

На правах рукописи



Николаев Владислав Сергеевич

**Динамические свойства и фазовые переходы  
в неоднородных плазменно-пылевых системах**

1.3.9 – Физика плазмы

**АВТОРЕФЕРАТ**

диссертации на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

Москва – 2022

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Объединенный институт высоких температур Российской академии наук (ОИВТ РАН).

**Научный руководитель:** **Тимофеев Алексей Владимирович**

кандидат физико-математических наук,  
ФГБУН Объединенный институт высоких температур Российской академии наук,  
заместитель директора по научной работе

**Официальные оппоненты:** **Дубинский Андрей Юльевич**

кандидат физико-математических наук,  
ФГБУН Институт космических исследований  
Российской академии наук

**Сухинин Геннадий Иванович**

доктор физико-математических наук,  
ФГБУН Институт теплофизики им. С.С.  
Кутателадзе Сибирского отделения Россий-  
ской академии наук, профессор

**Ведущая организация:** ФГБОУ ВО «Санкт-Петербургский государ-  
ственный университет»

Защита состоится 5 октября 2022 г. в 11 часов на заседании диссертационного совета 24.1.193.01 при ФГБУН Объединенный Институт Высоких Температур РАН, расположенном по адресу: 125412, г. Москва, ул. Ижорская, д.13, стр.2.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке и на сайте ОИВТ РАН  
<https://jiht.ru/>.

Автореферат разослан «\_\_\_\_\_» \_\_\_\_\_ 2022 г.

Ученый секретарь  
диссертационного совета,  
к. ф.-м. н.

Тимофеев А. В.

## Общая характеристика работы

### **Актуальность и степень разработанности темы исследования.**

Актуальность исследования систем заряженных пылевых частиц в плазме заключается в том, что понимание свойств таких систем необходимо для совершенствования технологических процессов (технологий термоядерного синтеза, травления микросхем). Пылевая плазма широко распространена в природе (атмосфере Земли, межпланетной среде). Ее уникальные свойства в лабораторных установках обуславливают возможность проведения аналогий с классическим конденсированным веществом [1–11] и активной материей [12, 13]. Одним из факторов, заметно влияющих на свойства ограниченных в пространстве систем заряженных частиц, является удерживающий внешний конфайнмент [14–22].

В работах Тоцуджи [23–25] и Клумова [26] для квазидвумерной системы из частиц, взаимодействующих по потенциалу Юкавы, продемонстрировано, что влияние конфайнмента приводит к возникновению структурной неоднородности в системе. Этот результат позднее объяснен на основании решения вариационной задачи в работах Хеннинга и др. [27, 28], получено аналитическое выражение для радиального профиля плотности частиц.

Влияние конфайнмента на динамические свойства до сих пор рассмотрено только в работе Тоцуджи [23], где показано, что среднеквадратичное смещение частиц от исходных положений в расплавленной квазидвумерной системе частиц растет со временем существенно быстрее в периферийных областях структуры.

Детальный экспериментальный анализ пространственной неоднородности пылевых структур проведен для ряда условий в квазиодномерных [29] и квазидвумерных [30] системах. Монотонное уменьшение плотности от центра к краю системы подтверждается результатами измерений. Обнаружено различие величины средней кинетической энергии пылевых частиц в центре и на краю структуры [30].

## **Цели и задачи диссертационной работы:**

1. Развитие аналитической теории, описывающей пространственную неоднородность динамических характеристик систем заряженных частиц в параболической электростатической ловушке в квазигармоническом приближении;
2. Анализ пространственного распределения динамических и спектральных характеристик в системе заряженных частиц в конфайнменте при помощи методов численного моделирования в широком диапазоне температур;
3. Разработка локального критерия плавления для количественного анализа процесса неоднородного плавления в системах из конечного числа заряженных частиц в параболическом конфайнменте;
4. Анализ сценариев плавления плазменно-пылевых систем под влиянием их пространственной неоднородности и невзаимности сил, действующих между пылевыми частицами в определенных условиях лабораторного эксперимента;
5. Анализ сценария развития неустойчивости связанных мод в пространственно неоднородном плазменно-пылевом монослое при помощи численных методов решения уравнений движения пылевых частиц.

## **Научная новизна.**

1. При помощи аналитических подходов и численных методов развита теория неоднородности динамических свойств в системах заряженных частиц в параболическом конфайнменте, в том числе в плазменно-пылевых структурах [31–33]. Эта теория дополняет работы по пространственной неоднородности структурных свойств в таких системах [23, 26, 27].
2. Показано, что параметр флуктуации межчастичного расстояния [15, 16, 34–38] может быть адаптирован в локальном приближении в качестве индикатора фазового состояния для систем заряженных частиц в удерживающем конфайнменте. Демонстрируется, что в таких системах данный параметр имеет неоднородный радиальный профиль [39].
3. Проведен анализ сценария развития неустойчивости связанных мод [40–43] в плазменно-пылевом монослое в условиях, характерных для лабораторного

эксперимента. Показано, что критерии для развития неустойчивости также носят локальный характер: она возникает в наиболее плотной области монослоя и затухает в разреженной [39, 44].

4. Описано два режима сосуществования фаз в однослойной системе из заряженных частиц в поле удерживающего конфайнмента. В классической системе частиц, взаимодействующих по парному экранированному кулоновскому потенциалу, в широком диапазоне температур упорядоченное ядро сосуществует с расплавленными оболочками [23, 26]. Под влиянием невзаимности сил, действующих между частицами в характерных условиях плазменно-пылевых экспериментов, реализуется противоположный сценарий сосуществования плотного расплавленного ядра с упорядоченными разреженными оболочками [39, 44].

5. Хорошим показателем научной новизны является ежегодный конкурс на соискание медалей Российской академии наук с премиями для молодых ученых России и для студентов вузов России за лучшие научные работы. Часть из представленных в диссертации результатов была отмечена медалью в области физико-технических проблем энергетики в 2018 году.

**Научная значимость работы** заключается в детальном анализе влияния эффектов конечности размеров и удерживающего конфайнмента на динамические свойства и фазовые превращения в системах заряженных частиц. Важным результатом, имеющим широкую значимость, является развитие локального критерия плавления, позволяющего независимо определять условия плавления областей таких систем в локальном приближении.

**Практическая значимость работы** состоит в применимости полученных результатов к экспериментальным исследованиям плазменно-пылевых систем и других систем заряженных частиц: однокомпонентной и коллоидной плазмы, антивещества, ионов в ловушках. Предлагается подход к рассмотрению таких систем как систем принципиально неоднородных.

**Методология и методы исследования.** Применяются аналитические подходы, основанные на теории динамики кристаллической решетки в квазигар-

моническом приближении. Компьютерное моделирование выполняется в программном пакете LAMMPS и при помощи самостоятельно разработанного кода на ведомственных суперкомпьютерах МФТИ и ОИВТ РАН.

**Положения, выносимые на защиту:**

В диссертации рассматриваются динамические свойства и фазовые переходы в системах заряженных частиц в параболической ловушке с учетом присущей таким системам структурной неоднородности. Обосновывается локальный подход к расчету их характеристик. На защиту выносятся следующие положения:

1. Функциональная связь между локальным значением плотности и амплитудой тепловых колебаний частиц в пространственно неоднородной системе сильно экранированных зарядов в параболическом конфайнменте.

2. Пространственная неоднородность динамических характеристик — амплитуды и характерной частоты тепловых колебаний частиц, параметра Линдемманна — в системе сильно экранированных зарядов в параболическом конфайнменте.

3. Локальный подход к рассмотрению систем сильно экранированных зарядов в параболическом конфайнменте, в том числе локальный критерий плавления таких систем, основанный на расчете параметра флуктуации межчастичного расстояния для выделенной области системы.

4. Режим развития неустойчивости связанных мод в плазменно-пылевом монослое, при котором неустойчивость локализована в центре структуры, не затрагивает внешние оболочки системы и существенно изменяет ее динамические свойства по сравнению с классическим юкавовским монослоем.

5. Два режима стационарного сосуществования областей в упорядоченном и неупорядоченном состоянии в плазменно-пылевом монослое, в том числе режим, в котором плотная расплавленная центральная область сосуществует с разреженной и упорядоченной периферией системы.

## **Степень достоверности и апробация результатов.**

Результаты обоснованы по итогам сравнения полученных аналитических зависимостей, описывающих пространственную неоднородность динамических свойств систем заряженных частиц в параболическом конфайнменте, с результатами компьютерного моделирования и экспериментальными данными, полученными как отечественными, так и зарубежными коллективами. Основные результаты диссертационной работы докладывались и обсуждались на российских и международных конференциях: Российские симпозиумы «Фундаментальные основы атомистического многомасштабного моделирования» (Новый Афон, Абхазия, 2015, 2016, 2018), Научные конференции МФТИ (Москва, Россия, 2014-2021), International Conferences on Equations of State for Matter (Эльбрус, Россия, 2016, 2018, 2022), International Conferences on Interaction of Intense Energy Fluxes with Matter (Эльбрус, Россия, 2017, 2019), Scientific-Coordination Workshop on Non-Ideal Plasma Physics (Москва, Россия, 2016-2019, 2021), International Workshop Complex Systems of Charged Particles and Their Interactions with Electromagnetic Radiation (Москва, Россия, 2016-2019, 2022), 8th International Conference on the Physics of Dusty Plasmas (Прага, Чехия, 2017), International Conference on Plasma Science & Applications (Лакхнау, Индия, 2019), 47th EPS Conference on Plasma Physics (онлайн, 2021), 9th International Conference on the Physics of Dusty Plasmas (Москва, 2022).

Представленные доклады по тематике диссертации получили награду Best Student Poster Award на 8th International Conference on the Physics of Dusty Plasmas (Прага, Чехия, 2017), награду Young Achiever's Award на International Conference on Plasma Science & Applications (Лакхнау, Индия, 2019). Часть результатов диссертации удостоена медали Российской академии наук для студентов вузов в области физико-технических энергетик в 2018 году. Результаты представлены на конкурсах научных работ ОИВТ РАН (2 место в 2019 году, 3 место в 2020 году).

**Публикации.** Материалы диссертации опубликованы в 43 печатных работах, из них 10 статей в рецензируемых журналах и 33 тезиса докладов.

**Личный вклад автора.** Все представленные в диссертации результаты получены лично автором. Постановка задач, вошедших в диссертационную работу, выполнена под руководством А. В. Тимофеева. Выводы и положения, выносимые на защиту, сформулированы лично автором.

**Структура диссертации** состоит из введения, пяти глав, заключения, списка сокращений и библиографии. **Объем диссертации** 115 страниц включая 30 рисунков. Библиография включает 125 наименований.

## Содержание работы

**Во Введении** обоснована актуальность диссертационной работы, сформулирована цель, аргументированы научная новизна и практическая значимость исследований, представлены выносимые на защиту научные положения.

**В первой главе** представлена общая информация о пылевой плазме, необходимая для понимания содержания диссертации, приведен обзор истории исследования структурных и динамических свойств систем заряженных частиц в параболическом конфайнменте. Обсуждаются, в том числе, критерии и механизмы плавления пылевых структур в плазме. **В разделах 1.4 и 1.5** приводятся данные теоретических и экспериментальных работ, подтверждающие принципиальную структурную неоднородность рассматриваемых систем под влиянием конфайнмента. В конце главы приводится краткий литературный обзор методов численного решения уравнений движения частиц, аналогичных методу классической молекулярной динамики.

**Во второй главе** формулируется аналитическая теория пространственной неоднородности динамических свойств в системах заряженных частиц в удерживающей электростатической ловушке. Рассматриваются системы с различной конфигурацией частиц: цепочечные, однослойные, трехмерные. Обозна-

чены границы применимости теории, обусловленные использованием квазигармонического приближения при описании тепловых колебаний частиц и приближения сильной экранировки потенциала взаимодействия.

В разделе 2.1 описана модель взаимодействия частиц, в рамках которой развивается аналитическая теория. Предполагается, что частицы взаимодействуют по экранированному кулоновскому потенциалу

$$V(r) = \frac{Q^2}{\Delta} \exp(-\kappa\Delta) \quad (1)$$

в поле электростатической параболической ловушки

$$U_{trap} = \frac{1}{2}\alpha Qr^2, \quad (2)$$

где  $Q$  — заряд частицы, полагаемый равным и постоянным для всех частиц,  $\kappa$  — постоянная экранирования,  $\Delta$  — расстояние между частицами,  $\alpha$  — параметр ловушки,  $r$  — расстояние до ее центра.

Далее приведен вывод формул для радиальных профилей амплитуды тепловых колебаний частиц  $\langle u^2 \rangle$ , параметров Линдемманна  $\delta$  и неидеальности  $\Gamma^*$  в системе сильно экранированных зарядов в параболическом конфайнменте. В предположении, что характерная частота колебаний частиц в выделенной области структуры близка к локальному значению эйнштейновской частоты  $\omega_E$  [45, 46], выведены следующие соотношения:

$$\langle u^2(r) \rangle \approx \frac{3kT(r)}{m\omega_E^2(r)} = A^2 T(r) \Delta_{local}(r) \exp(\kappa\Delta_{local}(r)), \quad (3)$$

$$\delta(r) = \frac{\sqrt{\langle u^2 \rangle(r)}}{\Delta_{local}(r)} = A \sqrt{\frac{T(r) \exp(\kappa\Delta_{local}(r))}{\Delta_{local}(r)}}, \quad (4)$$

$$\Gamma^*(r) = \frac{Q^2}{\Delta_{local}(r) kT(r)} \left( 1 + \lambda(r) + \frac{\lambda^2(r)}{2} \right) \exp(-\lambda(r)), \quad (5)$$

где  $A$  — коэффициент для рассматриваемой структуры, не зависящий от ра-

диального расстояния;  $T$  — локальное значение средней кинетической энергии частиц,  $\Delta_{local}$  — локальное значение межчастичного расстояния,  $\lambda(r) = \kappa \Delta_{local}(r)$ .

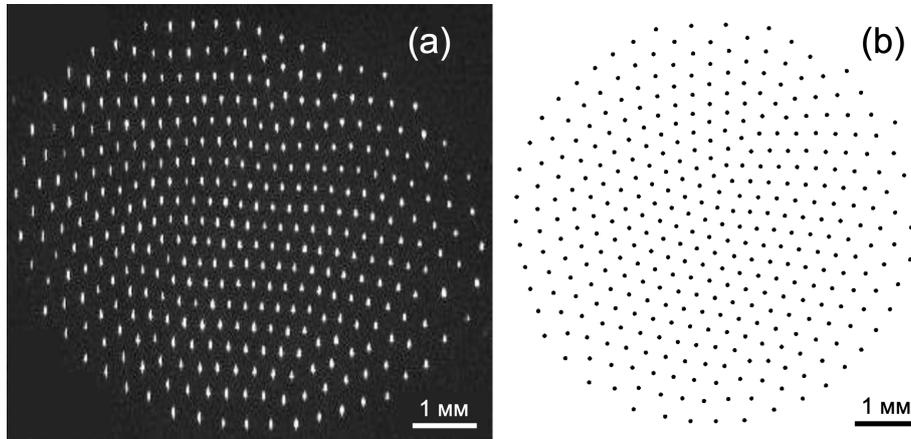


Рис. 1: Структура из 368 частиц, (а) наблюдавшаяся в эксперименте [30] в приэлектродном слое тлеющего разряда постоянного тока; (б) полученная в данной работе при помощи численного моделирования при значениях параметров  $Q = 3300 e$ ,  $\kappa = 136.0 \text{ см}^{-1}$ ,  $\alpha = 0.0005 \text{ ед. СГСЭ}$ . Данные значения получены с использованием формул 3, 4, 5.

В разделах 2.2 и 2.3 обсуждается возможность применения разработанной теории к анализу экспериментальных данных для оценки недостающих параметров системы, в том числе заряда частиц и константы экранировки потенциала взаимодействия. Проводится сравнение предсказаний предложенной аналитической модели с данными эксперимента [30]. В эксперименте исследуется квазидвумерная система из 368 пылевых частиц околOMICРОННОГО размера в приэлектродном слое тлеющего разряда. Авторами показано, что в системе присутствует радиальный градиент межчастичного расстояния: в центре оно составляет 250 мкм, на периферии — 300 мкм. Оценен радиальный профиль амплитуд тепловых колебаний частиц. По форме профиля в данной диссертации восстановлены эффективные значения заряда пылевых частиц и константы экранировки в системе:  $Q = 3000e \pm 100 e$ , где  $e$  — элементарный заряд;  $\kappa = 136.0 \pm 20.0 \text{ см}^{-1}$ . Компьютерное моделирование структуры из 368 частиц с данными значениями  $Q$  и  $\kappa$  методом численного решения уравнений движения пылевых частиц позволяет получить систему с той же конфигурацией частиц (см. Рис. 1) и близкими структурными свойствами (см. Рис. 2).

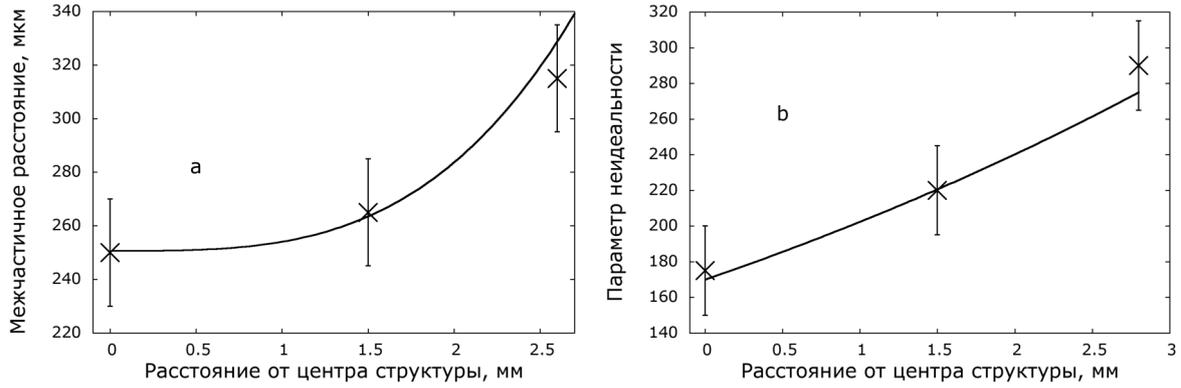


Рис. 2: Сравнение радиального профиля (а) межчастичного расстояния и (б) параметра неидеальности в экспериментальной структуре [30] и в структуре, полученной в ходе численного моделирования в данной работе при параметрах  $Q = 3000 e$ ,  $\kappa = 136.0 \text{ см}^{-1}$ ,  $\alpha = 0.004$  ед. СГСЭ. На обоих рисунках крестиками отмечены экспериментальные точки, сплошными линиями – зависимости, построенные по модельной структуре.

В третьей главе описаны подходы к рассмотрению систем заряженных частиц в удерживающем конфайнменте при помощи методов численного моделирования [47, 48]. Целью применения численных методов является, с одной стороны, расширение диапазона температур, в котором рассматриваются динамические свойства исследуемых систем по сравнению с квазигармоническим приближением аналитической теории. С другой стороны, методы компьютерного моделирования, аналогичные методу классической молекулярной динамики, позволяют учесть ряд эффектов, характерных для пылевой плазмы в условиях лабораторного эксперимента.

В разделе 3.1 обсуждаются три модели взаимодействия заряженных частиц, используемые при численном моделировании в данной работе. Первая модель сводится к использованию классического экранированного кулоновского потенциала и применима к широкому классу систем заряженных частиц [14–16]. Вторая модель используется для частного случая описания свойств плазменно-пылевого монослоя в тлеющем разряде и опирается на модель т. н. “точечного ионного фокуса” [7, 41, 42, 49–51]. В рамках третьего подхода для расчета сил, действующих между пылевыми частицами, используется распределение потенциала вокруг частицы, рассчитанное в сеточной форме из прямого моделирования кинетики ионов плазмы в присутствии пылевой частицы [52]. Такой под-

ход позволяет подробно исследовать динамические свойства, режим развития неустойчивостей и плавления в плазменно-пылевом монослое без упрощающих предположений модели “точечного ионного фокуса”.

При рассмотрении плазменно-пылевых систем в уравнениях движения пылевых частиц дополнительно учитываются ланжевеновские слагаемые, моделирующие взаимодействие частиц с окружающим разрядным газом [6, 53, 54]:

$$F_{Lang} = -m\gamma\mathbf{v}_i + \mathbf{L}_i, \quad (6)$$

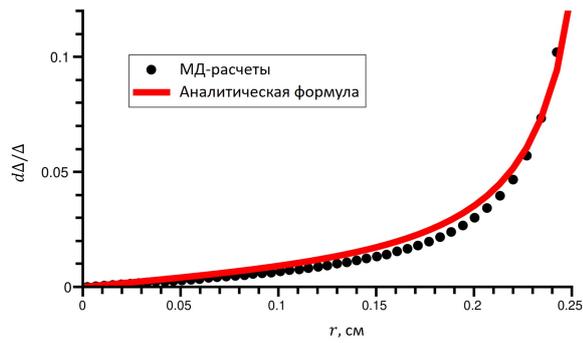
где  $m$  — масса частицы,  $\mathbf{v}_i$  — вектор ее скорости,  $\gamma$  — коэффициент вязкого трения пылевых частиц в нейтральном газе;  $\mathbf{L}_i$  — случайная сила, имеющая нормальное распределение с дисперсией  $2m\gamma kT/\Delta t$ , где  $\Delta t$  — шаг интегрирования уравнений движения. Расчет коэффициента  $\gamma$  для условий конкретного эксперимента делается в соответствии с приближенной формулой [2]:

$$\gamma = \frac{8\sqrt{2\pi}}{3} \frac{a^2 P_n}{v_n m}, \quad (7)$$

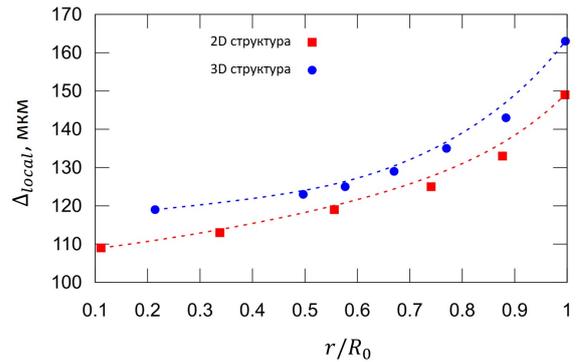
где  $a$  — радиус пылевой частицы,  $P_n$  — давление нейтрального газа,  $v_n$  — тепловая скорость нейтральных атомов разрядного газа.

**В разделах 3.2 и 3.3** обсуждается методика вывода исследуемых модельных систем заряженных частиц на равновесие и расчета необходимых свойств. Для рассмотрения систем в локальном приближении интересующие характеристики, такие как межчастичное расстояние, амплитуда и спектр тепловых колебаний, рассчитываются для каждой отдельной частицы, а затем усредняются по выделенной подсистеме.

**В четвертой главе** приведены результаты моделирования систем заряженных частиц, взаимодействующих по экранированному кулоновскому потенциалу в параболическом конфайнменте. Методика моделирования и расчета динамических свойств основана на численном решении уравнений движения



(a)



(б)

Рис. 3: 3а: Черными точками показаны результаты вычисления величины  $d\Delta/\Delta$  в МД расчете цепочечной системы при параметрах  $\kappa = 300.0 \text{ см}^{-1}$ ,  $Q = 3000 e$ ,  $\alpha = 0.01 \text{ ед. СГ-СЭ}$ ,  $N^{1D} = 100$ . Красная линия является аппроксимацией этой зависимости в соответствии с формулой 8; 3б: Зависимость локального межчастичного расстояния, рассчитанного по положению первого пика парной корреляционной функции, от нормированного на радиус структуры  $R_0$  радиального расстояния. Показаны результаты для квазидвумерной и трехмерной систем при тех же значениях параметров  $Q$ ,  $\kappa$ ,  $\alpha$ , что и в квазиодномерном случае.

частиц, аналогичном методу классической молекулярной динамики.

В разделе 4.1 продемонстрирована структурная неоднородность квазиодномерных, квазидвумерных и трехмерных систем. Для квазиодномерной цепочечной структуры получена аналитическая формула, описывающая относительное приращение межчастичного расстояния между частицей и ее двумя ближайшими соседями  $d\Delta/\Delta$  в зависимости от радиального расстояния  $r$ , на котором находится частица:

$$\frac{d\Delta}{\Delta} = \frac{\alpha r}{Q \exp(-\kappa\Delta)(\Delta^{-2} + (\Delta^{-1} + \kappa)^2)}. \quad (8)$$

Как показано на Рис. 3а, полученное выражение с хорошей точностью описывает результаты моделирования цепочечной системы в рамках приближения сильной экранировки потенциала взаимодействия и параболического профиля удерживающей ловушки.

Структурная неоднородность квазидвумерной и трехмерной систем при тех же значениях  $Q$ ,  $\kappa$ ,  $\alpha$ , что и в квазиодномерном случае, отражена на Рис. 3б. Число частиц в квазидвумерной системе равно 200, в трехмерной — 2800. Зна-

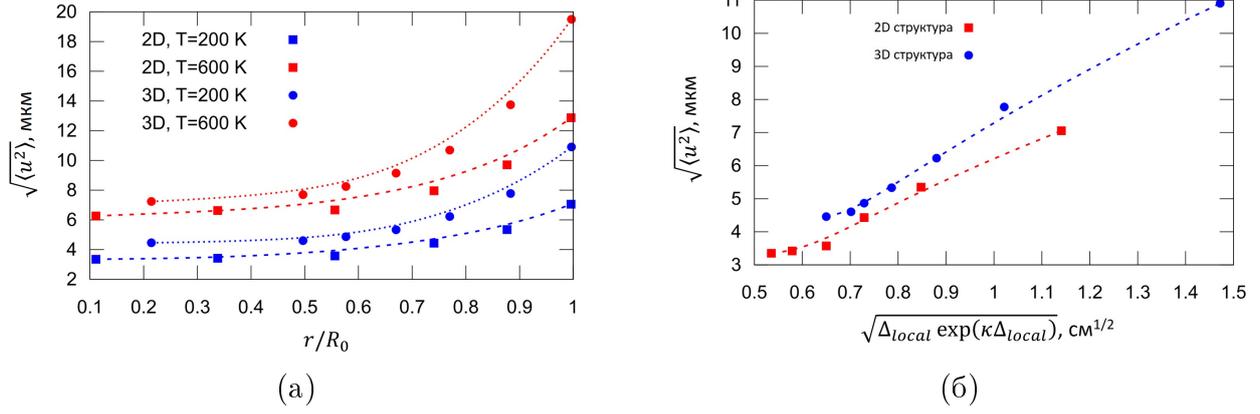
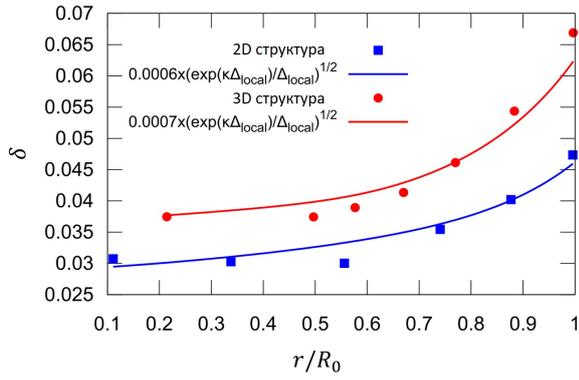


Рис. 4: 4а: Радиальный профиль амплитуды тепловых колебаний при температурах 200 и 600 К; 4б: зависимость амплитуды тепловых колебаний от величины  $(\Delta_{local}(r) \exp(\kappa \Delta_{local}(r)))^{1/2}$  в квазидвумерной и трехмерной системах при параметрах  $Q = 3000 e$ ,  $\kappa = 300.0 \text{ см}^{-1}$ ,  $\alpha = 0.01 \text{ ед. СГСЭ}$ ,  $T = 200 \text{ К}$ .

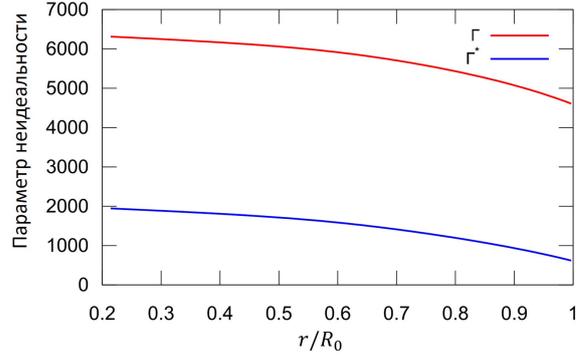
чение локальной величины межчастичного расстояния  $\Delta_{local}$  на графике определяется из первого пика парной корреляционной функции, рассчитанной для каждой отдельной подсистемы — концентрического слоя. Как можно видеть, межчастичное расстояние монотонно увеличивается от центра к периферии системы. Профиль хорошо согласуется с аналитическим выражением, предложенным в работах [23, 26, 27].

В разделе 4.2 анализируются динамические свойства рассматриваемых квазиодномерной, квазидвумерной и трехмерной систем. В разделе 4.2.1 показано, что величина амплитуды тепловых колебаний частиц в квазиодномерной цепочке распределена по системе принципиально неоднородно и монотонно возрастает к краю, в отличие от однородной системы в периодических граничных условиях при тех же значениях  $Q, \kappa, T$ .

В разделе 4.2.2 проведено рассмотрение динамических свойств квазидвумерной и трехмерной систем при тех же значениях  $Q, \kappa, \alpha$ , что и в квазиодномерном случае. На Рис. 4а приведены радиальные профили амплитуды тепловых колебаний частиц в обеих системах при двух значениях температур 200 и 600 К. В данном случае температура соответствует средней энергии движения частиц. На Рис. 4б показана зависимость амплитуды тепловых ко-



(a)



(б)

Рис. 5: **5a**: Радиальный профиль локального значения параметра Линдемманна в квазидвумерной и трехмерной системах при параметрах  $Q = 3000 e$ ,  $\kappa = 300.0 \text{ см}^{-1}$ ,  $\alpha = 0.01 \text{ ед. СГСЭ}$ . Точки обозначают результаты МД расчетов, линии соответствуют аппроксимациям функцией  $A\sqrt{T}(\exp(\kappa\Delta_{\text{local}}(r))/\Delta_{\text{local}}(r))^{1/2}$ ; **5б**: Радиальные профили двух форм параметра неидеальности  $\Gamma$  и  $\Gamma^*$  в трехмерной структуре из 2800 частиц.

лебаний от величины  $[\Delta_{\text{local}}(r) \exp(\kappa\Delta_{\text{local}}(r))]^{1/2}$ . Как следует из рисунков, пространственное распределение амплитуды тепловых колебаний носит принципиально неоднородный характер. Линейная зависимость  $\sqrt{\langle u^2 \rangle}$  от параметра  $[\Delta_{\text{local}}(r) \exp(\kappa\Delta_{\text{local}}(r))]^{1/2}$  подтверждает применимость формулы 3 к квазидвумерным и трехмерным системам. Также подтверждением применимости выведенных в данной работе формул 3 и 4 служит зависимость параметра Линдемманна  $\delta$  от величины  $[\exp(\kappa\Delta_{\text{local}}(r))/\Delta_{\text{local}}(r)]^{1/2}$ , показанная на Рис. 5а.

Помимо параметра Линдемманна, дополнительным индикатором неоднородного пространственного распределения степени неидеальности рассматриваемых систем служит параметр неидеальности, радиальный профиль которого показан на Рис. 5б. Рассчитываются две формы параметра неидеальности: классическая для кулоновских систем  $\Gamma$  и модифицированная для систем экранированных зарядов [55]:

$$\Gamma^* = \Gamma(1 + \kappa\Delta + (\kappa\Delta)^2/2) \exp(-\kappa\Delta). \quad (9)$$

На Рис. 6а показаны радиальные профили угловой и радиальной составляющих амплитуды тепловых колебаний частиц. Как видно, угловая компонента,

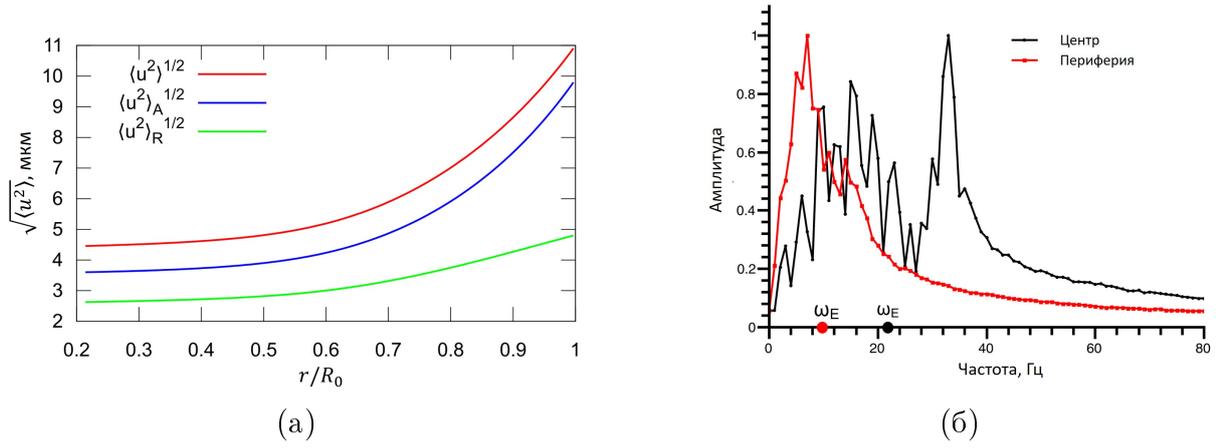


Рис. 6: 6а: Полная, радиальная и угловая компоненты среднеквадратичного смещения частиц от их равновесных положений в зависимости от радиального расстояния до центра ловушки в трехмерной системе; 6б: Спектры тепловых колебаний частиц в центральной и периферийной областях трехмерной системы, полученные из Фурье-преобразования автокорреляционных функций скорости для соответствующих подсистем. Большие точки обозначают эйнштейновские частоты, рассчитанные отдельно для каждой подсистемы.

соответствующая внутриоболочечному движению и относительному вращению оболочек, имеет более высокое значение, чем радиальная. С ростом расстояния до центра системы обе компоненты монотонно увеличиваются.

Особый интерес представляет анализ спектров колебаний частиц на разных оболочках системы. Сравнение спектров колебаний частиц в центральной и периферийной областях трехмерной структуры показано на Рис. 6б. Спектры получены при помощи Фурье-преобразования автокорреляционной функции скорости, рассчитанной отдельно для каждой области системы. Можно видеть, что на периферии структуры спектр заметно смещается в низкочастотную область. Эйнштейновская частота, характеризующая усредненную частоту фононов в системе, также уменьшается с ростом радиального расстояния. Ее величина дополнительно изображена на графике для центральной и периферийной подсистем.

**В пятой главе** проведен анализ механизма плавления и пространственного распределения параметра неидеальности в неоднородной квазидвумерной системе заряженных частиц — монослое.

В качестве локального индикатора степени упорядоченности монослоя пред-

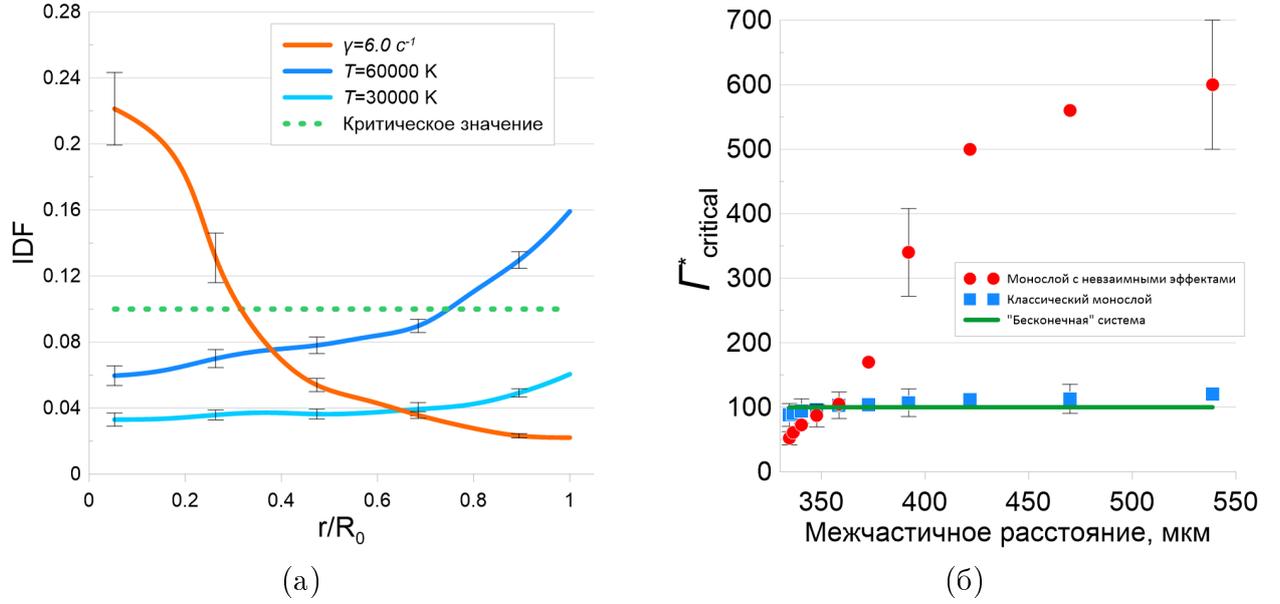


Рис. 7: 7a: Радиальные профили параметра флуктуации межчастичного расстояния  $IDF$  при различных степенях “аномального разогрева” монослоя. Классическая система без разогрева показана при двух значениях температур: 30000 К и 60000 К. Разогретая система с ионным фокусом показана при значении коэффициента трения  $\gamma = 6.0 \text{ с}^{-1}$ ; 7б: Зависимость критического значения параметра неидеальности от межчастичного расстояния в “классическом” монослое, монослое с невязимными эффектами и “бесконечной” юкавовской системе.

ложено использовать параметр, изначально сформулированный для наноразмерных кластеров — величину флуктуации межчастичного расстояния [15, 16, 34–38]:

$$IDF = \frac{2}{N_c(N_c - 1)} \sum_{1 \leq i < j}^N \sqrt{\frac{\langle \Delta_{ij}^2 \rangle}{\langle \Delta_{ij} \rangle^2} - 1}, \quad (10)$$

где  $\Delta_{ij}$  — расстояние между частицами  $i$  и  $j$ ;  $N_c$  — число частиц, включенных в расчет параметра. Параметр рассчитывается отдельно для каждой ячейки структуры, включающей в себя 6 частиц в идеальном случае и 5, 7 частиц в присутствии дефекта. Радиальные профили  $IDF$  в системе из классических экранированных зарядов и в системе с включением модели “точечного ионного фокуса”, соответствующей условиям плазменно-пылевых экспериментов, показаны на Рис. 7a. Как можно видеть, распределение параметра  $IDF$  по структуре для обеих моделей взаимодействия носит принципиально неоднородный характер. При достижении  $IDF$  значения 0.1 в выделенной подсистеме эта подсистема плавится. Оценки критического значения параметра неидеальности

$\Gamma_{\text{critical}}$  для различных подсистем монослоя при помощи параметра  $IDF$  показаны на Рис. 76. Отличие величины  $\Gamma_{\text{critical}}$  для подсистем в классической системе зарядов от “бесконечной” юкавовской системы не превышает 20%, в системе с невзаимными эффектами оно более существенно.

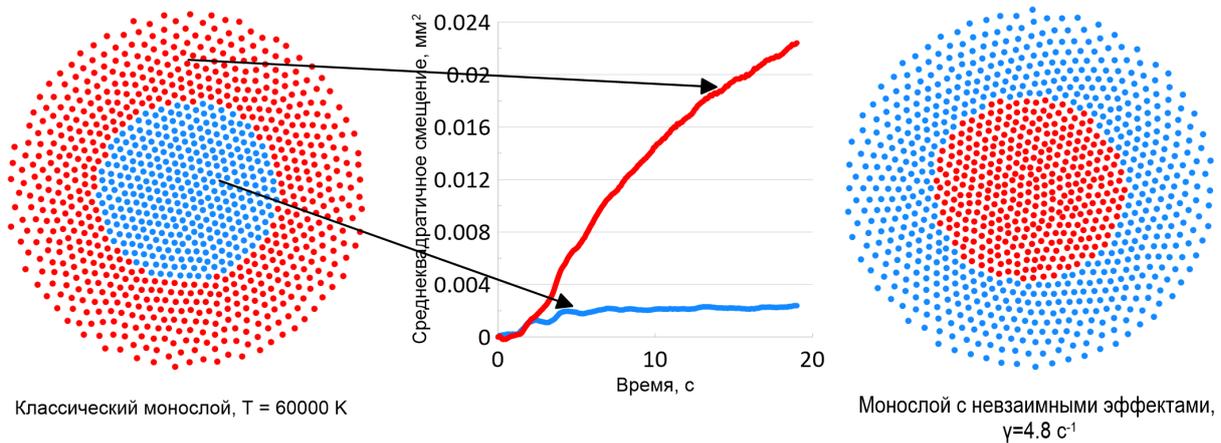


Рис. 8: Сценария сосуществования фаз в “классическом” монослое и в монослое с невзаимными эффектами. Голубым цветом обозначена упорядоченная подсистема, красным — расплавленная. На графике показана временная зависимость среднеквадратичного смещения частиц в “классическом” монослое от их начальных положений при температуре 60000 K. Голубой цвет на графике соответствует центральной области, красный — периферийной в “классической” системе. В “классическом” монослое наблюдается сосуществование упорядоченного ядра с расплавленными оболочками, в монослое с невзаимными эффектами — расплавленного ядра с упорядоченными оболочками.

Вследствие неоднородности радиального профиля  $IDF$  в монослое может наблюдаться режим сосуществования упорядоченного и неупорядоченного состояний в широком диапазоне параметров системы. Как показано на Рис. 8, в классической системе зарядов плотное ядро сосуществует с расплавленными оболочками. В монослое с невзаимными эффектами реализуется необычный обратный эффект: плотное расплавленное ядро сосуществует с упорядоченными разреженными оболочками в широком диапазоне значений  $\gamma$ .

Для объяснения этого эффекта проведено рассмотрение квазидвумерной системы заряженных пылевых частиц с прямым расчетом распределения электростатического потенциала вокруг частицы из моделирования кинетики ионов плазмы. Показано, что под действием невзаимных эффектов в центральной области системы при определенном значении коэффициента трения  $\gamma$  возникает

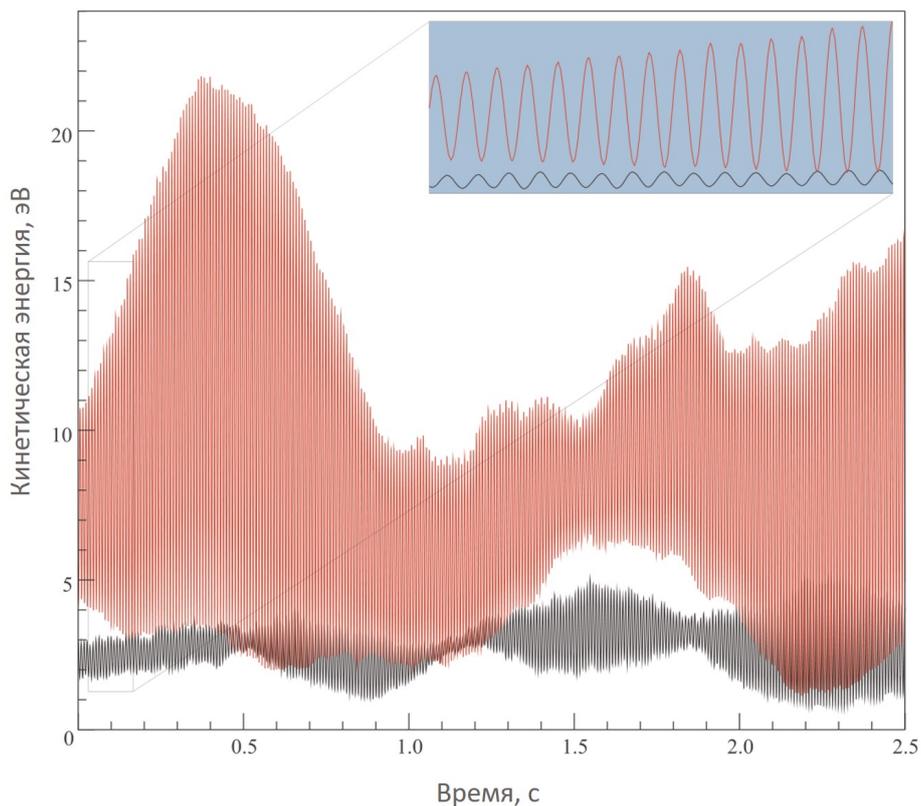


Рис. 9: Временная зависимость кинетической энергии частиц, находящихся в центральной области монослоя. Красным цветом обозначена энергия внеплоскостного движения, черным цветом — внутриплоскостного. В голубую рамку помещена кривая для более короткого временного интервала для наглядной демонстрации колебательного характера зависимости.

неустойчивость связанных мод. Вследствие структурной неоднородности системы она остается локализованной в центральной области. За счет этого энергия движения частиц в центральной области существенно возрастает, и при дальнейшем уменьшении  $\gamma$  центральная область плавится. Менее плотные оболочки системы могут при этом оставаться упорядоченными, если теплообмен с центральной областью недостаточно интенсивен для их плавления. Колебательный характер изменения кинетической энергии частиц в центральной области при возникновении неустойчивости показан на Рис. 9.

Предложенная модель позволяет на количественном уровне объяснить неоднородный радиальный профиль кинетической энергии пылевых частиц в эксперименте [30].

## Основные результаты и выводы работы

Диссертация посвящена динамическим свойствам и фазовым переходам в системах заряженных частиц в удерживающей ловушке. Продемонстрирована принципиальная неоднородность динамических свойств и сценария плавления в таких системах. Предложен и обоснован локальный подход к анализу их свойств. В итоге получены следующие результаты:

1. В квазигармоническом приближении развита теория пространственного распределения динамических свойств в системах из конечного числа заряженных частиц в удерживающей параболической ловушке. Показано, что под действием структурной неоднородности указанные характеристики имеют принципиально неоднородный радиальный профиль.

2. По результатам компьютерного моделирования показана пространственная неоднородность динамических характеристик в системах из большого числа (порядка сотни и более) заряженных частиц в поле удерживающей электростатической ловушки в широком диапазоне температур. Сделан вывод о необходимости рассмотрения таких систем в локальном приближении.

3. Предложен локальный критерий плавления структур из конечного числа частиц, основанный на расчете параметра флуктуации межчастичного расстояния для выделенной области системы. Продемонстрирована неоднородность радиального профиля этого параметра для рассматриваемых систем зарядов в конфайнменте.

4. Показано, что под действием невзаимных эффектов динамические свойства плазменно-пылевого монослоя могут существенно отличаться от свойств классической юкавовской системы в параболическом конфайнменте. При определенных параметрах плазмы в центральной области монослоя без плавления системы может развиваться неустойчивость связанных мод, не затрагивающая внешние оболочки структуры.

5. Показана возможность наблюдения двух режимов стационарного сосу-

ществования областей в упорядоченном и неупорядоченном состоянии в плазменно-пылевых структурах, в том числе режима, в котором более плотная расплавленная центральная область плазменно-пылевого монослоя сосуществует с разреженной и упорядоченной периферией системы.

## Публикации автора по теме диссертации

V. S. Nikolaev, A. V. Timofeev. Screening length in dusty plasma crystals // J. Phys.: Conf. Ser. 2016. Vol. 774, no. 1. P. 012172.

И. С. Самойлов и др. Пылевая плазма в тлеющем разряде гелия в диапазоне температур 5–300 К // ЖЭТФ. 2017. Т. 151, № 3. С. 582-591.

V. S. Nikolaev, A. V. Timofeev. Dependence of average inter-particle distance upon the temperature of neutrals in dusty plasma crystals // J. Phys.: Conf. Ser. 2018. Vol. 946, no. 1. P. 012146.

А. В. Тимофеев, В. С. Николаев. Влияние параметров тлеющего разряда на среднее межчастичное расстояние в плазменно-пылевых структурах в диапазоне температур от криогенных до комнатной // ЖЭТФ. 2019. Т. 155, № 2. С. 356-370.

V. S. Nikolaev, A. V. Timofeev. Inhomogeneity of a harmonically confined Yukawa system // Phys. Plasmas. 2019. Vol. 26, no. 7. P. 073701.

V. S. Nikolaev, A. V. Timofeev. Influence of ion shadowing effect on average inter-particle distance in dusty plasma crystals // J. Phys.: Conf. Ser. 2019. Vol. 1147, no. 1. P. 012109.

V. S. Nikolaev, A. V. Timofeev. Inhomogeneity of a one-dimensional Yukawa system in a trap // J. Phys.: Conf. Ser. 2020. Vol. 1556, no. 1. P. 012077.

А. В. Тимофеев, В. С. Николаев, В. П. Семенов. Неоднородность структурных и динамических характеристик пылевой плазмы в газовом разряде // ЖЭТФ. 2020. Т. 157, № 1. С. 180-188.

V. S. Nikolaev, A. V. Timofeev. Nonhomogeneity of phase state in a dusty plasma monolayer with nonreciprocal particle interactions // Phys. Plasmas. 2021. Vol. 28, no. 3. P. 033704.

Д. А. Колотинский, В. С. Николаев, А. В. Тимофеев. Влияние структурной неоднородности и невзаимных эффектов во взаимодействии макрочастиц на динамические свойства плазменно-пылевого монослоя // Письма в ЖЭТФ. 2021. Т. 113, № 9. С. 514-522.

## Список литературы

1. Попель С. И. Лекции по физике пылевой плазмы. МФТИ, 2012.
2. Цытович В. Н. // УФН. 1997. Т. 167, № 1. С. 57–99.
3. Фортов В. Е., Храпак А. Г., Храпак С. А. и др. // УФН. 2004. Т. 174, № 5. С. 495–544.
4. Болтнев Р., Васильев М., Кононов Е., Петров О. // ЖЭТФ. 2018. Т. 153, № 4. С. 679–684.
5. Antipov S., Asinovskii É., Kirillin A. et al. // ЖЭТФ. 2008. Vol. 106, no. 4. P. 830–837.
6. Klumov B. A. // Phys.-Usp. 2010. Vol. 53, no. 10. P. 1053.
7. Ivlev A., Nosenko V., Röcker T. // Contrib. Plasma Phys. 2015. Vol. 55, no. 1. P. 35–57.
8. Самойлов И., Баев В., Тимофеев А. et al. // ЖЭТФ. 2017. Vol. 151, no. 3. P. 582–591.
9. Nikolaev V., Timofeev A. // J. Phys.: Conf. Ser. Vol. 774. 2016. P. 012172.
10. Nikolaev V., Timofeev A. // J. Phys.: Conf. Ser. Vol. 946. 2018. P. 012146.
11. Nikolaev V., Timofeev A. // J. Phys.: Conf. Ser. Vol. 1147. 2019. P. 012109.
12. Arkar K., Vasiliev M. M., Petrov O. F. et al. // Molecules. 2021. Vol. 26, no. 3. P. 561.
13. Nosenko V., Luoni F., Kaouk A. et al. // Phys. Rev. Res. 2020. Vol. 2, no. 3. P. 033226.
14. Block D., Kroll M., Arp O. et al. // Plasma Phys. Controlled Fusion. 2007. Vol. 49, no. 12B. P. B109.
15. Baumgartner H., Kählert H., Golobnychiy V. et al. // Contrib. Plasma Phys. 2007. Vol. 47, no. 4-5. P. 281–290.
16. Baumgartner H., Block D., Bonitz M. // Contrib. Plasma Phys. 2009. Vol. 49, no. 4-5. P. 281–302.
17. Schiffer J. // Phys. Rev. Lett. 2002. Vol. 88, no. 20. P. 205003.
18. Schweigert V. A., Peeters F. M. // Phys. Rev. B. 1995. Vol. 51, no. 12. P. 7700.
19. Schweigert V., Peeters F. // J. Phys.: Condens. Matter. 1998. Vol. 10, no. 11. P. 2417.
20. Melzer A. // Phys. Rev. E. 2003. Vol. 67, no. 1. P. 016411.
21. Kong M., Partoens B., Peeters F. // New J. Phys. 2003. Vol. 5, no. 1. P. 23.
22. Тимофеев А., Николаев В. // ЖЭТФ. 2019. Vol. 155, no. 2. P. 356–370.
23. Totsuji H., Totsuji C., Tsuruta K. // Phys. Rev. E. 2001. Vol. 64, no. 6. P. 066402.
24. Totsuji H. // Phys. Plasmas. 2001. Vol. 8, no. 5. P. 1856–1862.
25. Totsuji H. // J. Phys. A: Math. Gen. 2006. Vol. 39, no. 17. P. 4493.
26. Klumov B. A. // ЖЭТФ Letters. 2019. Vol. 110, no. 11. P. 715–721.
27. Henning C., Baumgartner H., Piel A. et al. // Phys. Rev. E. 2006. Vol. 74, no. 5. P. 056403.
28. Henning C., Ludwig P., Filinov A. et al. // Phys. Rev. E. 2007. Vol. 76, no. 3. P. 036404.
29. Liu B., Goree J. // Phys. Rev. E. 2005. Vol. 71, no. 4. P. 046410.
30. Hariprasad M., Bandyopadhyay P., Arora G., Sen A. // Phys. Plasmas. 2018. Vol. 25, no. 12.

P. 123704.

31. Nikolaev V., Timofeev A. // *Phys. Plasmas*. 2019. Vol. 26, no. 7. P. 073701.
32. Тимофеев А., Николаев В., Семенов В. // *ЖЭТФ*. 2020. Vol. 157, no. 1. P. 180–188.
33. Nikolaev V., Timofeev A. // *J. Phys.: Conf. Ser.* Vol. 1556. 2020. P. 012077.
34. Berry R., Beck T., Davis H., Jellinek J. // *Adv. Chem. Phys.* 1988.
35. Zhou Y., Karplus M., Ball K. D., Berry R. S. // *J. Chem. Phys.* 2002. Vol. 116, no. 5. P. 2323–2329.
36. Bonitz M., Ludwig P., Baumgartner H. et al. // *Phys. Plasmas*. 2008. Vol. 15, no. 5. P. 4717.
37. Böning J., Filinov A., Ludwig P. et al. // *Phys. Rev. Lett.* 2008. Vol. 100, no. 11. P. 113401.
38. Melzer A., Schella A., Miksch T. et al. // *Contrib. Plasma Phys.* 2012. Vol. 52, no. 10. P. 795–803.
39. Nikolaev V., Timofeev A. // *Phys. Plasmas*. 2021. Vol. 28, no. 3. P. 033704.
40. Ivlev A., Morfill G. // *Phys. Rev. E*. 2000. Vol. 63, no. 1. P. 016409.
41. Zhdanov S., Ivlev A., Morfill G. // *Phys. Plasmas*. 2009. Vol. 16, no. 8. P. 083706.
42. Couëdel L., Zhdanov S., Ivlev A. et al. // *Phys. Plasmas*. 2011. Vol. 18, no. 8. P. 083707.
43. Кёдель Л., Носенко В. М., Жданов С. и др. // *УФН*. 2019. Т. 189, № 10. С. 1070–1083.
44. Колотинский Д. А., Николаев В. С., Тимофеев А. В. // *Письма в ЖЭТФ*. 2021. Т. 113, № 8. С. 514–522.
45. Robbins M. O., Kremer K., Grest G. S. // *J. Chem. Phys.* 1988. Vol. 88, no. 5. P. 3286–3312.
46. Kremer K., Robbins M. O., Grest G. S. // *Phys. Rev. Lett.* 1986. Vol. 57, no. 21. P. 2694.
47. Норман Г. Э., Стегайлов В. В. // *Мат. Мод.* 2012. Т. 24, № 6. С. 3–44.
48. Frenkel D., Smit B. *Understanding Molecular Simulation: From Algorithms to Applications*. Second edition. San Diego: Academic Press, 2002. Vol. 1 of Computational Science Series.
49. Röcker T., Couëdel L., Zhdanov S. K. et al. // *EPL (Europhysics Letters)*. 2014. Vol. 106, no. 4. P. 45001.
50. Kryuchkov N. P., Yakovlev E. V., Gorbunov E. A. et al. // *Phys. Rev. Lett.* 2018. Vol. 121, no. 7. P. 075003.
51. Zampetaki A., Huang H., Du C.-R. et al. // *Phys. Rev. E*. 2020. Vol. 102, no. 4. P. 043204.
52. Hutchinson I. // *Phys. Plasmas*. 2011. Vol. 18, no. 3. P. 032111.
53. Norman G., Stegailov V., Timofeev A. // *Contrib. Plasma Phys.* 2010. Vol. 50, no. 1. P. 104–108.
54. Norman G., Timofeev A. // *Phys. Rev. E*. 2011. Vol. 84, no. 5. P. 056401.
55. Vaulina O., Koss X. // *Phys. Rev. E*. 2015. Vol. 92, no. 4. P. 042155.

Николаев Владислав Сергеевич

## АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук на тему:  
Динамические свойства и фазовые переходы  
в неоднородных плазменно-пылевых системах