

# ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ САМООРГАНИЗАЦИИ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ В ДВУМЕРНЫХ ПОТЕНЦИАЛАХ С КРУГОВОЙ СИММЕТРИЕЙ

П.И. Глуховцев<sup>2</sup>, Э.Г. Никонов<sup>1,2</sup>, Р.Г. Назмитдинов<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Российская Федерация

<sup>2</sup> Государственный университет «Дубна», г. Дубна РФ

Исследования процессов кристаллизации конечного числа одинаково заряженных частиц в условиях конфайнмента со сферической и круговой симметрией получили в последние годы новый импульс в связи с развитием нанотехнологий. Существуют большие ожидания в возможном применении данных процессов при создании дисплеев нового поколения, перспективной элементной базы нанoeлектроники и новых продуктов биохимии. Настоящая работа посвящена молекулярно-динамическому исследованию условий, при которых происходит возникновение и плавление кристаллизации двумерных систем, состоящих из взаимодействующих посредством сил Кулона заряженных частиц одного сорта, запертых в круговой области с жесткой, непрозрачной границей. В результате моделирования была определена критическая температура  $T_c$ , при которой происходит разрушение равновесной томпсоновской структуры для различных значений числа электронов.

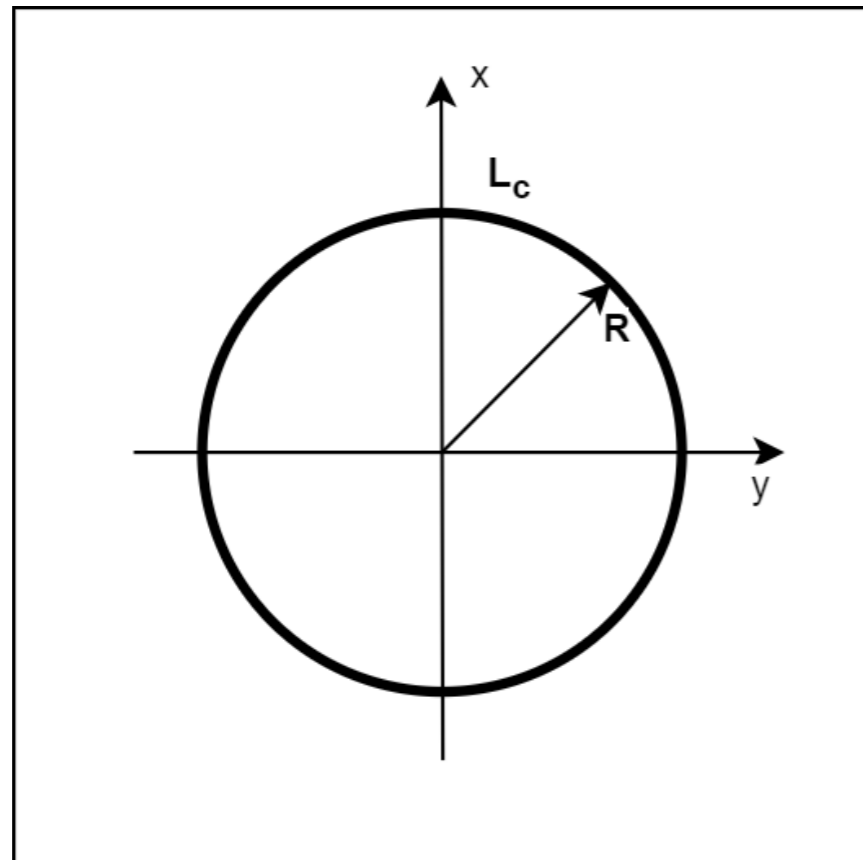


Рис. 1. Область моделирования

## Начальные условия

Моделирование проводилось при начальной температуре системы и термостата  $T, T_0 = 5K$ . Координаты частиц в начальный момент времени заданы внутри окружности в соответствии с нормальным распределением по оси  $x$  и  $y$ . Скорости частиц заданы в соответствии с распределением Максвелла, таким образом что бы квадрат средней скорости соответствовал температуре системы.

## Термостат

Для контроля температуры моделируемой системы использовался термостат **Берендсена**. Термостат Берендсена реализуется в уравнениях движения путем включения в результирующую силу дополнительного переменного нелинейного трения. С начала симуляции температура термостата постепенно уменьшается до близкого к 0K значения, после чего начинается ее постепенное увеличение до разрушения устойчивой структуры.

## Граничные условия

Область моделирования представляет собой внутреннюю часть круга с границей  $L_c = [x^2 + y^2 = R^2]$ , где  $R$  – радиус окружности. На границе  $L_c$  находится жесткий запирающий потенциал

$$V(r) = \begin{cases} 0, & r < R \\ \infty, & r \geq R, \end{cases}$$

где  $r$  – расстояние частицы до центра окружности.

## Потенциалы взаимодействия

Для моделирования процессов взаимодействия заряженных частиц между собой использовался электростатический потенциал  $V_c(\mathbf{r}_{ij}) = \frac{\alpha}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}$  с постоянной  $\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}$ , где  $e=1.6 \cdot 10^{-19}$  Кл – заряд электрона,  $k = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} = 8,98 \cdot 10^9$  Фм<sup>-1</sup> · м – электростатическая постоянная,  $|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$  – расстояние между частицами  $i$  и  $j$ .

## Интегрирование уравнений движения

Численное интегрирование уравнений Ньютона проводилось скоростным методом Верле для  $2 \cdot 10^6$  шагов по времени с величиной временного шага  $\Delta t = 26,25$  фс, что соответствует интервалу 52,5 мкс. Параметр  $\tau_B$  термостата Берендсена принимался равным  $\tau_B = 2,625$  пс

## Результаты моделирования

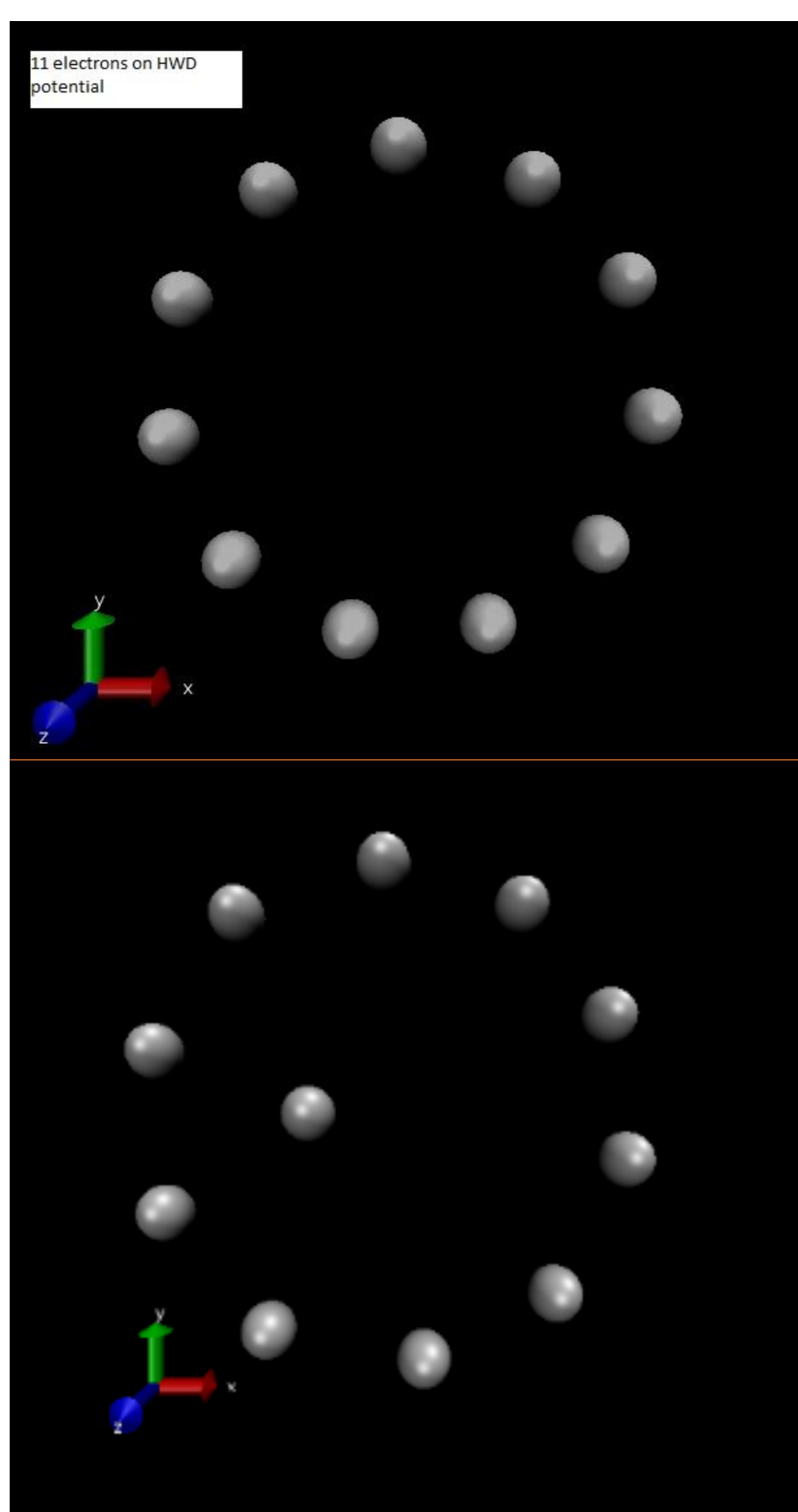


Рис. 2. 11 частиц, критическая температура –  $T_c = 0,339537K$

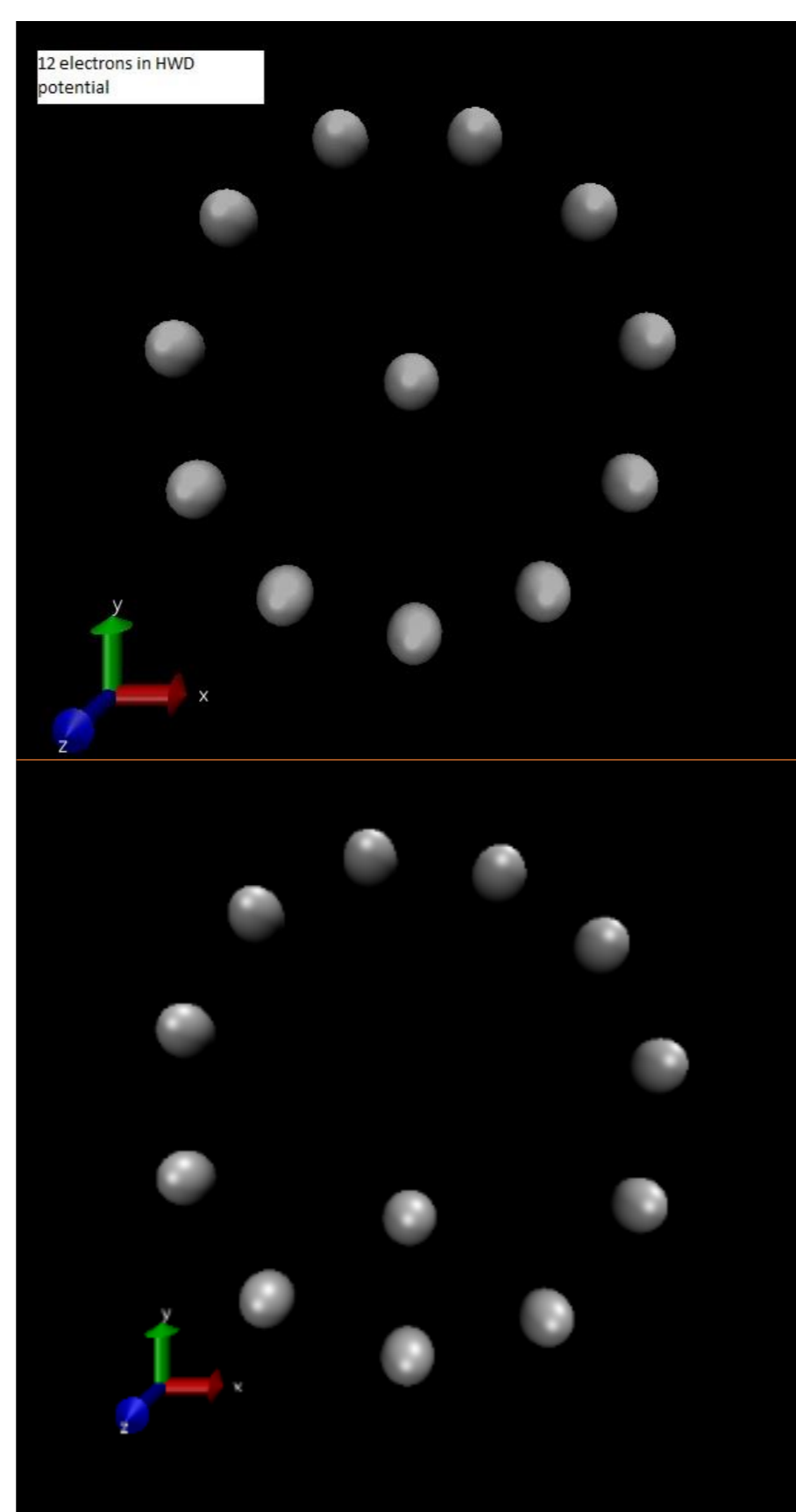


Рис. 3. 12 частиц, критическая температура –  $T_c = 0,438365K$

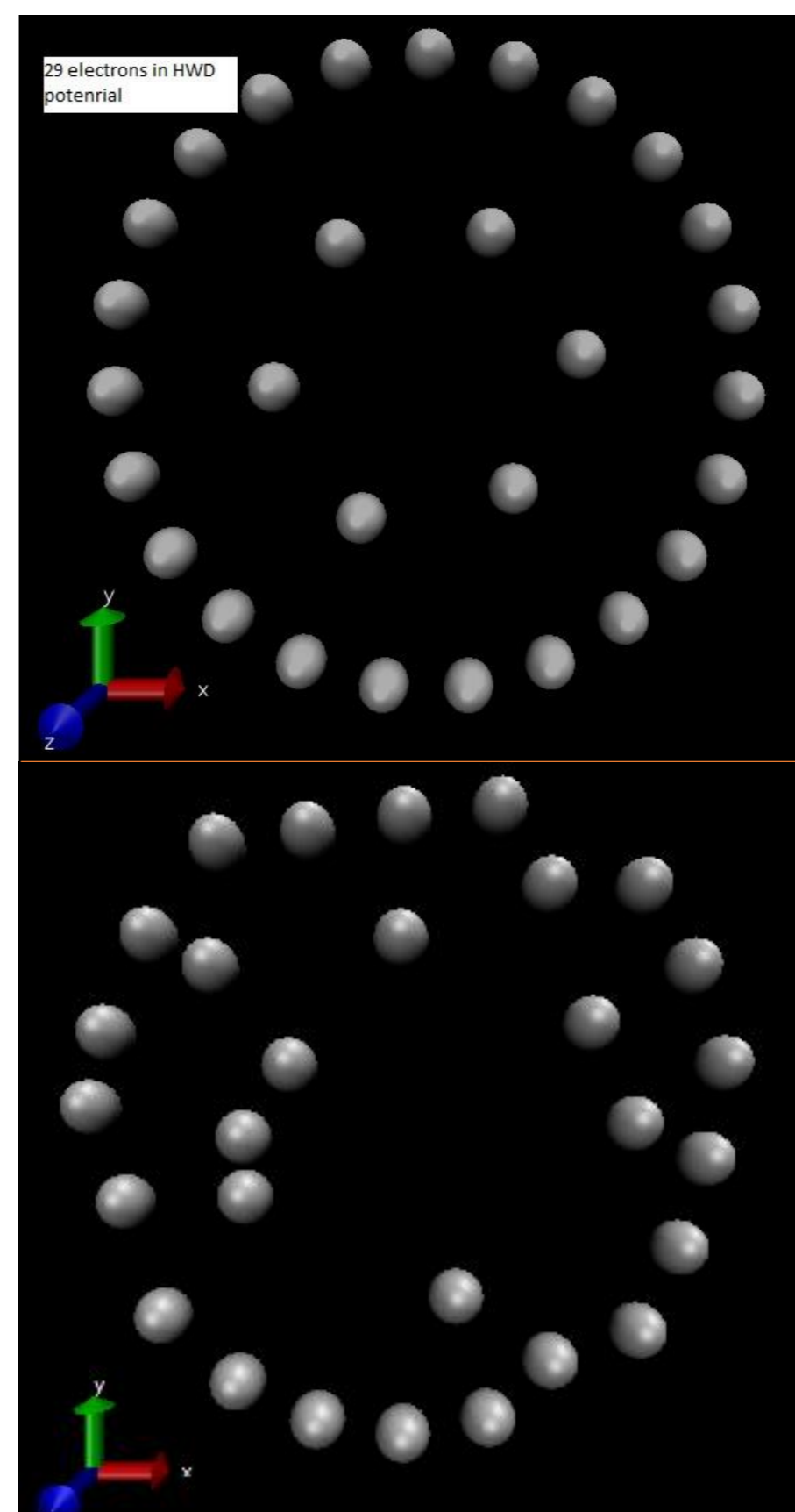


Рис. 4. 29 частиц, критическая температура –  $T_c = 2,88013K$

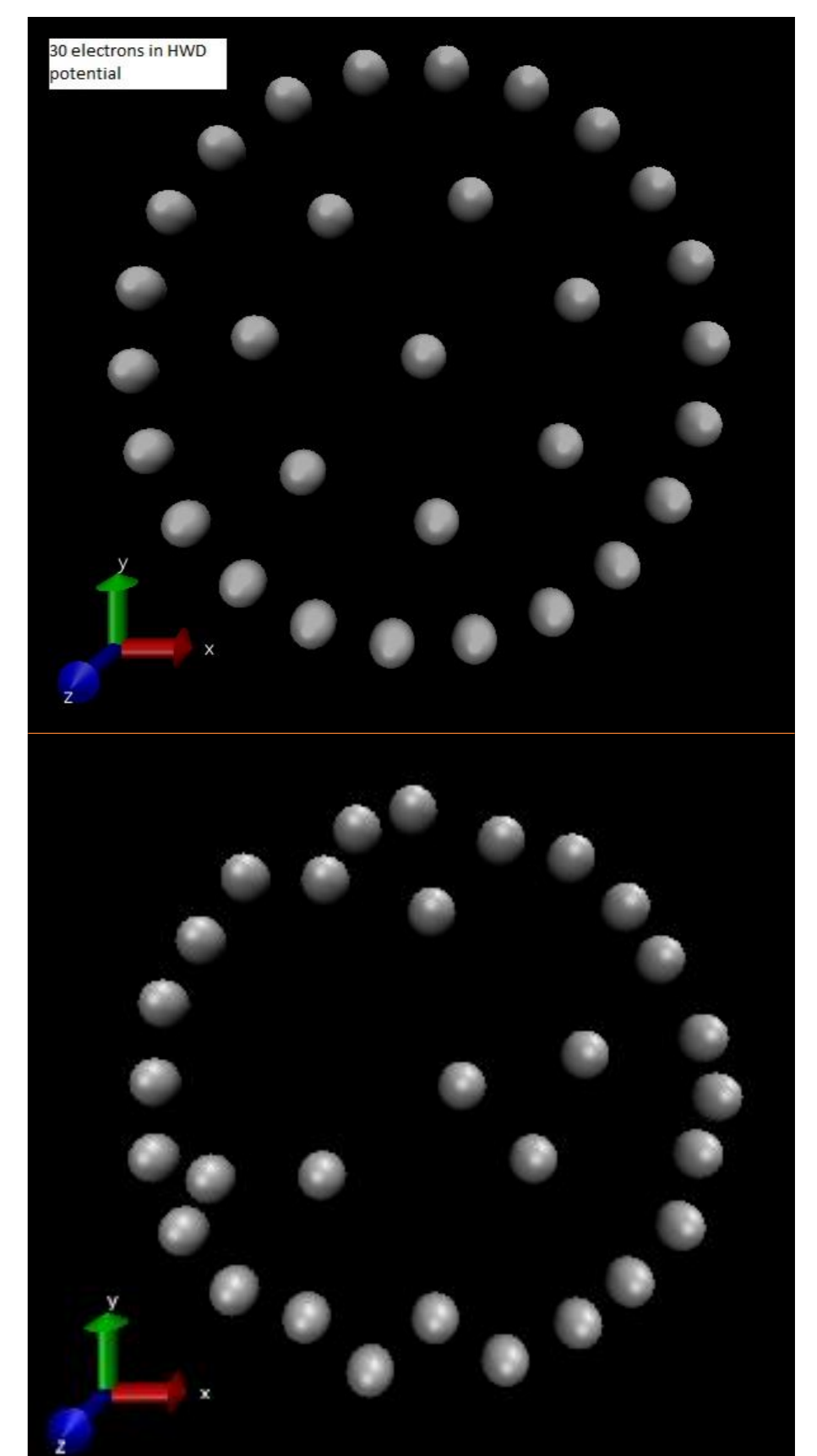


Рис. 5. 30 частиц, критическая температура –  $T_c = 2,962343K$