

Особенности плавления двумерных мезоскопических вигнеровских кластеров

© Ю.Е. Лозовик, Е.А. Ракоч

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

E-mail: lozovik@isan.troitsk.ru

(Поступила в Редакцию 20 октября 1998 г.)

Рассматриваются двумерные вигнеровские микрокластеры в полупроводниковой точке. Подробно исследуется их плавление и показывается, что для типичных мезоскопических кластеров, обладающих оболочечной структурой, плавление происходит в две стадии: ориентационное плавление (проворот оболочек друг относительно друга) и полное плавление, при котором оболочки начинают перекрываться и обмениваться частицами. Приводится пример "магического" микрокластера с треугольной структурой, у которого плавление происходит в одну стадию. Для этого исследуются температурные зависимости различных величин, характеризующих структуру кластера. Исследуется изменение распределения конфигураций кластера по локальным минимумам потенциальной энергии с повышением температуры. При температуре, меньшей температуры полного плавления, кластер все время находится вблизи конфигурации глобального минимума, а при температуре, большей температуры полного плавления, кластер может с конечной вероятностью находиться вблизи конфигураций, соответствующих различным локальным минимумам потенциальной энергии.

В последние годы большое внимание было уделено изучению систем, состоящих из конечного числа частиц с отталкивательным потенциалом взаимодействия, удерживаемых искусственным или естественным внешним потенциалом [1–6]. Системы из малого числа удерживаемых частиц с физическими свойствами, не совпадающими (вследствие их малых размеров) со свойствами кристаллов называются кластерами. Внутри мезоскопического кластера нельзя выделить "объемные" и "поверхностные" частицы. При добавлении лишь одной частицы может произойти существенная перестройка структуры мезоскопического кластера. В макрокластере имеет место обратная ситуация (однако число частиц в объемной фазе одного порядка с числом частиц на поверхности в макрокластере в отличие от микрочастицы).

Двумерные дипольные и вихревые кластеры и их плавление были подробно исследованы соответственно в [3,4]. В частности, было показано, что дипольные кластеры в зависимости от числа частиц могут плавиться в одну и в две стадии [3], а вихревые кластеры (для изученного числа частиц $N < 200$) — только в две стадии. В случае двухстадийного плавления при более низкой температуре происходит ориентационное, а затем, при более высокой температуре, полное плавление см. [4]. Термин "ориентационное плавление" используется в следующем смысле: при некоторой температуре некоторые оболочки, сохраняя свою кристалличность, начинают проворачиваться друг относительно друга, однако кластер при этом еще сохраняет свою оболочечную структуру.

Структура и плавление двумерных кулоновских кластеров были рассмотрены в [2,5,6]. Одной из наиболее интересных физических реализаций кулоновских кластеров являются электроны в полупроводниковых точ-

ках [7]. Мезоскопические кулоновские кластеры при их кристаллизации имеют оболочечную структуру [2,5,6], как правило существенно отличающуюся от структуры протяженного вигнеровского кристалла, приближаясь к ней лишь для достаточно большого числа частиц (и в редком случае — для магических кластеров, см. далее). Было показано, что в случае классических кулоновских мезоскопических кластеров ориентационное плавление происходит для всех пар оболочек, а для макрокластеров — только для внешних пар оболочек (см. [5]). Однако более детальное исследование, проведенное в настоящей работе, показало, что существуют "магические кластеры", имеющие в глобальном минимуме структуру с высокой симметрией, плавление которых происходит в одну стадию (т.е. ориентационное плавление отсутствует).

Поэтому цель данной работы — детально исследовать изменение характеристик и плавление двумерных "кристаллических" электронных (вигнеровских) микрокластеров. Мы рассматриваем классический режим, когда де-Бройлевская тепловая длина волны электронов значительно больше среднего расстояния между ними. Для описания ориентационного плавления кластера исследуется температурная зависимость параметра, характеризующего взаимный ориентационный порядок рассматриваемой пары оболочек. Анализ проводится для кластеров с разной оболочечной структурой. Кроме того, в работе будет показано, что при температуре, меньшей температуры полного плавления (но даже при температуре большей, чем температура ориентационного плавления), кластер находится вблизи конфигурации одного — глобального минимума энергии, а при температуре, большей температуры полного плавления, кластер "прыгает" между различными минимумами.

В разделе 1 описана физическая модель системы. В разделе 2 — численный метод решения задачи и исследуемые физические величины. Результаты расчета плавления представлены в разделе 3.

1. Физическая модель

Физической реализацией двумерных кулоновских кластеров являются электроны в полупроводниковой точке [7] (этой моделью описываются также электроны в ямке на поверхности жидкого He [8] либо ионы в плоской ловушке типа Пеннинга или Поля, охлажденные лазерным излучением).

Мы исследуем двумерную систему с конечным числом N заряженных частиц, отталкивающихся друг от друга по кулоновскому закону $U_{ij} = e^2/r_{ij}$, где $r_{ij} = r_i - r_j$, r_i — радиус-вектор частицы i . Рассматривается параболический удерживающий потенциал $U_i = \alpha r_i^2$.

Рассматриваемые классические кулоновские кластеры в тепловом равновесии характеризуются одним безразмерным параметром $1/T' = \Gamma = (e^{4/3} \alpha^{1/3})/k_B T$. После обезразмеривания потенциальная энергия приобретает вид

$$U = \sum_{i < j}^N \sum_{i=1}^N \frac{1}{r_{ij}} + \sum_{i=1}^N (r_i)^2. \quad (1)$$

Численные оценки параметра α для некоторых экспериментальных систем приведены, например, в [9,10].

2. Численный метод

Для исследования плавления системы был использован метод Монте-Карло с двумя различными алгоритмами. В первом алгоритме мы осуществляли случайное движение одной (случайно взятой) частицы и случайное движение одной (случайно взятой) оболочки (см. [3–5]). Во втором алгоритме использовался метод мультигрид (V -цикл): сначала двигается $1 = 2^0$ частица, потом $2 = 2^1$, потом $4 = 2^2$ частицы и т.д., потом все частицы, половина частиц и т.д. до одной частицы. Численный расчет показал, что второй метод эффективнее первого в 2.5 раза (т.е. для достижения одинаковой точности этими методами нужно сделать в 2.5 раза больше итераций первым методом, чем вторым). Для достижения хорошей точности система при каждой температуре отогревалась $3 \cdot 10^4$ итераций, а затем исследовалась в течение $5 \cdot 10^6 - 10^7$ итераций.

Мы рассчитывали следующие физические величины:

1) полную потенциальную энергию системы U_{pot} по формуле (3);

2) теплоемкость $C = (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2)/T$, где $E = U$; здесь и далее усреднение $\langle \dots \rangle$ производится по числу измерений при различных конфигурациях Монте-Карло (каждые 10^3 итераций);

3) радиальное относительное смещение

$$U_{\text{pair}} = \frac{2}{N(N-1)} \sum_{i < j}^N \sum_{i=1}^N \sqrt{\frac{\langle r_{ij}^2 \rangle}{\langle r_{ij} \rangle^2}} - 1 \quad (2)$$

либо

$$U_{\text{pair } 2} = \frac{2}{N(N-1)} \sum_{i < j}^N \sum_{i=1}^N \left(\frac{\langle r_{ij}^2 \rangle}{\langle r_{ij} \rangle^2} - 1 \right); \quad (3)$$

4) радиальный коэффициент Линдемана

$$U_r = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sqrt{\frac{\langle r_i^2 \rangle}{\langle r_i \rangle^2}} - 1 \quad (4)$$

либо величину

$$U_{r2} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{\langle r_i^2 \rangle}{\langle r_i \rangle^2} - 1; \quad (5)$$

5) радиальную функцию распределения

$$g_r(r) = \left\langle \sum_{i=1}^N \delta(r_i - r) \right\rangle; \quad (6)$$

6) радиальную корреляционную функцию

$$g_{\text{pair}}(r) = \left\langle \sum_{i < j}^N \sum_{i=1}^N \delta(r_i) \delta(r_j - r_i + r) \right\rangle; \quad (7)$$

7) угловое относительное среднеквадратичное смещение

$$U_2 = \frac{2}{N_1 N_2} \sum_{i=1}^{N_1} \sum_{j=1}^{N_2} \langle (\varphi_i - \varphi_j)^2 \rangle - \langle \varphi_i - \varphi_j \rangle^2; \quad (8)$$

8) параметр взаимного ориентационного порядка оболочек l_1 и l_2

$$\rho_{l_1 l_2} = \langle \Psi_{l_1} \Psi_{l_2}^* \rangle, \quad (9)$$

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

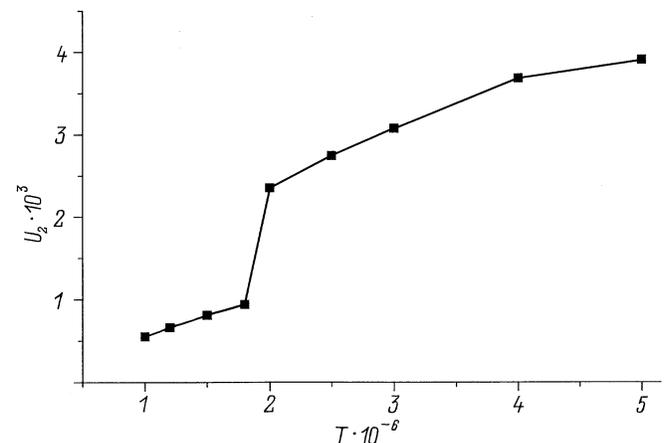


Рис. 1. Зависимость относительного углового смещения U_2 от температуры T . $N = 20$.

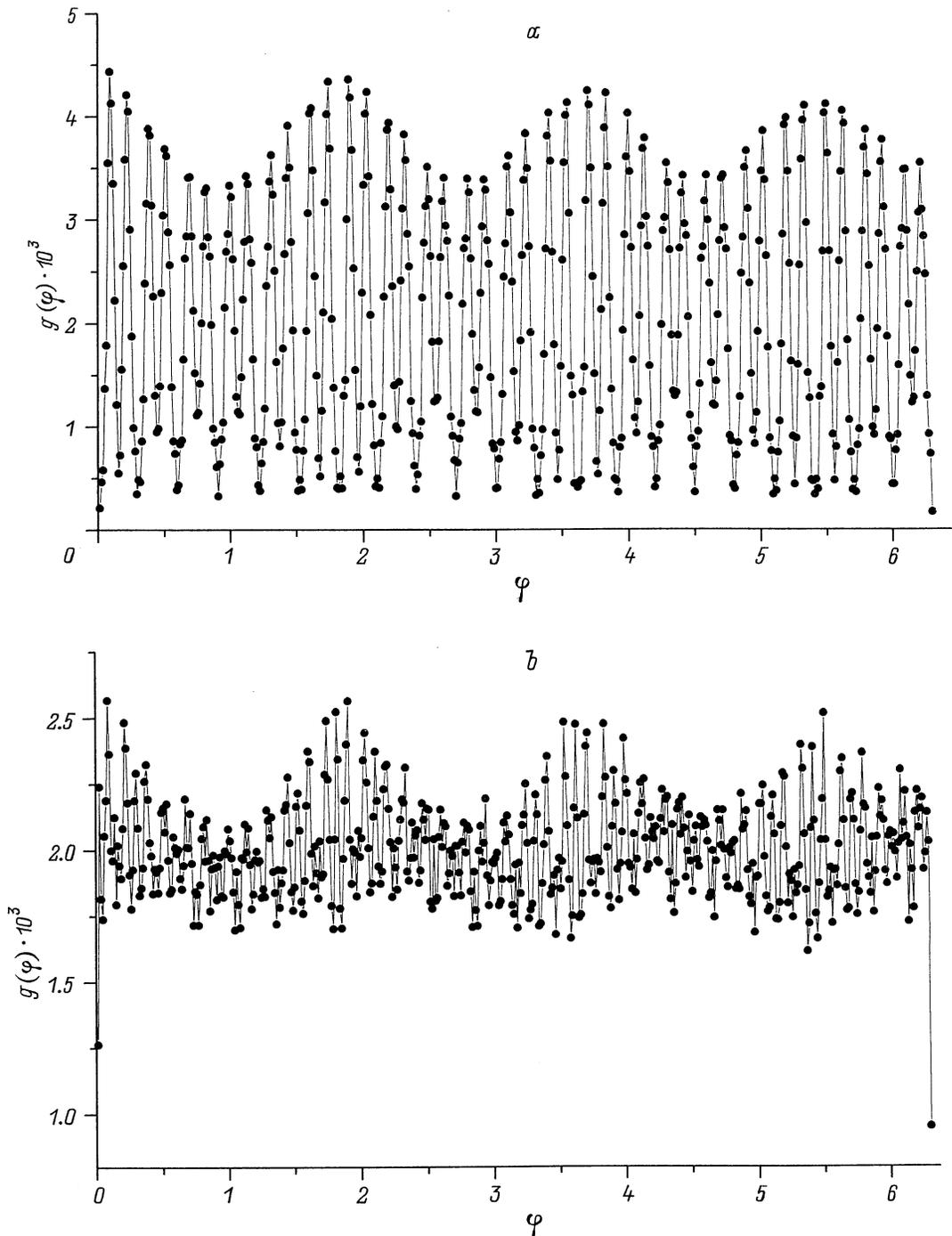


Рис. 2. Функция распределения углов между частицами двух оболочек $g(\varphi)$. $N = 20$. $a - T = 1 \cdot 10^{-6}$; $b - T = 4 \cdot 10^{-6}$.

9) угловую корреляционную функцию двух оболочек

$$g(\varphi) = \left\langle \sum_{i=1}^{N_1} \sum_{j=1}^{N_2} \delta(\varphi_i) \delta(\varphi_j - \varphi_i + \varphi) \right\rangle; \quad (10)$$

10) распределение частиц по локальным минимумам — вероятность обнаружить систему вблизи разных минимумов потенциальной энергии P_{\min} . Для расчета данной величины система периодически (раз в 10^5 ите-

раций) резко охлаждалась до температуры, на несколько порядков меньшей всех температур плавления ($1 \cdot 10^{-7}$) в течение $2 \cdot 10^4$ итераций. Затем минимальное значение энергии сравнивалось со значением энергии в различных локальных минимумах и, если оно оказывалось близко к значению энергии в каком-то минимуме, то считалось, что система попала в этот минимум (локальные и глобальный минимумы полной потенциальной энергии были рассчитаны нами предварительно).

3. Плавление двумерных кулоновских кластеров

Для расчета плавления были выбраны кластеры с близким числом частиц $N = 19$ и $N = 20$, но с существенно разными структурами в глобальных минимумах потенциальной энергии, причем кластер с $N = 19$ имеет конфигурацию (1, 6, 12) и является почти точным фрагментом треугольной решетки, а кластер с $N = 20$ имеет конфигурацию (1, 7, 12) и имеет ярко выраженную оболочечную структуру. Поэтому представляет интерес отличие характеров плавления этих кластеров. Оказалось, что кластер $N = 20$ плавится в две стадии, причем температуры ориентационного и полного плавлений в нем очень сильно отличаются, а кластер с $N = 19$ в силу своей высокой симметрии плавится в одну стадию, что уникально для кулоновских микрокластеров. Ранее полагалось [1–6], что все кулоновские кластеры плавятся в две стадии, причем в мезоскопических кластерах (или микрокластерах) имеет место ориентационное плавление всех пар оболочек, а в макрокластерах — только внешних пар оболочек.

Ориентационное плавление кластера с $N = 20$ происходит при очень низкой температуре $T_{c2} = 1.8 \cdot 10^{-6}$. При этом угловое относительное смещение U_2 испытывает

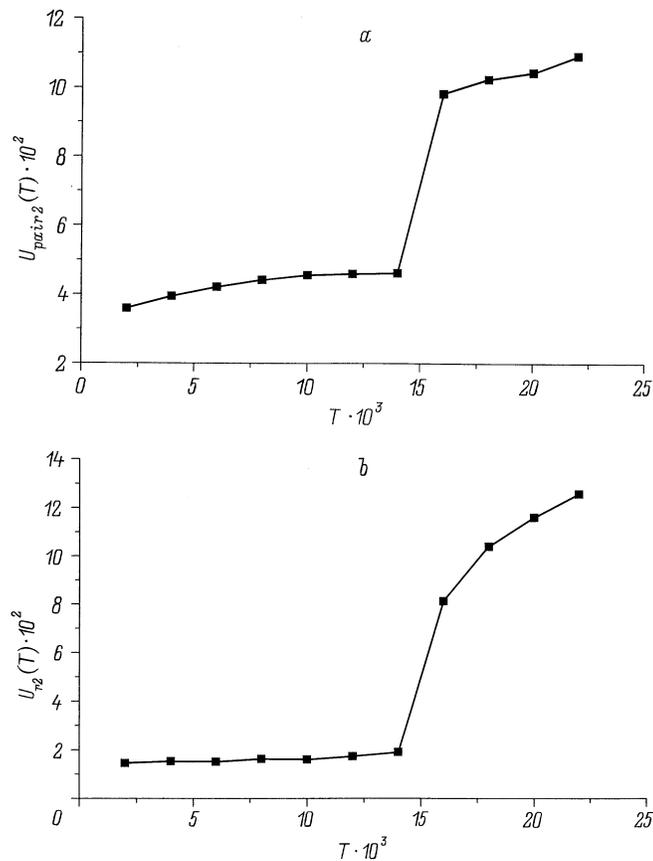


Рис. 3. Зависимость величин, характеризующих радиальное смещение, от температуры. $N = 20$. *a* — радиальное относительное смещение $U_{\text{pair}2}(T)$; *b* — радиальное абсолютное смещение $U_{r2}(T)$.

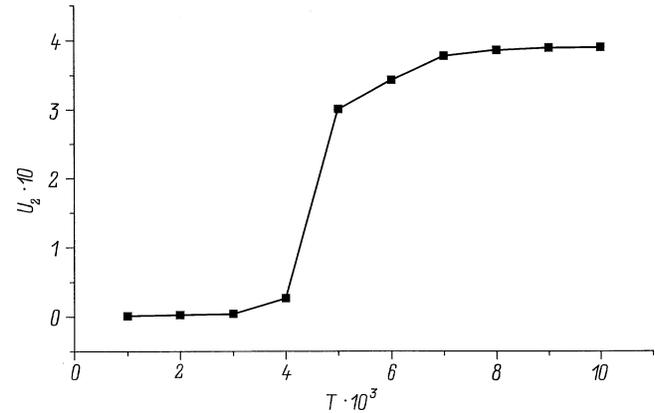


Рис. 4. Зависимость относительного углового смещения U_2 от температуры T . $N = 19$.

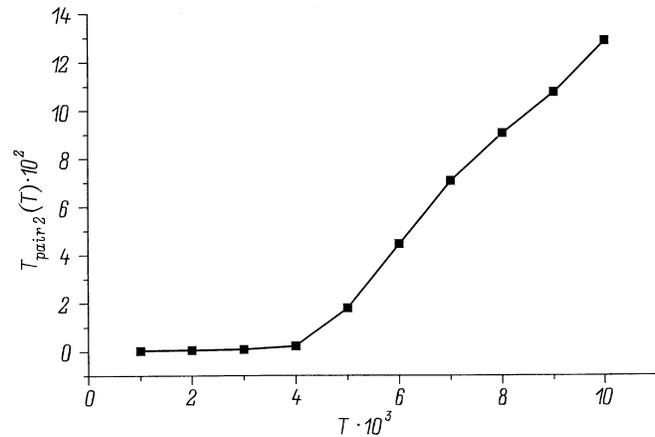


Рис. 5. Зависимость радиального относительного смещения $U_{\text{pair}2}(T)$ от температуры. $N = 19$.

резкий скачок (рис. 1), а параметр взаимного ориентационного порядка оболочек $\rho_{l_1 l_2}$ падает в нуль. При $T < T_{c2}$ функция $g(\varphi)$ имеет нули (см. рис. 2, *a*), а при $T > T_{c2}$ нули в функции $g(\varphi)$ исчезают (см. рис. 2, *b*), что подтверждает наличие ориентационного плавления при $T = T_c$ в кластере $N = 20$. Очень низкая температура ориентационного плавления связана с тем, что числа частиц в оболочках 7 и 12 несоизмеримы (не имеют общих делителей), и поэтому взаимная потенциальная энергия ”замороженных” оболочек как функция угла поворота имеет очень мелкие минимумы. Период функции $g(\varphi)$ при $T < T_{c2}$ обратно пропорционален величине наименьшего общего кратного чисел частиц в оболочках $P = (2 \cdot 2\pi) / (\text{НОК}[l_1, l_2]) = 4\pi / 12 \cdot 7 = 2\pi / 42$ (коэффициент 2 в числителе возник в силу соответствующей симметрии кластера), см. рис. 2, *a*.

Температура полного плавления кластера имеет намного большее значение $T = T_{c1} = 1.4 \cdot 10^{-2}$. При этом испытывают изломы следующие величины: радиальное относительное смещение U_{pair} и $U_{\text{pair}2}$, радиальный коэффициент Линдемана U_r и дисперсия радиальных расстояний U_{r2} (см. рис. 3).

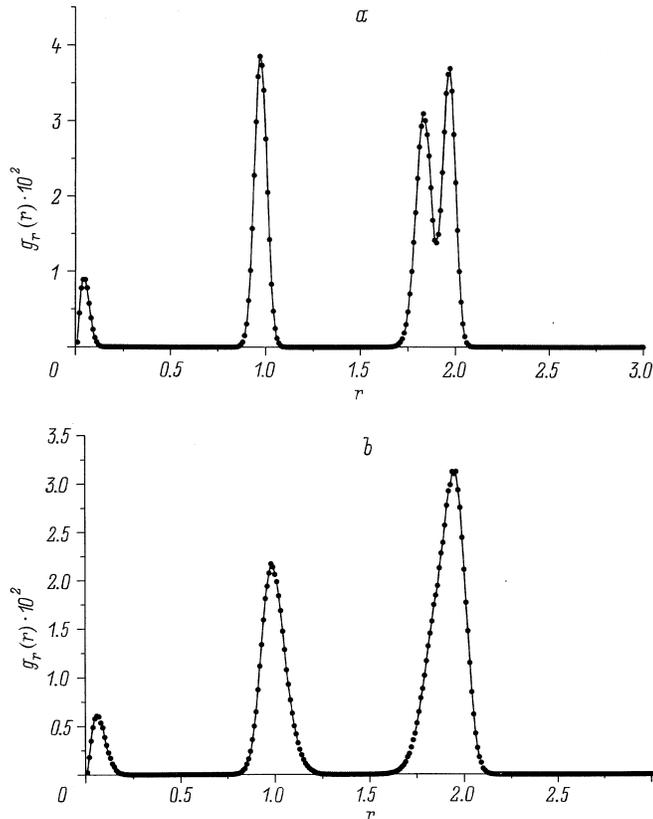


Рис. 6. Радиальная функция распределения $g_r(r)$. $N = 19$. $a - T = 3 \cdot 10^{-3}$; $b - T = 7 \cdot 10^{-3}$.

В кластере $N = 19$ величина U_2 испытывает скачок при той же температуре $T_c = 4 \cdot 10^{-3}$, что и величины U_{pair} , $U_{\text{pair}2}$, U_r , U_{r2} (ср. рис. 4 и 5). При $T = T_c$ в функции $g_r(r)$ резкие два максимума внешней оболочки сливаются, оболочки сильно размываются в радиальном направлении (см. рис. 6); а в функции $g(\varphi)$ исчезают нули (см. рис. 7). Все это говорит о том, что ориентационное плавление в кластере $N = 19$ отсутствует, а при $T = T_c$ сразу происходит полное плавление кластера. На рис. 7 период функции $g(\varphi)$ равен $42\pi/12 = 2\pi/3$ (коэффициент 4 в числителе возник в силу соответствующей симметрии кластера).

Следует отметить, что потенциальная энергия и теплоемкость, как функции температуры, в обоих кластерах не имеют особенностей, поэтому эти зависимости нельзя использовать для определения температур плавления. Строго говоря, ориентационное и полное плавления в микрокластерах лишь условно можно называть фазовыми переходами, так как система является конечной.

Мы также исследовали распределение системы по локальным минимумам с повышением температуры. Оказалось, что и для $N = 19$ и 20 при температуре, меньшей температуры полного плавления, кластер все время находится вблизи конфигурации, отвечающей глобальному минимуму потенциальной энергии. При температуре, большей температуры полного плавления, вероятность

того, что кластер находится вблизи конфигурации, соответствующей глобальному минимуму уменьшается и выходит на постоянное значение; а вероятности того, что кластер находится вблизи конфигурации, соответствующей локальному минимуму потенциальной энергии, увеличиваются и тоже выходят на постоянные значения. На рис. 8 показаны изменения вероятностей нахождения

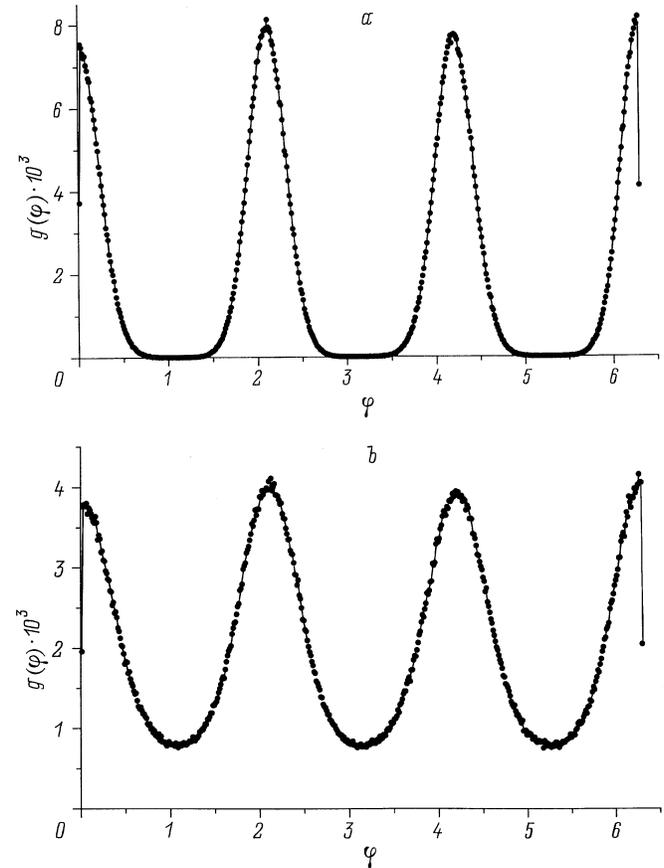


Рис. 7. Функция распределения углов между частицами двух оболочек $g(\varphi)$. $N = 19$. $a - T = 3 \cdot 10^{-3}$; $b - T = 7 \cdot 10^{-3}$.

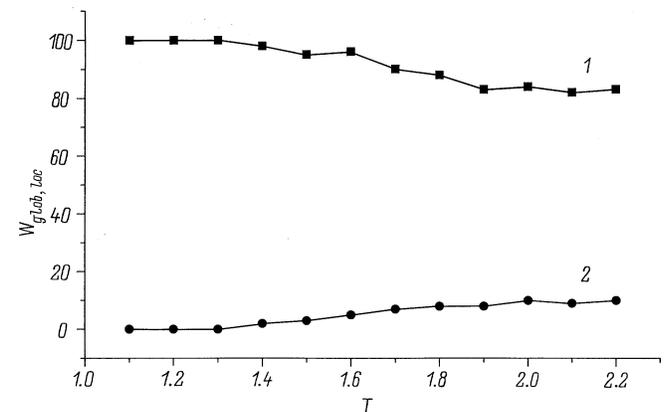


Рис. 8. Вероятность нахождения кластера вблизи глобального (1) и локального минимумов (2) потенциальной энергии, как функции температуры $W(T)$. $N = 20$.

кластера $N = 20$ в глобальном минимуме потенциальной энергии с оболочечной структурой (1, 7, 12) и в ближайшем к нему локальном минимуме со структурой (1, 6, 13). Кластер перемещается между конфигурациями, соответствующими различным локальным минимумам.

В заключение отметим, что некоторые выводы настоящей работы относятся не только к мезоскопическим электронным кластерам, но и к протяженному вигнеровскому кристаллу в полупроводниках с дефектами, шероховатостями структур и т.п. В самом деле, при наличии случайных потенциальных ям, электронный кристалл может при определенных условиях разбиваться на отдельные кластеры вблизи этих ям, "плавление" которых происходит, как описано в настоящей работе.

Работа поддержана Российским фондом фундаментальных исследований, ИНТАС и программой "Физика наноструктур".

Список литературы

- [1] Ю.Е. Лозовик. УФН **153**, 2, 356 (1987); Изв. РАН. Сер. физ. **60**, 9, 72 (1996).
- [2] Yu.E. Lozovik, V.A. Mandelshtam. Phys. Lett. **A145**, 5, 269 (1990); Yu.E. Lozovik, V.A. Mandelshtam. Phys. Lett. **A165**, 6, 469 (1992).
- [3] Yu.E. Lozovik, E.A. Rakoch. Phys. Lett. **A235**, 1, 55 (1997); Ю.Е. Лозовик, Е.А. Ракоч. ФТТ **40**, 7, 1379 (1998); A.I. Belousov, Yu.E. Lozovik. condmat/9806108.
- [4] Ю.Е. Лозовик, Е.А. Ракоч. Письма в ЖЭТФ **65**, 3, 268 (1997); Ю.Е. Лозовик, Е.А. Ракоч. ФТТ **39**, 6, 1005 (1997); Yu.E. Lozovik, E.A. Rakoch. Phys. Rev. **B57**, 2, 1214 (1998).
- [5] Yu.E. Lozovik, E.A. Rakoch. Phys. Lett. **A240**, 6, 311 (1998).
- [6] F.M. Peeters, V.A. Schweigert, V.M. Bedanov. Physica **B212**, 3, 237 (1995).
- [7] M.A. Read, W.P. Krik. Nanostructure Physics and Fabrication. Academic Press, Boston (1989).
- [8] P. Leiderer, W. Ebner, V.B. Shikin. Surf. Sci. **173**, 4, 405 (1987).
- [9] F. Diedrich, E. Peik, J.M. Chen, W. Quint, H. Walther. Phys. Rev. Lett. **59**, 26, 2931 (1988).
- [10] S.L. Gilbert, J.J. Bollinger, D.J. Wineland. Phys. Rev. Lett. **60**, 20, 2022 (1988).