

Erősen csatolt plazmák molekuladinamikai szimulációja

Donkó Zoltán



MTA
Szilárdtestfizikai és Optikai Kutatóintézet

&



Physics Department, Boston College, Chestnut Hill, MA, USA
(Visiting Scholar)

Erősen csatolt plazmák molekuladinamikai szimulációja

- MTA SZFKI
- BOSTON COLLEGE, PHYS. DEPT.

Köszönét / Együttműködések



- Nyíri B, Holló S - Tungsram/GE (T-15)
- **Gabor J. Kalman** - Boston College, USA (T-13)
- Hartmann P, Kutasi K - MTA SZFKI (T-11)
- K. I. Golden - University of Vermont, USA
- J. Goree - University of Iowa, USA
- M. Rosenberg - UCSD, USA
- S. Kyrkos - Boston College / Le Moyne College, USA
- M. Bonitz, T. Ott - Christian Albrechts University, Kiel, Germany

Támogatás

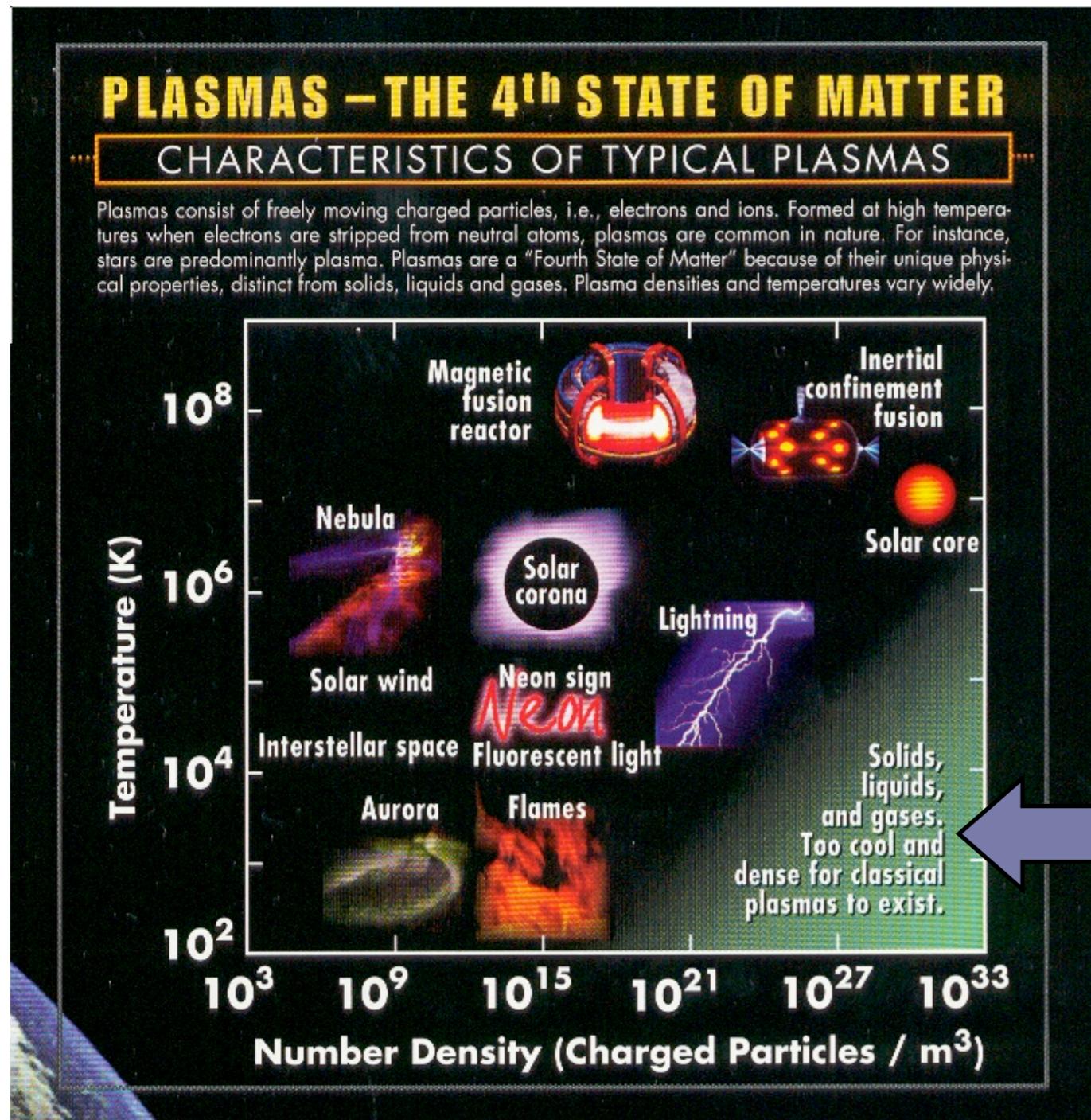
- OTKA
- MTA-NSF

Tartalom

- Plazmák / Erősen csatolt plazmák / Fizikai rendszerek
- Miért van szükség szimulációkra?
- Molekuladinamikai (MD) szimuláció alapjai
- Mit tanulhatunk az MD szimulációkból?
- Eredmények, példák
 - Szerkezeti és termodinamikai jellemzők
 - Transzport
 - Kollektív jelenségek (hullámok)
- Összefoglalás

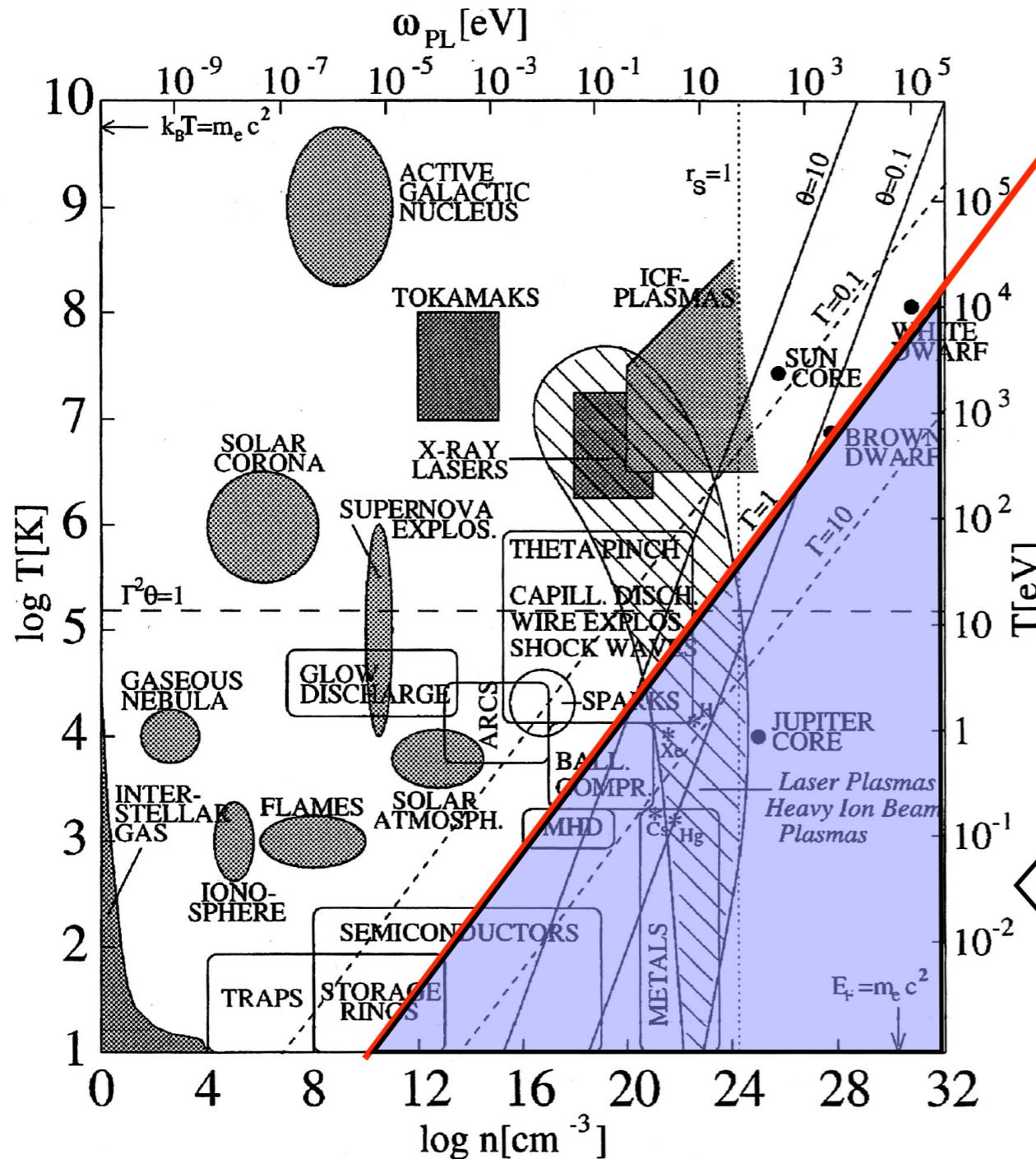


Plazmák



American Physical Society
“fusion chart”

Plazmák.... egy jobb fázisdiagram



$$\Gamma = 1$$

Tekintsük a plazma
egy összetevőjét!

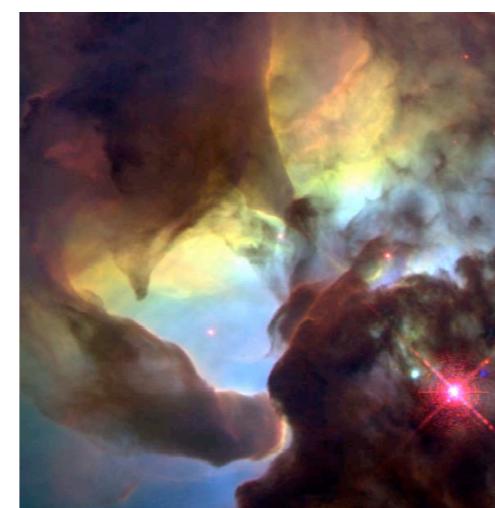
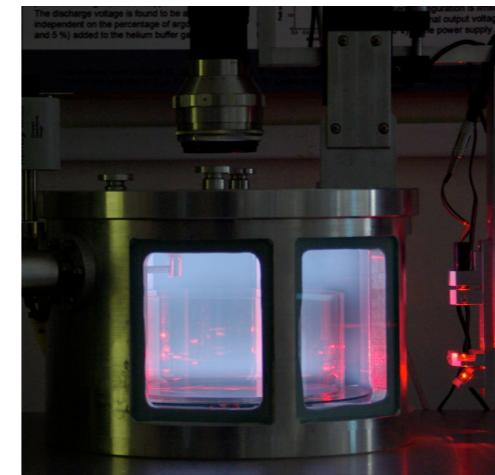
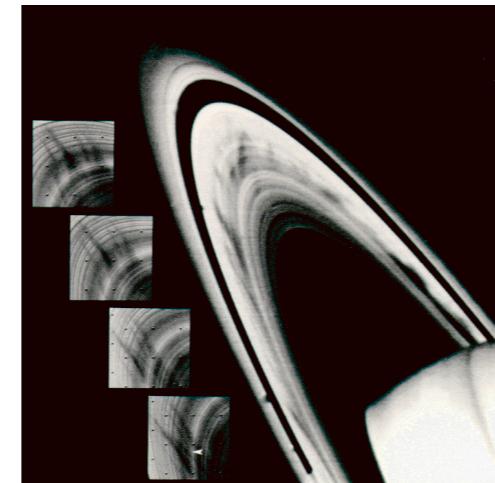
$$\Gamma = \frac{V_{\text{POT}}}{V_{\text{KIN}}}$$

ERŐSEN CSATOLT PLAZMÁK

R. Redmer, Phys. Reports 282, 35 (1997)

Fizikai rendszerek

- **3D rendszerek** (porfelhők, neutroncsillagok, reaktív plazmák, poros plazma kísérletek mikrogravitációs körülmények között)
- **2D / Kvázi-2D rétegek** (poros plazmák gázkisülésekben)
- 1D láncok (csapdák)
- 2D klaszterek (csapdák)
- 3D klaszterek (Yukawa "labdák")
- Kettősrétegek (csapdák, félvezetők)
- Dipól rendszerek (félvezetők)
- **Egykomponensű rendszerek**
- Többkomponensű rendszerek (asztro)
-



- *Klasszikus, elektromosan töltött sokrészecske-rendszerek, Coulomb, illetve Debye-Hückel / Yukawa potenciállal*

$$\phi_C(r) = \frac{Q}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r}$$

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

- *Az erősen csatolt tartományban*

$$\Gamma = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Q^2}{akT} \gg 1$$

csatolási paraméter

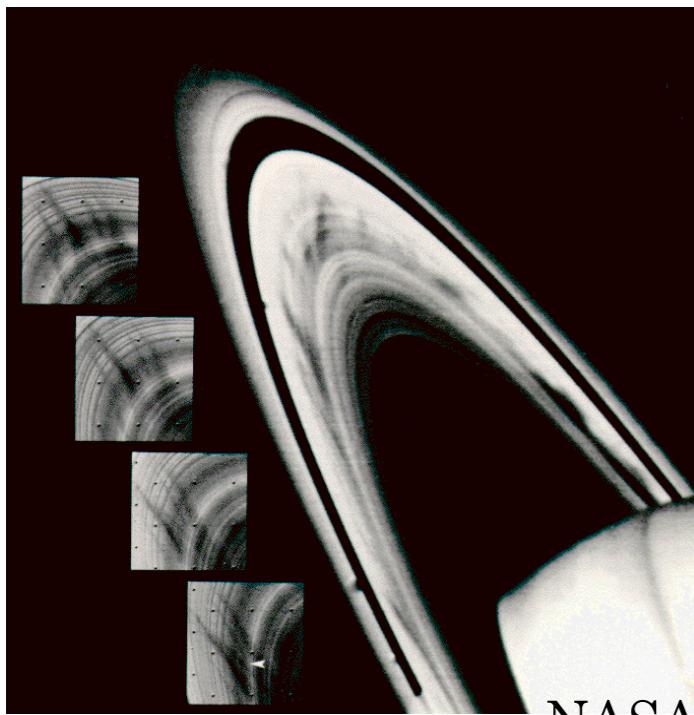
a: Wigner-Seitz sugár

$\kappa = a/\lambda_D$: árnyékolási paraméter

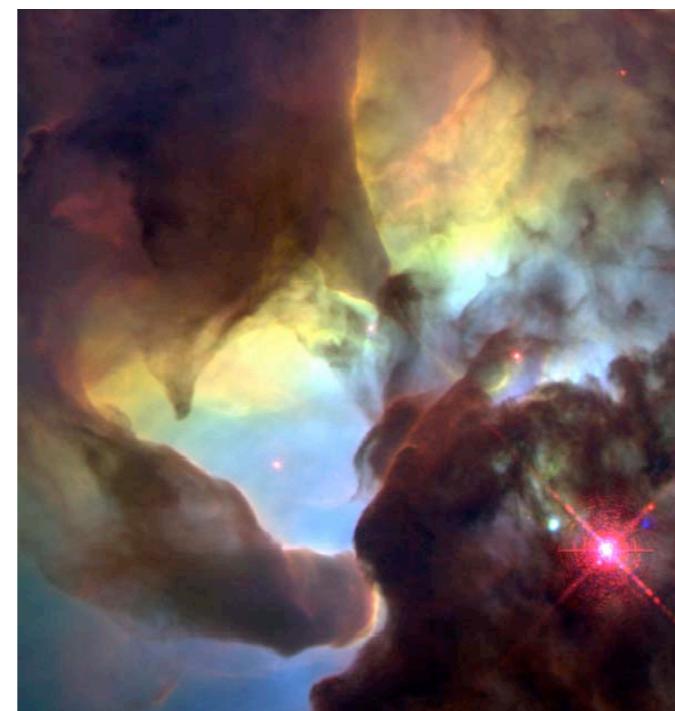


Poros plazmák

1980-as évek: Voyager2
képek a Szaturnusz
gyűrűiről → "küllők"
→ töltött por



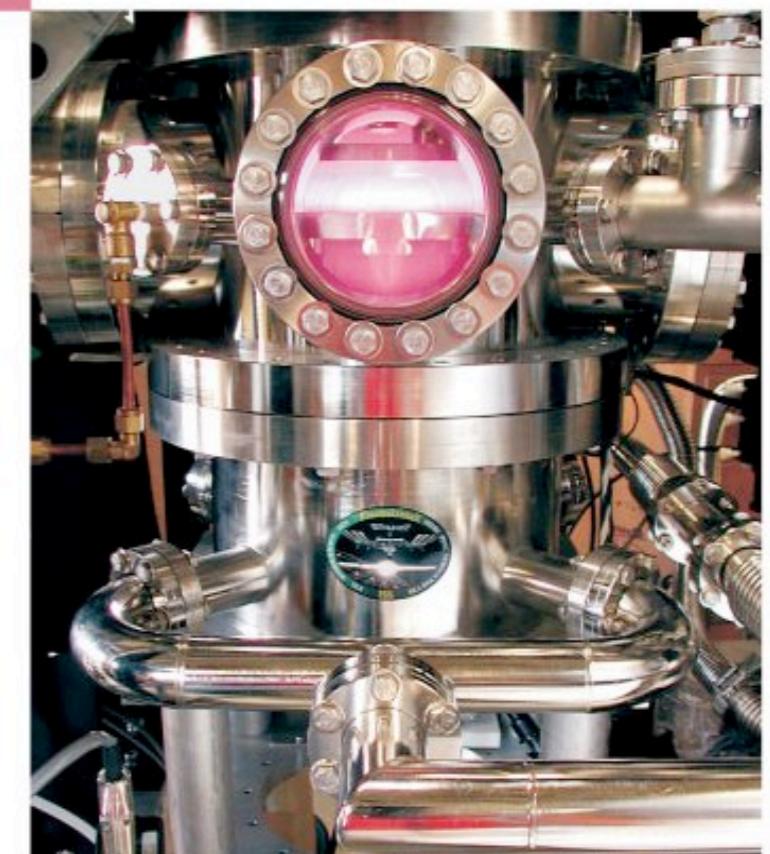
Porfelhők
Lagoon Nebula (Hubble)



Mikrométeres porrészecskék reaktív plazmákban:
G. S. Selwyn, J. Singh, R. S. Bennett,
J. Vac. Sci. Technol. A7, 2758 (1989).

"Dusty plasmas in the Laboratory, Industry and Space"
Robert L. Merlino and John A. Goree
Physics Today, pp. 32 - 38, July 2004

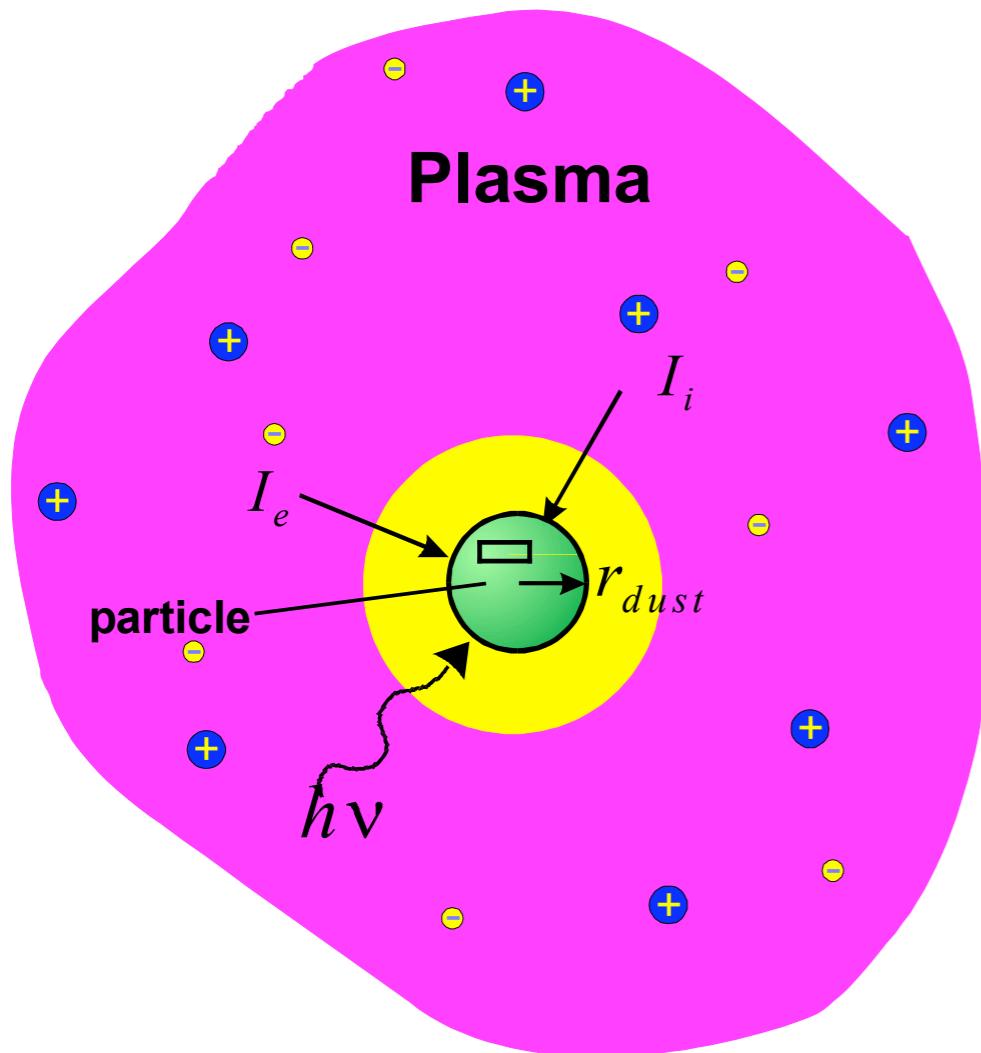
PHYSICS TODAY



Looking into dusty plasmas

Komplex (poros) plazmák: “Egykomponensű plazma” (OCP) modell

A plazmának csak egy komponensét vesszük explicit módon figyelembe, a többi komponens hatása a kölcsönhatási potenciálon keresztül érvényesül



Jellemző energiák (Coulomb)

$$V_{\text{KIN}} = kT$$

$$V_{\text{POT}} = \frac{Q^2}{4\pi\varepsilon_0 a}$$

a : Wigner-Seitz radius

Csatolási paraméter

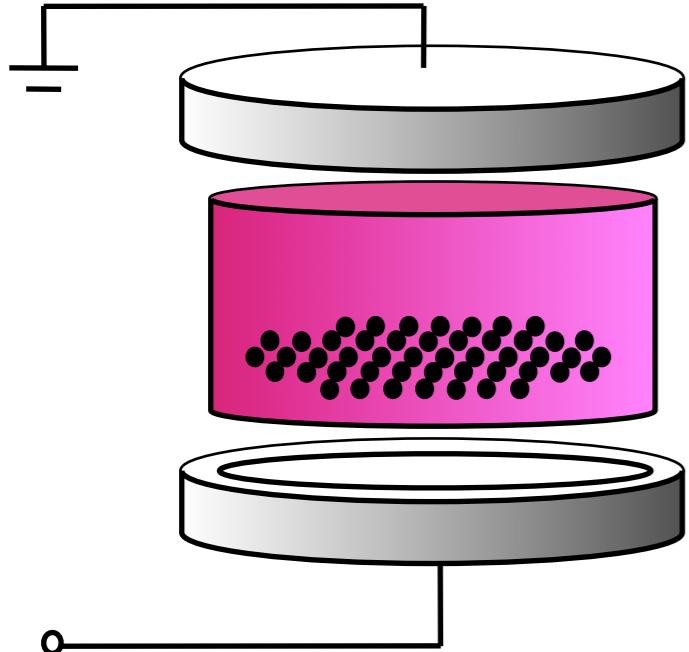
$$\Gamma = \frac{V_{\text{POT}}}{V_{\text{KIN}}} = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \frac{Q^2}{akT}$$

Debye / Yukawa potenciál & árnyékolási paraméter:

$$\Phi(r) = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \frac{Q \exp(-r/\lambda_D)}{r} ,$$

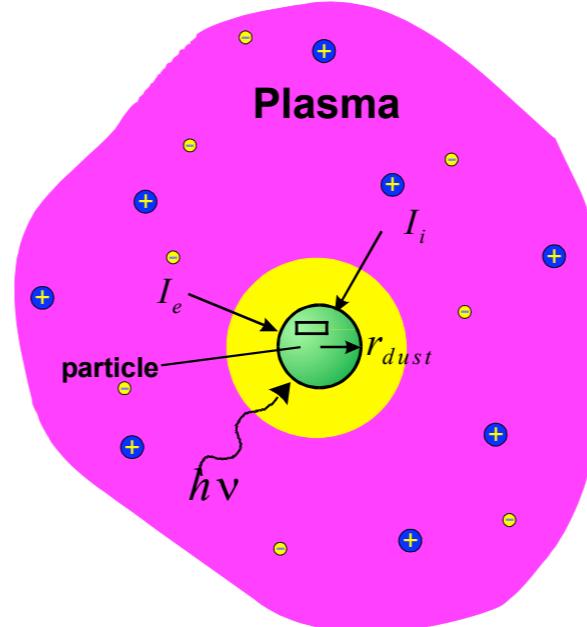
$$\kappa = \frac{a}{\lambda_D}$$

Kísérleti megvalósítás (poros plazma)

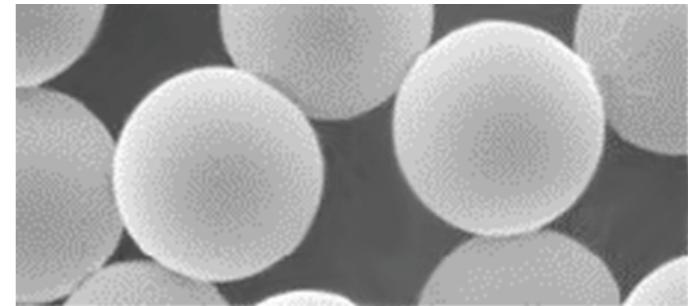


RF
gázkisülés

gravitáció és
elektromos tér
egyensúlya
lebegteti a
részecskéket

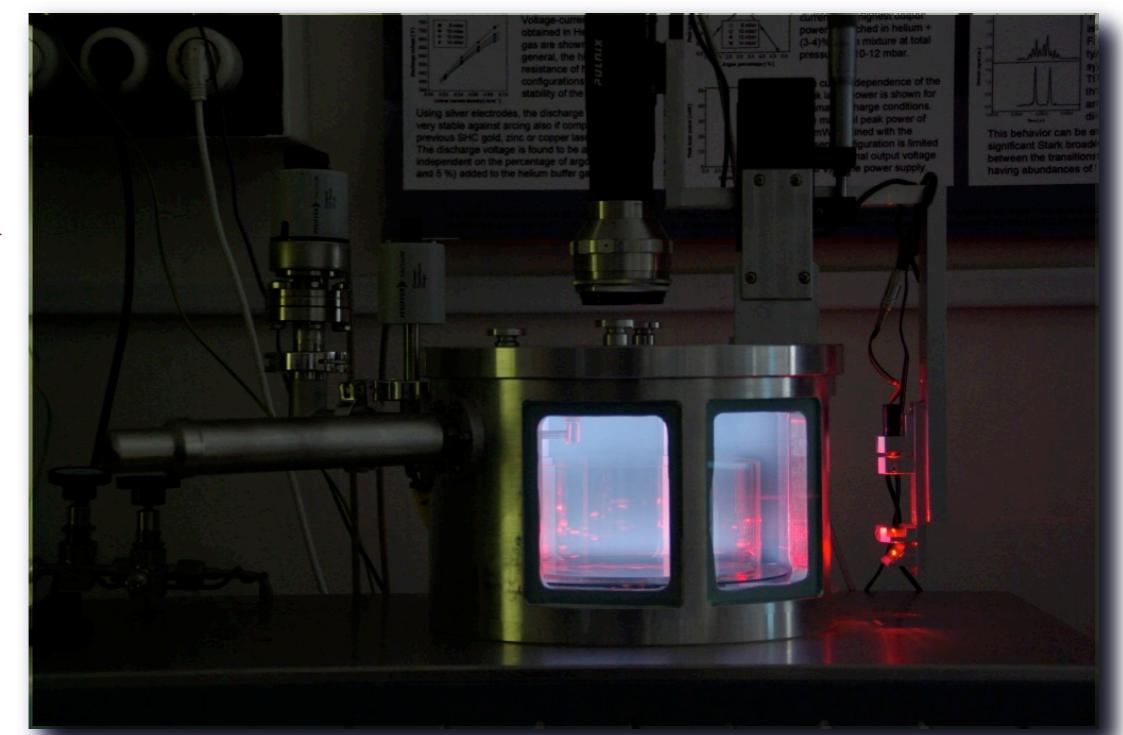


melamine-formaldehyde
részecskék

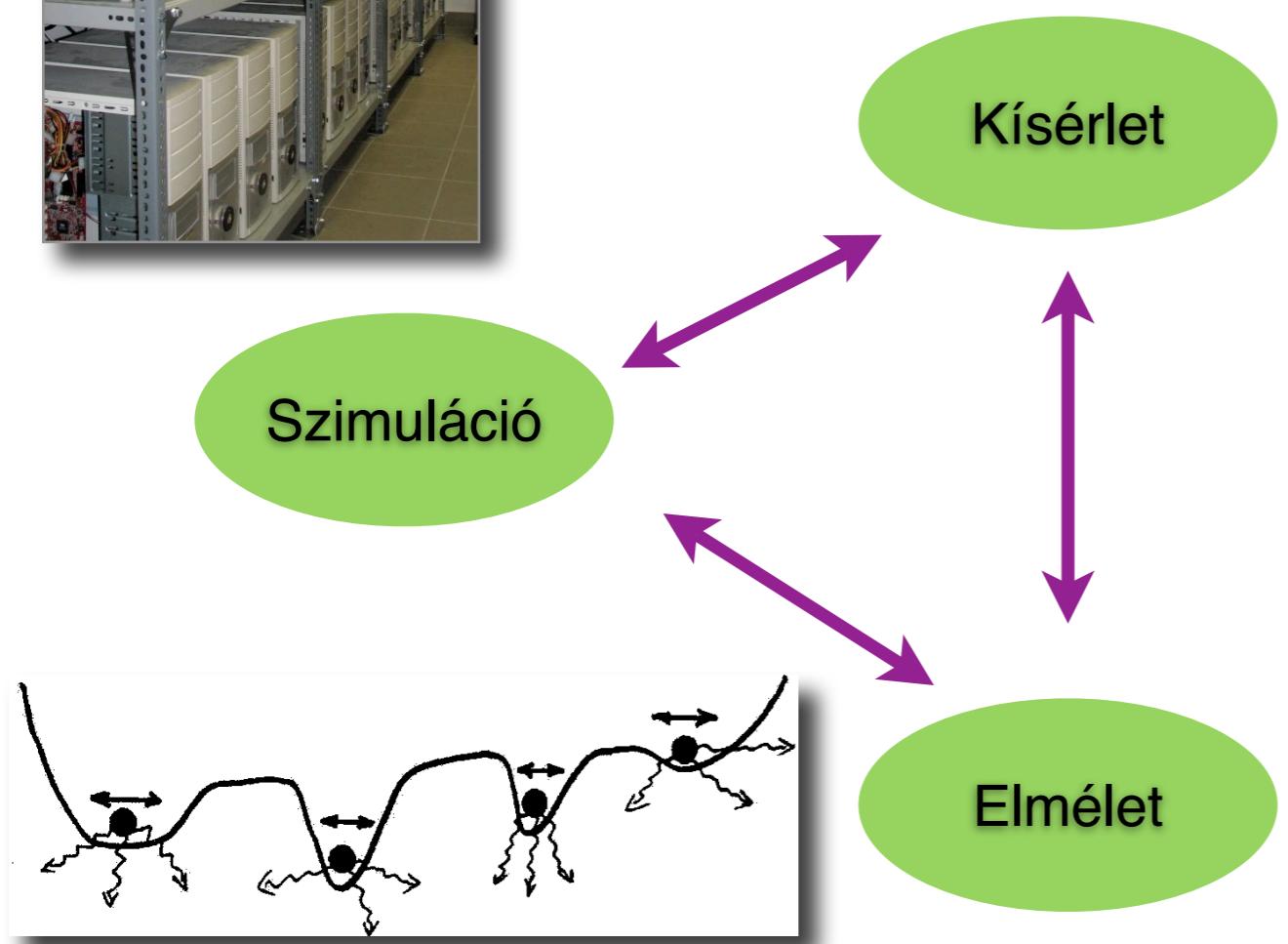
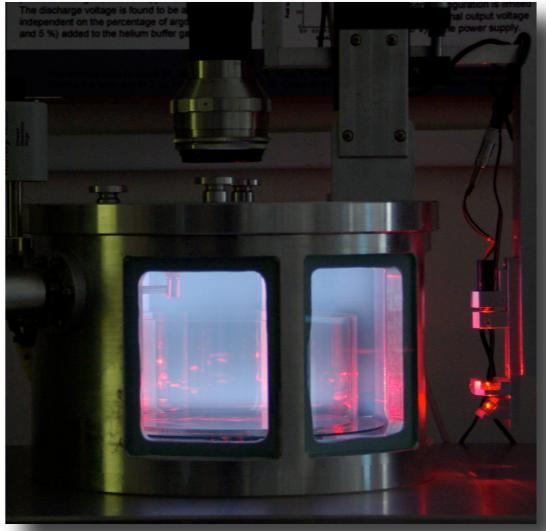


MTA
SZFKI

Hartmann
Péter



Miért van szükségünk szimulációkra?



A szimulációk

- hasznosak az elméleti eredmények ellenőrzésére,
- információt adnak elméleti, eredmények hiányában,
- segítenek a kísérleti eredmények értelmezésében,
- segítenek a fontos folyamatok azonosításában,
- lehetővé teszik a rendszer megjelenítését.

A hardver fejlődése

THE JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS VOLUME 45, NUMBER 6 15 SEPTEMBER 1966

Monte Carlo Study of a One-Component Plasma. I*

S. G. BRUSH†

Lawrence Radiation Laboratory, University of California, Livermore, California

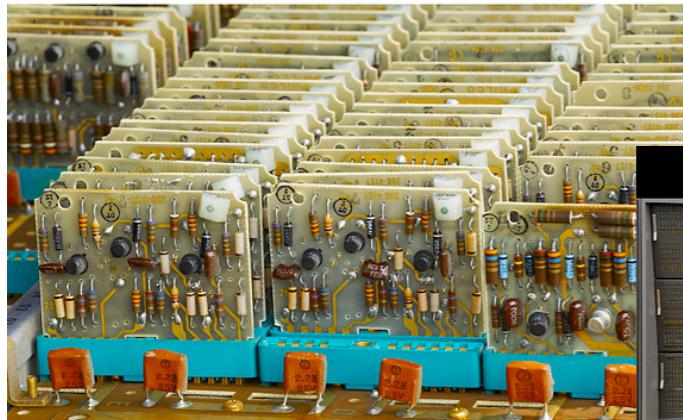
AND

H. L. SAHLIN AND E. TELLER

*Lawrence Radiation Laboratory, University of California, Livermore, California, and
Department of Applied Science, University of California, Davis/Livermore, California*

(Received 28 March 1966)

been made of a plasma of heavy ions immersed in a uniform neutralizing background from 32 to 500 particles, with periodic boundary conditions, were used. The results are presented in terms of a dimensionless parameter $\Gamma = (4\pi n/3)^{1/3} [(Ze)^2/kT]$, where n is the density (particles per cubic centimeter), T is the temperature (degrees Kelvin), k is the Boltzmann constant, e is the electronic charge, and Z is the atomic number. Thermodynamic properties of the plasma were obtained for values of Γ ranging from 0.05 to 100.0 by the Monte Carlo (MC) method.



Első MD szimulációk: 1960-as évek



A molekuladinamikai (MD) szimuláció alapjai

Egyensúlyi

A rendszert “hagyjuk” a
kölcsönhatásoknak
megfelelően fejlődni

&

nemegyensúlyi MD

A rendszert perturbáljuk
és
mérjük a válaszát

MD szimuláció alapjai

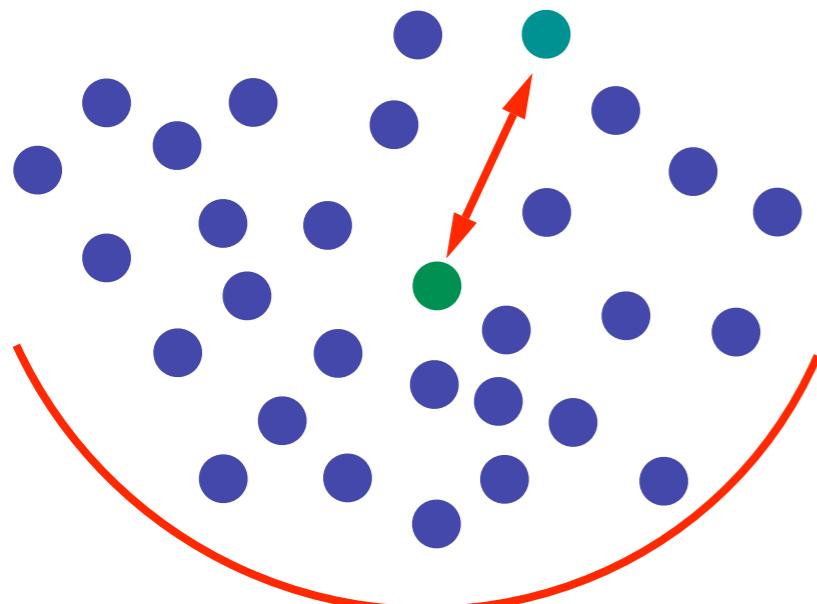
Egyensúlyi MD

SZIMULÁCIÓ “MAGJA” + MÉRÉSEK

N részecske fázistérbeli trajektóriáinak meghatározása

A számunkra “érdekes” mennyiségek meghatározása a koordinátákból

pl. véges rendszer, külső összetartó potenciállal



$$m\ddot{\mathbf{r}}_i = \sum_{i \neq j} \mathbf{F}_{i,j}(t) + \mathbf{F}_{\text{ext}}(t) - m\eta\mathbf{v}_i(t) + \mathbf{R}$$

$$\mathbf{F}_{i,j} = -\frac{\partial \phi(r_{ij})}{\partial r}$$

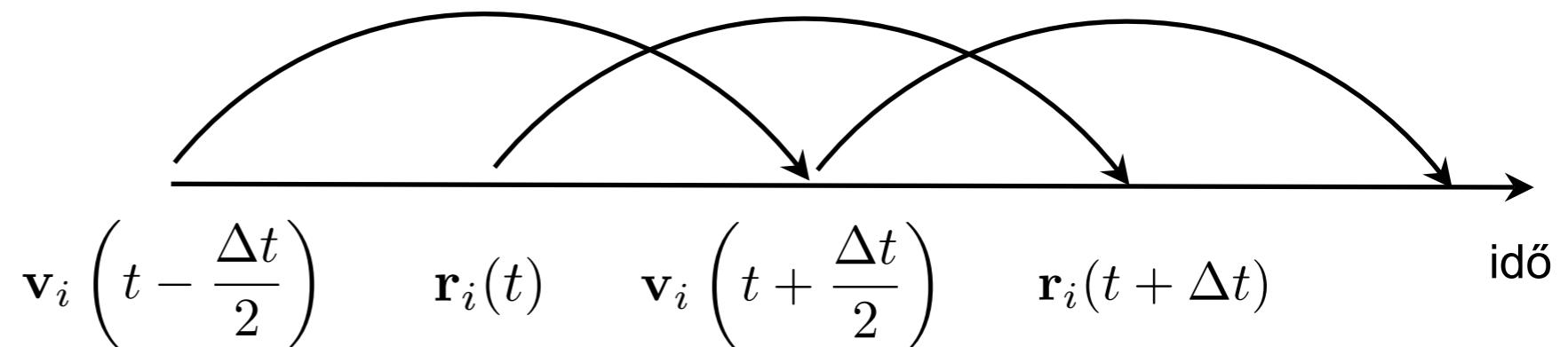
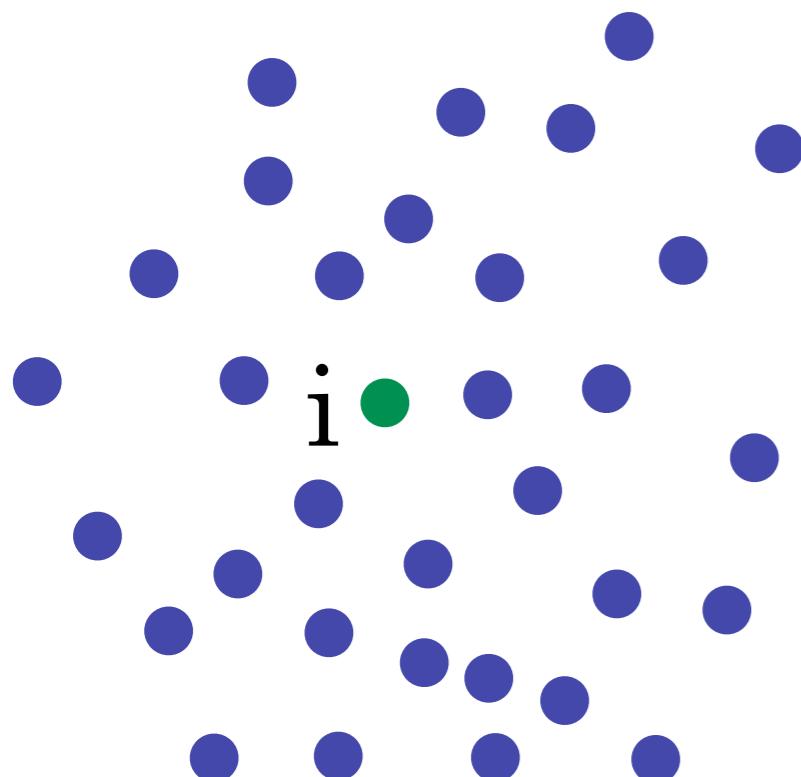
$$\mathbf{F}_{\text{ext}} = -fr^2 \text{ (e.g.)}$$

Súrlódás

Véletlenszerű erő
(Langevin erő)

MD szimuláció alapjai

A mozgásegyenlet integrálása
(egy lehetséges séma)



$$\mathbf{v}_i \left(t + \frac{\Delta t}{2} \right) = \mathbf{v}_i \left(t - \frac{\Delta t}{2} \right) + \frac{\mathbf{F}_i(t)}{m} \Delta t$$

$$\mathbf{r}_i(t + \Delta t) = \mathbf{r}_i(t) + \mathbf{v}_i \left(t + \frac{\Delta t}{2} \right)$$

$$m\ddot{\mathbf{r}}_i = \sum_{i \neq j} \mathbf{F}_{i,j}(t) + \mathbf{F}_{\text{ext}}(t) - m\eta\mathbf{v}_i(t) + \mathbf{R}$$

$\sum \mathbf{F}_{i,j}(t)$ meghatározása ?

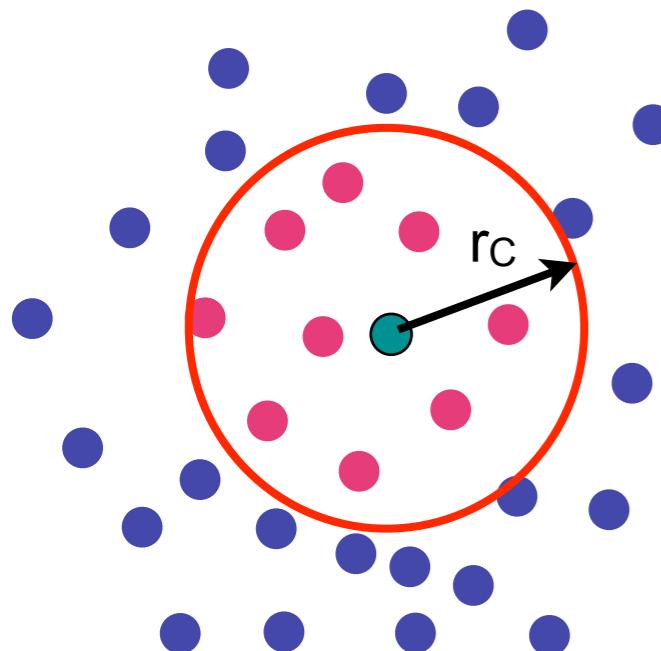
MD szimuláció alapjai

Rövid hatótávolságú erők

A kölcsönhatást csak a “közel” lévő részecskepárok között kell figyelembe venni
 → r_C : levágási sugár

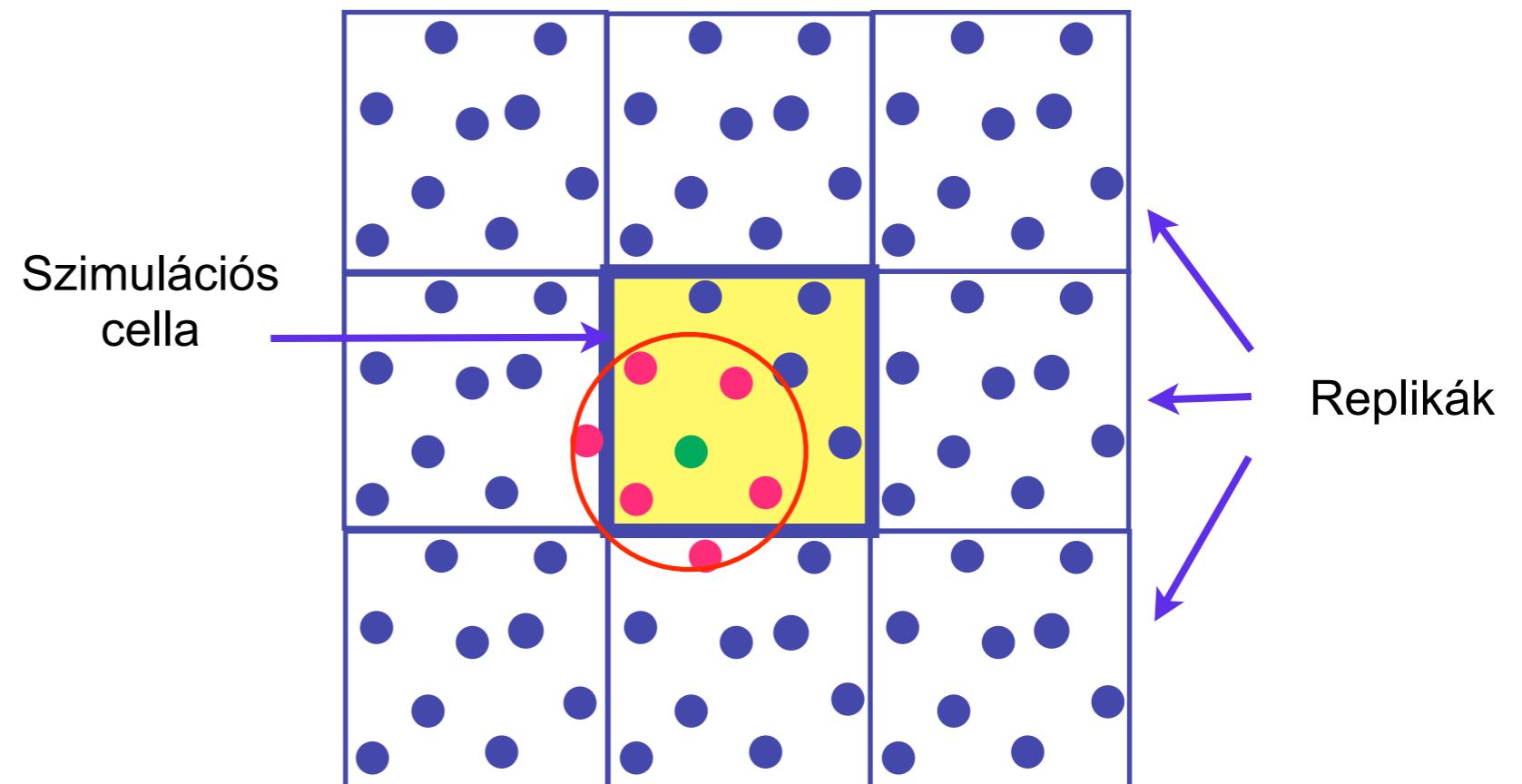
$$\mathbf{F}_i(t) = \sum_{r_{ij} < r_C} \mathbf{F}_{i,j}(t)$$

Véges rendszer



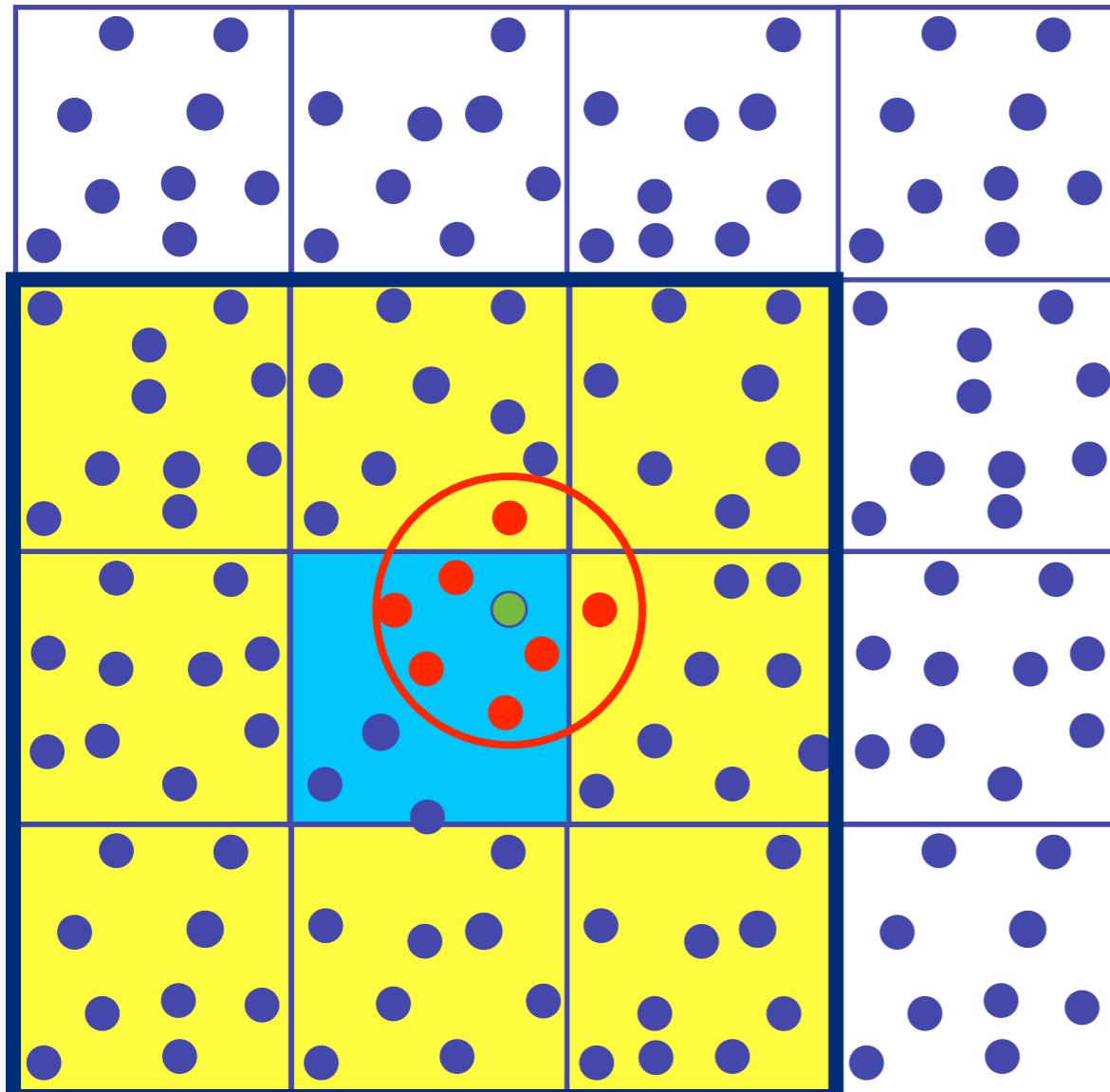
Végtelen rendszer

Periódikus határfeltételek



MD szimuláció alapjai

Hogyan keressük meg a szomszédokat?



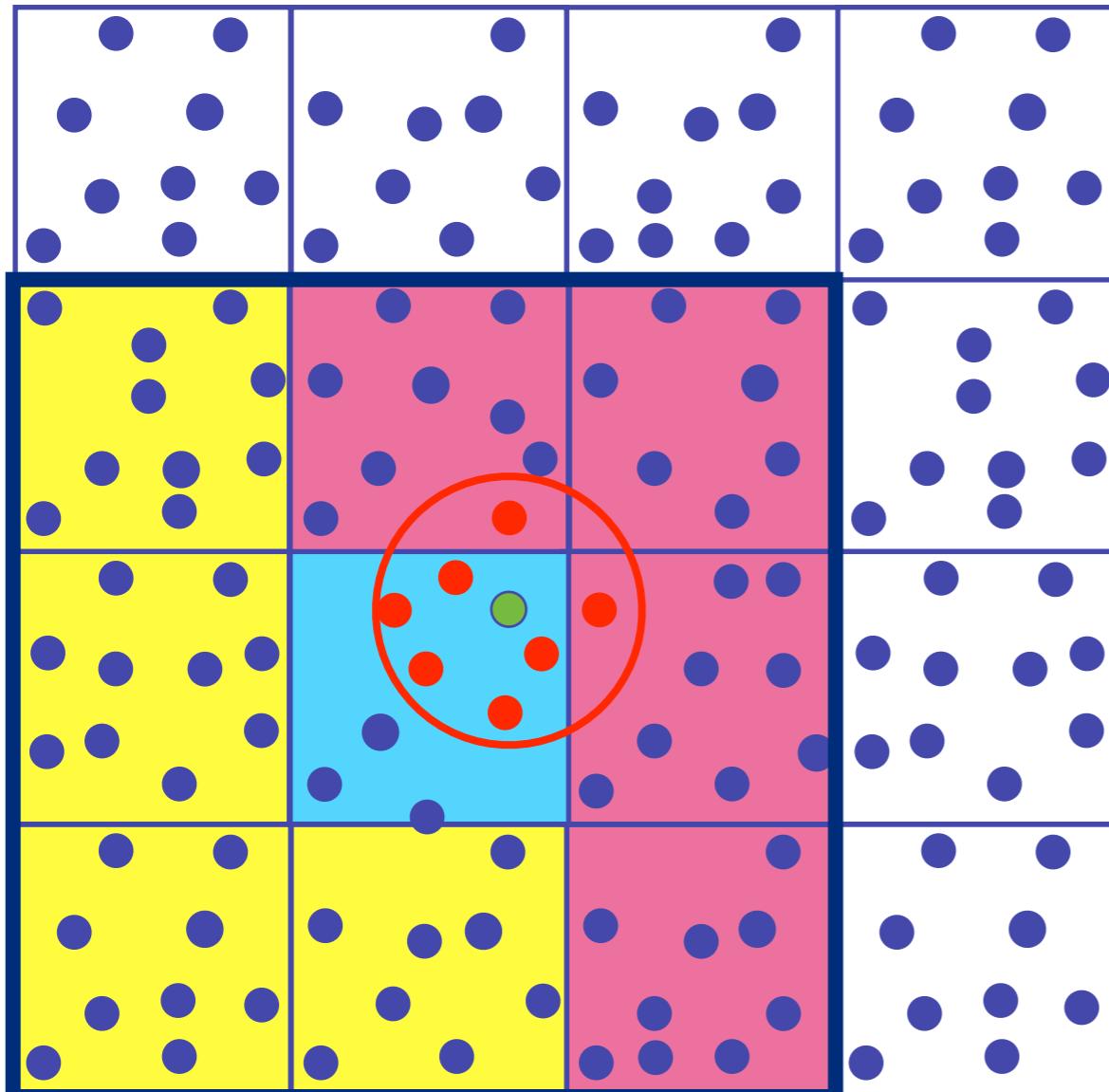
A szimulációs cellát
"alcellákra" osztjuk fel

Alcellák
replikái

- minden részecskére, $i=1\dots N$, megvizsgáljuk, hogy a j -edik részecske szomszéd-e?
- Alcellák / részecskelisták ("chaining mesh")

MD szimuláció alapjai

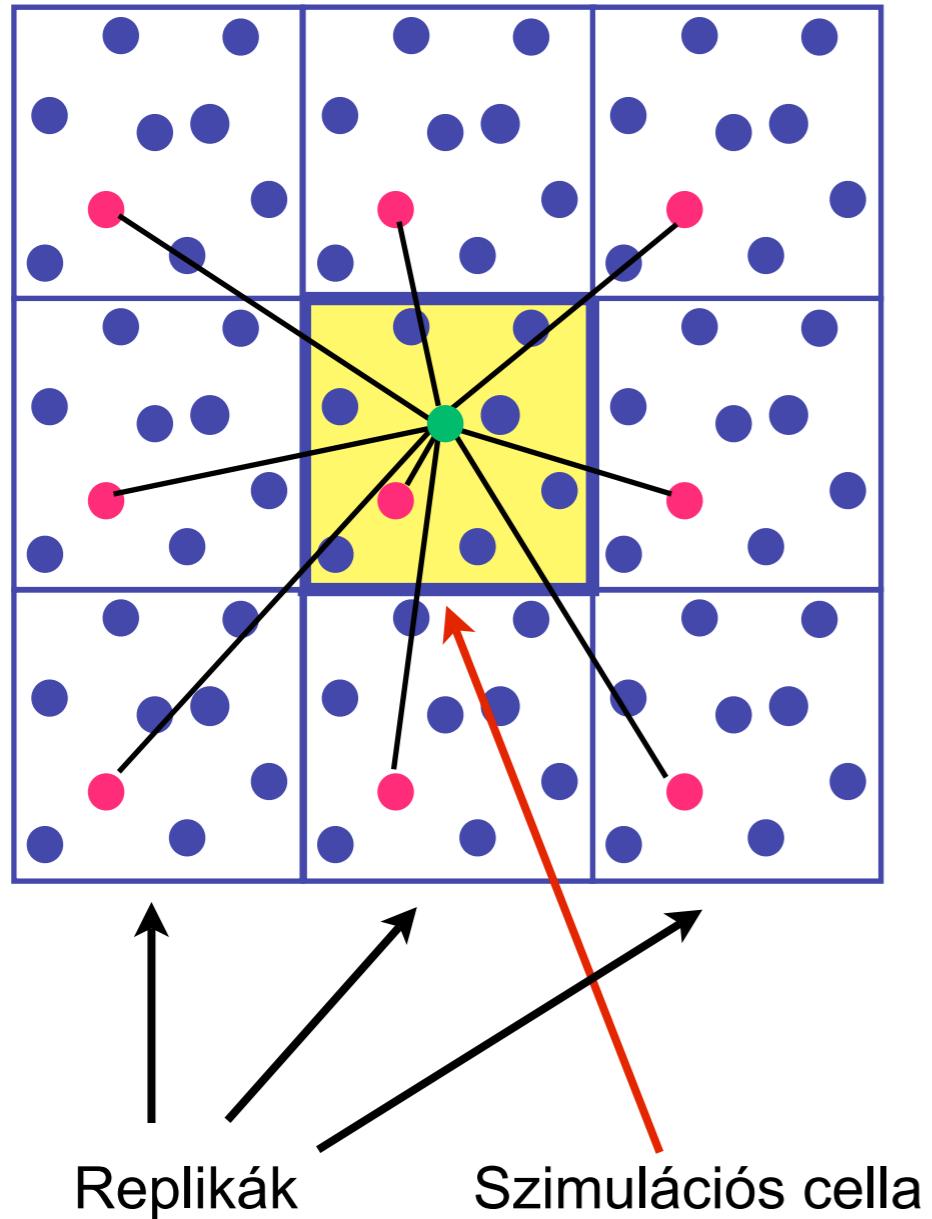
Hogyan keressük meg a szomszédokat?



- minden részecskére, $i=1\dots N$, megvizsgáljuk, hogy a j -edik részecske szomszéd-e?
- Alcellák / részecskelisták ("chaining mesh")
- Hozzunk létre egy részecskelistát minden alcellára: $L(m,n)$
- Egy adott (m,n) alcellában lévő összes részecske szomszédjai a saját és szomszédos cellákban vannak; ezek (m,n) , $(m,n+1)$, $(m+1,n)$, $(m+1,n+1)$, $(m+1,n-1)$, ha az alcella élhossza nem kisebb, mint a levágási sugár

D. Frenkel and B. Smit, Understanding Molecular Dynamics Simulations (Academic Press, 2001)

MD szimuláció alapjai



Hosszú hatótávolságú erők

(pl. Coulomb):

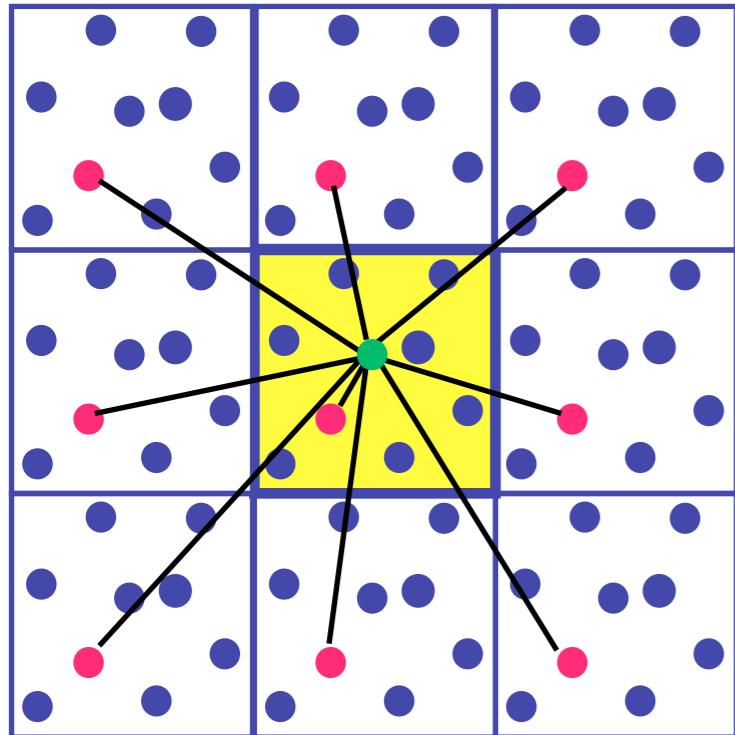
Nincs levágási sugár!

$$\mathbf{F}_i(t) = \sum_{\text{cell+images}} \mathbf{F}_{i,j}(t)$$

Megoldás:

- Ewald összegzés
- Részecske-részecske részecske-rács módszer (PPPM, P3M) (Hockney & Eastwood)

MD szimuláció alapjai



A PPPM módszer
véges méretű töltésfelhők



$$\rho(r) = \rho_0 \left(1 - \frac{r}{R}\right)$$

$$\int_0^R \rho(r) dV = Q$$

Ez esetben a Fourier transzformáció sávkorlátozott, a töltésfelhők kölcsönhatása a \mathbf{k} -térben leírható, a replikákat "automatikusan" figyelembe veszi (PM)

$$\text{if } r \geq R : F(\bullet \bullet) = F(\bullet \bullet)$$

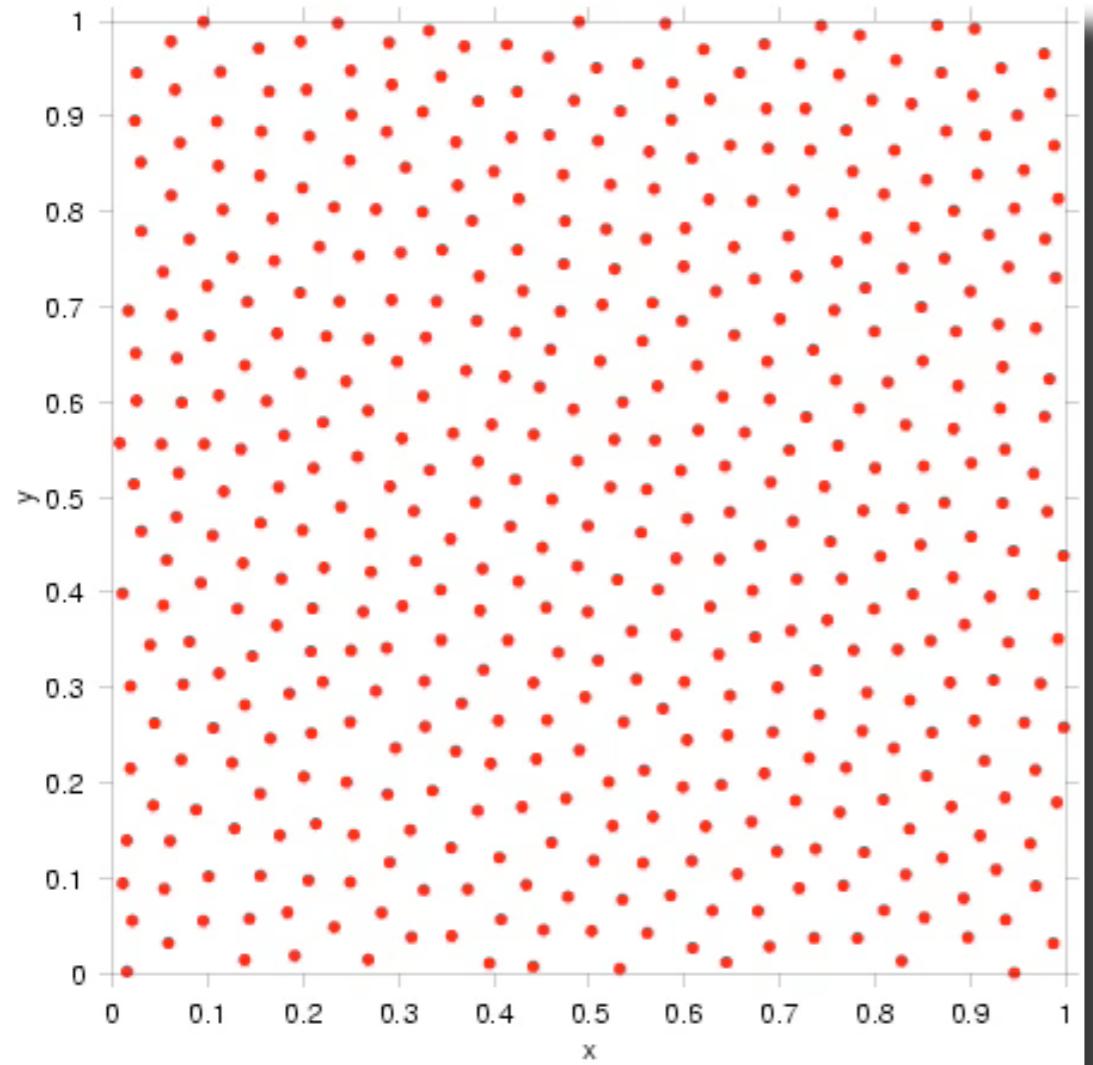
$$\text{if } r < R : F(\bullet \bullet) = F(\bullet \bullet) + F_{\text{corr}}(r)$$

Hockney R W and Eastwood J W 1981
Computer Simulation Using Particles
(New York: McGraw-Hill)

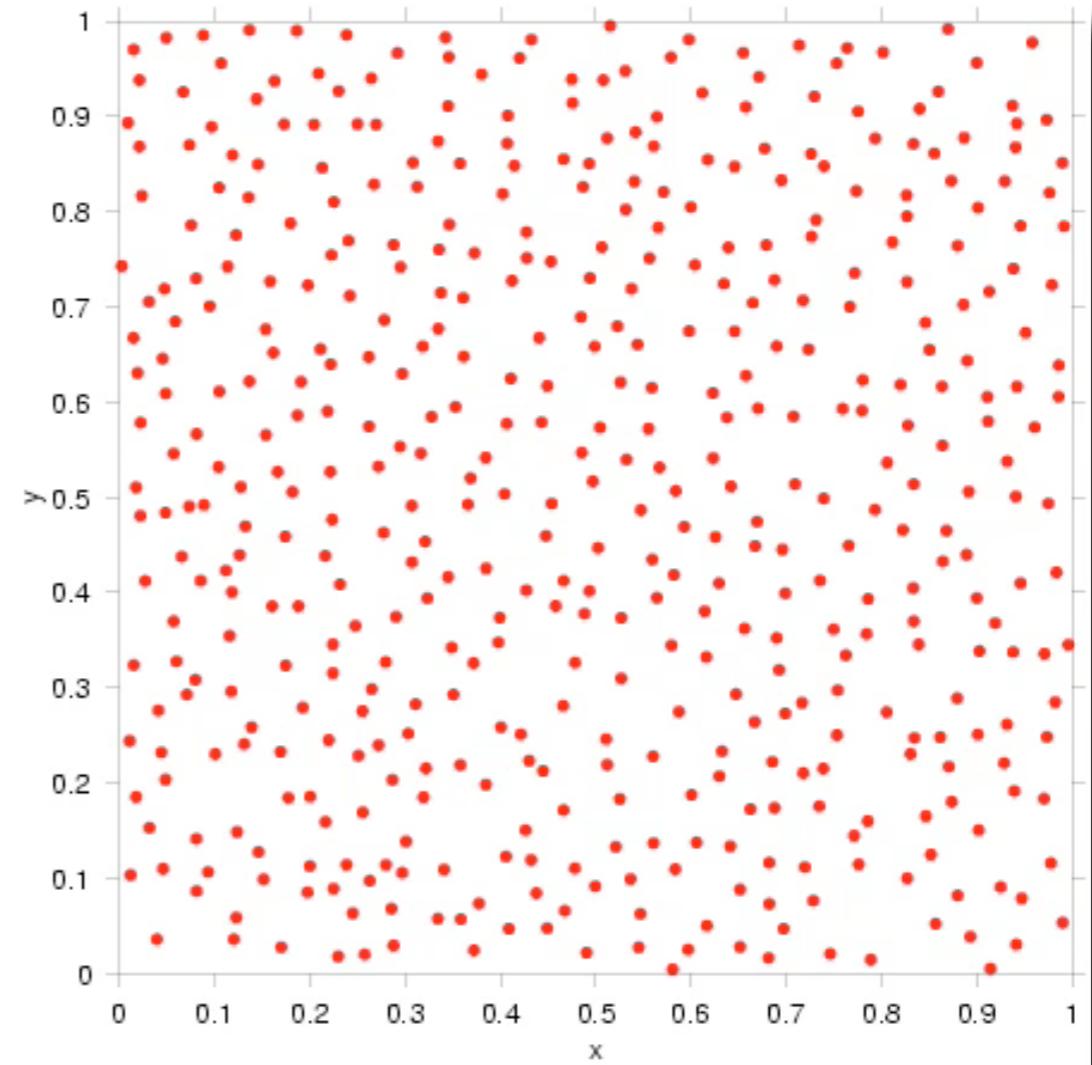
A közel elhelyezkedő részecskepárok esetén
egy korrekciós erőt kell alkalmazni (PP)

MD: mit látunk, ha végre működik?

$\Gamma=120, \kappa=1$

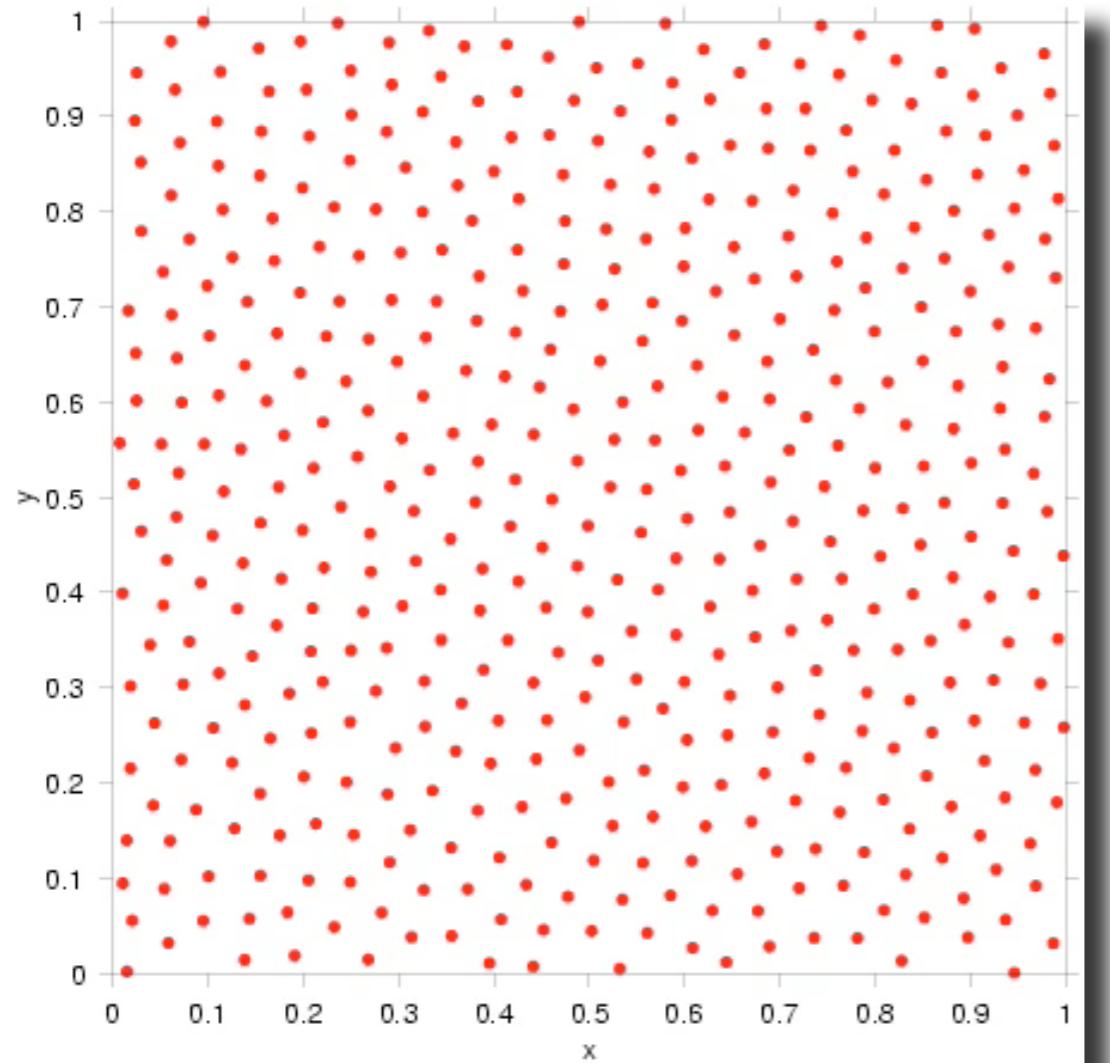


$\Gamma=5, \kappa=1$



2D (súrlódásmentes) Yukawa folyadék

MD: ... és mit tanulunk belőle?



$(\mathbf{r}_i, \mathbf{v}_i) \quad i = 1 \dots N$

Fázistér koordináták

Korrelációs
függvények

Szerkezet

Termodinamikai
jellemzők

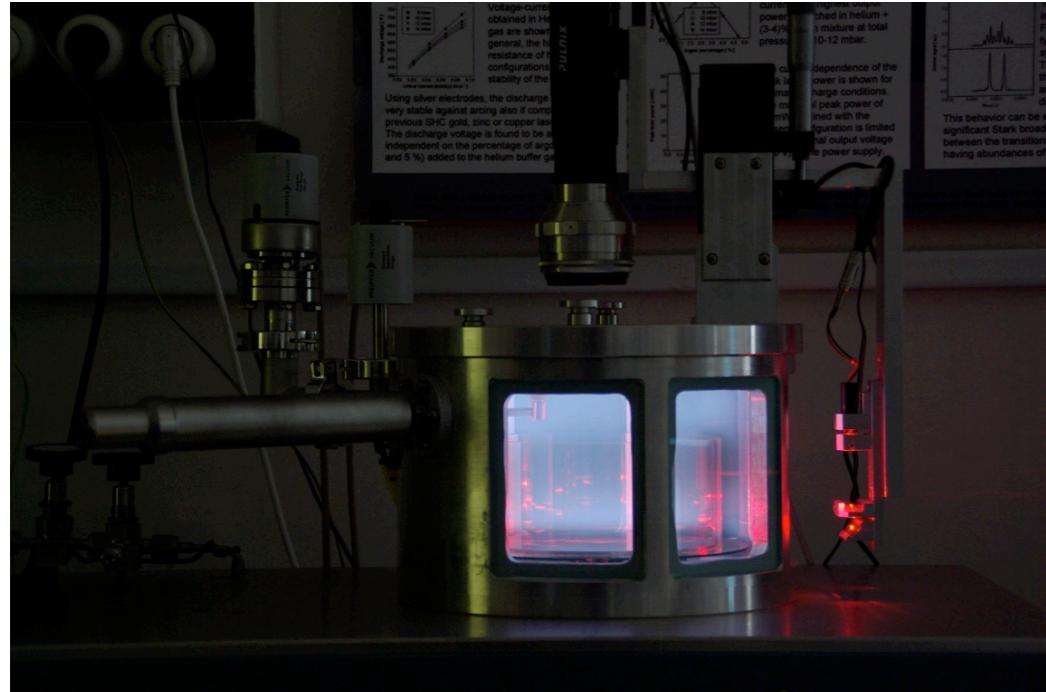
Transzport
paraméterek

Kollektív
gerjesztések

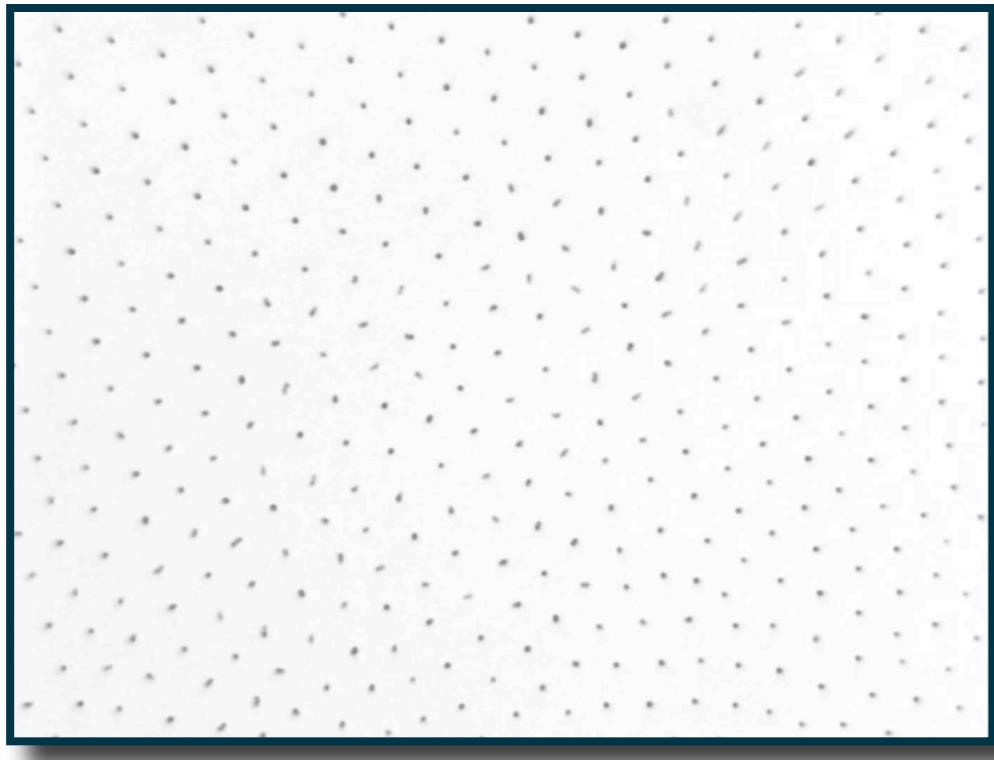
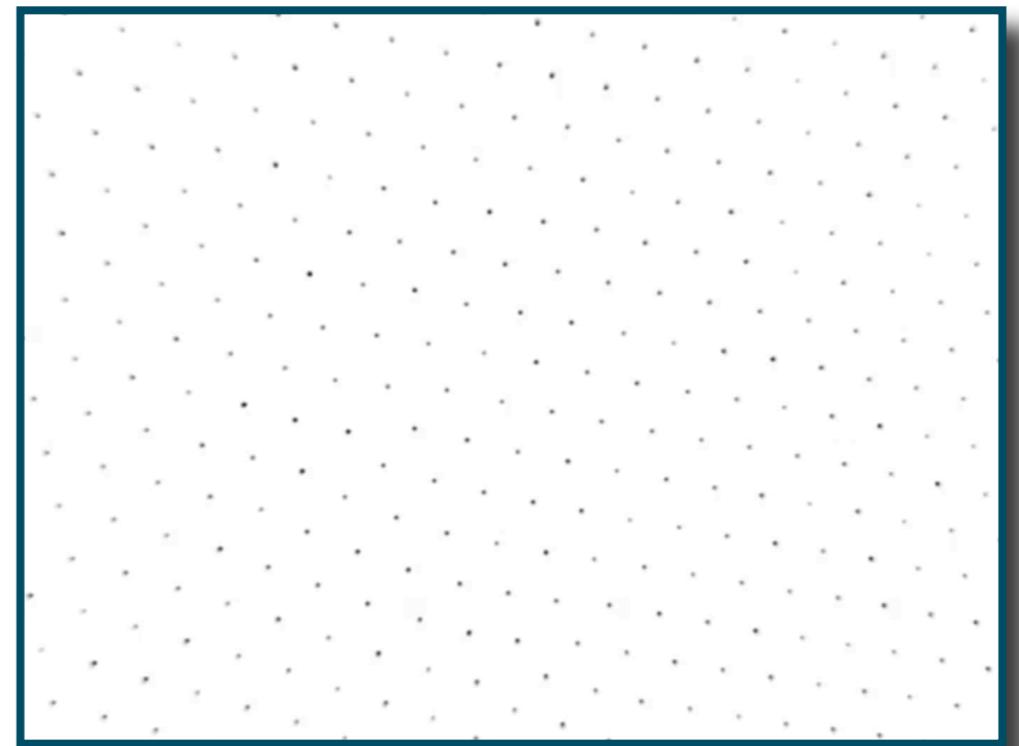
Ugyanezek a koordináták és így a származtatható
mennyiségek kísérletileg is mérhetők !!



Kísérleti megvalósítás (poros plazma)



Kristályos rendszer: egyrétegű,
hexagonális szerkezet: “PLAZMAKRISTÁLY”



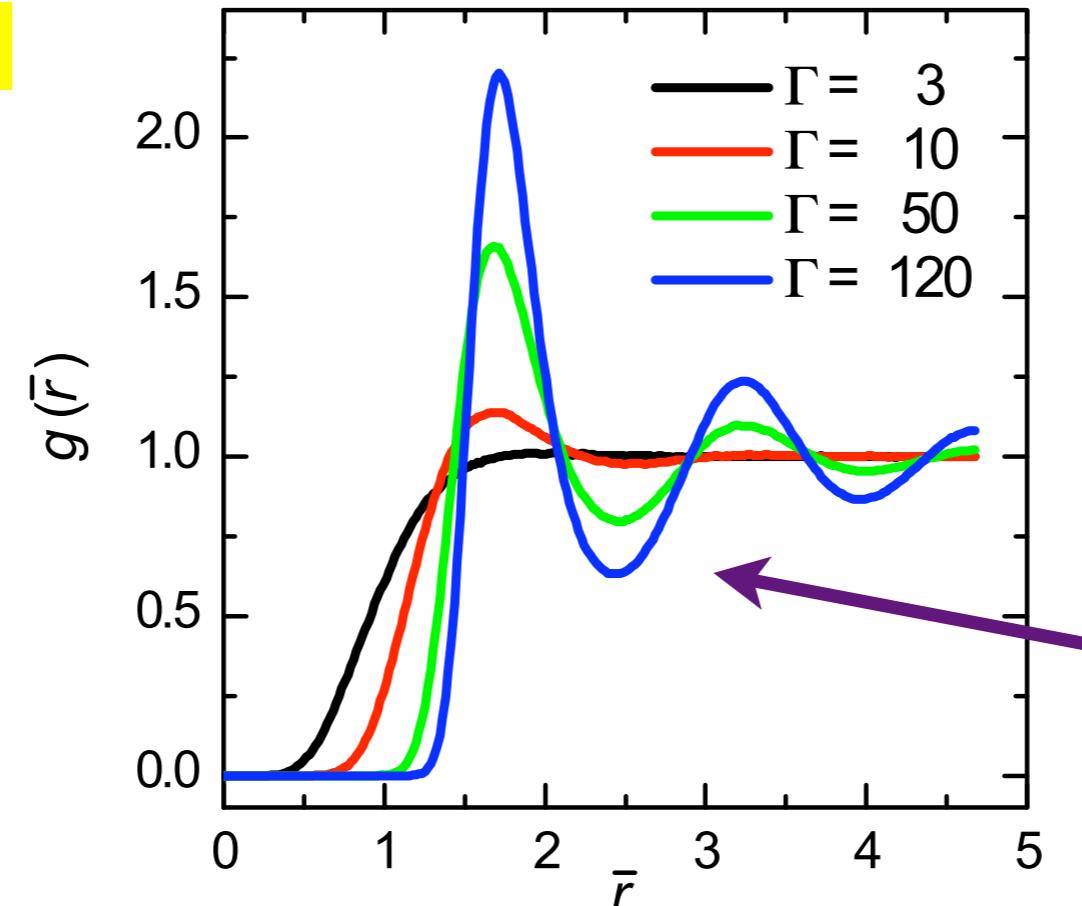
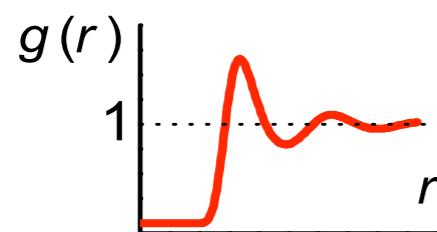
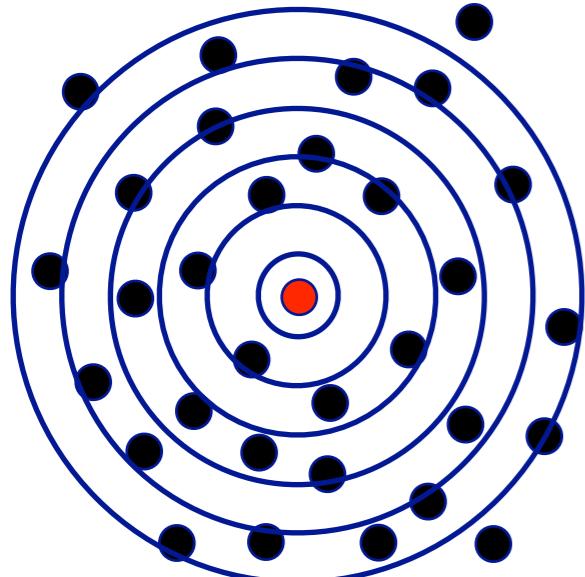
Olvadás körüli rezgések

Hartmann Péter, SZFKI

A molekuladinamikai (MD) szimuláció alkalmazásai

Párkorreláció és termodinamikai jellemzők

Párkorrelációs függvény



pl. 3D Coulomb plazma

Nagy csatolási paraméter
mellett folyadékszerű
viselkedés

- Energia:

$$\frac{E}{N} = \frac{3}{2} k_B T + \frac{n}{2} \int_0^\infty \varphi(r) g(r) 4\pi r^2 dr$$

- Izotermikus kompresszibilitás

$$k_B T \left(\frac{\partial n}{\partial p} \right)_T = 1 + n \int_0^\infty [g(r) - 1] 4\pi r^2 dr$$

- Nyomás:

$$p = nk_B T - \frac{n^2}{6} \int_0^\infty \frac{\partial \varphi(r)}{\partial r} g(r) 4\pi r^3 dr$$

Fázisátalakulás - 3D

Coulomb

S. G. Brush, H. L. Sahlin and E. Teller,
J. Chem. Phys. 45, 2102 (1966).

$\Gamma \approx 125$

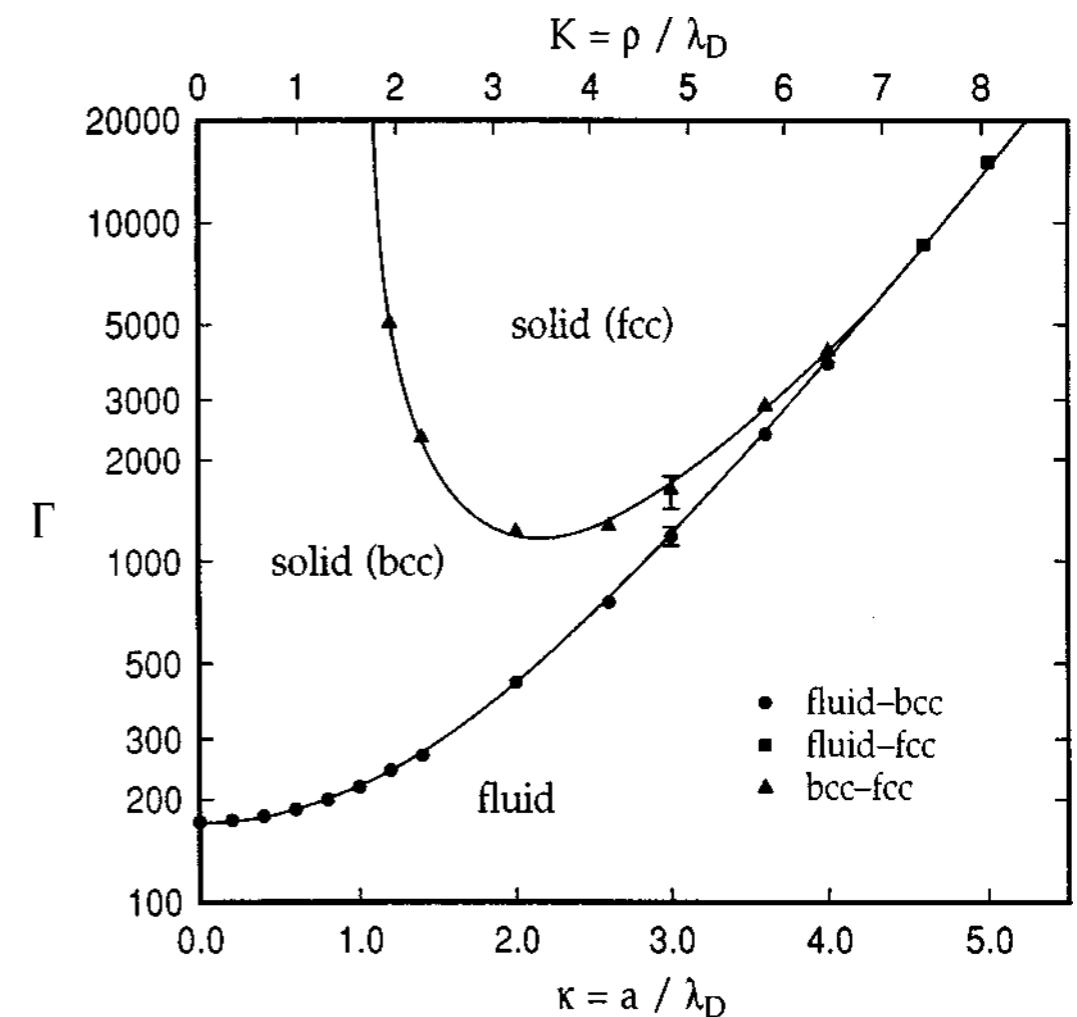
E. L. Pollock and J. P. Hansen
Phys. Rev. A 8, 3110 (1973)

Yukawa

S. Hamaguchi, R.T. Farouki and D.H.E. Dubin,
Phys. Rev. E 56, 4671 (1997).

$\Gamma \approx 175$

G. S. Stringfellow, H. E. DeWitt and W. L. Slattery,
Phys. Rev. A 41, 1105 (1990).



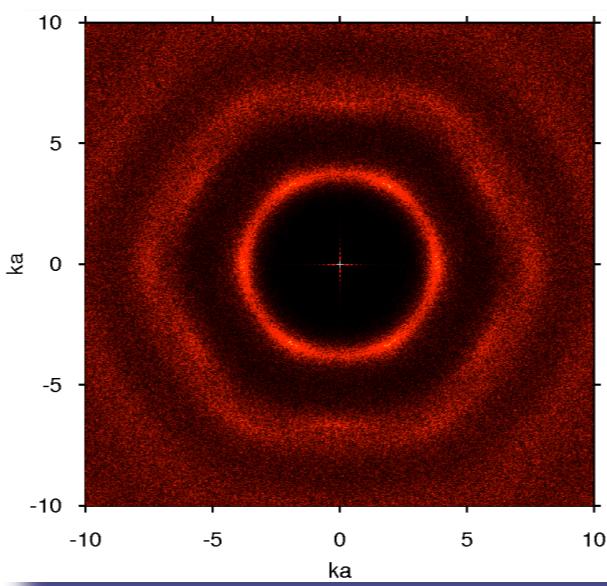
Fázisátalakulás - 2D

Fagyás / olvadás

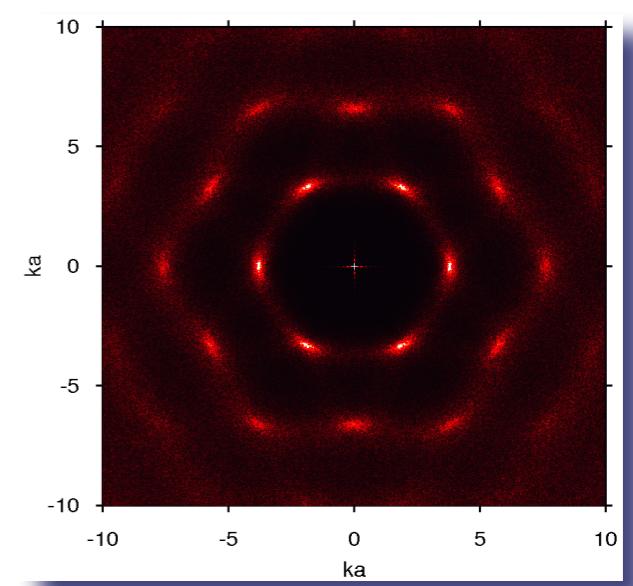
P. Hartmann, Z. Donkó, P. Bakshi, G. J. Kalman, S. Kyrkos, IEEE Trans. Plasma Sci., 35 332 (2007)

P. Hartmann, A. Douglas, J. C. Reyes, L. S. Matthews, T. W. Hyde, A. Kovács and Z. Donkó, Phys. Rev. Lett. 105, 115004 (2010).

Hexatikus fázis kérdése: tranziens fázis [Hartmann Péter, habilitációs előadás, SZFKI 2010]



$$\Gamma = 406$$



$$\Gamma = 420$$



Transzportegyütthatók mérése

Egyensúlyi molekuladinamika

→ korrelációs függvények mérése

$$D = \frac{1}{2} \int_0^\infty C_v dt \quad C_v \equiv \langle \mathbf{v}(t) \cdot \mathbf{v}(0) \rangle \quad \text{VACF}$$

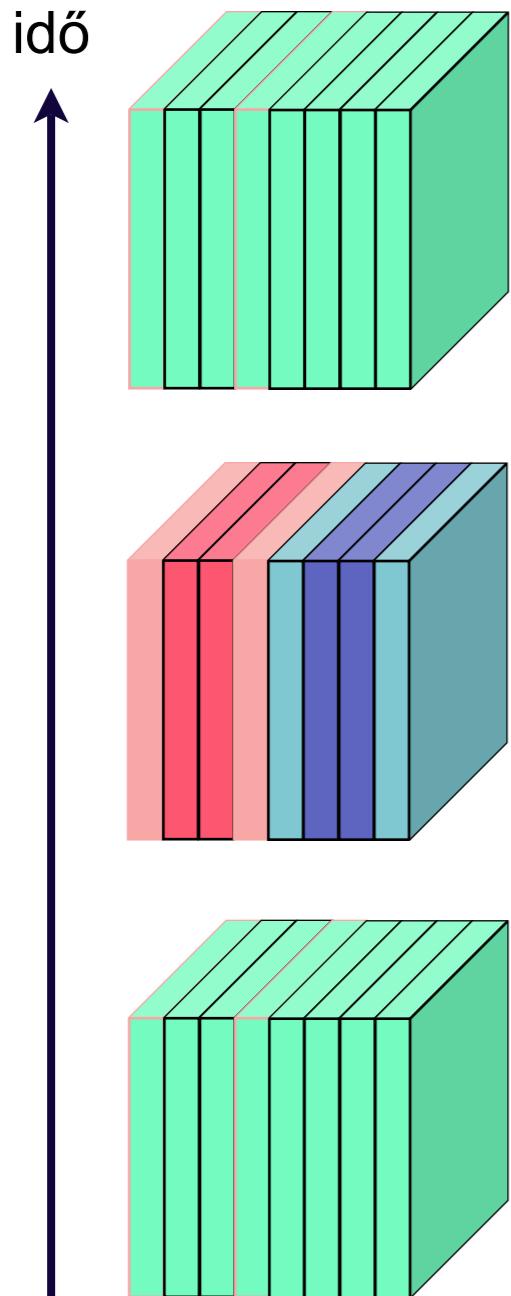
$$\eta = \frac{1}{V k T} \int_0^\infty C_\eta dt \quad C_\eta \equiv \langle P_{xy}(t) P_{xy}(0) \rangle \quad \text{SACF}$$

$$\lambda = \frac{1}{V k T^2} \int_0^\infty C_\lambda dt \quad C_\lambda \equiv \langle J_{Qx}(t) J_{Qx}(0) \rangle \quad \text{EACF}$$

Nemgyensúlyi molekuladinamika

→ perturbáció, majd a válasz mérése

3D Coulomb plazmafolyadék hővezetése



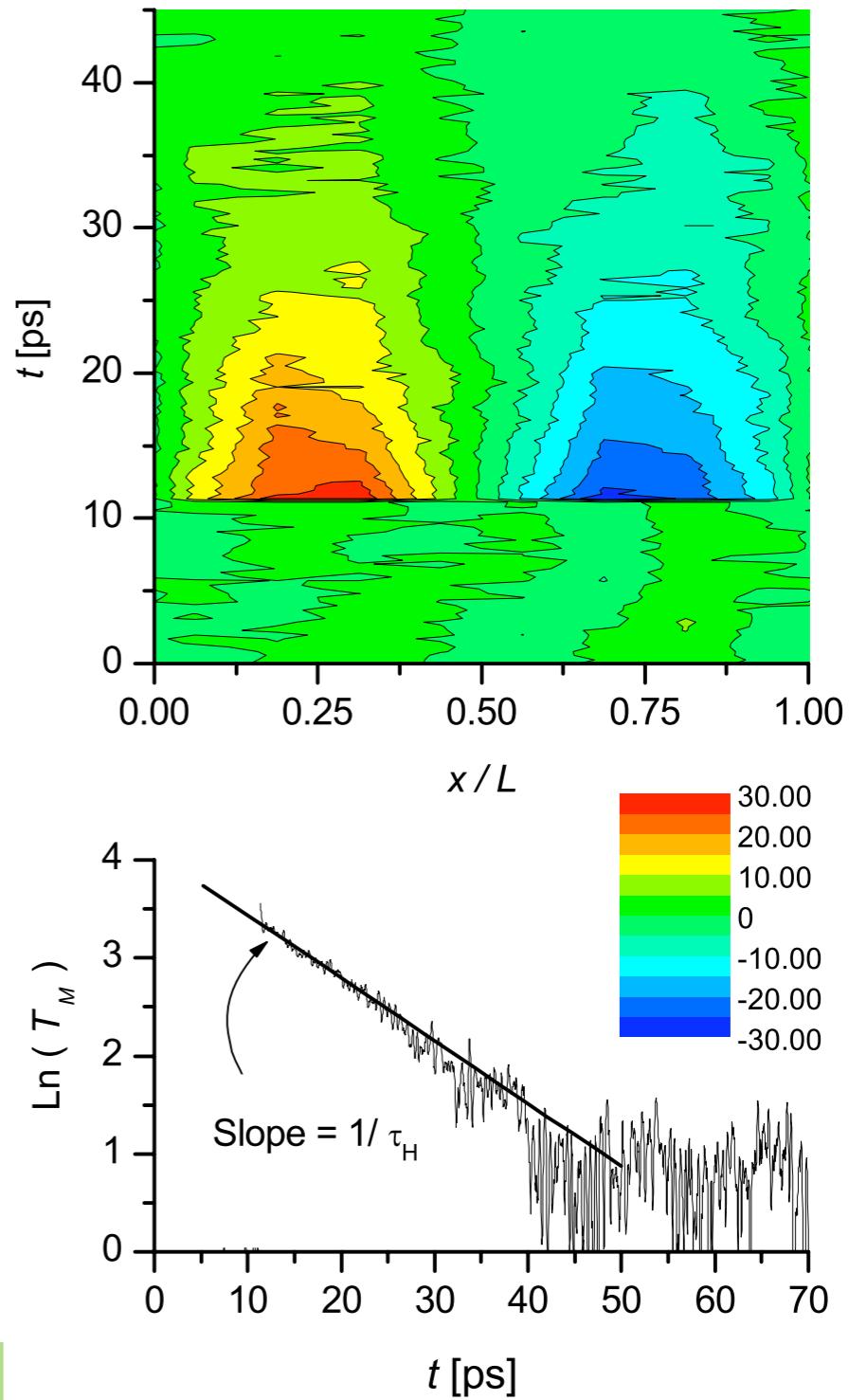
$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\lambda}{c\rho} \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$$

$$\lambda = \frac{c\rho}{\tau_H} \left(\frac{L}{2\pi} \right)^2$$

Relaxáció

Térbeli hőmérséklet
moduláció

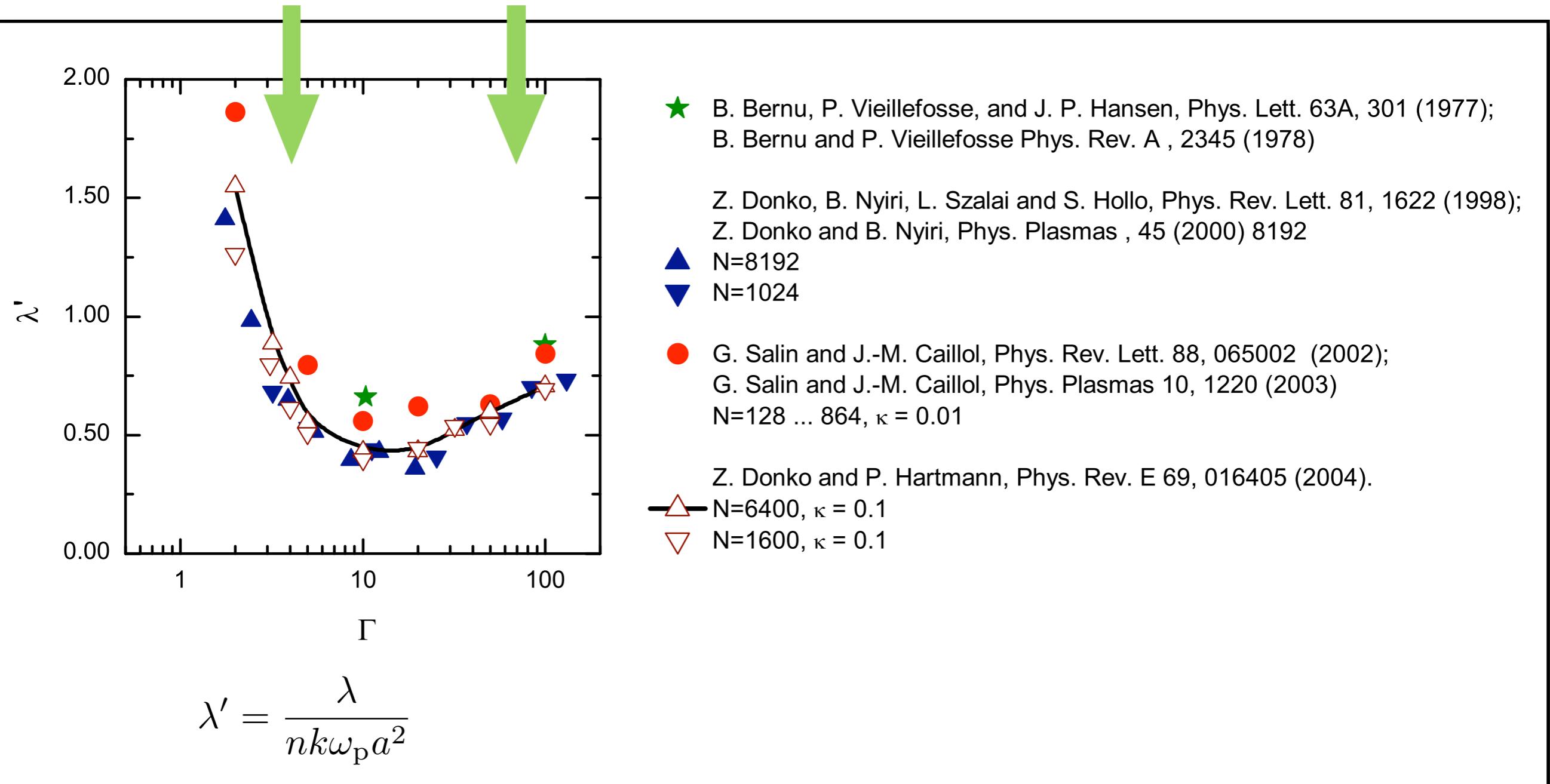
Termalizált rendszer



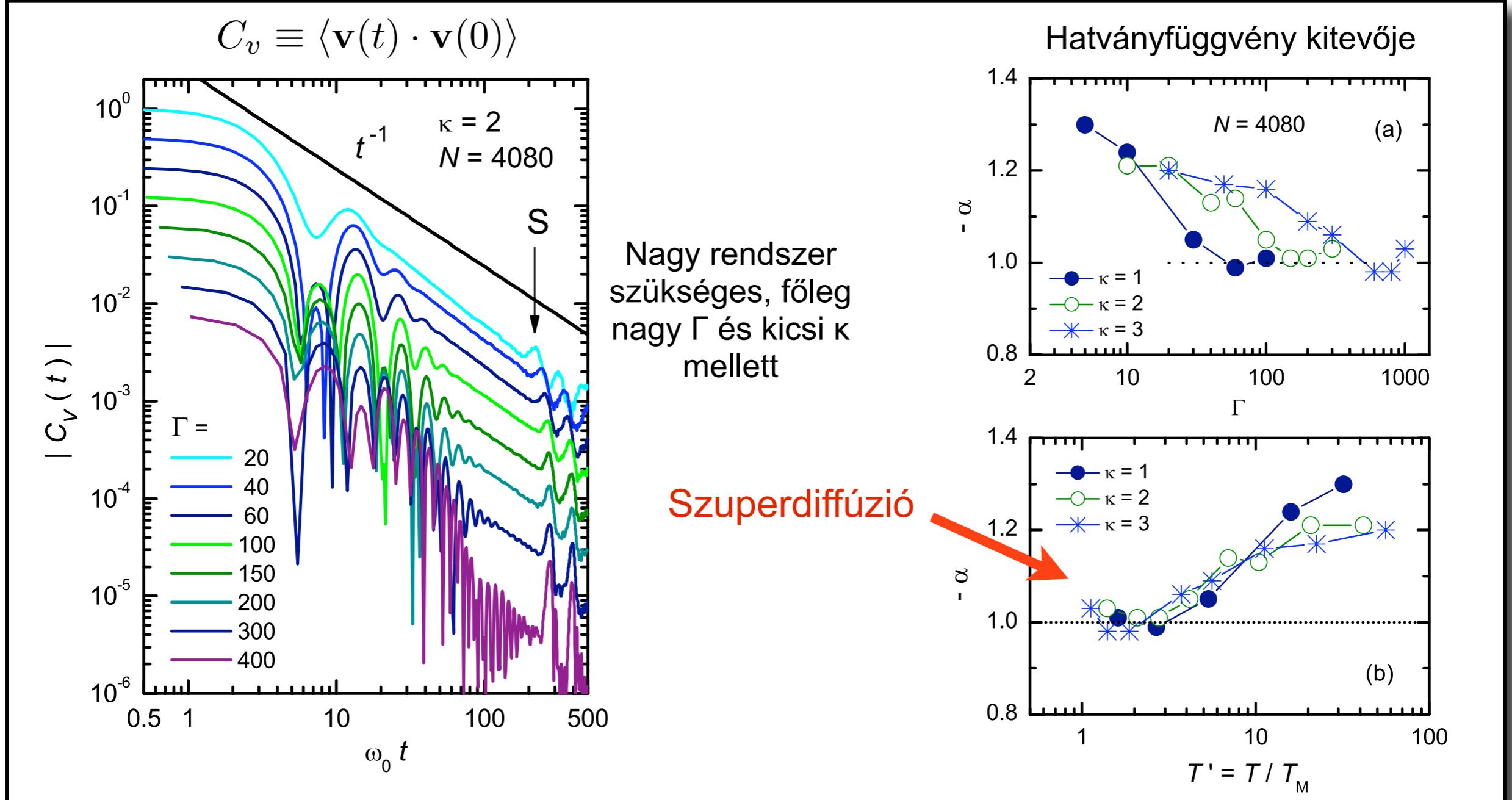
Z. Donkó, B. Nyíri, L. Szalai, and S. Holló, Phys. Rev. Lett. 81, 1622 (1998).

3D Coulomb plazmafolyadék hővezetése

Kintetikus Potenciális



Diffúzió 2D Yukawa folyadékban



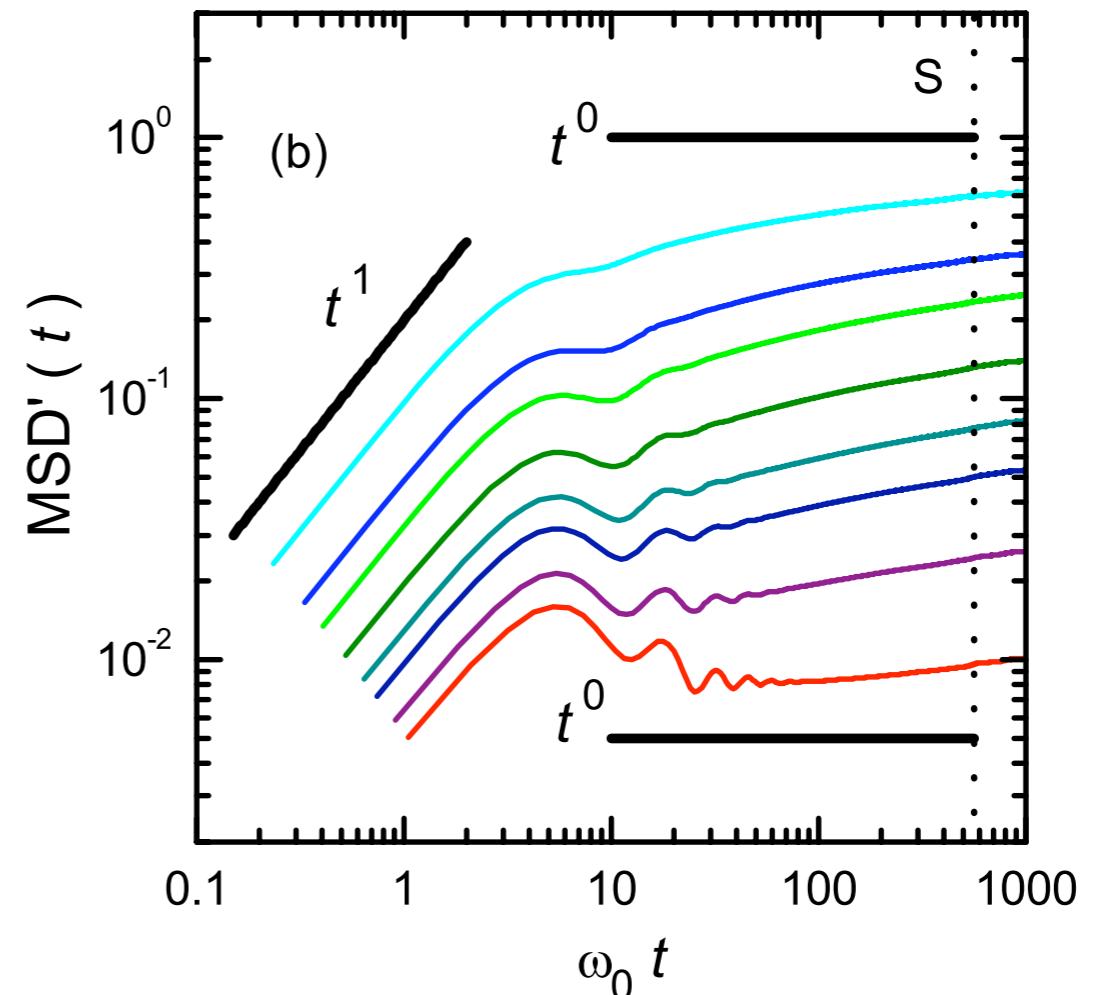
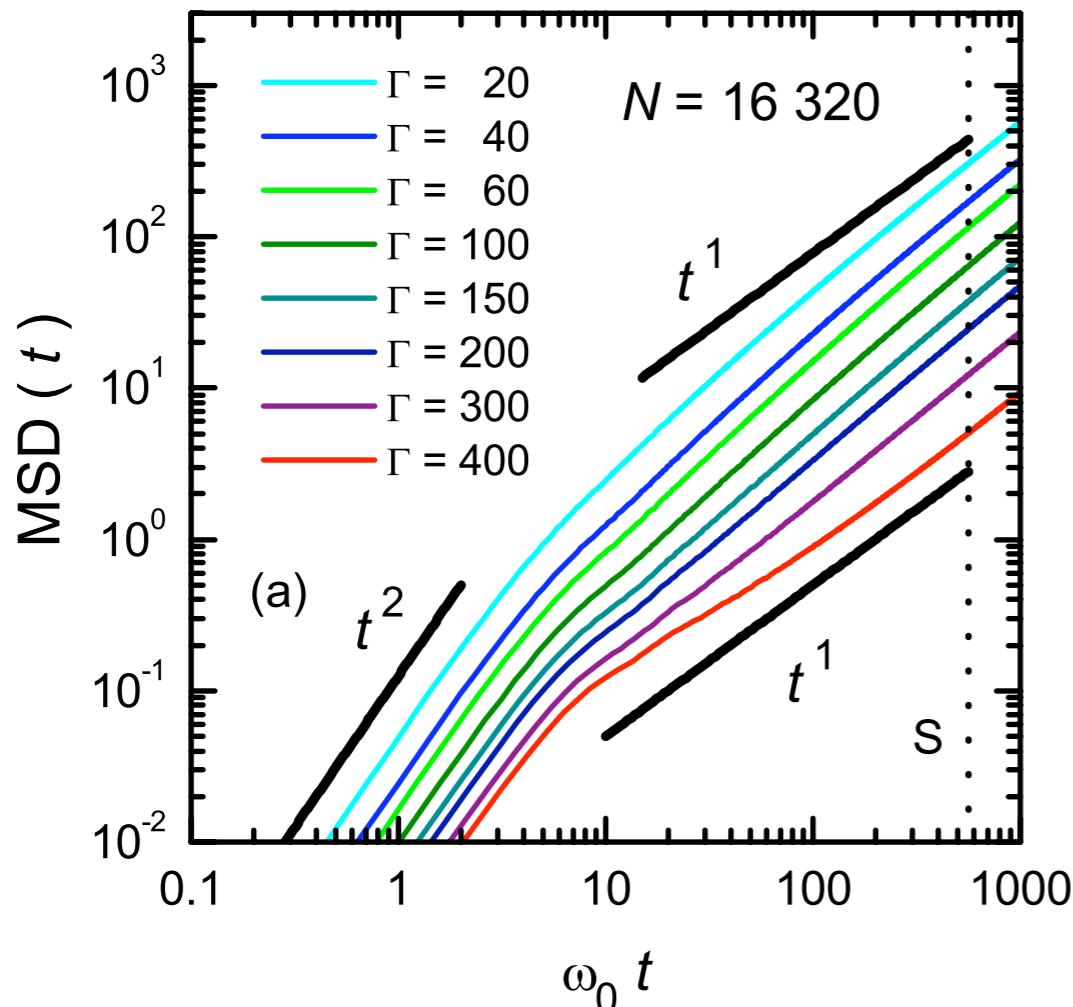
Kezdetben oszcillációk (csapdázás)
+ sima esés + hang csúcs ("S")

Z. Donkó, J. Goree, P. Hartmann, and Bin Liu,
Phys. Rev. E 79, 026401 (2009)

Diffúzió 2D Yukawa folyadékban

$$\text{MSD}(t) = \langle |\mathbf{r}(t) - \mathbf{r}(0)|^2 \rangle$$

$$D = \frac{1}{2N_d t} \langle |\mathbf{r}(t) - \mathbf{r}(0)|^2 \rangle$$



Lehet, hogy csak nem tudunk mérni elég hosszú ideig ?? .. főleg kísérletekben...

A jelenséget kísérletben is észlelték:

Bin Liu and J. Goree

Superdiffusion and non-Gaussian statistics in a driven-dissipative 2D dusty plasma
Physical Review Letters, Vol. 100, article no. 055003, pp. 1-4, 2008

Diffúzió 2D Yukawa folyadékban: legújabb eredmények

PRL 103, 195001 (2009)

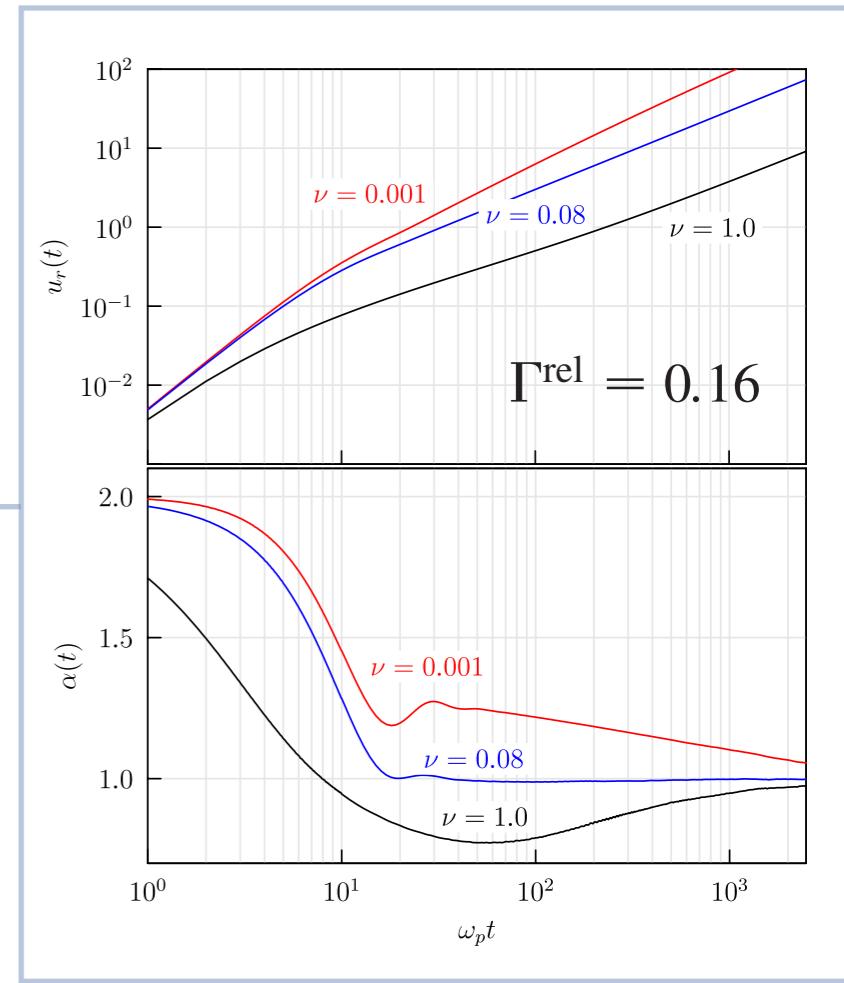
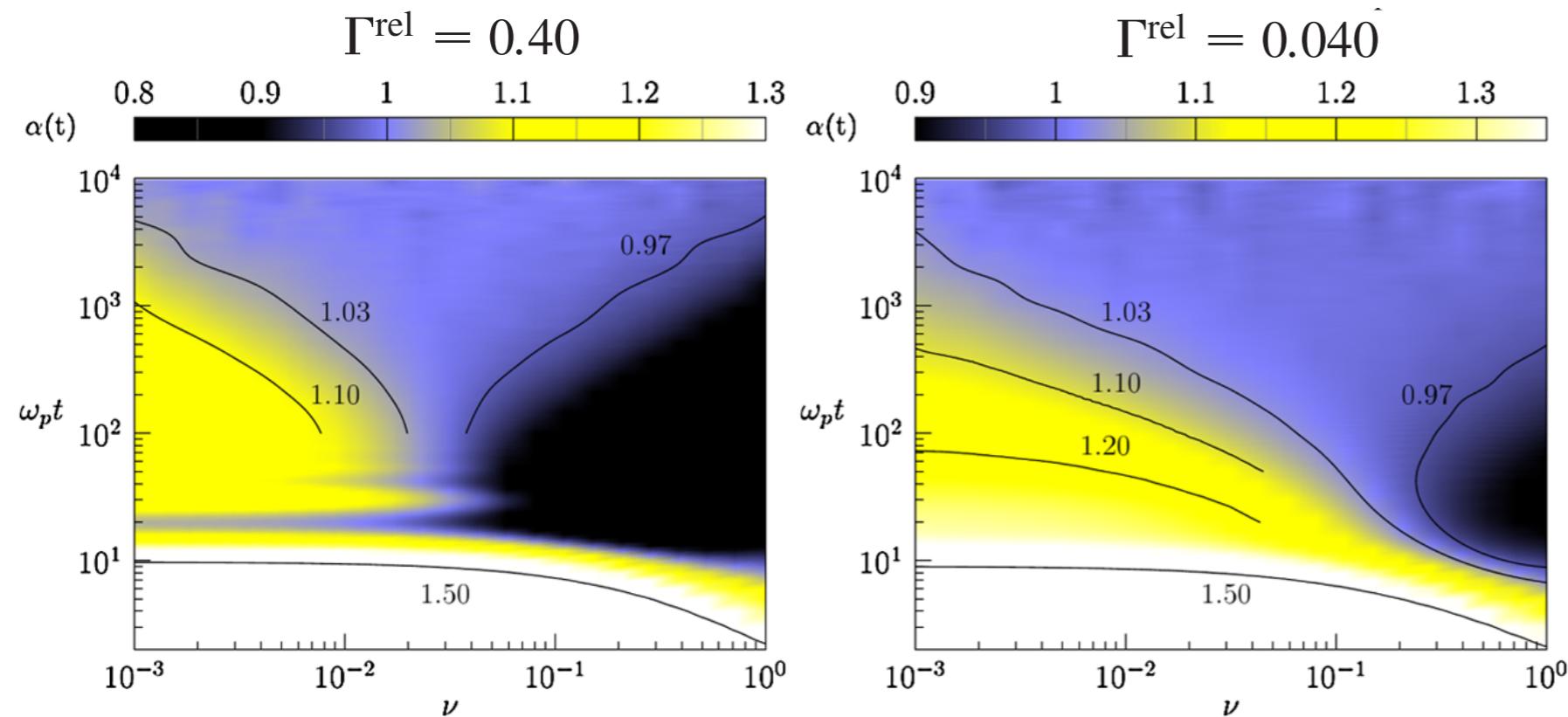
PHYSICAL REVIEW LETTERS

week ending
6 NOVEMBER 2009

Is Diffusion Anomalous in Two-Dimensional Yukawa Liquids?

T. Ott and M. Bonitz

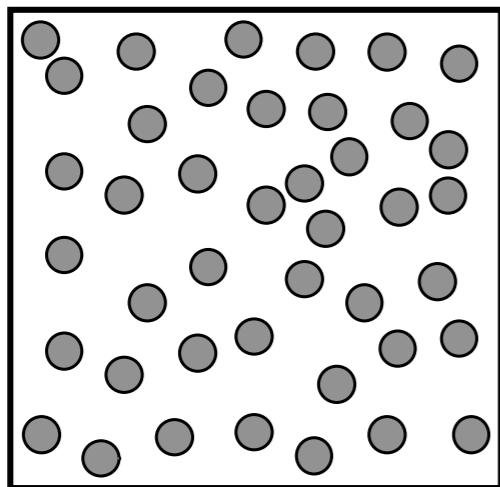
- Hosszú idő után normális diffúzió.
- Kapcsolat poros plazma kísérletekkel (időskála, egyensúly)
- MD pontossága "nagyon" hosszú idő után???



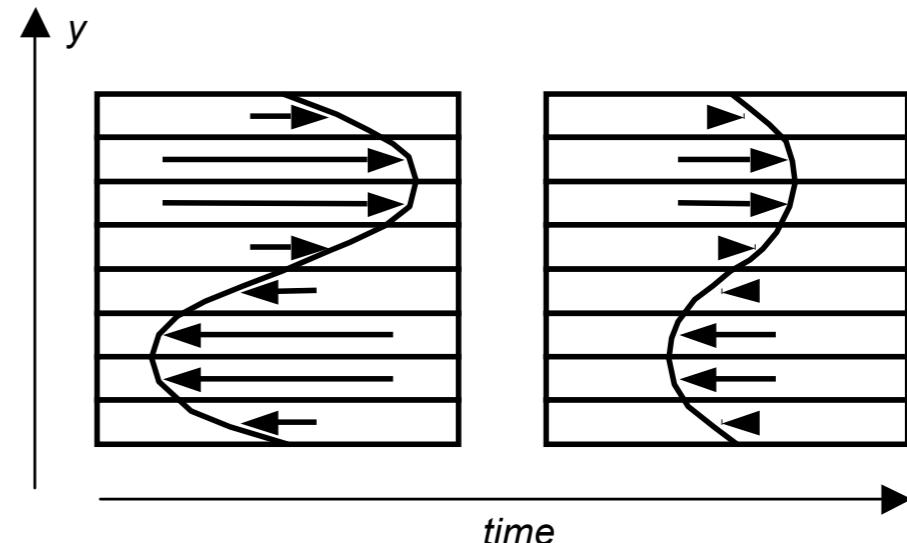
$$\Gamma^{\text{rel}} = \Gamma/\Gamma_c$$

Transzportegyütthatók mérése: nyíró viszkozitás

Egyensúlyi MD



Nemegyensúlyi MD



$$P^{xy} = \sum_{i=1}^N \left[mv_{ix}v_{iy} - \frac{1}{2} \sum_{j \neq i}^N \frac{x_{ij}y_{ij}}{r_{ij}} \frac{\partial \phi(r_{ij})}{\partial r_{ij}} \right]$$

$$\eta = \frac{1}{V k T} \int_0^\infty \langle P^{xy}(t) P^{xy}(0) \rangle dt$$

$$W(y_k) = W_{M0} \sin\left(\frac{2\pi y_k}{L}\right) \quad \frac{\partial v_x}{\partial t} = \frac{\eta}{\rho} \frac{\partial^2 v_x}{\partial y^2}$$

$$W(y, t) = W_{M0} \sin\left(\frac{2\pi y}{L}\right) \exp\left(-\frac{t - t_0}{\tau}\right)$$

$$\eta = \frac{\rho}{\tau} \left(\frac{L}{2\pi}\right)^2$$

Z. Donkó and B. Nyiri, Phys. Plasmas 7, 45 (2000)
 K. Y. Sanbonmatsu and M. S. Murillo, Phys. Rev. Lett. 86, 1215 (2001)

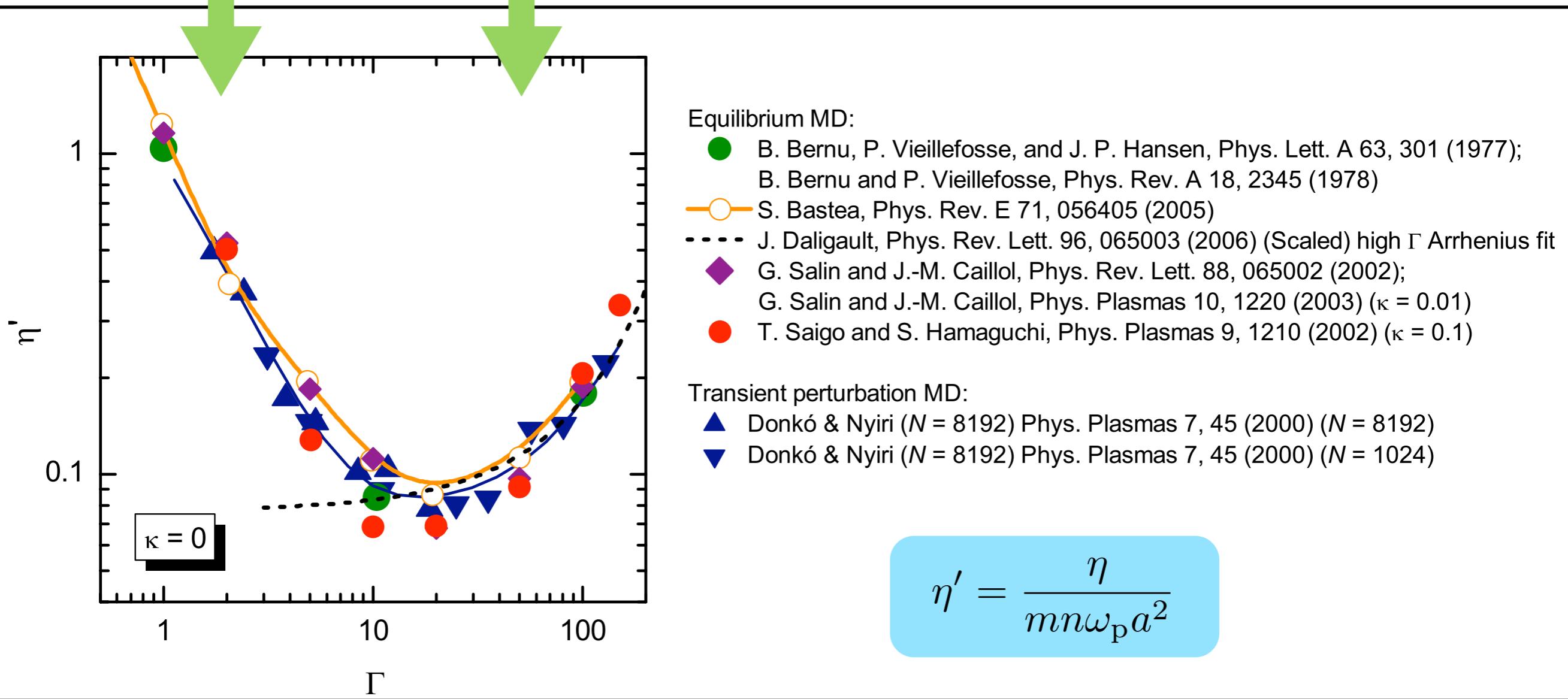
3D Coulomb folyadék nyíró viszkozitása

Kinetikus

Potenciális



$$P^{xy} = \sum_{i=1}^N \left[m v_{ix} v_{iy} - \frac{1}{2} \sum_{j \neq i}^N \frac{x_{ij} y_{ij}}{r_{ij}} \frac{\partial \phi(r_{ij})}{\partial r_{ij}} \right]$$



Ketchup



Inform Inspire Involve
science.nasa.gov

Shear Mystery



Some fluids have a mysterious property: one moment they're thick, the next they're thin. Physicists aim to find out why with the aid of an experiment in space.

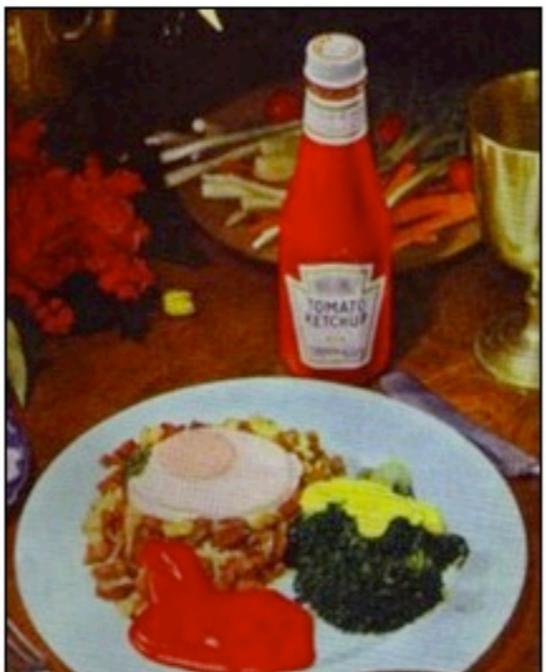
Listen to this story via [streaming audio](#), a [downloadable file](#), or [get help](#).

"Shake and shake the ketchup bottle. None'll come, and then a lot'll." --Richard Armour

June 7, 2002: Everyone has fallen prey to the ketchup bottle at one time or another.

After struggling to dislodge a meager few drops of the red liquid, an avalanche suddenly gushes out and buries your perfectly cooked burger. With suspiciously perfect timing, the ketchup changes from a thick paste to a runny liquid.

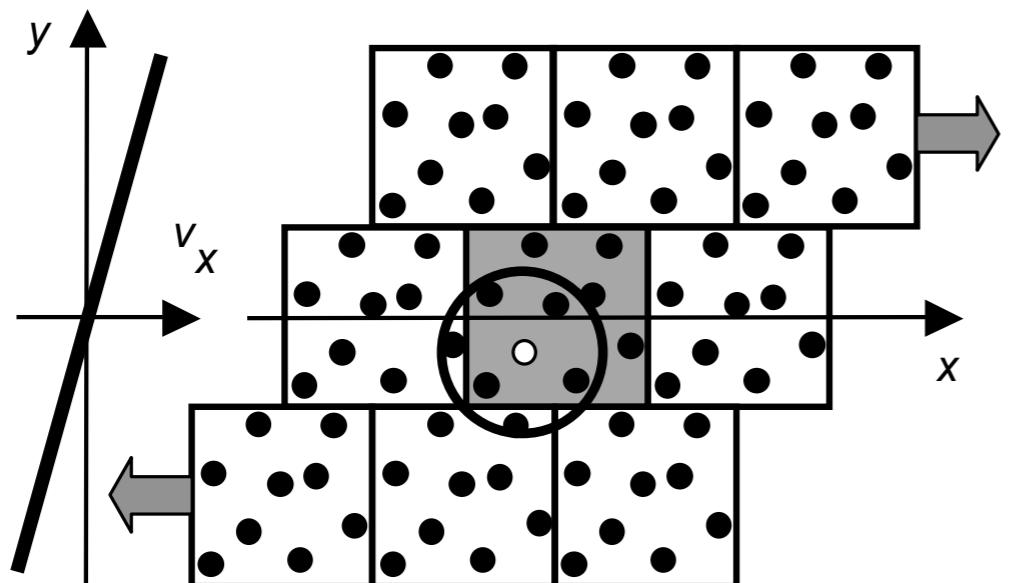
If you find yourself splattered and wondering "why?", you're in good company. Theoretical physicists are puzzled, too.



Above: The sudden surge of ketchup from a bottle typifies an important and puzzling property of many liquids: shear thinning. Credit: MacKingShow.com.

Homogeneous Shear Algorithm

Homogeneous Shear Algorithm

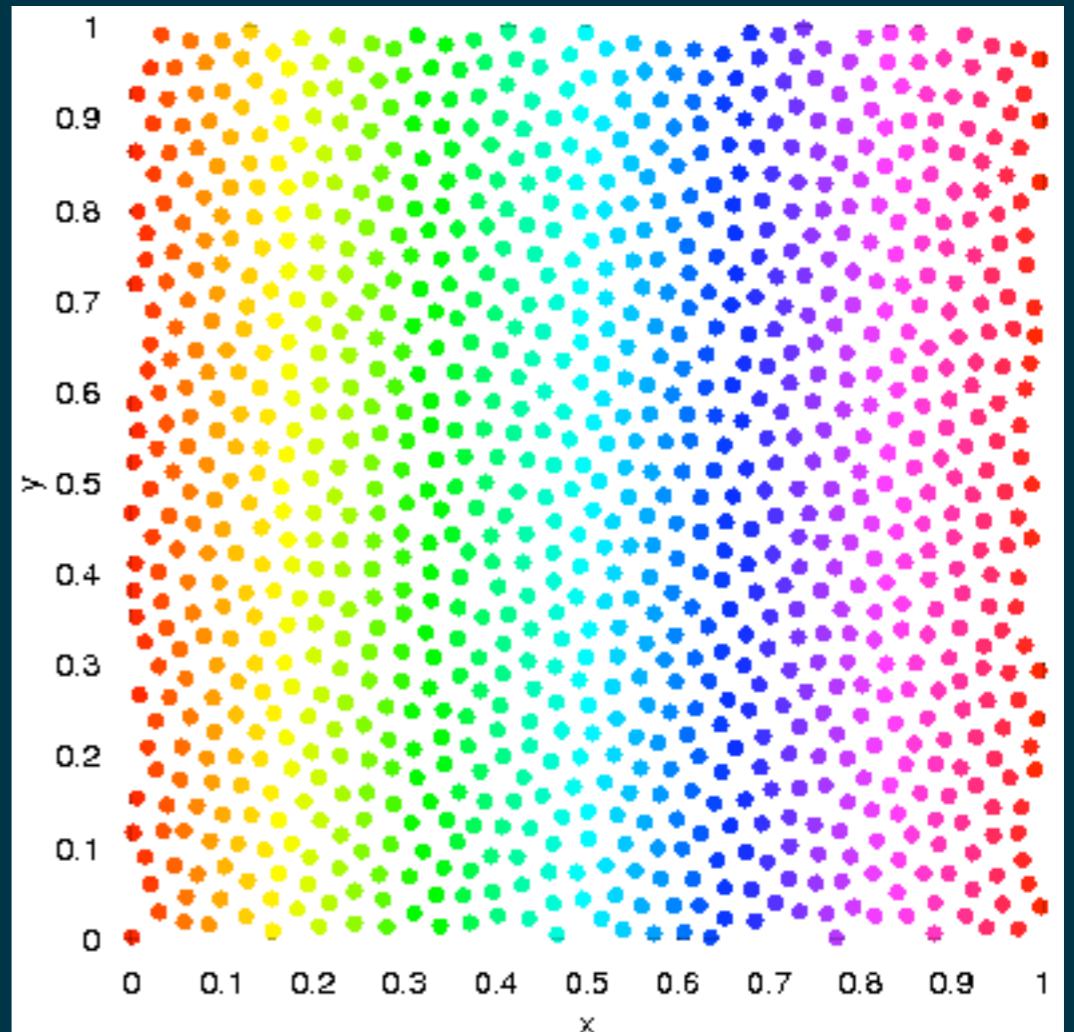


$$\frac{d\mathbf{r}_i}{dt} = \tilde{\mathbf{p}}_i / m + \gamma y_i \hat{\mathbf{x}} \quad \frac{d\tilde{\mathbf{p}}_i}{dt} = \mathbf{F}_i - \gamma \tilde{p}_{y_i} \hat{\mathbf{x}} - \alpha \tilde{\mathbf{p}}_i$$

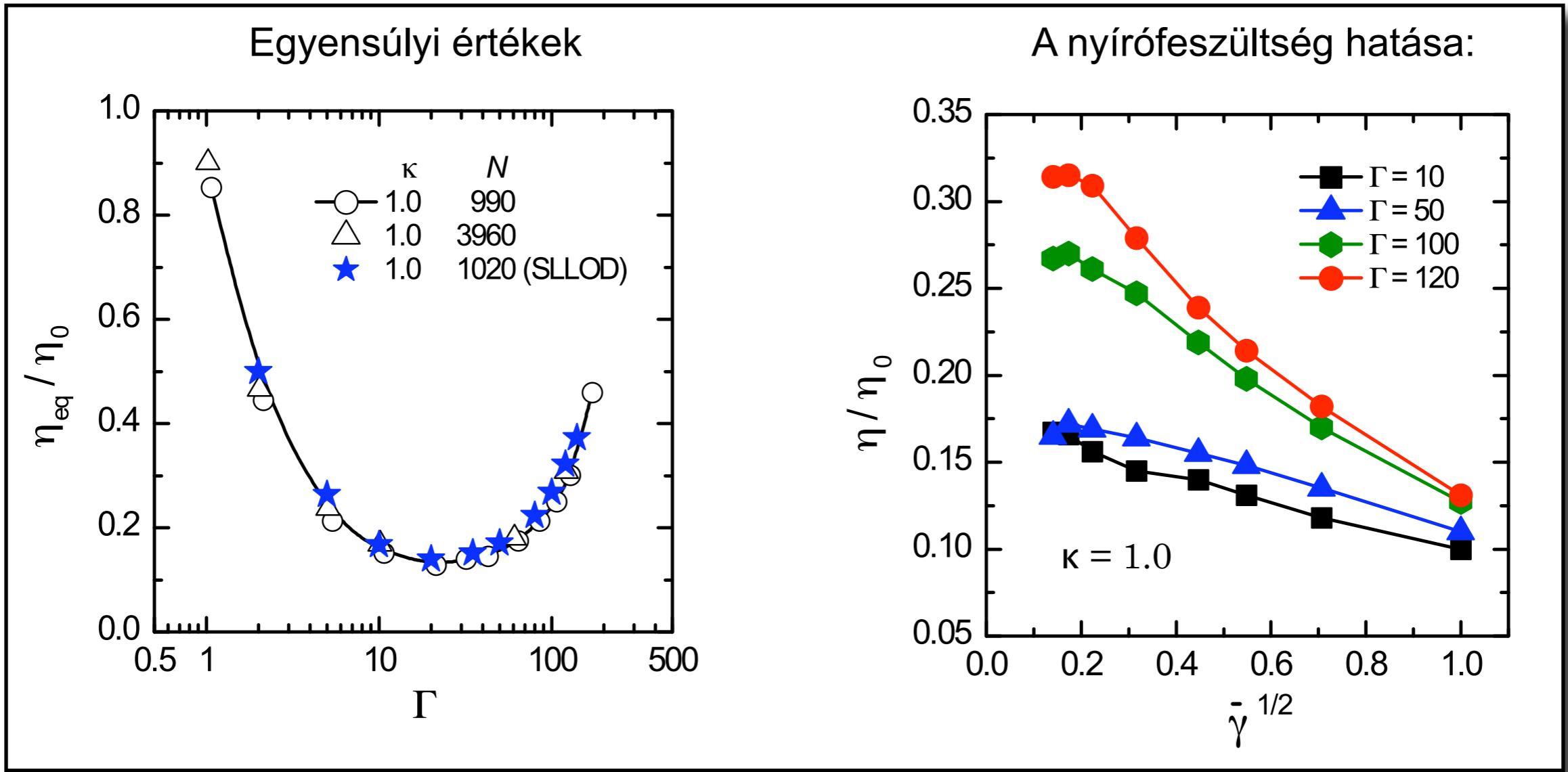
$$\eta = - \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\langle P^{xy}(t) \rangle}{\gamma}$$

D. J. Evans and G. P. Morriss, "Statistical mechanics of nonequilibrium liquids" (Academic Press, 1990)

$\Gamma = 140, \kappa = 1.0$



2D Yukawa plazmafolyadék viszkozitása

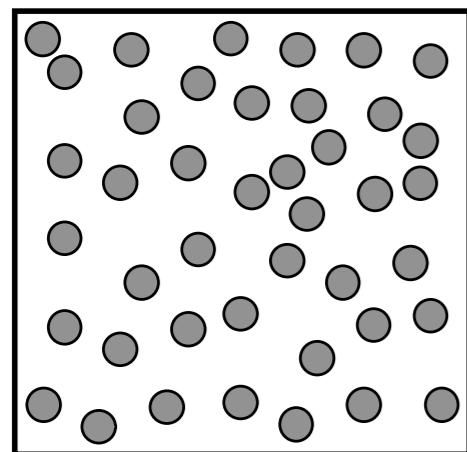


A viszkozitás csökken a nyírófeszültség növekedésével: “shear thinning”

Z. Donkó, J. Goree, P. Hartmann, K. Kutasi, Phys. Rev. Lett. 96, 145003 (2006)

Komplex viszkozitás

Egyensúlyi MD

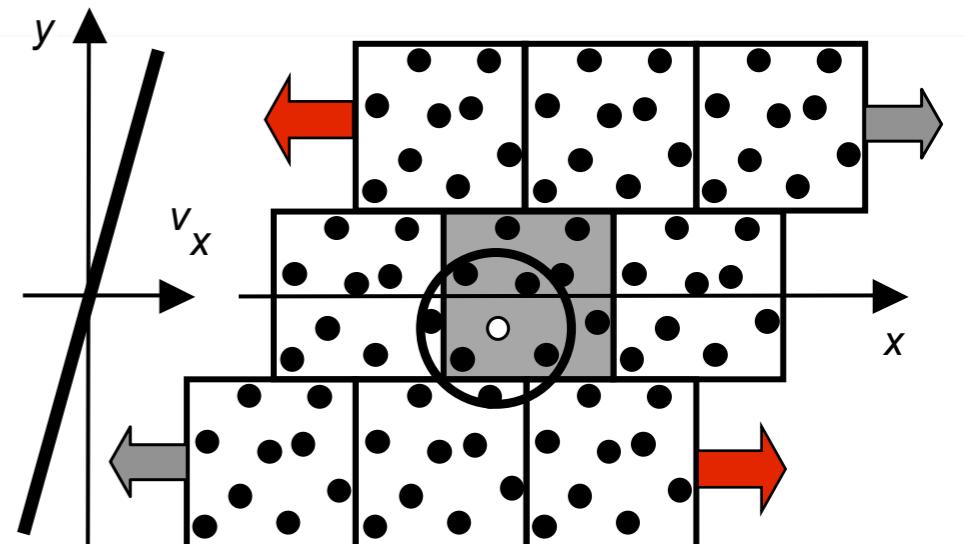


$$\eta(\omega) = \eta'(\omega) - i\eta''(\omega)$$

Viszkózus
disszipáció

Elaszticitás

Homogeneous Shear Algorithm



$$P_{xy} = \sum_{i=1}^N \left[mv_{ix}v_{iy} - \frac{1}{2} \sum_{j \neq i}^N \frac{x_{ij}y_{ij}}{r_{ij}} \frac{\partial\phi(r_{ij})}{\partial r_{ij}} \right]$$

$$C_\eta(t) = \langle P_{xy}(t)P_{xy}(0) \rangle$$

$$\eta(\omega) = \frac{1}{VkT} \int_0^\infty C_\eta(t) e^{i\omega t} dt$$

A Greek-Kubo integrál
Laplace-Fourier transzformáltja

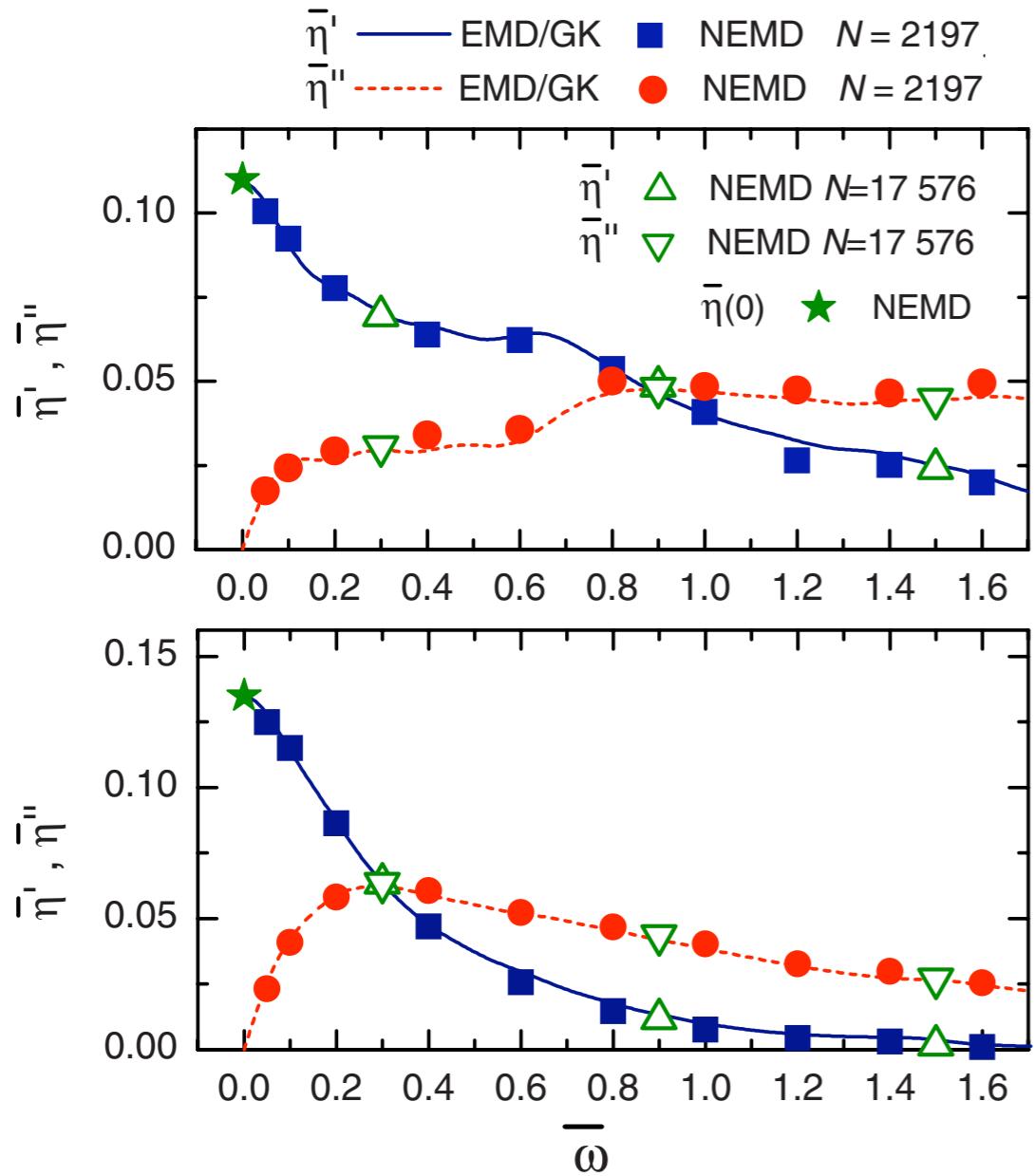
$$\frac{d\mathbf{r}_i}{dt} = \frac{\tilde{\mathbf{p}}_i}{m} + \gamma y_i \hat{\mathbf{x}} \quad \frac{d\tilde{\mathbf{p}}_i}{dt} = \mathbf{F}_i - \gamma \tilde{p}_{yi} \hat{\mathbf{x}} - \alpha \tilde{\mathbf{p}}_i$$

$$\gamma(t) = \gamma_0 \cos(\omega t)$$

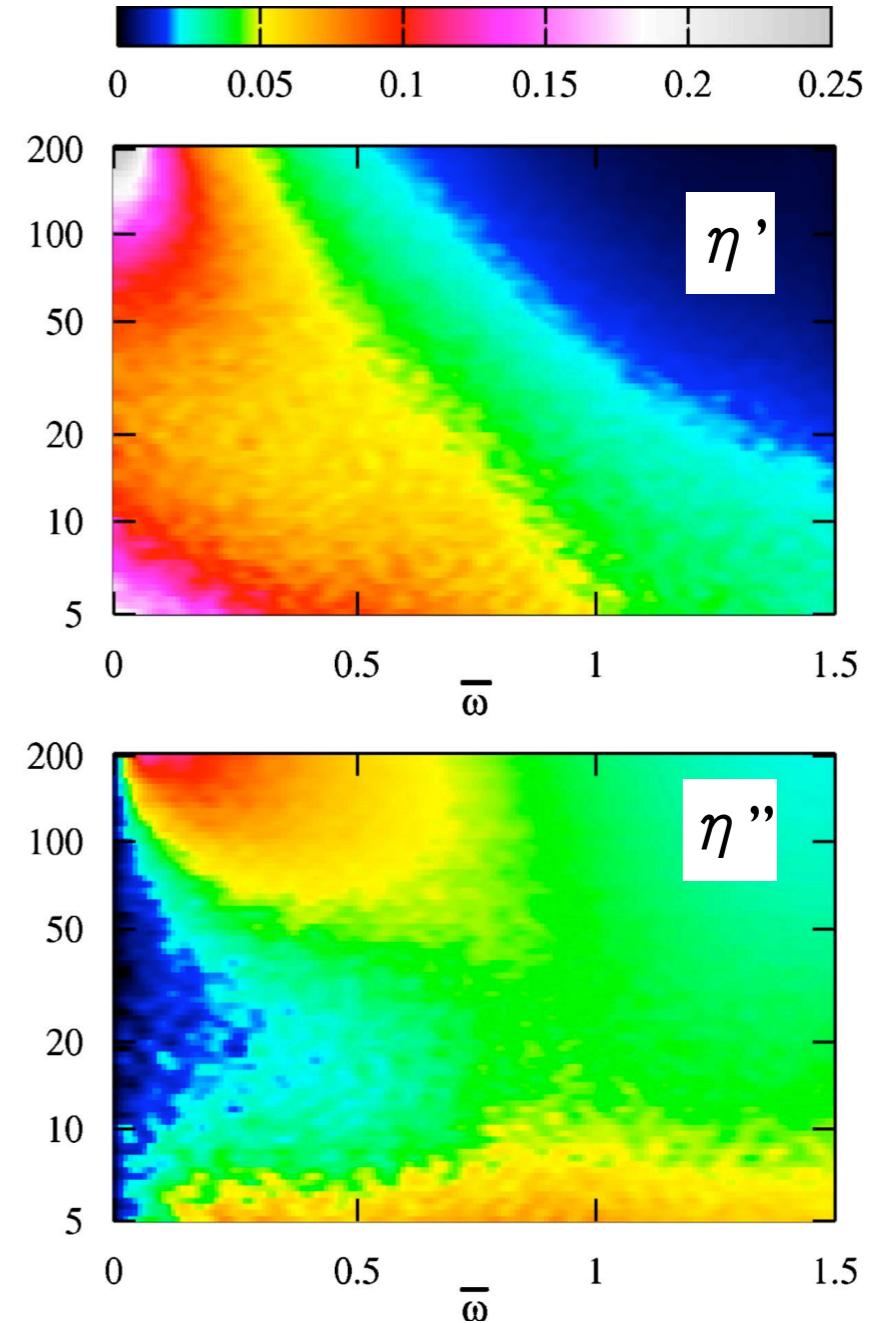
Harmonikus nyírás, P_{xy}
amplitudójának és fázisának mérése

Komplex viszkozitás: 3D Yukawa folyadék

$$\eta(\omega) = \eta'(\omega) - i\eta''(\omega)$$



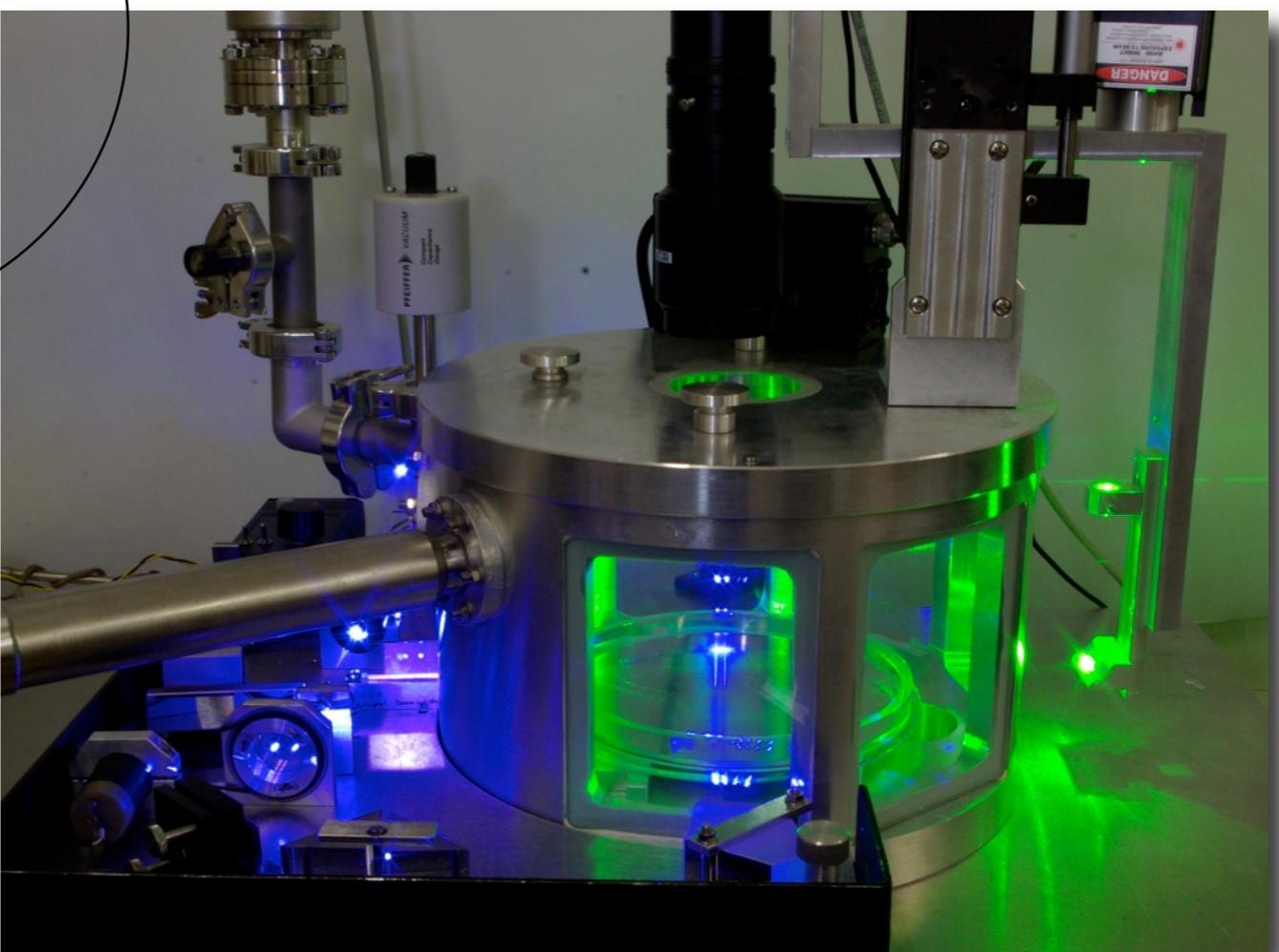
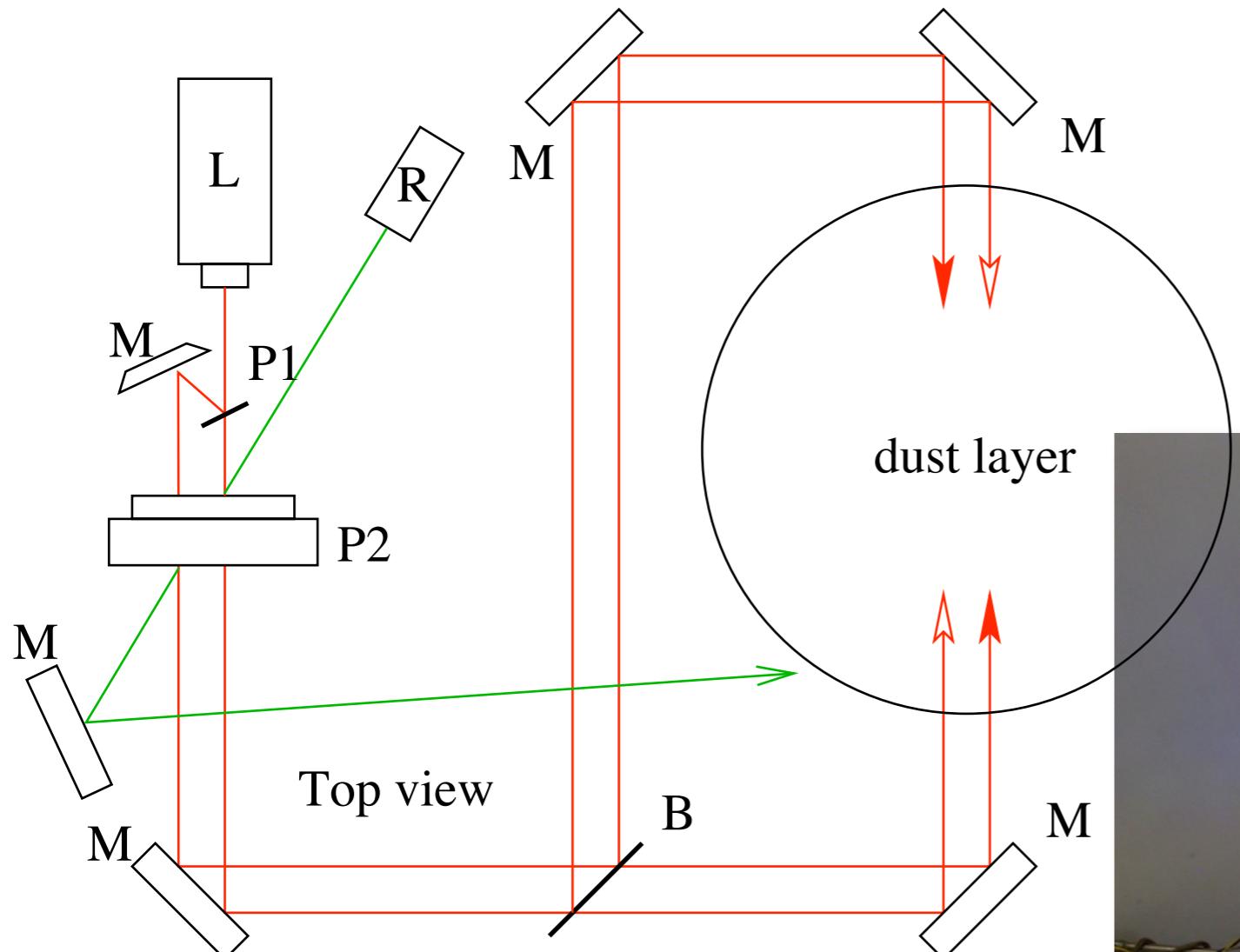
$$\bar{\omega} = \frac{\omega}{\omega_p}$$



Z. Donkó, J. Goree, H. Hartmann, Phys. Rev. E 81, 056404 (2010)

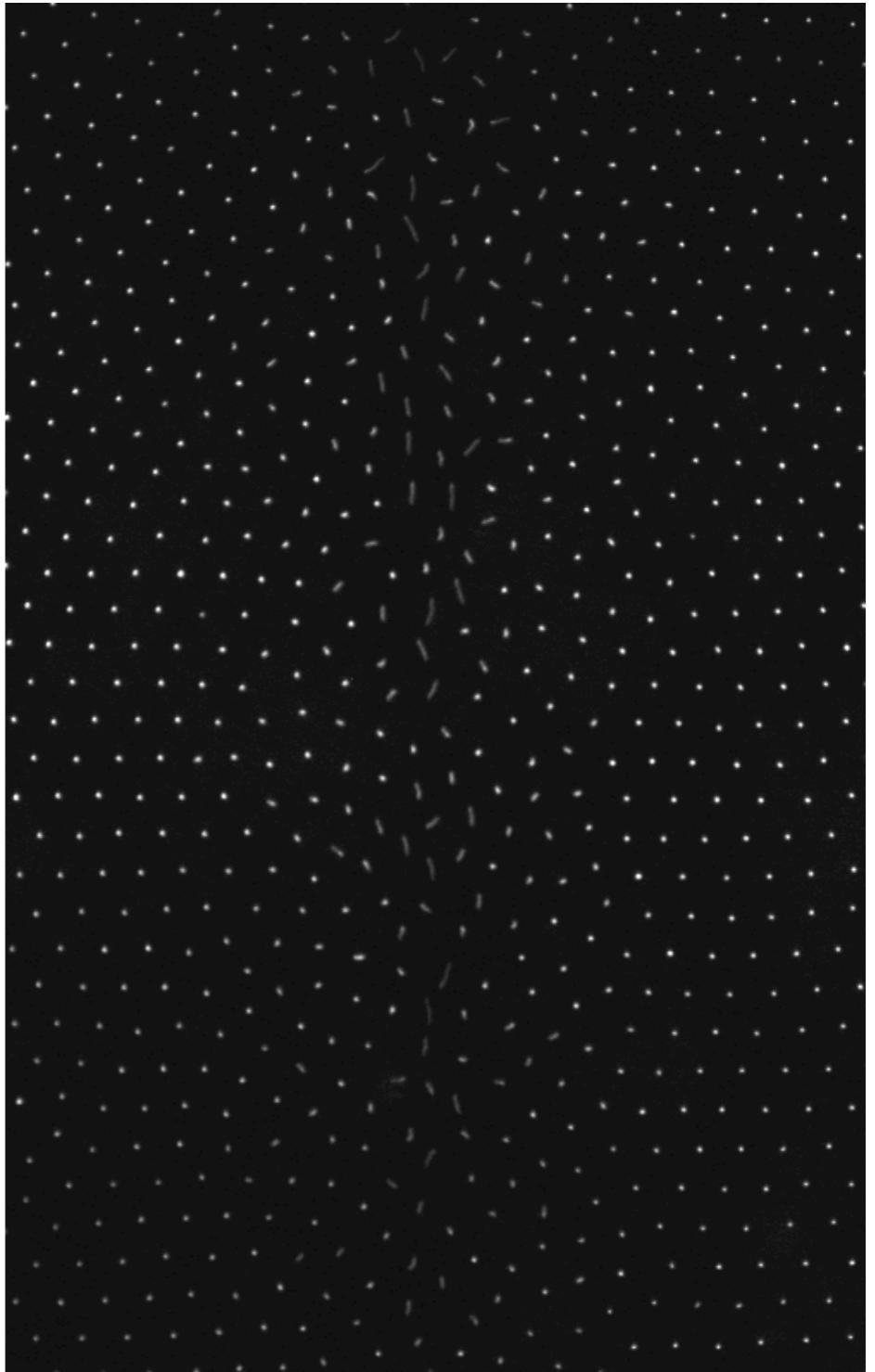
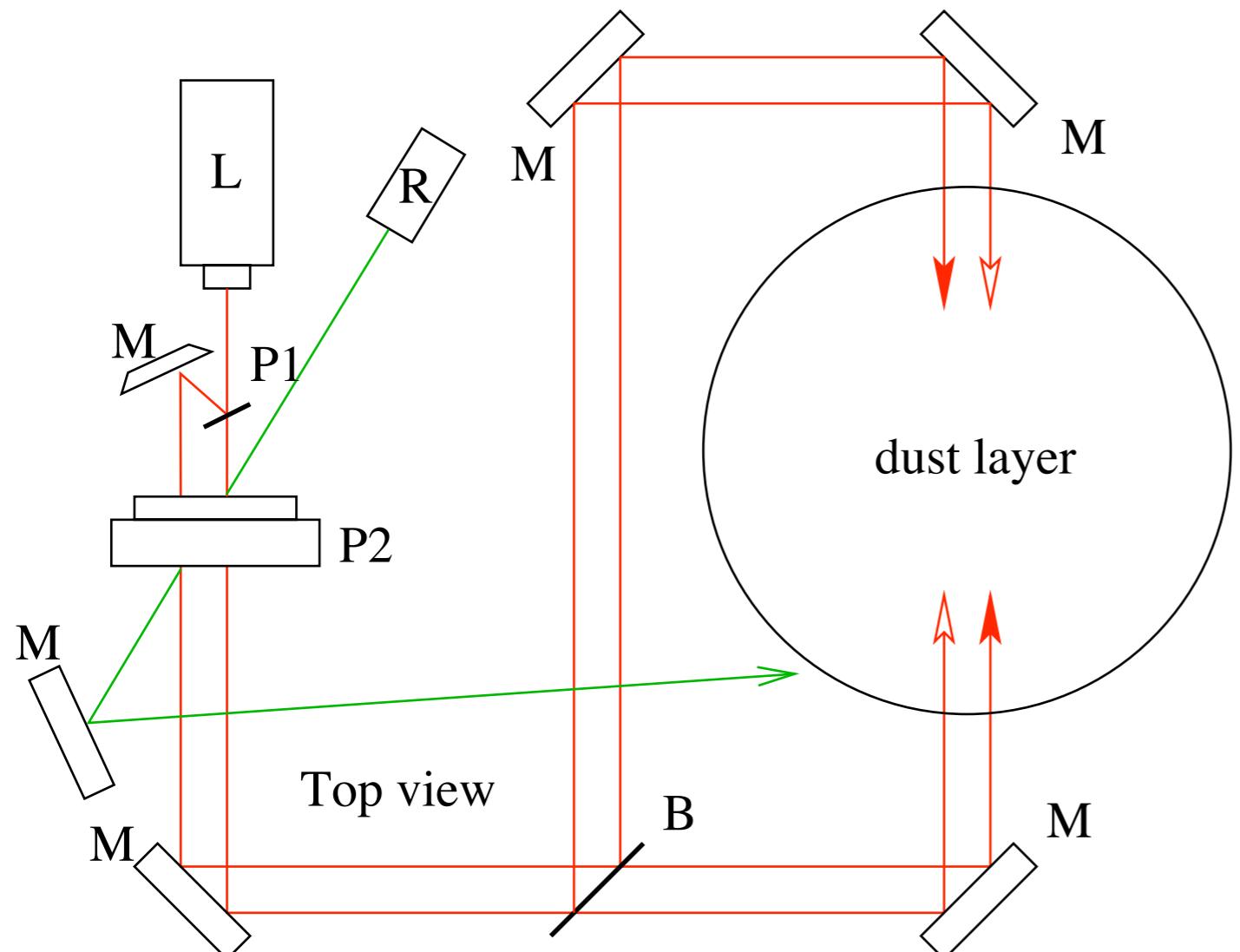


Komplex viszkozitás - mérés (SZFKI)



P. Hartmann, M. Cs. Sándor, A.-Zs. Kovács, Z. Donkó:
"Static and dynamic viscosity of a single layer complex plasma",
to be published

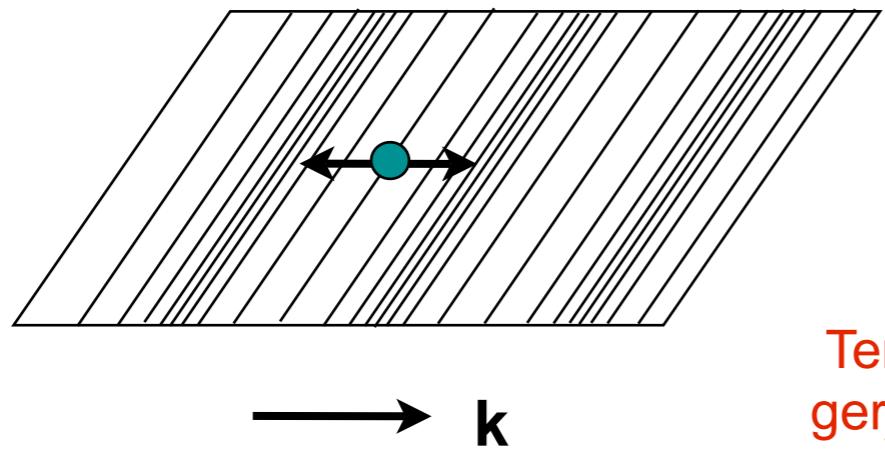
Komplex viszkozitás - mérés (SZFKI)



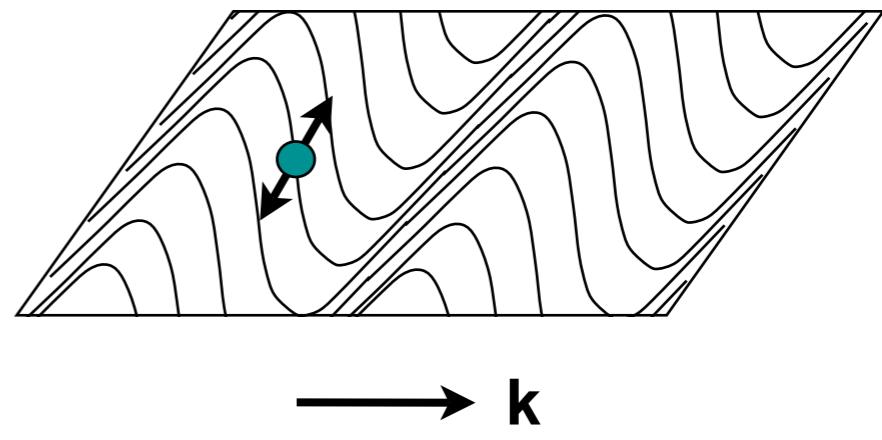
P. Hartmann, M. Cs. Sándor, A.-Zs. Kovács, Z. Donkó:
“Static and dynamic viscosity of a single layer complex plasma”,
to be published

Kollektív gerjesztések (hullámok)

Longitudinális sűrűséghullám



Transzverzális hullám



Termikus
gerjesztés

Mikroszkópikus sűrűségfluktuációk

$$\rho(k, t) = \sum_{j=1}^N \exp[i k x_j(t)]$$

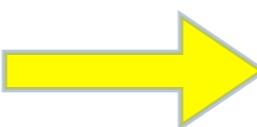


Dinamikus struktúrafüggvény

$$S(k, \omega) = \frac{1}{2\pi N} \lim_{\Delta T \rightarrow \infty} \frac{1}{\Delta T} |\rho(k, \omega)|^2 \quad \rho(k, \omega) = \mathcal{F}[\rho(k, t)]$$

Mikroszkópikus áramfluktuációk

$$\lambda(k, t) = \sum_{j=1}^N v_{jx}(t) \exp[i k x_j(t)]$$



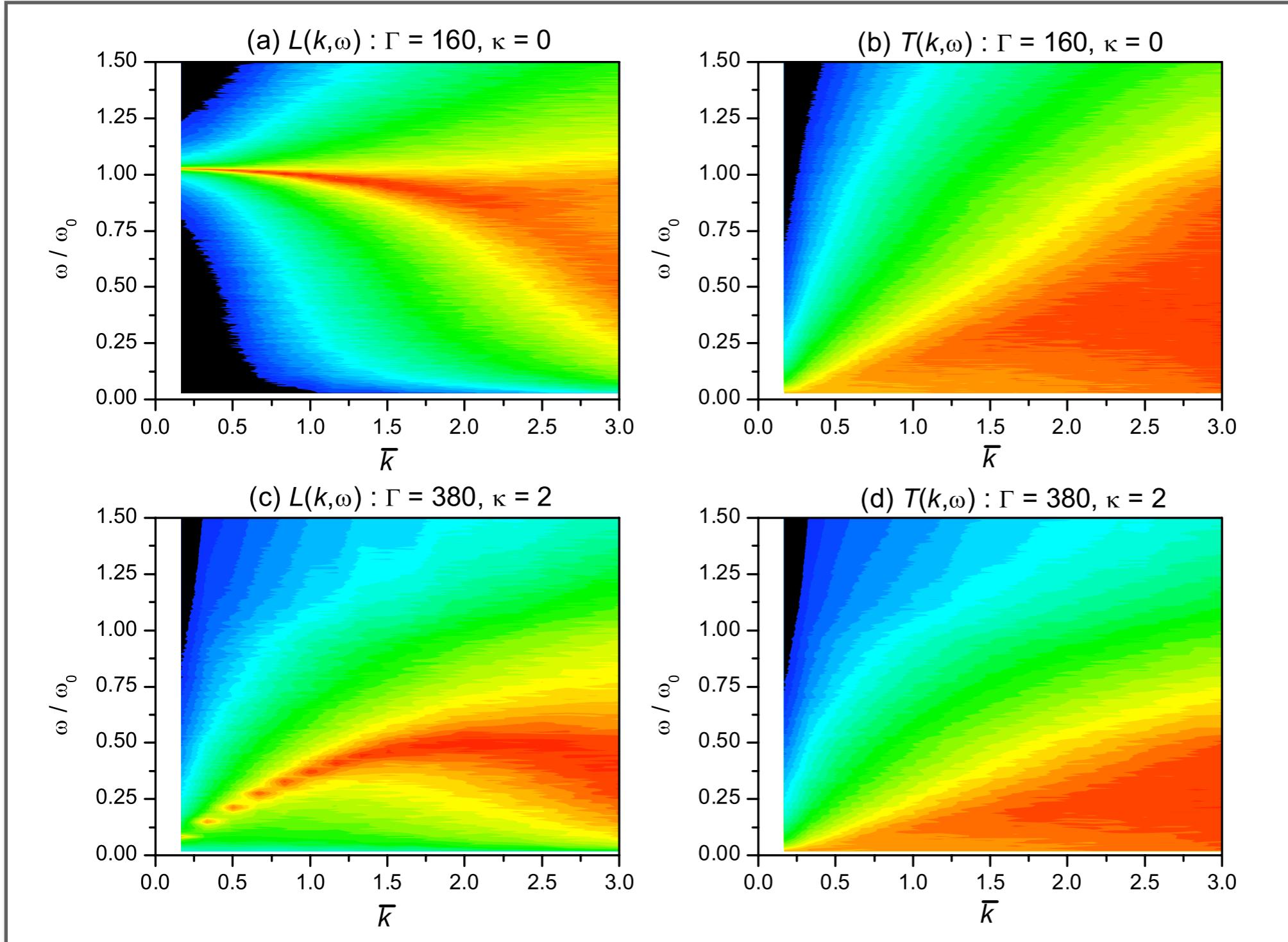
Longitudinális és transzverzális
áramfluktuációk spektrumai

$$L(k, \omega)$$

$$T(k, \omega)$$

$$\tau(k, t) = \sum_{j=1}^N v_{jy}(t) \exp[i k x_j(t)]$$

3D plazmafolyadékok kollektív gerjesztései



Coulomb:

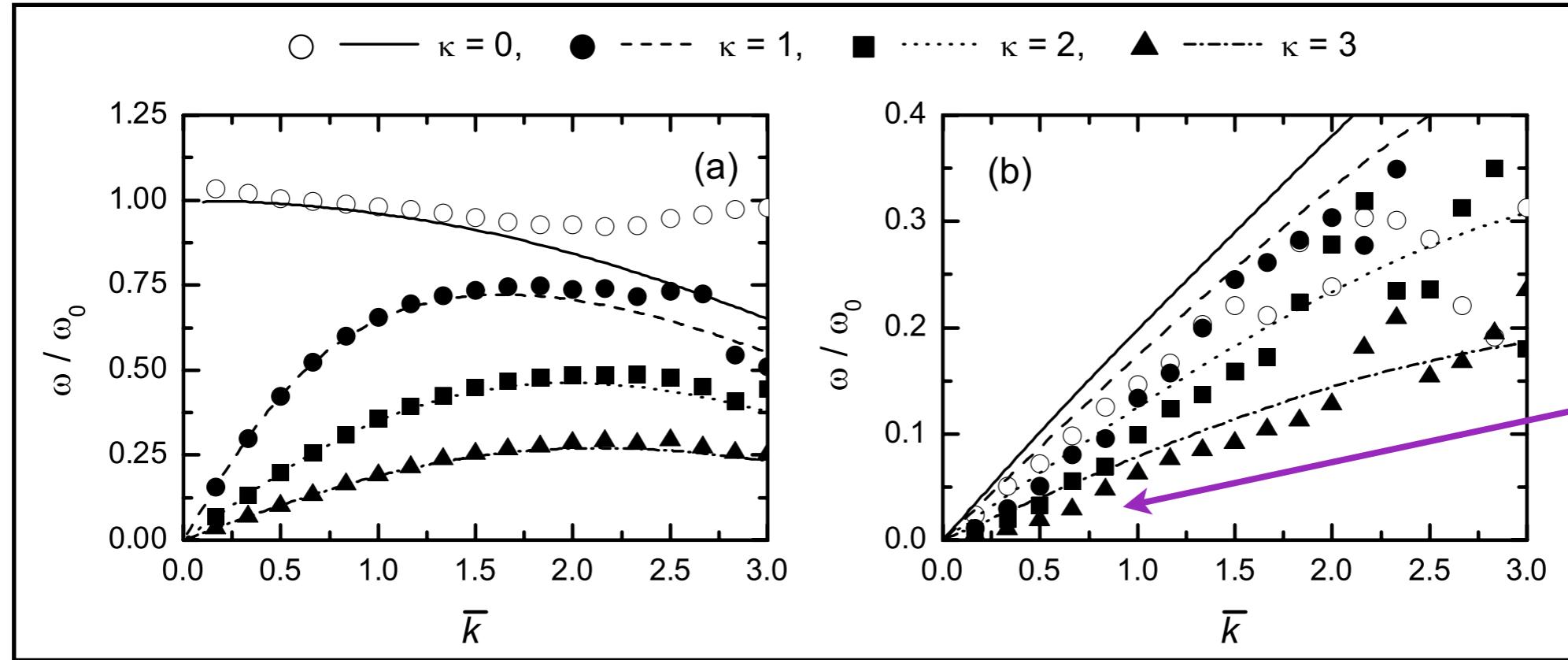
L : konst. frekvencia
T : akusztikus

Yukawa:

L : kváziakusztikus
T : akusztikus

3D plazmafolyadékok kollektív gerjesztései: MD / elmélet

Golden
&
Kalman
QLCA
elmélet:



T módus:
levágás
véges k
mellett

M.S. Murillo
Phys. Rev. Lett.
85, 2514 (2000)

EXP: J. Goree

$$\Omega_L^2(\mathbf{k}) = \Omega_0^2(\mathbf{k}) + \omega_{0,3D}^2 \frac{\bar{k}^2}{2} \int_0^\infty \Lambda^{3D}(\bar{k}\bar{r}, \kappa\bar{r}) h(\bar{r}) d\bar{r}$$

$$\Omega_0^2(\mathbf{k}) = \omega_{0,3D}^2 \frac{\bar{k}^2}{\bar{k}^2 + \kappa^2}$$

$$\Omega_T^2(\mathbf{k}) = \omega_{0,3D}^2 \frac{\bar{k}^2}{2} \int_0^\infty \Theta^{3D}(\bar{k}\bar{r}, \kappa\bar{r}) h(\bar{r}) d\bar{r}$$

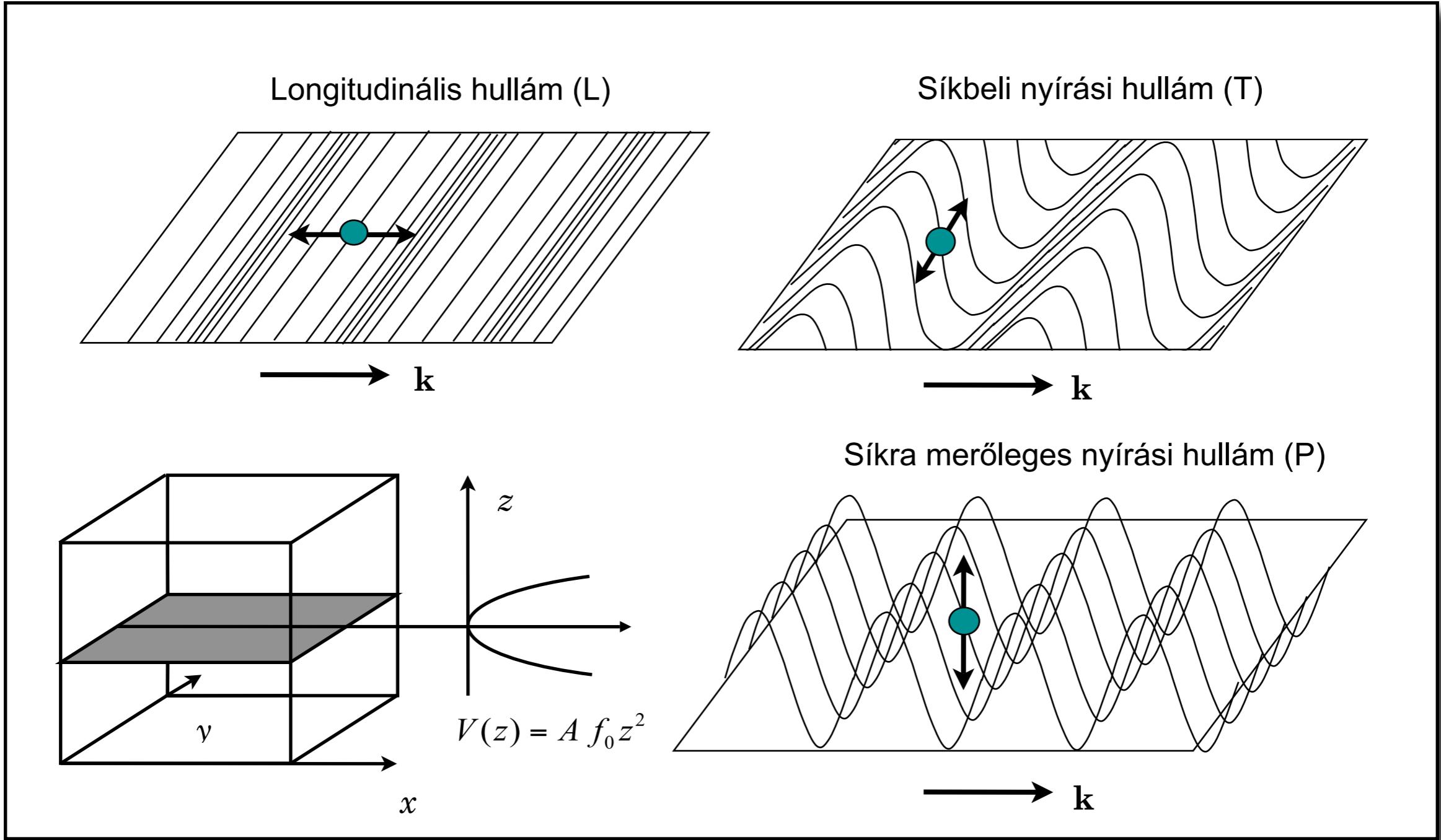
párokrelációs fv. (statikus) → dinamika

$$\Lambda^{3D}(x, y) = -2 \frac{e^{-y}}{x} \left[(1 + y + y^2) \left(\frac{\sin(x)}{x} + 3 \frac{\cos(x)}{x^2} - 3 \frac{\sin(x)}{x^3} \right) - \frac{y^2}{6} \left(1 + 3 \frac{\sin(x)}{x} + 12 \frac{\cos(x)}{x^2} - 12 \frac{\sin(x)}{x^3} \right) \right]$$

$$\Theta^{3D}(x, y) = \frac{1}{2} \left[\frac{e^{-y}}{x} y^2 \left(1 - \frac{\sin(x)}{x} \right) - \Lambda^{3D}(x, y) \right]$$

Z. Donkó, G. J. Kalman & P. Hartmann, J. Phys. Cond. Matter 20, 413101 (2008)

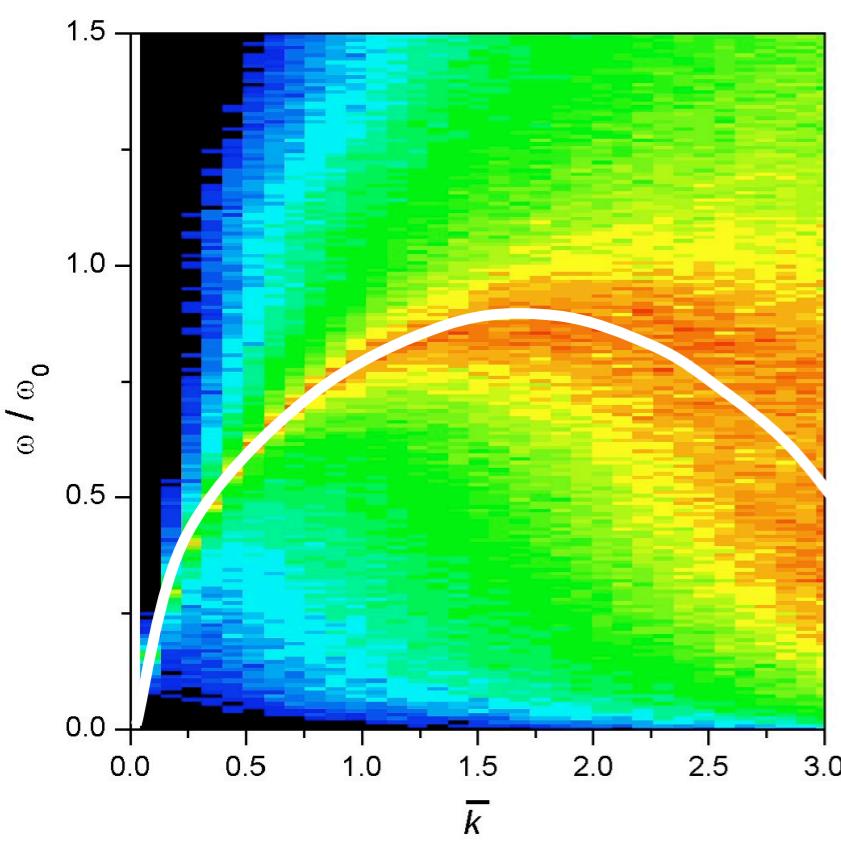
Kollektív gerjesztések (hullámok): kvázi 2D



Kollektív gerjesztések (hullámok): kvázi 2D

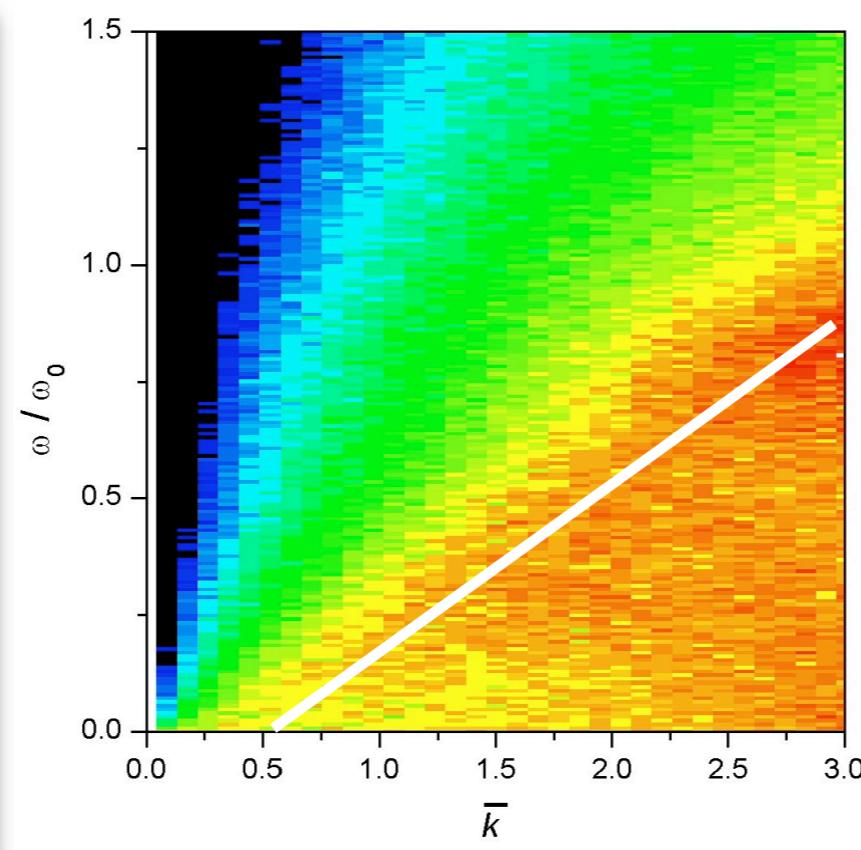
$$\Gamma = 100, \quad \kappa = 0.27$$

Longitudinális hullám (L)



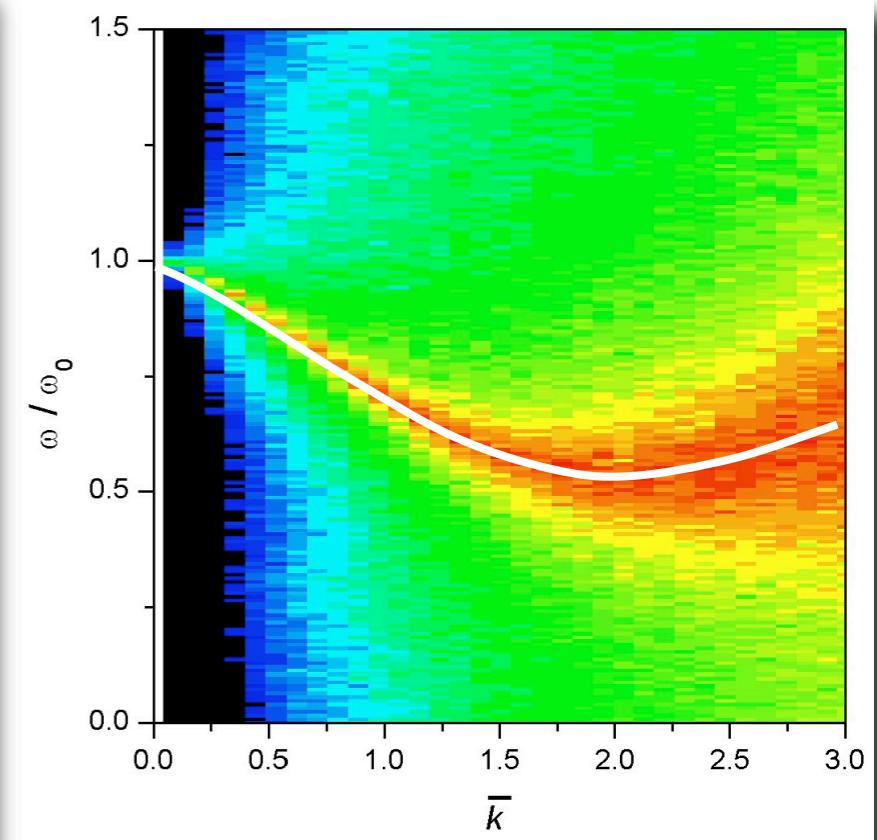
L : quasi-acoustic

Síkbeli nyírási hullám (T)



T : acoustic

Síkra merőleges nyírási hullám (P)



P : optical

Z. Donkó, P. Hartmann, G. J. Kalman, M. Rosenberg, Contrib. Plasma Phys. 43, 282-284 (2003).
 G. J. Kalman, P. Hartmann, Z. Donkó, M. Rosenberg, Phys. Rev. Lett. 92, 065001 (2004).

Összefoglalás

- Erősen csatolt plazmák - fizikai rendszerek
- MD szimuláció alapjai
- Egyensúlyi & Nemegyensúlyi MD módszerek
 - termodinamikai jellemzők meghatározása
 - transzportfolyamatok vizsgálata
 - kollektív gerjesztések azonosítása

KÖSZÖNÖM A FIGYELMET !