

01

Кулоновские кластеры в гармонических ловушках

© Л.Г. Дьячков

Объединенный институт высоких температур РАН, Москва

E-mail: dyachk@mail.ru

Поступило в Редакцию 31 января 2015 г.

Классический кулоновский кластер в цилиндрически симметричной гармонической ловушке рассматривается в приближении однородного распределения частиц по его объему. Предложены аналитические выражения для размера и потенциальной энергии кластера, применимые лишь при большом числе частиц в нем. Оценено влияние возможной неоднородности и показано, что на потенциальную энергию это влияние очень слабое. Выражение для потенциальной энергии распространено на меньшие кластеры введением корректирующего фактора, полученного аппроксимацией данных численных расчетов.

Системы сильно взаимодействующих кулоновских частиц одного знака, образующих в потенциальных ловушках кластеры, интенсивно изучаются в последние десятилетия. Это связано с фундаментальным и прикладным значением таких физических объектов, как ионные кристаллы и ненейтральная плазма [1], электроны над поверхностью жидкого гелия [2] и в квантовых точках [3], коллоидные суспензии [4], плазменно-пылевые структуры [5]. Большое внимание уделяется преобразованиям кластера при изменении анизотропных свойств ловушки, в частности структурным переходам, связанным с изменением размерности кластера [1,6,7]. Обычно ловушки полагаются гармоническими и цилиндрически симметричными, что достаточно хорошо аппроксимирует экспериментальные условия. В большинстве работ применяются численные методы молекулярной динамики и Монте-Карло, а расчеты выполняются для фиксированных условий анизотропии ловушки. В то же время представляет интерес модель кластера, позволяющая делать простые оценки основных его характеристик в широком диапазоне условий анизотропии.

В данной работе предлагаются простые аналитические выражения для потенциальной энергии и размера классического кулоновского

кластера в зависимости от анизотропии ловушки и числа частиц N в кластере. Они получены в рамках модели однородного кластера [1,8,9] и применимы, очевидно, при достаточно больших значениях N . Сделаны оценки влияния неоднородности в распределении частиц по объему кластера. Чтобы применить модель к малым кластерам, на основании сопоставления результатов с данными численных расчетов в полученные формулы вводится корректирующий фактор.

Потенциальная энергия кластера $U = U_E + U_t$ складывается из энергии электростатического взаимодействия частиц U_E и энергии их взаимодействия с полем ловушки U_t . В цилиндрически симметричной гармонической ловушке, если все частицы идентичны, имеют массу m и несут заряд q , то

$$U_E = \frac{q}{2} \sum_{i=1}^N \Phi_E(x_i, y_i, z_i), \quad U_t = \frac{m\omega^2}{2} \sum_{i=1}^N (r_i^2 + \alpha z_i^2),$$

где $\Phi_E(x_i, y_i, z_i)$ — электростатический потенциал в точке нахождения i -й частицы, создаваемый остальными частицами кластера, ω — частота гармонических осцилляций отдельной частицы в плоскости x – y около положения равновесия ($x = y = z = 0$), $r_i^2 = x_i^2 + y_i^2$, α — параметр анизотропии. Предполагая, что частиц достаточно много и они равномерно распределены по объему кластера V_c с плотностью $\rho = N/V_c$, его потенциальную энергию можно приближенно записать в виде

$$U = \frac{1}{2} \rho q \int_{V_c} \Phi_E dV + \frac{1}{2} \rho m \omega^2 \int_{V_c} (r^2 + \alpha z^2) dV. \quad (1)$$

В таком приближении кластер имеет форму сфероида, ограниченного поверхностью $r^2/a^2 + z^2/b^2 = 1$, с радиусом a в плоскости x – y и полуосью b по оси симметрии z [1]. Если $\alpha < 1$, сфероид вытянут и $\beta \equiv b/a > 1$; если $\alpha > 1$, он сплюснут и $\beta < 1$; при $\alpha = 1$ он принимает форму шара и $\beta = 1$. Электростатический потенциал внутри сфероида можно записать в виде интеграла [10] (в [10] рассматривается гравитационный потенциал, который имеет такую же зависимость от расстояния, как и кулоновский, другой только знак)

$$\Phi_E(r, z) = \pi \rho q a^2 b \int_0^\infty \left(1 - \frac{r^2}{a^2 + s} - \frac{z^2}{b^2 + s} \right) \frac{ds}{(a^2 + s)(b^2 + s)^{1/2}},$$

который в данном случае берется в элементарных функциях

$$\Phi_E(r, z) = 2\pi\rho qa^2\beta \left[\left(1 - \frac{r^2 - 2z^2}{2a^2(1 - \beta^2)} \right) S(\beta) + \frac{\beta}{2a^2(1 - \beta^2)} \left(r^2 - \frac{2z^2}{\beta^2} \right) \right], \quad (2)$$

где $S(\beta) = \arccos \beta / \sqrt{1 - \beta^2}$ при $\beta < 1$ и $S(\beta) = \ln(\beta + \sqrt{\beta^2 - 1}) / \sqrt{\beta^2 - 1}$ при $\beta > 1$. После подстановки (2) в (1) и интегрирования с учетом $\rho = 3N/(4\pi a^3\beta)$ получим

$$U = \frac{3}{5} N^2 \frac{q^2}{a} S(\beta) + \frac{1}{5} Nm\omega^2 a^2 \left(1 + \frac{1}{2} \alpha\beta^2 \right). \quad (3)$$

Из условий минимума потенциальной энергии $\partial U/\partial a = 0$ и $\partial U/\partial \beta = 0$ находим

$$\alpha = \frac{2}{\beta} \frac{1 - \beta S(\beta)}{S(\beta) - \beta}, \quad a = \left(\frac{3Nq^2}{2m\omega^2} \frac{S(\beta) - \beta}{1 - \beta^2} \right)^{1/3}. \quad (4)$$

Уравнения (4) дают параметрическую зависимость $a(\alpha)$ с параметром β . Подставляя (4) в (3), получим окончательное выражение для потенциальной энергии кластера

$$U = \frac{9}{10} \frac{N^2 q^2}{a} S(\beta) = \frac{3^{5/3}}{2^{2/3} 5} N^{5/3} (q^4 m \omega^2)^{1/3} S(\beta) \left(\frac{1 - \beta^2}{S(\beta) - \beta} \right)^{1/3}. \quad (5)$$

В частном случае сферического кластера оно переходит в хорошо известное соотношение $U = (9/10)N^{5/3}q^2/d$, где $d = (q^2/m\omega^2)^{1/3}$ — радиус Вигнера–Зейтца.

Для всех значений α точно выполняется соотношение $U_E/U_t = 2$, что согласуется с результатами численного моделирования методом молекулярной динамики [11]. Нетрудно показать с помощью теоремы Эйлера об однородных функциях, что это соотношение должно выполняться в локальных экстремумах потенциальной энергии. Можно показать также, что для значений a и β , определяемых уравнениями (4), выполняются условия минимума потенциальной энергии (положительная определенность гессиана функции $U(a, \beta)$).

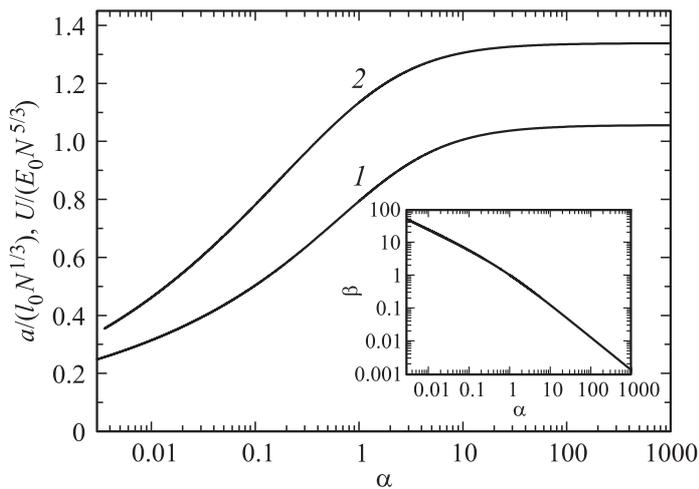


Рис. 1. Зависимость радиуса (1), потенциальной энергии (2) и отношения полуосей $\beta = b/a$ (на врезке) сфероидального кулоновского кластера от параметра анизотропии ловушки.

Зависимости β , $a/N^{1/3}$ и $U/N^{5/3}$ от α показаны на рис. 1, они определяются формулами (4) и (5) и справедливы, очевидно, лишь при достаточно большом количестве частиц N в кластере. Энергия U и радиус a даны в единицах $E_0 = (q^4 m \omega^2 / 2)^{1/3}$ и $l_0 = (2q^2 / m \omega^2)^{1/3}$ соответственно. Для $\alpha \gg 1$ кластер становится почти плоским ($\beta \ll 1$) и его радиус и энергия практически перестают зависеть от α . При $\alpha \ll 1$ кластер вытягивается вдоль оси z ($\beta \gg 1$) и в пределе $\alpha \rightarrow 0$ обращается в одномерную цепочку частиц. Однако в отличие от перехода к двумерной конфигурации переход к одномерной в рамках данной модели не может быть описан, так как полная потенциальная энергия одномерного кластера и его корреляционная энергия, не учитываемая данной моделью, одного порядка величины [1].

Оценим влияние возможной неоднородности в распределении частиц по объему кластера на его потенциальную энергию, форму и размер, задав ее некоторым простым и правдоподобным способом. Пусть распределение частиц по объему сфероида зависит только от параметра $t = r^2/a^2 + z^2/b^2$, $0 < t < 1$ (сфероид состоит из однородных

слоев, подобных его поверхности). Тогда электростатический потенциал внутри него задается интегралом [12]

$$\Phi_E(r, z) = \pi q a^2 b \int_0^{\infty} \frac{\rho^*(p(r, z, s)) ds}{(a^2 + s)(b^2 + s)^{1/2}},$$

$$p(r, z, s) = \frac{r^2}{a^2 + s} + \frac{z^2}{b^2 + s}, \quad \rho^*(t) = \int_t^1 \rho(t') dt'.$$

Предположим, что плотность частиц имеет простую зависимость от t : $\rho(t) = \rho_0(1 - t^n)$. Тогда все расчеты могут быть выполнены в элементарных функциях. Рассмотрим вначале простейший случай $n = 1$ и, опуская детали вычислений, приведем окончательный результат. Радиус неоднородного кластера a_1 по сравнению с радиусом однородного a увеличивается в $(5/3)^{1/3} = 1.186$ раз, его форма остается неизменной ($\beta_1 = \beta$), а потенциальная энергия увеличивается менее чем на 0.5%: $U_1/U = 5^{5/3}/3^{2/3}7 = 1.0041$. В случае $n \geq 2$ соотношение между полуосями сфероида β также остается неизменным, а радиус и энергия увеличиваются, но в меньшей степени, чем при $n = 1$. Этот результат вполне очевиден, так как с ростом n распределение частиц приближается к однородному. Таким образом, хотя влияние неоднородности рассмотрено только для простого модельного случая, можно заключить, по-видимому, что она слабо сказывается на потенциальной энергии кулоновского кластера.

Поскольку рассмотренная модель применима только при достаточно больших N , модифицируем ее так, чтобы можно было применить к небольшим кластерам. Сделаем это на примере формулы для потенциальной энергии. Сопоставим (5) с данными численного расчета плоского кластера [13]. Переходя к пределу плоского кластера $\beta \rightarrow 0$ в (5), получим

$$U_{2D} = \frac{3}{5} \left(\frac{3\pi}{4} \right)^{2/3} N^{5/3} (q^4 m \omega^2)^{1/3}. \quad (6)$$

Заметим, что (6) соответствует поверхностной плотности частиц в плоском кластере $\sigma(r) = (3N/2\pi a^2) \sqrt{1 - r^2/a^2}$, которая получена предельным переходом из однородной объемной плотности, но сама не

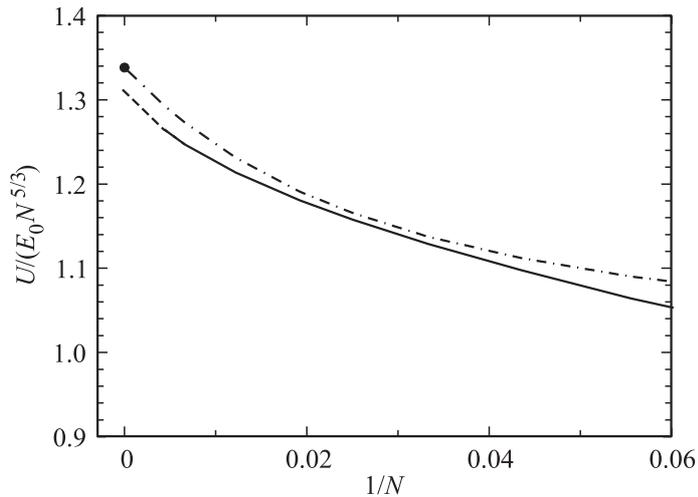


Рис. 2. Сравнение расчета по формуле (6) для плоского кластера (точка) с данными метода Монте-Карло [13] (сплошная кривая) и их экстраполяцией при $N^{-1} \rightarrow 0$ (штриховая кривая); штрихпунктир — расчет по (7).

является однородной. Расчет потенциальной энергии плоского кластера при однородной поверхностной плотности $\sigma = N/\pi a^2$ показал, что, как и в случае объемного кластера, она отличается от (6) менее чем на 0.5%. Таким образом, влияние неоднородного распределения частиц как в объемном, так и в плоском кластере слабо влияет на его потенциальную энергию. Соответствующие изменения составляют доли процента.

На рис. 2 наш результат $U_{2D}/E_0 N^{5/3} = (3/10)(3\pi)^{2/3} \cong 1.34$ сопоставляется с данными численного расчета [13] при различных значениях N и их экстраполяцией при $N^{-1} \rightarrow 0$, что дает $U_{2D}/E_0 N^{5/3} \cong 1.31$. Различие около 2% связано с тем, что модель не учитывает дискретную структуру кластера и его корреляционную энергию. Чтобы применять формулу (6) при небольших N , введем в нее корректирующий фактор, полученный аппроксимацией данных [13]:

$$U_{2D} = \frac{3}{5} \left(\frac{3\pi}{4} \right)^{2/3} N^{5/3} (q^4 m \omega^2)^{1/3} \left(0.845 - \frac{0.718}{N} + 0.155 e^{-50.5/N} \right). \quad (7)$$

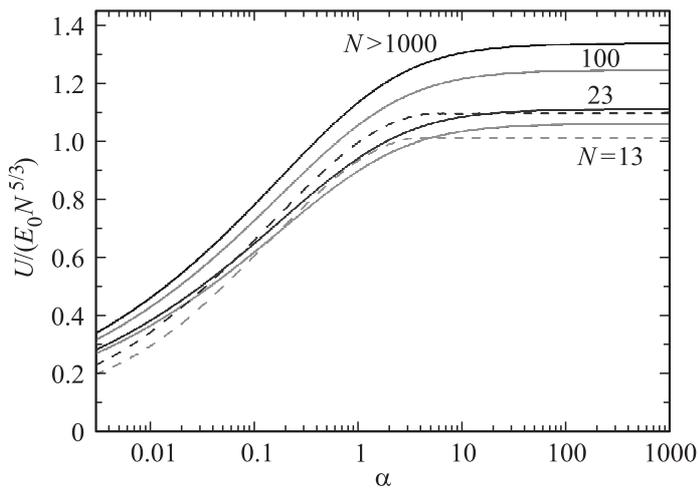


Рис. 3. Потенциальная энергия кулоновского кластера в зависимости от параметра анизотропии ловушки. Сплошные кривые — расчет по формуле (5) для $N > 1000$ и по формуле (8) для $N = 100, 23$ и 13 ; штриховые кривые — молекулярно-динамический расчет [11] для $N = 23$ и 13 .

Штрихпунктирная кривая на рис. 2, показывая результат расчета по (7), разумным образом аппроксимирует данные [13] при $N > 20$. Этот же корректирующий фактор будем применять также для объемных кластеров, введя его в формулу (5). Другими словами, предположим, что величина $U/N^{5/3}$ как функция α и N приближенно может быть представлена произведением двух факторов, один из которых зависит от α , а другой — от N . В результате имеем формулу

$$U = \frac{3^{5/3}}{2^{2/3}5} N^{5/3} (q^4 m \omega^2)^{1/3} S(\beta) \left(\frac{1 - \beta^2}{S(\beta) - \beta} \right)^{1/3} \times \left(0.845 - \frac{0.718}{N} + 0.155 e^{-50.5/N} \right). \quad (8)$$

С ростом N корректирующий множитель обращается в единицу, при $N > 10^3$ применимы формулы (5) и (6) (с точностью порядка процента), а при меньшем количестве частиц в кластере следует применять (7) и (8). На рис. 3 представлены результаты расчета по (8) для $N = 100$,

23 и 13. Верхняя кривая для $N > 10^3$ соответствует формуле (5) и совпадает с кривой 2 на рис. 1. Расчет для $N = 23$ и 13 сравнивается с данными молекулярно-динамического моделирования [11]. Видно, что формула (8) дает удовлетворительное приближение даже для таких малых кластеров, хотя с более пологой зависимостью $U(\alpha)$ при $\alpha < 1$. Последнее, а также увеличение погрешности расчета при уменьшении α связано с отмеченной выше невозможностью описания перехода к цепочечной структуре кластера в рамках данной модели.

Таким образом, в данной работе с использованием модели однородного кластера, применимой лишь при достаточно большом числе частиц, получены простые аналитические выражения для размера и потенциальной энергии кулоновского кластера в анизотропной гармонической ловушке. Показано, что неоднородность в распределении частиц слабо влияет на его потенциальную энергию. Для применения модели к малым кластерам в формулу для потенциальной энергии вводится корректирующий фактор, полученный аппроксимацией данных численных расчетов.

Работа выполнена за счет гранта Российского научного фонда, проект № 14-50-00124.

Список литературы

- [1] *Dubin D.H.E., O'Neil T.M.* // Rev. Mod. Phys. 1999. V. 71. P. 87.
- [2] *Leiderer P., Ebner W., Shikin V.B.* // Surf. Sci. 1987. V. 113. P. 405.
- [3] *Ashoori R.C.* // Nature (London). 1996. V. 379. P. 413.
- [4] *Golosovsky M., Saado Y., Davidov D.* // Phys. Rev. E. 2002. V. 65. P. 061 405.
- [5] *Morfill G.E., Ivlev A.* // Rev. Mod. Phys. 2009. V. 81. P. 1353.
- [6] *Cornelissens Y.G., Partoens B., Peters F.M.* // Physica. E. 2000. V. 8. P. 314.
- [7] *Hyde T.W., Kong J., Matthews L.S.* // Phys. Rev. E. 2013. V. 87. P. 053 106.
- [8] *Turner L.* // Phys. Fluids. 1987. V. 30. P. 3196.
- [9] *Nelissen K., Matulis A., Partoens B., Kong M., Peeters F.M.* // Phys. Rev. E. 2006. V. 73. P. 016 607.
- [10] *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Теория поля. М.: Наука, 1976.
- [11] *D'yachkov L.G., Myasnikov M.I., Petrov O.F., Hyde T.W., Kong J., Matthews L.* // Phys. Plasmas. 2014. V. 21. P. 093 702.
- [12] *Антонов В.А., Никифоров И.И., Холшевников К.В.* // Элементы теории гравитационного потенциала и некоторые случаи его явного выражения. СПб.: С.-Петербургский гос. университет, 2008. 208 с.
- [13] *Bedanov V.M., Peeters F.M.* // Phys. Rev. B. 1994. V. 49. P. 2667.