

СТРУКТУРНЫЙ ПЕРЕХОД В В СИЛЬНОНЕИДЕАЛЬНЫХ КУЛОНОВСКИХ КЛАСТЕРАХ

Жуховицкий Д.И., Перевощиков Е.Е.*

ОИВТ РАН, Москва, Россия

**dmr@ihed.ras.ru*

Методом молекулярной динамики исследованы равновесные состояния кулоновских кластеров, содержащих до $N = 5000$ частиц, при высоких значениях кулоновского параметра неидеальности Γ . Показано, что при числе частиц более 2000 в кулоновских кластерах появляется кристаллизованное ядро с доминирующей структурой hcp, которое плавится при величине Γ , близкой к характерной для бесконечной однокомпонентной плазмы [1]. В целом, большой кластер представляет собой кристаллическое ядро, окруженное сферическими оболочками, число которых не зависит от полного числа частиц, но зависит от параметра неидеальности. Большая величина порога структурного перехода объясняется близостью потенциальных энергий кристаллической структуры и системы вложенных сферических оболочек. Получено выражение для фактора сжимаемости системы

$$Z_c = 1 + \frac{\Gamma}{3}(u_p - 2u_b - 3N^{2/3}),$$

где u_p и u_b – энергия межчастичного взаимодействия на одну частицу и энергия взаимодействия частиц с фоном, соответственно. Фактор сжимаемости частиц, определенный как по вириалу сил, так и по энергии, оказывается близким к нулю в широком диапазоне чисел частиц, что позволяет экстраполировать этот результат к классической однокомпонентной плазме. Предложено объяснение данного результата, основанное на модели ячеек Вигнера–Зейтца.

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

-
1. Жуховицкий Д.И., Перевощиков Е.Е. // ТВТ. 2024. V. 62. No. 4. (в печати).