

ПЕРЕХОД КРИСТАЛЛ-ЖИДКОСТЬ В ОДНОКОМПОНЕНТНЫХ ПЛАЗМЕННЫХ КЛАСТЕРАХ

Шпилько Е. С.,^{1,2} Жуховицкий Д. И.*^{1,2}

¹ ОИВТ РАН, Москва, Россия, ² МФТИ, Долгопрудный, Россия

*dmr@ihed.ras.ru

Объектом исследования являются массивные заряженные частицы на компенсирующем однородном фоне, ограниченном сферической поверхностью. Такие объекты значительно расширяют границы модели бесконечной системы [1], поскольку состояние системы определяется не только кулоновским параметром неидеальности Γ , но и числом частиц N . Поскольку размерные эффекты представляют интерес, N не слишком велико. Это позволяет непосредственно учесть силы кулоновского взаимодействия и в то же время избежать громоздких расчетов, связанных с МД-моделированием таких систем.

В работе проведено МД-моделирование однокомпонентных плазменных кластеров. Температура контролировалась терmostатом Ланжевена, который был модифицирован для сохранения полного импульса частиц. Это исключает колебания поверхности диполя, которые могут оказывать заметное влияние на кристаллизацию кластера. Моделирование производилось для N в диапазоне от 140 до 1200 и Γ от 50 до 500 и показали, что в точке перехода кристалл–жидкость Γ увеличивается с ростом N , причем среднее значение мало отличается от значения для бесконечной системы [1]. Структура кристаллизованного кластера представляет собой набор вложенных сферических оболочек.

Обсуждаются методы экспериментального определения Γ на основе модели ячеек Вигнера–Зейтца. Показано, что оценка по среднеквадратичному отклонению частицы от центра ее ячейки, обычно используемая при анализе экспериментальных данных (например, в [2]), недостоверна из-за смещения центра ячейки благодаря тепловым прыжкам частиц. Предложен новый метод, основанный на определении ускорения частиц, который обладает достаточной точностью не только для кристалла, но и для жидкого состояния. Данный метод может быть применен для комплексной плазмы.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 20-12-00365).

-
1. Hamaguchi S., Farouki R. T., Dubin., D. H. E. // Phys. Rev. E. 1997. V. 56. No. 4. P. 4671.
 2. Zhukhovitskii D. I., Naumkin V. N., Khusnulgatin A. I., Molotkov V. I., Lipaev A. M. // Phys. Rev. E. 2017. V. 96, No. 4, P. 043204.