

О ПРИМЕНИМОСТИ ПРИБЛИЖЕНИЯ ЯЧЕЕК ВИГНЕРА–ЗЕЙТЦА  
ДЛЯ КУЛОНОВСКИХ КЛАСТЕРОВ© 2023 г. Е. С. Шпилько<sup>a,b</sup>, Д. И. Жуховицкий<sup>a,b,\*</sup><sup>a</sup> Объединенный институт высоких температур РАН, Москва, Россия<sup>b</sup> Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет),  
Московская область, Долгопрудный, Россия

\*e-mail: dmr@ihed.ras.ru

Поступила в редакцию 20.05.2023 г.

После доработки 10.06.2023 г.

Принята к публикации 20.06.2023 г.

Проведено моделирование методом молекулярной динамики системы массивных заряженных частиц на компенсирующем однородном фоне, ограниченном сферической поверхностью. Кристаллизованный кластер представляет собой набор вложенных сферических оболочек практически одинаковой структуры и ядро. Показано, что плавление кластера является комбинацией плавления в оболочках и плавления ядра. Обнаружено, что значения кулоновского параметра неидеальности  $\Gamma$ , соответствующие этим двум видам плавления, не зависят от размера кластера. Обсуждаются методы определения  $\Gamma$ , основанные на модели ячеек Вигнера–Зейтца. Показано, что оценка по среднеквадратичному отклонению частицы от центра ее ячейки ненадежна из-за самодиффузии частиц. Предложено соотношение, определяющее  $\Gamma$  через среднеквадратичные скорость и ускорение частицы и не включающее среднеквадратичного отклонения частицы от ее усредненного положения. Показано, что это соотношение выполняется с высокой точностью не только для кристалла, но и для жидкого состояния. Тем самым продемонстрировано, что модель ячеек Вигнера–Зейтца хорошо применима для рассматриваемой сильно неоднородной системы.

*Ключевые слова:* комплексная плазма, однокомпонентная плазма, сильнонеидеальная плазма, кулоновский кластер, плавление

DOI: 10.31857/S0367292123600590, EDN: EQDRKD

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Исследование сильнонеидеальных конечно-размерных плазменных объектов на основе приближения однокомпонентной плазмы (массивные заряженные частицы на компенсирующем их заряд однородном фоне) [1, 2] представляет значительный интерес, поскольку существенно расширяет возможности традиционного подхода, в рамках которого рассматривается однородная бесконечная система, и имеет важные приложения в области пылевой плазмы [3–10], а также при исследовании кулоновских кластеров, образованных захваченными в электрические или электромагнитные ловушки ультрахолодными ионами (например, [11, 12]).

Результаты экспериментальных и теоретических исследований кулоновских кластеров, сформированных в пылевой плазме, свидетельствуют о том, что их структура представляет собой набор вложенных друг в друга сферических оболочек. По мере увеличения числа частиц в кластере  $N$  происходит заполнение оболочек; значения  $N$ ,

при которых все оболочки заполнены, соответствуют максимальной энергии связи системы и называются магическими числами [4, 5, 9].

В обзоре [12] приводятся результаты экспериментальных и теоретических исследований кулоновских кластеров, образованных ионами, удерживаемыми в ограниченном объеме с помощью ловушки Пеннинга. Несмотря на то, что потенциальная яма ловушки сильно отличается от параболической, такие свойства кластера как структура вложенных оболочек и ориентационная, преимущественно гексагональная, структура внутри каждой оболочки качественно не отличаются от наблюдавшихся для кулоновских кластеров в пылевой плазме. Отметим, что процесс плавления для ионных кулоновских кластеров не исследовался.

В работе [10] изучалось плавление оболочек кластера для малых значений числа частиц  $N \leq 38$ , и было показано, что оно носит сложный характер и может реализовываться по разным сценариям, в зависимости от  $N$ . Малые значения

$N$  и сильная зависимость всех свойств кластеров от этого числа не позволили авторам оценить кулоновский параметр неидеальности  $\Gamma$ , соответствующий этому типу плавления. В данной работе показано, что при достаточно больших  $N$  плавление оболочек, имеющее характер двумерного (2D) плавления, имеет универсальный характер, причем интервал значений  $\Gamma$ , при котором происходит плавление, достаточно узок и не зависит от  $N$ . Если кластер имеет ядро, образованное частицей в центре кластера, то оно плавится по трехмерному (3D) сценарию, причем значение  $\Gamma$  плавления оказывается близким к его значению для бесконечной системы [1, 2] также независимо от  $N$ .

Модель ячеек Вигнера–Зейтца, часто используемая в теории сильнонеидеальной плазмы, обычно применяется для системы точечных зарядов или заряженных сфер на фоне непрерывно распределенного компенсирующего заряда противоположного знака. В своей простейшей формулировке эта модель сводится к разбиению всего объема рассматриваемой системы на совокупность пересекающихся сферических ячеек, в центре каждой из которых находится точечный заряд или заряженная сфера. По определению каждая ячейка электронейтральна. Такая модель, очевидно, является альтернативой модели слабо-неидеальной (дебаевской) плазмы и поэтому имеет смысл ее использовать только для больших параметров кулоновской неидеальности межчастичного взаимодействия. Очевидно, что данная модель может быть использована как для жидкого, так и для кристаллизованного состояния неидеальной плазмы. Недостатком модели является пренебрежение корреляцией частиц, находящихся в различных ячейках, т.е. фактически неучет фоновонного спектра системы зарядов. Это существенно отличает данную модель от, например, модели Дебая для твердого тела. Тем не менее, преимуществом модели ячеек Вигнера–Зейтца является ее применимость к жидкому состоянию, тогда как модель Дебая применима только для сред с упругими свойствами. Другим преимуществом модели ячеек является чрезвычайно простое описание движения частиц в ячейках как движения в поле с параболическим потенциалом, параметры которого полностью определяются только зарядом частицы и радиусом ячейки. Под приближением ячеек Вигнера–Зейтца мы подразумеваем следующее из этой модели описание движения частиц, в частности, выражение для действующей на частицу силы. Ясно, что для такой сильно неоднородной и анизотропной среды как кулоновский кластер, это приближение может быть слишком грубым для описания некоторых характеристик системы.

Интересно исследовать вопрос о применимости модели ячеек Вигнера–Зейтца для кулонов-

ских кластеров, в частности, для оценки величины  $\Gamma$ . В литературе нет однозначного ответа на этот вопрос даже для неограниченной системы. Так, попытка определения  $\Gamma$  по величине среднеквадратичного отклонения частицы от центра ячейки в протяженном 3D пылевом кристалле сталкивается со значительными трудностями [13]. В работах [14, 15] приводятся аргументы в пользу того, что сильная корреляция соседних частиц, связанная с длинноволновой частью фоновонного спектра, приводит к существенному нарушению связи между  $\Gamma$  и среднеквадратичным отклонением, диктуемой моделью ячеек. В данной работе продемонстрировано, что эта связь действительно нарушается, в первую очередь, за счет интенсивной самодиффузии частиц. В качестве альтернативы предложен способ определения  $\Gamma$ , также основанный на модели ячеек, но не требующий определения среднеквадратичного отклонения, который обладает высокой точностью как для кристаллического, так и для жидкого состояний. Это указывает на хорошую применимость модели ячеек Вигнера–Зейтца, в частности, для комплексной плазмы.

## 2. МОДЕЛЬ КУЛОНОВСКОГО КЛАСТЕРА

Рассмотрим  $N$  массивных частиц с зарядом  $Ze$ , где  $e$  – элементарный заряд, на однородном фоне с полным зарядом  $-ZNe$ , ограниченном сферой радиуса  $R$ . Введем параметры длины  $r_d = RN^{-1/3}$ , энергии  $\varepsilon = Z^2 e^2 / r_d$  и времени  $\tau_0 = r_d(m/\varepsilon)^{1/2}$ , где  $m$  – масса частицы. Очевидно, что  $r_d$  – радиус ячейки Вигнера–Зейтца,  $\Gamma = \varepsilon/T$  ( $T$  – температура в энергетических единицах), а  $\tau_0^{-1}$  совпадает с частотой колебания частицы в ячейке

$$\omega_0 = \sqrt{\frac{Z^2 e^2}{mr_d^3}} = \frac{\omega_L}{\sqrt{3}}, \quad (1)$$

где  $\omega_L = (3NZ^2 e^2 / mR^3)^{1/2}$  – ленгмюровская частота (средняя концентрация частиц равна  $3N/4\pi R^3$ ). С помощью определенных выше размерных параметров введем безразмерные переменные. Уравнение движения частицы в безразмерных переменных имеет вид (начало координат помещено в центр масс кластера):

$$\ddot{\mathbf{r}}_i = \mathbf{f}_{Zi} + \mathbf{f}_{Bi} + \mathbf{f}_{Li}, \quad (2)$$

где  $\mathbf{f}_{Zi}$ ,  $\mathbf{f}_{Bi}$  и  $\mathbf{f}_{Li}$ , соответственно, обозначают силу, действующие на  $i$ -ю частицу, со стороны других частиц:

$$\mathbf{f}_{Zi} = \sum_{j \neq i} \frac{\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j}{\xi_{ij}^3}, \quad \xi_{ij} = |r_i - r_j|, \quad (3)$$

где  $\mathbf{r}_i$  – радиус-вектор  $i$ -й частицы, силу притяжения к фону:

$$\mathbf{f}_{Bi} = \begin{cases} -\mathbf{r}_i, & r_i \leq R, \\ -N \frac{\mathbf{r}_i}{r_i^3}, & r_i > R \end{cases} \quad (4)$$

и силу со стороны термостата Ланжевена:

$$\mathbf{f}_{Li} = -\gamma \dot{\mathbf{r}}_i + \mathbf{f}_{sti}, \quad (5)$$

где  $\gamma$  – обратное время торможения частицы,  $\mathbf{f}_{sti}$  – случайная сила с гауссовым распределением, такая, что  $\langle f_{sti}^2 \rangle = 6\gamma/\Gamma \tau_{st}$ ,  $\tau_{st}$  – время распада ее автокорреляций. Заметим, что ограничение фона сферой радиуса  $R$  позволяет моделировать, в частности, испарение кластера, которое отсутствует для системы частиц в ловушке.

Как видно из (4), взаимодействие с фоном сохраняет положение центра масс частиц, если их выходом за границу фона можно пренебречь. Оказывается, что это справедливо для всех  $\Gamma$  выше точки 2D-плавления. Чтобы моделировать кластер с неподвижным центром масс, а не систему частиц в ловушке, как делалось в работах других авторов, сила  $\mathbf{f}_{sti}$  генерировалась таким образом, чтобы было  $\sum_{i=1}^N \mathbf{f}_{sti} = 0$ . Для этого на каждом шаге по времени при четном  $N$  генерировались  $3N/2$  случайных компонент  $\mathbf{f}_{sti}$ , которые применялись для половины частиц. Затем эти компоненты для каждой координаты случайно перемешивались и использовались для оставшихся частиц. При нечетном  $N$  силы  $\mathbf{f}_{sti}$  генерировались описанным выше способом для  $N - 1$  частицы, и полагалось  $\mathbf{f}_{stN} = 0$ .

Случайное перемешивание наборов компонент случайной силы выполнялось на каждом шаге интегрирования по времени. Поэтому если слабые корреляции между силами, действующими на отдельные частицы, и возникают, то характерное время распада этих корреляций равно шагу интегрирования, т.е. такие корреляции не являются физически значимыми. Наблюдаемые корреляции отклонений частиц от центров соответствующих ячеек Вигнера–Зейтца относятся к временному масштабу не менее обратной ленгмюровской частоты, что на два порядка превосходит величину шага интегрирования. Предложенная процедура генерации ланжевенских сил, гарантирующая неподвижность центра масс, позволяет исключить влияние дипольных осцилляций системы частиц в неподвижной ловушке, которые имели бы наибольшую амплитуду, на ее фоновый спектр. Заметим, однако, что данная процедура не обеспечивает обращения в нуль полного момента ланжевенских сил, что вызы-

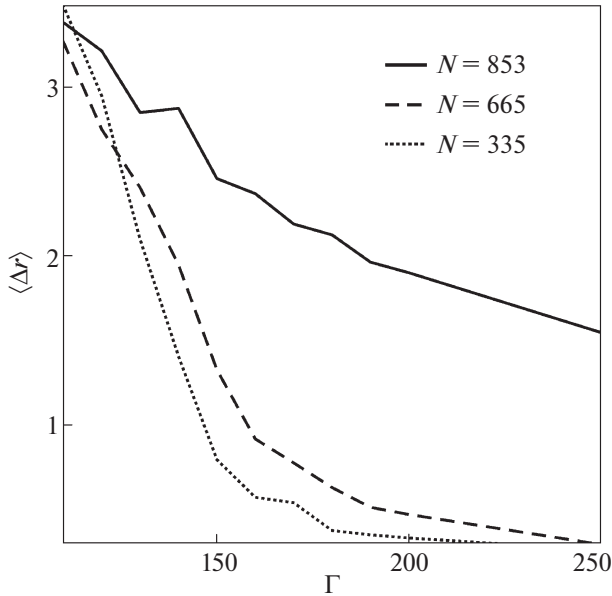
вает диффузионное вращение кластера как целого. Явление передачи энергии с колебательных на вращательные степени свободы наблюдается для некоторых термостатов, например термостата Берендсена, при моделировании ограниченных систем частиц (отдельных кластеров). Однако для термостата Ланжевена это явление не наблюдается благодаря действию на каждую частицу силы трения, зависящей от абсолютной скорости частицы. В результате кинетическая энергия вращения кластера оказывается порядка температуры частиц, что при большом числе частиц составляет лишь малую долю их полной кинетической энергии. В данной работе нам не удалось зарегистрировать вращение системы в течение всего времени моделирования. Более важным оказалось то обстоятельство, что вращение кластера, в отличие от его дипольных колебаний, вряд ли способно повлиять на его фоновый спектр.

Вначале кластер, содержащий  $N$  частиц, специализировался в виде гексагональной решетки, ограниченной сферой, причем параметр решетки выбирался так, чтобы минимизировать время релаксации системы. Затем уравнения (2) интегрировались численно. После релаксации системы частиц в равновесное состояние в течение длительного времени производился сбор статистических данных.

### 3. 2D- И 3D-ПЛАВЛЕНИЕ КУЛОНОВСКИХ КЛАСТЕРОВ

Данные, полученные при моделировании рассматриваемой системы методом молекулярной динамики, позволяют исследовать вопрос о ее плавлении. В первую очередь, исследовался вопрос о наличии у кластера ядра, представляющего собой частицу, находящуюся весьма близко к центру кластера (центральную частицу). Для этого при  $\Gamma = 500$  для различных  $N$  определялась ближайшая к центру частица, и находилось ее расстояние от центра  $\Delta r$  спустя значительное (порядка  $10^5$ ) время. Диапазон исследованных значений от  $N = 150$  до  $N = 1075$  разбивается на участки, где  $\Delta r$  мало, и те, где  $\Delta r$  на порядок величины больше. Очевидно, что малые  $\Delta r$  соответствуют наличию центральной частицы, а большие  $\Delta r$ , близкие к радиусу первой оболочки, означают отсутствие центральной частицы.

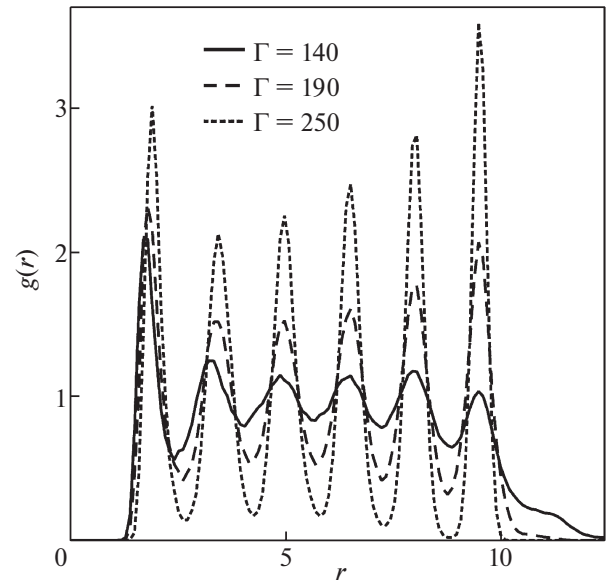
Аналогичные вычисления проводились при фиксированном  $N$  для различных  $\Gamma$ , причем величина  $\langle \Delta r \rangle$  получалась усреднением по многим реализациям моделирования в течение времени порядка  $10^4$ . Результаты приведены на рис. 1 для  $N = 335$  и 665 (центральная частица присутствует) и  $N = 853$  (центральной частицы нет). Видно, что в первых двух случаях  $\langle \Delta r \rangle$  резко возрастает,



**Рис. 1.** Разность между начальным и конечным расстоянием до центра кластера для частицы, наиболее близкой к нему в начале наблюдения, как функция кулоновского параметра неидеальности  $\Gamma$ , для разных размеров кластера: сплошная линия –  $N = 853$ , штриховая линия – 665, пунктир – 335.

что свидетельствует о быстрой интенсификации диффузии центральной частицы в результате 3D-плавления ядра. Отметим, что такой переход происходит при  $\Gamma$  в диапазоне от 160 до 180, что коррелирует с данными о  $\Gamma$  плавления неограниченной системы [1, 2]. Напротив, при  $N = 853$  изменение  $\langle \Delta r \rangle$  невелико и становится заметным только при  $\Gamma < 130$ , что свидетельствует об отсутствии 3D-плавления в отсутствие ядра. О том же свидетельствует и радиальная функция распределения, для которой  $r$  отсчитывается от центральной частицы, построенная для  $N = 1075$  при различных  $\Gamma$  (рис. 2). Можно видеть, что при изменении  $\Gamma$  от 140 до 190 происходит резкое изменение вида функции распределения, связанного с относительными высотами максимумов, от типичного для жидкости до характерного для кристаллического состояния.

Необходимо отметить, что в данной системе словам “3D-плавление” нельзя придавать буквального значения, поскольку “ядро” кулоновского кластера, если оно вообще присутствует для данного  $N$ , состоит только из одной частицы даже для максимального  $N$ , использованного в расчетах. Однако резкое изменение коэффициента самодиффузии центральной частицы, а также вида радиальной функции распределения (рис. 2) при  $\Gamma \leq 200$ , значения, при котором происходит плавление бесконечной однокомпонентной плазмы, свидетельствует о процессе, находящемся в



**Рис. 2.** Радиальная функция распределения вокруг центральной частицы ( $N = 1075$ ) при различных  $\Gamma$ . Сплошная линия –  $\Gamma = 140$ , штриховая линия – 190, пунктир – 250.

близкой аналогии с 3D-плавлением, которое происходило бы в кристаллизованном ядре достаточно большого кластера. Более точно наблюдаемый процесс можно было бы назвать “прототипом” 3D-плавления.

Для исследования 2D-плавления в оболочках для каждой из них проводился анализ их 2D-структуры. Независимо от числа частиц и номера оболочки, кристаллизованные оболочки имеют преимущественно гексагональную структуру, т.е. каждая частица имеет с наибольшей вероятностью шесть ближайших соседей из той же оболочки; встречаются также частицы с пятью и семью соседями. Для характеристики 2D-структуры для каждой частицы фиксированной оболочки находились шесть ближайших соседей, принадлежащих данной оболочке, и определялся средний по всем частицам угол  $\alpha$  между направлениями на два смежных соседа из проекции данной частицы на плоскость, в которой лежали бы эти соседи в случае идеальной двумерной гексагональной структуры оболочки. Использование координат проекции частицы вместо координат самой частицы позволяет исключить эффект кривизны поверхности оболочки и получить универсальные зависимости. На рис. 3 представлены результаты такого исследования для  $N = 853$ . Из рисунка следует, что зависимости  $\alpha(\Gamma)$  являются универсальными, а углы для всех оболочек, кроме первой и последней, практически совпадают. Характерной особенностью всех кривых является их резкое падение при  $\Gamma < 80$ , причем при  $\Gamma < 60$  на-

блюдается испарение кластера (вылет отдельных частиц). Это свидетельствует о 2D-плавлении системы. Весьма близкие результаты получаются и для других  $N$ . Заметим, что радиальная функция распределения, построенная от центра масс частиц, имеет тот же характер, что и изображенная на рис. 2, но переход к характерному жидкостному виду с отсутствием выраженных максимумов происходит при  $\Gamma < 60$ . Таким образом, полученные данные свидетельствуют о плавлении оболочек в интервале  $60 < \Gamma < 90$ .

Заметим, что, в отличие от, например, работы [12], где поле ловушки создает потенциальную яму для ионов практически бесконечной глубины, в данной работе исследуется ограниченная однокомпонентная плазма, в которой удерживающий частицы потенциал равномерно распределенного заряда создает потенциальную яму конечной глубины. Благодаря этому обстоятельству возможно наблюдение испарения частиц при уменьшении  $\Gamma$ , которое начинается при 2D-плавлении оболочек кластера и является еще одним свидетельством этого процесса.

#### 4. ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПАРАМЕТРА КУЛОНОВСКОЙ НЕИДЕАЛЬНОСТИ

Определив особенности структуры и фазового состояния рассматриваемой системы, перейдем к вопросу о применимости для нее модели ячеек Вигнера–Зейтца. Будем считать, что модель применима, если на ее основе удастся построить достаточно точную оценку для  $\Gamma$ . Имея в виду возможное применение полученных результатов для других систем, в данном разделе будем использовать размерные величины.

Модель ячеек сводит многочастичную задачу к одночастичной: частица движется в потенциальной яме  $m\omega_0^2 r^2/2$ , где  $r$  – расстояние от частицы до центра ячейки, в котором находится начало отсчета. Тогда из теоремы вириала следует связь между оценкой кулоновского параметра неидеальности  $\Gamma_1$  и среднеквадратичным отклонением частицы от центра ячейки  $\delta r = \langle r^2 \rangle^{1/2}$  (см., например, [13])

$$\Gamma_1 = 3 \left( \frac{r_d}{\delta r} \right)^2. \quad (6)$$

Казалось бы, соотношение (6) должно быть применимо, по крайней мере, для центральной частицы, окруженной практически изотропной средой. Однако результаты расчетов показывают, что частота прыжков частицы между ячейками даже при большом  $\Gamma$  высока, и невозможно выбрать интервал усреднения по времени  $r^2$  так, чтобы значение  $\Gamma_1$  слабо зависело от него. Из

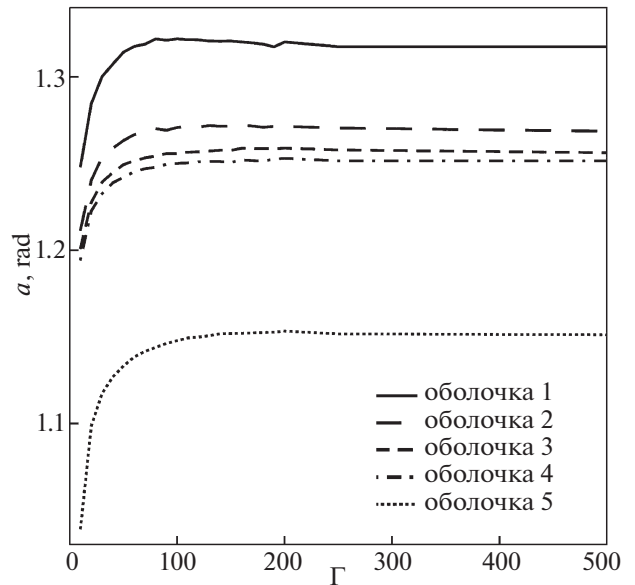
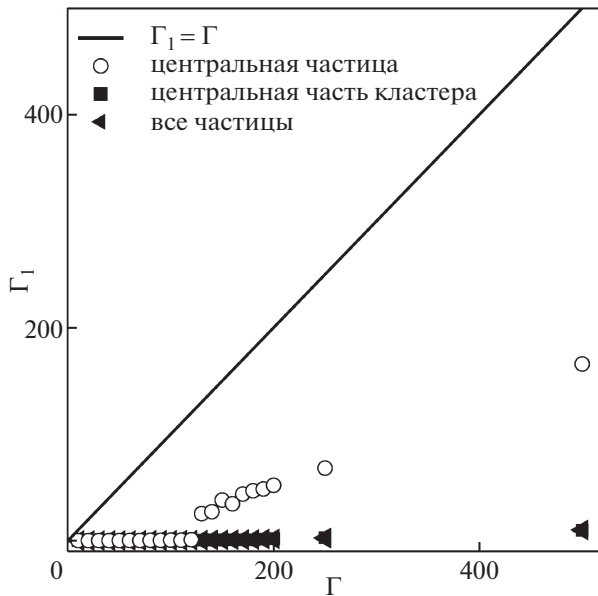


Рис. 3. Средний угол между направлениями на соседние частицы (см. текст) в различных оболочках как функция кулоновского параметра неидеальности для  $N = 853$ . Номера оболочек указаны в легенде.

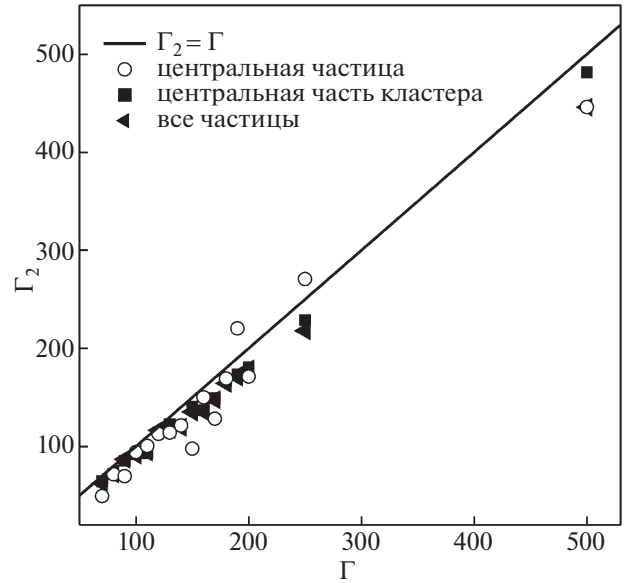
рис. 4 видно, что даже для кристаллизованного кластера оценка (6) значительно расходится с истинным значением  $\Gamma$ , а для жидкого состояния не имеет даже близкого порядка величины. Аналогичные трудности возникали в работе [13] при попытке оценить  $\Gamma$  для пылевого кристалла, хотя, возможно, на смещение равновесных положений частиц в этом эксперименте влияло его медленное вращение.

Очевидно, что оценка (6) может быть улучшена, если она не будет содержать плохо определяемую величину  $\delta r$ . Поскольку сила взаимодействия частицы с фоном ячейки равна  $\mathbf{f} = -m\omega_0^2 \mathbf{r}$ , имеем  $\langle f^2 \rangle = m^2 \omega_0^4 \langle \delta r^2 \rangle$ , что, с учетом теоремы вириала  $m\omega_0^2 \langle \delta r^2 \rangle = 3T$  ( $T = m\langle v^2 \rangle/3$ ,  $v$  – скорость частицы) и выражения (1), следующего из модели ячеек, дает возможность записать требуемую оценку для кулоновского параметра неидеальности  $\Gamma_2 = \langle f^2 \rangle r_d^2 / 3T^2$ . Однако в эксперименте система находится в контакте с термостатом, и измеряется ускорение частицы  $a$ , через которое и нужно выразить  $\langle f^2 \rangle$ . Обозначая полную силу, действующую на частицу, через  $\mathbf{f}_i$ , имеем  $m\mathbf{a} = \mathbf{f}_i = \mathbf{f} + \mathbf{f}_L$ , где  $\mathbf{f}_L$  – сила, действующая со стороны термостата и определяемая так же, как  $\mathbf{f}_{Li}$  (5). Производя усреднение по времени, получим в равновесии:

$$\langle f^2 \rangle = \langle f_i^2 \rangle - 2 \langle \mathbf{f} \cdot \mathbf{f}_L \rangle - \langle f_L^2 \rangle. \quad (7)$$



**Рис. 4.** Оценка параметра кулоновской неидеальности по средневекторному отклонению частицы от центра ее ячейки для  $N = 335$ , формула (6). Сплошная линия —  $\Gamma_1 = \Gamma$ . Усреднение выполнялось для центральной частицы (кружки), частиц внутри сферы радиуса  $(2/3)R$  (квадраты) и всех частиц (треугольники).



**Рис. 5.** Оценка параметра кулоновской неидеальности по средневекторным скорости и ускорению частицы для  $N = 1075$ , формула (9). Сплошная линия —  $\Gamma_2 = \Gamma$ . Усреднение выполнялось для центральной частицы (кружки), частиц внутри сферы радиуса  $(2/3)R$  (квадраты) и всех частиц (треугольники).

Корреляционные функции в правой части (7) вычисляем с учетом определения  $\mathbf{f}$ , уравнения движения частицы в ячейке:

$$m\dot{\mathbf{v}} + m\boldsymbol{\gamma} = \mathbf{f} + \mathbf{f}_{st} \quad (8)$$

и связи  $\langle f_{st}^2 \rangle = 2\gamma\langle v^2 \rangle / \tau_{st}$ . Окончательно получим оценку

$$\Gamma_2 = \frac{3r_d^2}{\langle v^2 \rangle^2} \left[ \langle a^2 \rangle + \gamma \left( \gamma - \frac{2}{\tau_{st}} \right) \langle v^2 \rangle \right]. \quad (9)$$

Как видно из рис. 5, оценка (9) хорошо коррелирует с результатами численного моделирования. Отметим, что хорошее согласие имеет место не только для кристаллического, но и для жидкого состояния кластера. Основываясь на этом, можно сделать вывод о применимости модели ячеек Вигнера–Зейтца для рассматриваемой системы. По-видимому, этому способствует относительно малая величина коэффициента корреляции отклонений двух частиц от центров соответствующих ячеек. В данной работе для него была получена величина порядка 0.1, что согласуется с результатом измерения этой величины в комплексной плазме [13].

В работе проводилось сравнение корреляций отклонений частиц от центров ячеек Вигнера–Зейтца для алгоритма генерации случайной силы, описанного в разд. 2, и для обычного термостата Ланжевена, которое в пределах статистической

погрешности моделирования не выявило никаких различий. Это свидетельствует о том, что в системе практически отсутствуют длинноволновые фононы, возможно, в результате отсутствия у кластера кристаллического ядра.

## 5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе показано, что плавление кулоновского кластера является комбинацией 2D- и 3D-плавлений. При числе частиц  $N > 300$  кулоновский параметр неидеальности  $\Gamma$  принимает независимо от  $N$  значение 60–70 для 2D-плавления (плавления в оболочках) и 160–180, как в неограниченной системе, для 3D-плавления (плавления ядра). Обнаружена универсальность двумерной кристаллической структуры сферических оболочек и характера ее плавления.

Впервые исследована система тяжелых заряженных частиц на фоне равномерно распределенного заряда противоположного знака, ограниченного сферой, с неподвижным центром масс (кластер). Оказывается, что в отличие от традиционно рассматриваемого ансамбля частиц в ловушке, при 2D-плавлении кластера начинается его интенсивное испарение.

Предложено соотношение, определяющее параметр кулоновской неидеальности межчастичного взаимодействия через средневекторные скорость и ускорение частицы и не включающее

среднеквадратичного отклонения частицы от центра ячейки Вигнера–Зейтца. Данное соотношение проверено в численном эксперименте, доказано, что оно выполняется с высокой точностью не только для кристаллизованного, но и для жидкого состояния системы. Предложенное соотношение должно быть особенно эффективно в том случае, когда невозможно выделить такой отрезок времени, на протяжении которого допустимо пренебрегать самодиффузией. Данное соотношение может быть использовано для анализа экспериментальных данных, в частности, в области пылевой плазмы, когда заранее не известны ни заряд частиц, ни их кинетическая температура.

Показано, что классическая модель ячеек Вигнера–Зейтца может быть использована для рассматриваемой системы и обеспечивает достаточно высокую точность определения кулоновского параметра неидеальности.

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

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Slattery W.L., Doolen G.D., De Witt H.E.* // Phys. Rev. A. 1980. V. 21. P. 2087.  
<https://doi.org/10.1103/PhysRevA.21.2087>
2. *Hamaguchi S., Farouki R.T., Dubin D.H.E.* // Phys. Rev. E. 1997. V. 56. P. 4671.  
<https://doi.org/10.1103/PhysRevE.56.4671>
3. Complex and Dusty Plasmas: From Laboratory to Space. Series in Plasma Physics / Eds. V. E. Fortov and G. E. Morfill. CRC Press: Boca Raton, FL, 2010.
4. *Arp O., Block D., Klindworth M., and Piel A.* // Phys. Plasmas. 2005. V. 12. P. 122102.  
<https://doi.org/10.1063/1.2147000>
5. *Arp O., Block D., Bonitz M., Fehske H., Golubnychiy V., Kosse S., Ludwig P., Melzer A., and Piel A.* // J. Phys.: Conf. Series. 2005. V. 11. P. 234.  
<https://doi.org/10.1088/1742-6596/11/1/023>
6. *Käding S., Melzer A.* // Phys. Plasmas. 2006. V. 13. P. 090701.  
<https://doi.org/10.1063/1.2354149>
7. *Block D., Käding S., Melzer A., Piel A., Baumgartner H., Bonitz M.* // Phys. Plasmas. 2008. V. 15. P. 040701.  
<https://doi.org/10.1063/1.2903549>
8. *Arp O., Block D., Piel A.* // Phys. Rev. Lett. 2004. V. 93. P. 165004.  
<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.93.165004>
9. *Totsuji H., Ogawa T., Totsuji C., Tsuruta K.* // J. Phys. A: Math. Gen. 2006. V. 39. P. 4545.  
<https://doi.org/10.1088/0305-4470/39/17/S36>
10. *Apolinario S.W.S., Albino Aguiar J., Peeters F.M.* // Phys. Rev. E. 2014. V. 90. P. 063113.  
<https://doi.org/10.1103/PhysRevE.90.063113>
11. *Wineland D.J., Bergquist J.C., Itano W.M., Bollinger J.J., Manney C.H.* // Phys. Rev. Lett. 1987. V. 59. P. 2935.  
<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.59.2935>
12. *Dubin D.H.E., O'Neil T.M.* // Rev. Mod. Phys. 1999. V. 71. P. 87.
13. *Zhukhovitskii D.I., Naumkin V.N., Khusnulgatin A.I., Molotkov V.I., Lipaev A.M.* // Phys. Rev. E. 2017. V. 96. P. 043204.  
<https://doi.org/10.1103/PhysRevE.96.043204>
14. *Baiko D.A., Yakovlev D.G., De Witt H.E., Slattery W.L.* // Phys. Rev. E. 2000. V. 61. P. 1912.  
<https://doi.org/10.1103/PhysRevE.61.1912>
15. *Chugunov A.I., Baiko D.A.* // Physica A. 2005. V. 352. P. 397.  
<https://doi.org/10.1016/j.physa.2005.01.005>