

Fázisátalakulás és kollektív dinamika kétdimenziós sokrészecske rendszerekben

Témavezető: Hartmann Péter
MTA-SZFKI / MTA Wigner FK, SZFI

Bevezető

A jelen pályázatban erősen csatolt, síkbeli sokrészecske rendszerekben megfigyelhető kollektív jelenségek kísérleti és elméleti (elsősorban számítógépes szimulációkon alapuló) tanulmányozását vállaltam. A kísérleteket az általam tervezett "poros plazma" berendezésen végeztem, míg a szimulációkat a csoportunk által üzemeltetett kb. 100 processzoros linux klaszteren futtattam, saját fejlesztésű molekuladinamikai szimulációs programok segítségével.

Az erősen csatolt poros plazmák kísérleti kutatása 1994-ben kezdődött, amikor az első plazmakristályok megvalósításáról számolt be három kutatócsoport egymástól függetlenül, közel egyidejűleg¹. Hamar kiderült, hogy a gázkisülésbe szórt, elektromosan töltött, mikrométeres szilárd szemcsékből álló rendszer kitűnően alkalmas szilárd és folyadék fázisú hagyományos (atomos) anyagok modellezésére. A két rendszerben lejátszódó kollektív jelenségek kvalitatíven azonosak, csak hogy a poros plazmákra jellemző távolság és időskálák a több ezer alkotó szemcse teljes kinetikus megfigyelését lehetővé teszik, amely atomok esetén jelenleg elképzelhetetlen. Laboratóriumi körülmények között síkbeli és kis térbeli struktúrák kelthetők, míg mikrogravitációs körülmények között homogén térbeli porfelhők hozhatók létre. Ennek felismerése vezetett oda, hogy először parabolikus repülésekre, majd az ISS nemzetközi űrállomásra telepítettek poros plazma kísérleteket². A kísérletek mindegyike digitális videomikroszkópián és PTV (particle tracking velocimetry) módszeren alapulnak, vagyis nagy mennyiségű képi információt termelnek, amely képek feldolgozása során kell az egyes részecskéket beazonosítani, azok trajektóriáját meghatározni.

A poros plazma kísérletekhez kapcsolódó numerikus szimulációk általában molekuladinamikai vagy Monte Carlo típusú algoritmusokon alapulnak, közös bennük, hogy a részecskék közötti kölcsönhatást első közelítésben árnyékolt Coulomb (Debye-Hückel, vagy Yukawa) párpotenciállal veszik figyelembe:

$$V(r) = \frac{Q}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^{-r/\lambda}}{r}$$

(ahol Q a részecskék töltése és λ a Debye árnyékolási hossz). Síkbeli rendszereknél ezen közelítés rendkívül sikeres, kitűnő kvantitatív összhangban van a kísérletekkel. Térbeli struktúrák esetén viszont figyelembe kell venni az eddig háttérnek tekintett gázkisülés

¹ Thomas H., Morfill G., Demmel V., Goree J. (1994) "Plasma crystal: Coulomb crystallization in a dusty plasma." *Physical Review Letters*, 73, 652.

Chu J.H., I Lin (1994) "Direct observation of Coulomb crystals and liquids in strongly coupled rf dusty plasmas" *Phys. Rev. Lett.* 72, 4009.

Melzer, A., Trottenberg, T., & Piel, A. (1994) "Experimental determination of the charge on dust particles forming Coulomb lattices." *Physics Letters-Section A*, 191, 301.

² Fortov V., Morfill G (Eds), "Complex and Dusty Plasmas: From Laboratory to Space" CRC Press, Taylor & Francis Group, 2010

töltött-részecske áramait, és azok anizotrop kölcsönhatását a porszemcsékkel. Jelen pályázat keretében, ezen nehézségeket elkerülendő, kizárólag síkbeli rendszereken végeztünk kísérleteket, ahol az említett áramok a porrétegre merőlegesek, így nem befolyásolják a kölcsönhatás izotrópiáját.

A kísérletek és a numerikus szimulációk során az adatgyűjtést követő (esetleg azzal párhuzamos) adatkiértékelés alapvető feladata, hogy a 10^3 - 10^6 részecske mikroszkopikus trajektóriájának ismeretében a rendszert jellemző makroszkopikus mennyiségeket határozzanak meg. Ehhez az alapokat a statisztikus fizika és annak kinetikus elméletei, valamint a hidrodinamika szolgáltatják.

A kutatás célja, kutatási program

A pályázat szerződésében megfogalmazottak szerint kutatási céljaink az alábbiak voltak:

A poros plazma kísérletek terén:

- A kísérleti berendezés összeállításának befejezése, reprodukálható kísérleti protokollok megalkotása.
- Egyensúlyi (termikusan gerjesztett) síkbeli plazmakristályok fázistér-koordinátáinak felvétele, abból statikus (párkorreláció, struktúra függvény), dinamikus (sűrűség-, és áram-fluktuációs spektrumok, hullámdiszperziós relációk) és termodinamikai mennyiségek (nyomás, állapotegyenlet, stb.) meghatározása.
- folyadék-szilárd átalakulás tanulmányozás, amelyet az tesz lehetővé, hogy a kisülési paraméterek finomhangolásával mindkét egyensúlyi állapot előállítható.
- Az adatgyűjtési módszerek optimalizálása, az adatfeldolgozás és az adatgyűjtés egyidejűsítésével, amellyel a rendkívüli nyers adat mennyisége lényegesen redukálható

A szimulációk terén:

- Az alkalmazott numerikus módszerek továbbfejlesztése, annak érdekében, hogy nagyobb részecskeszámú rendszerek (10^6 -ig) is hatékonyan vizsgálhatóak legyenek.
- Az elméleti modell kísérleti eredmények alapján történő továbbfejlesztése.
- Új makroszkopikus mennyiségek meghatározása, amelyek elsősorban a fázisátalakulások vizsgálata során nyújthatnak segítséget.
- Hullámdiszperziók vizsgálata széles hullámszám tartományban, amelyek felvilágosítást adhatnak a gerjesztési és csillapítási mechanizmusok természetéről.
- Fázisátalakulások vizsgálata kanonikus sokaságon, amely eltér a molekuladinamikai szimulációkra jellemző mikro-kanonikus sokaságoktól.

Kutatási eredmények

A pályázat munkája a tervek között felsorolt fő célok irányába folyt, de a számos, időközben felmerült érdekes tudományos kérdés és probléma, illetve a kialakult új nemzetközi kapcsolatok számos nem várt eredmény eléréséhez segítettek hozzá. Az alábbiakban ezeket ismertetem.

Poros plazma kísérletekkel:

- Kétdimenziós plazmakristály longitudinális és transzverzális hullámdiszperzióját határoztuk meg, amely eredményeit egy konferencián mutattuk be³.
- Két különböző szemcseméretű port alkalmazva erősen kölcsönható kettősréteget hoztam létre. Kimutattam a fent említett két akusztikus módus mellett két optikai hullámmódus jelenlétét is, amelyek eredete pusztán a két réteg közötti korrelációkból származik⁴.
- Megvalósítottam a gyors hőmérséklet csökkentést egyrétegű poros plazma rendszerben. Ennek segítségével folyadék állapotú rendszert gyorsítva ("quench"-elve) tanulmányoztam az amorf-kristályos átalakulás időfejlődését. Megállapítottam, hogy az átalakulásnak két szakasza különböztethető meg, mindkét szakaszban a korrelációs hosszak, ill. a kristályszemcsék átmérője időben hatvány függvény szerint növekszik. A kezdeti szakaszában a részecskék ballisztikus mozogása 0.9 körüli exponenst eredményez, míg később, a kollektív átrendeződések szakaszában ez 0.38-ra lassul. Numerikus szimulációk segítségével azonosítottunk jellemző folyamatokat, amelyek a kristályszemcsék összeolvadását és növekedését eredményezik⁵.
- Vizsgáltuk a 2D poros plazma viszkoelasztikus tulajdonságait (frekvenciafüggő komplex viszkozitást). Ehhez megépítettem egy összetett lézeres manipuláló optikai összeállítást. Első eredmények egy fizikus szakos BSc diplomamunkát eredményeztek (Sándor Máté Csaba, ELTE TTK, Alkalmazott Fizikus Szakirány, 2010). Kimutattuk, hogy alacsony frekvenciájú harmonikus nyírás esetén a diszipatív, míg magas frekvenciákon a rugalmas járulék dominál. A kísérletek⁶ összhangban vannak a szimulációkkal⁷, amelyek jelentősen kiterjesztették a vizsgálható paraméter tartományt.
- Az adatfeldolgozás optimalizálása terén megvalósítottam az adatgyűjtés közbeni (párhuzamos) adatredukciót, vagyis a kamera képei csak átmenetileg, a rendszeremóriába kerülnek, míg az adattároló egységre már csak a részecskék

³ Mohácsi I, Hartmann P, Donkó Z; "Experimental investigation of the collective dynamics in a single layer dusty plasma crystal"; Book of Contributed Papers, p. 159-160 (2009). 17th Symposium on Application of Plasma Processes & Visegrad Workshop on Research of Plasma Physics, 17.-22.1.2009, Hotel Máj, Liptovský Ján, Low Tatras, Slovakia

⁴ Hartmann P, Donkó Z, Kalman G J, Kyrkos S, Golden K I, Rosenberg M; "Collective dynamics of complex plasma bilayers"; Phys. Rev. Lett., 103 (2009) 245002

⁵ Hartmann P, Douglass A, Reyes J C, Matthews L S, Hyde T W, Kovács A, Donkó Z; "Crystallization Dynamics of a Single Layer Complex Plasma"; Phys. Rev. Lett., 105 (2010) 115004

⁶ Hartmann P, Sándor M Cs, Kovács A, Donkó Z; "Static and dynamic shear viscosity of a single-layer complex plasma"; Phys. Rev. E, 84 (2011) 016404

⁷ Kovács A, Hartmann P, Donkó Z; "Dynamic Shear Viscosity in a 2D Yukawa System"; Contrib. Plasma Phys. 52 (2012) 199

koordinátái kerülnek eltárolásra. Egyes esetekben ez előnyösnek bizonyult, viszont kettősrétegek és nagy sűrűségek esetén továbbra is a nyers képek utólagos feldolgozása előnyösebb.

Numerikus szimulációkkal:

- 2D Yukawa rendszerek molekuladinamikai szimulációja segítségével meghatároztam, hogy olvadás során, végtelen hosszú relaxációs időre extrapolálva, korábbi eredményekkel ellentétben, a translációs és az orientációs rendezettség azonos hőmérsékleten tűnik el, valamint az átmenet csak Coulomb kölcsönhatás esetén lehet elsőrendű⁸.
- Hasonló szimulációval a gyors hűtés (quench) utáni kristályszemcse növekedést tanulmányoztuk, amely során négy független módszert alkalmazva konzisztensen hatvány függvénnyel leírható időfejlődését találtunk. Ezen eredményekre építve egy MSc diplomamunka készült (Kovács Anikó Zsuzsa, Babes-Bolyai Egyetem, Kolozsvár).
- Kimutattuk 2D Yukawa rendszerek transzport jelenségeinek (diffúzió, hővezetés, viszkozitás) érvényességi tartományát, illetve szuperdiffúzió és nyírési hígulás (shear-thinning) megjelenését⁹.
- Meghatároztuk 2D klasszikus dipólus rendszerek hullámdiszperzióját, amely jól egyezik mikroszkopikus (kvantumozott) erősen csatolt, kötött elektron-lyuk dipólusok (excitonok) hullámdiszperziójával¹⁰.
- Graphene-hez kapcsolódó vizsgálataink során meghatároztuk 2D ultra-relativisztikus dinamikájú (egyébként klasszikusan kezelt) részecskesokaság pátkorrelációs és hullámdiszperziós függvényeit¹¹.
- Kimutattuk 2D, kettősréteg és 3D Coulomb és Yukawa rendszerek sűrűség-, és áramfluktuációs spektrumaiban megjelenő másod (és magasabb) harmonikus hullámok erősségét a Coulomb-csatolás, és a hullámszám függvényében¹².
- Meghatároztuk folyadék állapotú 3D Yukawa rendszerek viszkoelasztikus tulajdonságait. Megmutattuk, hogy a frekvencia növelésével az energiatárolás erősebbé válik a diszipatív járuléknál. Meghatároztuk a rendszerek komplex viszkozitását¹³.

⁸ Hartmann P, Donkó Z, Kalman G J; "On the melting of 2D Yukawa systems"; pp. P-4 in: Book of Abstracts of the 2nd Workshop on Diagnostics and Simulation of Dusty Plasmas, Kiel, Germany, Sep 2-4, 2009 (oral)

⁹ Donkó Z, Goree J, Hartmann P, Liu B; "Time-correlation functions and transport coefficients of two-dimensional Yukawa liquids"; Physical Review E, 79 (2009), 026401/1-12

¹⁰ Golden K I, Kalman G J, Donkó Z, Hartmann P; "Collective excitations in a two-dimensional dipole system"; J. Phys. A: Math. Theor.; 42 (2009), 214017/1-8

¹¹ Hartmann P, Kalman G J, Golden K I, Donkó Z; "Collective excitations in strongly coupled ultra-relativistic plasmas"; J. Phys. A: Math. Theor.; 42 (2009), 214018/1-6

¹² Hartmann P, Donkó Z, Tierney K P, Lee C J, Kalman G J; "Higher harmonic generation in strongly coupled plasmas"; J. Phys. A: Math. Theor.; 42 (2009), 214040/1-6

¹³ Donkó Z, Goree J, Hartmann P; "Viscoelastic response of Yukawa liquids"; Phys. Rev. E, 81 (2010), 056404/1-9

- 2D dipólus rendszer sűrűségfluktuációs spektrumában, illetve annak diszperziós függvényében azonosítottuk az ún. roton minimumot, valamint annak klasszikus, korrelációs eredetét¹⁴.
- Erős mágneses térbe helyezett 2D Yukawa rendszerben magas felharmonikusok megjelenését igazoltuk, diszperziójuk kvantitatív leírására elméleti, az erős csatolásból származó korrelációkat tartalmazó nemlineáris modellt állítottunk fel¹⁵.
- Meghatároztuk szuper-paramágneses poros plazma rendszerek alapállapotú konfigurációit, ahol az elektromos töltés mellett saját, anizotrop mágneses dipólus momentum is jelen van. Kimutattuk, hogy az alapállapotú kristályrács paraméterei a gyenge külső mágneses térrel széles tartományban hangolhatók¹⁶.
- Kétkomponensű Yukawa rendszerek hullámdiszperziós és szerkezeti tulajdonságait határoztuk meg. Kimutattuk, hogy az erősen csatolt folyadék tartományban az "átlagos atom" modell az érvényes, vagyis a nehezebb részecske dominálja a rezgési frekvenciákat¹⁷.
- Meghatároztuk három dimenziós áramló poros plazma rendszerekben fellépő instabilitások növekedési rátáját a rendszer paramétereinek függvényében. Kimutattuk, hogy az erős korrelációk elősegíthetik a hosszú hullámhosszú instabilitások megjelenését¹⁸.
- Grafikus processzorra átültetett három dimenziós molekuladinamikai szimuláció segítségével millió részecskés rendszereken határoztuk meg egyensúlyi módszerekkel a Yukawa folyadékok nyírási viszkozitását a csatolási-, és a Yukawa árnyékolási paraméter függvényében¹⁹.

¹⁴ Kalman G J, Hartmann P, Golden K I, Filinov A, Donkó Z; "Correlational origin of the roton minimum"; Europhysics Letters 90 (2010) 55002.

Kalman G J, Kyrkos S, Golden K I, Hartmann P, Donkó Z; "The Roton Minimum: Is it a General Feature of Strongly Correlated Liquids?"; Contrib. Plasma Phys. 52 (2012) 219.

¹⁵ Bonitz M, Donkó Z, Ott T, Kahlert H, Hartmann P; "Nonlinear Magnetoplasmons in Strongly Coupled Yukawa Plasmas"; Phys. Rev. Lett., 105 (2010) 055002.

Ott T, Bonitz M, Hartmann P, Donkó Z; "Higher harmonics of the magnetoplasmon in strongly coupled Coulomb and Yukawa systems"; Physical Review E; 83 (2011), 046403/1-8

¹⁶ Hartmann P, Rosenberg M, Kalman G J, Donkó Z; "Ground-state structures of superparamagnetic two-dimensional dusty plasma crystals"; Phys. Rev. E, 84 (2011) 016409

¹⁷ Kalman G J, Donkó Z, Hartmann P, Golden K I; "Strong Coupling Effects in Binary Yukawa Systems"; Phys. Rev. Lett., 107 (2011) 175003.

Kalman G J, Donkó Z, Hartmann P, Golden K I, Kyrkos S; "Collective Modes in Strongly Coupled Binary Liquids"; Contrib. Plasma Phys. 52 (2012) 234

¹⁸ Rosenberg M, Kalman G J, Hartmann P; "Instabilities in Yukawa Liquids"; Contrib. Plasma Phys. 52 (2012) 70

¹⁹ Budea Á, Derzsi A, Hartmann P, Donkó Z; "Shear Viscosity of Liquid-Phase Yukawa Plasmas from Molecular Dynamics Simulations on Graphics Processing Units"; Contrib. Plasma Phys. 52 (2012) 194

A kutatási eredmények visszhangja, publikációk

A pályázat keretében végzett munkából született publikációk száma:	29
Nemzetközileg referált folyóiratcikkek száma: (ebből 4 db Phys. Rev. Letters)	22
Megjelent folyóiratcikkek össz impakt faktora:	63.8
A megjelent cikkekre eddig ismert független hivatkozások száma:	42
Szóbeli előadások nemzetközi konferenciákon	4

A közleményeket itt nem soroljuk fel, ezek felvezetésre kerültek az OTKA elektronikus rendszerébe.

Nemzetközi kapcsolatok

Az elméleti kutatásokban továbbra is nagy segítséget nyújtanak prof. Kalman Gabor (Boston College) és prof. Kenneth Golden (Univ. Vermont) amerikai kollégák, akikkel évtizedes múltú szoros szakmai együttműködésünk van.

Prof. Marlene Rosenberg (Univ. California, San Diego) szintén elméleti szakember, akivel közösen poros plazma rendszerekben fellépő instabilitások tulajdonságait vizsgáltam. Mindkét fél szándéka szerint az együttműködést erősíteni szeretnénk.

Prof. Michael Bonitz (Christian Albrechts Universität zu Kiel) és csoportja elméleti ötletekkel és szimulációs háttérrel járulnak hozzá közös munkánkhoz. Velük az erős külső mágneses tér hullámmódusokra kifejtett hatását tanulmányoztuk. Szakmai kapcsolatunk folyamatos.

Prof. John Goree (University of Iowa) egyike a tudományterület úttörőinek, mind kísérleti, és szimulációs területeken aktív. Együttműködésünk keretében kezdtük a viszkozitás és egyéb transzport jelenségek szimulációs tanulmányozását.

Prof. Truell W. Hyde (Center for Astrophysics, Space Physics, and Engineering Research, Baylor University, Waco, Texas) kísérleti erőforrásait bocsájtotta a rendelkezésemre. Ezen együttműködés keretében vizsgáltuk a túlhűtött folyadék gyors kristályosodásának mikroszkopikus részleteit. Ezen együttműködés az egyik pillére az újonnan indult OTKA NN-103150 projektnek.

Személyi változások

A jelen pályázat PD jellegéből eredően alapvetően egy-személyi pályázat, így a szerződésben rajtam, a témavezetőn kívül nem szerepel több résztvevő. Szerencsére azonban sikerült egy doktoranduszt magam mellé csábítani. Kovács Anikó Zsuzsa, a PTE doktori iskolájának nappali tagozatos hallgatója, kutatómunkáját az én témavezetésemmel intézetünkben végzi. Anikó már az MSc munkáját is mellettem végezte, diplomamunkáját „Crystallization dynamics of a 2D Yukawa system“ címmel Kolozsváron nyújtotta be és

védte meg. Ezt követően csatlakozott hozzánk doktori munkára. Munkájának eredményeként társszerzője három referált folyóiratcikknek²⁰.

A kutatási téma lehetséges további irányai

Az itt ismertetett kutatási területeken munkám szerencsére tovább folytatódhat az NN-103150 sz. „Dusty plasma: a laboratory for classical many-particle physics“ című, 2012 és 2015 között futó OTKA pályázat keretében. Az új pályázat tárgya a klasszikus sokrészecske rendszerekben megfigyelhető kollektív, tipikusan erősen korrelált jelenségek részecske szintű vizsgálata poros plazma kísérletekkel, numerikus szimulációval és elméleti módszerekkel. Fel kívánjuk tárnai a mikroszkopikus részleteit olyan folyamatoknak, mint a kétdimenziós szilárd-folyadék fázisátalakulás, reológia, lassú plasztikus deformáció hatására fellépő szerkezeti változások, néhány speciális hidrodinamikai áramlás, kétkomponensű és háromdimenziós rendszerekben fellépő kollektív gerjesztések és instabilitások. Meg kívánunk tervezni, és kísérleti szinten, valósítani egy hordozható, egyszerű üzemeltetésű poros plazma eszközt, amely utat nyithat további alkalmazások irányába.

Az elért eredmények hasznosításának lehetőségei

Az erősen csatolt plazmák tanulmányozása során alapvető, esetenként évszázados (pl. áramlások, deformációk, fázisátalakulások. stb.) tudományos kérdések megválaszolásához járultunk hozzá.

* * *

Végül megköszönöm az OTKA támogatását, amelynek köszönhetően az ismertetett munkát elvégezhetjük és az eredményeket elérhetjük.

Hartmann Péter
(témavezető)

Budapest, 2012. augusztus 7.

²⁰ Hartmann P, Douglass A, Reyes J C, Matthews L S, Hyde T W, Kovács A, Donkó Z; “Crystallization Dynamics of a Single Layer Complex Plasma”; Phys. Rev. Lett., 105 (2010) 115004.

Hartmann P, Sándor M Cs, Kovács A, Donkó Z; “Static and dynamic shear viscosity of a single-layer complex plasma”; Phys. Rev. E, 84 (2011) 016404.

Kovács A, Hartmann P, Donkó Z; “Dynamic Shear Viscosity in a 2D Yukawa System”; Contrib. Plasma Phys. 52 (2012) 199