

04;05;12

©1995

СТРУКТУРА КРИСТАЛЛА МИКРОЧАСТИЦ В ПРИЭЛЕКТРОДНОМ СЛОЕ ВЫСОКОЧАСТОТНОГО РАЗРЯДА

В.А.Швейгерт, М.С.Обрепт

Одним из наиболее интересных эффектов в плазме с конденсированной дисперсной фазой является пространственное упорядочение частиц, предсказанное в [1] и обнаруженное в ряде экспериментов [2-4]. В плазме частицы приобретают отрицательный заряд eZ , и потенциал частицы eZ/R с радиусом R относительно плазмы составляет несколько электронных температур. В зависимости от размерности вигнеровская кристаллизация происходит при $\Gamma_* = e^2 Z^2 / aT = 140-170$, где a — расстояние между частицами, T — температура частиц, которая равна температуре газа [5,6]. Параметр Γ примерно квадратично растет с увеличением размеров частиц и для достаточно больших частиц $\Gamma \gg \Gamma_*$ при характерных для эксперимента объемных плотностях частиц $n_v = 10^3-10^4 \text{ см}^{-3}$. Для трехмерных систем считается, что вигнеровский кристалл должен представлять объемоцентрированную кубическую решетку, которая обладает наименьшей статической энергией [5]. В двумерном случае наиболее выгодна гексагональная решетка [7]. В эксперименте вигнеровский кристалл представляет собой несколько слоев частиц, причем в различных экспериментах наблюдался различный тип упаковки [2-4]. Поскольку в эксперименте существует разброс частиц по размерам, то наблюдается скорее аморфное, чем кристаллическое состояние, что осложняет однозначное определение типа решетки. Ниже проводится численный расчет оптимальной структуры слоистого кристалла, находящегося в поле тяжести и поле объемного заряда ионов, для гексагональной и квадратной двумерной решетки Браве.

В квазинейтральной плазме потенциал частицы приблизительно описывается законом Дебая-Хюккеля [8]. Однако используемые в экспериментах частицы с характерными размерами $R = 5-15 \text{ мкм}$ из-за силы тяжести находятся не в квазинейтральной плазме, а в приэлектродном слое, где существует большое постоянное электрическое поле, препятствующее падению частиц на электрод. Согласно [9], в первом приближении экранировкой частиц в приэлектрод-

ном слое можно пренебречь и учитывать только заряды изображений в плазме и в электроде. При расчетах энергий решеток с кулоновским потенциалом взаимодействия обычно применяют метод Эвальда. Мы использовали модификацию этого метода, позволяющую найти энергию решетки, состоящей из нескольких слоев, когда периодичность в продольном направлении отсутствует. Опуская довольно громоздкие выкладки, приведем конечные результаты для однородной плотности ρ объемного заряда в слое. В этом случае можно выделить часть полной энергии решетки, которая зависит только от положения центра масс решетки $z_a = N^{-1} \sum z_i$:

$$E_a = 2\pi e Z \rho z_a - g M z_a + 2\pi e^2 Z^2 n_s (z_a - z_a^2/d),$$

где z_i — продольные координаты частиц; g — ускорение силы тяжести; M — масса частицы; d — толщина приэлектродного слоя; N — число частиц в элементарной ячейке решетки с площадью S ; $n_s = N/S$ — поверхностная плотность частиц. Здесь и ниже фигурирует энергия, приходящаяся на одну частицу. Оставшаяся часть полной энергии решетки зависит только от взаимного расположения частиц r_{ij} . Именно она определяет вид решетки. Введение безразмерных переменных для координат $\mathbf{r} = \mathbf{r}/r_*$ и энергии $E' = E/E_*$, где $r_* = (eZ/2\pi\rho)^{1/3}$, $E_* = (2\pi e^2 Z^2 \rho)^{1/3}$ позволяет выделить единственный безразмерный параметр $n' = n_s (eZ/2\pi\rho)^{2/3}$, от которого зависит тип решетки. Убирая штрихи у безразмерных переменных, приведем развернутое выражение для энергии:

$$E \cdot N = -\frac{Np}{\sqrt{\pi}} + \sum_i z_i^2 + \sum_{i>j} \sum_a \frac{\operatorname{erfc}(p|\mathbf{r}_{ij} - \mathbf{a}|)}{|\mathbf{r}_{ij} - \mathbf{a}|} -$$

$$- \frac{2\pi}{S} \sum_{i \geq j} \left(z_{ij} \operatorname{erf}(z_{ij}) + \frac{e^{-p^2 z_{ij}^2}}{p\sqrt{\pi}} - \right.$$

$$\left. - \sum_b \frac{1}{2\kappa} \left(e^{\kappa z_{ij}} \operatorname{erfc}\left(\frac{\kappa}{2p} + pz_{ij}\right) + e^{-\kappa z_{ij}} \operatorname{erfc}\left(\frac{\kappa}{2p} - pz_{ij}\right) \right) e^{i\mathbf{b}\rho_{ij}} \right),$$

где при суммировании векторы \mathbf{a} , \mathbf{b} пробегает по всем векторам прямой и обратной решетки, ρ — поперечные координаты, $\kappa = |\mathbf{b}|$, erf — интеграл ошибок, $\operatorname{erfc}(x) = 1 - \operatorname{erf}(x)$, параметр p определяет скорость сходимости сумм. Ниже везде используются безразмерные переменные.

Поиск оптимальной решетки осуществлялся следующим образом. Поскольку кристалл ограничен в продольном направлении, он является, строго говоря, двумерным. Рассматривалось два типа двумерной решетки Браве — гексагональная и квадратная. При заданной плотности частиц менялось число частиц в элементарной ячейке. Для различных случайных начальных координат методом Ньютона определялись конечные оптимальные конфигурации. Эти расчеты показали, что стабильными являются только плотные упаковки, в которых решетки в соседних слоях сдвинуты относительно друг друга. Поэтому в дальнейшем рассматривались именно плотные гексагональная и объемноцентрированная тетрагональная упаковки. При заданной плотности частиц и разном числе слоев N сначала методом Ньютона находились оптимальные значения продольных координат z_i и соответствующие им энергии решетки. Затем выбиралась конфигурация с числом слоев, при котором достигается минимальная энергия, приходящаяся на одну частицу. При малой плотности все частицы располагаются в одной плоскости $z = 0$. Для этого случая энергии гексагональной $E \approx -1.964\sqrt{n}$ и квадратной $E \approx -1.950\sqrt{n}$ решетки совпадают с данными [7]. С увеличением плотности растет кулоновское расталкивание частиц и возникает слоистая структура. Для квадратной решетки возникновение первых двух слоев возможно с удвоением периода решетки, когда соседние частицы смещаются в противоположном по z направлении. Поэтому начиная с плотности $n \approx 0.305$ расстояние между слоями плавно увеличивается (рис. 1, а) с ростом плотности, что соответствует фазовому переходу второго рода [10]. Для гексагональной решетки возможно только плавное утроение периода [10]. Но при низ-

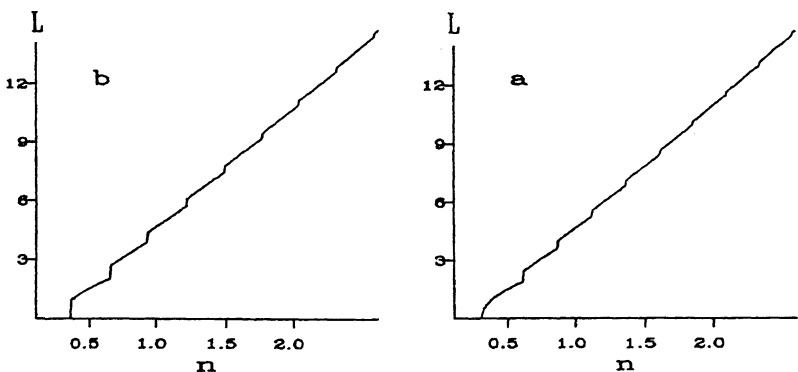


Рис. 1. Зависимость толщины кристалла L от плотности частиц для тетрагональной (а) и гексагональной (б) упаковок.

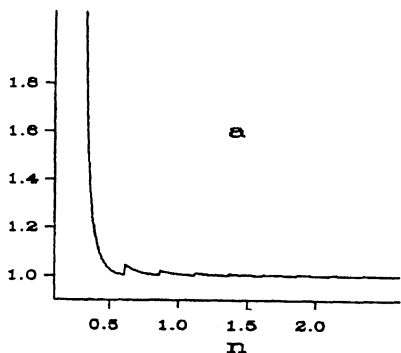
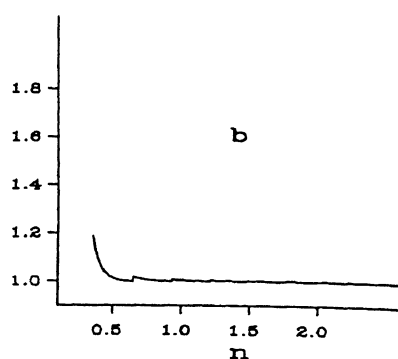
$2\pi n_V$  $2\pi n_V$ 

Рис. 2. Зависимость объемной плотности частиц n_V от поверхностной для тетрагональной (а) и гексагональной (б) упаковок.

кой плотности трехслойная структура невыгодна и сначала скачкообразно возникает решетка с двумя слоями (рис. 1, б), что отвечает фазовому переходу первого рода [10], который происходит при $n \approx 0.355$. С дальнейшим ростом плотности продольный размер кристалла меняется скачкообразно как в гексагональной, так и в квадратной решетке. При этом энергия решетки меняется плавно. Наблюдаются скачки первой производной для фазовых переходов первого рода и скачки второй производной для фазовых переходов второго рода. С увеличением плотности скачкообразное изменение всех параметров решетки становится менее заметным $\sim 1/N$ из-за увеличения числа слоев. Разброс в расстояниях между соседними слоями незначителен 0.1–1%, и решетку можно рассматривать как периодическую и в продольном

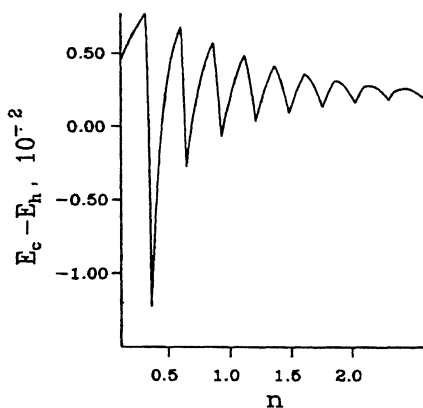


Рис. 3. Разность энергии тетрагональной E_c и гексагональной E_h решеток в зависимости от плотности частиц.

направлении. Среднее расстояние между слоями приблизительно соответствует случаю плотной упаковки для гексагональной и объемноцентрированной кубической решетки. Объемная плотность решетки сразу после образования двух слоев уменьшается с ростом плотности и далее изменяется, слабо стремясь к пределу $1/2\pi$ (рис. 2). Для решеток с $N = 2-4$ существуют диапазоны изменения плотности, где объемноцентрированная тетрагональная упаковка более выгодна, чем плотная гексагональная (рис. 3). При $N \geq 5$ всегда более предпочтительна гексагональная решетка.

Основные закономерности поведения слоистого кристалла во внешнем поле легко объяснимы с помощью приближения сплошной среды. В равновесии действующая на частицу сила тяжести должна быть уравновешена электрическим полем объемного заряда в слое и заряда самой решетки. Поскольку сила тяжести постоянна, то в приближении сплошной среды абсолютная величина плотности заряда решетки с несколькими слоями должна равняться плотности объемного заряда (рис. 2). Расстояние между соседними слоями можно приблизительно найти из условия плотной упаковки и таким образом определить все параметры решетки при заданной плотности объемного заряда электронов и ионов.

Выражаем благодарность А. Melzer и А. Piel за предоставление оттисков работ до их опубликования в печати. Работа осуществлена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант 94-02-03326) и INTAS (грант 740).

Список литературы

- [1] Ikezi H. // Phys. Fluids. 1986. V. 29. P. 1764-1766.
- [2] Chu. J.H., Lin I. // Phys. Rev. Lett. 1994. V. 72. P. 4009-4012.
- [3] Thomas ., Morfill G.E., Demmel V. et al. // Phys. Rev. Lett. 1994. V. 73. P. 652-655.
- [4] Melzer A., Trotenberg T., Piel A. // Phys. Lett. A. 1994. V. 191. P. 301-308.
- [5] Baus M., Hansen J.P. // Phys. Rep. 1980. V. 59. P. 1-94.
- [6] Morf R.H. // Phys. Rev. Lett. 1979. V. 43. P. 931-935.
- [7] Bonsall L., Maradudin A.A. // Phys. Rev. B. 1977. V. 15. P. 1959-1973.
- [8] Choi S.J., Kushner M.J. // J. Appl. Phys. 1994. V. 75. P. 3351-3357.
- [9] Швейгерт В.А. Письма в ЖТФ. 1994. Т. 21. В. 10. С.
- [10] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Статистическая физика. М.: Наука, 1976. 583 с.

Институт теоретической
и прикладной механики
СО РАН
Новосибирск

Поступило в Редакцию
17 января 1995 г.