

## **Ю. Е. Лозовик. Ионные и электронные кластеры.**

Рассматриваются кластеры из электронов либо ионов, локализованные во внешних полях. Их физические реализации: 1) ионы, электроны либо другие частицы в радиочастотной либо пенниговской ловушках; 2) электроны в потенциальных ямах в полупроводниках, созданных примесями либо контактными явлениями на границе; включения одного полупроводника в другой; 3) электроны, локализованные над диэлектрической частицей или каплей силами изображения. При понижении температуры в этих системах осуществляется иерархия изменений структуры, связанная, как оказалось, с последовательным замерзанием степеней свободы и проявляющаяся в изменении характера спектров, типа движений частиц и т. п.<sup>1</sup>. Анализ свойств рассматриваемых систем производился: 1) в низкотемпературном случае — с помощью варианта теории самосогласованного колебательного приближения, последовательно учитывающего все эффекты одного и того же порядка по смещениям частиц из узла решетки<sup>2, 3</sup>; 2) с помощью моделирования методами молекулярной динамики и Монте-Карло; 3) в квантовом случае — с помощью вариационного расчета.

В случае осцилляторного внешнего потенциала (гармонической ловушки) такие системы аналогичны атому Томсона. Кулоновские заряды образуют в основном состоянии системы оболочечные структуры с квазикристаллическим угловым порядком внутри оболочки. Заполнение последующих оболочек начинается при определенных числах частиц  $N$  (см. таблицу). Построен

Таблица заполнения оболочек двумерных кулоновеких кластеров

$N$	1–5	6–8	9–10	11–13	14–15	16
$N_1, N_2, N_3$	$N = N$	$1, N-1$	$2, N-2$	$3, N-3$	$5, N-5$	$1, 5, 10$
$N$	17–18	19–21	...	56–58	...	
$N_1, N_2, N_3$	1, 6, $N-7$	1, 7, $N-8$	...	1, 6, 12, 18, $N-37$	...	

аналог периодической системы «элементов», найдены энергии кластеров, их симметрия и структура (для трехмерного и двумерного случаев). Определены не только глобальный, но и локальные минимумы системы, существенным образом отличающиеся структурой (их энергии отличаются лишь в четвертом знаке). С ростом  $N$  размеры кластеров медленно растут.

С ростом температуры  $T$  потенциальная энергия кластера растет по почти линейному закону как в глобальном, так и в локальном минимумах (частичное равновесие). С ростом  $T$  возникает иерархия изменений структуры кластеров. В трехмерных кластерах при  $T_1 \sim 10^{-3}$ – $10^{-4}$  (в безразмерных единицах) происходит плавление кристаллической структуры внутри одной оболочки, затем — при  $T_2 \sim 10^{-1}$  — происходит радиальное расплывание оболочек. В двумерных кластерах при  $T'_1 \sim 10^{-3}$ – $10^{-4}$  начинается относительное вращение оболочек друг относительно друга, затем — при  $T'_2 \sim 10^{-2}$  — происходят перескоки частиц между оболочками, а при  $T'_3 \sim 10^{-1}$  — радиальное расплывание оболочек. Эти изменения структуры проявляются как в характере зависимости от времени  $t$  среднеквадратичных смещений  $\langle u^2 \rangle$  из положения равновесия (например, функция  $\langle u^2 \rangle = f(t)$  совершает колебания и редкие скачки при  $T > T'_2$ ), так и в виде спектра колебаний. До первого структурного изменения ( $T < T_1$ ) спектр автокорреляционной функции скоростей дискретный, после — непрерывный. С ростом числа частиц заполнение оболочек в центре кластера приближается к координационным числам соответствующего вигнеровского кристалла, а в системе с ростом  $T$  происходит обычное плавление (в двумерии — двухстадийное<sup>4</sup>).

Качественно близкие глобальные и локальные структуры и их изменение с температурой возникают для зарядов на сфере, в круге либо в цилиндре (пучке охлажденных частиц в ускорителе и т. п.). В первом случае, если характерные энергии взаимодействия зарядов имеют порядок энергии связи на сфере, система становится неустойчивой. При очень низких  $T$ , когда становятся существенными квантовые свойства, основное состояние кластеров рассчитывается вариационно — с помощью пробной функции  $\Psi = \exp(-V/2T^*)$ , где  $V$  — полная потенциальная энергия,  $T^*$  — пробный параметр. Усреднение по такому  $\Psi$  эквивалентно термодинамическому усреднению для классической системы с температурой  $T^*$ . После масштабных преобразований координат и энергии поведение системы в гармонической ловушке зависит лишь от одного квантового параметра  $\lambda = \frac{\hbar^2}{2m} e^{-8/3} \alpha^{1/3}$  ( $e$  — заряд,  $\alpha$  — параметр ловушки). В результате минимизации находим зависимость

$T^* = f(\lambda)$ , так что иерархии переходов в классической системе с изменением  $T^*$  соответствует иерархия переходов по квантовому параметру  $\lambda$  (например, с изменением  $\alpha$ , что эквивалентно изменению плотности).

Предсказываемые явления можно обнаружить для лазерно-охлаждаемых зарядов<sup>5</sup>, для электронов над каплей гелия или криокристаллитом<sup>6</sup>, электронов в полупроводниковом кластере. Близкие эффекты должны иметь место и для кластеров иной природы, например из диполей, вихрей и т. п., а также для частиц, образующих ближний порядок в аморфных веществах. Перспективно, в частности, в связи с последней системой, исследование переориентации оболочек и других изменений, которые могут имитировать предплавление, давать вклад в низкотемпературные свойства и т. п.

Иерархия переходов в двумерных электронных кластерах в магнитном поле могла бы проявиться (см.<sup>7</sup>) в дробном квантовом эффекте Холла.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Лозовик Ю. Е. Препринт ИСАН АН СССР.— Троицк, Московская обл., 1987.— Доклад на школе по лазерному охлаждению. Хельсинки, 1986.
- Lozovik Yu. E., Fagzdinov V. M.//Sol. State Commun. 1985. V. 54. P. 725.
- Lozovik Yu. E., Fagzdinov V. M., Abdullaev B., Kuchegorov S. A. //Phys. Lett. Ser. A. 1985. V. 112. P. 61.
- Беданов В. М., Гадиляк Г. В., Лозовик Ю. Е.//ЖЭТФ. 1985. Т. 88. С. 1622.
- Миногин В. Г., Летохов В. С.//Давление лазерного излучения на атомы. М.: Наука, 1986.— С. 222.
- Хайкин М. С.//Письма ЖЭТФ. 1978. Т. 27. С. 706.
- Lozovik Yu. E.//Two-Dimensional Electron Systems/Eds Yu. E. Lozovik, A. A. Madadulin.— Amsterdam: North-Holland.