

## ВЕРОЯТНОСТИ РЕАЛИЗАЦИЙ РАЗЛИЧНЫХ СОСТОЯНИЙ ТРИНАДЦАТИАТОМНОГО КЛАСТЕРА АРГОНА

М.А. Гуфан<sup>1</sup>, Ю.М. Гуфан<sup>1</sup>, О.В. Наскалова<sup>2</sup>, А.А. Новакович<sup>1</sup>

<sup>1</sup>ФГБОУ ВО «Южный федеральный университет»  
НИИ физики отдел теоретической физики,  
Пр. Стачки 194, Ростов-на-Дону 344090  
<sup>2</sup>ФГБОУ ВПО «Чеченский государственный университет»,  
364093, г. Грозный, ул. А. Шерипова, 32  
e-mail: [yu.gufan@gmail.com](mailto:yu.gufan@gmail.com)

## PROBABILITIES OF THE DIFFERENT STATES OF THE THIRTEEN-ATOMIC ARGON CLUSTER

М.А. Gufan<sup>1</sup>, Yu.M. Gufan<sup>1</sup>, O.V. Naskalova<sup>2</sup>, A.A. Novakovich<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Federal State Budget-Funded Educational Institution of Higher Education “Southern Federal  
University”, Research Institute of Physics, Pure Physics Division,  
194 Stachki ave., Rostov-on-Don, 344090 Russia;

<sup>2</sup>Federal State Budget-Funded Educational Institution of Higher Vocational Education “Chechen  
State University”,  
32 A. Sheripova str., Grozny, 364093 Russia  
e-mail: [yu.gufan@gmail.com](mailto:yu.gufan@gmail.com)

В численном эксперименте впервые обнаружена резко немонотонная зависимость числа структурно возбужденных состояний малых кластеров от энергии ( $n(e_i)_0$ ) возбужденного состояния ( $e_i$ ). В работе обсуждается физическая природа обнаруженных особенностей в зависимости  $n(e_i)_0$ .

A sharply non-monotonic dependence of the number of structurally exited states of small clusters ( $n(e_i)_0$ ) on the exited state energy ( $e_i$ ) has been discovered for the first time in the numerical experiment. The physical nature of the discovered features of dependence  $n(e_i)_0$  is discussed in the work.

В работе исследуется распределение малых кластеров с заданным числом атомов  $N$ , по возможным формам таких кластеров. Обычно считается, что распределение кластеров разной формы по энергиям определяется классической статистикой Больцмана, то есть гладкой функцией энергии состояний  $e_i$  и температуры  $T$ :

$$n(e_i) = n(e_i)_0 \exp\left(-\frac{e_i}{k_B T}\right) \quad (1)$$

В работе тоже принимается это предположение, а внимание сосредоточено на выявлении плотности вероятности распределения кластеров по энергиям при нулевой температуре, то есть на выявлении зависимости  $n(e_i)_0$ . В процессе исследования было обнаружено, что «сглаженная» зависимость  $n(e_i)_0$  резко не монотонная, а плотность распределения числа разных состояний кластеров вдоль шкалы энергий резко неоднородная. Сглаженную зависимость  $n(e_i)_0$  обозначим  $[\bar{n}(e_i)]_0$ . Строилась функция  $[\bar{n}(e_i)]_0$  следующим образом. Если построить график огибающей значений чисел состояний с разной энергией  $n(e_i)_0 \equiv [\bar{n}(e_i)]_0$ , то обнаружится что этот график характеризуется максимумами, число которых зависит от числа атомов в кластерах рассматриваемого ансамбля. Числа различных состояний кластеров, охватываемых каждым максимумом номер  $i$ :  $n_i(e) \equiv \int_{e_{i0}}^{e_{(i+1)0}} n(e)_0 de$ , тоже зависят от  $N$ . Здесь пределы интегрирования  $e_{i0}$  и  $e_{(i+1)0}$  - это границы интервала энергий, над которым расположен максимум номер  $i$ . Значение  $n_i(e)$  зависит и от положения центра интервала энергий

$[e_{i0}; e_{(i+1)}]$ , которому соответствует максимум номер  $i$ . Обнаруженная нами неожиданная характеристика зависимости  $n(e_i)_0$  очень существенно определяет термодинамические и электродинамические характеристики ансамблей кластеров. Это заставляет сосредоточиться на выяснении физического смысла немонотонности функции  $n(e_i)_0$ .

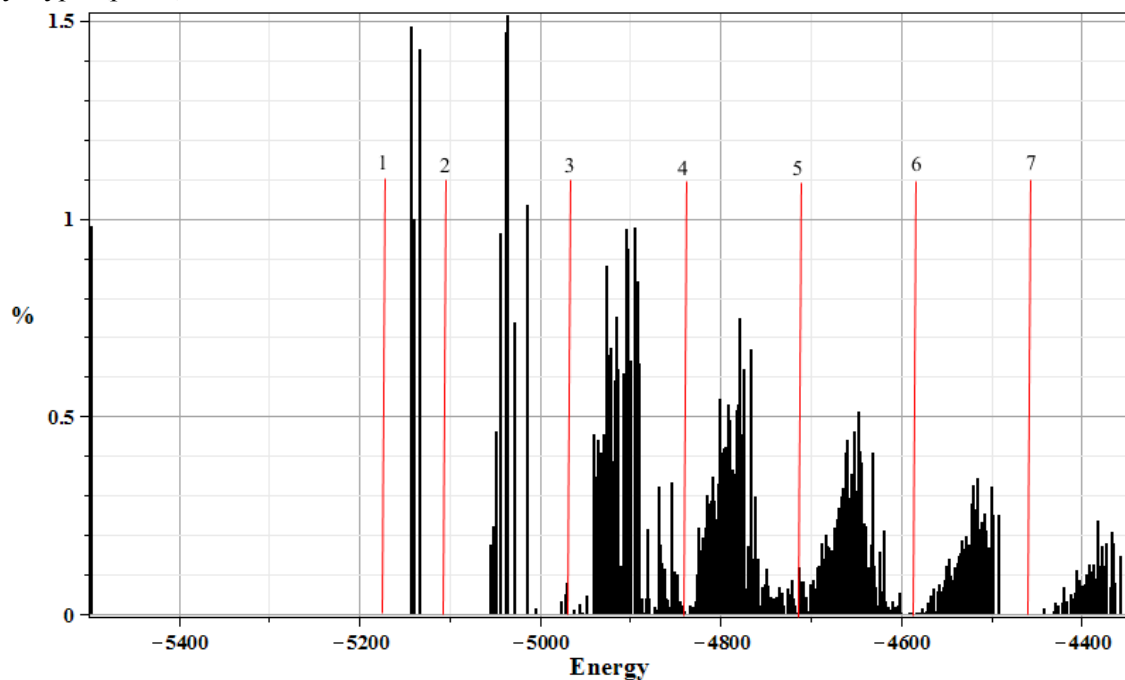
Как ясно из сказанного, и полное число возможных форм кластеров, и сами эти формы, и их энергии, и функция  $n(e_i)_0$  оказываются зависящими от числа частиц в кластерах ансамбля  $N$ . В (1) эта зависимость не представлена явно, так как в этой работе обнаруженная особенность иллюстрируется на единственном примере 13 атомного кластера атомов Ar. Считается, что энергия взаимодействия между атомами инертных газов лучше всего аппроксимируется потенциалом парного взаимодействия Леннарда –Джонса вида:

$$E(r_{\alpha\beta}^2) = \varepsilon \left[ -\frac{r_0^6}{r_{\alpha\beta}^2 \cdot 3} + \frac{r_0^{12}}{r_{\alpha\beta}^2 \cdot 6} \right] \quad (2)$$

Для Ar наиболее подходящими считаются значения  $r_0 = 2.858A$ ,  $\varepsilon = 124K$ .

Кластеры, содержащие 13 атомов, по целому ряду причин, пользуются большим вниманием со стороны физиков [1–4]. Наиболее экономным в смысле времени и сложности вычислений методом перечисления возможных структур изолированных кластеров, содержащих фиксированное число атомов, является метод самосборки в свободном потоке [4]. Для получения приводимых ниже результатов было использовано  $10^5$  пусков программы самосборки. В рассматриваемом примере такое количество пусков необходимо и достаточно, для обеспечения 20% погрешности вычислений, что вполне достаточно для выявления отмеченных выше качественных особенностей зависимости  $n(e_i)_0$ .

Нас интересует природа полученной в проведённых расчётах резко немонотонной зависимости числа локальных минимумов, соответствующих структурно возбуждённым состояниям кластера, состоящего из 13 атомов Аргона, от энергии возбуждённого состояния структуры (рис 1).



**Рис.1** - Процент локальных минимумов, соответствующих определённому значению энергии основного и структурно возбуждённого состояний Ленард – Джонсовского кластера Аргона, состоящего из 13 атомов. Значения энергии даны в градусах Кельвина

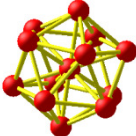
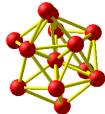
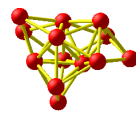
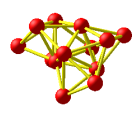
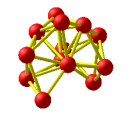
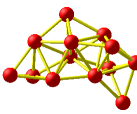
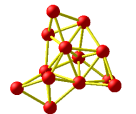


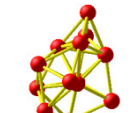
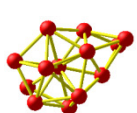
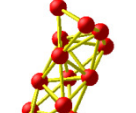

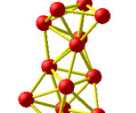
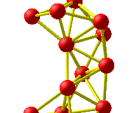
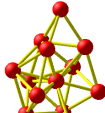

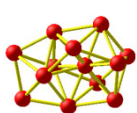
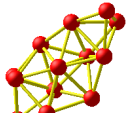
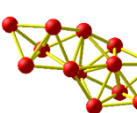
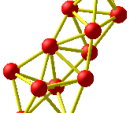
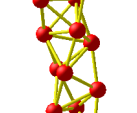
На Рис. 1 вертикальные линии, которые разделяют интервалы энергий  $[e_{i0}; e_{(i+1)}]$ , и  $[e_{(i+1)0}; e_{(i+2)}]$ , пронумерованы цифрами от 1 до 7. Линии проведены из точек оси абсциссы, которые соответствуют энергиям, не реализовавшимся ни в одной из возможных метастабильных конфигураций тринадцатиатомного кластера Аргона.

Для того, чтобы установить физическую природу обнаруженной нами не монотонной зависимости функции  $n(e_i)_0$  мы рассмотрели чем отличаются структурно возбуждённые состояния, которые расположены вблизи каждого из 8 максимумов распределения. Здесь мы

говорим о восьми, а не о семи максимумах, так как называем максимумом  $n(e_i)_0$  не вырожденное основное состояние кластера значительно удалённое по энергии от всех остальных. Результаты наших вычислений приведены в таблице 1.

**Таблица 1:**

Основные структурные типы структурно возбуждённых состояний кластера Аргона, содержащего 13 атомов.

 Основное состояние: $\varepsilon_{13} = -5496,5 \text{ K}$						
1–2	2–3	3–4	4–5	5–6	6–7	7–8
(-5142,5 -5132,9)	(-5054,1 -4970,8)	(-4969,3 -4842,9)	(-4841,6 -4715,5)	(-4714,8 -4589,3)	(-4586,9 -4491,0)	(-4440,2 -4348,8)
						
-5142,5	-5043,1	-4924,9	-4800,2	-4667,8	-4548,5	-4404,6
						
-5139,1	-5035	-4903,8	-4777,3	-4650,4	-4514,6	-4381,5
						
-5132,9	-5013,7	-4868	-4765,5	-4630,6	-4491	-4348,8

В первой строке таблицы изображено основное состояние тринадцатиатомного кластера Аргона, которое представляет собой правильный икосаэдр. Там же указана энергия этого состояния в градусах. В ансамбле, состоящем из  $10^5$  кластеров  $Ar_{13}$ , вероятность встретить такое состояние при  $T = 0$  менее одного процента.

Во второй строке таблицы указаны номера интервалов энергий, в которых расположены максимумы распределения  $n(e_i)_0$ . В каждом интервале энергий  $[e_{i0}; e_{(i+1)}]$  в соответствующем столбце приведены три отдельных рисунка. На каждом из рисунков, присутствующих в строках четыре, шесть и восемь изображена одна из типичных метастабильных структур, присутствующая в ансамбле кластеров в этом интервале энергий. Рисунки призваны помочь понять на уровне качественных сопоставлений различия и общие черты расположения атомов в этих структурах. Общие черты позволят выявить, что общего в структурах кластеров, объединённых под куполом одного максимума, то есть понять природу структурно возбуждённых состояний кластеров с близкими энергиями в соответствующем интервале энергий.

В 3-ей строке таблицы приведены значения энергий, соответствующие границам интервалов, условно определяющих локализацию соответствующего максимума  $n(e_i)_0$  на оси энергий. Значение  $e_{(7+1)} = -4348,8 \text{ K}$ , приведенное в конце 3-ей строки, равно максимальному значению энергии структурно возбуждённого кластера Аргона, которое встретилось в данном ансамбле, состоящем из  $10^5$  кластеров  $Ar_{13}$ . В 5-той, 7-ой и 9-ой строках таблицы 1 указаны

точные значения энергий возбуждённых состояний, соответствующие рисункам, структур, которые присутствуют в этих же столбцах, но в строках 4, 6 и 8.

Для примера рассмотрим интервал энергий **1–2** (–5142,5К – –5132,9К). В этом интервале энергий присутствуют всего три типа структур. Они геометрически образованы перемещением одного из атомов Аргона из верхнего слоя икосаэдра на его поверхность. Если удалить этот атом, то останется сильно искажённый икосаэдр с вакансией в структуре поверхности. Три типа структур, обнаруживаемых в рассматриваемом интервале энергий, соответствуют трём геометрически различимым расположениям 13-го атома на поверхности «остатка» икосаэдра по отношению к вакансии.

«Мелкая рябь» состояний между вертикальными линиями на рис. 1 соответствует структурно возбуждённым состояниям, отличающимся от приведённых на рисунках таблицы малыми деформациями отдельных связей.

Причин, по которым отмеченные выше неравномерности в распределении структурно возбуждённых состояний по шкале энергий, ранее не обсуждались несколько. Одна из основных заключается в том, что во многих работах расстояния между атомами в возбуждённой структуре не вычислялись, а постулировались: фиксировались длины связей ближайших соседей. Конечно, те работы, в которых есть дополнительное ограничение на «радиус взаимодействия», вообще не следует рассматривать, как физически обоснованные, даже для относительно «больших» кластеров, содержащих менее  $2.5 \cdot 10^3$  атомов.

Приведем так же полученные в ходе выполнения работы зависимости числа структурно возбуждённых состояний от интервала энергий возбуждений:

$\Delta E_{i-k}(K)$	0–1	1–2	2–3	3–4	4–5	5–6	6–7	7–.....
$\frac{N(\Delta E_{i-k})}{\sum_{i-k} \Delta E_{i-k}} (\%)$	0,979	3,910	7,380	22,832	23,428	21,676	14,008	5,787

Работа выполнена при финансовой поддержке МОН РФ (базовая часть гос. задания темы №6386.2017/БЧ (вн. № БЧ0110-11/2017-42).

#### Список использованных источников:

1. Берри С., Смирнов Б. М. Фазовые переходы и сопутствующие явления в простых системах связанных атомов // Успехи физических наук, 2005. Т. 175 (4). С. 367-411.
2. Берри С., Смирнов Б. М. Фазовые переходы в кластерах различных типов // Успехи физических наук., 2005. Т. 175 (2). С 147-177.
3. Берри С., Смирнов Б. М. Фазовые переходы и сопутствующие явления в простых системах связанных атомов // Успехи физических наук, 2005. Т. 175(4). С. 367-411.
4. Гуфан А.Ю., Наскалова О.В., Гуфан Ю.М. Структура и термодинамические характеристики малых кластеров инертных газов // Изв.РАН, сер. Физическая, 2011. Т.75(5). С.659-663; *Gufan A.Yu, Naskalova A.V., Gufan Yu.M. Bull.Russian Academy of Scien.:Physics. 2011. V.75. №5.P.616.*