# Двумерные мезоскопические кластеры вихрей в сверхпроводящем кольце: оболочечная структура и плавление

© Ю.Е. Лозовик, Е.А. Ракоч, С.Ю. Волков

Институт спектроскопии Российской академии наук, 142092 Троицк, Московская обл., Россия E-mail: lozovik@isan.msk.su

(Поступила в Редакцию 26 февраля 2001 г. В окончательной редакции 16 апреля 2001 г.)

Исследуются структура и фазовые переходы в мезоскопической системе вихрей в квазидвумерном сверхпроводящем кольце. Изучена оболоченая структура мезоскопической системы вихрей, а также ее изменение в зависимости от их числа и характеристик сверхпроводящего кольца. Обнаружено два механизма образования новых оболочек в кластерах вихрей при увеличении их числа с ростом магнитного поля: зарождение новой оболочки внутри кластера и расщепление внутренней оболочки на две. С помощью метода Монте-Карло проанализированы плавление кластеров вихрей и их термодинамические характеристики. Обнаружено двухстадийное плавление оболочечных кластеров: при меньшей температуре происходит ориентационное плавление, при котором почти кристаллические соседние оболочечная структура. Оболочки, полученные расщеплением при росте числа вихрей, не участвуют в ориентационном плавлении. Двухстадийность плавления связана с малостью потенциальных барьеров, преодолеваемых при вращении оболочек друг относительно друга, по сравнению с барьером перескока вихрей из одной оболочки в другую.

Работа поддержана грантами Российского фонда фундаментальных исследований и ИНТАС (№ 99-02-16654-а).

Магнитное поле  $H > H_{c1}$  проникает в сверхпроводники второго рода в виде абрикосовских вихрей, образующих в низкотемпературной области (в отсутствие центров пиннинга) идеальную треугольную решетку [1]. При повышении температуры могут происходить плавление этой решетки и образование жидкой фазы из вихрей, что и наблюдалось для высокотемпературных сверхпроводников (см. обзор [2]).

Представляет большой интерес поведение вихрей в мезоскопических сверхпроводящих структурах, в частности в связи с их возможным использованием в качестве элементной базы в запоминающих устройствах.

В реальных сверхпроводниках второго рода присутствуют центры пиннинга (связанные с дефектами, примесями). Сверхпроводящие свойства, в частности критический ток, в значительной степени зависят от поведения вихрей вблизи этих центров. При больших расстояниях между центрами пиннинга группу вихрей вблизи дефекта можно рассматривать как кластер вихрей. Большой фундаментальный и прикладной интерес представляют также искусственные сверхпроводящие структуры с профилированной поверхностью, отверстиями и т. п. [3,4]. Ожидается, чтло благодаря пиннингу на этих структурах существенно возрастет критический ток и др.

В связи с вышесказанным представляет интерес моделирование системы вихрей в указанных структурах. В качестве первого шага можно исследовать структуру и плавление кластеров вихрей в мезоскопическом сверхпроводящем кольце. Это и является целью настоящей работы. Как оказалось, мезоскопические кластеры вихрей в сверхпроводящих кольцах имеют некоторые свойства, аналогичные свойствам кластеров вихрей в сверхпроводящих островках [5,6].

В разделе 1 мы описываем исследуемую физическую модель. Численные методы, используемые в работе, обсуждаются в разделе 2. В разделе 3 исследованы конфигурации кластеров вихрей в глобальных и локальных минимумах потенциальной энергии в зависимости от геометрических параметров кольца и от числа вихрей. Результаты расчетов плавления в кластерах вихрей в кольце приведены в разделе 4. В разделе 5 исследованы потенциальные барьеры относительного вращения оболочек и перескока частиц между оболочками.

## 1. Физическая модель

Рассмотрим островок сверхпроводника второго рода в форме кольца в поперечном магнитном поле. Если толщина островка *d* в некоторой области температур меньше длины когерентности сверхпроводника  $\xi(T)$ , то с точки зрения сверхпроводящих свойств островок может считаться двумерным. Магнитное поле проникает в рассматриваемую систему в виде двумерных (2D) вихрей. Потенциал взаимодействия между двумя 2D-вихрями примем в виде (см. [7])  $U(r) = -q^2 \ln(r/a), a \ll r \ll \lambda_{\perp};$  $U(r) = q^2 \lambda_{\perp}/r + \text{const}, r \gg \lambda_{\perp},$ где q — "заряд", пропорциональный плотности сверхтекучей компоненты, г расстояние между вихрями, а — радиус кора вихря,  $a \sim \xi(T), \lambda_{\perp} = \lambda^2/d$  — глубина проникновения перпендикулярного магнитного поля в 2*D*-сверхпроводник, *λ* лондоновская глубина проникновения магнитного поля в трехмерный сверхпроводник. Например, для пленок толщиной  $d \simeq 100$  Å и для  $\lambda \simeq 2000$  Å имеем  $\lambda_{\perp} \simeq 4 \, \mu$ m.

Предположим, что размеры сверхпроводящего островка удовлетворяют соотношению  $\xi \ll R_{\text{max}} - R_{\text{min}} \ll \lambda_{\perp}$ . Тогда вихри в сверхпроводящем кольце можно считать точечными "частицами", отталкивающимися по логарифмическому закону. Стабилизация концентрации вихрей в сверхпроводниках во внешнем магнитном поле учитывается в этой модели введением эффективного потенциала конфайнмента  $U_{\rm eff} = \alpha ({f r} - {f r}_0)^2$  (параметр  $r_0$  выбирается внутри кольца, между внутренним и внешним радиусом кольца), которому соответствует однородный компенсирующий фон с плотностью "заряда"  $\rho_{\rm ext}=2\alpha.$ Эффективное взаимодействие вблизи границы сверхпроводящей системы меняется, и это изменение можно учесть введением сил изображения, однако силы изображения для вихрей не изменяют качественно свойства кластера и лишь слабо влияют на его количественные характеристики (см. [5,8]). Поэтому здесь мы их не учитываем.

Таким образом, приходим к модели двумерного кластера из N классических частиц (N = 1-50) с логарифмическим законом отталкивания  $U(r_{ij}) = q^2 \ln(r_{ij}/a)$ между частицами, удерживаемых внешним потенциалом  $U_{\text{ext}}(r_i) = \alpha(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_0)^2$ .

После масштабных преобразований  $r \to \alpha^{1/2}/qr$ ,  $T \to k_{\rm B}/q^2 T$ ,  $U \to 1/q^2 U$  потенциальная энергия системы с точностью до постоянной  $C_N^2 \ln (q/(\alpha^{1/2}a))$  принимает вид

$$U = -\sum_{i>j} \ln r_{ij} + \sum_{i} (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_0)^2.$$
 (1)

Можно показать (см. [5,6]), что изучаемые свойства кластеров качественно не меняются и при небольшой анизотропии  $U_{\text{eff}}(r)$ .

## 2. Численные методы

Для поиска равновесных конфигураций частиц применялись два метода: метод отжига и метод градиентного спуска. Для изучения зависимости физических величин от температуры и плавления кластера в работе использовался метод Монте-Карло с модифицированным алгоритмом Метрополиса [5,6]. Вычислялись следующие величины.

- 1) Полная потенциальная энергия  $U_{pot}$ .
- 2) Теплоемкость

$$C = \frac{\langle U_{\text{pot}}^2 \rangle - \langle U_{\text{pot}} \rangle^2}{T}.$$
 (2)

 Радиальные среднеквадратичные смещения (PCC) — полное и для каждой оболочки отдельно

$$U_R = \frac{1}{N_R} \sum_{i=1}^{N_R} \frac{\langle \mathbf{r}_i^2 \rangle - \langle \mathbf{r}_i \rangle^2}{a^2},\tag{3}$$

где  $N_R$  — число частиц в кластере или в оболочке; усреднение  $\langle \dots \rangle$  производится по различным конфигурациям Монте-Карло.

4) Угловые среднеквадратичные смещения (УСС) относительно ближайших частиц своей оболочки

$$U_{\varphi_1} = \frac{1}{N_R} \sum_{i=1}^{N_R} \frac{\langle \varphi_i - \varphi_{i_1} \rangle - \langle \varphi_i - \varphi_{i_1} \rangle^2}{\varphi_0^2}$$
(4)

и УСС относительно частиц соседней оболочки

$$U_{\varphi_2} = \frac{1}{N_{R_1}N_{R_2}} \sum_{i=1}^{N_{R_1}} \sum_{i_2=1}^{N_{R_2}} \frac{\langle (\varphi_i - \varphi_{i_2})^2 \rangle - \langle (\varphi_i - \varphi_{i_2}) \rangle^2}{\varphi_0 \varphi_{0_2}}, \quad (5)$$

где  $i_1$  и  $i_2$  относятся к ближайшей частице из этой же оболочки и к частице из соседней оболочки,  $\varphi_0 = 2\pi/N_R$  — среднее угловое расстояние между соседними частицами для данной оболочки.

5) Радиальная функция распределения частиц в кластере

$$g_r = \sum_{i=1}^{N} \langle \delta(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_0) \rangle, \qquad (6)$$

где  $r_i$  — радиальные координаты частиц кластера.

6) Угловая корреляционная функция двух оболочек

$$g_{\Delta\varphi} = \sum_{i=1}^{N_1} \sum_{i=1}^{N_2} \langle \delta(\varphi_i - \varphi_j - \varphi_0) \rangle, \tag{7}$$

где  $\varphi_{i,j}$  — угловые координаты частиц из двух соседних оболочек кластера,  $N_1$  и  $N_2$  — число частиц в каждой оболочке.

7) Параметр взаимного ориентационного порядка оболочек  $s_1$  и  $s_2$ 

$$g_{s_1s_2} = \langle \operatorname{Re}\left(\Psi_{s_1}\Psi_{s_2}\right)\rangle,\tag{8}$$

где  $\Psi_l = 1/N_l \sum_{i=1}^{N_l} \exp(iN_l \varphi_{il})$  — параметр углового порядка *l*-й оболочки,  $N_l$  — число частиц в *l*-й оболочке. Параметр взаимного ориентационного порядка оболочек при ориентационном плавлении должен обращаться в нуль.

Потенциальные барьеры относительного вращения оболочек и перескока частиц между оболочками исследовались с учетом релаксации, т. е. подстройкой частиц к соответствующим изменениям конфигурации. В противном случае, как показывает расчет, получаются нереалистические (завышенные) значения потенциальных барьеров.

# 3. Равновесные конфигурации кластеров

Для двумерных кластеров вихрей в кольцевом удерживающем потенциале с числом вихрей  $N = 1, \ldots, 50$ и различными значениями радиального параметра удерживающего потенциала  $r_0$  были найдены глобальные

Физика твердого тела, 2002, том 44, вып. 1



Рис. 1. Конфигурация кластеров вихрей в кольце в зависимости от числа частиц.

минимумы потенциальной энергии. Как оказалось, кластеры вихрей в кольце имеют оболочечное строение при низких температурах и малых числах частиц (рис. 1).

Оболочка в кластере определяется как выпуклый многоугольник из максимально возможного числа частиц (внутри которого находится предыдущая оболочка), удовлетворяющий правилу: максимальное расстояние от частицы данной оболочки до центра системы должно быть меньше минимального расстояния до центра системы от частицы соседней, внешней относительно нее оболочки.

Потенциальная энергия системы и потенциальная энергия на одну частицу (удельная потенциальная энергия) уменьшаются при увеличении числа частиц, причем первая убывает квадратично, а вторая — линейно. Этот результат можно получить из модели равномерно "размазанных" по кольцу вихрей. Плотность "заряда" островка будет в этом случае равна

$$\rho = \frac{qN}{\pi (R_{\max}^2 - R_{\min}^2)}.$$
(9)

Здесь q— заряд одного вихря,  $R_{\text{max}}$  и  $R_{\text{min}}$ — соответственно, внешний и внутренний радиус кольцевого островка. Потенциальная энергия такого кластера есть  $U = -\text{const}(S)N^2$ , где S— площадь кольцевого островка, не зависящая от N; т. е. потенциальная энергия кластера пропорциональна  $-N^2$ , а удельная потенциальная энергия гия пропорциональна -N.

Примеры равновесных конфигураций и их энергий кластеров вихрей в кольцевом удерживающем потенциале с радиальными параметрами  $r_0 = 0.5$  и 2 приведены в табл. 1.

В кластерах с кольцевым и круговым удерживающим потенциалом наблюдаются различные механизмы обра-

Ν	$N_1, N_2, \ldots, r_0 = 0.5$	$U_{\rm pot},  r_0 = 0.5$	$N_1, N_2, \ldots, r_0 = 2$	$U_{\rm pot},  r_0 = 2$
8	8	$-1.179805 \cdot 10^{1}$	8	$-3.222613 \cdot 10^{1}$
9	1, 8	$-1.607791 \cdot 10^{1}$	9	$-4.124632 \cdot 10^{1}$
12	3, 9	$-3.457878 \cdot 10^{1}$	12	$-7.548147 \cdot 10^{1}$
13	3, 10	$-4.269991 \cdot 10^{1}$	13	$-8.936393 \cdot 10^{1}$
14	4, 10	$-5.187863 \cdot 10^{1}$	14	$-1.045188 \cdot 10^{2}$
15	4, 11	$-6.210678 \cdot 10^{1}$	8, 7	$-1.209840 \cdot 10^{2}$
23	8, 15	$-1.855514 \cdot 10^{2}$	8, 15	$-3.046596 \cdot 10^{2}$
24	1, 8, 15	$-2.065622 \cdot 10^2$	8, 16	$-3.342975 \cdot 10^2$
34	5, 11, 18	$-4.922492 \cdot 10^{2}$	13, 21	$-7.165943 \cdot 10^{2}$
35	5, 12, 18	$-5.286966 \cdot 10^{2}$	7, 7, 21	$-7.636627 \cdot 10^2$
38	6, 13, 19	$-6.470145 \cdot 10^2$	8, 8, 22	$-9.150325 \cdot 10^2$
43	8, 14, 21	$-8.748539 \cdot 10^{2}$	8, 14, 21	$-1.201622 \cdot 10^{3}$
44	1, 7, 15, 21	$-9.251369 \cdot 10^{2}$	8, 14, 22	$-1.264181 \cdot 10^{3}$

Таблица 1. Оболочечная структура и потенциальная энергия кластеров вихрей в кольце

зования новых оболочек. В кластере в круге при зарождении новой оболочки сначала одна частица появляется в центре симметрии кластера, а затем происходит монотонный рост числа частиц во всех оболочках. В случае же кластера в кольце с  $r_0 = 2$  при образовании новой оболочки внутренняя оболочка сначала расщепляется на две с примерно равным числом частиц, а с дальнейшим увеличением числа частиц начинается монотонный рост числа частиц в оболочках, причем некоторые частицы из внутренней оболочки приближаются к соседней оболочке и при некотором критическом числе частиц происходит структурное преобразование внутренних оболочек: скачкообразное изменение числа частиц в двух внутренних оболочках, после чего вновь начинается монотонный рост числа частиц во всех оболочках вплоть до следующего расщепления внутренней оболочки. Таким образом, формирование новых оболочек в кластере в кольце с большим значением радиального параметра происходит в два этапа. В промежуточном случае кластера в кольце с  $r_0 = 0.5$  образование новой оболочки, как и для кластера в круге, происходит в один этап. Здесь также при образовании новой оболочки внутри кластера появляется частица, однако, во-первых, она смещена из центра симметрии кластера, а во-вторых, такая конфигурация не очень стабильна: при увеличении числа частиц еще на единицу внутренняя оболочка состоит уже из двух частиц в отличие от кластера в круге.

Для выявления структурных изменений в кластерах при увеличении числа частиц были исследованы зависимости среднего расстояния между ближайшими частицами  $\overline{a}$ , внутреннего и внешнего радиусов кластера  $R_{\min}$  и  $R_{\max}$ , площади кластера S, чисел частиц в оболочках  $N_l$  от числа частиц в кластере. Здесь  $\overline{a} = \sqrt{\pi}(R_{\rm ext} - R_{\rm int})/\sqrt{N}$ , где  $R_{\rm ext}$  и  $R_{\rm int}$  — радиальные координаты максимально удаленной от центра кластера и максимально приближенной к центру кластера частиц соответственно,  $R_{\rm max} = R_{\rm ext} + \overline{a}/2$ ,  $R_{\rm min} = R_{\rm int} - \overline{a}/2$ ,  $S = \pi(R_{\rm max} - R_{\rm min})^2$  (рис. 2, *a*, *b*).

Среднее расстояние между частицами  $\overline{a}$  при образовании новых оболочек испытывает резкое падение, а при структурном преобразовании внутренних оболочек — небольшие скачки; в отсутствие структурных перестроений  $\overline{a}$  монотонно уменьшается с ростом N в случае, когда кластер состоит из одной оболочки, и монотонно растет в случае кластера, состоящего из двух и более оболочек. Величины  $R_{\text{max}}$ ,  $R_{\text{min}}$  и S также испытывают падения и скачки при образовании новых оболочек и при структурном преобразовании внутренних оболочек.



**Рис. 2.** Зависимости средних радиусов оболочек (a) и числа частиц в оболочках (b) от числа частиц в кластере. Цифры соответствуют номерам оболочек. Параметр  $r_0 = 2.0$  (a) и 0.5 (b).

Представляют интерес также изменения в структуре кластеров с одним и тем же N и разными значениями параметра r<sub>0</sub>. Эти изменения исследованы на примере кластеров с N = 12, 24, 38. Оказалось, что с изменением  $r_0$  при данном N в кластере наблюдаются те же структурные переходы, что и в кластерах с разными N при заданном r<sub>0</sub>. Так, с увеличением r<sub>0</sub> сначала происходит переформирование внутренних оболочек, а затем объединение двух оболочек в одну. Между структурными переходами происходят лишь незначительные изменения чисел частиц в оболочках. Так, в кластере с N = 12 при увеличении  $r_0$  чередуются конфигурации (3,9), (2,10), (6,6), (12); в кластере с N = 24 при увеличении  $r_0$  чередуются конфигурации (2,8,14), (1,8,15), (9,15), (8,16), (6,6,12), (12,12), (24); в кластере с N = 38 при увеличении  $r_0$  чередуются конфигурации (6,13,19), (8,10,20), (8,8,22), (15,23), (16,22), (19,19), (38). Потенциальная энергия убывает монотонно с ростом r<sub>0</sub>.

Исследованы также зависимости  $\overline{a}$ ,  $R_{\text{max}}$ ,  $R_{\text{min}}$  и S от  $r_0$  при N = 12, 24, 38. Среднее расстояние между частицами *a* с ростом  $r_0$  испытывает скачки при структурных переходах, связанных с уменьшением числа оболочек; кроме того, а довольно резко уменьшается при структурных переходах, связанных с переформированием внутренних оболочек. В отсутствие структурных переходов  $\overline{a}$  монотонно уменьшается в случае кластера, состоящего из двух и более оболочек, и монотонно увеличивается в случае кластера, состоящего из одной оболочки. Фактически, параметр r<sub>0</sub> является при заданном числе вихрей функцией внешнего и внутреннего радиусов. Однако легче изучать обратную зависимость — формальную зависимость  $r_1$  и  $r_2$  от  $r_0$ . Внутренний радиус кластера в целом возрастает как функция параметра  $r_0$ , испытывая небольшие скачки при переформировании внутренних оболочек и небольшие падения при слиянии двух оболочек в одну (уменьшение числа оболочек). Внешний радиус кластера монотонно возрастает с ростом параметра  $r_0$ , испытывая скачки при слиянии двух оболочек.

#### 4. Плавление и фазовые переходы

Для изучения плавления кластеров вихрей в колыце были найдены зависимости величин, описанных в разделе 2, от температуры для ряда кластеров (табл. 2). Найдены следующие закономерности. Во всех кластерах с  $r_0 = 0.5$  и в кластерах с  $r_0 = 2$ , в которых внутренние оболочки имеют сильно отличающиеся числа частиц, плавление происходит в две стадии, как и в случае кластеров в круге. Так, при температуре  $T_{c_1}$  происходит полное (радиальное) плавление кластеров, а при температуре  $T_{c_2}$ , существенно меньшей  $T_{c_1}$ , происходит специфическое ориентационное плавление, характерное для кластеров с оболочечной структурой. Так, оболочки в кластере, сохраняя свою "кристалличность", начинают проворачиваться друг относительно друга. При этом от-

Таблица 2. Потенциальные барьеры и температуры плавления кластеров вихрей

N	$r_0$	$U_{ m rot}$	$U_{ m jump}$	$T_{c_1}$	$T_{c_2}$
12	0.5	$1.7\cdot 10^{-2}$	$6.5\cdot10^{-2}$	$4.0 \cdot 10^{-3}$	$1.5\cdot 10^{-3}$
17	0.5	$1\cdot 10^{-9}$	$5\cdot 10^{-2}$	$4.5\cdot 10^{-3}$	$5.0\cdot 10^{-8}$
27	0.5	$5\cdot 10^{-3}$	$3.1\cdot 10^{-2}$	$4.0\cdot10^{-3}$	$8.0\cdot 10^{-4}$
16	2.0	$6\cdot 10^{-2}$	$1\cdot 10^{-2}$	$3.3\cdot10^{-3}$	_
21	2.0	$6.5\cdot 10^{-2}$	$7\cdot 10^{-2}$	$2.7\cdot 10^{-3}$	$2.3\cdot 10^{-3}$
22	2.0	$7\cdot 10^{-3}$	$9\cdot 10^{-2}$	$2.5\cdot10^{-3}$	$8.0\cdot10^{-5}$

 $\Pi$ р и м е чан и е.  $U_{\rm rot}$  — потенциальный барьер относительного вращения,  $U_{\rm jump}$  — потенциальный барьер перескока частиц между оболочками.

ношение температур полного и ориентационного плавления  $T_{c_1}/T_{c_2}$  для магических кластеров (с кратным числом частиц в оболочках) значительно меньше, чем в других кластерах. В целом при росте числа частиц в оболочках наблюдается тенденция к увеличению температуры ориентационного плавления и к уменьшению  $T_{c_1}/T_{c_2}$ . В кластерах с  $r_0 = 2$  с внутренними оболочками, полученными расщеплением одной оболочки кластера с меньшим числом частиц, т. е. с примерно равным числом частиц в двух внутренних оболочках, ориентационного плавления внутренних оболочек вообще не происходит (табл. 2).

Плавление кластеров вихрей в кольце рассмотрено на примере кластеров с N = 12, 17, 27 и  $r_0 = 0.5$  и кластеров с N = 16, 21, 22, 38 и  $r_0 = 2$  (табл. 2).

Полное плавление в кластерах наиболее ярко продемонтрировано с помощью температурных зависимостей РСС. Из рис. З виден скачок РСС (на примере кластера с N = 27 и  $r_0 = 0.5$ ) при температуре полного плавления  $T_{c_1}$  (табл. 2). При  $T > T_{c_1}$  в функции g(r)(раздел 2) резкие максимумы оболочек, сушествовавшие при  $T < T_{c_1}$ , размываются и сливаются.



**Рис. 3.** Зависимость радиального среднеквадратичного смещения от температуры для кластера N = 27,  $r_0 = 0.5$ . Быстрый рост этого параметра соответствует полному плавлению вихревого кластера.

Ориентационное плавление кластеров вихрей в кольце можно наблюдать с помощью температурных зависимостей УСС, РСС, угловой корреляционной функции частиц двух оболочек и параметра порядка  $g_{s_1s_2}$ . На примере кластеров с N = 21, 22, 38 и  $r_0 = 2$  и N = 12, 27и  $r_0 = 0.5$  показано, что УСС как функция *T* испытывает сильный излом (в случае N = 38 только для внешней пары оболочек) при  $T = T_{c_2}$  (см. рис. 4 и табл. 2). РСС также испытывает небольшие скачки при  $T = T_{c_2}$ . Угловая корреляционная функция  $g_{\Delta \varphi}$ имеет отрезки нулевых значений при  $T < T_{c_2}$ , которые исчезают при  $T>T_{c_2}$ , т.е. при  $T>T_{c_2}$  частицы в соседних оболочках могут находиться на любых угловых расстояниях друг от друга, тогда как при  $T < T_{c_2}$  они могут находиться только в определенных интервалах угловых расстояний. Параметр порядка  $g_{s_1s_2}$  в точке ориентационного плавления резко падает (см. рис. 5 для кластера с N = 12 и  $r_0 = 0.5$ ) и флуктуирует возле нулевого значения.



**Рис. 4.** Температурная зависимость углового среднеквадратичного смещения оболочек кластера с числом частиц N = 22,  $r_0 = 2$ . 1 — внутриоболочечное УСС внешней оболочки, 2 — внутриоболочечное УСС внутренней оболочки, 3 — УСС внутренней оболочки относительно внешней.



**Рис. 5.** Зависимость от температуры параметра порядка  $g_{s_1s_2}$  кластера N = 12,  $r_0 = 0.5$ .



**Рис. 6.** Температурная зависимость средней потенциальной энергии кластера N = 16,  $r_0 = 2$ .

Потенциальная энергия растет линейно с температурой до точки полного плавления, а затем вблизи точки плавления растет быстрее и сильно флуктуирует (рис. 6). Теплоемкость также начинает сильно флуктуировать. Это связано с тем, что при температурах выше температуры полного плавления кластер может с различной вероятностью существовать в конфигурациях, соответствующих разным локальным минимумам — динамическое сосуществование.

# Потенциальные барьеры относительного вращения оболочек и перескока частицы из одной оболочки в другую

Описанным в разделе 2 методом мы нашли потенциальный барьер вращения  $U_{\rm rot}$  и потенциальный барьер перескока частицы из одной оболочки в другую U<sub>jump</sub> в кластерах с различными значениями N и r<sub>0</sub> (см. табл. 2 и рис. 7, a, b). Как и следовало ожидать, потенциальные барьеры относительного вращения оболочек меньше, чем потенциальные барьеры перескока частиц между оболочками только для тех пар оболочек в кластерах, которые ориентационно плавятся друг относительно друга. При этом отношение потенциальных барьеров  $U_{\rm rot}/U_{\rm iump}$ совпадает по порядку величины с отношением температур ориентационного плавления для соответствующих оболочек и полного плавления кластера. Для оболочек с равным числом частиц (возникающих путем расщепления) ориентационного плавления не происходит изза большой величины барьера вращения этих оболочек. В данном случае при относительном повороте указанных оболочек угловые координаты всех частиц внешней оболочки одновременно принимают такие же значения, как и угловые координаты соответствующих частиц внутренней оболочки, поэтому расстояния между соответствующими частицами данных оболочек одновременно



**Рис. 7.** Зависимость полной потенциальной энергии вихревого кластера N = 17,  $r_0 = 0.5$  от относительного углового положения оболочек (*a*) и от координаты частицы при перемещении частицы из одной оболочки в другую (*b*). Зависимость (*a*) дает потенциальный барьер относительного вращения оболочек, зависимость (*b*) дает потенциальный барьер для перескока частицы между оболочками.

принимают минимальные значения, а радиальное расстояние между этими оболочками мало; следовательно, потенциальный барьер очень велик. Иными словами, большая величина барьера связана с соизмеримостью оболочек, а малая — с несоизмеримостью.

Таким образом, в настоящей работа получены следующие результаты.

1) Показано, что двумерные мезоскопические кластеры вихрей в сверхпроводящем кольце имеют оболочечную структуру при низких температурах. Найдены конфигурации системы в локальных и глобальных минимумах потенциальной энергии. Обнаружено два механизма формирования новых оболочек при изменении числа вихрей, обусловленном ростом магнитного поля, а также параметра  $r_0$ : а) новая оболочка из вихрей появляется внутри кластера; b) происходит расщепление внутренней оболочки в кластере на две оболочки

с равным числом частиц с дальнейшим структурным преобразованием образовавшихся внутренних оболочек. Последний механизм характерен для частиц в кольцевом потенциале и превалирует при увеличении  $r_0$ .

2) Детально изучены температурные зависимости потенциальной энергии, теплоемкости, среднеквадратичного радиального и углового смещения, функции радиального и углового распределения частиц. В результате исследовано плавление системы. Показано, что в мезоскопических кластерах плавление происходит в две стадии: при меньших температурах имеет место ориентационное плавление — из замороженной фазы в состояние с вращательной переориентацией "кристаллических" оболочек друг относительно друга, а затем — переход с исчезновением радиального порядка. Причина ориентационного плавления заключается в малости потенциального барьера относительного вращения оболочек (связанной с несоизмеримостью соседних оболочек) по сравнению с барьером перескока частицы из одной оболочки в другую. Ориентационное плавление не происходит для внутренних оболочек, полученных путем расщепления и содержащих равное число частиц.

Отношение температур ориентационного и радиального (полного) плавления оказывается равным по порядку величины отношению барьеров относительного вращения оболочек и перескока вихря из одной оболочки в другую.

## Список литературы

- [1] А.А. Абрикосов. ЖЭТФ **32**, 1442 (1957).
- [2] G. Blatter, M.V. Feigel'man, V.B. Geshkenbein, A.I. Larkin, V.M. Vinokur. Rev. Mod. Phys. 66, 4, 1125 (1994).
- [3] V.V. Molshchalkov, V. Bruyndoncx, L. Van Look, J. Van Bael, Y. Bruynserade. HanBook of Nanostructured Materials and Nanotechnology / Ed. H.S. Halwa. Academic Press, N.Y. (1999). V. 3. 521 p.
- [4] A.K. Geim, I.V. Grigorieva, S.V. Dubonos, J.G.S. Lok, J.C. Maan, A.E. Filipov, F.M. Peeters. Nature **390**, 259 (1997).
- [5] Ю.Е. Лозовик, Е.А. Ракоч. Письма в ЖЭТФ 65, 268 (1997);
   Yu.E. Lozovik, E.A. Rakoch. Phys. Rev. B57, 2, 1214 (1998).
- [6] Yu.E. Lozovik, V.A. Mandelshtam. Phys. Lett. A145, 269 (1990); F.M. Peeters, V.A. Schweigert, V.M. Bedanov. Physica B212, 237 (1995); Yu.E. Lozovik, E.A. Rakoch. Phys. Lett. A235, 55 (1997).
- [7] Y. Pearl. Appl. Phys. Lett. 5, 65 (1964).
- [8] L.J. Campbell, R.M. Ziff. Phys. Rev. B20, 5, 1886 (1979).