

ИССЛЕДОВАНИЕ СПЕКТРАЛЬНЫХ СВОЙСТВ ПРОСТРАНСТВЕННО-НЕОДНОРОДНОЙ СИСТЕМЫ ЧАСТИЦ ЮКАВЫ В ПАРАБОЛИЧЕСКОМ КОНФАЙНМЕНТЕ

И. В. Воронов^{a,b,}, В. С. Николаев^{a,b}, А. В. Тимофеев^{b,a,c}*

^a *Московский физико-технический институт (Национальный исследовательский университет)
141700, Долгопрудный, Московская обл., Россия*

^b *Объединенный институт высоких температур Российской академии наук
125412, Москва, Россия*

^c *Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»
101000, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 17 июня 2022 г.,
после переработки 27 июля 2022 г.
Принята к публикации 2 августа 2022 г.

Исследуются динамические свойства системы из конечного числа одноименно заряженных частиц, взаимодействующих по экранированному кулоновскому потенциалу в поле параболической ловушки. Методом анализа нормальных мод в квазигармоническом приближении получено пространственное распределение амплитуд колебаний частиц в системе: высокочастотные колебания локализуются в ее центральной области. Это приводит к тому, что в разных областях структуры спектры колебаний частиц различны. Для обобщения этого результата на широкий температурный диапазон проведено численное моделирование систем из конечного числа заряженных частиц в ловушке методом классической молекулярной динамики. Показана пространственная неоднородность спектров тепловых колебаний частиц: происходит смещение спектра в низкочастотную область при увеличении расстояния от рассматриваемой подсистемы до центра структуры. Различные методы расчета амплитуды тепловых колебаний частиц — как в рамках квазигармонического приближения, так и методом молекулярной динамики — подтверждают неоднородность радиального профиля амплитуды: на периферии системы амплитуда тепловых колебаний частиц имеет более высокое значение, чем в центре структуры. Показано, что в локальном приближении динамические свойства подсистем структур из конечного числа заряженных частиц в ловушке при определенных условиях существенно отличаются от динамических свойств систем заряженных частиц близкой плотности в периодических граничных условиях. Результаты настоящего исследования могут быть полезны при описании динамических свойств лабораторных плазменно-пылевых и коллоидных систем.

DOI: 10.31857/S0044451022120197
EDN: LFFJRM

1. ВВЕДЕНИЕ

Система частиц, взаимодействующих по потенциалу Юкавы, используется в качестве модельной как для систем элементарных частиц [1], так и для коллоидной [2] и пылевой [3–18] плазмы. При описании систем одноименно заряженных частиц в плазме используется экранированный кулоновский по-

тенциал, совпадающий с отталкивательным потенциалом Юкавы по функциональной форме:

$$U_{Coul}(r_{ij}) = \frac{Q^2}{r_{ij}} \exp(-\kappa r_{ij}), \quad (1)$$

где Q — электрический заряд частицы, $r_{ij} = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$ — расстояние между частицами i и j , κ — параметр экранирования. В силу своего отталкивательного характера потенциал такой формы может быть использован только для описания модельных «бесконечных» однородных систем заряженных частиц в периодических граничных условиях. Структурные, динамические и транспортные свойства таких систем детально изучены в работах [19–21]. В идеаль-

* E-mail: ilya.v.vorovov@gmail.com

ных условиях описанные структуры образуют кристаллическую решетку из одноименно заряженных частиц: в трехмерном случае ОЦК или ГЦК, в двумерном — гексагональную.

В лабораторных экспериментах исследуются структуры из конечного числа частиц с открытой границей. Примерами могут служить коллоидные системы, пылевая и однокомпонентная плазма. В таких системах одним из подходов для удержания отталкивающихся частиц от разлета является воздействие внешней электростатической ловушки. Например, в плазменно-пылевых системах конфайнмент может быть связан со следующими факторами: в тлеющем разряде ловушка вызвана амбиполярной диффузией [22], а в высокочастотном разряде она создается намеренно с помощью специального кольца [23]. В первом приближении конфайнмент в таких системах имеет параболический профиль [24]:

$$U_{trap}(x_i, y_i, z_i) = 0.5Q(\alpha x_i^2 + \beta y_i^2 + \gamma z_i^2), \quad (2)$$

где α, β, γ — параметры ловушки. В зависимости от их соотношения получаются трех-, двух- и одномерные системы. Обоснованность использования функциональной формы потенциалов (1), (2) подтверждается теоретическими результатами работ [12, 25] по исследованию пространственного распределения плазмы в положительном столбе тлеющего разряда. Результаты этих работ указывают на то, что в области существования пылевой структуры профиль плотности ионов и электронов плазмы в радиальном направлении сглаживается, градиент плотности ионов и электронов вблизи оси разрядной трубки уменьшается. Радиальная компонента электрического поля в этих условиях имеет линейную зависимость от радиального расстояния, что соответствует ловушке с параболическим профилем вблизи центра системы. Таким образом, модель, включающая в себя потенциалы (1) и (2), может использоваться в качестве первого приближения для описания подсистемы пылевых частиц в плазме газового разряда.

В данной работе в центре внимания находятся двумерные системы из конечного числа заряженных частиц в параболической ловушке, для которых $\alpha = \beta \ll \gamma$. Такие системы хорошо изучены с точки зрения структурных свойств [26–31]. Им присуща пространственная неоднородность, проявляющаяся в монотонном убывании плотности частиц с увеличением радиального расстояния как $n(r) = a - br^2$ [30]. Следовательно, среднее межчастичное расстояние $\Delta_{local}(r) \propto n^{-1/2}(r)$ в таких системах, наобо-

рот, увеличивается от центра системы к ее краю. В работах [26, 27] подчеркивается, что структурная неоднородность системы заряженных частиц связана как с наличием удерживающей ловушки, так и с экранировкой ($\kappa \neq 0$) потенциала взаимодействия.

В работе [32] предлагается локальный подход к описанию динамических свойств пространственно-неоднородных систем заряженных частиц в удерживающей ловушке. Показано, что амплитуда тепловых колебаний частиц увеличивается от центра структуры к ее краю. Также в работе [32] обсуждается неоднородность пространственного распределения температуры плавления: отдельные области системы плавятся при различных температурах. Делается вывод, что в таких системах может наблюдаться сосуществование двух фаз: твердой в центре системы и жидкой на периферии. Это происходит из-за того, что от центра к периферии амплитуда тепловых колебаний частиц растет быстрее, чем среднее межчастичное расстояние. Отношение этих двух параметров определяет величину параметра Линдемманна, что в первом приближении и указывает на неоднородный характер процесса плавления. Позднее в работе [33] показано, что влияние неустойчивости связанных мод может привести к диаметрально противоположному эффекту: сначала плавится центральная часть квазидвумерной структуры, а затем периферия.

Наряду с амплитудными свойствами исследуются и спектральные характеристики систем из конечного числа заряженных частиц в ловушке [34, 35]. В работах [34, 35] для исследования спектральных свойств систем применяется метод анализа нормальных мод. Он позволяет получить информацию о колебательных модах и сравнить колебательные процессы между системой из конечного числа частиц и однородной системой в периодических граничных условиях. В работе [34] проведен анализ спектров колебаний частиц в системе из конечного числа частиц и приведено замечание, что существует некоторая максимальная частота колебаний частиц, ограничивающая спектр колебаний. Это ограничение частоты колебаний частиц в системе связано с числом частиц и, соответственно, с размером системы. В работе [35] показано, что колебания частиц в таких системах можно разделить на колебательные процессы, имеющие сходство с волнами сжатия и волнами сдвига в «бесконечных» юкавовских системах. Отметим, что в работах [34, 35] анализ нормальных мод проведен для систем из малого числа заряженных частиц и не было уделено достаточно

внимания влиянию неоднородности пространственных свойств систем в ловушке на их динамические свойства. В настоящем же исследовании проводится анализ нормальных мод с целью установления влияния неоднородности пространственных свойств таких систем на их динамические свойства.

Изучение влияния неоднородности пространственных свойств на динамические свойства могло бы быть полезным для описания некоторых экспериментальных результатов. К примеру, в экспериментальных работах [36–38] из плазменно-пылевой структуры выделяется центральная область, свойства которой далее описываются с помощью численного моделирования в периодических граничных условиях. Заметим, что, несмотря на обилие работ, в которых используется данный подход, вопрос обоснованности его применения все еще нельзя считать закрытым [39–41].

Настоящая статья построена следующим образом. В разд. 2 подробно описываются рассматриваемая модель, методика исследования и локальный подход к изучению динамических свойств системы из конечного числа частиц в ловушке. В разд. 3 динамические свойства конечной системы рассматриваются в низкотемпературном квазигармоническом приближении с помощью метода анализа нормальных мод. Показано, что в зависимости от частоты колебательные процессы локализуются в различных областях системы. В разд. 4 исследуются динамические свойства системы из конечного числа заряженных частиц в ловушке с помощью метода молекулярной динамики, поскольку данный метод, в отличие от метода анализа нормальных мод, эффективен при большом числе частиц в системе и применим в широком диапазоне температур. Наблюдается совпадение результатов расчета динамических свойств в разд. 3 и 4. Показана неоднородность динамических свойств и предложены методы их расчета. В разд. 5 проводится сравнительный анализ динамических свойств «конечных» и «бесконечных» структур. В рассмотрении участвуют набор систем из конечного числа заряженных частиц в ловушке и набор однородных систем заряженных частиц в периодических граничных условиях (ПГУ). Набор систем в ловушке состоит из нескольких пространственно-неоднородных структур с совпадающим межчастичным расстоянием в центре и различным числом частиц. Набор систем в ПГУ состоит из нескольких однородных структур с совпадающей плотностью частиц и также различным числом частиц. Проводится сравнение спектров тепловых колебаний частиц в

неоднородных «конечных» и однородных «бесконечных» системах. Обнаружено различие в амплитудах тепловых колебаний частиц в центральной квазиоднородной подсистеме конечной структуры и однородной системе в ПГУ при совпадении их плотностей вплоть до числа частиц $N = 10^5$ в обеих системах.

2. ОПИСАНИЕ МОДЕЛИ И ЛОКАЛЬНОГО ПОДХОДА К РАСЧЕТУ ДИНАМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ КОНЕЧНОЙ СИСТЕМЫ

В настоящей работе с помощью численного метода, аналогичного методу классической молекулярной динамики, моделируется двумерная система одноименно заряженных частиц, взаимодействующих по экранированному кулоновскому потенциалу (1) и находящихся в поле параболической электростатической ловушки (2). Моделирование проводится с применением пакета LAMMPS. Полная потенциальная энергия системы записывается следующим образом:

$$E = 0.5\alpha \sum_{i=1}^N (x_i^2 + y_i^2) + \sum_{i=1}^N \sum_{i>j}^N \frac{Q^2}{r_{ij}} \exp(-\kappa r_{ij}), \quad (3)$$

где $\alpha = 0.09$ ед. СГСЭ, $N = 500$ частиц, $Q = 5000e$, $\kappa = 100 \text{ см}^{-1}$. Численное интегрирование уравнений движения выполняется с применением алгоритма Верле с шагом по времени $\tau = 10^{-5}$ с. Система подготавливается в мягком термостате Нозе–Гувера с температурой $T = 300$ К и параметром релаксации $T_{damp} = 1000\tau$ в течение $5 \cdot 10^6$ шагов. После релаксации системы происходит расчет интересных характеристик в течение 10^6 шагов, мягкий термостат при этом остается включенным. Рассчитанные характеристики усредняются более чем по нескольким идентичным статистически независимым структурам. Контроль сходимости рассчитываемых характеристик проводится по зависимости усредненной величины от времени усреднения.

Для реализации метода анализа нормальных мод в разд. 3 используется динамическая матрица, полученная численно для исследуемой методом молекулярной динамики структуры с помощью пакета LAMMPS. Выражение для расчета динамической матрицы имеет вид

$$\hat{E}_{\alpha,\beta,i,j} = \frac{\partial^2 E}{\partial r_{\alpha,i} \partial r_{\beta,j}}, \quad (4)$$

где $\alpha, \beta = \{x, y\}$, т.е. $r_{\alpha,i}$ обозначает координату x или y частицы с номером i из моделирования, а диф-

ференцируемая величина E — полная потенциальная энергия системы (3). Затем с применением собственного программного кода происходит поиск собственных чисел и векторов динамической матрицы. Полученные характеристики усредняются по статистически независимым структурам.

В рамках численного моделирования в разд. 4 конечные системы заряженных частиц в ловушке рассматриваются с применением локального подхода. В структуре выделяются области, такие что в них плотность частиц приблизительно постоянна, а число частиц достаточно велико для проявления подсистемой макроскопических свойств. Целесообразность такого подхода заключается в том, что во многих классах систем из конечного числа частиц (например, пылевая плазма, коллоидные системы) наблюдается наличие зависимости плотности частиц от радиального расстояния. В силу цилиндрической симметрии рассматриваемой в данной работе системы, в качестве описанных выше областей в ней можно выделить кольца, в которых число частиц велико, и плотность частиц близка к постоянной. Характерное разделение исследуемой структуры на кольца можно видеть на рис. 1 А. В настоящей работе сравниваются характеристики, усредненные по всем частицам в указанных подсистемах. Также в настоящей работе в разд. 5 соотносятся свойства выделенных цветом квазиоднородных подсистем конечной системы со свойствами однородной системы в периодических граничных условиях с совпадающей плотностью (см. рис. 1 В). Рассматриваемая в работе структура из 500 частиц имеет радиус $R_0 \approx 0.15$ см. Разбиение системы на кольцевые фрагменты проводится с учетом неоднородности радиального профиля плотности частиц в системе [26, 27]. Принцип выбора границ разбиения показан на рис. 2. Во фрагментах находится приблизительно следующее число частиц: I — 200, II — 150, III — 100, IV — 50.

3. АНАЛИЗ ДИНАМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ СИСТЕМ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ В ЛОВУШКЕ В НИЗКОТЕМПЕРАТУРНОМ КВАЗИГАРМОНИЧЕСКОМ ПРИБЛИЖЕНИИ

В настоящей работе применяется метод анализа нормальных мод для исследования динамических свойств системы заряженных частиц в ловушке в рамках низкотемпературного квазигармонического приближения. Метод анализа нормальных мод используется для нахождения собственных частот и

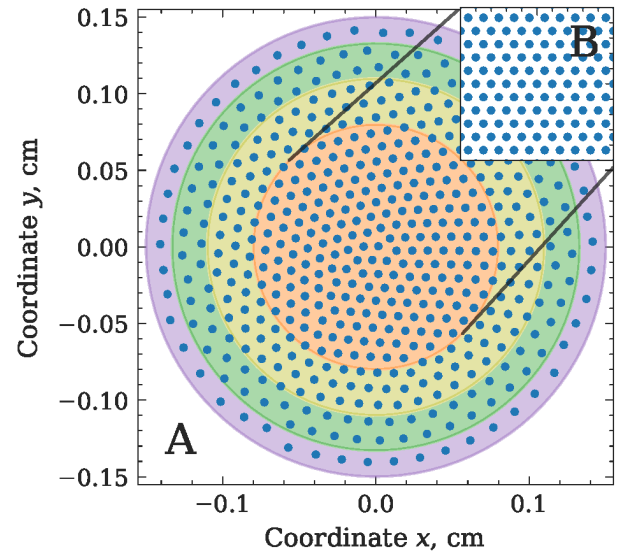


Рис. 1. В конечной двумерной системе мысленно выделяются кольца, в каждое из которых входит подсистема с постоянной плотностью и числом частиц $N \gg 1$ (А). В разд. 5 каждому такому кольцу конечной структуры (А) ставится в соответствие однородная система в периодических граничных условиях с совпадающей плотностью (В)

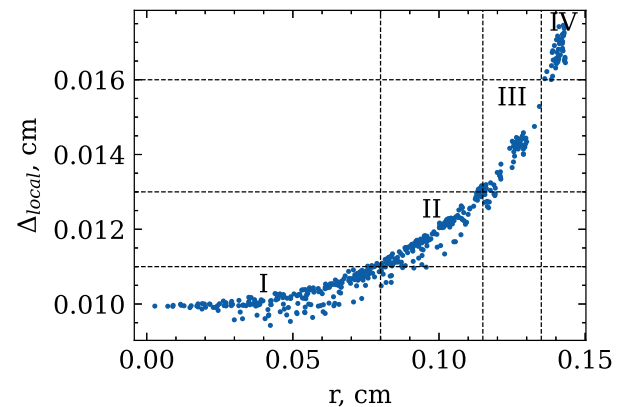


Рис. 2. Радиальный профиль межчастичного расстояния $\Delta_{local}(r)$. Штриховыми линиями обозначено разбиение системы на кольцевые фрагменты в локальном подходе

векторов колебаний частиц в различных модах. Всего в произвольной системе из N частиц существует $\mathbb{D}N$ нормальных мод, где $\mathbb{D} = 2$ — размерность пространства. Из $\mathbb{D}N$ нормальных мод f_{trans} мод соответствуют поступательному движению центра масс системы, f_{rot} мод соответствуют вращению системы как целого. В рассматриваемом в работе двумерном случае $f_{trans} = 2, f_{rot} = 1$. Таким образом, в двумерной системе из N частиц наблюдается $2N - 3$ нормальных колебательных мод. Поступательные и

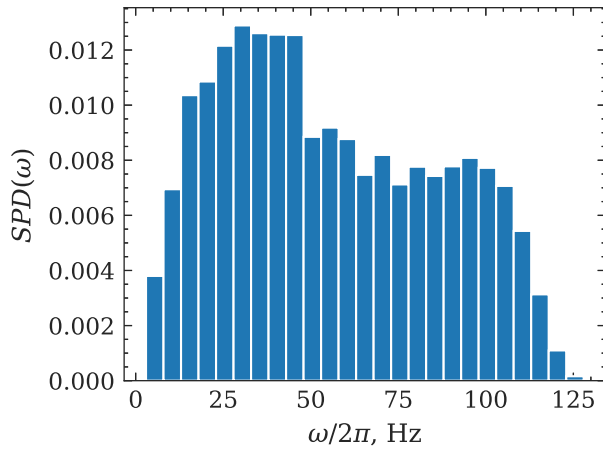


Рис. 3. Спектральная плотность энергии колебаний частиц $SPD(\omega)$ в системе из конечного числа заряженных частиц в ловушке. Наблюдается ограничение спектра максимальной частотой колебаний частиц $\omega_{max}/2\pi \approx 125$ Гц

вращательные моды исключаются из рассмотрения в данной работе, поскольку именно колебательные моды представляют интерес.

Нормальные частоты и направления колебаний частиц могут быть найдены как собственные числа и векторы динамической матрицы \hat{E} (4) [42]. При расчете динамической матрицы используются координаты всех частиц системы, т.е. локальный подход в данном разделе не применяется.

В результате анализа нормальных мод получены частоты колебаний частиц в системе ω^m (m — номер моды), которые представлены на рис. 3 в виде спектра колебаний частиц. Спектр колебаний, полученный таким образом из анализа нормальных мод, принято называть спектральной плотностью энергии ($SPD(\omega)$) [35]. Диапазон частот, проявляющихся в спектре колебаний частиц, может быть оценен из структурных характеристик системы. В кристалле могут распространяться колебательные процессы с длиной волны из диапазона от $2\Delta_0$ до $2D_0$, где Δ_0 — межчастичное расстояние, D_0 — линейный размер системы. В таком случае максимальная частота колебаний частиц ω_{max} в спектре $SPD(\omega)$ зависит от числа частиц в системе и определяется минимальным межчастичным расстоянием Δ_{local}^{min} , о чем упоминается в том числе в работе [34]. Связь максимальной частоты и минимального межчастичного расстояния может быть в первом приближении оценена из закона дисперсии, который хорошо изучен для однородной системы Юкавы как в длинноволновом, так и в коротковолновом пределе [43, 44].

Собственный вектор колебания $\mathbf{u}^{m,p}$ показывает направление и безразмерную амплитуду смещения данной частицы \mathbf{p} в моде колебаний m . Длину собственного вектора можно понимать как количественное описание того, насколько энергично частица участвует в данной моде колебаний. На рис. 4А–С положения точек соответствуют координатам частиц в конечной структуре, а яркость точек отражает величину собственного вектора колебания частиц в данной моде колебаний. Таким образом, рис. 4А–С изображает пространственное распределение приведенной к безразмерному виду амплитуды колебаний частиц в различных модах. На рис. 4D–F показан радиальный профиль амплитуды собственного вектора колебаний частиц в различных модах, полученный из соответствующих графиков на рис. 4А–С. Согласно рис. 4, при увеличении частоты моды колебаний колебания локализуются в области с большей плотностью (в рассматриваемой системе — в центре). Этот результат дополняет вывод, сделанный ранее по спектральной плотности энергии (рис. 3): колебания наивысшей доступной частоты ω_{max} тесно связаны с минимальным расстоянием между частицами в системе.

Из работ [26, 27] известна связь среднего межчастичного расстояния с расстоянием до центра структуры:

$$\Delta_{local} \propto n^{-1/2}(r) = \sqrt{\frac{1}{a - br^2}}, \quad (5)$$

где a, b — коэффициенты, определяемые параметрами системы. Следовательно, имеется тесная связь между максимальной частотой колебаний частицы в системе и расстоянием от данной частицы до центра. На рис. 5 показано, что максимальная доступная частицам частота колебаний ω_{max} уменьшается от центра к краю системы. Таким образом, происходит локализация колебаний высокочастотных мод в центре конечной системы.

Согласно стандартной формулировке метода анализа нормальных мод, амплитуда собственного вектора $\mathbf{u}^{m,p}$ приведена к безразмерному виду таким образом, что $\sum_m |\mathbf{u}^{m,p}|^2 = 1$. В случае, когда частицы испытывают тепловые колебания при произвольной температуре T , амплитуда этих колебаний может быть получена путем перенормировки суммарной длины собственных векторов $\mathbf{u}^{m,p}$ на абсолютную температуру по шкале Кельвина [45]. В результате имеем выражение для амплитуды тепловых колебаний частицы \mathbf{p} в конечной системе:

$$A^p = \left| \sum_m \tilde{\mathbf{u}}^{m,p} \right| = \left| \sum_m \sqrt{\frac{\mathbb{D}k_B T^p}{M}} \frac{1}{\omega^m} \mathbf{u}^{m,p} \right|, \quad (6)$$

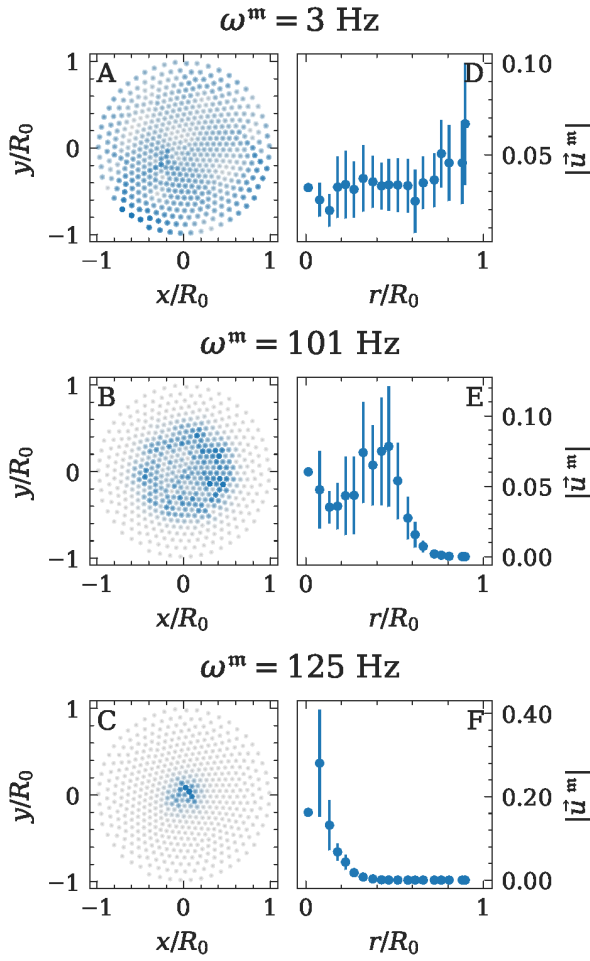


Рис. 4. Распределение длин собственных векторов колебаний всех частиц в конечной системе в трех различных модах колебаний m , соответствующих частотам колебаний $\omega^m/2\pi = \{3, 101, 125\}$ Гц. На рис. А–С показано распределение амплитуды собственного вектора каждой частицы по структуре. Чем ярче изображена точка, тем больше длина собственного вектора колебания соответствующей частицы в данной моде. На рис. D–F показана зависимость длины собственного вектора частицы от радиального расстояния, соответствующая графикам А–С для данной моды колебаний. Расстояния нормированы на радиус системы R_0

где \mathbb{D} — размерность пространства, k_B — постоянная Больцмана, M — масса частицы, а $T^p \equiv T$, поскольку температура в системе постоянна. Суммирование ведется по модам $m = \{f_{trans} + f_{rot} + 1, \dots, \mathbb{D}N\}$. Таким образом, из суммирования исключаются поступательные и вращательные моды, присутствующие среди решений задачи на собственные значения динамической матрицы (4). Радиальный профиль амплитуды тепловых колебаний частиц в системе, по-

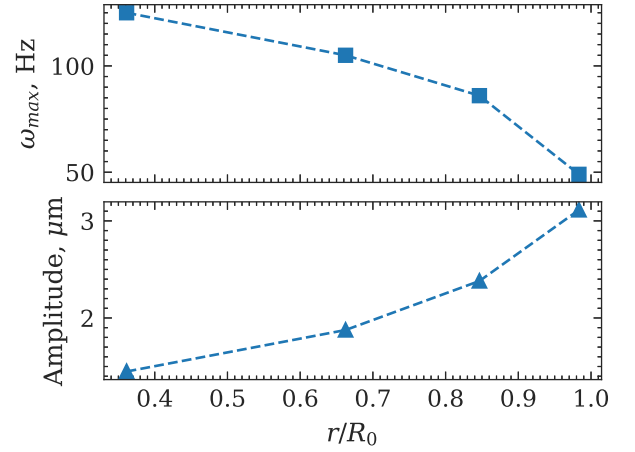


Рис. 5. Сверху показан нормированный на радиус системы R_0 радиальный профиль максимальной частоты колебаний частиц в системе ω_{max} — частоты, которой ограничен спектр на рис. 3. Снизу показан нормированный таким же образом радиальный профиль амплитуды тепловых колебаний частиц в системе, рассчитанной методом анализа нормальных мод с помощью формулы (6). Штриховые линии проведены для наглядности

лученный из анализа нормальных мод, показан на рис. 5: амплитуда тепловых колебаний в квазигармоническом приближении увеличивается от центра к краю системы. Этот результат согласуется с работой [32], где амплитуда тепловых колебаний заряженных частиц в ловушке рассчитана с применением метода классической молекулярной динамики.

4. ИССЛЕДОВАНИЕ ДИНАМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ СИСТЕМ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ В ЛОВУШКЕ В РАМКАХ ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

В численном моделировании, аналогичном методу классической молекулярной динамики, система из конечного числа заряженных частиц рассматривается в рамках описанного в разд. 2 локального подхода. Численное моделирование позволяет исследовать систему из значительно большего числа частиц и в более широком диапазоне параметров, чем метод анализа нормальных мод, примененный в разд. 3. В каждом выделенном кольце конечной системы (см. рис. 1) рассчитывается автокорреляционная функция скорости (АКФС):

$$VACF(t) = \frac{\langle \mathbf{v}_i(0) \cdot \mathbf{v}_i(t) \rangle_i}{\langle (\mathbf{v}_i(0))^2 \rangle_i}, \quad (7)$$

где $\mathbf{v}_i(t)$ — скорость частицы i в момент времени t , а усреднение ведется по частицам в равно-

весном ансамбле. Затем в каждом кольце вычисляется плотность колебательных состояний частиц $\text{VDOS}(\omega)$ путем применения преобразования Фурье к АКФС [46]:

$$\text{VDOS}(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \text{VACF}(t) \exp(-i\omega t) dt. \quad (8)$$

Сравнение плотности колебательных состояний $\text{VDOS}(\omega)$ со спектральной плотностью энергии $\text{SPD}(\omega)$ при различных значениях температуры можно видеть на рис. 6. Частоты на рис. 6 нормированы на среднее значение «плазменно-пылевой» частоты $\tilde{\omega}_{pd} = \sqrt{Q^2/(M\langle\Delta_{local}\rangle^3)}$, где Q — электрический заряд частицы, M — ее масса, а $\langle\Delta_{local}\rangle = 1/\sqrt{N/S} = \sqrt{\pi R_0^2/N}$ — среднее межчастичное расстояние в системе, S — площадь структуры. Спектры колебаний частиц $\text{VDOS}(\omega)$ и $\text{SPD}(\omega)$ имеют схожий вид: наблюдаются два характерных пика. При этом наилучшее соответствие VDOS и SPD наблюдается в низкочастотной области спектра. Отметим, что при обоих значениях температур спектры SPD трудно различимы. Спектры VDOS , напротив, при разных температурах различаются значительно. Это связано с тем, что метод анализа нормальных мод не выходит за рамки квазигармонического приближения, а результаты его применения определяются силовыми константами и положениями частиц, т.е. зависят от структурных характеристик. Спектр VDOS , в свою очередь, получен напрямую из расчета динамики частиц, поэтому позволяет более точно описать вид спектра колебаний частиц в широком диапазоне температур.

На рис. 7 показаны спектры колебаний частиц $\text{VDOS}(\omega)$ в различных кольцах конечной системы. Частоты нормированы на среднее значение «плазменно-пылевой» частоты $\tilde{\omega}_{pd}$. Наблюдается ограничение максимальной частоты спектра колебаний частиц величиной ω_{max} . Значение ω_{max} уменьшается с увеличением межчастичного расстояния.

Спектры колебаний частиц $\text{VDOS}(\omega)$ в различных кольцах конечной системы могут быть нормированы на локальную величину эйнштейновской частоты ω_E^{local} , которая зависит от локального значения межчастичного расстояния Δ_{local} . Для нормировки используются результаты расчета эйнштейновской частоты для однородных юкавовских систем из работы [47]. На рис. 8 показаны спектры колебаний частиц в различных кольцах конечной системы с описанной нормировкой на величину ω_E^{local} . При такой нормировке спектры ограничи-

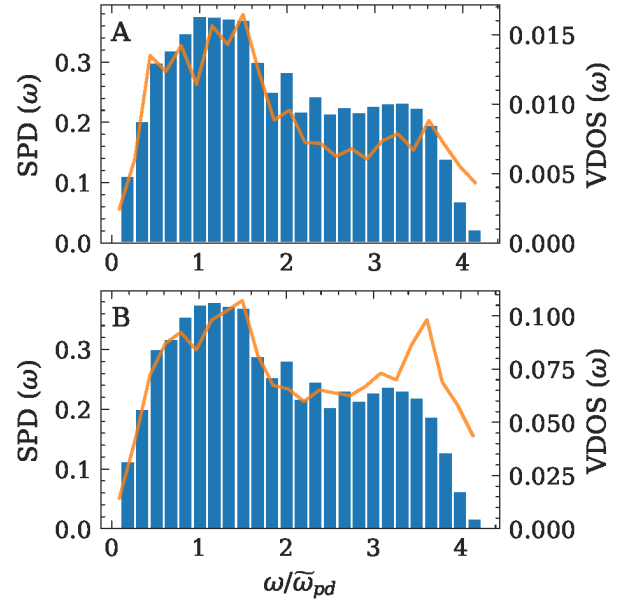


Рис. 6. Сравнение спектров колебаний всех частиц в конечной системе $\text{SPD}(\omega)$ (рис. 3) и $\text{VDOS}(\omega)$ (формула (8)) при двух значениях температуры: $\rightarrow T = 100$ K (A) и 300 K (B). Частоты нормированы на $\tilde{\omega}_{pd}$. Наблюдается схожесть положения характерных пиков, в особенности низкочастотного. Однако можно видеть различное поведение спектров в высокочастотной части. Видимая непрерывность спектров связана только со сглаживанием исходных дискретных спектров для наглядности

ваются приблизительно на одной и той же частоте ω_{max} , которая может быть оценена как

$$\omega_{max} \approx C\omega_E^{local}, \quad (9)$$

где величина C не зависит от радиального расстояния.

Радиальный профиль максимальной частоты ω_{max} в различных безразмерных единицах представлен на рис. 9. Отметим, что величина C из выражения (9) приблизительно равна 1.5 в рассматриваемой в работе структуре. Величина $\tilde{\omega}_E$ — среднее значение эйнштейновской частоты, рассчитанное для среднего значения межчастичного расстояния $\langle\Delta_{local}\rangle$ с использованием выражения из работы [47]. Причины ограничения максимальной частоты спектра обсуждаются в разд. 3 — величина максимальной частоты ω_{max} тесно связана с межчастичным расстоянием в кольце и, соответственно, с радиальным расстоянием. Таким образом, неоднородность спектра колебаний частиц, определяющего динамические свойства системы, напрямую связана с неоднородностью структурных характеристик.

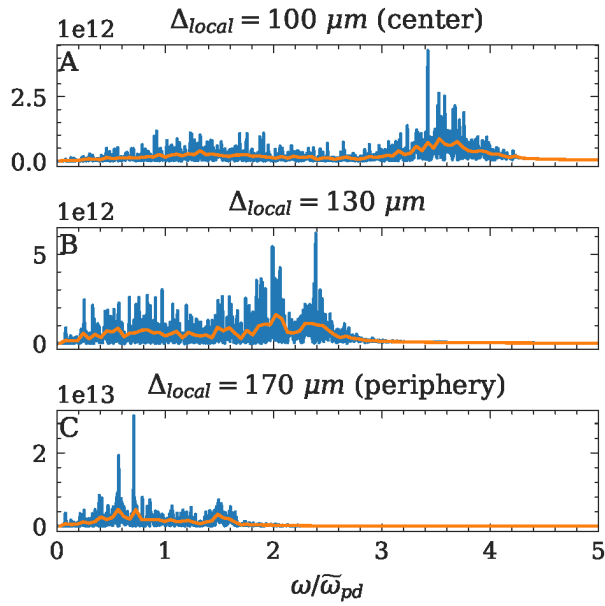


Рис. 7. (В цвете онлайн) Спектр колебаний частиц VDOS(ω) в областях конечной системы (синим цветом): центральной (А), промежуточной (В) и периферийной (С). Частоты нормированы на среднее значение «плазменно-пылевой» частоты $\tilde{\omega}_{pd}$. Спектры ограничены величиной максимальной частоты $\omega_{max}/\tilde{\omega}_{pd}$, которая уменьшается с увеличением межчастичного расстояния. Оранжевой линией соответствует сглаженный для наглядности спектр

Как было отмечено выше, спектр колебаний частиц на рис. 6 состоит из двух пиков. Это можно связать с тем, что в структуре происходят колебательные процессы двух принципиально разных типов, которые можно сравнить с волнами сдвига (низкочастотный пик) и сжатия (высокочастотный пик) в «бесконечных» системах [35]. Сглаженные спектры на рис. 7 наглядно показывают, что наличие двух пиков в спектре выделенной подсистемы наблюдается при любом разбиении системы на кольца. Сохранение двух пиков в спектре колебаний позволяет сделать вывод о том, что на качественном уровне спектральные характеристики можно сопоставлять с бесконечным юкавовским кристаллом не только в конечной структуре целиком, но и в ее отдельных областях.

Амплитуда тепловых колебаний частиц может быть рассчитана по спектру колебаний частиц с применением низкотемпературного приближения теории динамики кристаллической решетки в каждом отдельном кольце конечной системы:

$$\langle u^2 \rangle = \frac{\mathbb{D}k_B T}{M} \left\langle \frac{1}{\omega^2} \right\rangle, \quad (10)$$

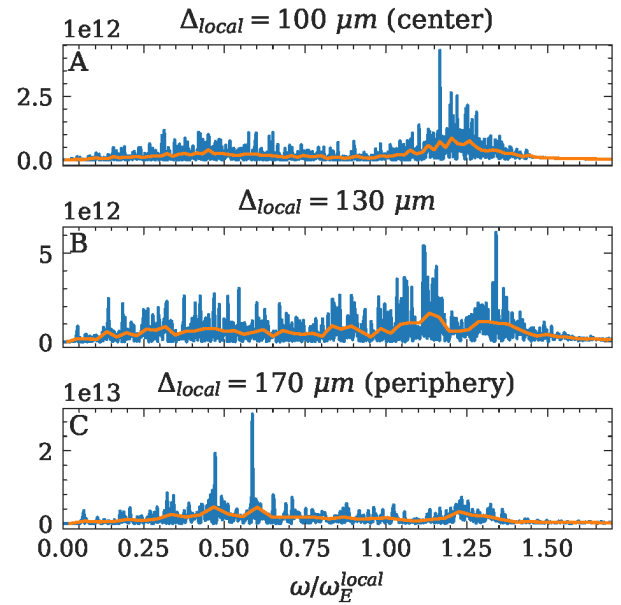


Рис. 8. (В цвете онлайн) Спектр колебаний частиц VDOS(ω) в областях конечной системы (синим цветом): центральной (А), промежуточной (В) и периферийной (С). Частоты нормированы на локальное значение эйнштейновской частоты ω_E^{local} . Спектры ограничены величиной максимальной частоты $\omega_{max}/\omega_E^{local}$, которая не зависит от радиального расстояния. Оранжевой линией соответствует сглаженный для наглядности спектр

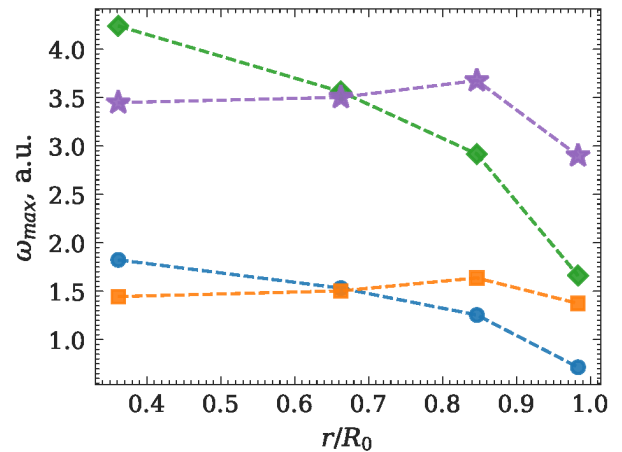


Рис. 9. (В цвете онлайн) Приведенный к безразмерному виду радиальный профиль наивысшей доступной частоты колебаний частиц ω_{max} (см. рис. 5). Оранжевыми квадратами (■) обозначена величина $\omega_{max}/\omega_E^{local}$. Синими кругами (●) обозначена величина $\omega_{max}/\tilde{\omega}_E$. Фиолетовыми звездами (★) обозначена величина $\omega_{max}/\tilde{\omega}_{pd}$. Зелеными ромбами (◆) обозначена величина $\omega_{max}/\tilde{\omega}_{pd}$. Штриховые линии проведены для наглядности

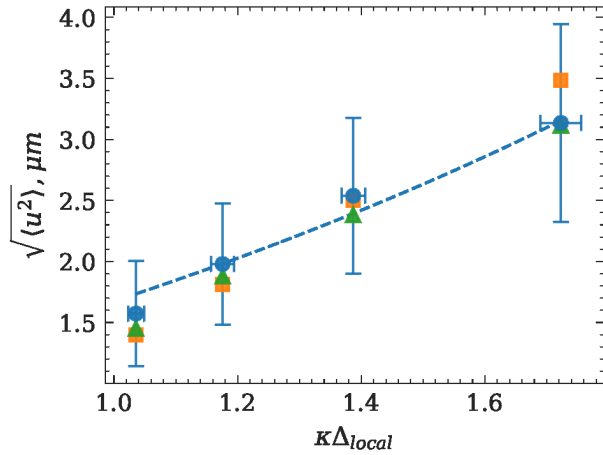


Рис. 10. Зависимости амплитуды тепловых колебаний частиц в конечной системе от безразмерного параметра экранирования $\kappa\Delta_{local}$. Круги (●) соответствуют RMSD (12), квадраты (■) соответствуют теоретической формуле (10), треугольники (▲) обозначают результаты анализа нормальных мод (6). Штриховая линия соответствует аппроксимации $\langle u^2(r) \rangle \propto \Delta_{local}(r) \exp(\kappa\Delta_{local}(r))$ из работы [32]

где используется величина $\langle 1/\omega^2 \rangle$, полученная по спектру колебаний согласно следующему выражению [48, 49]:

$$\left\langle \frac{1}{\omega^2} \right\rangle = \frac{\int \text{VDOS}(\omega)\omega^{-2} d\omega}{\int \text{VDOS}(\omega) d\omega}. \quad (11)$$

В некоторых случаях может быть более удобно провести расчет амплитуды тепловых колебаний как среднеквадратического отклонения частиц от их положений равновесия:

$$\langle u_i \rangle = \sqrt{\langle (\mathbf{r}_i(t) - \langle \mathbf{r}_i \rangle_t)^2 \rangle}. \quad (12)$$

Результаты расчетов амплитуды тепловых колебаний заряженных частиц в ловушке, проведенных по формулам (6), (10) и (12), представлены на рис. 10. Показана неоднородность радиального профиля амплитуды тепловых колебаний. Наблюдается согласие предложенных методов расчета амплитуды тепловых колебаний как между собой, так и с теоретической оценкой из работы [32]:

$$\langle u^2(r) \rangle \propto \Delta_{local}(r) \exp(\kappa\Delta_{local}(r)). \quad (13)$$

5. СРАВНЕНИЕ ДИНАМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ КОНЕЧНЫХ И БЕСКОНЕЧНЫХ СИСТЕМ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ

С помощью приведенных в разд. 2 и 4 методов можно исследовать не только системы из конечного

числа частиц в ловушке, но и однородные системы в периодических граничных условиях.

Предлагаемый локальный подход к описанию конечных систем позволяет сравнить с точки зрения динамических свойств различные области конечной системы с соответствующими им по плотности однородными системами в ПГУ. Структура из конечного числа частиц мысленно разбивается на участки с близкой к постоянной плотностью частиц. Каждая из полученных таким образом квазиоднородных подсистем сравнивается с однородной структурой в ПГУ (см. рис. 1). Это позволяет сделать выводы о границах применимости подхода к описанию конечных структур, который заключается в переносе хорошо изученных свойств систем в ПГУ на близкую к однородной внутреннюю область структур из конечного числа частиц.

5.1. Сравнение спектров колебаний частиц

На рис. 11 показан результат применения локального подхода к сравнению спектров колебаний частиц в конечной системе в ловушке со спектрами соответствующих по плотности однородных систем в ПГУ.

Особенности спектров колебаний частиц в конечной системе уже подробно описаны в разд. 3 и 4. В данном разделе мы отметим особенности спектров, проявляющиеся при сравнении систем из конечного числа частиц и однородных бесконечных систем в ПГУ.

Как в конечных структурах, так и в «бесконечных» системах спектр колебаний частиц ограничивается предельной частотой, причем величины ω_{max} имеют близкие друг к другу значения в обеих системах при одинаковом межчастичном расстоянии. Этот результат еще раз подчеркивает вывод о том, что максимальная частота колебаний частиц определяется минимальным межчастичным расстоянием в системе.

5.2. Сравнение амплитуд колебаний частиц

В настоящем разделе рассматриваются (а) центральная часть системы из конечного числа частиц и (б) система в ПГУ при той же плотности частиц. Двумерная постановка задачи требует исследования влияния числа частиц на величину амплитуды тепловых колебаний частиц, поскольку в двумерных системах наблюдается логарифмическая расходимость амплитуды тепловых колебаний по числу частиц [50–52]. Также отметим, что существенным

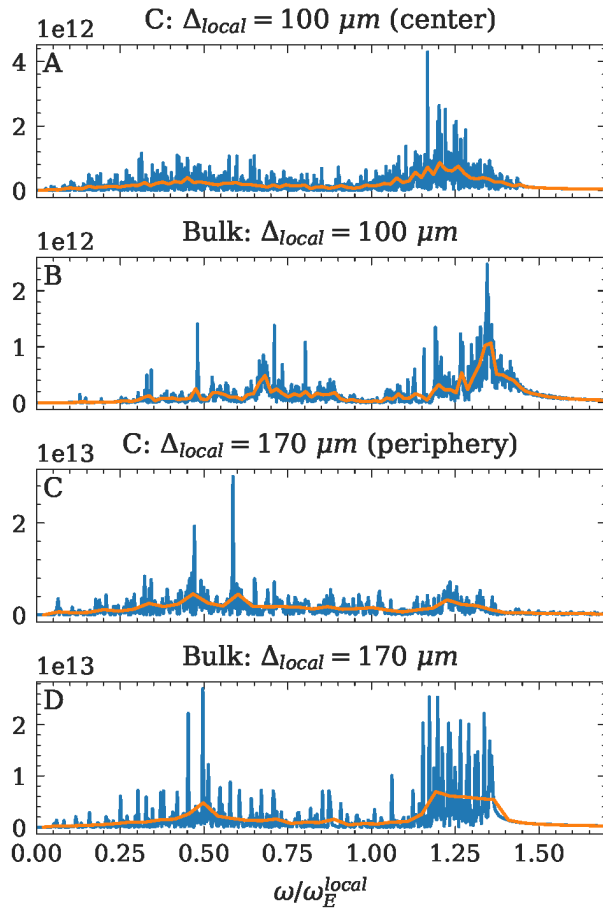


Рис. 11. (В цвете онлайн) Спектры колебаний частиц в выделенных подсистемах конечной системы (соответствуют буквам А, С) и соответствующих по плотности однородных системах (соответствуют буквам В, D). Частоты нормированы на локальное значение эйнштейновской частоты ω_E^{local} . Спектры ограничены величиной максимальной частоты $\omega_{max}/\omega_E^{local}$. Спектр выделенной подсистемы с постоянной плотностью ограничивается приблизительно на той же частоте, что и соответствующая однородная система в ПГУ. Оранжевой линии соответствует сглаженный для наглядности спектр

отличием конечной системы от системы в ПГУ является отсутствие в последней удерживающей ловушки. В данном разделе проводится сравнение амплитуд тепловых колебаний частиц в близкой к однородной центральной области системы в ловушке и в системе в ПГУ.

Вопрос сравнения свойств конечной системы в ловушке и системы в ПГУ поднимался ранее [35, 53, 54]. В работе [54] отмечено, что конечноразмерные эффекты в двумерной системе становятся незначительными с точки зрения влияния на структурные свойства при числе частиц в системе $N > 50$. При

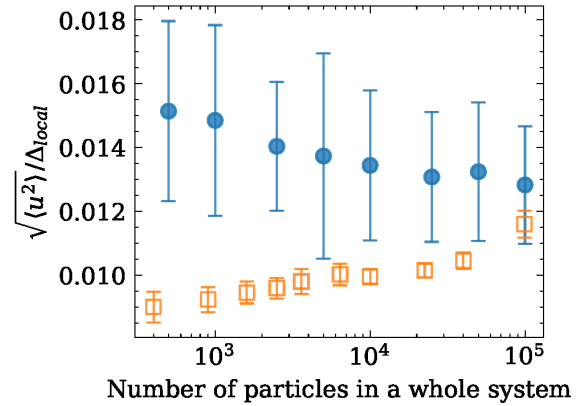


Рис. 12. Зависимость параметра Линдемманна $\sqrt{\langle u^2(r) \rangle} / \Delta_{local}$ от полного числа частиц в системе. Каждая точка соответствует отдельной системе. Закрашенные символы (●) соответствуют центральной области конечных систем в ловушке, светлые (□) — однородным структурам в ПГУ

этом в центре конечной системы наблюдается гексагональная решетка, аналогичная решетке в структуре в периодических граничных условиях. В работе [53] сравнение конечной системы с системой в ПГУ проводится не только с точки зрения структурных свойств, но и с точки зрения упругих характеристик, в частности, модуля упругости. Выдвинуто предположение о том, что при числе частиц больше 3200 внутренняя область системы из конечного числа частиц может описываться с помощью теоретических представлений, существующих для систем в ПГУ. Этот результат получен для значений параметра экранировки потенциала из диапазона $0.2 < \kappa \Delta_{local} < 0.5$. В работе [35] отмечено сходство спектров колебаний частиц в конечной системе и в системе в ПГУ. Показано наличие в конечной системе колебательных процессов, аналогичных волнам сжатия и сдвига в «бесконечной» системе. Тем не менее полученные в приведенных работах результаты не позволяют разрешить вопрос о возможности переноса динамических свойств систем в ПГУ на конечные структуры в связи с ограниченностью рассмотренного диапазона числа частиц $N \lesssim 10^3$. В приведенных работах также не обсуждается вопрос обеспечения неизменного межчастичного расстояния в центре конечной системы. Этот вопрос имеет принципиальное значение, поскольку при увеличении числа частиц в конечной системе при постоянных Q, κ, α межчастичное расстояние в центральной области структуры монотонно уменьшается, что показано в работах [26, 30]. Таким образом, при увеличении числа частиц требуется уменьшать

параметр ловушки α для обеспечения неизменности межчастичного расстояния в центральной области конечной структуры. При этом влияние ловушки на систему из конечного числа частиц уменьшается, и ее динамические свойства постепенно сходятся к свойствам системы в ПГУ.

На рис. 12 представлена зависимость параметра Линдемманна $\sqrt{\langle u^2 \rangle} / \Delta_{local}$ от полного числа частиц в системе. Величина параметра Линдемманна в конечной системе рассчитывается для центральной области, а в периодических граничных условиях — для всей системы. Как можно видеть из графика, амплитуда тепловых колебаний частиц в системе в ПГУ логарифмически растет с ростом числа частиц. Этот эффект подтверждается результатами работ [50–52]. В то же время амплитуда тепловых колебаний частиц в центре конечной системы монотонно уменьшается с ростом полного числа частиц в структуре. При значении числа частиц $N \approx 10^5$ величина амплитуды тепловых колебаний частиц в конечной системе сравнивается с величиной в системе в ПГУ в пределах ошибки расчета. Отметим, что структуры из 10^5 частиц редко наблюдаются в лабораторных экспериментах [3]. Таким образом, перенос хорошо изученных свойств однородных систем в ПГУ на структуры из конечного числа частиц может приводить к заметным систематическим ошибкам при описании пылевой подсистемы в плазме в условиях лабораторного эксперимента.

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе исследованы динамические свойства двумерной системы из конечного числа взаимодействующих по экранированному кулоновскому потенциалу одноименно заряженных частиц в ловушке: спектры, частоты и амплитуды тепловых колебаний частиц. Система рассматривается при сильной экранировке ($\kappa\Delta \gtrsim 1$).

Методом анализа нормальных мод показано пространственное распределение амплитуд колебаний частиц в различных модах. Сделан вывод о том, что в низкочастотные колебания вовлечены все частицы системы, в то время как высокочастотные колебания локализуются в области с наибольшей плотностью частиц. В рассматриваемой двумерной системе в параболической ловушке этой области соответствует центральная часть структуры.

Для обобщения результатов анализа нормальных мод на более широкий температурный диапазон проведено численное моделирование системы из ко-

нечного числа одноименно заряженных частиц в параболической электростатической ловушке методом классической молекулярной динамики. В локальном подходе рассмотрены спектры и амплитуды тепловых колебаний частиц. Показано, что от центра к краю структуры происходит смещение спектра колебаний частиц в низкочастотную область, что связано с увеличением межчастичного расстояния в системе от центра к краю. Неоднородность радиального профиля амплитуды тепловых колебаний частиц продемонстрирована как методом анализа нормальных мод, так и с помощью расчетов методом молекулярной динамики. Результаты расчетов величины амплитуды тепловых колебаний частиц различными методами согласуются друг с другом при низких температурах.

С помощью численного моделирования с применением локального подхода сравнивается центральная подсистема конечной структуры из заряженных частиц в ловушке и соответствующая ей по плотности «бесконечная» однородная система заряженных частиц в периодических граничных условиях. Даже при условии совпадения межчастичных расстояний при числе частиц меньше 10^5 наблюдается различие динамических свойств центральной подсистемы конечной структуры и соответствующей однородной системы в рассматриваемых условиях. Показано, что при малом числе частиц амплитуды тепловых колебаний частиц существенно различны в центре конечной системы в ловушке и в совпадающей с ней по плотности однородной системе в периодических граничных условиях. Таким образом, перенос динамических свойств однородных систем в периодических граничных условиях на системы из конечного и недостаточно большого числа частиц может приводить к ошибкам как при разработке теоретических моделей, так и при обработке экспериментальных результатов.

Финансирование. Работа В. С. Николаева была поддержана грантом Фонда развития теоретической физики и математики «БАЗИС». Работа А. В. Тимофеева поддержана в рамках Программы фундаментальных исследований НИУ ВШЭ.

ЛИТЕРАТУРА

1. H. Yukawa, Proc. Phys.-Math. Soc. Jpn. **17**, 48 (1935).
2. P. Pieranski, Contemp. Phys. **24**, 25 (1983).

3. V. E. Fortov and G. Morfill, *Complex and Dusty Plasmas: From Laboratory to Space*, CRC Press (2009).
4. С. Н. Антипов, Э. И. Асиновский, А. В. Кириллин, С. А. Майоров, В. В. Марковен, О. Ф. Петров, В. Е. Фортов, ЖЭТФ **133**, 948 (2008).
5. D. N. Polyakov, V. V. Shumova, and L. M. Vasilyak, *Surf. Eng. Appl. Electrochem.* **51**, 143 (2015).
6. V. N. Tsytovich, N. G. Gusein-Zade, and A. M. Ignatov, *Plasma Phys. Rep.* **43**, 981 (2017).
7. О. С. Ваулина, Э. А. Саметов, ЖЭТФ **154**, 407 (2018).
8. В. Е. Фортов, В. С. Филинов, А. П. Нефедов, О. Ф. Петров, А. А. Самарян, А. М. Липаев, ЖЭТФ **111**, 889 (1997).
9. В. Ю. Карасев, А. Ю. Иванов, Е. С. Дзलिएва, А. И. Эйхвальд, ЖЭТФ **133**, 460 (2008).
10. М. М. Васильев, Л. Г. Дьячков, С. Н. Антипов, О. Ф. Петров, В. Е. Фортов, *Письма в ЖЭТФ* **86**, 414 (2007).
11. О. С. Ваулина, Е. А. Лисин, А. В. Гавриков, О. Ф. Петров, В. Е. Фортов, ЖЭТФ **137**, 751 (2010).
12. G. I. Sukhinin, A. V. Fedoseev, S. N. Antipov, O. F. Petrov, and V. E. Fortov, *Phys. Rev. E: Stat., Nonlinear, Soft Matter Phys.* **87**, 013101 (2013).
13. D. Samsonov, S. K. Zhdanov, R. A. Quinn, S. I. Popel, and G. E. Morfill, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 255004 (2004).
14. A. M. Ignatov, *Plasma Phys. Rep.* **31**, 46 (2005).
15. А. В. Филиппов, В. В. Решетняк, А. Н. Старостин, И. М. Ткаченко, В. Е. Фортов, *Письма в ЖЭТФ* **110**, 658 (2019).
16. Р. Е. Болтнев, ЖЭТФ **153**, 679 (2018).
17. O. S. Vaulina and X. G. Koss, *Phys. Rev. E* **92**, 042155 (2015).
18. О. С. Ваулина, И. И. Лисина, Е. А. Лисин, ЖЭТФ **148**, 819 (2015).
19. M. O. Robbins, K. Kremer, and G. S. Grest, *J. Chem. Phys.* **88**, 3286 (1988).
20. S. Hamaguchi, R. T. Farouki, and D. H. E. Dubin, *J. Chem. Phys.* **105**, 7641 (1996).
21. S. Hamaguchi, R. T. Farouki, and D. H. E. Dubin, *Phys. Rev. E* **56**, 4671 (1997).
22. D. N. Polyakov, V. V. Shumova, and L. M. Vasilyak, *Plasma Sources Sci. Technol.* **26**, 08LT01 (2017).
23. T. S. Ramazanov, K. N. Dzhumagulova, A. N. Jumabekov, and M. K. Dosbolayev, *Phys. Plasmas* **15**, 053704 (2008).
24. U. Konopka, G. E. Morfill, and L. Ratke, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 891 (2000).
25. D. N. Polyakov, V. V. Shumova, L. M. Vasilyak, and V. E. Fortov, *Phys. Lett. A* **375**, 300 (2011).
26. C. Henning, H. Baumgartner, A. Piel, P. Ludwig, V. Golubnichiy, M. Bonitz, and D. Block, *Phys. Rev. E* **74**, 056403 (2006).
27. C. Henning, P. Ludwig, A. Filinov, A. Piel, and M. Bonitz, *Phys. Rev. E* **76**, 036404 (2007).
28. A. M. Ignatov, *Plasma Phys. Rep.* **46**, 410 (2020).
29. N. P. Kryuchkov, *Phys. Rev. Lett.* **121**, 075003 (2018).
30. H. Totsuji, C. Totsuji, and K. Tsuruta, *Phys. Rev. E* **64**, 066402 (2001).
31. M.G. Hariprasad, P. Bandyopadhyay, G. Arora, and A. Sen, *Phys. Plasmas* **25**, 123704 (2018).
32. V. S. Nikolaev and A. V. Timofeev, *Phys. Plasmas* **26**, 073701 (2019).
33. V. S. Nikolaev and A. V. Timofeev, *Phys. Plasmas* **28**, 033704 (2021).
34. V. A. Schweigert and F. M. Peeters, *Phys. Rev. B* **51**, 7700 (1995).
35. A. Melzer, *Phys. Rev. E* **7**, 016411 (2003).
36. V. Nosenko and J. Goree, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 155004 (2004).
37. Z. Donkó, P. Hartmann, and J. Goree, *Mod. Phys. Lett. B* **21**, 1357 (2007).
38. P. Hartmann, M. C. Sándor, A. Kovács, and Z. Donkó, *Phys. Rev. E* **84**, 016404 (2011).
39. H. C. Lee, D. Y. Chen, and B. Rosenstein, *Phys. Rev. E* **56**, 4596 (1997).
40. H. C. Lee and B. Rosenstein, *Phys. Rev. E* **55**, 7805 (1997).
41. Б. А. КлуMOV, УФН **180**, 1095 (2010).
42. A. Melzer, M. Klindworth, and A. Piel, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 115002 (2001).
43. L. Bonsall and A. A. Maradudin, *Phys. Rev. B* **15**, 1959 (1977).

44. S. H. X. W. S. Nunomura, J. Goree, S. Hu, X. Wang, and A. Bhattacharjee, *Phys. Rev. E* **65**, 066402 (2002).
45. *Normal Mode Analysis: Theory and Applications to Biological and Chemical Systems*, ed. by Q. Cui and I. Bahar, CRC press (2005).
46. P. Vashishta, R. K. Kalia, A. Nakano, and J. P. Rino, *J. Appl. Phys. (Melville, NY, U. S.)* **101**, 103515 (2007).
47. S. Khrapak and B. Klumov, *Phys. Plasmas* **25**, 033706 (2018).
48. D. A. Young and B. J. Alder, *J. Chem. Phys.* **60**, 1254 (1974).
49. S. A. Khrapak, *Phys. Rev. Res.* **2**, 012040 (2020).
50. Л. Д. Ландау, Е.М. Лифшиц, *Теоретическая физика*, т. V, *Статистическая физика*, ч. 1., Наука, Москва (1976).
51. S. Toxværd, *Phys. Rev. Lett.* **51**, 1971 (1983).
52. N. D. Mermin, *Phys. Rev.* **176**, 250 (1968).
53. T. E. Sheridan, *Phys. Plasmas* **14**, 032108 (2007).
54. Yu. Ivanov and A. Melzer, *Phys. Rev. B* **79**, 036402 (2009).