

## НЕУСТОЙЧИВОСТЬ И ПЛАВЛЕНИЕ КРИСТАЛЛА МИКРОЧАСТИЦ В ПЛАЗМЕ ВЫСОКОЧАСТОТНОГО РАЗРЯДА

И. В. Швейгерт<sup>а\*</sup>, В. А. Швейгерт<sup>б</sup>, В. М. Беданов<sup>б</sup>,

А. Мельцер<sup>с†</sup>, А. Хоманн<sup>с†</sup>, А. Пиль<sup>с†</sup>

<sup>а</sup> Институт физики полупроводников  
Сибирского отделения Российской академии наук  
630090, Новосибирск, Россия

<sup>б</sup> Институт теоретической и прикладной механики  
Сибирского отделения Российской академии наук  
630090, Новосибирск, Россия

<sup>с</sup> Институт экспериментальной физики  
Кильский университет, Киль, Германия

Поступила в редакцию 11 ноября 1997 г.

Методом ланжевендовской молекулярной динамики исследуется развитие неустойчивости, нагрев и плавление двухслойного кристалла пылевых частиц в приэлектродном слое высокочастотного разряда. Силы взаимодействия между частицами определяются в рамках разработанной ранее модели, в которой ионные облака под верхними частицами заменяются эффективными точечными зарядами. Рассматривается случай как чисто кулоновского, так и экранированного взаимодействия. Обсуждаются различные режимы движения частиц в кристалле. Проводится сравнение экспериментальных и расчетных данных по средней энергии частиц и количеству дефектов кристаллов.

### 1. ВВЕДЕНИЕ

Интерес к исследованию поведения микрочастиц в плазме традиционно определяется их важной ролью в плазменных технологиях, в частности, при плазменно-стимулированных процессах травления и осаждения в микроэлектронике. Практически одновременное открытие в 1994 г. несколькими экспериментальными группами [1–3] образования кристалла пылевых частиц в газовом разряде показало, что микрочастицы в плазме представляют собой также новый уникальный объект, позволяющий изучать явления, лежащие на стыке физики неидеальной плазмы, теории твердого тела и фазовых переходов. В низкотемпературной плазме частицы микронных размеров приобретают значительный заряд  $eZ = (10^3 - 10^4)e$ . Поэтому, изменяя плотность микрочастиц, можно экспериментально варьировать в широких пределах степень неидеальности плазмы  $G = e^2 Z^2 / a_c T_p$ , где  $T_p$  — температура частиц,  $a_c = \sqrt{1/\pi n}$  в двумерном и  $a_c = (3/4\pi n)^{1/3}$  в трехмерном случаях,  $n$  — плотность частиц. Согласно теории однокомпонентной плазмы, переход системы микрочастиц в кристаллическое состояние

\*E-mail: ischweig@isp.nsc.ru

†A. Melzer, A. Homann, and A. Piel, Institut für Experimentalphysik, Christian—Albrechts—Universität Kiel, 24098, Kiel, Deutschland.

должен происходить при  $G_* = 130\text{--}140$  [4] и  $G_* \approx 170$  [5] соответственно для двумерного и трехмерного случаев. Возможность возникновения кристалла пылевых частиц в плазме была предсказана Икези [6] еще в 1986 г., однако именно экспериментальное открытие таких кристаллов в магнетронном [1, 7, 8] и высокочастотном [2, 3, 9, 10] разрядах привлекло широкое внимание к проблеме исследования сильнонеидеальных систем заряженных микрочастиц. В настоящее время упорядочение структуры ансамбля микрочастиц наблюдают также в термической плазме [11] и в стратах положительного столба тлеющего газового разряда постоянного тока [12]. Ниже рассматривается наиболее хорошо экспериментально изученный пылевой кристалл в высокочастотном разряде.

В высокочастотном разряде кристалл располагается в приэлектродном слое нижнего электрода, где сила тяжести уравнивается в вертикальном направлении электрическим полем, действующим на отрицательно заряженные частицы. Силиконовые [1], углеродные [13] либо полимерные [10] частицы образуют в плоскости электрода протяженную кристаллическую решетку, ограниченную специально создаваемыми выступами на электродах и состоящую примерно из  $100 \times 100$  элементарных ячеек. В продольном направлении кристалл состоит из нескольких слоев.

Уже первые наблюдения пылевых кристаллов показали две особенности его поведения, не укладывающиеся в рамки классической теории кулоновских систем. Во-первых, наряду с различными типами плотной упаковки (гранцентрированной [1], объемноцентрированной [1, 13, 14]) многослойных кристаллов наблюдалось также выстраивание частиц в колонны, когда частицы нижнего слоя расположены строго под верхними частицами [1, 2, 9, 10, 13]. При этом в поперечной плоскости частицы образуют характерную для двумерных систем гексагональную решетку. Последние эксперименты показывают, что именно такой тип упаковки обычно и реализуется в многослойных кристаллах для наиболее изученного диапазона изменения радиуса частиц  $R = 3\text{--}5$  мкм. Согласно экспериментальным наблюдениям кристалла растущих углеродных частиц в метановой плазме [13], переход от кубической объемноцентрированной решетки к выстраиванию в колонны происходит при  $R \sim 1$  мкм. Отметим, что теория кулоновских [15–17] систем или систем Юкавы [18] дает в качестве стабильных состояний многослойных кристаллов только плотные упаковки, тип которых меняется в зависимости от расстояния между слоями. Как показано в [19–22], причина выстраивания частиц в колонны заключается в фокусировке полем частицы траекторий ионов, поток которых направлен из квазинейтральной плазмы к электроду. Вниз по потоку за частицами образуются области повышенной ионной концентрации — ионные облака, притягивающие частицы нижнего слоя и обеспечивающие тем самым вертикальное выстраивание частиц.

Другая неожиданная особенность поведения кристалла наблюдается при уменьшении давления или увеличении мощности разряда, когда многослойный кристалл начинает плавиться, хотя по оценкам при комнатной температуре частиц  $G = 10000\text{--}20000$  и должно заведомо реализовываться кристаллическое состояние [2]. Согласно расчетам [23], экранирование заряда частиц в слое слишком мало и не может служить причиной плавления, как это предполагалось в [24]. Как выяснилось в результате экспериментальных наблюдений движения частиц [25, 26], ниже определенного критического давления газа многослойный кристалл становится неустойчивым и частицы начинают осциллировать около своих равновесных положений. С уменьшением давления средняя кинетическая энергия частиц достигает десятков электронвольт, что приводит к

плавлению кристалла. Отметим, что однослойный кристалл остается устойчивым при тех же параметрах разряда. Как показано в [21, 22], причиной развития неустойчивости многослойных кристаллов является также образование ионных облаков. Пылевой кристалл в приэлектродном слое находится под воздействием ионного потока и является открытой системой, в которой происходит трансформация энергии направленного движения ионов в энергию колебания частиц. В [21, 22] на основе линейного анализа получены основные характеристики неустойчивости двухслойного кристалла — критическое давление газа, частота колебаний, отношение амплитуд колебаний и фазовый сдвиг между частицами верхнего и нижнего слоев, — качественно согласующиеся с экспериментальными данными.

Ниже с помощью ланжевеновской молекулярной динамики проводится нелинейный анализ неустойчивости пылевого кристалла. Для случаев чисто кулоновского и экранированного взаимодействий рассматривается поведение средней энергии частиц, функций распределения частиц по скоростям, автокорреляционных функций скорости при различных давлениях. Исследуется фазовый переход кристалл — жидкость и проводится сравнение с экспериментальными данными.

## 2. МОДЕЛЬ ПЫЛЕВОГО КРИСТАЛЛА

В эксперименте исследуется двухслойный кристалл частиц с гексагональной симметрией в каждом слое. Кристалл парит в приэлектродном слое высокочастотного разряда в гелии. Мощность разряда составляет 12 Вт. Пылевой кристалл состоит из сферических монодисперсных частиц с радиусом  $R = 4.7$  мкм и массой  $M = 6.73 \cdot 10^{-13}$  кг. При изменении давления газа в диапазоне  $P = 30\text{--}100$  Па среднее расстояние между частицами в слое  $a \approx 450$  мкм и расстояние между слоями двухслойного кристалла  $d \approx 380$  мкм меняется незначительно. Более детальное описание экспериментальной установки и процедуры измерений можно найти в [21, 22, 25].

Следуя экспериментальным условиям, мы рассматриваем также двухслойный кристалл частиц с гексагональной решеткой в плоскости электродов ( $xy$ ) и «колонной» структурой по направлению к электроду ( $z$ ). Согласно данным экспериментов [21, 22, 25], амплитуда колебаний частиц в плоскости электродов значительно превосходит амплитуду продольных колебаний. Поэтому мы рассматриваем движение частиц только в поперечной плоскости  $\rho_{ik} = (x_{ik}, y_{ik})$  при фиксированных продольных координатах  $z_k$ , где индекс  $i$  обозначает номер частицы в слое, а  $k = 1, 2$  соответствует верхнему ( $k = 1$ ) и нижнему ( $k = 2$ ) слоям. В пылевом кристалле движение частицы определяется столкновениями с атомами газа, а также электростатическим взаимодействием с другими частицами кристалла и пространственно-неоднородным распределением ионного заряда в приэлектродном слое. Влияние электронов описывается введением экранированного потенциала взаимодействия. Расчеты методом Монте-Карло движения ионов в приэлектродном слое через двухслойный пылевой кристалл [21, 22] показали, что поток ионов экранирует заряженные частицы несимметрично и вниз по потоку за частицами образуются ионные облака. В [22] на основе расчетов возвращающей силы, действующей на частицы нижнего слоя при его смещении от положения равновесия, была предложена используемая ниже аналитическая модель кристалла, в которой реальное пространственно-неоднородное распределение ионного заряда заменяется на эффективный точечный заряд, жестко связанный с порождающей его части-

цей. Величина и положение эффективного заряда определяются по результатам расчета возвращающей силы. Итак, модель включает в себя взаимодействие частиц с атомами газа, электростатическое расталкивание частиц и притяжение частиц нижнего слоя к точечным ионным облакам, расположенным под верхними частицами.

Уравнения Ланжевена для нашей системы можно записать в виде [27]

$$\frac{d^2 \rho_{ik}}{dt^2} = \frac{1}{M} \mathbf{F}_{ik} - \nu \frac{d\rho_{ik}}{dt} + \frac{1}{M} \mathbf{F}, \quad (1)$$

где  $\nu$  — коэффициент трения частиц в газе,  $\mathbf{F}$  — случайная ланжевенская сила, описывающая нагрев частиц (имеются в виду поступательные степени свободы) в результате соударений с нейтральными атомами. Электростатические силы

$$\mathbf{F}_{ik} = \mathbf{F}_{ik,pp} + \mathbf{F}_{ik,pi}$$

включают отталкивание между частицами  $\mathbf{F}_{ik,pp}$  и притяжение частиц нижнего слоя к ионным облакам  $\mathbf{F}_{ik,pi}$ . Силы, действующие между частицами, могут быть записаны как

$$\mathbf{F}_{ik,pp} = -\partial U_{pp} / \partial \rho_{ik},$$

где

$$U_{pp} = \sum_{i>j} \sum_{k=1}^2 U(|\rho_{ik} - \rho_{jk}|) + \sum_{ij} U(|\rho_{i1} - \rho_{j2} + \mathbf{e}_z d|) \quad (2)$$

является потенциальной энергией межчастичного взаимодействия,  $\mathbf{e}_z$  — единичный вектор в продольном направлении,  $d$  — расстояние между слоями. Первый член в уравнении (2) описывает взаимодействие частиц в одном и том же слое, а второй — взаимодействие частиц разных слоев. Силы взаимодействия между частицами нижнего слоя и эффективными положительными точечными зарядами  $eZ_i$ , расположенными на расстоянии  $d - d_i$  под частицами верхнего слоя, даются выражением

$$\mathbf{F}_{ik,pi} = -\delta_{k2} \partial U_{pi} / \partial \rho_{ik},$$

где

$$U_{pi} = -\epsilon \sum_{ij} U(|\rho_{i1} - \rho_{j2} + \mathbf{e}_z d_i|), \quad \epsilon = Z_i/Z,$$

а символ Кронекера  $\delta_{k2}$  отражает тот факт, что сила притяжения действует только на нижние частицы. Для взаимодействия двух точечных зарядов в плазме используется потенциал Дебая-Хюккеля

$$U(\rho_i - \rho_j) = \frac{e^2 Z^2}{|\rho_i - \rho_j|} \exp(-\lambda |\rho_i - \rho_j|),$$

где  $\lambda$  — длина экранирования электронами. Отметим, что описанная выше модель взаимодействия частиц базируется на результатах несамосогласованных расчетов пространственного распределения концентрации ионов [21, 22] и по этой причине может претендовать только на качественное описание нагрева и плавления реального пылевого

кристалла. Для выяснения роли экранирования мы рассматривали случай как сильно экранированного,  $\lambda = 2/a$ , так и чисто кулоновского,  $\lambda = 0$ , взаимодействий.

Поведение пылевого кристалла определяется давлением  $P$  и температурой  $T$  газа, параметрами решетки  $a$ ,  $d$ ,  $d_i$  и зарядами  $Z$ ,  $Z_i$ . Измеряя расстояния в постоянных решетке кристалла  $a$  и время в периодах плазменных колебаний кристалла  $1/\omega_p$ , где  $\omega_p = \sqrt{4\pi e^2 Z^2 / M a^3}$  — плазменная частота, можно уменьшить число переменных. Нас будет интересовать поведение кристалла при различном давлении газа, или, другими словами, различных безразмерных коэффициентах трения  $\nu/\omega_p$ . Температура газа  $T = 300$  К, которая определяет амплитуду ланжевеновской случайной силы, заряды частиц и параметры решетки предполагаются неменяющимися с давлением газа. Для условий эксперимента [21, 22, 25]  $Z \approx 13000e$ , расстояние между частицами  $a \approx 450$  мкм, расстояние между слоями  $d \approx 360$  мкм, плазменная частота кристалла  $\omega_p \approx 90$  с<sup>-1</sup>. Коэффициент трения линейно растет с увеличением давления газа [28] и меняется в диапазоне 12–40 с<sup>-1</sup> при изменении давления газа  $P = 30$ –100 Па. Остальные параметры  $Z_i = 0.5Z$ ,  $d_i = 0.4a$  взяты из результатов расчетов движения ионов методом Монте-Карло [22].

Используя периодические граничные условия, мы моделируем только фрагмент бесконечного в горизонтальной плоскости кристалла, включающий  $N = 448$  частиц — по 224 частицы в каждом слое. Расчетная область представляет собой прямоугольник  $X \times Y = 14 \times 8\sqrt{3} a^2$ , в который фрагмент гексагональной решетки вписывается без искажений. Поскольку  $X, Y \gg a$ , при определении действующих на частицы сил в случае экранированного потенциала мы учитывали только взаимодействие между частицами и их ближайшими образами. Для кулоновского потенциала ( $\lambda = 0$ ) использовался метод интерполяции [29]. Взаимодействие между ближайшими частицами учитывалось непосредственно, а силы взаимодействия с образами находились при линейной интерполяции сил, рассчитанных предварительно методом Эвальда [30]. При решении ланжевеновских уравнений использовался подход [31]. Постепенно снижая давление газа, мы рассматривали стационарные состояния системы при различных значениях коэффициента трения. Для каждого давления газа мы проводили моделирование движения частиц до тех пор, пока характеристики системы не выходили на свои стационарные значения, и после этого проводилось усреднение по времени. Полученное состояние использовалось как начальные данные для следующего давления газа.

Для анализа характера движения частиц кроме их траекторий рассматривалось поведение автокорреляционной функции скорости  $v$

$$Z_{vk}(\tau) = \frac{\sum_i \langle v_{ik}(t) v_{ik}(t - \tau) \rangle}{\sum_i \langle v_{ik}(t) v_{ik}(t) \rangle},$$

где  $\langle \dots \rangle$  означает усреднение по времени, спектра автокорреляционной функции

$$Z_{\omega k}(\omega) = 2 \int_0^{\infty} \cos(\omega\tau) Z_{vk}(\tau) d\tau \quad (3)$$

и функции распределения частиц по скоростям в каждом слое. Для определения процентного содержания дефектов в гексагональной решетке — частиц, имеющих количество ближайших соседей отличное от шести, — использовалось построение полигонов

Вороного. При анализе фазового перехода кристалл—жидкость рассматривалось поведение парной корреляционной функции  $g(r)$  и относительное отклонение частиц  $u_{ik}$  от их равновесных положений в кристалле, которое характеризовалось модифицированным параметром Линдемманна [32]

$$\gamma_k = \frac{2}{Na_c^2} \left\langle \sum_{i=1}^{N/2} \frac{1}{N_b} \sum_{j=1}^{N_b} |u_{ik} - u_{jk}|^2 \right\rangle,$$

где внутреннее суммирование проводится по ближайшим соседям. Смещение частиц нижнего слоя относительно ближайших частиц верхнего слоя характеризовалось параметром

$$\gamma_i = \frac{2}{Na_c^2} \left\langle \sum_{i=1}^{N/2} |u_{i1} - u_{i2}|^2 \right\rangle.$$

Статистическая погрешность расчетов, связанная с конечным временем наблюдения системы, указана на зависимостях от давления газа средней энергии частиц в различных слоях

$$E_k = M \left\langle \sum_i |v_{ik}|^2 \right\rangle / N$$

и параметров Линдемманна. Для сравнения особенностей поведения многослойного пылевого кристалла и обычных вигнеровских двумерных классических кристаллов, а также для проверки корректности алгоритма расчета мы проводили моделирование однослойного кристалла с тем же количеством частиц в слое — 224 для кулоновского и экранированного взаимодействий. Однослойный кристалл является гамильтоновой системой с полной потенциальной энергией

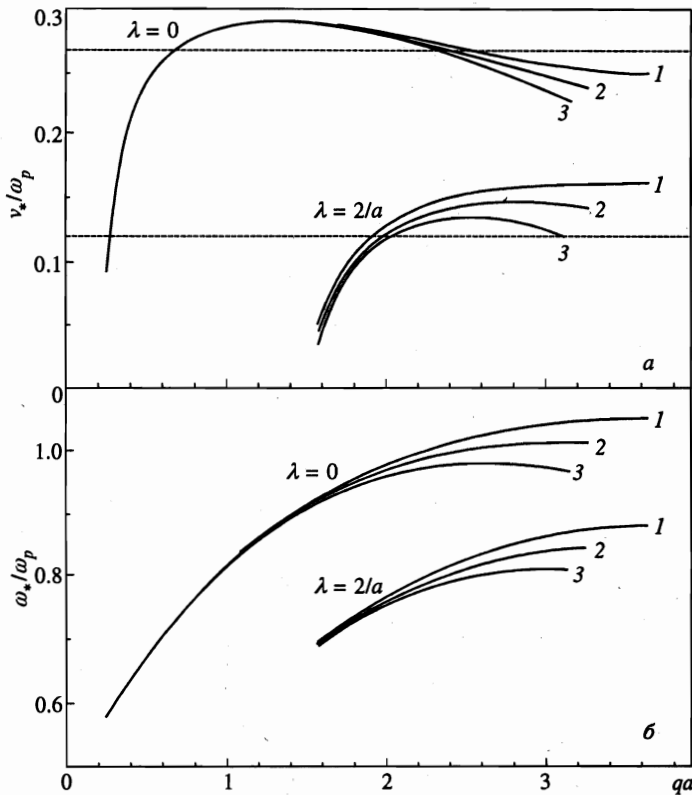
$$U_p = \sum_{i>j} U(|\rho_i - \rho_j|).$$

### 3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Основной особенностью пылевого кристалла частиц является асимметрия во взаимодействии частиц нижнего и верхнего слоев. Частицы нижнего слоя притягиваются к ионным облакам, расположенным вниз по потоку за верхними частицами, однако притяжение верхних частиц к нижним отсутствует. Для такой открытой негамильтоновой системы динамическая матрица первых производных от сил  $F_{ik}$  неэрмитова и имеет в общем случае комплексные собственные значения  $\eta$ . Для малых отклонений частиц

$$\chi_{ik} = \xi(\mathbf{q}) \exp(\lambda t + i\mathbf{q}\rho_{ik})$$

от их положений в кристалле  $\rho_{ik}$  собственные значения  $\lambda$  и собственные векторы  $\xi$  системы уравнений (1) при различных волновых векторах  $\mathbf{q}$  были найдены в [22]. Поскольку



**Рис. 1.** Критическое значение коэффициента трения (а) и частота соответствующих неустойчивых колебаний (б) в зависимости от величины волнового вектора при различных его направлениях:  $q_y/q_x = \cos(\pi/6)$  (1),  $q_y/q_x = \cos(\pi/12)$  (2),  $q_y = 0$  (3) для кулоновского ( $\lambda = 0$ ) и экранированного ( $\lambda = 2/a$ ) потенциалов взаимодействия. Штриховые горизонтальные линии показывают значение коэффициента трения, соответствующее плавлению кристалла

$$\lambda = \left( -\nu \pm \sqrt{\nu^2 + 4\eta} \right) / 2, \tag{4}$$

при комплексных значениях  $\eta$  кристалл становится неустойчивым при уменьшении коэффициента трения ниже некоторого критического значения

$$\nu_* = \text{Im } \eta / \omega_*,$$

где  $\omega_* = \sqrt{-\text{Re } \eta}$  — частота неустойчивых колебаний [22]. Для рассматриваемых ниже параметров пылевого кристалла зависимости  $\nu_*$ ,  $\omega_*$  от амплитуды волнового вектора приведены на рис. 1 для различных направлений  $q$ . Наиболее опасное возмущение с максимальным значением  $\nu_i$  коэффициента трения соответствует  $q_y/q_x = 1/\sqrt{3}$  как для кулоновского ( $\nu_i \approx 0.290\omega_p$ ,  $\omega_* \approx 0.89\omega_p$ ), так и для экранированного ( $\nu_i \approx 0.163\omega_p$ ,  $\omega_* \approx 0.88\omega_p$ ) потенциалов.

В зависимости от величины коэффициента трения в пылевом кристалле можно выделить четыре характерных режима движения частиц: 1)  $\nu > \nu_i$  — хаотическое движение в кристаллической фазе со средней энергией частиц, в несколько раз превышающей

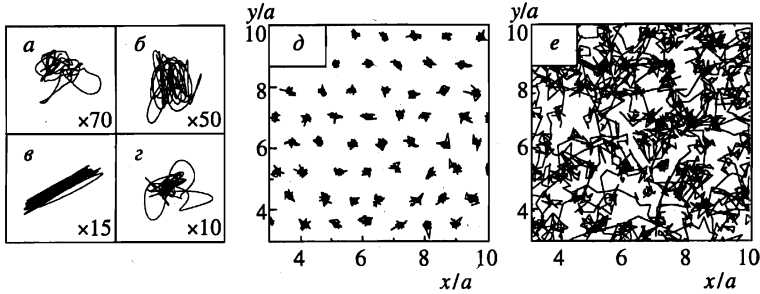


Рис. 2. Траектории частиц в фрагменте верхнего слоя кристалла для экранированного потенциала взаимодействия при различных коэффициентах трения  $\nu/\omega_p = 0.21$  (а), 0.1625 (б), 0.1575 (в), 0.15 (г), 0.12 (д) и 0.115 (е)

температуру газа (рис. 2а, б); 2)  $\nu_c < \nu < \nu_i$  — почти гармонические колебания частиц (рис. 2в); 3)  $\nu_m < \nu < \nu_c$  — хаотическое движение около равновесных положений в кристалле со средней энергией, на несколько порядков превышающей температуру газа (рис. 2г, д); 4)  $\nu < \nu_m$  — броуновское движение частиц после фазового перехода кристалл—жидкость (рис. 2е). Критические значения  $\nu_i$ ,  $\nu_m$ , соответствующие порогу развития неустойчивости и границе фазового перехода кристалл—жидкость, показаны на рис. 3 вертикальными линиями. Переход от гармонических колебаний к хаотическому движению не имеет резкой границы.

### 3.1. Хаотическое движение частиц при высоких давлениях газа

Специально проведенные расчеты при нулевой температуре газа показали, что при  $\nu > \nu_i$  пылевой кристалл устойчив по отношению к развитию возмущений и с течением времени средняя кинетическая энергия частиц стремится к нулю. Хорошо известно, что в термостате, которым является окружающий частицы нейтральный газ, любая гамильтонова система стремится к равновесию и средняя кинетическая энергия частиц равняется температуре газа. В частности, для однослойного кристалла это положение использовалось как один из тестов корректности решения ланжевеновских уравнений. В этой связи отметим, что в [24] наличие броуновского движения частиц привлекалось для объяснения экспериментально измеренных низких критических значений  $G_*$ , соответствующих плавлению кристалла. На наш взгляд, такое объяснение некорректно, так как наличие термостата не должно сказываться на равновесных характеристиках гамильтоновой системы. В частности, наши расчеты дали для кулоновского взаимодействия в однослойном кристалле значение  $G_* \approx 135$ , согласующееся с данными других авторов, полученных с использованием метода Монте-Карло или метода молекулярной динамики.

Передача энергии от ионного потока к пылевому многослойному кристаллу проявляется и при  $\nu > \nu_i$ , когда кристалл устойчив к развитию возмущений. Наличие комплексных собственных значений динамической матрицы ведет к снижению эффективного коэффициента трения, и средняя кинетическая энергия частицы превышает температуру газа даже при  $\nu > \nu_i$  (рис. 3). Экспериментально измеренная энергия частиц также превышает температуру газа, однако это отличие лежит в пределах ошибки измерений. Функция распределения частиц по скоростям практически не отличается



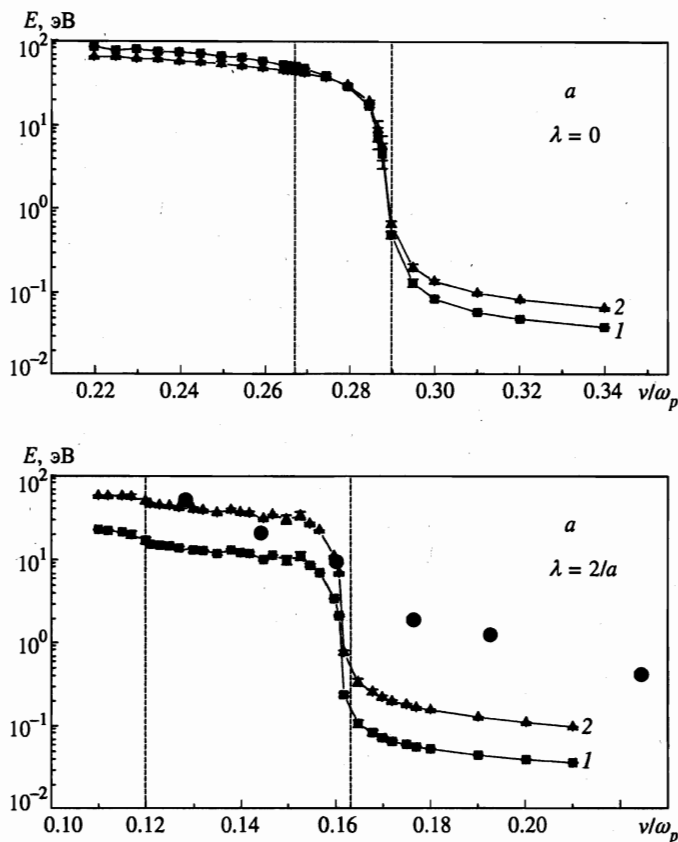


Рис. 3. Энергия частиц в верхнем (1, кружки) и нижнем (2) слоях для кулоновского (а) и экранированного (б) потенциалов взаимодействия. Кружки соответствуют экспериментальным данным, треугольники и квадратики — результаты расчетов. Вертикальные штриховые линии показывают границы неустойчивости, полученные в линейном анализе, и пороги плавления кристалла

от максвелловской (рис. 4а), причем распределение по скоростям изотропно. Средняя энергия частиц в нижнем слое выше, чем в верхнем, как для экранированного, так и для кулоновского потенциалов взаимодействия, что согласуется с экспериментальными данными [25] и результатами линейного анализа [22]. Движение частиц со сравнительно небольшой амплитудой отклонения от положений равновесия приводит к незначительному уширению пиков парной корреляционной функции, которые соответствуют положению частиц в идеальной гексагональной решетке (рис. 5а). Наиболее заметно наличие мод с комплексными собственными значениями проявляется на спектре автокорреляционной функции скорости, где высота пика, соответствующего плазменным колебаниям, увеличивается с уменьшением коэффициента трения (рис. 6, 7а). Наличие сплошного спектра автокорреляционной функции скорости и ее экспоненциальное уменьшение на нескольких периодах колебаний (рис. 8а) указывает на хаотичность движения частиц. Отметим, что для всех режимов движения автокорреляционные функции скорости частиц верхнего и нижнего слоев качественно похожи.

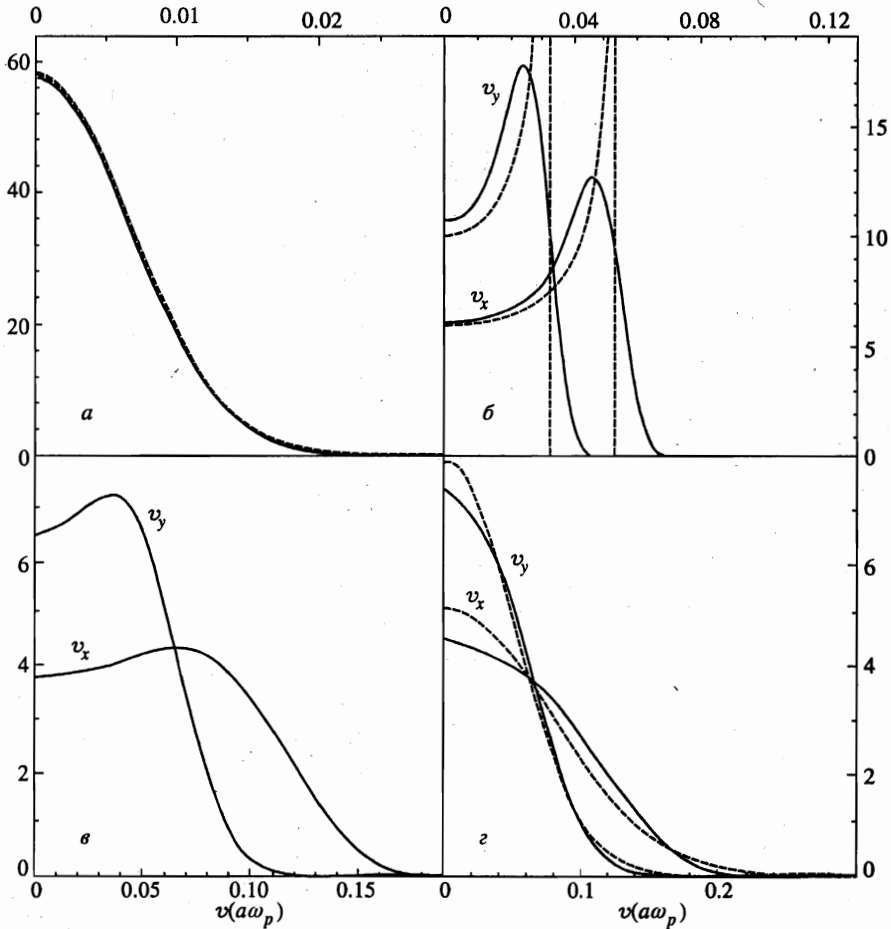


Рис. 4. Функция распределения частиц по скоростям  $v_x, v_y$  в нижнем слое кристалла при экранированном потенциале взаимодействия и различных коэффициентах трения  $\nu/\omega_p = 0.165$  (а), 0.16125 (б), 0.155 (в) и 0.145 (г). Штриховые кривые соответствуют максвелловскому распределению (а, г) и распределению скоростей при гармонических колебаниях (б)

### 3.2. Когерентные колебания в кристаллической фазе

При  $\nu < \nu_i$  трение частиц в газе уже не может стабилизировать развитие неустойчивости, что ведет к резкому увеличению средней кинетической энергии частиц (рис. 3). Наиболее интересной особенностью движения частиц является существование когерентных колебаний, которые реализуются в узком диапазоне изменения коэффициента трения  $\nu_c < \nu < \nu_i$ . Для экранированного потенциала  $\nu_c \sim 0.155\omega_p$ . При когерентных колебаниях все частицы движутся с одинаковой фазой и частотой  $\omega$ . Для гармонического движения частиц  $v_i = v_m \sin(\omega t)$  функция распределения частиц по скоростям дается выражением

$$f(v) = \frac{dt}{dv} = \frac{1}{\sqrt{v_m^2 - v^2}}, \tag{5}$$

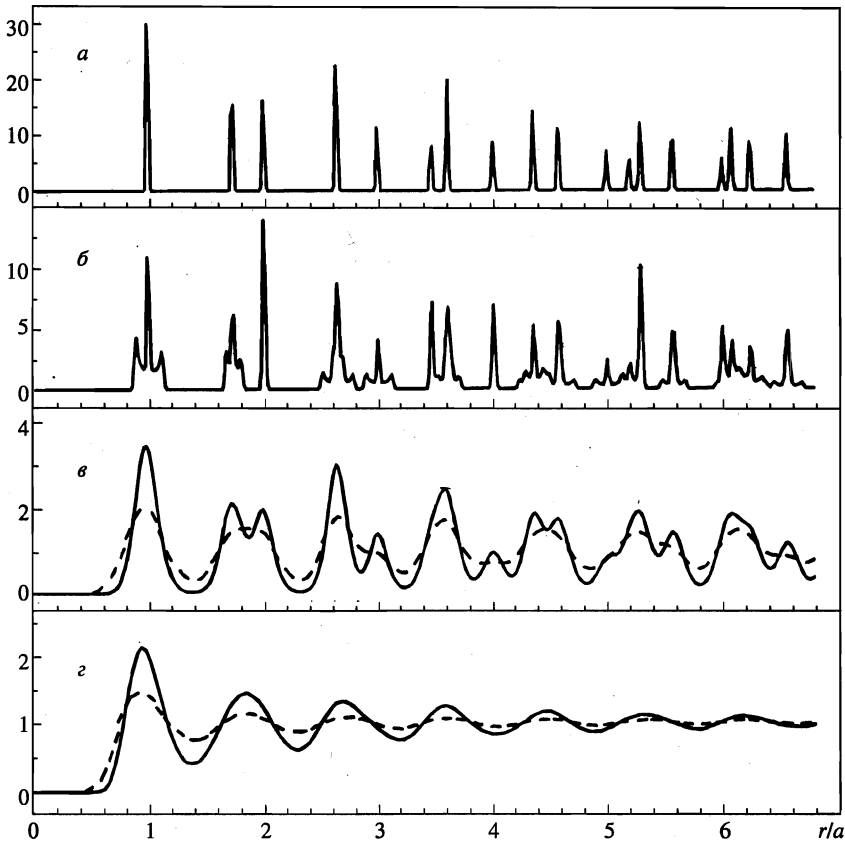


Рис. 5. Парная корреляционная функция для экранированного потенциала взаимодействия при различном коэффициенте трения  $\nu/\omega_p = 0.21$  (а),  $0.1575$  (б),  $0.125$  (в),  $0.115$  (г). Сплошные и штриховые кривые соответствуют верхнему и нижнему слоям

где  $v_m$  — максимальная скорость частиц. Сравнение выражения (5) с результатами расчетов приведено на рис. 4б. Наличие когерентного режима означает, что в кристалле возбуждена только одна колебательная мода. Мы рассматриваем конечный фрагмент кристалла, в котором фононный спектр дискретен. Поэтому сразу после перехода через критическое значение коэффициента трения возбуждается только одна мода с частотой  $0.881\omega_p$ . Однако с дальнейшим уменьшением коэффициента трения количество неустойчивых мод возрастает. На рис. 9 представлено распределение по частотам неустойчивых мод, полученное при линейном анализе рассматриваемого фрагмента кристалла. Для экранированного потенциала при  $\nu = 0.1575\omega_p$  с учетом вырождения существует 26 неустойчивых мод, частоты которых распределены в диапазоне  $0.847$ – $0.882$ . Ширина пика на спектре автокорреляционной функции скорости в когерентном режиме оказывается явно меньше и определяется конечным временем  $(400/\omega_p)$  интегрирования в (3). Таким образом, в результате нелинейного взаимодействия различных мод при слабой нелинейности доминирующей является только одна мода. В этом плане ситуация аналогична генерации многомодового лазера [33]. На траекториях частиц наличие когерентного режима проявляется как практически гармонические осцилляции

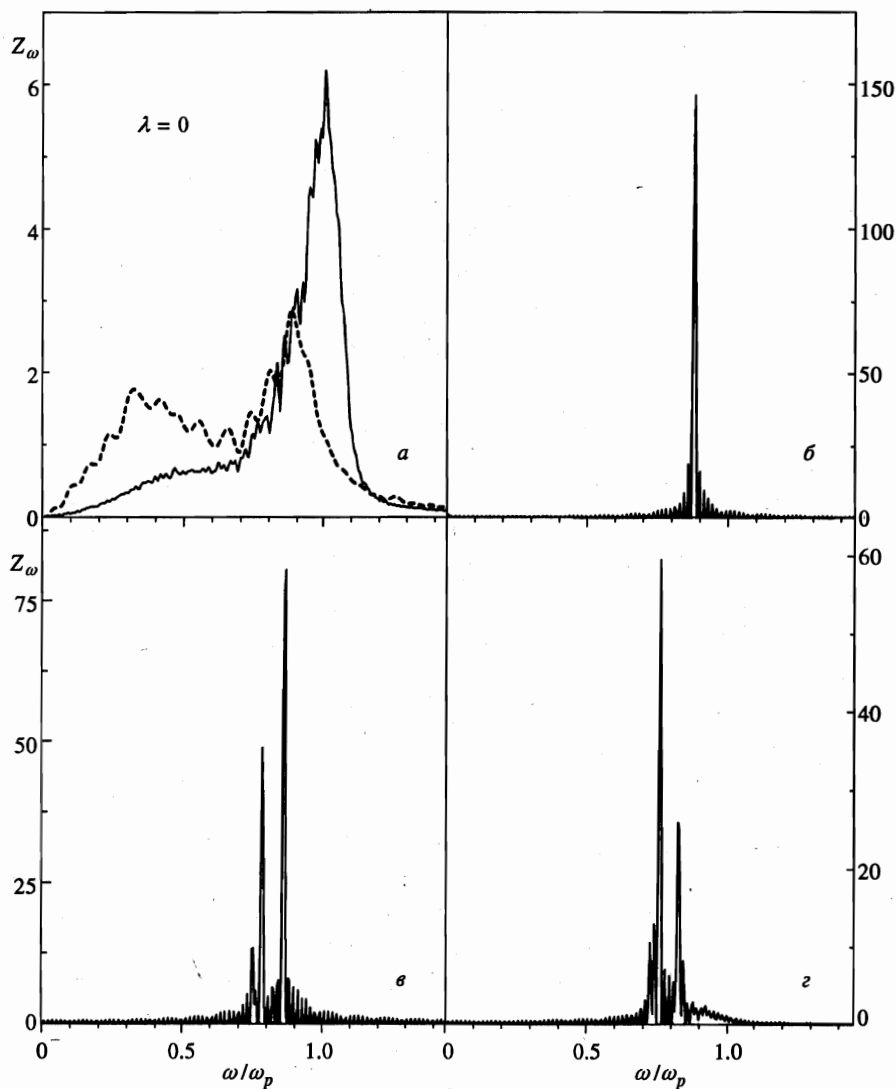


Рис. 6. Спектр автокорреляционной функции скорости частиц верхнего слоя для кулоновского потенциала взаимодействия при различном коэффициенте трения  $\nu/\omega_p = 0.32$  (а), 0.285 (б), 0.27 (в), 0.23 (з). Штриховая кривая (а) соответствует спектру автокорреляционной функции скорости однослойного кристалла при  $G = 400$

(рис. 2в). На парной корреляционной функции эти осцилляции приводят к появлению двух дополнительных максимумов около равновесных положений (рис. 5б), происхождение которых совершенно аналогично появлению максимумов в функции распределения по скоростям. Автокорреляционная функция скорости гармонически осциллирует со временем с практически неизменной амплитудой (рис. 8б), что также указывает на доминирование только одной моды. В случае кулоновского взаимодействия когерентный режим движения частиц также существует, но он менее ярко выражен.

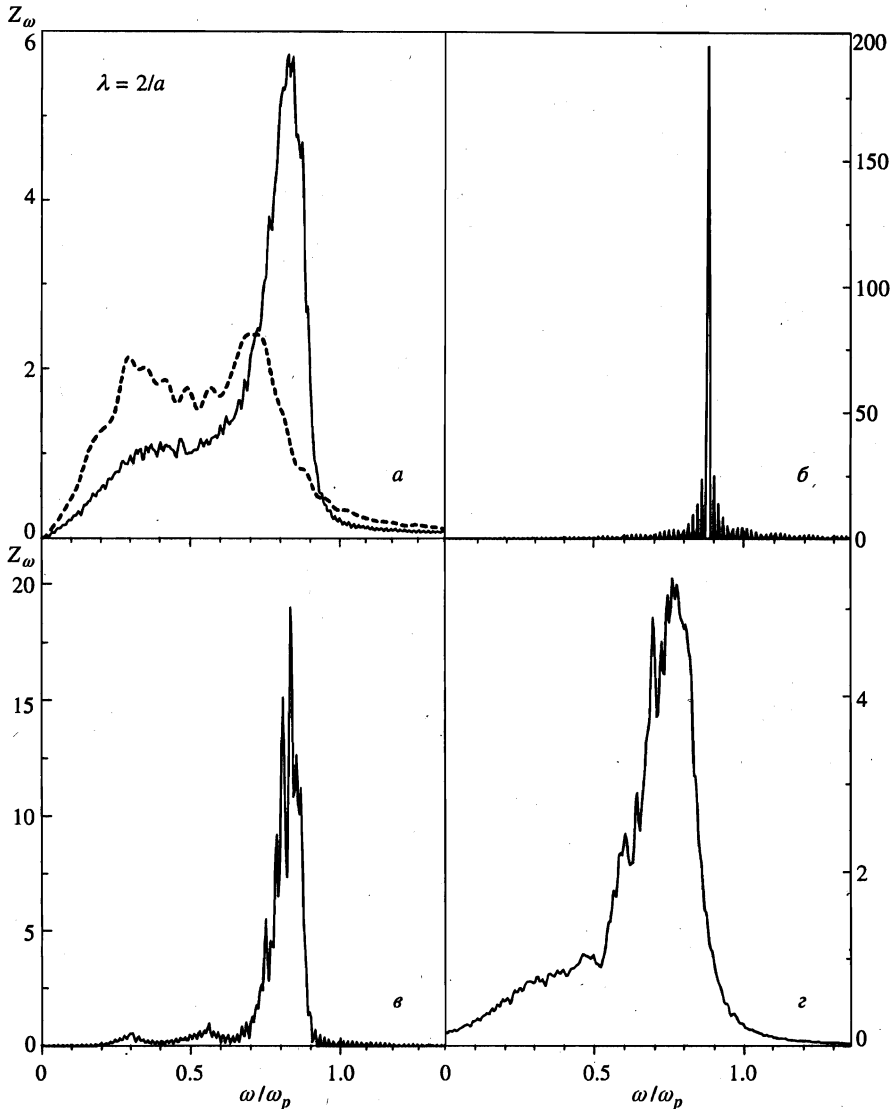


Рис. 7. Спектр автокорреляционной функции скорости частиц верхнего слоя для экранированного потенциала взаимодействия при различном коэффициенте трения  $\nu/\omega_p = 0.21$  (а), 0.1575 (б), 0.125 (в), 0.115 (г). Штриховая кривая (а) соответствует спектру автокорреляционной функции скорости однослойного кристалла при  $G = 400$

Имеющиеся экспериментальные данные пока не подтверждают существование когерентного режима. Экспериментально наблюдаемые кристаллы отличаются от нашей модели в двух аспектах. Во-первых, характерное число частиц в реальном кристалле  $\sim 10^4$  много больше, чем число частиц 448, движение которых мы моделируем. Спектр элементарных возбуждений реального кристалла соответственно более близок к непрерывному, чем спектр рассматриваемого нами фрагмента кристалла. Однако, используя аналогию с многомодовым лазером, можно полагать, что наличие непрерывного спек-

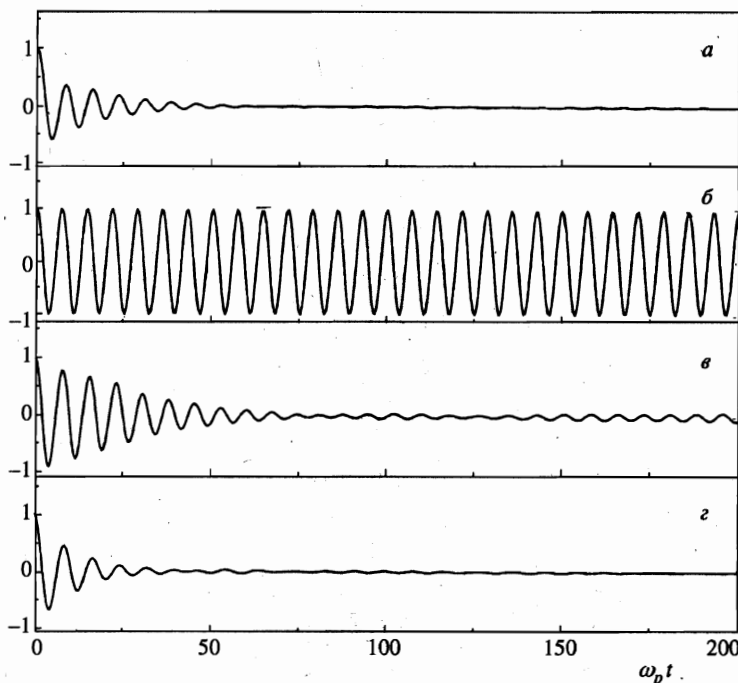


Рис. 8. Автокорреляционная функция скорости частиц верхнего слоя для экранированного потенциала взаимодействия при различных коэффициентах трения  $\nu/\omega_p = 0.21$  (а), 0.1575 (б), 0.125 (в), 0.115 (г)

ра не должно коренным образом сказываться на существовании когерентного режима. Более важным представляется второй аспект — присутствие большого количества дефектов в экспериментально реализуемом кристалле (рис. 10) даже при низких энергиях частиц, когда  $G \gg G_*$  и в идеальной ситуации дефекты должны отсутствовать. Происхождение дефектов в реальном кристалле не совсем ясно. Поскольку кристалл ограничен в плоскости электродов, в периферийных областях гексагональная симметрия должна нарушаться, что неизбежно ведет к появлению дефектов. Однако расчеты больших двумерных кулоновских кластеров, удерживаемых параболическим потенциалом, указывают на значительно меньшее процентное содержание дефектов [34]. Возможно, что появление дефектов в реальном кристалле связано с разбросом частиц по размерам. Влияние дефектов на механизмы нагрева частиц и плавления кристалла пока не исследовано. Как показывают экспериментальные данные (рис. 3), увеличение средней энергии частиц с уменьшением давления газа происходит в реальном кристалле более плавно, чем при расчете. При этом количество дефектов также возрастает (рис. 10) даже при таких значениях энергии частиц, когда в расчетах дефекты отсутствуют. Отметим, что использование криптона в качестве несущего газа позволяет уменьшить дефектность кристалла и наблюдать более резкий рост энергии частиц с уменьшением давления газа [35]. Наличие дефектов может привести к локализации неустойчивых мод и существенному уменьшению межмодового взаимодействия, что в свою очередь ведет к подавлению когерентного режима.

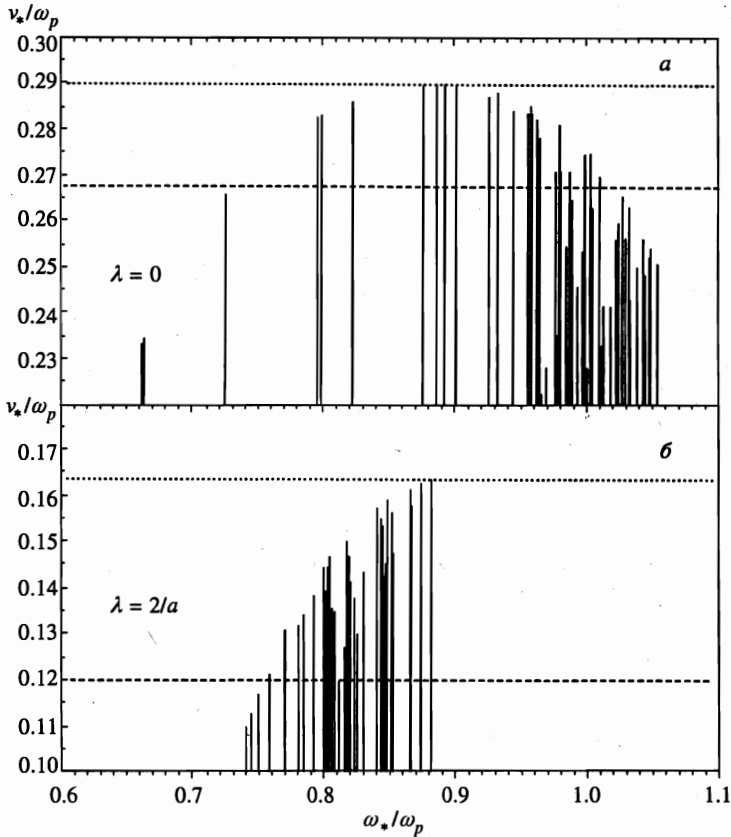


Рис. 9. Неустойчивые моды рассматриваемого фрагмента кристалла с 448 частицами для кулоновского (а) и экранированного (б) потенциалов взаимодействия. Верхние горизонтальные штриховые линии соответствуют порогу неустойчивости, а нижние — плавлению кристалла

### 3.3. Хаотические колебания в кристаллической фазе

С уменьшением коэффициента трения максимумы в функции распределения частиц по скоростям постепенно уширяются (рис. 4а) и происходит плавный переход к почти максвелловской функции распределения (рис. 4з), которая остается анизотропной по направлениям скоростей вплоть до момента плавления кристалла. Непосредственно перед плавлением функция распределения по скоростям практически не отличается от максвелловской и становится изотропной по направлениям скоростей в жидкой фазе. Автокорреляционная функция скорости уменьшается со временем (рис. 8з) и ее спектр уширяется (рис. 7в), что также свидетельствует о хаотизации движения частиц. Пик в спектре автокорреляционной функции скорости, соответствующий частотам неустойчивых мод, сдвигается с уменьшением коэффициента трения в область меньших частот, что согласуется с результатами линейного анализа (рис. 9б). В результате взаимодействия мод при  $\lambda = 2/a$  появляются два дополнительных размытых пика, положение которых приблизительно соответствует субгармоникам  $\omega/3, 2\omega/3$  неустойчивых мод (рис. 7в). Для кулоновского взаимодействия при  $\nu < \nu_c$  спектры автокорреляционной

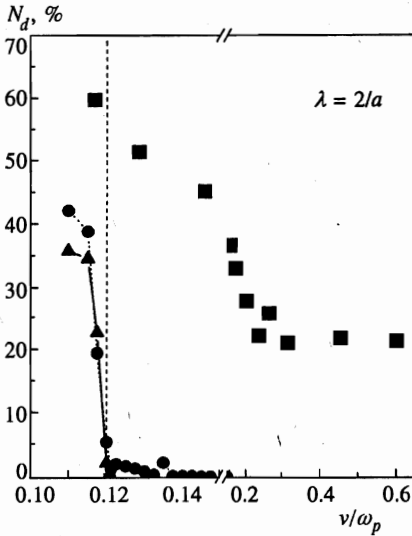


Рис. 10. Зависимость от коэффициента трения процентного содержания дефектов в нижнем (кружки) и верхнем (треугольники) слоях кристалла при экранированном потенциале взаимодействия. Квадратики соответствуют экспериментальным результатам

функции скорости качественно отличаются от описанных выше. С уменьшением коэффициента трения возникает второй узкий пик, амплитуда которого постепенно растет и становится больше амплитуды первого пика. Одной из причин различия в поведении спектров является, по-видимому, различие в плотности состояний неустойчивых мод (рис. 9). Для  $\lambda = 2/a$  расстояние между соседними модами меньше, чем при  $\lambda = 0$ , что должно способствовать перекрытию мод в результате их взаимодействия.

Средняя кинетическая энергия частиц продолжает расти с уменьшением коэффициента трения, причем для кулоновского потенциала в верхнем слое частицы имеют большую энергию  $E_1$ , чем в нижнем  $E_2$ . Для случая экранированного потенциала реализуется противоположная ситуация,  $E_1 < E_2$ , которая и наблюдается в эксперименте [21, 22, 25]. Непосредственно перед плавлением кристалла пики на парной корреляционной функции хотя и уширяются, но остаются достаточно четко выраженными (рис. 5в), особенно для верхнего слоя, где при  $\lambda = 2/a$  средняя энергия частиц ниже.

### 3.4. Плавление кристалла

Плавление кристалла, которое идентифицировалось в расчетах по резкому скачку как числа дефектов в системе (рис. 10), так и параметра Линдемана (рис. 11), происходит при  $\nu \approx 0.12\omega_p$  для экранированного и  $\nu \approx 0.267\omega_p$  для кулоновского потенциалов. Расчеты [32] показывают, что для различных потенциалов взаимодействия критическое значение параметра Линдемана, соответствующее плавлению двумерных кристаллов, остается примерно одинаковым  $\gamma_* \approx 0.1$ . Для экранированного потенциала энергия частиц и, соответственно, параметр Линдемана в нижнем слое больше, чем в верхнем. Однако плавление кристалла происходит только тогда, когда в верхнем слое параметр Линдемана достигает своего критического значения  $\sim 0.09-0.11$ , которое примерно одинаково для  $\lambda = 0$  и  $\lambda = 2/a$ . В отличие от кулоновского потенциала, при  $\lambda = 2/a$  плавление кристалла сопровождается скачком средней энергии частиц. После фазового перехода кристалл—жидкость амплитуды пиков парной корреляционной функции уменьшаются с расстоянием и на нескольких межчастичных расстояниях  $g(r)$  выходит



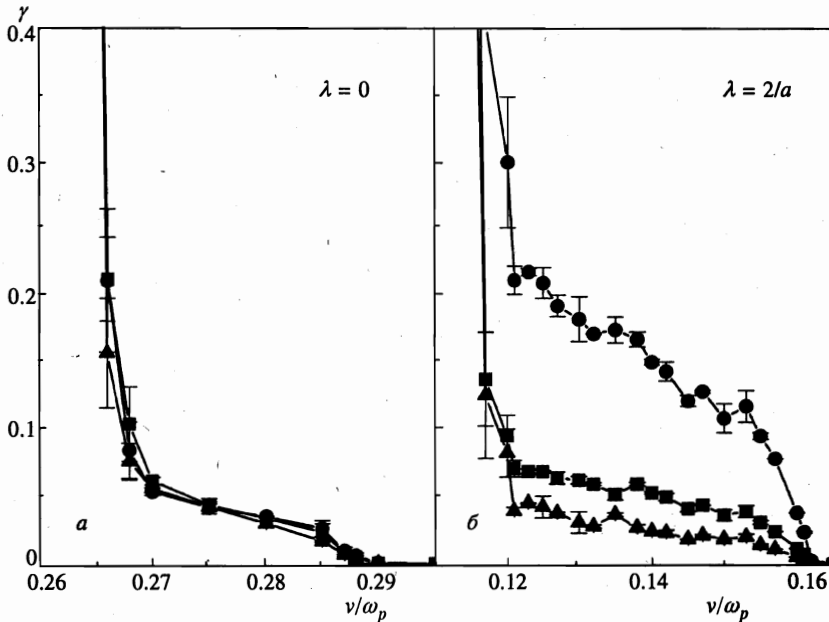


Рис. 11. Среднеквадратичное относительное смещение частиц в верхнем (квадратики) и нижнем (кружки) слоях кристалла при кулоновском (а) и экранированном (б) потенциале взаимодействия. Треугольники соответствуют параметру Линдемманна  $\gamma_i$ , описывающему смещение верхних и нижних частиц друг относительно друга

на свое асимптотическое значение  $g(r \rightarrow \infty) = 1$ . Спектр автокорреляционной функции скорости при  $\omega = 0$  становится отличным от нуля, что свидетельствует о самодиффузии частиц в жидкостной фазе (рис. 7з). Поскольку при кулоновском взаимодействии нет резкого изменения кинетической энергии частиц после плавления, уширение спектра автокорреляционной функции скорости и самодиффузия частиц после плавления при  $\lambda = 0$  существенно менее выражены, чем при  $\lambda = 2/a$ .

Ограниченный размер рассматриваемого нами фрагмента кристалла не позволяет делать выводы о порядке фазового перехода, наличии промежуточной гексатичной фазы и других актуальных для теории плавления двумерных кристаллов вопросов. Судя по последним численным экспериментам [36], для этого необходимо иметь по крайней мере на порядок большие значения числа частиц. Для проверки правильности предсказания положения самого фазового перехода мы проводили моделирование плавления однослойного кулоновского кристалла и получили  $G_* \approx 135$ , что близко к результатам расчетов других авторов и экспериментальным данным [37]. Для экранированного потенциала в однослойном кристалле  $G_* \approx 189$ . Пылевой кристалл плавится при  $G_* \approx 19$  и  $G_* \approx 52$  соответственно для кулоновского и экранированного потенциалов. Таким образом, многослойные пылевые кристаллы оказываются существенно более устойчивыми к плавлению, чем обычные кулоновские кристаллы. Отметим, что трехмерные или двухслойные кулоновские кристаллы плавятся при больших значениях  $G$ , чем однослойные [38]. Разница в значениях  $G_*$  для пылевых и обычных кристаллов связана, по-видимому, с различным распределением энергии по колебательным модам (рис. 6, 7). В пылевых кристаллах основная часть энергии содержится в коротковолновых ко-

лебаниях, в то время как механизм плавления обычных двумерных кристаллов определяется длинноволновыми фонами [39–42].

#### 4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Сопоставление экспериментальных данных с результатами численного моделирования нагрева и плавления кристалла показывает, что предложенная математическая модель дает правильный порядок цифр по энергии частиц и критическим давлениям газа, соответствующим неустойчивости и плавлению кристалла. В то же время некоторые предсказанные теоретически результаты — резкое повышение энергии частиц в результате развития неустойчивости и когерентный режим колебаний — пока не подтверждаются экспериментально, что связано, по-видимому, с большой дефектностью кристалла, наблюдаемой при низких энергии частиц. Для более детального сопоставления теории с экспериментом необходимо в эксперименте снижать дефектность кристалла, а при теоретических расчетах проводить численное моделирование конечных систем, в которых дефекты существуют при нулевой кинетической энергии частиц.

В результате проведенных расчетов обнаружено, что пылевой кристалл более устойчив к плавлению, чем обычные кулоновские кристаллы. Вид потенциала взаимодействия частиц качественно сказывается на поведении автокорреляционных функций скорости и движении частиц после плавления. В отличие от случая кулоновского взаимодействия, плавление кристалла при экранированном взаимодействии сопровождается скачкообразным увеличением кинетической энергии частиц.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 96-02-19134-а), РФФИ–Немецкого научно-исследовательского общества (грант № 96-02-00241-G) и INTAS (грант № 94-740).

#### Литература

1. J. H. Chu and L. I, Phys. Rev. Lett. **72**, 4009 (1994).
2. H. Tomas, G. E. Morfill, V. Demmel, J. Goree, B. Feuerbacher, and D. Möhlmann, Phys. Rev. Lett. **73**, 652 (1994).
3. Y. Hayashi and K. Tachibana, Jap. J. Appl. Phys. **33**, L804 (1994).
4. K. J. Strandburg, Rev. Mod. Phys. **60**, 161 (1988).
5. R. T. Farouki and A. Hamaguchi, J. Chem. Phys. **101**, 9885 (1994).
6. H. Ikezi, Phys. Fluids. **29**, 1764 (1986).
7. J. H. Chu and L. I, Physica A **205**, 183 (1994).
8. J. H. Chu and L. I, J. Phys. D: Appl. Phys. **27**, 296 (1994).
9. A. Melzer, T. Trottenberg, and A. Piel, Phys. Lett. A **195**, 301 (1994).
10. T. Trottenberg, A. Melzer, and A. Piel, Plasma Sources Sci. Technol. **4**, 450 (1995).
11. В. Е. Фортгов, А. П. Нефедов, О. Ф. Петров, А. А. Самарян, А. В. Чернышев, Письма в ЖЭТФ **63**, 176 (1996); Phys. Rev. E **54**, R 2236 (1996); ЖЭТФ **111**, 467 (1997).
12. В. Е. Фортгов, А. П. Нефедов, В. М. Торчинский и др., Письма в ЖЭТФ **64**, 86 (1996).
13. Y. Hayashi and K. Tachibana, J. Vac. Sci. Technol. A **14**, 506 (1996).
14. J. Pieper, J. Goree, and R. Quinn, J. Vac. Sci. Technol. A **14**, 519 (1996).
15. D. H. E. Dubin, Phys. Rev. Lett. **71**, 2753 (1993).

16. В. А. Швейгерт, М. С. Обрехт, Письма в ЖТФ **20**(10), 57 (1995).
17. G. Goldoni, V. A. Schweigert, and F. M. Peeters, Surface Science **361/362**, 163 (1996).
18. H. Totsuji, T. Kishimoto, Y. Inoue, C. Totsuji, and S. Nara, Phys. Lett. A **221**, 215 (1996); H. Totsuji, T. Kishimoto, and C. Totsuji, Phys. Rev. Lett. **78**, 3113 (1997).
19. S. V. Vladimirov and M. Nambu, Phys. Rev. E **52**, 2172 (1995); M. Nambu, S. V. Vladimirov, and P. K. Shukla, Phys. Lett. A **203**, 40 (1995); S. V. Vladimirov and O. Ishihara, Phys. Plasmas **3**, 444 (1996).
20. F. Melandso and J. Goree, Phys. Rev. E **52**, 5312 (1995); J. Vac. Sci. Technol. A **14**, 511 (1996).
21. A. Melzer, V. A. Schweigert, I.V. Schweigert, A. Homann, S. Peters, and A. Piel, Phys. Rev. E **54**, R46 (1996).
22. V. A. Schweigert, I. V. Schweigert, A. Melzer, A. Homann, and A. Piel, Phys. Rev. E **54**, 4155 (1996).
23. В. А. Швейгерт, Письма в ЖТФ **20**(12), 69 (1995).
24. X. H. Zheng and J. C. Earnshaw, Phys. Rev. Lett. **75**, 4214 (1995).
25. A. Melzer, A. Homann, and A. Piel, Phys. Rev. E **53**, 2757 (1995).
26. H. Thomas and G. E. Morfill, Nature **379**, 806 (1996).
27. S. Chandrasekhar, Rev. Mod. Phys. **15**, 1 (1943).
28. P. S. Epstein, Phys. Rev. **23**, 710 (1924).
29. A. Y. Toukmaji and J. A. Board, Comput. Phys. Comm. **95**, 73 (1996).
30. P. Ewald, Ann. Phys. **64**, 253 (1921).
31. H. Gould and J. Tobochnik, *Computer Simulation Methods, Part 2*, Addison-Wesley, Reading, MA (1987).
32. V. M. Bedanov, G. V. Gadiyak, and Y. E. Lozovik, Phys. Lett. A **109**, 289 (1985).
33. Г. Хакен, *Синергетика*, Мир, Москва (1980).
34. V. M. Bedanov and F. M. Peeters, Phys. Rev. B **49**, 2667 (1994).
35. H. Thomas, частное сообщение
36. K. Chen, T. Kaplan, and M. Mostoller, Phys. Rev. Lett. **74**, 4019 (1995).
37. C. C. Crimes and G. Adams, Phys. Rev. Lett. **42**, 795 (1979).
38. G. Goldoni and F. M. Peeters, Phys. Rev. B **53**, 4591 (1996).
39. J. M. Kosterlitz and D. J. Thouless, J. Phys. C **6**, 1181 (1973).
40. B. I. Halperin and D. R. Nelson, Phys. Rev. Lett. **41**, 121 (1978).
41. D. R. Nelson and D. B. Halperin, Phys. Rev. B **19**, 2457 (1979).
42. A. P. Young, Phys. Rev. B **19**, 1855 (1979).