

*PD-49991 OTKA pályázat összefoglaló szakmai beszámolója*

**Plazmafizikai sokrészecske-rendszerek modellezése**

Témavezető: Hartmann Péter  
Vezető kutató: Donkó Zoltán (OTKA T-48389)  
MTA-SZFKI

Bevezet

A plazmafizika számos nyitott kérdésének megválaszolásához az utóbbi években igen komoly segítséget adtak, illetve adnak a széles körben hozzáférhetővé vált számítástechnikai lehetőségek. Ezeknek köszönhetően numerikus módszerekkel és szimulációs eljárások alkalmazásával számos olyan jelenség kvantitatív kezelése vált lehetővé, amelyeket előzőleg csak kvalitatív módon sikerült megérteni. A pályázat keretében végzett munka ezen új eszköztár adta lehetőségeket kihasználva egyes plazmatípusok: az erősen csatolt plazmák és az alacsony nyomású ködfénykisülések egyes fizikai alapjelenségeinek és tulajdonságainak megértéséhez kívánt hozzájárulni.

Az erősen csatolt Coulomb rendszerek a fizika számos területén jelennek meg (pl. plazmafizika, szilárdtestfizika, asztrofizika) - ott, ahol a töltött részecskék kölcsönhatásából származó energia jelentősen felülmúlja a részecskék kinetikus energiáját. Az egyik legfontosabb példaként a csapdákban létrehozott ionplazmákat említhetjük. Hasonlóan érdekesek az alacsony nyomású plazmákban létrehozható plazmakristályok, amelyek mikroszkopikus (tipikusan mikrométer méretű) részecskékből állnak. Ezen kristályok úgy jönnek létre, hogy a kis méretű részecskék számos elektront megkötve negatív töltést vesznek fel. Mivel töltésük az elemi töltés több ezerszerese is lehet, a részecskék között igen nagy Coulomb erők léphetnek fel, így a részecskék szabályos (2 vagy 3 dimenziós) struktúrákba rendeződnek. Az így létrehozott ún. poros plazmák annyiban különböznek a csapdázott ionplazmáktól, hogy a részecskéket más részecskék elektromosan leárnyékolják, így a Coulomb potenciál helyett Yukawa potenciállal jellemezhető a kölcsönhatásuk. Ezen rendszerek vizsgálatában jelentős szerepet kapnak a direkt szimulációs módszerek: a Monte Carlo (MC) és molekuladinamikai (MD) eljárások. Míg a Monte Carlo szimulációkkal rendszerint a rendszereknek csak az egyensúlyi állapota tanulmányozható (a módszer lényege a minimális energiájú részecske-konfiguráció megkeresése), addig az MD eljárásokkal követhető a rendszerek dinamikus viselkedése is.

A ködfénykisülések számos igen fontos felhasználási területtel rendelkeznek, pl. fényforrások, gázlézerek, plazmakémia, felületmegmunkálás, rétegleválasztás. Ezen alkalmazások világszerte stratégiai fontosságúak, ugyanakkor hazai viszonyok között legtöbbjük kevésbé elterjedt. Az alkalmazások jövőbeli fejlesztéséhez nagy szükség van a plazmában lejátszódó folyamatok alapkutató szintű megértésére, modellezésére. A több évtizeddel ezelőtt született, klasszikus gázkisülési modellek a kisülések egyes térrészeire vonatkoztak, az adott térrészt határoló más térrészek

hatását általában csak határfeltételekkel tudták figyelembe venni. A kisülések egészének leírására alkalmas modellek ezekhez képest jelentős előrelépést jelentenek.

Az említett modellezési eljárásokhoz elengedhetetlenül szükséges számítástechnikai eszköztár közelmúltbeli megjelenése egyben az elvégzett kutatómunka időszerűségét is jelzi.

### A kutatás célja, kutatási program

A pályázat szerződésében megfogalmazottak szerint kutatási céljaink az alábbiak voltak:

Az erősen csatolt plazmák területén Yukawa

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

(ahol  $Q$  a részecskék töltése és  $\lambda$  a Debye árnyékolási hossz) kölcsönhatási potenciállal jellemzett (klasszikus) sokrészecske-rendszerek tulajdonságainak vizsgálatát terveztük. Célként fogalmazzuk meg a rendszerek struktúrális és termodinamikai jellemzőinek meghatározását, transzportjellemzőinek, szilárd-folyadék fázisátalakulásának és nemegyensúlyi folyamatainak vizsgálatát, molekuladinamikai szimulációs módszerekkel. Az utóbbi években végzett nagyenergiás ionütközéses kísérletek talulságai szerint a keltett kvark-gluon plazma is erősen csatolt állapotban van, így céljaink között szerepel ezen egzotikus anyagállapot vizsgálata a kalsszikus rendszereknél sikeres szimulációs eljárások módosított változataival.

Az alacsony nyomású gázkisülések területén elsősorban olyan „globális” gázkisülési modellek kialakítása volt célunk, amely a ködfénykisülések összes térrészének egyidejű leírására alkalmasak. A modellektől elvártuk, hogy előzetes feltételezések nélkül adják vissza a ködfénykisülések térbeli tagozódását. Terveztük a kisülések leírására használt hibrid (folyadék + részecske) modellek megbízhatóságának és pontosságának kritikai elemzését, illetve egy-, és kétdimenziós modellek összehasonlítását.

### 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 ismertetjük.

2-dimenziós kristályos és folyadékállapotú Yukawa rendszerek hullámdiszperziós tulajdonságait vizsgáltuk rácsösszegzéssel, molekuladinamikai szimulációval és az ú.n. QLCA (quasilocalized charge approximation) elmélet alkalmazásával. A három

független módszer összehasonlításával azok megbízhatóságát is vizsgáltuk<sup>1</sup>. Szilárd-folyadék fázisátmenet részleteit tanulmányoztuk molekuladinamikai szimulációval, több rendparaméter, illetve termodinamikai mennyiség egyértelműen mutatják a fázisátalakulást<sup>2</sup>. Az átalakulás természetét illetően több évtizedes vita folyik, vizsgálataink jelenlegi állapotukban nagyban hozzájárulnak a témáról rendelkezésre álló ismereteinkhez, de a fázisátalakulás rendjét és dinamikájának részleteit további kutatómunka során fogjuk meghatározni.

2-dimenziós folyadékállapotú Yukawa rendszerek nyírási viszkozitását határoztuk meg széles paraméter tartományban két különböző nemegyensúlyi molekuladinamikai megközelítést alkalmazva. A módszerek konzisztens eredményekre vezettek. Alacsony nyírás esetén a meghatározott viszkozitási együtthatók univerzális skálatörvényt követnek, amennyiben azok értékeit a rendszerre jellemző Einstein-frekvenciával, a hőmérsékletet pedig az olvadási hőmérséklettel normálva ábrázoljuk. Nagy nyírások esetén a rendszer nem-Newtoni viselkedését (a viszkozitás függését az alkalmazott nyírás mértékétől) mutattuk ki<sup>3</sup>. Eredményeinket poros-plazma kísérletek során meghatározott adatokkal, a kísérletezőkkel együttműködve, összehasonlítottuk és jó egyezést találtunk<sup>4</sup>.

3-dimenziós folyadékállapotú Yukawa rendszerek nyírási viszkozitását két különböző egyensúlyi és nem-egyensúlyi molekuladinamikai módszerrel vizsgáltuk. Kihhasználva az egyes módszerek előnyeit, sikerült a vizsgálható paraméter-tartományt jelentősen kiterjesztenünk, és az irodalomban fellelhető korábbi eredményekkel részben összhangban lévő, azoknál lényegesen pontosabb adatokat meghatározunk. Nagy nyírás esetén itt is kimutattuk a rendszer nem-Newtoni jellegét, valamint meghatároztuk a Stokes-Einstein reláció érvényességi tartományát<sup>5</sup>.

Kvázi 2-dimenziós (függőlegesen parabolikus potenciál által összetartott) folyadékállapotú Yukawa rendszerek öndiffúziós tulajdonságait vizsgálva kimutattuk, hogy amíg a rendszer egy rétegbe rendeződik, szuperdiffúzió lép fel. Az összetartó potenciált "puhítva" a rendszer kiszélesedik, és a diffúzió a hagyományos 3-dimenziós anyagokban megszokotthoz hasonlóan normalizálódik<sup>6</sup>.

2-dimenziós, kvázi 2-dimenziós és 3-dimenziós kristályos és folyadékállapotú Yukawa rendszerek szerkezeti, termodinamikai és hullámdiszperziós

---

<sup>1</sup> Hartmann P, Donkó Z, Kalman G J, Kyrkos S, Rosenberg M, Bakshi P; „Collective modes in 2D Yukawa solids and liquids”; *IEEE Trans. Plasma Sci.*, **35** (2007) 337.

<sup>2</sup> Hartmann P, Donkó Z, Bakshi P, Kalman G J, Kyrkos S; „Molecular dynamics studies of the solid-liquid phase transition in 2D Yukawa systems”; *IEEE Trans. Plasma Sci.*, **35** (2007) 332.

<sup>3</sup> Donkó Z, Goree J, Hartmann P, Kutasi K; “Shear Viscosity and Shear Thinning in Two-Dimensional Yukawa Liquids”; *Phys. Rev. Lett.* **96** (2006) 145003.

<sup>4</sup> Donkó Z, Hartmann P, Goree J; "Shear viscosity of strongly-coupled two-dimensional Yukawa liquids: experiment and modeling"; *Modern Physics Letters B* **21** (2007) 1357-1376.

<sup>5</sup> Donkó Z, Hartmann P; “Shear viscosity of strongly coupled Yukawa liquids”; *Phys. Rev. E* **78** (2008) 026408.

<sup>6</sup> Ott T, Bonitz M, Donkó Z, Hartmann P; “Superdiffusion in quasi-two-dimensional Yukawa liquids”; *Phys. Rev. E* **78** (2008) 026409.

tulajdonságainak rácsösszegzésen, QLCA (quasilocalized charge approximation) elméleten és molakuladinamikai szimulációkon alapuló kutatásink eredményeit egy terjedelmes, áttekintő jellegű munkában foglaltuk össze <sup>7</sup>.

2-dimenziós mágneses dipólus-momentummal is rendelkező elektromosan töltött részecskékből álló sokrészecske rendszer alapállapotú konfigurációját vizsgáltuk a mágneses és az elektromos kölcsönhatások arányának függvényében. Meghatároztuk a ferro-, és antiferromágneses fázisok közötti határvonalat a rombusz szimmetriájú rács paramétereinek függvényében. Rácspontokban rögzített, de szabadon forgó mágneses részecskékből álló rendszerben gerjedő hullámok diszperziós tulajdonságait tanulmányoztuk, kimutattuk a folytonosan degenerált alapállapotú rendszerben megjelenő Goldstone módust mind rácsösszegzésen alapuló elméleti számolással, mind molekuladinamikai szimuláció segítségével <sup>8</sup>.

2-dimenziós elektromos dipólus rendszerek (ahol a dipólus momentum merőleges a részecskét tartalmazó síkra) hullámdiszperziós tulajdonságait vizsgáltuk. Összehasonlítottuk különböző elméleti megközelítések (RPA - random phase approximation, QLCA - quasilocalized charge approximation és eQLCA - extended QLCA) eredményeit molekuladinamikai szimulációkkal széles hőmérséklet tartományban. Korábbi kvantum Monte Carlo szimulációkkal kiegészítve meghatároztuk a klasszikus megközelítés alkalmazhatóságának tartományát, amely különös jelentősége abban rejlik, hogy a jelenlegi kvantum szimulációk többnyire Monte Carlo jellegűek, vagyis a folyamatok időbeli lefutása (dinamikája) nem hozzáférhető <sup>9</sup>.

Elektron-lyuk kettősrétegek hullámdiszperziós tulajdonságairól (a fenti módszerekkel) kimutattuk, hogy azok jelentősen eltérnek az irodalomban található elméleti jóslattól. Számításaink szerint a két rétegben ellentétes fázisú részecskeoszillációknak megfelelő módus gap-pel rendelkezik, ez a gap viszont a kristályos fázisban is kis hullámszámoknál egyértékű, a korábbi jóslatokkal ellentétben. Megfigyeltük továbbá ezen gap frekvencia felharmonikusait a többi rezgési módus spektrumában, amely nemlineáris hullámjelenségek léteire utal <sup>10</sup>. Monte-Carlo típusú számítógépes szimulációval feltérképeztük ezen bipoláris kettősrétegek szilárd-folyadék, illetve Coulomb-dipólus fázisdiagramját a hőmérséklet és a rétegtávolság függvényében. Kimutattuk, hogy a rétegek közötti korrelációk közepes rétegtávolság esetén segítik, míg kis rétegtávolság esetén rontják a hosszú távú rend kialakulását <sup>11</sup>.

---

<sup>7</sup> Donkó Z, Kalman G J, Hartmann P; "Dynamical correlations and collective excitations of Yukawa liquids"; *J. Phys.: Condens. Matter* **20** (2008) 413101.

<sup>8</sup> Feldmann J D, Kalman G J, Hartmann P, Rosenberg M; "Ground State of Magnetic Dipoles on a Two-Dimensional Lattice: Structural Phases in Complex Plasmas"; *Phys. Rev. Lett.* **100** (2008) 085001.

<sup>9</sup> Golden K I, Kalman G J, Donkó Z, Hartmann P; "Acoustic dispersion in a two-dimensional dipole system"; *Phys. Rev. B* **78** (2008) 045304.

<sup>10</sup> Kalman G J, Hartmann P, Donkó Z, Golden K I; "Collective Excitations in Electron-Hole Bilayers"; *Phys. Rev. Lett.* **98** (2007) 236801.

<sup>11</sup> Hartmann P, Donkó Z, Kalman G J; "Structure and phase diagram of strongly-coupled bipolar charged-particle bilayers"; *Europhysics Letters*, **72** (2005) 396-402

Erősen kölcsönható kvark-gluon plazma kváziklasszikus leírására molekuladinamikai szimulációt dolgoztunk ki, amellyel tanulmányoztuk a kvark és a gluon összetevők közötti lehetséges energiatranszfert, valamint egy erősen csatolt kvark plazma dinamikus viszkozitását azokban a tartományokban is, amelyekre az elméleti analitikus megközelítés érvényét veszti. A szimulációk szerint az átmeneti (hadronizációs) hőmérséklet felé haladva csökken a viszkozitás, amely alátámasztja a kísérletek alapján felállított ideális folyadék hipotézist <sup>12</sup>.

Az elektromos gázkisülések fizikájának kutatás terén a szimulációs modellek további tesztelésére Langmuir szondás méréseket végeztünk alacsony nyomású hélium gázkisülésekben. A mérések megadták az elektronok sűrűségét és hőmérsékletét. A mért és számolt sűrűség egy kettes faktoron belül egyezett, ami (figyelmbe véve a modellek bemenő adatainak bizonytalanságát, valamint a használt szonda véges méretét) igen jónak számít. A mérési adatok egyértelműen bizonyították, hogy a kisülések negatív fény térrészében egy lényegében termikus (közel szobahőmérsékletű) elektronpopuláció van jelen <sup>13</sup>.

Szimulációkkal vizsgáltuk egy, a különleges körülmények között fellépő gerjesztési folyamat megjelenését gázkisülésekben. Igen nagy térerősségek mellett a gázionok rugalmas ütközésekkel gyors atomokat hoznak létre, amelyek energiája akár több 100 eV értékű is lehet. Ezek a gyors atomok az elektronokhoz hasonlóan ütközésekkel gerjeszthetik a gázatomokat. Emellett a gyors atomok eredményeink szerint lényegesen befolyásolhatják a kisülés ionizációs mérlegét is <sup>14</sup>.

Behatóan vizsgáltuk az alacsony nyomású gázkisülések modelljeiben használt feltételezések jogosságát és a modellek megbízhatósági határait <sup>15</sup>.

### A kutatási eredmények visszhangja, publikációk

A pályázat keretében folytatott kutatások eredményei alapján 2 nemzetközi konferencián tartottam meghívott előadást (az előadó neve aláhúzással jelezve):

“Numerical experiments on complex plasmas: 2D Yukawa systems”  
XXVIII. ICPIG, July 15-20, 2007, Prague, Czech Republic

“Numerical experiments on complex plasmas”  
16th Symposium on Application of Plasma Processes (Podbanske, Slovakia, 2007  
January 20-25)

---

<sup>12</sup> Hartmann P, Donkó Z, Kalman G J, Lévai P; „Molecular dynamics simulation of strongly coupled QCD plasmas”; *Nucl. Phys. A*, **774** (2006) 881-884.

<sup>13</sup> Bánó G, Hartmann P, Kutasi K, Horváth P, Plasil R, Hlavenka P, Glosik J, Donkó Z; "Combined Langmuir probe, electrical and hybrid modelling characterization of helium glow discharges"; *Plasma Sources Sci. Technol.* **16** (2007) 492–500

<sup>14</sup> Donkó Z, Hartmann P, Kutasi K; "Effects of fast neutral particles in low-pressure gas discharges"; *J. Phys. Conf. Series* **71** (2007) 021008

<sup>15</sup> Donkó Z, Hartmann P, Kutasi K; "On the reliability of low-pressure dc glow discharge modelling"; *Plasma Sources Sci. Technol.* **15** (2006) 178–186

A pályázat keretében végzett munkából született publikációk száma:	24
Nemzetközileg referált folyóiratcikkek száma:	16
Megjelent folyóiratcikkek össz impakt faktora:	44,64
A megjelent (ill. beküldött) cikkekre eddig ismert független hivatkozások száma:	38

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

#### A kutatási téma lehetséges további irányai

Az itt ismertett kutatási területeken munkám szerencsére tovább folytatódhat a PD-75113 sz. „Fázisátalakulás és kollektív dinamika kétdimenziós sokrészecske rendszerekben“ című, 2009 és 2011 között futó OTKA pályázat keretében. Ebben a pályázatban legfontosabb célom a Yukawa rendszerek folyadék – szilárd átmenetének tanulmányozása, a fázisdiagram meghatározása. Ennek fényében tervezem a korábbi számítógépes szimulációkon alapuló kutatásaink folytatását és azok saját poros-plazma kísérletekkel való kiegészítését.

Az erősen csatolt plazmák témakörében egy NSF (USA, együttműködő partner: Prof. G. J. Kalman, Physics Department, Boston College) projekthez kapcsolódó MTA NSF/102 projekt támogatja további együttműködésünket.

#### Az elért eredmények hasznosításának lehet ségei

Az elért eredmények hasznosítására rövid távon az alacsony nyomású gázkisülések területén látunk lehetőséget. Ilyen plazmákat számos, csúcstechnológiát képviselő iparág használ eredményesen (fényforrástechnika, chip-gyártás, felületkezelés, biokompatibilis felületek létrehozása, plazma alapú sterilizálás, stb.). Az erősen csatolt plazmák tanulmányozása során alapvető, esetenként évszázados (pl. áramlások, fázisátalakulások. stb.) tudományos kérdések megválaszolásához járultunk hozzá.

\* \* \*

Végül megköszönöm az OTKA támogatását, amelynek köszönhetően az ismertett munkát elvégezhettük és az eredményeket elérhettük.

Hartmann Péter  
(témavezető)

Budapest, 2009 február 24.