

СТРУКТУРА, ПЛАВЛЕНИЕ И ПОТЕНЦИАЛЬНЫЕ БАРЬЕРЫ В МЕЗОСКОПИЧЕСКИХ КЛАСТЕРАХ ОТТАЛКИВАЮЩИХСЯ ЧАСТИЦ

Ю. Е. Лозовик*, Е. А. Ракоц

*Институт спектроскопии Российской академии наук
142092, Троицк, Московская обл., Россия*

Поступила в редакцию 12 января 1999 г.

Рассматриваются двумерные мезоскопические кластеры из частиц, отталкивающихся по дипольному, кулоновскому и логарифмическому законам и удерживаемых внешним параболическим потенциалом. Эти модели описывают ряд физических систем, в частности, электроны в полупроводниковых структурах либо на поверхности жидкого He с учетом сил изображения, непрямые экситоны в связанных полупроводниковых точках, небольшое число вихрей в островке сверхпроводника второго рода либо в сверхтекучем гелии. Обнаружены два конкурирующих между собой вида упорядочения частиц в мезоскопических кластерах — образование треугольной решетки или оболочечной структуры. Исследованы температурные зависимости потенциальной энергии, среднеквадратичного радиального и углового смещений, радиального и углового распределений частиц и распределения частиц по локальным минимумам. В мезоскопических кластерах плавление происходит в две стадии: при меньших температурах осуществляется ориентационное плавление — из замороженной фазы в состояние с вращательной переориентацией «кристаллических» оболочек друг относительно друга; затем — переход с исчезновением радиального порядка. В дипольных макрокластерах плавление происходит в одну стадию. В кулоновских же и логарифмических макрокластерах ориентационное плавление происходит только для внешних пар оболочек. Обнаружено ориентационное плавление и в трехмерных кулоновских кластерах. Установлена связь характера плавления и соотношения энергетических барьеров, описывающих разрушение ориентационной и радиальной структуры кластера.

PACS: 34.40.Ei; 36.40.Wa; 36.40.c; 61.46

1. ВВЕДЕНИЕ

В последние годы значительное внимание было уделено изучению свойств систем из конечного числа частиц с отталкивательным потенциалом взаимодействия. Связанные системы из малого числа частиц с физическими свойствами, не совпадающими (в силу их малых размеров) со свойствами кристаллов, принято называть кластерами.

Мы рассматриваем здесь кластеры с логарифмическим, кулоновским и дипольным законами взаимодействия между частицами, каждый из которых имеет интересные физические реализации (см. ниже).

Оказывается, что кластеры с разными законами взаимодействия при небольшом числе частиц обладают многими общими свойствами, в частности, оболочечной структурой, конкурирующей с возникновением внутри кластера зародыша со структурой

*E-mail: lozovik@isan.msk.su

«объемной фазы» (т. е. треугольной решетки для двумерных систем). Мы рассматриваем мезоскопические кластеры, обладающие оболочечной структурой. Они являются промежуточным случаем между микроскопическими кластерами, состоящими из одной оболочки, и макроскопическими кластерами, в которых большая часть частиц образует «объемную» фазу. Например, в двумерном случае большая часть частиц внутри кластера образует фрагмент слегка искаженной двумерной треугольной решетки. В мезоскопических кластерах число частиц N изменяется в пределах от 6 до 50–100 в зависимости от закона взаимодействия между частицами в кластере (чем более дальнедействующим является закон взаимодействия, тем большему числу частиц соответствуют макроскопические кластеры). Оболочечная структура мезоскопического кластера может резко меняться при добавлении лишь одной «частицы» (структурная чувствительность) вплоть до некоторого числа «частиц» N , когда внутри этого кластера появляется область со структурой «объемной» фазы. Что наиболее интересно, плавление мезоскопического кластера может обладать интересными специфическими чертами по сравнению с плавлением объемной фазы [1–3]. Оказывается, что плавление указанных мезоскопических кластеров имеет две стадии — сначала происходит взаимное ориентационное плавление оболочек, а при более высокой температуре — исчезновение оболочечной структуры (исключение составляют магические кластеры). Эти особенности являются, как будет показано, общими для мезоскопических кластеров разной природы, что и делает разумным совместное их рассмотрение. Вместе с тем оказывается, что критерий мезоскопичности кластера зависит от того, насколько дальнедействующим является взаимодействие между частицами. А именно, оказывается, что переход от мезоскопических кластеров к макроскопическим (при котором исчезают отмеченные выше особенности мезоскопических кластеров) происходит для дипольных кластеров при меньшем числе частиц, чем, например, для кулоновских и логарифмических.

Вышеуказанное ориентационное плавление возможно и в протяженной системе из отталкивающихся частиц, находящейся во внешнем (случайном) поле, создаваемом примесями, дефектами, шероховатостью границ и т. п. Вблизи минимума случайного потенциала (или вблизи отдельных дефектов, если их концентрация мала) также образуется структура, напоминающая кластер, и может происходить ориентационное плавление при повышении температуры (для вихревой решетки в примесной системе оно наблюдалось в [4]).

Рассмотрим теперь кратко физические реализации рассматриваемых кластеров.

Остановимся сначала на наиболее важной физической реализации для логарифмических кластеров. Магнитное поле проникает в сверхпроводники второго рода в виде вихрей Абрикосова, которые в низкотемпературной области образуют идеальную треугольную решетку [5]. При повышении температуры возможно плавление этой решетки и образование жидкой фазы из вихрей, что и наблюдалось для высокотемпературных сверхпроводников (см. обзор [6]). Представляет большой интерес вопрос о структуре вихревой системы с небольшим числом вихрей, заключенных в островках сверхпроводящей фазы.

Кроме того, вихри во вращающемся сосуде со сверхтекучим гелием при небольшом числе вихрей также взаимодействуют по логарифмическому закону. По логарифмическому закону взаимодействуют в некотором интервале [7] и электроны в полупроводниковой наноструктуре, окруженной средой с малой диэлектрической проницаемостью.

Исследуемая система эквивалентна задаче о двумерном аналоге (ср. [1]) классического атома Томсона [8] с конечной системой «зарядов», подчиняющихся законам

двумерной электростатики, и компенсирующим несжимаемым фоном.

Физическими реализациями двумерных кулоновских кластеров являются, например, электроны в лунках на поверхности жидкого гелия [9] и электроны в квантовой точке [10]. Система электронов в трехмерной квантовой точке является аналогом атома Томсона.

При учете сил изображения вблизи границы полупроводник—металл кулоновский закон взаимодействия заменяется на больших расстояниях дипольным и это отражается на фазовой диаграмме системы, приводя к возвратному квантовому плавлению вигнеровского кристалла с изменением плотности [11]. По дипольному закону отталкиваются на больших расстояниях также и экситоны с пространственно разделенными электронами и дырками [12–16], частицы в слое магнитной жидкости, слой диэлектрических кластеров на поверхности электролита и т. п. (см. [17] и цитируемую там литературу).

В настоящей работе мы рассмотрели зависимость структуры кластеров от температуры. Показано, что двумерный мезоскопический кластер плавится в две стадии: сначала происходит межоболочечное («ориентационное») плавление, а при существенно более высокой температуре расплываются оболочки. (Исключение могут составлять кластеры с небольшим числом частиц, но со структурой близкой к правильной треугольной решетке — «магические кластеры».) Плавление же макрокластера (в изученном интервале чисел частиц) происходит в одну или в две стадии в зависимости от закона взаимодействия между частицами. Показано, что это связано с тем, что энергетический барьер относительно переориентации оболочек в случае микрокластеров существенно меньше барьера относительно радиальных перескоков частиц, а в случае макрокластеров эти барьеры одного порядка. Мы также проанализировали, как указанные потенциальные барьеры исчезают с повышением температуры.

В настоящей работе мы рассматриваем классический режим для электронов, когда их характерная длина волны де Бройля существенно меньше среднего расстояния между ними (квантовый режим, в частности, квантовое плавление кластеров (см., например, [18]) здесь не рассматривается).

В разд. 2 кратко описана физическая модель. В разд. 3 приведены численные методы, используемые в работе. В разд. 4 описаны конфигурации кластеров в глобальных и локальных минимумах потенциальной энергии. В разд. 5 приведены результаты расчетов плавления в кластерах. В разд. 6 проанализированы потенциальные барьеры при вращении оболочек в кластерах друг относительно друга и при перескоке частиц из одной оболочки в другую. В разд. 7 исследовано влияние анизотропии удерживающего потенциала на структуру и плавление кластеров. В разд. 8 исследовано плавление трехмерных кулоновских кластеров. Выводы представлены в разд. 9.

2. ФИЗИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

Мы рассматриваем двумерные кластеры с дипольным, кулоновским и логарифмическим законами взаимодействия между частицами, удерживаемыми внешним потенциалом $U_{ext}(r)$. Для электронов в полупроводниковой наноструктуре роль удерживающего потенциала играет граница полупроводниковой наноструктуры. Для электронов над пленкой гелия роль бокового удерживающего потенциала может играть потенциал (небольшого) металлического электрода, погруженного в гелий. Для вихрей в сверхпроводящем островке роль удерживающего потенциала играет компенсирующий несжима-

ющийся фон зарядов противоположного знака (эффективно учитывающий правильную среднюю плотность вихрей в заданном магнитном поле, определяющую минимум функционала Гинзбурга—Ландау в поле). Во всех указанных случаях удерживающий потенциал можно считать для небольших кластеров квадратичным: $U_{ext}(r_i) = \alpha r_i^2$, где α — положительная константа.

Для двумерных (2D) дипольных кластеров (диполи перпендикулярны плоскости кластера) с парным взаимодействием $U_{ij} = D^2/r_{ij}^3$, мы осуществляем масштабные преобразования:

$$r \rightarrow \frac{\alpha^{1/5} \epsilon^{1/5}}{D^{2/5}} r, \quad T \rightarrow \frac{k \epsilon^{2/5}}{\alpha^{3/5} D^{4/5}} T, \quad U \rightarrow \frac{\epsilon^{2/5}}{\alpha^{3/5} D^{4/5}} U. \quad (1)$$

Аналогично для кулоновского закона взаимодействия $U_{ij} = q^2/r_{ij}$ получаем безразмерные величины с помощью преобразований

$$r \rightarrow \frac{\alpha^{1/3} \epsilon^{1/3}}{q^{2/3}} r, \quad T \rightarrow \frac{k \epsilon^{2/3}}{\alpha^{1/3} q^{2/3}} T, \quad U \rightarrow \frac{\epsilon^{2/3}}{\alpha^{1/3} q^{2/3}} U. \quad (2)$$

А для логарифмического взаимодействия $U_{ij} = -q^2 \ln r_{ij}$ используем преобразование

$$r \rightarrow \frac{\alpha^{1/2}}{q} r, \quad T \rightarrow \frac{k_B}{q^2} T, \quad U \rightarrow \frac{1}{q^2} U. \quad (3)$$

В результате потенциальная энергия кластера приобретает вид

$$U = \sum_{i>j} U_{ij} + \sum_i r_i^2, \quad (4)$$

где для рассмотренных случаев соответственно $U_{ij} = 1/r_{ij}^3$, $U_{ij} = 1/r_{ij}$, $U_{ij} = -\ln r_{ij}$.

3. ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ, ИСПОЛЬЗУЕМЫЕ В РАБОТЕ

Для поиска равновесных конфигураций частиц использовался случайный поиск минимума потенциальной энергии системы со случайным движением отдельных оболочек в целом и случайным движением частиц. В случае изотропного удерживающего потенциала в качестве начальных конфигураций удобно брать правильные многоугольники, вписанные в окружности, так как оболочки имеют формы близкие к окружностям, а в случае анизотропного конфайнмента в качестве начальных конфигураций удобно брать правильные многоугольники, вписанные в эллипсы. В случае очень сильной анизотропии в качестве начальных конфигураций частицы располагались на прямой линии. Максимальная величина шага уменьшалась от $1 \cdot 10^{-2}$ до $1 \cdot 10^{-6}$ в безразмерных единицах. Каждые 10^3 шагов величина шага уменьшалась в 0.8–0.98 раз.

Потенциальный барьер вращения (с учетом весьма существенной релаксации, т. е. подстройки частиц к повороту оболочки) можно найти, используя следующую процедуру. Закрепим все частицы кластера в конфигурации, отвечающей глобальному минимуму потенциальной энергии, кроме частиц выделенной оболочки. Все частицы указанной оболочки повернем на угол $\delta\phi$ относительно других. Затем закрепим угол одной частицы из вращающейся оболочки и угол одной частицы из неподвижной оболочки

и найдем минимум потенциальной энергии по $2N - 2$ переменным с помощью метода случайного поиска (N переменных радиусов r и $N - 2$ переменных углов ϕ). Запомним минимальную потенциальную энергию этой системы. Далее будем повторять эту процедуру, меняя ϕ , пока одна оболочка относительно другой не повернется на угол равный среднему угловому расстоянию между частицами во вращающейся оболочке. Таким образом можно найти зависимость потенциальной энергии системы от угла вращения одной оболочки ϕ и потенциальный барьер вращения.

Потенциальный барьер перескока частицы из одной оболочки в другую характеризует радиальное (полное) плавление оболочек. Для его нахождения используем следующую процедуру. Закрепим все частицы кластера в конфигурации, отвечающей глобальному минимуму потенциальной энергии, кроме одной частицы на месте, а эту частицу будем передвигать от центра системы (или к центру) в сторону ее положения в локальном минимуме потенциальной энергии на расстояние δr . Затем закрепим расстояние от этой частицы до центра системы и найдем минимум потенциальной энергии по $2N - 1$ переменным с помощью метода случайного поиска ($N - 1$ переменных r и N переменных ϕ). Запомним минимальную потенциальную энергию этой системы. Далее будем повторять эту процедуру, пока система не попадет в локальный минимум потенциальной энергии. Таким образом можно найти зависимость потенциальной энергии от координаты r частицы, «меняющей оболочку», и потенциальный барьер перескока частицы. Предложенный учет «релаксации» положений частиц при провороте оболочек либо при перескоке частиц между оболочками существенно понижает барьеры относительно переориентации оболочек и относительно перескока. В противном случае, как показывает расчет, получаются нереалистические, завышенные их значения (в первом случае этот эффект особенно велик).

Вышеописанными методами мы находили потенциальные барьеры в кластерах при нулевой температуре. Однако представляет интерес изменение барьеров с температурой. Отличие в методике нахождения «температурных» потенциальных барьеров от «нетемпературных» заключается в следующем. Вместо нахождения минимума по $2N - 2$ переменным в случае барьера вращения или по $2N - 1$ переменным в случае барьера перескока в случае температурного барьера мы находим среднее значение потенциальной энергии при фиксированных T и $\Delta\phi$ в случае углового барьера и фиксированных T и r в случае радиального барьера. Усреднение проводится примерно по $1 \cdot 10^5$ шагам Монте-Карло.

Для изучения зависимости физических величин от температуры и плавления системы в работе использовался метод Монте-Карло с алгоритмом Метрополиса. После нахождения равновесных конфигураций температура системы повышалась на ΔT ($\Delta T = 5 \cdot 10^{-7} - 5 \cdot 10^{-3}$), далее система удерживалась до выхода на равновесие при новой температуре в течение $(2-4) \cdot 10^4$ шагов Монте-Карло. Затем рассчитывались статистические характеристики путем усреднения по $1 \cdot 10^6$ шагов Монте-Карло. После этого следовал дальнейший нагрев с использованием описанной процедуры. Вычислялись следующие величины.

- 1) Полная потенциальная энергия U_{pot} .
- 2) Радиальные среднеквадратичные смещения: полное,

$$\langle \delta R^2 \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{\langle r_i^2 \rangle - \langle r_i \rangle^2}{a^2}, \quad (5)$$

и отдельно для каждой оболочки,

$$\langle \delta r^2 \rangle = \frac{1}{N_R} \sum_{i=1}^{N_R} \frac{\langle r_i^2 \rangle - \langle r_i \rangle^2}{a^2}, \quad (6)$$

где N_R — число частиц в оболочке, усреднение $\langle \dots \rangle$ проводится по различным конфигурациям Монте-Карло.

3) Угловые среднеквадратичные смещения относительно ближайших частиц своей оболочки,

$$\langle \delta \phi_1^2 \rangle = \frac{1}{N_R} \sum_{i=1}^{N_R} \frac{\langle (\phi_i - \phi_{i_1})^2 \rangle - \langle (\phi_i - \phi_{i_1}) \rangle^2}{\phi_0^2}, \quad (7)$$

и относительно ближайших частиц соседней оболочки,

$$\langle \delta \phi_2^2 \rangle = \frac{1}{N_R} \sum_{i=1}^{N_R} \frac{\langle (\phi_i - \phi_{i_2})^2 \rangle - \langle (\phi_i - \phi_{i_2}) \rangle^2}{\phi_0^2}, \quad (8)$$

где i_1 и i_2 относятся к ближайшей частице из той же и из соседней оболочки, $2\phi_0 = 2\pi/N_R$ — среднее угловое расстояние между соседними частицами для данной оболочки.

Расчитаны только относительные угловые среднеквадратичные смещения, так как вращение системы в целом не представляет интереса.

Для двумерных кулоновских кластеров с $N = 19$ и $N = 20$ были дополнительно рассчитаны следующие величины.

4) Радиальная функция распределения:

$$g(r) = \left\langle \sum_{i=1}^N \delta(r_i - r) \right\rangle.$$

5) Корреляционная функция углов между частицами двух оболочек:

$$g(\phi) = \left\langle \sum_{i=1}^{N_1} \sum_{j=1}^{N_2} \delta(\phi_i) \delta(\phi_j - \phi_i + \phi) \right\rangle.$$

6) Распределение частиц по локальным минимумам — вероятность обнаружить систему вблизи разных минимумов потенциальной энергии $W_{glob,loc}$. Для расчета данной величины система периодически (раз в 10^4 – 10^5 итераций) резко охлаждалась до температуры, которая была на несколько порядков меньше всех температур плавления ($1 \cdot 10^{-7}$) в течение $2 \cdot 10^4$ итераций. Затем минимальное значение энергии сравнивалось со значением энергии в различных локальных минимумах, и если оно оказывалось близко к значению в каком-то минимуме, то считалось, что система попала в этот минимум (локальные и глобальный минимумы были рассчитаны предварительно).

4. РАВНОВЕСНАЯ СТРУКТУРА ДВУМЕРНЫХ КЛАСТЕРОВ

Мы исследуем равновесную структуру кластеров с логарифмическим и дипольным законами взаимодействия. Кулоновское взаимодействие является промежуточным по

дальнодействию. Равновесная структура кулоновских кластеров исследовалась ранее (см., например, [?, ?]).

Мезоскопические кластеры имеют оболочечное строение при низких температурах, что объясняется влиянием центрально-симметричного удерживающего потенциала. Как известно, неограниченный двумерный кристалл имеет треугольную решетку. Однако треугольная структура зарождается внутри кластера при довольно большом числе частиц (см. также [?]). В случае дипольных кластеров в силу близкодействующего характера взаимодействия треугольная решетка зарождается при $N > 11$, а при $N > 40$ сложно выделить оболочки, поэтому мы изучали дипольные кластеры с $N \leq 40$. В логарифмических кластерах треугольная решетка образуется при намного больших N , поэтому мы исследовали логарифмические кластеры с $N \leq 50$ и выборочно для больших N . Для двумерных кластеров были найдены: а) локальные и б) глобальные (наиболее глубокие из локальных) минимумы потенциальной энергии.

4.1. Структура логарифмических кластеров

Зависимости внутренней, внешней и полной потенциальной энергии на одну частицу от числа частиц близки к линейным. При этом зависимости внутренней и полной потенциальной энергии на одну частицу от числа частиц N являются убывающими и гладкими для N от 3 до 50, а зависимость внешней потенциальной энергии на одну частицу от числа частиц для N от 1 до 50 является возрастающей и гладкой.

В табл. 1 приведены числа заполнения оболочек и соответствующие потенциальные энергии (отсчитанные от $C_N^2 \ln(q/\alpha^{1/2}a)$ — см. выше) для глобальных минимумов двумерных логарифмических кластеров. Последовательное заполнение оболочек до некоторой степени напоминает периодическую таблицу элементов (ср. заполнение оболочек в двумерной классической системе частиц с трехмерным кулоновским взаимодействием [?]). Каждая оболочка может содержать не более определенного числа частиц. Так, в первой оболочке (считая от центра системы) не может быть более 5 частиц, а во второй — не более 11 частиц. Когда все оболочки заполнены, т. е. содержат максимально возможное в них число частиц, начинает появляться новая оболочка: сначала появляется одна дополнительная частица в центре системы, затем (с увеличением числа частиц) уже две частицы образуют внутреннюю оболочку и т. д. При этом одна частица появляется в центре системы после добавления частицы к системе с конфигурацией (5,...), две — после конфигурации (1,7,...) или (1,8,...), три — после конфигурации (2,8,...), четыре — после конфигурации (3,9,...), пять — после конфигурации (4,11,...).

Мы используем следующее понятие оболочки (отличающееся от использованных ранее, не универсальных для разного числа частиц определений). Определим оболочку, как выпуклый многоугольник из максимально возможного числа частиц (внутри которого находится предыдущая оболочка), удовлетворяющий такому правилу: максимальное расстояние от частицы данной оболочки до центра системы должно быть меньше минимального расстояния до центра системы от частицы соседней, внешней относительно нее оболочки. В результате этого определения закон заполнения оболочек в кластерах, полученный из наших расчетов с использованием вышеуказанного определения, похож на закон заполнения оболочек в атоме Томсона [?]. В частности, в наших работах в отличие от [?] при возрастании числа частиц число оболочек не может уменьшаться.

Так как удерживающий квадратичный потенциал является центрально-симметричным, следовало ожидать, что оболочки в кластере должны иметь форму правильных

Таблица 1

Оболочечная структура и потенциальная энергия кластеров из двумерных вихрей

Число частиц	Числа заполнения оболочек	Потенциальная энергия	Число частиц	Числа заполнения оболочек	Потенциальная энергия
1	1	$0.000000 \cdot 10^0$	26	3,9,14	$-1.940569 \cdot 10^2$
2	2	$5.000000 \cdot 10^{-1}$	27	3,9,15 Cr_3	$-2.156137 \cdot 10^2$
3	3	$8.918023 \cdot 10^{-1}$	28	4,9,15	$-2.384294 \cdot 10^2$
4	4	$1.090457 \cdot 10^0$	29	4,10,15	$-2.625912 \cdot 10^2$
5	5	$9.764052 \cdot 10^{-1}$	30	4,10,16	$-2.881028 \cdot 10^2$
6	1,5	$4.354169 \cdot 10^{-1}$	31	4,10,17	$-3.149268 \cdot 10^2$
7	1,6 Cr_1	$-7.512442 \cdot 10^{-1}$	32	4,11,17	$-3.431329 \cdot 10^2$
8	1,7	$-2.514746 \cdot 10^0$	33	5,11,17	$-3.727473 \cdot 10^2$
9	1,8	$-4.914510 \cdot 10^0$	34	1,5,11,17	$-4.037308 \cdot 10^2$
10	2,8	$-8.100414 \cdot 10^0$	35	1,6,11,17	$-4.361606 \cdot 10^2$
11	3,8	$-1.209333 \cdot 10^1$	36	1,6,12,17	$-4.700331 \cdot 10^2$
12	3,9	$-1.697858 \cdot 10^1$	37	1,6,12,18 Cr_1	$-5.053534 \cdot 10^2$
13	4,9	$-2.271610 \cdot 10^1$	38	1,6,12,19 Cr_1	$-5.420929 \cdot 10^2$
14	4,10	$-2.942793 \cdot 10^1$	39	1,7,13,18	$-5.803155 \cdot 10^2$
15	4,11	$-3.706118 \cdot 10^1$	40	1,7,13,19	$-6.200430 \cdot 10^2$
16	5,11	$-4.573707 \cdot 10^1$	41	1,7,13,20	$-6.612310 \cdot 10^2$
17	1,5,11	$-5.541308 \cdot 10^1$	42	1,7,14,20	$-7.039416 \cdot 10^2$
18	1,6,11	$-6.620692 \cdot 10^1$	43	2,8,14,19 Cr_2	$-7.481666 \cdot 10^2$
19	1,6,12	$-7.811655 \cdot 10^1$	44	2,8,14,20 Cr_2	$-7.939606 \cdot 10^2$
20	1,6,13	$-9.110199 \cdot 10^1$	45	2,8,14,21 Cr_2	$-8.412619 \cdot 10^2$
21	1,7,13	$-1.052696 \cdot 10^2$	46	3,9,14,20 Cr_3	$-8.901514 \cdot 10^2$
22	1,7,14	$-1.205683 \cdot 10^2$	47	3,9,15,20 Cr_3	$-9.406122 \cdot 10^2$
23	1,8,14	$-1.370647 \cdot 10^2$	48	3,9,15,21 Cr_3	$-9.926554 \cdot 10^2$
24	2,8,14	$-1.548203 \cdot 10^2$	49	3,9,15,22 Cr_3	$-1.046250 \cdot 10^3$
25	3,8,14	$-1.737968 \cdot 10^2$	50	4,10,15,21	$-1.101460 \cdot 10^3$
107	3,9,15,21,27,32 Cr_3	$-7.155730 \cdot 10^3$			
108	3,9,15,21,27,33 Cr_3	$-7.316694 \cdot 10^3$	192	3,9,15,21,27,33,39,45 Cr_3	$-2.834568 \cdot 10^4$

многоугольников, вписанных в окружности. Однако это верно лишь для кластеров, состоящих из одной оболочки или из двух оболочек, внутренняя из которых имеет всего одну частицу. При дальнейшем увеличении числа частиц в кластерах с малым N происходит спонтанное нарушение симметрии. Наиболее сильно это проявляется в кластере с двумя частицами в центре (в кластерах с $N = 10$ и $N = 24$). В этих случаях, поскольку первая оболочка (считая от центра) состоит из двух частиц, второй оболочке выгодно принять форму эллипса.

Основой некоторых конфигураций в глобальных минимумах потенциальной энергии являются части кристаллической решетки с гексагональной симметрией. При описании и анализе свойств таких конфигураций представляется удобным ввести в рассмотрение «кристаллические оболочки» (Cr_c) — концентрические группы узлов идеального двумерного кристалла, в центре которых находится c частиц (см. табл. 1).

Аналитический расчет радиуса и потенциальной энергии кластеров, состоящих из

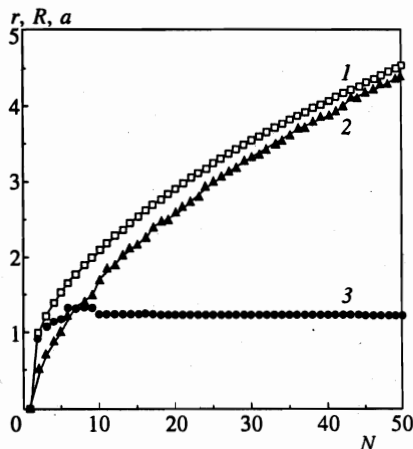


Рис. 1

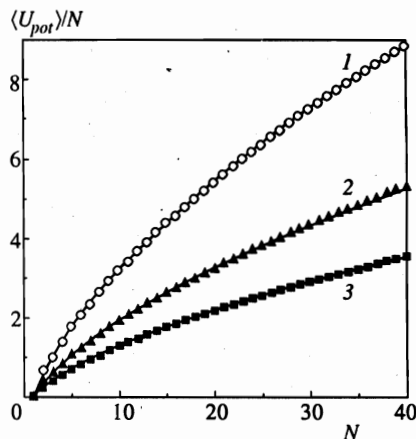


Рис. 2

Рис. 1. Зависимости среднего расстояния между частицами r (1), размера системы R (2) и периода решетки a (3) для двумерных логарифмических кластеров от числа частиц

Рис. 2. Зависимости потенциальной энергии на одну частицу $\langle U_{pot} \rangle / N$ от числа частиц N для двумерных дипольных кластеров: 1 — полная потенциальная энергия $\langle U_{pot} \rangle / N$, 2 — средняя потенциальная энергия всех взаимодействий между частицами $\langle U_{int} \rangle / N = (1/2N) \sum \langle U_{ij} \rangle = (1/2N) \sum (1/r_{ij}^3)$, 3 — внешняя потенциальная энергия $\langle U_{ext} \rangle / N = (1/N) \alpha \sum r_i^2$

одной оболочки, а также кластеров, состоящих из двух оболочек, вторая из которых содержит только одну частицу, подтверждает достаточную точность (девять знаков) компьютерного расчета.

На рис. 1 видно, что среднее расстояние между частицами монотонно возрастает при увеличении числа частиц, причем скорость его роста несколько убывает с ростом N . Что же касается размера системы, то при общей тенденции его роста нельзя говорить о его монотонной зависимости от N при всех N . Сопоставляя рис. 1 и табл. 1, можно сделать вывод о том, что размер системы R испытывает скачки при появлении новой оболочки и при добавлении частицы в первую (от центра системы) оболочку. Если же при увеличении числа N на единицу кластер становится более симметричным, то размер системы может почти не увеличиться или даже немного уменьшиться, как видно на рис. 1. Кроме того, период решетки (среднее расстояние между ближайшими частицами) выходит примерно на постоянное значение при $N > 9$ (см. рис. 1). Последние два обстоятельства говорят о постоянстве плотности частиц.

Отметим, что поиск конфигурации, соответствующей глобальному минимуму потенциальной энергии, является довольно трудной задачей при больших N в связи с наличием большого числа локальных минимумов с потенциальной энергией, очень мало отличающейся от энергии системы в глобальном минимуме. Например, в случае $N = 49$ разница между потенциальной энергией системы в глобальном минимуме (3, 9, 15, 22) и в ближайшем к нему локальном минимуме (3, 9, 16, 21) составляет всего $4 \cdot 10^{-4}\%$. По этой причине приходится искать минимумы с большой точностью (не менее семи знаков).

Таблица 2

Оболочечная структура и потенциальная энергия дипольных кластеров, удерживаемых гармоническим потенциалом

Число частиц	Числа заполнения оболочек	Потенциальная энергия	Число частиц	Числа заполнения оболочек	Потенциальная энергия
1	1	$0.0000000 \cdot 10^0$	21	2,7,12 Cr_2	$1.1740007 \cdot 10^2$
2	2	$1.2932046 \cdot 10^0$	22	2,8,12 Cr_2	$1.2715322 \cdot 10^2$
3	3	$3.0418217 \cdot 10^0$	23	3,8,12 Cr_3	$1.3727919 \cdot 10^2$
4	4	$5.5208363 \cdot 10^0$	24	3,8,13 Cr_3	$1.4753113 \cdot 10^2$
5	5	$8.7856477 \cdot 10^0$	25	3,9,13 Cr_3	$1.5814029 \cdot 10^2$
6	1,5	$1.2289769 \cdot 10^1$	26	4,9,13	$1.6921679 \cdot 10^2$
7	1,6 Cr_1	$1.6281382 \cdot 10^1$	27	4,9,14 Cr_4	$1.8047079 \cdot 10^2$
8	1,7	$2.1083395 \cdot 10^1$	28	4,10,14 Cr_4	$1.9198318 \cdot 10^2$
9	2,7	$2.6313547 \cdot 10^1$	29	5,10,14 Cr_5	$2.0404328 \cdot 10^2$
10	3,7 Cr_3	$3.1901163 \cdot 10^1$	30	5,10,15 Cr_5	$2.1616304 \cdot 10^2$
11	3,8 Cr_3	$3.7616955 \cdot 10^1$	31	1,5,10,15 Cr_1	$2.2839087 \cdot 10^2$
12	3,9 Cr_3	$4.3999784 \cdot 10^1$	32	1,6,12,13 Cr_1	$2.4093329 \cdot 10^2$
13	4,9	$5.0634105 \cdot 10^1$	33	1,6,12,14 Cr_1	$2.5368468 \cdot 10^2$
14	4,10 Cr_4	$5.7895957 \cdot 10^1$	34	1,6,12,15 Cr_1	$2.6669867 \cdot 10^2$
15	5,10	$6.5399893 \cdot 10^1$	35	1,6,12,16 Cr_1	$2.8012640 \cdot 10^2$
16	1,5,10	$7.3049228 \cdot 10^1$	36	1,6,12,17 Cr_1	$2.9407878 \cdot 10^2$
17	1,6,10 Cr_1	$8.1136231 \cdot 10^1$	37	1,7,13,16 Cr_1	$3.0825097 \cdot 10^2$
18	1,6,11 Cr_1	$8.9506331 \cdot 10^1$	38	2,8,13,15 Cr_2	$3.2244908 \cdot 10^2$
19	1,6,12 Cr_1	$9.8421773 \cdot 10^1$	39	3,8,13,15 Cr_3	$3.3690883 \cdot 10^2$
20	1,7,12	$1.0776650 \cdot 10^2$	40	3,9,14,14 Cr_3	$3.5144690 \cdot 10^2$

4.2. Структура дипольных кластеров

Для дипольных кластеров внутренняя, внешняя и полная потенциальная энергия на одну частицу E/N возрастают почти линейно с увеличением числа частиц (см. рис. 2). Это говорит о том, что при малом числе частиц $N \leq 40$ система имеет свойства кластера и еще не приобретает свойств кристалла (для которого $E/N = \text{const}$).

В табл. 2 приведены числа заполнения оболочек и соответствующие потенциальные энергии для глобальных минимумов двумерных дипольных кластеров. Правила заполнения оболочек похожи на правила их заполнения в логарифмических кластерах.

При увеличении N обнаруживается, что внутри кластера начинает зарождаться треугольная решетка. Впервые фрагменты треугольной решетки появляются уже для кластера из 12 частиц (конфигурация (3,9) — см. табл. 2). Начиная с 32 частиц в кластере все время преобладает треугольная структура: некоторые частицы нельзя полностью отнести к определенным оболочкам — они оказываются между оболочками, образуя фрагмент треугольной решетки (последний имеет центр вблизи границы кластера, а не в центре симметрии удерживающего потенциала). Например, в кластере из 37 частиц в конфигурации, соответствующей глобальному минимуму потенциальной энергии (см. табл. 2), уже нельзя однозначно выделить оболочки. В оболочечной структуре существует дефект, однако частицы в основном образуют треугольную решетку. Таким образом, происходит упорядочение двух видов — образование либо треугольной решетки,

либо оболочечной структуры, — которые конкурируют между собой. Для дипольных кластеров треугольная структура появляется при меньшем N , чем для кулоновских и логарифмических кластеров [2], что можно объяснить тем, что дипольный потенциал взаимодействия является более близкодействующим. Так как правильная треугольная решетка обладает гексагональной симметрией, то наблюдаются отклонения формы оболочек от окружностей для $N > 30$. Это явление аналогично «огранке» кристалла (см. также [20]). Так, в дипольном кластере некоторые частицы находятся не на границе кластера, а на расстоянии порядка периода решетки от нее. Для дипольных кластеров введение понятия «кристаллические оболочки» (C_{T_c}) является более естественным, чем для логарифмических, так как большинство конфигураций в глобальных минимумах можно классифицировать таким образом (см. табл. 2).

5. ПЛАВЛЕНИЕ И ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ ДВУМЕРНЫХ МЕЗОСКОПИЧЕСКИХ КЛАСТЕРОВ

Мы исследовали плавление логарифмических, кулоновских и дипольных микро- и макрокластеров с увеличением температуры.

5.1. Плавление логарифмических кластеров

Температурная зависимость радиального среднеквадратичного смещения для двумерного логарифмического кластера с $N = 37$ показана на рис. 3. Радиальные среднеквадратичные смещения для всех оболочек испытывают излом при одной и той же температуре $T_c = 8 \cdot 10^{-3}$.

На рис. 4 видно, что при той же температуре испытывают излом угловые среднеквадратичные смещения относительно ближайших частиц своей оболочки для всех оболочек. Следовательно, при температуре $T_c = 8 \cdot 10^{-3}$ (см. табл. 3) в кластере из $N = 37$ частиц происходит фазовый переход: система теряет свое упорядоченное строение. При $T > T_c$ число частиц в оболочках начинает меняться, оболочки обмениваются частицами, размываются. При $T \gg T_c$ невозможно выделить какие-либо оболочки. Частицы движутся хаотически. Характерное значение безразмерного параметра $\Gamma = q^2/k_B T_c$, при котором происходит плавление системы, при $N = 37$ равно 125, что почти не отличается от величины Γ , при которой происходит плавление системы с относительно большим числом вихрей ($\Gamma = \Gamma_c \simeq 130$).

Оказывается, однако, что угловые среднеквадратичные смещения относительно ближайших частиц соседней оболочки испытывают излом при намного меньших температурах. Для кластера из 37 частиц угловые среднеквадратичные смещения внешней оболочки относительно ближайших частиц средней оболочки начинают быстро расти при температуре $T_{c1} = 8 \cdot 10^{-4}$ ($\Gamma = 1/T_{c1} = 1250$) (см. рис. 5а), а угловые смещения средней оболочки относительно ближайших частиц внутренней оболочки — при температуре $T_{c2} = 3 \cdot 10^{-3}$ ($\Gamma = 1/T_{c2} = 333$) (см. рис. 5б). Это означает, что при этих температурах для соответствующих пар оболочек происходит специфическое ориентационное плавление, характерное для кластеров с оболочечной структурой, т. е. в двумерных кластерах в некоторый момент оболочки, сохраняя свою кристалличность, начинают проворачиваться друг относительно друга.

Отметим, что фазовые переходы в рассматриваемой мезоскопической системе, как

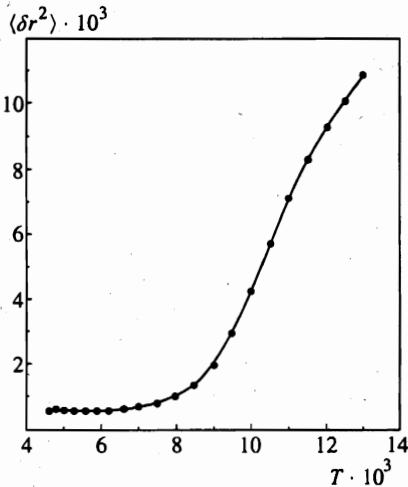


Рис. 3

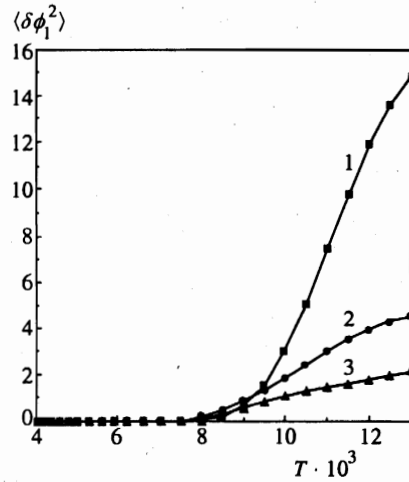


Рис. 4

Рис. 3. Зависимость полного радиального среднеквадратичного смещения $\langle \delta r^2 \rangle$ от температуры для двумерного логарифмического кластера с числом частиц $N = 37$

Рис. 4. Зависимости угловых среднеквадратичных смещений $\langle \delta \phi_1^2 \rangle$ внешней (1), средней (2) и внутренней (3) оболочек относительно ближайших частиц из своей оболочки от температуры для двумерного логарифмического кластера с числом частиц $N = 37$

показывает расчет, еще достаточно хорошо определены (т. е. уширение области перехода $\Delta T/T$ еще не велико).

Потенциальная энергия логарифмического кластера почти линейно возрастает с температурой и не имеет особенностей. Поэтому зависимость потенциальной энергии системы от температуры нельзя использовать для определения температуры плавления.

Для логарифмических макрокластеров с $N \simeq 100$ ориентационное плавление происходит только для внешних пар оболочек, так как внутри образуется область треугольной решетки.

5.2. Плавление кулоновских кластеров

Температурные зависимости полного радиального смещения и радиальных среднеквадратичных смещений для всех оболочек в отдельности для двумерного кулоновского кластера с $N = 54$ показаны на рис. 6. Эти зависимости для всех оболочек испытывают излом при одной и той же температуре $T_{cl} = 4 \cdot 10^{-3}$.

На рис. 7 видно, что при той же температуре испытывают излом угловые смещения относительно ближайших частиц своей оболочки для всех оболочек. Следовательно, при температуре $T_{cl} = 4 \cdot 10^{-3}$ в кластере из $N = 54$ частиц происходит фазовый переход: система теряет свое упорядоченное строение.

Оказывается, однако, что угловые среднеквадратичные смещения относительно ближайших частиц соседней оболочки для двух внешних пар оболочек испытывают из-

Таблица 3

Температуры плавления T_c и потенциальные барьеры $U_{j,rot}$ двумерных кластеров

	T_c	$U_{j,rot}$
Логарифмический кластер, $N = 11$		
Ориентационное плавление внешней оболочки относительно внутренней	$4.0 \cdot 10^{-7}$	$2.32 \cdot 10^{-6}$
Полное плавление	$4.5 \cdot 10^{-3}$	$3.71 \cdot 10^{-2}$
Логарифмический кластер, $N = 37$		
Ориентационное плавление внешней оболочки относительно средней	$8.0 \cdot 10^{-4}$	$2.30 \cdot 10^{-3}$
Ориентационное плавление средней оболочки относительно внутренней	$2.4 \cdot 10^{-3}$	$1.61 \cdot 10^{-2}$
Полное плавление	$8.0 \cdot 10^{-3}$	$6.61 \cdot 10^{-2}$
Логарифмический кластер, $N = 107$		
Ориентационное плавление внешней оболочки относительно соседней	$7.5 \cdot 10^{-3}$	$3.0 \cdot 10^{-2}$
Полное плавление	$8.5 \cdot 10^{-3}$	$5.8 \cdot 10^{-2}$
Кулоновский кластер, $N = 19$		
Ориентационное плавление	—	$4.5 \cdot 10^{-2}$
Полное плавление	$4.0 \cdot 10^{-3}$	$5.0 \cdot 10^{-2}$
Кулоновский кластер, $N = 20$		
Ориентационное плавление внешней оболочки относительно средней	$1.8 \cdot 10^{-6}$	$1.2 \cdot 10^{-5}$
Полное плавление	$1.4 \cdot 10^{-2}$	$5.4 \cdot 10^{-2}$
Кулоновский кластер, $N = 37$		
Ориентационное плавление внешней оболочки относительно средней	$4.0 \cdot 10^{-5}$	$6.1 \cdot 10^{-3}$
Ориентационное плавление средней оболочки относительно внутренней	$4.0 \cdot 10^{-5}$	$6.1 \cdot 10^{-3}$
Полное плавление	$6.5 \cdot 10^{-3}$	$5.17 \cdot 10^{-2}$
Кулоновский кластер, $N = 54$		
Ориентационное плавление внешней оболочки относительно соседней	$1.5 \cdot 10^{-3}$	$4.59 \cdot 10^{-2}$
Ориентационное плавление средних оболочек	$1.5 \cdot 10^{-3}$	$5.72 \cdot 10^{-2}$
Ориентационное плавление внутренней оболочки относительно соседней	$4.0 \cdot 10^{-3}$	$1.01 \cdot 10^{-1}$
Полное плавление	$4.0 \cdot 10^{-3}$	$5.31 \cdot 10^{-2}$
Дипольный кластер, $N = 10$		
Ориентационное плавление внешней оболочки относительно внутренней	$1.2 \cdot 10^{-5}$	$3.5 \cdot 10^{-5}$
Полное плавление	$7.0 \cdot 10^{-3}$	$5.6 \cdot 10^{-2}$
Дипольный кластер, $N = 38$		
Ориентационное плавление отсутствует		
Полное плавление	$9.0 \cdot 10^{-3}$	

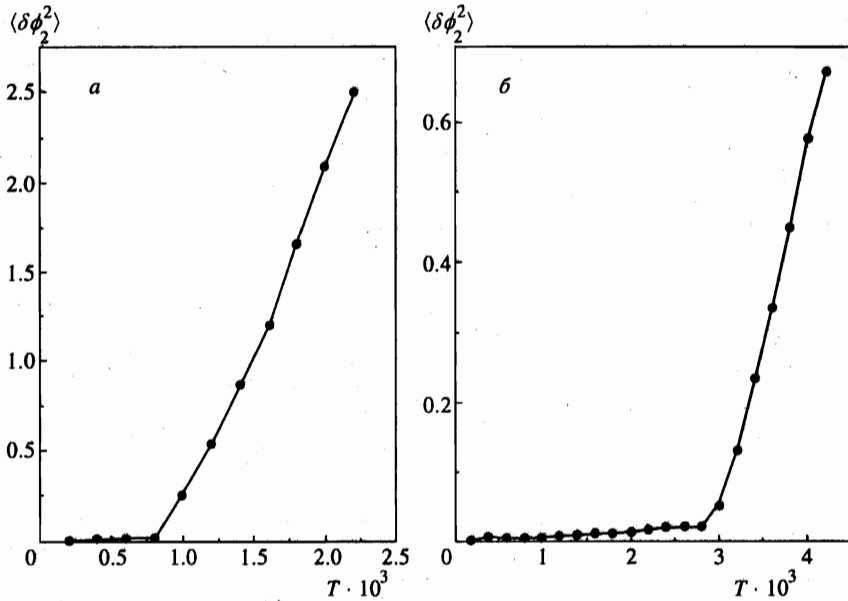


Рис. 5. Температурные зависимости угловых среднеквадратичных смещений $\langle \delta\phi_2^2 \rangle$ средней оболочки относительно ближайших частиц из внешней оболочки (а) и внутренней оболочки относительно ближайших частиц из средней оболочки (б) для двумерного логарифмического кластера с числом частиц $N = 37$.

лом при меньшей температуре $T_{c2} = 1.5 \cdot 10^{-3}$, и лишь для внутренней пары оболочек при той же температуре T_{c1} (см. рис. 7, табл. 3). Это означает, что при температуре $T = T_{c2}$ для соответствующих пар оболочек происходит ориентационное плавление.

Отсутствие ориентационного плавления внутренней пары оболочек объясняется тем, что внутри кластера из 54 частиц имеется фрагмент треугольной решетки. Весь кластер не может иметь треугольную решетку, так как в силу центрально-симметричного удерживающего потенциала снаружи наблюдаются ярко выраженные круговые оболочки.

Потенциальная энергия кулоновского кластера так же, как и логарифмического, почти линейно растет с температурой и не имеет особенностей.

Плавление кулоновского кластера из 37 частиц происходит также в две стадии: ориентационное и полное плавление (см. табл. 3). В отличие от кластера из 54 частиц, в случае $N = 37$ все (в том числе и внутренняя) пары оболочек испытывают ориентационное плавление, что связано с отсутствием области треугольной решетки внутри кластера с $N = 37$.

Плавление кластеров из 19 и 20 частиц мы рассмотрим более подробно.

В кластере с $N = 20$ наблюдалось двухстадийное плавление, как и ожидалось для кулоновских мезоскопических кластеров, причем температуры ориентационного и полного плавления различаются на несколько порядков. Так, при $T = T_{c2} = 1.8 \cdot 10^{-6}$ угловое среднеквадратичное смещение относительно ближайших частиц соседних оболочек испытывает излом. Кроме того, при $T < T_{c2}$ амплитуда колебаний функции $g(\phi)$ (см. разд. 3) велика (см. рис. 8а), а при $T > T_{c2}$ амплитуда $g(\phi)$ резко убывает (см. рис. 8б).

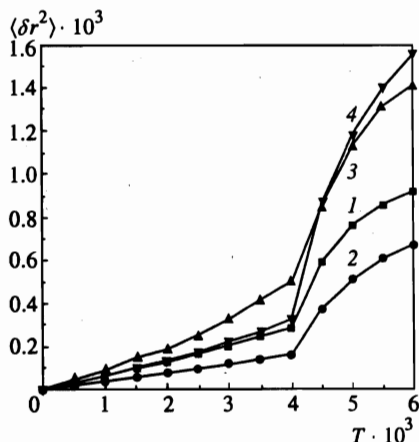


Рис. 6

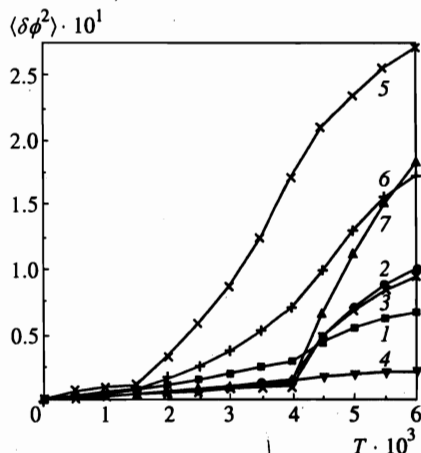


Рис. 7

Рис. 6. Зависимости радиальных средневекторных смещений $\langle \delta r^2 \rangle$ от температуры для двумерного кулоновского кластера, $N = 54$: 1 — полное, 2 — первой оболочки, 3 — второй оболочки, 4 — третьей оболочки

Рис. 7. Температурные зависимости угловых средневекторных смещений $\langle \delta \phi^2 \rangle$ для двумерного кулоновского кластера относительно ближайших частиц своей и соседней оболочек, $N = 54$: 1 — первой оболочки относительно частиц своей оболочки, 2 — второй оболочки относительно частиц своей оболочки, 3 — третьей оболочки относительно частиц своей оболочки, 4 — четвертой оболочки относительно частиц своей оболочки, 5 — второй оболочки относительно частиц первой оболочки, 6 — третьей оболочки относительно частиц второй оболочки, 7 — четвертой оболочки относительно частиц третьей оболочки

Все это указывает на наличие ориентационного плавления при $T = T_{c2}$. Радиальные средневекторные смещения испытывают излом при $T = T_{c1} = 1.4 \cdot 10^{-2}$ (см. табл. 3), что говорит о наличии полного плавления кулоновского кластера с $N = 20$ в точке $T = T_{c1}$.

В кластере с $N = 19$ величины радиальных и угловых средневекторных смещений относительно ближайших частиц соседней оболочки испытывают скачок при одной и той же температуре $T = T_{c1} = 4 \cdot 10^{-3}$ (см. табл. 3). При $T > T_{c1}$ в функции $g(r)$ (см. разд. 3) два резких максимума внешней оболочки, существовавшие при $T < T_{c1}$, сливаются (рис. 9); а в функции $g(\phi)$ исчезают нули, существовавшие при $T < T_{c1}$ (рис. 10). Все это говорит об одновременном исчезновении ориентационного и радиального порядков в кулоновском кластере с $N = 19$ при $T = T_{c1}$. Следовательно, кулоновский микрокластер с $N = 19$ плавится в одну стадию — ориентационное плавление отсутствует, что является уникальным для мезоскопических кластеров. Последнее обстоятельство связано с тем, что кластер $N = 19$ имеет в глобальном минимуме конфигурацию (1,6,12) и является почти точным фрагментом треугольной решетки.

Мы также исследовали распределение системы по локальным минимумам потенциальной энергии с повышением температуры. Оказалось, что и для $N = 19$, и для

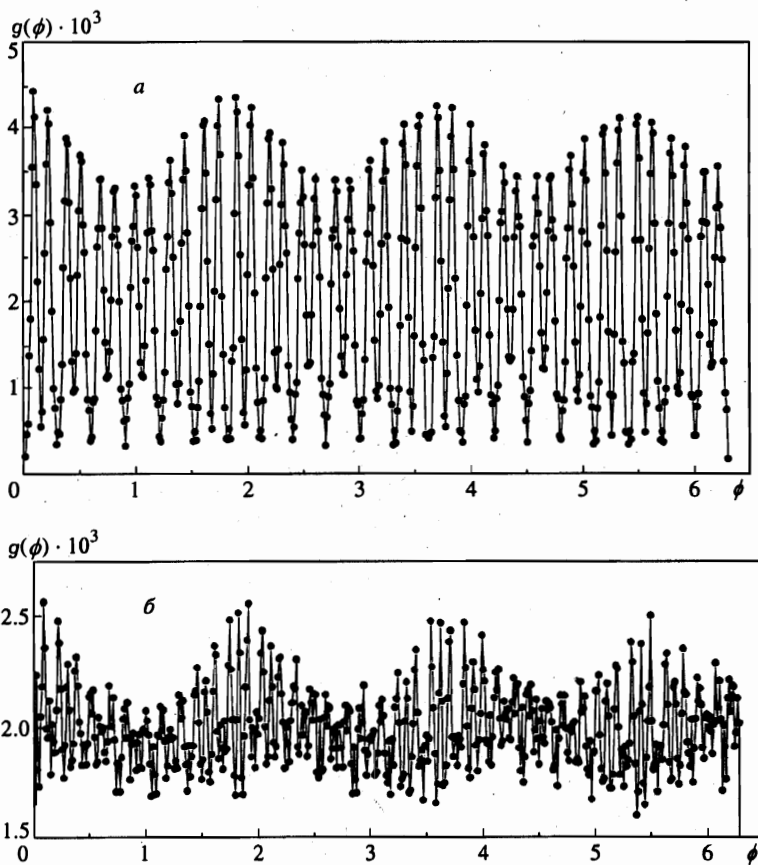


Рис. 8. Функции распределения углов между частицами двух оболочек $g(\phi)$ для $N = 20$ при $T = 1 \cdot 10^{-6}$ (а) и $T = 4 \cdot 10^{-6}$ (б)

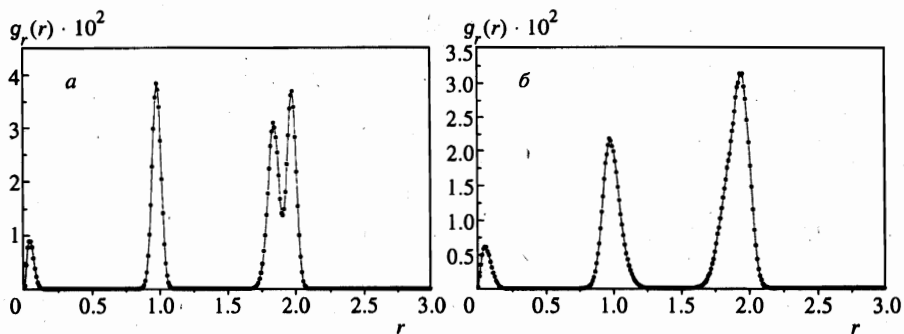


Рис. 9. Радиальные функции распределения $g(r)$ для $N = 19$ при $T = 3 \cdot 10^{-3}$ (а) и $T = 7 \cdot 10^{-3}$ (б)

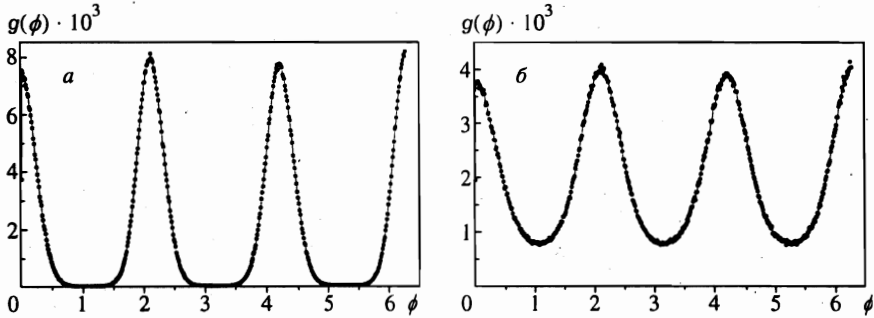


Рис. 10. Функции распределения углов между частицами двух оболочек $g(\phi)$ для $N = 19$ при $T = 3 \cdot 10^{-3}$ (а) и $T = 7 \cdot 10^{-3}$ (б)

$N = 20$ при температуре ниже температуры полного плавления кластер все время находится вблизи конфигурации, отвечающей глобальному минимуму потенциальной энергии. При температуре выше температуры полного плавления вероятность того, что кластер находится вблизи конфигурации, соответствующей глобальному минимуму (1,7,12), уменьшается и выходит на постоянное значение. Кластер перемещается между конфигурациями, соответствующими различным локальным минимумам (1,7,12), (1,6,13), (1,8,11).

5.3. Плавление дипольных кластеров

Температурные зависимости радиальных среднеквадратичных смещений, полного и для каждой оболочки, для двумерного дипольного кластера с $N = 38$ испытывают излом при температуре T_{c1} (см. табл. 3). При той же температуре испытывают излом угловые среднеквадратичные смещения относительно ближайших частиц своей и соседней оболочек для всех оболочек. Следовательно, при температуре T_{c1} в кластере из $N = 38$ частиц происходит фазовый переход: система теряет свое упорядоченное строение. При $T > T_{c1}$ число частиц в оболочках начинает меняться, оболочки обмениваются частицами, размываются. При $T \gg T_{c1}$ уже невозможно выделить какие-либо оболочки. Частицы движутся хаотически.

Безразмерный параметр Γ_d , при котором происходит плавление системы, в единицах $D = k_B = 1$ равен

$$\Gamma_d = \frac{1}{2a^3 T_c}$$

Для $N = 38$ значение $\Gamma_d = 69$ не сильно отличается от значения $\Gamma_d = 62$, при котором плавится дипольный кристалл [21].

Сценарий плавления двумерного дипольного кластера из $N = 38$ частиц аналогичен сценарию плавления двумерного дипольного кристалла с треугольной решеткой за исключением отсутствия скачка потенциальной энергии в температуре плавления [21]. Однако это не справедливо для мезоскопических кластеров, состоящих всего из двух оболочек. Здесь, несмотря на близкодистанционный характер дипольного взаимодействия, большую роль играет квадратичный удерживающий потенциал: оболочечная структура конкурирует с треугольной решеткой. Плавление двумерного дипольного

кластера из 10 частиц происходит в две стадии аналогично плавлению логарифмических и кулоновских кластеров.

Из табл. 3 и предыдущих рассуждений видно, что плавление двумерных логарифмических, кулоновских и дипольных мезоскопических кластеров происходит в два этапа (исключение составляют магические кластеры с треугольной структурой), плавление логарифмических и кулоновских макрокластеров — тоже в два этапа, однако ориентационное плавление происходит только у внешних пар оболочек, наконец, плавление дипольных макрокластеров происходит в один этап.

6. ПОТЕНЦИАЛЬНЫЕ БАРЬЕРЫ ОТНОСИТЕЛЬНОГО ВРАЩЕНИЯ ОБОЛОЧЕК И ПЕРЕСКОКА ЧАСТИЦЫ ИЗ ОДНОЙ ОБОЛОЧКИ В ДРУГУЮ

Описанными выше методами мы нашли потенциальный барьер вращения оболочек друг относительно друга U_{rot} и потенциальный барьер перескока частицы из одной оболочке в другую U_j в кластерах, в которых изучали плавление (см. табл. 3). Вращение оболочек является низшим возбуждением в случае мезоскопических кластеров. Оказалось, что для мезоскопических кластеров ориентационный барьер существенно ниже радиального. Несоизмеримость барьеров наряду со скачком углового среднеквадратичного смещения является еще одним веским доказательством возможности ориентационного плавления в двумерных кластерах. Однако для макрокластеров барьеры вращения внутренних оболочек (для логарифмических и кулоновских кластеров) или всех оболочек (для дипольных кластеров) и барьеры перескока — величины одного порядка.

Из табл. 3 видно, что отношение между потенциальными барьерами вращения и перескока для данного числа N и данного закона взаимодействия по порядку величины равно отношению между температурами ориентационного и полного плавления,

$$\frac{U_{rot}}{U_j} \approx \frac{T_{c2}}{T_{c1}}$$

Это позволяет предсказывать возможность ориентационного плавления в кластерах с разными N и различными законами взаимодействия.

Мы также исследовали изменение потенциальных барьеров вращения и перескока при повышении температуры. Нетрудно понять, что при очень высокой температуре $T \gg T_c$, при которой в кластере уже нельзя выделить оболочки, все барьеры должны исчезнуть. Однако интересно сопоставить температуры исчезновения барьеров относительно вращения оболочек и относительно перескока частиц между оболочками с температурами ориентационного и полного плавления кластеров.

Мы исследовали изменение зависимостей потенциальной энергии от угла вращения оболочек друг относительно друга для двух пар оболочек с температурой и изменение зависимости потенциальной энергии от радиуса частицы, меняющей оболочку, с температурой для кулоновского кластера с $N = 37$. Оказалось, что барьер вращения внешней оболочки относительно средней исчезает при $T = 2.5 \cdot 10^{-4}$ (рис. 11), а средней относительно внутренней — при $T = 6.0 \cdot 10^{-4}$. Барьер перескока частиц между оболочками исчезает при $T = 3.0 \cdot 10^{-2}$. При сравнении этих температур с температурами плавления видно, что температура плавления меньше температуры исчезновения соответствующего ей барьера примерно в 5–15 раз. По-видимому, это связано с тем,

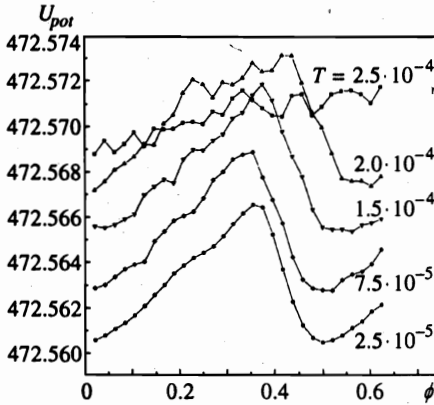


Рис. 11. Температурное изменение зависимости потенциальной энергии от угла вращения внешней оболочки относительно средней оболочки для двумерного кулоновского кластера с $N = 37$

что при температуре плавления частицы начинают часто преодолевать барьер, а уже при дальнейшем повышении температуры, когда барьер исчезает, частицы перестают его «замечать» и двигаются хаотически в направлении соответствующего барьера.

7. КЛАСТЕРЫ С АНИЗОТРОПНЫМ КОНФАЙНМЕНТОМ

Рассмотрим изменения равновесной структуры двумерных кластеров, вызванные анизотропией удерживающего потенциала. Анизотропный удерживающий потенциал имеет вид

$$U_{ext} = \gamma \sum_i x_i^2 + (2 - \gamma) \sum_i y_i^2, \quad (9)$$

где $0 \leq \gamma \leq 2$ ($\gamma = 1$ соответствует изотропному случаю). Мы рассчитываем равновесные конфигурации с помощью метода, описанного выше. Исследовались конфигурации, соответствующие локальным и глобальным минимумам потенциальной энергии для логарифмического и кулоновского кластеров с $N = 37$ и для логарифмических кластеров с $N = 7$ и 11 с различными степенями анизотропии γ (конфигурации кулоновского кластера с $N = 37$ изображены на рис. 12) и обнаружили следующие эффекты.

1. Чем больше степень анизотропии, тем больше тенденция нахождения глобального минимума в конфигурации с меньшим числом оболочек и с меньшим числом частиц во внутренних оболочках (см. табл. 4). Оболочки становятся все более вытянутыми и близкими по своей форме к многоугольникам, вписанным в эллипсы. Мы должны изменить определение оболочки, данное выше. Сейчас наибольшее значение величины $r_i \sqrt{(2 - \gamma) \sin^2 \phi_i + \gamma \cos^2 \phi_i}$ для частиц каждой оболочки должно быть больше, чем наименьшее значение этой величины для частиц внешней относительно данной оболочки. (Из-за анизотропии удерживающего потенциала максимальное значение величины r_i для частиц каждой оболочки может быть намного больше минимального значения r_i для частиц внешней относительно нее оболочки.)

2. При сильной степени анизотропии конфайнмента внутренняя оболочка может иметь два хвоста, направленных вдоль оси y (если $\gamma < 1$, т.е. $\gamma < 2 - \gamma$), или может просто превратиться в прямую линию (см. табл. 4). Если кластер состоит из одной

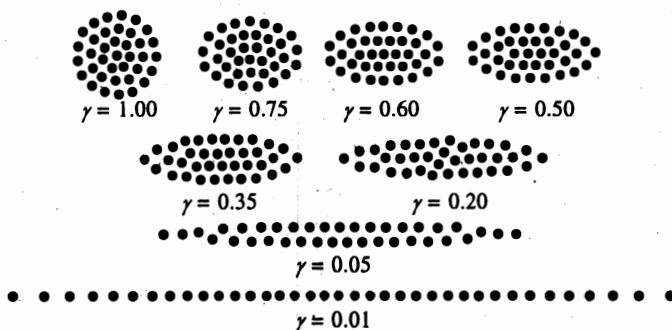


Рис. 12. Конфигурации двумерного кулоновского кластера с $N = 37$ и различными степенями анизотропии γ

оболочки, то после ее превращения в линию его структура не претерпевает никаких изменений (кроме увеличения расстояния между частицами при увеличении степени анизотропии). Кластер становится одномерным. Следует отметить, что плотность одномерного кластера возрастает к его центру.

3. Чем больше степень анизотропии удерживающего потенциала, тем меньше локальных минимумов имеет кластер с данным числом N . В частности, одномерный кластер (двумерный кластер с очень сильной степенью анизотропии) имеет только один минимум — частицы располагаются на прямой линии.

Эффекты, описанные выше, можно проследить в табл. 4.

Далее рассмотрим влияние степени анизотропии удерживающего потенциала на соотношение потенциальных барьеров относительного вращения оболочек и перескока частиц между оболочками. Можно предположить, что в соответствии с искажением круговой симметрии удерживающего потенциала ориентационное плавление исчезает, и плавление становится одностадийным. Для доказательства этой гипотезы мы исследовали барьеры вращения U_2 и перескока U_1 на примере логарифмического и кулоновского кластеров, состоящих из 37 частиц (см. табл. 5). При увеличении степени анизотропии γ отношение U_{rot}/U_j увеличивается (исключение составляет случай логарифмического кластера с $\gamma = 0.89$, когда это отношение уменьшается, что можно объяснить смещением глобального минимума из конфигурации (1,6,12,18), близкой к фрагменту треугольной решетки, в конфигурацию (6,12,19), обладающую ярко выраженной оболочечной структурой и не похожую на фрагмент треугольной решетки) и при некотором γ ($\gamma = 0.50$ для логарифмического кластера и $\gamma = 0.60$ для кулоновского кластера) становится больше единицы для всех пар оболочек (см. табл. 5), что согласуется с нашими предположениями.

С другой стороны, для того чтобы подтвердить, что плавление двумерного кластера имеет одну стадию при сильной анизотропии удерживающего потенциала, мы рассчитали температурные зависимости радиального и относительного углового смещений для логарифмического кластера с $N = 37$ и $\gamma = 0.50$ и для кулоновского кластера с $N = 37$ и $\gamma = 0.60$. Мы обнаружили, что зависимости радиального и относительного угловых смещений относительно ближайших частиц из своей и из соседней оболочек испытывают скачок при одной и той же температуре ($T_c = 0.0045$ для логарифмического кластера и $T_c = 0.0065$ для кулоновского кластера). Следовательно, плавление двумерного кластера с достаточно сильной степенью анизотропии происходит в одну стадию.

Таблица 4

Структура двумерных анизотропных кластеров

Число частиц	Степень анизотропии γ	Числа заполнения оболочек N_1, N_2, \dots	Потенциальная энергия U_{pot}
Кулоновские кластеры			
37	1.00	1,7,12,17	$4.725601 \cdot 10^2$
37	0.90	1,7,13,16	$4.714139 \cdot 10^2$
37	0.75	вогн.7,13,17	$4.651811 \cdot 10^2$
37	0.60	Л5,14,18	$4.528417 \cdot 10^2$
37	0.50	Л4,14,19	$4.403236 \cdot 10^2$
37	0.35	15, 22	$4.124505 \cdot 10^2$
37	0.20	$4 + X3 + X4$, вогн.26	$3.652442 \cdot 10^2$
37	0.05	$35 + 2 * X1$	$2.546257 \cdot 10^2$
37	0.01	Л37	$1.652735 \cdot 10^2$
Логарифмические кластеры			
7	1.00	1, 6	$-7.512442 \cdot 10^{-1}$
7	0.89	1, 6	$-8.891301 \cdot 10^{-1}$
7	0.67	1, 6	$-2.136851 \cdot 10^0$
7	0.50	1, 6	$-4.172614 \cdot 10^0$
7	0.40	1, 6	$-6.029061 \cdot 10^0$
7	0.33	17	$-7.802550 \cdot 10^0$
7	0.18	17	$-1.416698 \cdot 10^1$
11	1.00	3, 8	$-1.709333 \cdot 10^1$
11	0.89	2, 9	$-1.251753 \cdot 10^1$
11	0.67	2, 9	$-1.566826 \cdot 10^1$
11	0.50	11	$-2.082752 \cdot 10^1$
11	0.40	11	$-2.560793 \cdot 10^1$
11	0.33	11	$-2.983309 \cdot 10^1$
11	0.18	Л11	$-4.548732 \cdot 10^1$
37	1.00	1, 6,12,18	$-5.053534 \cdot 10^2$
37	0.89	6,12,19	$-5.095770 \cdot 10^2$
37	0.67	Л4,13,20	$-5.456363 \cdot 10^2$
37	0.50	15, 22	$-6.037877 \cdot 10^2$
37	0.40	$9 + 2 * X2, 24$	$-6.580007 \cdot 10^2$
37	0.33	Л9, 28	$-7.064780 \cdot 10^2$
37	0.18	37	$-8.840317 \cdot 10^2$
37	0.10	$31 + 2 * X3$	$-1.073160 \cdot 10^3$
37	0.06	$17 + 2 * X10$	$-1.237329 \cdot 10^3$
37	0.03	Л37	$-1.468088 \cdot 10^3$

Примечание. Здесь использованы следующие обозначения: Лz — линия, состоящая из z частиц; x * Xu — x-хвосты, каждый из которых состоит из y частиц; «вогн.» означает, что эта оболочка вогнутая.

Таблица 5

Потенциальные барьеры кластеров с $N = 37$ с различными степенями анизотропии удерживающего потенциала

γ	$U_{rot,a}$	$U_{rot,b}$	U_j
Логарифмический кластер			
1.00	$2.31 \cdot 10^{-3}$	$1.60 \cdot 10^{-2}$	$6.60 \cdot 10^{-2}$
0.89	$1.14 \cdot 10^{-4}$	$5.84 \cdot 10^{-2}$	$5.01 \cdot 10^{-2}$
0.67	$1.17 \cdot 10^{-2}$	$6.67 \cdot 10^{-2}$	$3.04 \cdot 10^{-2}$
0.50	$9.47 \cdot 10^{-2}$	—	$4.64 \cdot 10^{-2}$
Кулоновский кластер			
1.00	$6.1 \cdot 10^{-4}$	$6.1 \cdot 10^{-3}$	$5.17 \cdot 10^{-2}$
0.90	$1.96 \cdot 10^{-2}$	$5.73 \cdot 10^{-2}$	$5.12 \cdot 10^{-2}$
0.75	$1.13 \cdot 10^{-1}$	$1.77 \cdot 10^{-2}$	$6.93 \cdot 10^{-2}$
0.60	$8.95 \cdot 10^{-2}$	$1.21 \cdot 10^{-1}$	$6.65 \cdot 10^{-2}$

Примечание. Здесь γ — параметр анизотропии, $U_{rot,a}$ — барьер вращения внешней оболочки относительно средней оболочки, $U_{rot,b}$ — барьер вращения средней оболочки относительно внутренней, U_j — барьер перескока частицы между оболочками.

Следует также отметить, что для очень сильной степени анизотропии конфайнмента, плавления кластера вообще не происходит, так как кластер становится одномерной системой.

8. ПЛАВЛЕНИЕ ТРЕХМЕРНЫХ КУЛОНОВСКИХ КЛАСТЕРОВ

В этом разделе мы изучаем трехмерные кулоновские кластеры в квадратичном удерживающем потенциале. Поскольку удерживающий потенциал является центрально-симметричным, кластеры имеют оболочечную структуру (как и двумерные кластеры) при низких температурах (см., например, [3, 22]). Однако в трехмерном случае при малых значениях N ($N < 100$) оболочки в кластерах имеют форму многогранников, близких к вписанным в сферы. Кроме того, чем больше размерность, тем больше критическое число частиц, при котором образуется новая оболочка (см. табл. 6).

Таблица 6

Образование новых оболочек в кулоновских кластерах

Образование оболочек	$D = 2$	$D = 3$
Образование второй оболочки	$N_{cr} = 6$	$N_{cr} = 13$
Образование третьей оболочки	$N_{cr} = 17$	$N_{cr} = 61$

Существует ряд работ, посвященных структуре трехмерных кулоновских кластеров (см., например, [3, 22, 23]). Однако плавление трехмерных кулоновских кластеров де-

тально не изучалось (предварительные данные были получены в работе одного из авторов [3]). Поэтому возникает интересный вопрос о возможности ориентационного плавления (которое является обычным для двумерного кластера) в трехмерных кластерах.

Таблица 7

Потенциальные барьеры в трехмерных кулоновских кластерах

Барьер	$N = 33$	$N = 48$	$N = 60$	$N = 100$
Барьер относительного вращения оболочек	$1.44 \cdot 10^{-2}$	$3.00 \cdot 10^{-2}$	$7.5 \cdot 10^{-3}$	$3.13 \cdot 10^{-2}$
Барьер перескока частиц между оболочками	$6.42 \cdot 10^{-2}$	$6.74 \cdot 10^{-2}$	$1.18 \cdot 10^{-1}$	$5.71 \cdot 10^{-2}$

Сначала мы нашли конфигурации кластеров в локальных и глобальных минимумах потенциальной энергии для $N = 33, 48, 60, 100$. Далее мы нашли потенциальные барьеры относительного вращения оболочек и перескока частиц между оболочками для данных N . Оказалось, что только для $N = 100$ барьер вращения не сильно отличается от барьера перескока, а для кластеров, состоящих из двух оболочек с $N = 33, 48, 60$, барьер вращения существенно меньше барьера перескока (см. табл. 7). Поэтому ориентационное плавление возможно и в трехмерных мезоскопических кластерах.

Для подтверждения этого факта мы рассчитали плавление трехмерных кулоновских кластеров с $N = 33, 100$. Были исследованы температурные зависимости следующих величин, являющихся аналогами вышеприведенных величин для двумерных систем:

- 1) Полная потенциальная энергия.
- 2) Полное радиальное среднеквадратичное смещение и радиальное среднеквадратичное смещение для каждой оболочки.
- 3) Угловое среднеквадратичное смещение относительно ближайших частиц из данной оболочки:

$$\langle \delta \Omega_{int}^2 \rangle = \frac{1}{N_R} \sum_{i=1}^{N_R} \frac{\langle (\phi_i - \phi_{i_1})^2 + (\theta_i - \theta_{i_1})^2 \rangle - \langle (\phi_i - \phi_{i_1} + \theta_i - \theta_{i_1})^2 \rangle}{\Omega_0^2}. \quad (10)$$

- 4) Угловое среднеквадратичное смещение относительно ближайших частиц соседней оболочки:

$$\langle \delta \Omega_{ext}^2 \rangle = \frac{1}{N_R} \sum_{i=1}^{N_R} \frac{\langle (\phi_i - \phi_{i_2})^2 \rangle + \langle (\theta_i - \theta_{i_2})^2 \rangle - \langle (\phi_i - \phi_{i_2} + \theta_i - \theta_{i_2})^2 \rangle}{\Omega_0^2}. \quad (11)$$

Здесь $2\Omega_0 = 4\pi/N_R$ — среднее угловое расстояние между ближайшими частицами данной оболочки.

Для $N = 33$ температурные зависимости радиального среднеквадратичного смещения для обеих оболочек испытывают скачок одновременно при $T_{c1} = 7 \cdot 10^{-3}$. При дальнейшем увеличении температуры оболочки в кластере размываются и кластер теряет свое упорядоченное строение. Следовательно, $T = T_{c1}$ — температура полного плавления для трехмерного кулоновского мезоскопического кластера с $N = 33$.

Однако температурная зависимость углового среднеквадратичного смещения относительно ближайших частиц соседней оболочки испытывает излом при меньшей температуре $T_{c2} = 4 \cdot 10^{-4}$. Зависимости радиального и углового среднеквадратичных смещений относительно ближайших частиц данной оболочки для обеих оболочек также

испытывают изломы при этой температуре. Таким образом, при $T = T_{c2}$ в трехмерном кластере с $N = 33$ происходит ориентационное плавление, т. е. «объемные» оболочки, сохраняя свою кристалличность, при $T = T_{c2}$ начинают проворачиваться друг относительно друга.

Однако плавление трехмерного кулоновского макрокластера с $N = 100$ происходит в одну стадию. Зависимости радиальных среднеквадратичных смещений для всех оболочек испытывают излом при $T_c = 9.0 \cdot 10^{-3}$, угловых среднеквадратичных смещений относительно ближайших частиц своей и соседней оболочек не имеют особенностей, как функции температуры. Эти результаты подтверждают результаты расчета потенциальных барьеров.

9. ВЫВОДЫ

1. Показано, что двумерные мезоскопические кластеры частиц, отталкивающихся по дипольному, кулоновскому и логарифмическому законам и удерживаемых внешним квадратичным потенциалом, имеют оболочечную структуру при низких температурах. Найдены конфигурации системы в локальных и глобальных минимумах потенциальной энергии. При увеличении числа частиц в кластерах зарождается фрагмент треугольной решетки. Чем более дальнедействующим является потенциал взаимодействия между частицами, тем большее число частиц необходимо для образования треугольной решетки. Рассматриваются следующие физические реализации: электроны на поверхности жидкого гелия, электроны в квантовой точке, частицы в слое магнитной жидкости, вихри в маленьком сверхпроводящем островке или во вращающемся сосуде со сверхтекучим гелием, а также электроны в полупроводниковой наноструктуре, окруженной средой с малой диэлектрической проницаемостью, и т.п.

2. Детально исследованы температурные зависимости потенциальной энергии, среднеквадратичного радиального и углового смещений, функции радиального и углового распределений частиц и распределение частиц по локальным минимумам потенциальной энергии. В результате исследовано плавление системы. Показано, что в дипольных макрокластерах плавление происходит в одну стадию. В макрокластерах с более дальнедействующим потенциалом взаимодействия и во всех мезоскопических кластерах (исключение составляют магические микрокластеры со структурой треугольной решетки) плавление идет в две стадии: при меньших температурах происходит ориентационное плавление — из замороженной фазы в состояние с вращательной переориентацией «кристаллических» оболочек друг относительно друга; затем — переход с исчезновением радиального порядка. В кулоновских и логарифмических макрокластерах ориентационное плавление происходит только для внешних пар оболочек. Отметим, что ориентационное плавление возможно и в соответствующих кристаллах с примесями. Тогда примесь играет роль удерживающего потенциала, и весь кристалл в некотором смысле разбивается на кластеры, так что при повышении температуры происходит ориентационное плавление вокруг примесей.

3. Причина ориентационного плавления заключается в несоизмеримости (малости) потенциального барьера относительно вращения оболочек по сравнению с барьером относительно перескока частицы из одной оболочки в другую (в мезоскопических кластерах для всех пар оболочек и в макрокластерах с кулоновским и логарифмическим законами взаимодействия для внешних пар оболочек). При сравнении температур ис-

чезновения потенциальных барьеров с соответствующими им температурами плавления видно, что температура плавления ниже температуры исчезновения соответствующего ей барьера примерно в 5–15 раз. Предложен способ предсказания характера плавления в оболочечных кластерах с помощью сравнения потенциальных барьеров вращения оболочек и перескока частиц между оболочками. Температуры плавления можно оценить с помощью температур исчезновения потенциальных барьеров.

4. Мы исследовали изменение структуры кластеров при различной степени анизотропии удерживающего потенциала. При малой степени анизотропии глобальные минимумы смещаются в конфигурации с меньшим числом частиц во внутренних оболочках и в конфигурации с меньшим числом оболочек. При сильной степени анизотропии удерживающего потенциала внутренняя оболочка может иметь два хвоста, направленных вдоль оси, или даже может выродиться в прямую линию. Если кластер состоит из одной оболочки, то при вырождении в прямую линию кластер становится одномерным. При увеличении степени анизотропии барьеры вращения увеличиваются по отношению к барьерам перескока и при некоторой степени анизотропии ориентационное плавление исчезает и плавление становится одностадийным.

5. Чем больше размерность кластера, тем больше критическое число частиц, при котором образуется новая оболочка. Ориентационное плавление имеет место также в трехмерных кулоновских мезоскопических кластерах. Однако при больших значениях N ориентационное плавление исчезает и плавление трехмерных макрокластеров одностадийно.

Работа была поддержана INTAS, Российским фондом фундаментальных исследований и программой «Поверхностные атомные структуры».

Литература

1. Ю. Е. Лозовик, УФН 153, 356 (1987).
2. Ю. Е. Лозовик, Е. А. Ракоч, Письма в ЖЭТФ 65, 268 (1997); Yu. E. Lozovik and E. A. Rakoch, Phys. Rev. B 57, 1214 (1998).
3. Yu. E. Lozovik and V. A. Mandelshtam, Phys. Lett. A 145, 269 (1990); F. M. Peeters, V. A. Schweigert, and V. M. Bedanov, Physica B 212, 237 (1995); Yu. E. Lozovik and E. A. Rakoch, Phys. Lett. A 235, 55 (1997).
4. М. Е. Грачева, В. А. Кашурников, И. А. Руднев, Письма в ЖЭТФ 66, 269 (1997).
5. А. А. Абрикосов, ЖЭТФ 32, 1442 (1957).
6. G. Blatter, M. V. Feigel'man, V. B. Geshkenbein et al., Rev. Mod. Phys. 66, 1125 (1994).
7. Л. В. Келдыш, Письма в ЖЭТФ 29, 716 (1979).
8. J. J. Thomson, Phil. Mag. S 6, 7, 238 (1904).
9. P. Leiderer, W. Ebner, and V. B. Shikin, Surf. Sci. 113, 405 (1987).
10. M. A. Read and W. P. Kirk, *Nanostructure Physics and Fabrication*, Academic Press, Boston (1989).
11. Ю. Е. Лозовик, В. И. Юдсон, Письма в ЖЭТФ 22, 556 (1975); S. M. Apenko, A. V. Kluchnik, and Yu. E. Lozovik, Sol. St. Comm. 36, 485 (1980); Б. А. Абдулаев, Ю. Е. Лозовик, ФТТ 24, 2663 (1982).
12. Ю. Е. Лозовик, В. И. Юдсон, ЖЭТФ 71, 738 (1976); Ю. Е. Лозовик, О. Л. Берман, Письма в ЖЭТФ 64, 750 (1996); Yu. E. Lozovik and O. L. Berman, Phys. Scripta 58, 86 (1998).
13. D. Yoshioka and H. Fukuyama, J. Phys. Soc. Jap. 45, 137 (1978).
14. L. Brey, Phys. Rev. Lett. 65, 903 (1990).

15. D. Yoshioka and A. H. MacDonald, *J. Phys. Soc. Jap.* **59**, 4211 (1990).
16. X. M. Chen and J. J. Quinn, *Phys. Rev. Lett.* **67**, 895 (1991).
17. A. T. Skjeltorp, *Phys. Rev. Lett.* **51**, 2306 (1983).
18. Yu. E. Lozovik and V. A. Mandelshtam, *Phys. Lett. A* **165**, 469 (1992).
19. L. J. Campbell and R. M. Ziff, *Phys. Rev. B* **20**, 1886 (1979).
20. G. E. Volovik and U. Parts, *Письма в ЖЭТФ* **58**, 826 (1993).
21. В. М. Беданов, Г. В. Гадияк, Ю. Е. Лозовик, *ЖЭТФ* **88**, 1622 (1985).
22. R. M. Hasse and V. V. Avilov, *Phys. Rev. A* **44**, 4506 (1991).
23. K. Tsuruta and S. Ichimaru, *Phys. Rev. A* **48**, 1339 (1993).