

**ЭЛЕМЕНТАРНЫЕ
ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ ПРОЦЕССЫ**

УДК 593.139

МОДЫ ДВИЖЕНИЯ ВРАЩАЮЩИХСЯ ТРИМЕРОВ АТОМОВ АРГОНА

© 2004 г. **Е. Д. Белега***, **А. А. Рыбаков***, **Д. Н. Трубников***, **А. И. Чуличков****

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова

e-mail: elena@phys.chem.msu.ru

Поступила в редакцию 13.02.2003

Методом молекулярной динамики с использованием определения эффективной размерности фазового пространства вращающихся тримеров благородных газов выделены главные моды движения атомов в кластере. Показано, что с известной точностью внутренняя динамика тримеров определяется двумя-тремя модами движения, особенностями поведения которых зависят от полной энергии и суммарного углового момента системы. Проведено сравнение выделенных мод движения кластера с нормальными модами в жестких трехатомных молекулах.

ВВЕДЕНИЕ

Атомные и молекулярные кластеры вызывают значительный интерес в разных областях науки в связи с решением проблемы перехода вещества от атомов и молекул к конденсированному состоянию. Свойства кластеров зависят от степени агрегации (числа атомов или молекул в кластере). Исследование внутреннего движения кластеров ведет к пониманию динамических особенностей таких процессов, как изомеризация и фрагментация.

Малые кластеры атомов благородных газов представляют собой слабосвязанные системы, взаимодействие между частицами в которых носит ван-дер-ваальсовый характер и может быть описано потенциалом Леннарда-Джонса [1]. В силу ангармоничности потенциала взаимодействия движение атомов уже в тримерах благородных газов в основном стохастично, т.е. неустойчиво к изменению начальных условий. Описать внутреннюю динамику таких кластеров в терминах нормальных мод до сих пор было возможно только для ограниченного интервала энергий, незначительно превышающих энергию нулевых колебаний [2].

В исследованиях внутренней динамики ван-дер-ваальсовых кластеров можно выделить два подхода. При одном из них характер эволюции моделей устанавливается на основе анализа поведения характеристик стохастического движения (спектров динамических переменных, показателей Ляпунова, колмогоровской энтропии). Было обнаружено, что изменение стохастических характеристик, в частности для Ar_3 , существенно зависит от структуры поверхности потенциальной энергии и значения полной энергии системы [2–4]. Хаос, характерный для внутреннего движения атомов в кластере, ослабевает при энергии, до-

статочной для прохождения седловидной области поверхности потенциальной энергии, которая разделяет треугольную и линейную конфигурации. Также показано, что при энергии, допускающей линейную конфигурацию, распределение внутренней кинетической энергии тримера носит бимодальный характер [2, 5]. Наличие глобального и локального минимумов на поверхности потенциальной энергии Ar_3 , а следовательно, долгоживущих состояний кластера с большой и незначительной кинетической энергией (относительно полной) позволило выдвинуть предположение о том, что мера хаоса связана с долей кинетической энергии в колебательных степенях свободы. Изучение влияния структуры поверхности потенциальной энергии на внутреннюю динамику атомов сталкивается с определенными трудностями, связанными с расчетом такой поверхности, принадлежащей многомерному пространству кластера [6]. Для кластеров, состоящих из большого числа частиц, на поверхности потенциальной энергии удается обнаружить только минимумы и седловидные точки, соответствующие различным конфигурациям атомов в кластере. В тримере число атомов достаточно мало, чтобы детально исследовать его структуру и внутреннюю динамику. Результаты, полученные в данной работе для модели, описывающей внутреннее движение Ar_3 , могут позволить выявить динамические закономерности поведения нелинейных систем.

Большинство вышеупомянутых исследований выполнено для невращающихся кластеров. Однако наряду с полной энергией угловой момент в таких системах также является интегралом движения. Вращение ван-дер-ваальсовых кластеров является нежестким и влияние углового момента на их внутреннюю динамику существенно. Так, при “включении” вращения в фазовом пространстве трехатомного кластера аргона появляются регулярные траектории, зависимость доли которых

* Химический факультет МГУ.

** Физический факультет МГУ.

от значения углового момента носит немонотонный характер [7, 8]. Исследование структуры фазового пространства вращающихся кластеров, представленное в работах [7, 8], существенно дополняет сведения о конфигурациях атомов, доступные из исследования поверхности потенциальной энергии.

Наличие углового момента становится источником анизотропии фазового пространства, что отражается на определении внутренней температуры кластера [9]. Вращение кластера вносит свой вклад также в процесс перераспределения энергии между внутренними степенями свободы [7, 8, 10, 11]. Кроме того, в работе [11] исследовано влияние направления вектора суммарного углового момента на характер движения атомов в кластере. В частности, зафиксированы качественные и количественные различия в зависимостях максимального показателя Ляпунова от направления вектора углового момента.

Другой подход в исследовании внутренней динамики малых кластеров благородных газов связан с детальным изучением поведения выделенных координат системы. Так, для описания движения трех атомов в кластере с фиксированным центром масс необходимо 12 переменных (шесть координат и шесть импульсов). При таком числе координат достаточно трудно выявить особенности внутренней динамики системы. Поэтому предпринимаются попытки описать относительное движение трех атомов аргона в кластере с помощью нового, меньшего чем 12, набора координат. Так, в работе [12] рассматривается задача о нахождении доступного для движения координационного пространства A_3 . Однако, несмотря на все достоинства метода, используемого в работе, его применимость естественным образом ограничивается частными случаями.

Метод исследования эволюции нелинейных динамических систем, предлагаемый авторами данной работы, основан на понятии эффективной размерности фазового пространства и главных мод [13]. Многие нелинейные системы обладают следующим свойством: их динамика в основном происходит в подпространстве меньшей, чем число степеней свободы, размерности. Проекция фазовой траектории на такое подпространство имеет наибольшие размеры. Проекция фазовой траектории на характерные направления выделенного подпространства называются главными модами движения, а их число, требующееся для описания движения с заданной точностью – эффективной размерностью.

Цель данной работы – выделение главных мод внутреннего движения вращающихся кластеров A_3 и выявление особенностей поведения каждой из мод в зависимости от полной энергии и суммарного углового момента системы.

МЕТОД

Для разложения движения системы по модам потребуем, чтобы первая мода обладала максимальным (в среднем по времени) квадратом амплитуды, вторая – максимальным квадратом амплитуды в направлении, ортогональном к первой моде, и т.п. В работе [13] показано, что такие моды движения являются проекциями фазовой траектории $\mathbf{x}(t)$, $t \in T$, на ортонормированные собственные векторы оператора

$$\mathbf{S} = \frac{1}{T} \int_0^T \mathbf{x}(t) \mathbf{x}^*(t) dt,$$

упорядоченные по невозрастанию соответствующих им собственных значений $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_n$. Здесь $\mathbf{x} \mathbf{x}^* \in (\mathfrak{R}_n \rightarrow \mathfrak{R}_n)$ – внешнее (тензорное) произведение вектора $\mathbf{x} \in \mathfrak{R}_n$ на себя. Обозначив через $\{\mathbf{e}_k\}$ базис из собственных векторов оператора \mathbf{S} , получим выражение для k -й моды в виде $(\mathbf{e}_k \mathbf{x}(t)) \mathbf{e}_k \in \mathfrak{R}_n$; здесь вектор \mathbf{e}_k задает направление в фазовом пространстве, а скалярное произведение $(\mathbf{e}_k \mathbf{x}(t))$ – амплитуду моды. Квадратный корень из соответствующего собственного значения дает характерный размер множества точек фазовой траектории вдоль направления \mathbf{e}_k в фазовом пространстве.

Для гамильтоновых систем имеет смысл разделить фазовые переменные $\mathbf{x} = (\mathbf{q}, \mathbf{p}) \in \mathfrak{R}_{2n}$ на координаты $\mathbf{q} \in \mathfrak{R}_n$ и импульсы $\mathbf{p} \in \mathfrak{R}_n$. В n -мерном фазовом пространстве импульсов \mathfrak{R}_n описанный выше подход позволяет построить систему мод движения. Такие моды являются проекцией векторов $\mathbf{p}(t)$, $t \in [0, T]$, на собственные векторы оператора

$$\mathbf{S}^p = \frac{1}{T} \int_0^T \mathbf{p}(t) \mathbf{p}^*(t) dt$$

и характеризуют распределение кинетической энергии в пространстве импульсов.

При описанном выше упорядочении собственных чисел конфигурация системы в направлении, задаваемом первым собственным вектором оператора \mathbf{S}^p , наиболее вытянута (в среднем по времени $t \in [0, T]$), а в направлении n -го собственного вектора она имеет наименьший размер. В n -мерном фазовом пространстве импульсов \mathfrak{R}_n k -я мода несет в себе часть средней по времени кинетической энергии системы, равную $\lambda_k^p / \sum_{i=1}^n \lambda_i^p$; здесь λ_k^p – k -е собственное число оператора \mathbf{S}^p .

Если фазовая траектория задается в дискретные моменты времени t_1, \dots, t_N , то эволюция системы будет описываться траекторной матрицей $X_{i,j} = \mathbf{x}_i(t_j)$, $i = 1, \dots, 2n$, $j = 1, \dots, N$. В этом случае

числа $\sqrt{\lambda_k^p}$, $k = 1, \dots, n$, являются сингулярными числами матрицы $X_{i,j}^p = \mathbf{p}_i(t_j)$, $i = 1, \dots, n, j = 1, \dots, N$, а направление моды задается соответствующим сингулярным вектором этой же матрицы.

Фазовое пространство тримера аргона также может быть разделено на координатное и импульсное подпространства. Плоскость, натянутая на два собственных вектора, \mathbf{e}_1^p и \mathbf{e}_2^p , матрицы S^p , отвечающих максимальным собственным значениям, содержит двумерную составляющую импульса $\mathbf{p} \in \mathfrak{R}_6$, в среднем по времени несущую самую большую кинетическую энергию. Если точность описания динамики импульса системы охарактеризовать долей кинетической энергии, сосредоточенной в этой двумерной составляющей, то эта доля вычисляется по формуле $(\lambda_1^p + \lambda_2^p) / \sum_{i=1}^6 \lambda_i^p$.

Главные моды движения кластера, исследуемые в данной работе, – ортогональные составляющие, на которые можно разложить движение динамической системы в 6-мерном фазовом пространстве импульсов, обладающие следующими экстремальными свойствами: суперпозиция из k первых мод, $k = 1, \dots, 6$, наиболее точно аппроксимирует среднюю по времени кинетическую энергию системы среди всех k -мерных составляющих фазовой траектории импульсов $\mathbf{p}(t) \in \mathfrak{R}_6$, $t \in [0, T]$.

Более полно математическое описание используемого здесь метода представлено в ранее опубликованной работе [13].

ДВИЖЕНИЕ КЛАСТЕРА Ar_3 В ВЫДЕЛЕННОМ ПОДПРОСТРАНСТВЕ

Кластер из трех одинаковых атомов благородного газа можно рассматривать как связанное или долгоживущее квазисвязанное состояние системы с гамильтонианом

$$H = \sum_{i=1}^3 \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + \sum_{i=j}^3 U(r_{ij}), \quad (1)$$

где $r_{ij} = |\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j|$, \mathbf{p}_i и \mathbf{q}_i – векторы импульса и координаты i -го атома, m – его масса, $U(r_{ij})$ – потенциал Леннарда–Джонса,

$$U(r_{ij}) = 4U_0 \left[\left(\frac{\alpha}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\alpha}{r_{ij}} \right)^6 \right], \quad (2)$$

с глубиной потенциальной ямы U_0 и характерной шириной α , соответствующей положению нуля потенциала. Расчеты проводились в естественной системе единиц, в которой масштабами служат m , U_0 и α . При этом основное состояние кластера с энергией $E_0 = -3$ и величиной углового момента

$M = 0$ соответствует неподвижным атомам, размещенным в вершинах равностороннего треугольника с длиной стороны $\alpha' = \alpha\sqrt{2}$. В работе M есть угловой момент, нормированный на максимальный M_{max} для данной энергии E . Движение системы в состоянии с $M = M_{max}$ представляет собой вращение вокруг основной оси симметрии равностороннего треугольника, лежащего в плоскости, перпендикулярной вектору углового момента.

В данной работе главные моды внутреннего движения Ar_3 выделены для двух значений энергии ($E = -2.5$ и $E = -1.5$) и различных значений суммарного углового момента кластера. Такой выбор связан с тем, что энергия $E = -2.5$ незначительно превышает энергию нулевых колебаний трехатомного кластера аргона в треугольной конфигурации [3]. Энергия $E = -1.5$ превосходит минимальное значение энергии $E_{jin} = -2.03$, при которой достигается линейная конфигурация кластера, и соответствует половине глубины потенциальной ямы Ar_3 .

Структура фазового пространства кластера исследовалась методом молекулярной динамики. Схема численного интегрирования уравнений движения со случайными начальными условиями, выбранными на фиксированной энергетической поверхности, подробно описана в [7]. Время расчета траектории (T) составляло 2500 естественных единиц времени. Отобранные для исследования траектории относятся к областям хаотического и регулярного движения кластера и принадлежат разным областям двухпараметрической энергетической поверхности (т.е. характеризуются разными значениями полной энергии и углового момента системы). При этом их принадлежность регулярной или хаотической компоненте определялась по значению максимального показателя Ляпунова, рассчитанного стандартным способом [14]. Для каждой выбранной траектории строилась траекторная матрица с использованием вышеуказанного метода, определялись направления, в которых в среднем по траектории происходят самые быстрые перемещения атомов в кластере, т.е. выделялись главные моды движения системы.

ГЛАВНЫЕ МОДЫ ДВИЖЕНИЯ ДЛЯ РЕГУЛЯРНОЙ И ХАОТИЧЕСКОЙ КОМПОНЕНТ

Точность описания движения двумя модами

Графики зависимости погрешности, с которой оценен вклад во внутреннюю кинетическую энергию двух первых мод, от величины углового момента, представлены на рис. 1. Обнаружено различие в поведении регулярной и хаотической компонент системы при описании ее внутренней кинетической энергии двумя модами. Для обоих исследуемых значений полной энергии системы

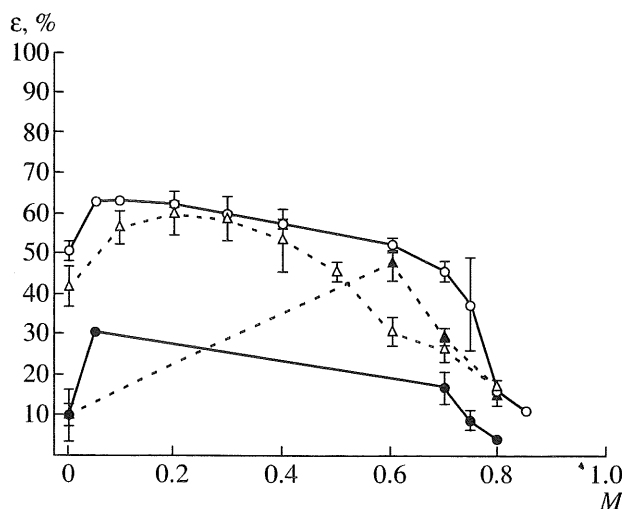


Рис. 1. Погрешность ϵ (%), с которой оценен вклад во внутреннюю кинетическую энергию двух первых мод, в зависимости от относительного углового момента M : \blacktriangle, \bullet – регулярное движение; \triangle, \circ – хаотическое движение; $\blacktriangle, \triangle$ – $E = -2.5$; \bullet, \circ – $E = -1.5$.

кинетическая энергия регулярной компоненты невращающегося кластера сосредоточена в двух направлениях, с погрешностью, не превышающей 10%. При включении вращения ошибка описания кинетической энергии системы двумя модами резко возрастает. Этот факт позволяет сделать вывод о том, что наличие нежесткого вращения активизирует моды движения кластера. Кинетическая энергия хаотической компоненты может быть представлена двумя модами с достаточно высокой (40% и выше) погрешностью, причем как в случае невращающегося кластера, так и при наличии вращения. Отсутствие данных по регулярной компоненте в промежуточном интервале значений углового момента M ($0.1 \leq M \leq 0.7$) связано с тем, что среди отобранных для исследования 100 пар траекторий не нашлось ни одной регулярной. Регулярные траектории были также зафиксированы при достаточно больших значениях углового момента, а именно, при $M \geq 0.6$ для $E = -2.5$ и $M \geq 0.7$ для $E = -1.5$. Как было установлено ранее, в первом случае – это движение кластера в треугольной конфигурации, во втором – в линейной [7, 8]. Причем при сильном вращении кластера в линейной конфигурации его кинетическая энергия с точностью до 5% сосредоточена в двух модах.

Связь мод движения с нормальными модами колебаний

Вектор импульса частиц кластера $\mathbf{p}(t) \in \mathfrak{N}_6$ в каждый момент времени $t \in [0, T]$ представляется

в виде разложения по модам:

$$\mathbf{p}(t) = \sum_{k=1}^6 (\mathbf{p}(t) \mathbf{e}_k^p) \mathbf{e}_k^p. \quad (3)$$

Рассмотрим моду движения $(\mathbf{p}(t) \mathbf{e}_k^p) \mathbf{e}_k^p$ с номером k . Коэффициент $(\mathbf{p}(t) \mathbf{e}_k^p)$ определяет амплитуду составляющей вектора $\mathbf{p}(t)$ в направлении \mathbf{e}_k^p в пространстве \mathfrak{N}_6 , при этом первые три координаты вектора \mathbf{e}_k^p дают направление и величину составляющей трехмерного импульса первой частицы, отвечающей моде движения с номером k , следующие три координаты – направление и величину составляющей импульса второй частицы кластера, соответствующей k -й моде движения, импульс третьей частицы вычисляется из условия равенства нулю вектора полного импульса системы. Эти соображения позволяют визуализировать главные моды движения атомов кластера путем указания движений каждого атома, составляющих эту моду.

Заметим, что для системы m материальных точек, находящихся в поле потенциальных сил с квадратичным потенциалом, определенные выше моды движения соответствуют нормальным модам колебаний [15]. Действительно, обозначим через $\mathbf{q} \in \mathfrak{N}_{3m-6}$ координаты, соответствующие колебательным степеням свободы, и запишем потенциал в виде $U(\mathbf{q}) = U_0 + Q\mathbf{q}\mathbf{q}/2$, где $U_0 = \text{const}$, а Q – неотрицательно определенная симметричная матрица. Тогда $\mathbf{q}(t)$ является решением линейной системы обыкновенных дифференциальных уравнений:

$$\dot{\mathbf{q}} = \mathbf{p},$$

$$\dot{\mathbf{p}} = -Q\mathbf{q},$$

с начальными условиями $\mathbf{q}(0) = \mathbf{q}_0$, $\mathbf{p}(0) = \mathbf{p}_0$. Это решение записывается в виде

$$\mathbf{q}(t) = \sum_{k=1}^{3m-6} \{b_k \cos \omega_k t + c_k \sin \omega_k t\} \mathbf{e}_k, \quad (4)$$

$$\mathbf{p}(t) = \dot{\mathbf{q}}(t) = \sum_{k=1}^{3m-6} \{-b_k \omega_k \sin \omega_k t + c_k \omega_k \cos \omega_k t\} \mathbf{e}_k,$$

где ω_k – собственные числа матрицы Q , $\{\mathbf{e}_k\}$ – соответствующие им ортонормированные собственные векторы, а константы $b_1, \dots, b_{3m-6}, c_1, \dots, c_{3m-6}$ определяются из начальных условий: $b_k = \mathbf{e}_k \mathbf{q}_0$, $c_k = \mathbf{e}_k \mathbf{p}_0$, $k = 1, \dots, 3m-6$. Анализ этой фазовой траектории описанным выше методом приводит к равенствам $\mathbf{e}_k^p = \mathbf{e}_k^q = \mathbf{e}_k$, $k = 1, \dots, 3m-6$, для собственных векторов, соответствующих неупо-

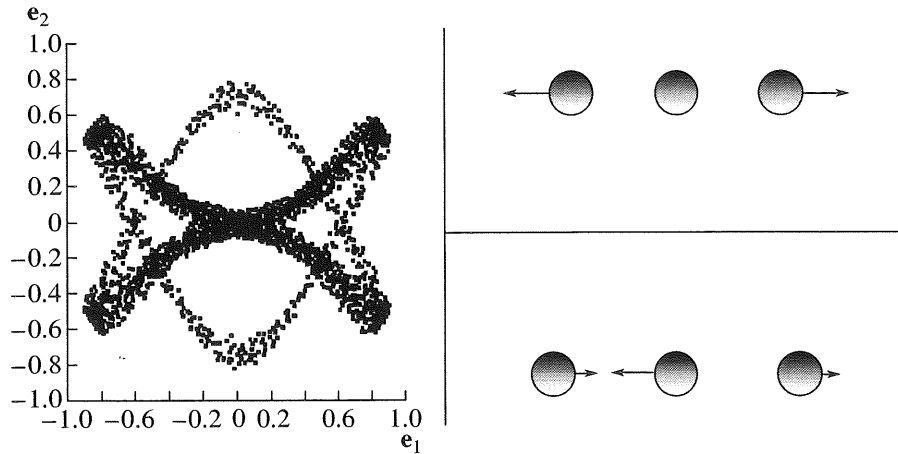


Рис. 2. Типичный портрет движения трехатомного кластера Ar_3 в плоскости, проходящей через векторы e_1^p и e_2^p (слева). Средние по траектории положения и направления движения атомов в кластере в первой моде (справа сверху), во второй моде (справа внизу). Линейная конфигурация, регулярная траектория, $E = -1.5$, $M \leq 10^{-3}$.

рядоченным собственным числам λ_k^q и λ_k^p матриц S^q и S^p , соответственно.

Пусть движение кластера происходит вблизи точки минимума q_0 потенциала $U(q)$, имеющего в точке q_0 непрерывную вторую производную $Q(q)$,

$$Q_{i,j}(q) = \frac{d^2 U(q)}{dq_i dq_j}, \quad i, j = 1, \dots, 3m - 6, \quad (5)$$

так, что при разложении его по формуле Тейлора вблизи точки равновесия можно записать

$$U(q) = U(q_0) + \frac{1}{2} Q(q_0)(q - q_0)(q - q_0) + o(\|q - q_0\|^2), \quad (6)$$

где $\lim_{z \rightarrow 0} \{o(z)/z\} = 0$. Тогда, если члены выше квадратичных по q достаточно малы, то в силу теоремы Ляпунова [16] движение кластера является асимптотически устойчивым, и с течением времени решение нелинейной системы динамических уравнений с потенциалом (6) будет стремиться к решению вида (4), определяемому нормальными модами колебаний. Таким образом, при регулярном (устойчивом) движении можно надеяться на то, что полученные описанным выше методом моды $(p(t)e_k^p)e_k^p$ будут повторять моды нормальных колебаний.

При движении кластера вдали от точки минимума потенциала или при хаотическом (неустойчивом) движении представление потенциала в виде (6) не является достаточно точным и моды движения могут оказаться далекими от классических нормальных колебаний.

В работе численно исследовались как ситуации, в которых эволюция кластера близка к движению, описываемому нормальными модами колебаний, так и ситуации, далекие от нормальных колебаний.

Нормальные моды кластера в линейной конфигурации

Движение, близкое к нормальным колебаниям, наблюдалось в регулярной компоненте невращающегося кластера при $E = -1.5$. На рис. 2, слева, изображена проекция импульса $p(t) \in \mathcal{H}_6, t \in [0, T]$ трехатомного кластера Ar_3 на плоскость, проходящую через векторы e_1^p и e_2^p . Первая мода, описывающая динамику импульса системы и несущая около 70% кинетической энергии кластера, состоит из движений атомов, изображенных на рис. 2 справа сверху, вторая мода (28% кинетической энергии) изображена на рис. 2 справа внизу. Стрелками показано направление импульса каждого атома кластера, длина стрелок пропорциональна средней величине импульса атома в данной моде. Каждый атом изображен в точке трехмерного пространства, совпадающей со средним по времени положением этого атома за время от 0 до T . Как известно [17], моды, изображенные на рис. 2 справа, совпадают с нормальными модами колебаний линейной симметричной трехатомной молекулы с потенциалом, зависящим от квадрата расстояний от центрального атома. Этот факт может свидетельствовать о том, что рассматриваемый режим движения кластера примерно соответствует движению в окрестности минимума локально квадратичного потенциала, когда в (6) члены более высокого порядка играют малую роль.

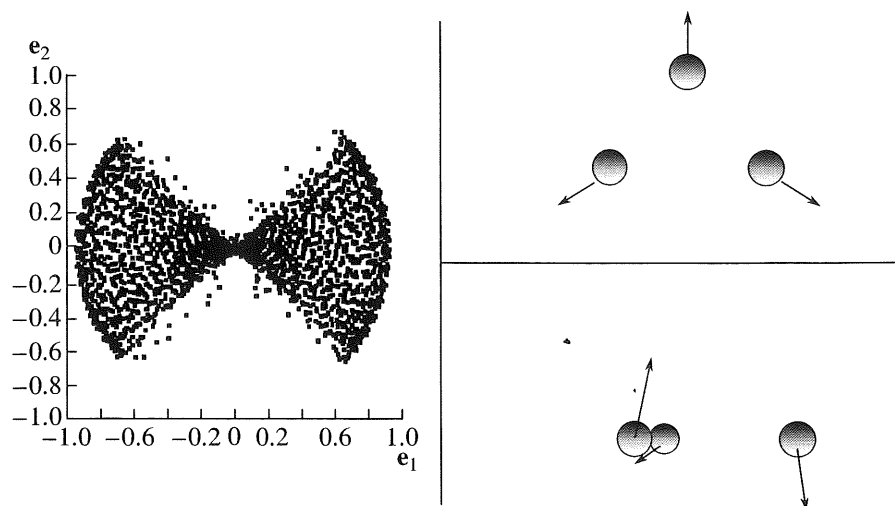


Рис. 3. Типичный портрет движения трехатомного кластера Ag_3 в плоскости, проходящей через векторы \mathbf{e}_1^P и \mathbf{e}_2^P (слева). Средние по траектории положения и направления движения атомов в кластере в первой моде (справа сверху), во второй моде (справа снизу). Треугольная конфигурация, регулярная компонента, $E = -2.5$, $M \leq 10^{-3}$.

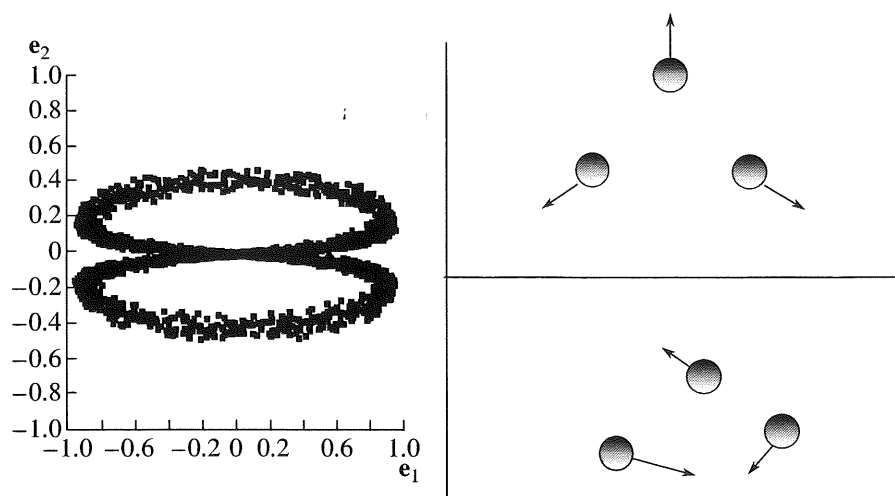


Рис. 4. Типичный портрет движения трехатомного кластера Ag_3 в плоскости, проходящей через векторы \mathbf{e}_1^P и \mathbf{e}_2^P (слева). Средние по траектории положения и направления движения атомов в кластере в первой моде (справа сверху), во второй моде (справа снизу). Треугольная конфигурация, регулярная компонента, $E = -2.5$, $M \leq 10^{-3}$.

Движение кластера в треугольной конфигурации

В общем случае локально-квадратичное описание потенциала взаимодействия атомов в кластере является достаточно грубым. В эволюции модели это проявляется следующим образом.

На рис. 3 слева приведена проекция траектории $\mathbf{p}(t) \in \mathcal{N}_6$, $t \in [0, T]$, на плоскость, проходящую через векторы \mathbf{e}_1^P и \mathbf{e}_2^P невращающегося кластера (энергия $E = -2.5$, регулярная траектория). На рис. 3 справа сверху схематично изображено дви-

жение атомов кластера, составляющих первую моду движения, несущую 84% кинетической энергии. Она с хорошей точностью повторяет форму нормальных колебаний молекулы треугольной конфигурации [17]. Вторая мода содержит 10% кинетической энергии кластера. Форма движения атомов во второй моде показана на рис. 3 справа снизу. Во второй моде регулярной компоненты движения атомов почти перпендикулярны плоскости, проходящей через средние положения частиц кластера.

На рис. 4 приведены аналогичные данные для регулярной траектории с той же энергией $E = -2.5$ и нулевым угловым моментом, отличающиеся от предыдущего примера начальными условиями. Здесь первая мода также незначительно отличается от моды нормальных колебаний молекулы треугольной конфигурации (см. рис. 4 справа вверху). Вторая мода, изображенная на рис. 4 справа внизу, в значительной степени асимметрична и состоит из движений, при которых один из атомов движется почти ортогонально плоскости, проходящей через средние положения частиц.

ВЫВОДЫ

Как показали исследования внутренней динамики трехатомного кластера аргона, выделение главных мод движения позволяет описать в деталях поведение хаотической и регулярной компонент нелинейных динамических систем. В отсутствие вращения движение в регулярной компоненте с достаточно высокой точностью происходит на плоскости, а две первые моды движения в линейной конфигурации с высокой точностью совпадают с нормальными модами колебаний жестких молекул. В случае треугольной конфигурации только первая мода кластера совпадает с нормальной. Включение вращения активизирует моды движения кластера, что усиливает хаос в системе. Характерной особенностью первых двух мод невращающегося кластера в регулярной компоненте является ограничение взаимного направления импульсов частиц. В двух первых модах хаотической траектории векторы импульсов частиц могут занимать любые направления. При высоком угловом моменте эволюция кластера как в хаоти-

ческой, так и в регулярной компоненте также может быть представлена двумя модами.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Aziz R.A. // *Inert Gases*. Berlin: Springer. 1984. Ch. 2.
2. Beck T.L., Leitner D.M., Berry R.S. // *J. Chem. Phys.* 1988. V. 89. № 3. P. 1681.
3. Leitner D.M., Berry R.S., Whitnell R.M. // *J. Chem. Phys.* 1989. V. 91. № 6. P. 3470.
4. Amitrano C., Berry S.R. // *Phys. Rev. Lett.* 1992. V. 68. P. 729.
5. Wales D.J., Berry R.S. // *J. Phys. B*. 1991. V. 24. P. L351.
6. Berry R.S. // *Chem. Soc. Faraday Trans.* 1990. V. 86. № 13. P. 2343; *J. Chem. Phys.* 1994. V. 98. P. 6910.
7. Белега Е.Д., Елютин П.В., Трубников Д.Н., Швилкина Л.Б. // *Докл. АН*. 1997. Т. 355. № 6. С. 750.
8. Belega E.D., Trubnikov D.N., Lohr L.L. // *Phys. Rev. A*. 2001. V. 63. P. 043203.
9. Shvilkina L.B., Belega E.D., Elyutin P.V., Trubnikov D.N. // *Z. Phys. D*. 1997. V. 42. P. 131.
10. Yurtsever E. // *Europhys. Lett.* 1997. V. 37. № 2. P. 91.
11. Yurtsever E. // *Phys. Rev. A*. 1998. V. 58. № 1. P. 377.
12. Lohr L.L. // *Mol. Phys.* 1997. V. 91. P. 1097.
13. Белега Е.Д., Рыбаков А.А., Трубников Д.Н., Чуличков А.И. // *ЖВМ и МФ*. 2002. Т. 42. № 12. С. 1909.
14. Benettin G., Galgani L., Strelcyn J.M. // *Phys. Rev. A*. 1976. V. 14. № 6. P. 2338.
15. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. *Теоретическая физика*. Т. 1. Механика. М.: Наука, 1988.
16. Петровский И.Г. *Лекции по теории обыкновенных дифференциальных уравнений*. М.: Наука, 1984.
17. Волькенштейн М.А., Грибов Л.А., Ельяшевич М.А., Степанов Б.И. // *Колебания молекул*. М.: Наука, 1972. С. 66.