

Monte-Carlo Simulation von Coulomb balls

Diplomarbeit

vorgelegt von

Henning Baumgartner

Institut für Theoretische Physik und Astrophysik
der Christian-Albrechts-Universität zu Kiel
Kiel, Januar 2006

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
1.1	Motivation	1
1.2	Experiment	3
1.2.1	Aufbau	3
1.2.2	Beobachtungen	4
2	Modell	7
2.1	Hamiltonfunktion	7
2.2	Schalenmodelle	9
2.2.1	Avilov und Hasse	9
2.2.2	Ichimaru und Tsuruta	10
2.2.3	Bonitz und Kraeft	12
2.3	Numerische Resultate. Grundzustände	13
3	Monte-Carlo Simulation	19
3.1	Allgemeines	19
3.2	Algorithmus	21
3.2.1	Ergodizität. Anpassung der Schrittweite	22
4	Endliche Temperaturen. Schmelzverhalten	25
4.1	Experimentelle Ergebnisse	27
4.2	Analytische Beschreibung	28
4.2.1	Clusterkompression	28
4.2.2	Fluktuationen im lokalen Zwei-Teilchenpotential	31
4.3	Schmelzpunkte	37
4.4	Kopplungsparameter	39
5	Simulationsergebnisse	43
5.1	Fluktuationen. Schmelzpunkte	43
5.2	Potentialbarrieren	50
6	Vergleich mit experimentellen Ergebnissen	53
6.1	Abschirmung	53

6.1.1	Clusterkompression	53
6.1.2	Schalenpopulation. Temperaturabhängigkeit	56
6.1.3	Debyelänge	58
6.2	Staubtemperatur	61
7	Zusammenfassung	65
A	Anhang	67
A.1	Metropolis Algorithmus	68
A.2	Schrittweitenregelung	70
A.3	Monte-Carlo Simulation	72
A.4	Fluktuationsberechnungen	74
	Abbildungsverzeichnis	82
	Tabellenverzeichnis	83
	Literaturverzeichnis	87

Kapitel 1

Einleitung

1.1 Motivation

In dieser Arbeit wird ein Modell vorgestellt und untersucht, das stark gekoppelte Systeme beschreibt. Dabei gibt der Kopplungsparameter Γ einer Menge geladener Teilchen, definiert als Verhältnis der Wechselwirkungsenergie zur kinetischen Energie

$$\Gamma = \frac{|\langle U_{WW} \rangle|}{\langle U_{kin} \rangle}, \quad (1.1)$$

Aufschluß über die Stärke der Kopplung des Systems. Bei hoher Kopplung befindet sich das System in kristallinem Zustand und bei niedriger Kopplung in flüssiger oder gasförmiger Phase. Hier wird ein systematischer Überblick des Schmelzverhaltens im Modell

$$H = \sum_i^N \frac{p_i^2}{2m_i} + \sum_i^N \frac{m_i}{2} \omega^2 r_i^2 + \sum_{i=1}^N \sum_{j=i+1}^N \frac{q^2}{4\pi\epsilon r_{ij}} e^{-\kappa r_{ij}}, \quad (1.2)$$

gegeben. Dabei ist p_i der Impuls, m_i die Masse und r_i die Koordinaten des Teilchens i , wobei $r_{ij} = |r_i - r_j|$ der Abstand der Teilchen i und j zueinander ist. Alle Größen sind dimensionlos, indem sie mit Hilfe von $r_0 = (q^2/2\pi\epsilon m_i \omega^2)^{1/3}$, dem Zwei-Teilchen-Gleichgewichtsabstand für reine Coulomb-Wechselwirkung ($\kappa = 0$), und $E_0 = (m_i \omega^2 q^4 / 32\pi^2 \epsilon^2)^{1/3}$, der Zwei-Teilchenenergie im Fall reiner Coulomb-Wechselwirkung für den Grundzustand, angegeben werden. Die Teilchen in diesem System ordnen sich sphärisch symmetrisch um das Zentrum an und im Bereich starker Kopplung bezeichnet man dieses System als *Coulomb-ball*. Coulomb balls sind eine besondere Art von $3d$ -Plasmakristallen [18, 28, 38]. Sie sind sphärisch symmetrisch. Die Anordnung der Teilchen in ineinanderliegenden Schalen kann auch bei Ionenkristallen in Paul- [8, 12] und Penningfallen [37] in der Atomphysik experimentell beobachtet werden und wird für weitere Systeme, z.B. bei einem expandierenden, neutralem Plasma [20, 29], erwartet. Verwandte Systeme im Bereich der Festkörperphysik sind der Elektron-Wigner-Kristall [11] oder

der erst kürzlich vorhergesagte Lochkristall [5].

Systeme starker Kopplung in komplexen Plasmen wurden zunächst in $1d$ - [26] und $2d$ -Systemen [25] untersucht. Die Entdeckung und systematische Untersuchung der $3d$ -Kristalle geht auf ein Experiment [3], durchgeführt im Jahr 2003, der Kieler Arbeitsgruppe Plasmadynamik des Instituts für experimentelle und angewandte Physik der Christian-Albrechts-Universität (CAU) zurück.

Ein weiteres Ziel der in dieser Arbeit vorgestellten Methoden ist die Entwicklung einer Diagnostik zur Bestimmung wichtiger Plasmaparameter, z.B. der Abschirm- oder Debyelänge λ_D , die die Reichweite des Coulomb-Potentials beschreibt,

$$\lambda_D = \sum_{\alpha} \left(\frac{\epsilon_0 k_B T_{\alpha}}{e^2 n_{\alpha 0}} \right)^{\frac{1}{2}}, \quad \alpha : \text{Spezies} \quad (1.3)$$

oder aber der Staubtemperatur T_d aus Vergleichen der Modellergebnisse mit experimentellen Beobachtungen. Hier spielt insbesondere der Vergleich mit dem Experiment an der CAU [3] eine wichtige Rolle, das Coulomb balls in einem komplexen Plasma untersucht.

Ein klassisches Plasma ist ein ionisiertes Gas, das neben neutralen Atomen aus freien Elektronen und Ionen besteht. Diese Teilchen bestimmen die charakteristischen Eigenschaften, Quasineutralität, Abschirmlänge und kollektives Verhalten eines Plasmas.

In einem komplexen Plasma befinden sich zusätzlich mikroskopische Partikel, sogenannte Staubteilchen. Die Partikel werden durch Ströme der freien Ladungsträger auf die Partikeloberfläche aufgeladen. Die sehr hohe Beweglichkeit der Elektronen - im Vergleich zu den Ionen - führt im allgemeinen zu einer negativen Aufladung der anfangs neutralen Staubteilchen. Diese Ladung liegt in Größenordnungen von einigen tausend Elementarladungen. Damit befindet sich im Plasma eine weitere Spezies, die aufgrund ihrer hohen Masse und Ladung eigene dynamische Effekte hervorruft.

Normalerweise sind Laborplasmen schwach gekoppelte Systeme. Es herrschen hohen Temperaturen bei niedrigem Druck vor. Stark korrelierte Plasmen findet man nur bei hohen Dichten und niedrigen Temperaturen, z. B. im Bereich der Astrophysik in weißen oder braunen Zwergen oder bei Ionenkristalle in Paul- und Penning-Fallen vor. Die Problematik der Untersuchung von Ionenkristallen liegt bei den niedrigen Temperaturen in der Größenordnung von mK und den nur schwer realisierbaren Beobachtungsmöglichkeiten bei Systemgrößen von einigen Atome.

Um die erwähnten Phänomene zu verstehen, gilt der theoretischen Beschreibung des Gebietes von flüssigen und festen Zuständen in stark gekoppelten Systemen, wie den Coulomb balls, großes Interesse. Im Experiment [3] gibt die Bezeichnung Coulomb ball bereits Aufschluß über die Anordnung der Staubteilchen in diesem komplexen Plasma bei Raumtemperatur. Die Staubpartikel haben einen Durchmesser von einigen Mikrometer und ordnen sich zu sphärischen Kugeln an. Die

vergleichsweise große Partikelgröße erlaubt eine direkte Beobachtung mit einfacher Video-Mikroskopie.

Die Herausforderung besteht darin, diese Systeme theoretisch zu beschreiben, denn bisher fehlte die Möglichkeit sowohl der Überprüfung der theoretischen Voraussagen am Experiment als auch die erforderliche Rechenleistung, da bei stark gekoppelten Systemen eine Vielzahl wechselwirkender Teilchen eingeht.

Besonders interessant ist hier die Zusammenarbeit mit der Arbeitsgruppe der experimentellen Plasmaphysik an der CAU, da vor Ort ein Vergleich zwischen den theoretischen Ergebnissen und den Beobachtungen an einem Experiment zum vorliegenden Thema vorgenommen werden kann.

Beschreibt das vorliegende Modell Coulomb balls richtig, so kann ein Austausch der gewonnenen Erkenntnisse mit anderen Fachgebieten erfolgen, da auch hier großes Interesse darin besteht, stark korrelierte Systeme zu verstehen. Die Bedingungen für genauere Untersuchungen von Ionenkristallen oder weißen und braunen Zwergen sind dort um vieles schwieriger.

1.2 Experiment

Diese Arbeit untersucht das durch die Hamiltonfunktion (1.2) beschriebene Modell, das sich auch auf die Anordnung und Dynamik der Coulomb balls und der zugehörigen Experimente [3] anwenden läßt. Hierbei handelt es sich um ein Experiment das ebenfalls an der Christian-Albrechts-Universität zu Kiel durchgeführt wird. Die mit dem Modell produzierten Ergebnisse können mit den Beobachtungen dieses Experiments verglichen werden. Nur so läßt sich eine Beurteilung der Qualität über das Zutreffen von Vorhersagen treffen.

Der verhältnismäßig einfache experimentelle Zugang zu diesen Systemen - die Beobachtung erfolgt durch CCD-Kameras - erklärt das besondere Interesse an dieser Art von stark korrelierten Systemen.

1.2.1 Aufbau

Dieses Experiment wird genutzt, um 3d Coulomb Kristallisation zu untersuchen. Es eignet sich aufgrund der Transparenz, der langsamen Dynamik und der makroskopischen Dimension für die Beobachtung stark gekoppelter Systeme. Kürzlich wurden Messungen vorgenommen, um die die Partikel einschließenden Kräfte zu erforschen [2].

Der Versuch wird unter Vakuumbedingungen vorgenommen und besteht aus einer kapazitiv gekoppelten rf-Entladung. Ein schematischer Aufbau ist in Abbildung 1.1 gezeigt. Die beheizbare rf-Elektrode hat einen Durchmesser von ca. 170 mm. Vier große Fenster erlauben die Beobachtung der Entladung und des Teilcheneinfangs.

Typische Entladungsparameter sind die rf-Amplitude von 20 – 30 V bei Fre-

quenzen von $13,54\text{ MHz}$ und einem Neutralgasdruck in Argon von $20 - 120\text{ Pa}$. Ein oben und unten offener Glaswürfel mit Seitenlänge 30 mm wird in die Mitte der Elektrode platziert. Die Heizbarkeit der Elektrode erlaubt Temperaturen von Raumtemperatur bis 90°C .

Als Staubpartikel werden monodisperse Melamine-Formaldehyd Kugeln eingesetzt. Ihre Dichte beträgt 1514 kg/m^3 . Für die Coulomb ball Generierung wird nur der manuelle Dispenser benötigt. In ihm befinden sich Partikel mit einem Durchmesser von $4,8\text{ }\mu\text{m}$.

Der Aufbau der Diagnostik ist in Abb.1.1b) dargestellt. Die CCD-Kamera und der Laser sind zusammen an einem in nur eine Richtung verfahrbaren Gestell rechtwinklig zueinander montiert. Der aufgeweitete Laserstrahl beleuchtet eine Schichtbreite von ca. $200\text{ }\mu\text{m}$ innerhalb der Staubwolke. Das gestreute Licht wird mit der CCD-Kamera detektiert. Man erhält verschiedenen Schnitte durch die Teilchenwolke, indem das Gestell entlang der y-Richtung bewegt wird.

1.2.2 Beobachtungen

Mit den richtigen Einstellungen der rf-Amplitude und der Elektrodentemperatur kann man sphärische Staubwolken innerhalb der Glasbox erzeugen. Die Teilchen ordnen sich wie auf Kugelschalen an. Abhängig von der Zahl der beteiligten Partikel - es sind bisher nur Coulomb balls mit 100 Teilchen und mehr erzeugt worden - bilden sich Wolken mit Durchmessern von typischerweise $3 - 10\text{ mm}$. Der typische Teilchenabstand ist $500\text{ }\mu\text{m}$.

Externe Parameter sind Gasdruck, Elektrodentemperatur und rf-Amplitude. Der Gasdruck beeinflusst zwar die Dämpfung der individuellen Teilchenbewegung, nicht aber den Einfang von Teilchen. Die Elektrodentemperatur hingegen ist eine entscheidende Größe für die Erzeugung der Teilchenfalle. Ist die Temperatur zu niedrig, zieht sich die Kugel vertikal in die

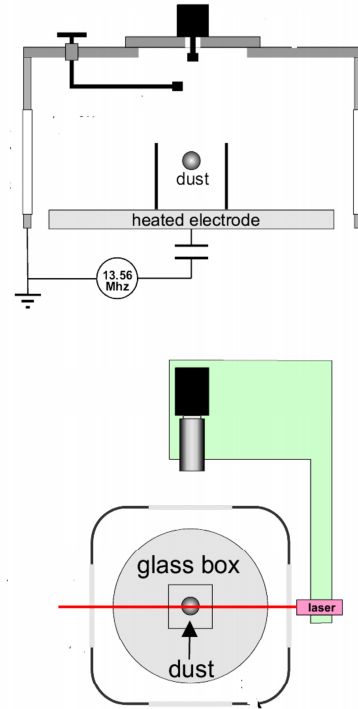


Abbildung 1.1: a) Schnitt durch die Entladungskammer innerhalb des Vakuumsgefäßes: Die Staubpartikel werden im offenen Glaswürfel gefangen. b) Blick auf die Anordnung: Ein aufgefächelter Laserstrahl beleuchtet eine dünne Ebene der Staubwolke. Die Bildaufnahme geschieht über eine CCD-Kamera, die rechtwinklig zum Laserstrahl montiert ist [2].

Länge, ist die Temperatur zu hoch, bildet sich eine in der horizontalen Ebene gestauchte Kugel. Ebenso ändert sich mit der Form die Höhe der Levitation. Je höher die Elektrodentemperatur, desto größer wird die Distanz der Staubwolke zur Elektrode. Der Richtwert von 75°C hat sich bewährt [2, 3].

Ein entgegengesetztes Verhalten bezüglich der Levitation tritt bei der Veränderung der rf-Amplitude auf. Eine niedrige rf-Amplitude führt zu einer niedrigen Levitationsdistanz zur Elektrode und zur Expansion der Staubwolke. Erhöht man die rf-Amplitude bis zu einem bestimmten Wert, schrumpft die Staubwolke immer weiter zusammen, bis das Entladungsregime sich innerhalb des Glaswürfels abrupt ändert. Ein Einfang der Partikel ist in der Glasbox nicht mehr möglich.

Das Experiment liefert aus den Beobachtungen die Positionen \vec{r}_i , Geschwindigkeiten \vec{v}_i und damit die Trajektorien aller Teilchen direkt aus der Videomikroskopie. Daraus erhält man die Schalenbesetzungen und beispielsweise Fluktuationen, die den Vergleich mit der Theorie auf mikroskopischer Ebene in Kapitel 6 ermöglichen.

Kapitel 2

Modell

Für ein komplexes Plasma, bestehend aus Elektronen, Ionen, Neutral- und Staubteilchen, gibt es bisher noch keine selbstkonsistente mikroskopische Beschreibung. Auch Computersimulationen aller vier Komponenten wurden bisher noch nicht durchgeführt, da sowohl die Zeitskalen, auf denen Änderungen für die entsprechende Spezies passieren, als auch die Längenskalen und Energieskalen sehr unterschiedlich sind. Eine solche umfassende Simulation ist theoretisch sehr komplex und benötigt enorme Rechenleistungen, die in dieser Größenordnung bisher nicht zur Verfügung standen. Daher müssen Annahmen gemacht werden, die das Modell so vereinfachen, daß die Physik noch korrekt wiedergegeben ist, aber der Zeitaufwand der Modellsimulation verringert wird.

Es wird versucht, ein solches einfaches Modell für eine Komponente des Plasmas, die Staubteilchen, in Simulationen umzusetzen und die Ergebnisse mit dem Experiment zu vergleichen, um die Güte des Modells zu beurteilen. Dafür betrachten wir die Staubkomponente. Alle Wechselwirkungen mit den anderen Komponenten des Plasmas spiegeln sich nur in der Abschirmung κ der Wechselwirkung der Staubteilchen untereinander wieder. Einflüsse durch die Dynamik der anderen Komponenten werden komplett vernachlässigt. Die Falle, in der sich die Staubteilchen anordnen, wird durch ein externes parabolisches Potential hervorgerufen, das nur einen Parameter enthält, die Frequenz der Falle ω .

Die Staubteilchen sind makroskopische Teilchen, weshalb klassische Simulationen gerechtfertigt sind.

2.1 Hamiltonfunktion

Die Hamiltonfunktion des Modellsystems (1.2) setzt sich aus der kinetischen Energie

$$E_{kin} = \sum_i^N \frac{p_i^2}{2m_i},$$

dem parabolischen, externen Potential, dem *Confinement*,

$$E_{Conf} = \sum_i^N \frac{m_i}{2} \omega^2 r_i^2 \quad (2.1)$$

und der Summe über alle Wechselwirkungen der Teilchen im System

$$E_{WW} = \sum_i^N \sum_{j=i+1}^N \frac{q^2}{4\pi\epsilon r_{ij}} e^{-\kappa r_{ij}} \quad (2.2)$$

zusammen. Für die Rechnungen in diesem Modell wird angenommen, daß alle Teilchen die gleiche Ladung $q_i = q_j$ besitzen. Die kinetische Energie wird in der Monte-Carlo (*MC*)-Simulation nicht explizit enthalten sein, eine Besonderheit dieser Art von Computersimulation (siehe Kapitel 3). Das externe, parabolische Potential ist unabhängig von der Abschirmung und damit unabhängig von den anderen Komponenten des komplexen Plasmas. Es gibt andere Modelle [9, 32], die weitere Komponenten enthalten. So entsteht bei dem Modell [32] ein *Self-Confinement*. Dieses Modell nimmt eine kugelförmige, örtlich feste Raumladung an, die nach außen wie ein Coulomb Potential wirkt und im Innenraum ein parabolisches Confinement erzeugt. Zusammen mit der abstoßenden Coulomb- bzw. Yukawa-Kraft entstehen auch in diesem Modell sphärisch konzentrische Anordnungen der Staubteilchen. Bei dem Vergleich mit dem Experiment [3] und deren Besetzungszahlen der Schalen und dem experimentell bestimmten Confinement [2] zeigt sich keine Übereinstimmung mit dem Modell [32]. Später wird auch gezeigt, daß die Annahme eines externen, parabolischen Potentials - unabhängig von der Abschirmung κ - gerechtfertigt ist.

Die Wechselwirkung zwischen den Staubteilchen wird in dem Modell 1.2 als abgeschirmte Coulomb- oder *Yukawa*-Wechselwirkung angenommen. Die Abschirmung

$$\kappa = \frac{r_0}{\lambda_D} \quad (2.3)$$

steht mit der Debyelänge λ_D (s. 1.3), die auch dimensionslos in Einheiten von r_0 angegeben wird, in Zusammenhang. Diese Abschirmlänge enthält die Wechselwirkung des Staubs mit den anderen Plasmaspezies, die die reine Coulomb-Wechselwirkung zwischen den Staubteilchen abschwächen. Der Term, der die Wechselwirkungen der Teilchen untereinander enthält, skaliert in der Rechenzeit mit $\frac{N(N-1)}{2} \rightarrow N^2$. Daher werden Simulationen bzw. Berechnungen für Systeme mit großen Teilchenzahlen sehr aufwendig.

Neben den Computersimulationen wurde schon seit 1991 an ersten analytischen Modellen [17] gearbeitet, die weiter verbessert wurden [6,33]. Bei diesen Modellen wird eine reine Coulomb-Wechselwirkung und eine homogene Verteilung der Ladungen auf Schalen der Dicke Null betrachtet. Diese *Zwiebelschalenmodelle* eignen sich sehr gut, um schnell Teilchenenergien und Besetzungszahlen abzuschätzen.

Die geometrische Struktur der geladenen Staubpartikel auf den Schalen und dazwischen, wird hier, ebenso wie der Einfluß der anderen Plasmakomponenten auf den Staub durch eine Yukawa-Wechselwirkung, vernachlässigt.

2.2 Schalenmodelle

Die Idee für das Schalenmodell entsteht aus den Kondensatorgleichungen für geladene Kugeln [13]. Die folgenden Formeln sind für eine gleichmäßig geladene Kugel des Radius a und der Gesamtladung q bekannt. Die potentielle Energie ist

$$E = \alpha \frac{q^2}{a}. \quad (2.4)$$

Der Vorfaktor α hängt davon ab, ob man die Ladung als gleichmäßig verteilt im Innenraum annimmt ($\alpha = \frac{3}{5}$), nur an der Oberfläche ($\alpha = \frac{1}{2}$) oder als Punktladung ($\alpha = 1$) betrachtet. Besteht die Kugeloberfläche aus Z Einzelladungen, ergibt sich statt 2.4 mit $\alpha = \frac{1}{2}$ der modifizierte Ausdruck

$$E_{Oberfl.} = \frac{1}{2} \frac{Z(Z-1)e^2}{a}. \quad (2.5)$$

Eine Grundannahme bei der Betrachtung des Gesamtsystems im Sinne des Zwiebschalenmodells ist, daß die Teilchen auf infinitesimal kleinen konzentrischen Schalen sitzen und dort homogen verteilt sind. Die Teilchen befinden sich alle genau im Abstand R_i vom Zentrum entfernt und die Teilchendichte ist durch

$$n(r) = \sum_{\nu=1}^L N_{\nu} \delta(r - R_{\nu}) \quad (2.6)$$

gegeben, wobei L die Anzahl der Schalen in dem System ist und N_{ν} Anzahl der Teilchen auf der Schale ν und R_{ν} Radius der Schale ν sind. Damit ergibt sich die gesamte Teilchenzahl zu

$$N = \int_0^{\infty} dr n(r) = \sum_{\nu=1}^L N_{\nu}. \quad (2.7)$$

2.2.1 Avilov und Hasse

Mit den zuvor erläuterten Ausdrücken für die potentielle Energie einer Kugel und der Energie für zwei Teilchen im Gleichgewichtsabstand E_0 läßt sich nun 1.2 für den Grundzustand im Coulomb-Fall ($\kappa = 0$), also ohne kinetische Energie ($T = 0$), umschreiben. Im Schalenmodell gibt es L Schalen mit N_{ν} Teilchen pro Schale ν . Der Radius der Schale ν ist R_{ν} . Die Massen der Staubteilchen werden als

gleich angenommen, $m_i = m_j = m, \forall i, j \in N$ und für alle Teilchen $i = 1 \dots N_\nu$, die sich auf der selben Schale befinden, gilt $r_i = r_j = R_\nu, \forall i, j \in 1 \dots N_\nu$. Daraus folgt für eine Schale

$$\sum_{i=1}^{N_\nu} m_i r_i^2 = m \cdot N_\nu \cdot R_\nu^2,$$

so daß das externe Confinement im Schalenmodell unter der Voraussetzung, daß N Ladungen auf L Schalen verteilt sind, in

$$\sum_{i=1}^N \frac{m_i}{2} \omega^2 r_i^2 \Rightarrow m \omega^2 \sum_{\nu=1}^L \frac{N_\nu}{2} R_\nu^2 \quad (2.8)$$

übergeht. Der Wechselwirkungsterm über alle Paare

$$\frac{q^2}{4\pi\epsilon} \sum_{i=1}^N \sum_{j=i+1}^N \frac{1}{r_{ij}} \stackrel{2.5 \wedge 2.4}{\Rightarrow} \frac{q^2}{4\pi\epsilon} \sum_{\nu=1}^L \left(\frac{1}{2} \frac{N_\nu(N_\nu - 1)}{R_\nu} + \sum_{\mu < \nu} \frac{N_\nu N_\mu}{R_\nu} \right) \quad (2.9)$$

teilt sich in die Wechselwirkungen der Paare auf einer Schale und in die Wechselwirkungen der Paare zu den inneren Schalen auf. Die Wechselwirkungen der Paare auf einer Schale ergeben sich mit Hilfe von (2.5) zu $\frac{1}{2} \frac{N_\nu(N_\nu - 1)}{R_\nu}$ und die Wechselwirkungen mit einer inneren Schale μ werden durch eine Punktladung im Zentrum des Coulomb balls der Ladung $N_\mu \cdot q$ genähert (vgl. (2.4)). So ergibt sich mit den dimensionslosen Größen r_0 und E_0 das Schalenmodell von Hasse und Avilov [17]

$$\epsilon_{Coul} + \epsilon_{Conf} = \sum_{\nu=1}^L \left(\frac{N_\nu}{NR_\nu} \frac{N_\nu}{2} + \frac{1}{2N} N_\nu R_\nu^2 + \sum_{\mu < \nu} \frac{N_\mu N_\nu}{NR_\nu} \right). \quad (2.10)$$

Dabei ist $\epsilon = \frac{E(N)}{N}$, wobei die Energie E in Einheiten von E_0 angegeben wird. Der erste Term beschreibt die Wechselwirkung der Teilchen auf einer Schale untereinander (vgl. (2.5)), wobei hier offensichtlich die -1 in $N_\nu(N_\nu - 1)$ vergessen wurde. Der zweite Term entspricht (2.8) und enthält das Confinement, also die Begrenzung durch das externe Potential, und der dritte Term enthält die Summe über die Wechselwirkung mit allen inneren Schalen (vgl. (2.4)). Das bedeutet, daß die Schale ν als separiert von den anderen Schalen angenommen wird.

2.2.2 Ichimaru und Tsuruta

Eine wesentliche Verbesserung des Schalenmodells gelang Ichimaru und Tsuruta [33] durch die Einführung eines Zentralteilchens. Dieses Schalenmodell enthält L Schalen ($L \geq 1$) und zusätzlich ζ Teilchen ($\zeta = 0 \vee 1$) im Zentrum. Der

Coulomb ball hat den Radius R , die Schalen haben die Radien R_ν und enthalten N_ν Teilchen, für die gilt

$$N = \sum_{\nu=1}^L N_\nu + \zeta. \quad (2.11)$$

Die gesonderte Behandlung des Zentralteilchens in (2.11) läßt es im Gegensatz zu (2.10) erst zu, daß ein Teilchen im Zentrum sitzen kann. Die Ladung ist gleichmässig auf den Schalen verteilt.

$$\begin{aligned} \epsilon &= \frac{E_{Modell}(N)}{N} \\ &= \sum_{\nu=1}^L \underbrace{\left\{ \underbrace{\frac{N_\nu}{NR_\nu} \left(\frac{N_\nu - \sqrt{N_\nu}}{2} \right)}_{(1)} + \underbrace{\sum_{\mu < \nu} \frac{N_\nu}{NR_\nu} N_\mu}_{(2)} + \underbrace{\frac{N_\nu}{NR_\nu} \zeta}_{(3)} + \underbrace{\frac{N_\nu}{2N} R_\nu^2}_{(4)} \right\}}_{n_\nu(N)} \\ &\quad - \frac{9}{10} N^{2/3} \end{aligned} \quad (2.12)$$

Der Term (2), der die Wechselwirkung einer Schale mit den inneren Schalen enthält (vgl. 2.4) ist gegenüber dem Modell von Avilov und Hasse unverändert. Der dritte Summand (3) stellt die Erweiterung der Wechselwirkung mit dem Zentralteilchen dar und ergibt sich einfach aus der gesonderten Behandlung dieses Teilchens. Der vierte Term (4) entspricht wieder dem Confinement (vgl. (2.8)). Die Herleitung des Terms (1), der die Wechselwirkung der Teilchen auf einer Schale untereinander beschreibt, ist etwas komplizierter. Avilov und Hasse haben hierfür $\frac{N_\nu}{NR_\nu} \frac{N_\nu}{2}$ angegeben. Nach (2.5) hätte dieser Term schon $\frac{N_\nu(N_\nu-1)}{2NR_\nu}$ sein müssen. Dieser Term wird noch durch die Annahme des *Ion-sphere models* [19] modifiziert, die eine Wechselwirkung eines Teilchens mit weiteren Ladungen auf der Schale nur außerhalb der von diesem Teilchen selbst eingenommenen Oberfläche zuläßt. Die Oberfläche der Schale ν ist $4\pi R_\nu^2$, die eines Teilchens auf dieser Schale $\frac{1}{N_\nu} 4\pi R_\nu^2$. Damit verhält sich der Radius der Schale zu dem eines Teilchens dieser Schale wie $R_\nu : R_\nu/\sqrt{N_\nu}$. Der Term $-\frac{9}{10} N^{2/3}$ berücksichtigt den neutralisierenden Hintergrund im Modell des Ein-Komponenten-Plasmas (OCP), der durch extensive Monte-Carlo Rechnungen [10] eines OCPs mit periodischen Randbedingungen (PBC) zu $-0.895929\dots$ für *bcc*- und $-0.895874\dots$ für *fcc*-Gitter bestimmt wurde. Dieser Term tritt nur auf, wenn ein neutralisierender Hintergrund als Confinement im Modell genutzt wird.

Die Besetzungszahlen und Radienvoraussagen dieses Modells können [33] entnommen werden und stellen eine gute Verbesserung gegenüber dem Modell [17] dar. Diese Ergebnisse für die Radien der Schalen, die Energien und die Besetzungszahlen stimmen verhältnismässig gut mit den exakten Ergebnissen aus Molekulardynamik-Simulationen überein.

2.2.3 Bonitz und Kraeft

Eine weitere Verbesserung, um die bestehenden Differenzen, insbesondere in den Besetzungszahlen und Energien zu verkleinern, ist die Einführung eines Parameters α . Die Energie in den Zwiebelschalenmodellen [17, 33] wird normalerweise auf der Grundlage der *Hartree-Näherung* diskutiert. Diese nähert die N-Teilchen-Wellenfunktion durch ein Produkt von Ein-Teilchen-Wellenfunktionen an. Das entspricht hier der Näherung der Gesamtenergie durch die Ein-Teilchen-Energie, was dazu führt, daß die so approximierte Energie immer größer als die tatsächliche Energie ist. Das Modell (2.12) wird um den Parameter α vor dem Wurzelterm erweitert, um die Korrelationen des Terms $N_\nu - \sqrt{N_\nu}$ in (1) der Gleichung (2.12) zu präzisieren. In dieser Näherung ist $\alpha = 1.1$ exakt, wohingegen in diesem Modell der Parameter α als freier Parameter im Bereich $0.98 \dots 1.18$ betrachtet wird.

$$\begin{aligned} \epsilon &= \frac{E_{model}(N)}{Nq^2/R} \\ &= \sum_{\nu=1}^L \frac{N_\nu}{NR_\nu} \left[\left(\frac{N_\nu - \alpha\sqrt{N_\nu}}{2} \right) + \sum_{\mu < \nu} N_\mu + \zeta + \frac{R_\nu^3}{2} \right] - \frac{9}{10}N^{2/3} \quad (2.13) \end{aligned}$$

Eine Variationsrechnung mit den Parametern ζ , N_ν und α ergibt die Energien und Radien des Systems. Erste Rechnungen [21, 22] zeigen, daß α gegen 1.105 für Teilchenzahlen $N \geq 300$ konvergiert. Mit diesem Wert werden die besten Übereinstimmungen zu den exakten Rechnungen erzielt. Dennoch weisen die Besetzungszahlen der Schalen weiterhin Differenzen auf.

Den hier vorgestellten analytischen Schalenmodellen ist gemeinsam, daß sie nur eine reine Coulomb-Wechselwirkung zwischen den Teilchen beschreiben und dennoch die Grundzustandsenergien und auch die Besetzungszahlen nicht exakt wiedergeben. Kürzlich wurde auch ein Schalenmodell [31, 32] für eine Yukawa-Wechselwirkung entwickelt. Die Unzulänglichkeiten, insbesondere die Annahme, daß im Experiment der Staub nur einer Coulomb-Wechselwirkung unterliegt, führen dazu, daß Simulationen mit einer Yukawa-Wechselwirkung notwendig sind. Neben (1.2) gibt es nur noch ein weiteres Modell [9]. Dieses Modell enthält ein zusätzliches attraktives Potential, das die räumliche Anordnung der Coulomb balls bewirkt. Sowohl für (1.2) als auch [9] sind intensive Computersimulationen erforderlich, um die exakten Grundzustandsenergien, Besetzungszahlen und Radien der Schalen zu bestimmen. Über die Güte der Modelle für die Beschreibung der Coulomb balls in staubigen Plasmen kann nur der Vergleich mit dem Experiment entscheiden, der in Kapitel 6 folgt.

2.3 Numerische Resultate. Grundzustände

Zur Bestimmung des Grundzustandes wird die Hamiltonfunktion (1.2) bei gegebener Fallenfrequenz ω , Masse der Staubteilchen m und Abschirmung κ minimiert. In [24] wurden dafür *Molekulardynamik(MD)*-Simulationen mit reiner Coulomb-Wechselwirkung ($\kappa = 0$) durchgeführt. In der Molekulardynamik werden alle N Bewegungsgleichungen der Staubteilchen, die als klassisch betrachtet werden können, in allen drei Dimensionen für verschiedene Zeiten gelöst. Das Ergebnis sind Trajektorien $(\vec{r}(t), \vec{v}(t))$ im $6N$ -dimensionalen Phasenraum Ω , mit Hilfe derer alle physikalischen Eigenschaften bestimmt werden können. Für die Berechnung des Grundzustandes eines Systems in dem Modell (1.2) werden die v_i zu jedem Zeitschritt gleichmäßig reduziert und damit das System abgekühlt, so daß die Teilchen am Ende der Simulation in einem Minimum sitzen. Dieses so bestimmte Minimum kann immer noch ein lokales Minimum sein, so daß diese Simulation sehr oft wiederholt werden muß, um mit einer hohen Sicherheit sagen zu können, daß der angegebene Zustand der Grundzustand und kein angeregter Zustand ist. Das Ergebnis dieser Simulation wird in Auszügen für Cluster mit $N \leq 100$ Teilchen mit bereits durchgeführten Berechnungen [17,24] in Tabelle 2.1 verglichen. Die durch MD-Simulationen, die bis zu 10000 mal wiederholt wurden, berechneten Grundzustände für Systeme mit $N \leq 160$ können der Referenz [1] entnommen werden.

Die in der vorliegenden Arbeit verwendete Methode, die MC-Simulation, eignet sich auch, um Grundzustände zu berechnen. Da MC-Simulationen immer zu endlichen Temperaturen $k_B T$ durchgeführt werden, ist das unüblich. MC-Simulationen enthalten nicht den kinetischen Term in dem Modell 1.2, sondern stattdessen die Temperatur $k_B T$, in dem Algorithmus selbst. Um den Grundzustand eines Systems zu bestimmen, kühlt man das System langsam ab. Zu jeder konstanten Temperatur wird das System ins thermodynamische Gleichgewicht gebracht. Eine genaue Begründung und Beschreibung der MC-Methode und des verwendeten Metropolis Algorithmus folgt in Kapitel 3. Sowohl die Art der Abkühlung (-sfunktion) als auch die Anzahl der MC-Schritte, sowie die Methode zur Anpassung der Schrittweite, bestimmen die Laufzeit bis ein möglicher Grundzustand gefunden wird. Wie in den MD-Simulationen ist ein möglicher Grundzustand nicht zwangsläufig das globale Minimum, so daß auch diese Simulation sehr häufig wiederholt wird. Bei kleineren Clustern ($N \leq 100$) wurde die MC-Simulation für jedes System $x = \max\{20, N\}$ mal wiederholt. Die Ergebnisse für die Energien pro Teilchen $\frac{E}{N}$ stimmen mit den MD-Simulationen bis zur vierten Nachkommastelle überein. Eine höhere Genauigkeit läßt sich durch häufigeres Wiederholen der Simulationen erzielen.

Tabelle 2.1 zeigt einen Auszug aus dem Vergleich der Simulationen durch Avilov und Hasse [17] mit den MD-Rechnungen von Ludwig et al. [24] und den MC-

N	Konfiguration			Energien pro Teilchen ($\frac{E}{N}$)		
	Avilov/H. [17]	MD [24]	MC	Avilov/H. [17]	MD [24]	MC
3	(3)	(3)	(3)	1.0400	1.04004	1.04004
4	(4)	(4)	(4)	1.4174	1.41741	1.41741
11	(11)	(11)	(11)	3.5822	3.58219	3.58219
12	(12)	(12)	(12)	3.8407	3.84069	3.84069
13	(12; 1)	(12; 1)	(12; 1)	4.1009	4.10089	4.10089
18	(17; 1)	(17; 1)	(17; 1)	5.3010	5.30099	5.30099
28	(24; 4)	(25; 3)	(25; 3)	7.4200	7.4198	7.41980
29	(26; 3)	(25; 4)	(25; 4)	7.6162	7.6159	7.61590
30	(27; 3)	(26; 4)	(26; 4)	7.8098	7.8092	7.80919
31	(28; 3)	(27; 4)	(27; 4)	8.0026	8.0001	8.00011
34	(30; 4)	(30; 4)	(30; 4)	8.5648	8.5647	8.56470
35	(30; 5)	(30; 5)	(30; 5)	8.7488	8.7487	8.74874
40	(34; 6)	(34; 6)	(34; 6)	9.6437	9.6436	9.64361

Tabelle 2.1: Auszug berechneter Grundzustandskonfigurationen und Grundzustandsenergien durch MD-Simulationen von Avilov und Hasse [17] und Ludwig et al. [24] und MC-Simulation. Die Differenzen in Grundzustandsenergien von den Simulationen zu dem Schalenmodell treten ab $N \geq 28$ auf. Bei $N = 28, 29, 30, 31$ sind auch Abweichungen in der Grundzustandskonfiguration des Schalenmodells gegenüber den Simulationen erkennbar.

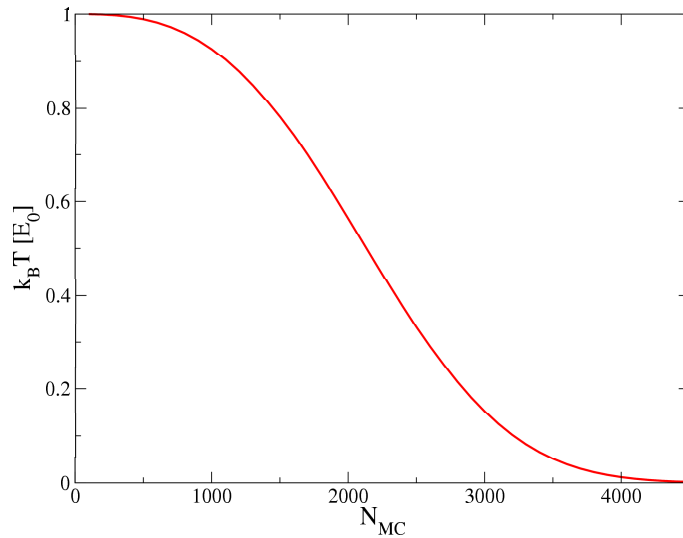


Abbildung 2.1: Temperatur des Wärmebades in der MC-Simulation während der Suche des Grundzustandes eines Systems mit $N = 12$ Teilchen. N_{MC} ist der aktuelle MC-Schritt. Bei größeren Systemen steigt die Dauer der Simulation deutlich an und der Bereich, in dem langsamer abgekühlt wird, (hier ab ca. 3000 MC-Schritten) ist größer.

Simulationen dieser Arbeit. Die Tabelle zeigt, daß die Ergebnisse der Berechnungen bis $N \leq 27$ gut mit den neueren Simulationen übereinstimmen, sowohl in den Besetzungszahlen als auch in den Energien. Ab Systemen mit $N \geq 28$ zeigt sich jedoch, daß die Energien aus [17] systematisch größer sind und sich gelegentlich auch die Konfigurationen unterscheiden. Die Angaben $(A; B)$ für eine Konfiguration sind bezogen auf die radiale Verteilung der Teilchen, die letzte Angabe in Klammern B gilt für die innerste Schale. $(A; B)$ bedeutet, daß sich B Teilchen auf der innersten Schale und A Teilchen auf der nächsten Schale befinden. Systematisch gibt es ab Systemen mit $N \geq 80$ Teilchen Unterschiede in den Konfigurationen zwischen [17] und den neueren Simulationen. Die Anzahl der lokalen Minima steigt exponentiell mit der Anzahl der Teilchen im System, so daß die Vermutung nahe liegt, daß in früheren Rechnungen wie denen von Avilov und Hasse die Grundzustandssuche nicht häufig genug wiederholt wurde. Die Ergebnisse der MC-Simulation für $N \leq 100$ haben sowohl die bereits durchgeführten MD-Simulationen [24] bestätigt, als auch den MC-Code getestet.

Im Vergleich mit den Schalenmodelle zeigt sich auch die Unverzichtbarkeit der Computersimulation des Modells (1.2), da die bisherigen Schalenmodelle die Grundzustände und deren Konfigurationen nicht korrekt wiedergeben, sondern nur eine gute Näherung sind. Insbesondere im Bereich der Systeme, bei denen neue Schalen eröffnet werden (z.B. $N = 12, 13$) sind die Differenzen groß, da die Schalenmodelle die Geometrie der Anordnung der Staubteilchen in der homoge-

nen Verteilung (2.6) in den Schalenmodellen nicht gut wiedergeben.

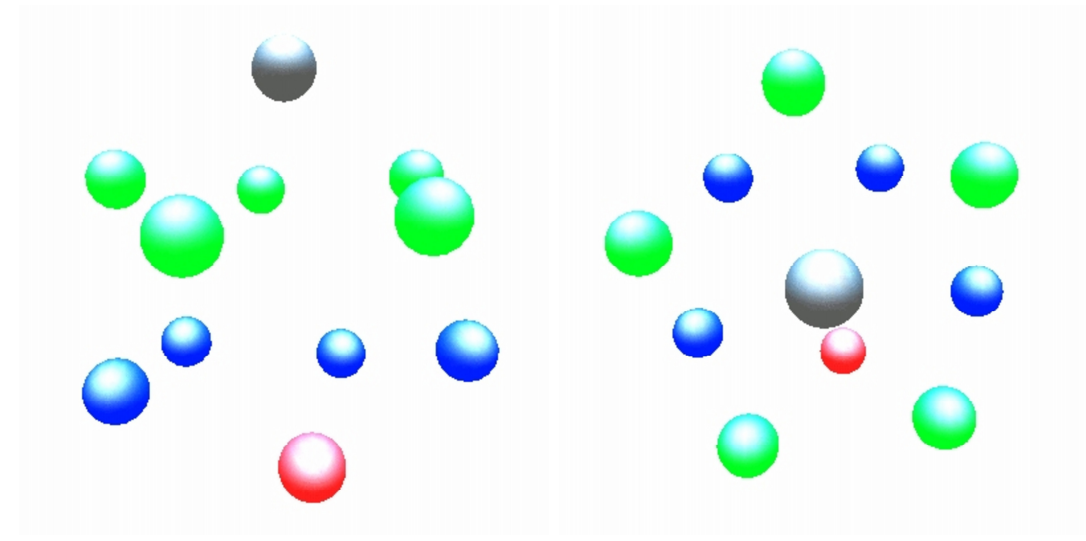


Abbildung 2.2: Coulomb ball mit $N = 11$ Teilchen in Seiten- (linke Grafik) und Frontalansicht (rechte Grafik). Zur Veranschaulichung der Symmetrie wurden die Teilchen unterschiedlich eingefärbt.

Bei sehr kleinen mesoskopischen Systemen spielt die Symmetrie eine große Rolle. Als Beispiel sind hier zwei Systeme ausgewählt, um die unterschiedlichen Symmetrien zu beschreiben. Die Abbildung 2.2 zeigt einen Coulomb ball mit $N = 11$ Teilchen in Frontal- und Seitenansicht. In der Seitenansicht kann man gut erkennen, daß die grüne Schicht aus 5 Teilchen und die blaue Schicht aus 4 Teilchen besteht. Dadurch haben die Teilchen auch unterschiedlich viele Nachbarn im Gegensatz zu dem System mit $N = 12$ Teilchen in Abbildung 2.3. Hier befinden sich alle Teilchen exakt auf dem gleichen Radius vom Zentrum und haben alle 5 Nachbarn. Dieses System besitzt eine perfekte Symmetrie, solche Coulomb balls werden als *magische Cluster* bezeichnet. Die perfekte Symmetrie zu zerstören erfordert deutlich mehr thermische Energie als bei einem System, in dem die Teilchen unterschiedlich viele Nachbarn haben. Die Ergebnisse dieser Voronoi-Analyse für Systeme mit $N \leq 190$ können in [24] gefunden werden.

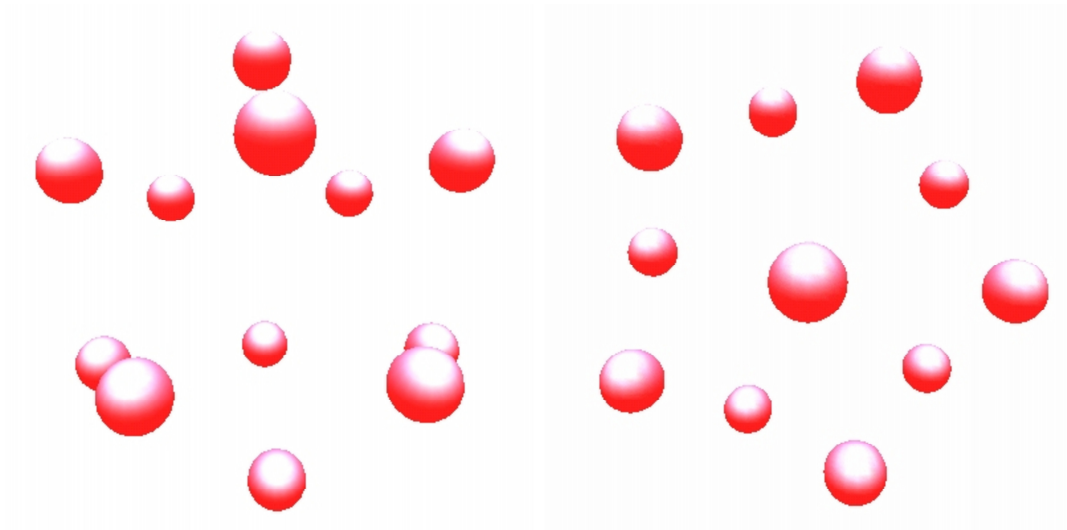


Abbildung 2.3: Coulomb ball mit $N = 12$ Teilchen in Seiten- (linke Grafik) und Frontalansicht (rechte Grafik). Alle Teilchen befinden sich auf einer Schale und haben eine perfekte fünfzählige Symmetrie.

Kapitel 3

Monte-Carlo Simulation

In Kapitel 2.3 wurde bereits das Ergebnis von MC-Simulationen zur Berechnung von Grundzuständen des Modells (1.2) gezeigt. Im folgenden wird die Methode und der Algorithmus der hier verwendeten klassischen MC-Simulation beschrieben.

3.1 Allgemeines

MC-Simulationen sind eine spezielle Art von Simulation, in der man keine Kraftgleichungen löst - wie in den MD-Simulationen - sondern einen wahrscheinlichkeitsgewichteten Weg im Phasenraum abgeht. Diese Art von Simulationen sind besonders gut geeignet, hochdimensionale Integrale oder statistische Mittelwerte einer Größe A

$$\langle A \rangle = \sum_{x \in \Omega} P(x) A(x) \quad (3.1)$$

zu berechnen. Dabei ist $P(x)$ ein normiertes statistisches Gewicht, im folgenden ein Boltzmanngewicht, und $A(x)$ ist der Wert der Größe A im Zustand x . Dabei ist x der Zustand, der durch die Koordinaten \vec{r}_i und Geschwindigkeiten \vec{v}_i aller Teilchen beschrieben wird und A beispielsweise die Energie des Systems. Die Summation läuft hier über den gesamten Phasenraum Ω der Teilchen im System. Um nicht alle möglichen Zustände x summieren zu müssen, wird eine *Markov-Kette* x_1, x_2, \dots von Zuständen in Ω erzeugt, deren Häufigkeit wie das Gewicht $P(x)$ verteilt ist (Importance Sampling). Dann läßt sich (3.1) in das einfache arithmetische Mittel der Größe A umschreiben

$$\langle A \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N A(x_i).$$

Wenn die Markov-Kette den gesamten Raum Ω bedeckt, ist der Algorithmus ergodisch, d.h. daß der zeitliche Mittelwert gleich dem Ensemblemittelwert ist.

Ein solcher Algorithmus ist der *Metropolis-Algorithmus* [27].

Ein Ensemblemittelwert der klassischen statistischen Physik ist gegeben durch

$$\langle f \rangle = \frac{\int_{\Omega} f(\vec{x}) \rho(\vec{x}) d\vec{x}}{\int_{\Omega} \rho(\vec{x}) d\vec{x}}, \quad (3.2)$$

mit \vec{x} als einem Zustand im Phasenraum Ω , ρ der Zustandsdichte des Systems und $f(\vec{x})$ einer beliebigen Funktion von \vec{x} . Für ein System von N Teilchen eingeschlossen in einem Volumen V bei der Temperatur T (kanonisches NVT -Ensemble) gilt für die Zustandsdichte ρ

$$\rho(\vec{x}) = e^{-\beta H(\vec{x})}, \quad (3.3)$$

mit $\beta = \frac{1}{k_B T}$, k_B Boltzmannkonstante und $H(\vec{x})$ der Hamiltonfunktion des Systems. Eingesetzt in (3.2) und Aufspaltung der Hamiltonfunktion in kinetische und potentielle Energie, die wiederum aus Confinement- und Wechselwirkungsenergie zusammengesetzt ist, folgt daraus

$$\langle f \rangle = \frac{\int \int_{V^N} f(\vec{r}) e^{-\beta(T(\vec{p})+V(\vec{r}))} d\vec{p} d\vec{r}}{\int \int_{V^N} e^{-\beta(T(\vec{p})+V(\vec{r}))} d\vec{p} d\vec{r}},$$

dabei sind \vec{r} und \vec{p} $3N$ -dimensionale Vektoren, deren Komponenten die Koordinaten und Impulse aller Teilchen im System enthalten. Das Integral über \vec{p} läßt sich kürzen und es bleibt

$$\langle f \rangle = \frac{\int_{V^N} f(\vec{r}) e^{-\beta V(\vec{r})} d\vec{r}}{\int_{V^N} e^{-\beta V(\vec{r})} d\vec{r}},$$

so daß es bei der MC-Methode ausreichend ist, die potentielle Energie zu kennen um thermodynamische Mittelwerte berechnen zu können. Die explizite Kenntnis der kinetischen Energie ist im Gegensatz zur Molekulardynamik nicht nötig. Bei der MC-Methode ersetzt man, wie oben beschrieben, nun die Integration durch eine Summation von Konfigurationsraumpunkten $\{\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_M\}$

$$\langle f \rangle \approx \bar{f}_M = \frac{\sum_i^M f(\vec{r}_i) e^{-\beta V(\vec{r}_i)}}{\sum_i^M e^{-\beta V(\vec{r}_i)}}. \quad (3.4)$$

Bei der einfachsten MC-Methode, dem *Simple-Sampling*, wählt man die Punkte \vec{r}_i rein zufällig und gleichverteilt aus dem Konfigurationsraum aus und erhält so eine charakteristische Stichprobe. Allerdings wählt man so mit großer Wahrscheinlichkeit Zustände aus, bei denen $\rho(\vec{r})$ sehr klein ist, so daß man über eine größere Anzahl Stichproben summieren muss. Diesen Nachteil vermeidet das *Importance-Sampling*, da man hier Zustände mit der Wahrscheinlichkeit $P(\vec{r})$ wählt. Um die Zustandsdichte des kanonischen Ensembles beizubehalten, muß man dann von (3.4) zu

$$f_{M'} = \frac{\sum_i^{M'} f(\vec{r}_i) e^{-\beta V(\vec{r}_i)} / P(\vec{r}_i)}{\sum_i^{M'} e^{-\beta V(\vec{r}_i)} / P(\vec{r}_i)} \quad (3.5)$$

übergehen. Wählt man nun Zustände mit der Wahrscheinlichkeit

$$P(\vec{r}_i) \propto e^{-\beta V(\vec{r}_i)} \quad (3.6)$$

aus, so stellt sich (3.5) als einfaches arithmetisches Mittel dar

$$\bar{f}_{M'} = \frac{1}{M'} \sum_i^{M'} f(\vec{r}_i). \quad (3.7)$$

3.2 Algorithmus

Der *Metropolis-Algorithmus* [27] ist eine sehr effektive Methode, die Zustände \vec{r}_i mit der gewünschten Wahrscheinlichkeit auszuwählen. Bei dieser Methode generiert man eine Markov-Kette, bei der die Zustände nicht unabhängig von einander erzeugt werden, sondern jeder Zustand \vec{r}_{i+1} vom vorhergehenden Zustand \vec{r}_i abhängt, mit einer Übergangswahrscheinlichkeit von $W(\vec{r}_i \rightarrow \vec{r}_{i+1})$. Eine ausreichende Bedingung für diese Übergangswahrscheinlichkeit stellt das Prinzip des detaillierten Gleichgewichts dar [36]

$$P(\vec{r}_i)W(\vec{r}_i \rightarrow \vec{r}_j) = P(\vec{r}_j)W(\vec{r}_j \rightarrow \vec{r}_i).$$

Die Übergangswahrscheinlichkeit eines Schritts $\vec{r}_i \rightarrow \vec{r}_j$ bzw. des inversen Schrittes ist also bei einem Gibbsschen Ensemble nur von der Energieänderung $\Delta V = V(\vec{r}_j) - V(\vec{r}_i)$ abhängig.

$$\frac{W(\vec{r}_i \rightarrow \vec{r}_j)}{W(\vec{r}_j \rightarrow \vec{r}_i)} = e^{-\beta \Delta V}$$

Diese Gleichung legt die Übergangswahrscheinlichkeit nicht eindeutig fest. Für $W(\vec{r}_i \rightarrow \vec{r}_j)$ wird die sogenannte Metropolisfunktion gewählt

$$W(\vec{r}_i \rightarrow \vec{r}_j) = \begin{cases} \frac{1}{\tau} e^{-\beta \Delta V} & \text{für } \Delta V > 0 \\ \frac{1}{\tau} & \text{sonst} \end{cases} \quad (3.8)$$

mit τ als frei wählbare Konstante. Dieses Verfahren ermöglicht eine einfache Konstruktion der Markovkette. Die so erzeugte Markovkette konvergiert gegen die kanonische Verteilung (3.6). Ein Problem bei den MC-Simulationen, wie auch bei MD-Simulationen, ist die fehlende *Ergodizität*. Das System ist dann ergodisch, wenn im Konfigurationsraum zwei oder mehrere lokale Energieminima existieren und die Barrieren von einem *Random Walk* in einer endlichen Anzahl von Schritten überwunden werden können.

Ein Random Walk ist dabei ein Weg, bei dem jeder Schritt, wie oben erläutert, verworfen oder angenommen wird. Explizit beinhaltet jeder Schritt der MC-Simulation hier die zufällige Auswahl eines Teilchens $i = 1 \dots N$, das dann um eine zufällige Distanz $p_{trial} \leq d$, wobei d die maximale Schrittweite ist, versetzt

wird (siehe Anhang A.2). Die vorherige potentielle Energie und die Koordinaten werden gespeichert und die neue potentielle Energie wird berechnet. In der Hamiltonfunktion (1.2) werden $(N-1)$ Wechselwirkungsterme und ein Potentialterm ersetzt, so daß diese Energieberechnung linear mit der Anzahl der Teilchen des Systems N skaliert. Aus der Energiedifferenz zum alten Zustand folgt die Bewertung des neuen Zustandes mit der Metropolis-Funktion 3.8, falls $\Delta V \leq 0$ wird der neue Zustand akzeptiert, sonst wird $P = e^{\beta\Delta V}$ berechnet und mit einer Zufallszahl z_i aus $[0 \dots 1]$ verglichen. Falls $z_i \leq P$ wird der neue Zustand ebenfalls akzeptiert ($\tau = 1$), sonst abgelehnt (vgl. Anhang A.1). Während der MC-Simulation werden statistische Größen und deren Quadrate aufaddiert und am Ende durch die Anzahl der MC-Schritte dividiert, um daraus die arithmetischen Mittel und die Varianzen zu bestimmen (siehe Anhang A.3).

3.2.1 Ergodizität. Anpassung der Schrittweite

Damit die berechneten Mittelwerte physikalisch eindeutig sind, muß die Ergodizität sichergestellt werden. Während der Simulation ist notwendig, daß sich das System zu jeder Temperatur im thermodynamischen Gleichgewicht befindet und die Schrittweite so eingestellt ist, daß das Verhältnis der akzeptierten zu den versuchten MC-Schritten gerade 50% beträgt. Für die Anpassung der maximalen Schrittweite während der Simulation bezüglich einer konstanten Temperatur kann man verschiedene Verfahren wählen. Die Wahl hat Einfluß auf die Laufzeit des gesamten Algorithmus, da Mittelwerte einer physikalischen Größe erst dann berechnet werden können, wenn sich das System im thermodynamischen Gleichgewicht befindet. In der Abbildung 3.2 sind exemplarisch zwei Verfahren und deren Einfluß auf die notwendigen MC-Schritte bis zum Erreichen des thermodynamischen Gleichgewichts dargestellt. Das erste Verfahren passt dabei die Schrittweite aus dem Verhältnis der Annahmewahrscheinlichkeiten der bisherigen MC-Schritte über zwei Blocklängen

$$V_c = \frac{p_{acc,akt}}{p_{acc,alt}} \quad (3.9)$$

in der Form an, daß die neue Schrittweite δ für den nächsten Block von MC-Schritten aus der bisherigen Schrittweite δ_{alt} durch

$$\delta = \begin{cases} \frac{1}{2} \cdot \delta_{alt} & \text{falls } V_c < \frac{1}{2} \\ \frac{3}{2} \cdot \delta_{alt} & \text{falls } V_c > \frac{1}{2} \\ \delta_{alt} \cdot |p_{acc,akt} + \frac{1}{2}| & \text{sonst} \end{cases} \quad (3.10)$$

berechnet wird. Das zweite untersuchte Verfahren bestimmt die neue Schrittweite durch

$$\delta = \begin{cases} \frac{1}{2} \cdot \delta_{alt} & \text{falls } V_c < \frac{1}{2} \\ \frac{3}{2} \cdot \delta_{alt} & \text{falls } V_c > \frac{1}{2} \\ \delta_{alt} \cdot 2 \cdot p_{acc,akt} & \text{sonst} \end{cases} . \quad (3.11)$$

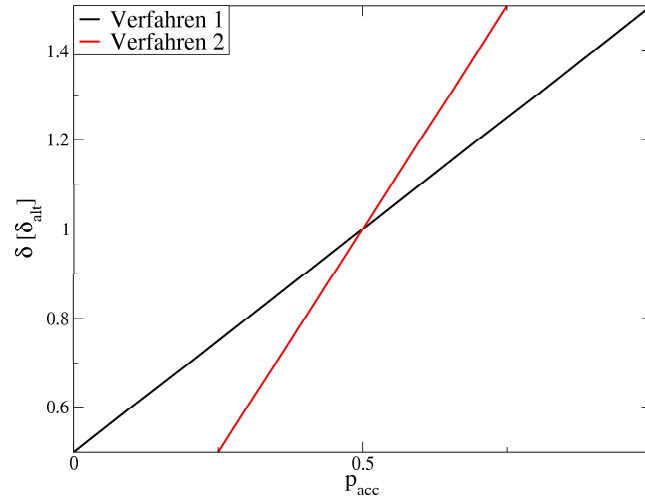


Abbildung 3.1: Änderung der maximalen Schrittweite δ in Abhängigkeit der Annahmewahrscheinlichkeit der MC-Schritte p_{acc} über den letzten Block von MC-Schritten. Das Verfahren 1 (schwarze Linie, (3.10)) passt die Schrittweite langsamer an als das Verfahren 2 (rote Linie, (3.11)).

Der Vergleich in der Abbildung 3.1 zeigt den Unterschied in der Anpassung. Das zweite Verfahren passt die Schrittweite schneller an, sorgt aber auch dafür, daß in der Nähe der bestmöglichen Schrittweite die Anpassung in einigen Fällen zu groß ist. Abbildung 3.2 zeigt, daß das zweite Verfahren die optimale Schrittweite, bei der die Hälfte aller MC-Schritte angenommen werden, schneller findet. Dieses Verfahren für die Anpassung der Schrittweite wurde daher in den weiteren Simulationen eingesetzt.

Für die Ergodizität ist zusätzlich erforderlich, daß die so gewählte Schrittweite es ermöglicht, mit einem Random Walk alle Energieminima zu erreichen. Diese Bedingung läßt sich mit keinem Verfahren garantieren. Wiederholungen der Simulationen mit geringfügig anderen Anfangsbedingungen werden durchgeführt, um den Phasenraum möglichst komplett zu erreichen.

Um zu überprüfen, ob sich das thermodynamische Gleichgewicht eingestellt hat, vergleicht man die Mittelwerte der Gesamtenergie des Systems über unterschiedliche Blöcke von MC-Schritten. Sind diese Mittelwerte ungefähr gleich, so ist das thermodynamische Gleichgewicht erreicht und das Programm kann beginnen, die zu untersuchenden Meßgrößen zu dieser Temperatur (Teilchenpositionen, Fluktuationen, Energien, etc.) aufzunehmen.

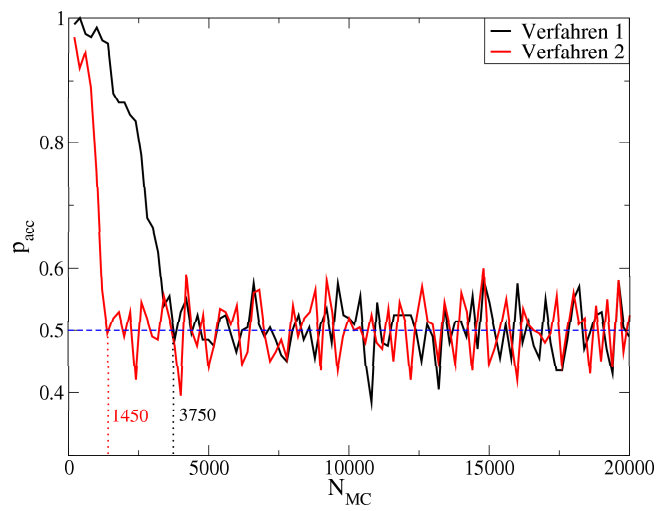


Abbildung 3.2: Annahmewahrscheinlichkeit der MC-Schritte p_{acc} in Abhängigkeit des Verfahrens für die Anpassung an die Schrittweite bei einem System von $N = 12$ Teilchen. Das Verfahren 2 (rote Linie, (3.11)) erreicht die optimale Annahmewahrscheinlichkeit von 50% deutlich schneller als das Verfahren 1 (schwarze Linie, (3.10)).

Kapitel 4

Endliche Temperaturen. Schmelzverhalten

Eine Möglichkeit, Phasenübergänge erster Ordnung in Simulationen zu beobachten, ist die Fluktuationen der Teilchen zu studieren. Allgemein beschreibt die Standardabweichung einer Größe r das Quadrat der absoluten Fluktuationen σ_r

$$\sigma_r^2 = \langle r^2 \rangle - \langle r \rangle^2 = \frac{1}{MC-1} \sum_{i=1}^{MC} (r_i - \langle r \rangle)^2, \quad (4.1)$$

dabei entspricht MC der Anzahl der MC-Schritte, $\langle r \rangle$ dem mittleren Abstand vom Zentrum, r_i dem aktuellen, während des Simulationsschrittes bestimmten Abstand vom Zentrum und folglich entspricht σ_r^2 der absoluten, radialen Fluktuation eines Teilchens. Eine dimensionslose Größe, die für beliebige Systeme verwendet werden kann, ist die zum Abstand relative Fluktuation

$$u_{rad} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sqrt{\frac{\sigma_r^2}{\langle r \rangle^2}} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sqrt{\frac{\langle r^2 \rangle}{\langle r \rangle^2} - 1}, \quad (4.2)$$

wobei der mittlere Abstand im makroskopischen Fall durch die Dichte

$$n = \frac{3}{4\pi \langle r \rangle^3} \quad (4.3)$$

ersetzt werden kann, wenn die Dichte n konstant ist. Ist man an den Fluktuationen aller Teilchen interessiert und zusätzlich an den Fluktuationen der Abstände der Teilchen i und j gegeneinander und nicht nur in rein radialer Richtung, betrachtet man die relativen Abstandsfluktuationen, wie beispielsweise in [14],

$$u_r = \frac{2}{N(N-1)} \sum_{i=1}^N \sum_{j=i+1}^N \sqrt{\frac{\langle r_{ij}^2 \rangle}{\langle r_{ij} \rangle^2} - 1}, \quad (4.4)$$

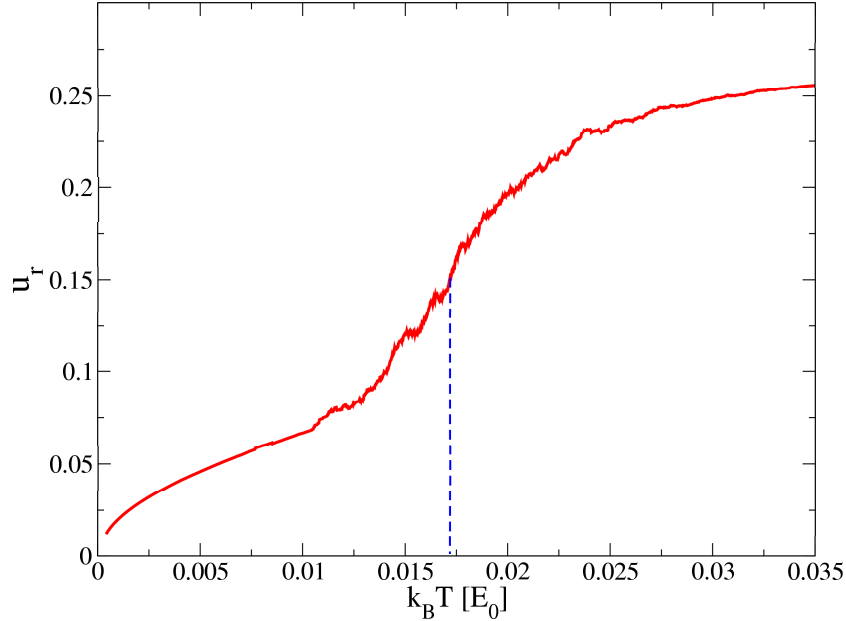


Abbildung 4.1: Relative Abstandsfluktuationen u_r für ein System mit $N = 12$ Teilchen. Der sprunghafte Anstieg der Fluktuationen kann nach [23] mit einem Phasenübergang erster Ordnung in Zusammenhang gebracht werden, da die Fluktuationen die Nahordnung der Teilchen zerstört haben. Die kritische Temperatur für diesen Phasenübergang hängt davon ab, ob man den Punkt des Anstiegs oder einen Wert dazwischen nimmt. Im folgenden wird für die Sprungtemperatur immer die Temperatur bei der Hälfte des Sprungs genommen (hier $u_r = 0,15$).

mit $r_{ij} = |r_i - r_j|$. Fluktuationen der Schalen ν und μ gegeneinander geben Aufschluß darüber, ob bestimmte Schalen bei kleineren Temperaturen eher schmelzen als andere

$$u_{\mu\nu} = \frac{\delta_{\mu\nu}}{\langle R_{\mu\nu} \rangle} = \sqrt{\frac{1}{MC-1} \sum_{i=1}^{MC} \left(\frac{R_{\mu\nu}}{\langle R_{\mu\nu} \rangle} - 1 \right)^2}, \quad (4.5)$$

mit $R_{\mu\nu} = R_\mu - R_\nu$. Diese Größen sind interessant, um *mesoskopisches* Schmelzen zu untersuchen, d.h. die Teilchenzahl im System ist stark begrenzt, im Gegensatz zum makroskopischen Schmelzen, bei dem $N \rightarrow \infty$. Bei einem Phasenübergang erster Ordnung zeigen diese Größen einen Sprung. Bei den relativen Abstandsfluktuationen gilt das sogenannte *Lindemann-Kriterium*. Es bestimmt den Schmelzpunkt eines Systems zu der Temperatur, bei der die Schwankungen ungefähr 10% (10 – 20% je nach Quelle) des mittleren Abstands überschreiten [23].

In Coulomb balls kann man verschiedene Schmelzprozesse unterscheiden: radiales oder inter-Schalen Schmelzen und intra-Schalen Schmelzen. Dabei beinhaltet das intra-Schalen Schmelzen verschiedene Möglichkeiten, wie das Ändern der lokalen Symmetrie (z.B. von 5 zu 6 Nachbarn) oder auch nur eine andere Anordnung der

Voronoi-Zellen auf der Schale, aber natürlich auch den Austausch zweier Teilchen bzw. die Fluktuationen gegeneinander. Voronoi Zellen sind analog zu den Wigner-Seitz-Zellen im Realraum, deren Kantenflächen die Anzahl der nächsten Nachbarn bestimmen. Für jede Schale kann man eine Voronoi-Analyse der Kugeloberfläche durchführen (z.B. in [24]) und erhält die Anzahl der Nachbarn zu jedem Teilchen. Diese Berechnung ist sehr aufwendig, so daß keine Voronoi-Analyse zu jedem Simulationsschritt durchgeführt wird. Damit wird keine genaue Trennung der Schmelzprozesse auf der Schale vorgenommen. Die Simulation beschränkt sich darauf, die relativen Abstandsfluktuationen, die sowohl radiale als auch intra-Schalen Prozesse beinhalten, zu studieren. Diese Fluktuationen werden für die Bestimmung der kritischen Temperaturen herangezogen.

4.1 Experimentelle Ergebnisse

Das dynamische Verhalten von Coulomb balls ist auch im Experiment untersucht worden. Die Abbildung 4.2 zeigt eine Zusammensetzung von Aufnahmen eines Coulomb balls mit $N > 6000$ Teilchen über einen Zeitraum von 120 Sekunden. Der Coulomb ball dieser Größe enthält verschiedene Phasen, die durch

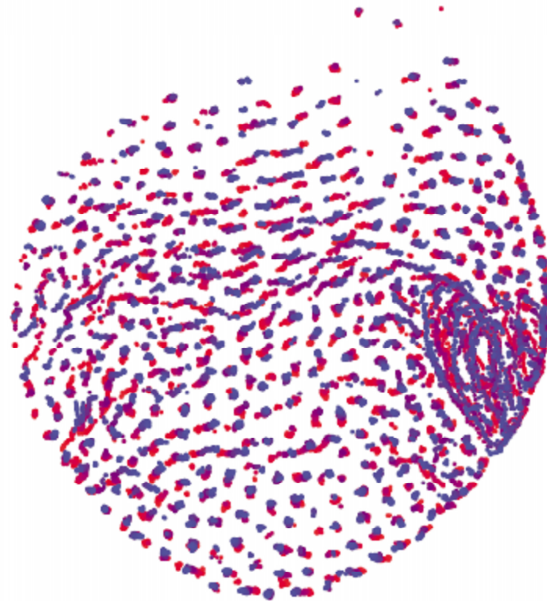


Abbildung 4.2: Vertikale Sicht durch das Zentrum eines Coulomb balls mit $N > 6000$ Teilchen [3]. Die Partikeltrajektorien über einen Zeitraum von 120 Sekunden werden durch die violetten Punkte dargestellt. Das System zeigt sowohl kristalline Phasen (unten), als auch fluide Phasen (rechts mittig).

die Bewegung der Teilchen (rot, violett) kenntlich gemacht sind. Sowohl im Bild

rechts in der Mitte, als auch links in der Mitte ist die Nahordnung des Coulomb balls zerstört. In der Abbildung 4.2 unten ist aber auch deutlich eine kristalline Phase zu erkennen. Dieses Verhalten kann experimentell durch das unterschiedliche Confinement erklärt werden [2].

Aber auch kleinere Coulomb balls, wo die harmonische Näherung des Confinements deutlich besser ist, weisen unterschiedliche Phasen auf. Generell ist der Trend zu beobachten, daß das System in der Nähe des Zentrums eher in die flüssige Phase übergeht als die äußeren Schalen.

Die Analyse der Abstandsfluktuationen kann bei der Erklärung dieses Phänomens helfen und wird im folgenden durchgeführt.

4.2 Analytische Beschreibung

4.2.1 Clusterkompression

Um relative Abstandsfluktuationen zu untersuchen, gehen wir in unserem System $\{r_1, \dots, r_N\}$ auf Schwerpunkts- und Relativ-Koordinaten über. Wir untersuchen zunächst ein 2-Teilchensystem [6].

$$\{r_1, r_2\} \rightarrow \begin{cases} r = r_1 - r_2 \\ R = \frac{r_1 + r_2}{2} \end{cases} . \quad (4.6)$$

Mit $r_{1,2} = R \pm \frac{r}{2}$ und $r_1^2 + r_2^2 = 2R^2 + \left(\frac{r}{2}\right)^2$ überführt man (1.2) für zwei Teilchen in eine Zentral- und Relativbewegung

$$\begin{aligned} H &= \frac{M}{2}\omega^2 R^2 + \frac{m_r}{2}\omega^2 r^2 + U(r) \\ &= U_{cm}(R) + U_{rel}(r), \end{aligned} \quad (4.7)$$

wobei die Relativbewegung eine Ein-Teilchen-Bewegung mit $m \rightarrow m_r$ bzw. $\frac{1}{m_r} = \frac{1}{m} + \frac{1}{m}$ und die Zentralbewegung eine Bewegung mit $M = m_1 + m_2$ ist. $U(r)$ ist dabei eine beliebige Wechselwirkung, die nur vom Abstand der Teilchen abhängt. Dann befindet sich das Teilchen im relativen Potential

$$U_{rel}(r) = \frac{m_r}{2}\omega^2 r^2 + U(r). \quad (4.8)$$

Es ergibt sich der Gleichgewichtsabstand zweier Teilchen aus dem Minimum des Potentials $U_{rel}(r)$

$$m_r \omega^2 r_0 = -U'(r_0).$$

Für den Fall $\kappa = 0$, also reiner Coulomb-Wechselwirkung mit $U = \frac{(Ze)^2}{r}$, ergibt sich

$$r_{0C}^3 = \frac{(Ze)^2}{m_r \omega^2} \quad (4.9)$$

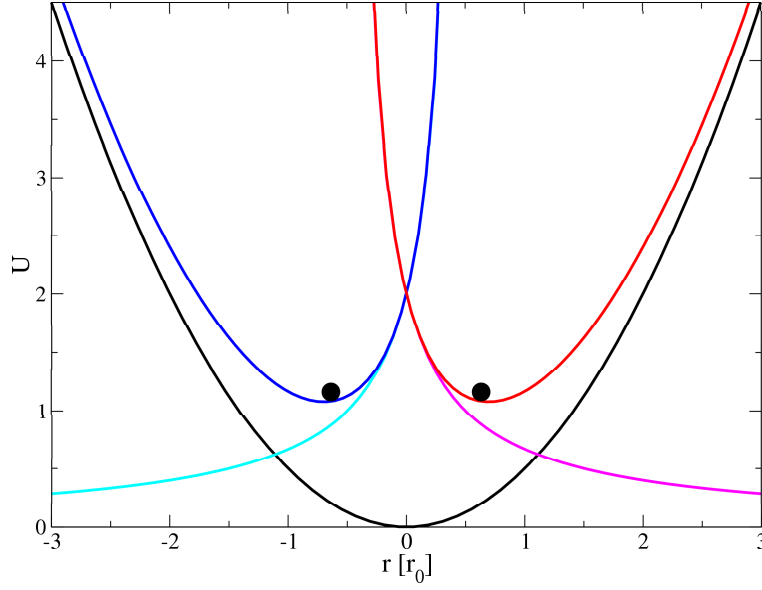


Abbildung 4.3: Lokales Teilchenpotential (blau und rot), das sich additiv aus externem Potential (schwarz) und Wechselwirkungspotential (cyan und magenta) zusammensetzt. Die Minima dieses lokalen Teilchenpotentials entsprechen den Gleichgewichtslagen der Teilchen im Grundzustand.

und für die Yukawa-Wechselwirkung $U = \frac{(Ze)^2}{r} \cdot e^{-\kappa r}$

$$\frac{e^{\kappa r_{0Y}} \cdot r_{0Y}^3}{1 + \kappa r_{0Y}} = r_{0C}^3. \quad (4.10)$$

Abbildung 4.3 zeigt die Gleichgewichtslage zweier durch Coulomb-Kraft wechselwirkender Teilchen in einem parabolischen Potential. Für $\kappa r_{0Y} < 1$ kann man 4.10 entwickeln

$$\frac{e^{\kappa r_{0Y}} r_{0Y}^3}{1 + \kappa r_{0Y}} \approx r_{0Y}^3 \left\{ 1 + \frac{1}{2} \frac{\kappa^2 r_{0Y}^2}{1 + \kappa r_{0Y}} + \mathcal{O}\left(\frac{(\kappa r_{0Y})^3}{1 + \kappa r_{0Y}}\right) \right\} = r_{0Y}^3 \cdot k_1^{-1}(\kappa r_{0Y}),$$

so daß man für die Darstellung des Zwei-Teilchen Gleichgewichtsabstands bei einer Yukawa-Wechselwirkung

$$r_{0Y}^3(\kappa) \stackrel{4.10}{=} r_{0C}^3 \cdot k_1(\kappa r_{0Y}) \quad (4.11)$$

mit r_{0C} aus (4.9) erhält. Für die iterative Berechnung von $k_1(\kappa r_{0Y})$ wird $r_{0Y} \approx r_{0C}$ verwendet und man erhält

$$\begin{aligned} k_1(\kappa r_{0Y}) &= \frac{r_{0Y}^3}{r_{0C}^3} \approx \frac{(1 + \kappa r_{0C})}{e^{\kappa r_{0C}}} \approx \frac{1 + \kappa r_{0C}}{1 + \kappa r_{0C} + \frac{1}{2} \kappa^2 r_{0C}^2} \\ &\simeq 1 - \frac{1}{2} \frac{\kappa^2 r_{0C}^2}{1 + \kappa r_{0C}} \\ &= 1 - \xi(\kappa r_{0C}) \end{aligned} \quad (4.12)$$

mit

$$\xi(\kappa r_{0C}) = \frac{1}{2} \frac{\kappa^2 r_{0C}^2}{1 + \kappa r_{0C}}. \quad (4.13)$$

Damit läßt sich die - durch Simulationen bestätigte - Clusterkompression durch die Abschirmung κ beschreiben

$$r_{0Y}(\kappa) \simeq r_{0C} \left[1 - \frac{1}{2} \frac{\kappa^2 r_{0C}^2}{1 + \kappa r_{0C}} \right]^{\frac{1}{3}}. \quad (4.14)$$

Soll nun analytisch der Gleichgewichtsabstand für größere κ berechnet werden, ist Gleichung 4.10 Ausgangspunkt für

$$\frac{e^x x^3}{1+x} = x_C^3, \quad (4.15)$$

mit $x \stackrel{!}{=} r_0 \kappa$, $x_C \stackrel{!}{=} r_{0C} \kappa$ und $r_{0C}^3 \stackrel{!}{=} \frac{(Ze)^2}{\frac{m}{2} \omega^2}$. Für den Coulomb-Fall wird $x = x_C + z$, $|z| \ll x_C$ und $z = \kappa(r_0 - r_{0C})$ angenommen.

κ	$r_{0Y} \left[\frac{1}{r_{0C}} \right]^1$	$r_{0Y} \left[\frac{1}{r_{0C}} \right]^2$
0,2	99,4%	99,4%
0,4	98,1%	98,0%
0,6	96,1%	96,0%
0,8	95,7%	95,7%
1,0	90,9%	91,2%
1,5	(81,9%)	85,0%
2,0	(69,3%)	79,2%
3,0	—	69,3%
4,0	—	61,4%

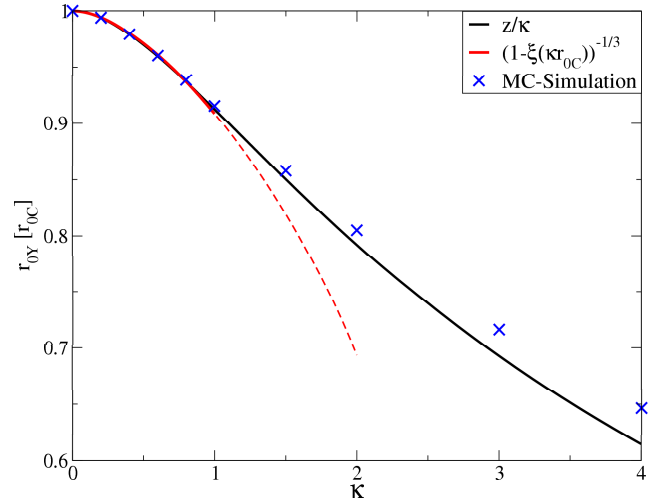


Abbildung 4.4: In der zweiten Spalte der Tabelle sind die Ergebnisse des Yukawa-Gleichgewichtsabstands ¹ für die Näherung mit der Formel (4.14) für $\kappa \leq 1$ eingetragen und in der dritten Spalte die Ergebnisse ² mit der Näherung (4.17) für $\kappa \leq 4$. Die Grafik zeigt die Ergebnisse der beiden Näherungen im Vergleich mit Simulationsdaten für $N = 2$. Die rote Linie gibt den Gleichgewichtsabstand mit der Näherung (4.14) an. Der gestrichelte Teil dieser Linie ab einer Abschirmung von $\kappa \approx 1,0$ deutet den Bereich an, in dem diese Näherung nicht mehr gültig ist. Die schwarze Linie entspricht der Näherung (4.17). Die Kreuze markieren die Gleichgewichtsabstände eines Zwei-Teilchen-Systems, der aus den Simulationen gewonnen wurde.

κ	rel. Fehler
1.0	0.3%
2.0	1.7%
3.0	3.4%
4.0	5.0%

Tabelle 4.1: Relativer Fehler der Näherung (4.17) für den Yukawa-Gleichgewichtsabstand zu den MC-Simulationsdaten.

Aus (4.15) folgt

$$\begin{aligned}
e^x &= \left(\frac{x_C}{x}\right)^3 (1+x) \\
x_C + z = x &= 3 \ln\left(\frac{x_C}{x_C + z}\right) + \ln(1 + x_C + z) \\
&= \ln(1 + x_C) + \ln\left(1 + \frac{z}{1 + x_C}\right) + 3 \ln\left(\frac{1}{1 + \frac{z}{x_C}}\right) \\
&\stackrel{z \ll x_C}{\simeq} \ln(1 + x_C) + \frac{z}{1 + x_C} + 3 \ln\left(1 - \frac{z}{x_C}\right)
\end{aligned}$$

und damit ist

$$x_C = \ln(1 + x_C) - z \left\{ \frac{1}{1 + x_C} - \frac{3}{x_C} - 1 \right\}, \quad (4.16)$$

und es folgt

$$z = \frac{\ln(1 + x_C) - x_C}{x_C^2 + 3x_C + 3} x_C (1 + x_C) < 0; \quad (4.17)$$

letzteres da $\ln(1 + x_C) - x_C < 0$. Dieses Resultat ist gültig im Bereich von $1 < x_C \leq 4$. Der Einfluß der Abschirmung auf den Gleichgewichtsabstand für zwei Teilchen ist in der Abbildung 4.4 dargestellt. Für $r_{0C} = 1$ kann man die Werte aus der Tabelle entnehmen. So ist beispielsweise der Gleichgewichtsabstand bei einer Yukawa-Wechselwirkung mit einer Abschirmung von $\kappa = 0,6$ 4% kleiner als im Coulomb-Fall. Der relative Fehler der Näherung (4.17) gegenüber den MC-Daten ist in Tabelle 4.1 dargestellt. Im folgenden wird in graphischen Darstellungen, die abhängig von κr_{0Y} sind, der Gleichgewichtsabstand $r_{0Y}(\kappa)$ durch diese Näherung ersetzt.

Der Coulomb ball wird mit zunehmender Abschirmung komprimiert.

4.2.2 Fluktuationen im lokalen Zwei-Teilchenpotential

Untersuchen wir nun kleine Fluktuationen um den Gleichgewichtsabstand $r = r_0$, so kann $U_{rel}(r)$ in

$$U_{rel}(r) = U_{rel}(r_0) + U'_{rel}(r_0) + \frac{1}{2!} U''_{rel}(r_0) \cdot (r - r_0)^2 + \dots \quad (4.18)$$

entwickelt werden, mit Beschränkung auf die radiale Mode. Jedes Teilchen besitzt 3 Freiheitsgrade und damit 3 Normalmoden. In (4.18) ist $U'_{rel}(r_0) = 0$, da r_0 der Gleichgewichtsabstand ist, und das lokale Potential, in dem die Teilchen oszillieren, läßt sich schreiben

$$U_{local} \stackrel{!}{=} U_{rel}(r) - U_{rel}(r_0) = \frac{1}{2!} U''_{rel}(r_0) \cdot (r - r_0)^2 + \dots \quad (4.19)$$

Mit

$$\Omega^2 \stackrel{!}{=} \omega^2 + \frac{U''_{rel}(r_0)}{m_r} \quad (4.20)$$

läßt sich das lokale Potential, in dem die Fluktuationen stattfinden, durch ein Oszillatorpotential nähern (vgl. Abbildung 4.3)

$$\begin{aligned} U_{local} &= \frac{1}{2} m_r \Omega^2 \cdot (r - r_0)^2 + \dots \\ &= \frac{1}{2} m_r \Omega^2 \cdot y^2 + \dots, \end{aligned} \quad (4.21)$$

mit $y = r - r_0$. Damit ergibt sich die Energiedifferenz zu

$$\Delta E = \frac{m_r}{2} \Omega^2 y_0^2, \quad (4.22)$$

mit y_0 als maximaler Auslenkung.

Um nun den zeitlichen Mittelwert des Auslenkungsquadrates zu berechnen, betrachten wir die durch $F = -\nabla_y U_{local} = -m_r \Omega^2 y \stackrel{!}{=} m \ddot{y}$ gegebene Differentialgleichung. Für die Zeitabhängigkeit $y(t)$ setzen wir

$$y(t) = y_0 \cos(\Omega t + \phi) \quad (4.23)$$

$$\dot{y}(t) = -y_0 \Omega \sin(\Omega t + \phi) \quad (4.24)$$

an. Für die klassische Aufenthaltswahrscheinlichkeit gilt nach [16]

$$w^{kl}(y) = \langle P(y) \rangle_{T_0}, \quad (4.25)$$

gemittelt über die Periode $T_0 = \frac{2\pi}{\Omega}$.

$$\begin{aligned} w^{kl}(y) \cdot dy &= \frac{dt}{T_0/2} \\ &= \frac{2}{2\pi} \Omega dt \\ &= \frac{\Omega dy}{\pi \dot{y}} \\ &\stackrel{4.24}{=} \frac{\Omega}{\pi y_0 \cdot \Omega \sin \Omega t + \phi} \stackrel{4.23}{=} \frac{dy}{\pi y_0} \frac{1}{\sqrt{1 - \left(\frac{y}{y_0}\right)^2}} \end{aligned} \quad (4.26)$$

mit $y_0 = \left(\frac{2\Delta E}{m\Omega^2}\right)^{1/2}$ und damit ist $w^{kl}(y) = w^{kl}(y, E)$ für beliebige Anregungsenergien festgelegt. Die Normierung erfolgt über die Boltzmannverteilung. Im thermodynamischen Gleichgewicht gilt

$$p_{kan}(E) \propto e^{-\frac{E}{k_B T}},$$

normiert durch

$$1 \stackrel{!}{=} c_n \cdot \int_0^\infty dE e^{-E/k_B T} = k_B T e^{-E/k_B T} \Big|_0^\infty = c_n \cdot k_B T = c_n \cdot \frac{1}{\beta}$$

ist

$$p_{kan}(E) = c_n \cdot e^{-\frac{E}{k_B T}} = \beta e^{-\beta E}, \quad (4.27)$$

mit $\beta \stackrel{!}{=} \frac{1}{k_B T}$. Die *Ergodenhypothese* sagt über die Mittelwerte von Observablen, daß das zeitliche Mittel dem Mittel über das Ensemble entspricht, d.h. die Trajektorie des Systems kommt jedem Punkt im Phasenraum beliebig nahe, so daß

$$\langle A(y) \rangle_{w^{kl}} = \langle A(y(t)) \rangle_{T_0} \quad (4.28)$$

gilt. Das ist auch die Rechtfertigung der Monte-Carlo Simulation. Außerdem ist

$$\langle A(y) \rangle_{w^{kl}} = \int_{-y_0}^{y_0} dy A(y) w^{kl}(y) \quad (4.29)$$

und damit folgt für die Normierung mit (4.26)

$$\int_{-y_0}^{y_0} \frac{dy}{\pi y_0} \frac{1}{\sqrt{1 - (y/y_0)^2}} = \frac{2y_0}{\pi y_0} \int_0^1 dx \frac{1}{\sqrt{1 - x^2}} = \frac{y_0}{y_0} = 1.$$

Das Integral mit der im Nenner stehenden Wurzel löst sich nach [7] zu arcsin auf, so daß die Berechnung des (wahrscheinlichsten) Abstandsquadrates

$$\langle y^2 \rangle = \frac{2}{\pi} \int_0^1 dx \frac{y_0^2}{\sqrt{1 - x^2}} = \frac{2y_0^2}{\pi} \int_0^1 dx \frac{x^2}{\sqrt{1 - x^2}} = y_0^2 \cdot I$$

ergibt, mit $I = \frac{2}{\pi} \int_0^1 dx \frac{x^2}{\sqrt{1 - x^2}}$. Nach [7] gilt $\int dx \frac{x^2}{\sqrt{1 - x^2}} = -\frac{1}{2}x\sqrt{1 - x^2} + \frac{\arcsin x}{2}$, in obigen Grenzen also $\frac{\pi}{4}$ bzw. $I = \frac{1}{2}$ und damit

$$\langle y^2 \rangle = \frac{y_0^2}{2}. \quad (4.30)$$

Das Resultat für die Varianz bezüglich der relativen Änderung zur Gleichgewichtslage bei einer fixierten Energie E oder, in anderen Worten, die absoluten radialen Änderungen im lokalen Potential, ist damit

$$\sigma_y^2 = \langle y^2 \rangle - \langle y \rangle^2 = \langle y^2 \rangle = \sigma_y^2(E). \quad (4.31)$$

Die Mittelung über das kanonische Ensemble ergibt

$$\begin{aligned}
\frac{1}{I} \langle \sigma_y^2(E) \rangle_{kan} &= \int_0^\infty dE y_0^2(E) \beta e^{-\beta E} = \frac{2\beta}{m_r \Omega^2} \int_0^\infty dE \cdot E e^{-\beta E} \\
&= \frac{2\beta}{m_r \Omega^2} \cdot (-1) \frac{d}{d\beta} \left(\frac{1}{\beta} \right) \\
&= \frac{2k_B T}{m_r \Omega^2}.
\end{aligned} \tag{4.32}$$

Damit ist die Temperaturabhängigkeit der absoluten radialen Fluktuationen des kanonischen Ensembles von Staubteilchen bestimmt

$$\sigma(T) = \sqrt{\langle \sigma_y^2 \rangle_{kan}} = \sqrt{\frac{k_B T}{m_r \Omega^2}}, \tag{4.33}$$

wobei die Kopplung der Normalmoden und die Wechselwirkung der Teilchen auf einer Schale vernachlässigt wurde, da nur die radiale Mode ohne Kopplung betrachtet worden ist. Es ist klar, daß die relativen Abstandsfluktuationen in dieser Form nicht unbegrenzt ansteigen können, denn wenn die oszillierenden Teilchen in den Bereich der nächsten Nachbarn eindringen, bricht die kristalline Struktur zusammen. Die harmonische Näherung ist hier nicht mehr gültig.

Die Frequenz des lokalen Potentials Ω ist nach (4.20) abhängig von der Art der Wechselwirkung der Teilchen. Der Vergleich von reiner Coulomb- mit Yukawa-Wechselwirkung ergibt für den Fall zweier Teilchen

$$U_{rel,C}(r) = \frac{m_r \omega^2 r^2}{2} + \frac{(Ze)^2}{r}, \quad \text{Coulomb,} \tag{4.34}$$

$$U_{rel,Y}(r) = \frac{m_r \omega^2 r^2}{2} + \frac{(Ze)^2}{r} e^{-\kappa r}, \quad \text{Yukawa.} \tag{4.35}$$

Für die explizite Berechnung von Ω^2 benötigen wir die zweite Ableitung an der Gleichgewichtslage r_0 . Für den Fall reiner Coulomb-Wechselwirkung ergibt das

$$\frac{d^2 U_{rel,C}(r)}{dr^2} = m_r \omega^2 + \frac{2(Ze)^2}{r_{0C}^3} \tag{4.36}$$

und für eine Yukawa-Wechselwirkung

$$\frac{\partial^2 U_{rel,Y}(r)}{\partial r^2} = m_r \omega^2 + \frac{(Ze)^2}{r_{0Y}^3} e^{-\kappa r_{0Y}} \left\{ 2 \left(1 + \kappa r_{0Y} + \frac{(\kappa r_{0Y})^2}{2} \right) \right\}.$$

Ersetzt man die entsprechenden Gleichgewichtsabstände, (4.9) und (4.10), erhält man die Frequenz $\Omega_Y(\kappa)$ des lokalen, parabolischen Potentials

$$\Omega_C^2 = 3\omega^2, \quad \text{Coulomb,} \tag{4.37}$$

$$\Omega_Y^2(\kappa) = \Omega_C^2 \cdot \left(1 + \frac{1}{3} \frac{(\kappa r_{0Y})^2}{1 + \kappa r_{0Y}} \right) = \Omega_C^2 \cdot f_1(\kappa r_{0Y}), \quad \text{Yukawa,} \tag{4.38}$$

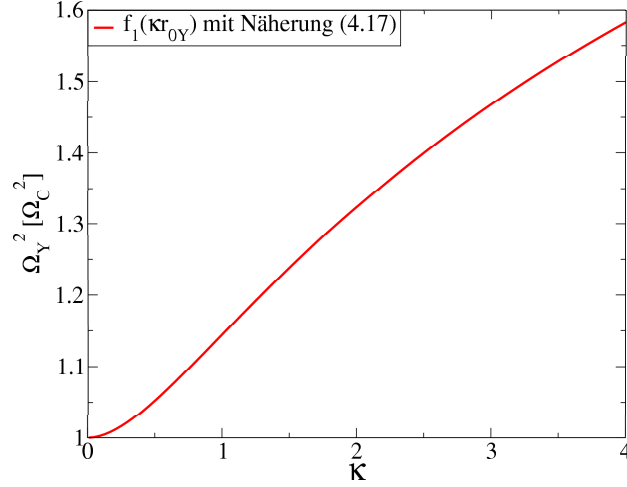


Abbildung 4.5: Frequenz des lokalen Potentials Ω_Y^2 als Funktion der Abschirmung κ . Der Gleichgewichtsabstand r_{0Y} wurde durch die Näherung (4.17) ersetzt. Das lokale Teilchenpotential wird steiler.

mit

$$f_1(\kappa r_{0Y}) = 1 + \frac{1}{3} \frac{(\kappa r_{0Y})^2}{1 + \kappa r_{0Y}}. \quad (4.39)$$

Das bedeutet, daß die Abschirmung das Potential steiler macht und der Kristall stabilisiert werden sollte. Das Verhältnis der Frequenz des lokalen Potentials im Yukawa-Fall gegenüber dem Coulomb-Fall (4.39) ist in der Abbildung 4.5 wiedergegeben.

Um das Lindemann-Kriterium, das einen Anstieg der Fluktuationen mit einem Phasenübergang verbindet, anwenden zu können, interessieren wir uns aber nicht für die absoluten Fluktuationen, sondern für die relativen Abstandsfluktuationen (vgl. Abbildung 4.7), die die Erklärung dafür geben, warum der Kristall nicht stabilisiert wird. Für den Fall reiner Coulomb-Wechselwirkung definieren wir zunächst

$$\sigma_0 \stackrel{!}{=} \sigma_C \stackrel{4.33}{=} \sqrt{\langle \sigma_{y,C}^2 \rangle_{kan}} = \sqrt{\frac{\langle \Delta E \rangle_{kan}}{m_r \Omega_C^2}} = \sqrt{\frac{k_B T}{m_r \cdot 3\omega^2}} \quad (4.40)$$

für die radiale Mode. Ersetzen wir nun $3\omega^2$ mit Hilfe von (4.37) und (4.38), erhalten wir für die absoluten Fluktuationen im Yukawa-Fall

$$\begin{aligned} \sigma_Y(\kappa) &= \sqrt{\frac{k_B T}{m_r \Omega^2(\kappa)}} \\ &\stackrel{4.39 \wedge 4.40}{=} \sigma_C \cdot \sqrt{\frac{r_{0Y}^3}{3(Ze)^2} \cdot f_1^{-1/2}(\kappa r_{0Y})}. \end{aligned} \quad (4.41)$$

Für die relativen Abstandsfluktuationen gilt dann

$$u_r^2 = \frac{\sigma^2}{r_0^2}. \quad (4.42)$$

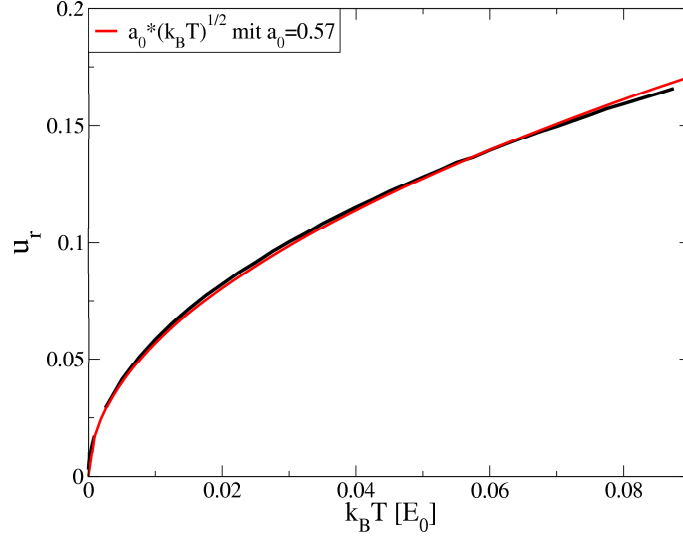


Abbildung 4.6: Relative Abstandsfluktuationen u_r für ein System mit $N = 2$ Teilchen und einer Abschirmung $\kappa = 1.0$. Die schwarze Linie beschreibt die MC-Simulationsdaten und die rote Linie ist ein *least-square-Fit* mit einer Funktion $a_0 \sqrt{k_B T}$. Dabei wurde der Parameter $a_0 \approx 0.57$ bestimmt, während die Theorie für $\kappa = 1.0$ einen Wert von $a_0^{Th.} \approx 0.59$ vorhersagt.

Mit den, abhängig von der Art der Wechselwirkung, entsprechenden Fluktuationen σ und dem entsprechenden Gleichgewichtsabstand r_0 ergibt sich für die Coulomb-Wechselwirkung

$$u_r^2 \stackrel{4.9}{=} \frac{1}{3} \frac{k_B T \cdot r_{0C}}{(Ze)^2} \quad (4.43)$$

und für die Yukawa-Wechselwirkung

$$u_r^2 \stackrel{4.10}{=} \frac{1}{3} \frac{k_B T \cdot r_{0C}}{(Ze)^2} \cdot f_2(\kappa r_{0Y}), \quad (4.44)$$

mit

$$f_2(\kappa r_{0Y}) = \left(\frac{1 + \kappa r_{0Y}}{e^{\kappa r_{0Y}}} \right)^{1/3} \cdot \frac{e^{\kappa r_{0Y}}}{1 + \kappa r_{0Y} + \frac{(\kappa r_{0Y})^2}{3}}. \quad (4.45)$$

In Abbildung 4.6 sind die relativen Abstandsfluktuationen exemplarisch für ein Zwei-Teilchen-System bei einer Abschirmung von $\kappa = 1.0$ dargestellt. Die Theorie gibt die Simulationsdaten sehr gut wieder, der Parameter a_0 des Fits durch

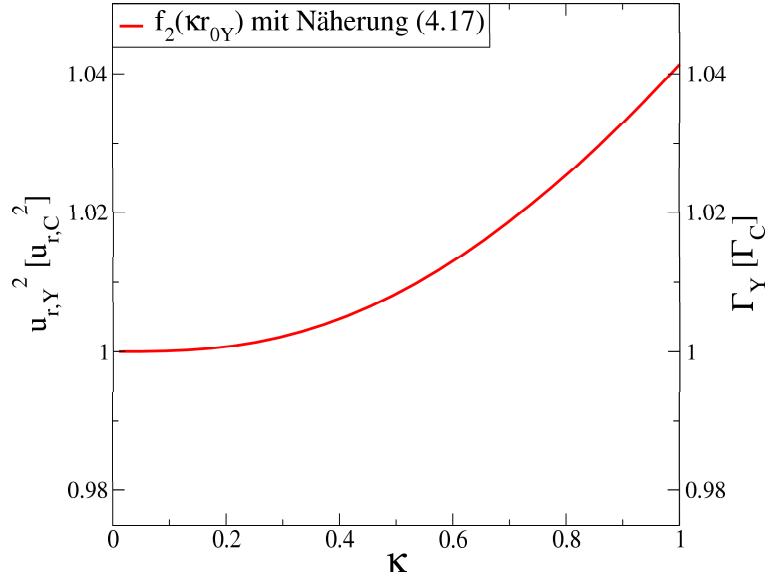


Abbildung 4.7: Verhältnis der relativen Abstandsfluktuationen zwischen Coulomb- und Yukawa-Wechselwirkung als Funktion der Abschirmung κ . Der Gleichgewichtsabstand r_{0Y} wurde durch die Näherung (4.17) ersetzt. Die Funktion $f_2(\kappa r_{0Y})$ beschreibt sowohl den Anstieg der relativen Abstandsfluktuationen u_r bei Erhöhung der Abschirmung, als auch die Korrektur des Coulomb-Kopplungsparameters Γ_C , um einen konstanten, universellen Kopplungsparameter für beliebige Abschirmungen zu erhalten (vgl. Kapitel 4.4).

die Simulationsdaten weicht nur um 3.5% von dem Theoriewert ab. Ein Vergleich der relativen Abstandsfluktuationen bei einer Yukawa-Wechselwirkung mit den Fluktuationen bei reiner Coulomb-Wechselwirkung zeigt die Abbildung 4.7. Hier konkurrieren zwei Effekte, sowohl die absoluten Fluktuationen im Yukawa-Fall σ_Y , als auch die Gleichgewichtsposition mit Yukawa-Wechselwirkung r_{0Y} werden kleiner. Die Änderung von der Gleichgewichtsposition r_{0Y} ist größer, so daß die relativen Abstandsfluktuationen erhöht werden.

Die Abschirmung destabilisiert den Coulomb ball [6].

4.3 Schmelzpunkte

Wie zu Beginn dieses Kapitels beschrieben, wird der Schmelzpunkt eines Systems über das Lindemann-Kriterium bestimmt [23]. Der Schmelzpunkt bezeichnet hier die kritische Temperatur, bei der die Nahordnung zerstört ist. In diesen mesoskopischen Systemen sind die Voraussetzungen für die Bezeichnungen *flüssig* oder *Schmelzpunkt* nicht immer gegeben, da sie stark begrenzt sind, dennoch werden

- auch in Ermangelung anderer Begriffe - im weiteren diese Worte benutzt. Die bereits berechnete Grundzustandskonfiguration der Systeme wird in den folgenden MC-Simulationen als Ausgangspunkt genommen und langsam erhitzt, indem die Temperatur des Wärmebades und damit die Temperatur der MC-Simulation erhöht wird. Als kritische Temperatur für den Phasenübergang fest-flüssig wird der Wert definiert, der bei der Hälfte der Stufe in den relativen Abstandsfluktuationen u_r (vgl. Abbildung 4.1) gegeben ist. Zur Bestimmung des Schmelzpunktes kann die in der Zwei-Teilchen-Theorie hergeleitete Formel (4.44) nicht mehr herangezogen werden, da sie aus einer Entwicklung für kleine Fluktuationen um die Ruhelage entstanden ist. Bei einem Phasenübergang sind die Fluktuationen zu groß, um diese Näherung noch geltend machen zu können. Bei weitergehenden Untersuchungen sollte eine anharmonische Entwicklung durchgeführt werden, die zusätzlich Terme höherer Ordnung berücksichtigt, und die kritischen Werte besser bestimmt [4].

Zur Bestimmung von Schmelzpunkten lassen sich auch andere Größen wie z.B. der Strukturfaktor oder das Verhältnis des ersten Maximums zum ersten Minimum der Paarverteilung heranziehen. Abbildung 4.8 zeigt die Paarverteilungen für einen Coulomb ball mit $N = 100$ Teilchen in der kristallinen und flüssigen Phase.

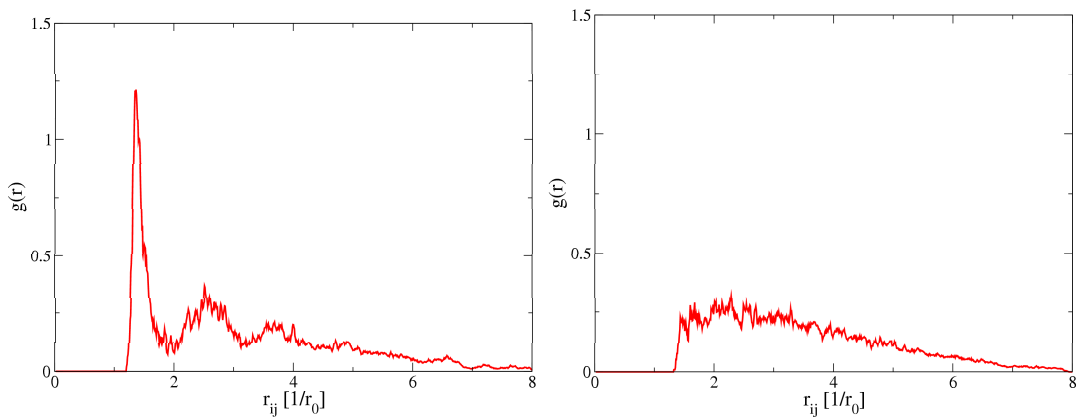


Abbildung 4.8: Paarverteilungsfunktion $g(r)$ bei $T = 0.002 \cdot E_0$ (linke Grafik) und $T = 0.02 \cdot E_0$ (rechte Grafik) für einen Coulomb ball mit $N = 100$ Teilchen. Die Paarverteilungsfunktion zur niedrigeren Temperatur korrespondiert mit der kristallinen Phase des Systems, die andere mit einer Temperatur, bei der das System bereits geschmolzen ist.

In dieser Arbeit wurden ausschließlich die relativen Abstandsfluktuationen zur Bestimmung der kritischen Temperaturen des Phasenübergangs herangezogen.

4.4 Kopplungsparameter

Der Kopplungsparameter Γ ist in (1.1) definiert als Verhältnis der Wechselwirkungsenergie U_{WW} zur kinetischen Energie U_{kin} , wobei U_{WW} abhängig von der Art der Wechselwirkung ersetzt wird. Im allgemeinen wird der Coulomb Kopplungsparameter

$$\Gamma_C = \frac{(Ze)^2}{a} \cdot \frac{1}{k_B T} \quad (4.46)$$

als Referenz benutzt, wobei a der mittlere Abstand zweier Teilchen ist und mit der makroskopischen Dichte n über

$$a = \left(\frac{3}{4\pi n} \right)^{1/3} \quad (4.47)$$

verknüpft ist. So ergibt sich für den makroskopischen Coulomb Kopplungsparameter

$$\Gamma_C = \left(\frac{4\pi}{3} \right)^{1/3} \frac{(Ze)^2 \cdot n^{1/3}}{k_B T}. \quad (4.48)$$

Im Fall eines infiniten OCPs ist der kritische Wert für den Phasenübergang festflüssig mit $\Gamma_C^* = 170$ (bzw. $\Gamma_C^* = 106$ ohne den Term $(\frac{4\pi}{3})^{1/3}$ in Gleichung 4.48) bestimmt. Die Abhängigkeit des Kopplungsparameters Γ^* von der Anzahl der Teilchen N ist bisher erst schlecht untersucht, so daß der Wert des OCPs als Referenz genommen wird. Der Vergleich von (4.46) mit den relativen Abstandsfluktuationen in (4.43) legt nahe, die relativen Abstandsfluktuationen durch den Kopplungsparameter zu beschreiben, wenn man den Zwei-Teilchen-Gleichgewichtsabstand r_{0C} durch den mittleren Abstand a ersetzt

$$u_r^2 = \frac{1}{3} \frac{1}{\Gamma_C}. \quad (4.49)$$

In dieser Ersetzung ist Γ_C die reziproke Temperatur der MC-Simulationen.

In Abbildung 4.9 zeigt sich ein Problem dieser Ersetzung. In dem Modell ist der Abstand zweier benachbarter Schalen verschieden von dem mittleren Abstand zweier Teilchen auf einer Schale. Um den Fehler der Substitution des mittleren Teilchenabstands durch die Dichte in mesoskopischen Systemen abzuschätzen, zeigt die Abbildung 4.9 den mittleren Teilchenabstand der nächsten Nachbarn r_{ij} , wobei Teilchen i und j benachbart sind, und den mittleren Schalenabstand $R_{\mu\nu}$ in Coulomb balls als Funktion der Teilchenanzahl N . Diese Grafik macht die Komplexität, die Schmelzpunkte dieser mesoskopischen Systeme analytisch zu beschreiben, deutlich.

Um einen *universellen* Kopplungsparameter Γ^* , der sowohl für Coulomb- als auch Yukawa-Wechselwirkung gilt, zu bestimmen, führt ein Vergleich von (4.43) mit (4.44) auf

$$\Gamma^*(\kappa \cdot r_{0Y}(\kappa), T) = \Gamma_C \cdot f_2(\kappa \cdot r_{0Y}), \quad (4.50)$$

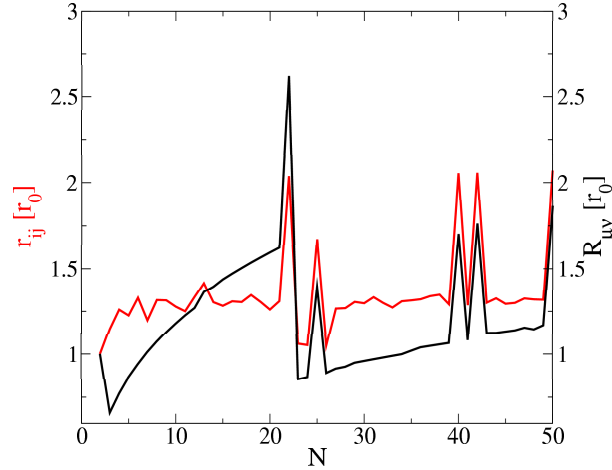


Abbildung 4.9: Mittlerer Abstand zweier, benachbarter Teilchen r_{ij} (rote Linie) und benachbarter Schalen $R_{\mu\nu}$ (schwarze Linie) in Abhängigkeit der Systemgröße N . Die Schwankungen deuten den Fehler der Ersetzung des Zwei-Teilchen-Gleichgewichtsabstands durch die makroskopische Dichte an.

mit

$$f_2 \stackrel{4.45}{=} \left(\frac{1 + \kappa r_{0Y}}{e^{\kappa r_{0Y}}} \right)^{1/3} \cdot e^{\kappa r_{0Y}} \cdot \left(1 + \kappa r_{0Y} + \frac{(\kappa r_{0Y})^2}{3} \right)^{-1}. \quad (4.51)$$

Die Korrektur des Coulomb-Kopplungsparameters durch die Abschirmung in dem Zwei-Teilchenmodell ist in Abbildung 4.7 dargestellt. Einen Vergleich mit der von Vulina et al. empirisch entwickelten Funktion [34,35] zeigt die Abbildung 4.10. Bis zu einer Abschirmung von $\kappa = 1.0$ ist die Näherung durch die hier vorgestellte Entwicklung akzeptabel, bei höheren Abschirmungen differieren die Funktionen stark. Erste Untersuchungen zeigen, daß eine anharmonische Entwicklung des lokalen Potentials (4.18), die auch Terme höherer Ordnung berücksichtigt, ein flacheres Potential entstehen lassen. Damit entstehen höhere Fluktuationen, die zu einer Verbesserung der Funktion $f_2(\kappa r_{0Y})$ führen. Diese Tendenz ist durch die roten Pfeile in der Abbildung 4.10 gekennzeichnet.

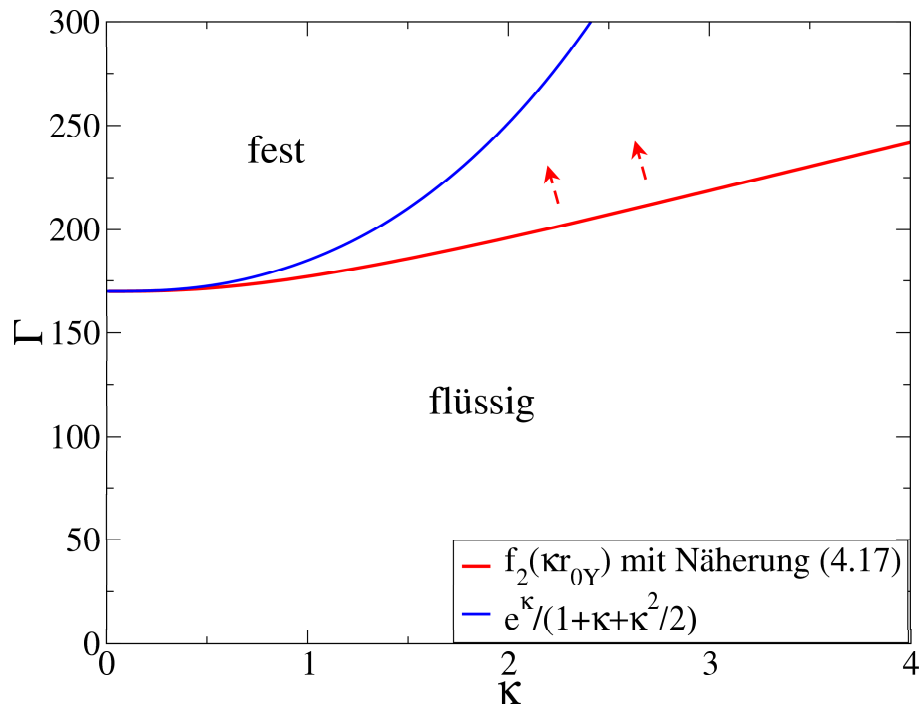


Abbildung 4.10: Funktionen zur Entwicklung eines universellen Kopplungsparameters, der ein konstantes, kritisches Gamma liefert. Die empirisch entwickelte Funktion von Vaulina et al. [35] (blaue Linie) liegt bei höheren Abschirmungen $\kappa \geq 1$ deutlich über der im Zwei-Teilchen-Modell entwickelten Funktion $f_2(\kappa r_{0Y})$ (rote Linie). Die Pfeile deuten an, in welche Richtung sich die Funktion verschiebt, wenn bei der Entwicklung des lokalen Potentials auch anharmonische Terme berücksichtigt werden.

Kapitel 5

Simulationsergebnisse

In diesem Kapitel werden die numerischen Resultate der MC-Simulation dargestellt. Resultate zu den Berechnungen der Grundzustände wurden bereits in Kapitel 2.3 gezeigt.

5.1 Fluktuationen. Schmelzpunkte

Das Problem, Schmelzpunkte beliebiger Systeme durch die relativen Abstandsfluktuationen zu bestimmen, zeigt sich in den Abbildungen 5.1, 5.2 und 5.6.

Dort sind die relativen Abstandsfluktuationen als Funktion der Temperatur für Systeme mit $N = 13, 57$ und 190 Teilchen bei reiner Coulomb-Wechselwirkung ($\kappa = 0.0$) dargestellt.

Das System mit $N = 13$ Teilchen in Abbildung 5.1 zeigt eine klar erkennbare Stufe in den relativen Abstandsfluktuationen. Daraus ergibt sich die kritische Temperatur des Phasenübergangs fest-flüssig in diesem System zu $k_B T = 0.0148 \cdot E_0$ bzw. $\Gamma^* = 68$. Die Grundzustandskonfiguration des Systems ist $(12; 1)$. Da eine Schale mit $N_S = 12$ magisch ist, erklärt sich der hohe Schmelzpunkt, zur besseren Veranschaulichung sind bei den weiteren Grafiken der relativen Abstandsfluktuationen die Fehlerbalken der Simulationsdatenpunkte weggelassen und nur hier exemplarisch für einige Datenpunkte dargestellt. In der kristallinen Phase des Systems ist der Fehler vernachlässigbar klein. Im Bereich des Phasenübergangs sind die Fehler einige Prozent, so daß eine exakte Bestimmung der Schmelzpunkte eine längere MC-Simulation für diesen Abschnitt erfordert. In der flüssigen Phase des Systems sind die Fehler wieder deutlich kleiner.

Schon bei dem System mit $N = 57$ Teilchen zeigt sich ein Problem von Systemen mit vielen Teilchen und mehreren Schalen. Die Grundzustandskonfiguration dieses Systems ist $(45; 12)$, d.h. eine Schale ist wieder magisch. Bei Systemen mit höheren Teilchenzahlen wird bereits die dritte Schale eröffnet. Die relativen Abstandsfluktuationen in Abbildung 5.2 zeigen zunächst einen Anstieg bei $k_B T = 0.0011 \cdot E_0$ bzw. $\Gamma = 910$ und dann einen weiteren, kleineren Anstieg bei

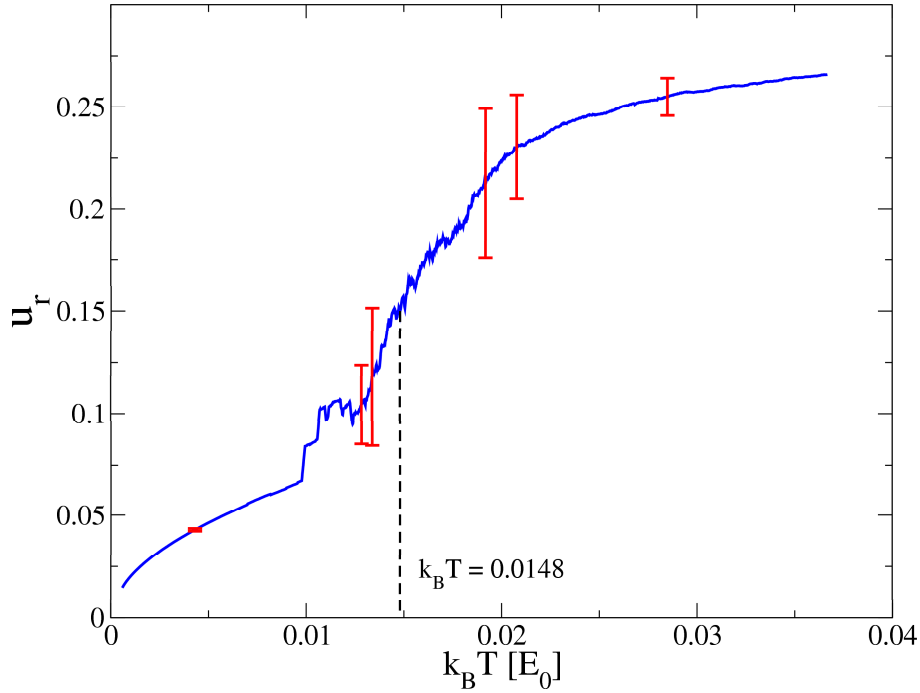


Abbildung 5.1: Relative Abstandsfluktuationen für ein System mit $N = 13$ Teilchen bei einer Abschirmung $\kappa = 0.0$. Der Sprung in den Fluktuationen korrespondiert mit dem Phasenübergang. Die kritische Temperatur liegt bei $k_B T = 0.0148 \cdot E_0$. Die Fehlerbalken sind hier exemplarisch für 6 Datenpunkte in rot dargestellt. Im Bereich des Phasenübergangs sind die Fehler am größten und betragen $\pm 15\%$.

$k_B T = 0.0098 \cdot E_0$ bzw. $\Gamma = 102$. Ein infinites OCP weist für den Phasenübergang fest-flüssig den kritischen Kopplungsparameter $\Gamma^* = 106$ auf. Der erste Anstieg in den relativen Abstandsfluktuationen bewirkt keine Änderung in der radialen Verteilung $p_r(r)$.

Die Radialverteilung bei einer festen Temperatur wurde in der MC-Simulation bestimmt, indem die radialen Positionen aller Teilchen bei jedem MC-Schritt gespeichert wurden und am Ende über die MC-Schritte gemittelt wurde. Dabei gilt für die Radialverteilung

$$N = \int_0^\infty p_r(r) dr \quad (5.1)$$

bzw.

$$N_S = \int_{Sg_{S,S-1}}^{Sg_{S,S+1}} p_r(r) dr, \quad (5.2)$$

mit N_S der Anzahl der Teilchen auf der Schale S und $Sg_{i,j} = \frac{R_i + R_j}{2}$ der Schalgrenze zwischen den Schalen i und j . Die mittleren Besetzungszahlen ergeben sich aus Gleichung 5.2, indem über die MC-Schritte gemittelt wird, $\langle N_S \rangle_{MC}$.

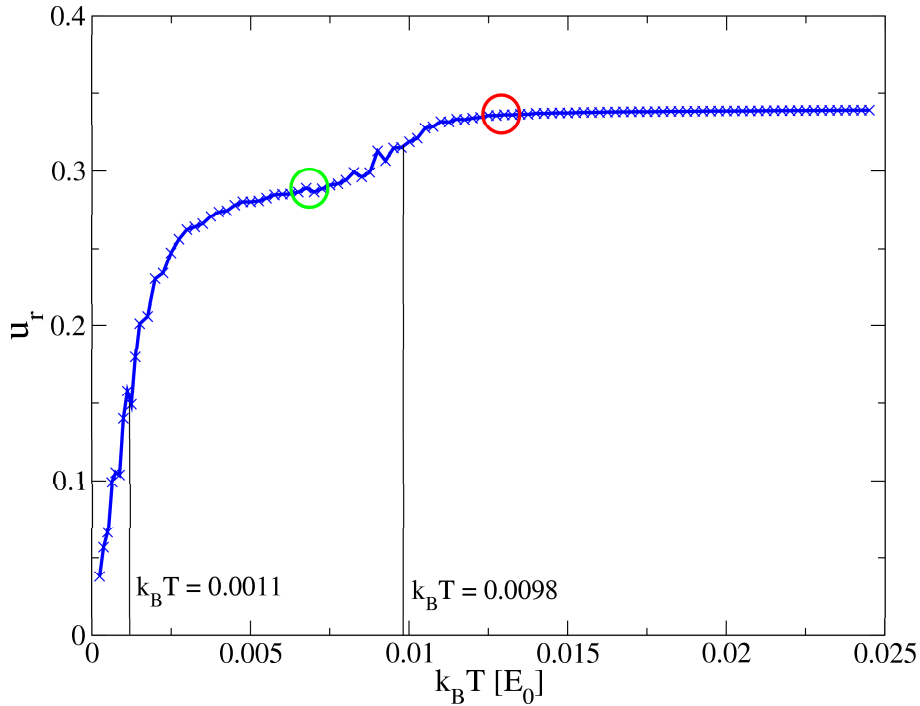


Abbildung 5.2: Relative Abstandsfluktuationen für ein System mit $N = 57$ Teilchen bei einer Abschirmung $\kappa = 0.0$. Man erkennt zwei Stufen in den Fluktuationen. Der Vergleich mit den radialen Verteilungsfunktionen zu diesen Temperaturen in den Abbildungen 5.3 und 5.4 zeigt, daß erst der zweite Sprung bei $k_B T = 0.0098 \cdot E_0$ mit radialem Schmelzen korrespondiert. Der Anstieg bei niedrigeren Temperaturen entspricht Symmetrieänderungen auf den Schalen des Coulomb balls. Der grüne und rote Kreis markieren, bei welchen Temperaturen die radialen Verteilungen in den Abbildungen 5.3 und 5.4 aufgenommen wurden.

Die radiale Verteilung des Systems mit $N = 57$ Teilchen nach dem ersten Anstieg (grüner Kreis in Abbildung 5.2) ist in Abbildung 5.3 wiedergegeben.

Das System befindet sich noch immer in der Grundzustandskonfiguration. Nach dem zweiten Anstieg in den relativen Abstandsfluktuationen (roter Kreis in der Abbildung 5.2) fluktuieren Teilchen ins Zentrum. Der Ausschnitt in Abbildung 5.4 im Bereich $0 < r < 0.5$ zeigt die Änderung in der radialen Verteilung gegenüber der Abbildung 5.3 deutlich.

Dagegen ist in der radialen Verteilung in Abbildung 5.5 für ein System mit $N = 13$ Teilchen keine Änderung der Konfiguration zu erkennen. Gegenüber der Grundzustandskonfiguration (rote Linie) bei $k_B T = 0 \cdot E_0$ sind die Peaks, ähnlich einer Deltafunktion, in der Verteilung nur aufgeschmolzen (blaue Linie), sie werden mit steigender Temperatur flacher und breiter.

In den relativen Abstandsfluktuationen bei einem System mit $N = 190$ Teilchen ist keine eindeutige Stufe mehr zu erkennen. Der Anstieg der Fluktuationen ver-

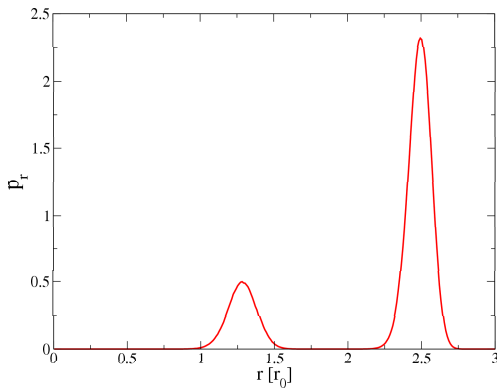


Abbildung 5.3: Radiale Verteilungsfunktion für ein System mit $N = 57$ Teilchen bei einer Temperatur $k_B T = 0.0069 \cdot E_0$ (vgl. roter Kreis in der Abbildung 5.2). Es existieren zwei Schalen.

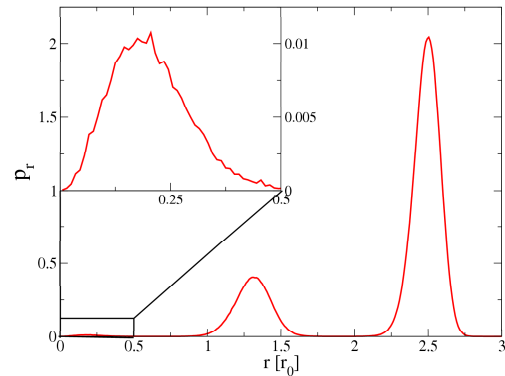


Abbildung 5.4: Radiale Verteilungsfunktion für ein System mit $N = 57$ Teilchen bei einer Temperatur $k_B T = 0.013 \cdot E_0$ nach dem zweiten Anstieg in den relativen Abstandsfluktuationen in Abbildung 5.2 (grüner Kreis). Der Ausschnitt zeigt deutlich, daß bereits radiales Schmelzen eingesetzt hat und Teilchen während der Simulation ins Zentrum des Coulomb ball und zurück gehen.

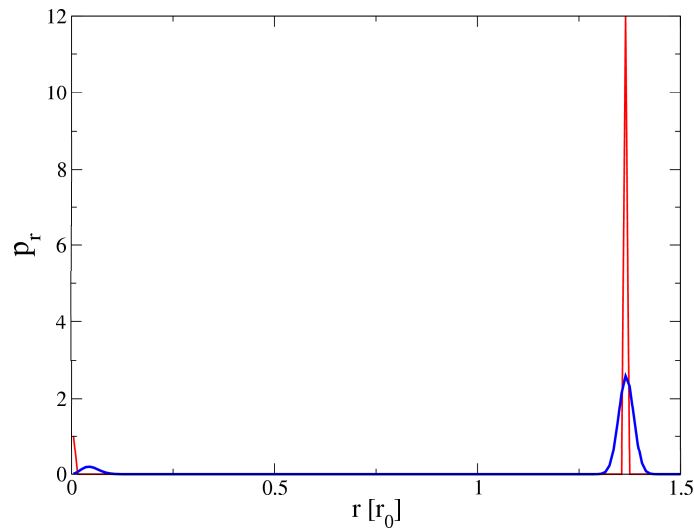


Abbildung 5.5: Radiale Verteilungsfunktion für ein System mit $N = 13$ Teilchen. Die rote Linie zeigt den Grundzustand bei $T = 0 \cdot E_0$, die blaue Linie bei $\Gamma_C = 500$ (entspricht $k_B T = 0.002 \cdot E_0$). Die Konfiguration des Systems ist bei beiden Temperaturen die Grundzustandskonfiguration (12; 1).

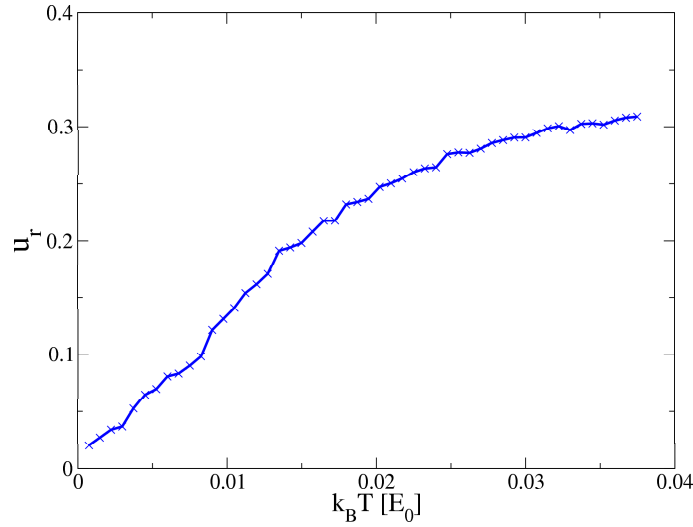


Abbildung 5.6: Relative Abstandsfluktuationen für ein System mit $N = 190$ Teilchen bei einer Abschirmung $\kappa = 0.0$. Bei diesem System ist kein explizites radiales Schmelzen mehr in den relativen Abstandsfluktuationen zu erkennen. Die Schmelzprozesse sind so komplex, daß sie sich überlagern.

teilt sich über einen großen Temperaturbereich. Hier kann durch die relativen Abstandsfluktuationen keine kritische Temperatur für den Phasenübergang bestimmt werden.

Die Erklärung ergibt sich aus den möglichen Schmelzprozessen und deren Reaktionswegen. Bei kleinen Systemen wie bei dem mit $N = 13$ Teilchen gibt es entsprechend weniger mögliche Symmetrie- und Konfigurationsänderungen als bei Systemen mit höheren Teilchenzahlen. Die vorhandenen Reaktionswege, Symmetrieänderungen auf den Schalen durch Änderung der Anzahl der Nachbarn oder der Anordnung der Voronoi-Zellen, Rotationen der Schalen gegeneinander oder auch radiale Prozesse, die zu Konfigurationsänderungen führen, sind sehr komplex und deren Anzahl steigt exponentiell mit der Gesamtzahl der Teilchen an. Diese möglichen Schmelzprozesse haben unterschiedliche Potentialbarrieren und überlagern sich in der Darstellung der relativen Abstandsfluktuationen, bei denen die Schmelzprozesse nicht in radiale und winkelabhängige Prozesse getrennt werden können.

Die Untersuchung der radialen Fluktuationen u_{rad} (vgl. Gleichung 4.1) gibt die Möglichkeit, die radialen Schmelzpunkte bei Systemen mit $N > 30$ zu bestimmen.

Für den Fall reiner CoulombWechselwirkung zeigt die Abbildung 5.7 die radialen Fluktuationen u_{rad} und die relativen Abstandsfluktuationen u_r für ein System mit $N = 57$ Teilchen im Vergleich. Es ist sofort erkennbar, daß der zweite Anstieg in den relativen Abstandsfluktuationen mit dem radialen Schmelzen korrespondiert. Eine umfangreiche Analyse der radialen Fluktuationen für die Cluster mit größte-

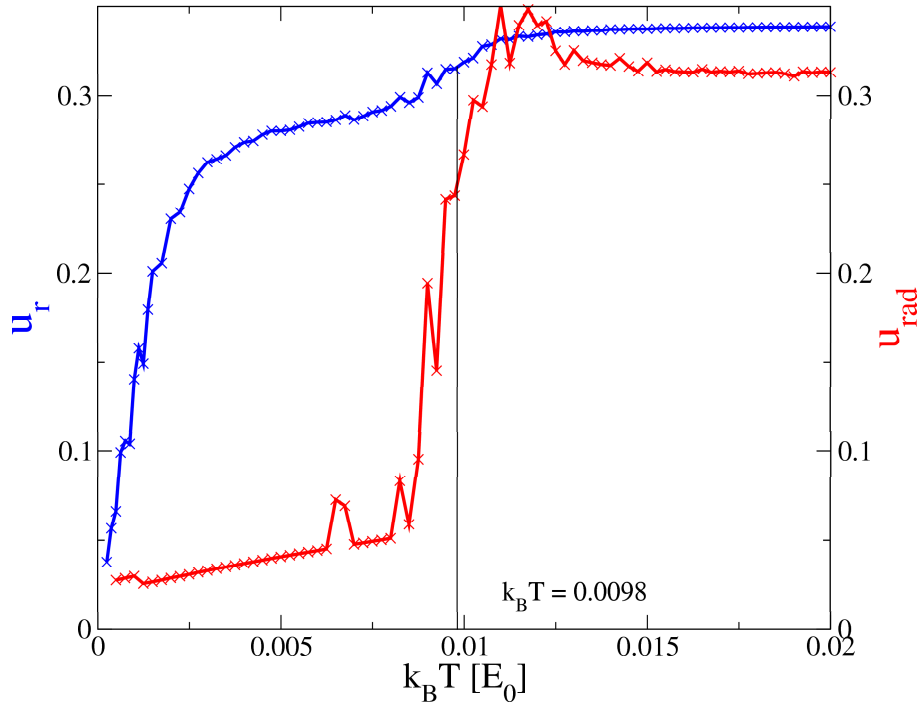


Abbildung 5.7: Relative Abstandsfluktuationen u_r (blaue Linie) und radiale Fluktuationen u_{rad} (rote Linie) für ein System mit $N = 57$ Teilchen bei einer Abschirmung $\kappa = 0.0$ im Vergleich. Der zweite Anstieg in den relativen Abstandsfluktuationen stimmt mit dem Anstieg in den radialen Fluktuationen überein.

ren Teilchenzahlen steht noch aus und wird in dieser Arbeit nicht behandelt. Für verschiedene, mesoskopische Systeme wurden die relativen und radialen Abstandsfluktuationen untersucht. Dabei wurde sowohl Coulomb- als auch Yukawa-Wechselwirkung in der Simulation berücksichtigt. Für den Fall der reinen Coulomb-Wechselwirkung zeigt Abbildung 5.8 die Schmelzpunkte der Coulomb balls mit $5 \leq N \leq 20$ Teilchen. Der Vergleich mit der Voronoi-Analyse bzw. den Bindungsenergien in [24] die Bedeutung der Symmetrie der Cluster für die Schmelzprozesse. Besonders symmetrische Cluster schmelzen später als Systeme mit niedriger Symmetrie. Die Abhängigkeit des Schmelzpunktes von der Gesamtzahl der Teilchen bzw. dem Prozentsatz der Teilchen an der Oberfläche (auf der äußersten Schale), wie bereits für Ionenkristalle größerer Teilchenzahlen in [30] gezeigt, läßt sich bei den untersuchten mesoskopischen Coulomb balls nur schwer zeigen, da die Symmetrie der Schalen für die Schmelzpunkte hier die entscheidene Rolle spielt. Dieses Phänomen erschwert ebenfalls die Analyse der Coulomb balls mit einer Yukawa-Wechselwirkung. Denn mit Erhöhung der Abschirmung ändert sich nicht nur der Gleichgewichtsabstand r_{0Y} , sondern auch die Gesamtkonfiguration des Systems. Bereits in [1] haben MD-Simulationen gezeigt, daß die Erhöhung der

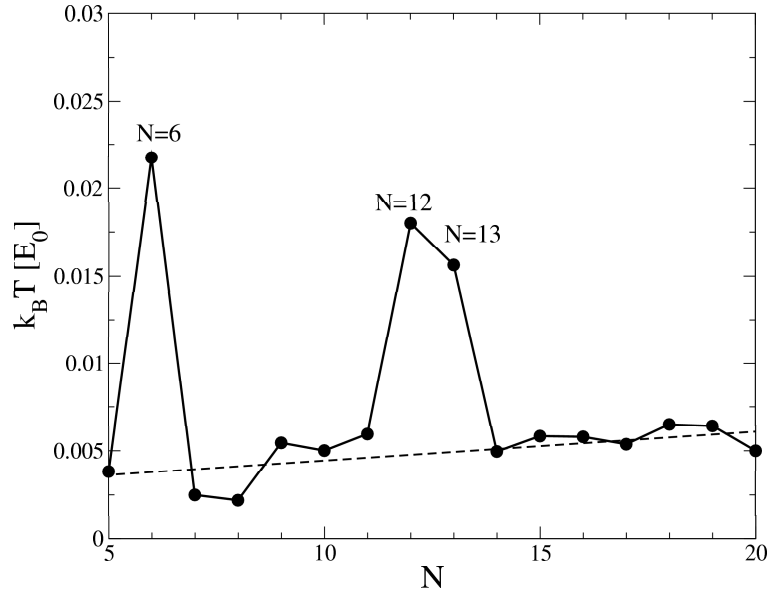


Abbildung 5.8: Schmelzpunkte in Abhängigkeit der Systemgröße für Coulomb balls mit $5 \leq N \leq 20$ Teilchen. Die höheren Schmelzpunkte beobachtet man bei Systemen mit magischen Schalen. Sie weisen perfekte Symmetrie auf. Hier sind es Systeme mit $N = 6, 12, 13$. Die gestrichelte Linie deutet den Verlauf der Schmelzpunkte der nicht magischen Cluster an; dieser nähert sich dem kritischen Wert ($\Gamma^* = 106$ bzw. $k_B T \approx 0.0094 \cdot E_0$) für ein infinites OCP an (vgl. [30]).

Abschirmung zu einer Umverteilung der Teilchen von der äußersten Schale auf die inneren Schalen führt. Diese Konfigurationsänderungen ergeben komplett unterschiedliche Symmetrieparameter und folgerichtig unterschiedliche Schmelzpunkte der Systeme.

Die Abbildungen 5.9 und 5.10 zeigen die relativen Abstandsfluktuationen für einen magischen Cluster mit $N = 12$ Teilchen bei unterschiedlichen Abschirmungen. In Grafik 5.9 sind die Abschirmungen $\kappa = 0.0$, $\kappa = 0.33$, $\kappa = 0.67$ und $\kappa = 1.0$ dargestellt und es ist keine Tendenz der Änderung der kritischen Temperatur für den Phasenübergang, wie durch Gleichung 4.50 vorausgesagt, erkennbar. Erst bei sehr viel höheren Abschirmungen wie in Grafik 5.10 mit $\kappa = 3.0$ und $\kappa = 10.0$ ändert sich die kritische Temperatur zu niedrigeren Temperaturen erwartungsgemäß. Der Vergleich in [15] zeigt jedoch, daß die Konfigurationen zu diesen Abschirmungen bereits unterschiedlich sind. Die Energiedifferenz zwischen der Grundzustandskonfiguration $(12; 0)$ und $(11; 1)$ ist bereits ab einer Abschirmung von $\kappa \approx 2.0$ kleiner als bei reiner Coulomb-Wechselwirkung. Bei $\kappa = 4.7$ und $\kappa \approx 20.0$ treten Änderungen in den Grundzustandskonfigurationen auf, so daß gerade in diesen Bereichen, die Grundzustandskonfiguration und Konfiguration des ersten angeregten Zustandes energetisch sehr dicht zusammen liegen. In diesen Bereichen überwiegt die Änderung der Konfiguration und damit verbundene

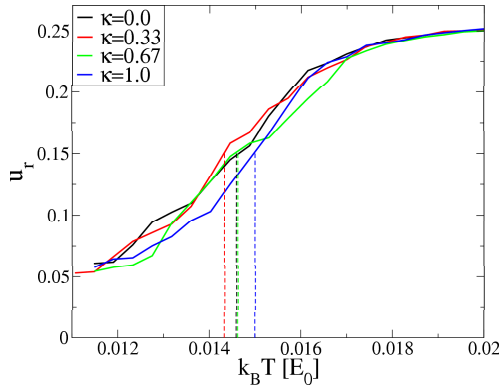


Abbildung 5.9: Relative Abstandsfluktuationen für einen magischen Cluster mit $N = 12$ Teilchen bei unterschiedlichen Abschirmungen $0.0 \leq \kappa \leq 1.0$. Es ist keine Systematik des Schmelzpunktes abhängig von der Abschirmung erkennbar.

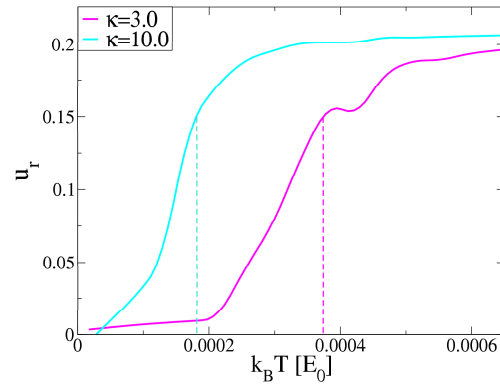


Abbildung 5.10: Relative Abstandsfluktuationen für einen magischen Cluster mit $N = 12$ Teilchen bei $\kappa = 3.0$ (magenta) und $\kappa = 10.0$ (cyan). Diese Systeme schmelzen bei sehr viel niedrigeren Temperaturen als der gleiche Cluster mit einer Abschirmung von $0.0 \leq \kappa \leq 1.0$.

Symmetrieänderung dem in Kapitel 4 vorgestellten Effekt deutlich.

5.2 Potentialbarrieren

Die Untersuchung der Potentialbarrieren des Coulomb balls liefert eine Möglichkeit, die kritischen Temperaturen für die Phasenübergänge in mesoskopischen Clustern zu bestätigen. Für die unterschiedlichen Schmelzprozesse, Rotationen der Schalen gegeneinander, Austausch von Teilchen innerhalb einer Schale oder Symmetrieänderungen, als auch radiales Schmelzen zwischen den Schalen, existieren unterschiedliche Potentialbarrieren. Aufgrund der Komplexität der möglichen Reaktionswege für solche Änderungen in den Konfigurationen wurden in dieser Arbeit nur die radialen Barrieren berücksichtigt.

Die radialen Potentialbarrieren lassen sich zur Bestätigung der Schmelzpunkte eines Systems heranziehen.

Der Abbildung 5.11 entnimmt man eine Höhe der radialen Potentialbarriere von $E = 0.01769 \cdot E_0$. Das ist die minimale Energie, die klassisch notwendig ist, die Barriere zu überwinden, während quantenmechanische Teilchen die Barriere bereits ab Energien, die größer als die Differenz des Grundzustandes $(12;0)$ zu dem angeregten Zustand $(11;1)$ von $\Delta E_{MC} = 0.01531 \cdot E_0$ sind, überwinden können. Aus der Analyse der MD-Daten ist bekannt, daß sich die Konfiguration des Grundzustandes um $\Delta E_{MD} = 0.0153 \cdot E_0$ von der Konfiguration $(11;1)$ unterscheidet. Die Analyse der relativen Abstandsfluktuationen für ein

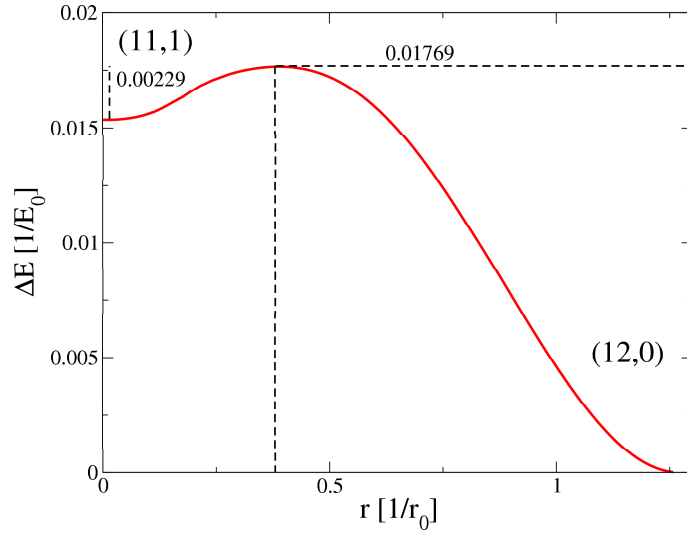


Abbildung 5.11: Radiale Potentialbarriere im System mit $N = 12$ Teilchen für die Bewegung eines Teilchens von der Schale ins Zentrum bei einer Abschirmung von $\kappa = 0.0$. Diese Bewegung entspricht der Änderung vom Grundzustand $(12; 0)$ in den ersten angeregten Zustand $(11; 1)$. Während der Bewegung ins Zentrum wurde das Teilchen in der MC-Simulation gepinnt.

System mit $N = 12$ Teilchen (Abbildung 4.1) ergibt eine kritische Temperatur von $k_B T \approx 0.017 \cdot E_0$, die sehr gut mit der Höhe der radialen Potentialbarriere übereinstimmt.

Die MC-Simulation zur Berechnung dieser Barrieren muß analog der Grundzustandsberechnung möglichst häufig wiederholt werden, um die niedrigste Potentialbarriere zu erhalten. Für jede radiale Bewegung des zu versetzenden Teilchens wird das System leicht erhitzt und wieder abgekühlt, wobei die energetisch günstigste Konfiguration gesucht wird und alle anderen Teilchen frei relaxieren können. Dieser Prozess wird bei jeder radiale Versetzung häufig wiederholt, so daß man mit hoher Wahrscheinlichkeit den günstigsten Reaktionsweg findet. Die Höhe der so bestimmten niedrigsten Potentialbarriere entspricht der Energie, die ein klassisches Teilchen mindestens haben muß, um die Schale zu wechseln.

Kapitel 6

Vergleich mit experimentellen Ergebnissen

Der Vergleich des Modells (1.2) mit dem Experiment [3] gibt Aufschluß über die Anwendbarkeit des Modells auf Coulomb balls in komplexen Plasmen. Es wird gezeigt, daß Vergleiche sich für die Entwicklung einer neuen Diagnostik für die Plasmamparameter Debyelänge λ_D und Staubtemperatur T_d eignen. Dazu werden Meßgrößen untersucht, die sich signifikant in Abhängigkeit des jeweiligen Parameters ändern und möglichst unabhängig von weiteren Einflüssen sind.

6.1 Abschirmung

Der Einfluß der Abschirmung auf die Clustergröße und Schalenpopulation in den Simulationen wird mit experimentellen Beobachtungen verglichen [1, 6]¹.

6.1.1 Clusterkompression

Ein typisches, experimentelles Ergebnis eines Clusters mit $N = 190$ Teilchen und seiner Schalenkonfiguration ist in der linken Grafik der Abbildung 6.1 dargestellt.

In allen Fällen sind vier konzentrische Schalen zu sehen, die aus dem Gleichgewicht des Confinements E_{conf} (2.1) und der abstoßenden Wechselwirkung E_{WW} (2.2) sind. Der Vergleich mit einer MD-Simulation bei verschiedenen Abschirmungen κ zeigt, daß ähnliche Konfigurationen wie im Experiment erzielt werden können.

¹Die Abbildungen 6.1, 6.2 und 6.9 sind der Referenz [6] entnommen. An den MD-Simulationen waren V. Golubnychiy und P. Ludwig beteiligt. Die Ergebnisse wurden im Bereich von $2 \leq N \leq 100$ durch MC-Simulationen bestätigt.

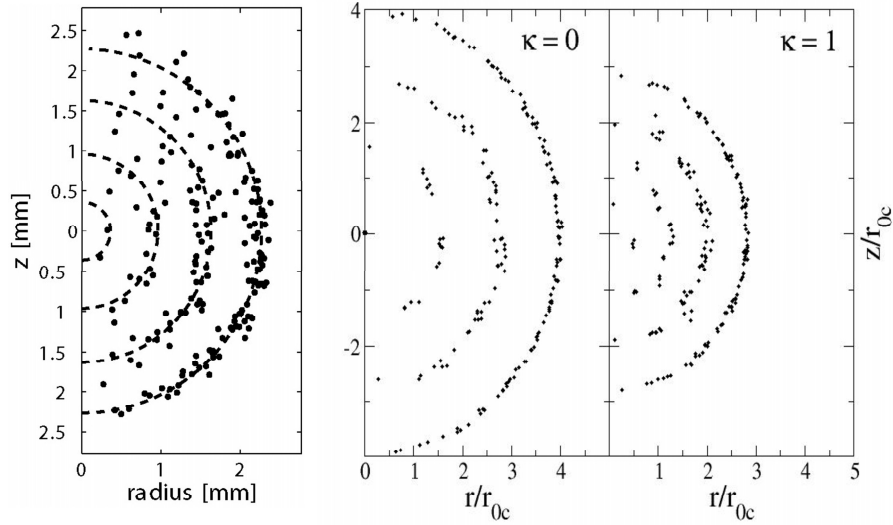


Abbildung 6.1: Radialverteilung für einen Coulomb ball mit $N = 190$ Teilchen in Zylinderkoordinaten. Die linke Grafik zeigt die experimentelle Konfiguration [2], während die beiden rechten Grafiken die Simulationsergebnisse mit Coulomb- ($\kappa = 0.0$) und Yukawa- ($\kappa = 1.0$) Potential zeigen. Die Längenangaben in den beiden rechten Grafiken sind in Einheiten des Gleichgewichtsabstands r_{0C} , gegeben durch (4.9).

$\kappa \rightarrow$	0.0	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	1.0	Experiment
N_4	1	1	2	2	2	2	4	2
N_3	18	18	20	20	21	21	24	21
N_2	56	57	57	58	58	60	60	60
N_1	115	114	111	110	109	107	102	107

Tabelle 6.1: Abhängigkeit der Besetzungszahlen von der Abschirmung κ für die Schalen bei einem Coulomb ball mit $N = 190$ Teilchen im Vergleich mit dem im Experiment beobachteten Coulomb ball. Bei $\kappa = 0.6$ gibt es eine Übereinstimmung der Grundzustandskonfiguration der Simulation mit der Konfiguration des Experimentes.

Die Tabelle 6.1 führt diesen Effekt für den Cluster mit $N = 190$ Teilchen noch einmal exemplarisch auf. Daraus ergibt sich hier eine Abschirmung von $\kappa_{N=190}^{Exp.} = 0.6$, bei der die Grundzustandskonfiguration der MD-Simulation mit der beobachteten Konfiguration übereinstimmt.

Ein detaillierterer Vergleich der Schalenradien R_S in Abhängigkeit der Cluster-

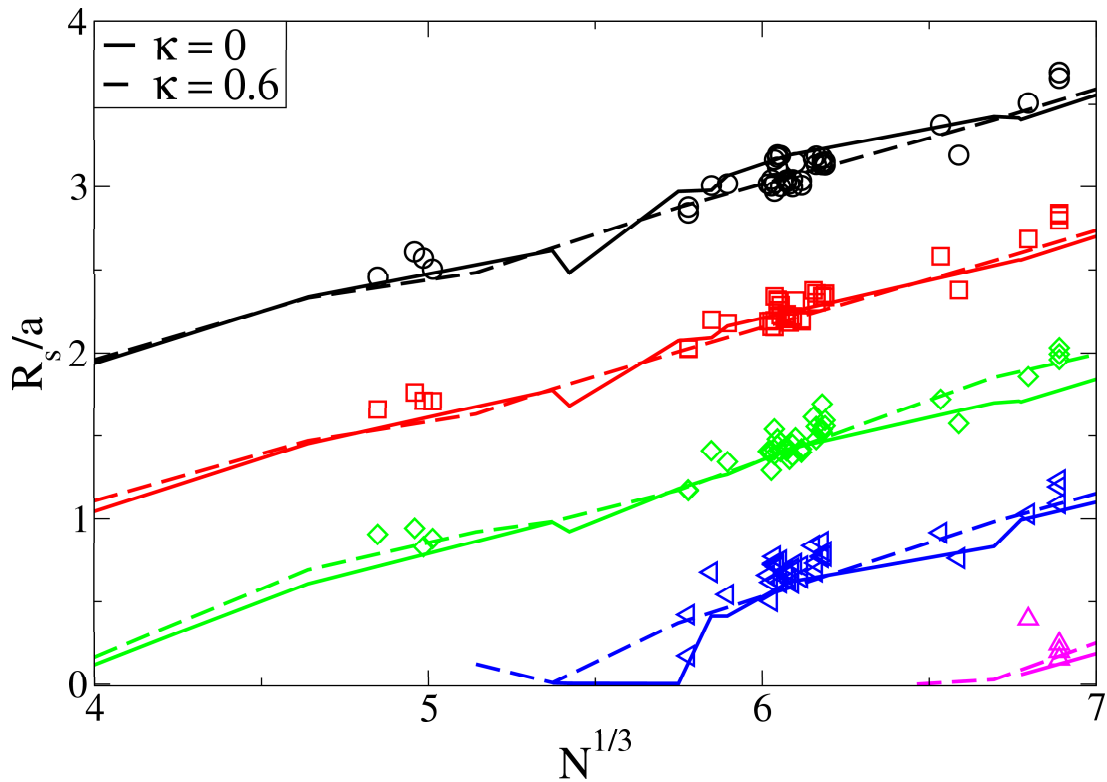


Abbildung 6.2: Experimentelle Ergebnisse (Symbole) und Simulationsdaten (Linien) für die Schalradien $3d$ -Coulomb balls in Einheiten des mittleren Teilchenabstands nächster Nachbarn a [6]. Die gestrichelte Linien stellen die MD-Simulationsergebnisse für eine Abschirmung von $\kappa = 0.6$ dar.

größe N im Experiments [3] mit MD-Simulationen zeigt in der Abbildung 6.2 einen linearen Anstieg des Schalradius' mit der Systemgröße N [6]. Nur im Bereich der Cluster, bei denen eine neue Schale auftritt (z.B. $N = 12$ und $N = 60$), gibt es Ausnahmen. Für diesen Vergleich wurden 43 Coulomb balls mit $100 < N < 500$ untersucht. Alle Coulomb balls wurden unter gleichen experimentellen Bedingungen aufgenommen. Sie waren alle sphärisch symmetrisch und ihr Durchmesser lag im Bereich $d = 4 - 5\text{mm}$.

Ohne freien Parameter findet sich eine gute Übereinstimmung der experimentellen Radien und der MD-Ergebnisse für reine Coulomb-Wechselwirkung (durchgezogene Linien). Sowohl die absoluten Werte, als auch die Äquidistanz der Schalen stimmt mit dem Experiment überein. Dieses Ergebnis ist auch für kleine Abschirmungen (z.B. $\kappa = 0.6$) gültig.

Daraus lassen sich bereits zwei Schlußfolgerungen ziehen. Zum Einen ist die Annahme, ein Confinent zu benutzen, das unabhängig von der Abschirmung ist, gerechtfertigt. Im Unterschied dazu zeigt das Modell [32] keine äquidistanten Schalen und keine Strukturänderung mit der Abschirmung, wie in der Tabelle

6.1 für den Cluster mit $N = 190$ dargelegt.

6.1.2 Schalenpopulation. Temperaturabhängigkeit

Nach (1.3) ist die Abschirmung κ abhängig von der Temperatur der einzelnen Spezies, auch der Staubtemperatur T_d . Um eine neue Diagnostik für den Plasmaparameter λ_D bzw. der Abschirmung κ zu entwickeln, ist es notwendig, den Temperatureinfluß zu vernachlässigen.

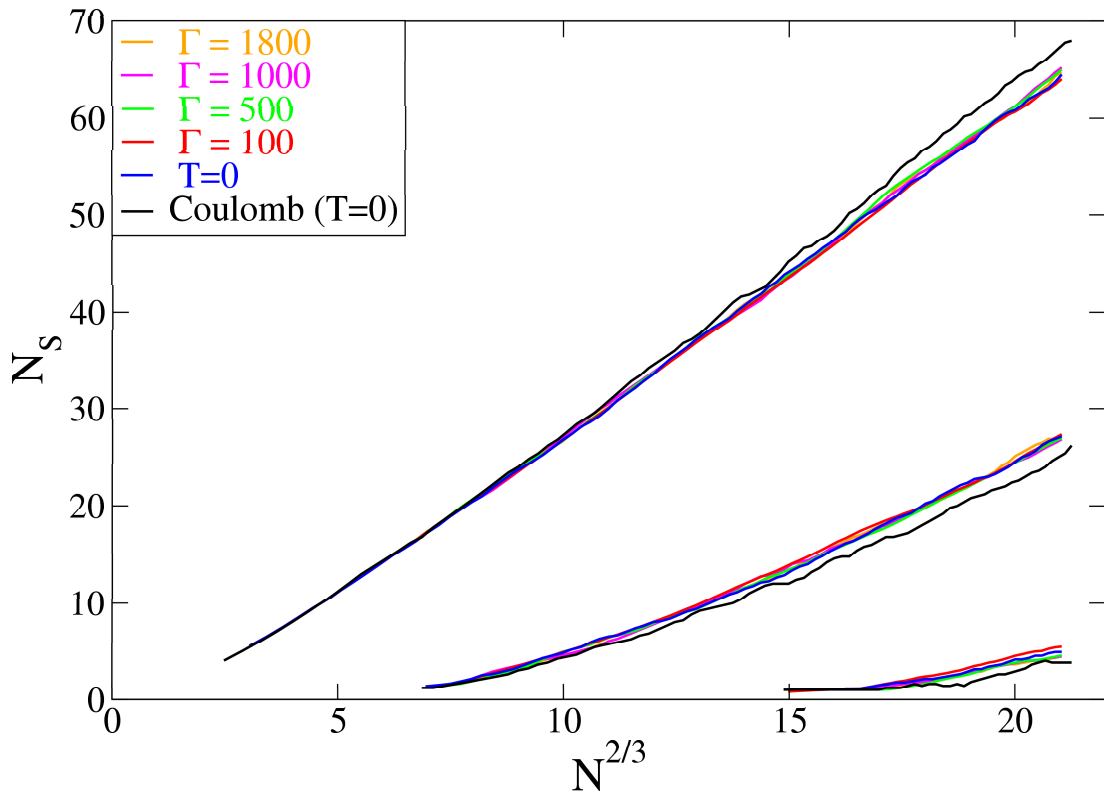


Abbildung 6.3: Temperaturabhängigkeit der Schalenbesetzungszahlen N_S als Funktion der Systemgröße N . Die Besetzungszahlen wurden bei konstanter Temperatur und konstanter Abschirmung ($\kappa = 0.67$) während der MC-Simulation gemittelt und zeigen im Bereich starker Kopplung, in dem das System noch in der kristallinen Phase ist, keine Änderung.

Abbildung 6.3 zeigt die Temperaturabhängigkeit der mittleren Schalenbesetzungszahlen N_S für Systeme mit $2 \leq N \leq 100$ Teilchen bei einer Abschirmung von $\kappa = 0.67$. In der MC-Simulation wurden die Cluster auf eine Temperatur entsprechend der Kopplungsparameter $\Gamma_C = 1800$, $\Gamma_C = 1000$, $\Gamma_C = 500$ und $\Gamma_C = 100$ erhitzt und die Besetzungszahlen N_S der Schalen über 500000 MC-Schritte gemittelt. Als Vergleich sind in der Grafik auch die Besetzungszahlen für den Grundzustand sowohl bei $\kappa = 0.67$ (blaue Linie), als auch für den Fall

reiner Coulomb-Wechselwirkung $\kappa = 0.0$ (schwarze Linie) bei $k_B T = 0 \cdot E_0$ dargestellt. Die Änderung zwischen den Konfigurationen bei $\kappa = 0.0$ und $\kappa = 0.67$ ist deutlich sichtbar, während die Abhängigkeit der Temperatur gegen diesen Effekt vernachlässigbar ist.

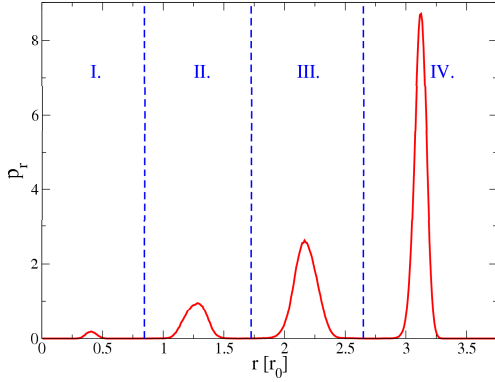


Abbildung 6.4: Radiale Verteilungsfunktion für ein System mit $N = 190$ Teilchen bei einer Temperatur $k_B T = 0.002 \cdot E_0$ und einer Abschirmung $\kappa = 0.67$. Das System befindet sich noch in der kristallinen Phase. Die Bereiche I. bis IV. deuten die Einteilung der Schalen an.

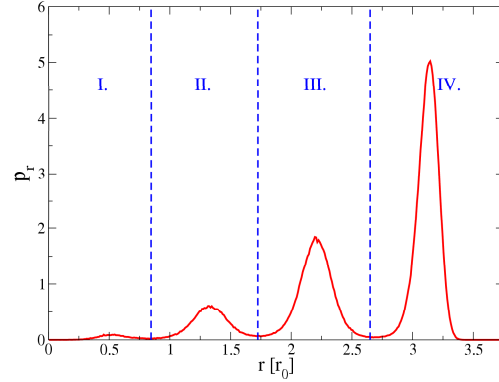


Abbildung 6.5: Radiale Verteilung der Teilchen eines Coulomb balls mit $N = 190$ Teilchen bei einer Temperatur $k_B T = 0.02 \cdot E_0$ und einer Abschirmung $\kappa = 0.67$. Das System befindet sich in der flüssigen Phase. Die Bereiche I. bis IV. deuten die Einteilung der Schalen an.

In den Abbildungen 6.4 und 6.5 ist die radiale Verteilung eines Coulomb balls mit $N = 190$ Teilchen bei einer Abschirmung von $\kappa = 0.67$ dargestellt. Bei der radialen Verteilung der Staubteilchen in Abbildung 6.4 befindet sich das System noch in der kristallinen Phase bei $k_B T = 0.002 \cdot E_0$, während es in Abbildung 6.5 bereits bei $k_B T = 0.02 \cdot E_0$ in der flüssigen Phase ist. Die Peaks der Schalen sind in der flüssigen Phase breiter und niedriger als in der kristallinen Phase. Insbesondere fluktuieren Teilchen zwischen den Schalen, was sich daran erkennen läßt, daß die Radialverteilung $p_r(r) \neq 0.0$ zwischen den einzelnen Schalen ist. Die Abweichung von (5.2) bei höheren Temperaturen ist jedoch gegenüber den Schalenbesetzungszahlen N_S im Grundzustand gering.

Die mittleren Besetzungszahlen der Schalen ändern sich in diesem Temperaturbereich nicht.

Bei sehr viel höheren Temperaturen ($\Gamma \geq 100$) in der flüssigen Phase läßt sich die Tendenz erkennen, daß sich die Schalenkonfiguration analog einer Erhöhung der Abschirmung ändert. Das ist besonders bei der innersten Schale in Abbildung 6.3 zu sehen. Die Teilchen auf dieser Schalen erhöhen sich langsam mit steigender Temperatur.

6.1.3 Debyelänge

Für die Bestimmung der Abschirmung κ bzw. der Debyelänge λ_D aus dem Vergleich der Simulationen mit dem Experiment [3] ist es entscheidend, den Temperatureffekt auf die Schalenbesetzungen vernachlässigen zu können. Aus dem Abschnitt 6.1.2 ist bekannt, daß die mittleren Besetzungszahlen auf den Schalen sich im Bereich der kristallinen Phase des Systems nur geringfügig ändern.

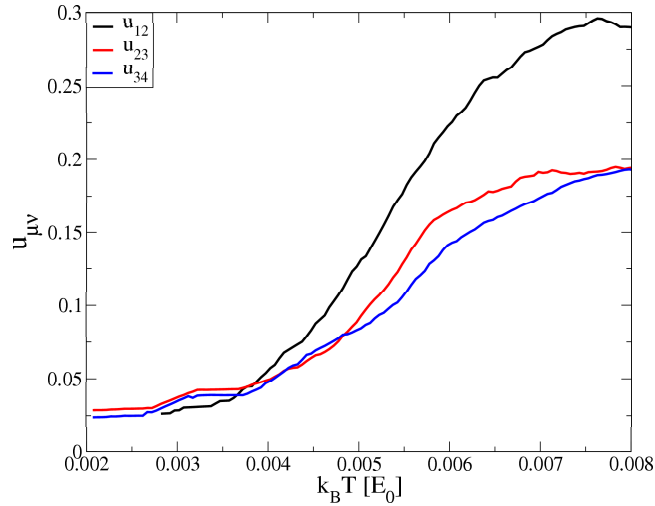


Abbildung 6.6: Schalenfluktuationen $\delta_{\mu\nu}$ der Schalen μ und ν gegeneinander als Funktion der Temperatur für einen Coulomb ball mit $N = 190$ Teilchen bei einer Abschirmung von $\kappa = 0.67$. Danach ist die kritische Temperatur für δ_{12} bei $k_B T \approx 0.0051 \cdot E_0$, für δ_{23} bei $k_B T \approx 0.0054 \cdot E_0$ und für δ_{34} bei $k_B T \approx 0.0057 \cdot E_0$.

Abbildung 6.6 zeigt die Fluktuationen $\delta_{\mu\nu}$ (vgl. Gleichung 4.5) der Schalen gegeneinander. Dabei zeigt sich, daß die Schmelzpunkte der einzelnen Schalen im Wesentlichen gleich sind.

Die Analyse der Potentialbarrieren zwischen den Schalen für den Cluster mit $N = 190$ Teilchen bestätigt, daß die kritischen Temperaturen der unterschiedlichen Schalen gleich sind. Für Systeme mit großen Teilchenzahlen ($N \geq 60$) gibt es verschiedene radiale Übergänge zwischen den Schalen. Die niedrigsten Potentialbarrieren für diesen Coulomb ball sind in Abbildung 6.7 dargestellt.

Die Potentialbarrieren sind nicht zwangsläufig mit einer Änderung der Schalenbesetzung gleichzusetzen, denn es kann verschiedene Möglichkeiten geben, wie das System relaxiert während der Radialbewegung des Teilchens. Dabei können Teilchen von benachbarten Schalen paritätisch getauscht werden, es kann sich die Konfiguration des Gesamtsystems ändern und es können auf anderen Schalen zusätzlich Teilchen radiale Bewegungen auch auf andere Schalen ausführen. In Abbildung 6.7 sind die jeweils niedrigsten Potentialbarrieren von 200 Programmläufen bei Bewegungen nach außen (gestrichelte Linie) und nach innen

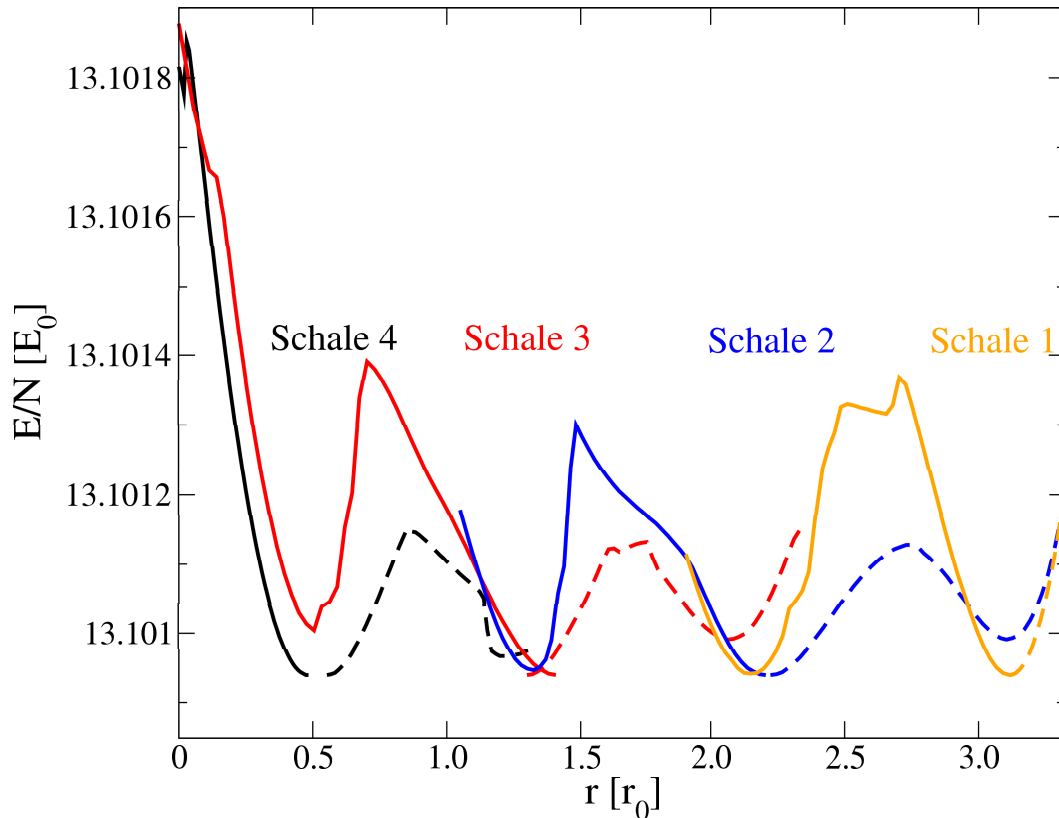


Abbildung 6.7: Radiale Potentialbarrieren im System mit $N = 190$ Teilchen bei einer Abschirmung $\kappa = 0.67$. Von jeder Schale wurde ein Teilchen nach innen (durchgezogene Linie) und in einer neuen Simulation nach außen (gestrichelte Linie) bewegt. Die radiale Bewegung eines Teilchens von einer Schale auf eine andere bedeutet nicht zwangsläufig eine Konfigurationsänderung, da alle andere Teilchen in allen Bewegungsrichtungen frei relaxieren können.

(durchgezogene Linie) dargestellt. Die Farbe der Linien markiert dabei die Zugehörigkeit des bewegten Teilchens, so bedeutet eine rote, gestrichelte Linie, dass ein Teilchen der Schale 2 nach außen bewegt wurde. In der Grafik lassen sich zwei Tendenzen erkennen, die minimalen Potentialbarrieren zwischen den einzelnen Schalen sind ungefähr gleich hoch und die Potentialbarrieren bei einer Bewegung nach außen sind in allen Fällen höher als die ins Zentrum gerichteten Bewegungen.

Es gibt bereits bei kleinen Temperaturen Fluktuationen zwischen den Schalen. Im Gegensatz dazu zeigt Abbildung 6.8 ein anderes Bild. Die radialen Fluktuationen aller Teilchen zeigen erst bei $k_B T = 0.015 \cdot E_0$ einen Anstieg. Diese kritische Temperatur entspricht der Temperatur, bei der die relativen Abstandsfluktuationen in Abbildung 5.6 ungefähr 15% betragen. Die so bestimmten Schmelzpunkte stimmen überein. Die Bestimmung der Temperatur in Abschnitt 6.2 führt auf eine

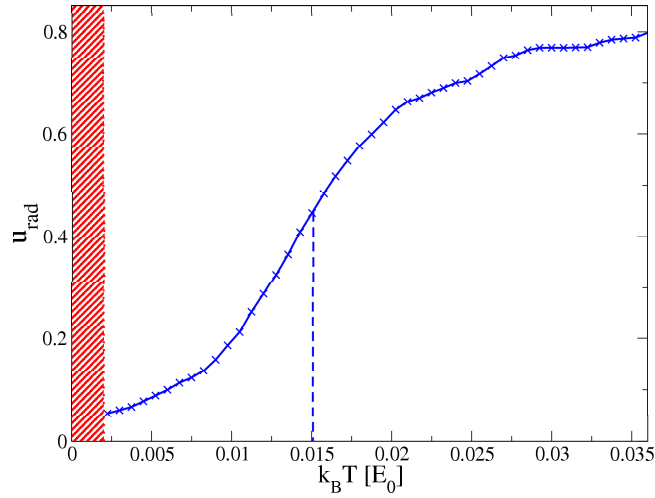


Abbildung 6.8: Radiale Fluktuationen u_{rad} für einen Coulomb ball mit $N = 190$ Teilchen bei einer Abschirmung von $\kappa = 0.67$. Die kritische Temperatur für den Phasenübergang beträgt $k_B T = 0.015 \cdot E_0$ bzw. $\Gamma_C^* = 67$. Der durch die Analyse der Schalenbreiten in Abschnitt 6.2 bestimmte Temperaturbereich des Experimentes ist rot-gestrichelt dargestellt.

Temperatur im Experiment von $\Gamma_C \approx 500$ und liegt damit deutlich im Bereich, wo der Coulomb ball noch kristallin ist (in Abbildung 6.8 dargestellt durch den rot-gestrichelten Bereich).

Damit ist die Vernachlässigung der Temperaturabhängigkeit der mittleren Schalenbesetzungszahlen erlaubt.

Die Abbildung 6.9 zeigt die Abhängigkeit der Schalenpopulation N_S von der Abschirmung als Funktion der Clustergröße $N^{2/3}$ im Vergleich der MD-Simulation mit dem Experiment [6]. Die Ergebnisse [6] wurden in den MC-Simulationen bestätigt. Alle Systeme, Coulomb-Wechselwirkung, Yukawa-Wechselwirkung und Experiment, zeigen eine nahezu lineare Abhängigkeit der Schalenbesetzung von der Systemgröße $N^{2/3}$. In allen Fällen ist die Besetzungszahl der äußersten Schale N_1 im Experiment (schwarze Kreise) niedriger als im Fall reiner Coulomb-Wechselwirkung ($\kappa = 0.0$, durchgezogene Linie). Diese Ergebnis läßt sich durch eine Yukawa-Wechselwirkung (gestrichelte Linien) in der MD-Simulation reproduzieren. Es zeigt sich, daß sich die Teilchen bei einer Erhöhung der Abschirmung κ von der äußersten Schale auf innere Schalen umverteilen. Diese Tendenz reflektiert die Tatsache, daß die höhere, innere Schalenbesetzung energetisch günstiger ist als auf der äußeren Schale, da dort das Confinement der Falle die potentielle Energie dominiert.

Bei genauerer Betrachtung ist zu erkennen, daß die größte absolute Änderung der Schalenbesetzung auf der äußersten Schale erfolgt und damit am besten für einen detaillierten Vergleich der experimentellen Beobachtungen mit den Simulationsergebnissen geeignet ist. Aus dem besten möglichen Fit der Simulations-

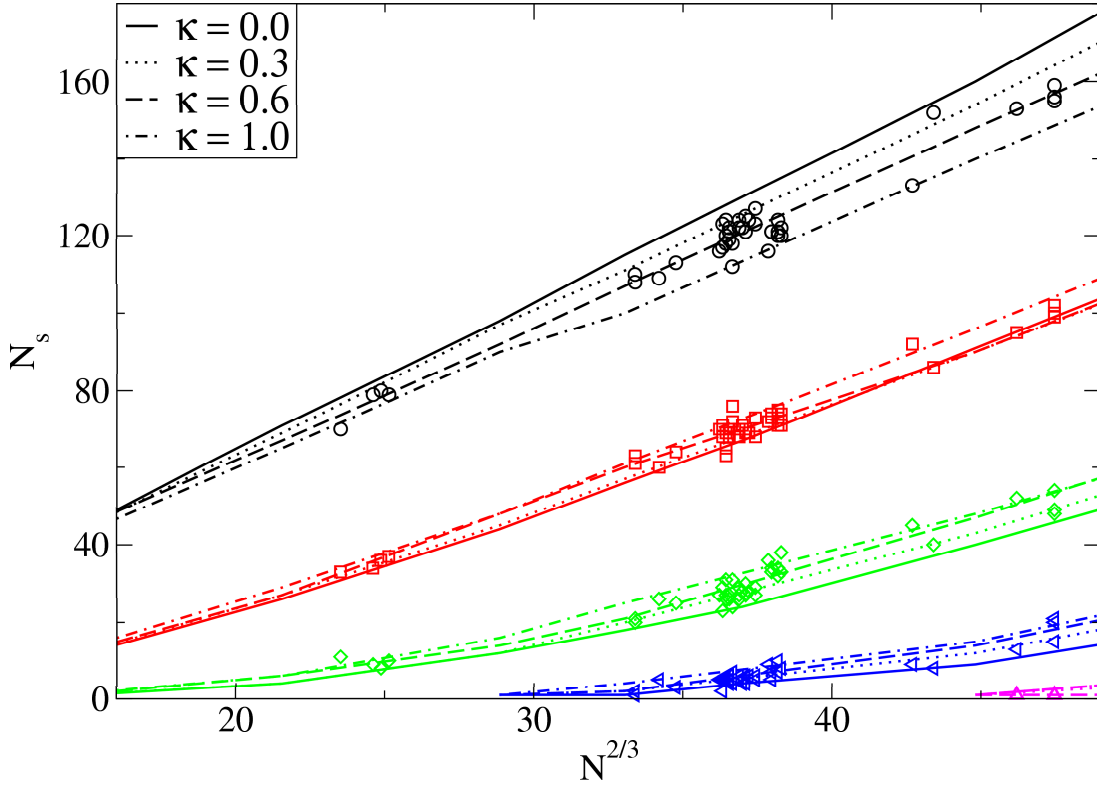


Abbildung 6.9: Abhängigkeit der Schalenpopulation N_s von der Abschirmung κ als Funktion der Systemgröße $N^{2/3}$ [6]. Die MD-Simulationen (Linien) zeigen, daß sich die Teilchen mit steigender Abschirmung nach innen umverteilen. Die Symbole sind die Schalenbesetzungszahlen von 43 Coulomb balls im Experiment, aufgenommen zu gleichen experimentellen Bedingungen.

daten an die 43 untersuchten Coulomb balls ergibt sich eine Abschirmung von $\kappa^{Exp.} = 0.62 \pm 0.23$. Eine unabhängige Analyse der anderen Schalen bestätigt diesen Wert (z.B. $\kappa^{Exp.} = 0.58 \pm 0.43$ auf der zweiten Schale von außen). Durch die Bestimmung des mittleren Teilchenabstandes nächster Nachbarn durch das erste Maximum der Paarverteilungsfunktion kann damit die mittlere Debyelänge $\frac{\lambda_D}{a} = 1.54 \pm 0.7$ bestimmt werden.

Im Bereich hoher Kopplung können die Schalenpopulationen im Vergleich mit experimentellen Daten zur Bestimmung der Abschirmung κ bzw. der Debyelänge λ_D eingesetzt werden.

6.2 Staubtemperatur

Für die Bestimmung der Staubtemperatur im Experiment aus Vergleichen mit den MC-Simulationen werden hier die Breiten der Schalen der Coulomb balls

benutzt. In dem Experiment stehen aus Videoaufnahmen die Positionen der Teilchen zur Verfügung.

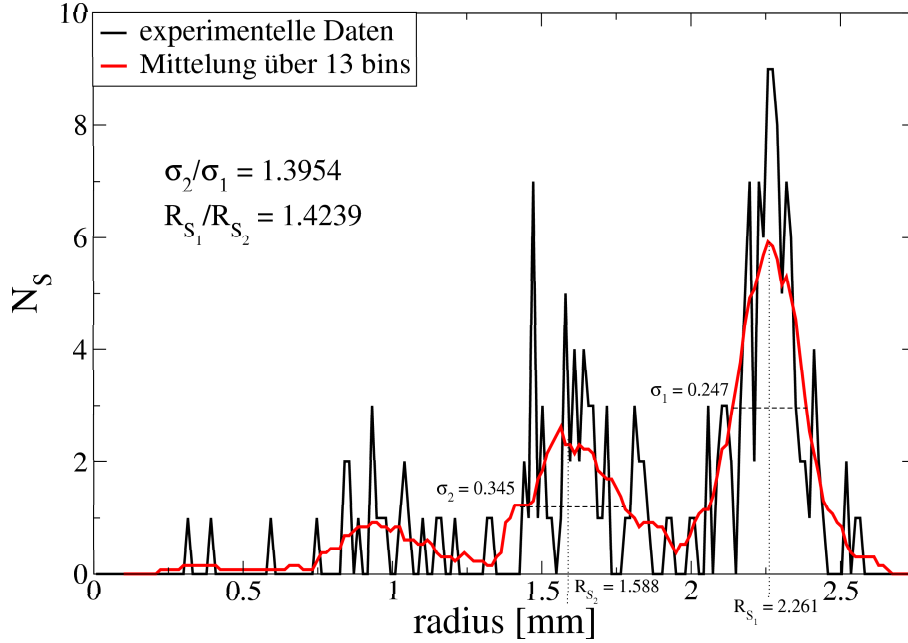


Abbildung 6.10: Radialverteilung der Staubteilchen im Experiment für einen Coulomb ball mit $N = 190$ Teilchen. Die rote Linie ergibt sich aus einer Mittelung über 13 *bins* des Histogramms, wobei 1 bin einer Breite von $\delta_r = 0,033\text{mm}$ entspricht. Die Unsicherheit in den Koordinaten der Staubteilchen beträgt etwa 0.2mm [3].

Die Positionen der Teilchen werden dazu genutzt, um die radiale Verteilung der Staubteilchen zu bestimmen. Abbildung 6.10 zeigt das Histogramm, das aus den Positionsdaten der Partikel im Experiment gewonnen wurde (schwarz) und eine Mittelung über 13 bins zur Glättung der Radialverteilung. Die Unsicherheit der Partikelpositionen ist im Vergleich mit der Systemgröße von einigen *mm* verhältnismäßig groß, so daß auch bei der Radialverteilung eine große Unsicherheit besteht. Für den Vergleich der MC-Simulation zu dem Experiment wurde hier nur ein Datensatz aus dem Experiment für den Coulomb ball mit $N = 190$ Teilchen genutzt, um das Verfahren exemplarisch darzustellen. Diese Analyse kann durch mehr experimentelle Datensätze deutlich verbessert werden.

Eine Möglichkeit, die MC-Simulationen mit den experimentellen Daten zu vergleichen, ist die Untersuchung der Radialverteilungen. Abbildung 6.11 zeigt dabei das gemittelte, experimentell aufgenommene Histogramm (schwarze Linie) und zwei Radialverteilungen aus MC-Simulationen im Vergleich. Die grüne Linie ist die Radialverteilung dieses Clusters in der kristallinen Phase bei $\Gamma_C = 1800$, wohingegen die Radialverteilung bei $\Gamma_C = 500$ bzw. $k_B T = 0.02 \cdot E_0$ (vgl. Schmelzpunkt der

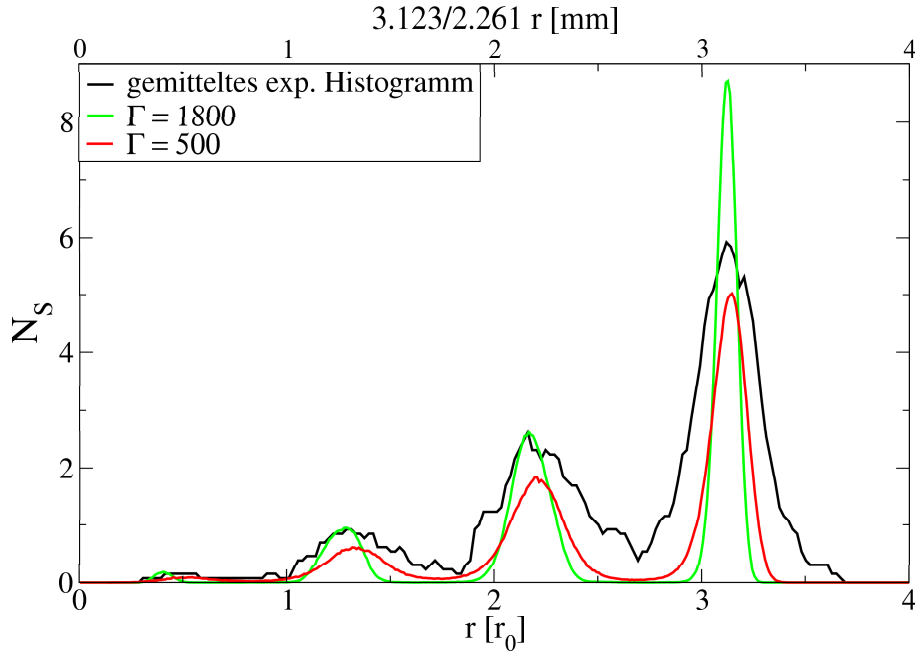


Abbildung 6.11: Radialverteilungen der Teilchen in der MC-Simulation (rote und grüne Linie) im Vergleich mit dem Experiment (schwarze Linie). Eine Übereinstimmung mit dem Auge kann nicht erzielt werden. Die Höhen der Peaks der ersten und zweiten Schale (von außen), als auch die Breiten, sind nicht gleichzeitig in Übereinstimmung zu bringen. Generell gibt es im Experiment breitere Schalen.

Radialfluktuationen u_{rad} von $k_B T = 0.015 \cdot E_0$ in der flüssigen Phase aufgenommen wurde. Die Höhe der Peaks bei der Radialverteilung zu $\Gamma = 1800$ entspricht der im Experiment aufgenommenen besser, während die Form der experimentellen Verteilung durch die Radialverteilung bei $\Gamma = 500$ besser wiedergegeben wird. Eine Übereinstimmung kann nicht erzielt werden.

Die Analyse der Schalenbreiten, in der dimensionslosen Größe

$$2\sigma_i = \frac{2 \cdot \text{Breite der Schale } i}{R_i},$$

führt zu dem Vergleich in Abbildung 6.12. Die gestrichelten Linien entsprechen den Breiten der ersten (äußersten) und zweite Schale im Experiment, ohne daß hier der Fehler von $\Delta \approx 0.08$ eingezeichnet wurde. Die Schnittpunkte der durchgezogenen Linien mit den gestrichelten Linien geben die Temperaturen wieder, bei denen die Breiten der Schalen in der MC-Simulation mit den Breiten im Experiment übereinstimmen. Im Idealfall stimmen die Schnittpunkte überein und die Staubtemperatur im Experiment ist bestimmt. Hier bleibt festzuhalten, daß - ohne Berücksichtigung der großen Ungenauigkeit der Partikelpositionen im Experiment - die reziproke Staubtemperatur $300 \leq \Gamma_{MC}^{Exp.} \leq 500$ ist. Untersuchungen

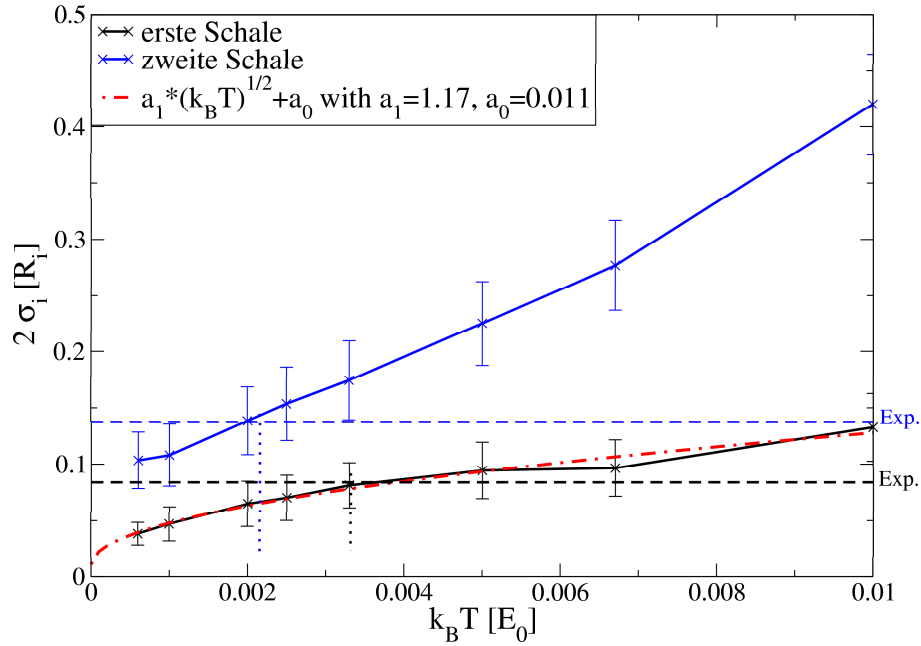


Abbildung 6.12: Vergleich der vollen Breite $2\sigma_i$ der Schale i zur halben Höhe des Maximums (FWHM) in Einheiten des Radius der i .ten Schale bei unterschiedlichen Temperaturen von der MC-Simulation mit dem Experiment. Die horizontalen, gestrichelten Linien geben die experimentell bestimmten Breiten der Schalen ohne Fehlergrenzen an. Die schwarze Linie beschreibt die FWHM der ersten (äußersten) Schale; man erkennt hier gut die Abhängigkeit in der Temperatur (rote Linie). Die blaue Linie entspricht der FWHM der zweiten Schale. Die Fehlerbalken geben den Fehler der Daten aus den MC-Simulationen an. Idealerweise sollten die Schnittpunkte auf der Temperaturachse übereinstimmen. Daraus ergibt sich ein Bereich für den möglichen, experimentellen Kopplungsparameter von $300 < \Gamma^{Exp.} < 500$. Berücksichtigt man die Fehler in den Koordinaten der Teilchen bei der Bestimmung der experimentellen Breite der Schalen, lassen sich ohne weitere Daten desselben Coulomb balls zu gleichen experimentellen Bedingungen noch keine zuverlässigen Voraussagen über den möglichen Kopplungsparameter angeben. Der Fehler Δ in den experimentellen Schalenbreiten liegt hier bei $0.05 < \Delta < 0.09$, so daß nahezu beliebige Temperaturen möglich sind.

am Experiment ergeben einen Kopplungsparameter von $\Gamma^{Exp.} \approx 1800$ [3].

Kapitel 7

Zusammenfassung

Im Rahmen dieser Arbeit wurden umfangreiche Untersuchungen des Modells 1.2 vorgenommen. Das Modell wurde im Rahmen eines Monte-Carlo-Programms in der Programmiersprache Fortran 90 implementiert und dokumentiert. Dabei wurden die Grundzustände, die Energien, Radien und Schalenpopulationen der Molekulardynamik-Simulationen für Coulomb balls reproduziert und mit Ergebnissen aus vorhandenen Schalenmodellen verglichen.

Für den Fall reiner Coulomb-Wechselwirkung konnte insbesondere das verbesserte Schalenmodell (2.13) die Ergebnisse in der Tendenz gut wiedergeben, wobei es immer noch Abweichungen sowohl in den Grundzustandsenergien als auch in den Konfigurationen gibt. Der Vergleich mit dem Experiment von Arp et al. [3] legte die Vermutung einer abgeschirmten Coulomb-Wechselwirkung und eines externen Confinementpotentials, das unabhängig von der Abschirmung ist, nahe. Die Rechtfertigung dieser Vermutung wurde sowohl durch Computersimulationen als auch durch experimentelle Untersuchungen [2] gegeben.

Einen Schwerpunkt dieser Arbeit bildete die Untersuchung der thermodynamischen Prozesse in Coulomb und Yukawa balls. Dafür wurden hauptsächlich die relativen Abstandsfluktuationen (4.4) analysiert. Zunächst wurden diese Fluktuationen analytisch aus einem Zwei-Teilchen-Modell hergeleitet. Dabei wurde insbesondere auf die Abhängigkeit der Abschirmung κ eingegangen. Ergebnis dieser theoretischen Untersuchungen war, daß die Erhöhung der Abschirmung der Wechselwirkung zur Destabilisierung des Coulomb balls führt. Die Abhängigkeit des im Zwei-Teilchen-Modell entwickelten Kopplungsparameters von der Abschirmung wurde mit empirischen Daten verglichen. Hier besteht noch die Möglichkeit, Verbesserungen durch eine anharmonische Entwicklung des lokalen Ein-Teilchen-Potentials (4.8), in dem sich ein Teilchen in dem System befindet, zu erreichen.

Im Anschluß wurden die Schmelzpunkte der mesoskopischen Cluster intensiv in den MC-Simulationen untersucht. Die Grenzen, relative Abstandsfluktuationen für die Bestimmung der Schmelzpunkte heranzuziehen, wurden aufgezeigt. Bei Systemen mit Teilchenzahlen $N \geq 30$ überlagern sich die Schmelzprozes-

se in diesen Fluktuationen, die inter-Schalen-Prozesse nicht von intra-Schalen-Prozessen unterscheiden, so daß die Bestimmung des Schmelzpunktes durch einen sprunghaften Anstieg der Fluktuationen nicht gewährleistet ist. Die Symmetrie der Konfiguration spielt für die Bestimmung der Schmelzpunkte in sehr kleinen Clustern mit $N \leq 20$ Teilchen die entscheidende Rolle. Systeme dieser Größe zeigen eine starke Abhängigkeit in ihren Konfigurationen von der Abschirmung. Die Erhöhung der Abschirmung führt allgemein dazu, daß Teilchen von der äußersten Schale auf innere umverteilt werden und bewirkt so eine Konfigurationsänderung. Diese bedingt eine Änderung der Symmetrie des Systems und damit eine Änderung in den Schmelzpunkten. Dieser Effekt überlagert die theoretisch entwickelte Abhängigkeit der Schmelzpunkte von der Abschirmung, so daß ein Vergleich unmöglich wird.

Es werden weitere Möglichkeiten vorgestellt, insbesondere radiales Schmelzen zu untersuchen. Sowohl die radialen Potentialbarrieren als auch radiale Fluktuationen werden mit den relativen Abstandsfluktuationen verglichen.

In Zusammenarbeit mit MD-Simulationen wurden Analysen der Schalenbesetzungszahlen in Abhängigkeit von der Abschirmung in den Computersimulationen betrieben. Der Vergleich der Grundzustandskonfigurationen des Clusters mit $N = 190$ Teilchen zu unterschiedlichen Abschirmungen mit der im Experiment beobachteten Konfiguration ergab mit $\kappa \approx 0.6$ ein erstes Ergebnis für den Plasmaparameter $\lambda_D = \frac{\kappa}{a}$, wobei a der mittlere Teilchenabstand ist. Dabei wurde die Abschirmung als temperaturunabhängig angenommen. Die MC-Simulation der mittleren Schalenpopulationen lieferte die Rechtfertigung dieser Annahme. Der Einfluß der Temperatur auf die mittleren Besetzungszahlen in dem im Experiment vermuteten Temperaturbereich war bis zu einem Kopplungsparameter von $\Gamma = 100$ zu vernachlässigen. Dieses Verfahren eignete sich gut zur Bestimmung der experimentellen Abschirmung und wurde genutzt [6], um die im Experiment vorhandene Abschirmung der Coulomb-Wechselwirkung auf $\kappa = 0.62 \pm 0.23$ zu bestimmen.

Diese Arbeit gibt auch einen Überblick über die Möglichkeit mit MC-Simulationen und Vergleichen mit den experimentellen Daten, die Staubtemperatur zu bestimmen. Die Experimentatoren bestimmten den möglichen Kopplungsparameters zu $\Gamma^{Exp.} \approx 1800$. Die Untersuchung der Schalenbreiten in Abhängigkeit der Temperatur der MC-Simulation wurde exemplarisch an dem Coulomb ball mit $N = 190$ Teilchen durchgeführt. Hier ergab der Vergleich mit dem Experiment eine Kopplung von $300 \leq \Gamma^{Sim.} \leq 500$. Eine umfangreichere Analyse mehrerer Cluster zu gleichen Bedingungen verspricht hier zukünftig eine Verbesserung dieses neuen Diagnostikverfahrens, die Staubtemperatur zu bestimmen.

Anhang A

Anhang

A.1 Metropolis Algorithmus

Im verwendeten Monte-Carlo Verfahren wird die Markov-Kette mit Hilfe des Metropolis-Algorithmus erzeugt. Die Funktion, die einen Monte-Carlo Schritt ausführt, ist in A.1 als Ausschnitt aus dem Simulationsprogramm angegeben. Die aktuelle Schrittweite d legt dabei die maximale Versetzung je Dimension fest. Die tatsächliche Versetzung findet innerhalb dieser Grenzen statt und wird zufällig ausgewählt. Nach der Versetzung des Teilchens wird die zu „testende“, neue Gesamtenergie des Systems berechnet und mit der vorherigen Energie verglichen. Ist die neue Gesamtenergie kleiner, ist eine energetisch günstigere Position gefunden, und diese wird angenommen. Ist die zu testende Energie größer, wird die neue Position mit der Wahrscheinlichkeit, die durch $e^{-\Delta E/k_B T}$ gegeben ist, angenommen. Die Markov-Kette wird also durch ein Importance-Sampling erzeugt.

Listing A.1: Metropolis Algorithmus

<pre> 1 subroutine mc_move(d) 2 double precision :: d 3 integer :: index 4 integer :: l 5 double precision(1:dim) :: dl 6 double precision :: diff 7 double precision :: h 8 double precision :: p_acc 9 index = int(Npart*GetRand())+1 10 attempts = attempts+1 11 h = 0.0d0 12 do l=1,dim 13 dl(l) = (GetRand()-0.5d0)*2*d 14 ptrial(l) = pi(index,l)+dl(l) 15 h = h+ptrial(l)**2 16 enddo 17 ri_trial = dsqrt(h) 18 call trial_energy(index) 19 diff = -(Etot_trial-Etot)*beta 20 if (diff.gt.0.0d0) then 21 p_acc = 1.0d0 22 else 23 if (diff.lt.(-12.0d0)) then 24 p_acc = 0.0d0 25 else 26 p_acc = exp(diff) 27 endif 28 endif 29 if ((GetRand()).lt.(p_acc)) then 30 accepts = accepts+1 31 ri(index) = ri_trial 32 call accepted(index) 33 endif 34 end subroutine mc_move </pre>	<pre> 1 Funktion, die einen MC- 2 Schritt ausführt 3 · Eingabeparameter: 4 <i>d</i> - aktuelle Schrittweite 5 6 7 8 9 · zufällige Auswahl eines 10 Teilchens und Erhöhung 11 der Anzahl der Versuche 12 · für jede Dimension, 13 zufällige Berechnung einer 14 Versetzung innerhalb der 15 Schrittweite <i>d</i> 16 17 · radiale Test-Position und 18 -Energie und deren Diffe- 19 renz zur „alten“ Energie 20 · falls die Testenergie 21 niedriger als die alte 22 Energie ist, wird die An- 23 nahmewahrscheinlichkeit 24 auf 1.0 gesetzt, sonst auf 25 $e^{-\Delta E/k_B T}$ 26 27 28 29 · falls die Zufallszahl 30 kleiner der Annahme- 31 wahrscheinlichkeit für den 32 MC-Schritt ist, folgt die 33 Annahme des Schrittes, 34 sonst die Ablehnung </pre>
----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------	---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------

A.2 Schrittweitenregelung

Die Anpassung der Schrittweite ist für eine effektive MC-Simulation wichtig. Die Funktion A.2 enthält zwei Verfahren, mit dem die Schrittweite angepasst werden kann, die in Abhängigkeit des Parameters v gewählt werden können. Beide Verfahren sind abhängig vom Prozentsatz der angenommenen MC-Schritte seit dem letzten Aufruf dieser Funktion. Der Vergleich in Abbildung 3.2 zeigt, daß die Anpassung durch die Zeilen 15 – 19 schneller zu einer Annahmewahrscheinlichkeit von 50% der MC-Schritte führt.

Listing A.2: Schrittweitanpassung

<pre> 1 subroutine adjust(d,v) 2 double precision :: d 3 integer :: old_att 4 integer :: old_acc 5 double precision :: p 6 integer :: v 7 save old_att, old_acc 8 if (att.eq.0) then 9 old_att = 0 10 old_acc = 0 11 else 12 p = (acc-old_acc)/(att-old_att) 13 if (v.eq.1) then 14 d = d*(p+0.50d0) 15 else 16 d = d*p*2.0d0 17 if (p.lt.0.25d0) d = d*0.5d0 18 if (p.gt.0.75d0) d = d*1.5d0 19 endif 20 old_att = att 21 old_acc = acc 22 endif 23 end subroutine adjust </pre>	<p>1 Funktion, die die Schritt-</p> <p>2 weite d in Abhängigkeit</p> <p>3 des Verfahrens v anpasst</p> <p>4 · gesamte, bisherige Versu-</p> <p>5 che und bisherige, an-</p> <p>6 genommene Versuche werden</p> <p>7 gespeichert</p> <p>8 · Initialisierung bei Start</p> <p>9 der Simulation</p> <p>10</p> <p>11 · Berechnung des Pro-</p> <p>12 zentsatzes p angenomme-</p> <p>13 ner MC-Schritte und</p> <p>14 abhängig vom Verfahren</p> <p>15 die neue angepasste</p> <p>16 Schrittweite d (vgl. Abbil-</p> <p>17 dung 3.2)</p> <p>18 · Verhinderung einer zu</p> <p>19 schnellen Anpassung</p> <p>20 durch Begrenzung</p> <p>21</p> <p>22</p> <p>23</p>
--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------	------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------

A.3 Monte-Carlo Simulation

Die Monte-Carlo Simulation eines Systems mit n Teilchen bei einer konstanten Temperatur t wird durch die Funktion „calc state“ durchgeführt. Sie setzt zunächst die maximale Anfangsschrittweite willkürlich fest und bringt das System ins thermodynamische Gleichgewicht zur Temperatur t . Dadurch ist die mittlere Energie des Systems bestimmt und es wurde eine Schrittweite berechnet, die ungefähr die Hälfte aller MC-Schritte annimmt. Dann werden die statistischen Größen initialisiert und die MC-Simulation beginnt. Während der MC-Simulation wird die Schrittweite weiterhin optimiert und es werden durch die Funktion „acquiredata“ die statistischen Größen aufgenommen. Dabei wird zu jedem MC-Schritt die Normierungskonstante c inkrementiert. Die Berechnung dieser Größen erfolgt durch „normalize data“ (siehe Anhang A.4).

Listing A.3: Auszug aus dem MC-Simulationsprogramm

<pre> 1 subroutine calc_state (n,mc,t) 2 integer :: n 3 integer :: mc 4 double precision :: t 5 integer :: i , j , ncycle 6 double precision :: dd 7 integer :: c 8 ncycle = n 9 dd = 1.0d0 10 call adjust_temp(-Temp+t) 11 call equilibrate(n,t,dd) 12 call initialize_data(c) 13 do i=1,mc 14 do j=1,ncycle 15 call mc_move(dd) 16 enddo 17 call adjust(dd) 18 call aquiredata(n) 19 c = c+1 20 enddo 21 call normalize_data(c) 22 end subroutine calc_state </pre>	<pre> 1 Funktion, die den Zustand 2 Systems mit n Teilchen bei 3 einer Temperatur t über mc 4 MC-Schritte simuliert 5 6 7 8 • Anfangsschrittweite dd 9 und Temperatur t 10 • Bestimmen des thermody- 11 namischen Gleichgewichts 12 • Initialisierung $c = 0$ 13 • Start der MC-Simulation 14 15 16 17 • Anpassung der Schrittweite 18 • Aufnahme der Daten 19 • Inkrementierung der Nor- 20 mierungskonstante 21 • Normierung der Daten 22 </pre>
----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------	--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------

A.4 Fluktuationsberechnungen

Während der MC-Simulation werden statistische Größen, wie in Anhang A.3 beschrieben, berechnet. Es werden die arithmetischen Mittel der Größen $\langle r_i \rangle$, $\langle r_i^2 \rangle$, $\langle r_{ij} \rangle$, $\langle r_{ij}^2 \rangle$ und die Verteilungsfunktionen der Paare $g(r)$ und radialen Positionen der Teilchen $p_r(r)$ berechnet. Aus den Mittelwerten erhält man dann die radialen Fluktuationen u_{rad} nach (4.2) und die relativen Abstandsfluktuationen u_r nach (4.4).

Listing A.4: Fluktuationsberechnungen

1	subroutine aquiredata(n)	1 Funktion, die statistische
2	integer :: n	2 Größen eines Systems mit
3	integer :: i , j , ind	3 n Teilchen berechnet
4	do i=1,n	4
5	mr(i) = mr(i)+r(i)	5 · $\sum_{i=1}^N r_i$
6	mr2(i) = mr2(i)+r(i)**2	6 · $\sum_{i=1}^N r_i^2$
7	do j=i+1,n	7
8	mij(i , j)=mij(i , j)+rij(i , j)	8 · $\sum_{i=1}^N \sum_{j=i+1}^N r_{ij}$
9	mi2(i , j)=mi2(i , j)+rij(i , j)**2	9 · $\sum_{i=1}^N \sum_{j=i+1}^N r_{ij}^2$
10	ind = int(rij(i , j)/binw)+1	10 · Bestimmung des Paar-
11	gr2(ind)=gr2(ind)+1	11 verteilungshistogramms
12	enddo	12
13	ind = int(r(i)/binw)+1	13 · Bestimmung des radia-
14	pr(ind) = pr(ind)+1	14 len Histogramms
15	enddo	15
16	end subroutine aquiredata	16
17		17
18	subroutine normalize_data(c,n)	18
19	integer :: c	19
20	integer :: n	20
21	integer :: i , j	21
22	do i=1,n	22
23	mr(i) = mr(i)/dble(c)	23 · $\langle r_i \rangle = \frac{1}{c} \sum_{i=1}^N r_i$
24	mr2(i) = mr2(i)/dble(c)	24 · $\langle r_i^2 \rangle = \frac{1}{c} \sum_{i=1}^N r_i^2$
25	do j=i+1,n	25
26	mij(i , j) = mij(i , j)/dble(c)	26 · $\langle r_{ij} \rangle = \frac{1}{c} \sum_{i=1}^N \sum_{j=i+1}^N r_{ij}$
27	mi2(i , j) = mi2(i , j)/dble(c)	27 · $\langle r_{ij}^2 \rangle = \frac{1}{c} \sum_{i=1}^N \sum_{j=i+1}^N r_{ij}^2$
28	enddo	28
29	enddo	29
30	do i=1,histl	30
31	gr2(i)=2*gr2(i)/dble(c*(c-1))	31 · Normierung der Paar-
32	pr(i) =pr(i)/dble(c)	32 und Radialverteilung
33	enddo	33
34	do i=1,n	34
35	urad=urad+dsqrt(mr2(i)/mr(i)**2-1)	35 · Berechnung der radialen
36	do j=i+1,n	36 Fluktuationen
37	ur=ur+dsqrt(mi2(i , j)/mij(i , j)**2-1)	37 · Berechnung der relativen
38	enddo	38 Abstandsfluktuationen
39	enddo	39
40	urad = urad/dble(n)	40 · Normierung der Fluk-
41	ur = 2*ur/dble(n*(n-1))	41 tuationen auf die Anzahl
42	end subroutine normalize_data	42 der Teilchen und Paare

Danksagung

An dieser Stelle möchte ich allen danken, die mich bei der Erstellung dieser Arbeit unterstützt haben. Mein erster und ganz besonderer Dank geht an Prof. Dr. Michael Bonitz, der mir dieses interessante Thema überließ und es exzellent betreute. Entscheidend für die Qualität der Arbeit waren seine konstruktive Kritik und die wertvollen methodischen Hinweise in jeder Phase der Arbeit.

Für die gute und effektive Zusammenarbeit bedanke ich mich auch bei meinen Arbeitskollegen, Dr. Alexei Filinov, Dr. Volodymyr Golubnychiy und Patrick Ludwig, die mir mit sachkundigen Anregungen und nicht zuletzt auch mit freundlicher Unterstützung im akademischen Alltag beistanden. Für die Anregungen aus dem Bereich der Experimentalphysik und den Kooperationswillen bin ich Oliver Arp und Dr. Dietmar Block dankbar. Mein Dank geht auch an die hier nicht erwähnten Mitarbeiter und Kollegen am Institut und an der Fakultät.

An Imke Goertz geht mein herzlichster Dank für ihren liebevollen Beistand, die vielfachen Unterstützungsleistungen, insbesondere im Endspurt, wertvollen Ratschläge und ihr Korrekturlesen dieser Arbeit. Auch sei all meinen Freunden, die mich verständnisvoll in der Zeit der Anfertigung dieser Arbeit begleitet und abgelenkt haben, gedankt.

Mein abschließender Dank geht an meine Eltern, Ilse und Rüdiger Baumgartner, ohne deren finanzielle und moralische Unterstützung ich dieses Studium nicht beenden hätte können. Sie haben mich zu dem gemacht, was ich heute bin.

Erklärung

Hiermit bestätige ich, dass ich die vorliegende Diplomarbeit selbstständig verfasst und keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel verwendet habe. Ich versichere, dass diese Arbeit noch nicht zur Erlangung eines Diplomgrades an anderer Stelle vorgelegen hat.

Kiel, den

(Henning Baumgartner)

Abbildungsverzeichnis

1.1	Aufbau des Experiments [2,3].	4
2.1	Temperatur des Wärmebades während der MC-Simulation bei der Berechnung eines Grundzustandes.	15
2.2	Ansicht eines Coulomb balls mit $N = 11$ Teilchen.	16
2.3	Ansicht eines Coulomb balls mit $N = 12$ Teilchen.	17
3.1	Änderung der maximalen Schrittweite in Abhängigkeit der Annahmewahrscheinlichkeit der MC-Schritte.	23
3.2	Annahmewahrscheinlichkeit der MC-Schritte in Abhängigkeit des verwendeten Verfahrens für die Anpassung der Schrittweite.	24
4.1	Relative Abstandsfluktuationen für ein System mit $N = 12$ Teilchen.	26
4.2	Experimentell aufgenommene Teilchentrajektorien für einen Coulomb ball mit $N > 6000$ Teilchen.	27
4.3	Lokales Teilchenpotential für ein System mit $N = 2$ Teilchen.	29
4.4	Yukawa-Gleichgewichtsabstand in Einheiten des Coulomb-Gleichgewichtsabstands in Anhängigkeit von der Abschirmung und der Näherung.	30
4.5	Frequenz des lokalen Teilchenpotentials in Abhängigkeit von der Abschirmung unter Verwendung der Näherung (4.17).	35
4.6	Relative Abstandsfluktuationen für ein System mit $N = 2$ Teilchen bei einer Abschirmung von $\kappa = 1.0$ im Vergleich von Theorie und MC-Simulation.	36
4.7	Relative Abstandsfluktuationen in Abhängigkeit von der Abschirmung unter Verwendung der Näherung (4.17).	37
4.8	Paarverteilungsfunktion eines Systems mit $N = 100$ Teilchen in der kristallinen und flüssigen Phase.	38
4.9	Mittlerer Abstand zweier, benachbarter Teilchen und benachbarter Schalen in Abhängigkeit der Teilchenanzahl.	40
4.10	Vergleich des universellen Kopplungsparameters in Beobachtung [35] und Theorie.	41
5.1	Relative Abstandsfluktuationen für ein System mit $N = 13$ Teilchen.	44

5.2	Relative Abstandsfluktuationen für ein System mit $N = 57$ Teilchen.	45
5.3	Radiale Verteilungsfunktion für ein System mit $N = 57$ Teilchen vor dem radialen Schmelzpunkt.	46
5.4	Radiale Verteilungsfunktion für ein System mit $N = 57$ Teilchen nach dem radialen Schmelzpunkt.	46
5.5	Radiale Verteilungsfunktion für ein System mit $N = 13$ Teilchen in Grundzustand und angeregtem Zustand.	46
5.6	Relative Abstandsfluktuationen für ein System mit $N = 190$ Teilchen.	47
5.7	Relative Abstandsfluktuationen im Vergleich mit radialen Fluktuationen bei einem System mit $N = 57$ Teilchen.	48
5.8	Schmelzpunkte mesoskopischer Cluster.	49
5.9	Relative Abstandsfluktuationen für ein System mit $N = 12$ Teilchen bei niedrigen Abschirmungen.	50
5.10	Relative Abstandsfluktuationen für ein System mit $N = 12$ Teilchen bei hohen Abschirmungen.	50
5.11	Radiale Potentialbarriere im System mit $N = 12$ Teilchen.	51
6.1	Radialverteilung für einen Coulomb ball mit $N = 190$ Teilchen in Zylinderkoordinaten [6].	54
6.2	Schalenradien in Abhängigkeit von der Anzahl der Teilchen und der Abschirmung.	55
6.3	Schalenbesetzungen in Abhängigkeit der Anzahl der Teilchen und der Temperatur.	56
6.4	Radialverteilung für einen Coulomb ball mit $N = 190$ Teilchen vor dem radialen Schmelzpunkt.	57
6.5	Radialverteilung für einen Coulomb ball mit $N = 190$ Teilchen nach dem radialen Schmelzpunkt.	57
6.6	Schalenfluktuationen für einen Coulomb ball mit $N = 190$ Teilchen.	58
6.7	Radiale Potentialbarrieren für einen Coulomb ball mit $N = 190$ Teilchen und einer Abschirmung von $\kappa = 0.67$	59
6.8	Radialfluktuationen für einen Coulomb ball mit $N = 190$ Teilchen.	60
6.9	Schalenbesetzungen in Abhängigkeit von der Anzahl der Teilchen und der Abschirmung.	61
6.10	Radialverteilung der Staubteilchen im Experiment bei einem Coulomb ball mit $N = 190$ Teilchen [3].	62
6.11	Vergleich der Radialverteilungen aus dem Experiment [3] und den MC-Simulationen.	63
6.12	Vergleich der Schalenbreiten im Experiment [3] und den MC-Simulationen.	64

Tabellenverzeichnis

2.1	Auszug berechneter Grundzustandskonfigurationen und -energien durch MD-Simulationen von Avilov und Hasse [17], Ludwig et al. [24] und MC-Simulationen.	14
4.1	Relativer Fehler der Näherung (4.17) für den Yukawa-Gleichgewichtsabstand zu den MC-Simulationsdaten.	31
6.1	Schalenbesetzung in Abhängigkeit von der Abschirmung bei einem Coulomb ball mit $N = 190$ Teilchen.	54

Literaturverzeichnis

- [1] O. Arp, D. Block, M. Bonitz, H. Fehske, V. Golubnychiy, S. Kosse, P. Ludwig, A. Melzer, and A. Piel. 3d Coulomb Balls: Experiment and Simulation. *Journal of Physics: Conference Series*, 11:234, 2005.
- [2] O. Arp, D. Block, M. Klindworth, and A. Piel. Confinement of Coulomb balls. *Physics of Plasmas*, 12(122102), 2005.
- [3] O. Arp, D. Block, A. Piel, and A. Melzer. Dust Coulomb Balls: Three-Dimensional Plasma Crystals. *Physical Review Letters*, 93(16):165004, 2004.
- [4] H. Baumgartner and M. Bonitz. *Publikation in Vorbereitung*.
- [5] G. F. Bertsch, M. Bonitz, A. Filiov, V. S. Filinov, D. Semkat, and H. Ruhl. *Introduction to Computational Methods in Many-Body Physics*. Rinton Press, Princeton, 2006.
- [6] M. Bonitz, D. Block, O. Arp, V. Golobnychiy, H. Baumgartner, P. Ludwig, A. Filinov, and A. Piel. Structural properties of screened Coulomb balls. *accepted for publication in Physical Review Letters*, 2006.
- [7] I. N. Bronstein, K. A. Semendjajew, G. Musiol, and H. Mühlig. *Taschenbuch der Mathematik*. Verlag Harri Deutsch, 1999.
- [8] R. Casdorff and R. Blatt. Ordered structures and statistical properties of ion clouds stored in a Paul trap. *Applied Physics B: Lasers and Optics*, 45:175, 1988.
- [9] Z. Chen, M. Y. Yu, and H. Luo. Molecular Dynamics Simulation of Dust Clusters in Plasmas. *Physica Scripta*, 71:638–643, 2005.
- [10] H. DeWitt, W. Slattery, D. Baiko, and D. Yakovlev. Harmonic Lattice Theory of Coulomb Solids and Comparison with Monte Carlo Simulations. *Contributions to Plasma Physics*, 41:251–254, 2001.

- [11] Wigner E. On the Interaction of Electrons in Metals. *Physical Review*, 46:1002, 1934.
- [12] M. Drewsen et al. Large Ion Crystals in a Linear Paul Trap. *Physical Review Letters*, 81:2878, 1998.
- [13] R. P. Feynman, R. B. Leighton, and M. Sands. *The Feynman Lectures on Physics*, volume 1-3. Addison-Wesley Longman, Amsterdam, 1964.
- [14] A. V. Filinov, M. Bonitz, and Yu. E. Lozovik. Wigner Crystallization in Mesoscopic 2d Electron Systems. *Physical Review Letters*, 86(17):3851, 2001.
- [15] V. Golubnychiy, H. Baumgartner, M. Bonitz, A. Filinov, and H. Fehske. Screened Coulomb balls - structural properties and melting behaviour. *accepted for publication in Journal of Physics A: Math. General*, 2006.
- [16] W. Greiner. *Greiner - Theoretische Physik, Bd. 4: Quantenmechanik: Einführung*, volume IV. Verlag Harri Deutsch, 2005.
- [17] R. W. Hasse and V. V. Avilov. Structure and Madelung energy of spherical Coulomb crystals. *Physical Review A*, 44(7):4506, 1991.
- [18] Y. Hayashi. Structure of a Three-Dimensional Coulomb Crystal in a Fine-Particle Plasma. *Physical Review Letters*, 83(23):4764, 1999.
- [19] S. Ichimaru. Strongly coupled Plasmas: high density classical plasmas and degenerate electron liquids. *Review of Modern Physics*, 54:1017–1059, 1982.
- [20] T. C. Killian. Condensed-matter physics: Plasmas put in order. *Nature*, 429:815, 2004.
- [21] W. D. Kraeft and M. Bonitz. Thermodynamics of a correlated confined Plasma. I. Macroscopic Systems. *Journal of Physics: Conference Series*, 2006.
- [22] W. D. Kraeft and M. Bonitz. Thermodynamics of a correlated confined Plasma. II. Mesoscopic Systems. *Journal of Physics: Conference Series*, 2006.
- [23] F. A. Lindemann. The Calculation of Molecular Vibration Frequencies. *Physik. Z.*, 11:609–612, 1910.
- [24] P. Ludwig, S. Kosse, and M. Bonitz. Structure of spherical three-dimensional Coulomb crystals. *Physical Review E*, 71(046403), 2005.
- [25] A. Melzer, A. Homann, and A. Piel. Experimental investigation of the melting transition of the plasma crystal. *Physical Review E*, 53(3):2757, 1996.

- [26] A. Melzer, V. A. Schweigert, I. V. Schweigert, A. Homann, S. Peters, and A. Piel. Structure and stability of the plasma crystal. *Physical Review E*, 54(1):46, 1996.
- [27] N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller, and E. Teller. Equation of State Calculations by Fast Computing Machines. *Journal of Chemical Physics*, 21:1087–1092, 1953.
- [28] J. B. Pieper, Goree J., and R. A. Quinn. Three-dimensional structure in a crystallized dusty plasma. *Physical Review E*, 54:5636, 1996.
- [29] T. Pohl, T. Pattard, and J. M. Rost. Coulomb Crystallization in Expanding Laser-Cooled Neutral Plasmas. *Physical Review Letters*, 92:155003, 2004.
- [30] J. P. Schiffer. Melting of Crystalline Confined Plasmas. *Physical Review Letters*, 88(20):205003, 2002.
- [31] H. Totsuji, T. Ogawa, C. Totsuji, and K. Tsuruta. Structure of spherical Yukawa clusters: A model for dust particles in dusty plasmas in an isotropic environment. *Physical Review E*, 72:036406, 2005.
- [32] H. Totsuji, C. Totsuji, T. Ogawa, and K. Tsuruta. Ordering of dust particles in dusty plasmas under microgravity. *Physical Review E*, 71(045401), 2005.
- [33] K. Tsuruta and S. Ichimaru. Binding energy, microstructure, and shell model of Coulomb clusters. *Physical Review A*, 48(2):1339, 1993.
- [34] O. S. Vaulina and S. A. Khrapak. Scaling Law for the Fluid-Solid Phase Transition in Yukawa Systems (Dusty Plasmas). *JETP*, 90(2):287–289, 2000.
- [35] O. S. Vaulina, S. A. Khrapak, and G. E. Morfill. Universal scaling in complex (dusty) plasmas. *Physical Review E*, 66(016404), 2002.
- [36] Feller W. *An Introduction to Probability Theory and its Applications*, p324, volume 1. Wiley, New York, 1950.
- [37] D. J. Wineland, J. C. Bergquist, W. M. Itano, J. J. Bollinger, and C. H. Manney. Atomic-Ion Coulomb Clusters in an Ion Trap. *Physical Review Letters*, 59:2935, 1987.
- [38] M. Zuzic, A. V. Ivlev, J. Goree, G. E. Morfill, H. M. Thomas, H. Rothermel, U. Konopka, R. Sütterlin, and D. D. Goldbeck. Three-Dimensional Strongly Coupled Plasma Crystal under Gravity Conditions. *Physical Review Letters*, 85:4064, 2000.