

# КРИСТАЛЛИЗАЦИЯ И ПЛАВЛЕНИЕ СИСТЕМЫ ЗАРЯДОВ В КЛАСТЕРЕ ЖИДКОГО ГЕЛИЯ

*А. М. Лившиц\*, Ю. Е. Лозовик*

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

Поступила в редакцию 26 января 2007 г.

Исследована система одноименных (положительных либо отрицательных) зарядов, образующих «снежки» либо «пузырьки» в трехмерном кластере жидкого гелия. Заряды удерживаются внутри кластера благодаря «потенциалу изображения», возникающему из-за поляризации жидкого гелия. Рассмотрена стабильность многозарядного гелиевого кластера. С использованием компьютерного моделирования исследованы кристаллизация и плавление системы зарядов в зависимости от безразмерного параметра  $T^* = k_B T \epsilon R / e^2$ , где  $k_B$  — постоянная Больцмана,  $T$  — температура,  $\epsilon$  — диэлектрическая проницаемость жидкого гелия,  $R$  — радиус кластера,  $e$  — величина единичного заряда. Для равновесных конфигураций зарядов найдены различные характеристики, в том числе группы симметрии и моменты, при числе зарядов в кластере  $N = 1-100$ . При малых  $N \sim 10$  для описания структуры равновесных конфигураций зарядов может быть использована модель Томсона последовательного заполнения «поясов» из зарядов. При больших  $N$  более адекватным является описание структуры, сформированной зарядами, при помощи представления о квазидвумерной «замкнутой треугольной решетке» с топологическими дефектами. Формально такое описание справедливо, начиная с  $N = 4$ . Описано плавление «решетки» зарядов. Ряд выводов работы может быть обобщен на кластеры других благородных газов.

PACS: 61.46.Bc, 36.40.Wa, 67.40.Jg, 64.70.Nd

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Гелиевый кластер является уникальной системой. Благодаря малой массе и слабости межатомного взаимодействия, гелий, находясь при давлении своего насыщенного пара, не затвердевает при охлаждении. Таким образом, получаемые экспериментально гелиевые кластеры являются жидкими в отличие от прочих молекулярных и атомных кластеров. Более того, согласно теоретическим оценкам [1, 2], гелиевые кластеры из нескольких десятков и более атомов при  $T \lesssim 1.9$  К должны обладать сверхтекучими свойствами. Хотя большая часть явлений, относящихся к сверхтекучему состоянию, принципиально связана с макроскопичностью системы, были предложены эксперименты [3, 4], позволяющие обнаружить сверхтекучее состояние в конечной системе. Таким образом, гелиевый кластер может быть использован как объект для изучения изменения свойств находящейся в сверхтекучем со-

стоянии системы при уменьшении ее размеров. Отметим в этой связи, что гелиевые кластеры экспериментально получены в большом интервале размеров, от небольших кластеров из нескольких атомов [5, 6] до «капель» из  $10^3-10^7$  атомов [7]. Внутренняя температура гелиевых кластеров, получаемых расширением сверхзвукового пучка атомов гелия в вакуум, достигает, согласно теоретическим оценкам [8] и экспериментальным измерениям [9],  $T \approx 0.3-0.4$  К.

Большинство экспериментов по гелиевому кластеру включает возбуждение и ионизацию [10] кластера электронным пучком с последующим анализом продуктов в масс-спектрометре. Для исследования внутреннего состояния нейтрального кластера может также использоваться исследование свойств нейтральных атомов или молекул, внедренных в кластер [7, 9, 11].

Проблема двумерных заряженных систем в гелии подробно рассмотрена в книге [12].

Интересно рассмотреть структуру и другие свойства многозарядного гелиевого кластера. Заряжен-

\*E-mail: livshits@isan.troitsk.ru

ные частицы в плотном гелии, твердом или жидком, представляют собой различные сложные комплексы, состоящие из собственно заряженной частицы и окружающей ее «шубы» — области гелия, взаимодействующей с зарядом. Поляризационное взаимодействие положительного заряда (катиона) с окружающим гелием приводит к образованию около заряда области повышенной плотности. В центре этой области находится сфера затвердевшего гелия [13], так называемый снежок (snowball). Радиус затвердевания составляет примерно  $R_s \approx (6-7) \cdot 10^{-8}$  см. В указанной модели эффективная масса  $M_s$  катиона может быть представлена как сумма массы твердого ядра радиуса  $R_s$ , массы от избыточной плотности жидкости вокруг ядра и присоединенной массы. Оценка  $M_s$  дает  $75m_4$ , где  $m_4$  — масса атома  $^4\text{He}$ . Определяемая с помощью резонансной методики [14] величина  $M_s \approx (45 \pm 2)m_4$  [15, 16] немного меньше, чем теоретические оценки  $M_s$  [13, 17].

Электрон, введенный в жидкий гелий, создает в гелии пузырек, который локализуется внутри сферической полости [18, 19]. Образование пузырьков становится возможным благодаря одновременному влиянию ряда факторов. С одной стороны, отдельный атом гелия, являясь устойчивой квантовой системой, не присоединяет к себе избыточного электрона на расстояниях порядка боровской орбиты. По этой причине свободный электрон, искусственно введенный в плотный гелий и вынужденный двигаться на межатомных расстояниях вблизи отталкивающих его отдельных атомов, обладает большой энергией  $V_0$  нулевых колебаний. С другой стороны, поверхностное натяжение на границе жидкость–пар жидкого гелия очень мало. В результате полная энергия  $W$  образования пузырька оказывается значительно меньшей, чем  $V_0$ , так что электрону выгодно локализоваться, образуя пузырек (bubble). Резонансное измерение эффективной массы пузырька дает значение  $M_b \approx (243 \pm 5)m_4$  [16], что соответствует радиусу пузырька  $R_b \approx (17.4 \pm 0.2) \cdot 10^{-8}$  см.

Время жизни введенного в жидкий гелий электрона в делокализованном состоянии (т. е. в состоянии до возникновения пузырька) составляет не более чем  $10^{-8}$  с [20].

Хотя имелись основания предполагать, что пузырьки неустойчивы относительно процесса туннелирования содержащихся в них электронов в вакуум [19, 21], при малых температурах  $T \approx 1$  К скорость туннелирования из заселенных при данной температуре возбужденных состояний становится чрезвычайно малой [22]. Время туннелирования электрона достигает 1–100 с, что значительно боль-

ше характерного времени (порядка  $10^{-2}$  с) существования гелиевого кластера в вакуумной камере. В работе [23] рассматриваются различные механизмы выхода электрона из пузырька, находящегося вблизи поверхности жидкого гелия. В частности, найдено, что при расстоянии  $d_0 \approx 23 \text{ \AA}$  (и более) между электроном и поверхностью пузырек стабилен, а при меньших расстояниях пузырек разрушается. Потенциальный барьер тепловой эмиссии электрона из пузырька составляет  $\Phi/k_B \approx 38$  К, где  $k_B$  — постоянная Больцмана, однако вблизи поверхности (на расстояниях, меньших  $d_0$ ) потенциальная энергия электрона сильно отклоняется от своего идеального значения, что и приводит к увеличению скорости распада пузырька [23].

При введении в жидкий гелий отрицательного иона (например, иона  $\text{O}_2^-$ ) из-за конкуренции обменного отталкивания и поляризационного притяжения могут возникать сложные комплексы в виде полости, окруженной сферическим слоем плотного гелия [24].

В работе рассматриваются образование и распад «решетки» из заряженных частиц внутри гелиевого кластера. Отметим, что данный объект (многозарядный гелиевый кластер) может быть использован для исследования сверхтекучести в мезоскопической системе.

## 2. МОДЕЛЬ

### 2.1. «Потенциал изображения»

Для моделирования кристаллизации и плавления системы зарядов (снежков или пузырьков) в гелиевом кластере используется следующее приближение. Гелиевый кластер рассматривается как жидкая сферическая капля с диэлектрической проницаемостью жидкого гелия ( $\epsilon = 1.055$  [10]). Характерное расстояние между зарядами в кластере  $\langle \rho_{ij} \rangle \sim RN^{-1/3}$ , где  $N$  — число зарядов в кластере, а  $R$  — радиус кластера. Квантовыми эффектами для системы зарядов можно пренебречь при  $k_B T \gg \hbar^2 N^{5/3} / m^* R^2$ , где  $m^*$  и  $e$  — соответственно эффективная масса и величина единичного заряда. Кроме того, мы полагаем, что эффективный боровский радиус для зарядов в гелии,  $a^* = \hbar^2 \epsilon / m^* e^2$ , значительно меньше, чем характерное расстояние  $\langle \rho_{ij} \rangle$  между зарядами. Точечные, в принятом приближении, кулоновские заряды удерживаются внутри кластера за счет «сил изображения», обусловленных поляризацией диэлектрической среды.

Покажем, каким образом поляризация приво-

дит к возникновению удерживающего потенциала. Пусть внутри диэлектрического шара радиуса  $R$  с диэлектрической проницаемостью  $\epsilon$  на расстоянии  $r$  от центра шара расположен точечный заряд  $e$ . Решим уравнение Лапласа

$$\Delta\phi = 0 \tag{1}$$

с граничными условиями

$$\phi^{in} = \phi^{out}, \quad \epsilon\nabla\phi^{in} = \nabla\phi^{out}, \tag{2}$$

где  $\phi^{in}$  и  $\phi^{out}$  — потенциалы соответственно внутри и снаружи шара. (Метод решения подобных задач см., например, в книге [25].) Разложив потенциал  $\phi(\xi)$  по сферическим функциям, запишем выражение для потенциала, создаваемого зарядом внутри сферы ( $|\xi| < R$ ):

$$\phi(\xi) = \frac{e}{\epsilon\rho} + \frac{(\epsilon-1)e}{\epsilon R} \times \sum_{n=0}^{\infty} \frac{n+1}{n(\epsilon+1)+1} \frac{r^n}{R^{2n}} |\xi|^n P_n(\cos\theta) + \phi_0, \tag{3}$$

где  $\rho = |\mathbf{r} - \xi|$  — расстояние между точкой наблюдения  $\xi$  и зарядом,  $P_n(\cos\theta)$  — полиномы Лежандра,  $\theta = \widehat{(\mathbf{r}, \xi)}$  — угол между радиусами-векторами, проведенными в точку наблюдения и к заряду,  $\phi_0$  — константа. Перейдя от потенциала к потенциальной энергии, для энергии взаимодействия заряда с его «изображением» получим

$$U(r) = \frac{(\epsilon-1)e^2}{\epsilon R} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{n+1}{n(\epsilon+1)+1} \left(\frac{r}{R}\right)^{2n} + U_0. \tag{4}$$

После преобразований находим

$$U(r) = \frac{\alpha e^2}{\epsilon R} \times \left[ \frac{R^2}{R^2-r^2} + \frac{\epsilon R}{r} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(1+\epsilon)n+1} \left(\frac{r}{R}\right)^{2n+1} \right] + U_0, \tag{5}$$

где  $\alpha = (\epsilon-1)/(\epsilon+1)$  — малый параметр ( $\alpha \approx 0.027$  для He). Поскольку  $\epsilon \approx 1$ , воспользуемся формулой для суммы

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^{2n+1}}{2n+1} = \frac{1}{2} \ln \left| \frac{1+x}{1-x} \right| \tag{6}$$

и получим окончательно

$$U(r) = \frac{\alpha e^2}{\epsilon R} \left[ \frac{R^2}{R^2-r^2} + \frac{\epsilon R}{2r} \ln \left| \frac{R+r}{R-r} \right| \right] + U_0. \tag{7}$$

Выберем значение постоянной  $U_0$  таким образом, чтобы при  $r/R \rightarrow 1$  формула (7) совпадала с выражением для энергии  $E_f$  заряда, находящегося на расстоянии  $d$  от бесконечной плоской границы, отделяющей диэлектрическую среду от вакуума,

$$E_f(d) = \frac{\alpha e^2}{2\epsilon d}, \tag{8}$$

т.е. формально положим  $U_0 = 0$ . Вблизи центра кластера (при  $r/R \rightarrow 0$ ) возникает слабый (из-за малости параметра  $\alpha$ ) квадратичный удерживающий потенциал

$$U(r) = \frac{\alpha e^2}{\epsilon R} \left[ 1 + \epsilon + B \left(\frac{r}{R}\right)^2 \right], \tag{9}$$

где постоянная  $B = 1 + \epsilon/3$ . Таким образом, энергия поляризации кластера, обусловленная введением единичного заряда в центр кластера, в данном приближении есть

$$U(0) = (\epsilon-1) \frac{e^2}{\epsilon R}. \tag{10}$$

Теперь рассмотрим систему из  $N$  точечных зарядов  $\{\mathbf{r}_i, e\}$ , находящихся внутри диэлектрического шара радиуса  $R$  с диэлектрической проницаемостью  $\epsilon$ . Потенциал, создаваемый системой зарядов внутри диэлектрического шара, может быть записан в виде суммы

$$\phi(\xi) = \sum_{i=1}^N \frac{e}{\epsilon\rho_i} + \frac{(\epsilon-1)e}{\epsilon} \sum_{i=1}^N \sum_{n=0}^{\infty} \frac{n+1}{n(\epsilon+1)+1} \times \frac{|\mathbf{r}_i|^n}{R^{2n+1}} |\xi|^n P_n(\cos\theta_i) + \phi_0, \tag{11}$$

где  $\rho_i = |\mathbf{r}_i - \xi|$  — расстояние между точкой наблюдения  $\xi$  и  $i$ -м зарядом,  $P_n(\cos\theta_i)$  — полиномы Лежандра,  $\theta_i = \widehat{(\mathbf{r}_i, \xi)}$  — угол между точкой наблюдения и  $i$ -м зарядом.

В общем случае задача не решается аналитически и для расчета потенциальной энергии каждой конфигурации необходимо численно решать уравнение Лапласа для  $N$  точечных зарядов с граничными условиями. Мы, однако, можем сделать существенное упрощение, воспользовавшись близостью значения диэлектрической проницаемости  $\epsilon$  к единице. Поскольку эффективные «заряды изображений» содержат малый (при  $\epsilon \approx 1$ ) множитель  $\alpha$ , энергия взаимодействия зарядов с изображениями (своими и чужими), вообще говоря, всегда меньше энергии взаимодействия зарядов между собой (см. также [26]). Однако так как заряды в стационарном состоянии

находятся близко к границе кластера (что будет видно из дальнейшего), и, таким образом, расстояние от заряда до его собственного изображения весьма мало, взаимодействия зарядов с собственными изображениями будут учитываться. Поправку  $E_{ext}^{(2)}$ , соответствующую взаимодействию зарядов с чужими изображениями, можно оценить по формуле

$$E_{ext}^{(2)} \sim \frac{\langle d \rangle}{\sqrt{\langle \rho_{ij} \rangle^2 + \langle d \rangle^2}} E_{ext}^{(1)}, \quad (12)$$

где  $\langle d \rangle$  — среднее расстояние от заряда до границы кластера,  $\langle \rho_{ij} \rangle$  — среднее расстояние между зарядами, а  $E_{ext}^{(1)}$  соответствует взаимодействию зарядов с собственными изображениями. Проведенный компьютерный расчет (см. ниже) показывает, что для всех значений  $N \leq 100$  поправкой  $E_{ext}^{(2)}$  можно пренебречь. Таким образом, потенциальная энергия системы зарядов в гелиевом кластере может быть записана в виде

$$U^{tot} = \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N \frac{e^2}{\epsilon \rho_{ij}} + \sum_{i=1}^N U^{ext}(|\mathbf{r}_i|), \quad (13)$$

где  $\rho_{ij} = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$  — расстояние между  $i$ -м и  $j$ -м зарядами, а потенциальная энергия  $U^{ext}(|\mathbf{r}_i|)$  взаимодействия  $i$ -го заряда с его изображением определяется формулой (7). При рассмотрении процессов кристаллизации и плавления подсистемы зарядов мы можем не учитывать изменение энергии поверхностного натяжения капли. В задаче о стабильности заряженного гелиевого кластера (п. 2.3) энергия поверхностного натяжения должна быть учтена.

Итак, в предложенной модели заряженного гелиевого кластера потенциальная энергия системы зарядов внутри диэлектрического шара вычисляется в следующем приближении: 1) точно учитываются все парные кулоновские взаимодействия между зарядами; 2) взаимодействие каждого заряда с границей диэлектрика учитывается лишь как взаимодействие с собственным изображением (неучтенные вклады в потенциальную энергию соответствуют более слабому взаимодействию зарядов с чужими изображениями).

## 2.2. Кристаллизация кластера зарядов

Как известно (см., например, работы [26–28]), кластеры кулоновских зарядов кристаллизуются в различных удерживающих потенциалах, образуя более или менее ярко выраженные оболочки из зарядов. Предположив, что и в данном потенциале (по-

тенциале изображения) заряды также кристаллизуются с образованием оболочек, сделаем соответствующую оценку. Для случая одной оболочки относительное расстояние  $a_n$  от оболочки зарядов до поверхности кластера может быть вычислено из условия равновесия сил, действующих на отдельный заряд из оболочки. С одной стороны, это силы кулоновского отталкивания, которые мы рассчитываем в приближении равномерно размазанного заряда, с другой — удерживающие силы изображения:

$$\frac{e^2(N-1)}{2\epsilon R^2(1-a_n)^2} = \frac{\alpha e^2}{4\epsilon R^2 a_n^2}. \quad (14)$$

Из (14) следует

$$a_n = \frac{\sqrt{2\alpha(N-1)} - \alpha}{2(N-1) - \alpha} \approx \sqrt{\frac{\alpha}{2(N-1)}}. \quad (15)$$

Так, например, для двух зарядов имеем  $a_2 \approx 0.104$ , для пятидесяти  $a_{50} \approx 0.016$  и для ста  $a_{100} \approx 0.012$ . Как показывает компьютерный расчет (см. ниже), данная оценка весьма точна.

Сравним ситуацию, когда все  $N$  зарядов находятся вблизи поверхности кластера (внутри единственной оболочки), с ситуацией, в которой один заряд находится в центре кластера и  $N-1$  зарядов находятся во второй оболочке. Для оценки будем считать, что энергия поляризации, т. е. энергия взаимодействия зарядов с изображениями, пренебрежимо мала по сравнению с прямым кулоновским взаимодействием и заряды в обоих случаях располагаются на поверхности сферы радиуса  $R$ . Воспользуемся приближением равномерно размазанного заряда. Для удобства записи перейдем к единицам, в которых

$$\frac{e^2}{\epsilon R} = 1. \quad (16)$$

Энергия  $E_{N,0}^{sph}$  кластера в случае, когда все заряды находятся на поверхности сферы, в новых единицах равна  $N^2/2$ . Энергия кластера с одним зарядом в центре равна

$$E_{N-1,1}^{sph} = (N-1)^2/2 + (N-1).$$

Таким образом, при всех  $N$  выполняется соотношение

$$E_{N,0}^{sph} = E_{N-1,1}^{sph} + 1/2,$$

т. е. в приближении равномерно размазанного заряда при всех значениях  $N$  конфигурация с одним зарядом в центре кластера энергетически выигрышна.

В то же время из теоремы Ирншоу следует, что точечные заряды (при любом числе зарядов  $N$ ), помещенные в трехмерный «потенциальный ящик», в равновесии должны располагаться на поверхности. Рассмотрим несколько частных конфигураций с точечными зарядами. При  $N = 3$  экстремуму энергии данной системы соответствуют, во-первых, конфигурация, в которой заряды расположены на поверхности сферы в вершинах равностороннего треугольника в плоскости, проходящей через центр сферы, и, во-вторых, конфигурация, в которой заряды расположены на одной оси: два на поверхности сферы и один в ее центре. Имеем соответственно

$$E_{3,0}^{pnt} = \frac{1}{\sqrt{3}} + \frac{1}{\sqrt{3}} + \frac{1}{\sqrt{3}} \approx 1.7, \quad E_{2,1}^{pnt} = 1 + 1 + \frac{1}{2} = 2.5.$$

Таким образом, конфигурация с зарядом в центре невыгодна.

Аналогично, при  $N = 5$  заряды располагаются либо в вершинах вписанной в сферу бипирамиды с треугольным основанием, либо четыре заряда из пяти располагаются в вершинах тетраэдра, вписанного в сферу, а пятый заряд находится в центре сферы. В первом случае длина основания бипирамиды равна  $\sqrt{3}$ , длина бокового ребра равна  $\sqrt{2}$ . Для энергии получим

$$E_{5,0}^{pnt} = \frac{6}{\sqrt{2}} + \frac{3}{\sqrt{3}} + \frac{1}{2} \approx 6.5.$$

Во втором случае длина ребра тетраэдра равна  $4/\sqrt{6}$  и, следовательно, энергия системы

$$E_{4,1}^{pnt} = \frac{6\sqrt{6}}{4} + 4 \approx 7.7.$$

Таким образом, в данном случае конфигурация с зарядом в центре также энергетически невыгодна.

Таким образом, приближение равномерно размазанного по поверхности сферы заряда не дает в данном случае удовлетворительного результата. Компьютерный расчет конфигураций зарядов будет представлен в п. 3.1.

### 2.3. Стабильность заряженного кластера

При числе зарядов в гелиевом кластере  $2 \leq N \leq 100$  все заряды расположены в непосредственной близости от поверхности кластера (результаты компьютерного расчета для нулевой температуры см. в п. 3.1, для конечной температуры — в п. 4.2). Таким образом, к многозарядному гелиевому кластеру (в приближении равномерно

размазанного по поверхности сферы заряда) применим критерий Рэлея [29] устойчивости заряженной жидкой капли. Заряженная капля, имеющая радиус  $R$ , несущая заряд  $Q$  (в нашем случае  $Q = eN$ ), устойчива относительно колебаний поверхности при

$$R > \sqrt[3]{\frac{Q^2}{16\pi\epsilon\sigma}} \quad (17)$$

где  $\epsilon$  — диэлектрическая проницаемость, а  $\sigma$  — поверхностное натяжение вещества.

Критерий (17) применим как к положительно, так и к отрицательно заряженным кластерам. Однако в последнем случае возникает дополнительное условие устойчивости системы. Отрицательный ион в гелии представляет собой пузырек пара, внутри которого локализован электрон. Когда такой пузырек находится вблизи поверхности, он (из-за значительных вблизи границы колебаний потенциальной энергии электрона) нестабилен и разрушается [23]. Получаем критерий устойчивости

$$R^- > \frac{d_0}{a_n}, \quad (18)$$

где  $a_n$  — расстояние (в безразмерных единицах) от зарядов до поверхности кластера, а  $d_0$  — минимальное расстояние между электроном и поверхностью, при котором заряженный пузырек стабилен. Согласно (15),

$$a_n \approx \sqrt{\frac{\alpha}{2(N-1)}}.$$

В работе [23] определено значение  $d_0 \approx 23 \text{ \AA}$ . Таким образом, имеем оценку для критического радиуса отрицательно заряженного гелиевого кластера:

$$R_0^- [\text{ \AA}] \approx d_0 \sqrt{\frac{2(N-1)}{\alpha}} \approx 200\sqrt{N-1}. \quad (19)$$

### 3. КОМПЬЮТЕРНЫЙ РАСЧЕТ. НУЛЕВАЯ ТЕМПЕРАТУРА

В расчетах используются безразмерные единицы координат  $\tilde{\mathbf{r}}$ , энергии  $\tilde{U}$  и времени  $\tilde{t}$ :

$$\tilde{\mathbf{r}} = \frac{\mathbf{r}}{R}, \quad \tilde{U} = U \frac{\epsilon R}{e^2}, \quad \tilde{t} = t \sqrt{\frac{e^2}{m\epsilon R^3}}. \quad (20)$$

Для поиска минимумов потенциальной энергии применяется метод градиентного спуска с переменной величиной шага [30]:

$$\mathbf{r}_i \rightarrow \mathbf{r}'_i = \mathbf{r}_i + \gamma \mathbf{F}_i, \quad (21)$$

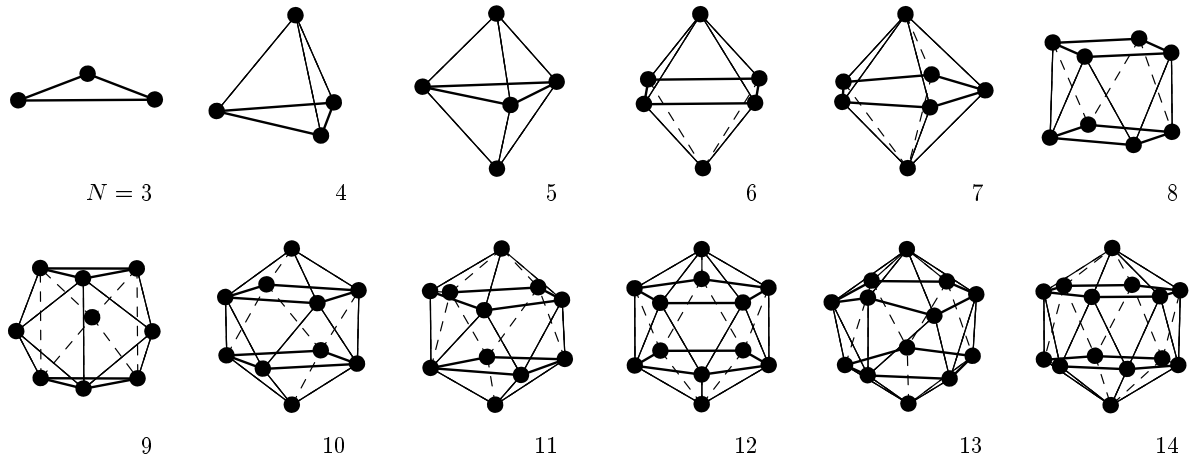


Рис. 1. Равновесные конфигурации зарядов в гелиевом кластере в диапазоне  $N = 3-14$

где  $\mathbf{F}_i$  — сила, действующая на  $i$ -ю частицу. Если на каком-либо шаге энергия (13) системы возросла, шаг не принимается и величина  $\gamma$  уменьшается вдвое. Поскольку система может иметь несколько локальных минимумов, при каждом  $N$  мы делаем 300 независимых спусков со случайным начальным расположением зарядов внутри сферы. В отдельных случаях, если симметрия системы позволяла предположить возможный минимум, проводились спуски из конфигураций, близких к ожидаемым. Поскольку схема (21) может в принципе сойтись к седловой точке энергии, для проверки устойчивости полученной конфигурации  $\{\mathbf{r}^0\}$  затем делается 500 случайных шагов:  $\mathbf{r}_i \rightarrow \mathbf{r}'_i = \mathbf{r}_i + \mathbf{h}_i$ , где  $\mathbf{h}_i$  — случайная величина с абсолютным значением  $h_i \leq 0.005$ . Если на каком-либо шаге  $t$  энергия системы понизилась,  $E(\{\mathbf{r}_i\}^t) < E(\{\mathbf{r}_i\}^0)$ , то рассматриваемая конфигурация не является минимумом и мы повторяем градиентный спуск из точки  $\{\mathbf{r}_i\}^t$ . Из полученных трехсот конфигураций выбираются локальные и глобальный (обладающий наименьшей энергией) минимумы. Отметим, что физическим аналогом градиентного спуска в данном случае является так называемая аристотелева динамика: скорости частиц пропорциональны действующим на них силам.

**3.1. Равновесные конфигурации зарядов. Результаты. Оболочка зарядов**

Если внутри кластера находится один заряд, то этот последний благодаря потенциалу изображения (7) локализуется в центре кластера. При большем числе зарядов,  $2 \leq N \leq 100$ , в кластере, все заряды находятся в узком шаровом слое вблизи по-

верхности кластера, т.е. образуют одну оболочку. На рис. 1 и 2 представлены типичные конфигурации зарядов.

Более того, при нагреве кластера заряды остаются внутри шарового слоя вблизи поверхности в большом интервале температур, в том числе и при температурах, при которых упорядоченной структуры зарядов уже не существует (см. ниже). С увеличением температуры ширина оболочки зарядов незначительно увеличивается. Интересно сравнить данную систему с другими подобными системами. Так, в кластерах из одноименных ионов в ловушках Поля и Пеннинга (с эффективным квадратичным удерживающим потенциалом) при  $N = 100$  имеется уже несколько оболочек зарядов [27].

Можно было бы ожидать, что при прочих равных условиях конфигурации с более высокой симметрией энергетически более выгодны. Однако, как оказывается, это не всегда верно. Например, в системе с  $N = 92$  существует локальный минимум с точечной группой симметрии  $I_h$ , но локальный минимум с симметрией  $C_2$  глубже, а глобальный минимум описывается точечной группой симметрии  $D_2$ . Кроме того, определенные конфигурации с высокой симметрией, но содержащие нетреугольные грани, вообще являются неустойчивыми — соответствуют седловым точкам потенциальной энергии (см. ниже).

В рассматриваемом диапазоне значений  $N$  были найдены стабильные конфигурации практически всех существующих в природе групп симметрий. В табл. 1 приведены, в частности, группы симметрий и дипольные моменты  $d = \left| \sum_i^N \mathbf{r}_i \right|$  равновесных си-

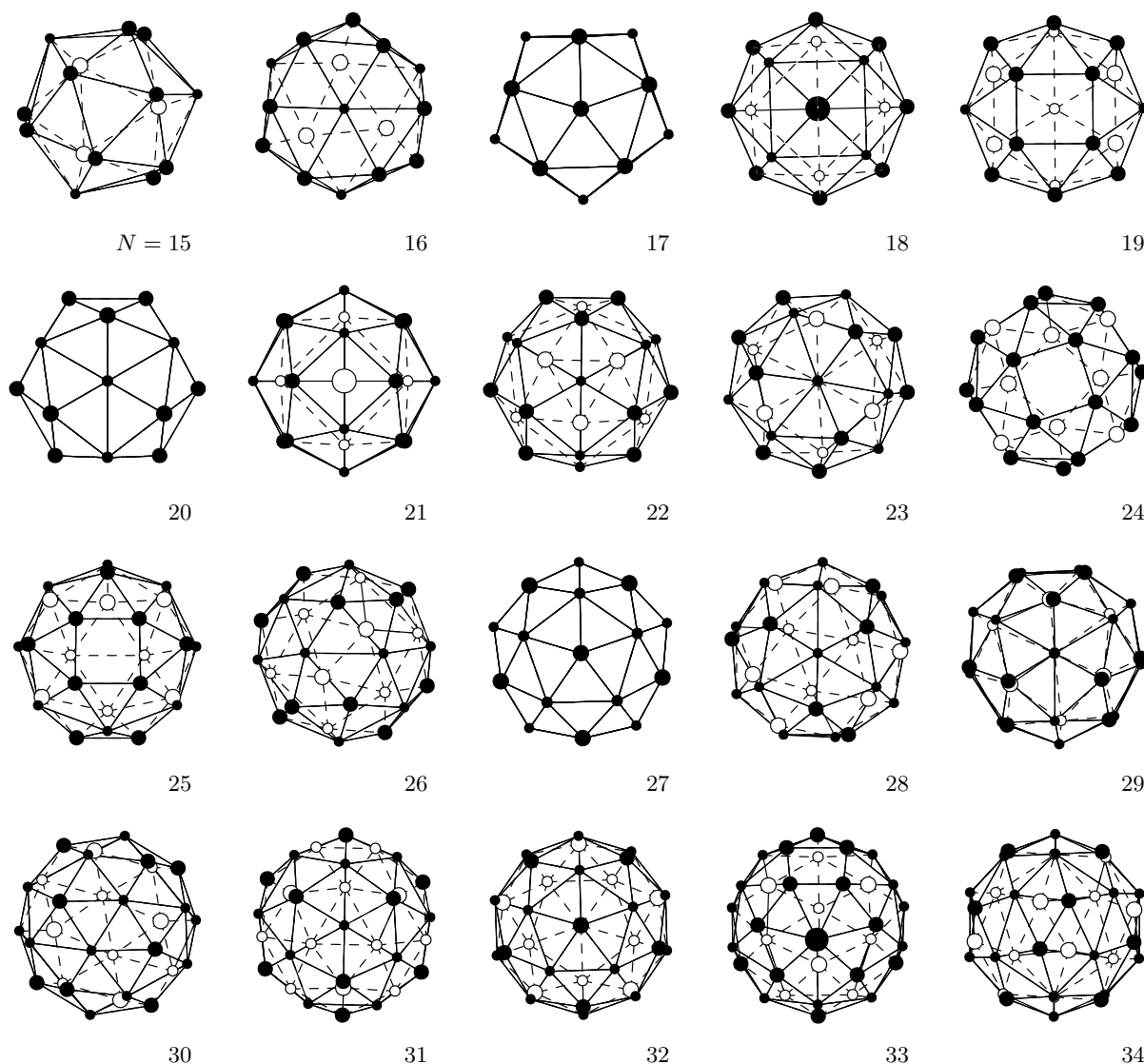


Рис. 2. Равновесные конфигурации зарядов в гелиевом кластере в диапазоне  $N = 15-34$

стем. Конфигурации, имеющие симметрию, более высокую чем  $C_n$ , обладают нулевым дипольным моментом. Конфигурации зарядов, группа симметрии которых не включает плоскостей симметрии, существуют в виде двух энантиоморфных структур («правой» и «левой»), описываемых одной и той же группой симметрии и имеющих одинаковую энергию. Так, энантиоморфные глобальные минимумы возникают в рассматриваемой системе при  $N = 15, 16, 23, 24, 26, 28, \dots$  (см. табл. 1).

Отношение  $E_{ext}^{(2)}/E_{ext}^{(1)}$  (см. формулу (12)) для всех рассчитанных конфигураций зарядов составляет менее 0.05, а поправка к полной энергии (при  $N \geq 4$ ) составляет менее 0.005. Таким образом, при

моделировании процессов кристаллизации и плавления подсистемы зарядов можно использовать выражение для полной энергии заряженного гелиевого кластера в виде (13).

### 3.2. Структура оболочки зарядов

Проблема расположения точечных кулоновских зарядов на поверхности сферы с наименьшей энергией известна как проблема Томсона [28, 31–35]. Особенности возникающей в этом случае структуры зарядов рассматривались нами ранее [36]. Повторим здесь только ключевые моменты.

Хорошо известно, что на плоскости при различ-

**Таблица 1.** Равновесные конфигурации зарядов в гелиевом кластере:  $N$  — число зарядов ( $N = 2-100$ ),  $a_n$  — среднее расстояние от зарядов до границы кластера,  $d$  — дипольный момент системы,  $G$  — группа симметрии (в символике Шенфлиса), Föppl — индекс Феппла,  $U^{tot}$  — полная энергия системы,  $(U^{ext}/U^{int})$  — отношение энергии поляризации к энергии прямого кулоновского взаимодействия зарядов

$N$	$a_n \cdot 100, \%$	$d$	$G$	Föppl	$U^{tot}$	$\frac{U^{ext}}{U^{int}} \cdot 100, \%$
2	17.5083	0	—	2	0.7601	25.4042
3	12.6836	0	—	3	2.2914	15.5166
4	10.4606	0	$T_d$	1, 3	4.5968	12.0223
5	9.0237	0	$D_{3h}$	1, 3, 1	7.8298	10.0174
6	8.0798	0	$O_h$	1, 4, 1	11.8179	8.7906
7	7.3377	0	$D_{5h}$	1, 5, 1	16.8246	7.8680
8	6.7790	0	$D_{4d}$	$4^2$	22.6251	7.1972
9	6.3257	0	$D_{3h}$	$3^3$	29.3324	6.6652
10	5.9487	0	$D_{4d}$	$1, 4^2, 1$	36.9538	6.2309
11	5.6266	0.01197	$C_{2v}$	$1, 2, 4, 2^2$	45.5398	5.8652
12	5.3599	0	$I_h$	$1, 5^2, 1$	54.8414	5.5662
13	5.1162	0.00806	$C_{2v}$	$1, 2^2, 4, 2^2$	65.3112	5.2955
14	4.9065	0	$D_{6d}$	$1, 6^2, 1$	76.5736	5.0647
15	4.7193	0	$D_3$	$3^5$	88.7807	4.8601
16	4.5518	0	$T$	$1, 3^5$	101.8963	4.6782
17	4.4004	0	$D_{5h}$	$1, 5^3, 1$	115.9401	4.5146
18	4.2629	0	$D_{4d}$	$1, 4^4, 1$	130.9088	4.3667
19	4.1362	0.00013	$C_{2v}$	$1, 4, 2, 4, 2^2, 4$	146.8803	4.2310
20	4.0214	0	$D_{3h}$	$1, 3^2, 6, 3^2, 1$	163.6621	4.1086
21	3.9147	0.00131	$C_{2v}$	$1, 2^2, 4, 2^2, 4, 2^2$	181.4419	3.9951
22	3.8161	0	$T_d$	$1, 3^2, 6, 3^3$	200.1335	3.8906
23	3.7236	0	$D_3$	$1, 3^7, 1$	219.8513	3.7928
24	3.6385	0	$O$	$4^6$	240.3635	3.7031
25	3.5579	0.00096	$C_{1h}$	$1^{10}, 5, 1^{10}$	261.9547	3.6183
26	3.4827	0.00181	$C_2$	$2^{13}$	284.4230	3.5394
27	3.4124	0	$D_{5h}$	$1, 5^5, 1$	307.7616	3.4657
28	3.3455	0	$T$	$1, 3^9$	332.1470	3.3958
29	3.2822	0	$D_3$	$1, 3^9, 1$	357.5107	3.3296
30	3.2227	0	$D_2$	$1, 2^{14}, 1$	383.7205	3.2676
31	3.1661	0.00304	$C_{3v}$	$1, 3^2, 6, 3^2, 6, 3^2$	410.9113	3.2087
32	3.1128	0	$I_h$	$1, 5^6, 1$	438.9237	3.1533
33	3.0610	0.00413	$C_{1h}$	$1^{13}, 7, 1^{13}$	468.1793	3.0995
34	3.0123	0	$D_2$	$1, 2^{16}, 1$	498.2089	3.0490
35	2.9656	0.00040	$C_2$	$1, 4, 2^{15}$	529.2248	3.0006
36	2.9211	0	$D_2$	$2^{18}$	561.1477	2.9546
37	2.8785	0	$D_{5h}$	$1, 5^7, 1$	594.0355	2.9106
38	2.8377	0	$D_{6d}$	$1, 6^6, 1$	627.8663	2.8684
39	2.7985	0	$D_{3h}$	$3^2, 6, 3, 9, 3, 6, 3^2$	662.6478	2.8280



Продолжение табл. 1

$N$	$a_n \cdot 100, \%$	$d$	$G$	Föppl	$U^{tot}$	$\frac{U^{ext}}{U^{int}} \cdot 100, \%$
40	2.7609	0	$T_d$	$1, 3^2, 6, 3^2, 6, 3, 6, 3^2$	698.3849	2.7892
41	2.7247	0	$D_{3h}$	$1, 3^2, 6, 3, 9, 3, 6, 3^2, 1$	735.0971	2.7519
42	2.6899	0	$D_{5h}$	$1, 5^3, 10, 5^3, 1$	772.7480	2.7161
43	2.6563	0.00038	$C_{2v}$	$1, 2, 4, 2, 4^2, 2^2, 4^3, 2, 4, 2^2$	811.3696	2.6815
44	2.6241	0	$O_h$	$4^3, 8, 4, 8, 4^3$	850.8789	2.6484
45	2.5928	0	$D_3$	$3^{15}$	891.4399	2.6162
46	2.5626	0	$T$	$1, 3^{15}$	932.9844	2.5852
47	2.5334	0.00238	$C_{1h}$	$1^{20}, 7, 1^{20}$	975.4598	2.5552
48	2.5054	0	$O$	$4^{12}$	1018.7105	2.5265
49	2.4779	0.00147	$C_3$	$1, 3^{16}$	1063.1749	2.4984
50	2.4516	0	$D_{6d}$	$1, 6^8, 1$	1108.4342	2.4714
51	2.4259	0	$D_3$	$3^{17}$	1154.7244	2.4452
52	2.4011	0.00044	$C_3$	$1, 3^{17}$	1201.9951	2.4197
53	2.3770	0.00027	$C_{2v}$	$1, 4, 2, 4^2, 2, 4^2, 2^2, 4^4, 2^2, 4$	1250.1854	2.3950
54	2.3536	0.00013	$C_2$	$2^{27}$	1299.3284	2.3711
55	2.3308	0.00038	$C_2$	$1, 2^{27}$	1349.4607	2.3478
56	2.3087	0	$D_2$	$2^{28}$	1400.5198	2.3253
57	2.2872	0	$D_3$	$3^{19}$	1452.5618	2.3033
58	2.2663	0	$D_2$	$1, 2^{11}, 4, 2^2, 4, 2^{11}, 1$	1505.5669	2.2819
59	2.2459	0.00013	$C_2$	$1, 2^{29}$	1559.5076	2.2612
60	2.2261	0	$D_3$	$3^{20}$	1614.3652	2.2410
61	2.2068	0.00105	—	$1^{61}$	1670.2955	2.2212
62	2.1880	0	$D_5$	$1, 5^{12}, 1$	1727.0957	2.2021
63	2.1696	0	$D_3$	$3^{21}$	1784.9153	2.1833
64	2.1516	0	$D_2$	$2^{32}$	1843.7031	2.1651
65	2.1341	0.00039	$C_2$	$1, 2^{32}$	1903.4487	2.1472
66	2.1171	0.00075	$C_2$	$2^{33}$	1964.1167	2.1299
67	2.1004	0	$D_5$	$1, 5^{13}, 1$	2025.7066	2.1129
68	2.0841	0	$D_2$	$2^{34}$	2088.3849	2.0963
69	2.0682	0	$D_3$	$3^{23}$	2151.9840	2.0801
70	2.0526	0	$D_{2d}$	$1, 2, 4, 2, 4^2, 2, 4^8, 2, 4^2, 2, 4, 2, 1$	2216.5056	2.0643
71	2.0374	0.00121	$C_2$	$1, 2^{28}, 4, 2^5$	2282.0241	2.0488
72	2.0225	0	$I$	$1, 5^{14}, 1$	2348.3564	2.0337
73	2.0079	0.00152	$C_2$	$1, 2^{36}$	2415.9914	2.0188
74	1.9936	0.00062	$C_2$	$2^{37}$	2484.4441	2.0042
75	1.9796	0	$D_3$	$3^{25}$	2553.7669	1.9900
76	1.9659	0.00091	$C_2$	$2^{38}$	2624.1134	1.9761
77	1.9525	0	$D_5$	$1, 5^{15}, 1$	2695.3424	1.9625
78	1.9393	0	$T_h$	$3^{26}$	2767.6078	1.9492
79	1.9264	0.00068	$C_{1h}$	$1^2, 2, 1^{28}, 2, 11, 2, 1^{28}, 2, 1^2$	2840.8938	1.9361

Продолжение табл. 1

$N$	$a_n \cdot 100, \%$	$d$	$G$	Föppl	$U^{tot}$	$\frac{U^{ext}}{U^{int}} \cdot 100, \%$
80	1.9138	0	$D_{4d}$	$4^3, 8, 4^2, 8, 4^2, 8, 4^2, 8, 4^3$	2915.0982	1.9232
81	1.9013	0.00019	$C_2$	$1, 2^{40}$	2990.3778	1.9106
82	1.8892	0	$D_2$	$1, 2^{40}, 1$	3066.5496	1.8983
83	1.8772	0.00033	$C_2$	$1, 2^{41}$	3143.6460	1.8862
84	1.8655	0.00039	$C_2$	$1, 2^{41}, 1$	3221.7341	1.8743
85	1.8540	0.00041	$C_2$	$1, 2^{42}$	3300.7955	1.8626
86	1.8427	0.00134	$C_2$	$2^{26}, 4, 2^{15}$	3380.8239	1.8511
87	1.8316	0.00073	$C_2$	$1, 2^{17}, 4, 2^{24}$	3461.8043	1.8399
88	1.8207	0	$D_2$	$2^{44}$	3543.7277	1.8288
89	1.8100	0.00007	$C_2$	$1, 2^{44}$	3626.6643	1.8180
90	1.7995	0	$D_3$	$3^{30}$	3710.5469	1.8073
91	1.7891	0.00003	$C_2$	$1, 2^{45}$	3795.4130	1.7968
92	1.7789	0	$D_2$	$2^{46}$	3881.2474	1.7865
93	1.7689	0.00021	$C_2$	$1, 2^{20}, 4, 2^{24}$	3968.0697	1.7764
94	1.7591	0	$D_2$	$1, 2^{46}, 1$	4055.8161	1.7664
95	1.7494	0.00011	$C_2$	$1, 2^{18}, 4, 2^{27}$	4144.5733	1.7566
96	1.7399	0.00004	$C_2$	$2^{12}, 4, 2^{34}$	4234.2625	1.7470
97	1.7305	0.00009	$C_2$	$1, 2^{48}$	4324.9621	1.7375
98	1.7213	0.00011	$C_2$	$2^{49}$	4416.5826	1.7282
99	1.7122	0.00015	$C_2$	$1, 2^{33}, 4, 2^{14}$	4509.2445	1.7190
100	1.7033	0	$T$	$1, 3^{33}$	4602.8124	1.7099

ных потенциалах отталкивания [37–39] устойчива треугольная решетка, которая обладает наименьшей энергией по сравнению с решетками других типов (квадратной, сотовой и др.). Таким образом, естественно ожидать, что на искривленной поверхности в области  $\langle \rho_{ij} \rangle \ll R$ , где  $R$  — радиус кривизны поверхности (радиус кластера), а  $\langle \rho_{ij} \rangle$  — среднее расстояние между частицами, треугольная решетка также будет локально устойчива. В частности, на любом сегменте поверхности сферы в пределе больших  $N$  естественно ожидать образования треугольной решетки. Однако «решетка», если рассматривать ее на всей поверхности сферы, обладает рядом существенных особенностей, возникающих вследствие топологических отличий плоскости от замкнутой односвязной поверхности.

Для описания структуры оболочки мы вводим термин «замкнутая квазидвумерная треугольная решетка с топологическими дефектами». Под замкнутой мы понимаем решетку, уложенную на любой за-

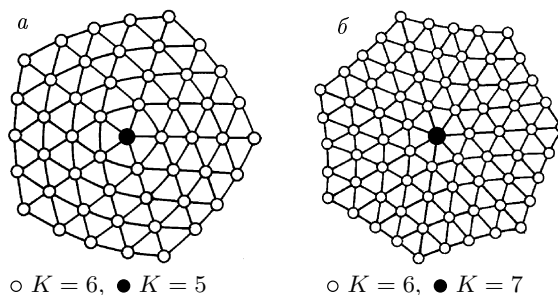


Рис. 3. Дисклинии в плоской треугольной решетке ( $K$  — число ближайших соседей):  $a$  — дисклиниция с топологической мощностью  $m = +1$  (пентамер);  $b$  — дисклиниция  $m = -1$  (гептамер)

мкнутой односвязной поверхности, не обязательно выпуклой. В замкнутой решетке неизбежно содержатся топологические дефекты.

Как известно, плоская решетка может содержать

дефекты двух типов, дислокации и дисклинации, причем последние являются топологическими дефектами. Дисклинация нарушает в плоской решетке симметрию направлений вектора, соединяющего ближайшие эквивалентные частицы. Если мы разместим дисклинацию мощности  $m$  в точке плоской решетки, через которую изначально проходила ось симметрии  $n$ -й степени, то при обходе вокруг этой точки (ядра дисклинации) значение фазы  $\varphi$  изменится на величину  $\delta\varphi = 2\pi m/n$ . Таким образом, частица, имеющая не шесть, а пять ближайших соседей (пентамер) в плоской треугольной решетке, является ядром дисклинации мощности  $m = +1$ , частица, имеющая четыре ближайших соседа, — ядром дисклинации мощности  $m = +2$  и т. д. (рис. 3). В любой реальной плоской макроскопической решетке образование дисклинаций маловероятно из-за высокой энергии возникающих упругих деформаций [40]. В отличие от плоской решетки любая замкнутая квазидвумерная решетка содержит дисклинации, причем полная (суммарная) топологическая мощность  $M$  дефектов всегда постоянна и зависит только от типа решетки, в треугольной  $M_{tr} = 12$ , в квадратной  $M_q = 8$  и в гексагональной  $M_{hex} = 12$ . Данные соотношения могут быть получены из теоремы Эйлера для выпуклых многогранников [36]. Согласно теореме Эйлера,  $V + F - E = 2$ , где  $V$  — число вершин,  $F$  — число граней, а  $E$  — число ребер произвольного выпуклого многогранника. «Замкнутая решетка» уложена на замкнутой односвязной поверхности и, таким образом, изоморфна выпуклому многограннику.

В настоящей работе для построения решетки<sup>1)</sup> мы используем ребра выпуклого многогранника, в вершинах которого расположены заряды. Из стереометрии известно, что выпуклый многогранник однозначно задается набором своих вершин. Другими словами, если на некоторых точках в пространстве как на вершинах можно построить выпуклый многогранник, то такой многогранник — единственный. Поскольку при  $N \geq 4$  заряды расположены на выпуклой поверхности, на зарядах может быть построен выпуклый многогранник, и, следовательно, такое построение решетки однозначно. Отметим, что для построения замкнутой решетки могут быть применены и другие способы. Например, возможно модифицировать метод Вороного для построения решеток на искривленных поверхностях (оригинальный ме-

тод Вороного используется для построения решеток на плоскости).

Оказывается, что если конфигурация соответствует минимуму, глобальному или локальному, то построенный на зарядах выпуклый многогранник почти всегда содержит только треугольные грани. Кроме того, при числе зарядов  $N \geq 12$  многогранники в большинстве случаев содержат 12 вершин, инцидентных пяти ребрам, и  $N - 12$  вершин, инцидентных шести ребрам. Конфигурации, в том числе с высокой точечной симметрией, но с нетреугольными гранями, как правило, неустойчивы. В частности, неустойчивы куб при  $N = 8$ , додекаэдр при  $N = 20$ , «фуллерен» (рассматриваемый здесь как геометрическая фигура) при  $N = 60$ . Отдельные многогранники из зарядов, соответствующие, например, глобальным минимумам при  $N = 8, 24, 44, 48$ , содержат четырехугольные грани. В принципе, при построении замкнутой треугольной решетки можно избежать появления в ней четырехугольных граней. Для этого достаточно в уже построенную решетку произвольно добавить ребра — по одному ребру на одну из диагоналей каждой четырехугольной грани. В то же время в большинстве случаев возникновение нетреугольной грани в решетке связано с некоторой специфической группой симметрии. Например, через центр четырехугольной грани может проходить ось симметрии четвертого порядка (простая или поворотная), как в конфигурациях при числе зарядов  $N = 8, 24, 44, 48$ , или плоскость симметрии, как при  $N = 33$ .

Используются следующие обозначения дефектов замкнутой треугольной решетки: пентамер —  $P$ -дисклинация ( $m = +1$ ); тетрамер —  $T$ -дисклинация ( $m = +2$ ); тример —  $Tr$ -дисклинация ( $m = +3$ ); гептамер —  $H$ -дисклинация ( $m = -1$ ). С топологической точки зрения четырехугольная грань в треугольной решетке является дисклинацией  $m = +2$ . В ядре такой дисклинации (в центре грани) отсутствует частица. Такой дефект замкнутой треугольной решетки назван  $F$ -дисклинацией. Как следует из теоремы Эйлера, числа пентамеров ( $N_5$ ), тетрамеров ( $N_4$ ), тримеров ( $N_3$ ), гептамеров ( $N_7$ ), октамеров ( $N_8$ ) в замкнутой треугольной решетке, содержащей только треугольные и четырехугольные грани, связаны соотношением

$$N_5 + 2N_4 + 3N_3 - N_7 - 2N_8 - 2Q = 12, \quad (22)$$

где  $Q$  — число четырехугольных граней. В более общем виде равенство (22) может быть записано в виде

<sup>1)</sup> Здесь и ниже речь идет о «замкнутой квазидвумерной треугольной решетке с топологическими дефектами».

$$M = (N_{+1} - N_{-1}) + 2(N_{+2} - N_{-2}) + 3(N_{+3} - N_{-3}) + \dots = 12,$$

где  $M$  — полная топологическая мощность дефектов замкнутой треугольной решетки, а  $N_i$  — число дисклинаций в решетке с топологической мощностью  $i$  ( $i = \pm 1, \pm 2, \dots$ ). Индекс решетки [36] описывает, какие дефекты и в каком количестве присутствуют в решетке. Число, стоящее перед символом дефекта, — это число дефектов данного типа в решетке. Например, индекс  $12P$  означает, что в решетке содержится двенадцать  $P$ -дисклинаций, индекс  $2T8P$  означает, что в решетке содержится две  $T$ -дисклинации и восемь  $P$ -дисклинаций, и т. д. Комплекс из двух дисклинаций противоположного знака — диполь  $PH$  — соответствует дефекту решетки — дислокации (для плоской решетки показано в работе [40]).

Большая часть рассматриваемых в настоящей работе структур имеет тип  $12P$ , исключения собраны в табл. 2.

Отметим, что моделью замкнутой гексагональной решетки описывается структура фуллеренов. Граф замкнутой гексагональной решетки является дуальным по отношению к графу замкнутой треугольной решетки, причем центрами дисклинаций в замкнутой гексагональной решетке являются не вершины, а грани. Так, структуре первого экспериментально полученного фуллерена  $C_{60}$  [41] соответствует локальный минимум ( $N = 32$ , симметрия  $I_h$ ) в системе кулоновских зарядов на сфере.

Отметим также, что при небольшом числе  $N < 20$  зарядов для описания структуры зарядов на сфере может быть использован другой подход, а именно, представление о постепенно заполняющихся с увеличением  $N$  соосных «кольцах», или «поясах», зарядов на сфере (см. рис. 1). Этот подход восходит к классической работе Томсона [42] о модели атома.

#### 4. КОМПЬЮТЕРНЫЙ РАСЧЕТ. КЛАСТЕР ПРИ КОНЕЧНОЙ ТЕМПЕРАТУРЕ

Для моделирования нагрева системы применяется метод Монте-Карло с классической процедурой Метрополиса [43]. Выполняется случайный пробный шаг (используем два типа случайных шагов, см. ниже). Если энергия системы в результате этого шага понизилась, то шаг принимается, в противном случае выбрасывается случайное число  $p$  с равномерным распределением в интервале от нуля до единицы. Если  $\exp(-|\Delta E|/T) < p$ , где  $\Delta E$  — измене-

**Таблица 2.** Равновесные конфигурации зарядов, соответствующие замкнутым решеткам с индексом, отличным от  $12P$ , при числе зарядов в кластере  $4 \leq N \leq 100$ . Используются следующие обозначения:  $N_i$  — число вершин замкнутой решетки, инцидентных  $i$  ребрам ( $i = 3, \dots, 7$ ),  $Q$  — число четырехугольных граней,  $L$  — индекс замкнутой решетки

$N$	$N_3$	$N_4$	$N_5$	$N_6$	$N_7$	$Q$	$L$
4	4						$4Tr$
5	2	3					$2Tr3T$
6		6					$6T$
7		5	2				$5T2P$
8		8				2	$8P2F$
9		3	6				$3T6P$
10		2	8				$2T8P$
11		2	8				$2T8P$
13		1	10				$T10P$
18		2	8	8			$2T8P$
19			14	5		1	$F10P$
21		1	10	10			$T10P$
24			24			6	$6F$
25			14	11		1	$F10P$
33			15	17	1	1	$F11P$
44			24	20		6	$6F$
47			14	33		1	$F10P$
48			24	24		6	$6F$
53			18	35		3	$3F6P$
59			14	43	2		$14P2H$
70			20	50		4	$4F4P$
71			14	55	2		$14P2H$
79			15	63	1	1	$F11PH$
80			16	64		2	$2F8P$
83			14	67	2		$14P2H$

ние энергии системы в результате пробного шага, а  $T$  — температура системы, то шаг принимается. При моделировании используются безразмерные единицы (20).

Мы применяем два различных типа случайных шагов. Шаг первого типа (шаг I) — это случайный сдвиг произвольной частицы. Из предварительных расчетов известно, что при нагреве и плавлении данной системы частицы остаются внутри узкого ша-

рового слоя, находящегося вблизи поверхности внутри единичной сферы (сдвиг частицы вдоль радиуса приводит к резкому изменению полной энергии системы). Поэтому компоненты случайного шага по радиусу и вдоль поверхности сферы выбраны неэквивалентными: вдоль поверхности частица «шагает шире». Уравнение движения  $i$ -й частицы при случайном шаге типа I выглядит следующим образом:

$$\mathbf{r}_i^{n+1} = \frac{\mathbf{r}_i^n + \mathbf{b}}{|\mathbf{r}_i^n + \mathbf{b}|} (|\mathbf{r}_i^n| + ha). \quad (23)$$

Здесь  $\mathbf{b}$  — случайный вектор, компоненты которого находятся в диапазоне  $[-0.05, 0.05]$ ,  $h$  — случайное число в диапазоне  $[-0.1, 0.1]$ ,  $a$  — среднее расстояние (при нулевой температуре) от зарядов до поверхности кластера (в безразмерных единицах),  $i$  — индекс частицы (случайное целое число с равномерным распределением в интервале от 1 до  $N$ ).

Случайный шаг второго типа (шаг II) мы назвали топологической перестановкой (определение шага будет дано ниже). Трудность моделирования термодинамики рассматриваемой мезоскопической системы состоит в том, что в системе имеется большое число локальных минимумов, отделенных друг от друга относительно высокими энергетическими барьерами. Как следствие, при использовании только случайных сдвигов частиц вероятность попасть из одного локального минимума в другой мала. Для того чтобы обеспечить правильное распределение системы по состояниям, которое бы соответствовало всему конфигурационному пространству системы при данной температуре, мы вводим в модель еще один тип случайного движения (шаг II).

Локальные минимумы системы зарядов в гелиевом кластере соответствуют различному положению топологических дефектов в замкнутой треугольной решетке (в большинстве случаев топологические дефекты представлены пентамерами). Случайный шаг типа топологической перестановки соответствует прямому переходу системы из области одного локального минимума в область другого.

Для наглядности рассмотрим вначале случайный шаг данного типа на примере графа. На рис. 4а изображен граф, который представляет собой кусок замкнутой треугольной решетки с топологическими дефектами. Два топологических дефекта (пентамера) находятся в решетке в узлах  $A$  и  $B$ , узлы  $C$  и  $D$  — гексамеры. «Реберное расстояние» (см. теорию графов)  $d_{AB}$  между дефектами  $A$  и  $B$  равно двум. Проведем следующий эксперимент: уберем ребро  $CD$  в решетке и проведем ребро  $AB$ . В результате два пентамера заняли другие позиции в решетке:

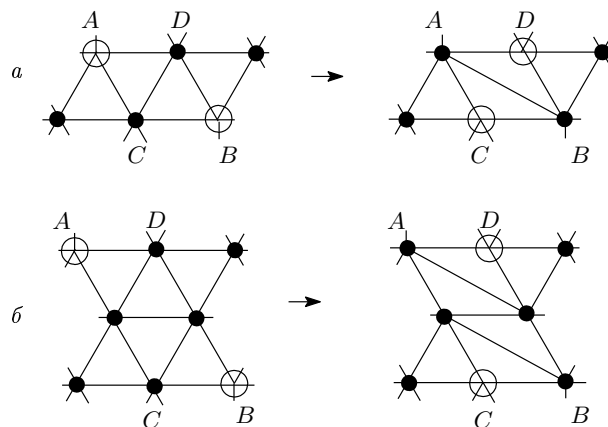


Рис. 4. Шаг II (топологическая перестановка) в треугольной решетке при расстоянии между дефектами  $d_{AB} = 2$  (а), 3 (б). До шага топологические дефекты (пентамеры) занимают узлы  $A$  и  $B$ , после шага — узлы  $C$  и  $D$

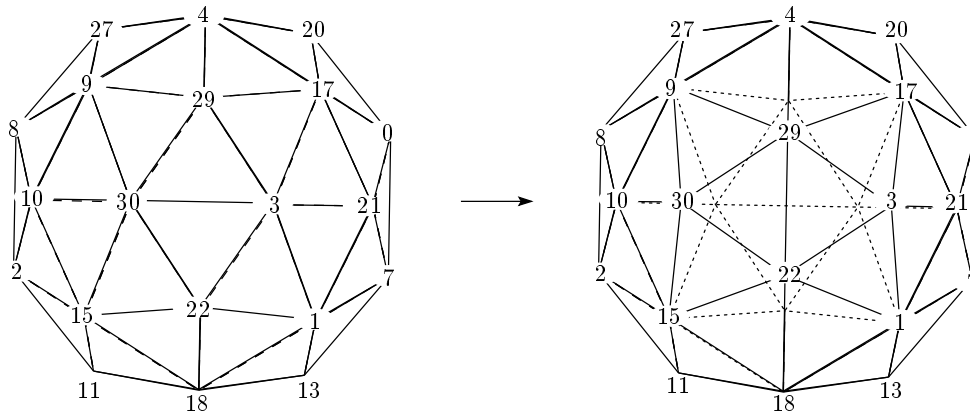
теперь пентамеры находятся в узлах  $C$  и  $D$ , а гексамеры — в узлах  $A$  и  $B$ . Это — принцип шага топологической перестановки.

Рассмотренная выше операция на графе представляет собой топологическую перестановку дефектов в случае, когда реберное расстояние между дефектами равно двум. Однако подобная операция перестановки дефектов в графе треугольной решетки может быть проделана при любом расстоянии между дефектами. На рис. 4б изображена топологическая перестановка в случае, когда  $d_{AB} = 3$ .

Отметим (это нам понадобится далее), что при топологической перестановке реберное расстояние между дефектами, задействованными в операции, не изменяется. Действительно, в первом рассмотренном случае после перестановки расстояние между дефектами равно двум, а во втором случае — трем (см. рис. 4).

В реальной системе, например в многозарядном гелиевом кластере, узлам графа (представляющего замкнутую треугольную решетку) соответствуют частицы и рассмотренная операция на графе должна соответствовать реальному изменению положения частиц в пространстве.

Итак, пусть локальная конфигурация зарядов в замкнутой решетке соответствует изображенной на рис. 4а. Обозначим расстояние от центра  $O$  сферы до частицы  $i$  как  $r_i$ , угловое расстояние вдоль поверхности сферы между частицами  $i$  и  $j$  как  $\theta_{ij}$ . В шаге участвуют частицы  $A, B, C$  и  $D$ . Дефекты расположены в узлах  $A$  и  $B$ . В плоскости  $OAB$  сместим



**Рис. 5.** Шаг II (топологическая перестановка) в замкнутой треугольной решетке, образуемой зарядами в гелиевом кластере. Число зарядов в кластере  $N = 32$ . До шага пентамеры находились в узлах 29 и 22, после шага пентамеры находятся в узлах 30 и 3

частицы, находящиеся в узлах  $A$  и  $B$ , вдоль поверхности сферы на равный угол в новые положения  $A'$  и  $B'$  так, что  $\theta_{A'B'} = \theta_{CD}$ . Аналогично, в плоскости  $OCD$  сместим частицы, находящиеся в узлах  $C$  и  $D$ , в новые положения  $C'$  и  $D'$  так, что  $\theta_{C'D'} = \theta_{AB}$ . Зададим новые расстояния от зарядов, участвующих в данном шаге, до центра сферы:

$$r_{i'} = \sum_{i=1, \dots, 4} \frac{r_i}{4},$$

здесь суммирование проводится по частицам  $A, B, C, D$ . Теперь снова построим замкнутую решетку на зарядах. После шага дефекты находятся в узлах  $C'$  и  $D'$  (рис. 5). Таким образом, в рассмотренном случае происходит кооперативное движение четырех частиц: двух пентамеров и двух гексамеров. Поскольку в результате подобной операции энергия системы в общем должна увеличиться, для повышения эффективности шага после перестановки частиц для всех четырех частиц, задействованных в этом шаге, выполняется случайный сдвиг по формуле (23).

Шаг II соответствует прямому переходу системы зарядов из области одного локального минимума в область другого. В процессе моделирования шаг II предпринимается в десяти процентах от общего числа случайных шагов. При этом на зарядах как на вершинах строится замкнутая решетка. Затем случайно выбираются частицы-пентамеры  $A$  и  $B$ . Если реберное расстояние между дефектами  $A$  и  $B$  равно двум или трем, выполняем шаг.

Поскольку индексы частиц-пентамеров выбираются случайно и реберное расстояние между дефектами, задействованными в шаге топологической пе-

рестановки, не изменяется, очевидно, что для данного типа движения выполняется правило микроскопической обратимости, т. е. при конфигурации  $X$  системы вероятность случайного выброса пробной конфигурации  $Y$  равна вероятности случайного выброса пробной конфигурации  $Y$  из конфигурации  $X$ .

Каждая точка по температуре рассчитывалась в течение  $10^6$  шагов Метрополиса. Контролировалось число успешных шагов Метрополиса во время пробега: 20–80 % от общего числа шагов данного типа для случайного сдвига, и более 200 шагов на пробег для шага топологической перестановки. Измерения проводились через каждые 100 шагов. Для каждого значения температуры проверялась близость распределения по состояниям полной энергии к нормальному. Последний критерий позволяет определить достоверность вычисленных средних.

#### 4.1. Измеряемые величины

Для обозначения средних по времени мы будем использовать треугольные скобки  $\langle \dots \rangle$ , а для обозначения средних по ансамблю — горизонтальную черту над символом величины. Рассчитываются следующие величины.

Вычисляется средняя потенциальная энергия  $\langle U^{tot} \rangle$  системы зарядов, где  $U^{tot}$  дается формулой (13).

Поскольку представляет интерес вопрос, насколько долго сохраняется оболочечная структура при нагреве кластера, в процессе моделирования мы измеряем величину среднего расстояния  $\bar{r}$  от зарядов до центра кластера. При каждом значении

температуры вычисляются среднее по температуре значение  $\langle \bar{r} \rangle$  и тепловые флуктуации  $\langle \bar{r}^2 \rangle$  величины  $\bar{r}$ ,

$$\langle \bar{r}^2 \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \langle r_i^2 \rangle - \langle r_i \rangle^2. \quad (24)$$

При сохранении одной оболочки в кластере величина  $\langle \bar{r}^2 \rangle$  характеризует толщину  $\Delta h$  шарового слоя, в котором движутся заряды.

В макроскопической двумерной системе фазовый переход кристалл–жидкость сопровождается резким увеличением числа дислокаций в решетке [44]. В данном случае (для мезоскопической квазидвумерной системы) нет выделенной точки фазового перехода и переход кристалл–жидкость размыт (кроссовер). Рост числа дислокаций при этом является критерием перехода системы в жидкое состояние. В процессе моделирования мы вычисляем среднее по пробегу относительное число дислокаций  $\langle N_D^{Rel} \rangle$  в системе, которое в замкнутой треугольной квазидвумерной решетке определяем формулой

$$N_D^{Rel} = \frac{2(N_7 + 2N_8)}{N - 12}, \quad (25)$$

где  $N_7$  — число гептамеров, а  $N_8$  — число октамеров. В отличие от макроскопической двумерной системы, число дислокаций в мезоскопической системе всегда ограничено. Так, в данном случае измеряемая величина  $N_D^{Rel} \leq 1$ .

В процессе моделирования вычисляется автокорреляционная функция  $\langle f(\rho_{ij}) \rangle$  парных расстояний зарядов.

#### 4.2. Термодинамические свойства решетки зарядов. Плавление

Как показывает моделирование, при нагреве заряды остаются внутри шарового слоя вблизи поверхности кластера вплоть до полного плавления квазидвумерной замкнутой решетки. С увеличением температуры ширина оболочки, образуемой зарядами, в несколько раз увеличивается, но при этом оболочка остается очень узкой. Так, в кластере из  $N = 32$  зарядов при эффективной температуре  $T^* = k_B T \epsilon R / e^2 = 0.2$ , когда квазидвумерная замкнутая решетка уже полностью расплавлена, ширина сферической оболочки составляет  $\Delta h \approx 0.002$  отн. ед. Таким образом, на всем интервале рассматриваемых температур мы имеем дело с квазидвумерной системой зарядов внутри трехмерного кластера.

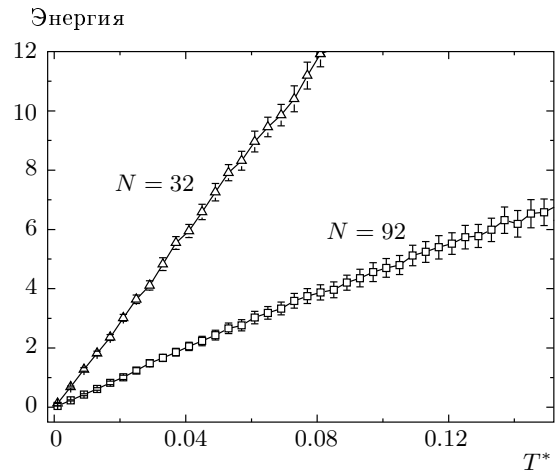


Рис. 6. Поведение потенциальной энергии (в единицах  $e^2/\epsilon R$ ) при увеличении эффективной температуры

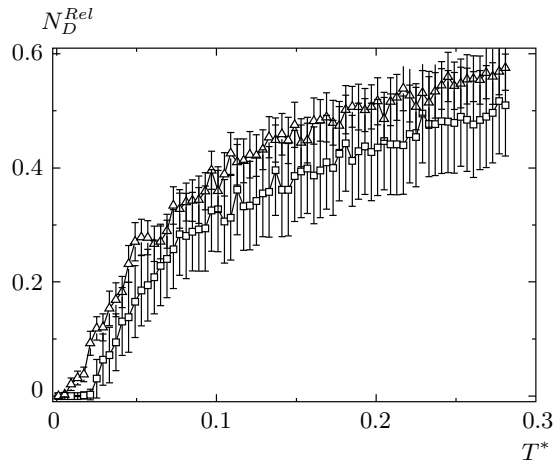


Рис. 7. Зависимость числа дислокаций в системе от эффективной температуры: верхняя кривая —  $N = 32$ , нижняя —  $N = 92$  (каждая точка рассчитывалась в течение  $10^6$  шагов Метрополиса)

Зависимость энергии системы (13) от температуры не имеет особенностей (рис. 6). Такое поведение зависимости потенциальной энергии от температуры характерно для мезоскопических систем. Размытость «фазового перехода» в мезоскопических системах и существование так называемого промежуточного состояния мезоскопической системы объясняются (см., например, работу [45]) одновременным наличием в диапазоне температур минимумов свободной энергии системы, соответствующих «твердой» и «жидкой» фазам мезоскопической системы.

С изменением температуры мы выделяем две точки перехода или, точнее, две области перехода, так как в обоих случаях переход размыт.

Один переход в рассматриваемой мезоскопической системе характеризуется резким ростом числа дислокаций в системе. В пределе больших  $N$  данный переход может быть соотнесен с переходом Костерлица–Таулеса (фазовый переход кристалл–жидкость в макроскопической двумерной системе). На рис. 7 показана зависимость числа дислокаций (25) в квазидвумерной замкнутой решетке, которую образуют заряды, от эффективной температуры. Отчетливо видна точка, в которой число дислокаций в системе начинает резко расти. При числе зарядов  $N = 32$  эта точка соответствует температуре  $T^* = 0.025$ , при числе зарядов  $N = 92$  — температуре  $T^* = 0.01$ .

Кроме указанного перехода (который может быть соотнесен с фазовым переходом кристалл–жидкость макроскопической двумерной системы), в рассматриваемой мезоскопической квазидвумерной системе зарядов происходит еще один специфический переход. Рассмотрим поведение автокорреляционной функции  $\langle f(\rho_{ij}) \rangle$  парных расстояний зарядов при изменении температуры. На рис. 8а показано распределение парных расстояний в кластере  $N = 32$  при нулевой температуре. Уширение первого максимума автокорреляционной функции объясняется разницей в парных расстояниях пентамер–гексамер и гексамер–гексамер.

На рис. 8б показана автокорреляционная функция при температуре  $T^* = 0.006$ . Между первым и вторым максимумами автокорреляционной функции имеется область, в которой значение функции обращается в нуль. Заряды колеблются вблизи своих положений равновесия. Это — «твердое» состояние кластера.

Как говорилось выше, переход, сопровождающийся резким ростом числа дислокаций, в рассматриваемой системе при  $N = 32$  наступает при температуре  $T^* = 0.025$ , однако уже при температуре  $T^* = 0.02$  между первым и вторым максимумами автокорреляционной функции парных расстояний нет разрыва (рис. 8в), т.е. при данной температуре в рассматриваемой квазидвумерной решетке зарядов имеется дрейф зарядов. Данное состояние кластера мы отождествляем с ориентационным плавлением, которое ранее было обнаружено при моделировании двумерных кластеров из отталкивающихся частиц в центрально-симметричном удерживающем потенциале [26]. Именно такой механизм плавления обеспечивает движение зарядов между различными ло-

кальными минимумами в квазидвумерной системе без возникновения дислокаций.

В состоянии ориентационного плавления заряды какое-то время совершают колебания вблизи одного из минимумов, затем в результате кооперативного движения нескольких зарядов, образующих «кольцо», происходит переход системы в область другого минимума (при этом кольцо зарядов «поворачивается» относительно других зарядов в системе), затем колебания зарядов вблизи нового минимума и т.д. В отличие от двумерной системы в центрально-симметричном удерживающем потенциале, в рассматриваемом нами случае нет заранее выделенной оси и, таким образом, поворот колец зарядов может происходить вокруг множества различных осей. Поворот колец хорошо виден при визуализации траекторий зарядов.

До сих пор ориентационное плавление было обнаружено в мезоскопических системах двух типов: в двумерных кластерах отталкивающихся частиц в центрально-симметричном удерживающем потенциале и в трехмерных кластерах, образующих несколько квазидвумерных концентрических оболочек. Ориентационное плавление зарядов в первом случае происходит вокруг заранее выделенной оси (ось удерживающего потенциала), во втором оно соответствует вращению квазидвумерных концентрических оболочек зарядов друг относительно друга. В рассматриваемой системе имеет место третий тип ориентационного плавления, а именно, есть одна квазидвумерная (сферическая) оболочка зарядов, и «ориентационное плавление» существует внутри этой оболочки, причем, повторимся, поворот колец зарядов может происходить вокруг множества различных осей.

На рис. 8г изображена автокорреляционная функция парных расстояний кластера в «жидком» состоянии.

## 5. ДРУГИЕ СИСТЕМЫ

Использованная в настоящей работе модель точечных кулоновских зарядов внутри диэлектрического шара также может быть применена к ряду других физических систем. Например, эффективный потенциал такого же типа возникает в случае трехмерной заряженной полупроводниковой (или полуметаллической) «точки», находящейся внутри диэлектрика (рассматривается область параметров, в которой характерная тепловая длина волны де Бройля электронов,  $\lambda \sim \hbar/\sqrt{mkT}$ , существенно меньше среднего расстояния между электронами). Также может быть



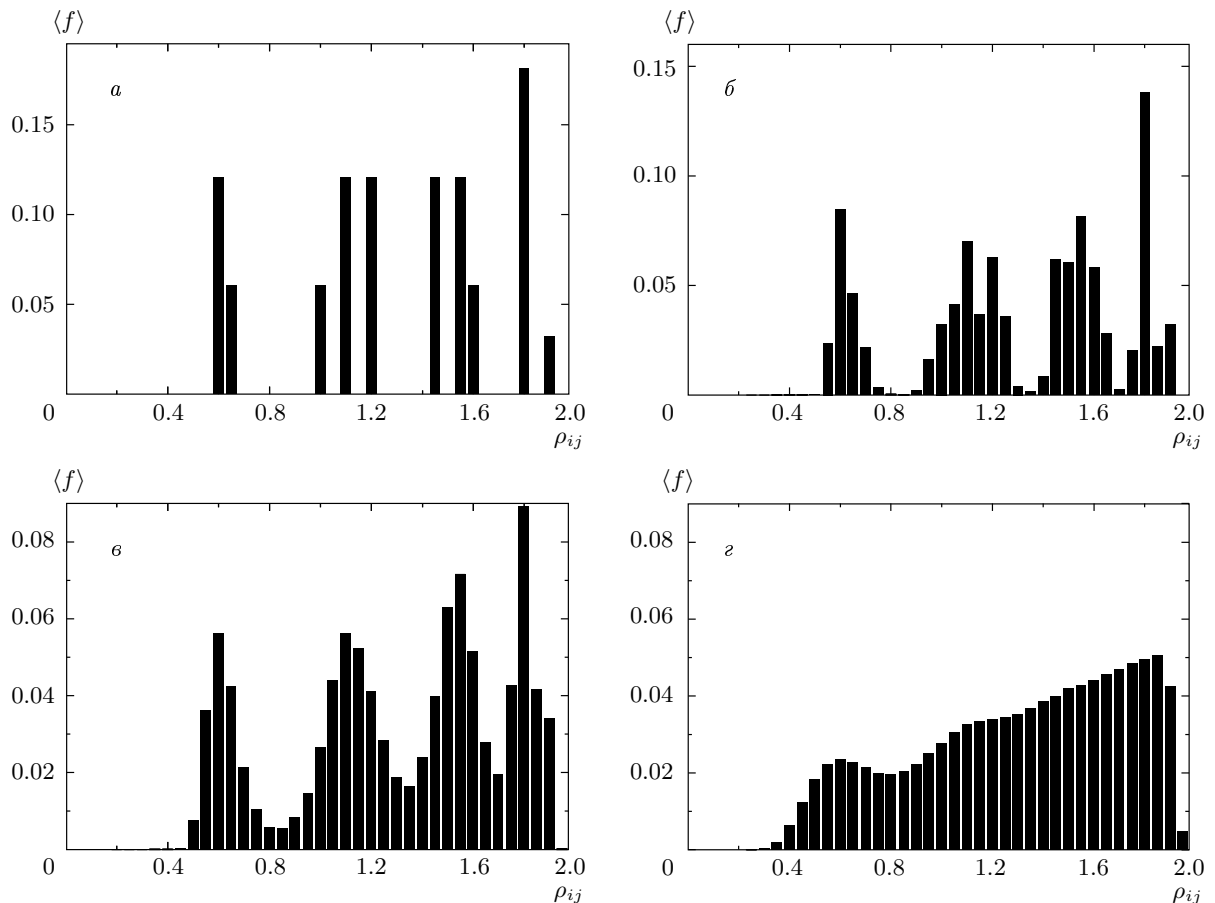


Рис. 8. Зависимости автокорреляционной функции  $\langle f(\rho_{ij}) \rangle$  парных расстояний от температуры в кластере, состоящем из  $N = 32$  зарядов:  $a - T^* = 0$ ;  $b - T^* = 0.006$  («твердое» состояние кластера);  $v - T^* = 0.02$  (ориентационное плавление);  $z - T^* = 0.19$  (жидкость)

рассмотрена система ионов в трехмерной ловушке с резко растущим вблизи границы потенциалом. Тот факт, что в рассмотренном диапазоне значений  $N$  все заряды находятся в узком шаровом слое вблизи поверхности, сближает данную задачу с известной проблемой Томсона нахождения глобального минимума системы зарядов на поверхности сферы.

Представляют интерес заряженные кластеры других благородных газов (неона, аргона, криптона). При температурах кристаллизации решетки зарядов и при давлении своего насыщенного пара данные кластеры находятся в твердом состоянии. В то же время рассмотренная выше модель диэлектрического шара с точечными кулоновскими зарядами внутри может быть применена также и к ним. Найденные в настоящей работе равновесные конфигурации зарядов в кластере жидкого гелия соответствуют глобальным минимумам энергии

твердых заряженных кластеров благородных газов, с различием только в расстоянии между оболочкой зарядов и границей кластера. Последнее зависит от диэлектрической проницаемости вещества.

## 6. ВЫВОДЫ

Рассмотрена кристаллизация системы зарядов (снежков и пузырьков) внутри гелиевого кластера. Для описания структур зарядов и структурных переходов в системе использовано представление о квазидвумерной замкнутой треугольной решетке с топологическими дефектами — дисклинациями различной мощности. Полная топологическая мощность  $M$  дефектов постоянна и не зависит от мощности и расположения отдельных дефектов:  $M = 12$ . Рассмотрены равновесные и квазиравновесные конфигурации при числе зарядов  $N = 1-100$ .

Отметим в этой связи, что в настоящее время известно и экспериментально наблюдается большое число объектов самой разной природы, объединенных одним общим свойством: с топологической точки зрения они могут рассматриваться как набор точек, распределенных на поверхности сферы. К таким объектам относятся кластеры из частиц, взаимодействующих по различным законам (например, кулоновскому, дипольному), атомные кластеры, многоатомные молекулы, фуллерены, сферические вирусы и т. д. Подобные структуры могут быть рассмотрены в рамках единого подхода, а именно, как квазидвумерные замкнутые решетки с топологическими дефектами разной мощности. Структуру решетки и характер дефектов в ней определяют различные механизмы, например валентность (в случае фуллеренов и других атомных и молекулярных кластеров) или взаимное отталкивание зарядов, которое приводит к образованию треугольной решетки, и др. Для каждого типа решетки полная мощность всех дисклинаций является инвариантом. Так, в случае замкнутых треугольных решеток и в случае фуллеренов полная мощность всех дефектов составляет  $M = 12$ , однако в первом случае дисклинациями являются вершины-негексамеры, а в фуллеренах — грани, не являющиеся шестиугольниками. Ряд систем, например ионы в ловушках, углеродные многооболочечные кластеры («луковицы») и т. п., могут рассматриваться как системы замкнутых решеток. В дальнейшем можно ожидать создания новых веществ с молекулярной структурой замкнутых решеток.

Рассмотрены термодинамические свойства системы зарядов в кластере, проведено компьютерное моделирование методом Монте-Карло. Фазовый переход «кристалл»–«жидкость» в системе размыт и сопровождается заметным увеличением числа дислокаций. При плавлении заряды остаются внутри узкого шарового слоя. До начала фазового перехода возникает процесс, который мы определяем как ориентационное плавление, при котором «твердое» состояние решетки зарядов в классическом понимании уже перестает существовать. В этом состоянии заряды некоторое время совершают колебания вблизи одного из минимумов, затем происходит переход в область другого минимума (при этом кольцо зарядов как бы проворачивается вокруг оси), колебания вблизи нового минимума и т. д.

Ранее ориентационное плавление было обнаружено в двумерных и трехмерных мезоскопических системах. В отличие от случая трехмерных кластеров, в которых ориентационным плавлением названо вра-

щение квазидвумерных концентрических оболочек зарядов друг относительно друга, в данном случае имеется лишь одна такая оболочка, и ориентационное плавление зарядов существует внутри этой сферической оболочки. Таким образом, есть аналогия с двумерным кластером. Однако имеется существенное отличие данной системы от двумерного кластера в центрально-симметричном удерживающем потенциале, а именно, в данной системе ось ориентационного плавления заранее никак не выделена, тем самым поворот колец зарядов может происходить вокруг множества различных осей.

Рассмотренная модель зарядов в гелиевом кластере применима к ряду различных физических систем, в том числе к трехмерной системе ионов в ловушке с резким удерживающим потенциалом, к системе электронов в полупроводниковой трехмерной «точке» (в классическом пределе), к многозарядному баблону с электронами в жидком гелии (в классическом пределе).

Работа поддержана грантом РФФИ.

## ЛИТЕРАТУРА

1. P. Sindzingre, M. L. Klein, and D. M. Ceperley, *Phys. Rev. Lett.* **63**, 1601 (1989).
2. M. V. Rama Krishna and K. B. Whaley, *Phys. Rev. Lett.* **64**, 1126 (1990).
3. J. W. Halley, C. E. Campbell, C. F. Giese, and K. Goetz, *Phys. Rev. Lett.* **71**, 2429 (1993).
4. M. Lewenstein and L. You, *Phys. Rev. Lett.* **71**, 1339 (1993).
5. A. P. V. van Deursen and J. Reuss, *J. Chem. Phys.* **63**, 4559 (1975).
6. P. W. Stephens and J. G. King, *Phys. Rev. Lett.* **51**, 1538 (1983).
7. J. Gspann, *Z. Phys. B.* **98**, 405 (1995).
8. D. M. Brink and S. Stringari, *Z. Phys. D.* **15**, 257 (1990).
9. M. Hartmann, R. E. Miller, J. P. Toennies, and A. Vilesov, *Rhys. Rev. Lett.* **75**, 1566 (1995).
10. H. Buchenau, J. P. Toennies, and J. A. Northby, *J. Chem. Phys.* **95**, 8134 (1991).
11. A. Scheidemann, J. P. Toennies, and J. A. Northby, *Phys. Rev. Lett.* **64**, 1899 (1990).

12. В. Б. Шикин, Ю. П. Монарха, *Двумерные заряженные системы в гелии*, Наука, Москва (1989).
13. K. R. Atkins, Phys. Rev. **116**, 1339 (1959).
14. В. Б. Шикин, ЖЭТФ **58**, 1748 (1970).
15. J. Poitrenaud and F. J. B. Williams, Phys. Rev. Lett. **29**, 1230 (1972).
16. J. Poitrenaud and F. J. B. Williams, Phys. Rev. Lett. **32**, 1213 (1974).
17. Р. Г. Архипов, УФН **88**, 185 (1966).
18. R. A. Ferrel, Phys. Rev. **108**, 167 (1937).
19. G. Careri, V. Fasoli, and F. Gaeta, Nuovo Cim. **15**, 774 (1960).
20. W. F. Schmidt, E. Illenberger, A. G. Khrapak, and Y. Sakai, J. Chem. Phys. **115**, 10048 (2001).
21. J. A. Northby, S. Kim, and T. Jiang, Physica B **197**, 426 (1994).
22. W. Schoepe and G. W. Rayfield, Phys. Rev. A **7**, 2111 (1973).
23. F. Ancilotto and F. Toigo, Z. Phys. B **98**, 309 (1995).
24. К. Ф. Вольхин, А. Г. Храпак, В. Ф. Шмидт, ЖЭТФ **108**, 1642 (1995).
25. Дж. А. Стреттон, *Теория электромагнетизма*, Гостехиздат, Москва (1948).
26. Yu. E. Lozovik and E. A. Rakoch, Phys. Rev. B **57**, 1214 (1998).
27. Yu. E. Lozovik and V. A. Mandelshtam, Phys. Lett. **145A**, 269 (1990); **165A**, 469 (1992).
28. A. M. Livshits and Yu. E. Lozovik, Chem. Phys. Lett. **314**, 577 (1999).
29. Lord Rayleigh, Phil. Mag. **14**, 184 (1882).
30. А. А. Самарский, А. В. Гулин, *Численные методы*, Наука, Москва (1989).
31. T. Erber and G. M. Hockney, J. Phys. A **24**, L1369 (1991).
32. E. L. Altshuler, T. J. Williams, E. R. Ratner et al., Phys. Rev. Lett. **72**, 2671 (1994).
33. H. A. Munera, Nature **320**, 597 (1986).
34. L. T. Wille, Nature **324**, 46 (1986).
35. J. R. Edmundson, Acta Cryst. A **49**, 648 (1993).
36. А. М. Лившиц, Ю. Е. Лозовик, Кристаллография **47**, 7 (2002).
37. L. Bonsall and A. A. Maradudin, Phys. Rev. B **15**, 1959 (1974).
38. G. Meissner and A. Flammig, Phys. Lett. **57A**, 277 (1976).
39. Ю. Е. Лозовик, В. М. Фарзтдинов, Препринт № 24 Института спектроскопии АН СССР, Троицк (1987).
40. В. А. Лихачев, Р. Ю. Хайров, *Введение в теорию дисклинаций*, Изд-во Ленинградского ун-та, Ленинград (1975).
41. H. W. Kroto, J. R. Heath, S. C. O'Brien et al., Nature (London) **318**, 162 (1985).
42. J. J. Thomson, Phil. Mag. **7**, 237 (1904).
43. N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth et al., J. Chem. Phys. **21**, 1087 (1953).
44. J. M. Kosterlitz and D. J. Thouless, J. Phys. **86**, 1181 (1973).
45. D. J. Wales and R. D. Berry, Phys. Rev. Lett. **73**, 2875 (1994).