [2]. Она включает в себя экранированный кулоновский потенциал и параболическую ловушку. Экранированный

кулоновский потенциал задается следующим выражением:

$$V(r) = \frac{Q^2}{\Delta} \exp(-\kappa\Delta), \quad (2.1)$$

где Q – заряд частицы, полагаемый равным и постоянным для всех частиц, κ – постоянная экранирования, Δ – расстояние между частицами. В данной работе рассматривается ситуация достаточно сильного экранирования:

$$\kappa\Delta_{local} \sim 1, \quad (2.2)$$

где Δ_{local} – локальное значение расстояния между двумя соседними частицами в произвольной области системы. Для математического описания электростатической ловушки используется формула, дающая параболический профиль потенциала U_{trap} в зависимости от расстояния r до центра ловушки [1, 27, 2]:

$$U_{trap} = \frac{1}{2}\alpha Qr^2, \quad (2.3)$$

где α – параметр ловушки. В условиях реального плазменно-пылевого эксперимента как форма потенциала 2.1, так и профиль ловушки 2.3 являются лишь первым приближением к описанию сил, действующих на пылевые частицы. Это связано с тем, что линеаризация уравнения Пуассона, применяемая при получении выражения для экранированного кулоновского потенциала, некорректна в случае сильно заряженных пылевых частиц. В свою очередь, профиль ловушки может отклоняться от параболического вследствие пространственно неоднородного распределения разрядной плазмы и влияния на нее самих пылевых частиц. По этим причинам потенциалы 2.1 и 2.3 стоит воспринимать, скорее, как эффективный подход к описанию взаимодействия пылинок, подтвердивший свою применимость [46, 47, 48, 49].

2.1.2. Амплитуда тепловых колебаний частиц в пространственно неоднородной системе

Рассмотрим упорядоченную структуру из большого числа пылевых частиц, взаимодействующих по потенциалам 2.1 и 2.3. Под большим числом пони-

мается количество достаточное, чтобы рассматриваемая структура проявляла макроскопические свойства [64, 60, 69]. Предположим, что известен радиальный профиль плотности $n(r)$ или межчастичного расстояния $\Delta_{local}(r)$, измеренный в лабораторном эксперименте или в модельной структуре. Согласно работе [4], под влиянием ловушки значение плотности квадратично спадает от центра к периферии структуры, а межчастичное расстояние монотонно увеличивается. При этом

$$\Delta_{local}(r) = n^{-1/3}(r). \quad (2.4)$$

В таком случае при учете условия 2.2, означающего, что вклад в энергию частицы вносят только ближайшие N_c соседей, можно получить зависимость потенциальной энергии частицы от радиального расстояния:

$$V_s(r) = E_{trap}(r) + E_C(r) = \frac{1}{2}\alpha Qr^2 + N_c \frac{Q^2}{\Delta_{local}(r)} \exp(-\kappa\Delta_{local}(r)). \quad (2.5)$$

Первое слагаемое E_{trap} в этой сумме связано с вкладом в энергию частицы энергии в поле ловушки, второе E_C – энергии межчастичного взаимодействия. При расчете характерной частоты колебаний частицы относительно положения равновесия (частоты Эйнштейна [72, 51]) в системе, взаимодействующей по экранированному кулоновскому потенциалу, используется следующая формула:

$$\omega_E^2(r) = \frac{2\kappa^2}{3m} E_C(r) = \frac{2\kappa^2}{3m} N_c \frac{Q^2}{\Delta_{local}(r)} \exp(\kappa\Delta_{local}(r)), \quad (2.6)$$

где m – масса частицы. Далее, используя соображения теории динамики кристаллической решетки в квазигармоническом приближении [54], можно с точностью до постоянного коэффициента рассчитать квадрат амплитуды тепловых колебаний частицы относительно положения равновесия:

$$\langle u^2(r) \rangle \approx \frac{3kT(r)}{m\omega_E^2(r)} = A^2 T(r) \Delta_{local}(r) \exp(\kappa\Delta_{local}(r)), \quad (2.7)$$

где $T(r)$ – радиальный профиль средней кинетической энергии пылевых частиц в структуре, A – коэффициент, не зависящий от радиального расстояния.

Из этой формулы напрямую следует, что неоднородность плотности плазменно-пылевой структуры приводит также к неоднородности величины среднеквадратичного смещения частиц от положения равновесия в упорядоченной плазменно-пылевой структуре. Чем дальше частица от центра параболической ловушки, тем выше амплитуда ее колебаний.

2.1.3. Пространственная неоднородность параметров Линдемманна и неидеальности

Из формулы 2.7 также следует неоднородность параметра Линдемманна, равного отношению амплитуды тепловых колебаний к расстоянию между частицами:

$$\delta(r) = \frac{\sqrt{\langle u^2 \rangle(r)}}{\Delta_{local}(r)} = A \sqrt{\frac{T(r) \exp(\kappa \Delta_{local}(r))}{\Delta_{local}(r)}} \quad (2.8)$$

Стоит отметить, что при условии постоянства средней кинетической энергии частиц T по структуре, параметр Линдемманна увеличивается от центра к периферии системы, что указывает на неоднородность ее фазового состояния.

Неоднородность межчастичного расстояния в структуре также обеспечивает неоднородность параметра неидеальности, который является индикатором фазового состояния и для плазменно-пылевой системы записывается как [110]:

$$\Gamma^*(r) = \frac{Q^2}{\Delta_{local}(r) kT(r)} \left(1 + \lambda(r) + \frac{\lambda^2(r)}{2} \right) \exp(-\lambda(r)), \quad (2.9)$$

где $\lambda(r) = \kappa \Delta_{local}(r)$.

Поведение параметра Линдемманна при увеличении радиального расстояния определяется соотношением двух параметров: локального значения амплитуды тепловых колебаний и локального значения плотности системы. Так как $\sqrt{\langle u^2 \rangle} \propto n^{-1/6} \exp(-\kappa n^{-1/3}/2)$, а $\Delta_{local} \propto n^{-1/3}$, локальное значение амплитуды увеличивается быстрее с ростом радиального расстояния, чем локальное значение плотности. Это подтверждает тот факт, что параметр Линдемманна увеличивается от центра структуры к ее периферии, так же, как и величина, обратная

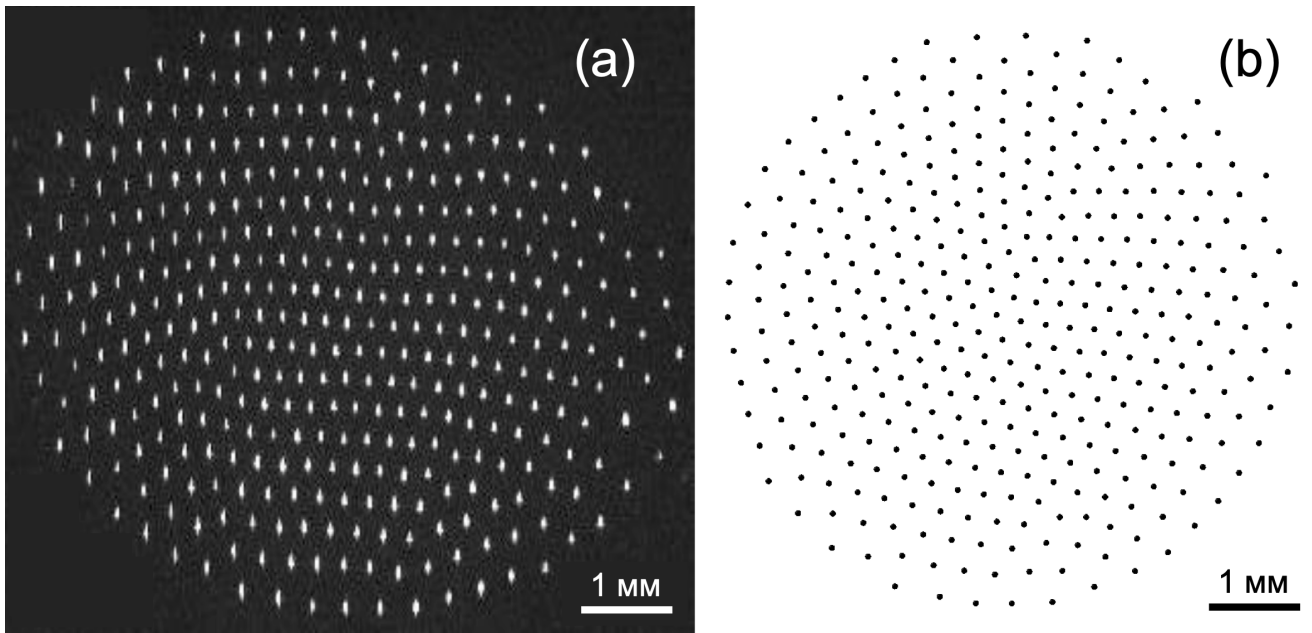


Рис. 2.1. Структура из 368 частиц, (а) наблюдавшаяся в эксперименте [8] в приэлектродном слое тлеющего разряда постоянного тока; (б) полученная в данной работе при помощи численного моделирования при значениях параметров $Q = 3300 e$, $\kappa = 136.0 \text{ см}^{-1}$, $\alpha = 0.0005 \text{ ед. СГСЭ}$. Данные значения получены с использованием формул 2.4, 2.7, 2.8, 2.9.

к параметру неидеальности. И параметр Линдемманна, и параметр неидеальности определяют локальную степень неидеальности системы. Неоднородность этих характеристик означает, что подсистемы, расположенные на разном радиальном расстоянии от центра ловушки, обладают разной степенью упорядоченности. Это позволяет предположить, что анализ структур может вестись в локальном приближении посредством разделения целой системы на близкие к однородным подсистемы. Этот подход будет проиллюстрирован в разделе 3.3.

2.2. Обсуждение полученных результатов

Формулы 2.4, 2.7, 2.8, 2.9 содержат в себе полный набор параметров, определяющих взаимодействие пылевых частиц и структурные характеристики плазменно-пылевой системы: в эти формулы входят заряд частицы, константа экранирования и косвенно (через величину межчастичного расстояния) параметр ловушки. Таким образом, располагая данными о пространственной неоднород-

ности плотности, амплитуды тепловых колебаний, средней кинетической энергии частиц и параметра неидеальности в плазменно-пылевой системе, можно сделать достаточно точные оценки параметров, входящих в потенциалы 2.2 и 2.3. Хочется еще раз отметить, что полученные значения будут соответствовать не абсолютным, а эффективным значениям приведенных параметров, так как формы потенциалов 2.2 и 2.3 записаны в первом приближении. К примеру, полученный по этим оценкам заряд может оказаться далек от реального заряда пылевой частицы в эксперименте. Тем не менее, такие оценки могут позволить описать не только структурные, но и динамические свойства плазменно-пылевых систем, что подчеркивает их ценность.

2.3. Сопоставление с экспериментальными данными

Одной из экспериментальных работ, в которых исследуется неоднородность плазменно-пылевых кристаллов, является эксперимент индийской группы [8]. Он посвящен исследованию монослоя из пылевых частиц в тлеющем разряде постоянного тока. В работе впервые измерены зависимости межчастичного расстояния, кинетической энергии горизонтального движения пылинок и параметра неидеальности от расстояния до центра системы. Обнаружена неоднородность каждого из этих параметров: межчастичное расстояние в структуре увеличивается от 250 мкм в центральной области структуры до 300 мкм на периферии, средняя кинетическая энергия горизонтального движения монотонно убывает, а параметр неидеальности монотонно возрастает с увеличением радиального расстояния. В то же время, ни заряд, ни радиус экранирования, ни параметр параболической ловушки не измерены экспериментаторами. По измеренному в эксперименте профилю средней кинетической энергии горизонтального движения частиц и формулам 2.4, 2.7, 2.8, 2.9 в данной работе оценены эффективные параметры экспериментальной пылевой структуры: $Q = 3000e \pm 100 e$, где e – элементарный заряд; $\kappa = 136.0 \pm 20.0 \text{ см}^{-1}$; $\alpha = 0.004 \pm 0.0001 \text{ ед. СГСЭ}$.

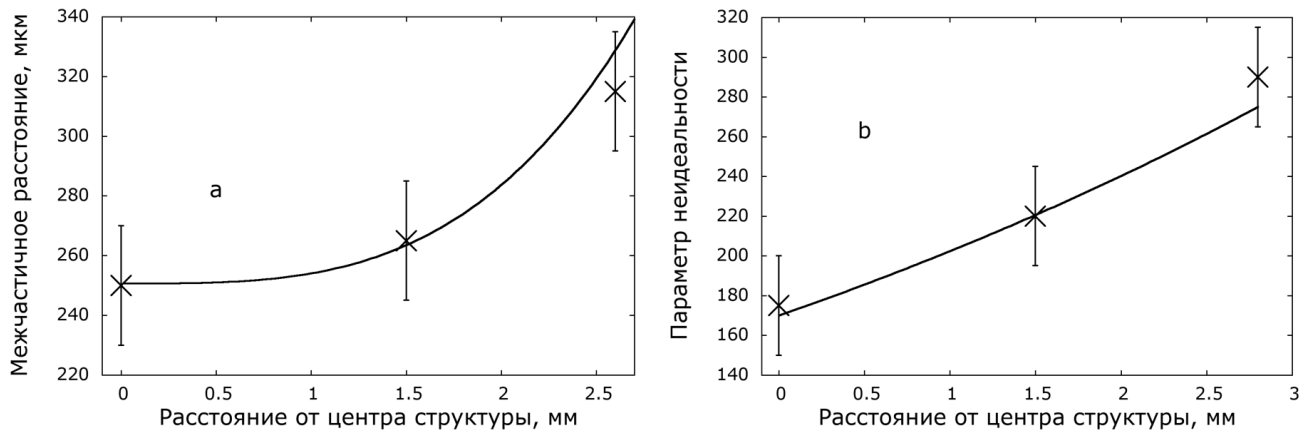


Рис. 2.2. Сравнение радиального профиля (а) межчастичного расстояния и (b) параметра неидеальности в экспериментальной структуре [8] и в структуре, полученной в ходе численного моделирования в данной работе при параметрах $Q = 3000$ е, $\kappa = 136.0$ см⁻¹, $\alpha = 0.004$ ед. СГСЭ. На обоих рисунках крестами отмечены экспериментальные точки, сплошными линиями – зависимости, построенные по модельной структуре.

Система пылевых частиц при данных значениях Q , κ , α исследована путем численного решения уравнений движения пылевых частиц скоростной схемой Верле. Данный метод аналогичен методу МД [25, 106, 107]. Количество частиц в численном эксперименте выбрано равным 368, как в экспериментальной структуре. Учет трения и разогрева колебаний частиц при моделировании в данном разделе не производится, так как исследуются структурные свойства системы. Средняя кинетическая энергия частиц в модельной системе постоянна, однородна и соответствует комнатной температуре. Конфигурации частиц, полученные в [8] и в данной работе, представлены на Рис. 2.1. Как видно из Рис. 2.2, в расчетной и экспериментальной структурах радиальные профили межчастичного расстояния и параметра неидеальности совпадают в пределах погрешности эксперимента. При расчете параметра неидеальности учитывается экспериментальное распределение средней кинетической энергии частиц по структуре.

2.4. Выводы ко второй главе

В главе рассмотрены системы из заряженных частиц, взаимодействующих по сильно экранированному кулоновскому потенциалу в поле параболической притягивающей ловушки. На основании теории динамики кристаллической решетки в квазигармоническом приближении получены аналитические соотношения, описывающие пространственную неоднородность амплитуды тепловых колебаний частиц в такой системе, параметров Линдемманна и неидеальности. Предсказания модели успешно проверены сравнением с результатами МД расчетов и экспериментальными данными. Общая формула, описывающая зависимость амплитуды тепловых колебаний от локальных значений межчастичного расстояния $\Delta_{\text{local}}(r)$, заряда частиц $Q(r)$, константы экранировки $\kappa(r)$ и средней кинетической энергии частиц $T(r)$ выведена в следующем виде:

$$\langle u^2 \rangle(r) = C^2 \frac{T(r)}{\kappa^2(r) Q^2(r)} \Delta_{\text{local}}(r) \exp(\kappa(r) \Delta_{\text{local}}(r)),$$

где C — константа для конкретной структуры, не зависящая от радиального расстояния r .

Основной результат главы заключается в демонстрации принципиальной неоднородности пылевых систем с точки зрения динамических характеристик. Уже в упрощенной модели пылевой плазмы возникающие структуры принципиально неоднородны: межчастичное расстояние, амплитуда тепловых колебаний и параметр Линдемманна увеличиваются от центра к периферии системы, в то время как параметр неидеальности уменьшается. Можно сделать вывод, что степень неоднородности экспериментальной плазменно-пылевой системы, в том числе и отсутствие выраженной неоднородности, может служить важным индикатором пространственного распределения параметров пылевых частиц и плазмы по исследуемой системе. Предложена методика оценки эффективных параметров взаимодействия пылевых частиц по степени неоднородности плазменно-пылевых структур.

Глава 3

Методика численного моделирования систем заряженных частиц в конфайнменте

В данной главе описывается процедура подготовки, постановки расчетов и обработки результатов, полученных методом численного решения уравнений движения пылевых частиц, аналогичного методу классической МД. Описывается подход к усреднению интересующих величин — плотности, амплитуды тепловых колебаний, спектров колебаний частиц — в локальном приближении. Приводятся соотношения, используемые для вычисления исследуемых характеристик. Используемые методы численного решения уравнений движения пылевых частиц соответствуют работам [25, 74, 104, 105, 106, 107].

3.1. Модель взаимодействия пылевых частиц друг с другом и с окружающей плазмой

В следующих главах диссертации неоднородность динамических характеристик и фазового состояния системы заряженных частиц в конфайнменте исследуется при помощи метода численного решения уравнений движения пылевых частиц, аналогичного методу классической МД. Данный подход выбран для того, чтобы убедиться в справедливости выведенных соотношений 2.7, 2.8, 2.9, а также чтобы не ограничиваться квазигармоническим приближением и иметь возможность исследовать систему в том числе вблизи точки плавления.

Для описания взаимодействия заряженных частиц друг с другом используется несколько подходов.

- Первая модель взаимодействия сводится к выбору классического взаимного экранированного кулоновского потенциала в виде 2.1 [13] и используется для описания равновесной гамильтоновой системы. В рамках этого под-

хода проводится проверка полученных аналитических соотношений 2.7, 2.8, 2.9. Полученные таким образом результаты могут быть применены к широкому классу систем заряженных частиц, в том числе к коллоидной и комплексной плазме и системам ионов в ловушке. Интегрирование уравнений движения в этом случае проводится с использованием скоростной схемы Верле без дополнительных членов, что соответствует рассмотрению микроканонического NVE-ансамбля. Такой подход эквивалентен используемому в работах [2, 6] и дополняет их.

- Вторым подходом к описанию взаимодействия используется в частном случае рассмотрение плазменно-пылевого монослоя и опирается на модель точечного ионного фокуса [85, 86, 80, 90, 29, 91]. В рамках этой модели становится доступным изучение влияния невзаимных эффектов на динамические свойства монослоя. Описывается плавление монослоя за счет НСМ. В отличие от первого подхода, в этом случае в уравнения движения добавляются слагаемые, соответствующие ланжевеновскому термостату при комнатной температуре. Они позволяют учитывать взаимодействие пылевых частиц с окружающим разрядным газом [13].
- Третий способ задания взаимодействия пылевых частиц также связан с учетом эффекта ионной фокусировки, однако позволяет обойтись без параметров точечного ионного фокуса, не допускающих измерения или оценки в эксперименте. В этом случае расчет сил, действующих между пылевыми частицами, проводится численно с использованием сеточного распределения электростатического потенциала вокруг пылевых частиц. Метод расчета распределения потенциала реализован другими авторами и основан на прямом моделировании кинетики ионов в присутствии пылевой частицы [111, 112]. В этом случае ланжевеновские слагаемые в уравнениях движения пылевых частиц также учитываются. Цель использования такого подхода заключается в дополнительной проверке результатов, полу-

ченных при помощи второй модели взаимодействия, и в более детальном исследовании сценария развития НСМ в пространственно неоднородном монослое.

Учет ланжевеновских слагаемых в уравнениях движениях пылевых частиц реализован в соответствии с формулой

$$F_{Lang} = -m\gamma\mathbf{v}_i + \mathbf{L}_i, \quad (3.1)$$

где γ — коэффициент вязкого трения пылевых частиц в нейтральном газе; \mathbf{L}_i — случайная сила, имеющая нормальное распределение с дисперсией $2m\gamma kT/\Delta t$, где Δt — шаг интегрирования уравнений движения. При расчете коэффициента γ используется формула для условий, характерных для плазменно-пылевых экспериментов в широком диапазоне параметров [13, 14]:

$$\gamma = \frac{8\sqrt{2\pi}}{3} \frac{a^2 P_n}{v_n m}, \quad (3.2)$$

где a — радиус пылевой частицы, P_n — давление нейтрального газа, v_n — тепловая скорость нейтральных атомов разрядного газа. Таким образом, добавочные ланжевеновские слагаемые имеют физический смысл и соответствуют модели классической броуновской частицы.

Потенциал конфайнмента, в отличие от выражения 2.3, задается в общем случае анизотропным для моделирования систем с разной пространственной конфигурацией частиц [113]:

$$U_{trap} = \frac{1}{2}Q(\alpha_x x_i^2 + \alpha_y y_i^2 + \alpha_z z_i^2), \quad (3.3)$$

где x_i, y_i, z_i — координаты i -той частицы.

- При описании трехмерной системы, так называемого юкавовского шара, полагается, что ловушка изотропна и параметры ловушки вдоль каждого направления равны: $\alpha_x = \alpha_y = \alpha_z$.

- В ситуации с моделированием монослоя без ограничения общности считается, что монослой расположен в XU -плоскости, а вертикальная ловушка в направлении Oz существенно больше, чем в двух других: $\alpha_z \gg \alpha_x = \alpha_y$. При этом движение частиц в плоскости Oz не останавливается, поэтому общее движение остается трехмерным.
- Для расчетов квазиодномерной системы принимается, что структура ориентирована вдоль оси Ox и соответствующие параметры ловушки $\alpha_z = \alpha_y \gg \alpha_x$.

Отметим, что влияние эффектов невзаимности на динамику системы исследуется только в однослойной пылевой структуре. Трехмерные и квазиодномерные структуры моделируются как равновесные гамильтоновы системы для анализа пространственной неоднородности динамических свойств.

Численные значения параметров модельных систем во всех расчетах выбираются близкими к характерным оценочным значениям в плазменно-пылевых экспериментах в тлеющем разряде [7, 27, 35, 64, 89]. Оценка заряда частиц делается в соответствии с теорией ограниченного орбитального движения (OML) [14] для различных инертных газов, используемых в экспериментальных установках. Значение заряда выбирается из диапазона $1000 \div 20000 e$. Оценка константы экранировки проводится путем расчета ионного и электронного радиусов Дебая в плазме. Концентрации ионов и электронов плазмы полагаются лежащими в диапазоне $10^8 \div 10^{10} \text{ см}^{-3}$. Температура электронов принимается по порядку равной нескольким эВ. Величина параметров ловушки α_x , α_y , α_z подбирается таким образом, чтобы обеспечить соответствующую экспериментам среднюю плотность пылевых структур. При этом полученные системы являются сильно экранированными: $\kappa\Delta_{local} \sim 1$.

Набор численных значений параметров для каждого расчета в следующих главах будет указан отдельно.

3.2. Границы применимости используемых моделей взаимодействия частиц

Используемые в рамках данной диссертации функциональные формы потенциалов взаимодействия, в частности, экранированный кулоновский потенциал в форме 2.1 и параболическая ловушка в форме 2.3, являются лишь первым приближением к описанию сил, действующих на пылевые частицы в плазме газового разряда.

Экранированный кулоновский потенциал аналитически может быть получен в результате линеаризации уравнения Пуассона для распределения электростатического потенциала вокруг пылевой частицы, однако типичное значение заряда пылевой частицы, левитирующей в плазме тлеющего разряда, достаточно велико и по порядку составляет десять тысяч элементарных зарядов [14, 16]. В связи с этим линеаризация уравнения Пуассона на малых расстояниях от пылевой частицы не является корректной. Тем не менее, из экспериментальных оценок сил, действующих между пылевыми частицами, следует, что в большинстве случаев функциональная форма 2.1 применима в диапазоне характерных величин межчастичных расстояний в пылевых структурах при использовании эффективных величин заряда частиц и константы экранировки [46, 47, 48, 49].

При расчете сил взаимодействия пылевых частиц также требуется учитывать и возможную пространственную неоднородность плазмы. Значения концентрации и температуры ионов и электронов определяют локальное значение константы экранировки потенциала. В отсутствие пылевых частиц радиальное распределение концентрации заряженных компонент плазмы в разрядной трубке ярко выражено неоднородное и хорошо описывается функцией Бесселя [114, 115, 116]. Добавление пылевых частиц при типичных значениях плотности пылевой компоненты в эксперименте может приводить к заметному уменьшению концентрации электронов и к сглаживанию радиального профиля плотности как для ионов, так и для электронов в области существования пылевой

структуры [114, 115, 116]. В связи с этим в данной диссертации в рамках первого приближения считается, что константа экранировки имеет одинаковое значение во всех областях рассматриваемых структур.

В свою очередь, выбор формы потенциала удерживающей ловушки также должен осуществляться с учетом особенностей экспериментально наблюдаемой системы. В общем случае форма конфайнмента определяется как причиной его возникновения, так и локальными параметрами плазмы. Как показывают расчеты параметров плазмы тлеющего разряда с учетом присутствия пылевой компоненты, в области существования пылевой структуры радиальная компонента электрического поля при характерных параметрах эксперимента имеет близкий к линейному радиальный профиль, который существенно искажается лишь вблизи границы пылевой структуры [114, 115, 116]. По этой причине в рамках данной работы параболическая форма потенциала конфайнмента 2.3, дающая линейный профиль радиальной компоненты электрического поля, используется в качестве основного приближения. Модель параболического конфайнмента применяется в ряде работ для систем, содержащих не более нескольких десятков тысяч частиц [56, 57, 76, 60, 62, 63, 64, 69, 3, 59].

3.3. Вывод системы заряженных частиц в ловушке на равновесие и последующее усреднение характеристик

Процедура для получения интересующих характеристик из исходных данных численных расчетов практически эквивалентна для квазиодномерных, квазидвумерных и трехмерных систем. Независимо от типа системы, на нулевом шаге интегрирования частицам в системе задаются случайно распределенные по вычислительной ячейке значения координат. Температура (средняя кинетическая энергия частиц) контролируется стохастическим ланжевеновским термостатом и изначально устанавливается заведомо выше температуры плавления в системе. Система медленно охлаждается за счет уменьшения параметра термо-

стата, пока не устанавливается равновесная конфигурация частиц и требуемая температура. Контроль установления равновесия проводится за счет проверки максвеллизации распределения скоростей частиц.

После установления равновесия при рассмотрении свойств гамильтоновых систем термостат Ланжевена отключается, полный импульс и момент импульса системы обнуляются. Дальнейшее интегрирование уравнений движения происходит в микроканоническом ансамбле.

Если рассматривается монослойная структура с учетом невзаимных эффектов, после вывода системы на равновесие при требуемой температуре экранированный кулоновский потенциал, описывающий взаимодействие частиц, изменяется в соответствии с моделью точечного ионного фокуса либо заменяется на сеточный потенциал, полученный по результатам прямого моделирования кинетики ионов. После этого проводится дальнейший вывод системы на стационарное состояние.

После получения стационарных структур для всех типов систем проводится усреднение интересующих характеристик в локальном приближении: межчастичное расстояние, амплитуда тепловых колебаний, спектр колебаний рассчитываются в окружении каждой отдельной частицы, а затем усредняются по выделенным подсистемам. Пример разбиения монослойной структуры на кольцевые сегменты показан на Рис. 3.1. Для проверки сходимости усредняемых величин строятся их зависимости от времени усреднения. Для уменьшения ошибки определения среднего рассчитываемые величины усредняются по нескольким независимым расчетам.

3.4. Расчет локальных значений структурных и динамических параметров системы

Для определения локального значения межчастичного расстояния Δ_{local} и соответствующей ему плотности рассчитывается и усредняется расстояние от

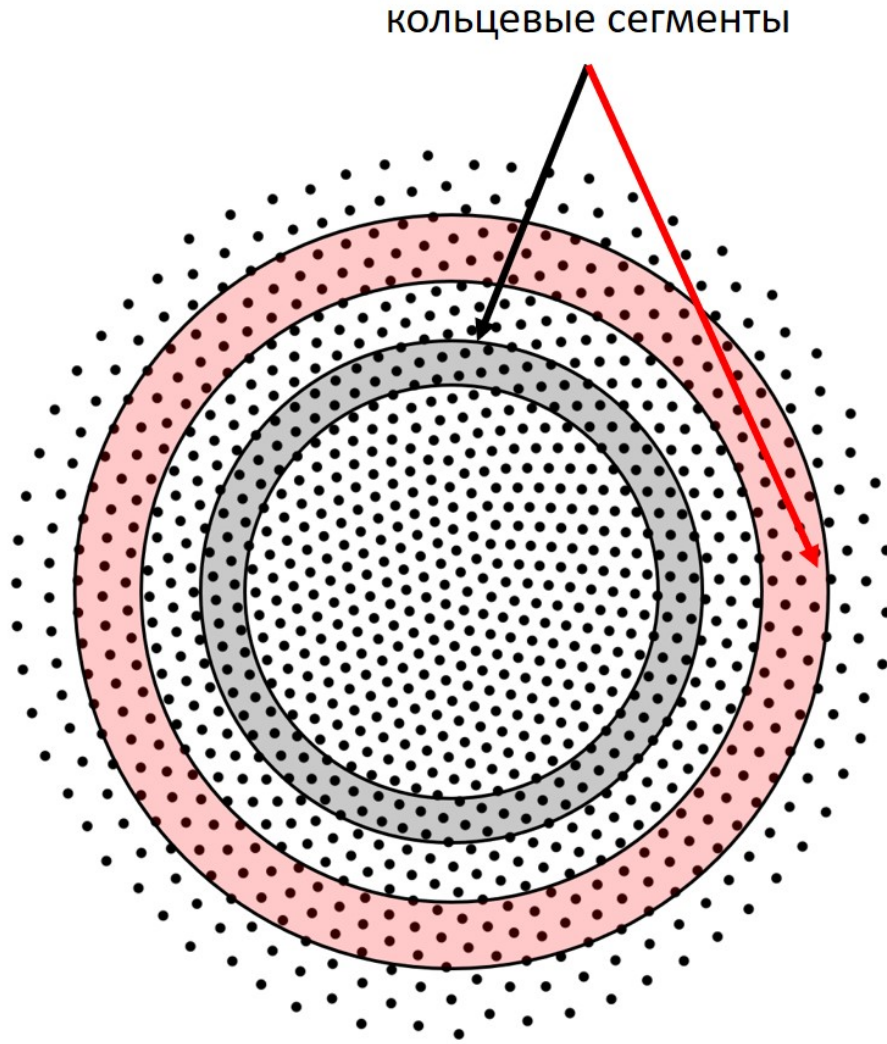


Рис. 3.1. Иллюстрация процедуры расчета характеристик пространственно неоднородного монослоя из заряженных частиц в конфайнменте в локальном приближении. Система разбивается на близкие к однородным кольцевые сегменты, внутри которых усредняются величины, рассчитанные в окружении каждой отдельной частицы.

выделенной частицы до N_c ее ближайших соседей. К примеру, в случае квазиодномерной цепочки $N_c = 2$, в случае квазидвумерного монослоя $N_c = 6$ для идеальной треугольной решетки и 5, 7 при наличии дефекта в окружении рассматриваемой частицы.

Амплитуда тепловых колебаний отдельной частицы рассчитывается в соответствии со следующей формулой:

$$\langle u_i^2 \rangle = \sqrt{\langle (x_i - x_{i0})^2 \rangle + \langle (y_i - y_{i0})^2 \rangle + \langle (z_i - z_{i0})^2 \rangle}, \quad (3.4)$$

где x_{i0} , y_{i0} , z_{i0} — координаты равновесного положения частицы. Эта формула

применима для всех типов систем, рассматриваемых в диссертации, так как движение частиц в них принципиально трехмерное.

Параметр Линдемманна [75] определяется как отношение амплитуды тепловых колебаний частицы к локальному значению межчастичного расстояния:

$$\delta^2 = \frac{\langle u_i^2 \rangle}{\Delta_{local}^2}. \quad (3.5)$$

Параметр неидеальности рассчитывается в модифицированной форме [110]:

$$\Gamma^* = \frac{Q^2}{\Delta_{local} kT} \exp(-\kappa \Delta_{local}) \left(1 + \kappa \Delta_{local} + \frac{\kappa \Delta_{local}}{2} \right). \quad (3.6)$$

Для расчета спектра тепловых колебаний частицы используется метод преобразования Фурье автокорреляционной функции скорости частиц. Нормированная автокорреляционная функция скорости для системы частиц определяется как

$$Z = \frac{\langle \mathbf{v}(0) \mathbf{v}(t) \rangle}{\langle \mathbf{v}(0) \mathbf{v}(0) \rangle}, \quad (3.7)$$

где угловые скобки определяют усреднение по ансамблю. Фурье-преобразование от данной функции позволяет получить плотность колебательных состояний в системе $g(\omega)$, эквивалентную плотности фононных состояний [62, 64] в “бесконечном” кристалле.

3.5. Выводы к третьей главе

В главе описаны используемые в диссертации модели взаимодействия пылевых частиц друг с другом и с окружающей разрядной плазмой, подходы к описанию конфайнмента для моделирования квазиодномерных, квазидвумерных и трехмерных систем заряженных частиц. Приведены условия и характерные параметры МД расчетов. Проиллюстрировано содержание локального приближения, используемого для анализа свойств систем заряженных частиц в данной работе. Записаны выражения, используемые для расчета динамических характеристик систем заряженных частиц.

Глава 4

Неоднородность динамических свойств квазиодномерных, квазидвумерных и трехмерных систем заряженных частиц в конфайнменте

В данной главе приводятся результаты исследования динамических свойств систем заряженных частиц в ловушке методом численного решения уравнений движения частиц, аналогичным методу классической МД. Рассматриваются квазиодномерные цепочки, квазидвумерные монослойные структуры и трехмерные юкавовские шары. Рассчитываются локальные значения плотности, амплитуды тепловых колебаний, параметров Линдемманна и неидеальности в соответствии с подходами, представленными в главе 3. Демонстрируется, что радиальные профили указанных характеристик являются принципиально неоднородными под влиянием конфайнмента. Показано, что положения теории неоднородности динамических свойств, изложенные в главе 2, применимы для описания результатов моделирования. Проводится сравнение с доступными экспериментальными данными [7, 8]. Результаты, изложенные в данной главе, опубликованы в работах [108, 109, 117].

4.1. Неоднородность структурных свойств цепочечных, квазидвумерных и трехмерных систем заряженных частиц под влиянием параболического конфайнмента

Перед анализом динамических свойств рассмотрим структурные свойства моделируемых систем, а именно радиальные профили межчастичного расстояния. Такой подход позволяет убедиться в корректности используемой модели

взаимодействия и процедуры вывода систем на равновесие, описанной в разделе 3.3.

4.1.1. Неоднородность структурных свойств цепочечной системы

Рассматривается система из частиц, взаимодействующих друг с другом по экранированному кулоновскому потенциалу 2.1. Частицы находятся в поле анизотропной параболической ловушки, описываемой формулой 3.3 при параметрах $\alpha_z = \alpha_y \gg \alpha_x$. Рассматриваемая система обладает цепочечной структурой и ориентирована вдоль оси Ox . Под радиальным расстоянием r в этом случае понимается расстояние вдоль оси Ox до центра системы.

Полная энергия системы записывается следующим образом:

$$U^{1D} = \frac{1}{2}Q\alpha \sum_i x_i^2 + \frac{1}{2}Q^2 \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^N \frac{1}{x_{ij}} \exp(-\kappa x_{ij}). \quad (4.1)$$

Параметры системы выбираются равными: $\kappa = 300.0 \text{ см}^{-1}$, $Q = 3000 e$, $\alpha_x = \alpha = 0.01 \text{ ед. СГСЭ}$, число частиц $N^{1D} = 100$. Шаг интегрирования уравнений движения частиц $\Delta t = 10^{-4} \text{ с}$.

Из условия механического равновесия частицы в цепочке следует, что полная сила, действующая на нее со стороны $N_c = 2$ соседей и электростатической ловушки, должна быть равна нулю. Обозначим модуль расстояния от i -той до $i - 1$ -ой частицы через $\Delta_c = x_i - x_{i-1}$, а до $i + 1$ -ой — через $\Delta_f = x_{i+1} - x_i$. При этом полагается, что i -тая частица расположена в области положительных значений x . Тогда в ситуации сильной экранировки потенциала, когда $\kappa\Delta_c, \kappa\Delta_f > 1$ и следующими рядами соседей можно пренебречь, потенциальная энергия i -той частицы записывается как:

$$U_i^{1D} = \frac{1}{2}\alpha Q x_i^2 + \frac{Q^2}{\Delta_c} \exp(-\kappa\Delta_c) + \frac{Q^2}{\Delta_f} \exp(-\kappa\Delta_f). \quad (4.2)$$

Первая производная от потенциальной энергии есть сила, действующая на ча-

стицу:

$$F_i^{1D} = \alpha Q x_i - \frac{Q^2}{\Delta_c} \exp(-\kappa \Delta_c) \left(\kappa + \frac{1}{\Delta_c} \right) + \frac{Q^2}{\Delta_f} \exp(-\kappa \Delta_f) \left(\kappa + \frac{1}{\Delta_f} \right). \quad (4.3)$$

Приравнивая действующую силу к нулю и обозначая $\Delta_f - \Delta_c = d\Delta$, $\Delta_c = \Delta$, можно записать:

$$\frac{d\Delta}{\Delta} = \frac{\alpha r}{Q \exp(-\kappa \Delta) (\Delta^{-2} + (\Delta^{-1} + \kappa)^2)}. \quad (4.4)$$

Из этой формулы напрямую следует, что если частицы расположены на одинаковом расстоянии друг от друга ($\Delta_f = \Delta_c$), сила, действующая на частицу со стороны ловушки, не компенсируется. Таким образом, структурная неоднородность системы частиц в ловушке может быть объяснена и из самых базовых механических соображений.

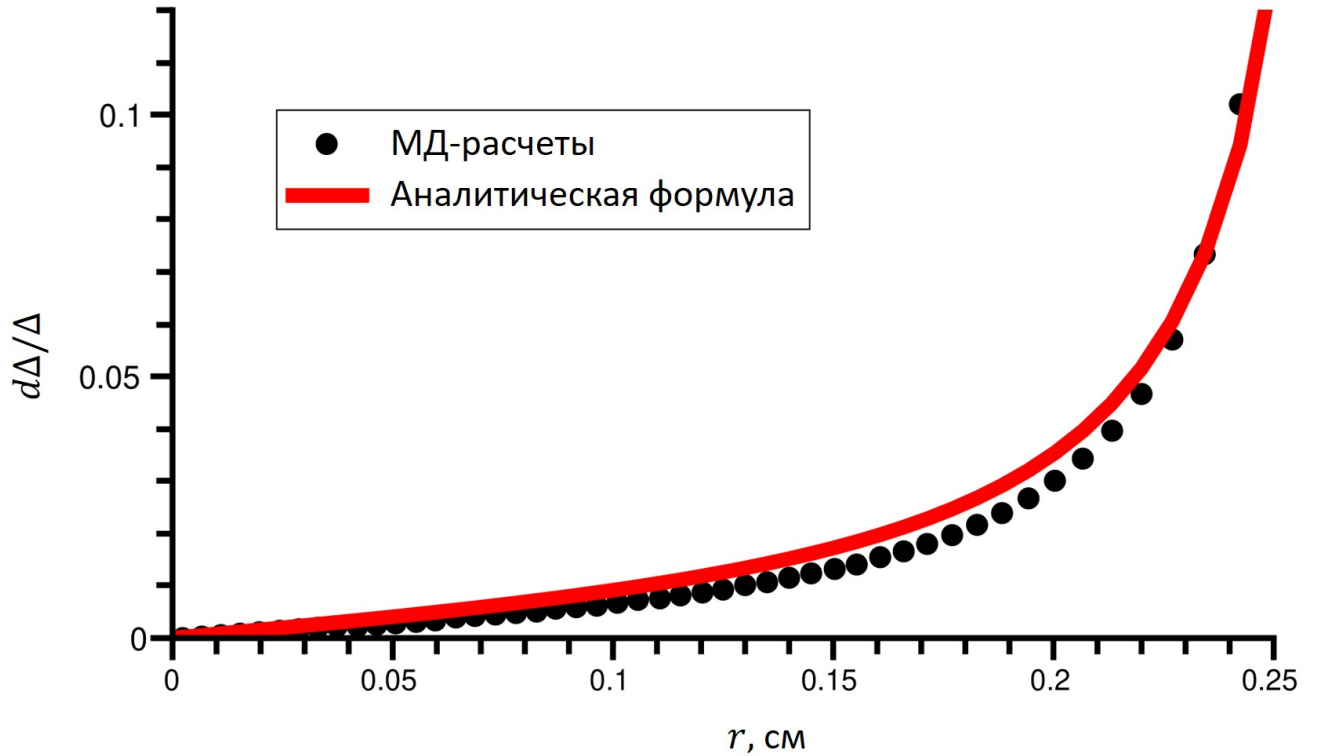


Рис. 4.1. Черными точками показаны результаты вычисления величины $d\Delta/\Delta$ в МД расчете цепочечной системы при параметрах $\kappa = 300.0 \text{ см}^{-1}$, $Q = 3000 \text{ e}$, $\alpha_x = \alpha = 0.01 \text{ ед. СГСЭ}$, $N^{1D} = 100$. Красная линия является аппроксимацией этой зависимости в соответствии с формулой 4.4

На Рис. 4.1 показаны результаты определения величины $d\Delta/\Delta$ в МД рас-

четах цепочечной структуры с указанными значениями параметров Q , κ , α , N^{1D} . Как видно, полученные значения хорошо описываются формулой 4.4.

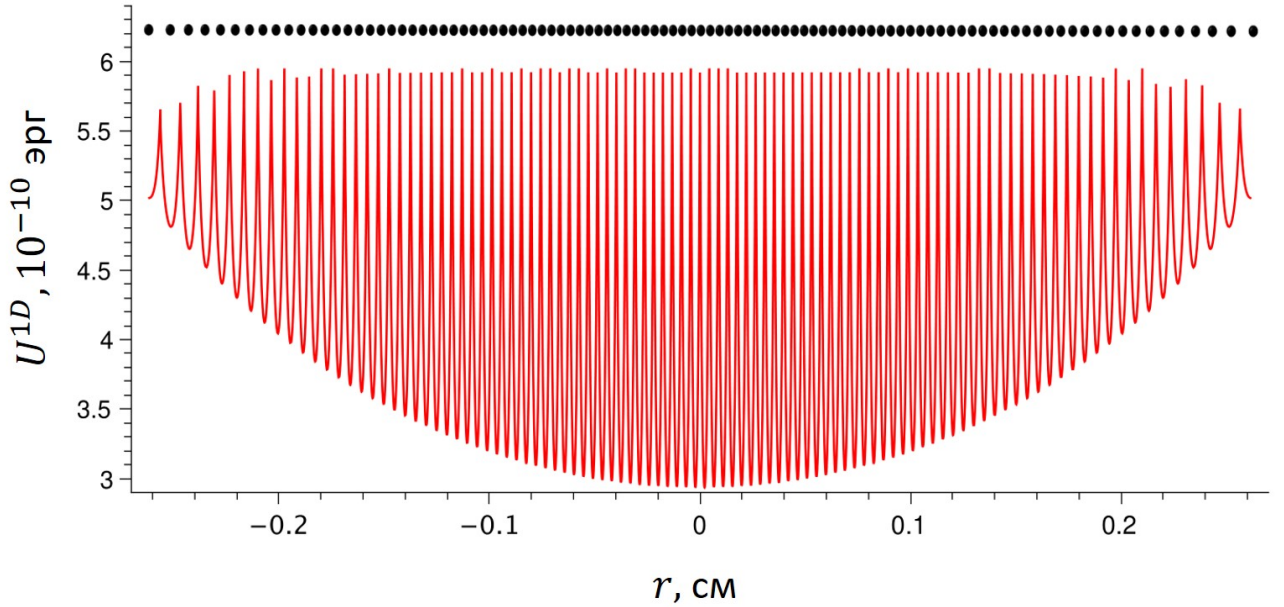


Рис. 4.2. Черные круги обозначают равновесные положения частиц в МД расчете цепочечной системы при параметрах $\kappa = 300.0 \text{ см}^{-1}$, $Q = 3000 e$, $\alpha_x = \alpha = 0.01 \text{ ед. СГСЭ}$, $N^{1D} = 100$; красная линия обозначает одномерную поверхность потенциальной энергии системы.

На Рис. 4.2 для наглядности изображена поверхность потенциальной энергии исследуемой цепочечной системы. Как видно, на параболитический профиль ловушки накладываются потенциальные ямы, определяемые межчастичным взаимодействием. Глубина и профиль потенциальной ямы заметным образом зависят от радиального расстояния.

4.1.2. Неоднородность структурных свойств квазидвумерной и трехмерной систем

Проводится моделирование квазидвумерной системы из $N^{2D} = 200$ частиц и трехмерной системы из $N^{3D} = 2800$ частиц. Число частиц выбрано достаточно большим, чтобы системы проявляли макроскопические свойства [64, 60, 69]. Частицы взаимодействуют по экранированному кулоновскому потенциалу 2.1. Параметры системы выбраны такими же, как и для квазиодномерной системы

из предыдущего раздела: $Q = 3000 e$, $\kappa = 300.0 \text{ см}^{-1}$, $\alpha = 0.01 \text{ ед. СГСЭ}$. Они соответствуют условиям плазменно-пылевых экспериментов в тлеющем разряде. В случае трехмерной системы, профиль конфайнмента является изотропным и сферически симметричным, а в квазидвумерной системе компонента ловушки вдоль оси Oz выбрана в 10000 большей, чем по двум другим направлениям [113].

Процедура вывода структур на равновесие подробно описана в разделе 3.3. Системы рассматриваются при двух значениях температур: 200 К и 600 К. Оба значения соответствуют упорядоченному состоянию системы.

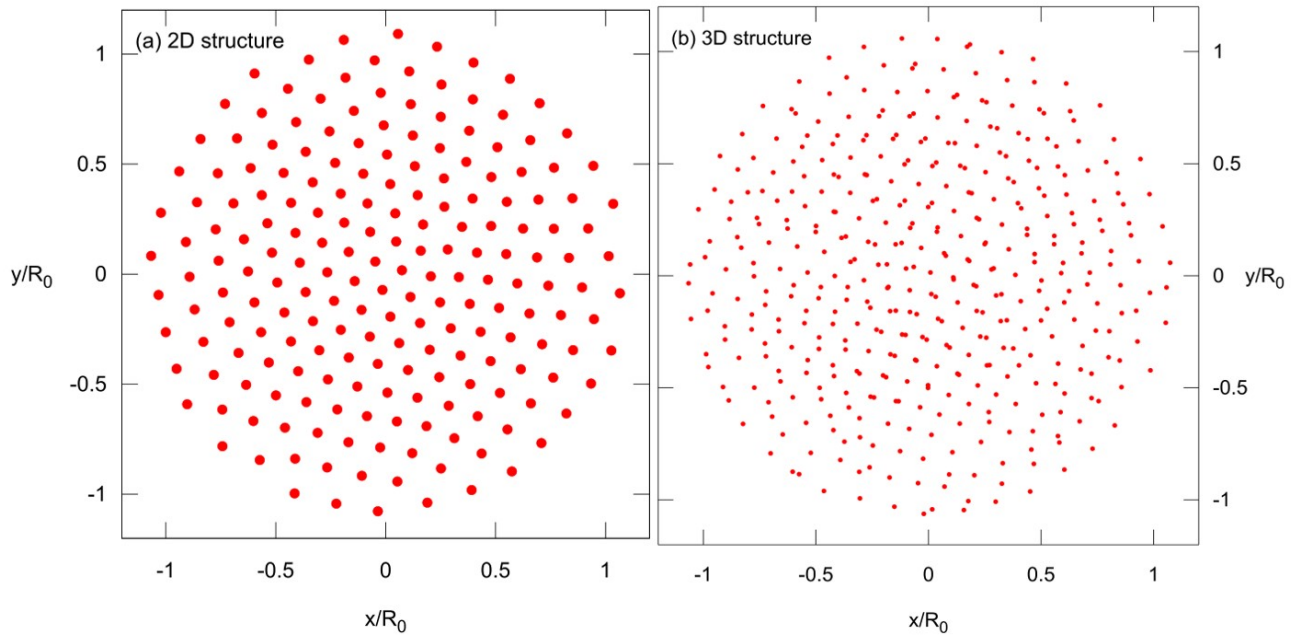


Рис. 4.3. (а) Квазидвумерная структура из 200 частиц, $R_0 = 900 \text{ мкм}$; (б) экваториальное сечение трехмерной структуры из 2800 частиц, ширина сечения ~ 4 средних межчастичных расстояний в структуре, $R_0 = 1050 \text{ мкм}$.

Равновесные структуры из 200 и 2800 частиц показаны на Рис. 4.3. Радиус R_0 двумерной системы $R_0^{2D} = 900 \text{ мкм}$, трехмерной системы — $R_0^{3D} = 1050 \text{ мкм}$. Для усреднения характеристик структуры разделяются на концентрические слои: 6 в случае двумерной структуры с внешними радиусами (в единицах R_0^{2D}) 0.22, 0.46, 0.67, 0.81, 0.94, 1.00; 7 в случае трехмерной структуры с внешними радиусами (в единицах R_0^{3D}) 0.43, 0.52, 0.62, 0.73, 0.83, 0.94, 1.00. Это подразделение на слои с хорошей точностью соответствует локализации частиц на

оболочках структуры.

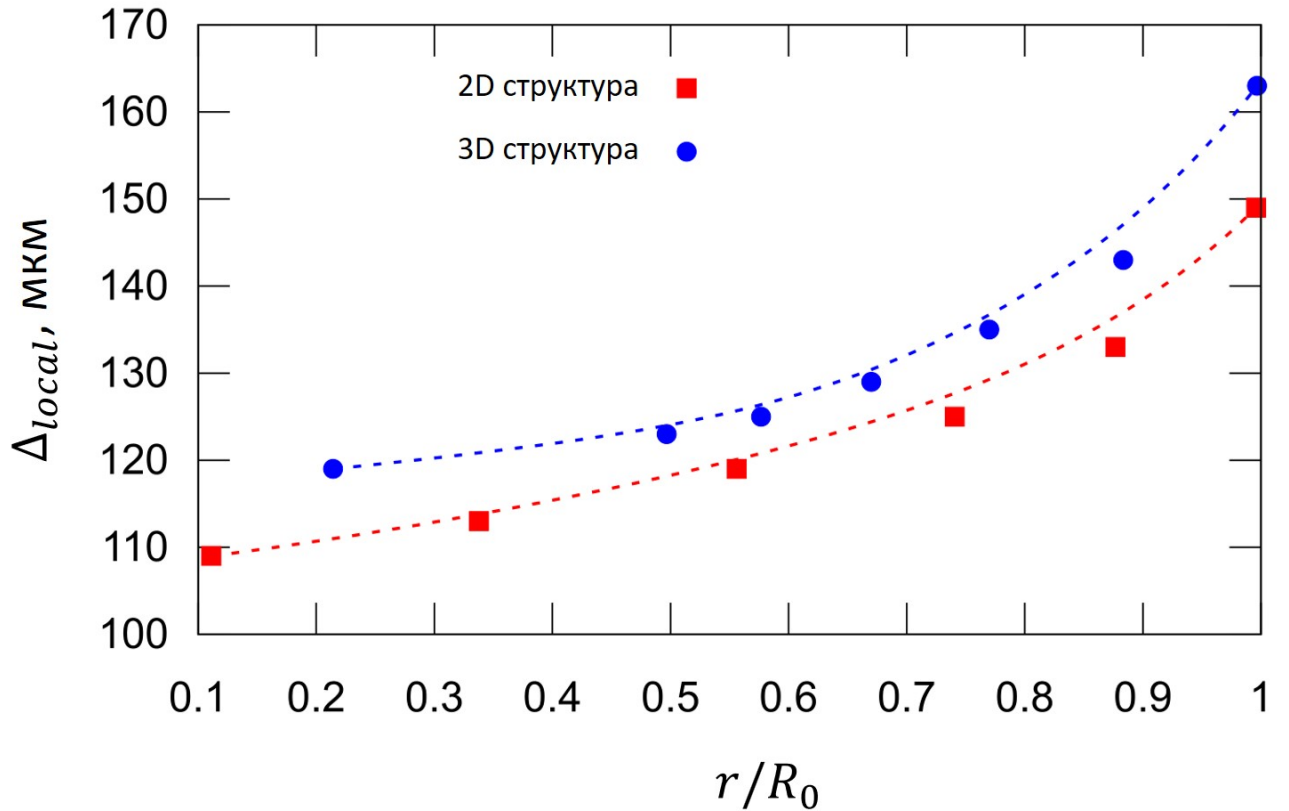


Рис. 4.4. Зависимость локального межчастичного расстояния, рассчитанного по положению первого пика парной корреляционной функции, от радиального расстояния до центра параболической ловушки.

Среднее значение локальной величины межчастичного расстояния Δ_{local} определяется из первого пика парной корреляционной функции, рассчитанной для каждой отдельной подсистемы—концентрического слоя. Профиль межчастичного расстояния показан на рисунке 4.4 как функция радиального расстояния $\Delta_{local}(r)$, на рисунке 4.5 — как функция средней потенциальной энергии, приходящейся на одну частицу $\Delta_{local}(V_s)$. Как можно видеть, межчастичное расстояние монотонно увеличивается от центра к периферии системы. Профиль хорошо согласуется с аналитическим выражением, предложенным в работах [2, 4, 6]. Зависимость среднего межчастичного расстояния от средней потенциальной энергии на одну частицу близка к линейной и в квазидвумерном, и в трехмерном случаях с коэффициентами наклона $k_{2D} \approx k_{3D} = 40 \text{ мкм}/(10^{-11} \text{ эрг})$.

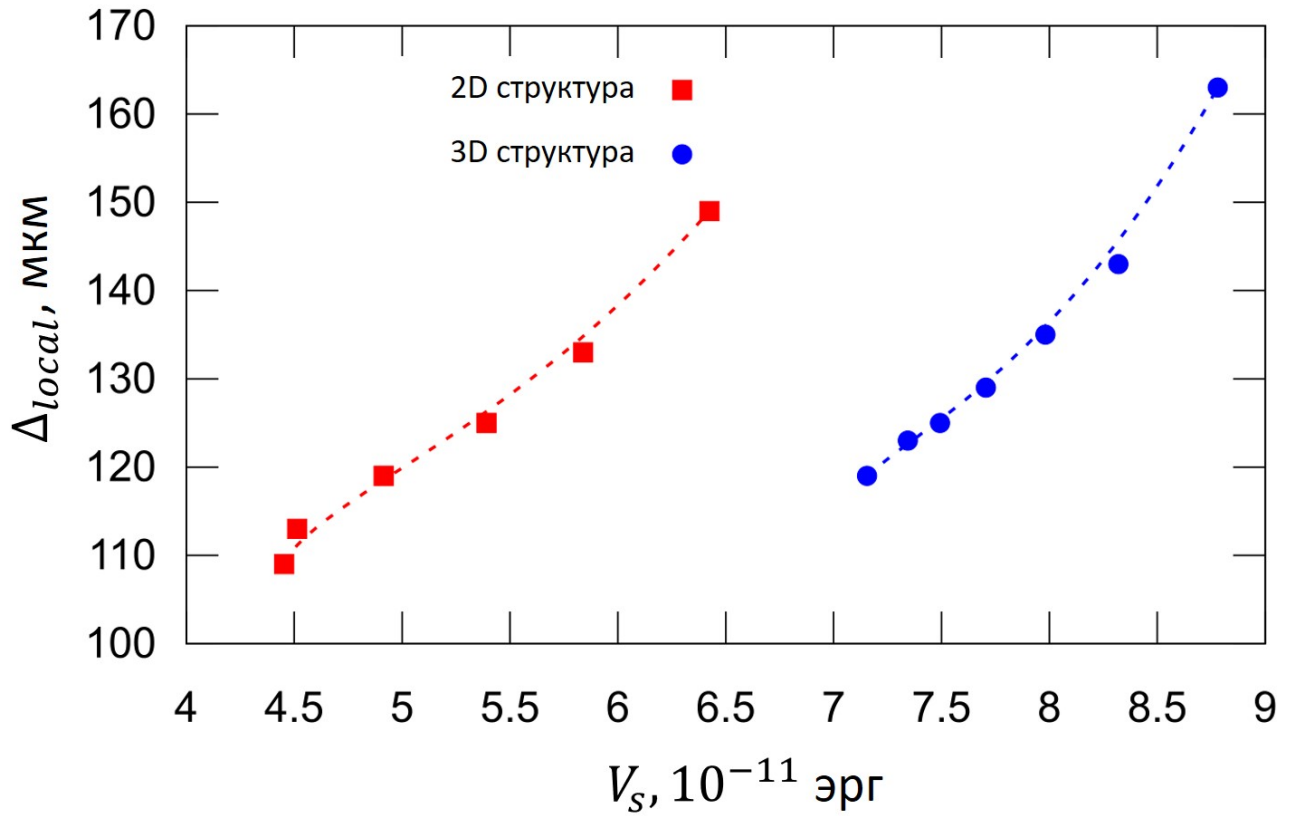


Рис. 4.5. Зависимость локального межчастичного расстояния, рассчитанного по положению первого пика парной корреляционной функции, от средней потенциальной энергии в расчете на частицу.

4.2. Неоднородность динамических свойств цепочечных, квазидвумерных и трехмерных систем заряженных частиц под влиянием параболического конфайнмента

В рамках данной диссертации наибольший интерес представляют не структурные, а динамические свойства систем заряженных частиц в параболическом конфайнменте. Перейдем к их рассмотрению на примере квазиодномерной, квазидвумерной и трехмерной систем, описанных в разделах 4.1.1, 4.1.2.

4.2.1. Неоднородность динамических свойств цепочечной системы

Для анализа радиального профиля амплитуд тепловых колебаний частиц в квазиодномерной цепочке можно обратить внимание на то, что профиль потен-

циальной ямы, в которой находится частица, существенным образом зависит от расстояния до центра системы (Рис. 4.2). Профиль потенциальной ямы вблизи положения равновесия определяется второй производной потенциальной энергии частицы, выраженной соотношением 4.2:

$$(U_i^{1D})'' = \alpha Q + \frac{2Q^2}{\Delta_c} \exp(-\kappa\Delta_c) \left(\frac{1}{\Delta_c^2} + \frac{\kappa}{\Delta_c} + \kappa^2 \right) + \frac{2Q^2}{\Delta_f} \exp(-\kappa\Delta_f) \left(\frac{1}{\Delta_f^2} + \frac{\kappa}{\Delta_f} + \kappa^2 \right). \quad (4.5)$$

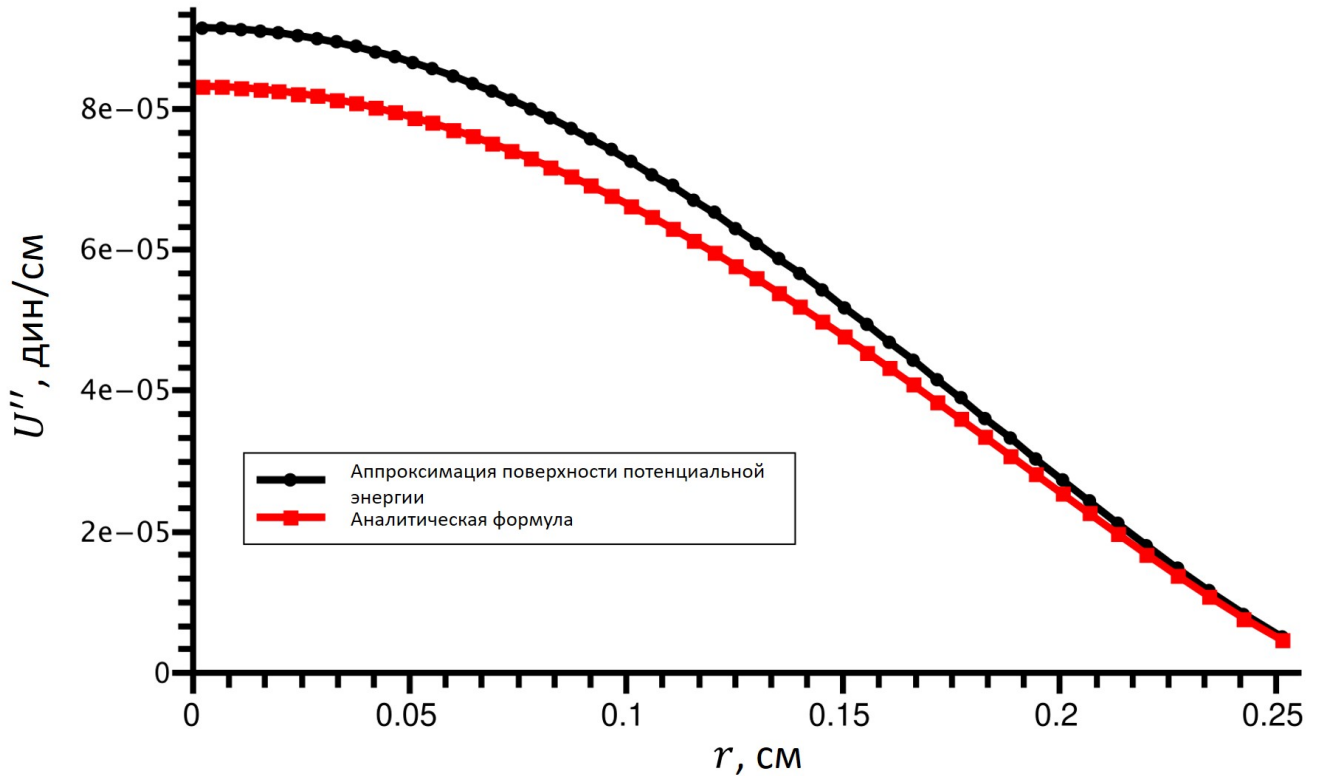


Рис. 4.6. Радиальные профили второй производной потенциальной энергии, рассчитанные по формуле 4.5 (красная линия) и через прямое численное дифференцирование поверхности потенциальной энергии в равновесных положениях частиц (черная линия).

На Рис. 4.6 показано сравнение радиальных профилей второй производной потенциальной энергии, рассчитанных по формуле 4.5 и через прямое численное дифференцирование поверхности потенциальной энергии в равновесных положениях частиц. Как можно видеть, согласие формулы с расчетными результатами достаточно хорошее: с ростом радиального расстояния вторая производная потенциальной энергии в равновесных положениях частиц монотонно уменьшается. Это соответствует также и уменьшению эйнштейновской частоты коле-

баний, которая для одномерной системы определяется аналогично трехмерной (формула 1.9) [72, 51]. Из этого напрямую следует, что профиль амплитуды тепловых колебаний $\langle u^2(r) \rangle$ также будет принципиально неоднородным.

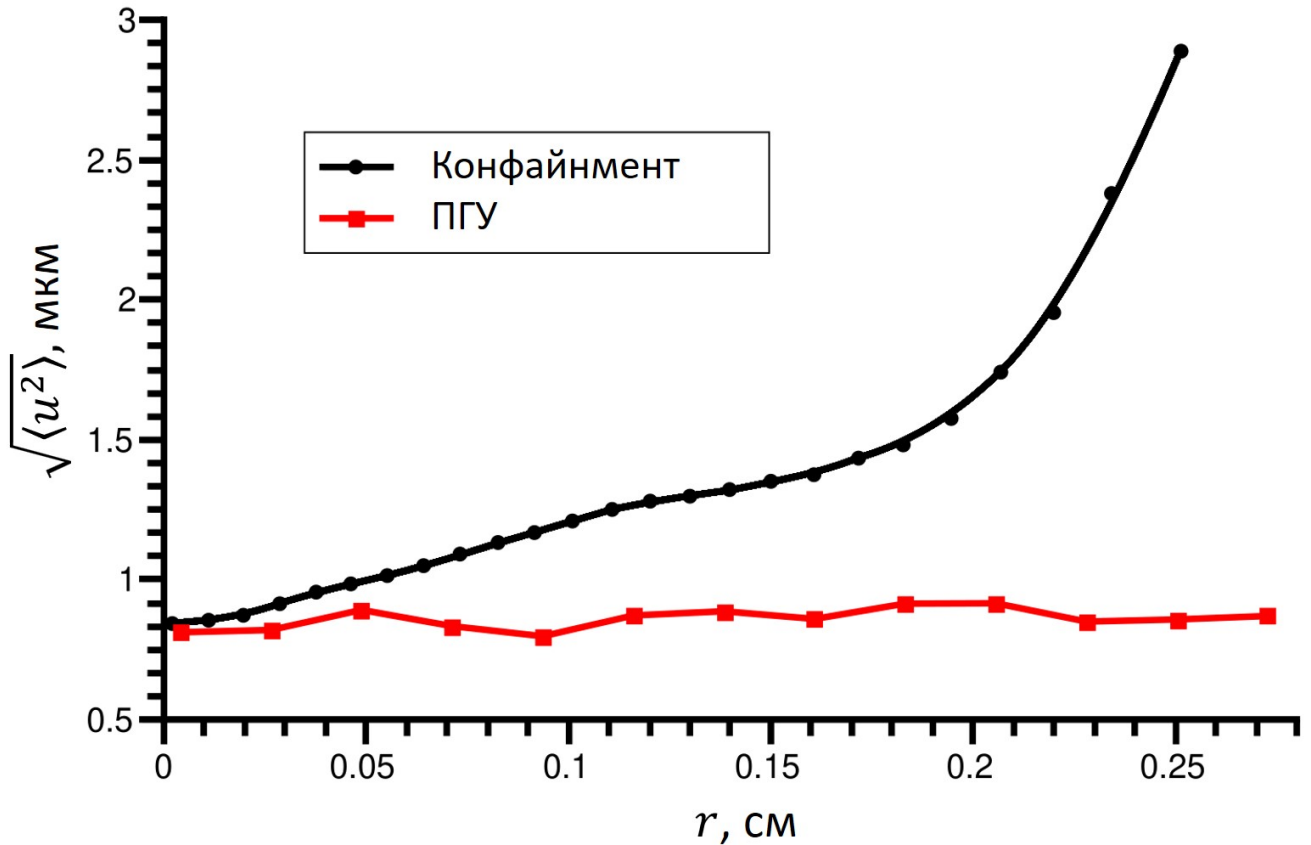


Рис. 4.7. Радиальный профиль амплитуды тепловых колебаний в квазиодномерной цепочечной структуре частиц в конфайнменте (черная линия) и аналогичной однородной цепочке в периодических граничных условиях (красная линия).

Зависимость амплитуды тепловых колебаний частиц от расстояния до центра системы показана на Рис. 4.7. Для сравнения приводится также зависимость амплитуды тепловых колебаний от положения частицы в однородной цепочке частиц в периодических граничных условиях (ПГУ), без влияния конфайнмента. Параметры Q, κ, T системы в ПГУ выбраны такими же, как и в конечной системе. Как можно видеть, в системе в ПГУ величина амплитуды тепловых колебаний ожидаемо распределена по структуре однородно. В структуре в ловушке, напротив, амплитуда тепловых колебаний строго монотонно увеличивается с ростом радиального расстояния.

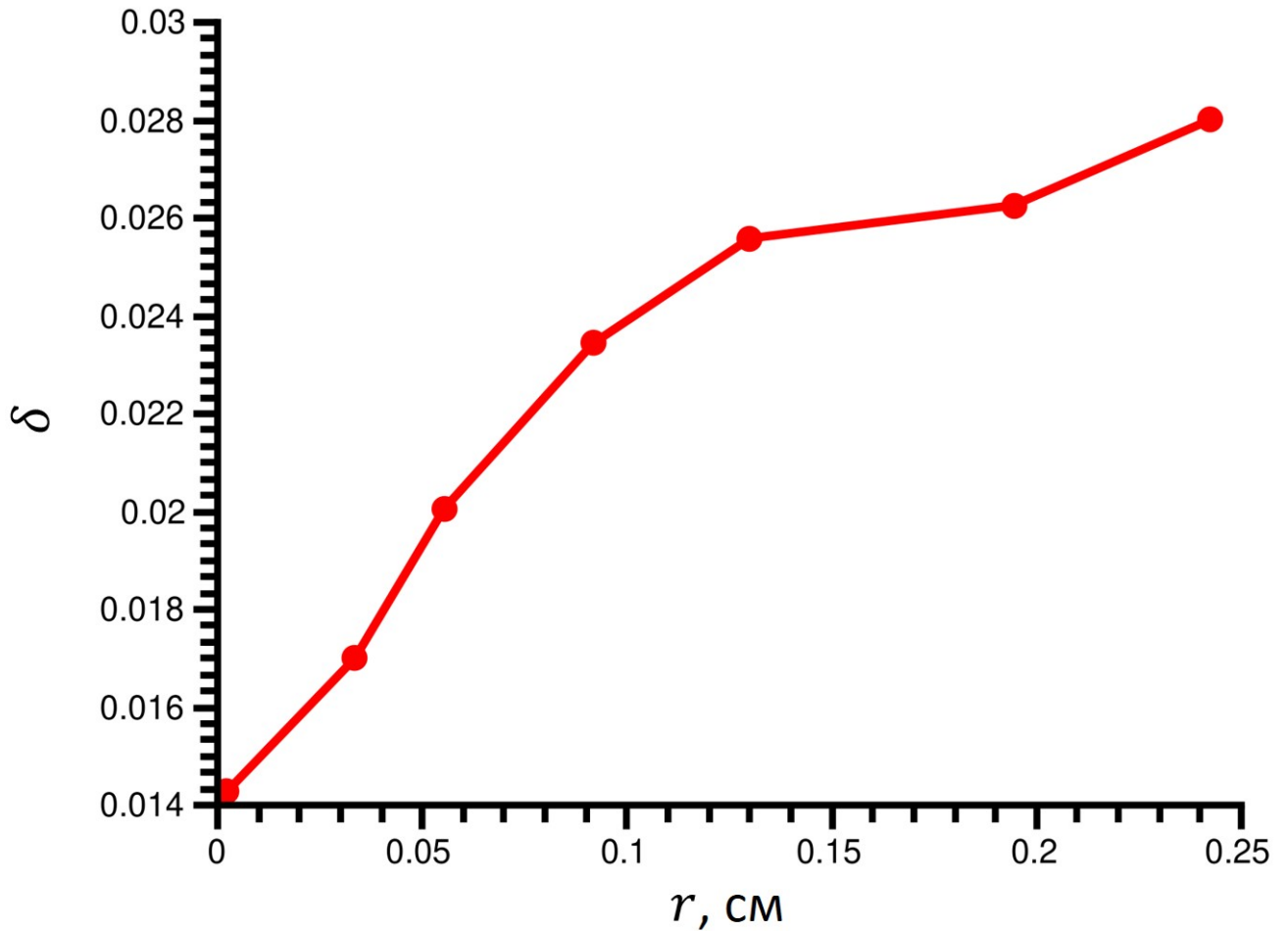


Рис. 4.8. Зависимость локальной величины параметра Линдемманна от расстояния до геометрического центра электростатической ловушки.

Аналогичный эффект наблюдается и для параметра Линдемманна [75]. Он рассчитывается по следующей формуле:

$$\delta = \frac{\langle u^2 \rangle}{(\Delta_c + \Delta_f)/2}. \quad (4.6)$$

Как следует из Рис. 4.8, от центра к периферии системы параметр увеличивается более, чем в 2 раза.

Таким образом, принципиальная неоднородность динамических свойств квазиодномерной цепочки подтверждается. Далее рассматриваются квазидвумерная и трехмерная системы, для которых дополнительно проверяются соотношения разработанной аналитической модели 2.7, 2.8, 2.9.

4.2.2. Неоднородность динамических свойств квазидвумерной и трехмерной систем

Основной интерес в данной главе представляет величина среднеквадратичного смещения частиц относительно положений равновесия в упорядоченном состоянии — амплитуда тепловых колебаний. Рассматриваются квазидвумерная и трехмерная система, описанные в разделе 4.1.2. Исходные данные для расчета амплитуды тепловых колебаний вычисляются на протяжении 100 – 200 тысяч шагов МД интегрирования. На Рис. 4.9, 4.10 усредненная величина амплитуды показана для двух значений температуры 200 К и 600 К как функция радиального расстояния и как функция параметра $(\Delta_{\text{local}}(r) \exp(\kappa \Delta_{\text{local}}(r)))^{1/2}$, который взят из формулы 2.7. Амплитуда тепловых колебаний монотонно увеличивается от центра к краю структуры вместе со значением локального межчастичного расстояния как в квазидвумерной, так и в трехмерной системе при обоих значениях температуры. Зависимость амплитуды от величины $(\Delta_{\text{local}}(r) \times \exp(\kappa \Delta_{\text{local}}(r)))^{1/2}$ линейна для квазидвумерных и трехмерных систем со значением $A\sqrt{T}$, равным 0.0007 и 0.0008 см^{1/2} соответственно. Этот результат подтверждает выводы аналитической модели, изложенной в главе 2, и обосновывает использование формулы 2.7 для описания радиального профиля амплитуды тепловых колебаний в сильно экранированных юкавовских кристаллах:

$$\langle u^2 \rangle(r) \propto \Delta_{\text{local}}(r) \exp(\kappa \Delta_{\text{local}}(r)). \quad (4.7)$$

Зависимость параметра Линдемманна δ от радиального расстояния и аппроксимация этой зависимости формулой $A\sqrt{T}(\exp(\kappa \Delta_{\text{local}}(r))/\Delta_{\text{local}}(r))^{1/2}$ показаны на Рис. 4.11. Параметр Линдемманна часто используется в качестве индикатора плавления. Считается, что когда он достигает критического значения δ_{melt} , которое для разных систем может лежать в диапазоне от 0.1 до 0.2, происходит плавление системы. Для юкавовских систем, $\delta_{\text{melt}} \approx 0.19$ [54]. Как можно видеть из графика, под влиянием конфайнмента величина параметра Линдемманна имеет принципиально неоднородный радиальный профиль как для ква-

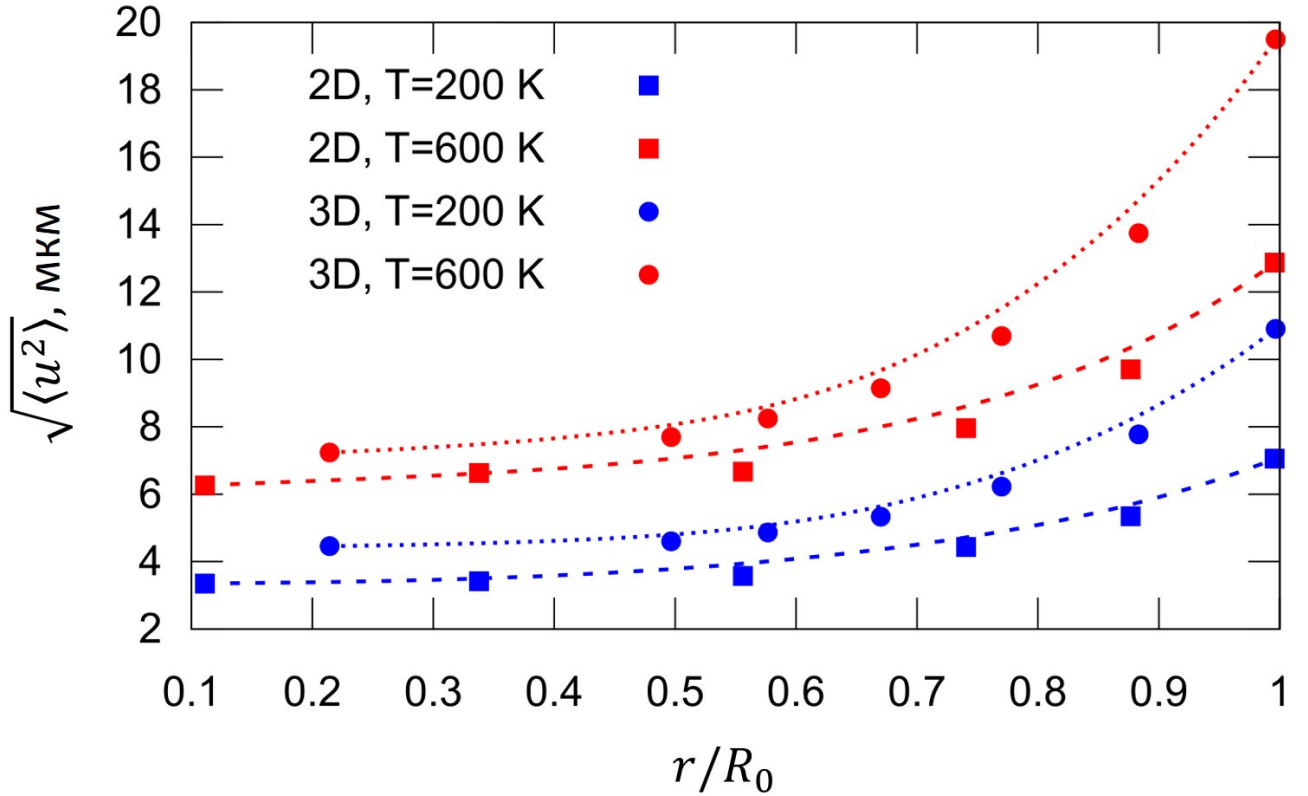


Рис. 4.9. Радиальный профиль амплитуды тепловых колебаний в квазидвумерной и трехмерной системах при параметрах $Q = 3000$ е, $\kappa = 300.0$ см $^{-1}$, $\alpha = 0.01$ ед. СГСЭ и температурах 200 и 600 К.

зидвумерной, так и для трехмерной системы: параметр имеет более высокое значение на периферии системы. Данный факт указывает на то, что периферийная система находится ближе к точке локального плавления.

Также рассчитываются радиальная и угловая компоненты среднеквадратичного смещения частиц от положения равновесия в трехмерной системе по следующим формулам:

$$\langle u^2 \rangle_R = \langle (r_i - r_{i0})^2 \rangle, \quad (4.8)$$

$$\langle u^2 \rangle_A = r_{i0}^2 \langle (\theta_i - \theta_{i0})^2 + \sin^2 \theta_{i0} (\varphi_i - \varphi_{i0})^2 \rangle, \quad (4.9)$$

где r_i, θ_i, φ_i — радиус, зенитный и азимутальный углы положения i -ой частицы в сферических координатах, индекс 0 обозначает величину координат в равновесном положении. Таким образом, рассчитываемые параметры $\langle u^2 \rangle_R$ и $\langle u^2 \rangle_A$ соответствуют колебаниям частиц вдоль их радиус-вектора и перпендикулярно

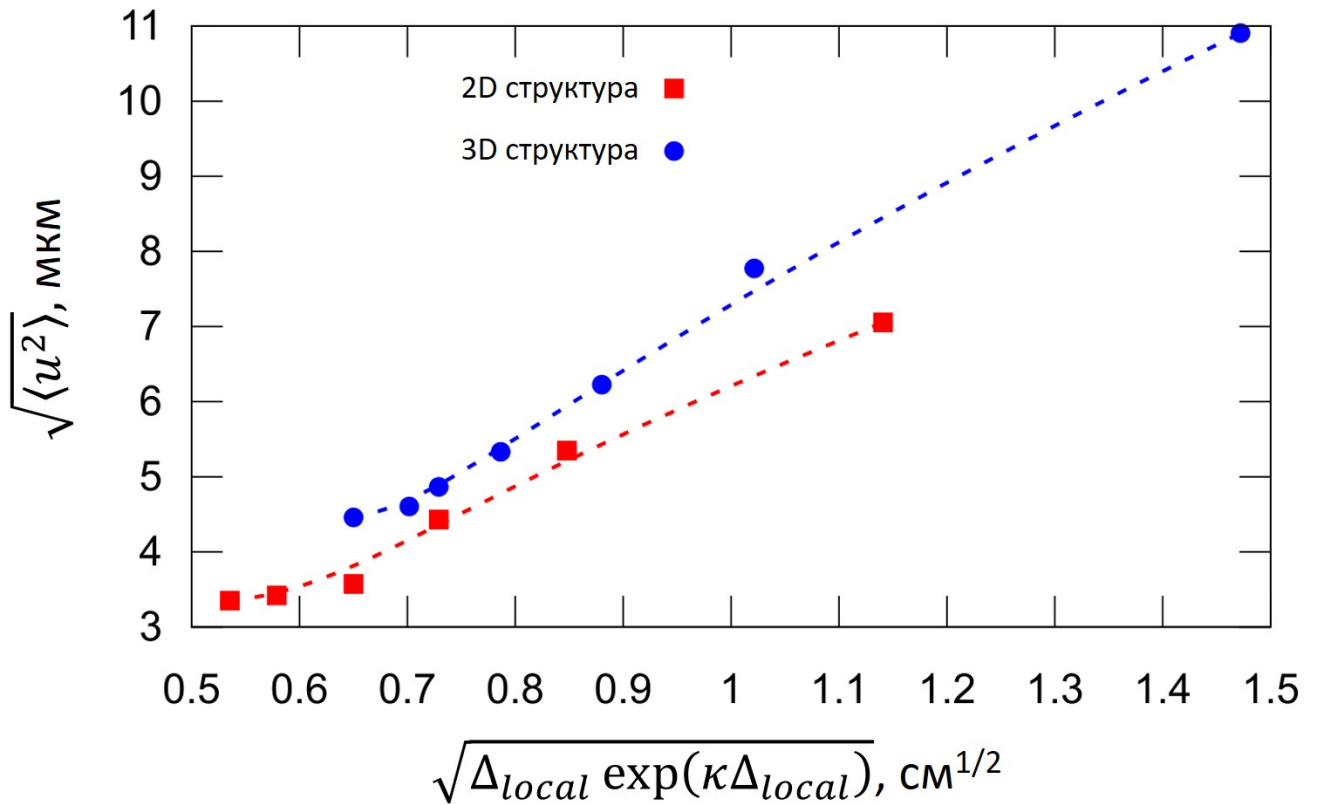


Рис. 4.10. Зависимость амплитуды тепловых колебаний в квазидвумерной и трехмерной системах от величины $(\Delta_{local}(r) \exp(\kappa \Delta_{local}(r)))^{1/2}$ при параметрах $Q = 3000 e$, $\kappa = 300.0 \text{ cm}^{-1}$, $\alpha = 0.01$ ед. СГСЭ и температурах 200 и 600 К.

ему. Их радиальные профили показаны на Рис. 4.12 вместе с полным значением амплитуды тепловых колебаний. Угловая компонента, соответствующая внутриоболочечному движению и относительному вращению оболочек, всегда имеет более высокое значение, чем радиальная. С ростом расстояния до центра системы обе компоненты монотонно увеличиваются, при этом угловая увеличивается более заметно. Это может означать, что на больших расстояниях от центра системы колебания частиц в направлениях, лежащих внутри оболочек, преобладают над колебаниями частиц в направлении, лежащем вне оболочек. Таким образом, оболочечные подсистемы могут в первом приближении рассматриваться как независимые друг от друга.

Как следует из формулы 2.6, характерная частота колебаний частиц в системе из заряженных частиц в конфайнменте должна уменьшаться с ростом

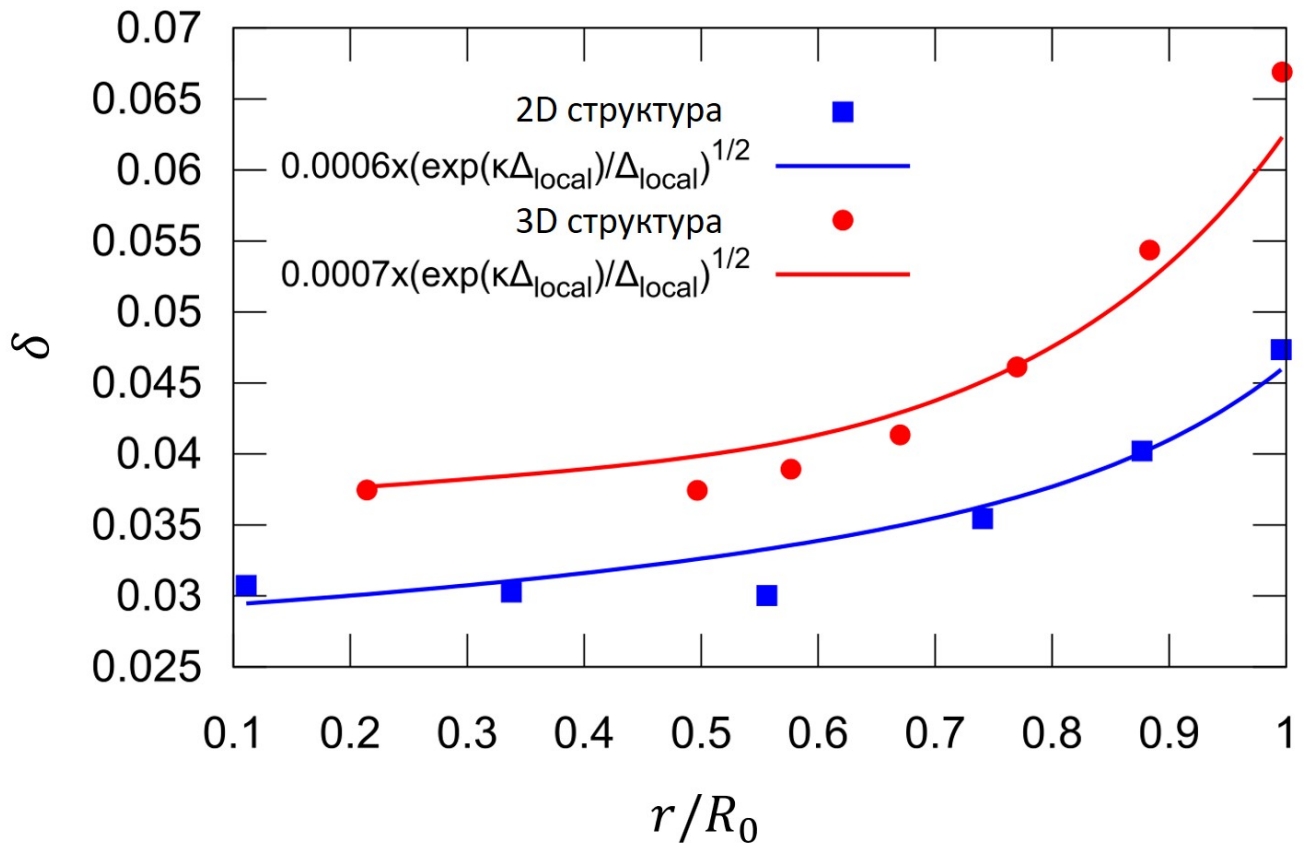


Рис. 4.11. Радиальный профиль локального значения параметра Линдемманна в квазидвумерной и трехмерной системах при параметрах $Q = 3000$ е, $\kappa = 300.0$ см⁻¹, $\alpha = 0.01$ ед. СГСЭ и температурах $T = 200$ и 600 К. Точки обозначают результаты МД расчетов, линии соответствуют аппроксимациям функцией $A\sqrt{T}(\exp(\kappa\Delta_{\text{local}}(r))/\Delta_{\text{local}}(r))^{1/2}$.

радиального расстояния. Это обусловлено тем, что межчастичное расстояние с удалением от центра увеличивается, а энергия юкавовского взаимодействия уменьшается. Сравнение спектров колебаний частиц в центральной и периферийной областях трехмерной системы показано на Рис. 4.13. Техника расчета спектров подробнее описана в разделе 3.4. Можно видеть, что на периферии структуры спектр действительно заметно смещается в низкочастотную область. Эйнштейновская частота, характеризующая усредненную частоту фононов в подсистеме, также уменьшается с ростом радиального расстояния. Ее величина рассчитана в соответствии с формулой 2.6 и изображена на графике для центральной и периферийной подсистем.

Отдельно рассматривается поведение радиального профиля параметра неидеальности в двух формах. Первая форма соответствует общему определению для

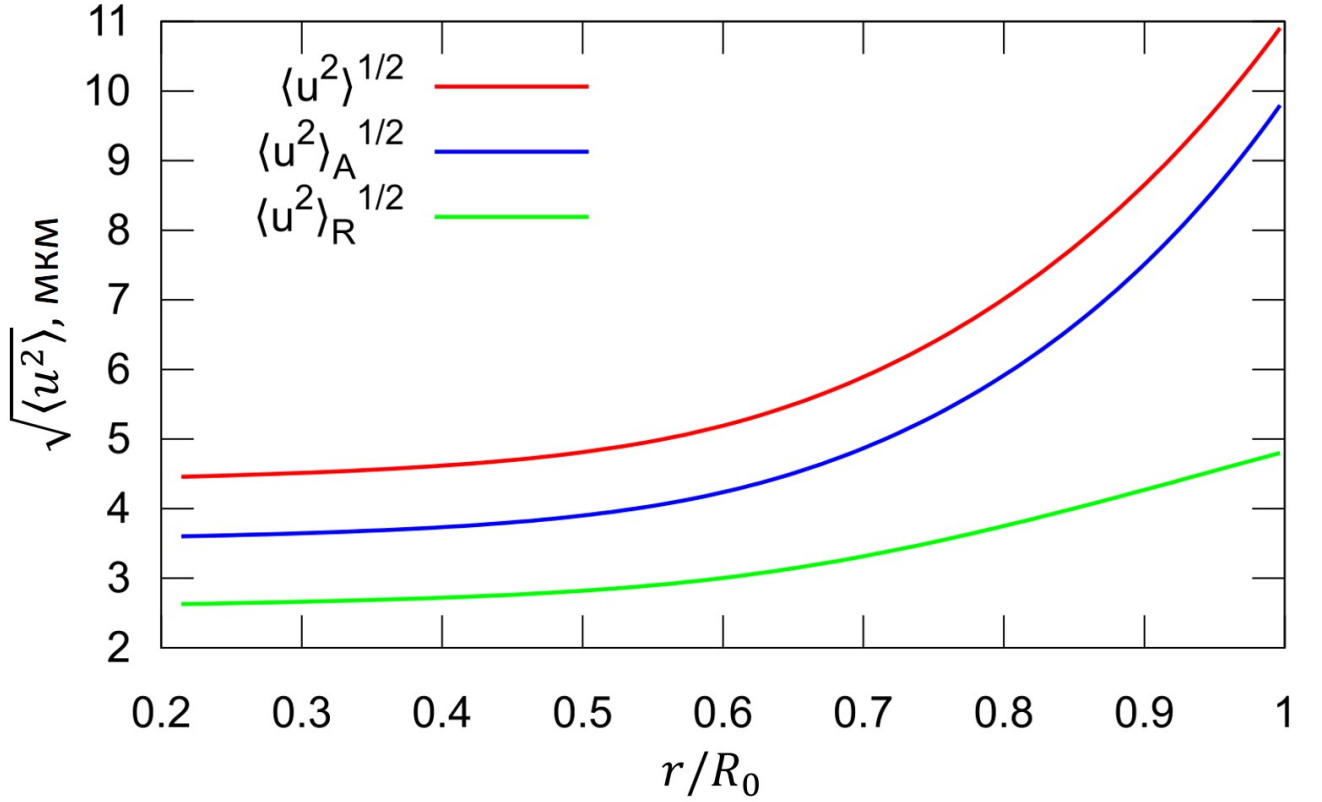


Рис. 4.12. Полная, радиальная и угловая компоненты среднеквадратичного смещения частиц от их равновесных положений в зависимости от радиального расстояния до центра ловушки в трехмерной системе.

систем заряженных частиц, взаимодействующих по не экранированному кулоновскому потенциалу [13, 14]:

$$\Gamma = \frac{Q^2}{\Delta k T}, \quad (4.10)$$

а вторая, модифицированная форма получена Ваулиной и др. [110] и лучше описывают линию плавления для юкавовских систем:

$$\Gamma^* = \Gamma(1 + \kappa\Delta + (\kappa\Delta)^2/2) \exp(-\kappa\Delta). \quad (4.11)$$

В “бесконечных” кулоновских системах кристаллизация происходит, когда Γ превышает критическую величину ~ 105 [110]. В “бесконечных” трехмерных юкавовских системах то же самое происходит, когда Γ^* превышает ~ 105 [110]. Радиальные профили обеих форм параметра неидеальности в трехмерной структуре показаны на Рис. 4.14. Величина Γ уменьшается в 1.4 раза от центра структуры к ее периферии, в то время как Γ^* уменьшается более чем в 3 раза. Этот

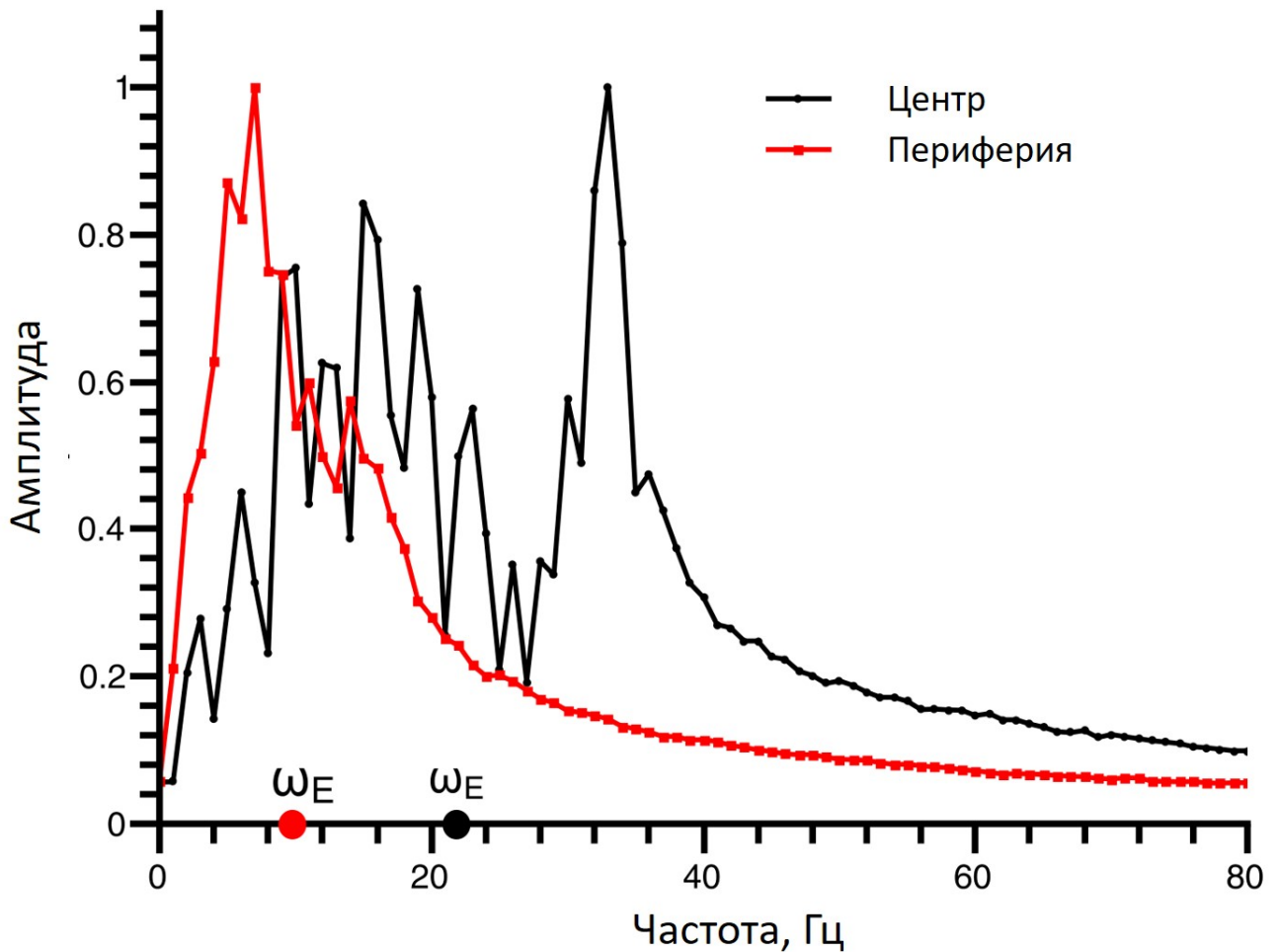


Рис. 4.13. Спектры тепловых колебаний частиц в центральной и периферийной областях системы, полученные из Фурье-преобразования автокорреляционных функций скорости для соответствующих подсистем. Большие точки обозначают эйнштейновские частоты, рассчитанные по формуле 2.6.

результат указывает, что степень упорядоченности групп частиц, расположенных в разных областях конечной юкавовской системы в конфайнменте, может существенно отличаться.

Таким образом, посредством МД расчетов для квазидвумерных и трехмерных систем проверена аналитическая теория, изложенная в главе 2. Показано, что структурная неоднородность, вызванная действием конфайнмента, приводит к неоднородности основных динамических характеристик системы: спектра и амплитуды тепловых колебаний частиц, параметров Линдемманна и неидеальности.

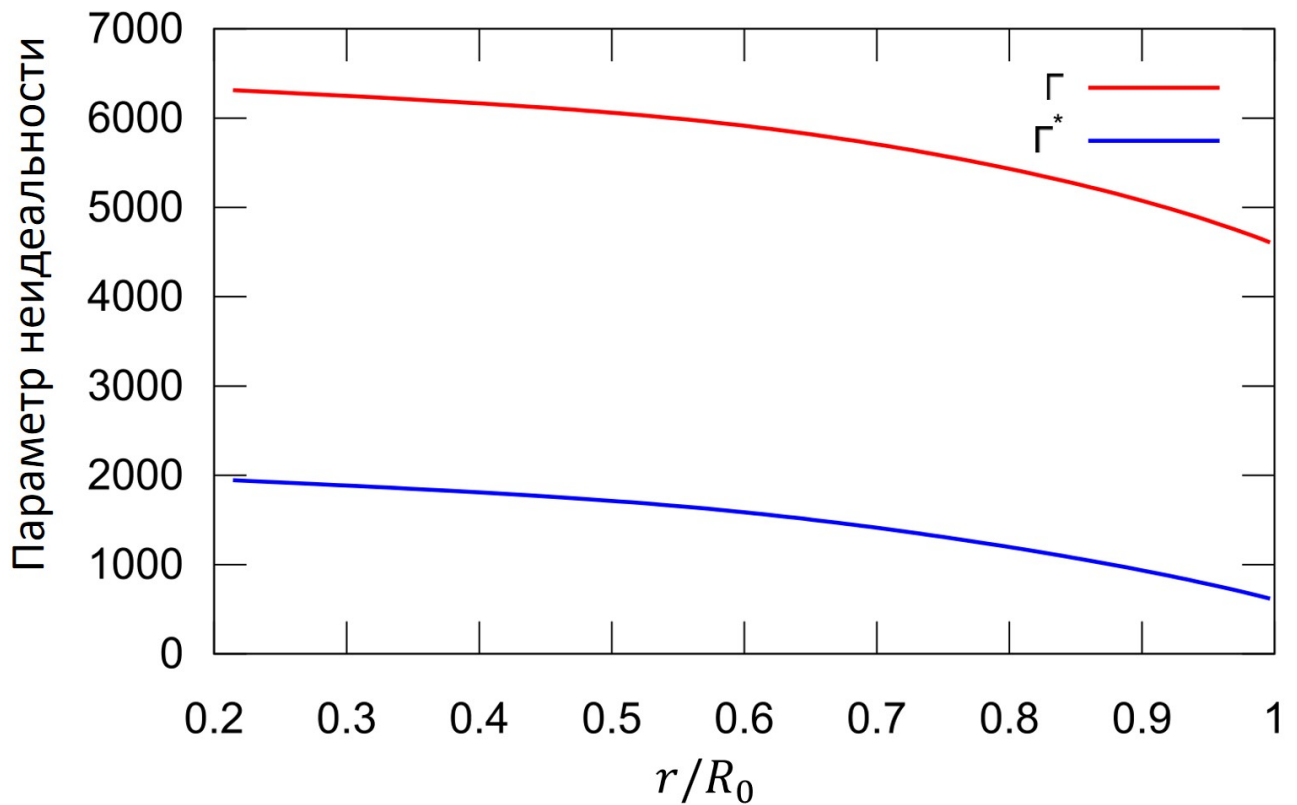


Рис. 4.14. Радиальные профили двух форм параметра неидеальности Γ и Γ^* в трехмерной структуре из 2800 частиц.

4.3. Сопоставление результатов с экспериментальными данными

Применимость результатов, описывающих неоднородность динамических характеристик систем заряженных частиц в конфайнменте, для объяснения данных лабораторных плазменно-пылевых экспериментов существенным образом зависит от применимости самой модели юкавовских частиц к плазменно-пылевым структурам.

Несмотря на то, что пространственная неоднородность систем заряженных частиц подробно исследована Тоцуджи и др. в двумерном случае и Хеннингом и др. в трехмерном, подробного сравнения с экспериментальными работами не проведено. В данном разделе проверяется применимость модели юкавовских частиц в ловушке к экспериментальным квазиодномерной [7] и квазидвумерной [8] пылевым структурам.

В квазиодномерной системе из работы Лиу и др. [7], градиент межчастичного расстояния в структуре равен $\partial\Delta/\partial r \approx 0.01$ для оцененных авторами значений заряда частицы $Q = 7600 e$ и радиуса экранирования $\lambda_D = 1/\kappa = 0.86$ мм. В МД расчетах в данной работе удается получить совпадающее значение градиента межчастичных расстояний при близких параметрах системы $Q = 7600 e$, $\lambda_D = 0.86$ мм и $\alpha = 7.4 \times 10^{-4}$ ед. СГСЭ.

В эксперименте Харипрасада и др. с плазменно-пылевым монослоем [8], ни один из параметров Q , λ_D , α не оценен и не измерен. Тем не менее, радиальный профиль локального межчастичного расстояния измерен напрямую и дает $\Delta_{cen} = 250$ мкм в центре структуры и $\Delta_{per} = 300$ мкм на ее краю. Дана оценка параметра неидеальности в соответствии с выражением $\Gamma = \Delta_{local}^2/\langle u^2 \rangle$. Показано, что параметр неидеальности имеет неоднородный радиальный профиль. С ростом радиального расстояния он увеличивается вместо уменьшения, которое продемонстрировано для классической юкавовской системы с постоянным зарядом, параметрами экранирования и ловушки на Рис. 4.14.

Главная причина такого расхождения заключается в величине средней энергии движения пылевых частиц в этом эксперименте. Харипрасад и др. [8] измерили неоднородный радиальный профиль температуры (средней кинетической энергии) пылевой компоненты. Ими показано, что величина средней кинетической энергии пылевых частиц не совпадает с комнатной температурой: в то время как комнатная температура порядка $T_r = 0.025$ эВ, энергия движения пылевых частиц в центре системы $T_{cen} = 0.12$ эВ, а на периферии $T_{per} = 0.08$ эВ.

В связи с неоднородностью радиального профиля средней кинетической энергии пылевых частиц, для описания радиальной зависимости амплитуды тепловых колебаний необходимо использовать формулу 2.7. Оценим величину амплитуды тепловых колебаний частиц в центре и на периферии структуры из локального значения параметра неидеальности: $\sqrt{\langle u^2 \rangle_{cen}} \approx 18.7$ мкм и

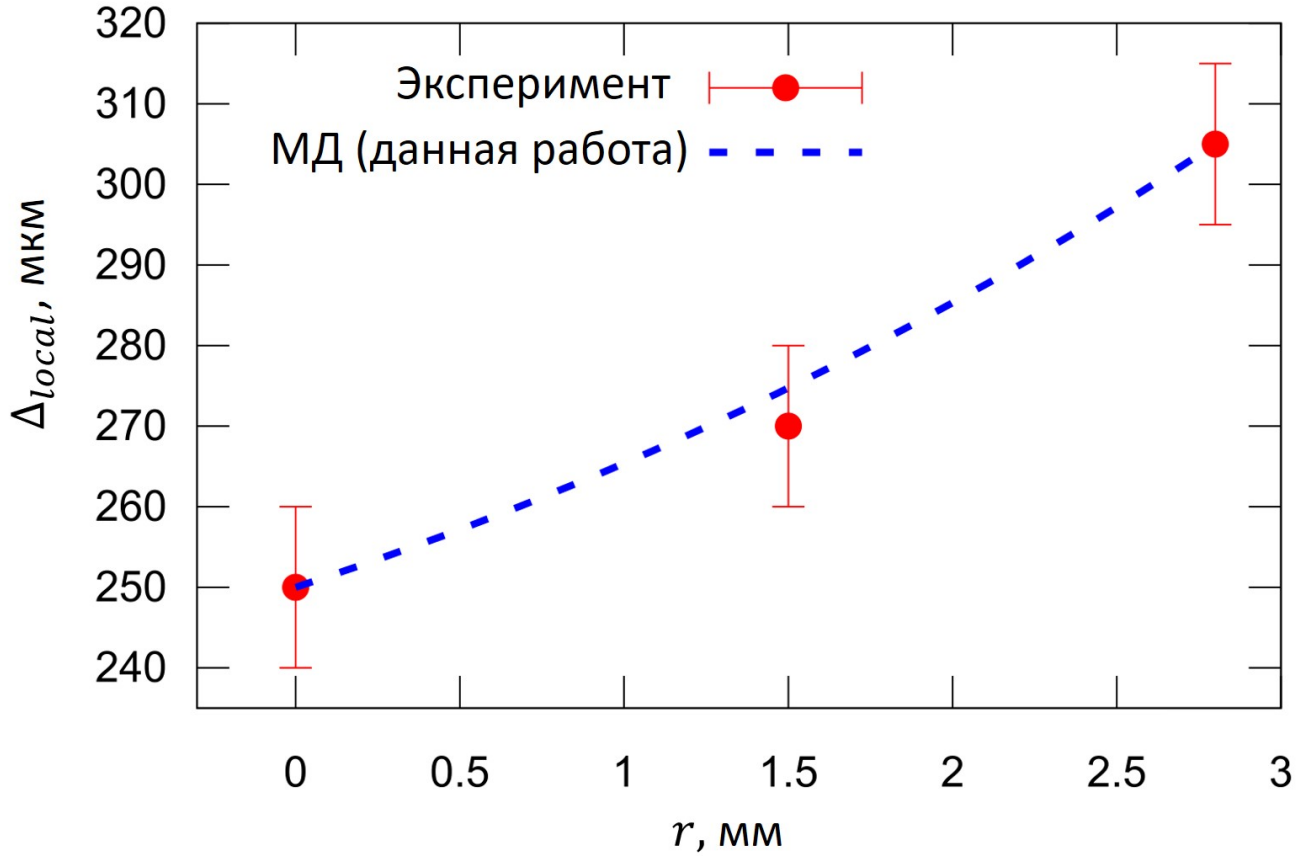


Рис. 4.15. Радиальный профиль межчастичного расстояния в эксперименте [8] и в МД расчетах квазидвумерной системы в данной работе при параметрах $Q = 3000 e$, $\kappa = 136.0 \text{ см}^{-1}$ и $\alpha = 4 \times 10^{-3}$ ед. СГСЭ.

$\sqrt{\langle u^2 \rangle_{per}} \approx 17.7$ мкм. Из формулы 2.7,

$$\frac{\langle u^2 \rangle_{per}}{\langle u^2 \rangle_{cen}} = \frac{T_{per} \exp(\kappa \Delta_{per}) \Delta_{per}}{T_{cen} \exp(\kappa \Delta_{cen}) \Delta_{cen}} \approx 1 \quad (4.12)$$

откуда можно определить значение $\kappa = 136.0 \text{ см}^{-1}$. Оценка заряда частицы из величины параметра неидеальности дает значение $3000 \pm 100 e$. Как показано на Рис. 4.15, квазивумерная структура, полученная по результатам МД моделирования при параметрах $Q = 3000 e$, $\kappa = 136.0 \text{ см}^{-1}$ и $\alpha = 4 \times 10^{-3}$ ед. СГСЭ, имеет такой же радиальный профиль межчастичного расстояния, как и в эксперименте.

Сравнение аналитической модели, развитой в данной диссертации, с данными лабораторных экспериментов подтверждает применимость формулы 2.7 для описания сильно экранированных упорядоченных систем пылевых частиц.

4.4. Выводы к четвертой главе

В рамках данной главы показано, что в системе равных по величине зарядов в поле удерживающего конфинмента в квазиодномерном, квазидвумерном и трехмерном случаях и амплитуда тепловых колебаний частиц, и параметр Линдемманна увеличиваются от центра к периферии системы, в то время как параметр неидеальности уменьшается. Полученные результаты подтверждают аналитические соотношения, выведенные в главе 2. Обнаружено, что колебания частиц, расположенных на периферии системы, смещаются в низкочастотную область спектра по сравнению с колебаниями частиц в центральной области. Это в первом приближении обусловлено изменением профиля потенциальных ям, в которых находятся частицы, с удалением от центра системы. Сравнение результатов моделирования с экспериментальными результатами позволяет получить удовлетворительное согласие для квазиодномерной структуры [7] и для квазидвумерной — при учете неоднородного радиального профиля средней кинетической энергии пылевых частиц [8].

Основной вывод главы заключается в том, что для описания свойств частиц в конфинменте независимо от пространственной конфигурации частиц необходимо учитывать эффекты возможной пространственной неоднородности. Предлагается проводить анализ плазменно-пылевых структур в локальном приближении разделяя их на подсистемы с близкими к однородным свойствами.

Неоднородность фазового состояния плазменно-пылевого монослоя с учетом невзаимных эффектов

В данной главе рассматривается квазидвумерная конечная система из юкавовских частиц в параболической ловушке — монослой. Исследуется пространственная неоднородность процесса плавления монослоя. Сравниваются результаты, полученные с помощью трех моделей взаимодействия частиц. Первая модель включает взаимный экранированный кулоновский потенциал и центральную электростатическую ловушку с гармоническим профилем [2, 57, 6]. Второй подход опирается на модель точечного ионного фокуса для описания невязимных эффектов [90, 29, 91] в системе пылевых частиц в плазме. В рамках третьей модели взаимодействия распределение электростатического потенциала вокруг пылевых частиц рассчитывается посредством прямого моделирования кинетики ионов окружающей плазмы [112]. Анализируются характеристики различных сценариев плавления, которые реализуются в монослойной структуре в зависимости от модели взаимодействия и параметров системы. Рассматривается сценарий возникновения и развития НСМ в монослое из пылевых частиц в плазме. Предложен локальный критерий плавления, основанный на параметре флуктуации межчастичного расстояния [9, 10] и позволяющий определять положение границы раздела между упорядоченной и неупорядоченной областями системы в режиме сосуществования фаз. Представленные в главе результаты опубликованы в работах [118, 119].

5.1. Пространственная неоднородность свойств монослоя с учетом невзаимных эффектов

В лабораторных экспериментах с комплексной плазмой, частицы конденсированного вещества микронных размеров помещаются в газоразрядную плазму. Они приобретают высокий отрицательный электрический заряд, типичные значения которого лежат в диапазоне $10^3 - 10^4 e$ [13, 14]. Радиус экранирования в плазменно-пылевом монослое обычно определяется величиной радиуса Дебая для электронов [80]. Его величина обычно составляет порядка нескольких сотен микрон. Межчастичные расстояния в экспериментальных системах обычно также не превышают нескольких сотен микрон [35, 27, 64, 89, 7].

Для исследования выбираются параметры системы, характерные для экспериментов в плазме аргона [14]: модуль заряда частицы $Q = 17000 e$, константа экранирования $\kappa = 30 \text{ см}^{-1}$, параметр параболической ловушки в плоскости монослоя $\alpha_{xy} = 4 \times 10^{-3}$ ед. СГСЭ. Эти значения соответствуют пылевой частице с радиусом $a = 4 \text{ мкм}$ и плотностью вещества $\rho = 1 \text{ г/см}^3$ в плазме с температурой $T_e = 3 \text{ эВ}$ и концентрацией электронов $n_e = 10^9 \text{ см}^{-3}$. Межчастичное расстояние Δ в монослое при этих параметрах близко к 300 мкм , так что $\kappa\Delta \sim 1$. Параметр ловушки вдоль оси Oz α_z устанавливается равным $600\alpha_{xy}$, чтобы получить монослойную структуру и учитывать движение во внеплоскостном направлении. Выбранные значения параметров не ограничивают общность полученных результатов и соответствуют сильно экранированной квазидвумерной системе юкавовских частиц, которая может наблюдаться экспериментально [8, 89].

Для исследования неоднородных эффектов в однослойной системе используется метод, подробно описанный в главе 3 и основанный на численном решении уравнений движения пылевых частиц. Масса частицы $m = 3 \times 10^{-10} \text{ г}$, шаг численного интегрирования $\Delta t = 10^{-5} \text{ с}$. Число частиц в структуре выбрано равным $N = 1000$, чтобы система проявляла макроскопические свой-

ства [64, 60, 69].

В данной главе используются две модели взаимодействия пылевых частиц, подробно описанные в разделе 3.1.

- Первая модель “классического” монослоя включает только экранированный кулоновский потенциал в форме 2.1 и центральную параболическую ловушку. Эта модель является базовым подходом к описанию свойств конечных систем заряженных частиц. Расчеты в данном случае проводятся в NVE-ансамбле, динамика частиц не является ланжевеновской. Такое рассмотрение аналогично работам Тоцуджи [2], Конга и др. [69] и другим. Цель использования этой модели заключается в демонстрации того, что неоднородные свойства присущи юкавовскому монослою в том числе и в рамках базового подхода.
- Вторая модель является общепринятой для моделирования монослоя в условиях плазменно-пылевых экспериментов и опирается на концепцию точечного ионного фокуса для описания эффектов невзаимности и режима развития НСМ [11, 85, 86, 87]. В рамках этой модели учитывается ланжевеновский термостат, действующий при комнатной температуре и описывающий взаимодействие пылевых частиц с окружающим разреженным газом. В ранних работах по этой модели неоднородные эффекты в монослое не рассматривались.

Отметим, что проводимые расчеты являются полностью трехмерными для обеих моделей.

Процедура создания модельных систем подробно описана в 3.3. Когда рассматривается “классический” монослой, начальные координаты частиц задаются случайным образом. Затем система выводится на равновесие при целевой температуре (средней кинетической энергии частиц) T . Перед началом усреднения характеристик импульс и момент импульса системы обнуляются. В этом

случае, уравнение движения i -ой частицы принимает следующий вид:

$$m\ddot{\mathbf{r}}_i = -Q\nabla U_{\text{trap}} - \nabla \sum_j V(\Delta_{ij}). \quad (5.1)$$

Радиальный профиль средней кинетической энергии частиц в этой системе является пространственно однородным и не изменяется в ходе расчета.

Когда рассматривается монослой с “точечными ионными фокусами”, динамика частиц является ланжевеновской, и термостат не выключается после уравнивания системы. Уравнение движения i -ой частицы имеет вид:

$$m\ddot{\mathbf{r}}_i = -Q\nabla U_{\text{trap}} - \nabla \sum_{j \neq i} V_{\text{wake}}(\Delta_{ij}) - m\gamma \dot{\mathbf{r}}_i + \mathbf{L}_i(T_{\text{room}}), \quad (5.2)$$

где γ — коэффициент вязкого трения, определяемый давлением газа в разрядной трубке в соответствии с формулой 3.2; $\mathbf{L}_i(T_{\text{room}})$ — изотропная ланжевеновская случайная сила при комнатной температуре [25, 107], V_{wake} — потенциал взаимодействия пылевых частиц. Для описания взаимодействия в этом случае используется схема, которая успешно применялась при теоретическом исследовании НСМ [85, 86, 80, 90, 29, 91]. В рамках этой схемы, распределение электростатического потенциала вокруг частицы моделируется с учетом точечных положительных зарядов q , расположенных строго под каждой пылевой частицей на фиксированном расстоянии δ_q во внеплоскостном направлении. В этой модели проявляются не взаимные эффекты: частица j и связанный с ней точечный ионный фокус оба действуют на частицу i , но частица i действует *только* на частицу j , но не на связанный с ней точечный заряд. Формула для $V_{\text{wake}}(\Delta_{ij})$ может быть записана как:

$$V_{\text{wake}}(\Delta_{ij}) = \frac{Q^2}{\Delta_{ij}} \exp(-\kappa r_{ij}) + \frac{Qq}{\Delta_{ij}^q} \exp(-\kappa \Delta_{ij}^q), \quad (5.3)$$

where Δ_{ij}^q — расстояние между i -ой частицей и положительным точечным зарядом, жестко связанным с j -ой частицей.

Отметим, что обозначение T используется в данной главе только для “клас-

сической” системы с изотропным и однородным профилем температуры. Обозначения T_h и T_z используются для монослоя с учетом невзаимных эффектов.

Сначала рассмотрим неоднородность “классического” монослоя с взаимными силами между частицами. Она соответствует результатам, описанным в разделе 4.2.2. Такой монослоем является принципиально неоднородной системой, организованной в треугольную решетку в центральной области и в оболочки на периферии. Межчастичное расстояние Δ в монослое изменяется от 330 мкм в центральной области до 540 мкм на периферии системы, таким образом, $\kappa\Delta$ изменяется от 1 до 1.6, что характерно для экспериментов [8, 7].

Неоднородность “классического” монослоя показана на Рис. 5.1. Радиус структуры $R_0 = 0.65$ см. Построены радиальные профили межчастичного расстояния Δ , амплитуды тепловых колебаний $\langle u^2 \rangle$ и параметра неидеальности Γ^* при двух значениях температуры T . В этом случае температура T не соответствует температуре газа в разрядных трубках. Она соответствует средней кинетической энергии частиц. Амплитуда тепловых колебаний i -ой частицы рассчитывается в соответствии с формулой 3.4, параметр неидеальности — в соответствии с формулой 3.6. На Рис. 5.1 все параметры представлены в виде отношения к своим усредненным величинам по всей системе Δ_{ave} , $\langle u^2 \rangle_{\text{ave}}$, Γ_{ave}^* .

Как и ожидается, в системе с взаимным экранированным кулоновским потенциалом в параболическом конфайнменте межчастичное расстояние увеличивается к периферии системы вместе с амплитудой тепловых колебаний. Параметр неидеальности уменьшается. Увеличение температуры слабо влияет на пространственное распределение динамических характеристик. И при $T = 12000$ К, и при $T = 36000$ К отношение величин межчастичного расстояния и параметра неидеальности в центре и на краю структуры является одинаковым. Неоднородность радиального профиля амплитуды тепловых колебаний усиливается с увеличением температуры. Этот результат находится в согласии с аналитической теорией, развитой в главе 2.

Особый интерес представляет то, как неоднородность проявляется в систе-

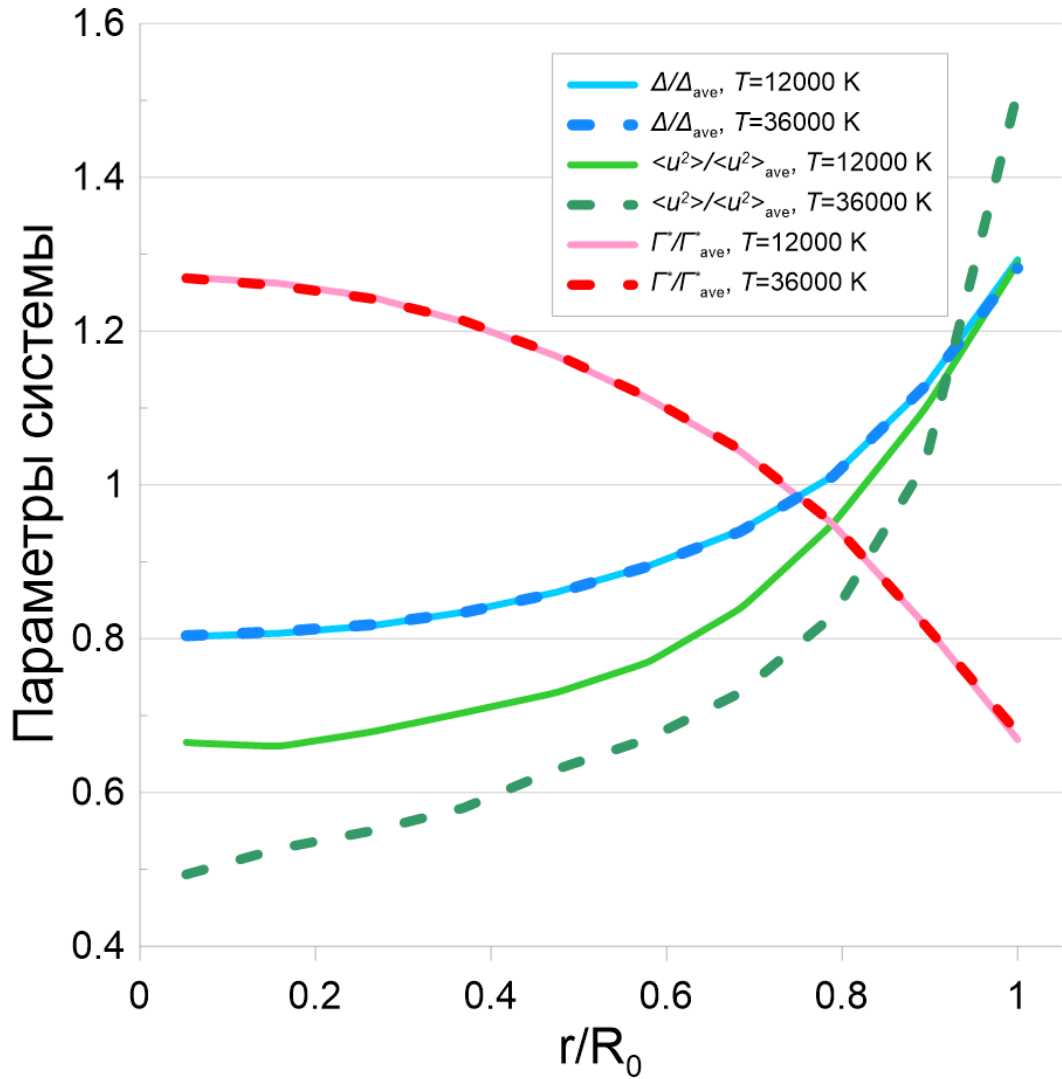


Рис. 5.1. Пространственная неоднородность классического монослоя. Показаны радиальные профили межчастичного расстояния Δ , амплитуды тепловых колебаний $\langle u^2 \rangle$ и параметра неидеальности Γ^* . Рассматриваются два значения температуры системы: $T = 12000$ К и $T = 36000$ К. Параметры представлены в виде отношения к своим усредненным величинам по всей системе Δ_{ave} , $\langle u^2 \rangle_{\text{ave}}$, Γ_{ave}^* .

ме с учетом невзаимных эффектов, которые при достаточно малых значениях коэффициента вязкого трения γ могут приводить к резкому увеличению кинетической энергии пылевых частиц. Для описания точечного ионного фокуса в соответствии с формулой 5.3, выбираются типичные значения заряда $q = -0.2Q$ и расстояния между частицей и зарядом $\delta_q = 80$ мкм (~ 0.25 от межчастичного расстояния в центральной области) [85, 86, 80, 90, 29, 91]. Величина коэффициента трения в формуле 5.2 варьируется таким образом, чтобы наблюдать

“аномальный разогрев” движения пылевой компоненты. С физической точки зрения, изменение коэффициента трения соответствует изменению давления в экспериментальной разрядной трубке. Коэффициент трения может быть рассчитан по формуле 3.2 [14, 109]. Он изменяется в диапазоне $0.5 - 10.0 \text{ с}^{-1}$, что соответствуют диапазону давлений $1 - 20 \text{ Па}$ в экспериментах с аргонной плазмой при выбранных размере и плотности пылевой частицы.

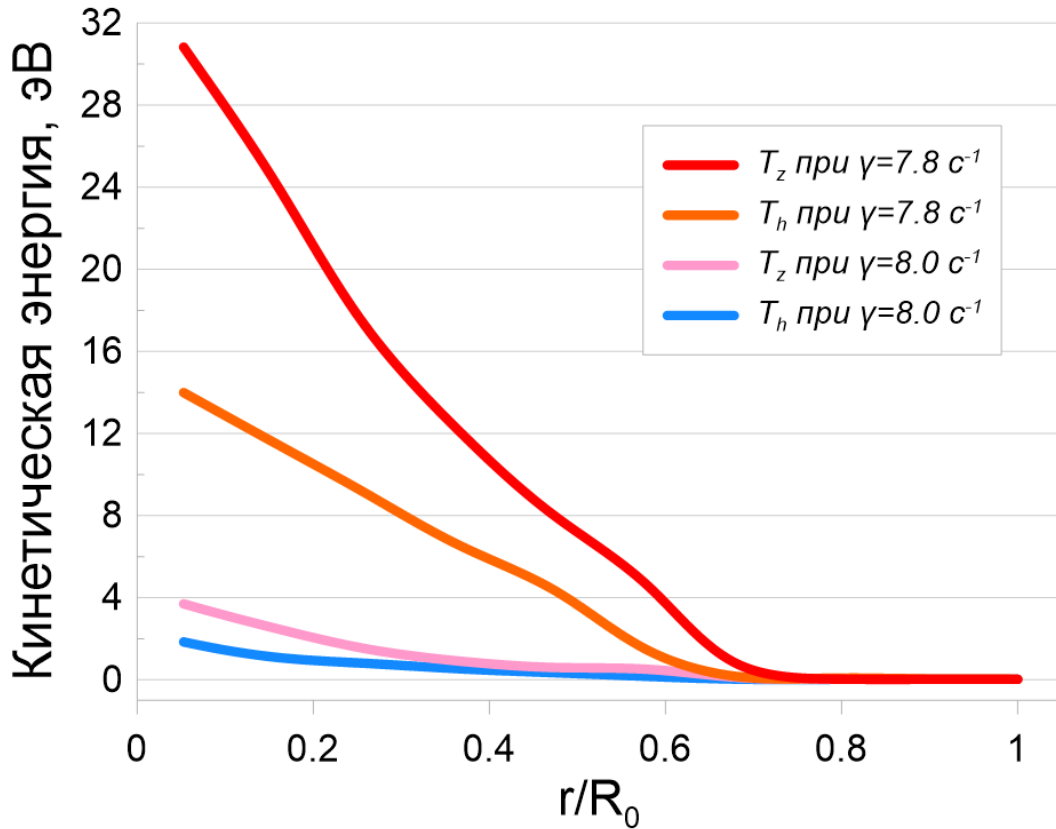


Рис. 5.2. Радиальные профили внутриплоскостной и внеплоскостной компонент кинетической энергии частиц в модели с учетом точечного ионного фокуса. Параметры расчета: $Q = 17000 \text{ e}$, $\kappa = 30 \text{ см}^{-1}$, $\alpha = 3.2 \times 10^{-3}$ ед. СГСЭ, $\beta = 600\alpha$, $q/Q = -0.2$, $\delta_q = 80 \text{ мкм}$. Показаны результаты для двух значений коэффициента γ : 7.8 с^{-1} и 8.0 с^{-1} .

Включение в модель взаимодействия положительных точечных зарядов, расположенных под каждой пылевой частицей, приводит к сжатию системы пылевых частиц. Для избежания этого эффекта величина внутриплоскостной компоненты ловушки α_{xy} изменяется от значения 4.0×10^{-3} на значение 3.2×10^{-3} ед. СГСЭ, чтобы получить такие же структурные свойства, как и у “классического” монослоя. Также отметим, что в рассматриваемой системе величина

ω_0/ω_h равняется 3.0 в центральной области системы и 6.5 на ее периферии, где $\omega_0 = \sqrt{\alpha_z Q/m}$ — частота вертикальных колебаний пылевой частицы, а $\omega_h = \sqrt{Q^2/(m\Delta^3)}$ — временная частота продольных волн в “бесконечной” системе. Это означает, что в первом приближении, условия для запуска НСМ с понижением γ выполнены только в центральной области [85, 86, 80], что позволяет подробно проанализировать влияние неоднородности на режим развития НСМ.

Из результатов расчета следует, что динамические свойства монослоя с невязимными эффектами существенно отличаются от “классического” случая. Отличие обусловлено, прежде всего, аномальным увеличением кинетической энергии пылевых частиц в центральной области структуры, которое начинается уже вдали от точки плавления системы [89, 106]. Величина и степень пространственной неоднородности кинетической энергии частиц сильно зависят от величины коэффициента вязкого трения γ . Если величина коэффициента трения низкая, внеплоскостная и внутриплоскостная компоненты кинетической энергии частиц существенно превосходят температуру термостата 300 К. Отличие может достигать трех-четырех порядков величины. Более того, радиальный профиль кинетической энергии в этом случае является принципиально неоднородным: кинетическая энергия выше в центральной области системы и монотонно убывает к периферии. Это означает, что не только плотность частиц и параметр неидеальности являются неоднородными характеристиками, но и степень “аномального разогрева” пылевых частиц.

Для иллюстрации эффекта, на Рис. 5.2 показаны радиальные профили и внеплоскостной, и внутриплоскостной компоненты кинетической энергии частиц при различной величине коэффициента вязкого трения γ . Можно видеть, что при высоких значениях коэффициента трения неоднородность кинетической энергии частиц выражена слабо, а сама величина кинетической энергии близка к температуре термостата 300 К. С уменьшением коэффициента трения, энергия движения монотонно увеличивается. В центральной части системы она

увеличивается быстрее. Еще до полного плавления монослоя, отношение средней кинетической энергии в центре системы и на ее периферии может достигать нескольких сотен.

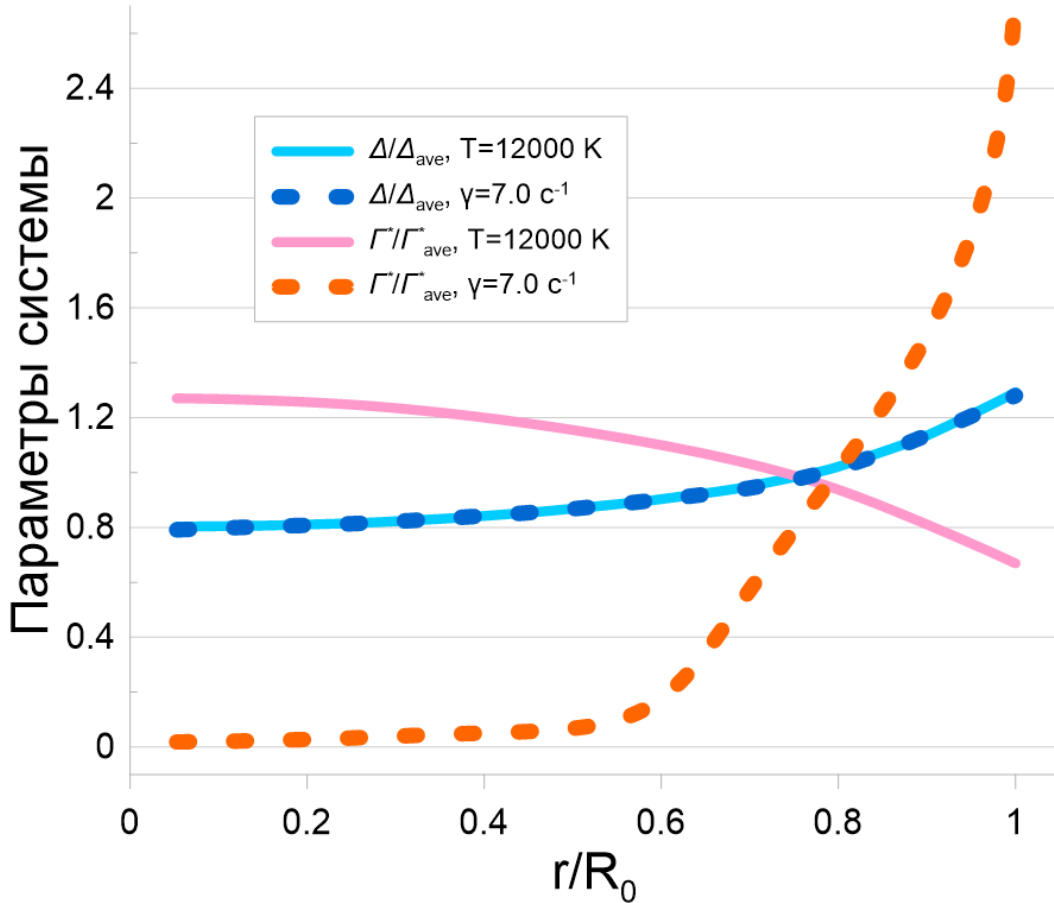


Рис. 5.3. Неоднородность классического монослоя и монослоя с учетом невзаимных эффектов. Построены радиальные профили межчастичного расстояния Δ и параметра неидеальности Γ^* . Величина коэффициента трения в расчетах монослоя с невзаимными эффектами 7.0 c^{-1} . Параметры представлены в виде отношения к своим усредненным величинам по всей системе Δ_{ave} , Γ^*_{ave} .

Неоднородное пространственное распределение внутриплоскостной компоненты энергии движения частиц оказывает существенное влияние на степень неидеальности монослоя с невзаимными эффектами. На Рис. 5.3 показано сравнение радиальных профилей межчастичного расстояния Δ и параметра неидеальности Γ^* в классической системе и в системе с включением модели точечного ионного фокуса. При расчете Γ^* для монослоя с невзаимными эффектами, в формулу 3.6 вместо величины T подставляется T_h . Можно видеть, что “разо-

грев” движения частиц приводит к изменению радиального профиля параметра неидеальности. Так как внутриплоскостная компонента кинетической энергии имеет наибольшее значение в центральной области системы, параметр неидеальности в ней уменьшается наиболее заметно. При низких значениях коэффициента трения, параметр неидеальности увеличивается к периферии системы вместо роста, наблюдаемого для классической системы (раздел 4.2.2).

В данном разделе показано, что в юкавовском монослое характер парных взаимодействий определяет и характер пространственной неоднородности динамических характеристик. В монослое с невзаимными эффектами радиальные профили внутриплоскостной и внеплоскостной компоненты кинетической энергии частиц становятся неоднородными при низких значениях коэффициента трения в системе. Это приводит к трансформации радиального профиля параметра неидеальности. Полученные результаты указывают на то, что независимо от модели взаимодействия монослой из заряженных частиц в конфайнменте должен рассматриваться как принципиально неоднородная система, в том числе с точки зрения динамических характеристик. Влияние неоднородности на сценарий плавления монослоя обсуждается далее.

5.2. Сосуществование фаз и сценарий плавления в юкавовском монослое

Термины “юкавовский кристалл”, “плазменно-пылевой кристалл”, “ионный кристалл” часто используются для обозначения комплексных систем заряженных частиц в параболическом конфайнменте [14]. В первом приближении, под кристаллическими системами подразумеваются системы протяженные, “бесконечные”, в то время как юкавовские кристаллы, доступные для наблюдения в эксперименте, принципиально конечны. Конечноразмерные эффекты могут оказывать существенное влияние на кинетику фазовых переходов. Например, плавление наночастиц происходит неоднородно: сначала плавление затрагивает

поверхность, затем продвигается вглубь системы [120, 121].

Конечные системы юкавовских частиц имеют ряд особенностей. Взаимодействие частиц в нанокластерах чаще всего может быть описано в рамках парных потенциалов, содержащих члены, ответственные за притяжение и отталкивание [122]. В конечной юкавовской системе отталкивание частиц компенсируется не межчастичным, а центральным потенциалом, радиальным конфайнментом. Влияние конфайнмента приводит к принципиальной неоднородности структурных и динамических свойств таких систем, описанной выше (глава 4). Если выделенная частица расположена далеко от центра структуры, для уравнивания силы, действующей со стороны ловушки, необходим градиент локального межчастичного расстояния, что показано на примере одномерной цепочки в разделе 4.1.1.

Неоднородность плотности приводит к сильно неоднородному пространственному распределению степени неидеальности системы. Этот эффект продемонстрирован для юкавовского монослоя в разделе 5.1. Плавление классического юкавовского монослоя обсуждается в нескольких теоретических работах [2, 6]. Плавление начинается на периферии системы, затем фронт плавления продвигается вглубь структуры с повышением температуры, пока структура не плавится полностью. Возможность сосуществования фаз при промежуточных значениях температуры и влияние невзаимных эффектов на сценарий плавления монослоя представляют большой интерес.

Чтобы количественно определять фазовое состояние подсистем монослоя, в данном разделе используется несколько методов. Основной метод опирается на параметр флуктуации межчастичного расстояния (IDF) [9, 10]. Этот параметр аналогичен классическому параметру Линдемманна, который широко используется для различных систем, но не обладает сходимостью в конечных двумерных структурах. IDF успешно применяется в теоретических и экспериментальных исследованиях плазменно-пылевых систем и подобных конечных структур [76, 57, 77, 78, 79]. В случае малых систем с менее чем 100 частицами

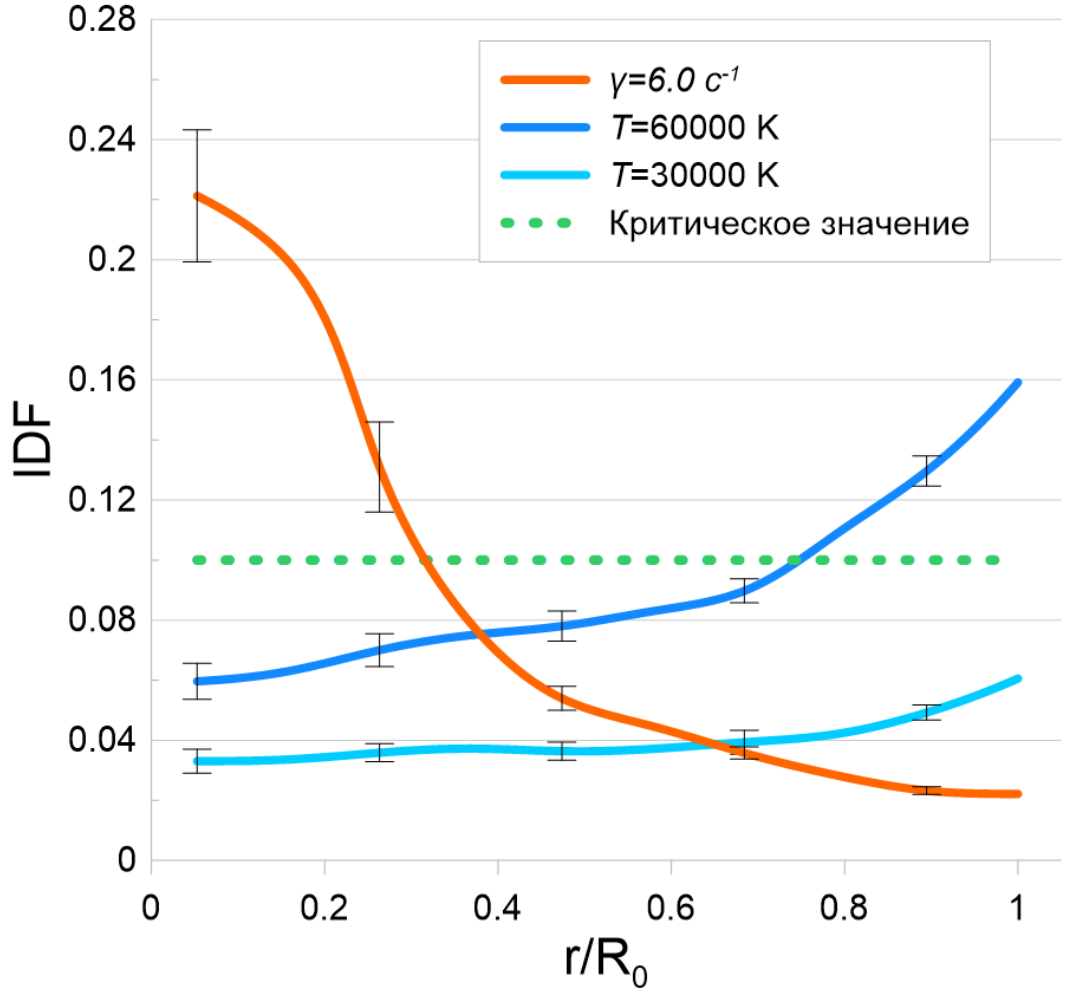


Рис. 5.4. Радиальные профили параметра флуктуации межчастичного расстояния IDF при различных степенях “аномального разогрева” монослоя. Классическая система без разогрева показана при двух значениях температур: 30000 К и 60000 К. Разогретая система с ионным фокусом показана при значении коэффициента трения $\gamma = 6.0 \text{ с}^{-1}$. Ошибка расчета IDF выше для центральной подсистемы ($\sim 10\%$) в связи с меньшим числом частиц, чем на периферии ($\sim 5\%$).

вместо самого IDF используется его модифицированная форма, $VIDF$ [78, 79]. Величина $VIDF$ имеет различимый пик при плавлении системы. В данной работе рассматривается система из 1000 частиц. По этой причине, используется стандартный IDF , рассчитываемый в соответствии с формулой:

$$IDF = \frac{2}{N_c(N_c - 1)} \sum_{1 \leq i < j}^N \sqrt{\frac{\langle \Delta_{ij}^2 \rangle}{\langle \Delta_{ij} \rangle^2} - 1}, \quad (5.4)$$

где Δ_{ij} — расстояние между частицами i и j ; N_c — число частиц, включенных в расчет параметра. Сходимость параметра IDF проверяется в расчетах

длительностью не менее 10^6 шагов.

Отметим, что IDF рассчитывается как локальная характеристика. Вместо расчета IDF с включением всех частиц структуры, система разделяется на элементарные ячейки. Каждая ячейка состоит из центральной частицы и ее N_c ближайших соседей. Число соседей равняется 6 в случае правильной ячейки и 5 или 7 при наличии дефекта. Величина IDF рассчитывается отдельно для каждой ячейки. Таким образом, величина этого параметра позволяет определять условия, при которых ячейка теряет упорядоченность. Когда IDF достигает критического значения (≈ 0.1), ячейка начинает обмениваться частицами с соседними ячейками. Можно ожидать, что ячейки, находящиеся на одинаковом радиальном расстоянии от центра системы, формируют подсистемы с определенной локальной температурой плавления. По этой причине, значения IDF усредняются по ячейкам, находящимся на оболочках структуры. Такой подход к определению точки плавления является локальным и хорошо сочетается с использованием IDF , который сформулирован для конечных систем [9, 10].

Для проверки применимости предложенного подхода используются другие критерии плавления. В частности, проверяется величина коэффициента диффузии и расходимость среднеквадратичных смещений частиц в выделенной подсистеме. Эти параметры могут служить индикатором фазового состояния периферийной подсистемы. Диффузия в монослое при его переходе в неупорядоченное состояние подробно исследована Тоцуджи [2]. Также рассматривается и поведение корреляционных функций, описанных в разделе 1.7. Дополнительное сравнение показывает, что величина 0.1 действительно может использоваться в качестве критического значения IDF для подсистем монослоя. Преимущество использования IDF аналогично преимуществам параметра Линдемманна в бесконечных системах. Это достаточно простой метод, который опирается на одно численное значение для определения фазового состояния.

Поведение флуктуации межчастичного расстояния в обоих типах монослойных структур показано на Рис. 5.4. В “классическом” монослое величина

IDF монотонно увеличивается от центра к периферии системы. Такое же поведение демонстрирует параметр и в монослое с невзаимными эффектами при высоких значениях коэффициента трения, когда температурный профиль в системе является однородным. Рост IDF к периферии соответствует уменьшению степени упорядоченности подсистем с увеличением радиального расстояния. С повышением температуры системы, IDF увеличивается одновременно во всех подсистемах и достигает критического значения в первую очередь на краю структуры. Затем, при промежуточных значениях температуры, наблюдается режим сосуществования плотного упорядоченного ядра структуры и неупорядоченной разреженной периферии. Граница раздела “фаз” находится в той подсистеме, для которой IDF равен 0.1.

В монослое с невзаимными эффектами режим сосуществования фаз проявляется иначе. В то время как его структурные свойства соответствуют классическому монослою, неоднородный радиальный профиль внутриплоскостной кинетической энергии частиц изменяет и профиль IDF . При низких значениях коэффициента трения, IDF выше в центральной области. Это обусловлено запуском НСМ без плавления монослоя и энерговыделением в плотной центральной области. Эти эффекты и определяют сценарий плавления монослоя с невзаимными силами, действующими между частицами. На начальной стадии плавления, в центральной области начинается резкое увеличение кинетической энергии — развивается НСМ. При дальнейшем уменьшении коэффициента трения НСМ приводит к плавлению ядра. После того как ядро расплавилось, периферия системы может сохранять упорядоченность в широком диапазоне значений коэффициента трения. Тепла, поступающего в нее из расплавленного ядра за счет механизмов теплопереноса, недостаточно для ее плавления. В монослое проявляется режим стационарного сосуществования фаз, обусловленный совместным действием эффектов неоднородности и невзаимности сил в системе. При дальнейшем уменьшении коэффициента трения, скорость диссипации энергии уменьшается, а фазовая граница двигается в периферийные

области, где нет условий для запуска НСМ.

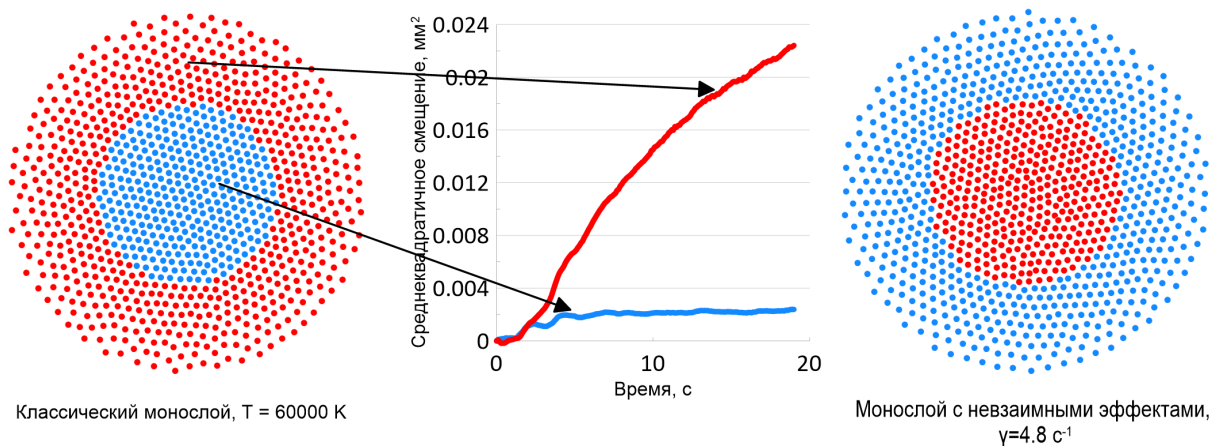


Рис. 5.5. Сценария сосуществования фаз в “классическом” монослое и в монослое с невязимными эффектами. Голубым цветом обозначена упорядоченная подсистема, красным — расплавленная. На графике показана временная зависимость среднеквадратичного смещения частиц от начальных положений в областях классического монослоя при температуре 60000 K . Голубой цвет на графике соответствует центральной области, красный — периферийной в “классической” системе. В “классическом” монослое наблюдается сосуществование упорядоченного ядра с расплавленными оболочками, в монослое с невязимными эффектами — расплавленного ядра с упорядоченными оболочками.

Оба сценария сосуществования фаз в монослое проиллюстрированы на Рис. 5.5. В “классической” системе с однородным температурным профилем ядро остается упорядоченным при промежуточных значениях температуры, когда периферия уже расплавлена. Радиус упорядоченной области уменьшается с ростом температуры. Граница между упорядоченной и неупорядоченной областями ярко выражена. На периферии движение частиц происходит в режиме, аналогичном диффузии в жидкости. В ядре частицы колеблются относительно равновесных положений. С повышением температуры само ядро начинает заметно колебаться относительно центра масс системы из-за флуктуаций в расплавленной области. Это приводит к увеличению амплитуд колебаний частиц в центре структуры. Величина IDF не затрагивается этим эффектом: она рассчитывается из относительных положений частиц. Даже если исходная ячейка двигается как целое в центральной области, но сохраняет свою структуру, IDF

идентифицирует ее как часть упорядоченной области.

На Рис. 5.5 показано, что в системе с невзаимными эффектами при низкой величине коэффициента трения плотное ядро существенно разогревается за счет НСМ и плавится первым. Наблюдаемое сосуществование плотного расплавленного ядра и упорядоченных периферийных областей также стационарно.

Отдельно рассматривается вопрос о том, плавятся ли соответствующие подсистемы “классического” монослоя и монослоя с невзаимными эффектами при одинаковых значениях температуры. Для наглядности сравниваются критические значения параметра неидеальности для каждой подсистемы монослоя со значением для “бесконечных” юкавовских систем такой же плотности. Критическое значение параметра неидеальности для “бесконечных” юкавовских систем Γ^* , которое соответствует их точке плавления, лежит в диапазоне $70 \pm 10 \div 100 \pm 4$ независимо от плотности [113]. Такой разброс численных значений обусловлен используемыми разными авторами методами для определения точки плавления: анализом парных корреляционных функций, глобального параметра порядка, коэффициента диффузии, параметра Линдемманна [123, 124]. Значение Γ_{critical} в данном разделе принимается равным 100. Ошибка при определении расчетных температур плавления подсистем в данной работе с использованием параметра IDF не превышает 20%.

Зависимости критического параметра неидеальности от межчастичного расстояния для “классического” монослоя, монослоя с невзаимными эффектами и “бесконечной” юкавовской системы показаны на Рис. 5.6. В “бесконечной” юкавовской системе плавление происходит при $\Gamma_{\text{critical}} \approx 100$ при всех значениях плотности. Если бы подсистемы монослоя соответствовали “бесконечной” системе, радиальный профиль критического параметра неидеальности был бы горизонтальной линией: все подсистемы плавилась бы при $\Gamma_{\text{critical}} = 100$. Вместо этого, наблюдается сильная неоднородность критического параметра неидеальности. В классическом монослое разность значений критического параметра неидеальности в центре системы и на периферии не превышает 20%. И в центре,

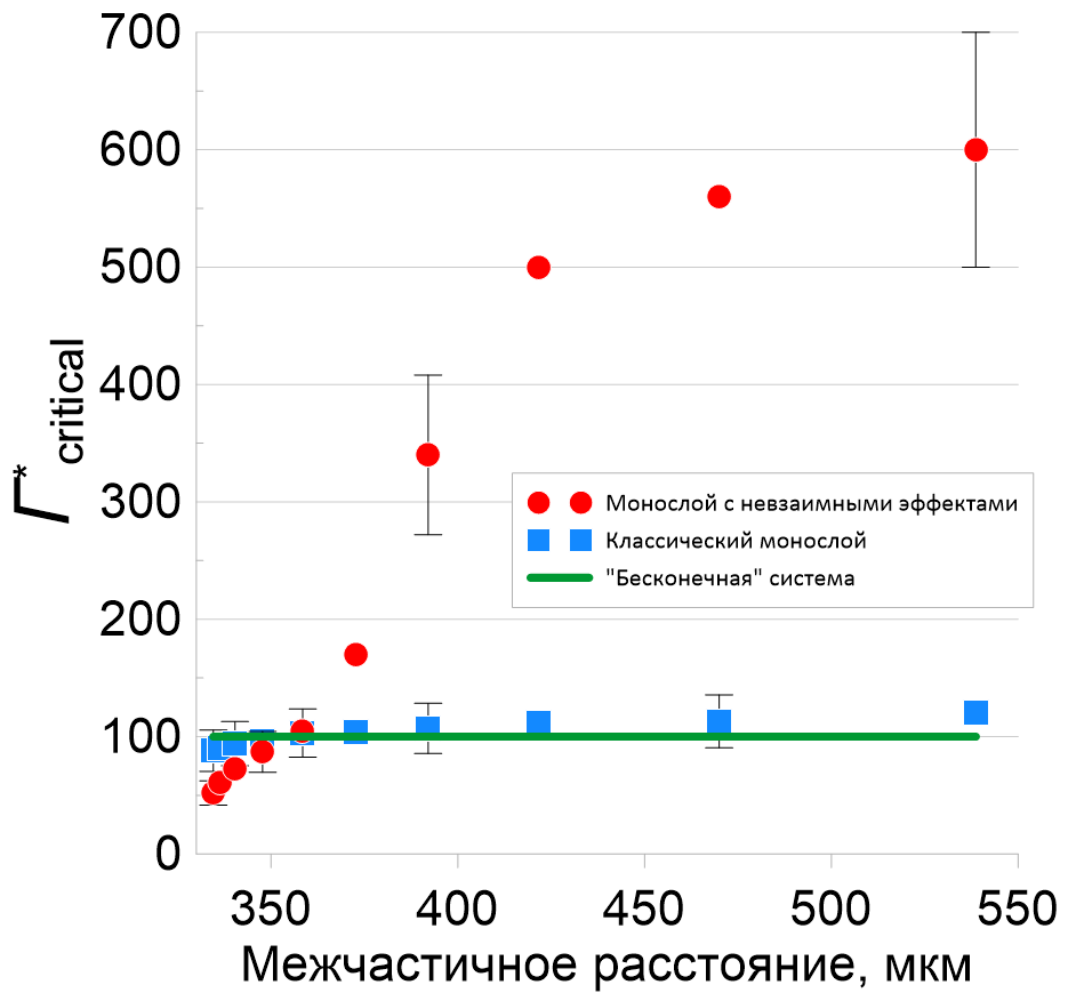


Рис. 5.6. Зависимость критического значения параметра неидеальности от межчастичного расстояния в “классическом” монослое, монослое с невязимными эффектами и “бесконечной” юкавовской системе. В монослойных структурах, критический параметр неидеальности соответствует точке плавления *подсистемы*. Различные значения межчастичных расстояний соответствуют различным подсистемам одного монослоя. Например, правая синяя точка обозначает величину критического параметра неидеальности на периферии классического монослоя, левая — в его центре, средние точки — на его средних оболочках. Ошибка определения величины критического значения параметра неидеальности не превышает 20%.

и на периферии значение температуры плавления близко к соответствующей по плотности “бесконечной” системе. Ситуация отличается в монослое с невязимными эффектами: в то время как центральная область плавится при более высокой температуре, чем в “бесконечной” системе, на периферии плавление происходит при более низкой температуре. Можно предположить, что снижение температуры плавления периферийной подсистемы обусловлено дестабилизирующим

воздействием расплавленного ядра на внешние оболочки системы.

Важно отметить, что сценарии плавления “классического” монослоя и монослоя с невзаимными эффектами не симметричны. Их подсистемы плавятся при различных значениях температуры из-за конечноразмерных и невзаимных эффектов. В разделе показано, что плавление монослоя с невзаимными эффектами начинается в центральной области из-за запуска НСМ при определенном значении коэффициента вязкого трения. Затем, с уменьшением коэффициента трения, граница раздела фаз движется в периферийные области, где условия для запуска НСМ не выполняются. Плавление “классического” монослоя протекает по другому сценарию: плавление является равновесным процессом, начинается на периферии системы, а затем с повышением температуры продвигается в центральную область. Продемонстрировано, что сосуществование фаз в монослое с невзаимными эффектами проявляется совершенно не так, как в “классической” системе. Плотное ядро претерпевает вызванное НСМ плавление и сосуществует с разреженными упорядоченными внешними оболочками.

5.3. Сценарий развития неустойчивости связанных мод в пространственно неоднородном монослое

Рассматривается влияние структурной неоднородности на процесс развития НСМ, которая в первом приближении и является причиной отличий в динамических характеристиках “классического” монослоя и монослоя с невзаимными эффектами. В отличие от предыдущего раздела, вместо использования приближения точечного ионного фокуса распределение электростатического потенциала вокруг пылевой частицы рассчитывается из прямого моделирования кинетики ионов методом частиц в ячейках [112].

Такой подход к расчету электростатического потенциала является самосогласованным и позволяет исключить из математической модели дополнительные параметры, описывающие ионный фокус. Вместо этого становится возмож-

ным вычислить потенциал взаимодействия через параметры, получаемые в лабораторном эксперименте. Как и в подходе с точечным положительным зарядом, распределение электростатического потенциала вокруг пылевых частиц в данной работе полагается неизменным на протяжении расчета и вычисляется на нулевом шаге интегрирования уравнений движения. При расчете сил, действующих на каждую пылевую частицу, делаются следующие предположения:

1. Электрический потенциал в области монослоя без учета электростатической ловушки может быть представлен как линейная суперпозиция потенциалов уединенных пылевых частиц.
2. Время релаксации распределения ионов и электростатического потенциала при изменении конфигурации пылевой системы намного меньше минимального характерного времени динамики пылевых частиц.
3. Соседние частицы слабо изменяют траектории ионов вблизи положений друг друга.

На основании этих предположений сила межчастичного взаимодействия в данной работе вычисляется через градиент электростатического потенциала. При этом сила взаимодействия частиц с возмущенным ими потоком ионов — сила ионного увлечения [125] — считается независимой от времени и положения частиц и не учитывается при расчете их динамики. Аналогичный подход к расчету межчастичного взаимодействия используется в работах [112, 97].

Выбор параметров плазменно-пылевой системы сделан в соответствии с характерными условиями лабораторных экспериментов, в которых исследуется монослой [35, 27, 64, 89, 7]. Предполагается, что плазма создается в аргоне при давлении $P = 136$ мТорр и температуре $T_{Ar} = 300$ К. Температура ионов в первом приближении считается совпадающей с температурой нейтральной компоненты $T_i = T_{Ar}$. Температура электронов в плазме принимается равной $T_e = 2.58$ эВ ($T_e/T_i = 100$), концентрация заряженной компоненты —

$n_{i(e)} = 2 \times 10^9 \text{ см}^{-3}$. Такой температуре и концентрации электронов соответствует величина электронного дебаевского радиуса $r_{D_e} = 260 \text{ мкм}$ и константы экранировки $\kappa = 38 \text{ см}^{-1}$. В первом приближении именно электронный дебаевский радиус определяет экранировку потенциала пылевых частиц при наличии потока ионов со скоростью больше Бомовской в области существования монослоя. Заряд пылевой частицы оценивается в первом приближении как $Q = 23000$ элементарных зарядов для частицы радиусом $a = 4.41 \text{ мкм}$ и массой $m = 5.43 \times 10^{-10} \text{ г}$.

Расчет распределения электростатического потенциала вокруг пылевой частицы выполнен Д. А. Колотинским. Процедура расчета описана в работе [119]. Перейдем к рассмотрению динамических свойств монослойной пылевой структуры, в которой взаимодействие частиц описывается с использованием рассчитанного распределения электростатического потенциала.

Структура содержит $N = 10^3$ частиц. Их радиус, масса и заряд совпадают со значениями, используемыми при расчете электростатического потенциала. Удержание одноименно заряженных пылевых частиц от разлета в горизонтальном направлении происходит за счет дополнительного центрального потенциала, имеющего параболический профиль: $U_{\text{trap}} = \alpha_x(x_i^2 + y_i^2)/2$. В вертикальном направлении конфайнмент описывается аналогичным соотношением: $U_{\text{vert}} = \alpha_z z_i^2/2$. Этот подход соответствует описанному в разделе 3.1. Значение $\alpha_x = 1.3 \times 10^{-2}$ ед. СГСЭ выбрано таким образом, чтобы обеспечить соответствующее лабораторным экспериментам [27, 64, 89] межчастичное расстояние в системе: $\Delta = 260 \text{ мкм}$ в центральной области и на 85% большее — на периферии. При этом параметр экранировки $\kappa\Delta$ изменяется от 1.00 в центре до 1.85 в краевой области монослоя. В свою очередь, выбор значения $\alpha_z = 800\alpha$ обеспечивает возможность развития в системе НСМ и наблюдения аномального разогрева движения пылевых частиц [89, 106]. При таком значении α_z частота колебаний частиц в вертикальном направлении $\omega_v = \sqrt{\beta\alpha_z/m}$ не превышает величины $3.5\sqrt{Q^2/m\Delta^3}$ в центре монослоя. В связи с этим выполняется необхо-

димое условие для пересечения продольной горизонтальной и поперечной вертикальной мод колебаний частиц и появления при определенных условиях НСМ.

Для ясности напомним, что вызываемое НСМ плавление двумерного плазменно-пылевого кристалла не является объектом исследования в данной работе. Динамические свойства монослоя рассматриваются для упорядоченного состояния системы, в котором, тем не менее, связанные с НСМ особенности могут присутствовать. По этой причине выбрано высокое значение давления нейтрального газа — 136 мТорр, или около 18 Па. Соответствующее такому давлению значение коэффициента трения нейтрального газа можно оценить из формулы 3.2. Используемое в разделе значение $\gamma = 7.5 \text{ с}^{-1}$.

С учетом всего вышесказанного, уравнение движения, которое численно решается для каждой пылевой частицы, выглядит аналогично уравнению 5.2. Ланжевеновский термостат учитывается при температуре 300 К. Шаг интегрирования уравнений движения выбран равным 10^{-5} с и составляет 10^{-3} от характерной обратной частоты колебаний частиц в системе $\sqrt{m\Delta^3/Q}$. Длина траекторий, по которым усредняются необходимые параметры, не менее 20 с.

Рассматриваемый монослой имеют типичную структуру: в центре частицы организованы в треугольную решетку, на периферии — в концентрические оболочки. Радиус монослоя составляет 5.5 мм. Ввиду его сильной пространственной неоднородности, для расчета его свойств используется локальное приближение. Более подробно процедура применения локального приближения описана в разделе 3.4.

Одной из важных обнаруженных особенностей рассматриваемого плазменно-пылевого монослоя является пространственно неоднородный характер аномального разогрева движения пылевых частиц. Он продемонстрирован на Рис. 5.7. На периферии системы в плоскости монослоя частицы совершают движение со средней кинетической энергией, соответствующей комнатной температуре. Она определяется взаимодействием с термостатом. Одновременно с этим в центральной области системы энергия внутриплоскостного движения частиц больше на

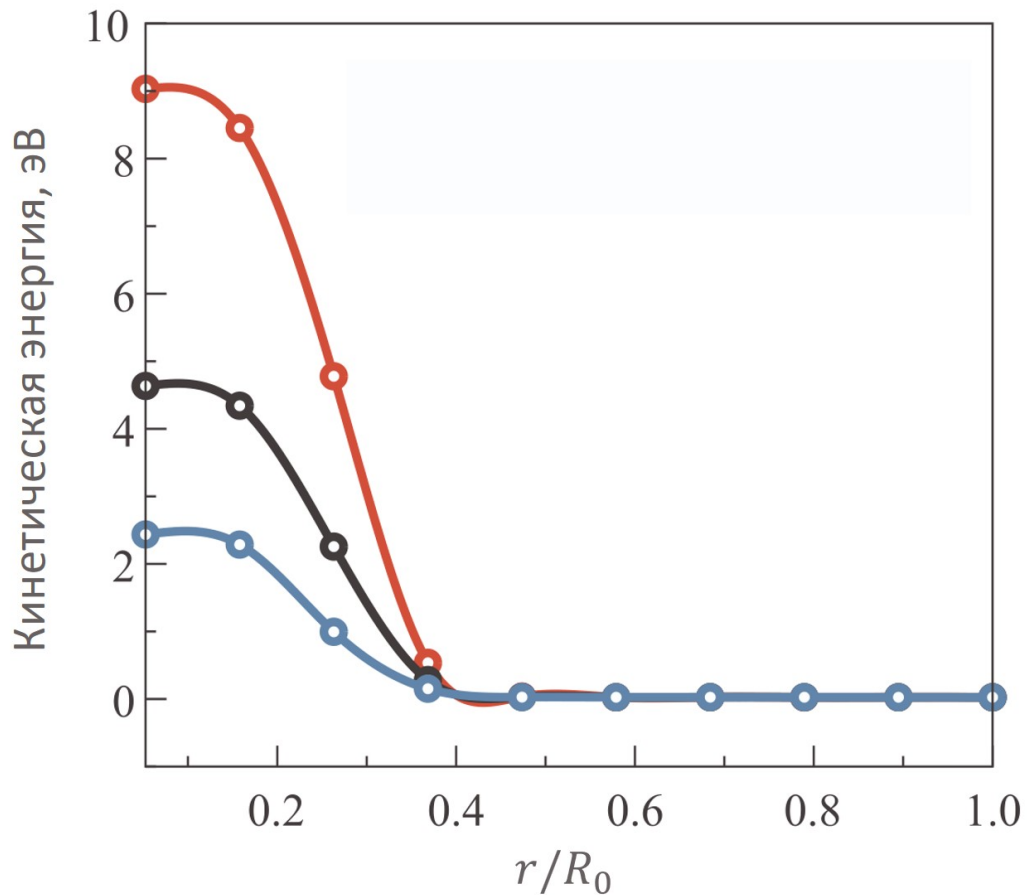


Рис. 5.7. Радиальные профили средней кинетической энергии частиц в монослое с невзаимным характером взаимодействия между частицами. Красная кривая соответствует энергии движения частиц в вертикальной плоскости, голубая — в горизонтальной плоскости, черная кривая соответствует полной кинетической энергии частиц. Значение кинетической энергии каждой частицы усредняется отдельно.

порядок, чем на периферии, а внеплоскостного — на два порядка. При этом упорядоченность монослоя не нарушается, обмена частицами между ячейками не наблюдается. Такой режим существования монослоя описан впервые: разогретая за счет влияния невзаимных эффектов центральная область системы стационарно сосуществует с находящейся в тепловом контакте с термостатом периферийной. При уменьшении коэффициента трения в системе возникает фронт плавления, обусловленный НСМ. Напомним, в рассматриваемых в данной работе условиях плавление не происходит.

Сильно неоднородный профиль средней кинетической энергии частиц приводит к пространственной неоднородности других параметров. Среди них —

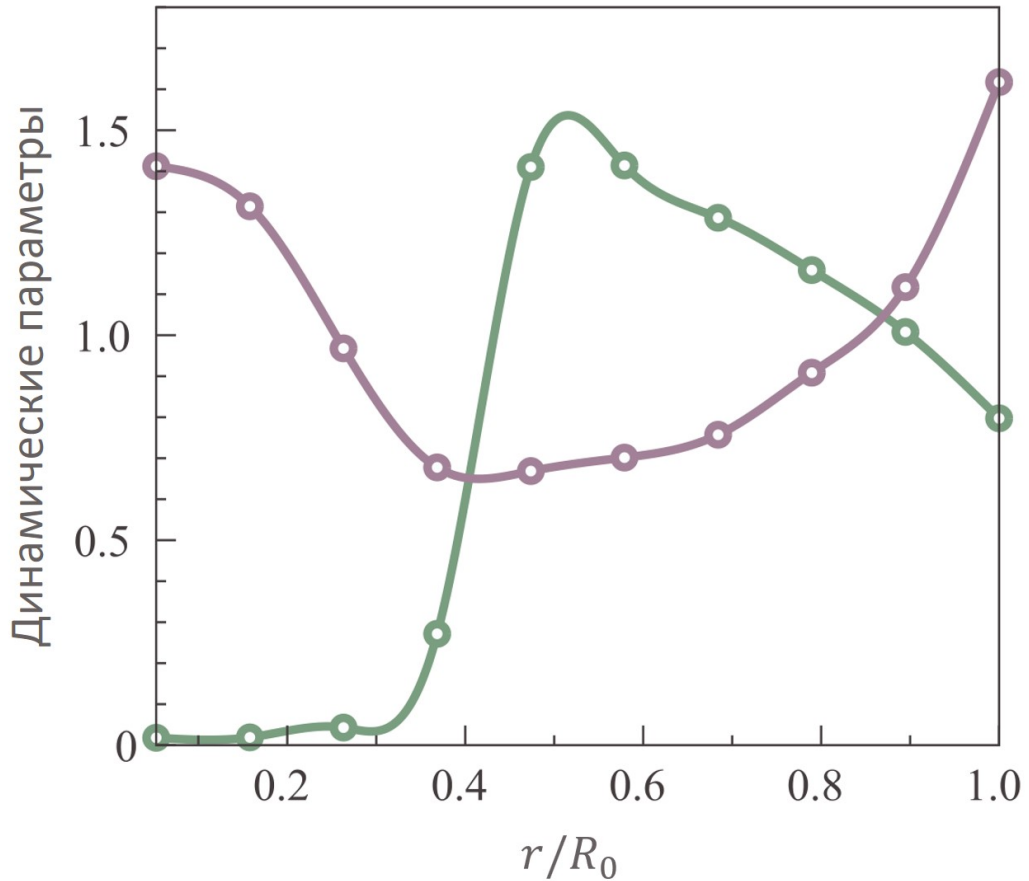


Рис. 5.8. Радиальные профили параметра неидеальности — зеленая кривая — и амплитуды тепловых колебаний частиц — фиолетовая кривая — в плазменно-пылевом монослое с взаимным характером взаимодействия частиц. Оба параметра приведены в виде отношения к значению, усредненному по всей структуре.

среднеквадратичное отклонение частиц от положения равновесия, т.е. амплитуда тепловых колебаний, и параметр неидеальности, который рассчитывается в локальном приближении по формуле 3.6. Поведение этих характеристик показано на Рис. 5.8. Параметр неидеальности в центре монослоя имеет значение, практически на три порядка меньшее, чем на периферии: кинетическая энергия частиц велика. С увеличением радиального расстояния кинетическая энергия падает, что приводит к росту параметра неидеальности. На периферии системы его рост сменяется падением: при практически одинаковой средней кинетической энергии увеличивается расстояние между частицами. Амплитуда тепловых колебаний частиц в первом приближении связана с параметром неидеальности обратным образом, по этой причине ее радиальный профиль ведет себя проти-

ВОПОЛОЖНО.

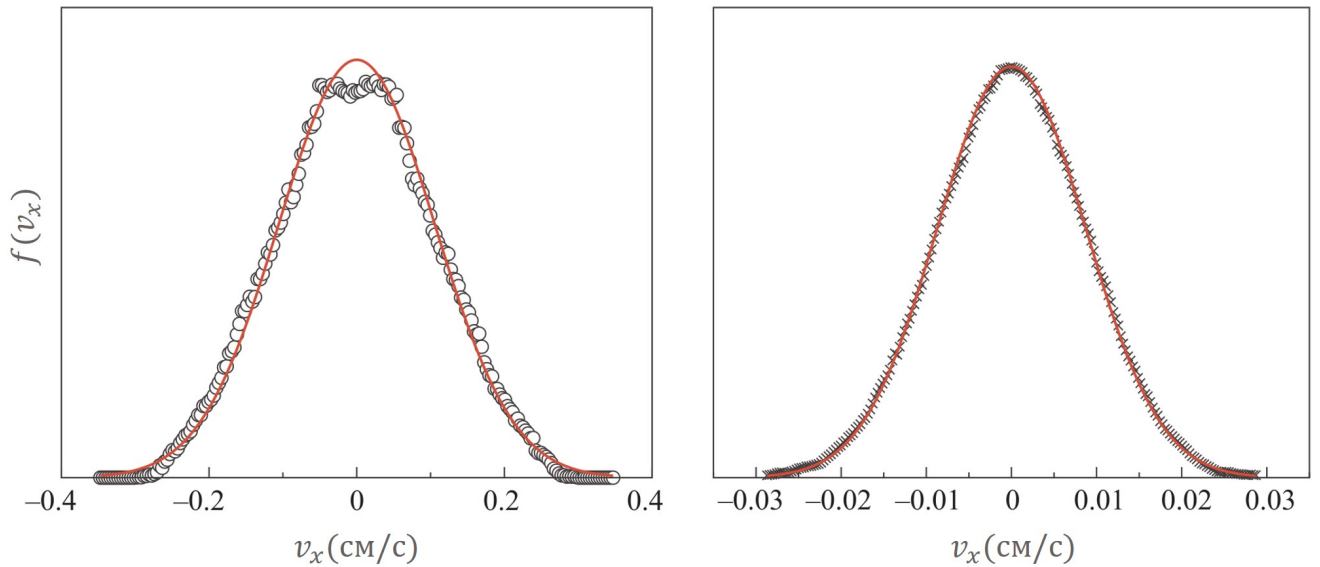


Рис. 5.9. Распределение частиц по скоростям в плоскости монослоя в двух областях системы. Слева показано распределение по скоростям для центральной области, справа — для периферии структуры. Полыми кругами обозначены точки, полученные по результатам моделирования для центральной области, черными крестами обозначены точки для периферии структуры. Красные кривые показывают аппроксимацию полученных точек распределением Максвелла с параметром, равным средней кинетической энергии частиц в подсистеме.

Важным является вопрос не только о величине средней кинетической энергии частиц, но и о распределении частиц по скоростям в центральной и периферийной областях системы ввиду существенного различия их свойств. Распределение частиц по скоростям в различных областях системы показано на Рис. 5.9. Распределение скоростей частиц в плоскости монослоя на его внешних оболочках соответствует максвелловскому при температуре 300 К. Величина мгновенной энергии движения частиц флуктуирует около среднего значения, равного температуре термостата. В то же время, в центральной области системы распределение заметным образом отличается от максвелловского как при малых скоростях, так и в “хвосте”. Из этого следует вывод, что измеренная величина средней кинетической энергии в центре монослоя в первом приближении не соответствует параметру температуры в распределении Максвелла, что

указывает на протекание неравновесного процесса, вызванного невзаимными эффектами.

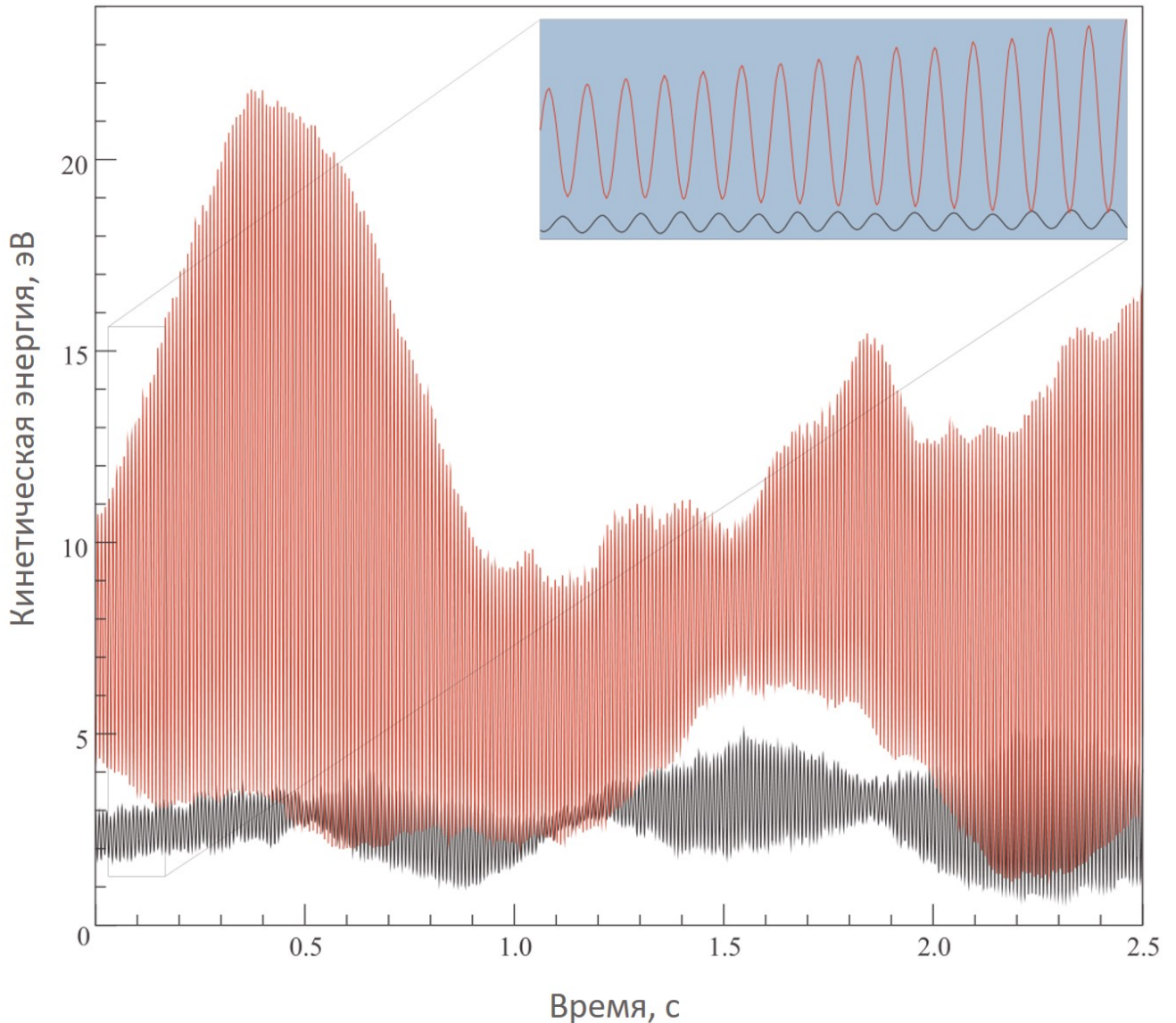


Рис. 5.10. Временная зависимость кинетической энергии частиц, находящихся в центральной области монослоя. Нулевой момент времени на графике соответствует 30 расчетным секундам с момента начала уравнивания системы. Красным цветом обозначена энергия внеплоскостного движения, черным цветом — внутриплоскостного. В голубую рамку помещена кривая для более короткого временного интервала для наглядной демонстрации колебательного характера зависимости.

Особенности протекающего неравновесного процесса проиллюстрированы на временной зависимости кинетической энергии частиц в центре системы на Рис. 5.10. В отличие от термодинамических флуктуаций величины энергии, ко-

торых следовало бы ожидать в равновесном случае, энергия движения пылинок как в плоскости монослоя, так и в перпендикулярном ей направлении изменяется периодически с частотой $2f_{\text{center}} = 110$ Гц. При этом частицы совершают колебания с временной частотой $f_{\text{center}} = 55$ Гц. Амплитуда колебаний и усредненная за период колебаний величина кинетической энергии частиц не выходят на стационарное значение в ходе расчета. Однако расходимость этих параметров не наблюдается, они изменяются в ограниченном диапазоне значений. Например, значение энергии внутриплоскостного движения частиц на протяжении всего расчета изменяется немонотонно и остается в диапазоне 1 – 5 эВ. Столь необычный процесс, стационарно поддерживаемый в центральной области за счет интенсивного взаимодействия частиц с ионным следом, имеет объяснение: совпадение частот вертикальных и горизонтальных колебаний частиц указывает на возникновение *гибридной моды* [11, 85, 86, 87].

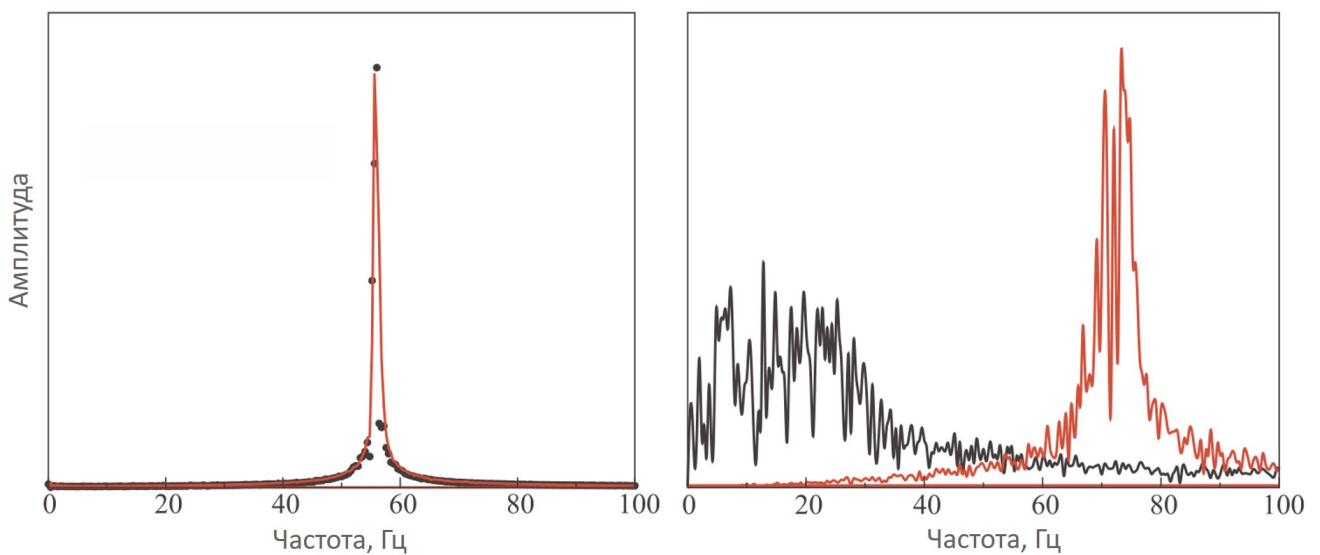


Рис. 5.11. Амплитудно-частотные характеристики горизонтальных и вертикальных колебаний пылевых частиц, полученные как Фурье-преобразование автокорреляционной функции скорости для соответствующих направлений. Черные кривые соответствуют спектрам горизонтальных колебаний частиц, красные кривые — спектрам вертикальных колебаний. Слева представлены спектры для центральной области, где явно различим один пик, соответствующий гибридной моде. Справа представлены спектры для частиц на периферии системы.

Напомним, гибридная мода часто является индикатором развития НСМ.

Она возникает в некоторой близости от пересечения продольной горизонтальной и поперечной вертикальной дисперсионных ветвей колебаний решетки плазменно-пылевого монослоя. Пересечение ветвей приводит к появлению резонансной связи между ними и запуску экспоненциального роста кинетической энергии в центральной области системы, где плотность частиц наибольшая. Это происходит по той причине, что, в отличие от остальных колебательных мод в структуре, гибридная мода имеет инкремент затухания, превышающий скорость диссипации за счет трения. Этот эффект многократно подтвержден экспериментально [80]. Особенностью нашей работы является рассмотрение режима существования монослоя, в котором появление гибридной моды не запускает НСМ, а влияет на свойства монослоя еще в упорядоченном состоянии, вдали от плавления. Отсутствие плавления в системе проверяется посредством анализа парной корреляционной функции как для всей системы, так и отдельно для ее центральной области.

Сделанный вывод о возникновении в центральной области системы гибридной моды подтверждается на основании численных оценок и анализа спектров автокорреляционных функций скорости для различных областей системы. Спектры показаны на Рис. 5.11. На периферии спектр колебаний частиц совпадает с характерным для классического юкавовского монослоя. В то же время, для центра системы в спектре колебаний преобладает одна гармоника, соответствующая гибридной моде, причем как для колебаний в плоскости монослоя, так и для колебаний в перпендикулярном направлении. Частота этой гармоники $2\pi f_{\text{center}}$ в 3 раза больше частоты продольной моды $\sqrt{Q^2/m\Delta^3}$ и составляет 0.75 от частоты вертикального конфайнмента $\sqrt{\alpha_z Q/m}$, что соответствует характерным значениям для гибридной моды. При этом колебания частиц в соседних рядах совершаются в противофазе, что объясняется близостью волнового числа гибридного режима к $k_{\text{hyb}}\Delta = \pi$ [87].

Описанный эффект, при котором упорядоченная центральная область, находящаяся в гибридном режиме, сосуществует с периферийной, находящейся

в тепловом равновесии со средой, обнаружен нами и в модельном подходе к описанию ионного следа, т. н. модели точечного ионного фокуса (*point-wake model*) [90, 29, 91]. В этом случае взаимодействие между пылевыми частицами описывается юкавовским потенциалом, а ионный фокус моделируется дополнительным точечным положительным зарядом, находящимся на фиксированном расстоянии строго под каждой отдельной частицей. При типичных значениях заряда точечного ионного фокуса $q/Q = 0.2$ и расстояния между фокусом и частицей в вертикальном направлении $\delta_q/\Delta = 0.28$ аналогичный режим обнаружен при неизменных остальных параметрах системы. Зависимости, представленные на рисунках 5.7, 5.8, 5.9, 5.10, 5.11, имеют аналогичный вид.

Отметим, что обсуждаемые динамические свойства монослоя значительно различаются для случаев сильной и слабой невзаимности во взаимодействии частиц. Ситуация со слабой невзаимностью может быть реализована при достаточно малой плотности пылевых частиц, высоком давлении разрядного газа или высокой мощности разряда. Свойства такого “классического” монослоя рассмотрены в нескольких теоретических работах [2, 6, 108] и дополнительно исследованы в данном разделе. При этом определяющей особенностью системы оказывается ее структурная неоднородность, вызванная действием удерживающего центрального конфайнмента. Она приводит к уменьшению плотности частиц с удалением от центра структуры, что, в свою очередь, влияет и на степень упорядоченности подсистем. В отличие от рассмотренной системы с невзаимными взаимодействиями, в “классическом” монослое параметр неидеальности монотонно спадает к периферии, а амплитуда тепловых колебаний частиц — напротив, монотонно увеличивается. При повышении температуры системы это может приводить к возникновению необычного явления — “волны плавления”, распространяющейся от края к центру структуры [6].

5.4. Сравнение полученных результатов с экспериментом

Для количественного сравнения обсуждаемых в данной главе результатов с известными в литературе экспериментальными данными используется упрощенный подход для описания невзаимных эффектов в пылевой подсистеме: модель точечного ионного фокуса, описанная в разделе 3.1. В эксперименте [8] наблюдается неоднородный радиальный профиль кинетической энергии частиц в квазидвумерной системе пылевых частиц. Величина коэффициента трения в разрядном газе может быть оценена из измеренных в эксперименте величин в соответствии с формулой 3.2: $\gamma = 8.0 \text{ с}^{-1}$. Параметры системы, не измеренные напрямую (Q , q , δ_q , α_x , α_z), могут быть оценены из межчастичных расстояний и амплитуд тепловых колебаний частиц. Для этого может использоваться теория неоднородности структурных и динамических свойств юкавовского монослоя [4, 108, 109]. Полученные оценки заряда пылевой частицы и горизонтального параметра ловушки $Q = 3000 e$ и $\alpha_x = 4 \times 10^{-3}$ ед. СГСЭ. При типичных значениях $q/Q = -0.35$, $\delta_q = 0.2\Delta$ в центральной области и $\alpha_z/\alpha_x = 135$ в МД расчетах наблюдается монотонно спадающий к периферии профиль средней кинетической энергии частиц с таким же значением в центре структуры. Этот результат указывает на принципиальную возможность описания экспериментальных данных в рамках используемых моделей.

5.5. Выводы к пятой главе

Рассмотрен процесс плавления квазидвумерной системы заряженных частиц в параболической ловушке. Используются три модели взаимодействия. Первая модель включает взаимный экранированный кулоновский потенциал и центральную электростатическую ловушку с гармоническим профилем. Второй подход опирается на модель точечного ионного фокуса для описания невзаимных эффектов в системе пылевых частиц в плазме. В рамках третьей модели

взаимодействия распределение электростатического потенциала вокруг пылевых частиц рассчитывать посредством прямого моделирования кинетики ионов окружающей плазмы. В рамках второго и третьего подхода получены одинаковые результаты на качественном уровне.

Показано, что в монослое под действием невзаимных эффектов радиальный профиль кинетической энергии частиц становится принципиально неоднородным при низких значениях коэффициента трения в системе. Этот эффект обусловлен развитием неустойчивости связанных мод еще в упорядоченном состоянии без плавления монослоя. Он приводит к существенному отличию динамических свойств такого монослоя от свойств классической юкавовской системы. В центральной области монослоя с невзаимными эффектами энергия движения частиц может быть существенно выше, чем на периферии. В то время, как периферийная подобласть находится в близком к равновесному тепловом контакте с окружающей средой, динамика центральной области в этом случае определяется гибридной модой. При этом в рассматриваемых условиях возникновение гибридной моды не приводит к экспоненциальному развитию неустойчивости связанных мод.

Продемонстрировано, что степень упорядоченности как классического монослоя, так и монослоя с невзаимными эффектами распределена по системе принципиально неоднородно. Предложен локальный подход для определения степени упорядоченности, основанный на параметре флуктуации межчастичного расстояния. Описано два новых сценария сосуществования фаз в монослое. В гамильтоновой равновесной системе проявляется сосуществование упорядоченного ядра системы с расплавленными оболочками. В системе с невзаимными эффектами, напротив, ядро плавится первым под воздействием локальной неустойчивости связанных мод и в широком диапазоне значений коэффициента трения сосуществует с упорядоченными менее плотными оболочками. Это явление объясняется совместным действием неоднородности и невзаимности в системе. Показано, что в классической системе температуры плавления подси-

стем близки к их значениям в протяженных юкавовских системах. В монослое с невзаимными эффектами температуры плавления заметно отличаются от классического случая.

Таким образом, принципиальная неоднородность фазового состояния монослоя приводит к проявлению сосуществования фаз в монослое в широком диапазоне параметров. Полученные результаты важны для теории структурообразования и фазовых переходов в конечных юкавовских системах.

Заключение

В работе исследуются динамические свойства и фазовые переходы в системах из конечного числа заряженных частиц в параболическом конфайнменте, в том числе в плазменно-пылевых системах. Развита аналитическая теория неоднородности динамических свойств таких систем. Выполнены молекулярно-динамические расчеты, подтверждающие принципиально неоднородное пространственное распределение динамических характеристик по структурам. Предложены локальные подходы к исследованию характеристик, в том числе локальный критерий плавления, основанный на параметре флуктуации межчастичного расстояния. Исследовано влияние пространственной неоднородности и невзаимных эффектов на сценарий плавления квазидвумерной системы зарядов в конфайнменте — монослоя. Описаны два сценария сосуществования фаз в монослое: плотного упорядоченного ядра с расплавленными оболочками в классической системе и расплавленного ядра с упорядоченными оболочками в системе с невзаимными эффектами. Проведено сравнение полученных результатов с данными экспериментов. В итоге сформированы следующие положения:

1. Развита аналитическая теория, описывающая пространственное распределение динамических свойств, таких как характерная частота и амплитуда тепловых колебаний частиц, параметры Линдемманна и неидеальности, в системах из конечного числа зарядов в удерживающей параболической ловушке. Теория выведена в квазигармоническом приближении. Показано, что под действием структурной неоднородности указанные характеристики также имеют принципиально неоднородный радиальный профиль. Полученные аналитические соотношения проверены на основании сравнения с данными из лабораторных экспериментов.

2. По результатам компьютерного моделирования показана пространственная неоднородность динамических характеристик, в том числе характерных частот и амплитуд тепловых колебаний частиц, параметров неидеальности и Лин-

деманна, в системах из большого числа (порядка сотни и более) заряженных частиц в поле удерживающей электростатической ловушки в широком диапазоне температур. Сделан вывод о необходимости рассмотрения таких систем в локальном приближении посредством разбиения на близкие к однородным подсистемы.

3. Предложен локальный критерий плавления структур из конечного числа частиц, основанный на расчете параметра флуктуации межчастичного расстояния для выделенной области системы и допускающий детальное исследование сценария плавления. Критерий проверен на основании сравнения с другими критериями плавления, применяемыми для плазменно-пылевых систем. Продемонстрирована неоднородность радиального профиля величины флуктуации межчастичного расстояния для рассматриваемых систем зарядов в конфайнменте.

4. Показано, что под действием невзаимных эффектов динамические свойства плазменно-пылевого монослоя могут существенно отличаться от свойств классической юкавовской системы в параболическом конфайнменте. При определенных параметрах плазмы в центральной области монослоя без плавления системы может развиваться неустойчивость связанных мод, не затрагивающая внешние оболочки структуры.

5. Показана возможность наблюдения двух режимов стационарного сосуществования областей в упорядоченном и неупорядоченном состоянии в плазменно-пылевых структурах, в том числе режима, в котором более плотная расплавленная центральная область плазменно-пылевого монослоя сосуществует с разреженной и упорядоченной периферией системы. Этот режим в плазменно-пылевом монослое может быть обусловлен локальным развитием неустойчивости связанных мод в центральной области системы.

Список сокращений и условных обозначений

NVE — Микроканонический ансамбль

МД — Молекулярная динамика

НСМ — Неустойчивость связанных мод (*mode-coupling instability*)

Список литературы

1. Totsuji H., Kishimoto T., Totsuji C. Structure of confined Yukawa system (dusty plasma) // *Physical Review Letters*. 1997. Vol. 78, no. 16. P. 3113.
2. Totsuji H., Totsuji C., Tsuruta K. Structure of finite two-dimensional Yukawa lattices: Dust crystals // *Physical Review E*. 2001. Vol. 64, no. 6. P. 066402.
3. Totsuji H. Equilibrium properties of two-dimensional Yukawa plasmas // *J. Phys. A: Math. Gen.* 2006. Vol. 39, no. 17. P. 4493.
4. Henning C., Baumgartner H., Piel A. et al. Ground state of a confined Yukawa plasma // *Physical Review E*. 2006. Vol. 74, no. 5. P. 056403.
5. Henning C., Ludwig P., Filinov A. et al. Ground state of a confined Yukawa plasma including correlation effects // *Physical Review E*. 2007. Vol. 76, no. 3. P. 036404.
6. Klumov B. A. On the effect of confinement on the structure of a complex (dusty) plasma // *JETP Letters*. 2019. Vol. 110, no. 11. P. 715–721.
7. Liu B., Goree J. Phonons in a one-dimensional Yukawa chain: Dusty plasma experiment and model // *Physical Review E*. 2005. Vol. 71, no. 4. P. 046410.
8. Hariprasad M., Bandyopadhyay P., Arora G., Sen A. Experimental observation of a dusty plasma crystal in the cathode sheath of a dc glow discharge plasma // *Physics of Plasmas*. 2018. Vol. 25, no. 12. P. 123704.
9. Berry R., Beck T., Davis H., Jellinek J. Evolution of size effects in chemical dynamics // *Adv. Chem. Phys.* 1988.
10. Zhou Y., Karplus M., Ball K. D., Berry R. S. The distance fluctuation criterion for melting: Comparison of square-well and Morse potential models for clusters and homopolymers // *The Journal of chemical physics*. 2002. Vol. 116, no. 5. P. 2323–2329.
11. Ivlev A., Morfill G. Anisotropic dust lattice modes // *Physical Review E*. 2000. Vol. 63, no. 1. P. 016409.
12. Langmuir I., Fong C., Dittmer A. A new type of electric discharge: the stream-

- er discharge // *Science*. 1924. Vol. 60, no. 1557. P. 392–394.
13. Tsyтович В. Н., Морфилл Г., Владимиров С. В., Томас Н. М. Elementary physics of complex plasmas. Springer Science & Business Media, 2007. Vol. 731.
 14. Fortov V., Morfill G. Complex and Dusty Plasmas: from Laboratory to Space. CRC Press, 2009.
 15. Попель С. И. Лекции по физике пылевой плазмы. МФТИ, 2012.
 16. Цытович В. Н. Плазменно-пылевые кристаллы, капли и облака // *Успехи физических наук*. 1997. Т. 167, № 1. С. 57–99.
 17. Фортов В. Е., Храпак А. Г., Храпак С. А. и др. Пылевая плазма // *Успехи физических наук*. 2004. Т. 174, № 5. С. 495–544.
 18. Ikezi H. Coulomb solid of small particles in plasmas // *The Physics of fluids*. 1986. Vol. 29, no. 6. P. 1764–1766.
 19. Ваулина О. С., Петров О. Ф., Фортов В. Е. и др. Пылевая плазма: эксперимент и теория. Физматлит, Москва, 2009.
 20. Chu J., Lin I. Direct observation of Coulomb crystals and liquids in strongly coupled rf dusty plasmas // *Physical Review Letters*. 1994. Vol. 72, no. 25. P. 4009.
 21. Thomas H., Morfill G., Demmel V. et al. Plasma crystal: Coulomb crystallization in a dusty plasma // *Physical Review Letters*. 1994. Vol. 73, no. 5. P. 652.
 22. Hayashi Y., Tachibana K. Observation of Coulomb-crystal formation from carbon particles grown // *Jpn. J. Appl. Phys., Part.* 1994. Vol. 2, no. 33. P. L804–L806.
 23. Филиппов А., Загородний А., Момот А. и др. Взаимодействие двух макро-частиц в неравновесной плазме // *Журнал экспериментальной и теоретической физики*. 2007. Т. 132, № 4. С. 949–965.
 24. Ваулина О., Лисин Е., Гавриков А. и др. Анализ парного межчастичного взаимодействия в неидеальных диссипативных системах // *Журнал экспериментальной и теоретической физики*. 2010. Т. 137, № 4. С. 751–766.

25. Клумов Б. А., Морфилл Г. Е. Структурные свойства комплексной (пылевой) плазмы при кристаллизации и плавлении // Письма в Журнал экспериментальной и теоретической физики. 2009. Т. 90, № 6. С. 489–493.
26. Lozovik Y. E., Mandelshtam V. Coulomb clusters in a trap // Physics Letters A. 1990. Vol. 145, no. 5. P. 269–271.
27. Arp O., Block D., Piel A., Melzer A. Dust Coulomb balls: Three-dimensional plasma crystals // Physical Review Letters. 2004. Vol. 93, no. 16. P. 165004.
28. Ivanov Y., Melzer A. Modes of three-dimensional dust crystals in dusty plasmas // Physical Review E. 2009. Vol. 79, no. 3. P. 036402.
29. Kryuchkov N. P., Yakovlev E. V., Gorbunov E. A. et al. Thermoacoustic instability in two-dimensional fluid complex plasmas // Physical Review Letters. 2018. Vol. 121, no. 7. P. 075003.
30. Piel A., Melzer A. Dynamical processes in complex plasmas // Plasma physics and controlled fusion. 2001. Vol. 44, no. 1. P. R1.
31. Nosenko V., Zhdanov S., Ivlev A. et al. Heat transport in a two-dimensional complex (dusty) plasma at melting conditions // Physical Review Letters. 2008. Vol. 100, no. 2. P. 025003.
32. Pustyl'nik M., Pikalev A., Zobnin A. et al. Physical aspects of dust–plasma interactions // Contributions to Plasma Physics. 2021. Vol. 61, no. 10. P. e202100126.
33. Samsonov D., Zhdanov S., Quinn R. et al. Shock melting of a two-dimensional complex (dusty) plasma // Physical Review Letters. 2004. Vol. 92, no. 25. P. 255004.
34. Vaulina O., Vladimirov S., Petrov O., Fortov V. Criteria of phase transitions in a complex plasma // Physical Review Letters. 2002. Vol. 88, no. 24. P. 245002.
35. Polyakov D., Vasilyak L., Shumova V. Synergetics of dusty plasma and technological aspects of the application of cryogenic dusty plasma // Surface Engineering and Applied Electrochemistry. 2015. Vol. 51, no. 2. P. 143–151.
36. Arkar K., Vasiliev M. M., Petrov O. F. et al. Dynamics of active Brownian

- particles in plasma // *Molecules*. 2021. Vol. 26, no. 3. P. 561.
37. Nosenko V., Luoni F., Kaouk A. et al. Active Janus particles in a complex plasma // *Physical Review Research*. 2020. Vol. 2, no. 3. P. 033226.
38. Nikolaev V., Timofeev A. Screening length in dusty plasma crystals // *Journal of Physics: Conference Series* / IOP Publishing. Vol. 774. 2016. P. 012172.
39. Nikolaev V., Timofeev A. Dependence of average inter-particle distance upon the temperature of neutrals in dusty plasma crystals // *Journal of Physics: Conference Series* / IOP Publishing. Vol. 946. 2018. P. 012146.
40. Nikolaev V., Timofeev A. Influence of ion shadowing effect on average inter-particle distance in dusty plasma crystals // *Journal of Physics: Conference Series* / IOP Publishing. Vol. 1147. 2019. P. 012109.
41. Тимофеев А., Николаев В. Влияние параметров тлеющего разряда на среднее межчастичное расстояние в плазменно-пылевых структурах в диапазоне температур от криогенных до комнатной // *Журнал экспериментальной и теоретической физики*. 2019. Т. 155, № 2. С. 356–370.
42. Самойлов И., Баев В., Тимофеев А. и др. Пылевая плазма в тлеющем разряде гелия в диапазоне температур 5-300 К // *Журнал экспериментальной и теоретической физики*. 2017. Т. 151, № 3. С. 582–591.
43. Trukhachev F., Boltnev R., Alekseevskaya A. et al. Dust-acoustic waves in weakly coupled (gaseous) cryogenic dusty plasma // *Physics of Plasmas*. 2021. Vol. 28, no. 9. P. 093701.
44. Болтнев Р., Васильев М., Кононов Е., Петров О. Явления самоорганизации в криогенной газоразрядной плазме: формирование пылевого облака наночастиц и плазменно-пылевых волн // *Журнал экспериментальной и теоретической физики*. 2018. Т. 153, № 4. С. 679–684.
45. Antipov S., Asinovskii É., Kirillin A. et al. Charge and structures of dust particles in a gas discharge at cryogenic temperatures // *Journal of Experimental and Theoretical Physics*. 2008. Vol. 106, no. 4. P. 830–837.
46. Konopka U., Ratke L., Thomas H. Central collisions of charged dust particles

- in a plasma // *Physical Review Letters*. 1997. Vol. 79, no. 7. P. 1269.
47. Konopka U., Morfill G., Ratke L. Measurement of the interaction potential of microspheres in the sheath of a rf discharge // *Physical Review Letters*. 2000. Vol. 84, no. 5. P. 891.
48. Takahashi K., Oishi T., Shimomai K.-i. et al. Analyses of attractive forces between particles in Coulomb crystal of dusty plasmas by optical manipulations // *Physical Review E*. 1998. Vol. 58, no. 6. P. 7805.
49. Alexander S., Chaikin P., Grant P. et al. Charge renormalization, osmotic pressure, and bulk modulus of colloidal crystals: Theory // *The Journal of chemical physics*. 1984. Vol. 80, no. 11. P. 5776–5781.
50. Rowlinson J. The Yukawa potential // *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*. 1989. Vol. 156, no. 1. P. 15–34.
51. Kremer K., Robbins M. O., Grest G. S. Phase diagram of Yukawa systems: model for charge-stabilized colloids // *Physical Review Letters*. 1986. Vol. 57, no. 21. P. 2694.
52. Hartmann P., Kalman G., Donkó Z., Kutasi K. Equilibrium properties and phase diagram of two-dimensional Yukawa systems // *Physical Review E*. 2005. Vol. 72, no. 2. P. 026409.
53. Pieper J., Goree J., Quinn R. Three-dimensional structure in a crystallized dusty plasma // *Physical Review E*. 1996. Vol. 54, no. 5. P. 5636.
54. Robbins M. O., Kremer K., Grest G. S. Phase diagram and dynamics of Yukawa systems // *The Journal of chemical physics*. 1988. Vol. 88, no. 5. P. 3286–3312.
55. Решетняк В., Старостин А., Филиппов А. Теоретическое исследование равновесных свойств жидкости Юкавы в широком диапазоне параметров // *Журнал экспериментальной и теоретической физики*. 2018. Т. 154, № 6. С. 1258–1270.
56. Block D., Kroll M., Arp O. et al. Structural and dynamical properties of Yukawa balls // *Plasma Physics and Controlled Fusion*. 2007. Vol. 49, no. 12B. P. B109.

57. Baumgartner H., Kählert H., Golobnychiy V. et al. Shell structure of yukawa balls // Contributions to Plasma Physics. 2007. Vol. 47, no. 4-5. P. 281–290.
58. Haberland H., Hippler T., Donges J. et al. Melting of sodium clusters: Where do the magic numbers come from? // Physical Review Letters. 2005. Vol. 94, no. 3. P. 035701.
59. Totsuji H., Kishimoto T., Totsuji C., Tsuruta K. Competition between two forms of ordering in finite Coulomb clusters // Physical Review Letters. 2002. Vol. 88, no. 12. P. 125002.
60. Schiffer J. Melting of crystalline confined plasmas // Physical Review Letters. 2002. Vol. 88, no. 20. P. 205003.
61. Cândido L., Rino J.-P., Studart N., Peeters F. M. The structure and spectrum of the anisotropically confined two-dimensional Yukawa system // Journal of Physics: Condensed Matter. 1998. Vol. 10, no. 50. P. 11627.
62. Schweigert V. A., Peeters F. M. Spectral properties of classical two-dimensional clusters // Physical Review B. 1995. Vol. 51, no. 12. P. 7700.
63. Schweigert V., Peeters F. Time-dependent properties of classical artificial atoms // Journal of Physics: Condensed Matter. 1998. Vol. 10, no. 11. P. 2417.
64. Melzer A. Mode spectra of thermally excited two-dimensional dust Coulomb clusters // Physical Review E. 2003. Vol. 67, no. 1. P. 016411.
65. Melzer A., Schella A., Schablinski J. et al. Instantaneous normal mode analysis of melting of finite dust clusters // Physical Review Letters. 2012. Vol. 108, no. 22. P. 225001.
66. Dubin D. H., Schiffer J. Normal modes of cold confined one-component plasmas // Physical Review E. 1996. Vol. 53, no. 5. P. 5249.
67. Henning C., Fujioka K., Ludwig P. et al. Existence and vanishing of the breathing mode in strongly correlated finite systems // Physical Review Letters. 2008. Vol. 101, no. 4. P. 045002.
68. Bedanov V. M., Peeters F. M. Ordering and phase transitions of charged particles in a classical finite two-dimensional system // Physical Review B. 1994.

- Vol. 49, no. 4. P. 2667.
69. Kong M., Partoens B., Peeters F. Structural, dynamical and melting properties of two-dimensional clusters of complex plasmas // *New Journal of Physics*. 2003. Vol. 5, no. 1. P. 23.
 70. Kong M., Partoens B., Peeters F. Topological defects and nonhomogeneous melting of large two-dimensional Coulomb clusters // *Physical Review E*. 2003. Vol. 67, no. 2. P. 021608.
 71. Golubnychiy V., Baumgartner H., Bonitz M. et al. Screened Coulomb balls—structural properties and melting behaviour // *Journal of Physics A: Mathematical and General*. 2006. Vol. 39, no. 17. P. 4527.
 72. Hone D. Equilibrium phases of charged colloids // *Le Journal de Physique Colloques*. 1985. Vol. 46, no. C3. P. C3–21.
 73. Hansen J.-P., Verlet L. Phase transitions of the Lennard-Jones system // *Physical Review*. 1969. Vol. 184, no. 1. P. 151.
 74. Klumov B. A. On melting criteria for complex plasma // *Physics-Uspekhi*. 2010. Vol. 53, no. 10. P. 1053.
 75. Lindemann F. The calculation of molecular vibration frequencies // *Physik. Zeits.* 1910. Vol. 11, no. 609.
 76. Baumgartner H., Block D., Bonitz M. Structure and phase transitions of Yukawa balls // *Contributions to Plasma Physics*. 2009. Vol. 49, no. 4-5. P. 281–302.
 77. Bonitz M., Ludwig P., Baumgartner H. et al. Classical and quantum Coulomb crystals // *Physics of Plasmas*. 2008. Vol. 15, no. 5. P. 4717.
 78. Böning J., Filinov A., Ludwig P. et al. Melting of trapped few-particle systems // *Physical Review Letters*. 2008. Vol. 100, no. 11. P. 113401.
 79. Melzer A., Schella A., Miksch T. et al. Phase transitions of finite dust clusters in dusty plasmas // *Contributions to Plasma Physics*. 2012. Vol. 52, no. 10. P. 795–803.
 80. Ivlev A., Nosenko V., Röcker T. Equilibrium and Non-Equilibrium Melting of

- Two-Dimensional Plasma Crystals // Contributions to Plasma Physics. 2015. Vol. 55, no. 1. P. 35–57.
81. Kosterlitz J. M., Thouless D. J. Ordering, metastability and phase transitions in two-dimensional systems // Journal of Physics C: Solid State Physics. 1973. Vol. 6, no. 7. P. 1181.
 82. Halperin B., Nelson D. R. Theory of two-dimensional melting // Physical Review Letters. 1978. Vol. 41, no. 2. P. 121.
 83. Nelson D. R., Halperin B. Dislocation-mediated melting in two dimensions // Physical Review B. 1979. Vol. 19, no. 5. P. 2457.
 84. Chui S. Grain-boundary theory of melting in two dimensions // Physical Review B. 1983. Vol. 28, no. 1. P. 178.
 85. Zhdanov S., Ivlev A., Morfill G. Mode-coupling instability of two-dimensional plasma crystals // Physics of Plasmas. 2009. Vol. 16, no. 8. P. 083706.
 86. Couëdel L., Zhdanov S., Ivlev A. et al. Wave mode coupling due to plasma wakes in two-dimensional plasma crystals: In-depth view // Physics of Plasmas. 2011. Vol. 18, no. 8. P. 083707.
 87. Кёдель Л., Носенко В. М., Жданов С. и др. Экспериментальные исследования двумерных кристаллических структур в комплексной плазме: волны и неустойчивости // Успехи физических наук. 2019. Т. 189, № 10. С. 1070–1083.
 88. Melzer A. Connecting the wakefield instabilities in dusty plasmas // Physical Review E. 2014. Vol. 90, no. 5. P. 053103.
 89. Ivlev A., Konopka U., Morfill G., Joyce G. Melting of monolayer plasma crystals // Physical Review E. 2003. Vol. 68, no. 2. P. 026405.
 90. Röcker T., Couëdel L., Zhdanov S. K. et al. Nonlinear regime of the mode-coupling instability in 2D plasma crystals // EPL (Europhysics Letters). 2014. Vol. 106, no. 4. P. 45001.
 91. Zampetaki A., Huang H., Du C.-R. et al. Buckling of two-dimensional plasma crystals with nonreciprocal interactions // Physical Review E. 2020. Vol. 102,

- no. 4. P. 043204.
92. Khrapak S., Ivlev A., Morfill G. Interaction potential of microparticles in a plasma: Role of collisions with plasma particles // *Physical Review E*. 2001. Vol. 64, no. 4. P. 046403.
93. Lisin E., Petrov O., Sametov E. et al. Experimental study of the nonreciprocal effective interactions between microparticles in an anisotropic plasma // *Scientific Reports*. 2020. Vol. 10, no. 1. P. 1–12.
94. Nosenko V., Ivlev A., Morfill G. Laser-induced rocket force on a microparticle in a complex (dusty) plasma // *Physics of Plasmas*. 2010. Vol. 17, no. 12. P. 123705.
95. Sundar S., Moldabekov Z. A. Ultracold ions wake in dusty plasmas // *New Journal of Physics*. 2020. Vol. 22, no. 3. P. 033028.
96. Khrapak S., Morfill G. Basic processes in complex (dusty) plasmas: Charging, interactions, and ion drag force // *Contributions to Plasma Physics*. 2009. Vol. 49, no. 3. P. 148–168.
97. Игнатов А. Коллективная сила ионного увлечения // *Физика плазмы*. 2019. Т. 45, № 9. С. 825–830.
98. Владимиров С., Крамер Н., Майоров С. Расчет динамики макрочастиц в плазменном потоке // *Краткие сообщения по физике Физического института им. ПН Лебедева Российской Академии Наук*. 2000. № 9. С. 33–39.
99. Филиппов А., Загородний А., Момот А. и др. Экранирование движущегося заряда в неравновесной плазме // *Журнал экспериментальной и теоретической физики*. 2009. Т. 135, № 3. С. 567–586.
100. Норман Г. Э., Стегайлов В. В. Стохастическая теория метода классической молекулярной динамики // *Математическое моделирование*. 2012. Т. 24, № 6. С. 3–44.
101. Frenkel D., Smit B. *Understanding Molecular Simulation: From Algorithms to Applications*. Second edition. San Diego: Academic Press, 2002. Vol. 1 of Computational Science Series.

102. Tuckerman M. *Statistical Mechanics: Theory and Molecular Simulation*. First edition. New York: Oxford Graduate Texts, 2010.
103. Fortov V., Ivlev A., Khrapak S. et al. Complex (dusty) plasmas: Current status, open issues, perspectives // *Physics reports*. 2005. Vol. 421, no. 1-2. P. 1–103.
104. Khrapak S. A., Vaulina O. S., Morfill G. E. Self-diffusion in strongly coupled Yukawa systems (complex plasmas) // *Physics of Plasmas*. 2012. Vol. 19, no. 3. P. 034503.
105. Vaulina O., Khrapak S., Morfill G. Universal scaling in complex (dusty) plasmas // *Physical Review E*. 2002. Vol. 66, no. 1. P. 016404.
106. Norman G., Stegailov V., Timofeev A. Abnormal kinetic energy of charged dust particles in plasmas // *Contributions to Plasma Physics*. 2010. Vol. 50, no. 1. P. 104–108.
107. Norman G., Timofeev A. Kinetic temperature of dust particle motion in gas-discharge plasma // *Physical Review E*. 2011. Vol. 84, no. 5. P. 056401.
108. Nikolaev V., Timofeev A. Inhomogeneity of a harmonically confined Yukawa system // *Physics of Plasmas*. 2019. Vol. 26, no. 7. P. 073701.
109. Тимофеев А., Николаев В., Семенов В. Неоднородность структурных и динамических характеристик пылевой плазмы в газовом разряде // *Журнал экспериментальной и теоретической физики*. 2020. Т. 157, № 1. С. 180–188.
110. Vaulina O., Koss X. Melting in three-dimensional and two-dimensional Yukawa systems // *Physical Review E*. 2015. Vol. 92, no. 4. P. 042155.
111. Joyce G., Lampe M., Ganguli G. Particle simulation of dust structures in plasmas // *IEEE Transactions on Plasma Science*. 2001. Vol. 29, no. 2. P. 238–246.
112. Hutchinson I. Nonlinear collisionless plasma wakes of small particles // *Physics of Plasmas*. 2011. Vol. 18, no. 3. P. 032111.
113. Vaulina O., Koss X., Vladimirov S. The dynamics of formation of monolayer dust structures in a confining electric field // *Physica Scripta*. 2009. Vol. 79, no. 3. P. 035501.
114. Sukhinin G., Fedoseev A., Antipov S. et al. Dust particle radial confinement

- in a dc glow discharge // *Physical Review E*. 2013. Vol. 87, no. 1. P. 013101.
115. Василяк Л. М., Поляков Д. Н., Фортов В. Е., Шумова В. В. Параметры положительного столба тлеющего разряда с пылевыми частицами // *Теплофизика высоких температур*. 2011. Vol. 49, no. 5. P. 643–648.
116. Vasilyak L., Polyakov D., Shumova V. Glow discharge positive column with dust particles in neon // *Contributions to Plasma Physics*. 2013. Vol. 53, no. 4-5. P. 432–435.
117. Nikolaev V., Timofeev A. Inhomogeneity of a one-dimensional Yukawa system in a trap // *Journal of Physics: Conference Series* / IOP Publishing. Vol. 1556. 2020. P. 012077.
118. Nikolaev V., Timofeev A. Nonhomogeneity of phase state in a dusty plasma monolayer with nonreciprocal particle interactions // *Physics of Plasmas*. 2021. Vol. 28, no. 3. P. 033704.
119. Колотинский Д. А., Николаев В. С., Тимофеев А. В. Влияние структурной неоднородности и невзаимных эффектов во взаимодействии макрочастиц на динамические свойства плазменно-пылевого монослоя // *Письма в Журнал экспериментальной и теоретической физики*. 2021. Т. 113, № 8. С. 514–522.
120. Pan D., Liu L.-M., Slater B. et al. Melting the ice: on the relation between melting temperature and size for nanoscale ice crystals // *ACS nano*. 2011. Vol. 5, no. 6. P. 4562–4569.
121. Lewis L. J., Jensen P., Barrat J.-L. Melting, freezing, and coalescence of gold nanoclusters // *Physical Review B*. 1997. Vol. 56, no. 4. P. 2248.
122. Baletto F., Ferrando R. Structural properties of nanoclusters: Energetic, thermodynamic, and kinetic effects // *Reviews of modern physics*. 2005. Vol. 77, no. 1. P. 371.
123. Schweigert I., Schweigert V., Peeters F. Melting of the classical bilayer wigner crystal: Influence of lattice symmetry // *Physical Review Letters*. 1999. Vol. 82, no. 26. P. 5293.

124. Muto S., Aoki H. Crystallization of a classical two-dimensional electron system: Positional and orientational orders // Physical Review B. 1999. Vol. 59, no. 23. P. 14911.
125. Khrapak S., Ivlev A., Morfill G., Thomas H. Ion drag force in complex plasmas // Physical Review E. 2002. Vol. 66, no. 4. P. 046414.