

Структура двумерных электронных кластеров различной формы при низких температурах

В. Е. Сивоконь

Физико-технический институт низких температур им. Б. И. Веркина НАН Украины

Харьков, 61103, Украина

E-mail: sivokon@ilt.kharkov.ua

Статья поступила в редакцию 13 марта 2020 г., опубликована онлайн 22 июля 2020 г.

Методом молекулярной динамики исследована структура двумерных кластеров, которые могут быть созданы в электронных системах над поверхностью сверхтекучего гелия при использовании прижимающих электродов треугольной, квадратной, шестиугольной и круглой форм. Исследованы кластеры с фиксированной поверхностной плотностью 10^8 см^{-2} , но различным числом частиц (от 3 до 406). Рассчитаны пространственные конфигурации частиц в кластерах, соответствующие температуре 10^{-2} К . Форма кластера существенно влияет на расположение электронов в нем. Если симметрия кластера согласуется с треугольной симметрией электронного кристалла, то при некоторых числах частиц возможны кластеры с идеальной бездефектной упаковкой. В остальных случаях кластеры содержат дефекты. Дополнительное внешнее поле, приложенное к кластеру, существенно меняет конфигурацию частиц в нем.

Ключевые слова: вигнеровский кристалл, пространственная структура, молекулярная динамика.

Введение

В 1934 году Ю. Вигнер предсказал кристаллизацию электронов на фоне равномерно распределенного положительного заряда [1]. В 1979 году вигнеровская кристаллизация была обнаружена в двумерной системе электронов над сверхтекучим гелием [2]. Двумерный электронный кристалл имеет треугольную решетку, соответствующую минимуму потенциальной энергии [3]. При исследовании кристаллов влиянием граничных условий на их свойства обычно пренебрегают, поскольку число частиц у границы мало по сравнению с общим числом частиц в системе. Особенность электронного кристалла, отличающая его от атомных или молекулярных кристаллов, заключается в отсутствии минимума в межчастичном взаимодействии и тем самым отсутствии предпочтительного масштаба расстояний между частицами в плотной среде. Поэтому в электронной системе расположение электронов, кроме собственно электрон-электронного взаимодействия, определяется конфигурацией и величиной внешних электрических полей. В таких системах возможны нерегулярные квазиупорядоченные структуры, структуры с переменной плотностью и т. п.

Большой интерес представляют электронные кластеры — системы, содержащие относительно небольшое число частиц. Исследование свойств таких систем

принципиально важно при разработке нанoeлектронных приборов, таких как одноэлектронный транзистор или кубит квантового компьютера, оперирующих малым числом электронов. Исследования кластеров затрагивают и фундаментальные физические проблемы, поскольку свойства мезоскопических систем принципиально зависят от условий на их границах и не могут быть сведены к свойствам макросистем.

Процессы упорядочения и разупорядочения в кластерах могут зависеть от числа частиц и приводить к структурным переходам и специфическим особенностям плавления. Например, в структурах, существующих в ловушках с круговой параболической ямой, четко прослеживается кольцевое упорядочение электронов, отвечающее симметрии внешнего поля [4]. В более сложном несимметричном поле [5] возникает неоднородное распределение электронов, позволяющее моделировать стеклообразное состояние или гексатическую фазу. Предложены модели, в которых электроны удерживаются локализованным положительным зарядом достаточно большой величины [6], но в силу теоремы Ирншоу [7] существуют проблемы с устойчивостью системы.

В экспериментах с двумерными электронными системами над жидким гелием электронный кристалл образуется в условиях, когда взаимное отталкивание электронов компенсируется полем, создаваемым прижимающим

электродом с равномерно распределенным положительным зарядом на нем. Величина положительного заряда, как правило, равна сумме зарядов всех электронов, так что в любой области слоя компенсация отталкивания одинакова и электронный слой имеет постоянную плотность. При достаточно низкой температуре наблюдается упорядочение электронов и образуется электронный кристалл, т. е. структура, обладающая дальним порядком. Однако в двумерной системе дальний порядок невозможен из-за роста среднеквадратичных смещений электронов с увеличением размеров системы [8], поэтому в двумерной системе порядок является, строго говоря, квазидальним. Единственный внешний фактор, влияющий на свойства такой электронной системы, — граничные условия. Изменяя форму и размеры прижимающего электрода, можно формировать различные электрические поля на границе слоя, а меняя количество электронов над электродом, создавать мезоскопические системы с различными свойствами. По мере уменьшения числа частиц в системе роль граничных условий возрастает, и для кластеров из малого числа частиц они могут играть определяющую роль. Роль граничных условий в упорядочении электронов хорошо видна при исследовании электронов в узких каналах, где при уменьшении ширины канала структура изменяется от характерной для массивного двумерного кристалла до единичного квазиодномерного шнура [9].

Цель настоящей работы — исследование упорядочения в двумерных электронных кластерах на поверхности жидкого гелия в зависимости от их размера и симметрии граничных условий. Такие системы могут быть созданы в эксперименте при использовании прижимающих электродов различных размеров и формы. Рассматриваются электронные системы над прижимающими электродами треугольной, квадратной, шестиугольной и круглой форм. При расчете поверхностная плотность электронов для всех кластеров фиксирована и составляет $n_s = 10^8 \text{ см}^{-2}$. Исследованы конфигурации частиц при температуре $T = 0,01 \text{ К}$, что значительно меньше температуры плавления массивного электронного кристалла плотностью $n_s = 10^8 \text{ см}^{-2}$ ($T = 0,22 \text{ К}$). Результаты работы легко распространить на системы с любой другой поверхностной плотностью электронов в области параметров, при которых система может рассматриваться как классическая, при соответствующем изменении размеров системы и температуры.

Модель и процедура расчета

Исследована система N электронов, движение которых ограничено двумя пространственными измерениями. Плоскость, в которой могут двигаться электроны, расположена на расстоянии d от положительно заряженного электрода (прижимающего электрода). Заряд на прижимающем электроде равномерно распределен и создает положительный фон, компенсирующий взаимное

отталкивание электронов и обеспечивающий положение электронной системы в ограниченной области двумерного пространства. Поверхностная плотность электронов, т. е. отношение количества частиц к площади прижимающего электрода $n_s = N / S_{\text{hold}} = 1 \cdot 10^8 \text{ см}^{-2}$ сохранилась постоянной, несмотря на то, что кластеры содержали разное число частиц. Фактически исследовался один и тот же объект — двумерная электронная система с фиксированной поверхностной плотностью, помещенная в различные условия, которые задавались формой и размерами прижимающего электрода.

В качестве начальной конфигурации выбиралось, как правило, случайное расположение частиц над электродом с выбранной геометрией. Скорости частиц случайно распределены в некотором интервале, зависящем от выбранной температуры. На скорости накладывалось

условие $\frac{m}{2} \sum_{i=1}^N \mathbf{v}_i^2 = NT$, которое проверялось и коррек-

тировалось в процессе расчета на каждом вычислительном шаге. Это соотношение между средней кинетической энергией частиц и температурой соответствует двумерной системе. Для кластеров, пространственная размерность которых, по-видимому, меньше 2, коэффициент пропорциональности между энергией и температурой несколько иной, но для удобства используется температура, определенная для двумерной системы. Более точным было бы использование средней кинетической энергии, но отличие заключается лишь в численном коэффициенте порядка единицы и мало влияет на полученные результаты. В процессе расчета все скорости для корректировки умножались на отношение выбранной температуры к температуре, которая определяется текущим набором скоростей.

Такая процедура моделирует реальный эксперимент, в котором электронная система находится в тепловом равновесии с внешней средой. Временной интервал, соответствующий одному вычислительному шагу, выбирался автоматически в начале расчета из условия, чтобы смещение электрона на каждом шаге не превышало 1 % среднего расстояния между частицами. Установлено, что уменьшение временного шага на порядок при соответственном увеличении числа шагов принципиально не изменяет результат. Для расчета конфигурации, как правило, использовано 10^5 шагов. Для некоторых конфигураций число шагов увеличивалось вплоть до $5 \cdot 10^6$, однако увеличение числа шагов не приводит к принципиальным изменениям результатов вычислений. Для расчета эволюции системы с течением времени или при изменении внешних условий, а также определения устойчивых конфигураций при тех или иных параметрах задачи пошагово решалась линеаризованная система уравнений движения:

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

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

где $\mathbf{f}_i(t)$ — сила, действующая на электрон в момент времени t ; $i = 1 \dots N$,

Эта сила состоит из двух частей: силы, действующей на выбранный электрон со стороны всех электронов вследствие кулоновского взаимодействия, и силы, обусловленной зарядом на прижимающем электроде $\mathbf{F}_i^{(\perp)}$:

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

где e — заряд электрона.

Сила $\mathbf{F}_i^{(\perp)}$ для прижимающих электродов различной геометрии вычислялась по-разному. При использовании круглого электрода вследствие симметрии имеется только радиальная зависимость

$$|F(r)| = \sigma e \int_0^R \int_0^{2\pi} dx d\phi \frac{r - x \cos \phi}{(x^2 + r^2 - 2rx \cos \phi + d^2)^{3/2}}.$$

Здесь σ — поверхностная плотность положительного заряда на прижимающем электроде, R — радиус электрода. Сила $\mathbf{F}_i^{(\perp)}$ вычислялась для каждого электрода в зависимости от его радиуса и аппроксимировалась полиномом 6-й степени (в нескольких случаях — 5-й) при дополнительном условии $\mathbf{F}_i^{(\perp)}(r = 0) = 0$. Полученная аппроксимация использовалась при пошаговом решении уравнений движения. При исследовании электронных систем над квадратными электродами использовалось полученное ранее аналитическое решение для силы [10].

Расчет $\mathbf{F}_i^{(\perp)}$ для треугольного и шестиугольного электродов основан на аналитическом решении для прямоугольного треугольника (рис. 1).

Выражения для компонент силы $\mathbf{F}_i^{(\perp)}$, действующей на электрон, находящийся над электродом (рис. 1) в форме прямоугольного треугольника в точке с координатами x и y , имеют вид

$$f_x(x, y) = \sigma e \int_{M_n}^{M_v} d\beta \int_{\tilde{L}_n(\beta)}^{L_v} d\alpha \frac{\alpha - x}{[(\alpha - x)^2 + (\beta - y)^2 + d^2]^{3/2}},$$

$$f_y(x, y) = \sigma e \int_{L_n}^{L_v} d\alpha \int_{\tilde{M}_n(\alpha)}^{M_v} d\beta \frac{\beta - y}{[(\alpha - x)^2 + (\beta - y)^2 + d^2]^{3/2}},$$

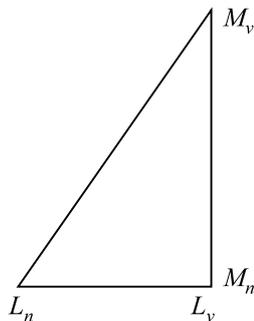


Рис. 1. Положительно заряженный треугольный электрод, используемый при расчете сил, действующих на электроны.

где

$$\tilde{L}_n(\beta) = L_n + \frac{L_v - L_n}{M_v - M_n}(\beta - M_n),$$

$$\tilde{M}_n(\alpha) = M_n + \frac{M_v - M_n}{L_v - L_n}(\alpha - L_n).$$

Вычисление интегралов приводит к выражениям

$$f_x(x, y) = \sigma e \left\{ \ln \left| \frac{(M_n - y) + \sqrt{(L_v - x)^2 + (M_n - y)^2 + d^2}}{(M_v - y) + \sqrt{(L_v - x)^2 + (M_v - y)^2 + d^2}} \right| + \frac{1}{\sqrt{Z}} \ln \left| \frac{(M_v + A) + \sqrt{D - A^2 + (M_v + A)^2}}{(M_n + A) + \sqrt{D - A^2 + (M_n + A)^2}} \right| \right\};$$

$$f_y(x, y) = \sigma e \left\{ \ln \left| \frac{(L_n - x) + \sqrt{(M_v - y)^2 + (L_n - x)^2 + d^2}}{(L_v - x) + \sqrt{(M_v - y)^2 + (L_v - x)^2 + d^2}} \right| + \frac{1}{\sqrt{Q}} \ln \left| \frac{(L_v + C) + \sqrt{D - C^2 + (L_v + C)^2}}{(L_n + C) + \sqrt{D - C^2 + (L_n + C)^2}} \right| \right\},$$

где

$$Z = \gamma^2 + 1; \quad \gamma = \frac{L_v - L_n}{M_v - M_n}; \quad \delta = \frac{1}{\gamma}; \quad Q = \delta^2 + 1;$$

$$A = \frac{\gamma k - y}{Z}; \quad k = L_n - M_n \gamma - x; \quad B = \frac{y^2 + d^2 + k^2}{Z};$$

$$C = \frac{\delta p - x}{Q}; \quad p = M_n - L_n \delta - y; \quad D = \frac{x^2 + d^2 + p^2}{Q}.$$

Сила $\mathbf{F}_i^{(\perp)}$ рассчитана и для прямоугольных треугольников с ориентацией, отличающейся на 90, 180 и 270° от приведенной на рис. 1. Используя полученные выражения, можно рассчитать силу, действующую на электрон со стороны любого электрода, который может быть представлен как набор прямоугольных треугольников. Расчеты силы $\mathbf{F}_i^{(\perp)}$ использованы в случае электродов в виде равностороннего треугольника и шестиугольника.

Выражения для силы $\mathbf{F}_i^{(\perp)}$ позволяют рассчитать энергию, которая характеризует притяжение электрона со стороны прижимающего электрода:

$$U_x^i(x) = \int dx F_x^{(\perp)}(x, y = y_i); \quad U_y^i(y) = \int dy F_y^{(\perp)}(x = x_i, y);$$

$$i = 1, 2, 3.$$

Энергия рассчитана для электрода в форме равностороннего треугольника (рис. 2). Зависимости энергии от x -координаты получены при фиксированных значениях y (показаны стрелками на рисунке) и аналогично зависимости энергии от y при нескольких фиксированных значениях x .

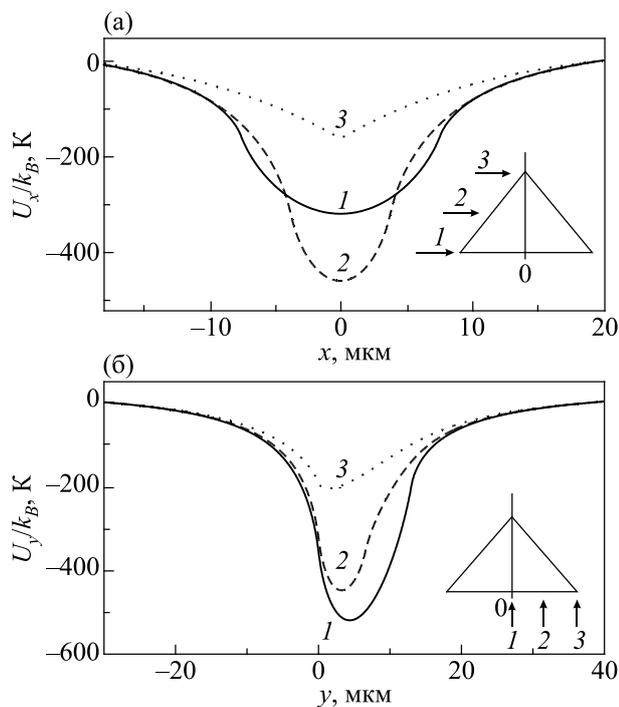


Рис. 2. Поле, создаваемое электродом в форме равностороннего треугольника (см. вставки). Стрелками показаны фиксированные значения y , при которых рассчитана зависимость $U(x)$ (а) и соответственно значения x , при которых получена $U(y)$ (б).

В результате решения уравнений движения в течение некоторого времени, определяемого длиной временного шага и числом шагов, электронная система достигает стационарного состояния. При достаточно низкой температуре это состояние характеризуется упорядоченным набором точек в пространстве, вблизи которых электроны совершают колебательные движения с амплитудами, зависящими от температуры. При температурах, для которых упорядоченное состояние частиц невозможно, устойчивое состояние можно характеризовать средними значениями координат, которые остаются неизменными (с некоторым шумом) при увеличении времени расчета и изменении величины временного шага. Устойчивые состояния электронной системы достигаются при произвольном первоначальном расположении частиц.

Кластеры с числом частиц от 3 до 22

Важную роль в образовании и поведении электронных кристаллов играют граничные условия. Электроны вблизи и вдали от границы находятся в разных условиях и могут вести себя по-разному при повышении температуры. Если симметрия кристалла не согласуется с симметрией граничных условий, то увеличивается вероятность образования дефектов упаковки. Исследование низкотемпературных конфигураций проводилось при температуре $T = 10^{-2}$ К, что примерно на порядок ниже температуры плавления массивного электронного

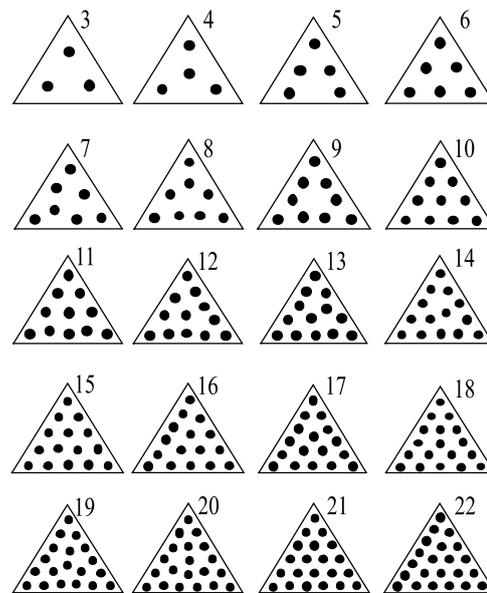


Рис. 3. Конфигурации электронных кластеров с числом частиц от 3 до 22 над треугольными электродами.

кристалла ($T = 0,22$ К) плотностью $n_s = 10^8$ см $^{-2}$. На рис. 3–5 показаны устойчивые низкотемпературные конфигурации в системах, содержащих от 3 до 22 электронов над электродами различной формы.

Симметрия треугольного электрода наиболее согласуется с треугольной решеткой двумерного электронного кристалла. Но идеальное упорядочение электронов над треугольным электродом возможно только в том случае, если число электронов — треугольное число $N_i^{(3)} = i(i+1)/2$, $i = 2, 3, 4, \dots$ (термины «треугольное», «квадратное» или вообще « k -угольное» число имеют тот же смысл, что и в теории чисел [11]). В остальных случаях конфигурации не столь симметричны (рис. 3), за исключением $N = 4$.

В кластере над квадратным электродом (рис. 4) при малом числе частиц симметрия самого электрода является преобладающим фактором в упорядочении электронов. Это хорошо заметно, если число электронов квадратное. В кластерах, состоящих из 4, 9 и 16 частиц, наблюдается квадратная решетка, хотя в кластере из 16 частиц уже видно смещение одних линий относительно других. Причина этого — стремление взаимодействующих электронов образовать треугольную решетку, что приводит к смещению положений частиц относительно идеальной квадратной решетки. При дальнейшем увеличении числа частиц роль межэлектронных взаимодействий возрастает, и в центре кластера формируется упорядоченная область с треугольной решеткой, а вблизи границы кластера — область, содержащая дефекты упаковки. Это хорошо заметно при упорядочении кластеров с большим, чем представлено на рис. 4, числом частиц: $N = 36$ и 49.

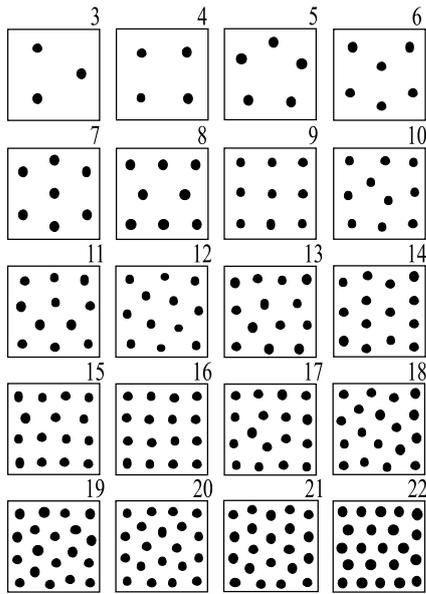


Рис. 4. Конфигурации электронных кластеров с числом частиц от 3 до 22 над квадратными электродами.

Симметрия шестиугольного электрода также согласуется с треугольной решеткой кристалла, что для количества частиц $N_i^{(6)} = 3i(i+1) + 1, i = 1, 2, 3 \dots$ приводит к идеальной упаковке (рис. 5).

Пространственные структуры в кластерах над круглыми электродами в ряде случаев совпадают со структурами, рассчитанными для электронов в параболических ловушках [4], поле в которых, как и поле круглого электрода, обладает радиальной симметрией. Но есть и некоторые различия. Следуя [4], опишем структуру, перечисляя число электронов на оболочках, на каждой из которых положение электронов характеризуется

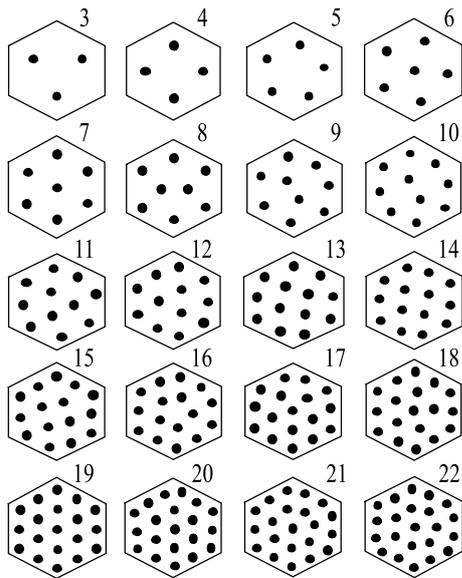


Рис. 5. Конфигурации электронных кластеров с числом частиц от 3 до 22 над шестиугольными электродами.

примерно одним и тем же радиусом. Так, например, структуру с $N = 9$ (рис. 6) можно описать как (2,7), а структуру с $N = 18$ как (1,6,11). Для кластеров с числом частиц от 3 до 22 отличия наблюдаются при $N = 11, 13, 15, 16, 17, 22$. Так, при $N = 11$ в параболической ловушке наблюдается конфигурация (3,8), а над круглым электродом — (2,9), при $N = 16$ в ловушке конфигурация (1,5,10), а над электродом — (5,11), при $N = 22$ в ловушке конфигурация (2,8,12), а над электродом — (1,8,13). Общая тенденция заключается в том, что для некоторых размеров кластеров число частиц на периферии кластера, расположенного над электродом, становится больше, чем число частиц на периферии кластера в ловушке. Тенденция прослеживается и для кластеров, содержащих большее число частиц. Так, конфигурация над электродом при $N = 37$ (1,6,12,18) отличается от конфигурации (1,7,12,17) в ловушке, а для $N = 50$ имеем соответственно (4,9,15,22) и (4,10,16,20). Причина отличий заключается, по-видимому, в том, что потенциал, создаваемый круглым электродом, не является параболическим, а имеет более сложную форму. Вероятно, для некоторых чисел электронов возможны состояния с несколько различной структурой, но с близкими потенциальными энергиями. Небольшого отличия в потенциальных рельефах над круглым электродом и в ловушке оказывается достаточно, чтобы электронные системы вели себя по-разному. Упорядочение заряженных частиц в кластерах наблюдалось в экспериментах с пылевой плазмой [12]. В большинстве случаев структуры совпадают со структурами, рассчитанными в [4], но есть и отличия, что подтверждает возможность существования различных конфигураций частиц с близкими энергиями при некоторых размерах кластеров.

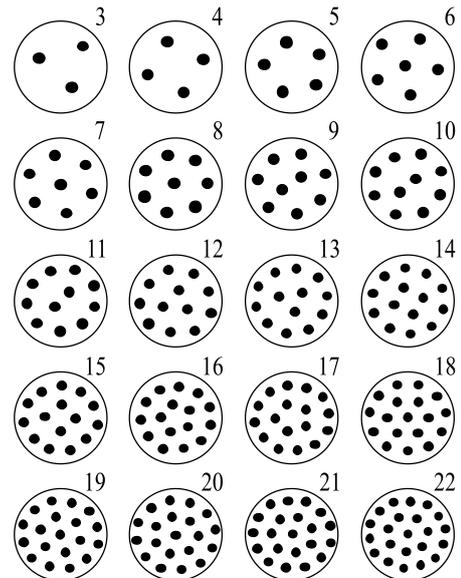


Рис. 6. Конфигурации электронных кластеров с числом частиц от 3 до 22 над круглыми электродами.

При увеличении числа электронов в центре круглого кластера в конечном итоге образуется область с треугольной решеткой, а вблизи границы — область с дефектами упаковки.

Форма кластера и дефекты структуры

Влияние симметрии на возможность образования бездефектных кристаллов хорошо видно при исследовании кластеров с большим числом частиц. На рис. 7а показана структура бездефектного треугольного кластера при $N^{(3)} = 210$. Близкое по значению число электронов $N^{(4)} = 225$ для квадратного электрода упорядочивается в треугольную структуру везде, кроме области вблизи границы (рис. 7б), где отчетливо видны дефекты упаковки. Бездефектный кристалл образуется и над шестиугольным электродом при $N^{(6)} = 217$ (рис. 7в), но кристалл из такого же количества частиц над круглым электродом содержит отчетливо наблюдаемые дефекты упаковки вблизи границы слоя (рис. 7г).

Возможность создания бездефектных кристаллических кластеров позволяет поставить вопрос об отличии плавления дефектных и бездефектных кристаллов, т. е. непосредственно проанализировать роль дефектов в процессе плавления. Кроме того, можно легко создать кластер с дефектом (дефектами), если число электронов в кластере отлично от числа, необходимого для образования идеальной бездефектной упаковки. На рис. 8 показано, как изменяется упорядочение над треугольным электродом при изменении числа частиц вблизи соответствующей бездефектной упаковке треугольного числа.

Если число частиц является треугольным ($N^{(3)} = 120$), над электродом образуется бездефектный кластер (рис. 8б). При $N^{(3)} = 121$ «лишний» электрон распо-

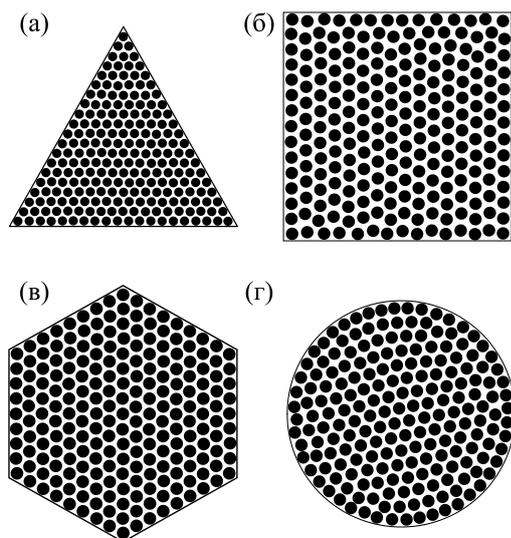


Рис. 7. Конфигурации электронных кластеров над электродами: треугольным с $N^{(3)} = 210$ (а); квадратным с $N^{(4)} = 225$ (б); шестиугольным с $N^{(6)} = 217$ (в) и круглым с $N^{(\infty)} = 217$ (г).

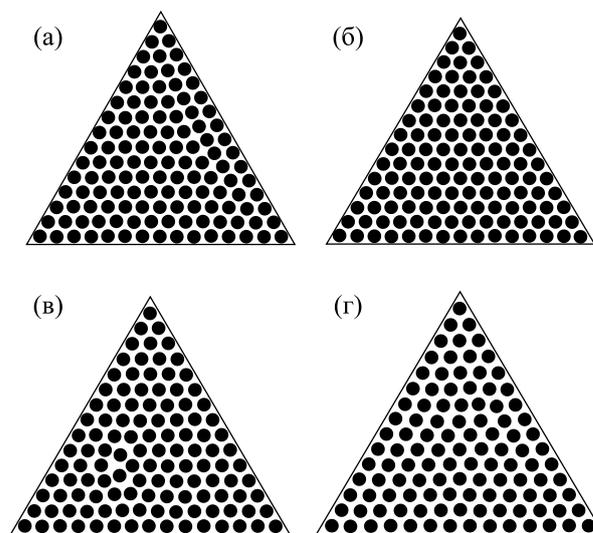


Рис. 8. Конфигурации электронных кластеров над треугольными электродами: $N^{(3)} = 119$ (а); $N^{(3)} = 120$ (б); $N^{(3)} = 121$ (в) и $N^{(3)} = 112$ (г).

гается на одной из сторон треугольника и отчетливо видно нарушение идеального порядка вдоль всей этой стороны. При $N^{(3)} = 119$ отчетливо проявляется дефект внутри кристалла. На рис. 8г показан кластер, содержащий число электронов ($N^{(3)} = 112$), лежащее в промежутке между двумя соседними треугольными числами (91 и 120). Упаковка неидеальная, имеются дефекты. Следует напомнить, что в расчетах отношение числа частиц к площади электрода поддерживается постоянным и равным $n_s = N / S_{el} = 1 \cdot 10^8 \text{ см}^{-2}$.

Аналогичная картина наблюдается над шестиугольным электродом (рис. 9). Бездефектный кластер образуется при $N^{(6)} = 127$ (б). Количество электронов $N^{(6)} = 128$ приводит к «лишнему» электрону на одной

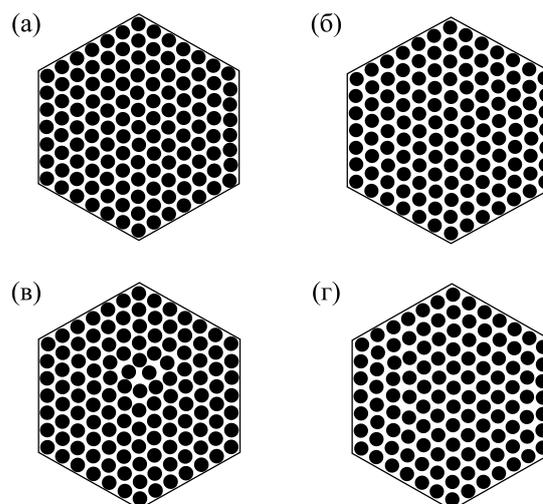


Рис. 9. Конфигурации электронных кластеров над шестиугольными электродами: $N^{(6)} = 126$ (а); $N^{(6)} = 127$ (б); $N^{(6)} = 128$ (в) и $N^{(6)} = 118$ (г).

из сторон шестиугольника (а), а «недостаток» одного электрона $N^{(6)} = 126$ — к хорошо заметному дефекту (с). При некотором количестве электронов $N^{(6)} = 118$, лежащем в интервале между значениями $N^{(6)} = 127$ и $N^{(6)} = 91$, которые являются соседними шестиугольными числами и соответствуют бездефектным кластерам, образуется структура с явными дефектами упаковки (г).

При расчете конфигураций в кластерах, содержащих большое количество частиц (~ 100 и больше), обычно используется процедура, моделирующая отжиг кристалла. В качестве первоначальной (стартовой) конфигурации выбирается случайное расположение N электронов над электродом выбранной формы. Скорости частиц имеют случайные (в некотором интервале) значения \mathbf{v}_i , подчиняющиеся условию

$$\frac{m}{2} \sum_{i=1}^N \mathbf{v}_i^2 = NT,$$

где $T = 10^{-2}$ К. При пошаговом решении уравнений движения на каждом шаге температура (скорости частиц) плавно увеличивалась, чтобы к концу расчета конфигурации достичь значения 0,5 К. В следующей серии расчетов температура плавно уменьшалась и к концу расчета возвращалась к значению $T = 10^{-2}$ К. В третьей серии решение уравнений проводилось при фиксированной температуре $T = 10^{-2}$ К.

Интересен вопрос о максимальном размере бездефектных кластеров над треугольным и шестиугольным электродами. В расчетах с большим количеством частиц удавалось получить бездефектные кластеры над треугольным электродом с $N^{(3)} = 406$ и шестиугольным электродом с $N^{(6)} = 397$, однако описанная расчетная процедура при разных случайных стартовых конфигурациях не всегда приводила к бездефектной структуре. В ряде случаев кластеры содержали дефекты. Не исключая возможности того, что подобная невоспроизводимость обусловлена самим расчетом, можно, тем не менее, полагать, что размер бездефектного кластера $N \sim 400$ частиц близок к максимальному из возможных.

Влияние внешнего поля на структуру кластера

При воздействии на электроны в кластере внешним полем, превышающим поле, необходимое для компенсации отталкивания электронов, конфигурация электронов меняется. На рис. 10 показан кластер с числом частиц $N = 55$ в условиях, когда поле создается зарядом на прижимающем электроде Q_i , который в V раз превышает компенсирующий заряд $V = Q_i / Ne$.

По мере увеличения внешнее поле начинает играть все более значительную роль в упорядочении электронов, и структура кластера начинает отклоняться от структуры двумерного вигнеровского кристалла, приближаясь к структурам, подобным структурам заряженных частиц в ловушках.

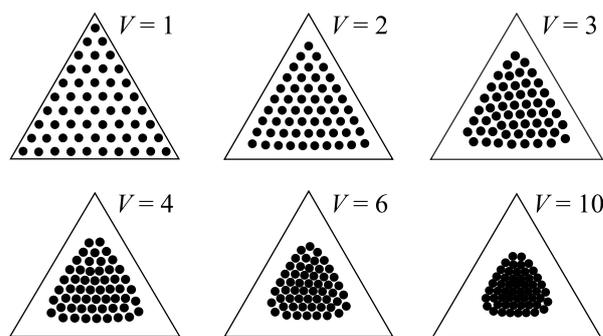


Рис. 10. Конфигурации электронных кластеров из $N = 55$ электронов во внешнем поле, созданном зарядом Q_i на прижимающем треугольном электроде при разных значениях $V = Q_i / Ne$.

Выводы

Форма электронного кластера существенно влияет на конфигурацию частиц в нем при низких температурах. Это влияние возрастает по мере уменьшения кластера. Если симметрия кластера согласуется с треугольной симметрией электронного кристалла, то при некоторых числах частиц возможны кластеры с идеальной бездефектной упаковкой. В остальных случаях кластеры содержат дефекты. Вероятно, предельный размер бездефектного кластера составляет около 400 частиц. Дополнительное внешнее поле, приложенное к кластеру, существенно меняет в нем конфигурацию частиц.

1. E. P. Wigner, *Phys. Rev.* **46**, 1002 (1934).
2. C. C. Grimes and G. Adams, *Phys. Rev. Lett.* **42**, 795 (1979).
3. L. Bonsall and A. A. Maradudin, *Phys. Rev. B* **15**, 1959 (1977).
4. V. M. Bedanov and F. M. Peeters, *Phys. Rev. B* **49**, 2667 (1994).
5. S. W. S. Apolinario, B. Partoens, and F. M. Peeters, *Phys. Rev. E* **72**, 046122 (2005); *ibid.* **74**, 031107 (2006).
6. W. P. Ferreira, F. M. Peeters, and G. A. Farias, *Phys. Rev. E* **72**, 041502 (2005), W. P. Ferreira, B. Partoens, F. M. Peeters, and G. A. Farias, *ibid.* **71**, 021501 (2005).
7. S. Earnshaw, *Trans. Cambridge Philos. Soc.* **7**, 97 (1842).
8. N. D. Mermin, *Phys. Rev.* **176**, 250 (1968).
9. В. Е. Сивоконь, И. В. Шарапова, *ФНТ* **45**, 1498 (2019) [*Low Temp. Phys.* **45**, 1267 (2019)].
10. В. Е. Сивоконь, С. С. Соколов, *ФНТ* **41**, 1097 (2015) [*Low Temp. Phys.* **41**, 858 (2015)].
11. Е. Деза, М. Деза, *Фигурные числа*, изд-во МЦНМО, Москва (2016).
12. Wen-Tau Juan, Zen-Hong Huang, Ju-Wang Hsu, Yin-Ju Lai, and Lin I, *Phys. Rev. E* **58**, R6947 (1998).

Структура двовимірних електронних кластерів
різної форми при низьких температурах

В. Ю. Сивоконь

Методом молекулярної динаміки досліджено структуру двовимірних кластерів, які можуть бути створені в електронних системах над поверхнею надплинної гелію при використанні притискуючих електродів трикутної, квадратної, шестигуної та круглої форм. Досліджено кластери з фіксованою поверхневою густиною 10^8 см^{-2} , але різною кількістю частинок (від 3 до 406). Розраховано просторові конфігурації частинок в кластерах, що відповідають температурі 10^{-2} K . Форма кластеру суттєво впливає на розташування у ньому електронів. Якщо симетрія кластера узгоджується з трикутною симетрією електронного кристала, то при деяких числах частинок можливі кластери з ідеальним бездефектним пакуванням. В решті випадків кластери містять дефекти. Додаткове зовнішнє поле, що прикладено до кластера, суттєво змінює конфігурацію частинок у ньому.

Ключові слова: вігнерівський кристал, просторова структура, молекулярна динаміка.

Structure of different shape 2D electron clusters
at low temperatures

V. E. Syvokon

Structure of two-dimensional clusters is studied by the molecular dynamics method. The clusters can be created in the electron systems over superfluid helium with holding electrodes of triangular, square, hexagonal, and round shapes. The surface electron density of 10^8 cm^{-2} is fixed. The clusters studied contain from 3 to 406 electrons. Spatial configurations corresponding to temperature 10^{-2} K are calculated. The cluster shape influences essentially on the spatial ordering of the electrons. If cluster symmetry is consistent with the electron crystal triangular symmetry, the ideal defect-free clusters are possible with certain numbers of electrons. In other cases the clusters contain defects. The additional external electric field applied to the cluster changes essentially the electron configuration.

Keywords: Wigner crystal, spatial structure, molecular dynamics.