ОСОБЕННОСТИ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ КОМПЛЕКСНОЙ ПЛАЗМЫ В УЗКИХ КАНАЛАХ

Б. А. Клумов^{*}, Г. Е. Морфилл^{**}

Институт внеземной физики им. Макса Планка 85740, Гархинг, Германия ***

Поступила в редакцию 25 апреля 2008 г.

Методом молекулярной динамики исследуется поведение комплексной (пылевой) плазмы в узких плоских трехмерных каналах в зависимости от вида удерживающего потенциала (конфайнмента). Динамика микрочастиц рассматривается в рамках ланжевеновского термостата, парное взаимодействие между заряженными частицами описывается экранированным кулоновским потенциалом (потенциалом Юкавы). Подробно проанализированы особенности кристаллизации микрочастиц в зависимости от вида конфайнмента. Показано, что конфайнмент сильно влияет на кристаллизацию и локальный порядок микрочастиц в рассматриваемой системе, в частности, обнаружено появление новой квазикристаллической фазы, индуцированной конфайнментом — жесткой стенкой. Исследованы переходы между различными типами кристаллической решетки при изменении ширины канала. Сильная зависимость поперечного профиля плотности микрочастиц от структурного параметра (отношения межчастичного расстояния к длине экранирования) позволяет легко манипулировать потоком микрочастиц в такой системе.

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

В последние годы значительно вырос интерес к процессам, происходящим в плазме, содержащей микрочастицы. Такую плазму обычно называют комплексной или пылевой плазмой (см., например, [1, 2]). Интерес к пылевой плазме обусловлен, с одной стороны, ее широкой распространенностью в природе. Межзвездные облака, газопылевые скопления, планетные кольца [3], атмосферы комет [4], ионосферы и магнитосферы планет — все эти объекты в той или иной степени являются комплексной плазмой, при этом пылевые частицы часто оказывают определяющее влияние на состояние системы, в которой они находятся. Например, образующиеся в запыленной холодной верхней атмосфере Земли серебристые облака [5-7] являются пылевыми структурами, которые определяют ионизационные свойства мезосферы. Присутствие кометной пыли в магнитосфере Юпитера возможно [8] привело к увеличению яркости радиационных поясов во время (и после)

столкновения с кометой Шумейкера — Леви 9 в июле 1994 г. [9].

С другой стороны, наблюдение за поведением каждой отдельной микрочастицы дает возможность описывать свойства ансамбля пылевых частиц на самом подробном, кинетическом уровне. Это делает пылевую плазму привлекательным инструментом для изучения различных фундаментальных проблем физики, например, для изучения фазовых переходов [10, 11], для понимания природы гидродинамических неустойчивостей [12], свойств волн кристаллизации [13, 14] и др.

Одной из таких важных проблем является поведение заряженных микро/наночастиц в узких каналах, когда межчастичное расстояние сопоставимо с шириной канала; в этом случае влияние стенок на состояние микрочастиц может быть исключительно важным. Поведение ансамбля взаимодействующих между собой частиц в ограниченных системах, когда один из пространственных масштабов, характеризующих состояние системы, сопоставим с межчастичным расстоянием, стало предметом интенсивных исследований в последнее время [15, 16] в связи с многочисленными приложениями в физике на-

^{*}E-mail: klumov@mpe.pmg.de

^{**}G. E. Morfill

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

но/микрожидкостей, коллоидных микрочастиц, капиллярных явлений в нанопорах [17], фазовых переходов, индуцированных конфайнментом, в физике гранулированных систем [18] и др. Комплексная плазма является удобным инструментом для исследования подобных явлений [19, 20].

Отметим, что в последние годы был достигнут большой прогресс в понимании поведения коллоидных частиц в узких каналах (например, [21,22]). Многие данные наблюдений были объяснены в рамках модели твердых шаров. Однако, в отличие от коллоидной, в комплексной плазме характерное расстояние между микрочастицами Δ значительно превышает их размер *a*. В экспериментах с комплексной плазмой обычно $\Delta \approx 100$ мкм, $a \approx 1$ мкм, что приводит к ряду особенностей в поведении ограниченной комплексной плазмы.

В лабораторных условиях комплексную/пылевую плазму традиционно получают при добавлении микрочастиц в слабоионизированную газоразрядную плазму инертных газов пониженного давления. Рекомбинация электронов и ионов на поверхности пылевых частиц приводит к их быстрой зарядке, величина заряда зависит от размера частицы и параметров плазмы, например, для типичного радиочастотного разряда в аргоне микронная частица приобретает отрицательный заряд $Z_d/e \sim 10^3$, где e заряд электрона. Такой высокий заряд микрочастицы часто приводит к сильной неидеальности пылевой компоненты, которая может находиться в широком диапазоне фазовых состояний: проявлять себя как газ, жидкость или кристалл. Кристаллическое состояние пылевой компоненты комплексной плазмы (так называемый плазменный кристалл) было экспериментально открыто в 1994 г. [23, 24], будучи предсказано теоретически в 1986 г. [25].

Из-за быстрой диффузии электронов на стенки разрядной камеры центральная область газового разряда заряжена положительно и является потенциальной ямой для отрицательно заряженных микрочастиц. Профиль удерживающего потенциала (конфайнмента) Φ_c вблизи центра можно считать параболическим: $\Phi_c(x) \propto (x-x_c)^2$, где x_c — центр разрядной области. У границ, в приэлектродной области разряда, электрическое поле растет значительно сильнее, чем в центральной области, в этом случае конфайнмент близок к жесткой стенке. Отметим, что в экспериментах с комплексной плазмой пылевая компонента может удерживаться в области разряда как внешним конфайнментом, так и самосогласованным электрическим полем, которое определяется распределением заряженных микрочастиц в

разряде.

В работе [19] было рассмотрено влияние конфайнмента на равновесные конфигурации пылевой компоненты комплексной плазмы (парное взаимодействие между пылинками описывалось экранированным кулоновским потенциалом) в узких каналах в двумерной геометрии. В частности, было показано, что конфайнмент сильно влияет на локальный порядок микрочастиц в системе, например, наличие конфайнмента — жесткой стенки — индуцирует переход микрочастиц в стекольное состояние при охлаждении системы из-за повышенной концентрации микрочастиц у стенки, в то время как для параболического конфайнмента наблюдается плазменный кристалл. Экспериментально локальный порядок микрочастиц и формирование слоев из микрочастиц, индуцированное конфайнментом, наблюдался в работе [26].

В настоящей работе нас будет интересовать, главным образом, локальный порядок микрочастиц в трехмерных узких каналах для разных видов удерживающего потенциала: параболического и жесткой стенки. Парное взаимодействие микрочастиц описывается, как и в двумерном случае, экранированным кулоновским потенциалом (потенциалом Дебая – Хюккеля или Юкавы):

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

где r — расстояние между частицами, λ_D — характерная длина экранирования. Поскольку исследуются особенности кристаллизации пылевой подсистемы, рассматриваемая комплексная плазма находится в сильносвязанном состоянии (strongly coupled). Это означает, что параметр неидеальности пылевой подсистемы

$$\Gamma = Z_d^2 \exp(-\kappa) / T_d \Delta \gg 1,$$

где T_d — температура микрочастиц, $\kappa = \Delta/\lambda_D$ — так называемый структурный параметр.

Поведение ансамбля микрочастиц в узких 3D-каналах исследуется методом молекулярной динамики. Для простоты считается, что все микрочастицы имеют фиксированный заряд Z_d . Уравнения движения отдельной микрочастицы имеют вид

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

Слагаемые в правой части (1), помимо электростатического взаимодействия частиц, описывают торможение пылевых частиц при их столкновениях с нейтральными атомами и молекулами буферного газа,



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

случайную силу **L**_i Ланжевена (тепловой шум, индуцированный нейтральными частицами), определяемую из соотношения

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

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

Система (1) решалась для N = 16000 микрочастиц, которые в начальный момент времени были случайно распределены в узком канале. Рисунок 1 иллюстрирует геометрию рассматриваемой задачи. Конфайнмент ограничивает положение микрочастиц вдоль оси $z \ (0 \le z \le L_z)$, а в плоскости xy частицы расположены в области $0 \le x, y \le L_{x,y}$. На боковых гранях ($x = \{0, L_x\}, y = \{0, L_y\}$) использовались периодические граничные условия. Рассматривались два варианта конфайнмента, который являлся либо параболическим $\Phi_c(z) \propto (z - L_z/2)^2$, либо жесткой упругой стенкой ($\Phi_c(z) \propto \exp((z - L_z)/\Delta_w)$) при $z > L_z$ и $\Phi_c(z) \propto \exp(-z/\Delta_w)$ для z < 0, где пространственный масштаб Δ_w определяет жесткость стенки; в настоящих расчетах использовалась величина $\Delta_w \approx \Delta/3$).

Известно, что в термодинамическом пределе неограниченная система частиц, парное взаимодействие которых описывается потенциалом Юкавы, в зависимости от параметра неидеальности Г и структурного параметра κ может иметь кристаллическую решетку только двух типов: гранецентрированную кубическую (fcc) (для больших κ) и объемноцентрированную кубическую (bcc) (для малых κ) (см., например, [2]). В неравновесной системе микрочастиц Юкавы часто образуются долгоживущая метастабильная фаза с гексагональной плотноупакованной кристаллической решеткой (hcp) (см., например, [14, 20]). Это связано с тем, что энергии образования фаз hcp и fcc очень близки [27]. Для идентификации fcc/hcp/bcc-типов решетки достаточно знать положение трех АВС близлежащих слоев кристалла. В этом случае тип образовавшейся кристаллической решетки может быть определен визуально. Поэтому для наглядности в настоящей работе рассматривается поведение системы Юкавы, которая на стадии установления состоит из трех слоев. Некоторые результаты моделирования поведения системы Юкавы в узких каналах для разных видов конфайнмента представлены ниже. Параметры моделируемой системы Юкавы: размер и заряд микрочастицы $a \approx 1$ мкм, $Z_d/e \approx 3 \cdot 10^3$, $\kappa \approx 2-3$, плотность нейтрального газа $\rho_g \sim 10^{-7}$ г/см³.

На рис. 2 представлено распределение плотности частиц ρ_N и их интегральное число N/N_{tot} в каждом слое для трехслойной системы Юкавы при уменьшении/увеличении расстояния между слоями для обоих видов конфайнмента. Сжатие такой системы (что эквивалентно уменьшению параметра $\kappa \equiv \Delta/\lambda$) приводит в определенный момент к бифуркации плотности микрочастиц и формированию двуслойной системы. Увеличение же расстояния (увеличение κ) приводит к формированию четырехслойной системы. Таким образом, трехслойная система может существовать (при заданных Γ и λ_D) только в определенном диапазоне значений параметра κ (и соответственно ширины канала L_z).



Рис.2. Относительная плотность микрочастиц ρ_N в зависимости от безразмерной координаты $\tilde{z} \equiv z/L_z$ для двух типов конфайнмента: параболического (a) и жесткой упругой стенки (b), при разных значениях L_z (и соответственно параметра κ). Распределения микрочастиц у границ в случае b не показано: они представляют собой узкие симметричные слои с резкими границами. Выбранные значения L_z демонстрируют состояние системы микрочастиц, близкой к бифуркации, когда система становится четырехслойной (переход 3–4, пунктирная линия), двуслойной (переход 3–2, сплошная линия) и промежуточный случай стабильной трехслойной системы (штрихпунктирная линия). Также представлены интегральное число частиц N/N_{tot} в каждом слое и зависимость $N/N_{tot}(\tilde{z})$ для переходов 3–4 (\Box), 3–2 (∇) и для стабильной трехслойной системы (•)

Интересным также представляется значительное изменение плотности частиц в поперечном направлении (вдоль z) при приближении системы к точкам бифуркации. Для обоих видов конфайнмента хорошо видно заметное уменьшение плотности центрального слоя при сжатии рассматриваемой системы. В случае конфайнмента в виде жесткой стенки центральный слой содержит меньше частиц, чем слои у границы [20]. При сжатии такой системы эта разница увеличивается, поскольку частицы центрального слоя покидают его (система готовится стать двуслойной). При этом центральный слой заметно размыва-



Рис. 3. Кристаллизация микрочастиц в узком канале в случае параболического конфайнмента (a, δ) и конфайнмента – жесткой стенки (e, e). Цвет частиц зависит от координаты z (первый слой частиц — белый, второй — серый, третий — черный). Представлены квазистационарные трехслойные конфигурации (a, b) и близкие к переходу системы в двухслойное состояние (δ, e) . Показаны домены с разными типами кристаллической решетки, включая квазикристаллическую (QC) фазу. На вставках — парные корреляционные функции $g(r/\Delta)$ для каждого слоя, соответствующие данному распределению частиц. Центральному слою соответствуют сплошные линии. Для верхнего и нижнего слоев (пунктирные линии) парные корреляционные функции практически идентичны для обоих видов конфайнмента

ется и число частиц в нем резко уменьшается. При расширении же такой трехслойной системы происходит формирование четырех слоев, причем суммарное число частиц в двух новых центральных слоях слабо отличается от стабильного промежуточного случая (см. рис. 26). Это связано с тем, что в процессе бифуркации два новых слоя частиц формируются из частиц старого центрального слоя.

В случае параболического конфайнмента центральный слой содержит больше частиц, чем пограничные слои и тоже теряет частицы при сжатии системы (см. рис. 2а). В этом случае легко создать трехслойную систему Юкавы с одинаковым числом частиц в каждом слое, а при кристаллизации такой системы можно получить совершенный плазменный кристалл. На рис. 3 представлено положение микрочастиц для трехслойной системы Юкавы в случае параболического конфайнмента (a, b) и конфайнмента-жесткой стенки (в,г). Указанные варианты показывают квазистационарную кристаллическую фазу системы Юкавы при значении параметра неидеальности $\Gamma \sim 10^4$. Во всех случаях цвет частицы соответствует определенному слою (или координате частицы z). Рисунки 3a, e соответствуют промежуточным распределениям плотности (сплошные линии на рис. 2), а рис. 26, r показывают приближение системы к переходу 3-2 для двух рассмотренных видов конфайнмента.

Видно, что параболический конфайнмент приводит в основном к образованию кристаллитов с расположением слоев ABA (третий слой экранирован первым), что характерно для фазы hcp или bcc (рис. 3a). Относительно небольшое число кластеров (~ 1%) обладает икосаэдрической симметрией; микрочастица из центрального слоя имеет 5 соседей у границы системы. При приближении такой системы к переходу 3-2 (рис. 3δ) гексагональная решетка (hcp) трансформируется в кубическую (bcc/fcc), при этом наблюдается переход из одного состояния твердого тела в другое.

В случае, если конфайнмент — жесткая упругая стенка (рис. 3в), хорошо видны области с расположением слоев ABA (что характерно для hcp/bcc-фазы) и АВС (видны частицы третьего слоя). Заметная часть пылевых частиц имеет гранецентрированную (fcc) кристаллическую решетку и гексагональную плотноупакованную (hcp). Очень интересным представляется появление новой квазикристаллической (QC) фазы для случая конфайнмента в виде жесткой стенки [20]. При сжатии системы (рис. 3г) квазикристаллическая и гексагональные фазы исчезают, остаются только домены с кубической решеткой (fcc/bcc), с большим числом линейных (sring-like) дефектов. Более подробно типы кристаллических решеток и локальный порядок в рассматриваемых системах будет обсуждаться ниже.

На вставках на рис. З представлены парные корреляционные функции g(r), определяемые как

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

для каждого слоя, соответствующие данному распределению частиц. Центральному слою соответствует сплошная линия. Для верхнего и нижнего слоев (пунктирные линии) парные корреляционные функции практически идентичны для обоих видов конфайнмента. Видно сильное влияние конфайнмента на g(r) и заметное обеднение центрального слоя при сжатии системы (особенно ярко этот эффект наблюдается в случае конфайнмента жесткой стенки).

Таким образом, из рассмотренных особенностей поведения микрочастиц в узких каналах следует важный вывод: появляется возможность манипулировать плотностью заряженных микрочастиц и распределением микрочастиц по слоям (а значит, и распределением дефектов в системе), просто меняя расстояние между границами системы (или варьируя структурный параметр κ).

При кристаллизации микрочастиц в узких каналах часто очень важно знать тип образуемой кристаллической решетки. Для его определения удобно использовать метод локальных вращательных инвариантов [28]. В рамках этого подхода для каждой *i*-й частицы сначала определяются $N_b(i)$ ближайших соседей, для нахождения которых обычно используются методы симплексов Делоне и ячеек Вороного, при этом N_b обычно не превышает число

$$N_m \approx \frac{4}{3}\pi r_m^3 \frac{N}{V},$$

где V, N — объем и полное число частиц в системе, r_m — расстояние до первого минимума парной корреляционной функции g(r). Векторы \mathbf{r}_{ij} , соединяющие частицу *i* с ближайшими соседями $(j=1, N_b)$, позволяют определить локальный ориентационный параметр $q_{lm}(i)$ для каждой микрочастицы:

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

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

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



Рис. 4. Локальные вращательные инварианты q_4 , q_6 для микрочастиц центрального слоя по данным, представленным на рис. 3. Параболический конфайнмент (a, δ) , жесткая стенка (e, c). Цвет частицы зависит от величины w_4

$$w_{l}(i) = \sum_{\substack{m_{1}, m_{2}, m_{3} \\ m_{1} + m_{2} + m_{3} = 0}} \begin{pmatrix} l & l & l \\ m_{1} & m_{2} & m_{3} \end{pmatrix} \times \\ \times q_{lm_{1}}(i)q_{lm_{2}}(i)q_{lm_{3}}(i), \quad (5)$$

где $\begin{pmatrix} l & l & l \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}$ — вигнеровские 3*j*-символы, причем в последнем уравнении суммирование проводится по всем индексам $m_i = -l, \ldots, l$, которые удовлетворяют условию $m_1 + m_2 + m_3 = 0$. Важно отметить, что каждый тип кристаллической решетки имеет свой уникальный набор q_l и w_l . Это дает возможность определить наблюдаемую кристаллическую структуру, сравнивая ее значения q_l, w_l с величинами q_l^{id}, w_l^{id} для идеальных решеток.

Для идентификации кристаллической структуры обычно используют вращательные инварианты q_4 , q_6 второго рода и w_4 , w_6 третьего рода (см., например, [28, 29]), которые для совершенных кристаллов fcc/hcp/ico/bcc достаточно легко вычисляются. Для fcc/hcp/ico число ближайших соседей $N_b = 12$ и указанные инварианты равны соответственно для гранецентрированной кубической решетки (fcc): $q_4^{fcc} = 0.1909$, $q_6^{fcc} = 0.5745$, $w_4^{fcc} = -0.1593$, $w_6^{fcc} = -0.01316$; для гексагональной плотноупакованной (hcp): $q_4^{hcp} = 0.0972$, $q_6^{hcp} = 0.4847$, $w_4^{hcp} = 0.1341$, $w_6^{hcp} = -0.01244$; для икосаэдрической (ico): $q_4^{ico} = 0$, $q_6^{ico} = 0.6633$, $w_4^{ico} = -0.1593$, $w_6^{ico} = -0.1697$.

Большие значения параметра q_6^{cr} для всех рассмотренных типов кристаллической решетки позволяют изучать начальные стадии нуклеации/кристаллизации в различных системах (см., например, [29]). Отметим, что для слабокоррелированной системы частиц (газ/жидкость) среднее значение $\langle q_6 \rangle \approx N_b^{-1/2}$ и значительно меньше q_6^{cr} ; например, для $N_b = 12$ величина $\langle q_6 \rangle \approx 0.29$.

Для объемно-центрированной кубической решетки (bcc) в случае $N_b = 8$ (когда рассматриваемая кристаллическая решетка является простой кубической (simple cubic)), $q_4^{sc} = 0.5092$, $q_6^{sc} = 0.6285$, $w_4^{sc} = -0.1593$, $w_6^{sc} = 0.1316$. Для определения кластеров bcc часто бывает важным положение второй оболочки, находящейся на небольшом расстоянии $((2/\sqrt{3} - 1)\Delta \approx 0.15\Delta)$ от первой. В этом случае $N_b = 14$ и $q_4^{bcc} = 0.0363$, $q_6^{bcc} = 0.510$, $w_4^{bcc} = 0.1593$, $w_6^{bcc} = 0.01316$. Мы приводим значения q_l , w_l для разных решеток, несмотря на то что такие данные были частично опубликованы уже в пионерской работе [28]. Это связано с тем, что часто в литературе приводятся ошибочные величины для q_l , w_l . На рис. 4 представлено распределение локальных



Рис.5. Вариации локальных вращательных инвариантов различных типов кристаллической решетки (для fcc/hcp/ico учитывались 12 ближайших соседей, для bcc — 8) при различных деформациях: сжатия/растяжения (С), сдвига (S) и кручения (T). Также показаны вращательные инварианты для fcc (вычисленные по 8 ближайшим соседям) и для bct — компрессионной модификации bcc

вращательных инвариантов q_4 , q_6 , w_4 для микрочастиц (представленных на рис. 3) центрального слоя в случае параболического конфайнмента (a, 6) и конфайнмента в виде жесткой стенки (e, r). Для параболического конфайнмента хорошо видны почти совершенные фазы hcp/fcc/bcc (a), а также исчезновение фаз hcp и fcc при бифуркации 3–2, что хорошо подтверждается рис. 3, на котором при переходе 3–2 преобладает фаза bcc. В случае конфайнмента – жесткой стенки хорошо видны компрессионные типы решетки fcc и hcp и практически отсутствует фаза bcc (e), а при приближении к переходу 3–2 остаются небольшие кластеры из фазы fcc/bcc (r), что также видно на рис. 3.

Кристаллическая решетка реального плазменного кристалла практически всегда искажена в силу различных причин, например, медленный дрейф микрочастиц может быть различным в разных областях кристалла, что может привести к сдвиговым напряжениям, которые деформируют отдельные области кристалла. Вихревое движение в системе может привести к торсионному искажению кристаллической решетки на масштабах, сопоставимых с Δ . Коротковолновые акустические возмущения также могут деформировать плазменный кристалл. Наличие анизотропии в потенциале межчастичного взаимодействия (которая всегда есть в приэлектродной области ВЧ-разряда из-за наличия ионного потока на стенки), а также диполь-дипольное взаимодействие микрочастиц могут привести к появлению дополнительных типов кристаллической решетки в системе. Например, помимо объемно-центрированной кубической решетки (a = b = c) могут формироваться фазы bct $(a = b \neq c)$, bco $(a \neq b, c \neq a, c \neq b)$. В узких каналах, в зависимости от конфайнмента, возможно образование деформированных кластеров fcc/hcp. Поэтому представляют интерес вариации q_l, w_l при различных деформациях совершенных кристаллических решеток fcc/hcp/ico/bcc. Такая информация представлена на рис. 5, на котором показаны вариации q_l , w_l на плоскости q_4q_6 при различных малых (при которых частица не меняет своих ближайших соседей) искажениях указанных совершенных решеток: при деформациях сдвига, растяжения/сжатия и кручения. Отметим, что рассмотренные деформации приводят, как правило, к уменьшению параметра q₆ для всех типов кристаллической решетки. Отметим также, что локальные инварианты особенно чувствительны к торсионному искажению решетки и в меньшей степени — к сдвиговым и компрессионным деформациям. Данные рис. 5 позволяют легко обнаружить на рис. 4 в деформированные растяжением решетки hcp/fcc и квазикристаллическую фазу (результат торсионного искажения решетки fcc/hcp).

Таким образом, в настоящей работе, используя метод молекулярной динамики, исследовалось влияние удерживающего потенциала (конфайнмента) на кристаллизацию системы частиц Юкавы в трехмерных узких каналах. Рассмотрены случаи конфайнмента — параболического и жесткой стенки, реализующие модели «мягкого» и «жесткого» удерживающих потенциалов. Указанные виды конфайнмента приводят к разному поведению плотности микрочастиц у границ, что, в свою очередь, оказывает сильное влияние на локальный порядок и тип кристаллической решетки в такой системе. Сжатие/расширение рассмотренной трехслойной системы Юкавы приводит к бифуркации порядка и формированию соответственно двух/четырехслойной системы, при этом значительно меняется плотность частиц и их распределение по слоям в поперечном направлении, что позволяет легко манипулировать потоком микрочастиц в такой системе, что, в свою очередь, может быть исключительно важным в нано/микромеханике и в физике нано/микрожидкостей.

ЛИТЕРАТУРА

- 1. P. K. Shukla and A. A. Mamun, Introduction to Dusty Plasmas Physics, IOP (2002).
- 2. V. E. Fortov et al., Phys. Rep. 421, 1 (2005).
- 3. M. Horanyi et al., Rev. Geophys. 42, RG4002 (2004).
- 4. В. А. Klumov, S. V. Vladimirov, and G. E. Morfill, Письма в ЖЭТФ 85, 584 (2007).
- 5. В. А. Klumov, S. I. Popel, and R. Bingham, Письма в ЖЭТФ 72, 524 (2000).
- Б. А. Клумов, Г. Е. Морфилл, С. И. Попель, ЖЭТФ 127, 171 (2005).
- 7. Б. А. Клумов, С. В. Владимиров, Г. Е. Морфилл, Письма в ЖЭТФ 82, 714 (2005).
- B. A. Klumov and G. Morfill, Pis'ma v Zh. Eksp. Teor. Fiz. 87, 409 (2008).
- 9. В. Е. Фортов, Ю. Н. Гнедин, М. Ф. Иванов, А. В. Ивлев, Б. А. Клумов, УФН 166, 391 (1996).
- 10. G. Morfill et al., Contrib. Plasma Phys. 44, 450 (2004).
- 11. G. Morfill et al., Phys. Scripta T107, 59 (2004).
- 12. G. Morfill et al., Phys. Rev. Lett. 92, 175004 (2004).
- 13. M. Rubin-Zuzic et al., Nature Phys. 2, 181 (2006).
- 14. Б. А. Клумов, М. Рубин-Зузич, Г. Е. Морфилл, Письма в ЖЭТФ 84, 636 (2006).
- 15. H. K. Christenson, J. Phys.: Condens. Matter 13, R95 (2001).
- Alba-Simionesco C. et al., J. Phys.: Condens. Matter 18, R15 (2006).
- 17. R. D. Deegan et al., Nature 389 (6653), 827 (1997).
- 18. M. G. Clerk et al., Nature Phys. doi:10.1038/nphys884 (2008).
- **19**. Б. А. Клумов, Г. Е. Морфилл, Письма в ЖЭТФ **85**, 604 (2007).
- **20**. Б. А. Клумов, Г. Е. Морфилл, Письма в ЖЭТФ **87**, 477 (2008).
- 21. M. Schmidt and H. Lowen, Phys. Rev. E 55, 7228 (1997).

- 22. A. Fortini and M. Dijkstra, J. Phys: Condens. Matter 18, L371 (2006).
- 23. J. H. Chu and L. I, Phys. Rev. Lett. 72, 4009 (1994).
- 24. H. Thomas et al., Phys. Rev. Lett. 73, 652 (1994).
- 25. H. Ikezi, Phys. Fluids 29, 1764 (1986).

- 26. L. W. Teng, P. S. Tu, and L. I, Phys. Rev. Lett. 90, 245004 (2003).
- 27. S. Hamaguchi, R. T. Farouki, and D. H. E. Dubin, Phys. Rev. E 56, 4671 (1997).
- 28. P. J. Steinhardt, D. R. Nelson, and M. Ronchetti, Phys. Rev. B 28, 784 (1983).
- 29. S. Auer and D. Frenkel, J. Chem. Phys. 120, 3015 (2004).