

УДК 533.95

## РАСПРЕДЕЛЕНИЕ КУЛОНОВСКОГО МИКРОПОЛЯ ВНУТРИ ИОННОГО КЛАСТЕРА

С. А. Майоров, А. А. Щербаков<sup>1</sup>

*С помощью моделирования методами молекулярной динамики и Монте-Карло исследуется функция распределения микрополя в кластерах. Полученные результаты сравниваются с распределением микрополей в неограниченной плазме, показано, что рассчитанные распределения имеют те же асимптотики. Положение же максимума и наличие дополнительных экстремумов зависят от типа и размера кластера. Также исследована зависимость математического ожидания и дисперсии микрополя от числа частиц в кластере.*

При рассмотрении систем заряженных частиц поле, создаваемое ими, часто называют микрополем, чтобы отличать его от внешних полей. Распределение таких микрополей в зависимости от рассматриваемой системы может определять множество различных характеристик системы, таких как сдвиги и уширение атомных спектров, сечения столкновений частиц и т.п. Поэтому знание характерного поведения распределений микрополей (асимптотики, наличие экстремумов) для конкретных систем может оказаться полезным для изучения разнообразных происходящих в них физических явлений.

В простейшем случае бесконечной системы заряженных частиц, равномерно распределенных в пространстве, точное аналитическое решение для нахождения функции распределения микрополя было дано Хольцмарком еще в 1919 году [1]. В этом решении предполагается, что частицы распределены независимо (корреляции между ними равны нулю), и их температура стремится к бесконечности (соответственно, показатель неидеальности системы  $\Gamma = U_{\text{pot}}/E_{\text{kin}}$  равен нулю).

<sup>1</sup>Московский Физико-Технический Институт (МФТИ).

Распределение Хольцмарка определяется выражением:

$$H(u) = \frac{2}{\pi u} \int_0^{\infty} t \sin t \exp[-(t/u)^{3/2}] dt. \quad (1)$$

Здесь  $u = E/E_H$  – безразмерное значение модуля микрополя;  $E$  – абсолютное значение модуля микрополя;  $E_H$  – т. н. хольцмарковское микрополе, равное  $2\pi(4/15)^{2/3}qn^{2/3}$ , где  $n$  – концентрация частиц,  $q$  – заряд частиц. Необходимо отметить, что выражение (1) достигает максимума при  $u \approx 1.607$ , и имеет следующие асимптотики:

$$H(u) \approx \begin{cases} 1.496u^{-5/2}(1 + 5.107u^{-3/2}), & u \gg 1 \\ \frac{4u^2}{3\pi}(1 - 0.463u^2), & u \ll 1. \end{cases} \quad (2)$$

Отметим, что распределение (1) является устойчивым. Это значит, что микрополе, создаваемое двумя типами независимо и равномерно распределенных одинаковых заряженных частиц, распределено так же, как и микрополя, соответствующие каждому типу в отдельности, т.е. по Хольцмарку. Иногда такое свойство распределения называют стабильностью.

Описанное распределение представляет собой важную, но слишком упрощенную и физически нереализуемую модель, поэтому были предприняты многочисленные попытки для его улучшения. Исследователи, которые решали данную задачу, так или иначе оперировали с фурье-образом функции распределения, для которого были получены различные приближенные аналитические выражения, а искомая функция находилась затем с помощью численного интегрирования (например, [2–5]).

При этом естественный интерес для рассмотрения представляла собой двухкомпонентная электрон-ионная плазма, где характерное микрополе можно разделить на две составляющие. Для первой – высокочастотной – изменения во времени обусловлены движением электронов, и, соответственно, она определяется суммарным электронным полем. Низкочастотную составляющую связывают с движением ионов. В нее входят ионные поля, экранированные электронными облаками. Для каждой из этих двух компонент были найдены приближенные решения, учитывающие парные межчастичные корреляции и справедливые в широком диапазоне значений показателя неидеальности  $\Gamma$  плазмы. Отметим, что эти распределения справедливы для достаточно большого объема плазмы, для которого можно пренебречь влиянием границы.

Если же рассматривать конечное число частиц, образующих кластер, естественно ожидать изменений в функции распределения микрополя по сравнению с системами бесконечного объема.

Вопрос о нахождении этой функции становится актуальным, например, при изучении процессов взаимодействия мощного фемтосекундного лазерного импульса с кластерами, в которых находится от десятков до нескольких тысяч атомов или молекул [6]. В процессе такого взаимодействия молекулы кластеров ионизируются (в зависимости от размера кластера и молекул, входящих в него, могут быть ионизованы как все, так и часть молекул), и происходит разлет электронов за времена 10–100 фс [6]. Так как время разлета оставшихся ионов, как правило, на 1–3 порядка больше времени разлета электронов, имеет смысл говорить об указанных выше компактных системах заряженных частиц с границей, удерживаемых инерционно.

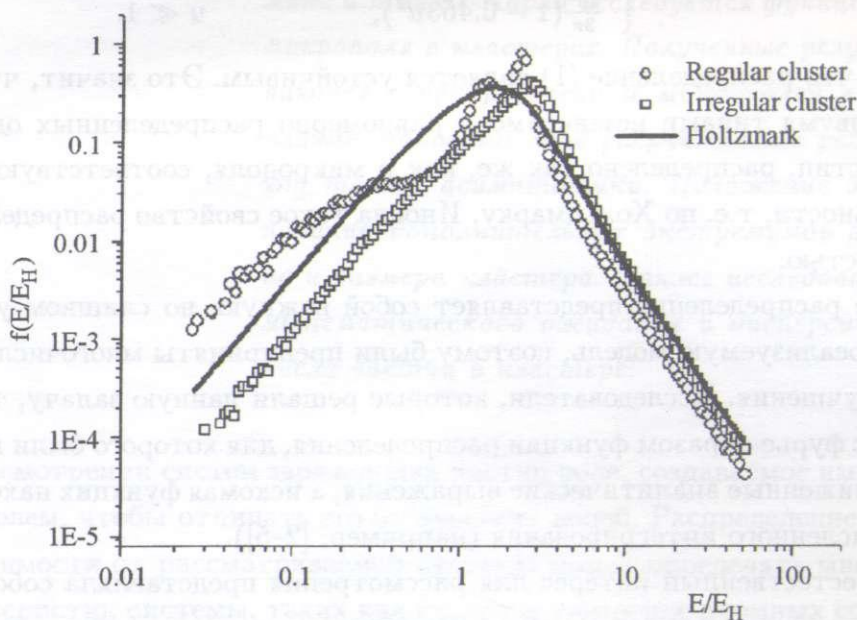


Рис. 1. Асимптотики распределения полей для всех рассмотренных кластеров совпадают с асимптотиками распределения Хольцмарка. На данном рисунке в качестве примера приведены распределения, соответствующие равносному (регулярному) и неравносному кластерам, состоящим из 50 частиц.

*Характерные черты функции распределения микрополя в ионном кластере.* Рассмотрим более подробно, какими свойствами может обладать функция распределения микрополя в кластере:

– Она должна иметь те же асимптотики, что и распределение Хольцмарка, поскольку механизмы формирования областей с малыми (взаимная компенсация полей частиц) и большими полями (сложение нескомпенсированных полей) одни и те же во всех системах заряженных частиц.

– Максимум искомой функции может располагаться как правее, так и левее Хольцмарковского в зависимости от числа частиц в кластере. Это обусловлено тем, что вблизи границы кластера поля преимущественно складываются.

– Если частицы находятся в узлах некоторой решетки, то их распределение по радиусу уже не будет гладкой квадратичной функцией, а будет иметь резкие пики. В таком случае у функции распределения микрополя возможно появление нескольких максимумов, соответствующих полям от слоев решетки.

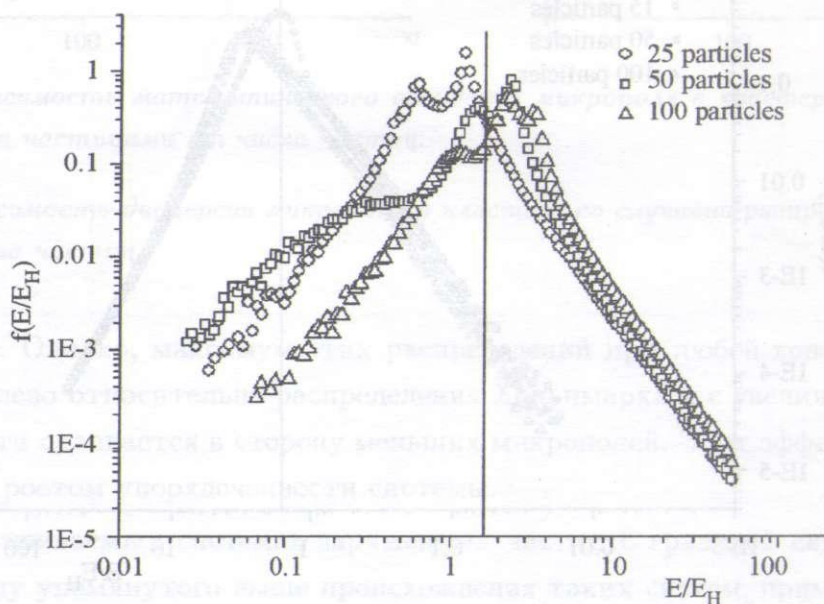


Рис. 2. Изменение функции распределения микрополя в равновесном кластере с увеличением числа частиц. Вертикальной чертой отмечен максимум распределения Хольцмарка.

*Результаты численного моделирования.* Рассмотрим два типа сферических кластеров. Первый – это кластеры со случайно разбросанными по объему частицами, поле каждой из которых  $\vec{E} = q/r^2$ . Для получения функции распределения микрополя в этом случае производилось усреднение по выборкам расположений частиц. Второй тип – равновесные конфигурации частиц, взаимодействующих по закону Кулона и находящихся во внешнем параболическом потенциале. Такие конфигурации для малого числа ионов от 4 до 20 были рассмотрены в [7]. В этой работе было показано, что для числа частиц  $N \leq 11$  все ионы располагаются вблизи поверхности кластера, формируя одну оболочку, а для  $N > 11$  в кластерах возможен структурный переход. При этом с увеличением числа ионов оказывается возможным появление все большего числа обо-

лочек различного радиуса. Наличие таких оболочек должно отражаться на функции распределения, а именно на появлении у нее дополнительных максимумов. Отметим, что приведенные ниже зависимости для кластеров с числом частиц больше 11 соответствуют какой-то одной конкретной равновесной конфигурации, поскольку в данной работе не ставилась задача изучить все функции распределения для каждой равновесной конфигурации частиц, а только общие особенности этих функций.

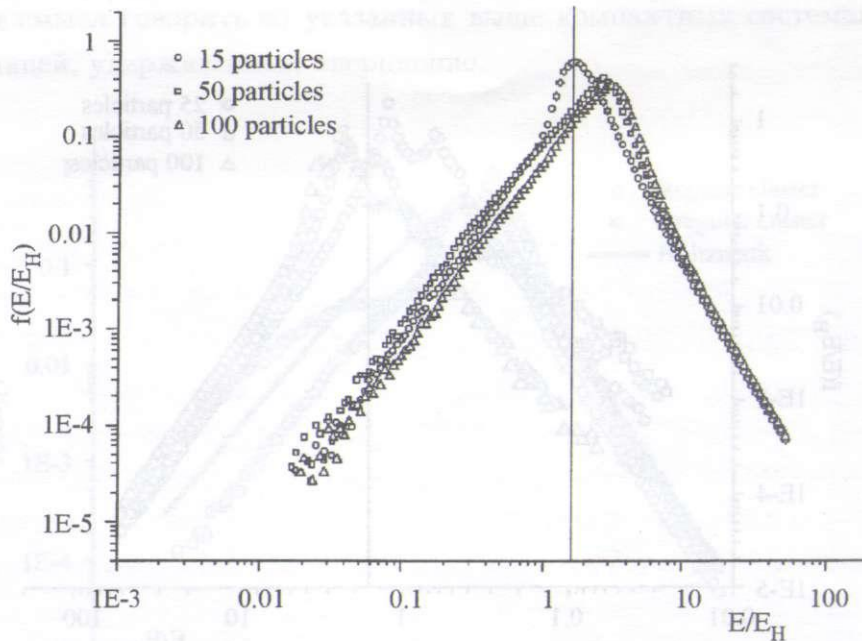


Рис. 3. Изменение функции распределения микрополя в кластере со случайно распределенными частицами с увеличением числа частиц.

Рассматриваемые типы кластеров физически соответствуют осколкам твердого тела и каплям конденсата, которые могут образовываться, например, в процессе лазерного испарения мишеней или при истекании газа из сопла в вакуум.

Проиллюстрируем сделанные выводы численными примерами. Сразу отметим, что во всех расчетах функции распределения микрополей в кластерах асимптотики найденных зависимостей совпадали с асимптотиками распределения Хольцмарка и распределений, полученных в [2–5], независимо от того, как расположены частицы кластера (см. рис. 1). Данное утверждение находится в противоречии с выводами работы [8], где выведенное аналитическое выражение для функции распределения убывает в пределе больших полей обратно пропорционально квадрату микрополя. Отметим, что асимптотики распределений, полученных в упомянутых работах [2–5], те же, что и у

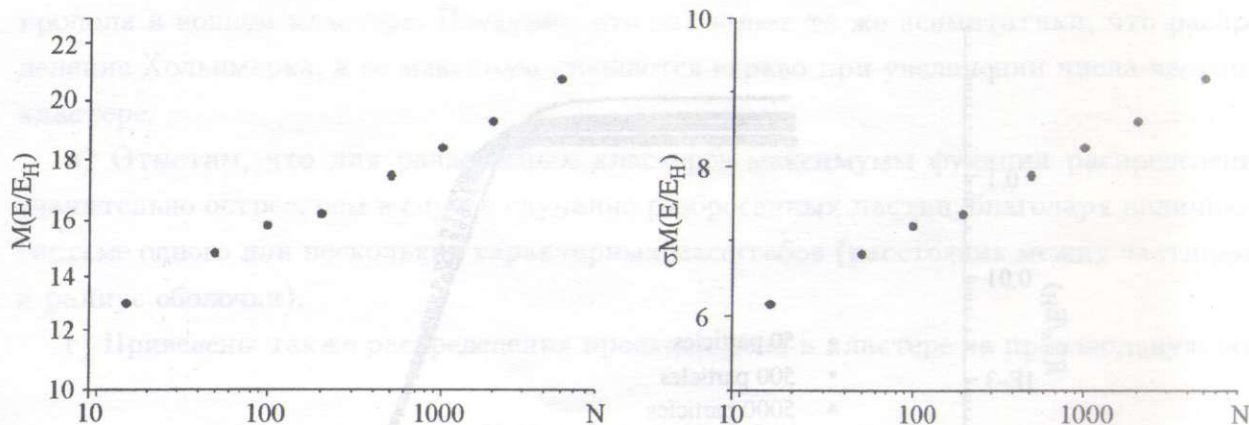


Рис. 4. Зависимость математического ожидания микрополя в кластере со случайно распределенными частицами от числа частиц.

Рис. 5. Зависимость дисперсии микрополя в кластере со случайно распределенными частицами от числа частиц.

функции (1). Однако, максимум этих распределений при любой конечной температуре смещен влево относительно распределения Хольцмарка и с увеличением параметра неидеальности сдвигается в сторону меньших микрополей. Этот эффект, по-видимому, объясняется ростом упорядоченности системы.

В рассматриваемых системах заряженных частиц с границей ситуация иная. Во-первых, ввиду упомянутого выше происхождения таких систем, применительно к ним некорректно понятие температуры и, соответственно, показателя неидеальности. Во-вторых, в приграничном слое с толщиной порядка межчастичного расстояния эффективная плотность частиц в два раза меньше. Но с другой стороны, из-за объемного заряда появляется радиальная составляющая поля, которая вблизи границы достигает своего максимума. Поэтому положение максимума микрополя при наличии границы должно возрастать с увеличением числа частиц системы и в некоторый момент превысить положение максимума у распределения Хольцмарка. На рис. 2 показано изменение распределения микрополя в равновесном кластере с ростом числа частиц. Аналогичная зависимость дана на рис. 3 для кластера со случайно распределенными частицами. На втором рисунке также хорошо видно, как наличие нескольких слоев частиц отражается на функции распределения.

Поскольку у кластеров со случайным распределением частиц по объему функция распределения микрополя имеет всего один максимум, представляется интересным то,

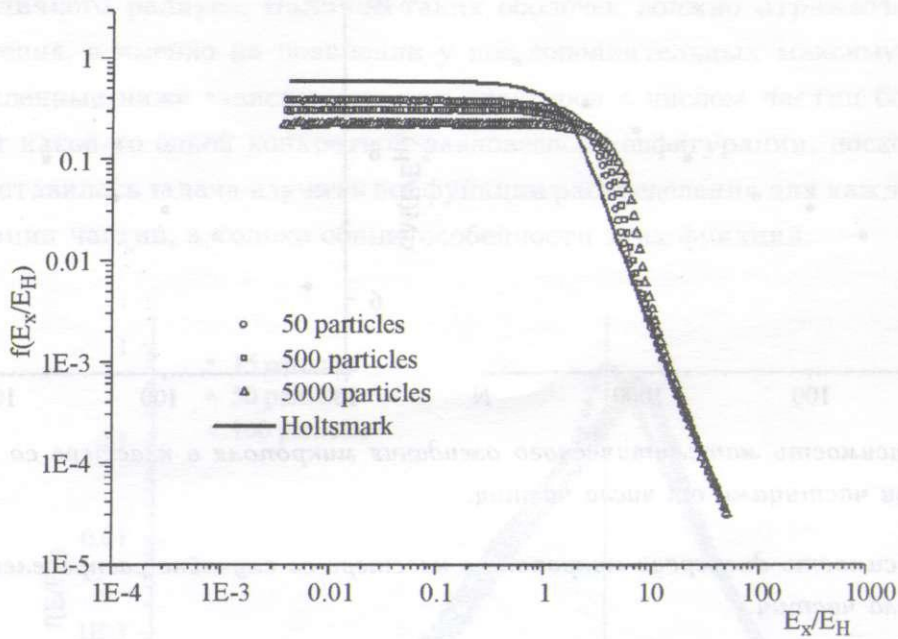


Рис. 6. Функция распределения проекции микрополя на произвольную ось в пространстве для кластера со случайно распределенными частицами.

как сдвигается и изменяется функция распределения с изменением числа частиц. Такая зависимость изображена на рис. 4, 5 в полулогарифмическом масштабе, из рисунков видно, что она неплохо аппроксимируется степенной зависимостью  $M_F(N) \sim N^n$ , причем в области, где  $100 < N < 200$ , происходит переход с прямой  $n \approx 4.2$  на прямую с  $n \approx 4.4$ .

Были также рассчитаны функции распределения проекции микрополя на произвольную ось в пространстве. Проекция микрополя может оказаться значимой в следующей ситуации. В случае ионизации кластеров мощным лазерным импульсом, поле которого на несколько порядков больше микрополей в кластере, оторванные от молекул электроны движутся преимущественно под влиянием поля ионизирующей лазерной волны и под действием средней проекции микрополя на направление распространения этой волны. На рис. 6 представлено описанное выше распределение, а также распределение Хольцмарка для проекции микрополя [9].

**Заключение.** а) Построена численная модель, позволяющая качественно проследить характерные особенности функции распределения кулоновского микрополя в заряженных кластерах.

б) С помощью численного моделирования исследована функция распределения ми-

крополя в ионном кластере. Показано, что она имеет те же асимптотики, что распределение Хольцмарка, а ее максимум смещается вправо при увеличении числа частиц в кластере.

в) Отметим, что для равновесных кластеров максимумы функции распределения значительно острее, чем в случае случайно разбросанных частиц, благодаря наличию в системе одного или нескольких характерных масштабов (расстояния между частицами и радиус оболочки).

г) Приведены также распределения проекции поля в кластере на произвольную ось.

#### ЛИТЕРАТУРА

- [1] J. Holtsmark, Ann. Phys. (Leipzig) **58**, 577 (1919).
- [2] C. F. Hooper, Phys. Rev. **149**, 77 (1966).
- [3] M. Baranger, B. Mozer, Phys. Rev. **115**, 521 (1959).
- [4] M. Baranger, B. Mozer, Phys. Rev. **118**, 626 (1960).
- [5] C. A. Iglesias, J. L. Lebowitz, Phys. Rev. A. **28**, 1667 (1983).
- [6] В. П. Крайнов, М. Б. Смирнов, УФН, **170**, N 9, 969 (2000).
- [7] Н. Г. Гусейн-заде, Д. Н. Клочков, Краткие сообщения по физике ФИАН N 12, 2 (2005).
- [8] M. Y. Romanovsky, W. Ebeling, Las. Phys. **14**(6), 850 (2004).
- [9] Т. А. Агемян, Теория вероятностей для астрономов и физиков. (М., Наука, 1974).

Институт общей физики  
им. А. М. Прохорова РАН

Поступила в редакцию 28 ноября 2007 г.