

Б.І. ЛЕВ, В.Б. ТИМЧИШИН, А.Г. ЗАГОРОДНІЙ

Інститут теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова НАН України
 (Вул. Метрологічна, 14б, Київ 03680; e-mail: blev@bitp.kiev.ua, yu.binkukoku@gmail.com,
 azagorodny@bitp.kiev.ua)

АНАЛІЗ ПОТЕНЦІАЛЬНОЇ ЕНЕРГІЇ СИСТЕМИ ВЗАЄМОДІЮЧИХ ЧАСТИНОК, УПОРЯДКОВАНИХ У ҐРАТКУ БРАВЕ

УДК 533.9...15, 519.651

Запропоновано метод визначення типу ґратки, утвореної порошинками у запиленій плазмі та оцінки їх потенціальної енергії. Основною складністю цієї задачі є міжчастинковий потенціал, що відноситься до “катастрофічних”. Такі потенціали потребують особливих підходів, щоб уникнути розбіжностей в процесі обчислення потенціальної енергії. У даній роботі розвинено необхідну для поставленої мети модифікацію відповідних методів. Показано, що отримані таким чином вирази для потенціальної енергії можна застосувати для визначення параметрів ґратки, а також, що знайдені значення параметрів відповідають відомим експериментальним даним.

Ключові слова: кулонівський потенціал, запорошена плазма, потенціальна енергія, ґратка Браве.

1. Вступ

Існує багато систем типу “м’якої матерії”, як-то порошинки у запиленій плазмі, колоїди у різноманітних розчинниках, розчини поверхнево-активних речовин, і т.п., які демонструють самоорганізацію та перебудову у кристалоподібні структури за певних умов. Їх часто описують з використанням далекодіючих кулоноподібних потенціалів. Отож, з одного боку, у нас є дуже цікаві фізичні системи, що виникають при дослідженні різноманітних специфічних явищ у різних областях науки [1–3]. З іншого боку, вони базуються на типі взаємодії, що призводить до розбіжностей при обчисленні потенціальної енергії (ось чому такі потенціали часто називають “катастрофічними”) і значно ускладнює аналіз, що викликало появу цілого ряду успішних підходів до “боротьби з нескінченностями” [4–10].

Якщо ж навіть якось подолати проблему нескінченної потенціальної енергії, то аналітично отримати статистичну суму вдасться лише для кількох модельних систем взаємодіючих частинок у термодинамічній границі [9, 11–15]. Але саме такі складні системи і реалізують явища, подібні до кристалізації і переходу між ґратками різних симетрій [16–20], що і буде предметом наших досліджень.

Дана робота ґрунтується на модифікації підсумовування Евальда. Зокрема, замість дельта-функції позицію частинки буде представлено певною функцією розподілу. Такий підхід відомий тим, що дозволяє враховувати вплив граничних ефектів для скінченних кластерів частинок [4, 9], а також досягнути прогресу в обчисленні потенціальної енергії для двовимірних систем [11]. Далі буде розширено та суттєво доповнено результати, отримані для двовимірної системи у [11], що зробить їх застосовними до тривимірних систем. Буде показано, що тривимірний випадок куди складніший, але натомість можна досягнути значного покращення збіжності для рядів, що представляють потенціальну енергію системи кулонівського типу.

У розділі 4 буде розглянуто частинки у запорошеній плазмі та застосовано розвинені методи, щоб знайти очікувану ґратку та порівняти з відомими експериментальними даними. Таку фізичну систему було вибрано, оскільки вона проявляє значну кількість цікавих ефектів. Наприклад, запорошена плазма може служити як ідеальне середовище для експериментального дослідження класичних рідин та твердих тіл разом з колоїдами [20, 22–30].

Впродовж цієї статті будуть зустрічатися *приклад* після кожного блоку обчислень у розділі 2. Вони мають два призначення. По-перше, вони показують як застосувати щойно отримані рівняння

© Б.І. ЛЕВ, В.Б. ТИМЧИШИН,
А.Г. ЗАГОРОДНІЙ, 2017

на практиці. А другою метою є повторне використання результатів *прикладів* при розгляді запорошеної плазми у розділі 4. При бажанні їх можна читати як у порядку зустрічі в тексті, так і пропустити, а згодом повернутися, коли в розділі 4 стануть зустрічатися посилки на ці приклади.

Щоб не переобтяжувати дану статтю дуже значною кількістю складних математичних обчислень, вони були переміщені до *додатків* 5. Отож вона тепер в основному складається з фізичних пояснень та результатів. Але якщо користуватися посилками на *додатки*, то тут цілком знайдеться детальний та строгий виклад представлених ідей.

Решту статті організовано наступним чином. Її можна умовно поділити на дві частини: розвиток апарату та його застосування. Розділ 2 зосереджений на загальному виразі для потенціальної енергії будь-якої ґратки Браве при довільному потенціалі. Крім того, розглядається найбільш цікавий випадок кулонівського потенціалу, щоб продемонструвати використання розвинених методів.

У розділі 3 буде проаналізовано можливі неоднозначності у виборі параметрів ґратки та представлено метод їх усунення. Насправді це дуже важливо, оскільки часто алгоритми мінімізації починають використовувати дуже великі значення для параметрів, коли ґратку цілком можна описати меншими числами. В такому випадку виростають чисельні похибки, комп'ютер починає отримувати невірні значення потенціальної енергії, що робить такі обчислення нестійкими та некоректними. Отож, у розділі 3 буде представлено метод уникнути згаданих вище проблем під час процесу мінімізації.

У останньому розділі 4 розглядається кристал з пилових частинок. Буде показано, що гексагональна щільна упаковка повинна бути тією ґраткою, що ми очікуємо в експерименті. Це знаходиться в узгодженні з експериментом [16] та іншими комп'ютерними симуляціями [17]. Ще одним цікавим висновком є те, що тип ґратки не залежить від заряду.

2. Частинок, впорядковані в ґратку

У цьому розділі ставиться за мету знайти спосіб обчислення потенціальної енергії системи ідентичних (з точки зору потенціалу) частинок, впорядкованих у ґратку Браве.

Як результат буде отримано вираз для потенціальної енергії у формі рядів (6). Коли потенціал наближається до “катастрофічного”, то згадані вище ряди можуть містити не більше одного доданка, що розбігається. Цей доданок не залежить від жодних параметрів ґратки окрім середньої густини частинок. Отож, існує значна кількість задач, де цей доданок можна просто використати як нульовий рівень для енергії (схоже з ренормалізацією у КТП).

2.1. Просторова функція розподілу частинок

Припустімо, у нас є рівноважна статична багато-частинкова система у тривимірному просторі. Всі частинки розташовано в якусь ґратку Браве. І ми хочемо обчислити потенціальну енергію частинки у цій системі в залежності від заданого потенціалу та типу ґратки. Але перш ніж ми будемо у змозі виконати таке обчислення, необхідно розробити деякий метод опису просторового розподілу частинок.

Було вибрано просторову функцію розподілу ймовірності, надалі позначену як $\rho(\mathbf{r})$. Вона відповідає на питання, яка густина ймовірності виявити якусь частинку в (x, y, z) . Більше того, допускається, що ця функція не просто “колекція дельта-функцій”, а дійсно кожна частинка флюктує поблизу свого вузла ґратки. У термінах окремих частинок це можна розглядати як введення форм-фактора. По відношенню до всієї ґратки, таке можна розглядати як модифікацію підсумовування Евальда [11, 21] через введення одночастинкової функції розподілу ймовірності ρ_{sp} замість дельта-функції.

Тепер перейдемо безпосередньо до обчислень. Порівняно легко ввести ρ_{sp} , принаймні з емпіричних міркувань. Але функція розподілу ймовірності ρ для всієї ґратки може виявитись доволі складною. Надалі буде показано як “розтиражувати” задану ρ_{sp} та побудувати з неї будь-яку ґратку Браве. Успішне використання такого апарату повинно видавати результат на кшталт показаного на рис. 1 (в ілюстративних цілях зображено двовимірний випадок, а не тривимірний, що розглядається).

Щоб сконструювати щось таким чином, ми розбиваємо простір \mathbb{R}^3 на “будівельні блоки”. Нехай

\mathbb{V} означає одну множину з точного покриття \mathbb{R}^3 однаковими доменами, кожен з яких містить строго одну частинку (відносна позиція кожної частинки у кожному домені однакова). Спосіб вибору \mathbb{V} далеко не унікальний, але ми зацікавлені у найбільш простому та природному варіанті. Отож, будемо застосовувати паралелепіеди як \mathbb{V} (рис. 2).

Можна бачити, що такий вибір \mathbb{V} задовольняє всі попередні умови. Паралелепіеди будуються на базових векторах ґратки Браве, тож трансляційна симетрія виникає природним чином. Частинка розміщена в центрі. Це важливо для наступних обчислень.

Наступне, що треба зробити, то це виразити функцію розподілу ймовірності ρ для всього \mathbb{R}^3 через одночастинкову функцію розподілу ймовірності ρ_{sp} . Можна показати, що “незначна модифікація” рядів Фур’є дозволяє цього досягнути. Як результат, отримується зв’язок між ρ та ρ_{sp} :

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k} \in \mathbb{Z}^3} \rho_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (1a)$$

$$\rho_{\mathbf{k}} = \bar{\rho} \iiint_{\mathbb{V}} f_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) \rho_{sp}(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r}, \quad (1b)$$

$$f_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{2\pi i(\mathbf{k}^T \hat{G} \mathbf{r})}, \quad (1c)$$

$$\hat{G} = \begin{pmatrix} \frac{1}{a} & -\frac{\cot(\alpha)}{a} & -\frac{\cot(\beta_c) \sin(\alpha - \alpha_c)}{a \sin(\alpha)} \\ 0 & \frac{\csc(\alpha)}{b} & -\frac{\cot(\beta_c) \sin(\alpha_c)}{b \sin(\alpha)} \\ 0 & 0 & \frac{\csc(\beta_c)}{c} \end{pmatrix}. \quad (1d)$$

Можна зауважити, що всі вектори трактуються як вектори-стовпчики. Символ $*$ позначає тут комплексне спряження, а

$$\bar{\rho} = \frac{1}{abc \sin(\alpha) \sin(\beta_c)}, \quad (2)$$

є середньою густиною частинок. Крім того, варто зауважити, що матриця \hat{G} включає в себе всю геометрію ґратки, яка розглядається.

В даному місці ми оминемо надто детальні розрахунки. Але звернувшись до додатку 6.1 можна знайти доведення періодичності ρ вздовж векторів \mathbf{a} , \mathbf{b} , та \mathbf{c} . Окрім того, там проливається певне світло на зв’язок даного перетворення з рядами Фур’є та оберненою ґраткою.

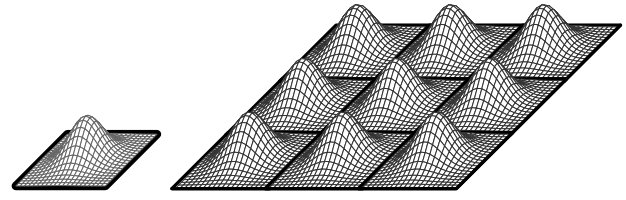


Рис. 1. Двовимірний аналіз переходу від одночастинкової функції розподілу ймовірності $\rho_{sp}(\mathbf{r})$ (зліва) до багаточастинкової $\rho(\mathbf{r})$ (справа). Функція $\rho(\mathbf{r})$ визначена для всього \mathbb{R}^2 за допомогою двовимірного аналога (1)

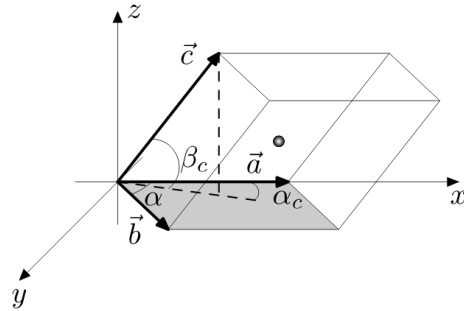


Рис. 2. Одна комірка \mathbb{V} з точного покриття \mathbb{R}^3 . Вектори \mathbf{a} , \mathbf{b} та \mathbf{c} є базовими векторами ґратки Браве. Кут між \mathbf{a} та \mathbf{b} покладається рівним α . Кут між \mathbf{c} та площиною XY β_c , а між його проекцією на площину XY та вектором \mathbf{a} – α_c . Одну частинку показано в центрі

Рівняння (1) дозволяють побудувати функцію $\rho(\mathbf{r})$, “скомпоновану” з одночастинкових функцій розподілу, “впорядкованих у ґратку”. Цей принцип демонструє рис. 1. Оскільки ρ має ту саму симетрію, що і ґратка та є хорошою локальною апроксимацією для ρ_{sp} , то й розглядатимемо її надалі як функцію розподілу ймовірності для цілої ґратки.

Щоб отримати краще інтуїтивне представлення як користуватись (1) варто глянути приклад 2.2 для гаусіани як ρ_{sp} .

2.2. Приклад: обчислення багаточастинкової функції розподілу ρ для гаусового одночастинкового розподілу ρ_{sp}

Припустимо, що всі частинки впорядковано у ґратку і їх позиції відомі. Але оскільки температура відрізняється від нуля, то можна очікувати, що частинка буде флукутувати поблизу свого вузла ґратки:

$$\rho_{sp}(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi s^2)^{3/2}} e^{-r^2/(2s^2)}, \quad (3)$$

де s позначає дисперсію, або відстань локалізації за фізичним смислом. Рівняння (3) – це нормальний розподіл, що виглядає достатньо розумним вибором як для класичних, так і квантових (основний стан квантового гармонічного осцилятора) систем.

Останнє необхідне припущення, що гаусіана (3) дуже “гостра” і кожна частинка лежить поза радіусом локалізації будь-якої іншої частинки. В протилежному випадку ми не матимемо змоги розглядати таку систему, як кристал. Це означає, що s значно менше за інші характерні відстані в системі.

Тепер підставимо $\rho_{sp}(r)$ в (1b) та виконаємо інтегрування. Допускаючи, що $\rho_{sp}(r)$ дуже “гостра” гаусіана, можна отримати таке:

$$\rho_{\mathbf{k}} = \bar{\rho} e^{-2\pi^2 s^2 \mathbf{k}^T \hat{G} \mathbf{k}}, \quad (4)$$

де $\bar{\rho}$ є середньою густиною частинок (2). Більш детально з процедурою інтегрування можна ознайомитись в додатку 6.2.

Рівняння (4) можна безпосередньо підставити у (1a) і одразу отримується результат цього прикладу. Пізніше (4) буде застосовано для обчислення потенціальної енергії при кулонівській взаємодії 2.4.

2.3. Потенціальна енергія однієї частинки

Тепер варто звернути увагу на обчислення потенціальної енергії. В звичайному випадку можна було б очікувати потенціальну енергію для i -ї частинки в якомусь такому вигляді $E_i = \sum_{j \neq i} V(r_{ij})$, де V – потенціал взаємодії, а r_{ij} – відстань між i -ю та j -ю частинками. Але ми не хочемо обмежувати себе конкретними позиціями частинок, а радше використовувати функцію розподілу ймовірності, яку ми ввели у підрозділі 2.1. Отож, замінимо підсумовування на інтегрування $\sum \rightarrow \int$, а вимогу $i \neq j \rightarrow \mathbb{R}^3 \setminus \mathbb{V}$, тобто виключення \mathbb{V} , що вміщує частинку, яка нас цікавить. Встановлюючи відповідні границі інтегрування і домножаючи де необхідно на функцію розподілу ймовірності, ми отримуємо наступний вираз для потенціальної енергії однієї частинки E_{sp} :

$$E_{sp} = E_{int} - E_s, \quad (5a)$$

$$E_{int} = \iiint_{\mathbb{V}} \iiint_{\mathbb{R}^3} V(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \rho(\mathbf{r}) \rho(\mathbf{r}') d^3 \mathbf{r}' d^3 \mathbf{r}, \quad (5b)$$

$$E_s = \iiint_{\mathbb{V}} \iiint_{\mathbb{V}} V(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \rho(\mathbf{r}) \rho(\mathbf{r}') d^3 \mathbf{r}' d^3 \mathbf{r}. \quad (5c)$$

Енергію взаємодії тут представлено як $E_{int} - E_s$. Це “розділення” є лише іншим способом сказати, що ми хочемо проінтегрувати по $\mathbb{R}^3 \setminus \mathbb{V}$. Якщо зібрати обидва вирази (5b) та (5c) разом і застосувати $\iiint_{\mathbb{R}^3 \setminus \mathbb{V}} = \iiint_{\mathbb{R}^3} - \iiint_{\mathbb{V}}$, то вийде звичайне інтегрування по $\mathbb{R}^3 \setminus \mathbb{V}$ по \mathbf{r}' .

Іншими словами, рівняння (5) стверджує таке. Оскільки частинка локалізована поблизу вузла ґратки, то можна взяти деяку “частину простору” \mathbb{V} навколо неї. А тоді інтегруванням обчислити енергію взаємодії між частинкою у \mathbb{V} і всіма рештою частинками у $\mathbb{R}^3 \setminus \mathbb{V}$.

Надалі, називатимемо E_{int} (5b) енергією взаємодії, а E_s (5c) – енергією самодії. Таке “розбиття” зручне з фізичної точки зору. Ґрунтуючись на природі потенціалу, що розглядається, ми можемо компенсувати самодію, або ні.

Щоб прояснити останнє твердження розглянемо обидва випадки. Пізніше будемо аналізувати кулонівську взаємодію і для неї однозначно необхідно компенсувати самодію. Це легко перевірити розглянувши виключно одну частинку – потенціальна енергія нульова, частинка навіть не знає, що у неї є якийсь заряд, бо їй немає з чим взаємодіяти.

Хорошим прикладом, коли ми можемо не хотіти компенсувати самодію є викривлення поверхні [11]. Якщо частинка викривляє поверхню, то вона змінює енергію системи, навіть якщо там немає жодної іншої частинки. Для цілей мінімізації можна “вкласти” цю енергію в потенціальну енергію частинки і розглядати як “самодію” [11]. Це може бути хорошим підходом для ефективних взаємодій через середовище.

Тепер підставимо (1) у (5b), щоб отримати енергію взаємодії у термінах одночастинкової функції розподілу ймовірності:

$$E_{int} = \frac{1}{\bar{\rho}^2} \sum_{\mathbf{k} \in \mathbb{Z}^3} |\rho_{\mathbf{k}}|^2 V_{\mathbf{k}}, \quad (6a)$$

$$V_{\mathbf{k}} = \bar{\rho} \iiint_{\mathbb{R}^3} \hat{f}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}') V(|\mathbf{r}'|) d^3 \mathbf{r}', \quad (6b)$$

де $\bar{\rho}$ – середня густина частинок. За більшою кількістю технічних деталей щодо проведеного перетворення можна звернутися до додатку 6.3.

І тепер ми стверджуємо, що (5а), (6), та (5с) є запланованим результатом розділу 2. Зручність цих виразів доволі далеко від того, щоб бути самоочевидною, тож розглянемо їх більш детально. Перш за все, ми намагаємось справитися з розбіжностями коли система стає необмеженою, а потенціал “катастрофічним”. Оскільки в (5с) інтегрування проводиться по паралелепіпедах \mathbb{V} і ρ_{sp} є “хорошою” швидко спадною функцією, то жодних розбіжностей ми тут не отримуємо. Отож, занепокоєння викликає лише (6).

Використовуючи теорію рядів Фур’є, можна легко показати, що є лише один доданок у (6), що може розійтися, коли система стане необмеженою, а потенціал “катастрофічним”:

$$\frac{1}{\bar{\rho}^2} |\rho_0|^2 V_0 = 4\pi \bar{\rho} \int_0^\infty V(r) r^2 dr.$$

Але цей доданок не вміщує жодної інформації про “геометрію ґратки”, він залежить лише від середньої густини частинок. Це означає, що ми можемо порівняти дві ґратки з рівною середньою густиною частинок, навіть якщо міжчастинковий потенціал “катастрофічний”. Ми просто вимірюватимемо енергію від цього доданка як нульового рівня (децю аналогічно до ренормалізації у КТП). Тепер у нас є інструменти, щоб порівнювати енергію ґраток та мінімізувати цю енергію по параметрах ґратки.

Наступний приклад 2.4 показує як обчислити потенціальну енергію довільної ґратки Браве, утвореної зарядженими частинками. За необхідності, всі попередні обчислення і наступні приклади можна звести до двовимірного випадку очевидним чином.

2.4. Приклад: обчислення $E_{int} - E_s$ для екранованого та неекранованого кулонівського потенціалу

Давайте застосуємо формалізм, розроблений у розділі 2.3 до найбільш цікавого випадку – кулонівської взаємодії. Для початку розглянемо екранований кулонівський потенціал

$$V(r) = \frac{q^2 e^{-r/\lambda_D}}{r}, \quad (7)$$

де λ_D – дебайвська відстань екранування, q – заряд частинки. Неекранована взаємодія буде роз-

глядатися як частковий випадок екранованої, коли $\lambda_D \rightarrow \infty$.

Ми підставляємо V з (7) в (6b) і виконуємо інтегрування, щоб отримати $V_{\mathbf{k}}$:

$$V_{\mathbf{k}} = \frac{4\pi \bar{\rho} q^2}{1/\lambda_D^2 + 4\pi^2 \mathbf{k}^T \hat{G} \hat{G}^T \mathbf{k}}. \quad (8)$$

Детально як виконати таке інтегрування можна знайти у додатку 5.

Наступний крок також простий. Візьмемо (8) і підставимо у (6а). Можна зауважити, що нам все ще потрібен $\rho_{\mathbf{k}}$ у цьому рівнянні, щоб отримати повний вираз для енергії взаємодії. Як таке ми використаємо $\rho_{\mathbf{k}}$ для гаусівського одночастинкового розподілу з рівняння (4), приклад 2.2:

$$E_{int} = \sum_{\mathbf{k} \in \mathbb{Z}^3} e^{-4\pi^2 s^2 \mathbf{k}^T \hat{G} \hat{G}^T \mathbf{k}} \frac{4\pi \bar{\rho} q^2}{1/\lambda_D^2 + 4\pi^2 \mathbf{k}^T \hat{G} \hat{G}^T \mathbf{k}}. \quad (9)$$

Для великих значень λ_D ми побачимо, що перші доданки у (9) спадають як $1/|\mathbf{k}|^2$. Але якщо ми запишемо ряд, що включає енергію взаємодії між даною частинкою та будь-якою іншою в лоб, то перші доданки будуть спадати лише як $1/|\mathbf{k}|$. Отож, сума (9) має кращу збіжність.

Щоб обчислити вільну енергію за допомогою (5) нам необхідно знайти вирази для E_{int} і E_s . На даний момент у нас є E_{int} (9) і все ще потрібно E_s (5с). Давайте підставимо гаусіану ρ_{sp} з (3) у (5с), врахуємо “гостроту” цієї гаусіани (означає, що s маленьке) а, виконаємо спрощення

$$E_s = \frac{1}{2\sqrt{\pi} s^3} \int_0^\infty e^{-r'^2/(4s^2)} V(r') r'^2 dr'. \quad (10)$$

Потім ми підставляємо екранований кулонівський потенціал (7) у (10) і ще один раз виконуємо інтегрування:

$$E_s = \frac{q^2}{\sqrt{\pi} s} - \frac{q^2}{\lambda_D}. \quad (11)$$

При обчисленні (11) ми знову прийняли до уваги, що s мале у порівнянні з іншими відстанями у ґратці. Щоб побачити проведені перетворення у деталях, можна скористатися додатком 6.5.

На даний момент вираз для $E_{int} - E_s$ може бути побудований з (9) та (11). Можна бачити, що

для неекранованого кулонівського потенціалу, тобто коли $\lambda_D \rightarrow \infty$ лише один доданок прямує до нескінченності. Це доданок з E_{int} , у якого $\mathbf{k} = 0$ (9). Але цей доданок не містить \hat{G} . Це означає, що там немає залежності від форми ґратки, а лише від середньої густини частинок. Отож, ми можемо застосувати підхід, схожий до ренормалізації у КТП і розглядати цей доданок як “нульовий рівень” енергії. Або ми можемо зауважити, що він рівний $4\pi\bar{\rho}q^2\lambda_D^2$, що є енергією взаємодії з рівномірно розподіленим зарядом. Якщо допустити, що частинки знаходяться в якомусь середовищі з рівномірно розподіленим зарядом протилежного знака, то цей доданок стане автоматично рівний нулю.

Зараз хороший момент щоб зупинитись, але ми хочемо зробити ще один крок – покращення збіжності. Кулонівська взаємодія дуже особлива та всюдисуща, тож виглядає розумним пошукати за настільки хорошим наближенням для енергії частинки, яке лише можливе. Якщо ми введемо середню відстань між частинками

$$l = \frac{1}{\sqrt[3]{\bar{\rho}}}, \quad (12)$$

і припустимо, що ґратка не вироджена, тоді рівняння (10) може бути наближене

$$E_{\text{int}} - E_s = \frac{\sqrt{\pi}q^2}{l} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \frac{e^{-\mathbf{k}^T \hat{G}^{-1} T \hat{G}^{-1} \mathbf{k} / l^2}}{\mathbf{k}^T \hat{G}^{-1} T \hat{G}^{-1} \mathbf{k} / l^2} + \frac{q^2}{\pi l} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \frac{e^{-l^2 \mathbf{k}^T \hat{G} \hat{G}^T \mathbf{k}}}{l^2 \mathbf{k}^T \hat{G} \hat{G}^T \mathbf{k}} - \frac{2\sqrt{\pi}q^2}{l} + 4\pi\bar{\rho}q^2\lambda_D^2. \quad (13)$$

Більше деталей щодо процедури наближення можна знайти у додатку 5.

Можна бачити, що останній доданок рівний енергії у випадку рівномірно розподіленого заряду. Дуже корисно зауважити, що це єдиний доданок, що досягає нескінченності, якщо $\lambda_D \rightarrow \infty$. Це означає, що (13) можна використовувати для порівняння різних ґраток навіть без екранування. Нам необхідно буде лише вимірювати енергію починаючи з $4\pi\bar{\rho}q^2\lambda_D^2$ як “нульового рівня”. Інші доданки є поправками на точковість заряду і включають в себе всю інформацію про геометрію ґратки.

І остання самоперевірка. Кулонівська взаємодія далекодіюча і відстань локалізації s не повинна відігравати жодної значної ролі в апроксимації. Тут

ми можемо бачити, що вона дійсно відсутня. Значно іншою може бути картина для близькодіючої взаємодії, або для ефективних взаємодій з некомпенсованим E_s .

Отримане рівняння (13) у певному сенсі еквівалентне підсумовуванню Евальда – та ж ідея розбиття на дві суми по ґратці та оберненій ґратці; та сама швидкість збіжності. Але підсумовування Евальда включає деякі довільні константи, що підбираються експериментально в залежності від ґратки для досягнення кращої продуктивності. Спосіб вибору цих параметрів може значно відрізнятись у різних роботах [38–45]. У даній статті ми отримали ряд без будь-яких “вільних змінних”. За необхідності, Читач може розглядати даний вивід як отримання ряду Евальда з “вбудованими” параметрами, уже налаштованими для найбільшої продуктивності у межах розглянутої задачі.

І ще одну річ варто зауважити. Ми не фокусуємось на обчисленні потенціальної енергії – це швидше побічний продукт. Що ми хочемо, так це порівняти дві ґратки; нам потрібні лише знаки “<” та “>”, щоб упорядкувати ґратки. Це означає, що навіть якщо отриманий ряд не “надточний” у порівнянні з іншими методами, то все одно він надзвичайно корисний. Як ми побачимо далі, отриманий ряд “зберігає порядок” та дозволяє вичислити параметри ґратки з використанням менш ніж 100 доданків.

3. Використання симетрії ґратки при виконанні комп’ютерної мінімізації потенціальної енергії

У даній роботі ми розробляємо метод дослідження потенціальної енергії однієї частинки в нескінченній ґратці Браве. І нам би хотілось, щоб даний метод був застосовним до мінімізації цієї енергії по параметрах ґратки.

Схоже на те, що рівнянь (6) та (5с), або їх специфічної версії для кулонівської взаємодії (13) повинно бути достатньо. Але той, хто спробує мінімізувати потенціальну енергію використовуючи чисельні методи, зустрінеться з такою проблемою. Всі можливі значення параметрів (трансляційні вектори) і всі можливі ґратки Браве не знаходяться у відповідності один до одного. Існує нескінченна множина можливих трійок трансляційних векторів, що описують одну й ту саму ґратку Браве.

Виконуючи мінімізацію потенціальної енергії, комп'ютер шукає трійку трансляційних векторів, що повинні бути підставлені у вираз для $E_{\text{int}} - E_s$, щоб отримати мінімальне можливе значення. Але через згадані невизначеності він іноді починає вибирати трійки, що містять все довші і довші вектори. Це через те, що виникають помилки заокруглення і алгоритм починає думати, що довші вектори роблять потенціальну енергію меншою. Отож, дуже бажано якось обмежити параметри і позбутися невизначеностей при виборі векторів трансляції.

У цьому розділі 3 проаналізуємо можливі невизначеності і надамо метод як уникнути згаданої проблеми під час процесу мінімізації.

Простіше розпочати з випадку двовимірної ґратки. На рис. 3 показано неоднозначність при виборі параметрів. Можна побачити, що вона усувається, якщо ми вимагатимемо, щоб проекція \mathbf{b} на \mathbf{a} була менше половини \mathbf{a} . В термінах параметрів це можна виразити як

$$0 \leq b \cos(\alpha) \leq \frac{a}{2}. \quad (14)$$

Обмеження для тривимірного випадку дещо більш складні. Щоб краще уявити вектори трансляції можна звернутись до рис. 2. Очевидно, що (14) можна зберегти і для цього випадку. Тож необхідно додати тільки додаткові умови на \mathbf{c} .

Означення вектора \mathbf{c} має ті самі проблеми, що були у \mathbf{b} з рис. 3. Для кожної ґратки Браве \mathbf{c} може бути вибраний таким чином, щоб його проекція потрапляла всередину паралелограма, побудованого на векторах \mathbf{a} та \mathbf{b} . Такий висновок стає очевидним після розгляду рис. 2 та використанні тих же міркувань по відношенню до \mathbf{c} , що раніше вже були застосовані до \mathbf{b} з рис. 3.

А при використанні дзеркального відображення по відношенню до площини XY умови на \mathbf{c} можна ще посилити. Розглянувши рис. 4, можна переконатись, що завжди можна добитись ситуації, щоб \mathbf{c} проектувався на нижню половину паралелограма, побудованого на векторах \mathbf{a} та \mathbf{b} . Отож, з застосуванням виразу для середньої густини частинок (2), можна отримати

$$c_x = c \cos(\beta_c) \cos(\alpha_c) = \frac{\cot(\beta_c) \cos(\alpha_c)}{\bar{\rho} ab \sin(\alpha)},$$

$$c_y = c \cos(\beta_c) \sin(\alpha_c) = \frac{\cot(\beta_c) \sin(\alpha_c)}{\bar{\rho} ab \sin(\alpha)},$$

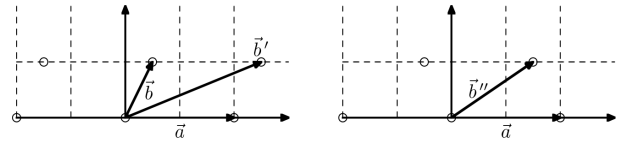


Рис. 3. Та сама ґратка у різних представленнях. Вона має трансляційну симетрію вздовж двох векторів \mathbf{a} та \mathbf{b} . На лівому рисунку показано різний вибір для другого трансляційного вектора \mathbf{b} та \mathbf{b}' . Використовуючи дзеркальне відображення можна показати, що ґратка справа така сама, як і та, що зліва. Отож \mathbf{b}'' є також можливим вибором. При виконанні чисельних розрахунків додаткові обмеження використовуються, щоб обійти дану неоднозначність

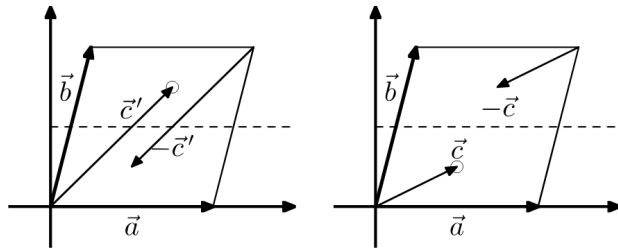


Рис. 4. Проекція однієї й тієї ґратки у різних представленнях на площину XY . Частинки з шару, що знаходиться безпосередньо над площиною XY показано кружечком, а ті, що під площиною – зафарбованим кружечком. Частинки у площині XY в явному вигляді не показані. Неважко бачити, що якщо верхня частинка проектується на верхню половину паралелограма ab , то дзеркальним відображенням відносно площини XY можна досягнути того, щоб вона проектувалась на нижню

а додавши згадане вище обмеження

$$0 < c_y < \frac{b \sin(\alpha)}{2}, \quad (15)$$

$$c_y \cot(\alpha) < c_x < c_y \cot(\alpha) + a.$$

Рівнянь (14) та (15) вже достатньо для того, щоб встановити однозначну відповідність між векторами трансляції та ґратками Браве. У розділі 4 вони будуть використані при обчисленні параметрів кристала, утвореного порошинками в плазмі.

4. Порошинки у запиленій плазмі, пиловий кристал і його ґратка

Як відомо, порошинки у запиленій плазмі взаємодіють і навіть демонструють певну самоорганізацію у формі плавлення та кристалізації пилових кристалів [16–20]. Надалі ми спробуємо застосувати розроблені у розділі 2 методи до даної системи.

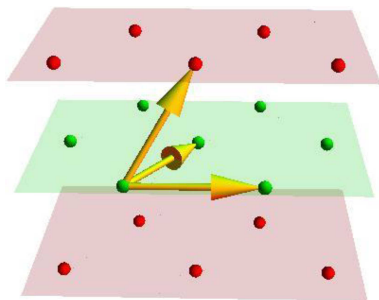


Рис. 5. Частина ґратки, отриманої чисельними розрахунками. Як можна бачити, тривимірна ґратка складається з двох видів площин, кожна містить двовимірну гексагональну ґратку. Єдина різниця між ними – зсув. Частинки в одній площині проєктуються в порожнечу на іншій. Вектори трансляції показано стрілками

Як перше наближення ми припустимо, що порожинки взаємодіють просто як заряджені частинки (слабо екранований кулонівський потенціал). Отримане рівняння (13) (приклад 2.4) дозволяє обчислити енергію довільної ґратки лише підставивши правильну матрицю \hat{G} та виконавши підсумовування. Та куди більш цікаво знайти ґратку з мінімальною енергією при фіксованій середній густині частинок ρ . До того ж, такий результат може бути перевірений експериментально.

Ми виконаємо мінімізацію потенціальної енергії по відношенню до параметрів \hat{G} при константній середній густині частинок. Вираз для $E_{sp} \equiv E_{int} - E_s$ вже було отримано (13), приклад 2.4. А проблему з різними \hat{G} , що представляють ту саму ґратку вирішено введенням обмежень (14) та (15), розділ 3.

Щоб спростити процес мінімізації, виконаємо кілька перетворень над (13). Перш за все ми позначимо $a = l(1 + \delta a)$, $b = l(1 + \delta b)$ і виразимо c через (2). Можна зауважити, що l скорочуються в експонентах та знаменниках (13). Це

Параметр	Обчислене значення	Гексагональна щільна упаковка (ГЩУ)
α	$\approx 1,04717$	$\pi/3 \approx 1,0472$
α_c	$\approx 0,523589$	$\pi/6 \approx 0,5236$
β_c	$\approx 0,955205$	$\arcsin(\sqrt{2/3}) \approx 0,9553$
a	$\approx 1,122462$	$\sqrt[6]{2} \approx 1,12246$
b	$\approx 1,122462$	$\sqrt[6]{2} \approx 1,12246$

означає, що даний метод мінімізації дозволяє виключити середню міжчастинкову відстань і веде до масштаб-інваріантної мінімізації. Цей результат важливий сам по собі – ми стверджуємо, що передбачена мінімізацією ґратка не залежить від середньої густини частинок. Це узгоджується з фізичною інтуїцією, оскільки кулонівська взаємодія далекодіюча і не містить будь-яких характерних параметрів для відстані. І друге – це дозволяє працювати з числами, що зручні для комп'ютера та не викликають занадто значної помилки обчислень. Таким же чином ми проводимо маніпуляції над обмеженнями (14) та (15). Можна бачити, що ми отримуємо ці обмеження шляхом, що зберігає масштаб-інваріантні властивості рівнянь.

Крім того, зауважимо, що необхідно мінімізувати лише частини з \hat{G} і тому знехтуємо іншими доданками у $E_{int} - E_s$ (це нормально, оскільки середня густина частинок константа). Тепер єдиним доданком, що містить l є q/l у виразі для $E_{int} - E_s$. Але його можна винести за дужки і тому він не впливатиме на мінімізацію – ми його просто проігноруємо.

Чисельну мінімізацію було виконано стандартною функцією FindMinimum пакета Wolfram Mathematica v.9. Обидві суми у (13) швидко сходяться, тому границею підсумовування вибрано $|\mathbf{k}| \leq 4$. Якщо взяти більше доданків, то результати мінімізації не зміняться.

Тепер ми представимо результати мінімізації у формі рис. 5 та наступної таблиці.

Розглядаючи рис. 5, можна прийти до думки, що отриманий результат сильно схожий на гексагональну щільну упаковку. ГЩУ також складається з двох почергових площин, кожна з яких містить гексагональну ґратку. Дану гіпотезу легко перевірити, порівнявши відповідні параметри.

Результати порівняння вказують, що отримана ґратка дійсно ГЩУ. Це цілком узгоджується з експериментальними даними та результатами інших комп'ютерних експериментів [16, 17].

5. Висновки

Як висновок хотілось би зробити деякий огляд результатів, що були отримані.

У розділі 2 ми розвинули загальний формалізм для обчислення потенціальної енергії. Будь-

яка ґратка Браве може бути проаналізована в цьому підході, навіть якщо міжчастинковий потенціал “катастрофічний”. Як найцікавіший приклад було розглянуто кулонівський потенціал (екранований та неекранований). А уже в наступному розділі цей результат було застосовано, щоб знайти яку ґратку формують порошинки у плазмі.

Отримані рівняння в якомусь сенсі еквівалентні ряду Евальда – та сама ідея розбиття на дві суми по ґратці та по оберненій ґратці, а також така ж швидкість збіжності. Але підсумовування Евальда включає деякі довільні константи, що вибираються експериментально в залежності від конкретної ґратки, щоб досягнути кращої збіжності. Метод вибору цих параметрів може значно відрізнитись у різних роботах [38–45]. У даній статті отримуємо ряди без будь-яких “вільних параметрів”. За необхідності, Читач може розглядати представлений вивід як отримання суми Евальда з всіма параметрами уже “вбудованими” і підібраними для найбільшої продуктивності обчислень в рамках розглянутої задачі.

Ми не фокусуємося на обчисленні потенціальної енергії самої по собі – це радше побічний продукт. Що ми хочемо, так це порівняти дві ґратки; нам потрібні тільки знаки $<$ та $>$, щоб впорядкувати ґратки. Це означає, що навіть якщо отриманий ряд не “надточний” у порівнянні з іншими підходами, то все одно надзвичайно корисний. Як показано в статті, отримані ряди “зберігають порядок” та дозволяють обчислювати параметри ґратки з менш ніж 100 доданками на одну ґратку.

Але навіть маючи вираз для потенціальної енергії, можна зустрітися з проблемою неоднозначності вибору трансляційних векторів при описі певної ґратки Браве. Під час чисельних розрахунків це може привести алгоритм до вибору все довших і довших трансляційних векторів. Це через те, що виникають помилки заокруглення і алгоритм починає думати, до довші вектори роблять потенціальну енергію меншою. У розділі 3 ми пропонуємо методи вирішення цієї проблеми. Як результат отримуються обмеження на трансляційні вектори. Ці обмеження дозволяють нам позбутися неоднозначності та виконати мінімізацію коректно. Більше того, отримані обмеження так само, як і ряди для мінімізації є “масштаб-інваріантними”, що справляє позитивний вплив на обчислення.

Останній розділ 4 присвячено розгляду заповненої плазми. Ми використовуємо результати з попередніх розділів, щоб визначити тип ґратки пилового кристала. Схоже на те, що нам слід очікувати гексагональну щільну упаковку (ГЩУ) для порошинок у запиленій плазмі. Цей результат не залежить від заряду порошинок, допоки вони всі однаково заряджені. Крім того, немає залежності від відстані екранування, якщо тільки вона значно більша за середню міжчастинкову. Це збігається з іншими чисельними симуляціями [17] та експериментами [16]. Поточний результат отримано з використанням менш ніж 100 доданків на ґратку. Отож ми розглядаємо проведені обчислення як “майже аналітичні” і такі, що залишають можливість колись знайти повністю аналітичний підхід до даного класу проблем.

6. ДОДАТКИ

Впродовж цієї статті ми намагалися проводити строге представлення ідей, але так, щоб фізичний смисл не загубився у великій кількості рівнянь. Тому, розрахунки, які сильно опираються на суто математичні перетворення, були переміщені в додатки. Читач, зацікавлений лише у “фізичній частині”, може їх пропустити.

6.1. Про властивості $f_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})f_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$

У (1) ми показали як обчислити функцію розподілу ймовірності $\rho(\mathbf{r})$ для цілої системи, ґрунтуючись на одночастинковій функції розподілу ймовірності $\rho_{\text{сп}}(\mathbf{r})$. Воно засноване на розкладі $\rho_{\text{сп}}$ з використанням $f_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ (1с) як базисних функцій у оберненій ґратці. Тут ми проведемо розгляд зв'язку між рядами Фур'є та представленими.

Допустимо, у нас є функція $g(\mathbf{u})$ означена на одиничному кубі $\mathbb{U} \equiv [0; 1] \times [0; 1] \times [0; 1]$. Ця функція може бути представлена в термінах рядів Фур'є:

$$g(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k} \in \mathbb{Z}^3} g_{\mathbf{k}} e^{2\pi i(\mathbf{k}^T \mathbf{r})},$$

$$g_{\mathbf{k}} = \iiint_{\mathbb{U}} g(\mathbf{u}) e^{-2\pi i(\mathbf{k}^T \mathbf{u})} d^3 \mathbf{u}. \quad (16)$$

Розглянемо бієкцію \hat{G} (1d) з \mathbb{V} у \mathbb{U} і обернену функцію $\hat{G}^{-1} : \mathbb{U} \rightarrow \mathbb{V}$ (див. рис. 2 для геометричних міркувань):

$$\hat{G}^{-1} = \begin{pmatrix} a & b \cos(\alpha) & c \cos(\alpha_c) \cos(\beta_c) \\ 0 & b \sin(\alpha) & c \sin(\alpha_c) \cos(\beta_c) \\ 0 & 0 & c \sin(\beta_c) \end{pmatrix}. \quad (17)$$

Можна бачити, що рядки \hat{G} є компонентами базисних векторів оберненої ґратки. Ми зацікавлені у випадку $g(\mathbf{u}) = \rho_{\text{сп}}(\hat{G}^{-1} \mathbf{u})$. Оскільки ми знаємо, що $\forall \mathbf{r} \in \mathbb{V}$:

$\rho_{\text{sp}}(\hat{G}^{-1}\hat{G}\mathbf{r}) = \rho_{\text{sp}}(\mathbf{r})$, то можемо відразу записати

$$\rho_{\text{sp}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k} \in \mathbb{Z}^3} g_{\mathbf{k}} e^{2\pi i(\mathbf{k}^T \hat{G}\mathbf{r})}. \quad (18)$$

І таким же способом розглядаємо друге рівняння з (16):

$$g_{\mathbf{k}} = \iiint_{\mathbb{V}} \rho_{\text{sp}}(\hat{G}^{-1}\mathbf{u}) e^{-2\pi i \mathbf{k}^T \hat{G}\hat{G}^{-1}\mathbf{u}} \frac{d^3(\hat{G}^{-1}\mathbf{u})}{J[\hat{G}^{-1}\mathbf{u}]}, \quad (19)$$

де J – якобіан. Тут $\hat{G}^{-1}\mathbf{u}$ розглядається як нова змінна з множини \mathbb{V} .

Якобіан $J[\hat{G}^{-1}\mathbf{u}] = abc \sin(\alpha) \sin(\beta_c) = 1/\bar{\rho}$ є насправді об'ємом \mathbb{V} або оберненою середньою густиною частинок. Позначаючи $g_{\mathbf{k}}$ як $\rho_{\mathbf{k}}$ у (18) та (19), замінюючи змінні у (19) $\hat{G}^{-1}\mathbf{u} \rightarrow \mathbf{r}$ і позначаючи експоненту у (18) як $f_{\mathbf{k}}$ (можна побачити, що експонента у (19) це $f_{\mathbf{k}}^*$, де $*$ позначає комплексне спряження) ми негайно отримуємо рівняння (1). Більше того, отримані результати означають, що всі властивості рядів Фур'є можуть бути застосовані до розкладу (1).

Останнє, що варто згадати – періодичні властивості представлених рядів. Ми збираємося розширити область визначення до \mathbb{R}^3 так що $\rho(\mathbf{r})$ буде визначеною всюди у просторі. Тож тепер необхідно дослідити поведінку цієї функції. З (1d) можна бачити, що якщо $l \in \mathbb{Z}$, $m \in \mathbb{Z}$ та $n \in \mathbb{Z}$:

$$\hat{G}(\mathbf{r} + l\mathbf{a} + m\mathbf{b} + n\mathbf{c}) = \hat{G}\mathbf{r} + l\mathbf{e}_x + m\mathbf{e}_y + n\mathbf{e}_z, \quad (20)$$

де \mathbf{e}_x , \mathbf{e}_y та \mathbf{e}_z є одиничними векторами вздовж координатних осей. З урахуванням (1c)

$$f_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + l\mathbf{a} + m\mathbf{b} + n\mathbf{c}) = f_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (21)$$

і з (1a)

$$\rho(\mathbf{r} + l\mathbf{a} + m\mathbf{b} + n\mathbf{c}) = \rho(\mathbf{r}). \quad (22)$$

Останнє рівняння виправдовує наш погляд на зв'язок між ρ та ρ_{sp} як він представлений на рис. 1.

6.2. Щодо виразу $\rho_{\mathbf{k}}$ для гаусіани ρ_{sp}

Ми допускаємо, що $\rho_{\text{sp}}(\mathbf{r})$ або 0 всюди у $\mathbb{R}^3 \setminus \mathbb{V}$, або по меншій мірі нехтовно мале. Якщо так, то ми можемо змінити границі інтегрування у (1b) на нескінченні.

На даний момент ми зацікавлені у конкретній формі ρ_{sp} (3), отож і підставимо її безпосередньо у (1b). Крім того, позначаємо $\mathcal{K} = 2\pi\mathbf{k}^T \hat{G}$ і переписуємо вираз у декартових координатах, змінюючи кратні інтеграли на їх добуток:

$$\rho_{\mathbf{k}} = \frac{\bar{\rho}}{(2\pi s^2)^{3/2}} \prod_{j=1}^3 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-r_j^2/(2s^2) - i\mathcal{K}_j r_j} dr_j.$$

Останній вираз може бути проінтегрований, якщо ми використаємо таке співвідношення [31]:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-p^2 x^2 \pm qx} dx = \frac{\sqrt{\pi}}{p} e^{q^2/(2p^2)}, \quad \Re(p^2) > 0.$$

Як результат отримуємо

$$\rho_{\mathbf{k}} = \bar{\rho} \prod_{j=1}^3 e^{-\mathcal{K}_j^2 s^2/2} dr_j.$$

Змінюючи добуток експонент на експоненту суми і зауважуючи, що $\sum_j \mathcal{K}_j^2 = \mathcal{K}\mathcal{K}^T = 4\pi^2 \mathbf{k}^T \hat{G}\hat{G}^T \mathbf{k}$, ми негайно отримуємо (4).

6.3. Щодо виразу E_{int}

Давайте розпочнемо з (5b). Внутрішній інтеграл має безмежні границі, отож ми можемо переписати цей вираз таким чином:

$$E_{\text{int}} = \iiint_{\mathbb{V}} \iiint_{\mathbb{R}^3} V(|\mathbf{r}'|) \rho(\mathbf{r}) \rho(\mathbf{r} + \mathbf{r}') d^3\mathbf{r}' d^3\mathbf{r}.$$

Оскільки $\rho(\mathbf{r})$ є дійсним, то його можна замінити на комплексно спряжений $\rho^*(\mathbf{r})$ не змінюючи E_{int} . Тепер ми можемо підставити ρ з (1a) і зауважити, що $f_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{r}') = f_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) f_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}')$ (1c). Отож якщо ми позначимо $V_{\mathbf{k}}$ як у (6b), то зможемо записати

$$E_{\text{int}} = \frac{1}{\bar{\rho}} \sum_{\mathbf{k} \in \mathbb{Z}^3} \rho_{\mathbf{k}} V_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}' \in \mathbb{Z}^3} \rho_{\mathbf{k}'}^* \iiint_{\mathbb{V}} f_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) f_{\mathbf{k}'}^*(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r}.$$

Останнє рівняння можна спростити, якщо ми проведемо інтегрування. З додатку 5 ми очікуємо на ортогональність функцій $f_{\mathbf{k}}$. Давайте зауважимо з (1c) $f_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) f_{\mathbf{k}'}^*(\mathbf{r}) = f_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}(\mathbf{r})$ і ми отримуємо

$$\iiint_{\mathbb{V}} f_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) f_{\mathbf{k}'}^*(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} = abc \sin(\alpha) \sin(\beta_c) \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}. \quad (23)$$

Тут $\delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} = \delta_{k_x, k'_x} \delta_{k_y, k'_y} \delta_{k_z, k'_z}$ – добуток трьох дельта-функцій Кронекера.

Зауважуючи, що $abc \sin(\alpha) \sin(\beta_c) = 1/\bar{\rho}$, де $\bar{\rho}$ є середньою густиною частинок (одна частинка на \mathbb{V} , див. рис. 2 щодо геометричних міркувань), ми отримуємо (6a).

6.4. $V_{\mathbf{k}}$ для екранованого кулонівського потенціалу

Давайте розглянемо рівняння (1c) та (1d) у сферичних координатах

$$f_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{2\pi i \mathbf{r} \cdot \mathbf{k}} (g_{\mathbf{k}} \cos(\theta) + g'_{\mathbf{k}} \cos(\varphi - \delta\varphi_{\mathbf{k}}) \sin(\theta)),$$

$$g_{\mathbf{k}} = \frac{k_x \sin(\alpha_c - \alpha)}{a \tan(\beta_c) \sin(\alpha)} - \frac{k_y \sin(\alpha_c)}{b \tan(\beta_c) \sin(\alpha)} + \frac{k_z}{c \sin(\beta_c)},$$

$$g'_{\mathbf{k}} = \sqrt{\frac{k_x^2}{a^2} + \left(\frac{k_y}{b \sin(\alpha)} - k_x \frac{\cot(\alpha)}{a} \right)^2},$$

і переписемо $V_{\mathbf{k}}$ з (6b)

$$V_{\mathbf{k}} = \bar{\rho} \int_0^{\infty} dr V(r) r^2 \times$$

$$\times \int_0^\pi d\theta \sin(\theta) \underbrace{\int_0^{2\pi} d\varphi e^{2\pi i r (g_{\mathbf{k}} \cos(\theta) + g'_{\mathbf{k}} \cos(\varphi - \delta\varphi_{\mathbf{k}}) \sin(\theta))}}_{I(\theta)}.$$

Інтегруючи по φ , ми отримуємо

$$I(\theta) = 2\pi e^{2\pi i g_{\mathbf{k}} r \cos(\theta)} J_0(2\pi g'_{\mathbf{k}} r \sin(\theta)).$$

Тоді підставимо останній вираз у рівняння для $V_{\mathbf{k}}$:

$$V_{\mathbf{k}} = 2\pi \bar{\rho} \int_0^\infty V(r) r^2 \int_0^\pi e^{2\pi i g_{\mathbf{k}} r \cos(\theta)} \times \\ \times J_0(2\pi g'_{\mathbf{k}} r \sin(\theta)) \sin(\theta) d\theta dr.$$

Ми будемо розглядати екранований кулонівський потенціал (7), що означає, що інтегрування по r може бути виконано. Можна використати таке співвідношення [31]:

$$\int_0^\infty e^{-\alpha x} J_\nu(\beta x) x^{\nu+1} dx = \frac{2\alpha(2\beta)^\nu \Gamma(\nu + \frac{3}{2})}{\sqrt{\pi}(\alpha^2 + \beta^2)^{\nu+3/2}}, \\ \Re(\alpha) > |\Im(\beta)|, \Re(\nu) > -1$$

і поєднати його з рівнянням для $V_{\mathbf{k}}$, щоб отримати

$$V_{\mathbf{k}} = \int_0^\pi \frac{2\pi \bar{\rho} q^2 (1/\lambda_D - 2\pi i g_{\mathbf{k}} \cos(\theta)) \sin(\theta) d\theta}{\left((1/\lambda_D - 2\pi i g_{\mathbf{k}} \cos(\theta))^2 + (2\pi g'_{\mathbf{k}} \sin(\theta))^2\right)^{3/2}}.$$

Заміняючи змінні $t = \cos(\theta)$ і виконуючи інтегрування по t , отримуємо

$$V_{\mathbf{k}} = \frac{4\pi \bar{\rho} q^2}{1/\lambda_D^2 + 4\pi^2 g_{\mathbf{k}}^2 + 4\pi^2 g'_{\mathbf{k}}{}^2}.$$

Останній вираз еквівалентний до (8). Це можна перевірити розписавши $g_{\mathbf{k}}$ та $g'_{\mathbf{k}}$.

6.5. Обчислення E_s для екранованого кулонівського потенціалу

Ми розпочнемо з рівняння (5с) і припустимо, що ρ_{sp} є дуже “гострою” функцією (приклад 2.2). З таким припущенням ми можемо змінити границі інтегрування на нескінченні, а це, в свою чергу, дозволить нам виконати заміну змінних як було зроблено (5):

$$E_s = \iiint_{\mathbb{R}^3} \iiint_{\mathbb{R}^3} V(|\mathbf{r}'|) \rho_{\text{sp}}(\mathbf{r}) \rho_{\text{sp}}(\mathbf{r} + \mathbf{r}') d^3 \mathbf{r}' d^3 \mathbf{r}. \quad (24)$$

Перш за все ми виконаємо деякі математичні перетворення з (3) (у декартовій координатній системі) і запишемо так

$$\rho_{\text{sp}}(\mathbf{r}) \rho_{\text{sp}}(\mathbf{r} + \mathbf{r}') = \frac{1}{8\pi^3 s^6} e^{-[\mathbf{r} + \mathbf{r}'/2]^2/s^2 - \mathbf{r}'^2/(4s^2)}.$$

Тепер можемо підставити цей вираз у (24) і виконати інтегрування по \mathbf{r} . Записуючи результат у сферичній системі координат і інтегруючи по кутах, ми негайно отримуємо (10).

Оскільки ми знаємо явний вираз для V (7), то можемо підставити його в (10) і виконати інтегрування використовуючи означення доповнюючої функції помилок [32]:

$$\text{erfc}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_x^\infty e^{-t^2} dt. \quad (25)$$

Як результат ми отримаємо

$$E_s = \frac{q^2}{\sqrt{\pi} s} \left(1 - \frac{s\sqrt{\pi}}{\lambda_D} e^{s^2/\lambda_D^2} \text{erfc}(s/\lambda_D)\right). \quad (26)$$

Оскільки ми можемо, очевидно, допустити, що s дуже мале у порівнянні з відстанню екранування, то $s \ll \lambda_D$. Отож, ми можемо наблизити останнє рівняння і як результат отримаємо (11).

6.6. Наближення $E_{\text{int}} - E_s$ для екранованого кулонівського потенціалу

Ми розпочнемо з виразу (9) для E_{int} . Але можна зауважити, що він містить вирази $s^2 \hat{G} \hat{G}^T$. Компоненти матриці $\hat{G} \hat{G}^T$ у (9) пропорційні до різних добутків обернених відстаней у ґратці, наприклад, $1/a^2$, $1/(ab)$, і т.ін. (див. (1d)). Оскільки $s \ll a$, $s \ll b$ і $s \ll c$ (припущення про “гостру гаусіану”), то ми очікуємо $|s^2 \hat{G} \hat{G}^T| \ll 1$. Це означає, що експонента “починає діяти” лише для доданків з дуже великими $|\mathbf{k}|$. У цьому розділі ми спробуємо переписати рівняння так, щоб отримати кращу збіжність ряду, ніж є наразі.

Перш за все ми перепишемо вираз для E_{int} таким чином:

$$E_{\text{int}} = \frac{2\bar{\rho}q^2}{\pi} e^{s^2/\lambda_D^2} \int_{2\pi s}^\infty s e^{-s^2/(2\pi\lambda_D)^2} \sum_{\mathbf{k} \in \mathbb{Z}^3} e^{-s^2 \mathbf{k}^T \hat{G} \hat{G}^T \mathbf{k}} ds.$$

Можна легко проінтегрувати цей вираз і перевірити, що він рівний (9).

Ми зауважимо, що змінна s приймає значення як значно менші середньої відстані (12), так і значно більші. Тому ми розіб'ємо інтеграл на два. Перше інтегрування буде проводитись від $2\pi s$ до l , а друге від l до нескінченності.

Ми допускаємо, що ґратка не надто вироджена (розділ 2.4), це означає, що кути α і β_c не повинні сильно відрізнятися від $\pi/2$. Тож ми можемо очікувати, що елементи $s^2 \hat{G} \hat{G}^T$ будуть менші від 1 для першого інтеграла і більші за 1 для другого. Якщо так, то можна виконати друге інтегрування і отримати суму, що сходиться значно краще за (9):

$$E_{\text{int}} = \frac{2\bar{\rho}q^2}{\pi} e^{s^2/\lambda_D^2} \int_{2\pi s}^l s e^{-s^2/(2\pi\lambda_D)^2} \underbrace{\sum_{\mathbf{k} \in \mathbb{Z}^3} e^{-s^2 \mathbf{k}^T \hat{G} \hat{G}^T \mathbf{k}}}_{\Theta(0; s^2 \hat{G} \hat{G}^T)} ds + \\ + 4\pi \bar{\rho} q^2 \sum_{\mathbf{k} \in \mathbb{Z}^3} \frac{e^{s^2/\lambda_D^2 - l^2(1/[2\pi\lambda_D]^2 + \mathbf{k}^T \hat{G} \hat{G}^T \mathbf{k})}}{1/\lambda_D^2 + 4\pi^2 \mathbf{k}^T \hat{G} \hat{G}^T \mathbf{k}}.$$

З (1d) за критерієм Сильвестра [33] можна перевірити, що \hat{G} (1d) є додатньо визначеною матрицею. Очевидно, ми

очікуємо, що \hat{G}^T та їх добуток $\hat{G}\hat{G}^T$ також будуть додатньо визначеними. Оскільки s приймає лише додатні значення, то $s^2\hat{G}\hat{G}^T$ також додатньо визначена. Це означає, що виділена сума у останньому рівнянні є тета-функцією Рімана [34] у точці $z = 0$, тож ми відповідно позначимо її як $\Theta(0; s^2\hat{G}\hat{G}^T)$.

Використовуючи модулярне перетворення [34]:

$$\Theta(z; \hat{A}) = \frac{\pi^{d/2}}{\sqrt{\det \hat{A}}} \Theta(\hat{A}^{-1}z; \hat{A}^{-1}), \quad (27)$$

де d відповідає кількості вимірів (3 у даному випадку), отримуємо

$$\Theta(0; s^2\hat{G}\hat{G}^T) = \frac{\pi^{3/2}}{s^3 \det \hat{G}} \Theta(0; \hat{G}^{-1T}\hat{G}^{-1}/s^2).$$

Ми використали той факт, що $\det \hat{G} = \det \hat{G}^T$ і що множення на s^2 еквівалентно множенню на діагональну матрицю, всі елементи якої рівні s^2 . Явний вираз для \hat{G}^{-1} можна взяти з (17). Крім того, можна зауважити

$$\det \hat{G} = \frac{1}{abc \sin(\alpha) \sin(\beta_c)} = \bar{\rho}, \quad (28)$$

і переписати вираз для E_{int} таким чином:

$$E_{\text{int}} = 2\sqrt{\pi}q^2 e^{s^2/\lambda_D^2} \sum_{\mathbf{k} \in \mathbb{Z}^3} \underbrace{\int_{2\pi s}^l e^{-s^2/(2\pi\lambda_D)^2 - |\hat{G}^{-1}\mathbf{k}|^2/s^2} \frac{ds}{s^2}}_{I(\mathbf{k})} + 4\pi\bar{\rho}q^2 \sum_{\mathbf{k} \in \mathbb{Z}^3} \frac{e^{s^2/\lambda_D^2 - l^2(1/[2\pi\lambda_D]^2 + |\hat{G}^T\mathbf{k}|^2)}}{1/\lambda_D^2 + 4\pi^2\mathbf{k}^T\hat{G}\hat{G}^T\mathbf{k}}.$$

Тепер ми можемо виконати інтегрування і знайти $I(\mathbf{k})$. Оскільки результат дуже складний, то ми спочатку введемо дві допоміжні функції

$$\phi(L) = \frac{e^{-L^2/(2\pi\lambda_D)^2}}{L} - \frac{1}{2\sqrt{\pi}\lambda_D} \operatorname{erfc}\left(\frac{L}{2\pi\lambda_D}\right),$$

$$f_\alpha(L) = e^{\alpha|\hat{G}^{-1}\mathbf{k}|/(\pi\lambda_D)} \operatorname{erfc}\left[\frac{|\hat{G}^{-1}\mathbf{k}|}{L} + \frac{\alpha L}{2\pi\lambda_D}\right],$$

і представимо результат у термінах цих функцій

$$I(\mathbf{k} = 0) = \phi(2\pi s) - \phi(l),$$

$$I(\mathbf{k} \neq 0) = \sqrt{\pi} (f_{-1}(l) - f_{-1}(2\pi s)) / |4\hat{G}^{-1}\mathbf{k}| + \sqrt{\pi} (f_{+1}(l) - f_{+1}(2\pi s)) / |4\hat{G}^{-1}\mathbf{k}|.$$

Використовуючи точний вираз для E_s (26) можна бачити

$$E_s = 2\sqrt{\pi}q^2 e^{s^2/\lambda_D^2} \phi(2\pi s).$$

Тож віднімання \bar{E}_s від E_{int} просто означає нехтування цим доданком.

Наші попередні обчислення не опирались на жодні наближення, але вираз для $I(\mathbf{k} \neq 0)$ дуже складний, тож доведеться їх виконати. Але перш ніж розпочати, необхідно

довести, що наближати дану суму прийнятно. Наступні обчислення поділено на дві частини: *доведення рівномірної збіжності та наближення* саме по собі.

Доведення рівномірної збіжності. Для досягнення цієї мети ми будемо застосовувати критерій Коші для послідовності функцій $f_i(x)$ в області E : $\forall \varepsilon > 0 \exists N \forall m \geq n > N : \forall x \in E : |\sum_{i=n}^m f_i(x)| < \varepsilon$. Надалі $\sum_{\mathbf{k} \in \mathbb{Z}^3} I(\mathbf{k})$ розглядається як послідовність для перевірки збіжності, а елементи \hat{G}^{-1} так само, як s, l та λ_D розглядаються як змінні з множини допустимих параметрів. Ми вже розглядали властивості \hat{G}^{-1} і не будемо заглиблюватися в деталі знову.

Для початку ми скористаємось $s < l < \lambda_D$. Це співвідношення виконується для фізичних систем, які ми розглядаємо, тож буде застосовано у всіх наступних викладках. Це означає, що $f_\alpha(l) > f_\alpha(2\pi s)$ і тому всі доданки в даній сумі будуть додатними і ми можемо опустити модулі. Друга річ, це те, що виконується наступна нерівність

$$0 < \sum_{\mathbf{k} \in \mathbb{Z}^3 \setminus \{0\}} I(\mathbf{k}) < \sum_{\mathbf{k} \in \mathbb{Z}^3 \setminus \{0\}} \frac{f_{-1}(l) + f_{+1}(l)}{|4\hat{G}^{-1}\mathbf{k}|} \sqrt{\pi}.$$

Потім ми застосовуємо співвідношення $\operatorname{erfc}(x) \leq e^{-x^2}$ для $x > 0$ [35] і замінюємо erfc у $f_{\pm 1}(l)$. Розписуючи квадрати в експонентах і виконуючи спрощення, отримуємо

$$\sum_{\mathbf{k} \in \mathbb{Z}^3 \setminus \{0\}} I(\mathbf{k}) < \sum_{\mathbf{k} \in \mathbb{Z}^3 \setminus \{0\}} \frac{\exp\left(-\frac{|\hat{G}^{-1}\mathbf{k}|^2}{l^2} - \frac{l^2}{4\pi^2\lambda_D^2}\right)}{|4\hat{G}^{-1}\mathbf{k}|}.$$

Крім того, було використано, що $2\sqrt{\pi} < 4$.

Тепер ми можемо використати відоме співвідношення $\min_{\|\mathbf{x}\|_2=1} \|\hat{A}\mathbf{x}\|_2 = \sqrt{\lambda_{\min}}$, де λ_{\min} є найменшим власним числом $\hat{A}^\dagger\hat{A}$, а \dagger позначає Ермітове спряження [36]. Ми знаємо, що $\det \hat{G}^{-1} = 1/\bar{\rho} > 0$ і тому $\hat{G}^{-1\dagger}\hat{G}^{-1}$ має ненульові власні значення. Вибираючи з них мінімальне λ_{\min} і позначаючи $g = \sqrt{\lambda_{\min}}$, ми стверджуємо, що $|\hat{G}^{-1}\mathbf{k}| \geq g|\mathbf{k}|$.

Тепер ми повинні змінити багатовимірне підсумовування на одновимірне. Оскільки всі доданки додатні, то ми можемо переставити їх у будь-якому зручному порядку. Отож ми будемо виконувати підсумовування по "поверхнях кубів". Для початку давайте позначимо

$$\mathbb{K}_n = \{\mathbf{k} \in \mathbb{Z}^3 \mid |k_x| \leq n \wedge |k_y| \leq n \wedge |k_z| \leq n\}.$$

Загальна сума може бути виражена як

$$\sum_{\mathbf{k} \in \mathbb{Z}^3 \setminus \{0\}} I(\mathbf{k}) = \sum_{n=1}^{+\infty} \sum_{\mathbf{k} \in \mathbb{K}_n \setminus \mathbb{K}_{n-1}} I(\mathbf{k}),$$

де кількість доданків у $\mathbb{K}_n \setminus \mathbb{K}_{n-1}$ може бути легко обчислена як $(2n+1)^3 - (2n-1)^3 \equiv 24n^2 + 2$. Мінімальна довжина для векторів-інтексів у цій множині n .

Збираючи разом попередні обчислення, отримуємо

$$\sum_{\mathbf{k} \in \mathbb{Z}^3 \setminus \mathbb{K}_m} I(\mathbf{k}) < \sum_{n=m+1}^{+\infty} \frac{(24n^2 + 2) \exp\left(-\frac{g^2 n^2}{l^2} - \frac{l^2}{4\pi^2\lambda_D^2}\right)}{gn}.$$

Подальше доведення очевидно, тож ми його опускаємо. Доведення збіжності для першого доданка у E_{int} може бути проведено куди більш просто за представленою схемою і тому також опускається. Натомість необхідно зробити важливе зауваження. Ряд сходиться краще, коли g/l більше. Враховуючи фізичний зміст даної змінної, ми отримуємо таке твердження: якщо спроектувати вектори \mathbf{a} , \mathbf{b} та \mathbf{c} на осі X , Y та Z відповідно (див. рис. 2) і поділити їх на середню відстань у ґратці $\sqrt[3]{\rho}$, то ми отримаємо міру на скільки добре сходиться ряд, або за фізичним змістом – на скільки дана ґратка близька до кубічної.

Наближення. Ми враховуємо, що $s \ll l \ll \lambda_D$, нехтуємо всіма доданками, що містять l/λ_D і s/λ_D у erfc і наближаємо $\text{erfc}(x \rightarrow \infty) \sim e^{-x^2}/(x\sqrt{\pi})$ [37]. Очевидно $f_\alpha(l) \gg f_\alpha(2\pi s)$ і тому всі f з аргументами $2\pi s$ можуть бути знехтувані. Крім того, ми нехтуємо всіма малими доданками у показниках експонент та знаменниках дробів. Щоб зробити цю процедуру більш очевидною, ми стверджуємо $|\hat{G}^{-1}\mathbf{k}|/l > l/\lambda_D$. Це означає, що відстань екранування достатньо велика, щоб не відчувати відхилення ґратки від кубічної. Це веде до рівнянь

$$\phi(l) \approx \frac{1}{l}, \quad I(\mathbf{k} \neq 0) \approx \frac{l}{2|\hat{G}^{-1}\mathbf{k}|^2} e^{-|\hat{G}^{-1}\mathbf{k}|^2/l^2}.$$

Щоб отримати перше з них, були використані рівність $\text{erfc}(x) = 1 - \text{erf}(x)$ і наближення $\text{erf}(x \rightarrow 0) \sim 2x/\sqrt{\pi}$ [37].

Тепер можна записати наближене рівняння (13).

- V.E. Fortov, A.V. Ivlev, S.A. Khrapak, A.G. Khrapak, G.E. Morfill. Complex (dusty) plasma: Current status, open issues, perspectives. *Phys. Rep.* **421**, 1 (2005) [DOI: 10.1016/j.physrep.2005.08.007].
- H. Löwen. Melting, freezing and colloidal suspensions. *Phys. Rep.* **237**, 249 (1994) [DOI: 10.1016/0370-1573(94)90017-5].
- G.E. Morfill, H.M. Thomas, U. Konopka, M. Zuzic. The plasma condensation: Liquid and crystalline plasmas. *Phys. Plasmas* **6**, 1769 (1999) [DOI: 10.1063/1.873435].
- Y. Bilotsky. On calculation of lattice energy in spatially confined domains. *Advances in Materials Science and Applications* **2**, (4), 127 (2013).
- L.N. Kantorovich, I.I. Tupitsyn. Coulomb potential inside a large finite crystal. *J. Phys.: Condens. Matter* **11**, 6159 (1999).
- L.P. Buhler, R.E. Crandal. On the convergence problem for lattice sums. *J. Phys. A: Math. Gen.* **23**, 2523 (1990) [DOI: 10.1088/0305-4470/23/12/029].
- D. Borwein, J.M. Borwein, R. Shail, I.J. Zucker. Energy of static electron lattices. *J. Phys. A: Math. Gen.* **20**, 1519 (1988) [DOI: 10.1088/0305-4470/21/7/015].
- T.R.S. Prasanna. Physical meaning of the Ewald sum method. *Philosophical Magazine Letters* **92**, No.1, 29 (2012) [DOI: 10.1080/09500839.2011.622725].
- Y. Bilotsky, M. Gasik. A new approach for modelling lattice energy in finite crystal domains. *Phys.: Conf. Ser.* **633**, 012014 (2015) [DOI: 10.1088/1742-6596/633/1/012014].
- D.M. Heyes, A.C. Brańka. Lattice summations for spread out particles: Applications to neutral and charged systems. *J. Chem. Phys.* **138**, 034504 (2013) [DOI: 10.1063/1.4775367].
- B.I. Lev, V.P. Ostroukh, V.B. Tymchyshyn, A.G. Zagorodny. Statistical description of the system electrons on the liquid helium surface. *Eur. Phys. J. B* **87**:253 (2014) [DOI: 10.1140/epjb/e2014-50303-2].
- D. Ruelle. *Statistical Mechanics: Rigorous Results* (W.A. Benjamin, 1969).
- A. Isihara. *Statistical Mechanics* (Academic Press, 1971).
- K. Huang. *Statistical Mechanics* (J. Wiley and Sons, 1963).
- R. Baxter. *Exactly Solved Models in Statistical Mechanics* (Academic Press, 1982).
- B. Klumov, G. Joyce, C. Rāth, P. Huber, H. Thomas, G.E. Morfill, V. Molotkov, V. Fortov. Structural properties of 3D complex plasmas under microgravity conditions. *Europhysics Letters* **92** (1), 15003 (2010) [DOI: 10.1209/0295-5075/92/15003].
- B.A. Klumov, G.E. Morfill. Structural properties of complex (dusty) plasma upon crystallization and melting. *JETP Letters* **90** (6), 444 (2009) [DOI: 10.1134/S002136400918009X].
- B.I. Lev, A.G. Zagorodny. Structure formation in system of Brownian particle in dusty plasma. *Phys. Lett. A* **373**, 1101 (2009) [DOI: 10.1016/j.physleta.2009.01.044].
- B.I. Lev, V.B. Tymchyshyn, A.G. Zagorodny. Brownian particle in non-equilibrium plasma. *Condens. Phys.* **12**, 593 (2009) [DOI: 10.5488/CMP.12.4.593].
- H. Thomas, G.E. Morfill, V. Demmel, J. Goree, B. Feuerbacher, D. Mohlmann. Plasma crystal: Coulomb crystallization in a dusty plasma. *Phys. Rev. Lett.* **73**, 652 (1994) [DOI: 10.1103/PhysRevLett.73.652].
- P. Ewald. Die Berechnung optischer und elektrostatischer Gitterpotentiale. *Ann. Phys.* **369** (3), 253 (1921) [DOI: 10.1002/andp.19213690304].
- J.H. Chu, Lin I. Direct observation of Coulomb crystals and liquids in strongly coupled rf dusty plasmas. *Phys. Rev. Lett.* **72**, 4009 (1994) [DOI: 10.1103/PhysRevLett.72.4009].
- A. Melzer, T. Trottenberg, A. Piel. Experimental determination of the charge on dust particles forming Coulomb lattices. *Phys. Lett. A* **191**, 301 (1994) [DOI: 10.1016/0375-9601(94)90144-9].
- S.V. Vladimirov, S.A. Khrapak, M. Chaudhuri, G.E. Morfill. Superfluidlike motion of an absorbing body in a collisional plasma. *Phys. Rev. Lett.* **100**, 055002 (2008) [DOI: 10.1103/PhysRevLett.100.055002].
- H. Ikezi. Coulomb solid of small particles in plasmas. *Phys. Fluids* **29**, 1764 (1986) [DOI: 10.1063/1.865653].
- A. Melzer, A. Homann, A. Piel. Experimental investigation of the melting transition of the plasma crystal. *Phys. Rev. E* **53**, 2757 (1996) [DOI: 10.1103/PhysRevE.53.2757].

27. A.G. Sitenko, A.G. Zagorodny, V.N. Tsytovich. Fluctuation phenomena in dusty plasmas. *AIP Conf. Proc.* **345**, 311 (1995) [DOI: 10.1063/1.49020].
28. S.A. Brazovsky. Phase transition of an isotropic system to a nonuniform state. *Sov. Phys. JETP* **41** (1), 85 (1975).
29. B.I. Lev, H. Yokoyama. Selection of states and fluctuation under the first order phase transitions. *Int. J. Mod. Phys. B* **17**, 4913 (2003) [DOI: 10.1142/S021797920302274X].
30. H. Totsuji, T. Kishimoto, C. Totsuji. Structure of confined yukawa system (dusty plasma). *Phys. Rev. Lett.* **78**, 3113 (1997) [DOI: 10.1103/PhysRevLett.78.3113].
31. I.S. Gradshteyn, I.M. Ryzhik. *Table of integrals, series, and products* (Academic Press, 2007).
32. A. Erdélyi, W. Magnus, F. Oberhettinger, F. G. Tricomi. *Higher Transcendental Functions* (Krieger, 1981), Vol. 2.
33. R. Bellman. *Introduction to Matrix Analysis* (Society for Industrial and Applied Mathematics, 1970).
34. R. Bellman. *A Brief Introduction to Theta Functions* (Holt, Rinehart and Winston, 1961).
35. M. Chiani, D. Dardari, M.K. Simon. New exponential bounds and approximations for the computation of error probability in fading channels. *IEEE Transactions on Wireless Communications* **4** (2), 840 (2003) [DOI: 10.1109/TWC.2003.814350].
36. C. Meyer. *Matrix Analysis and Applied Linear Algebra* (SIAM, 2000).
37. M. Abramowitz, I. Stegun. *Handbook of Mathematical Functions With Formulas, Graphs, and Mathematical Tables* (Tenth Printing, 1972).
38. B.R. Brooks, R.E. Bruccoleri, B.D. Olafson, D.J. States, S. Swaminathan, M. Karplus. HARMM: A program for macromolecular energy, minimization, and dynamics calculations. *J. Comput. Chem.* **4**, 187 (1983) [DOI: 10.1002/jcc.540040211].
39. T. Darden, D. York, L. Pederson. Particle mesh Ewald: An $N \cdot \log(N)$ method for Ewald sums in large systems. *J. Chem. Phys.* **98**, 10089 (1993) [DOI: 10.1063/1.464397].
40. B. Nijboer, E De Wette. On the calculation of lattice sums. *Physica* **23**, 309 (1957) [DOI: 10.1016/S0031-8914(57)92124-9].
41. J. Kolafa, J. Perram. Cutoff errors in the Ewald summation formulae for point charge systems. *Mol. Simulation* **9**, 351 (1992) [DOI: 10.1080/08927029208049126].
42. J. Perram, H. Petersen, S. De Leeuw. An algorithm for the simulation of condensed matter which grows as the $3/2$ power of the number of particles. *Mol. Phys.* **65**, 875 (1988) [DOI: 10.1080/00268978800101471].
43. Z. Rycerz, P. Jacobs. Ewald summation in the molecular dynamics simulation of large ionic systems. *Mol. Simulation* **8**, 197 (1992) [DOI: 10.1080/08927029208022476].
44. W. Smith. FORTRAN code for the Ewald summation method. *Information Quarterly for Computer Simulation of Condensed Phases* **21**, 37 (1986).
45. D. York, W. Yang. The fast Fourier Poisson method for calculating Ewald sums. *J. Chem. Phys.* **101**, 3298 (1994) [DOI: 10.1063/1.467576].

Одержано 23.09.16

B.I. Lev, V.B. Tymchyshyn, A.G. Zagorodny

POTENTIAL ENERGY ANALYSIS
FOR A SYSTEM OF INTERACTING PARTICLES
ARRANGED IN A BRAVAIS LATTICE

S u m m a r y

We propose a method to calculate the type of a lattice formed by grains in dusty plasma and estimate its potential energy. Basically, this task is complicated by the interparticle potential that appertains to “catastrophic potentials”. This kind of potentials needs special approaches to avoid divergences during potential energy calculations. In the current contribution, we will develop all the necessary modifications to appropriate methods. It will be shown that the obtained potential energy expression can be used to determine lattice parameters and these parameters comply to known experimental data.