

САМООРГАНИЗАЦИЯ СИСТЕМ КВАЗИЧАСТИЦ В ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ И ТОПОЛОГИЧЕСКИХ ЛОВУШКАХ

Богданкевич Н.М., Грачев Н.Е.

(Москва)

Методами стохастического и динамического моделирования изучается поведение и самоорганизация в равновесных состояниях систем небольшого числа взаимодействующих квазичастиц, помещённых в потенциальную либо топологическую ловушку. Показана возможность существенно различного, в том числе и нефизического поведения компьютерной модели системы, при одинаковой математической модели и одинаковом алгоритме, если без должного учёта физических и геометрических свойств исходной моделируемой системы выбираются технические характеристики компьютерной программы.

SELF-ORGANIZATION OF QUAZIPARTICLE SYSTEMS IN POTENTIAL AND TOPOLOGICAL TRAPS

Bogdankevich N.M., Grachev N.E.

(Moscow)

The behavior and self organization of systems consisting of a small number interacting quaziparticles in equilibrium in a potential or topological trap is studied using stochastic and dynamic methods. It is shown that various, not necessarily physical, behavior patterns of a computer model describing the system arise for identical mathematical model and algorithm, if without a proper account for physical and geometrical properties of the system, the technical characteristics of the computer model are chosen.

Модели «ансамбль квазичастиц в ловушке» отвечают многие реальные ситуации в физике твёрдого тела, нелинейной оптике, физике плазмы, физике сверхпроводимости, биофизике, при-

кладной физике и других областях.

Цель работы – изучить процессы самоорганизации квазичастиц в кристаллоподобные и оболочечные структуры равновесных состояний, а также обратить внимание исследователей, изучающих методами Монте – Карло и молекулярной динамики поведение ансамблей квазичастиц различной физической природы в потенциальных и топологических ловушках, на некоторые не вполне обычные источники нефизического поведения математической модели (алгоритма).

Ясно, что исходные данные для математического моделирования в компьютере должны отвечать параметрам моделируемой физической системы. Известны и общие принципы моделирования физических систем указанными методами, касающиеся, например, выбора метода интегрирования при динамическом моделировании, или подходящего объёма статистики при стохастическом, и многие другие.

Реже обращается должное внимание на иные, «не физические», параметры программной реализации, которые как бы и не относятся к собственно математической модели исследуемого физического процесса, или даже к её математической, алгоритмической реализации, но которые, как выясняется, также могут приводить к существенно нефизическому поведению компьютерной модели.

Редко становится предметом анализа геометрия сцены на которой рассматривается и отображается на экране компьютера динамика системы частиц. Если, помимо тех частиц, динамика которых рассматривается, на той же сцене размещаются ещё какие-то объекты («ловушки», «дефекты структуры», «элементы конструкции прибора»), редко осознанно принимается во внимание соотношение их геометрии и топологии с геометрией и топологией сцены моделирования.

Настоящая работа не претендует на всеобъемлющее изучение последнего вопроса, мы только хотели бы обратить внимание на те моменты, с которыми сами практически столкнулись при изучении некоторых моделей. Установлена возможность нефизического поведения модели системы, если выбор характеристик программы проводился без должного учёта физических и геометрических свойств моделируемой системы, для одной и

той же математической модели, и при одинаковом алгоритме.

Изучалось поведение небольшого числа квазичастиц при ненулевой температуре, обладающих потенциалом отталкивания и помещенных в ловушку, представляющую собой потенциальную яму, либо топологическую ловушку, например, поверхность тора, бутылки Клейна, модель проективного пространства, и т.д., либо их сочетание, как цилиндрическое кольцо или лист Мёбиуса с отталкиванием на свободном краю.

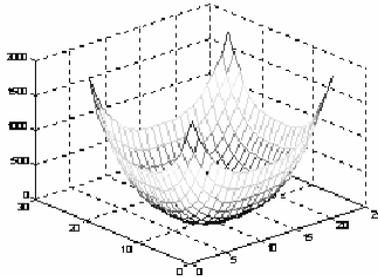


Рис. 1. Вид потенциальной ямы, $n = 3$.

Первоначальной целью работы было исследование динамических процессов самоупорядочения или, напротив, стохастизации таких систем, использование разработанных алгоритмов для генерации заданным образом упорядоченных или разупорядоченных комбинаций частиц. Полученные массивы координат «квазичастиц» далее использовались при описании объектов математического моделирования различной природы: наноструктур и кластеров, биологических объектов, стекол, полимерных расплавов, и других.

Квазичастицы в энергетической (потенциальной) ловушке.

Методом молекулярной динамики моделировалось поведение системы N квазичастиц, помещенных в потенциальную яму (рис. 1, 2), вида:

$$u = C (|x|^n + |y|^n), \quad (1)$$

где: $n > 0$; x, y – декартовы координаты; C – постоянная, и взаимодействующих между собой по закону кулоновского отталкивания.

Из любого (случайного) начального состояния, при наличии диссипации энергии, эта система приходит в положение равно-

весья, при котором частицы устанавливаются в упорядоченную структуру оболочечного типа. Изучалось влияние формы потенциала на форму орбит, их количество, радиусы орбит.

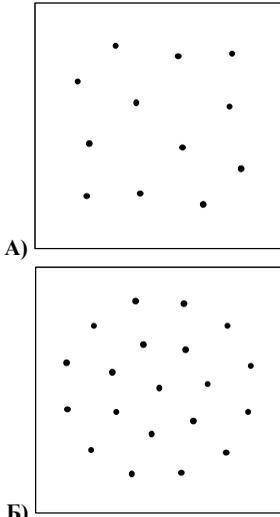


Рис.2. Частицы в яме вида (1) **А)** $n=3$, $N=12$; **Б)** $n=2$, $N=20$.

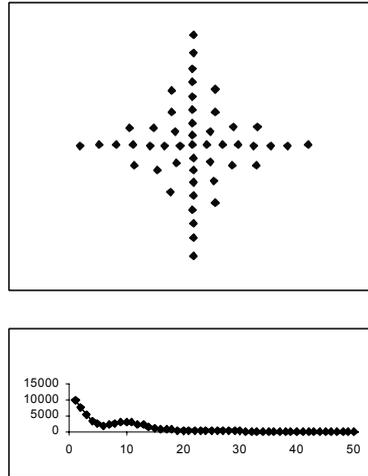


Рис.3. Частицы в яме вида (1), $n = 1$, $N=50$, показан график изменения кинетической энергии системы в относительных единицах.

Анализировались числа заполнения оболочек ("таблицы Менделеева") при различных потенциалах ($n = 0.5, 1, 2, 3$ и др.) и проведен сравнительный анализ.

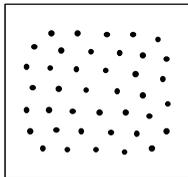
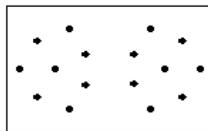
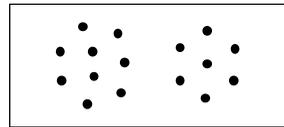


Рис. 4. Частицы в потенциальной яме вида (1), $n = 3$, $N=40$.



(трение мало)



(трение велико)

Рис.5. Частицы в потенциале из двух соседних ям, $n = 2$, $N = 16$, $\epsilon=70$. $u=C((x+\epsilon)^2+y^2)$, $x \leq 0$, $u=C((x-\epsilon)^2+y^2)$, $x > 0$

При больших количествах квазичастиц, или плоском дне ямы при большом показателе степени в выражении для потенциала, в центре ловушки наблюдается почти кристаллическая

упорядоченность частиц, выстраивается довольно правильная треугольная решётка.

Второй изучавшийся тип систем состоит из двух потенциальных ям, помещенных так, что частицы из разных потенциальных ям могут взаимодействовать друг с другом и переходить из одной ямы в другую (рис.5 - 7).

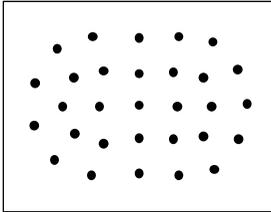


Рис.6. Частицы в потенциале из двух соседних ям, $n = 2$, $N = 30$, $\varepsilon=50$, $u=C((x+\varepsilon)^2+y^2)$, $x \leq 0$; $C((x-\varepsilon)^2+y^2)$, $x > 0$, расположение асимметрично.

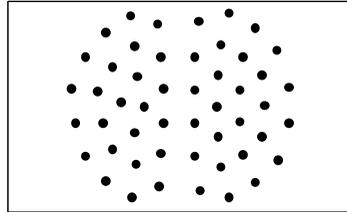


Рис.7. Частицы в потенциале из двух соседних ям, $n = 2$, $N = 50$, $\varepsilon=70$, $u=C((x+\varepsilon)^2+y^2)$, $x \leq 0$; $C((x-\varepsilon)^2+y^2)$, $x > 0$, расположение почти симметрично.

Поскольку при любом выборе метода численного интегрирования дифференциальных уравнений молекулярной динамики многих частиц, из за ошибок интегрирования всегда происходит «разогрев системы», для получения стационарных (равновесных) состояний системы нам необходимо было вводить избыточное искусственное трение. Показано (см. рис. 5 - 7), что при моделировании данных систем возникают неконтролируемые ошибки, связанные с неправильным заданием параметров искусственного трения, в результате чего система может в одних и тех же условиях случайным образом занимать различные положения равновесия, симметричные и не симметричные, если трение велико, или «разваливаться», если трение мало. Выбор различных параметров искусственного трения приводит к изменению поведения системы: перед установлением равновесного состояния: динамика системы может быть гладкой или пульсирующей (рис.8), что в определённых пределах позволяло управлять конечными состояниями систем с двумным потенциалом.

Квазичастицы в топологической ловушке.

Методом стохастических испытаний Монте - Карло моделировалось поведение системы N квазичастиц, помещенных в топологическую ловушку, и взаимодействующих между собой по

степенному закону типа кулоновского отталкивания, с учетом конкретной топологии ловушки. Топологические ловушки были нескольких видов: а) прямоугольный ящик с отражающими стенками (эту ловушку можно считать и потенциальной и топологической одновременно); б) топологические ловушки: поверхность тора, бутылки Клейна, проективная плоскость; в) смешанные ловушки: кольцо (боковая поверхность цилиндра), лента Мёбиуса.

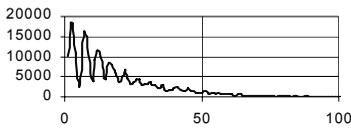


Рис.8. Пульсирующая динамика кинетической энергии системы, (см. рис.2Б), трение мало.

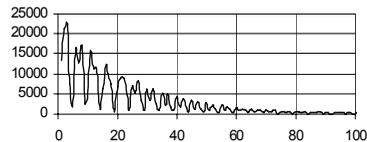


Рис.9. Пульсирующая динамика кинетической энергии системы в относительных единицах в двумерном потенциале (см. рис.5), $u=C((x+\varepsilon)^2+y^2)$, $x \leq 0$, $C((x-\varepsilon)^2+y^2)$, $x > 0$, $\varepsilon = 70$, $N=16$.

Частицы выстраивались (или разупорядочивались) определенным образом благодаря силам отталкивания между ними и под влиянием типа топологических граничных условий, характер стохастизации или самоорганизации частиц изучался с помощью линейных и радиальных функций распределения. Окно отображения положения частиц во всех случаях было прямоугольным или квадратным. В пределах окна действовали правила евклидовой геометрии, которые видоизменялись, если необходимо было вычислить взаимодействие некоторой данной частицы с другой, а отрезок «наименьшего расстояния» между ними проходил через границу окна.

За «наименьшее расстояние» принимался минимум из евклидовых расстояний между первой частицей, с одной стороны, и с другой стороны, второй частицей (и только ей, если ловушка была просто прямоугольным ящиком с отражающими стенками) и восьмью (в случае ловушки – тора, бутылки Клейна, проективной плоскости) или двумя (в случае ловушки – кольца или ленты Мёбиуса) её «отражениями» в сторонах прямоугольного окна отображения.

В случае края ящика, ленты, листа Мёбиуса, частица не мог-

ла проникнуть через него, а на топологически отождествляемых (см. ниже) сторонах прямоугольного окна частица попадала в него же вновь с противоположной стороны прямоугольника, в точке, определяемой правилами отождествления. Динамика поведения системы анализировалась по графикам изменения энергии дополнительно введённой в систему «нулевой» частицы, которую автор предложенного алгоритма Мишель Кройц предложил именовать в честь известного «демона Максвелла».

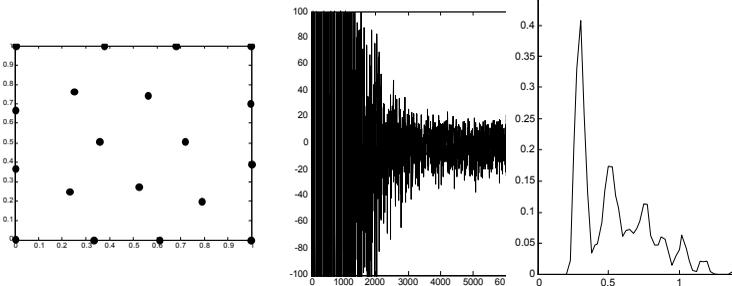


Рис. 10, а. Мгновенное состояние системы из 19 квазичастиц после 10000 шагов процесса Монте-Карло. Упорядочение неидеальное, поскольку число частиц (19) при данных размерах «ящика» не допускает этого.

Рис. 10, б. Энергия «демона» и усредненная радиальная функция распределения. Система быстро упорядочивается и стабилизируется, наблюдаются выраженный и устойчивый ближний и дальний порядок.

На каждом шаге процесса Монте – Карло демон «принимал» у очередной испытуемой частицы избыточную энергию, если при пробном перемещении последней общая потенциальная энергия системы уменьшалась, или мог, при наличии у него достаточного запаса энергии, «выдать» эту энергию частице, если, напротив, в результате пробного перемещения общая энергия системы частиц увеличивалась. Если энергии у демона оказывалось недостаточно, перемещение частицы отвергалось, и процесс продолжался с прежней конфигурации.

Установлена существенная зависимость радиальных функций равновесного распределения частиц от топологии ловушек. При моделировании небольших систем с числом частиц в около 10 – 50, могут возникать ошибки, связанные с неудачным зада-

нием параметров отображения системы при одинаковых физических параметрах. Выяснилось, что при изменении соотношения длин сторон окна, в котором производилось отображение результатов моделирования, меняются структура равновесной «кристаллической» решетки, температура её «плавления» и т.д.

При анализе структуры решеток с помощью радиальных и линейных функций распределения, по их графикам и графикам энергии системы легко оценить происходящие изменения в системе при изменении ее нефизических параметров.

Мы рассмотрели также такие ловушки, как проективная плоскость, лист Мёбиуса и поверхность бутылки Клейна. Если ставить целью получение неустойчивых систем, пригодных, скажем, в качестве генераторов случайных конфигураций с большим разбросом по положениям и энергиям, такие системы очень эффективны.

Рассмотрим результаты анализа систем, состоящих из 12, 19, и 25 квазичастиц.

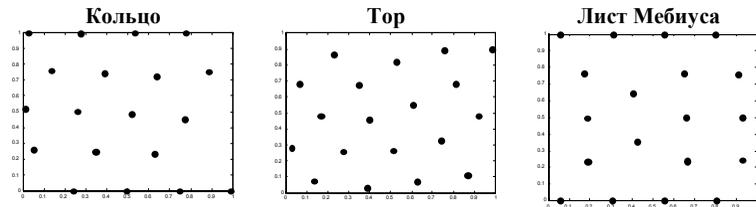


Рис. 11. Система 19 частиц в ловушках с топологиями кольца, тора и листа Мёбиуса.

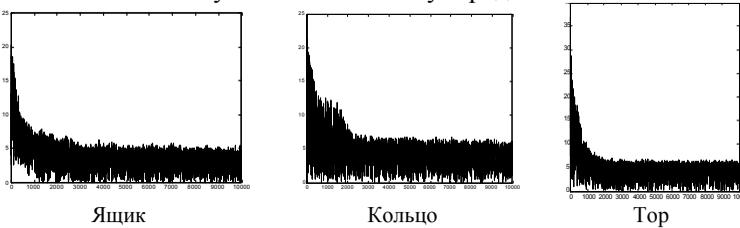
Девятнадцать отталкивающихся частиц были помещены в плоский «ящик» с размерами 1 x 1 с непроницаемыми стенками, и был запущен вышеописанный алгоритм. Результат моделирования после 10000 шагов процедуры Монте – Карло с «демоном» представлены на рис.10, все данные в условных и относительных единицах. Та же самая система частиц, помещённая в:

а) кольцо (прямоугольник, у которого отождествлены правая и левая стороны, т.е., как принято говорить, введены периодические граничные условия по оси X, а верхняя и нижняя стороны непроницаемы);

б) тор (отождествлены правая с левой, а верхняя с нижней границы прямоугольного окна: «торо-идальные», периодиче-

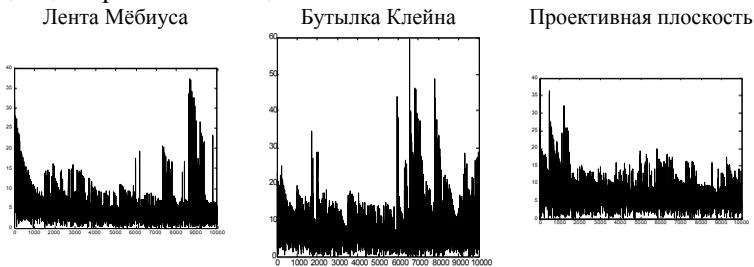
ские по X и Y граничные условия);

в) поверхность листа Мёбиуса (отождествлены верхняя и нижняя стороны, а правая и левая границы отождествлены с переворотом); демонстрирует иные динамику и устойчивость, значительно большую способность к упорядоченности.



Ящик Кольцо Тор
Рис. 12. Динамика величины $\text{Ln}(1+|E_d|)$, где E_d – энергия «демона»

В случае кольца, мгновенные состояния решетки близки к треугольной, при некотором увеличении числа частиц эта тенденция проявляется ещё более отчётливо.



Лента Мёбиуса Бутылка Клейна Проективная плоскость
Рис. 13. Характер динамики величины $\text{Ln}(1+|E_d|)$, где E_d – энергия «демона».

Решётка частиц в торе – переходная между треугольной и квадратной, а на листе Мёбиуса легко получить идеальную прямоугольную решётку в средней части полосы, при подходящем числе частиц, например, двадцати. Вместе с тем, стабилизация положения квазичастиц на листе Мёбиуса, и, особенно, на торе, значительно медленне (рис.12), а в топологических ловушках типа поверхности ленты Мёбиуса, поверхности бутылки Клейна (верхний и нижний края окна отождествляются, а правая и левая стороны отождествляются «с переворотом») и проективной плоскости (противоположные стороны прямоугольника попарно отождествляются «с переворотом») полная стабилизация не наступает, наблюдается только ближний порядок и система очень

неустойчива (рис.13). При имитации «неоднородностей» области моделирования, в которой рассматривается динамика системы квазичастиц, в этой области нередко помещают определённое количество «центров пиннинга», точечных или линейчатых «дефектов структуры» и т.п.

При моделировании это сводится к тому, что часть квазичастиц оказывается закреплённой. К чему может привести применение этого приёма без согласования с алгоритмом моделирования, иллюстрирует рис.14. В системе из 12 частиц на торе моделирование проведено трижды. В первом случае все частицы были свободны, и достаточно быстро установилась упорядоченная структура, близкая к треугольной решётке. Во втором случае, две из этих частиц были жёстко закреплены, на расстоянии друг от друга, соответствующем шагу и углу наклона решётки частиц, установившейся в первом случае. Вновь, с некоторым геометрическим сдвигом, установилась решётка, подобная первой, при этом незначительно изменилось поведение энергии «демона» и функции распределения. Вблизи закреплённых частиц система стала стабильнее, а в удалении – менее стабильной, здесь увеличился размер порций энергии обмена с «демоном». В целом изменения незначительны, что хорошо видно из рис.14 а, б.

В третьем случае были несколько изменены размеры окна наблюдения, одна из сторон увеличена на 10%, а другая уменьшена так, что общая площадь прямоугольника не изменилась, не изменилась и плотность частиц. Поскольку граничные условия рассматривались тороидальные, периодические, формально систему в таких случаях считают как бы бесконечной.

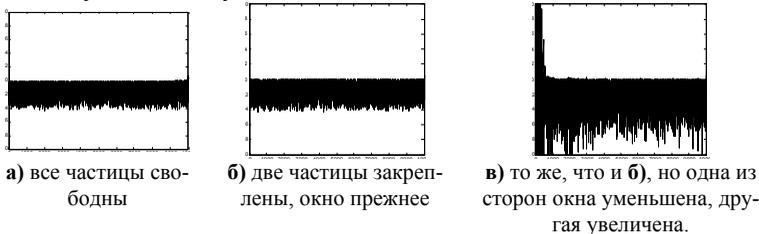


Рис. 14. Динамика энергии «демона» взаимодействующего с системой из12 частиц.

В этом случае, изменение окна наблюдения системы никак не должно было бы отразиться на её состоянии. Однако, как видно по рис.14в, это не так. При «кристаллизации» системы на торе, существенно, что «обмотка» тора из рядов частиц ложится на поверхность под определённым углом, который зависит от радиусов тора и равновесного расстояния между частицами. Закрепив две из них мы, не дав системе частиц в целом повернуться под нужным углом, изменили её динамику, привели её к нефизическому поведению. Таким образом, несогласованное с физическим содержанием задачи введение «периодических граничных условий» может приводить к ошибкам при оценке термодинамических параметров системы.

Литература.

1. Х.Гулд и Я.Тобочник. Компьютерное моделирование в физике, ч.2. М., Мир, 90
2. Ю.Ю.Тарасевич. Математическое и компьютерное моделирование. УРСС, 2001
3. В.Д. Лахно. Кластеры в физике, химии, биологии. РХД, М., Ижевск, 2001.
4. М. Creutz. Microcanonical Monte – Carlo Simul. Phys. Rev.Lett. **50**, 1411, 1983.