

«МАГИЧЕСКИЕ ЧИСЛА» ПРИ ПЛАВЛЕНИИ КЛАСТЕРА ТОЧЕЧНЫХ ЗАРЯДОВ НА ПОВЕРХНОСТИ СФЕРЫ

А. М. Лившиц^a, **Ю. Е. Лозовик**^{a,b*}

^a *Институт спектроскопии Российской академии наук
142190, Троицк, Московская обл., Россия*

^b *Московский физико-технический институт
141700, Долгопрудный, Московская обл., Россия*

Поступила в редакцию 26 октября 2009 г.

С использованием метода Монте-Карло исследованы термодинамические свойства кластера точечных кулоновских зарядов на поверхности сферы при числе зарядов $20 \leq N \leq 90$. Основное состояние системы зарядов описывается моделью замкнутой квазидвумерной треугольной решетки с топологическими дефектами. Определена зависимость параметра Линдемана δ_L данной системы от N и от безразмерного параметра \tilde{T} , пропорционального температуре T и радиусу кластера R : $\tilde{T} = k_B T \epsilon R / e^2$, где ϵ — диэлектрическая проницаемость среды, e — заряд частицы. Обнаружены «магические числа» — значения N , для которых температура плавления замкнутой треугольной решетки из зарядов значительно выше, чем для соседних значений N . Изучена эволюция механизмов плавления решетки при росте числа зарядов N в мезоскопическом кластере. При $N \leq 32$ плавление решетки происходит без участия дислокаций (нетопологическое плавление), что существенно отличает поведение мезоскопической системы зарядов на сфере от поведения протяженной плоской двумерной системы. При $N \gtrsim 50$ плавление сопровождается образованием дислокаций. Исследован реализующийся при малых N механизм бездислокационного, нетопологического плавления замкнутой решетки, связанный с кооперативным ротационным движением «колец» из частиц. Модель имеет различные реализации в мезоскопической области, в частности, описывает систему электронов над кластером жидкого гелия, жидкий гелиевый кластер с внедренными заряженными частицами, многоэлектронный пузырек в жидком гелии, заряженную квантовую точку и т. д.

1. ВВЕДЕНИЕ

В последнее время внимание исследователей привлекают заряженные мезоскопические (состоящие из $N \lesssim 100$ частиц) системы [1]. Заряженные квантовые точки используются в нанoeлектронике [2], на основе систем из охлажденных ионов в ловушках разрабатываются схемы квантового компьютера [3, 4] и т. д.

Большое число заряженных мезоскопических систем может быть описано моделью точечных кулоновских зарядов, распределенных на поверхности сферы. К таким системам относятся электроны на поверхности кластера гелия, гелиевый кластер с внедренными внутрь него заряженными частицами, многоэлектронный «пузырек» в жидком

гелии (в классическом пределе для электронов), разреженная система электронов или дырок в сферической квантовой точке (тоже в классическом пределе), кластер ионов, охлажденных в электромагнитной ловушке со специальной формой эффективного удерживающего потенциала, и т. д.

Задача поиска основного состояния системы из N точечных зарядов на поверхности сферы была сформулирована Томсоном в 1904 г. в связи с предложенной им (и не подтвердившейся экспериментально) моделью атома и была решена им аналитически с привлечением соображений симметрии для некоторых значений N (при $N \lesssim 10$) [5]. Всплеск работ, посвященных проблеме Томсона, приходится на конец 1980-х–1990-е гг. [6–13], когда были обнаружены первые экспериментальные реализации «атома Томсона» — квантовые точки, система ионов в ловушке и т. д. (см., например, работы [6, 9, 14, 15]).

*E-mail: lozovik@isan.troitsk.ru

При $N > 10$ решение проблемы Томсона в общем случае не может быть найдено аналитически и необходимо использовать численный расчет (см., например, [13]).

В основном состоянии точечные заряды формируют на поверхности сферы замкнутую квазидвумерную треугольную решетку с топологическими дефектами [16]. Из-за топологических особенностей сферы (замкнутой поверхности) вписанная в нее квазидвумерная решетка всегда содержит топологические дефекты — дисклинации различной мощности (см. ниже). Известно также, что дислокация в двумерной решетке может быть представлена как диполь из двух дисклинаций противоположного знака (см., например, [17]).

С теоретической точки зрения, а также с экспериментальной и в связи с возможным применением заряженных мезоскопических систем в микро- и в нанoeлектронике представляет интерес вопрос об устойчивости и о механизмах плавления мезоскопической системы точечных кулоновских зарядов, распределенных на поверхности сферы. Цель настоящей работы — теоретическое исследование, с применением компьютерного моделирования, термодинамических свойств и фазовых переходов в данной системе.

Плавление макроскопической плоской двумерной решетки, согласно теории Березинского–Костерлица–Таулеса (см., например, работы [18–21]), обусловлено образованием в системе свободных дислокаций — при этом модуль сдвига решетки μ обращается в нуль [22]. В зависимости от характера межчастичного потенциала [23, 24] разрушение низкотемпературной фазы (квазидальнего трансляционного порядка) может происходить по различным сценариям. А именно, в два этапа, с образованием гексатической фазы с квазидальним ориентационным порядком при промежуточных температурах (модель Гальперина–Нельсона–Янга [20, 21]), либо в один этап как фазовый переход первого рода [25, 26]. В частности, двумерный кристалл из точечных кулоновских зарядов плавится в два этапа (см., например, [27]): при температуре T_m происходит диссоциация дислокационных пар и появление свободных дислокаций (образуется гексатическая жидкокристаллическая фаза), а при более высокой температуре $T_i > T_m$ происходит разрушение дислокаций и появление свободных дисклинаций (образуется изотропная жидкость).

В рассматриваемой здесь мезоскопической замкнутой квазидвумерной системе уже в низкотемпературной фазе отсутствует ориентационный поряд-

док¹⁾ (из-за наличия в решетке топологических дефектов — дисклинаций). Вопрос о существовании дислокационного плавления в мезоскопической квазидвумерной системе при увеличении числа частиц исследуется в настоящей работе.

Мы провели методом Монте-Карло компьютерное моделирование системы точечных кулоновских зарядов на поверхности сферы при конечных температурах для всех N в интервале $20 \leq N \leq 90$. В частности, мы ставили перед собой следующие задачи: 1) найти температуры плавления $T_m(N)$ замкнутой квазидвумерной треугольной решетки с топологическими дефектами, образуемой точечными кулоновскими зарядами на сфере, в зависимости от числа частиц N в системе; 2) исследовать эволюцию механизмов плавления решетки при увеличении числа частиц в мезоскопической системе и проанализировать появление макроскопических свойств.

Особый интерес вызывает появление «магических чисел» — значений N , при которых температура плавления замкнутой решетки T_m значительно возрастает по сравнению с температурой плавления при соседних значениях N .

2. ФИЗИЧЕСКИЕ РЕАЛИЗАЦИИ

Модель точечных кулоновских зарядов на поверхности сферы имеет значительное число физических реализаций, в частности, в мезоскопической области.

Одна из интересных реализаций — многозарядный кластер жидкого гелия (см., например, работу [28]). Заряженные частицы (электроны или ионы), внедренные в жидкий гелиевый кластер, благодаря поляризации диэлектрической среды находятся в эффективном удерживающем «потенциале изображения»:

$$U(r) = \frac{\alpha e^2}{\epsilon R} \left[\frac{R^2}{R^2 - r^2} + \frac{\epsilon R}{2r} \ln \left| \frac{R+r}{R-r} \right| \right] + U_0, \quad (1)$$

где r — расстояние от центра шара до точечного заряда e , R — радиус сферического кластера ($r < R$), ϵ — диэлектрическая проницаемость гелия, $\alpha = (\epsilon - 1)/(\epsilon + 1)$ — малый параметр (в частности для гелиевого кластера $\alpha \approx 0.027$). Форма потенциала (1) близка к трехмерному «потенциальному

¹⁾ Разумеется, в силу замкнутости и мезоскопичности рассматриваемой системы здесь идет речь не о дальнем порядке, имеющем смысл лишь в макроскопической системе, а об упорядочении на расстояниях порядка размера рассматриваемой системы.

ящику», благодаря чему система заряженных частиц кристаллизуется и плавится в непосредственной близости к границе сферического кластера [28].

При описании системы зарядов в многозарядном гелиевом кластере может использоваться классическое приближение. Действительно, ионы в жидком гелии образуют сложные комплексы, состоящие из собственно заряженной частицы и окружающей «шубы» — области гелия, взаимодействующей с зарядом [29]. Поляризационное взаимодействие с окружающим гелием приводит к образованию около заряда области повышенной плотности. В центре этой области находится сфера затвердевшего гелия, так называемый «снежок» (snowball). Эффективная масса снежка измерена экспериментально и составляет $M_s \approx (45 \pm 2)m_4$, где m_4 — масса атома ${}^4\text{He}$. Радиус снежка $R_s \approx (6-7) \cdot 10^{-8}$ см. Атом гелия, являясь устойчивой квантовой системой, не присоединяет к себе избыточного электрона на расстояниях порядка боровской орбиты. Электрон, введенный в жидкий гелий, создает в гелии пузырек (bubble), локализуясь внутри сферической полости. Эффективная масса пузырька $M_b \approx (243 \pm 5)m_4$. Радиус «пузырька» $R_b \approx (17-18) \cdot 10^{-8}$ см. Отрицательные ионы Cl^- , F^- , I^- , характеризующиеся высокой энергией сродства к электрону, формируют снежки в гелии, аналогично катиону He^+ [30]. Квантовыми эффектами при описании системы зарядов можно пренебречь при выполнении условия $a^* \ll RN^{-1/3}$, где $a^* = \hbar^2 \epsilon / m^* e^2$ — эффективный боровский радиус для зарядов в гелии, m^* и e — соответственно эффективная масса и заряд частицы, N — число зарядов в кластере.

Внутренняя температура гелиевых кластеров, получаемых расширением сверхзвукового пучка атомов гелия в вакуум, составляет $T \approx 0.3-0.4$ К [31]. Безразмерная эффективная температура, определяющая плавление решетки заряженных частиц внутри кластера, $\tilde{T} = k_B T \epsilon R / e^2$ (см. ниже), может контролироваться в эксперименте (при фиксированной температуре T) путем изменения радиуса R кластера.

Интересное направление исследований гелиевых кластеров связано с проблемой сверхтекучести в конечной системе [32, 33]. Отметим в этой связи, что экспериментальное обнаружение сверхтекучести в конечной системе может осуществляться также, например, с помощью изучения эффективного момента инерции и/или затухания при вращении квазидвумерной замкнутой решетки заряженных частиц, кристаллизующейся внутри многозарядного гелиевого кластера.

Эффективный удерживающий потенциал, аналогичный (1), возникает также при помещении электронов или ионов в кластеры других благородных газов. Различие состоит в том, что при экспериментальных температурах формирования кластеров диэлектрическая среда в гелиевом кластере является жидкой, а в кластерах других благородных газов — «твердой».

В классическом пределе модель точечных зарядов на поверхности сферы может быть использована при описании ряда систем: заряженной сферической полупроводниковой «точки», помещенной в диэлектрическую среду, многоэлектронного пузырька в гелии, системы электронов над поверхностью сферического гелиевого кластера.

Наконец, модель зарядов на поверхности сферы описывает ситуацию ионного кластера, охлажденного в протяженной (в малой ловушке потенциал можно считать квадратичным) электромагнитной ловушке, когда форма удерживающего потенциала близка к «потенциальному ящику».

3. СТРУКТУРА ОСНОВНОГО СОСТОЯНИЯ

Основные состояния системы из N точечных кулоновских зарядов на сфере в интересующем нас интервале значений N ($20 \leq N \leq 90$) были найдены ранее (см., например, работу [16] и ссылки в ней). Для этого в [16] использовался метод градиентного спуска с переменной величиной шага [34]. Так как система имеет большое число локальных минимумов энергии, а используемая численная схема может сойтись к любому из них, проводились независимые спуски со случайным начальным расположением зарядов на сфере. Затем из полученных решений (локальных минимумов) выбиралась конфигурация, соответствующая наименьшей энергии — глобальному минимуму энергии системы при данном N . Для проверки устойчивости полученных конфигураций применялся «отжиг» системы. В таблице приведены различные характеристики, описывающие основное состояние системы в рассматриваемом интервале значений N , в том числе энергия системы, точечные группы симметрии конфигурации, индекс решетки (см. ниже), индекс Фёппла конфигурации и др. Примеры равновесных конфигураций зарядов показаны на рис. 1.

Точечные кулоновские заряды в равновесии образуют на сфере «замкнутую треугольную решетку с топологическими дефектами», структура и свойства которой подробно описаны ранее [16]. Крат-

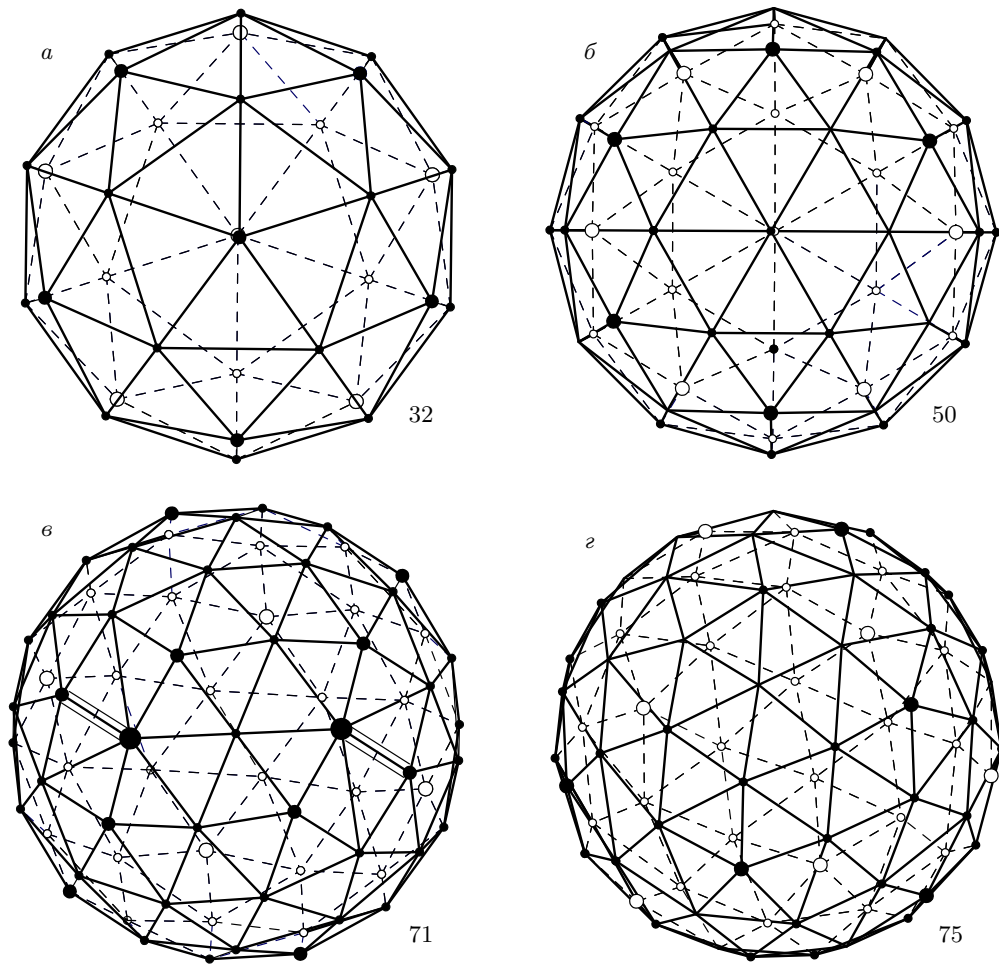


Рис. 1. Основные состояния системы из N точечных кулоновских зарядов на поверхности сферы. Заряды формируют замкнутую треугольную решетку с топологическими дефектами — дисклинациями различной мощности. Узлы решетки, соответствующие дисклинациям, показаны кружками большего размера: *a* — $N = 32$ (точная группа симметрии I_h , индекс решетки $12P$); *б* — $N = 50$ (группа симметрии D_{6d} , индекс решетки $12P$); *в* — $N = 71$, дисклинационные диполи PH показаны на рисунке тройными линиями (группа C_2 , индекс решетки $14P2H$); *г* — $N = 75$ (группа симметрии D_3 , индекс решетки $12P$)

ко приведем здесь свойства замкнутых решеток, существенные для дальнейшего изложения. Отметим, что модель замкнутой квазидвумерной решетки с топологическими дефектами может быть эффективно использована для описания наноструктур различных типов, в том числе ковалентных кластеров, и в частности, фуллеренов [35].

Замкнутая решетка — решетка, вписанная в односвязную замкнутую поверхность. В частности, в конфигурациях, являющихся решениями проблемы Томсона, заряды образуют замкнутую треугольную решетку с топологическими дефектами. Структурам фуллеренов соответствует замкнутая гексагональная решетка с топологическими дефектами (уз-

лы решетки представляют атомы углерода, ребра графа — ковалентные связи).

Топологический дефект плоской решетки — дисклинация — нарушает симметрию направлений векторов, соединяющих ближайшие эквивалентные частицы. Если разместить дисклинацию, имеющую мощность (топологический заряд) m , в точке плоской решетки, через которую изначально проходила ось симметрии n -го порядка, то при обходе вокруг этой точки значение фазы ϕ (угол поворота, отсчитываемый относительно кристаллографических осей плоской решетки) изменится на величину $\delta\phi = 2\pi m/n$. В частности, в плоской треугольной решетке частица, имеющая не шесть, а пять

Таблица. Равновесные конфигурации системы N зарядов ($N = 20-90$) на поверхности сферы (MR — дипольный момент системы, G — группа симметрии в символике Шенфлиса, θ — наименьшее угловое расстояние (в градусах) между зарядами, E_{Coul} — полная кулоновская энергия системы, L — индекс замкнутой решетки, Föppl — индекс Фёппла конфигурации)

| N | MR | G | θ | E_{Coul} | L | Föppl |
|-----|----------|----------|----------|---------------|-------|--|
| 20 | 0 | D_{3h} | 46.09330 | 150.88156833 | 12P | $1, 3^2, 6, 3^2, 1$ |
| 21 | 0.000067 | C_{2v} | 44.32038 | 167.64162240 | T10P | $1, 2^2, 4, 2^2, 4, 2^2$ |
| 22 | 0 | T_d | 43.30201 | 185.28753615 | 12P | $1, 3^2, 6, 3^3$ |
| 23 | 0 | D_3 | 41.48111 | 203.93019066 | 12P | $1, 3^7, 1$ |
| 24 | 0 | O | 42.06529 | 223.34707405 | 6F | 4^6 |
| 25 | 0.000041 | C_{1h} | 39.60981 | 243.81276030 | F10P | $1^{10}, 5, 1^{10}$ |
| 26 | 0.000074 | C_2 | 38.84214 | 265.13332632 | 12P | 2^{13} |
| 27 | 0 | D_{5h} | 39.94028 | 287.30261503 | 12P | $1, 5^5, 1$ |
| 28 | 0 | T | 37.82374 | 310.49154236 | 12P | $1, 3^9$ |
| 29 | 0 | D_3 | 36.39129 | 334.63443992 | 12P | $1, 3^9, 1$ |
| 30 | 0 | D_2 | 36.94228 | 359.60394590 | 12P | $1, 2^{14}, 1$ |
| 31 | 0.000103 | C_{3v} | 36.37311 | 385.53083806 | 12P | $1, 3^2, 6, 3^2, 6, 3^2$ |
| 32 | 0 | I_h | 37.37736 | 412.26127465 | 12P | $1, 5^6, 1$ |
| 33 | 0.000132 | C_{1h} | 33.69955 | 440.20405745 | F11PH | $1^{13}, 7, 1^{13}$ |
| 34 | 0 | D_2 | 33.27343 | 468.90485328 | 12P | $1, 2^{16}, 1$ |
| 35 | 0.000012 | C_2 | 33.10029 | 498.56987249 | 12P | $1, 4, 2^{15}$ |
| 36 | 0 | D_2 | 33.22727 | 529.12240838 | 12P | 2^{18} |
| 37 | 0 | D_{5h} | 32.33243 | 560.61888773 | 12P | $1, 5^7, 1$ |
| 38 | 0 | D_{6d} | 33.23648 | 593.03850357 | 12P | $1, 6^6, 1$ |
| 39 | 0 | D_{3h} | 32.05295 | 626.38900902 | 12P | $3^2, 6, 3, 9, 3, 6, 3^2$ |
| 40 | 0 | T_d | 31.91635 | 660.67527883 | 12P | $1, 3^2, 6, 3^2, 6, 3, 6, 3^2$ |
| 41 | 0 | D_{3h} | 31.52783 | 695.91674434 | 12P | $1, 3^2, 6, 3, 9, 3, 6, 3^2, 1$ |
| 42 | 0 | D_{5h} | 31.24474 | 732.07810754 | 13P | $1, 5^3, 10, 5^3, 1$ |
| 43 | 0.000009 | C_{2v} | 30.86664 | 769.19084646 | 13P | $1, 2, 4, 2, 4^2, 2^2, 4^3, 2, 4, 2^2$ |
| 44 | 0 | O_h | 31.25761 | 807.17426308 | 6F | $4^3, 8, 4, 8, 4^3$ |
| 45 | 0 | D_3 | 30.20718 | 846.18840106 | 12P | 3^{15} |
| 46 | 0 | T | 29.79025 | 886.16711364 | 12P | $1, 3^{15}$ |
| 47 | 0.000053 | C_{1h} | 28.78730 | 927.05927068 | F10P | $1^{20}, 7, 1^{20}$ |
| 48 | 0 | O | 29.68964 | 968.71345534 | 6F | 4^{12} |
| 49 | 0.000031 | C_3 | 28.38659 | 1011.55718265 | 12P | $1, 3^{16}$ |
| 50 | 0 | D_{6d} | 28.71140 | 1055.18231473 | 12P | $1, 6^8, 1$ |
| 51 | 0 | D_3 | 28.16539 | 1099.81929032 | 12P | 3^{17} |
| 52 | 0.000009 | C_3 | 27.66987 | 1145.41896432 | 12P | $1, 3^{17}$ |
| 53 | 0.000005 | C_{2v} | 27.13694 | 1191.92229042 | 3F6P | $1, 4, 2, 4^2, 2, 4^2, 2^2, 4^4, 2^2, 4$ |
| 54 | 0.000003 | C_2 | 27.02959 | 1239.36147473 | 12P | 2^{27} |
| 55 | 0.000007 | C_2 | 26.61507 | 1287.77272078 | 12P | $1, 2^{27}$ |
| 56 | 0 | D_2 | 26.68290 | 1337.09494528 | 12P | 2^{28} |
| 57 | 0 | D_3 | 26.70241 | 1387.38322925 | 12P | 3^{19} |

Продолжение таблицы

| <i>N</i> | MR | <i>G</i> | θ | E_{Coul} | <i>L</i> | Föppl |
|----------|----------|----------|----------|---------------|---------------------------------|---|
| 58 | 0 | D_2 | 26.15523 | 1438.61825064 | 12 <i>P</i> | $1, 2^{11}, 4, 2^2, 4, 2^{11}, 1$ |
| 59 | 0.000003 | C_2 | 26.17024 | 1490.77333528 | 14 <i>P</i> 2 <i>H</i> | $1, 2^{29}$ |
| 60 | 0 | D_3 | 25.95762 | 1543.83040098 | 12 <i>P</i> | 3^{20} |
| 61 | 0.000018 | C_1 | 25.39167 | 1597.94183020 | 12 <i>P</i> | 1^{61} |
| 62 | 0 | D_5 | 25.87987 | 1652.90940990 | 12 <i>P</i> | $1, 5^{12}, 1$ |
| 63 | 0 | D_3 | 25.25672 | 1708.87968150 | 12 <i>P</i> | 3^{21} |
| 64 | 0 | D_2 | 24.92001 | 1765.80257793 | 12 <i>P</i> | 2^{32} |
| 65 | 0.000006 | C_2 | 24.52673 | 1823.66796026 | 12 <i>P</i> | $1, 2^{32}$ |
| 66 | 0.000012 | C_2 | 24.76463 | 1882.44152531 | 12 <i>P</i> | 2^{33} |
| 67 | 0 | D_5 | 24.72726 | 1942.12270041 | 12 <i>P</i> | $1, 5^{13}, 1$ |
| 68 | 0 | D_2 | 24.43292 | 2002.87470175 | 12 <i>P</i> | 2^{34} |
| 69 | 0 | D_3 | 24.13651 | 2064.53348323 | 12 <i>P</i> | 3^{23} |
| 70 | 0 | D_{2d} | 24.29073 | 2127.10090155 | 4 <i>F</i> 4 <i>P</i> | $1, 2, 4, 2, 4^2, 2, 4^8, 2, 4^2, 2, 4, 2, 1$ |
| 71 | 0.000018 | C_2 | 23.80257 | 2190.64990643 | 14 <i>P</i> 2 <i>H</i> | $1, 2^{28}, 4, 2^5$ |
| 72 | 0 | <i>I</i> | 24.49170 | 2255.00119097 | 12 <i>P</i> | $1, 5^{14}, 1$ |
| 73 | 0.000022 | C_2 | 22.81041 | 2320.63388375 | 12 <i>P</i> | $1, 2^{36}$ |
| 74 | 0.000009 | C_2 | 22.96584 | 2387.07298184 | 12 <i>P</i> | 2^{37} |
| 75 | 0 | D_3 | 22.73643 | 2454.36968904 | 12 <i>P</i> | 3^{25} |
| 76 | 0.000012 | C_2 | 22.88571 | 2522.67487184 | 12 <i>P</i> | 2^{38} |
| 77 | 0 | D_5 | 23.28614 | 2591.85015235 | 12 <i>P</i> | $1, 5^{15}, 1$ |
| 78 | 0 | T_h | 23.42634 | 2662.04647457 | 12 <i>P</i> | 3^{26} |
| 79 | 0.000009 | C_{1h} | 22.63614 | 2733.24835748 | 11 <i>P</i> 1 <i>P</i> <i>H</i> | $1^{32}, 2, 11, 2, 1^{32}$ |
| 80 | 0 | D_{4d} | 22.77835 | 2805.35587598 | 2 <i>F</i> 8 <i>P</i> | $4^3, 8, 4^2, 8, 4^2, 8, 4^2, 8, 4^3$ |
| 81 | 0.000002 | C_2 | 21.89175 | 2878.52282966 | 12 <i>P</i> | $1, 2^{40}$ |
| 82 | 0 | D_2 | 22.20594 | 2952.56967529 | 12 <i>P</i> | $1, 2^{40}, 1$ |
| 83 | 0.000004 | C_2 | 21.64623 | 3027.52848892 | 14 <i>P</i> 2 <i>H</i> | $1, 2^{41}$ |
| 84 | 0.000005 | C_2 | 21.51267 | 3103.46512443 | 12 <i>P</i> | $1, 2^{41}, 1$ |
| 85 | 0.000005 | C_2 | 21.49758 | 3180.36144294 | 12 <i>P</i> | $1, 2^{42}$ |
| 86 | 0.000016 | C_2 | 21.52160 | 3258.21160571 | 12 <i>P</i> | 2^{43} |
| 87 | 0.000009 | C_2 | 21.45649 | 3337.00075001 | 12 <i>P</i> | $1, 2^{17}, 4, 2^{24}$ |
| 88 | 0 | D_2 | 21.48559 | 3416.72019676 | 12 <i>P</i> | 2^{44} |
| 89 | 0.000001 | C_2 | 21.18220 | 3497.43901862 | 12 <i>P</i> | $1, 2^{44}$ |
| 90 | 0 | D_3 | 21.23028 | 3579.09122272 | 12 <i>P</i> | 3^{30} |

ближайших соседей, «пентамер», соответствует дисклинации с мощностью $m = +1$, частица, имеющая семь частиц-соседей, «гептамер» — дисклинации $m = -1$ и т. д. Полная топологическая мощность M дефектов плоской или замкнутой квазидвумерной решетки:

$$M = \sum_m N_m m,$$

где N_m — число дисклинаций с топологической мощностью m ($m = \pm 1, \pm 2, \dots$). Опираясь на теорему Эйлера для выпуклых многогранников ($F + V - E =$

$= 2$, где F — число граней, V — число вершин, E — число ребер выпуклого многогранника), можно показать [16], что тип замкнутой решетки (треугольная, гексагональная, четырехугольная) определяет полную топологическую мощность дефектов в решетке, которая сохраняется независимо от числа узлов решетки и от числа, мощности и взаимного расположения отдельных топологических дефектов в замкнутой решетке. В треугольной и гексагональной решетках $M_{tr} = M_{hex} = 12$, в четырехугольной $M_q = 8$.

Структуру замкнутой решетки (неориентированный планарный граф решетки порядка N) определяют тип и взаимное расположение дефектов.

Для простейшей характеристики замкнутой решетки нами был введен [16] «индекс» решетки, который определяет, какие топологические дефекты и в каком количестве присутствуют в структуре. В замкнутых решетках, соответствующих основному состоянию системы в интервале значений $20 \leq N \leq 90$, встречаются топологические дефекты следующих типов: P -дисклинация (частица-пентамер, топологическая мощность $m = +1$), T -дисклинация (частица-тетрамер, $m = +2$), F -дисклинация (четырёхугольная грань в треугольной решетке, $m = +2$), и H -дисклинация (частица-гептамер, $m = -1$). Большая часть решеток в рассматриваемом интервале значений N имеет индекс $12P$ (см. таблицу). Образование дисклинационного диполя PH в треугольной решетке эквивалентно образованию дислокации (о дисклинациях и дислокациях в плоской решетке см. [17]).

Частицы могут быть пронумерованы в различном порядке. Одной и той же структуре из N одинаковых частиц соответствует в общем случае $N!$ различных способов нумерации частиц. Чтобы различать между собой изоморфные и неизоморфные структуры замкнутых решеток, мы вводим «граф топологических дефектов решетки» G_D .

Граф дефектов G_D , имеющий порядок N_{TD} (где N_{TD} — число дисклинаций в решетке), определяет тип и взаимное расположение дефектов в решетке: каждой вершине графа сопоставляется символическое обозначение соответствующего ей дефекта, а ребрам графа — набор из трех целых чисел (d, p, n_D) , каждое из которых характеризует взаимное расположение (инвариантное относительно нумераций частиц) двух инцидентных данному ребру дефектов решетки. Величина d — это реберное расстояние (длина кратчайшего пути) в графе решетки между данными дефектами, p — число различных путей в гра-

фе решетки, которыми это расстояние может быть реализовано, n_D — число дефектов (за вычетом двух рассматриваемых дефектов), которые принадлежат данным путям.

В рассматриваемом диапазоне значений N граф G_D однозначно определяет структуру замкнутой решетки, т. е. позволяет различать между собой конфигурации, соответствующие всем имеющимся в системе (глобальным и локальным) энергетическим минимумам.

Так как одному и тому же графу дефектов соответствует в общем случае $N_{TD}!$ различных способов нумерации вершин графа, для идентификации структуры целесообразно использовать инварианты графа дефектов — функции на графе, не зависящие от способа нумерации вершин. Инварианты графа дефектов могут быть представлены в следующей форме:

$$I = \sum_{i,j} f_1(e_{ij})g(V_i, V_j), \quad (2)$$

где g — произвольная симметричная функция двух аргументов, V_i — инварианты вершин графа дефектов вида $V_i = \sum_j f_2(e_{ij})$, f_1 и f_2 — произвольные функции от значений ребра $e_{ij} = (d, p, n_d)$. Например, гистограмма I_H распределения различных значений ребер e_{ij} графа дефектов является инвариантом графа дефектов.

Структура, являющаяся решением проблемы Томсона при $N = 32$ (см. рис. 1а), описывается следующим значением I_H в строковом представлении:

$$32 > 2.2.0 - 30|3.1.0 - 30|5.30.10 - 6|. \quad (3)$$

Это означает следующее: в графе дефектов решетки (при числе частиц $N = 32$) ребра с комбинацией значений (d, p, n_D) , равной $(2,2,0)$, встречаются 30 раз, $(3,1,0)$ — 30 раз, $(5,30,10)$ — 6 раз.

В общем случае один инвариант или комбинация нескольких инвариантов (в зависимости от размера решетки) однозначно определяют граф дефектов решетки и структуру всей решетки.

4. МОДЕЛИРОВАНИЕ

В расчетах используются безразмерные единицы координат, энергии, температуры, соответственно

$$\mathbf{r} \leftarrow \mathbf{r}/R, \quad E \leftarrow E\epsilon R/e^2, \quad T \leftarrow k_B T\epsilon R/e^2, \quad (4)$$

где R — радиус кластера, ϵ — диэлектрическая проницаемость среды, e — величина точечного заряда. В безразмерных единицах полная потенциальная энергия системы имеет вид

$$U = \sum_{i>j} |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|^{-1}, \quad |\mathbf{r}_i| = 1, \quad i, j = 1, \dots, N, \quad (5)$$

где \mathbf{r}_i — координата i -й частицы.

Для моделирования системы при конечной температуре мы используем метод Монте-Карло с классической процедурой Метрополиса [36]. Выполняется пробный случайный шаг

$$\mathbf{r}_i^{n+1} = \frac{\mathbf{r}_i^n + \mathbf{b}}{|\mathbf{r}_i^n + \mathbf{b}|}. \quad (6)$$

Здесь \mathbf{b} — случайный вектор, i — индекс частицы (случайное целое число с равномерным распределением в интервале от 1 до N). Если энергия системы в результате пробного 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 ΔE — изменение энергии системы в результате пробного шага, а T — температура системы, то шаг принимается. Абсолютное значение случайного вектора \mathbf{b} подбирается таким образом, чтобы число успешных шагов Метрополиса во время расчета составляло 20–80 % от общего числа случайных шагов.

При каждом значении температуры T для установления термодинамического равновесия в системе до начала измерений делается 2000–5000 случайных шагов. Число случайных шагов между двумя точками измерений подбирается в зависимости от числа зарядов N в кластере таким образом, чтобы избежать корреляции между значениями измеряемой величины (времена корреляции для различных величин могут различаться). Между двумя точками измерений система выполняет от 500 до 5000 случайных шагов Метрополиса.

Для определения ошибки вычисляемых средних вдоль траектории выбирается $k = 10$ блоков по 1000 точек измерения в каждом блоке. (Таким образом, каждая точка по температуре рассчитывается за $5 \cdot 10^6$ – $5 \cdot 10^7$ шагов Метрополиса.) Вычисляется среднее значение $\langle A \rangle_i$ в каждом блоке i , где $i = 1, \dots, k$. Ошибка вычисления средней величины $\langle A \rangle$ определяется как

$$\text{Err} = \frac{1}{k} \sqrt{\frac{1}{k} \sum_{i=1}^k \langle A \rangle_i^2 - \frac{1}{k^2} \left(\sum_{i=1}^k \langle A \rangle_i \right)^2}. \quad (7)$$

При моделировании поведения системы методом Монте-Карло в ходе последовательного случайного движения частиц возникает поворот системы как целого. Мы исключаем такой поворот (это важно, например, для определения случайных смещений час-

тиц относительно фиксированных узлов «кристаллической» решетки), для чего перед каждым измерением делается компенсирующий поворот системы,

$$\mathbf{r}_i = \hat{\Omega} \cdot \mathbf{r}_i, \quad (8)$$

где $\hat{\Omega}$ — матрица поворота.

Ось компенсирующего поворота $\Omega \sim \sum_i \mathbf{r}_i \times \mathbf{r}_i^0$, где \mathbf{r}_i и \mathbf{r}_i^0 — координаты частиц соответственно в текущий и в начальный моменты времени.

Угол ω компенсирующего поворота определяется из условия равенства нулю (после компенсирующего поворота) среднего поворота частиц относительно их начального положения в плоскости перпендикулярной оси Ω . Введя обозначения

$$\begin{aligned} \mathbf{t}_i &= \mathbf{r}_i - (\mathbf{r}_i \cdot \Omega) \Omega, \\ \mathbf{t}_i^0 &= \mathbf{r}_i^0 - (\mathbf{r}_i^0 \cdot \Omega) \Omega, \\ a_i &= \frac{|\mathbf{t}_i \times \mathbf{t}_i^0|}{|\mathbf{t}_i| \cdot |\mathbf{t}_i^0|}, \\ s_i &= \begin{cases} 1, & [\mathbf{t}_i \times \mathbf{t}_i^0] \cdot \Omega > 0, \\ -1, & [\mathbf{t}_i \times \mathbf{t}_i^0] \cdot \Omega \leq 0, \end{cases} \\ b_i &= \begin{cases} \arcsin a_i, & \mathbf{t}_i \cdot \mathbf{t}_i^0 > 0, \\ \pi - \arcsin a_i, & \mathbf{t}_i \cdot \mathbf{t}_i^0 \leq 0, \end{cases} \end{aligned} \quad (9)$$

получим

$$\omega = \frac{1}{N} \sum_i s_i b_i. \quad (10)$$

Вычисляемые величины

При моделировании системы при каждом значении безразмерной температуры T вычисляются следующие основные величины (везде ниже угловые скобки означают усреднение по траектории Монте-Карло, черта над символом — усреднение по ансамблю из N частиц):

1) **Средняя потенциальная энергия системы**

$$\langle E_{pot} \rangle = \left\langle \sum_{i>j} |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|^{-1} \right\rangle - E_0, \quad (11)$$

где \mathbf{r}_i — радиус-вектор i -й частицы, E_0 — энергия глобального минимума системы при данном значении N .

2) **Среднеквадратичные и абсолютные смещения частиц.** Квазидвумерная замкнутая решетка на поверхности сферы из-за присутствия топологических дефектов не обладает свойством трансляционной инвариантности. Таким образом, отрелаксировавшая решетка не имеет периода в строгом

смысле. Одним из характерных расстояний в данном случае является величина ρ_{min} — минимальное расстояние между зарядами в кластере при данном N в равновесной конфигурации. В качестве характеристики масштаба тепловых движений частиц мы вводим аналог параметра Линдемана для замкнутой квазидвумерной треугольной решетки:

$$\delta_L = \sqrt{\langle \mathbf{u}_i^2 \rangle} / \rho_{min}^2, \quad (12)$$

где $\mathbf{u}_i = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_i^0$ — смещение i -й частицы из начального положения, после исключения поворота системы как целого, см. выражения (8), (10).

Также вычисляются усредненные по траектории Монте-Карло среднее и максимальное по ансамблю абсолютные смещения частиц, соответственно

$$\langle \bar{u} \rangle = \left\langle \frac{1}{N} \sum_i |\mathbf{u}_i| \right\rangle_T, \quad (13)$$

$$\langle u_{max} \rangle = \langle \max(\{|\mathbf{u}_i|\})_N \rangle_T, \quad (14)$$

и их дисперсии, а также — максимальное для всей траектории Монте-Карло абсолютное значение смещения, $\max(\{u_{max}\})_T$.

Поскольку в рассматриваемой системе частицы движутся по поверхности единичной сферы, смещения частиц всегда ограничены, $|\mathbf{u}_i| \leq 2$. В случае расплавленного состояния кластера оценку среднего абсолютного смещения частиц получаем, предполагая равномерное распределение векторов \mathbf{r}_i по поверхности сферы. Интегрирование дает

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \langle \bar{u} \rangle = \frac{1}{4\pi R^2} \int_0^\pi 2\pi R^3 \sin \frac{\theta}{2} \sin \theta d\theta = \frac{4}{3} R, \quad (15)$$

где t — время, а $R = 1$ — радиус сферы.

3) **Среднее число дислокаций** $\langle N_D \rangle$ в замкнутой решетке. Макроскопическая двумерная решетка кулоновских частиц плавится при образовании в системе свободных дислокаций. При этом модуль сдвига решетки μ обращается в нуль. Интересно сравнить поведение макроскопической истинно двумерной системы и рассматриваемой мезоскопической квазидвумерной системы.

Дислокация в двумерной решетке [17, 20] эквивалентна дисклинационному диполю (связанной паре дисклинаций с равным по модулю и противоположным по знаку топологическим зарядом). В плоской треугольной решетке дислокация — это диполь из одной частицы-пентамера (т.е. частицы, у которой в решетке имеется не шесть, а пять ближайших соседей; топологический заряд такого дефекта $m = +1$)

и одной частицы-гептамера (семь соседей; топологический заряд дефекта $m = -1$). В разреженной двумерной системе дислокаций ($N_D \ll N$) в треугольной решетке число дислокаций N_D , очевидно, дается формулой $N_D = N_5 = N_7$, где N_5 и N_7 — число частиц-пентамеров и число частиц-гептамеров. В исследуемой замкнутой квазидвумерной треугольной решетке полная топологическая мощность дефектов всегда $M = +12$, т.е. в замкнутой решетке независимо от наличия или отсутствия дисклинационных диполей всегда, и в основном состоянии в частности, присутствуют положительные дисклинации. Поэтому для определения числа дислокаций в замкнутой треугольной решетке будем использовать отрицательные дисклинации. Так как относительное число дислокаций в исследуемой мезоскопической системе может быть не мало ($N_D \sim N$), учтем возможность образования в решетке сложных конфигураций дефектов, включающих сдвоенные и строенные дислокации. Можно показать, что с учетом сдвоенных и строенных дислокаций число дислокаций N_D в замкнутой треугольной решетке определяется формулой

$$N_D = N_7 + 2N_8 + 3N_9, \quad (16)$$

где N_k — число частиц в решетке, имеющих k частиц-соседей. Появление дефектов со значением $k > 9$ (что соответствует топологической мощности дефекта $m > 3$) крайне маловероятно при рассматриваемых температурах. Формула (16) учитывает все дисклинационные диполи, присутствующие в замкнутой треугольной решетке, в том числе диполи с длинами больше одного «периода» решетки.

Как показывают результаты расчетов, фазовый переход между низкотемпературной и высокотемпературной фазами в рассматриваемой системе размыт. Температурная зависимость средней потенциальной энергии системы не имеет особенностей в области фазового перехода (рис. 2).

На рис. 3 представлены типичные зависимости величин абсолютных смещений $\langle \bar{u} \rangle$, $\langle u_{max} \rangle$, $\max(\{u_{max}\})_T$ от температуры (кластер из $N = 27$ частиц, число шагов Монте-Карло $12 \cdot 10^7$). Штриховыми линиями на графике отмечены характерные расстояния системы: 2 (максимально возможное смещение), 4/3 (среднее смещение для расплавленного состояния) и 0.683 (значение ρ_{min} при $N = 27$). Фазовый переход между твердой и жидкой фазами в данной системе происходит в интервале температур $(6-12) \cdot 10^{-4}$; это область значительных гетерофазных флуктуаций в мезоскопической системе. Ниже, говоря о температуре фазового перехода

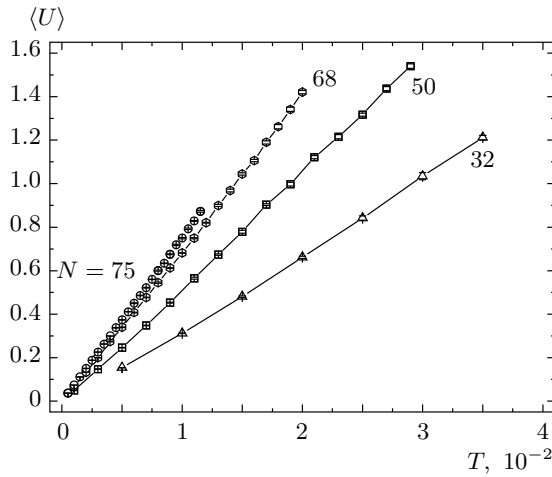


Рис. 2. Температурная зависимость средней потенциальной энергии (5) системы точечных зарядов на сфере для различных значений N в области фазового перехода. Здесь и ниже на рисунках использованы безразмерные переменные (4)

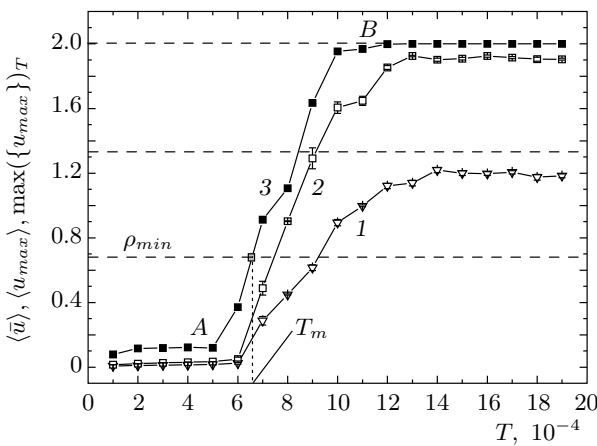


Рис. 3. Зависимости абсолютных смещений $\langle \bar{u} \rangle$, $\langle u_{max} \rangle$, $\max(\{u_{max}\})_T$ (соответственно кривые 1, 2, 3) от температуры в кластере $N = 27$

и о значениях измеряемых величин при данной температуре, мы используем следующий подход. За точку перехода принята температура T_m , при которой максимальное (при данной температуре) абсолютное смещение частиц становится больше, чем минимальное расстояние ρ_{min} между парами частиц (см. рис. 3):

$$T_m : \max(\{u_{max}\}_{T_m}) = \rho_{min}. \quad (17)$$

Таким образом, величине T_m отвечает примерно середина «переходной» области (AB — см. рис. 3) меж-

ду двумя «фазами», отвечающая быстрому росту среднеквадратичного смещения.

Для каждого значения N ($20 \leq N \leq 90$) проводится моделирование нагрева системы с шагом по температуре ΔT ($\Delta T = (1-5) \cdot 10^{-4}$). Начальное положение — глобальный минимум системы при данном N . Переход к следующему значению N происходит, если при последнем значении температуры T_k оказалось выполнено условие плавления. На основании последних двух температурных точек, T_k и T_{k-1} , вычисляется температура плавления T_m (в линейном приближении):

$$T_m = T_{k-1} + (T_k - T_{k-1}) \times \frac{\rho_{min} - \max(\{u_{max}\})_{k-1}}{\max(\{u_{max}\})_k - \max(\{u_{max}\})_{k-1}}. \quad (18)$$

Затем (в линейном приближении) вычисляются интересующие нас значения измеряемых величин A_i в точке плавления T_m :

$$A_i(T_m) = A_i(T_{k-1}) + (A_i(T_k) - A_i(T_{k-1})) \times \frac{T_m - T_{k-1}}{T_k - T_{k-1}}, \quad (19)$$

где $A_i(T_k)$ — значение величины A_i при температуре T_k .

5. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

На рис. 4 показаны температурные зависимости параметра Линдемана (12) при числе зарядов в кластере $N = 20-26$ и $N = 43-48$. Для всех представленных конфигураций число шагов Монте-Карло при каждом значении температуры T равно $3 \cdot 10^7$, шаг по температуре $\Delta T = 1 \cdot 10^{-4}$. Началу плавления соответствуют точки на графиках, в которых значения $\delta_L(T)$ начинают резко расти.

На рис. 5 показана зависимость температуры плавления кластера от числа зарядов в кластере N . В масштабе данного рисунка температура начала плавления и температура T_m (17) практически совпадают для всех значений $N = 20-90$. Для двух диапазонов значений N (20–26 и 43–48) на вставках с более высоким разрешением отдельно приведены графики для температуры T_m (17) и для температуры, соответствующей началу плавления.

Общая тенденция — рост температуры плавления с увеличением поверхностной плотности кулоновского заряда. Имеются значения N («магические

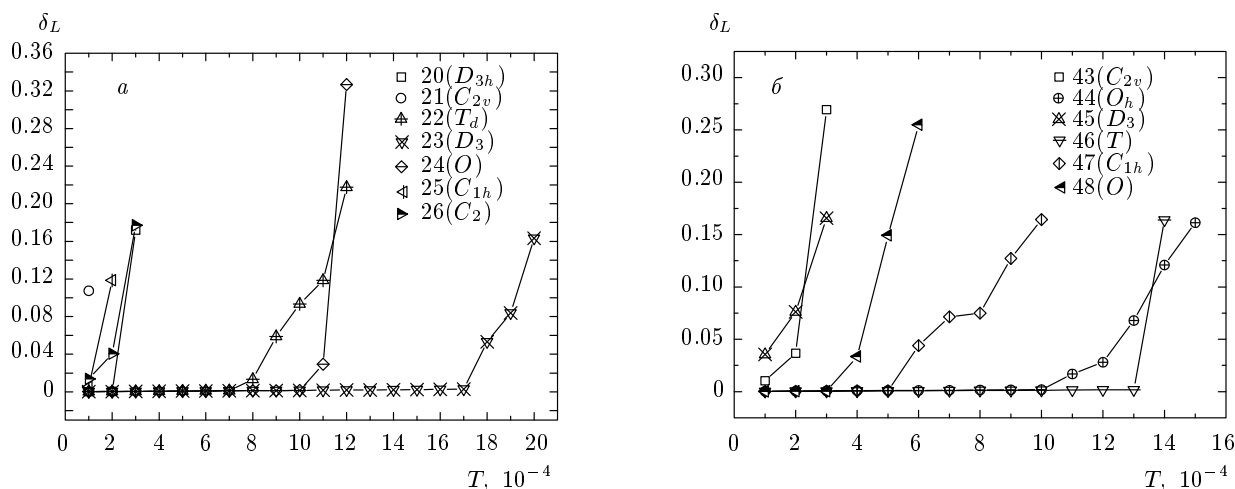


Рис. 4. Зависимость параметра Линдемана δ_L от температуры кластера T при количестве зарядов в кластере $N = 20-26$ (а) и $N = 43-48$ (б). Для каждого значения N приводится точечная группа симметрии равновесной конфигурации

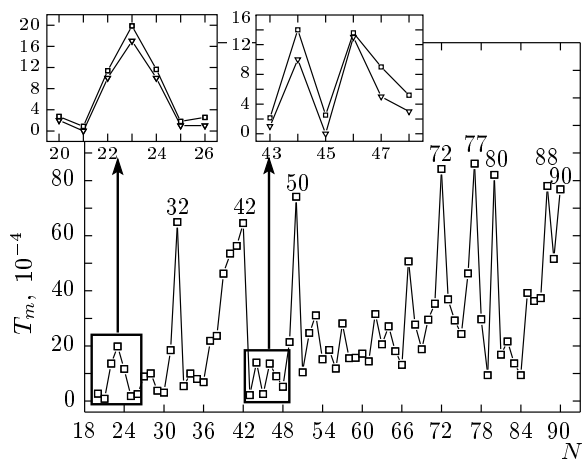


Рис. 5. Зависимость температуры плавления T_m замкнутой решетки от числа зарядов в кластере N

числа»), при которых температуры плавления решеток резко (иногда — на порядок) выше, чем температуры плавления решеток при близком числе зарядов. Можно выявить определенную зависимость между данным качеством особой «тугоплавкости» и точечной группой симметрии, описывающей основное состояние системы. Всем (в данном диапазоне значений N) anomalно тугоплавким системам соответствуют высокие группы симметрии (см. таблицу): например, I_h ($N = 32$), I (72), T_d (40), D_{6d} (50), D_{5h} (42), D_{3h} (39, 41), D_5 (77), D_{4d} (80).

В то же время обратное неверно: высокая группа симметрии не гарантирует высокую температуру плавления. Например, системы при $N = 29, 45$ (группа D_3), при $N = 48$ (O), при $N = 78$ (T_h) не относятся к тугоплавким.

Температура плавления каждой конкретной конфигурации определяется высотой энергетических барьеров относительно различных (всех возможных) способов движения частиц в кластере. Таким образом, тугоплавкость мезоскопической системы кулоновских частиц, образующих замкнутую треугольную решетку с топологическими дефектами на поверхности сферы, при данном значении N определяется не только группой симметрии конфигурации, но целиком структурой замкнутой решетки при данном N . (Структура замкнутой треугольной решетки с топологическими дефектами однозначно определяется графом топологических дефектов G_D — см. выше.)

На рис. 6 представлены графики температурной зависимости среднего числа дислокаций (16) в замкнутой решетке для $N = 32$ и $N = 75$. Штриховыми линиями на графиках отмечены точки плавления решеток T_m (17). При $N = 32$ плавление происходит без участия дислокаций и жидкая фаза при достаточно высоких температурах не содержит дисклинационных диполей. Напротив, при большем числе частиц ($N = 75$) плавление сопровождается образованием дислокаций.

На рис. 7 показано среднее число дислокаций $\langle N_D \rangle$ при температуре плавления решетки T_m

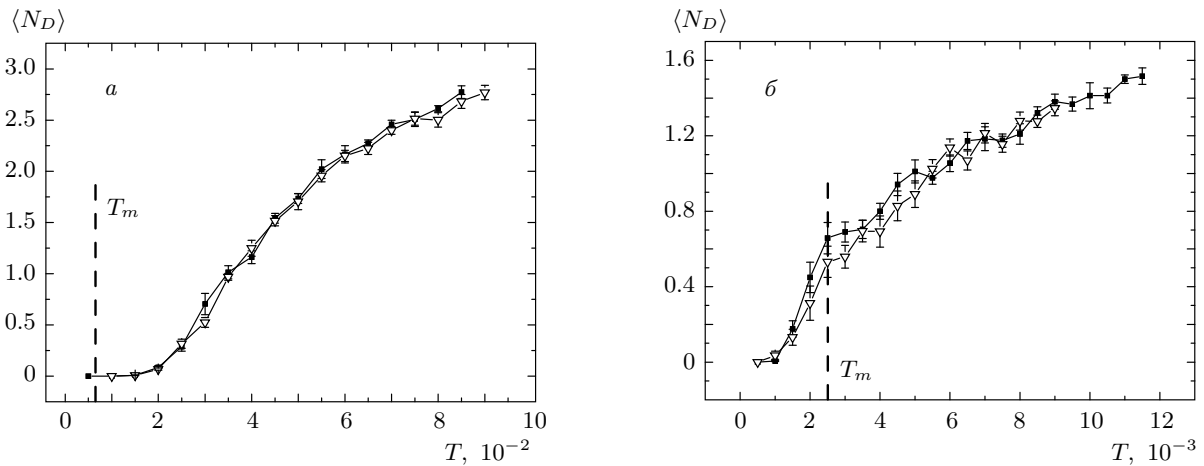


Рис. 6. Зависимости среднего числа дислокаций $\langle N_D \rangle$ в замкнутой решетке из N зарядов от температуры при $N = 32$ (а) и $N = 75$ (б). Темные символы соответствуют нагреванию, светлые — охлаждению

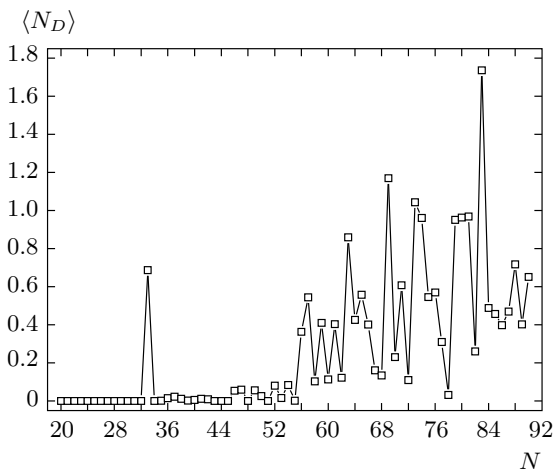


Рис. 7. Среднее число дислокаций $\langle N_D \rangle$ в точке плавления T_m замкнутой решетки в зависимости от числа зарядов в кластере N ($20 \leq N \leq 90$)

в зависимости от числа зарядов в кластере N . При «малых» N ($N \leq 32$) решетка плавится без участия дислокаций (дисклинационных диполей) и жидкая фаза при достаточно высоких температурах не содержит дисклинационных диполей. Например, при $N = 32$ температура плавления решетки $T_m = 6.5 \cdot 10^{-3}$, но $\langle N_D \rangle(T) \equiv 0$ вплоть до температур примерно $1.2 \cdot 10^{-2}$. Подчеркнем, что плавление макроскопической двумерной плоской решетки происходит путем появления свободных дислокаций (фазовый переход Березинского–Костерлица–Таулеса [18–21]).

Мы обнаружили необычный механизм бездисло-

кационного плавления мезоскопических кластеров со структурой замкнутой квазидвумерной решетки, принципиально отличный от механизма плавления макроскопической двумерной системы. Данный механизм, реализующийся при малом числе частиц в кластере, — кооперативное ротационное движение «колец» частиц.

На рис. 8 показан поворот кольца из шести зарядов в замкнутой решетке из $N = 32$ зарядов без участия дислокаций. При повороте кольца происходит перемещение топологических дефектов внутри решетки (рис. 8б). Так как ось поворота совпадает с осью симметрии системы третьего порядка, при повороте кольца на угол $2\pi n/3$, $n = 1, 2, \dots$ структура замкнутой решетки (описываемая графом дефектов G_D) не изменяется. Заметим, что состояния системы с распределением дисклинаций в решетке, отличным от распределения в основном состоянии (глобального минимума), могут соответствовать какому-то из локальных минимумов системы (с увеличением N число локальных минимумов системы быстро растет [16]) либо промежуточному (не стабильному и не метастабильному) состоянию решетки. В системе из $N = 32$ зарядов имеется только один (глобальный) минимум энергии. Таким образом все промежуточные состояния замкнутой решетки с расположением дефектов, отличным от основного состояния, не являются стабильными или метастабильными.

В отличие от двумерных кластеров в центрально-симметричных удерживающих потенциалах [9, 37], в данной системе ось «ориентационного плавления»

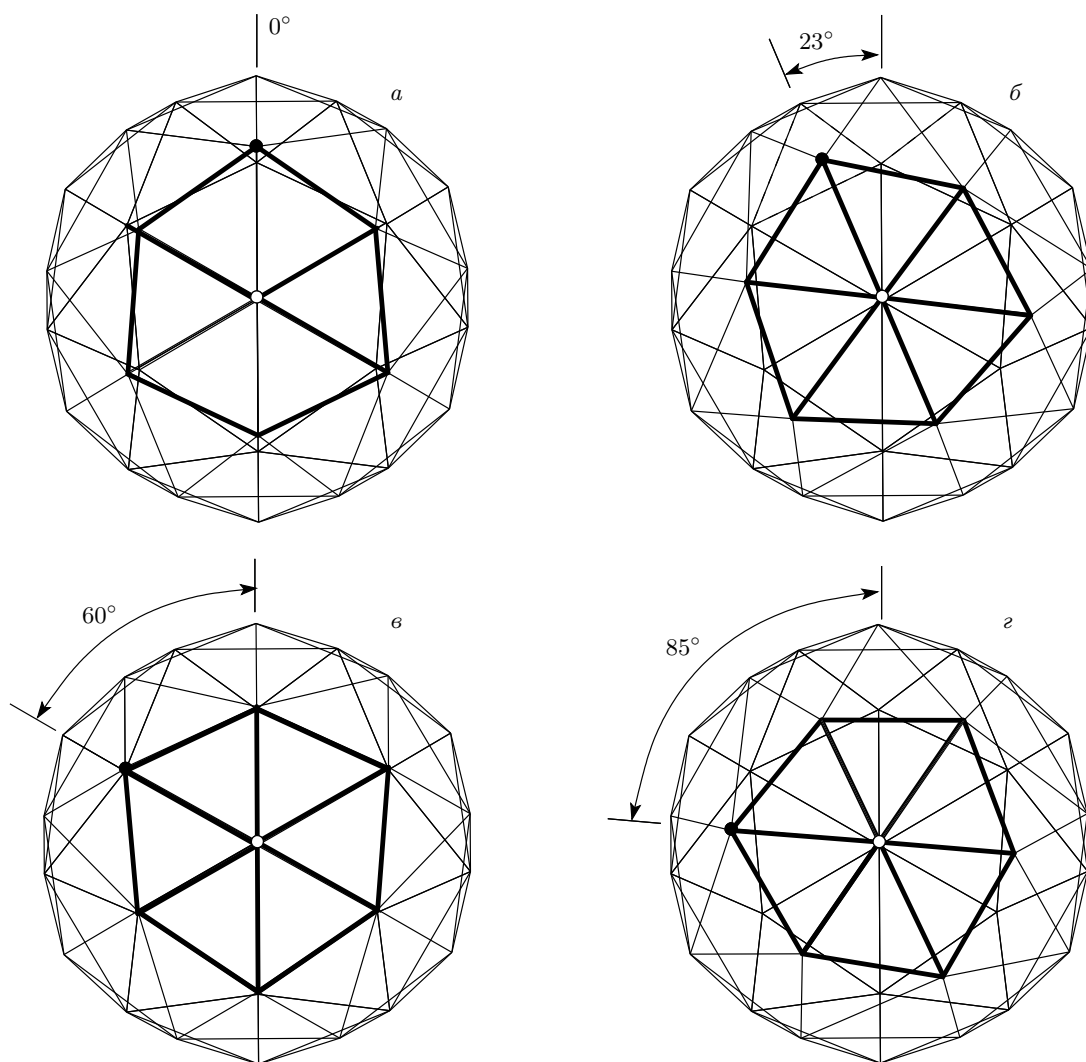


Рис. 8. Поворот «кольца» из шести зарядов в кластере $N = 32$ без образования дислокаций в замкнутой решетке. При повороте происходит перемещение топологических дефектов внутри решетки. Заряд, выделенный черным кружком, в положении a — нормальный узел решетки, в положении $б$ — топологический дефект (пентамер), в положениях $в$ и $г$ — нормальный узел решетки. Ось поворота кольца совпадает с осью симметрии третьего порядка — структура замкнутой решетки, определяемая расположением топологических дефектов внутри решетки, сохраняется при повороте на угол $2\pi n/3$, $n = 1, 2 \dots$

ния» заранее никак не выделена и поворот колец зарядов может происходить вокруг множества различных осей. Подчеркнем также следующую особенность плавления кластеров при малых N : данное плавление является нетопологическим (при плавлении решетки сохраняется число топологических дефектов в системе). Действительно, суммарный топологический заряд всех дефектов замкнутой треугольной решетки сохраняется всегда ($M = +12$), а число дисклинационных диполей в точке T_m равно нулю при малых N .

В окрестности температуры T_m , соответствующей разрушению низкотемпературной фазы в рассматриваемой системе, при $N > 32$ в решетке образуются дислокации (дисклинационные диполи). Заметное число дислокаций в окрестности точки плавления начинает появляться в решетках при $N \gtrsim 50$. (Исключение составляет кластер при $N = 33$, в структуре которого содержится дисклинационный диполь уже в основном состоянии. Индекс решетки равен $F11PH$ — см. таблицу). В этом смысле можно говорить о том, что рассматриваемая систе-

ма при $N \approx 50$ начинает приобретать макроскопические свойства (переход к дислокационной модели плавления). В то же время эффекты конкретной структуры играют значительную роль во всем диапазоне рассмотренных значений $20 \leq N \leq 90$; об этом можно судить по существенно немонотонным зависимостям $T_m(N)$ и $\langle N_D \rangle(N, T = T_m)$.

6. ВЫВОДЫ

Структуру рассматриваемой системы точечных зарядов на поверхности сферы можно представить в виде замкнутой квазидвумерной треугольной решетки с необходимо присутствующими в ней топологическими дефектами (суммарная топологическая мощность дефектов M определяется только типом решетки; в частности, для замкнутой треугольной решетки всегда $M = +12$). Характер плавления и температура плавления такой системы существенно зависят от структуры решетки при данном N , определяемой взаимным расположением топологических дефектов в решетке (графом дефектов G_D).

Существуют «магические числа» — значения N (например, $N = 32, 39-42, 50, 67, 72, 77, 80$), при которых температура плавления кластеров существенно выше, чем при соседних значениях N . Всем аномально «тугоплавким» системам соответствуют высокие группы симметрии в основном состоянии ($I, I_h, T_d, D_{6d}, D_{3h} \dots$). В то же время обратное неверно: высокая группа симметрии не гарантирует тугоплавкость системы.

Системы при «малых» N ($N \leq 32$) плавятся без участия дислокаций. При температурах значительно выше температуры плавления решетки жидкость из точечных зарядов на поверхности сферы содержит только положительные дисклинации (так же, как и «кристалл» из точечных зарядов в основном состоянии системы) и не содержит ни дислокаций, ни отрицательных дисклинаций. Мы обнаружили интересный механизм бездислокационного (негеометрического) плавления замкнутой квазидвумерной треугольной решетки, связанный с кооперативным ротационным движением «колец» зарядов. Подчеркнем, что плавление макроскопической двумерной плоской решетки (по крайней мере, для кулоновских частиц) определяется сценарием Костерлица — Таулеса — Гальперина — Нельсона — Янга, согласно которому плавление связано с распариванием дислокационных диполей и появлением свободных дислокаций. Заметное число дислокаций в окрестности точки плавления появляется в систе-

мах точечных зарядов на поверхности сферы при $N \gtrsim 50$. При дальнейшем увеличении температуры число дисклинационных диполей в жидкой фазе монотонно возрастает. Так, с увеличением N система приобретает некоторые макроскопические свойства.

Авторы признательны В. Н. Рыжову за полезные обсуждения результатов работы.

ЛИТЕРАТУРА

1. T. Heinzel, *Mesoscopic Electronics in Solid State Nanostructures*, Wiley-VCH, New York (2007).
2. M. Kastner, *Phys. Today* **46**, 24 (1993).
3. D. Kielpinski, C. Monroe, and D. J. Wineland, *Nature* **417**, 709 (2002).
4. J. Benhelm, G. Kirchmair, C. F. Roos, and R. Blatt, *Nature (Physics)* **4**, 463 (2008).
5. J. J. Thomson, *Phil. Mag.* **7**, 237 (1904).
6. Ю. Е. Лозовик, *УФН* **153**, 356 (1987).
7. H. A. Munera, *Nature* **320**, 597 (1986).
8. L. T. Wille, *Nature* **324**, 46 (1986).
9. Yu. E. Lozovik and V. A. Mandelshtam, *Phys. Lett. A* **145**, 269 (1990); **165**, 469 (1992).
10. T. Erber and G. M. Hockney, *J. Phys. A* **24**, L1369 (1991).
11. J. R. Edmundson, *Acta. Cryst. A* **49**, 648 (1993).
12. E. L. Altshuler, T. J. Williams, E. R. Ratner et al., *Phys. Rev. Lett.* **72**, 2671 (1994).
13. A. M. Livshits and Yu. E. Lozovik, *Chem. Phys. Lett.* **314**, 577 (1999).
14. F. Diedrich, E. Peik, J. M. Chen et al., *Phys. Rev. Lett.* **59**, 2931 (1987).
15. D. J. Wineland, J. C. Bergquist, Wayne M. Itano et al., *Phys. Rev. Lett.* **59**, 2935 (1987).
16. А. М. Лившиц, Ю. Е. Лозовик, *Кристаллография* **47**, 7 (2002).
17. В. А. Лихачев, Р. Ю. Хайров, *Введение в теорию дисклинаций*, Изд-во ЛГУ, Ленинград (1975).
18. В. Л. Березинский, *ЖЭТФ* **59**, 907 (1970).
19. J. M. Kosterlitz and D. J. Thouless, *J. Phys.* **86**, 1181 (1973).

20. B. I. Halperin and D. R. Nelson, *Phys. Rev. B* **19**, 2457 (1979).
21. A. P. Young, *Phys. Rev. B* **19**, 1855 (1979).
22. F. R. N. Nabarro, *Theory of Crystal Dislocations*, Clarendon Press, Oxford (1967), p. 821.
23. В. Н. Рыжов, Е. Е. Тареева, *ЖЭТФ* **108**, 2044 (1995).
24. Л. М. Помирчи, В. Н. Рыжов, Е. Е. Тареева, *ТМФ* **130**, 119 (2002).
25. S. W. Koch and F. M. Abraham, *Phys. Rev. B* **27**, 2964 (1983).
26. S. T. Chui, *Phys. Rev. B* **28**, 933 (1983).
27. В. М. Беданов, Г. В. Гадияк, Ю. Е. Лозовик, *ЖЭТФ* **88**, 1622 (1985).
28. А. М. Лившиц, Ю. Е. Лозовик, *ЖЭТФ* **132**, 647 (2007).
29. В. Б. Шикин, Ю. П. Монарха, *Двумерные заряженные системы в гелии*, Наука, Москва (1989).
30. А. Г. Храпак, *Письма в ЖЭТФ* **86**, 282 (2007).
31. Г. Н. Макаров, *УФН* **178**, 337 (2008).
32. S. Grebenev, J. P. Toennies, and A. F. Vilesov, *Science* **279**, 2083 (1998).
33. Б. С. Думеш, А. В. Потапов, Л. А. Сурин, *УФН* **179**, 317 (2009).
34. А. А. Самарский, А. В. Гулин, *Численные методы*, Наука, Москва (1989).
35. А. М. Лившиц, Ю. Е. Лозовик, *ФТТ* **45**, 1339 (2003).
36. N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth et al., *J. Chem. Phys.* **21**, 1087 (1953).
37. Yu. E. Lozovik and E. A. Rakoch, *Phys. Rev. B* **57**, 1214 (1998).