

УДК 533.95

МАЛЫЕ ТРЕХМЕРНЫЕ ПЫЛЕВЫЕ КЛАСТЕРЫ

Н. Г. Гусейн-заде, Д. Н. Клочков

В данной работе исследуются стационарные устойчивые трехмерные конфигурации частиц в параболической сферически-симметричной потенциальной яме, взаимодействие которых друг с другом описывается потенциалом Юкавы. Рассматриваются малые кластеры, в которых число частиц варьируется от $N = 4$ и до $N = 20$ включительно. В зависимости от коэффициента экранировки k проведена классификация равновесных конфигураций и определены наиболее энергетически выгодные из них. Показано, что, начиная с $N \geq 11$, в системе может происходить структурный переход.

В настоящее время интерес к исследованию сильно скоррелированных структур, состоящих из одноименно заряженных частиц, сильно возрос. Равновесие такой системы создается конкуренцией между внешней радиальной удерживающей силой и внутренними силами отталкивания. Природа конфигураций такого типа рассматривалась еще Дж.Дж. Томпсоном в классической модели атома [1].

Скоррелированные трехмерные кластеры экспериментально наблюдались для системы захваченных ультрахолодных атомных ионов в различных ловушках (см., например, [2]). Кроме того, недавно в наземных условиях удалось создать трехмерный пылевой кластер [3]. Так как в отличие от ионов в ловушках потенциал взаимодействия между пылинками в плазме не известен, то определение его является актуальной задачей.

Целью настоящей работы является поиск простейших трехмерных структур, удерживаемых в сферически симметричной потенциальной яме для частиц, взаимодействие которых друг с другом описывается потенциалом Юкавы. С целью определения наиболее энергетически выгодной конфигурации мы провели сравнительный анализ потенциальных энергий различных конфигураций, которые могут реализовываться при

одинаковом числе взаимодействующих частиц. Также мы исследовали структурные переходы, которые возможны для разных потенциалов взаимодействия между частицами (в зависимости от коэффициента экранировки k). Благодаря таким структурным переходам, появляется возможность оценить такой потенциал. Исследования проводились для малых кластеров, в которых число частиц варьируется от $N = 4$ и до $N = 20$ включительно.

Постановка задачи. Рассмотрим систему из N одноименно заряженных одномерных частиц, удерживаемых от расплывания внешним гармоническим потенциальным полем $U(\mathbf{r})$. Вблизи центра удерживающий потенциал можно аппроксимировать трехмерной параболой. Потенциал взаимодействия частиц друг с другом в большинстве известных случаев представлен функцией вида: $U_{int} = U(\mathbf{r})$, среди которых наиболее распространенным является потенциал Юкавы (Дебая–Хюккеля)

$$U_{int} = \frac{q^2}{r} \exp\left(-\frac{r}{r_D}\right) = \frac{q^2}{r} \exp(-kr). \quad (1)$$

Здесь q – заряд частицы, который считается одинаковым для всех частиц в силу одномерности. Полная потенциальная энергия системы из N частиц запишется в этом случае как:

$$U(x_1, y_1, \dots, z_N) = q^2 \sum_{i=1}^N \left\{ \sum_{j<i}^N \frac{e^{-kr_{ij}}}{r_{ij}} + \frac{1}{2d^3} [\alpha(x_i^2 + y_i^2) + z_i^2] \right\}. \quad (2)$$

Здесь d – масштаб ловушки, а

$$r_{ij} = \sqrt{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2 + (z_i - z_j)^2}. \quad (3)$$

Для сферически-симметричной ловушки, которая рассматривается нами в данной работе, $\alpha = 1$.

Эта задача напоминает модель отталкивания электронных пар Гиллеспи для строения молекул, где рассматривается конфигурация связей центрального атома A в зависимости от числа электронных пар q на его валентных орбиталях. Решение этой задачи сводится к размещению максимально удаленных друг от друга точек, символизирующих центры тяжести облаков электронных пар, при числе точек от 2 до 12. Это приводит к возможным конфигурациям связей, которые подобны перечисленным нами. Соответственно, легко представить геометрию молекул, имеющих такое расположение электронных пар.

Исследование равновесных состояний системы сводится к нахождению минимума функции (2), зависящей от $3N$ переменных. Существует несколько способов определения этого минимума.

I. Монте-Карло. Алгоритм Монте-Карло применяется обычно только для малого количества частиц. Случайным образом сдвигаются положения частиц на величину δ_i . При этом частицы можно сдвигать как по отдельности, так и все сразу. Если после изменения положения частиц потенциальная энергия системы уменьшается, то новые координаты частиц принимаются за начальные и операция повторяется. Если случайные сдвиги не привели к уменьшению общей энергии, то эти изменения аннулируются и производится очередная попытка. Случайное изменение положения частиц происходит в какой-то области, например, в сфере определенного радиуса, который равен нескольким долям от расстояния между рассматриваемой частицей и ближайшей к ней частицей.

II. Молекулярная динамика. Вводится коэффициент трения μ и рассматривается асимптотическое поведение при $t \rightarrow \infty$ диссипативной системы N частиц с одинаковыми массами m , описываемой системой уравнений

$$\begin{cases} \dot{\mathbf{r}}_i = \mathbf{v}_i, \\ \dot{\mathbf{v}}_i + \mu \mathbf{v}_i = -\frac{q^2}{m d^3} (\mathbf{A} \mathbf{r}_i) + \frac{q^2}{m} \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{(1 + k r_{ij}) e^{-k r_{ij}}}{r_{ij}^3} (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j). \end{cases} \quad (4)$$

Здесь вектор $\mathbf{A} = (\alpha, \alpha, 1)$. Данная система уравнений дополняется начальными условиями, которые задаются случайным образом в каждом испытании, чтобы определить все возможные устойчивые конечные состояния.

Результаты моделирования. В данной работе начальные распределения частиц задавались случайным образом и находились стационарные состояния (состояния с минимумом потенциальной энергии). Для получения необходимой статистики вычисления проводились 500 раз для каждого случая.

В работах по моделированию кулоновских систем [4] обычно приводят сравнение с энергиями правильных многогранников, таких как куб, додекаэдр, а также конфигурациями в виде правильных многогранников с частицей в центре (тетраэдр +1, куб+1), поскольку в более ранних работах неправильно считалось, что именно эти системы должны обладать минимумом потенциальной энергии. Мы отказались от подобной практики и сравнивали энергии только тех систем, которые реализуются при данных условиях.

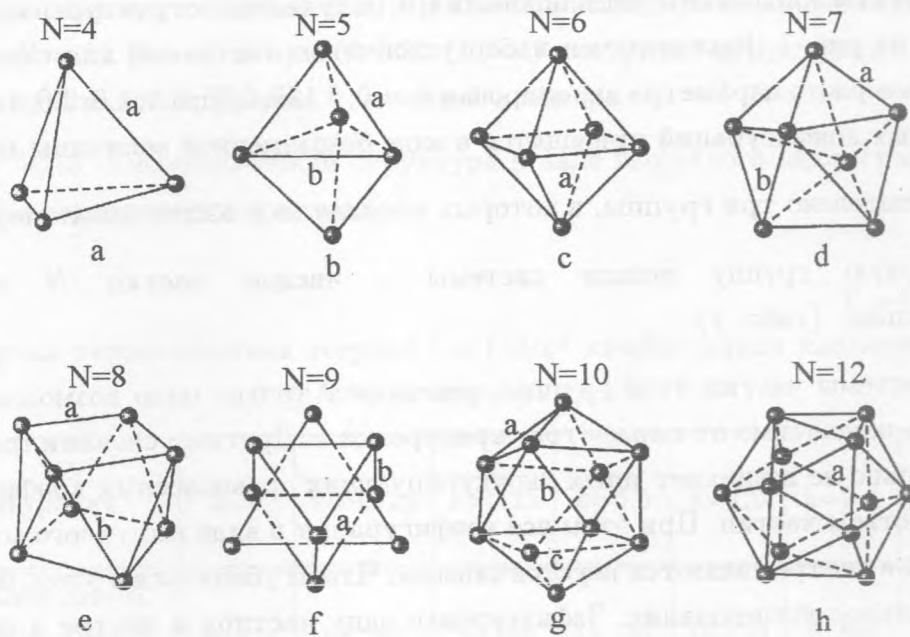


Рис. 1. Равновесные конфигурации при различных N : а – тетраэдр; б – тригональная бипирамида; с – октаэдр; д – пентагональная бипирамида; е – квадратная антипризма; ф – треугольная призма с тремя дополнительными вершинами; г – квадратная антипризма с двумя дополнительными вершинами; h – икосаэдр.

Т а б л и ц а 1

Безразмерная потенциальная энергия конфигураций $\tilde{u} = Ud/q^2$
 для $0 \leq k \leq 8$ и $4 \leq N \leq 8$

N	конфигурация	k=0	k=0.125	k=0.25	k=0.5	k=1.0	k=2.0	k=4.0	k=8.0
4	тетраэдр	5.669	4.989	4.429	3.576	2.519	1.511	0.777	0.351
5	тригональная бипирамида	8.910	7.784	6.870	5.501	3.839	2.288	1.171	0.532
6	октаэдр	12.639	10.960	9.614	7.627	5.262	3.100	1.575	0.708
7	пентагональная бипирамида	17.024	14.687	12.833	10.130	6.958	4.095	2.087	0.943
8	квадратная антипризма	21.864	18.764	16.329	12.816	8.753	5.131	2.612	1.182

Результаты численного моделирования и полученные структуры приведены в таблицах и на рис. 1. Был получен набор устойчивых состояний для следующих значений безразмерного параметра экранировки $k = 0; 0.125; 0.25; 0.5; 1.0; 2.0; 4.0; 8.0$. Энергии равновесных конфигураций приводятся в виде безразмерной величины $\tilde{u} = Ud/q^2$.

Было выделено три группы, в которых проявлялись общие закономерности.

В первую группу вошли системы с числом частиц N от 4 до 8 включительно (табл. 1).

Для системы частиц этой группы существует только одно возможное устойчивое состояние, независимо от параметра экранировки k . Другими словами говоря, до $N = 8$ включительно не возникает иных “конкурирующих” равновесных конфигураций с тем же количеством частиц. При этом все конфигурации в виде выпуклого многоугольника с частицей в центре являются неустойчивыми. Чтобы убедиться в этом, было проведено дополнительное исследование. Зафиксировав одну частицу в центре и получив устойчивую конфигурацию, кинетическая энергия которой не превышала заданную малую величину ϵ , мы “отпускали” центральную частицу. Независимо от величины ϵ система релаксировала к однооболочечной структуре. Только начиная с $N = 9$, равновесная конфигурация с частицей в центре становилась устойчивой.

Как можно заметить, и конфигурация в виде куба, являющегося одной из самых симметричных фигур, при моделировании тоже не наблюдается. Потенциальная энергия конфигурации в виде квадратной антипризмы почти всегда оказывается ниже энергии куба. Нами было проведено дополнительно следующее исследование. Находится минимум потенциальной энергии конфигурации макрочастиц в виде куба. Затем снимается ограничение на форму конфигурации. Как показывает моделирование, независимо от параметра экранировки, у куба поворачивается одно основание относительно другого на $\pi/4$, и они сдвигаются друг к другу. Получается правильная квадратная антипризма, причем радиус и энергия этой равновесной конфигурации меньше, чем у куба.

В следующую группу входят системы с числом частиц N от 9 и до 13 включительно. В табл. 2 приведены результаты моделирования для этой группы.

Начиная с $N = 9$, для каждого числа частиц есть несколько равновесных конфигураций, одна из них – выпуклый многогранник, а вторая – выпуклый многогранник с частицей в центре. Если в начале конфигурация с частицей в центре энергетически невыгодна, то с ростом числа N она начинает конкурировать с однооболочечной

структурой (выпуклым многогранником). И как можно видеть из приведенных данных в табл. 2, при $N = 11$ ($k = 2$) и при $N = 12$ ($k = 4$) наступает структурный переход, и становится выгодной конфигурация с частицей в центре.

А уже с $N = 13$ однооболочечная структура в виде выпуклого многогранника становится всегда энергетически невыгодной.

Т а б л и ц а 2

Безразмерная потенциальная энергия $\tilde{u} = Ud/q^2$ конфигураций кластеров для $9 \leq N \leq 16$ при разных k

N	конфигурация	k=0	k=0.125	k=0.25	k=0.5	k=1.0	k=2.0	k=4.0	k=8.0
9	треугольная призма с тремя дополнительными вершинами	27.214	23.247	20.158	15.747	10.704	6.256	3.182	1.439
	квадратная антипризма +1	27.448	23.481	20.388	15.965	10.892	6.394	3.267	1.485
10	квадратная антипризма с двумя дополнительными вершинами	33.057	28.120	24.307	18.911	12.809	7.476	3.806	1.726
	треугольная призма с тремя дополнительными вершинами +1	33.232	28.293	24.476	19.066	12.930	7.548	3.837	1.736
11	многогранник	39.404	33.394	28.789	22.325	15.085	8.804	4.491	2.041
	многогранник +1	39.490	33.479	28.868	22.386	15.111	8.788	4.455	2.011
12	икосаэдр	46.088	38.904	33.438	25.823	17.373	10.102	5.140	2.333
	многогранник + 1	46.234	39.048	33.576	25.943	17.452	10.129	5.132	2.316
13	многогранник	53.363	44.905	38.512	29.672	19.941	11.615	5.935	2.707
	икосаэдр + 1	53.311	44.849	38.448	29.584	19.810	11.448	5.776	2.597
14	многогранник	60.997	51.163	43.778	33.635	22.554	13.129	6.728	
	многогранник + 1	60.958	51.120	43.726	33.556	22.429	12.965	6.559	2.961
15	многогранник	69.065	57.755	49.314	37.794	25.299	14.726		
	многогранник + 1	68.957	57.643	49.191	37.641	25.095	14.487	7.329	3.311
16	многогранник	77.536	64.651	55.091	42.121	28.150			
	многогранник +1	77.381	64.491	54.918	41.915	27.888	16.091	8.148	3.687

Для большего числа частиц возможно уже существование нескольких типов равновесных структур. При изменении параметра экранировки k глубина потенциальной ямы для некоторых структур уменьшается, и при некотором пороговом значении структуры теряют устойчивость и, следовательно, не наблюдаются при численном моделировании.

Т а б л и ц а 3

Безразмерная потенциальная энергия $\tilde{y} = Ud/q^2$ различных конфигураций кластеров для $N \geq 17$ при разных k

N	конфигурация	k=0	k=0.125	k=0.25	k=0.5	k=1.0	k=2.0	k=4.0	k=8.0
17	многогранник	86.413	71.854	61.113	46.623	71.854			
	многогранник + 1	86.200	71.635	60.879	46.352	71.635	17.750	8.995	4.076
	многогранник + 2						17.851	9.061	4.120
18	многогранник	95.683	79.352	67.367					
	многогранник + 1	95.417	79.079	67.078	50.958	33.785	19.481	9.888	4.492
	многогранник + 2					33.884	19.544	9.918	4.507
19	многогранник	105.378							
	многогранник + 1	105.021	86.811	73.504	55.724	36.890	21.268	10.807	4.916
	многогранник + 2					36.955	21.290	10.806	4.913
20	многогранник + 1	115.041	94.863	80.191	60.684	40.132	23.150	11.787	5.378
	многогранник + 2	115.109	94.928	80.247	60.716	40.121	23.098	11.727	5.336
	многогранник + 3							11.770	

Из табл. 3 видно, что с $N = 17$ появляется равновесная конфигурация нового типа – с двумя частицами внутри выпуклого многогранника. И уже при $N = 19$ ($k = 4$) и при $N = 20$ ($k = 1$) наступает структурный переход, становится выгодной конфигурация с двумя частицами внутри выпуклого многогранника.

Заключение. В работе проведена классификация равновесных конфигураций и определены структуры, обладающие минимальной потенциальной энергией. Для малого количества частиц (от 4 до 8) конфигурации 3D кластеров не зависят от параметра экранировки. При изменении k от $k = 0$ до $k = 8.0$ структура кластера в точности такая же, что и в случае $k = 0$, этот результат аналогичен 2D плоскому случаю [5].

С увеличением числа частиц возникают новые состояния равновесия.

Для некоторого числа частиц в таких системах увеличение параметра k может приводить к изменениям типа устойчивых конфигураций (структурным переходам). Таким

образом, в нашей системе появился управляющий параметр, что делает эту систему полезной для прикладных задач, таких как, например, создание новых типов памяти.

А в случае систем, для которых не известен потенциал взаимодействия между частицами, благодаря структурным переходам, появляется возможность оценить такой потенциал.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Thompson J. J. Phil. Mag. S.6, 7, 237 (1904).
- [2] Bolinger J. J., Wineland D. J. and Dubin D. H. E. Phys. Plasmas, 1, 1403 (1994).
- [3] Arp O., Block D., Piel A., and Melzer A. Phys. Rev. Lett., 16, 165004 (2004).
- [4] Rafac R., Schiffer J. P., Hangste J. S., Dubin D. H. E., Wales D. J. Proc. Natl. Acad. Sci., 88, 483 (1991).
- [5] Kong M., Partoens B., and Peeterss F. M. New Journal of Physics, 5, N 23, 1 (2003).

Институт общей физики
им. А.М. Прохорова РАН

Поступила в редакцию 30 марта 2005 г.