

АМПЛИТУДНАЯ НЕУСТОЙЧИВОСТЬ В ДВУМЕРНЫХ ГЕКСАГОНАЛЬНЫХ КЛАСТЕРАХ

О. С. Ваулина*

*Объединенный институт высоких температур Российской академии наук
125412, Москва, Россия*

*Московский физико-технический институт (государственный университет)
141700, Долгопрудный, Московская обл., Россия*

Поступила в редакцию 10 мая 2018 г.

Выполнены исследования условий формирования амплитудных неустойчивостей в двумерных системах Юкавы, состоящих из семи заряженных частиц. Рассмотрен аналитический подход для поиска критерия развития таких неустойчивостей, основанный на определении точки перегиба потенциальной энергии системы при отклонении частиц от своего равновесного положения. Приведено сравнение полученных результатов с критериями плавления для протяженных двумерных систем.

DOI: 10.1134/S0044451018090134

1. ВВЕДЕНИЕ

Вопросы формирования различных неустойчивостей в неидеальных средах вызывают постоянный интерес в различных областях науки и техники [1–9]. Небольшое изменение управляющих параметров в изначально равновесных системах (таких, например, как градиенты внешнего поля, величина и/или градиенты зарядов частиц и т. д.) способны вызвать существенное изменение их структурных или динамических характеристик за счет развития либо абсолютных (диссипативных), либо конвективных (дисперсионных) неустойчивостей [7–14]. Кроме того, системы взаимодействующих частиц могут терять устойчивость с ростом амплитуды их отклонений от изначально равновесных позиций (например, при увеличении температуры частиц).

Большинство методов для исследования условий формирования неустойчивостей в неидеальных средах опирается либо на анализ линеаризованных уравнений движения взаимодействующих частиц, либо на поиск минимума потенциальной (или внутренней) энергии системы [10–20]. Первый из подходов ограничен необходимым условием малости отклонения (смещения) частиц от их равновесного положения, второй же является более фундаменталь-

ным и зачастую используется для определения ориентации несферических заряженных частиц в поле ловушки [15, 16], критериев плавления и условий формирования различных кристаллических решеток [11, 17–20] и т. д.

Невозможность корректного применения линеаризованных уравнений движения для описания нелинейных процессов (возникающих, например, с ростом температуры частиц) привела к широкому использованию разнообразных феноменологических критериев в теории плавления кристаллических сред. Так, для определения параметров вблизи линий плавления кристаллических решеток широко используются следующие критерии: 1) отношение корня из среднеквадратичного отклонения к среднему межчастичному расстоянию (критерий Лидемана); 2) величина первого максимума g_m парной корреляционной функции $g(l)$ (критерий Хансена); 3) отношение первого максимума функции $g(l)$ к ее первому минимуму при $l \neq 0$, изменение положения g_m и т. д. [1, 2, 20, 21]. Здесь l — расстояние между частицами. Однако величины перечисленных критических параметров могут заметно зависеть от типа решетки, а применение таких критериев для ограниченных и/или малоразмерных кластерных систем зачастую не является возможным [18, 20, 22].

В настоящей работе для анализа условий изменения физических характеристик кластерных систем с ростом температуры предлагается исследовать их

* E-mail: olga.vaulina@bk.ru

амплитудную устойчивость, т. е. устойчивость к любым (а не только к малым) отклонениям частиц от их равновесного положения. Данный подход основан на поиске точки перегиба потенциальной энергии системы с ростом смещений взаимодействующих частиц и ранее успешно использовался для систем Юкавы, состоящих из двух частиц, во внешнем электрическом поле асимметричной ловушки [23].

Расчеты проводились для двумерных систем, состоящих из семи частиц, взаимодействующих с экранированным кулоновским потенциалом (типа Юкавы) $\varphi = Q \exp(-l/\lambda)/l$; здесь Q — заряд частиц, λ — длина экранирования. Отметим, что численное и экспериментальное исследования динамических характеристик кластерной системы, состоящей из семи заряженных пылевых частиц, недавно представлены в работе [22].

Найдена величина параметра $\Gamma_0 = Q^2/Tl_0$ вблизи линии формирования амплитудной неустойчивости анализируемых систем; где T — температура частиц в энергетических единицах, l_0 — наиболее вероятное межчастичное расстояние, которое совпадает с шагом кластера (шагом «решетки»). Здесь и далее под температурой частиц принимается средняя кинетическая энергия их стохастического движения [1–3].

Выполнено сравнение полученных результатов с кулоновским параметром неидеальности, $\Gamma = Q^2/Tl_p$, вблизи линий плавления–кристаллизации протяженных двумерных систем Юкавы:

$$\Gamma_m = C \frac{\exp(\kappa^*)}{1 + \kappa^* + \kappa^{*2}/2}. \quad (1)$$

Здесь l_p — среднее межчастичное расстояние (которое в случае протяженных двумерных кристаллических систем с примитивной гексагональной решеткой определяется как $l_p = (\sqrt{3}/2)^{1/2}l_0$), $\kappa^* = l_p/\lambda$ — параметр экранирования, а величина коэффициента C несколько различается в зависимости от способа, выбранного для идентификации фазового перехода. Так, например, значение C может меняться в диапазоне от $C \approx 70 \pm 10$ [24–28] (по результатам анализа динамического поведения корреляционных функций и глобального параметра порядка) до $C \approx 100 \pm 4$ [29–39] (по результатам анализа температурной зависимости внутренней энергии системы, критерия Линдемана, коэффициента диффузии частиц, пространственного поведения ориентационной корреляционной функции и т. д.).

2. УСЛОВИЯ ФОРМИРОВАНИЯ АМПЛИТУДНОЙ НЕУСТОЙЧИВОСТИ В ГЕКСАГОНАЛЬНОМ КЛАСТЕРЕ

Анализ условий формирования амплитудных неустойчивостей для двумерных систем, состоящих из семи частиц, взаимодействующих с экранированным кулоновским потенциалом, выполнялся в широком диапазоне параметров экранирования $\kappa = l_0/\lambda$ (от $\kappa = 0$ до $\kappa = 8$). Отметим, что величина $\kappa = \kappa^*(2/\sqrt{3})^{1/2}$.

Заряженные частицы находились во внешнем электрическом поле $E(r) = \alpha r$ ловушки с радиальной симметрией; здесь $r \equiv (x^2 + y^2)^{1/2}$, где x и y — координаты частиц относительно центра ловушки, α — величина градиента электрического поля. Величина α связана с параметрами исследуемого гексагонального кластера (см. рис. 1) и определяется балансом сил, действующих в равновесной системе:

$$Q\alpha l_0 = \frac{Q^2}{l_0^2} \left\{ 2 \exp(-\kappa)(1+\kappa) + \exp(-2\kappa) \frac{1+2\kappa}{4} + \exp(-\sqrt{3}\kappa) \frac{1+\sqrt{3}\kappa}{\sqrt{3}} \right\}. \quad (2)$$

Зависимость отношения $\alpha/(Ql_0^{-3})$ от параметра экранирования κ показана на рис. 2.

Для исследования амплитуды неустойчивости системы, состоящей из семи частиц, взаимодействующих с экранированным кулоновским потенциалом, рассматривалось поведение ее потенциальной энергии при отклонениях данных частиц от их равновесного положения. В этом случае для потенциальной энергии анализируемой системы имеем

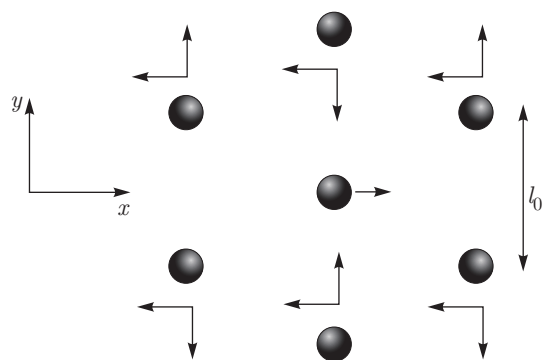


Рис. 1. Иллюстрация положения частиц в двумерном гексагональном кластере. Стрелками показаны направления смещений частиц вблизи линии формирования амплитудной неустойчивости

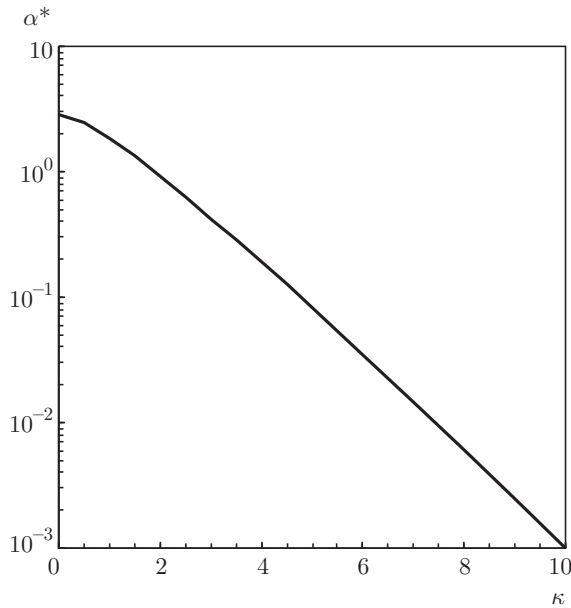


Рис. 2. Зависимость относительного значения $\alpha^* = \alpha / (Q^2 l_0^{-3})$ от параметра экранирования κ

$$U = \frac{Q\alpha}{2} \sum_{i=1}^7 (r_i + \delta r_i)^2 + 2 \sum_{i=1}^7 \sum_{j=1, j \neq i}^7 \frac{Q^2 \exp(-\kappa(l_{ij} + \delta l_{ij})/l_0)}{l_{ij} + \delta l_{ij}}, \quad (3)$$

где r_i — радиальные положения частиц при $T = 0$, l_{ij} — расстояния между ними ($T = 0$), а $\delta l_{ij} = f(\delta x_i, \delta y_i)$, $\delta r_i = f(\delta x_i, \delta y_i)$ и $\delta x_i, \delta y_i$ — отклонения частиц от их равновесного положения за счет тепловых флуктуаций ($i = 1, 2, \dots, 7; j = 1, 2, \dots, 7$). Таким образом, потенциальная энергия системы $U = U(x, y)$ является функцией переменных δx_i и δy_i .

Полные пространственные производные U' функции $U = U(x, y)$ (по переменной x или y) могут быть записаны как [40]

$$U'_x \equiv \frac{dU}{dx} = \frac{\partial U}{\partial x} + \frac{\partial U}{\partial y} \frac{dy}{dx},$$

$$U'_y \equiv \frac{dU}{dy} = \frac{\partial U}{\partial y} + \frac{\partial U}{\partial x} \frac{dx}{dy}.$$

Вторая пространственная производная U'' потенциальной энергии системы вычисляется аналогичным образом, путем замены функции U на функцию U' .

Первая производная U' потенциальной энергии U (3) в точке $\delta x = \delta y = \delta r \equiv 0$ равна нулю и соответствует равновесному состоянию системы, а ее вторая производная U'' в точке перегиба ($\delta x_i = \delta x_{0i}$,

$\delta y_i = \delta y_{0i}; i = 1, 2, \dots, 7$) отвечает за устойчивость системы при различных смещениях частиц.

Иллюстрация относительных значений $U^* = U / (Q^2 l_0^{-1})$, а также первой U'^* и второй U''^* производных величины U^* представлена на рис. 3 для двух разных параметров экранирования κ в условиях, близких к условиям формирования амплитудной неустойчивости, а именно: $\delta x_{0k} \cong -\delta x_{01}, |\delta y_{0k}| \cong \cong \text{const}, \delta y_{01} = 0$. Здесь $\delta x_{01}, \delta y_{01}$ — смещения центральной частицы кластера, а δx_{0k} и δy_{0k} — смещения частиц «оболочки», см. рис. 1. (Дифференцирование проводилось по переменной y .)

Глубина потенциальной ямы рассматриваемых систем определяется как $\Delta U = U(\delta x_0, \delta y_0) - U(0, 0)$, где $\delta x_{0i}, \delta y_{0i}$ — значения смещений $(\delta x_i, \delta y_i)$ частиц в точках перегиба. Можно предположить, что развитие амплитудной неустойчивости в анализируемых кластерах будет происходить, когда минимальное (среди всех возможных) значение $\Delta U = \Delta_{\min} U$ на одну частицу системы будет меньше их температуры T : $\Delta_{\min} U / 7 < T$. Данное условие можно представить в виде

$$\Gamma_0 < \Gamma_c = \frac{7Q^2}{l_0 \Delta_{\min} U^*}. \quad (4)$$

Зависимость от κ параметра Γ_c вблизи линии развития амплитудной неустойчивости в рассматриваемых системах представлена на рис. 4. Там же показаны данные об условиях плавления протяженных систем $\Gamma_m(\kappa)$ при $C = 100$, а также точки, обозначающие границы фазового перехода жидкость — квазикристаллическое состояние, найденные по результатам численного моделирования динамической энтропии в двумерной кластерной системе из семи заряженных частиц, которые были представлены в работе [22].

Зависимость $\Gamma_m(\kappa) / \Gamma_c(\kappa)$ показана на рис. 5. Таким образом, наблюдалась пропорциональность условий развития амплитудной неустойчивости в гексагональном кластере критериям плавления протяженных двумерных систем с примитивной гексагональной решеткой при некоторых различиях в 5–10% в области $\kappa < 1.5$. Отсюда следует, что представленные результаты существенно отличаются от численных результатов, полученных для двух взаимодействующих частиц [23], где величина $\Gamma_c(\kappa)$ хорошо описывалась функцией, пропорциональной $\exp(\kappa) / (1 + \kappa)$.

Зависимость относительных радиальных смещений частиц, $\delta r_0 / l_0$ (усредненная по всем частицам системы), в точке перегиба, соответствующей случаю минимальной глубины потенциальной ямы, от

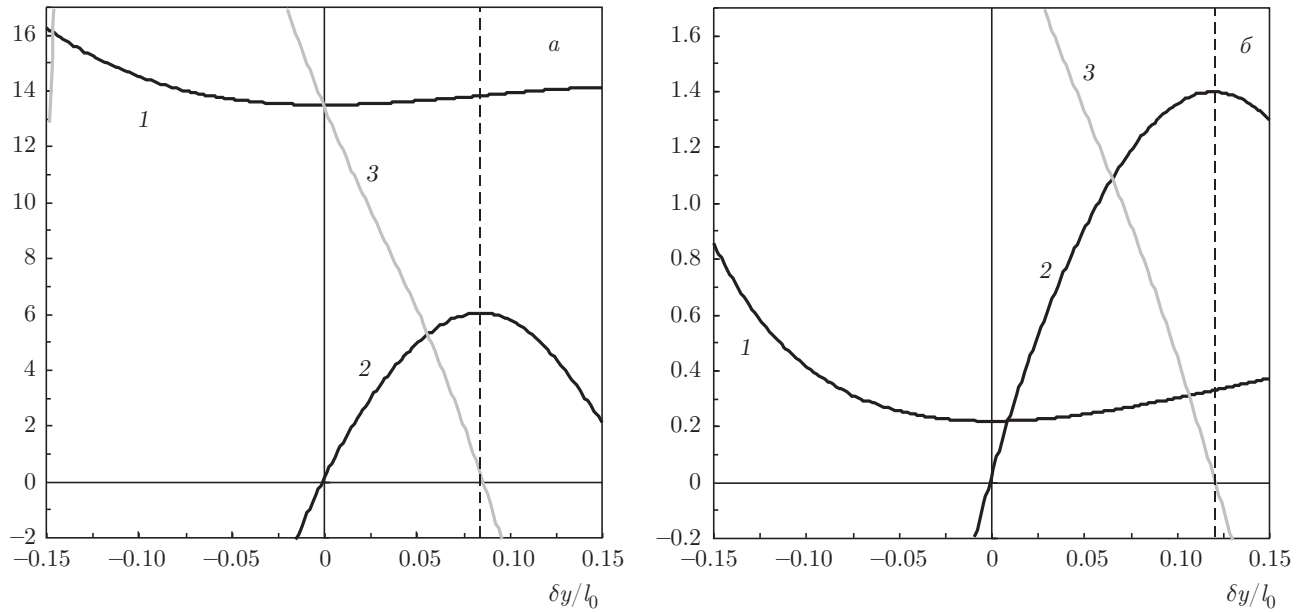


Рис. 3. Зависимости U^* (1), $U^{*'} (2)$, $U^{*''}/10$ (3) от $\delta y/l_0$ для $\kappa = 0$, $\delta x_0 \cong 2.4\delta y_0$ (а); $\kappa = 4$, $\delta x_0 \cong 1.8\delta y_0$ (б) (сплошные линии). Штриховыми линиями показаны положения точки перегиба ($\delta x_0, \delta y_0$)

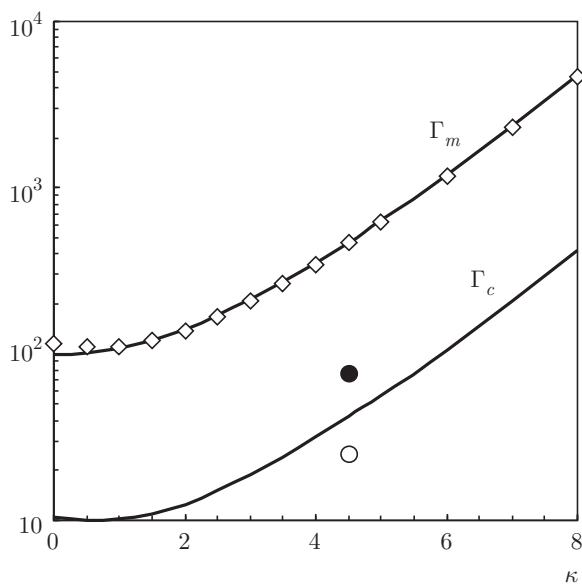


Рис. 4. Зависимости $\Gamma_c(\kappa)$ (4) и $\Gamma_m(\kappa)$ (1) (сплошные линии). Символы: \diamond — $11.25 \Gamma_c(\kappa)$; \bullet , \circ — квазикристаллическое ($\Gamma_0 \approx 76$; \bullet) и жидкостное ($\Gamma_0 \approx 25$; \circ) состояния [22]

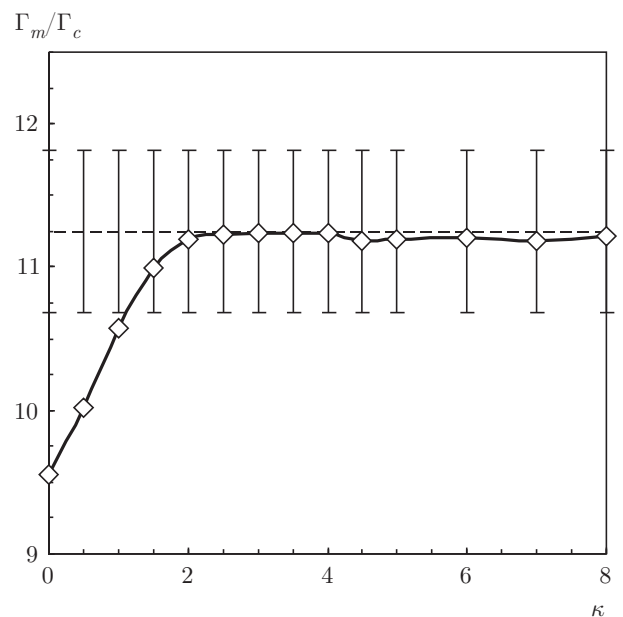


Рис. 5. Зависимость отношения Γ_m/Γ_c от параметра экранирования κ . Обозначено отклонение в 5% от величины равной $\Gamma_m/\Gamma_c = 11.25$

параметра экранирования κ показана на рис. 6. Легко увидеть, что для всех анализируемых параметров экранирования величина $\delta r_0/l_0 \cong 0.22 \pm 5\%$, что с точностью до постоянного коэффициента хорошо согласуется с результатами, полученными для протяженных двумерных систем: $\delta r_p/l_p \cong 0.11 \pm 2\%$ [32].

3. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Выполнены исследования условий формирования амплитудных неустойчивостей в двумерных кластерах, состоящих из семи заряженных частиц.

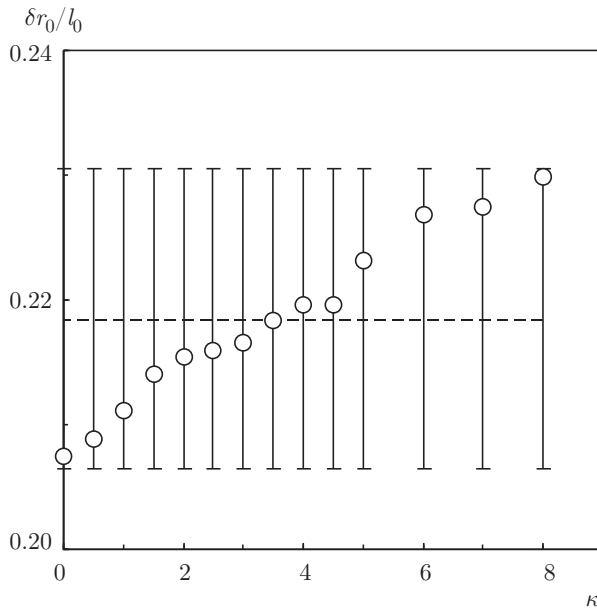


Рис. 6. Зависимость отношения $\delta r_0 / l_0$ от параметра экранирования κ . Обозначено отклонение в 5%

Расчеты выполнялись для экранированного кулоновского взаимодействия частиц (типа Юкавы) в широком диапазоне параметров экранирования κ .

Рассмотрен аналитический подход для поиска критерия развития таких неустойчивостей, основанный на определении точки перегиба потенциальной энергии системы при отклонении частиц от своего равновесного положения. Получена зависимость параметра $\Gamma_c = \Gamma_0 \equiv Q^2 / T l_0$ от параметра экранирования κ вблизи линии развития амплитудной неустойчивости.

Выполнено сравнение полученных результатов с фазовыми кривыми $\Gamma_m(\kappa)$ для протяженных двумерных систем с примитивной гексагональной решеткой. Получено хорошее согласие между формами функций $\Gamma_c(\kappa)$ и $\Gamma_m(\kappa)$.

Результаты настоящей работы применимы для систем с любым типом взаимодействий и могут быть полезны для качественного анализа динамики протяженных систем, которые представляют интерес в физике плазмы, медицине, биологии, физике полимеров и коллоидных систем.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ (грант № 16-08-00594), а также в рамках Программы Президиума РАН.

ЛИТЕРАТУРА

1. О. С. Ваулина, О. Ф. Петров, В. Е. Фортов, А. Г. Храпак, С. А. Храпак, *Пылевая плазма эксперимент и теория*, Физматлит, Москва (2009).
2. *Complex and Dusty Plasmas*, ed. by V. E. Fortov and G. E. Morfill, CRC Press (2010).
3. A. Ivlev, G. Morfill, H. Lowen, and C. P. Royall, *Complex Plasmas and Colloidal Dispersions: Particle-Resolved Studies of Classical Liquids and Solids*, World Sci., Singapore (2012).
4. *Photon Correlation and Light Beating Spectroscopy*, ed. by H. Z. Cummins and E. R. Pike, Plenum, New York (1974).
5. А. А. Овчинников, С. Ф. Тимашев, А. А. Белый, *Кинетика диффузионно-контролируемых химических процессов*, Химия, Москва (1986).
6. B. Pullman, *Intermolecular Interactions: from Diatomics to Biopolymers*, Wiley Intersci., Chichester (1978).
7. R. K. Dodd, J. C. Eilbeck, J. D. Gibbon, and H. C. Morris, *Solitons and Nonlinear Wave Equations*, Acad. Press, London–New York (1982).
8. R. Balescu, *Equilibrium and Nonequilibrium Statistical Mechanics*, Wiley Intersci., Chichester (1975).
9. E. M. Lifshitz and L. P. Pitaevskii, *Physical Kinetics*, Pergamon Press, Oxford (1981).
10. O. S. Vaulina, X. G. Adamovich, and S. V. Vladimirov, *Phys. Scripta* **79**, 035501 (2009).
11. I. I. Lisina and O. S. Vaulina, *Europhys. Lett.* **103**, 55002 (2013).
12. О. С. Ваулина, И. И. Лисина, К. Г. Косс, *Физика плазмы* **39**, 455 (2013).
13. О. С. Ваулина, А. П. Нефедов, О. Ф. Петров, В. Е. Фортов, *ЖЭТФ* **118**, 351 (2000).
14. O. S. Vaulina, *Europhys. Lett.* **115**, 10007 (2016).
15. A. V. Ivlev, A. G. Khrapak, S. A. Khrapak, B. M. Anaratone, G. Morfill, and K. Yoshino, *Phys. Rev. E* **68**, 026403 (2003).
16. I. Lisina, E. Lisin, and O. Vaulina, *Phys. Plasmas* **23**, 033704 (2016).
17. S. Hamaguchi, R. T. Farouki, and D. H. E. Dubin, *Phys. Rev. E* **56**, 4671 (1997).
18. D. H. Dubin and H. Dewitt, *Phys. Rev. B* **49**, 3043 (1994).

19. W. G. Hoover, D. A. Young, and R. Grover, *J. Chem. Phys.* **56**, 2207 (1972).
20. O. S. Vaulina and X. G. Koss, *Phys. Rev. E* **92**, 042155 (2015).
21. O. S. Vaulina and S. V. Vladimirov, *Plasma Phys.* **9**, 835 (2002).
22. К. Г. Косс, О. Ф. Петров, М. И. Мясников, К. Б. Стаценко, М. М. Васильев, *ЖЭТФ* **149**, 1 (2016).
23. I. I. Lisina, O. S. Vaulina, and E. A. Lisin, *Phys. Plasmas* **24**, 113705 (2017).
24. I. V. Schweigert, V. A. Schweigert, and F. M. Peeters, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 5293 (1999).
25. S. Muto and H. Aoki, *Phys. Rev. B* **59**, 14911 (1999).
26. P. Hartmann, G. J. Kalman, and Z. Donko, *J. Phys. A: Math. Gen.* **39**, 4485 (2006).
27. A. Derzsi, A. Zs. Kovacs, Z. Donko, and P. Hartmann, *Phys. Plasmas* **21**, 023706 (2014).
28. K. Zahn and G. Maret, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 3656 (2000).
29. O. S. Vaulina, X. G. Koss, Yu. V. Khrustalyov, O. F. Petrov, and V. E. Fortov, *Phys. Rev. E* **82**, 056411 (2010).
30. O. S. Vaulina and I. E. Drangevski, *Phys. Scripta* **73**, 577 (2006).
31. O. S. Vaulina and X. G. Koss (Adamovich), *Phys. Lett. A* **373**, 3330 (2009).
32. O. S. Vaulina and X. G. Koss, *Phys. Lett. A* **378**, 3475 (2014).
33. O. S. Vaulina and E. V. Vasilieva, *Europhys. Lett.* **106**, 65001 (2014).
34. O. S. Vaulina and E. V. Vasilieva, *Phys. Lett. A* **378**, 719 (2014).
35. Wei-Kai Qi, Ziren Wang, Yilong Han, and Yong Chen, *J. Chem. Phys.* **133**, 234508 (2010).
36. H. Lowen, *J. Phys.: Condens. Matter* **4**, 10105 (1992).
37. X. H. Zheng and J. C. Earnshaw, in *Advances in Dusty Plasma*, ed. by P. K. Shukla, D. A. Mendis, and T. Desai, Word Sci., Singapore (1997).
38. X. H. Zheng and J. C. Earnshaw, *Europhys. Lett.* **41**, 635 (1998).
39. B. K. Clark, M. Casula, and D. M. Ceperley, *Phys. Rev. Lett.* **103**, 055701 (2009).
40. И. Н. Бронштейн, К. А. Семендяев, *Справочник по математике для инженеров и учащихся втузов*, Наука, Москва (1986).