

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ РАВНОВЕСНЫХ КОНФИГУРАЦИЙ ОДНОИМЕННО ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ В ПЛАНАРНЫХ СИСТЕМАХ С КРУГОВОЙ СИММЕТРИЕЙ

Никонов Э. Г.^{1,2}, Назмитдинов Р.Г.^{1,2}, Глуховцев П.И.²

¹Объединённый институт ядерных исследований, Российская Федерация, 141980, г. Дубна Московской области, ул. Жолио - Кюри, 6, +74962164722, e.nikonov@jinr.ru;

²ГБОУ ВО МО «Университет «Дубна», Российская Федерация, 141980, г. Дубна Московской области, ул. Университетская, 19.

Планарные системы одноименных частиц, взаимодействующих посредством кулоновского потенциала и запертых внешними потенциалами с высокой симметрией, играют важную роль в различных областях как экспериментальной, так и теоретической физики и химии. К числу таковых систем относятся, например, квантовые точки, которые используются при создании дисплеев нового поколения; являются элементной базой нанoeлектроники; а также применяются в качестве новых типов маркеров в биохимии. С другой стороны, такие системы представляют огромный интерес с точки зрения решения фундаментальной задачи о нахождении оптимальных равновесных конфигураций конечного числа взаимодействующих частиц, локализованных в ограниченном пространстве, при существовании огромного числа локальных минимумов. В данной работе представлены результаты численного анализа равновесных конфигураций отрицательно заряженных частиц (электронов), запертых в круговой области бесконечным внешним потенциалом на ее границе.

Для поиска устойчивых конфигураций с минимальной энергией в упомянутой выше двумерной области авторами разработан гибридный вычислительный алгоритм. Основой алгоритма является использование в качестве начальных данных результатов для метода молекулярной динамики решения системы нелинейных уравнений [1], полученных из принципа минимизации энергии конечного числа частиц. Данная минимизация позволяет определить образование основного устойчивого состояния в виде серии колец (оболочек). В каждом кольце локализовано определенное число частиц, которое убывает по мере движения от граничного кольца к центральному. Начальная конфигурация для метода молекулярной динамики рассчитывается с использованием интерполяционных формул для зависимости распределения числа частиц от номера кольца. Данный подход позволяет значительно повысить скорость достижения равновесной конфигурации для произвольно выбранного числа частиц по сравнению с алгоритмом имитации отжига Метрополиса и другими алгоритмами, основанными на методах глобальной оптимизации.

Литература

1. Nazmitdinov R. G., Puente A., Cerkaski M. and Pons M.// *Phys. Rev. E* 95, 2017, 042603.
2. Cerkaski M., Nazmitdinov R. G., and Puente A.// *Phys. Rev. E* 91, 2015, 032312.