

PÉCSI TUDOMÁNYEGYETEM

Fizika Doktori Iskola

Lézer- és plazmafizika, lézerek alkalmazásai program



Erősen csatolt sokrészeskerendszerek kollektív dinamikája

Doktori disszertáció téziszülete

Kovács Anikó Zsuzsa

Témavezetők:

Hartmann Péter, Ph.D.

Donkó Zoltán, MTA doktora

PÉCS, 2015

ELŐZMÉNYEK ÉS CÉLKITŰZÉSEK

Számos fizikai rendszer (például szilárdtestek, folyadékok, elektroli-
tok, stb.) modellezhető, mint egymással kölcsönható részecskék összes-
sége. Dolgozatomban olyan új vizsgálati módszereket mutatok be,
amelyek lehetővé teszik az elektromosan töltött, klasszikus sokrész-
ecskekerenszerek egyes makroszkopikus jelenségeinek mikroszkopi-
kus vizsgálatát.

Értekezésemben az erősen csatolt sokrészecskekerenszerek terü-
letén végzett, a poros plazmákhoz szorosan kötődő kutatómunká-
mat ismertetem. Három témakört vizsgálok szimulációs modellek
segítségével: a kétdimenziós poros plazmák komplex viszkozitását
és lassú plasztikus deformációját, valamint a szilárd-folyadék fázis-
átalakulást leíró Kosterlitz-Thouless-Halperin-Nelson-Young elmélet
központi jóslatát.

Az első 2D poros plazma kísérleteket a viszkozitás mérésére 2001-
ben Lin I és munkatársai végezték [1]. Azóta számos kísérletet való-
sítottak meg a viszkozitás tanulmányozására. Felismerték 3D poros
plazmák nem-newtoni viselkedését [2], kimutatták a viszkoelaszti-
kus válasz létezését [3], és a viszkozitás hossz skálától való függését
[4]. Kristályos fázis esetén elsődleges relaxációs mechanizmusként a
kristályvonalak csúszását azonosították [5]. A 2D nyírási viszkozitás

nem-newtoni jellegének megerősítésére csoportunk is végzett kísérleteket [6].

A kísérleti erőfeszítések kiegészítésére számos szimulációs tanulmány is készült mind 2D, mind 3D rendszerek nyírési viszkozitásának számolására. A statikus viszkozitás számolása mellett, nagy nyírás esetén megjósolták a *nyírési vékonyodás* (shear thinning) hatást is [7], illetve meghatározták 3D Yukawa rendszerekre a komplex viszkozitás frekvenciafüggését [8].

A fentiek fényében célom a 2D Yukawa rendszerek harmonikusan oszcilláló nyírásra adott válaszának, komplex viszkozitásának mikroszkopikus, részecske szintű meghatározása széles tartományú nyírési rátákra és oszcillálási frekvenciákra, mind folyadék, mind szilárd fázisállapotú rendszerekre.

Az anyagtudományban és a kohászatban kúszás alatt a szilárd anyagok azon tulajdonságát értjük, hogy mechanikai feszültség hatására lassan, plasztikusan deformálódnak. A polikristályos szilárdtestek kúszóképességét általában az állandósult, stacionárius deformációsebesség tartományában vizsgálják, a kúszási ráta feszültség-, hőmérséklet-, illetve szemcseméret-függését analitikus és empirikus közelítések írják le. Értekezésemben a nagyon kis feszültségek tartományát vizsgáltam, ahol a deformációsebesség a nyírófeszültség hat-

ványfüggvénye szerint változik, és hatványkitevője tipikusan egyhez közeli.

A nagy hőmérsékleten kis feszültségek mellett létrejövő kúszás mechanizmusát Harper és Dorn fogalmazták meg [9], kúszási mechanizmusként a diszlokációs mászást jelölték meg.

Számos vizsgálat történt ezen tartományban a kúszás szemcseméretfüggésének meghatározására [10]. A diszlokációk eloszlásának szimulációjára „diszlokáció hálózat” elméletet dolgoztak ki [11].

Rézen végzett kísérletekkel megállapították az empirikus összefüggések feszültség, illetve szemcseméret kitevőjét [12]. Megmutatták, hogy magas hőmérsékleten a kis feszültségek tartományában a feszültség hőmérsékletfüggő [13].

A fentiekkel összhangban célozom a lassú nyírásnak kitett 2D Yukawa rendszerek, mint modell anyagok plasztikus deformációjának mikroszkopikus szintű megértése, továbbá a nyírási ráta, illetve diszlokációsűrűség nyírófeszültségtől való függésének meghatározása széles hőmérséklet tartományra, illetve a domináns folyamat felismerése.

A kétdimenziós sokrészecskerendszerek olvadási fázisátalakulása nyitott kérdés maradt az utóbbi évtizedekben. A szakirodalomban számos egymásnak ellentmondó tanulmány lelhető fel, melyekben

különböző típusú fázisátmenetet találtak az olvadási fázisátalakulásra. Napjainkban a nagy részecskeszámú számítógépes szimulációk általában a KTHNY [14] elméletet támasztják alá, mely a fázisátmenetet kétlepcsős folyamatként írja le, miszerint a szilárd és folyadék fázis között létezik egy harmadik, *hexatikus*, kvázi egyensúlyi fázis. Megjelenése óta ezen elmélet érvényességét számos különböző párpotenciállal jellemezhető rendszerre vizsgálták.

A Morse-potenciálok széles tartományára tanulmányozták a potenciál hatótávolságának hatását a 2D olvadásra [15]. Megmutatták, hogy a nagy hatótávolságú kölcsönhatási potenciálok fontosak a stabil hexatikus fázis kialakulását illetően. Lennard-Jones rendszerek esetén vizsgálták a matematikailag tökéletes 2D síktól való eltérés hatását [16] és azt találták, hogy a hexatikus fázis csak azon rendszerek esetén észlelhető, melyekben a részecskék elhelyezkedésének a síkjára merőlegesen csak 0.15 részecskeátmérőnyinél kisebb fluktuációk vannak.

Az irodalomban található tanulmányok idővonala azt az általános trendet mutatja, hogy a korábbi tanulmányokban elsőrendű vagy másodrendű fázisátalakulást észleltek a szimulációkban, de amint a számítógépek számolási kapacitása növekedett (a 2000. év körül), a részecskealapú szimulációk inkább a KTHNY elméletet igazolták.

A folyamatban lévő vita egy lehetséges feloldását Chen és munkatársai ismertették [17]: munkájukban a 2D Lennard-Jones rendszer Monte Carlo szimulációja feltárta a hexatikus fázis metastabilis jellegét. Ez a diffúzív időskálán működő atomisztikus fázismező (Phase Field Crystal, PFC) szimulációkat támasztja alá [18], melyek sokkal hosszabb időt fednek le, mint a Monte Carlo vagy a Molekuláris Dinamikai módszerek .

A fentiekkel összefüggésben célom 2D rendszerek esetén az olvadási fázisátalakulás során a szilárd és folyadék fázisok között levő egyensúlyi hexatikus fázis létezésének, illetve annak valódi egyensúlyi jellegének igazolása vagy cáfolása.

ALKALMAZOTT MÓDSZEREK

Az erősen csatolt kétdimenziós poros plazma rendszereket számítógépes modellezés segítségével vizsgáltam. Ilyen rendszerek szimulációjához két alapvető módszer áll rendelkezésre: a *Metropolis Monte Carlo szimuláció* és a *molekuláris dinamikai szimuláció*. Doktori munkám során a molekuláris dinamikai szimulációt használtam, mivel ez a rendszer időbeni megfigyelésére alkalmas módszer.

A szimuláció segítségével a részecskék közti párkölcsönhatás ismeretében, a mozgásegyenletek integrálásával a részecskék időbeni

mozgását (pályáját, helyzetét, sebességét) követhetjük. Az általam vizsgált tulajdonságok vizsgálatára kidolgozott szimulációk a rendszer fejlődését leíró mozgásegyenletekben, illetve ezen egyenletek megoldási algoritmusában, módszereiben különböznek.

ÚJ TUDOMÁNYOS EREDMÉNYEK

A munkám során elért új tudományos eredményeket az alábbi tézispontokban foglalom össze:

1. Nemegyensúlyi molekuláris dinamikai (NEMD), illetve Langevin dinamikai (LD) szimulációs modellt dolgoztam ki kétdimenziós, Yukawa párkölcsönhatással jellemezhető sokrészecskerendszerek harmonikusan oszcilláló nyírásra adott válaszának meghatározására. Kis nyírás esetén kapott eredményeimet a korábbi 3D szimulációk eredményeivel, valamint 2D poros plazma kísérletek eredményeivel összehasonlítva (azaz (i) alacsony frekvenciák esetén a viszkozitás értékének a nyírási rátától való függése, és (ii) közepes nyírások esetén a viszkozitás frekvenciafüggése) igazoltam a modell helyességét. Összehasonlítva a NEMD és LD szimulációk eredményeit erős és kisfrekvenciás nyírások esetén, megállapítottam, hogy a globális termosztát (NEMD szimulációk) alkalmazása alacsony frekvenciákon nem célravezető [TF1, TF4].

2. A NEMD és LD szimulációs vizsgálatok során új jelenségeket találtam: (i) erős és nagyfrekvenciás nyírásnál a viszkozitás egy újfajta, nem-monoton változását, (ii) közepes nyírások mellett maximális energia abszorpciót, (iii) a rendszer hullámdiszperziós relációjában fellépő platófrekvencia közelében erős kollektív gerjesztéseket, (iv) nagy nyírási ráták és alacsony frekvenciák mellett a rendszer stukturális anizotrópiáját figyeltem meg [TF1, TF4].
3. LD modellt fejlesztettem 2D Yukawa rendszerek lassú plasztikus deformációjának vizsgálatára. Összehasonlítva a modell eredményeit az irodalomban talált eredményekkel, illetve csoportunk korábbi kísérleti eredményeivel, igazoltam a modell helyességét. A szimuláció segítségével, a rendszer mikroszkopikus jellemzőinek (részecskék helyzete, sebessége, diszlokációk) ismeretében meghatároztam az eddig csak kísérleti megfigyelések alapján megállapított empirikus összefüggéseket a nyírási ráta és nyírófeszültség, valamint a hibaarány és a nyírási ráta makroszkopikus jellemzők között [TF2].
4. Mikrokanonikus sokaságot, illetve Gibbs kanonikus sokaságot megvalósító molekuláris dinamikai szimulációs modellt dolgoztam ki az olvadási fázisátalakulás Kosterlitz-Thouless-Halperin-Nelson-Young (KTHNY) elméletének vizsgálatára. Megmutattam, hogy

a szilárd és folyadék fázist elválasztó hexatikus fázis egy metastabilis fázis, és elég hosszú időt hagyva a rendszer termalizálására ez a fázis eltűnik. Továbbá azt is megmutattam, hogy szimulációs vizsgálatokban nem elég a rendszer méreteit kiterjeszteni, a méret növelésével a termalizációs időt is szükséges növelni [TF3].

SAJÁT PUBLIKÁCIÓK

Az értekezés témakörében készült:

Folyóiratcikkek:

- [TF1] Kovács A. Zs., Hartmann P., Donkó Z.: Complex viscosity of 2D Yukawa systems. *beküldve Phys. Rev. E*
- [TF2] Hartmann P., Kovacs A. Zs., Douglass A., Reyes J. C., Matthews L. S., Hyde T. W.: Slow plastic deformation (creep) of 2D dusty plasma solids. *Phys. Rev. Lett.*, **113**:025002, 2014.
- [TF3] Derzsi A., Kovács A. Zs., Donkó Z., Hartmann P.: On the metastability of the hexatic phase during the melting of two-dimensional charged particle solids. *Physics of Plasmas*, **21**:023706, 2014.
- [TF4] Kovács A. Zs., Hartmann P., Donkó Z.: Dynamic shear viscosity in a 2D Yukawa system. *Contributions to Plasma Physics*, **52**:3 199-202, 2012.

Konferenciakiadványok:

- [TK1] Kovács A. Zs., Hartmann P., Donkó Z.: "Dinamikus viszkozitás kétdimenziós komplex plazmában", *Kvantumelektronika 2014 Szimpózium*, November 28, Budapest (poszter).
- [TK2] Kovács A. Zs., Hartmann P., Donkó Z.: "Dinamikus viszkozitás 2D Yukawa rendszerben", *II. Interdiszciplináris Dokto-*

randusz Konferencia 2013, Pécs , Május 15-17, 231 (előadás).

[TK3] Kovács A. Zs., Hartmann P., Donkó Z.: "Dynamic shear viscosity in a 2D Yukawa system", *Book of Abstracts of the 13th workshop on the physics of dusty plasma*, Waco, Texas USA, May 20th-23rd 2012, 43 (poszter).

[TK4] Kovács A. Zs., Hartmann P., Donkó Z.: "Dynamic shear viscosity in a 2D Yukawa system", *Book of Abstracts of the Strongly Coupled Coulomb Systems conference (ISBN 978-963-88019-5-1)*, Budapest, Hungary, July 24-29, 2011, 138 (poszter).

Az értekezés témakörén kívül készült:

Folyóiratcikkek:

[F1] Hartmann P., Kovacs A. Zs., Reyes J., Matthews L., Hyde T.: Dust as probe for horizontal field distribution in low pressure gas discharges. *Plasma Sources Sci. Technol.*, **23**:045008, 2014.

[F2] Hartmann P., Sándor M. Cs., Kovács A., Donkó Z.: Static and Dynamic Shear Viscosity of a Single Layer Complex Plasma. *Phys. Rev. E*, **84**:016404, 2011.

[F3] 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**:115004, 2010.

Konferenciakiadványok:

- [K1] Bastykova N. Kh., Kovács A. Zs., Kodanova S. K., Ramazanov T. S., Korolov I., Hartmann P., Donkó Z.: "Force balance of dust particles in rf+DC discharges", *Abstract book of 20th Symposium on Application of Plasma Processes*, Tatranska Lomnica, Slovakia, Jan 17-22, 2015, 268 (poszter)
- [K2] Kovács A., Hartmann P., Donkó Z., Groma I., Györgyi G.: "Crystallization dynamics of a 2D Yukawa systems", *Book of Abstracts of the 6th International Conference on the Physics of Dusty Plasmas*, Garmisch-Partenkirchen, Germany, May 16-20, 2011, 259 (poszter).
- [K3] Kovács A., Hartmann P., Donkó Z., Groma I., Györgyi G.: "Crystallization dynamics of a 2D Yukawa systems", *Dusty/Complex plasmas: Basic and interdisciplinary Research AIP Conf. Proc. 1397*, 457-458, 2011, 457 (poszter).
- [K4] Kovács A., Hartmann P., Donkó Z., Groma I., Györgyi G.: "Crystallization dynamics of a 2D Yukawa system", *Book of Abstracts of the 2nd Workshop on Diagnostics and Simulation of Dusty Plasmas*, Kiel, Germany, Sep 2-4, 2009, P-8 (poszter).

HIVATKOZÁSOK

- [1] W.-T. Juan, M.-H. Chen, and L. I: Phys. Rev. E, 64, 016402 (2001).
- [2] A. V. Ivlev, V. Steinberg, R. Kompaneets, H. Höfner, I. Sidorenko, and G. E. Morfill: Phys. Rev. Lett., 98, 145003 (2007).
- [3] C.-L. Chan and L. I: Phys. Rev. Lett., 98, 105002 (2007).
- [4] Y. Feng, J. Goree, and B. Liu: Phys. Rev. Lett., 105, 025002 (2010).
- [5] C. Durniak and D. Samsonov: Phys. Rev. Lett., 106, 175001 (2011).
- [6] P. Hartmann, M. Cs. Sándor, A. Kovács, and Z. Donkó: Phys. Rev. E, 84, 016404 (2011).
- [7] Z. Donkó, J. Goree, P. Hartmann, and K. Kutasi: Phys. Rev. Lett., 96, 145003 (2006).
- [8] Z. Donkó, J. Goree, and P. Hartmann: Phys. Rev. E, 81, 056404 (2010).
- [9] J. Harper and J. E. Dorn: Acta Metallurgica, 5, 654 (1957).
- [10] G. Malakondaiah and P. R. Rao: Def. Sci. J, 35, 201 (1985);S. V. Raj: Mater. Sci. and Eng., 96, 57 (1987).
- [11] A. J. Ardell and S. S. Lee: Acta Metall., 34, 2411 (1986).
- [12] B. Wilshire and C. J. Palmer: Scripta Mater., 46, 483 (2002).

- [13] O. D. Sherby and E. M. Taleff: *Mater. Sci. and Eng.*, A322, 89 (2002).
- [14] B. I. Halperin and D. R. Nelson: *Phys. Rev. Lett.*, 41, 121 (1978).
- [15] S. I. Lee and S. J. Lee: *Phys. Rev. E*, 78, 041504 (2008).
- [16] N. Gribova, A. Arnold, T. Schilling, and C. Holm: *The Journal of Chemical Physics*, 135, 054514 (2011).
- [17] K. Chen, T. Kaplan, and M. Mostoller: *Phys. Rev. Lett.*, 74, 4019 (1995).
- [18] G. Tegze, L. Gránásy, G. I. Tóth, J. F. Douglas, and T. Pusztai: *Soft Matter*, 7, 1789 (2011).