

ДВУМЕРНЫЕ МИКРОКЛАСТЕРЫ ВИХРЕЙ: ОБОЛОЧЕЧНАЯ СТРУКТУРА И ПЛАВЛЕНИЕ

Ю.Е.Лозовик¹⁾, Е.А.Ракоч

Институт спектроскопии РАН

142092 Троицк, Московская обл., Россия

Поступила в редакцию 20 декабря 1996 г.

После переработки 30 декабря 1996 г.

Исследовано плавление двумерных микрокластеров из "частиц", отталкивающих-
ся по логарифмическому закону и удерживаемых внешним квадратичным потенциа-
лом. Модель описывает абрикосовские вихри в сверхпроводящем островке, вихри во
вращающейся сверхтекучей жидкости, электроны в полупроводниковойnanoструк-
туре, окруженной средой с малой диэлектрической проницаемостью. Исследована
структуря кластеров, ее зависимость от температуры и плавление. *Плавление*
микрокластеров вихрей происходит в две стадии: 1. Переход из замороженной
фазы в состояние, соответствующее *вращательной переориентации кристаллических оболочек* друг относительно друга. 2. При более высокой температуре
исчезает радиальный порядок. Это связано с тем, что барьер относительно вра-
щения оболочек существенно ниже барьера относительно радиального разрушения
оболочек.

PACS: 74.60.Ge, 73.61.Tm

Введение. Магнитное поле $H > H_{c_1}$ проникает в сверхпроводники второго
рода в виде вихрей Абрикосова, которые в низкотемпературной области обра-
зуют (в отсутствие центров пиннинга) идеальную треугольную решетку [1]. При
повышении температуры возможно плавление этой решетки и образова-
ние жидкой фазы из вихрей, что и наблюдалось для высокотемпературных
сверхпроводников (см. обзор [2]).

Представляет большой интерес вопрос о структуре мезоскопической си-
стемы из *небольшого* числа абрикосовских вихрей, заключенных в островок
сверхпроводящей фазы. Система эквивалентна задаче о *двуумерном аналоге*
(ср. [3]) классического атома Томсона [4] с "зарядами", подчиняющимися
законам двумерной электростатики, и компенсирующим несжимаемым фоном.
Эта модель описывает также вихри во вращающейся сверхтекучей жидкости, а
также электроны в полупроводниковой квантовой точке, погруженной в среду
со значительно меньшей диэлектрической проницаемостью (см. ниже). Малая
система вихрей должна вести себя как *микрокластер*. Это означает, что
оболочечная структура кластера может резко меняться при добавлении лишь
одной "частицы" (структурная чувствительность) вплоть до некоторого числа
"частиц" N , когда внутри этого кластера появляется область со структурой
"объемной" фазы – область с треугольной решеткой, и плавление микрокла-
стера может обладать интересными специфическими чертами по сравнению с
плавлением объемной фазы [3, 5].

В настоящей работе мы рассмотрели зависимость структуры микрокластеров
вихрей от температуры. Показано, что *плавление двумерного микрокласти-
ера вихрей* происходит в две стадии: сначала происходит межоболочечное
("ориентационное") плавление, а при существенно более высокой температуре

¹⁾e-mail: lozovik@isan.msk.su

расплюются оболочки. Показано, что это связано с тем, что энергетический барьер относительно переориентации оболочек существенно превосходит барьер относительно радиальных перескоков частиц.

Физическая модель. Рассмотрим островок сверхпроводника второго рода в поперечном магнитном поле. Если толщина островка d в рассматриваемой области температуры меньше длины когерентности сверхпроводника $\xi(T)$, то с точки зрения сверхпроводящих свойств островок может рассматриваться как двумерный. Магнитное поле проникает в систему в виде двумерных (2D) вихрей. Потенциал взаимодействия между 2D вихрями имеет вид (см. [6]):

$$U(r) = -q^2 \ln \frac{r}{a}, \quad a \ll r \ll \lambda_{\perp}; \quad U(r) = q^2 \frac{\lambda_{\perp}}{r} + \text{const}, \quad r \gg \lambda_{\perp},$$

где q – "заряд", пропорциональный плотности сверхтекучей компоненты, r – расстояние между вихрями, a – радиус кора вихря, $a \sim \xi(T)$, $\lambda_{\perp} = \lambda^2/d$ – глубина проникновения перпендикулярного магнитного поля в 2D сверхпроводник, λ – лондоновская глубина проникновения магнитного поля в трехмерный сверхпроводник. Например, для пленок толщиной $d \simeq 100 \text{ \AA}$ и $\lambda \simeq 2000 \text{ \AA}$ имеем $\lambda_{\perp} \simeq 4 \text{ мкм}$.

Пусть $\xi \ll R \ll \lambda_{\perp}$. Тогда вихри в островке можно считать точечными "частицами", отталкивающимися по логарифмическому закону. Стабилизация концентрации вихрей в сверхпроводниках во внешнем магнитном поле учитывается в этой модели введением эффективного потенциала конфайнмента $U_{eff} = \alpha r^2$, которому соответствует однородный компенсирующий фон. Силы изображения для вихрей не изменяют качественно свойства системы (их учет будет обсуждаться в более подробной публикации).

Таким образом мы приходим к модели 2D кластера из N классических частиц ($N = 1 - 50$) с законом отталкивания $U(r_{ij}) = -q^2 \ln(r_{ij}/a)$, удерживаемых внешним потенциалом $U_{ext}(r_i) = \alpha r_i^2$.

После масштабных преобразований

$$r \rightarrow (\alpha^{1/2}/q)r, \quad T \rightarrow (k_B/q^2)T, \quad U \rightarrow (1/q^2)U$$

потенциальная энергия системы с точностью до постоянной $C_N^2 \ln[q/(\alpha^{1/2}a)]$ принимает вид

$$U = - \sum_{i>j} \ln r_{ij} + \sum_i r_i^2. \quad (1)$$

Изучаемые свойства кластеров качественно не меняются и при небольшой анизотропии $U_{eff}(r)$.

Система классических частиц с указанной потенциальной энергией (2) эквивалентна 2D аналогу (ср. с [3]) классического атома Томсона [4]. Эта модель описывает не только вихри в сверхпроводящем островке, но и вихри во вращающемся сосуде со сверхтекучим гелием (см. [7–11]). Она описывает также электронный кластер в полупроводниковойnanoструктуре (2D квантовой точке), окруженной средой со значительно меньшей диэлектрической проницаемостью $\epsilon \ll \epsilon_{qdot}$ (если межэлектронные расстояния r таковы, что $D \ll r \ll D/k$; D – толщина nanoструктуры, $k = \epsilon/\epsilon_{qdot}$; при этом одноименные заряды изображения электронов "выстраиваются" в заряженные линии, что и приводит к эффективному логарифмическому взаимодействию между частицами).

Равновесные конфигурации кластеров. Для поиска равновесных конфигураций частиц использовался случайный поиск минимума потенциальной энергии

системы со случайным движением отдельных оболочек в целом и случайным движением частиц.

Были найдены: локальные и глобальные минимумы потенциальной энергии. Малые логарифмические кластеры (так же, как и кулоновские, см. [3, 5, 12, 13]) имеют оболочечное строение при низких температурах. Область с треугольной структурой зарождается внутри кластера при довольно большом числе частиц (см. [3, 5, 7–11]).

Оболочечная структура и потенциальная энергия микрокластеров вихрей

Число частиц	Числа заполнения оболочек	Потенциальная энергия	Число частиц	Числа заполнения оболочек	Потенциальная энергия
1	1	$0.000000 \cdot 10^0$	26	3,9,14	$-1.940569 \cdot 10^2$
2	2	$5.000000 \cdot 10^{-1}$	27	3,9,15	$-2.156137 \cdot 10^2$
3	3	$8.918023 \cdot 10^{-1}$	28	4,9,15	$-2.384294 \cdot 10^2$
4	4	$1.090457 \cdot 10^0$	29	4,10,15	$-2.625912 \cdot 10^2$
5	5	$9.764052 \cdot 10^{-1}$	30	4,10,16	$-2.881028 \cdot 10^2$
6	1,5	$4.354169 \cdot 10^{-1}$	31	4,10,17	$-3.149268 \cdot 10^2$
7	1,6	$-7.512442 \cdot 10^{-1}$	32	4,11,17	$-3.431329 \cdot 10^2$
8	1,7	$-2.514746 \cdot 10^0$	33	5,11,17	$-3.727473 \cdot 10^2$
9	1,8	$-4.914510 \cdot 10^0$	34	1,5,11,17	$-4.037308 \cdot 10^2$
10	2,8	$-8.100414 \cdot 10^0$	35	1,6,11,17	$-4.361606 \cdot 10^2$
11	3,8	$-1.209333 \cdot 10^1$	36	1,6,12,17	$-4.700331 \cdot 10^2$
12	3,9	$-1.697858 \cdot 10^1$	37	1,6,12,18	$-5.053534 \cdot 10^2$
13	4,9	$-2.271610 \cdot 10^1$	38	1,6,12,19	$-5.420929 \cdot 10^2$
14	4,10	$-2.942793 \cdot 10^1$	39	1,7,13,18	$-5.803155 \cdot 10^2$
15	4,11	$-3.706118 \cdot 10^1$	40	1,7,13,19	$-6.200430 \cdot 10^2$
16	5,11	$-4.573707 \cdot 10^1$	41	1,7,13,20	$-6.612310 \cdot 10^2$
17	1,5,11	$-5.541308 \cdot 10^1$	42	1,7,14,20	$-7.039416 \cdot 10^2$
18	1,6,11	$-6.620692 \cdot 10^1$	43	2,8,14,19	$-7.481666 \cdot 10^2$
19	1,6,12	$-7.811655 \cdot 10^1$	44	2,8,14,20	$-7.939606 \cdot 10^2$
20	1,6,13	$-9.110199 \cdot 10^1$	45	2,8,14,21	$-8.412619 \cdot 10^2$
21	1,7,13	$-1.052696 \cdot 10^2$	46	3,9,14,20	$-8.901514 \cdot 10^2$
22	1,7,14	$-1.205683 \cdot 10^2$	47	3,9,15,20	$-9.406122 \cdot 10^2$
23	1,8,14	$-1.370647 \cdot 10^2$	48	3,9,15,21	$-9.926554 \cdot 10^2$
24	2,8,14	$-1.548203 \cdot 10^2$	49	3,9,15,22	$-1.046250 \cdot 10^3$
25	3,8,14	$-1.737968 \cdot 10^2$	50	4,10,15,21	$-1.101460 \cdot 10^3$

В таблице приведены числа заполнения оболочек и соответствующие потенциальные энергии (отсчитанные от $C_N^2 \ln[q/(\alpha^{1/2}a)]$, см. выше) для глобальных минимумов 2D логарифмических кластеров. Последовательное заполнение оболочек напоминает "Периодическую таблицу" элементов (ср. заполнение оболочек в 2D классической системе частиц с *трехмерным* кулоновским взаимодействием [3]). Каждая оболочка может содержать не более определенного числа частиц.

Мы используем следующее понятие оболочки (отличающееся от использованных ранее, не универсальных для разного числа частиц определений, см., например, [9]). Определим оболочку как выпуклый многоугольник из максимально возможного числа частиц (внутри которого находится предыдущая оболочка), удовлетворяющий правилу: максимальное расстояние от частицы данной оболочки до центра системы должно быть меньше минимального расстояния до центра системы от частицы внешней относительно нее оболочки. Правила заполнения оболочек в кластерах, полученные из наших расчетов с использованием вышеуказанного определения, похожи на правила заполнения оболочек в Периодической системе элементов [3, 5]. В частности, при *росте*

числа частиц, в отличие от [9], число оболочек не может уменьшаться. Соответственно, распределение частиц по оболочкам в нашей работе отличается от полученного в работе [9].

Так как удерживающий квадратичный потенциал является центрально-симметричным, то казалось бы оболочки в кластере должны иметь форму правильных многоугольников, вписанных в окружности. Однако это верно лишь для кластеров, состоящих из одной оболочки или из двух оболочек, внутренняя из которых состоит всего из одной частицы. При дальнейшем увеличении числа частиц в кластерах с малым N происходит спонтанное нарушение симметрии. Наиболее сильно это проявляется при $N = 10$ и $N = 24$. В этих случаях, так как первая оболочка (считая от центра) состоит из двух частиц, второй оболочке выгодно принять форму эллипса.

Плавление и фазовые переходы. Для изучения зависимости физических величин от температуры и плавления системы в работе использовался метод Монте-Карло (МК). После нахождения равновесных конфигураций система нагревалась на температуру ΔT (ΔT от $1 \cdot 10^{-4}$ до $5 \cdot 10^{-3}$), далее система удерживалась до выхода на равновесие при новой температуре $2 \cdot 10^4$ шагов Монте-Карло. Затем рассчитывались статистические характеристики усреднением по $1 \cdot 10^6$ шагов Монте-Карло. После этого следовал дальнейший нагрев с использованием описанной процедуры. Вычислялись следующие величины:

1. Полная потенциальная энергия U_{pot} .
2. Радиальные среднеквадратичные смещения (РСС) – полное

$$\langle \delta R^2 \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{\langle r_i^2 \rangle - \langle r_i \rangle^2}{a^2} \quad (2)$$

и для каждой оболочки отдельно

$$\langle \delta r^2 \rangle = \frac{1}{N_R} \sum_{i=1}^{N_R} \frac{\langle r_i^2 \rangle - \langle r_i \rangle^2}{a^2}, \quad (3)$$

где N_R – число частиц в оболочке, усреднение $\langle \rangle$ производится по различным конфигурациям Монте-Карло.

3. Угловые среднеквадратичные смещения (УСС) относительно ближайших частиц своей оболочки

$$\langle \delta \phi_1^2 \rangle = \frac{1}{N_R} \sum_{i=1}^{N_R} \frac{\langle (\phi_i - \phi_{i_1})^2 \rangle - \langle (\phi_i - \phi_{i_1}) \rangle^2}{\phi_0^2} \quad (4)$$

и УСС относительно ближайших частиц соседней оболочки

$$\langle \delta \phi_2^2 \rangle = \frac{1}{N_R} \sum_{i=1}^{N_R} \frac{\langle (\phi_i - \phi_{i_2})^2 \rangle - \langle (\phi_i - \phi_{i_2}) \rangle^2}{\phi_0^2}, \quad (5)$$

где i_1 и i_2 относятся к ближайшей частице, соответственно, из той же и из соседней оболочек, $2\phi_0 = 2\pi/N_R$ – среднее угловое расстояние между соседними частицами для данной оболочки.

Температурная зависимость полного РСС для кластера $N = 37$ показана на рис.1. РСС для всех оболочек испытывают излом при одной и той же температуре $T_c = 8 \cdot 10^{-3}$. Из рис.2 видно, что при той же температуре испытывают излом УСС относительно ближайших частиц своей оболочки для всех оболочек. Следовательно, при температуре $T_c = 8 \cdot 10^{-3}$ в кластере из $N = 37$ частиц происходит фазовый переход: система теряет свое упорядоченное стро-

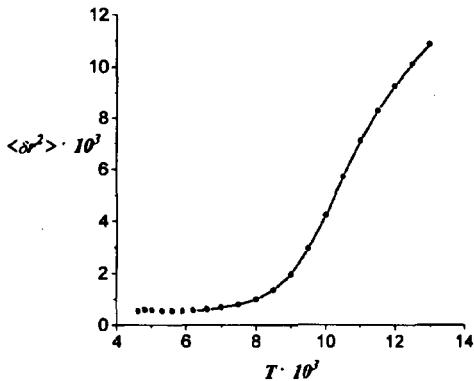


Рис.1. Полное радиальное среднеквадратичное смещение $\langle \delta r^2 \rangle$ как функция температуры для 2D логарифмического кластера с числом частиц $N = 37$

ение. При $T > T_c$ число частиц в оболочках начинает меняться, оболочки обмениваются частицами, размываются. При $T \gg T_c$ невозможно выделить какие-либо оболочки. Частицы движутся хаотически. Характерное значение безразмерного параметра $\Gamma = q^2/k_B T_c$, при котором происходит плавление системы при $N = 37$ есть: $\Gamma = 125$, что почти не отличается от величины Γ , при которой происходит плавление системы с относительно большим числом вихрей ($\Gamma = \Gamma_c \approx 130$).

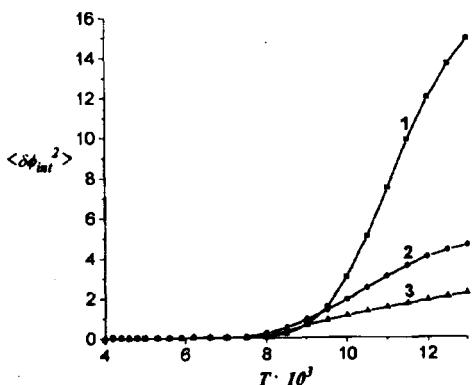


Рис.2. УСС $\langle \delta\phi_i^2 \rangle$ как функция температуры для 2D логарифмического кластера с числом частиц $N = 37$ относительно ближайших частиц из данной оболочки: 1 - УСС внешней оболочки относительно ближайших частиц из данной оболочки. 2 - УСС средней оболочки относительно ближайших частиц из данной оболочки. 3 - УСС внутренней оболочки относительно ближайших частиц из данной оболочки

Оказывается, однако, что УСС относительно ближайших частиц *соседней* оболочки испытывают излом при *намного меньших* температурах. Для кластера из 37 частиц УСС внешней оболочки относительно ближайших частиц средней оболочки начинают быстро расти при $T_{c_1} = 8 \cdot 10^{-4}$ ($\Gamma = 1/T_{c_1} = 1250$), см. рис.3a, а УСС средней оболочки относительно ближайших частиц внутренней оболочки – при $T_{c_2} = 3 \cdot 10^{-3}$ ($\Gamma = 1/T_{c_2} = 333$), см. рис.3b. Это означает, что при этих температурах для соответствующих пар оболочек происходит специфическое *ориентационное* плавление, характерное для кластеров с оболочечной структурой, то есть в 2D кластерах в некоторый момент оболочки, *сохраняя свою кристалличность, начинают проворачиваться друг относительно друга*.

Мы нашли потенциальный барьер вращения U_1 и потенциальный барьер перескока частицы из одной оболочки в другую U_2 . Оказалось, что ориен-

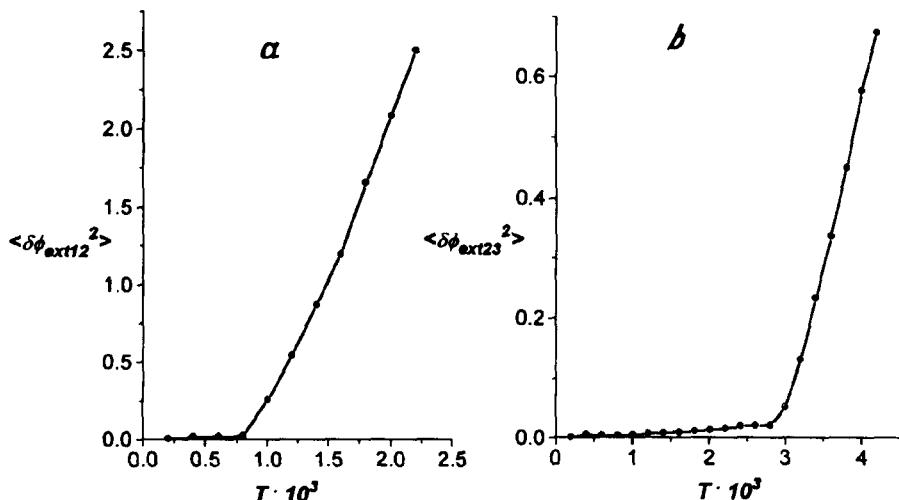


Рис.3. УСС $\langle \delta\phi_2^2 \rangle$ как функция температуры для 2D логарифмического кластера с числом частиц $N = 37$ относительно ближайших частиц из соседней оболочки: *а* – УСС средней оболочки относительно ближайших частиц из внешней оболочки; *б* – УСС внутренней оболочки относительно ближайших частиц из средней оболочки

тационный барьер существенно ниже радиального, что является, наряду со скачком УСС, еще одним веским доказательством ориентационного плавления в 2D кластерах вихрей (напр., для $N = 11$, $U_1 = 2.32 \cdot 10^{-6} \ll U_2 = 3.71 \cdot 10^{-2}$).

Было бы весьма интересно обнаружить экспериментально новое, ориентационное плавление в микрокластере вихрей, например, путем наблюдения за вихрями, используя в качестве подложки магнитооптический материал, локальное намагничение которого изучается с помощью поляризационного микроскопа (в этом случае возможно наблюдение переориентаций оболочек вихрей в реальном времени), либо с помощью сканирующего тунNELьного микроскопа или с помощью декорирования.

Выражаем признательность С.А.Бразовскому за полезное обсуждение. Работа поддержана грантами Российского фонда фундаментальных исследований, "Физика твердотельныхnanoструктур" и "Поверхностные атомные структуры".

-
1. А.А.Абрикосов, ЖЭТФ **32**, 1442 (1957).
 2. G.Blaetter, M.V.Feigel'man, V.B.Geshkenbein et al., Rev. Mod. Phys. **66**, 1125 (1994).
 3. Ю.Е.Лозовик, УФН **153**, 356 (1987).
 4. J.J.Thomson, Phil.Mag. **S6**, 7, 238 (1904).
 5. Yu.E.Lozovik and V.A.Mandelstam, Phys. Lett. A **145**, 269 (1990); Yu.E.Lozovik and V.A.Mandelstam, Phys. Lett. A **165**, 469 (1992); F.M.Peeters, V.A.Schweigert, and V.M.Bedanov, Physica B **212**, 237 (1995); Ю.Е.Лозовик, Изв.РАН, сер. физ., **60**, 85 (1996).
 6. Y.Pearl, Appl.Phys.Lett. **5**, 65 (1964).
 7. G.B.Hess, Phys.Rev. **161**, 189 (1967).
 8. D.Stauffer and A.L.Fetter, Phys.Rev. **168**, 156 (1968).
 9. L.J.Campbell and R.M.Ziff, Phys.Rev.B **20**, 1886 (1979).
 10. Р.Н.Игнатьев, Э.Б.Сонин, ЖЭТФ **81**, 2059 (1981).
 11. G.E.Volovik and U.Parts, Pis'ma v ZHETF **58**, 826 (1993).
 12. H.Totsuji and J.L.Barrat, Phys.Rev.Lett. **60**, 2484 (1988).
 13. K.Tsuruta and S.Ichimaru, Phys.Rev.A **48**, 1339 (1993).