

# ПРИМЕНЕНИЕ ЭФФЕКТИВНЫХ ЧИСЕЛ МОД ДЛЯ АНАЛИЗА ВНУТРЕННЕЙ ДИНАМИКИ СЛАБОСВЯЗАННЫХ КЛАСТЕРОВ

Рыбаков А.А., Белега Е.Д., Трубников Д.Н., Чуличков А.И.<sup>1</sup>

Московский государственный университет им. М.В.Ломоносова,  
Химический ф-т, каф. физической химии

<sup>1</sup> Физический ф-т, каф. компьютерных методов в физике,  
Россия, 119992, Москва, Ленинские Горы, МГУ им. М.В.Ломоносова, Химический ф-т  
Тел.: (495)939-45-60, факс: (495)939-45-60, e-mail: rybakovy@mail.ru

Исследование внутренней динамики слабосвязанных агрегатов, таких как Ван-дер-ваальсовы кластеры, осложняется сильной нелинейностью взаимодействия между атомами, составляющими кластер. Как следствие нелинейности, использование стандартного приближения типа “жесткий ротатор – гармонический осциллятор” приводит к недостоверным результатам. Исследование также осложняется большим числом степеней свободы, которыми описывается динамика системы. В связи с вышесказанным, авторами данной работы предложен метод эффективных мод [1], позволивший упростить анализ внутренней динамики таких объектов за счет понижения размерности фазового пространства и выявить закономерности коллективных движений частиц в кластерах. Для вращающихся кластеров разработана методика разделения кинетической энергии в эффективных модах на колебательную и вращательную компоненты [2], что позволило установить связь между типом динамики (хаотическим и регулярным) и величиной углового момента.

В настоящей работе рассматривается внутренняя динамика вращающихся трехатомных кластеров аргона - слабосвязанных нелинейных систем с сильным колебательно-вращательным взаимодействием и возможностью перехода к хаотическому режиму движения. Доли регулярной и хаотической компонент фазового пространства определены методом Монте-Карло при различных значениях полной энергии и углового момента. Показано, что немонотонная зависимость объема хаотической компоненты от величины углового момента для различных структурных изомеров кластеров может быть объяснена с помощью эффективных чисел мод.

## Литература

1. Белега Е.Д., Рыбаков А.А., Трубников Д.Н., Чуличков А.И. Эффективная размерность фазовой траектории в задаче визуализации эволюции динамической системы // Журнал вычислительной математики и математической физики **42**, 12, 2002. Стр. 1891.
2. Rybakov A.A., Belega E.D., Trubnikov D.N. Description of nonrigid rotation in small atomic clusters // Eur. Phys. J. D. **41**, 2, 2007. P. 297-302.