

# Плавление двумерных электронных кластеров различной формы

В. Е. Сивоконь

*Физико-технический институт низких температур им. Б. И. Веркина Национальной академии наук Украины  
Харьков, 61103, Украина  
E-mail: sivokon@ilt.kharkov.ua*

Статья поступила в редакцию 12 мая 2020 г., опубликована онлайн 21 августа 2020 г.

Методом молекулярной динамики исследовано плавление двумерных кластеров, которые могут быть созданы в электронных системах над поверхностью сверхтекучего гелия при использовании прижимающих электродов треугольной, квадратной, шестиугольной и круглой формы. Исследованы кластеры с фиксированной поверхностной плотностью  $10^8 \text{ см}^{-2}$ , но различным числом частиц (от 3 до 406). Показано, что в бездефектных кластерах переход в неупорядоченное состояние происходит резко и температуру плавления  $T_{\text{melt}}$  легко определить. Зависимость  $T_{\text{melt}}$  от размера кластера наблюдается для кластеров с числом частиц  $N < 400$ . В квадратных кластерах с  $N < 50$  упорядочение частиц навязывается граничными условиями, а при  $N > 100$  наблюдается треугольная решетка с дефектами вблизи границы. В круглых кластерах электроны начинают легко перемещаться в угловом направлении уже при довольно низких температурах, но температура «радиального плавления» согласуется с температурой плавления малых квадратных кластеров. При наличии дефектов переход в неупорядоченное состояние начинается с области дефекта и постепенно распространяется на весь кластер. Четкого определения температуры плавления в этой картине нет.

Ключевые слова: кластер, вигнеровский кристалл, плавление, молекулярная динамика.

## Введение

Кристаллизация электронов на фоне равномерно распределенного положительного заряда, предсказанная в 1934 Вигнером [1], обнаружена Граймсом и Адамсом в 1979 году [2] в системе электронов, образующейся при электризации поверхности сверхтекучего гелия [3]. Ввиду квантования движения электронов в направлении, перпендикулярном поверхности жидкости, при низкой температуре вблизи поверхности возможна пространственно двумерная электронная система, которая при определенном соотношении между потенциальной и кинетической энергией электронов кристаллизуется, образуя двумерный электронный (вигнеровский) кристалл. Исследованиям, как экспериментальным, так и теоретическим, электронного кристалла посвящено множество работ, результаты которых частично отражены в обзорах [4–6].

Среди других двумерных или квазидвумерных упорядоченных систем заряженных частиц следует отметить электронные структуры в полупроводниках [7–9], ионный кристалл под поверхностью сверхтекучего гелия [10, 11], структуры в пылевой или комплексной

плазме [12, 13], упорядоченные коллоидные системы [14, 15].

Одной из фундаментальных проблем при исследовании двумерных упорядоченных структур является механизм образования и разрушения пространственного порядка, т. е. механизм кристаллизации и плавления. Плавление двумерного вигнеровского кристалла, как принято считать, происходит по механизму Березинского–Костерлица–Таулесса–Нельсона–Гальперина–Янга [16–19], в котором определяющую роль играют дефекты кристаллической решетки. Электронный кристалл имеет треугольную решетку и характеризуется двумя типами симметрии — трансляционной и ориентационной, нарушениям которых соответствуют два типа дефектов — дислокации и дисклинации. Предполагается, что плавление вигнеровского кристалла происходит в два этапа, на каждом из которых исчезает один из видов симметрии, так что существует некое состояние системы (гексатическая фаза), в котором сохраняется только один вид порядка (ориентационный), но отсутствует другой (трансляционный). Плавление вигнеровского кристалла изучалось экспериментально, в том числе и в нелинейном режиме (в больших электрических полях

в плоскости слоя, влияющих на упорядочение электронов) [20–21], делались попытки обнаружить квантовое плавление кристалла над пленкой жидкого гелия [22], изучалось плавление кристалла над жидким  $^3\text{He}$  [23].

В связи с миниатюризацией электроники и необходимостью создания электронных устройств, оперирующих небольшим числом электронов, возникает необходимость исследования особенностей поведения систем с малым числом частиц (кластеров) в зависимости от их размеров и условий, в которых они находятся (конфигурация внешних полей и температура). Изучение кластеров затрагивает и фундаментальные физические проблемы, так как ставит вопросы о том, в какой мере представления и подходы, разработанные для статистически больших систем, могут быть использованы для описания процессов в мезоскопических системах.

Эффективными методами исследования мезоскопических систем являются модельные компьютерные расчеты, которые позволяют проанализировать поведение каждой частицы в системе в различных условиях и получить информацию о системе, недоступную или малодоступную в непосредственных физических измерениях. Такие расчеты часто весьма полезны при анализе и интерпретации результатов эксперимента [24].

Методами компьютерного моделирования исследуются процессы плавления двумерных кристаллов [25–28], в частности анализируются вопросы о существовании гексатической фазы [29]. Эти методы широко используются и для исследования систем с малым числом заряженных частиц, находящихся в условиях различных электрических полей, удерживающих эти частицы в ограниченной области пространства [30–38].

Цель настоящей работы — исследование плавления электронных кластеров в зависимости от их размера, формы и дефектов упаковки, в условиях, близких к условиям реального физического эксперимента. Объекты исследования — электронные системы, которые могут быть созданы в экспериментах с электронами над поверхностью сверхтекучего гелия при использовании прижимающих электродов различной формы.

### Методика

Методами молекулярной динамики исследовалось поведение кластеров двумерных электронных кристаллов над поверхностью жидкого гелия при использовании прижимающих электродов различной формы: треугольных, квадратных, шестиугольных и круглых. Рассматривались кластеры, содержащие  $N = 6\text{--}406$  частиц. Кластеры были расположены над электродами, площадь которых  $S$  выбиралась так, чтобы поверхностная плотность электронов поддерживалась постоянной  $N/S = n_s = 10^8 \text{ см}^{-2}$ . Двумерный слой электронов находился на расстоянии  $d = 10^{-5} \text{ см}$  от прижимающего электрода, что на порядок меньше среднего расстояния между электронами  $\bar{r} = 1/\sqrt{n_s} = 10^{-4} \text{ см}$ .

Начальная конфигурация электронов, как правило, представляла собой случайное расположение электронов над выбранным электродом. Скорости электронов тоже были случайными в некотором интервале, зависящем от выбранной температуры  $T$ . В процессе расчета пошагово решалась система уравнений

$$\mathbf{r}_i(t + \Delta t) = \mathbf{r}_i(t) + \mathbf{v}_i \Delta t + \frac{\mathbf{f}_i(t)}{2m} (\Delta t)^2$$

и

$$\mathbf{v}_i(t + \Delta t) = \mathbf{v}_i(t) + \frac{\mathbf{f}_i(t)}{m} \Delta t$$

и определялись координаты  $\mathbf{r}_i$  и  $\mathbf{v}_i$  электронов. Здесь  $m$  — масса электрона, а  $\mathbf{f}_i$  — сила, действующая на электрон. Эта сила состоит из межэлектронных сил и силы, обусловленной влиянием прижимающего электрода  $\mathbf{F}_i^{(\perp)}$ :

$$\mathbf{f}_i = e^2 \sum_{j \neq i}^N \frac{\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i}{|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i|^3} + \mathbf{F}_i^{(\perp)}.$$

На каждом шаге скорости электронов корректировались с тем, чтобы удовлетворить условию  $\frac{m}{2} \sum_{i=1}^N \mathbf{v}_i^2 = NT$ . Подробно процедура расчета описана в [39]. Расчеты проводились при фиксированных температурах, а также при медленном изменении температуры на каждом шаге так, чтобы за время расчета температура изменилась заданным образом.

### Плавление бездефектных кристаллов

Существуют разные критерии плавления двумерных систем [30, 40, 41], но насколько они применимы в случае мезоскопических систем априори неясно. В работе по исследованию плавления электронных кристаллов в узких каналах [42], проанализировав перемещения всех частиц при разных температурах, удалось отчетливо выделить два режима в поведении системы. В одном случае электроны колеблются возле некоторых средних значений, в другом — совершают скачки на расстояние, сравнимое со средним расстоянием между частицами, причем частота скачков возрастает с ростом температуры. Переход от одного режима к другому происходит в узком температурном интервале, так что его можно интерпретировать как фазовый переход (плавление). Это иллюстрация критерия Линдемана, который связывает плавление с достижением некоторой предельной амплитуды колебаний частиц. При достаточно большой амплитуде, сравнимой со средним расстоянием между частицами, соседние частицы могут обмениваться местами. Если процессы обмена происходят часто, в системе возможен массоперенос и любая частица может достичь любой точки в пространственной области, занимаемой системой. Такая картина характеризует неупорядоченную или жидкую фазу.

Аналогичные соображения применим при анализе плавления кластеров. В качестве количественной меры использованы величины  $\frac{1}{N} \sum_i (y_i - y_i^{(0)})^2$  и  $\frac{1}{N} \sum_i (x_i - x_i^{(0)})^2$ , где  $x_i^{(0)}$  и  $y_i^{(0)}$  — средние значения координат при низкой температуре, при которой отклонения частиц от положения равновесия малы.

При исследовании плавления расчеты проводились как при наборах фиксированных температур, так и при переменной температуре, которая плавно изменялась на каждом вычислительном шаге с тем, чтобы обеспечить исследование системы в выбранном температурном интервале.

Рисунок 1 иллюстрирует поведение бездефектного кристалла с  $N^{(3)} = 6$ . Верхний индекс в скобках указывает на число углов прижимающего электрода (для круглого электрода этот индекс  $\infty$ ). Температурные зависимости  $y$ -координат электронов [рис. 1(а)] показывают, что во всем исследованном температурном интервале существуют некоторые средние положения, вокруг которых колеблются электроны, причем амплитуда колебаний увеличивается с ростом температуры. При температуре около 1 К начинают происходить перескоки электронов из одного положения в другое, что отчетливо видно на температурной зависимости среднеквадратичных смещений  $\frac{1}{N} \sum_i (y_i - y_i^{(0)})^2$  [рис. 1(б)].

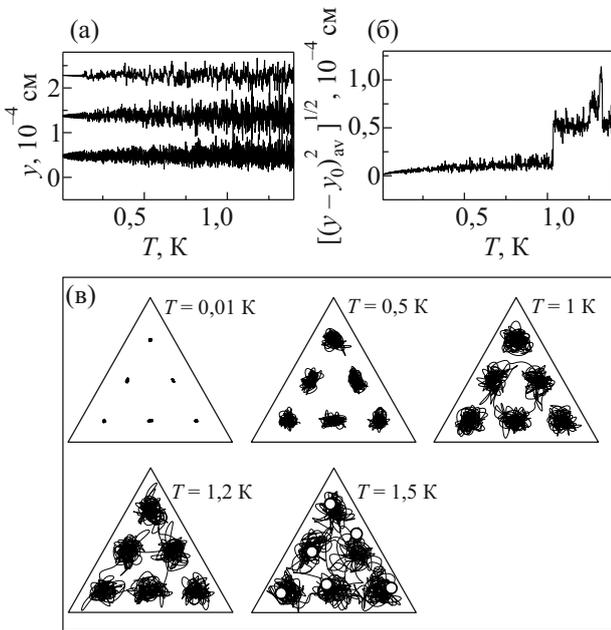


Рис. 1. Плавление кластера с  $N^{(3)} = 6$ . (а) Температурная зависимость  $y$ -координат; (б) температурная зависимость среднеквадратичных смещений  $\frac{1}{N} \sum_i (y_i - y_i^{(0)})^2$  от положений равновесия при  $T = 10^{-2}$  К; (в) траектории движения электронов при разных температурах. Положение электронов в некоторый фиксированный момент времени при  $T = 1,5$  К (○).

Резкое возрастание этой величины при  $T = 1,1$  К указывает на плавление кластера. Траектории движения электронов над электродом при разных температурах дополнительно иллюстрируют процесс плавления [рис. 1(в)]. При температуре  $T = 1$  К видны обмены между тремя центральными электронами, а при  $T = 1,2$  К во взаимные обмены включаются и остальные электроны. При  $T = 1,5$  К существует явно неупорядоченная фаза [положение электронов в некоторый фиксированный момент времени (○)], однако определенный порядок в среднем остается. Электроны с большей вероятностью находятся в местах, соответствующих положениям равновесия при низких температурах, что объясняется сильным влиянием симметрии электрода.

Аналогичное поведение демонстрируют бездефектные кристаллы с  $N^{(3)} = 21$  (рис. 2) и  $N^{(3)} = 105$  (рис. 3) и кристалл над шестиугольным электродом с  $N^{(6)} = 91$  (рис. 4).

На рис. 1–4 хорошо видно, что изменение температурной зависимости среднеквадратичных отклонений происходит очень резко, что позволяет легко определить температуру плавления как температуру, при которой быстро увеличиваются смещения электронов от положений равновесия. Траектории частиц при разных температурах показывают, что практически все частицы при достижении температуры плавления участвуют в процессах перемещения порядка среднего расстояния между электронами. Даже в явно неупорядоченной фазе частицы с большей вероятностью оказываются в

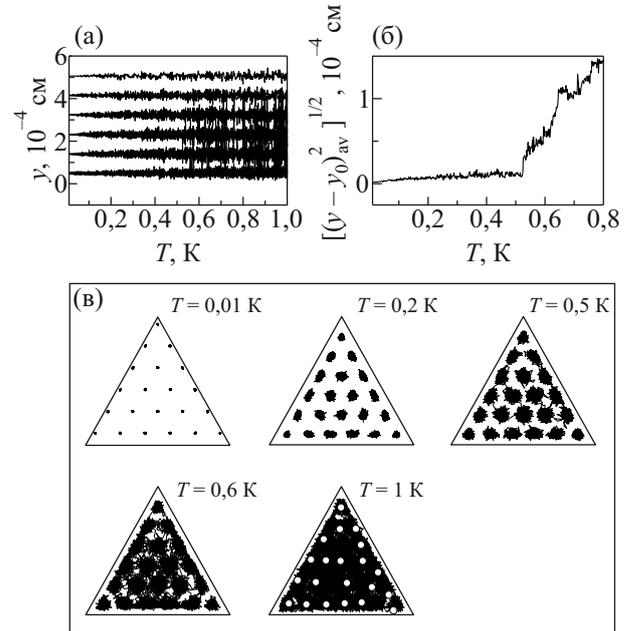


Рис. 2. Плавление кластера с  $N^{(3)} = 21$ . (а) Температурная зависимость  $y$ -координат; (б) температурная зависимость среднеквадратичных смещений  $\frac{1}{N} \sum_i (y_i - y_i^{(0)})^2$  от положений равновесия при  $T = 10^{-2}$  К; (в) траектории движения электронов при разных температурах. Положение электронов в некоторый фиксированный момент времени при  $T = 1$  К (○).

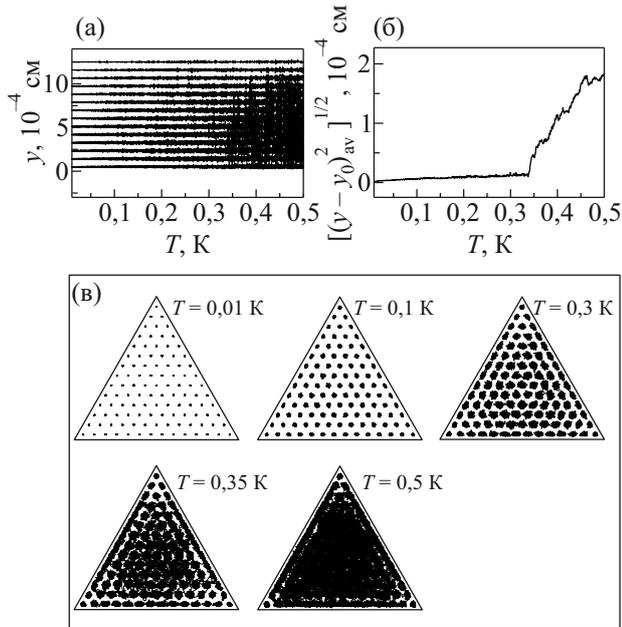


Рис. 3. Плавление кластера с  $N^{(3)} = 105$ . (а) Температурная зависимость  $y$ -координат; (б) температурная зависимость среднеквадратичных смещений  $\frac{1}{N} \sum_i (y_i - y_i^{(0)})^2$  от положений равновесия при  $T = 10^{-2}$  К; (в) траектории движения электронов при разных температурах.

местах, положение которых отражает симметрию системы. Для  $N^{(3)} = 21$  при  $T = 1$  К показана конфигурация электронов в некоторый фиксированный момент времени. Видно, что система явно неупорядочена, но в среднем электроны чаще находятся в местах, расположенных симметрично.

Температуру плавления бездефектного кластера в зависимости от его размера (рис. 5) можно аппроксимировать выражением  $T_{\text{melt}}^{(3,6)} = 1,58 \cdot N^{-1/3}$ . Эта зависимость показана на рис. 5 сплошной линией. Как видно, температура плавления кластера достигает температуры плавления массивного электронного кристалла (горизонтальный пунктир) при размере кластера около 400 электронов. Штриховой линией показана зависимость  $T_{\text{melt}}^{\text{chan}} = 0,9 \cdot \tilde{N}^{-1/3}$ , которой была аппроксимирована зависимость температуры плавления электронного кристалла с поверхностной плотностью  $n_s = 10^8 \text{ см}^{-2}$  в узких каналах вдали от структурных переходов [40] от величины  $\tilde{N} = M / \sqrt{n_s}$ , где  $M$  — ширина канала. Величина  $\tilde{N} = M / \sqrt{n_s}$  — это линейный размер системы в измерении, в котором она ограничена, т. е. имеет тот же смысл, что и величина  $N^{1/2}$  для кластера, который в отличие от канала ограничен не в одном, а в двух измерениях.

Квадратный кластер при малом числе частиц, когда симметрия электрода навязывает симметрию расположения частиц, плавится примерно так же, как и бездефектный кластер. Это хорошо видно на примере плавления

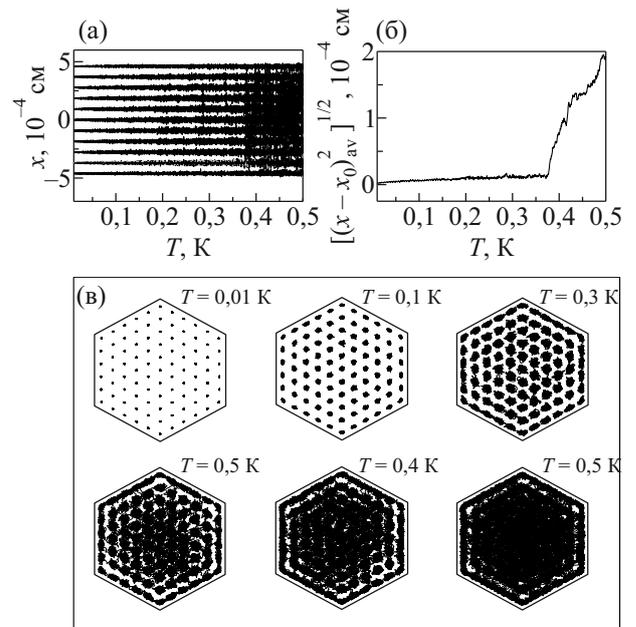


Рис. 4. Плавление кластера с  $N^{(6)} = 91$ . (а) Температурная зависимость  $x$ -координат; (б) температурная зависимость среднеквадратичных смещений  $\frac{1}{N} \sum_i (x_i - x_i^{(0)})^2$  от положений равновесия при  $T = 10^{-2}$  К; (в) траектории движения электронов при разных температурах.

квадратного кластера с  $N^{(4)} = 9$  (рис. 6). Температура плавления определяется достаточно четко.

Так же четко можно определить по среднеквадратичным смещениям электронов температуру плавления кластера, содержащего  $N^{(4)} = 49$  (рис. 7), но при

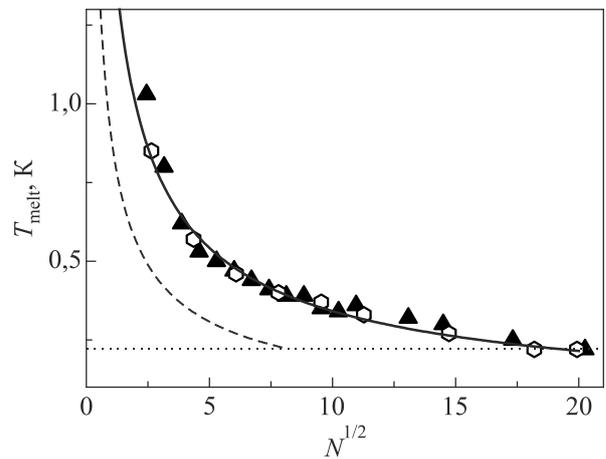


Рис. 5. Температура плавления бездефектных электронных кластеров с поверхностной плотностью  $n_s = 10^8 \text{ см}^{-2}$  над треугольными ( $\blacktriangle$ ) и шестиугольными ( $\circ$ ) электродами. Аппроксимирующая зависимость  $T_{\text{melt}}^{(3,6)} = 1,58 \cdot N^{-1/3}$  (—); аппроксимирующая зависимость для температуры плавления электронного кристалла в узком канале  $T_{\text{melt}}^{\text{chan}} = 0,9 \cdot \tilde{N}^{-1/3}$  ( $\tilde{N} = M / \sqrt{n_s}$ , где  $M$  — ширина канала) [40] (---); температура плавления массивного электронного кристалла с плотностью  $n_s = 10^8 \text{ см}^{-2}$  (···).

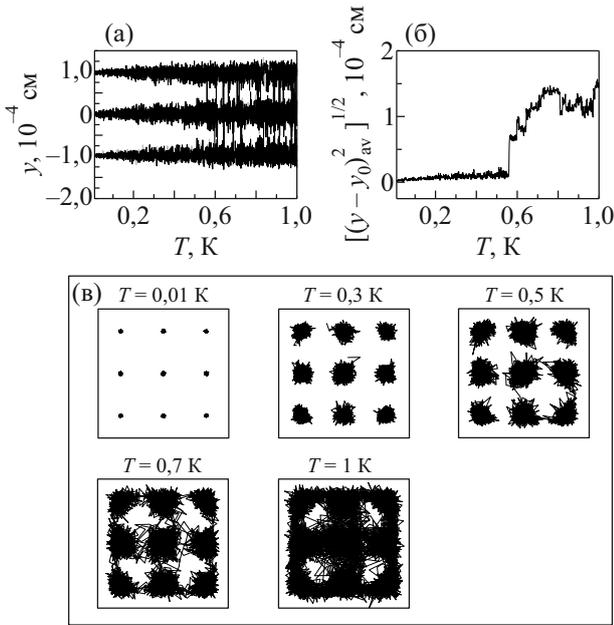


Рис. 6. Плавление кластера с  $N^{(4)} = 9$ . (а) Температурная зависимость  $y$ -координат; (б) температурная зависимость среднеквадратичных смещений  $\frac{1}{N} \sum_i (y_i - y_i^{(0)})^2$  от положений равновесия  $T = 10^{-2}$  К; (в) траектории движения электронов при разных температурах.

низкой температуре ( $T = 0,01$  К) хорошо заметно, что структура кластера заметно отклоняется от квадратной

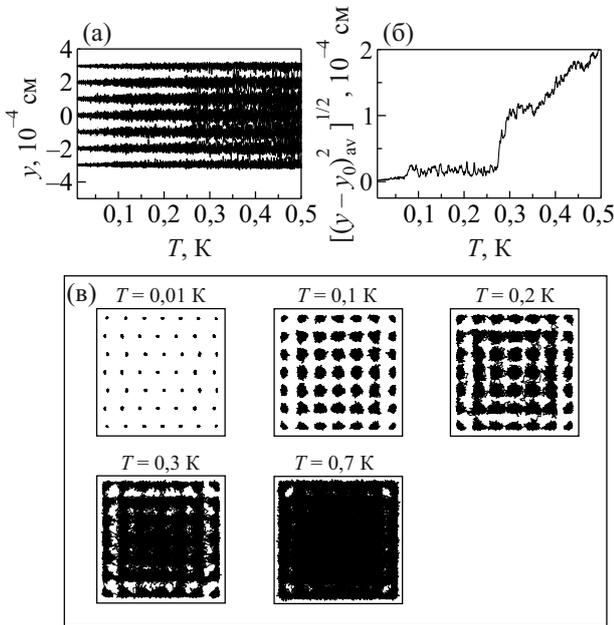


Рис. 7. Плавление кластера с  $N^{(4)} = 49$ . (а) Температурная зависимость  $y$ -координат; (б) температурная зависимость среднеквадратичных смещений  $\frac{1}{N} \sum_i (y_i - y_i^{(0)})^2$  от положений равновесия при  $T = 10^{-2}$  К; (в) траектории движения электронов при разных температурах.

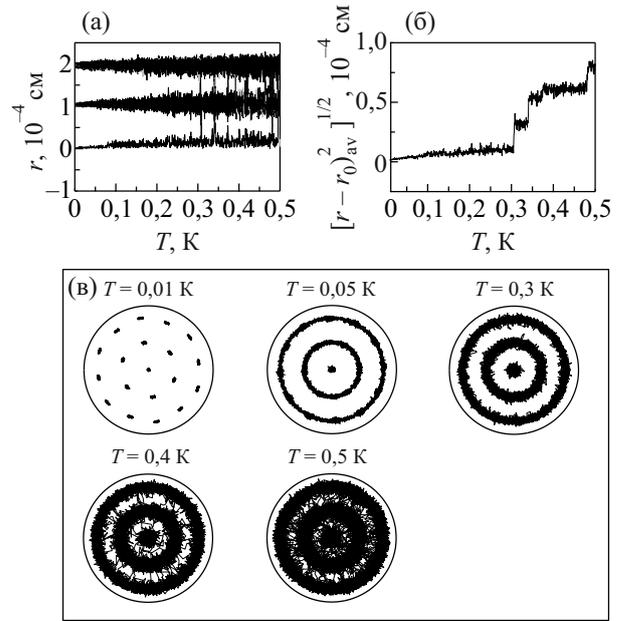


Рис. 8. Плавление кластера с  $N^{(\infty)} = 19$ . (а) Температурная зависимость радиусов частиц; (б) температурная зависимость среднеквадратичных смещений  $\frac{1}{N} \sum_i (r_i - r_i^{(0)})^2$  от положений равновесия при  $T = 10^{-2}$  К; (в) траектории движения электронов при разных температурах.

решетки. Кроме того, анализ траекторий частиц при фиксированных температурах показывает, что заметно ниже температуры плавления при  $T = 0,2$  К наблюдаются перемещения частиц порядка среднего расстояния между частицами и в эти движения вовлечено большое количество частиц.

Вероятно, кластер  $N^{(4)} = 49$  — это максимальный кластер, структура которого определяется преимущественно симметрией границы и который может рассматриваться как бездефектный. При дальнейшем увеличении размеров над квадратным электродом будет образовываться структура с треугольной решеткой, но с дефектами вблизи границ, обусловленными разными элементами симметрии кристаллической решетки и границ. Этот результат согласуется с расчетами упорядочения электронов в параболическом потенциале [12], в которых обнаружено, что для небольшого числа частиц ( $< 50$ ) образуются оболочки, то есть существенно сказывается симметрия внешнего поля.

Несколько иная картина в случае круглого электрода (рис. 8). При достаточно низкой температуре наблюдаются заметные угловые колебания и перемещения частиц, но перескоки частиц в радиальном направлении происходят при значительно более высокой температуре. Фактически наблюдаются две температуры плавления: температура ориентационного плавления и температура радиального плавления, которые сильно отличаются по величине.

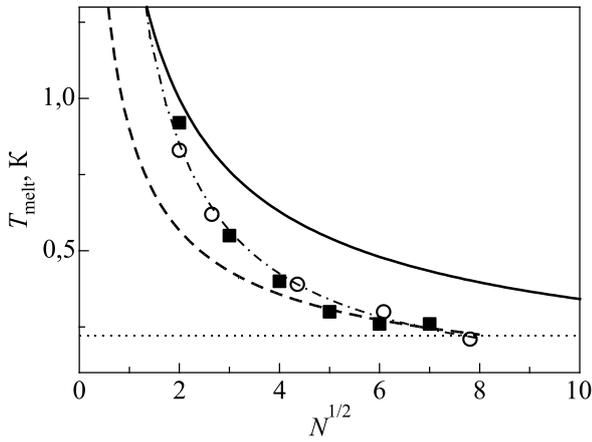


Рис. 9. Температура плавления электронных кластеров с поверхностной плотностью  $n_s = 10^8 \text{ см}^{-2}$  над квадратными (■) и круглыми (○) электродами. Аппроксимирующая зависимость  $T_{\text{melt}}^{(3,6)} = 1,58 \cdot N^{-1/3}$  для бездефектных кристаллов (—); аппроксимация  $T_{\text{melt}}^{(4,\infty)} = 1,7 \cdot N^{-1/2}$  (---); аппроксимирующая зависимость для кристаллов в узких каналах  $T_{\text{melt}}^{\text{chan}} = 0,9 \cdot \tilde{N}^{-1/3}$  ( $\tilde{N} = M / \sqrt{n_s}$ , где  $M$  — ширина канала) [40] (- -); температура плавления массивного электронного кристалла с плотностью  $n_s = 10^8 \text{ см}^{-2}$  (···).

Таким образом, существует интервал температур, в котором электронную систему нельзя однозначно рассматривать как полностью упорядоченную или полностью разупорядоченную. Хорошо определенная упорядоченная система существует лишь при низких температурах, а разупорядоченная система лишь после того, как электроны начнут совершать скачки не только в тангенциальном, но и в радиальном направлениях.

Кластер следует считать расплавленным только выше температуры радиального плавления.

На рис. 9 приведена зависимость температуры плавления кластеров над квадратным и круглым электродом от размера кластера. Для круглых кластеров температура соответствует радиальному плавлению.

Кластеры над квадратным и круглым электродом плавятся при  $T_{\text{melt}}$ , соответствующей массивному кристаллу, если их размеры около 50 частиц, но для кластеров меньших размеров температура плавления возрастает, стремясь к зависимости, найденной для бездефектных кристаллов. Штрихпунктирная линия — аппроксимация  $T_{\text{melt}}^{(4,\infty)} = 1,7 \cdot N^{-1/2}$ . Нужно отметить, что температуры плавления для кластеров над квадратным и круглым электродами описываются одной и той же зависимостью. При этом температура плавления кластеров над круглым электродом определялась как температура радиального плавления.

### Плавление кластеров с дефектами

Наличие дефектов в кластере заметно изменяет процесс его плавления. В треугольных или шестиугольных кластерах дефекты упаковки появляются, если число частиц отличается от числа, соответствующего идеальной

упаковке. Достаточно, если отличие минимально и составляет одну частицу.

На рис. 10 показан процесс плавления треугольного кластера, число частиц в котором на единицу превышает треугольное число. «Избыточная» частица размещается в ряду, ближайшем к границе, и приводит к снижению устойчивости в этом ряду. Заметные перемещения частиц наблюдаются уже при самых низких температурах. При температуре  $T = 0,3 \text{ К}$  видно, что значительная часть электронов совершает перемещения на межчастичные расстояния, что характерно для неупорядоченной фазы. Остальные электроны в таких движениях не участвуют, демонстрируя поведение, характерное для упорядоченной фазы. Если число частиц в кластере на единицу меньше треугольного числа (рис. 11), то образуется дефект внутри кластера и при увеличении температуры уже при  $T = 0,1 \text{ К}$  наблюдаются смещения электронов вблизи дефекта на межчастичные расстояния. Остальные электроны колеблются вокруг положений равновесия. При увеличении температуры число электронов, движение которых соответствует неупорядоченной фазе, увеличивается. Как следствие, среднеквадратичные смещения [рис. 11(б)] плавно изменяются с температурой. Аналогичное поведение наблюдается и в шестиугольных кластерах (рис. 12 и 13).

Возникает вопрос, что считать температурой плавления кластера, если в некотором интервале температур он частично упорядочен, а частично нет? По-видимому, логично считать температурой плавления (разупорядочения) температуру, при которой все частицы (или

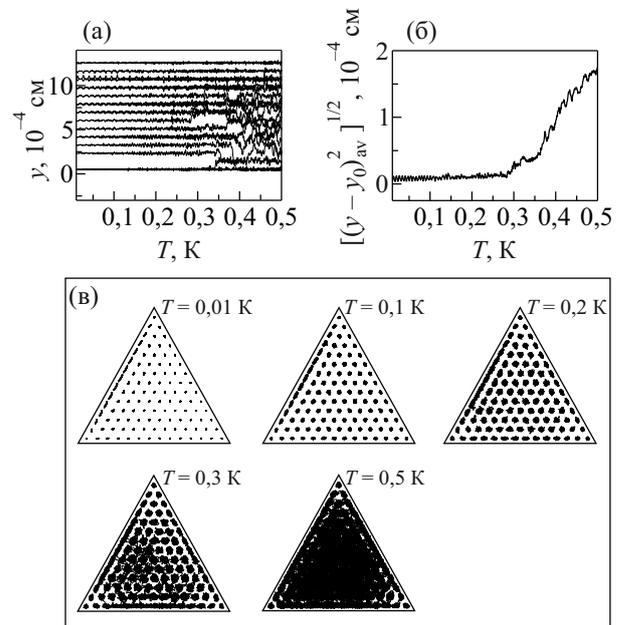


Рис. 10. Плавление кластера с  $N^{(3)} = 106$ . (а) Температурная зависимость  $y$ -координат; (б) температурная зависимость среднеквадратичных смещений  $\frac{1}{N} \sum_i (y_i - y_i^{(0)})^2$  от положений равновесия при  $T = 10^{-2} \text{ К}$ ; (в) траектории движения электронов при разных температурах.

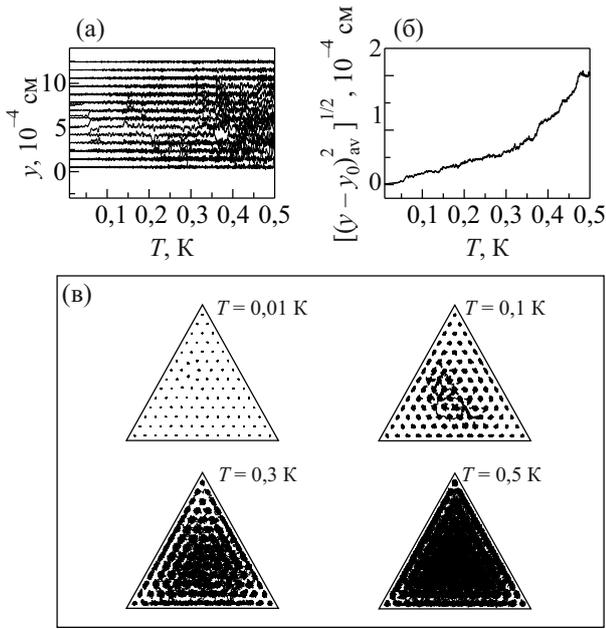


Рис. 11. Плавление кластера с  $N^{(3)} = 104$ . (а) Температурная зависимость  $y$ -координат; (б) температурная зависимость среднеквадратичных смещений  $\frac{1}{N} \sum_i (y_i - y_i^{(0)})^2$  от положений равновесия при  $T = 10^{-2} \text{ К}$ ; (в) траектории движения электронов при разных температурах.

подавляющая часть) в системе совершают значительные перемещения и каждой из них доступна любая область пространства, занимаемая системой. Выше

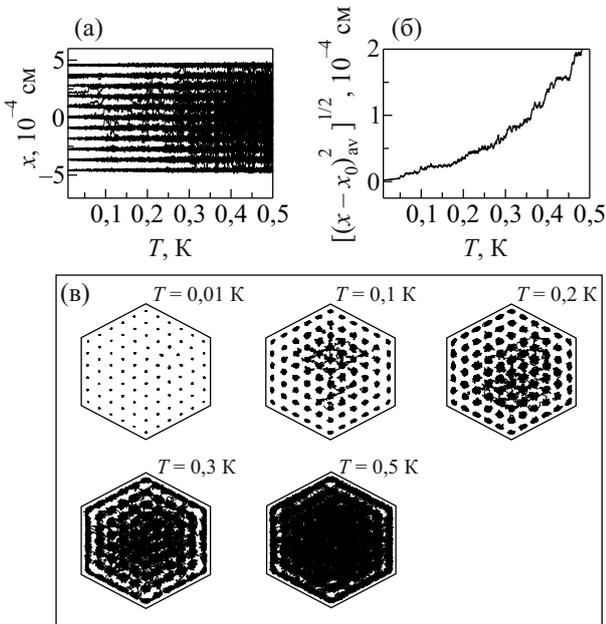


Рис. 12. Плавление кластера с  $N^{(6)} = 90$ . (а) Температурная зависимость  $x$ -координат; (б) температурная зависимость среднеквадратичных смещений  $\frac{1}{N} \sum_i (x_i - x_i^{(0)})^2$  от положений равновесия при  $T = 10^{-2} \text{ К}$ ; (в) траектории движения электронов при разных температурах.

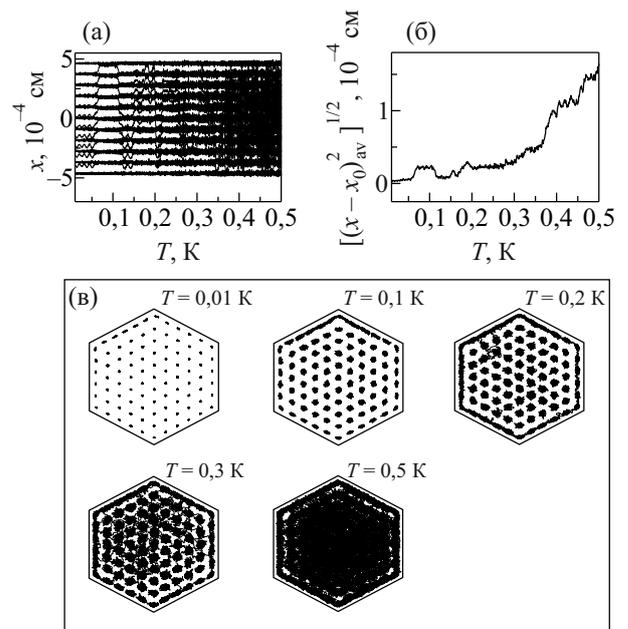


Рис. 13. Плавление кластера с  $N^{(6)} = 92$ . (а) Температурная зависимость  $x$ -координат; (б) температурная зависимость среднеквадратичных смещений  $\frac{1}{N} \sum_i (x_i - x_i^{(0)})^2$  от положений равновесия при  $T = 10^{-2} \text{ К}$ ; (в) траектории движения электронов при разных температурах.

этой температуры нет неопределенности в состоянии системы, она неупорядочена. А жидкоподобное поведение части частиц при более низких температурах следует рассматривать как проявление эффектов предплавления, обусловленное наличием дефектов и пониженными в области дефектов энергетическими барьерами, препятствующими движению частиц. Существенное влияние на движение частиц в малых кластерах ( $N < 50$ ), расположенных над квадратным и круглым электродами, оказывает граница. Так, в круглых кластерах ввиду круговой симметрии оказывается весьма вероятным угловое перемещение частиц, которое и проявляется при температурах значительно ниже температуры плавления. Как следствие, в кластерах с дефектами не удастся четко определить температуру плавления, в отличие от бездефектных кластеров. Однако сравнивая траектории движения электронов при фиксированных температурах для бездефектных кластеров и кластеров с дефектами, можно сделать вывод, что дефекты приводят к снижению температуры плавления.

Электронные кластеры квадратной или круглой формы, симметрия которых не совпадает с симметрией треугольной решетки, плавятся так же, как треугольные и шестиугольные кристаллы с дефектами (рис. 14 и 15). В этих системах так же сложно однозначно определить температуру плавления, анализируя траектории частиц при различных температурах и среднеквадратичные отклонения координат частиц. Возможно, существует

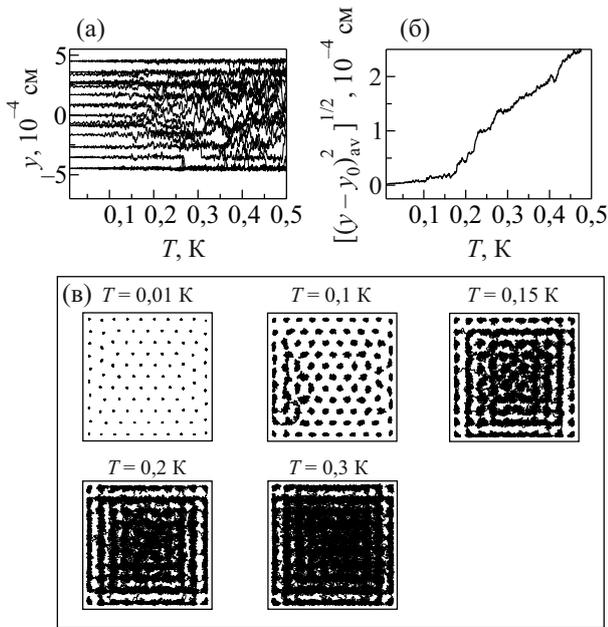


Рис. 14. Плавление кластера с  $N^{(4)} = 100$ . (а) Температурная зависимость  $y$ -координат; (б) температурная зависимость среднеквадратичных смещений  $\frac{1}{N} \sum_i (y_i - y_i^{(0)})^2$  от положений равновесия при  $T = 10^{-2}$  К; (в) траектории движения электронов при разных температурах.

какой-то универсальный численный критерий (аналогичный критерию Линдемана), который связывает температуру плавления с отклонением частиц от положений равновесия, но для его обоснования в рамках

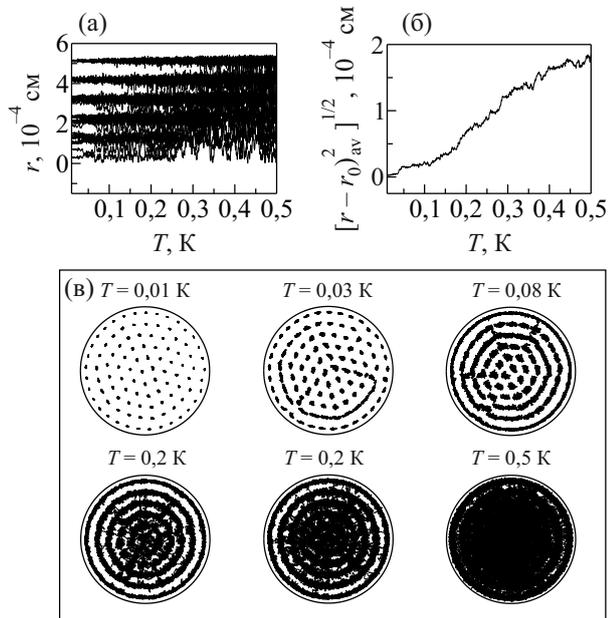


Рис. 15. Плавление кластера с  $N^{(\infty)} = 100$ . (а) Температурная зависимость  $r$ -координат; (б) температурная зависимость среднеквадратичных смещений  $\frac{1}{N} \sum_i (r_i - r_i^{(0)})^2$  от положений равновесия при  $T = 10^{-2}$  К; (в) траектории движения электронов при разных температурах.

проведенных расчетов нужны дополнительные соображения о том, при каком характере движения частиц систему можно рассматривать как разупорядоченную.

### Плавление электронного кластера во внешнем поле

Двумерный электронный кристалл образуется на фоне равномерного распределенного положительного заряда, компенсирующего взаимное отталкивание электронов. Структура и свойства упорядоченной двумерной системы определяются, с одной стороны, электрон-электронным взаимодействием, а с другой — конфигурацией внешних полей, которые являются неотъемлемым атрибутом системы, поскольку электроны могут находиться в определенной области пространства только при наличии полей, ограничивающих их движение.

Роль поля иллюстрируют рис. 16 и 17, на которых один и тот же треугольный электронный кластер, содержащий 55 электронов (треугольное число), плавится при разных условиях. В первом случае (рис. 16) компенсирующий положительный заряд равен суммарному заряду электронов  $Q_{\perp} = N^{(3)}e$ . При низкой температуре образуется бездефектный кластер. При повышении температуры кластер плавится, и  $T_{melt}$  легко определить по среднеквадратичным смещениям координат электронов [рис. 16(б)]. Если заряд на прижимающем электроде значительно превышает суммарный заряд электронов  $Q_{\perp} = 3 \cdot N^{(3)}e$  (рис. 17), на электронную систему начинает действовать дополнительное, по сравнению

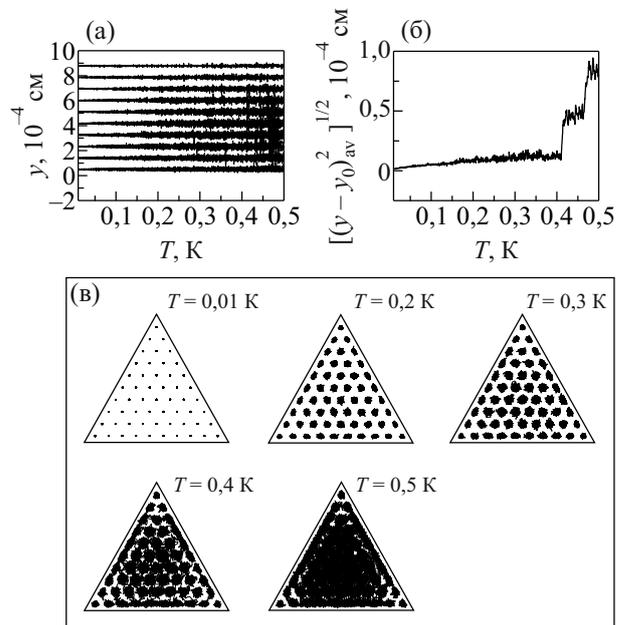


Рис. 16. Плавление кластера с  $N^{(3)} = 55$  при заряде на прижимающем электроде  $Q_{\perp} = N^{(3)}e$ . (а) Температурная зависимость  $y$ -координат; (б) температурная зависимость среднеквадратичных смещений  $\frac{1}{N} \sum_i (y_i - y_i^{(0)})^2$  от положений равновесия при  $T = 10^{-2}$  К; (в) траектории движения электронов при разных температурах.

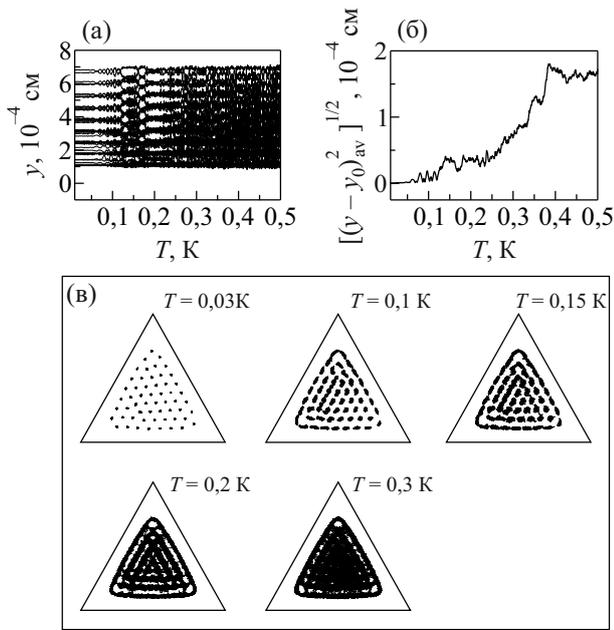


Рис. 17. Плавление кластера с  $N^{(3)} = 55$  при заряде на прижимающем электроде  $Q_{\perp} = 3 \cdot N^{(3)}e$ . (а) Температурная зависимость  $y$ -координат; (б) температурная зависимость среднеквадратичных смещений  $\frac{1}{N} \sum_i (y_i - y_i^{(0)})^2$  от положений равновесия при  $T = 10^{-2}$  К; (в) траектории движения электронов при разных температурах.

с необходимым для компенсации отталкивания электронов, электрическое поле в плоскости слоя. Это поле приводит к перестройке электронной структуры, поверхностная плотность электронов возрастает и кристаллический порядок нарушается. При повышении температуры наблюдается типичная для кластеров с дефектами картина движений электронов. При достаточно низкой температуре часть электронов способна перемещаться на расстояния, характерные для жидкой фазы, в то время как остальная часть сохраняет кристаллический порядок. Определить с достаточной точностью температуру перехода по среднеквадратичным смещениям электронов не удастся, но заметно, что нарушение порядка происходит при более низких по сравнению с бездефектным кластером температурах

### Выводы

Методами молекулярной динамики проведено исследование плавления электронных кластеров различной формы. Показано, что в бездефектных кластерах переход в неупорядоченное состояние происходит резко, и температуру плавления легко определить. Зависимость  $T_{\text{melt}}$  от размера кластера наблюдается для кластеров с числом частиц  $N < 400$ . Вероятно,  $N = 400$  близко к максимально возможному размеру бездефектного кластера. В квадратных кластерах с  $N < 50$  упорядочение частиц навязывается граничными условиями, а при  $N > 100$  наблюдается треугольная решетка с

дефектами вблизи границы. В круглых кластерах уже при достаточно низких температурах электроны начинают легко перемещаться в угловом направлении, но температура «радиального плавления» согласуется с температурой плавления малых квадратных кластеров. При наличии дефектов переход в неупорядоченное состояние начинается с области дефекта и постепенно распространяется на весь кластер. Четкого определения температуры плавления в этой картине нет.

Дополнительное внешнее поле способствует появлению дефектов. Поведение изначально бездефектного кластера в поле подобно поведению кластеров с дефектами.

1. E. P. Wigner, *Phys. Rev.* **46**, 1002 (1934).
2. C. C. Grimes and G. Adams, *Phys. Rev. Lett.* **42**, 795 (1979).
3. M. W. Cole, *Rev. Mod. Phys.* **46**, 451 (1974).
4. В. Б. Шикин, Ю. П. Монарха, *Двумерные заряженные системы в гелии*, Мир, Москва (1989).
5. Yuriy Monarkha and Kimitoshi Kono, *Two-Dimensional Coulomb Liquids and Solids*, Springer, Heidelberg (2004).
6. Ю. П. Монарха, В. Е. Сивоконь, *ФНТ* **38**, 1355 (2012) [*Low Temp. Phys.* **38**, 1067 (2012)].
7. E. Y. Andrei, G. Deville, D. C. Glatli, and F. I. B. Williams, *Phys. Rev. Lett.* **60**, 2765 (1988).
8. Yang Liu, S. Hasdemir, L. N. Pfeiffer, K. W. West, K. W. Baldwin, and M. Shayegan, *Phys. Rev. Lett.* **117**, 106802 (2016).
9. I. L. Driehko, I. Yu. Smirnov, A. V. Suslov, Y. M. Galperin, L. N. Pfeiffer, and K. W. West, *Phys. Rev. B* **94**, 075420 (2016).
10. W. F. Vinen, N. J. Appleyard, L. Skrbek, and P. K. H. Sommerfeld, *Physica B* **197**, 360 (1994).
11. P. L. Elliott, C. I. Pakes, L. Skrbek, and W. F. Vinen, *Phys. Rev. B* **61**, 1396 (2000).
12. В. Е. Фортов, А. Г. Храпак, С. А. Храпак, В. И. Молотков, О. Ф. Петров, *УФН* **174**, 495 (2004).
13. Б. А. Клумов, Г. Е. Морфилл, *Письма в ЖЭТФ* **90**, 489 (2009).
14. P. Henseler, A. Erbe, M. Köppl, P. Leiderer, and P. Nielaba, *Phys. Rev. E* **81**, 041402 (2010).
15. P. Keim, G. Maret, and H. N. von Grunberg, *Phys. Rev. E* **75**, 031402 (2007).
16. В. Л. Березинский, *ЖЭТФ* **59**, 907 (1970); *ЖЭТФ* **61**, 1144 (1971).
17. J. M. Kosterlitz and D. J. Thouless, *J. Phys. C* **6**, 1181 (1973).
18. B. I. Halperin and D. R. Nelson, *Phys. Rev. Lett.* **41**, 121 (1978).
19. A. P. Young, *Phys. Rev. B* **19**, 1855 (1979).
20. В. Е. Сивоконь, К. А. Наседкин, *ФНТ* **36**, 1267 (2010) [*Low Temp. Phys.* **36**, 1023 (2010)].
21. В. Е. Сивоконь, К. А. Наседкин, *ФНТ* **38**, 8 (2012) [*Low Temp. Phys.* **38**, 6 (2012)].
22. G. Mistura, T. Gunzler, S. Nesper, and P. Leiderer, *Phys. Rev. B* **56**, 8360 (1997).

23. D. Konstantinov, K. Kono, *J. Low Temp. Phys.* **150**, 236 (2008).
24. В. Е. Сивоконь, И. В. Шарапова, *ФНТ* **43**, 1303 (2017) [*Low Temp. Phys.* **43**, 1044 (2017)].
25. W. J. He, T. Cui, Y. M. Ma, Z. M. Liu, and G. T. Zou, *Phys. Rev. B* **68**, 195104 (2003).
26. L. Candido, J. P. Rino, and N. Studart, *Phys. Rev. B* **54**, 7046 (1996).
27. M. Mazars, *Europhys. Lett.* **110**, 26003 (2015).
28. S. Muto and H. Aoki, *Phys. Rev. B* **59**, 14911 (1999).
29. Wei-Kai Qi, Shao-Meng Qin, Xiao-Ying Zhao, and Yong Chen, *J. Phys.: Condens. Matter* **20**, 245102 (2008).
30. V. M. Bedanov and G. V. Gadiyak, *Phys. Rev. Lett.* **109A**, 289 (1985).
31. V. M. Bedanov and F. M. Peeters, *Phys. Rev. B* **49**, 2667 (1994).
32. V. A. Schweigert and F. M. Peeters, *Phys. Rev. B* **51**, 7700 (1995).
33. M. Kong, B. Partoens, and F. M. Peeters, *Phys. Rev. E* **67**, 021608 (2003).
34. S. W. S. Apolinario, B. Partoens, and F. M. Peeters, *Phys. Rev. E* **74**, 031107 (2006).
35. D. Bhattacharya and A. Ghosala, *Eur. Phys. J. B* **86**, 499 (2013).
36. W. P. Ferreira, F. M. Peeters, and G. A. Farias, *Phys. Rev. E* **72**, 041502 (2005).
37. D. M. Tomecka, B. Partoens, and F. M. Peeters, *Phys. Rev. E* **71**, 062401 (2005).
38. Ю. Е. Лозовик, Е. А. Ракоч, *ФТТ* **41**, 1499 (1999).
39. В. Е. Сивоконь, С. С. Соколов, *ФНТ* **41**, 1097 (2015) [*Low Temp. Phys.* **41**, 858 (2015)].
40. Б. А. Клумов, *УФН* **180**, 1095 (2010).
41. Б. А. Клумов, *Письма в ЖЭТФ* **98**, 296 (2013).
42. В. Е. Сивоконь, И. В. Шарапова, *ФНТ* **45**, 1498 (2019) [*Low Temp. Phys.* **45**, 1267 (2019)].

### Плавлення двовимірних електронних кластерів різної форми

В. Ю. Сивоконь

Методом молекулярної динаміки досліджено плавлення двовимірних кластерів, що можуть бути створені в електронних системах над поверхнею надплинного гелію з використанням утримуючих електродів трикутної, квадратної, шес-

тикутної та круглої форм. Досліджено кластери з фіксованою поверхневою густиною  $10^8 \text{ см}^{-2}$ , але різною кількістю частинок (від 3 до 406). Показано, що в бездефектних кластерах перехід до неупорядкованого стану відбувається різко і температуру плавлення  $T_{\text{melt}}$  легко визначити. Залежність  $T_{\text{melt}}$  від розміру кластера спостерігається для кластерів з числом частинок  $N < 400$ . У квадратних кластерах з  $N < 50$  упорядкування частинок накладається граничними умовами, а при  $N > 100$  спостерігається трикутна ґратка з дефектами поблизу границі. В круглих кластерах електрони починають легко пересуватись в кутовому напрямку вже при досить низьких температурах, але температура «радіального» плавлення узгоджується з температурою плавлення малих квадратних кластерів. За наявності дефектів перехід у неупорядкований стан починається з області дефекту і поступово поширюється на весь кластер. Чіткого визначення температури плавлення у цій картині немає.

Ключові слова: кластер, вігнерівський кристал, плавлення, молекулярна динаміка.

### Melting of different shape 2D electron clusters

V. E. Syvokon

Melting of two-dimensional clusters is studied by molecular dynamics method. The clusters can be created in the electron systems over superfluid helium with holding electrodes of triangular, square, hexagonal, and round shape. The surface electron density  $n_s = 10^8 \text{ cm}^{-2}$  is fixed. The clusters studied contain from 3 to 406 electrons. The transition to a non-ordered state for the defect-free clusters is shown to occur sharply and the melting temperature  $T_{\text{melt}}$  can be found easily. The  $T_{\text{melt}}$  dependence on cluster size is observed for the clusters containing less than 400 particles ( $N < 400$ ). The ordering in square clusters with  $N < 50$  is imposed by boundary conditions but at  $N > 100$  one can see the triangular lattice with defects near the edge of the cluster. In the round clusters electrons can move easily in the angular direction even at enough low temperatures, but the temperature of the “radial” melting agrees with the melting temperature of the small square clusters. The transition to a non-ordered state for clusters with defects starts near the defect and spread gradually over the whole cluster. In this case, there is no clear definition of the melting point.

Keywords: cluster, Wigner crystal, melting, molecular dynamics.