

ДВУМЕРНЫЕ МЕЗОСКОПИЧЕСКИЕ КЛАСТЕРЫ ПЫЛЕВОЙ ПЛАЗМЫ: СТРУКТУРА И ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ

Г. Е. Астрахарчик, А. И. Белоусов, Ю. Е. Лозовик*

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

Поступила в редакцию 6 апреля 1999 г.

Рассматривается двумерный мезоскопический кластер частиц «пылевой плазмы», реализацией которого может являться система микрочастиц в высокочастотном газовом разряде. Для кластеров из $N = 2-40$ частиц в гармоническом удерживающем потенциале находятся основные конфигурации и соответствующие им собственные частоты и векторы. Показано, что изменение дебаевской длины экранирования заряда частиц в плазме R может приводить к перестройкам структуры основного состояния системы, что проявляется в виде фазовых переходов первого или второго рода по параметру R . Методы Монте-Карло и молекулярной динамики используются для детального исследования разупорядочения («плавления») кластеров. Изменением характерного радиуса взаимодействия частиц в кластере можно модулировать его термодинамические свойства и характер фазовых переходов, переводя систему контролируемым образом в полностью упорядоченное, ориентационно разупорядоченное или полностью разупорядоченное состояние. Обсуждается возможность динамического сосуществования различных состояний кластеров «пылевой плазмы».

PACS: 64.70.Dv, 73.20.Dx, 61.20.J

1. ВВЕДЕНИЕ

Малые заряженные частицы «пыли» в нейтрализующей плазме — весьма распространенная система, которую можно наблюдать на разных масштабах и в разных средах: кластеры пыли в межзвездной среде и в верхних слоях атмосферы, упорядоченные структуры в газовом разряде, используемом при технологической обработке различных материалов, дают далеко не полный перечень подобных систем. В последнее время значительное внимание уделяется экспериментальному исследованию «пылевой плазмы», системы углеродных, силиконовых или полимерных микрочастиц в высокочастотном газовом разряде [1–4], ламинарной струи слабоионизованной термической плазмы [3, 5] и даже в условиях микрогравитации без использования электрических ловушек для удержания частиц [4]. Одной из основных причин внимания к таким искусственно приготовленным объектам является возможность непосредственного наблюдения, например при помощи лазерной интерференции, типа и динамики образования упорядоченных структур частиц «пыли». Исследования кристаллов и жидкостей пыльной плазмы *in situ*, проводящиеся в ряде лабораторий мира [1–3], не только важны для понимания физики плазмы, но также являются мощным средством для изучения процессов

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

плавления, отжига и формирования в кристаллической фазе дефектов различного рода. С другой стороны, в последние годы вызывает большой научный и прикладной интерес изучение микрокластеров, интересных сильной структурной чувствительностью к числу частиц, необычными перестройками структуры с ростом температуры и т. п. [6–11]. Интерес к системам малого числа частиц подкрепляется также значительным экспериментальным и теоретическим материалом, свидетельствующим о том, что кластеры могут сохранять свою индивидуальность внутри массивного тела, влияя на его свойства.

Целью настоящей работы является исследование статических и термодинамических свойств малых кластеров «пыли» в плазме. В проводящихся в настоящее время экспериментах малые частицы, погруженные в плазму, приобретают значительный (как правило) отрицательный заряд $-Ze$, $Z \sim 10^3$, вследствие более высокой подвижности и температуры электронов плазмы. Дебаевское экранирование заряда частиц модифицирует кулоновское взаимодействие между частицами, и с хорошей точностью (обсуждение этого вопроса — см. в работе [12, 13]) межчастичное взаимодействие может быть описано парным потенциалом Юкавы¹⁾. Используя параметры экспериментов [1, 2] с полимерными частицами характерных размеров $3 \cdot 10^{-4}$ см в аргоновой плазме высокочастотного разряда (~ 10 МГц) при низком давлении (~ 1 Торр), оценивая температуры электронов и ионов плазмы, соответственно, как $T_e \approx 1700$ К и $T_i \approx 300$ К и принимая примерно равные концентрации электронов и ионов плазмы $n_e \approx n_i \sim 10^9$ см⁻³, получим для оценки радиуса экранирования Дебая

$$R = \left(\frac{4\pi e^2 n_i}{k_b T_i} + \frac{4\pi e^2 n_e}{k_b T_e} \right)^{-1/2},$$

т. е.

$$R \approx \sqrt{k_b T_i / 4\pi e^2 n_i} \approx 10^{-2} \text{ см},$$

что является величиной одного порядка со средним расстоянием между частицами «пыли». В случае кластера малого числа частиц все частицы располагаются в одном (приэлектродном) слое и мы имеем двумерный кластер N «пылевых» частиц в плазме, выражение для энергии которого может быть представлено в виде

$$E = (Ze)^2 \sum_{i < j} \frac{\exp(-|r_{ij}|/R)}{|r_{ij}|} + \alpha \sum_{i=1}^N |r_i|^2. \quad (1)$$

Здесь предполагается, что частицы удерживаются квадратичным внешним потенциалом силы α .

Отметим, что в проводившихся недавно экспериментах по наблюдению малых пылевых кластеров [2] исследуемая система была по существу квазидвумерной, состоящей из вертикальных цепочек частиц пыли. Такие цепочки могут образовываться [14–16] вследствие наличия, помимо юкавовского потенциала, также и диполь-дипольного взаимодействия между частицами, причиной которого, как предполагается, является

¹⁾ В проводящихся экспериментах поперечные размеры «облака» частиц в плазме значительно превышают дебаевскую длину экранирования R , и поэтому, даже для рассматриваемых в настоящей статье «двумерных» кластеров, использование потенциала Юкавы, связанного с трехмерной экранировкой заряда частиц плазмой, вполне оправдано.

фокусировка отрицательным зарядом частицы пыли потока положительных ионов, летящих к электроду из облака плазменного разряда [2, 12, 13]. Эти короткие (до 20 частиц) цепочки могли двигаться только в горизонтальной плоскости, образуя кластер с характерной оболочечной структурой, проявляющий эффекты ориентационного и полного плавления. Также отметим, что непосредственное экспериментальное определение потенциала взаимодействия между двумя частицами дало лишь взаимодействие Юкавы, т. е. диполь-дипольное взаимодействие на рассматриваемых расстояниях давало меньший вклад [17]. Ясно, что в рассматриваемом здесь двумерном случае дополнительный учет диполь-дипольного взаимодействия не приведет к новым качественным эффектам.

При использовании безразмерных единиц для расстояния $r_0 = (Ze)^{2/3}/\alpha^{1/3}$ и энергии $E_0 = \alpha r_0^2$ выражение для энергии кластера принимает вид

$$E = \sum_{i < j} \frac{\exp(-\gamma |r_{ij}|)}{|r_{ij}|} + \sum_{i=1}^N |r_i|^2. \quad (2)$$

Таким образом, термодинамическое состояние кластера заданного числа частиц определяется двумя безразмерными параметрами: обратной длиной экранирования $\gamma = r_0/R$ и безразмерной температурой системы $\Theta = k_b T/E_0$. Управление характерным радиусом взаимодействия частиц $1/\gamma$ может осуществляться изменением дебаевского радиуса экранирования R , являющегося функцией плотности и температуры плазмы. Измерение трансляционной температуры частиц²⁾ может быть осуществлено по теореме вириала из наблюдений за колебаниями частиц (либо по «доплеровскому» контуру рассеянного излучения).

В настоящей работе проведено исследование свойств двумерных кластеров «пылевой плазмы» (2) как функции управляющего параметра γ и температуры Θ . Для ряда кластеров, содержащих $N < 40$ частиц, найдены структуры «пылевых кластеров», спектры гармонических колебаний и энергии основных состояний (разд. 2). Изменение дебаевского радиуса экранирования (параметра γ) приводит к перестройкам структуры основного состояния при некоторых γ^* , что может рассматриваться как осуществление фазовых переходов различного рода по параметру γ . На примерах кластеров, состоящих из $N = 10, 33, 37$ частиц, показано, что исследуемые системы могут испытывать ряд фазовых переходов первого и второго родов в широкой области значений $\gamma \in [0, 30]$. Для рассмотрения термодинамических свойств малых систем «пылевой плазмы» и исследования явлений разупорядочения (плавления) различных типов применялись методы молекулярной динамики и Монте-Карло в каноническом ансамбле (разд. 3). Мы покажем, что термодинамическим состоянием малых кластеров частиц «пыли» можно управлять не только температурой кластера, но также и длиной экранирования Дебая, т. е. плотностью и температурой плазмы, в которую погружены частицы. При этом незначительные изменения в параметрах проведения эксперимента могут привести к значительному изменению структуры кластеров, температур «фазовых переходов» и даже к исчезновению явлений разупорядочения некоторых типов.

²⁾ Трансляционная температура частиц, являющаяся мерой кинетического движения массивных частиц пыли, очевидно, может значительно отличаться от температуры самих частиц, определяемой температурами ионов и электронов плазмы.

2. КОНФИГУРАЦИИ ГЛОБАЛЬНЫХ МИНИМУМОВ

Для нахождения конфигураций, доставляющих системе (2) глобальный минимум, мы использовали модифицированный метод Ньютона [7] и комбинированный метод «случайный поиск + градиентный спуск» [8]. Конфигурации всех глобальных минимумов, представленные ниже (см. рис. 1–3 и таблицу), находились независимо обоими методами, что позволило повысить надежность результатов. Разумеется, никакой из существующих ныне методов поиска минимума функции многих переменных не в состоянии гарантировать, что полученная конфигурация соответствует глобальному минимуму. Чтобы обойти эту трудность, в качестве начальных мы рассматривали до 200 произвольно распределенных конфигураций. Такой подход позволяет также исследовать локальные минимумы и области сходимости к ним («удельные веса» локальных минимумов).

Таблица

Распределение частиц по оболочкам $\{N_1, N_2, \dots\}$ основных состояний кластеров N частиц в гармоническом удерживающем потенциале с дипольным, кулоновским и логарифмическим взаимодействиями

N	$1/r^3$	$1/r$	$-\ln r$
9	2,7	2,7	1,8
10	3,7	2,8	2,8
11	3,8	3,8	2,9
—	—	—	—
32	1,6,12,13	1,5,11,15	4,11,17
33	1,6,12,14	1,6,11,15	5,11,17
34	1,6,12,15	1,6,12,15	1,5,11,17
—	—	—	—
36	1,6,12,17	1,6,12,17	1,6,12,17
37	1,6,1,13,16	1,7,12,17	1,6,12,18
38	2,8,13,15	1,7,13,17	1,6,12,19

В пределе слабого экранирования зарядов частиц в плазме, $\gamma \ll 1$, модель (2) описывает кулоновский кластер в гармоническом удерживающем потенциале — систему, активно исследовавшуюся как экспериментально [18, 19], так и методами компьютерного моделирования [6, 7, 20]. В частности, проведенные ранее расчеты кулоновских кластеров показали, что конечные системы не слишком большого числа частиц удобно классифицировать в соответствии с их оболочечной структурой (см. таблицу). По характеру заполнения концентрических оболочек система приписывается одному из периодов таблицы типа периодической таблицы Менделеева.

Наличие параметра γ , определяющего радиус действия потенциала взаимодействия частиц в кластере, позволяет исследовать влияние короткодействия потенциала взаимодействия частиц на структуру и свойства основных состояний кластеров. Факт зависимости структуры кластеров от параметров потенциала взаимодействия становится очевидным при рассмотрении таблицы, в которой приведены некоторые основные

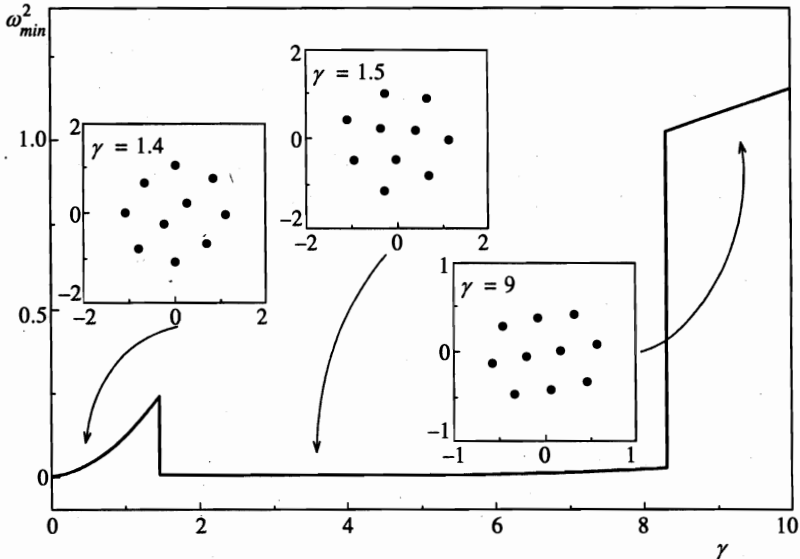


Рис. 1. Наименьшая ненулевая собственная частота ω_{min} кластера «пылевой» плазмы $N = 10$ частиц. На вставках показаны основные конфигурации системы в трех различных областях управляющего параметра γ

конфигурации $2D$ -кластеров в гармонической ловушке (по мере увеличения дальнего действия парного потенциала взаимодействия): дипольных, кулоновских и логарифмических кластеров. В рассматриваемом случае «пылевых кластеров» по мере изменения величины γ (радиуса экранирования Дебая $1/\gamma$) будут осуществляться перестройки основного состояния системы, причем о каждой точке γ^* , в которой имеет место какое-либо структурное изменение, можно говорить как о точке фазового перехода того или иного рода.

Род перехода может быть определен из графика энергии системы как функции управляющего параметра γ : разрыв n -й производной энергии основного состояния $E(\gamma)$ по параметру γ в некоторой точке γ^* формально соответствует фазовому переходу n -го рода в точке γ^* . Вывод о роде фазового перехода в точке изменения конфигурации системы может быть также сделан при исследовании набора $2N$ собственных частот нормальных колебаний кластера $\omega_i(\gamma), i = \overline{1, 2N}$ вблизи глобального минимума $E(\gamma)$, а именно, разрыв каких-либо частот свидетельствует о фазовом переходе первого рода, тогда как обращение в нуль частоты какого-либо движения («смягчение» моды соответствующего движения) позволяет утверждать о том, что в данной точке имеет место фазовый переход второго рода [9].

На рис. 1 показаны результаты расчетов собственных частот динамической матрицы кластера $N = 10$ частиц для различных величин параметра экранировки $\gamma \in [0, 10]$. Спектр собственных колебаний и соответствующие собственные векторы находились при помощи алгоритма Хаусхолдера. Хорошо заметно прерывное поведение минимальной ненулевой частоты в точках $\gamma \approx 1.4$ и $\gamma \approx 8.2$. Исследование конфигураций основных состояний кластера показывает (см. рис. 1), что по мере увеличения короткодействующего потенциала взаимодействия с ростом γ сначала (при $\gamma \approx 1.4$) происходит изменение распределения частиц по оболочкам, характерное для перехода от случая ку-

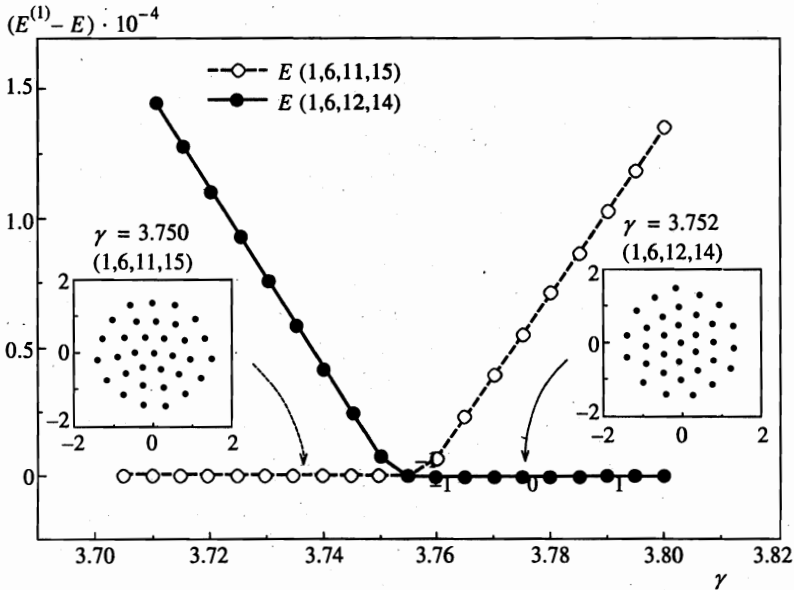


Рис. 2. Система $N = 33$ частиц. Энергии и конфигурации нижайшего локального минимума $E^{(1)}$, отсчитанного от энергии глобального минимума E , кластера в области фазового перехода

лоновского взаимодействия к дипольному ($\{2, 8\} \rightarrow \{3, 7\}$). Дальнейшее уменьшение радиуса экранирования переводит кластер (при $\gamma \approx 8.2$) в состояние с более плотной упаковкой (с конфигурацией $\{2, 8\}$), характерной для системы твердых сфер.

На рис. 2 показаны результаты расчета основных конфигураций кластера $N = 33$ частиц. В точке $\gamma^* \approx 3.751$ с увеличением короткодействия потенциала происходит изменение чисел заполнения двух внешних оболочек: $\{1, 6, 11, 15\} \rightarrow \{1, 6, 12, 14\}$. Точка γ^* фазового перехода первого рода может быть определена как точка, в которой сравниваются энергии основного и нижайшего возбужденного (метастабильного) состояний. Иллюстрацией этому может служить рис. 2, на котором приведены графики энергии основного состояния $E(\gamma)$ и энергии нижайшего локального минимума $E^{(1)}(\gamma)$ в области фазового перехода кластера $N = 33$ частиц. Из рисунка видно, что конфигурации, доставлявшие системе глобальный минимум до перехода (скажем, $\{1, 6, 11, 15\}$ при $\gamma < \gamma^*$), образуют метастабильную ветвь системы в непосредственной окрестности точки γ^* за переходом.

Весьма интересная картина структурных перестроек с изменением радиуса экранирования ожидалась от кластера $N = 37$ частиц. В соответствующей дипольной системе одна частица находится между второй и третьей оболочками, образуя «дефект внедрения» (аналог дефекта Френкеля в кристаллах) и разбиение на оболочки основной конфигурации неоднозначно [8]. Исследование этого кластера при различных величинах параметра γ показало, что в области $\gamma \in [0, 1.6]$ имеют место четыре фазовых перехода (см. рис. 3а): два перехода второго рода (при $\gamma \approx 0.78$ и $\gamma \approx 1.22$, где минимальная собственная частота нормальных колебаний обращается в нуль) и два перехода первого рода (при $\gamma \approx 0.52$ и $\gamma \approx 1.34$). Из рис. 3а видно, что при $\gamma \approx 0.52$ происходит изменение числа заполнения внешних оболочек. Аналогичная перестройка осуществляется

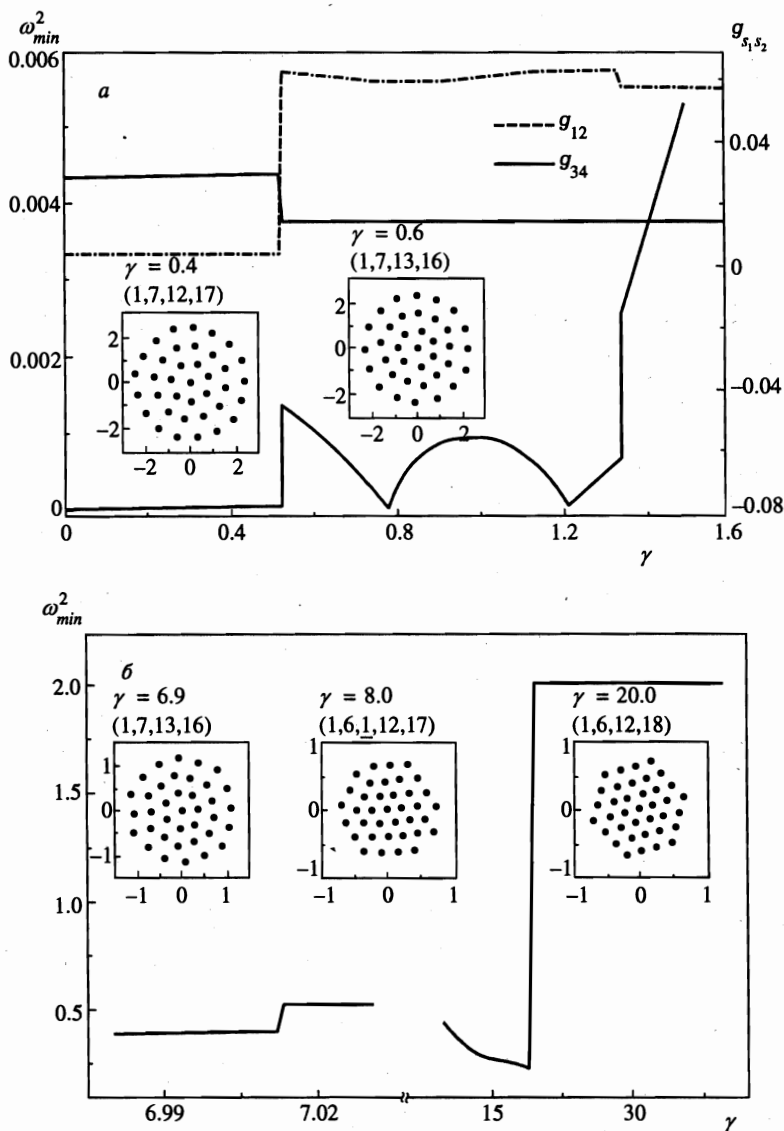


Рис. 3. Система $N = 37$ частиц. *a* — Нижайшая ненулевая собственная частота ω_{min} и взаимный ориентационный параметр порядка различных пар оболочек кластера как функции γ . *б* — Область сильного экранирования заряда частиц в плазме. Собственные колебания наименьшей ненулевой частоты при $\gamma > 19$ соответствуют движению всего кластера как целого в гармоническом потенциале

в точке $\gamma = 0.52$ кластера $N = 37$ частиц. Такие резкие изменения структуры кластеров характерны для фазовых переходов первого рода. Однако рассматривая область второго фазового перехода первого рода, происходящего при $\gamma \approx 1.34$, можно обнаружить, что никаких отчетливых изменений структуры кластера не происходит. Более детальный

анализ показывает, что в рассматриваемой области осуществляется проворот третьей оболочки относительно четвертой, что можно видеть из рис. 3б. Для количественного описания таких ориентационных перестроек на рис. 3 представлены зависимости параметра взаимного ориентационного порядка g_{s_1, s_2} различных пар оболочек $\{s_1, s_2\}$ (см. ниже формулу (4)), весьма чувствительного к изменению взаимной ориентации оболочек.

Дальнейшее увеличение параметра γ (уменьшение радиуса действия межчастичного потенциала взаимодействия) приводит к осуществлению еще двух переходов первого рода, показанных на рис. 3б. В результате первого из них (при $\gamma \approx 7.015$) одна из частиц внедряется между второй и третьей оболочками (см. таблицу и обсуждение выше). Соответствующая перестройка может быть записана как

$$\{1, 7, 13, 16\} \rightarrow \{1, 6, \bar{1}, 12, 17\}.$$

При $\gamma \approx 19$ кластер приобретает четко выраженную огранку и переходит в наиболее симметричное состояние $\{1, 6, 12, 18\}$ с наиболее плотной упаковкой. Последующее увеличение короткодействия потенциала взаимодействия не приводит к каким-либо перестройкам в системе. Любопытно отметить, что собственные колебания минимальной ненулевой частоты ω_{min} (см. рис. 3б) соответствуют в рассматриваемой области γ дважды вырожденному колебанию всего кластера как целого в гармонической ловушке с частотой $\omega_{min} = \sqrt{2}$.

Результаты исследования кулоновских и дипольных кластеров показали, что основой большинства основных конфигураций этих систем являются части кристаллической решетки с гексагональной симметрией [8, 19]. При описании и анализе свойств таких конфигураций представляется удобным ввести в рассмотрение «кристаллические оболочки» (Cr_c) — концентрические группы узлов идеального 2D-кристалла, в центре которых находится c частиц³⁾. Исследование конечных систем «пылевой» плазмы показало (см. рис. 1–3), что изменения конфигураций кластеров, имеющие место с увеличением параметра γ (т. е. с уменьшением дальнего действия потенциала взаимодействия), происходят в таком направлении, в котором заполняется максимальное число кристаллических оболочек.

В заключение этого раздела отметим, что характерной чертой всех обнаруженных нами фазовых переходов первого рода в кластерах $N < 40$ и в широком интервале управляющего параметра γ являлось резкое изменение структуры кластера. Обычно эта особенность проявляется как изменение чисел заполнения соседних оболочек системы, что имеет место в рассмотренных выше случаях кластеров $N = 10$ и $N = 33$ частиц (см. рис. 1, 2). Однако изменения структуры могут также происходить таким образом, что в точке фазового перехода первого рода одновременно изменяются числа заполнения удаленных друг от друга оболочек. Именно этот случай имеет место в областях $\gamma \approx 7.015$ и $\gamma \approx 19$ для системы $N = 37$ частиц, см. рис. 3б. Другим интересным примером перестроек такого рода может служить кластер $N = 26$ частиц, поведение которого сходно с картиной изменений в кластере $N = 10$ частиц: с уменьшением короткодействия потенциала взаимодействия частиц последовательно имеют место два

³⁾ Очевидно, что в силу изотропии удерживающего потенциала основной интерес представляет конечное число наиболее симметричных кристаллических оболочек, которые по количеству узлов в центре могут быть разбиты на следующие группы Cr_1, Cr_2, Cr_3, Cr_4 .

перехода первого рода с одновременным изменением чисел частиц в первой и третьей оболочках: $\{3, 9, 14\} \rightarrow \{4, 9, 13\}$ при $\gamma \approx 1.6$ и $\{4, 9, 13\} \rightarrow \{3, 9, 14\}$ при $\gamma \approx 12$.

3. ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ

Важной отличительной особенностью малых кластеров является возможность существования у таких систем двух типов явлений разупорядочения [6, 10]: межоболочечного разупорядочения (ориентационного плавления оболочек s_1 и s_2 при температуре Θ_{s_1, s_2}) и радиального разупорядочения (полного плавления при температуре Θ_f). Анализ собственных частот колебаний показывает, что для кластеров с малыми величинами низжайших собственных частот ω_{min} соответствующие собственные векторы в основном направлены по касательной к оболочкам и соответствуют взаимному провороту последних [7]. Такие кластеры будут обладать малыми температурами Θ_{s_1, s_2} межоболочечного разупорядочения, когда оболочки s_1 и s_2 проворачиваются друг относительно друга, теряя взаимный ориентационный порядок⁴).

Очевидно, что изменение структуры кластеров при варьировании управляющего параметра γ должно привести к изменению температур ориентационного и полного разупорядочения. Возможно также полное исчезновение явления ориентационного плавления в случае, когда кластер имеет «хорошо упакованную» структуру. Представленные ниже результаты наших расчетов подтверждают это предположение.

Обычным способом исследования ориентационного разупорядочения в кластерах является измерение среднеквадратичного относительного углового смещения двух оболочек, аналогичного среднеквадратичным смещениям (см. ниже, (5)). В подобном подходе температуру Θ_{s_1, s_2} ориентационного плавления оболочек s_1 и s_2 определяют как температуру, при которой происходит резкое изменение величины среднеквадратичного углового смещения. Мы используем несколько иной способ определения температуры ориентационного плавления как точки обращения в нуль параметра взаимного ориентационного порядка оболочек s_1 и s_2 [8]. Определим эту величину следующим образом. Для каждой оболочки номера s с числом частиц N_s рассмотрим комплексную величину ψ_s , такую что

$$\psi_s = \frac{1}{N_s} \sum_{i_s} \exp(jN_s\varphi_i), \quad j^2 = -1. \quad (3)$$

Сумма в (3) берется по всем частицам, принадлежащим данной оболочке. Параметр взаимного ориентационного порядка определим затем как

$$g_{s_1 s_2} = \psi_{s_1} \psi_{s_2}^*. \quad (4)$$

Очевидно, что величина $\langle g_{s_1, s_2} \rangle$ обращается в нуль в точке относительного разупорядочения (поворота) оболочек s_1 и s_2 . Характеристикой угловой упорядоченности частиц

⁴ Отметим, что, в отличие от систем большого числа частиц $N > 40$, ориентационное плавление в малых кластерах может иметь место для всех пар оболочек, т. е. могут существовать температуры плавления $\Theta_{21}, \Theta_{32}, \Theta_{43}, \dots$ Проведенные ранее расчеты кулоновских, дипольных и логарифмических кластеров показали, что в больших кластерах возможно лишь ориентационное плавление внешней оболочки.

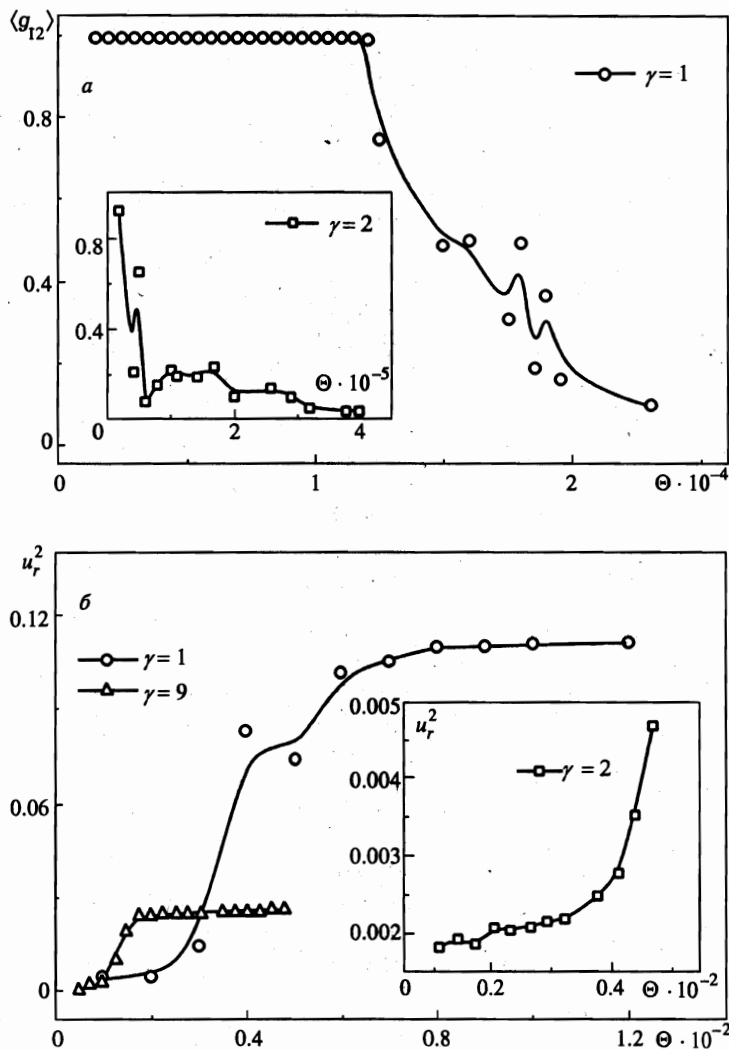


Рис. 4. Двухоболочечный кластер $N = 10$ частиц. *a* — Термодинамическое среднее взаимного ориентационного параметра порядка первой и второй оболочек при различных величинах параметра γ . *б* — Среднеквадратичные радиальные смещения как функция температуры $u_r^2(\Theta)$

внутри оболочки s может служить величина $\langle g_{ss} \rangle = \langle |\psi_s|^2 \rangle$. Отметим, что величины ψ_s и $\langle g_{s_1, s_2} \rangle$ являются аналогами ориентационного параметра ψ_6 и корреляционной функции $g_6(r)$ в неограниченных 2D-системах, где обращение корреляционной функции в нуль, $g_6(r) \rightarrow 0$, $r \rightarrow \infty$, при отсутствии трансляционного порядка свидетельствует об относительной ориентационной разупорядоченности удаленных частей системы.

На рис. 4*a* приведены зависимости термодинамического среднего $\langle g_{21} \rangle$ величины взаимного ориентационного порядка двухоболочечного кластера $N = 10$ частиц от температуры для разных значений параметра γ . Из рисунка видно, что изменение конфигу-

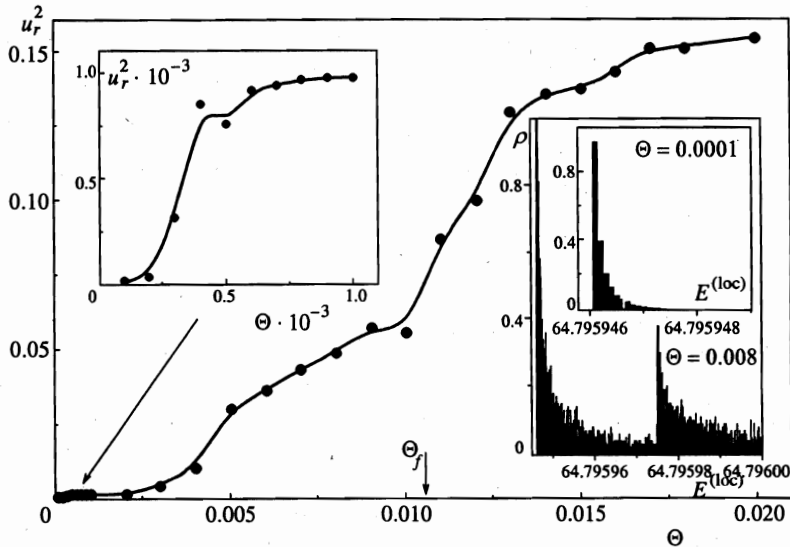


Рис. 5. Четырехоболочечный кластер $N = 33$ частиц. Среднеквадратичные радиальные смещения как функция температуры $u_r^2(\Theta)$. На вставке: гистограммы распределения по локальным минимумам $\rho(E^{(loc)})$ в упорядоченном состоянии (при $\Theta = 10^{-4}$) и при температуре $\Theta = 8 \cdot 10^{-3}$, при которой осуществляется обмен частицами между третьей и четвертой оболочками

рации системы $\{2, 8\} \rightarrow \{3, 7\}$ (которое происходит при $\gamma \approx 1.4$, см. рис. 1) приводит к резкому уменьшению температуры ориентационного разупорядочения: с $\Theta_{21} \approx 1.3 \cdot 10^{-4}$ на $\Theta_{21} \approx 0.7 \cdot 10^{-5}$.

В области $\gamma > 8.2$, где кластер имеет плотную упаковку (см. рис. 1), ориентационное плавление отсутствует и повышение температуры приводит к обмену частиц между оболочками, которое имеет место при $\Theta_f \approx 10^{-3}$. Это можно видеть из температурной зависимости среднеквадратичных радиальных смещений u_r^2 частиц системы:

$$u_r^2 = \frac{1}{N} \sum_i \left[\langle |\mathbf{r}_i|^2 \rangle - \langle |\mathbf{r}_i| \rangle^2 \right]. \tag{5}$$

Соответствующая зависимость представлена на рис. 4б. Показаны также аналогичные кривые для систем с $\gamma = 1$ и $\gamma = 2$. Из рисунка видно, что даже незначительное изменение величины управляющего параметра может на порядок изменить температуру полного плавления в системе.

Варьирование параметров потенциала взаимодействия приводит к изменениям структуры изоэнергетической поверхности системы, определяющей тип и характерные особенности происходящих фазовых переходов. Поэтому представляется возможным, что при определенных значениях управляющего параметра γ система может иметь весьма интересные термодинамические свойства, связанные с особенностями такой структуры.

На рис. 5 приведена зависимость среднеквадратичных радиальных смещений (5) четырехоболочечного кластера $N = 33$ частиц при $\gamma = 3.76$ как функция температуры. График имеет ряд плато, находящихся в различных температурных интервалах. Де-

тальное исследование показало, что области резкого роста величины u_r^2 соответствуют последовательному разупорядочению различных пар оболочек кластера: обмен частицами третьей и четвертой оболочек начинается при температуре $\Theta^{3,4} \approx 10^{-4}$, второй и третьей — при $\Theta^{2,3} \approx 0.005$. Полное плавление кластера имеет место при $\Theta_f \approx 0.01$.

Интересную информацию о характере происходящих процессов с увеличением температуры можно получить, исследуя распределение системы по локальным минимумам $\rho(E^{(loc)})$. Для оценки этой гистограммы на каждом шаге измерений мы осуществляли несколько сотен итераций метода градиентного спуска, что позволило определить ближайший локальный минимум, в окрестности которого находится система, и энергию этого минимума $E^{(loc)}$. На вставке рис. 5 приведены распределения системы $N = 33$ частиц при $\gamma = 3.76$ по локальным минимумам при температурах $\Theta = 10^{-4}$ (упорядоченное состояние) и $\Theta = 8 \cdot 10^{-3}$ (обмен частицами четвертой и третьей оболочек). В полностью упорядоченном состоянии система все время находится в окрестности глобального минимума энергии $E = 64.795946$, соответствующего структуре $\{1, 6, 12, 14\}$. При $\Theta = 8 \cdot 10^{-3}$ с конечной вероятностью заселяется нижайший локальный минимум $E^{(1)} = 64.795975$, конфигурация системы в окрестности которого может быть записана как $\{1, 6, 11, 15\}$, см. рис. 2.

Рассматривая эти результаты совместно с изложенными выше результатами поиска глобального минимума, см. рис. 2, можно сделать вывод, что первое разупорядочение, ясно видное на графике радиальных смещений $u_r^2(\Theta)$ в интервале температур $\Theta \in [10^{-4}, 10^{-3}]$ соответствует конечной вероятности заселения состояния $\{1, 6, 11, 15\}$, метастабильного при данном значении параметра γ . Подобная перестройка распределения частиц по оболочкам требует преодоления потенциального барьера, что, в совокупности с большими удельными весами «основного» и «возбужденного» состояний, позволяет рассматривать указанную температурную область как область динамического сосуществования двух форм кластера: $\{1, 6, 12, 14\} \leftrightarrow \{1, 6, 11, 15\}$ [21].

4. ВЫВОДЫ

В настоящей работе была рассмотрена конечная система частиц «пылевой плазмы», физической реализацией которой являются микрочастицы в столбе тлеющего разряда постоянного тока или в слабоизолированной плазме высокочастотного разряда при низком давлении. Для различных значений радиуса экранирования Дебая R были определены конфигурации основного состояния кластеров, состоящих из $N \leq 40$ частиц, собственные частоты и соответствующие собственные векторы их нормальных колебаний. С изменением длины экранирования кластеры испытывают структурные перестройки, которые проявляются как фазовые переходы первого или второго рода по параметру R . В точках фазовых переходов первого рода скачкообразно изменяются координаты частиц кластера, что происходит либо с изменением распределения частиц по оболочкам, либо как проворот пар оболочек друг относительно друга. В точке фазового перехода второго рода происходит смягчение (обращение в нуль) одной из собственных мод и положения частиц меняются непрерывно.

Исследование фазовых переходов в системе показало, что изменением R (например, варьированием плотности или температуры плазмы) можно модулировать термодинамические свойства системы, изменяя температуры ориентационного и полного разупорядочений (плавлений) на порядки. Оказалось также, что при некоторых значени-

ях радиуса экранирования Дебая возможно исчезновение ориентационного проворота различных оболочек системы, когда повышение температуры сразу приводит к обмену частиц между оболочками.

Анализ изменения распределения по локальным минимумам с изменением температуры показывает, что при определенных значениях R , вблизи точек фазовых переходов, плавление в ряде кластеров может проходить по многостадийному механизму, когда в различных температурных интервалах происходит разупорядочение различных областей кластера. В этом случае возможно наблюдение явления динамического сосуществования различных форм кластеров.

Ю. Е. Л. выражает признательность А. П. Нефедову за полезные обсуждения. Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант №) и программы «Поверхностные атомные структуры».

Литература

1. С.Н. Chiang and L. I, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 646 (1996).
2. W.-T. Juan, Z.-H. Huang, J.-W. Hsu et al., *Phys. Rev. E* **58**, R6947 (1998).
3. А. П. Нефедов, О. Ф. Петров, В. Е. Фортов, УФН **167**, 1215 (1997); В. Е. Фортов, А. П. Нефедов, О. С. Ваулина и др., ЖЭТФ **114**, 2004 (1998).
4. Y. K. Khodataev, S. A. Krapak, A. P. Nefedov, and O. F. Petrov, *Phys. Rev. E* **57**, 7086 (1998).
5. В. Е. Фортов, А. П. Нефедов, О. Ф. Петров, А. А. Самарян, А. В. Чернышев, ЖЭТФ **111**, 467 (1997).
6. Ю. Е. Лозовик, УФН **153**, 356 (1987); Yu. E. Lozovik and V. A. Mandelstam, *Phys. Lett. A* **145**, 269 (1990); *Phys. Lett. A* **165**, 469 (1992).
7. V. M. Bedanov and F. M. Peeters, *Phys. Rev. B* **49**, 2662 (1994); V. A. Schweigert and F. M. Peeters, *Phys. Rev. B* **51**, 7700 (1995); I. V. Schweigert, V. A. Schweigert, and F. M. Peeters, *Phys. Rev. B* **54**, 10827 (1996).
8. А. И. Белоусов and Yu. E. Lozovik, in: *Proc. of Conference on Computational Physics «ССР-1998»*; E-print archive cond-mat/9803300; А. И. Белоусов, Ю. Е. Лозовик, Письма в ЖЭТФ **68**, 11, 817 (1998).
9. B. Partoens, V. A. Schweigert, and F. M. Peeters, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 3990 (1997).
10. Yu. E. Lozovik and E. A. Rakoch, *Phys. Rev. B* **57**, 1214 (1998).
11. L. Cardido, J. P. Rino, N. Studart, and F. M. Peeters, *J. Phys.: Cond. Matt.* **10**, 11627 (1998).
12. D. P. Resendes, J. T. Mendonca, and P. K. Shukla, *Phys. Lett. A* **239**, 181 (1998); M. Nambu, S. V. Vladimirov, and P. K. Shukla, *Phys. Lett. A* **203**, 40 (1995).
13. A. Melzer, V. A. Schweigert, I. V. Schweigert, A. Homann, S. Peters, and A. Piel, *Phys. Rev. E* **54**, R46 (1996).
14. P. Pieranski, *Phys. Rev. Lett.* **45**, 569 (1980).
15. A. T. Skjeltorp, *Phys. Rev. Lett.* **51**, 2306 (1983).
16. Yu. E. Lozovik and V. A. Mandelstam, *Phys. Lett. A* **138**, 204 (1989).
17. А. П. Нефедов, частное сообщение.
18. R. Blümel, J. M. Chen, E. Peik et al., *Nature* **334**, 309 (1988).
19. M. Drewsen, C. Brodensen, L. Hornekar, and J. S. Hangst, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 2878 (1998).
20. A. A. Koulakov and B. I. Shklovskii, *Phys. Rev. B* **57**, 2352 (1998).
21. D. J. Wales and R. S. Berry, *Phys. Rev. Lett.* **73**, 2875 (1994); *Phys. Rev. Lett.* **63**, 1156 (1989); R. M. Lynden-Bell and D. J. Wales, *J. Chem. Phys.* **101**, 1460 (1994).