

УДК 538.911:538.915:519.6

## О РАВНОВЕСНЫХ КОНФИГУРАЦИЯХ ЗАРЯЖЕННЫХ ИОНОВ В ПЛАНАРНЫХ СИСТЕМАХ С КРУГОВОЙ СИММЕТРИЕЙ

© 2023 г. Э. Г. Никонов<sup>a, b, \*</sup>, Р. Г. Назмитдинов<sup>a, b</sup>, П. И. Глуховцев<sup>a, b</sup>

<sup>a</sup>Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, 141980 Россия

<sup>b</sup>Университет “Дубна”, Дубна, 141980 Россия

\*e-mail: e.nikonov@jinr.ru

Поступила в редакцию 20.06.2022 г.

После доработки 15.07.2022 г.

Принята к публикации 15.07.2022 г.

Проблема нахождения равновесных конфигураций одноименно заряженных частиц (ионов), индуцированных внешними электростатическими полями в планарных системах, представляет огромный интерес как для фундаментальных, так и прикладных исследований. В настоящей работе представлены результаты численного анализа равновесных конфигураций отрицательно заряженных частиц (электронов), запертых в круговой области бесконечным внешним потенциалом на ее границе. Для поиска устойчивых конфигураций с минимальной энергией разработан гибридный вычислительный алгоритм. Основой алгоритма являются интерполяционные формулы, выведенные на основе анализа равновесных конфигураций, полученных с помощью вариационного принципа минимума энергии для произвольного, но конечного числа частиц в циркулярной модели. Решения нелинейных уравнений данной модели позволяют предсказывать формирование структуры в виде колец (оболочек), заполненных электронами, число которых уменьшается при переходе от внешнего кольца к внутренним. Число колец зависит от полного числа заряженных частиц. Полученные интерполяционные формулы распределения полного числа электронов по кольцам используют в качестве начальных конфигураций для метода молекулярной динамики. Наши результаты демонстрируют значительную эффективность использования метода классической молекулярной динамики при использовании интерполяционных формул по сравнению с алгоритмами, основанными на методах Монте-Карло и глобальной оптимизации. Предложенный метод позволяет повысить на несколько порядков скорость достижения устойчивой конфигурации с минимальной энергией для произвольно выбранного числа частиц в рассматриваемой системе по сравнению с классическим методом молекулярной динамики.

**Ключевые слова:** атом Томсона, кристалл Вигнера, молекулярная динамика, поверхности.

**DOI:** 10.31857/S1028096023020085, **EDN:** DSMMLT

### ВВЕДЕНИЕ

Проблема оптимальной конфигурации конечного числа частиц на плоскости является одной из трудных задач как физики, так и математики на протяжении многих столетий. Еще в 1611 г. Кеплер задавал вопрос почему снежинка обладает совершенной гексагональной симметрией [1]. В настоящее время возросший интерес к задаче об оптимальной конфигурации обусловлен также и развитием нанотехнологий, позволяющих формировать системы одноименно заряженных частиц, запертых внешними потенциалами с высокой симметрией. Например, данная проблема возникает при анализе поведения квантовых вихрей в Бозе конденсате [2]; электронов в квантовых точках [3]; самоорганизации коллоидных частиц на границе раздела двух различных жидкостей [4, 5].

Недавно было показано, что идеальная гексагональная структура образуется на поверхности масла при воздействии электрического поля, индуцируемого игольчатым электродом [6]. Электрод располагали над поверхностью тонкого слоя масла, разлитого на заземленном контейнере. Под воздействием электрического поля на поверхности масла возникали ионы, которым требовалось некоторое время для нейтрализации вследствие плохой проводимости органического масла. Эти ионы и формировали гексагональную структуру. Данный простейший эксперимент открывает возможность безконтактного формирования гексагональных структур на соответствующей поверхности.

Отметим однако, что эксперимент с заряженными шариками миллиметрового размера, расположенными на нижней поверхности плоского

конденсатора [7], показал формирование конфигураций в виде колец. В связи с этим уместно вспомнить модель атома, предложенную Томсоном [8]. Согласно этой модели, положительный заряд атома распределен по его объему равномерно, а корпускулы (электроны) расположены внутри него. Модель Томсона предсказывала формирование устойчивой конфигурации электронов в виде колец (если электроны ограничены движением только в одной плоскости), или концентрических сфер (при свободном движении во всех направлениях) только при определенном числе корпускул в каждом кольце или сфере. На основе развитого подхода удалось рассчитать равновесные конфигурации электронов в экваториальной плоскости для небольшого числа электронов  $N < 10$ . Характерной чертой модели Томсона является доминирование энергии кулоновского взаимодействия над кинетической энергией движения электронов. Много позднее [9–11], результаты расчетов с помощью методов Монте-Карло равновесных конфигураций латеральных квантовых точек (где в качестве эффективного потенциала удержания электронов рассмотрен потенциал гармонического осциллятора) полностью совпали с предсказаниями, полученными с помощью модели Томсона для числа электронов  $N < 50$ . Несмотря на расхождение результатов двух вышеупомянутых подходов для  $N < 100$ , формирование устойчивых электронных конфигураций в виде последовательности кольцеобразных оболочек с определенным числом электронов было также получено с использованием методов Монте-Карло [9–11].

Таким образом, два экспериментальных наблюдения формирования оптимальной планарной конфигурации одноименно заряженных частиц в ограниченном потенциале находятся в явном противоречии. Кроме того, необходимо отметить работу [12], в которой было показано, что наилучшей конфигурации упаковки бесконечного числа электронов на двумерной поверхности отвечает гексагональная решетка, которая является двумерной версией кристалла Вигнера. Напомним, что Вигнер показал, что при доминировании потенциальной (кулоновской) энергии газ электронов образует трехмерную кристаллическую решетку [13], так называемый кристалл Вигнера.

В работах [14, 15] был развит теоретический подход, который позволил разрешить возникшую проблему о самоорганизации заряженных частиц либо в виде колец (оболочек), либо в узлах гексагональной структуры в планарной системе. В этих работах было показано, что при числе электронов  $N > 180$ , запертых в цилиндрическом потенциале (с бесконечными стенками) или в двумерном гармоническом потенциале, происходит формирование центрированной гексагональной решетки, отвечающей диэдральной группе симметрии.

Данная симметрия является группой симметрии правильного  $n$ -угольника, которая включает как  $n$  поворотов, так и  $n$  отражений. Каждое кольцо (оболочка) содержит частицы, локализованные в вершинах соответствующих шестиугольников (их число определяется номером оболочки), которые ограничены: окружностью, вписанной в данный шестиугольник и окружностью, описывающей данный шестиугольник. При заполнении оболочек при заданном общем числе частиц системы от ее центра к ее краю происходит постепенное разрушение гексагональной структуры, а пограничные кольца обладают только осевой симметрией запирающего потенциала. Основой предложенной модели являются полученные из вариационного принципа нелинейные уравнения, решение которых позволяет определить равновесную конфигурацию одноименно заряженных частиц. Как показали предварительные исследования, полученные равновесные конфигурации находятся вблизи истинного минимума системы.

В настоящей работе представлен новый подход для численно-аналитического анализа равновесных конфигураций отрицательно заряженных частиц (допустим, электронов), запертых в круговой области бесконечным внешним потенциалом на границе. С использованием модели устойчивых конфигураций, учитывающей взаимодействие между оболочками заряженных частиц [14, 15] получены функциональные зависимости полного числа частиц системы от количества колец и энергии равновесной конфигурации от полного числа частиц. Данные зависимости позволяют значительно упростить поиск абсолютного минимума системы для заданного полного числа одноименно заряженных частиц.

#### ФИЗИЧЕСКАЯ ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ И ЭВОЛЮЦИЯ ПОДХОДОВ К РЕШЕНИЮ ПРОБЛЕМЫ

С развитием нанотехнологий возникла потребность в создании новой элементной базы для нанoeлектроники. Одним из продуктов такого развития являются планарные квантовые точки, созданные в результате комбинации различных полупроводников. Наличие разных энергетических характеристик полупроводников позволило создать гетероструктуры, в которых электроны оказались технологически заперты в наноразмерной области. В девяностых годах прошлого столетия в связи с развитием такой технологии вновь возник вопрос о локализации электронов в таких системах. В работах [16, 17] было показано, что при сильном кулоновском взаимодействии потенциальная энергия является доминирующей компонентой полной энергии. Это позволяет перейти к классическому пределу описания взаимодействующих электронов в рассматриваемых системах.

Физическая постановка задачи может быть сформулирована следующим образом. Дана система одинаково заряженных частиц, которые расположены в области с цилиндрическим запирающим потенциалом на границе. Конфигурации частиц определяются гамильтонианом, в котором потенциальная энергия межчастичного взаимодействия доминирует над кинетической. Нужно найти устойчивую конфигурацию  $N$  частиц с минимальной энергией внутри заданной области.

Необходимость анализа таких систем вызвала развитие численных методов, включающих группу методов частиц (например, метод молекулярной динамики, методы Монте-Карло и т.п.) и методов минимизации функционалов (например, метод сопряженных градиентов, метод наискорейшего спуска и другие). При решении задачи об оптимальной конфигурации запертых электронов численными методами исследователь может встретить ряд серьезных проблем. В частности, данная задача требует больших вычислительных ресурсов в силу ее трудоемкости ввиду наличия огромного числа локальных минимумов у функционала энергии. С другой стороны, результаты численного анализа не позволяют понять фундаментальные принципы формирования устойчивых конфигураций. Попытки развития континуального предела данной задачи с предсказанием общей тенденции формирования равновесной конфигурации не позволяют определить детальную структуру формирования оболочек как функции конечного числа запертых частиц [18–20].

Итак, рассмотрим планарную систему из  $N$  идентичных заряженных частиц с кулоновским взаимодействием в двумерном ограничивающем потенциале радиуса  $R$ . Гамильтониан такой системы можно записать следующим образом:

$$H = \sum_{i=1}^N V(r_i) + \alpha \sum_{\substack{i,j=1 \\ i < j}}^N \frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} + \sum_{i=1}^N T_i, \quad (1)$$

где  $r_i = |\mathbf{r}_i|$  – это расстояние до центра области, ограниченной потенциалом,  $\alpha = e^2/4\pi\epsilon_0\epsilon_r$  – величина, характеризующая силу взаимодействия зарядов в среде,  $T_i$  – кинетическая энергия частицы. Ограничивающий потенциал  $V(r)$  определяется следующим образом:

$$V(r) = \begin{cases} 0, & r < R \\ \infty, & r \geq R. \end{cases} \quad (2)$$

Для того, чтобы избежать большого числа метастабильных состояний (локальных минимумов), система рассмотрена при близких к нулю температурах, при которых потенциальная энергия доминирует над кинетической. Вследствие чего

можно переписать функцию полной энергии системы (1) следующим образом:

$$H = \sum_{i=1}^N V(r_i) + \alpha \sum_{\substack{i,j=1 \\ i < j}}^N \frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}. \quad (3)$$

Задача состоит в нахождении устойчивой конфигурации частиц внутри заданной области, с минимально возможным значением энергии.

На основе своей модели Томсон получил уравнения (4) для аналитического вычисления координат частиц в равновесном состоянии на одном кольце:

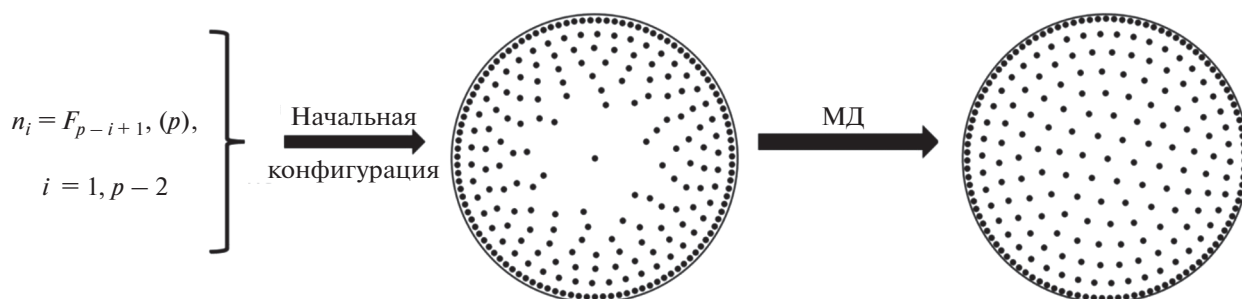
$$E_n(r) = \frac{\alpha}{2r} \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=i+1}^n \frac{1}{\sin \frac{\pi}{n} (|i-j|)} = \frac{\alpha n S_n}{4r}, \quad (4)$$

$$S_n = \sum_{k=1}^{n-1} \frac{1}{\sin \frac{\pi}{n} k}.$$

Здесь  $E_n(r)$  – кулоновская энергия  $n$  частиц с зарядом  $e$ , равномерно распределенных по окружности радиуса  $r$ ;  $\alpha = e^2/4\pi\epsilon_0\epsilon_r$  – величина, характеризующая силу взаимодействия заряженных частиц в среде. Без потери общности далее в качестве заряженных частиц рассмотрены электроны с зарядом  $e$ . В работах [14, 15], был сформулирован оригинальный подход к вычислению равновесных конфигураций и энергии равновесной конфигурации, в котором помимо энергии одного кольца (одной оболочки) учтено и взаимодействие между оболочками, состоящими из заряженных частиц. В результате решения вариационной задачи о минимуме полного энергетического функционала была получена система нелинейных уравнений (5):

$$\mathcal{F}_i = 0, \quad i = 2, \dots, p, \quad \mathcal{F}_i = r_i^2 \sum_{j=i+1}^p \frac{n_j E \left[ (r_j/r_i)^2 \right]}{r_j^2 - r_i^2} - \frac{\pi}{8} \sum_{k=1}^{n_i-1} \frac{1}{\sin \frac{\pi}{n_i} k} + r_i \sum_{j=1}^{i-1} n_j \left( \frac{r_j E \left[ (r_i/r_j)^2 \right]}{r_j^2 - r_i^2} - \frac{K \left[ (r_i/r_j)^2 \right]}{r_j} \right). \quad (5)$$

Здесь  $K = X_{-1}(E = X_1)$  – полные эллиптические интегралы первого (второго) рода:  $X_p(x) = \int_0^{\pi/2} dt (1 - x \sin^2 t)^{p/2}$ ;  $r_i$  – значение  $i$ -го оптимального радиуса для заданной устойчивой конфигурации заряженных частиц,  $n_i$  – количество частиц на  $i$ -й оболочке.



**Рис. 1.** Схема вычислений методом МД с использованием начальной конфигурации, полученной в соответствии с моделью устойчивых конфигураций (5), на основе распределения числа частиц  $n_i$  для заданного числа колец  $p$ .

Как показал предварительный анализ, решение данных уравнений позволяет существенно снизить объем вычислительных работ посредством нахождения ближайшего к равновесной конфигурации состояния. Стоит отметить, что данный подход позволяет определить практически точно как равновесную конфигурацию, так и полную энергию равновесного состояния для  $N < 52$ .

В настоящей работе авторами развит новый подход и разработаны методы вычисления координат частиц и энергии равновесной конфигурации для произвольного конечного числа частиц с использованием полученных аналитических зависимостей распределения частиц и энергии равновесной конфигурации от полного числа частиц в системе для  $N < 1000$ .

### СХЕМА ВЫЧИСЛЕНИЙ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МОДЕЛИ УСТОЙЧИВЫХ КОНФИГУРАЦИЙ

Для дальнейшего повышения эффективности и уменьшения времени расчетов в настоящей работе предложена следующая модификация традиционного подхода, основанного на методе молекулярной динамики [21] (рис. 1).

В качестве начального приближения взято распределение частиц, полученное с помощью решения уравнений модели устойчивых конфигураций (5) для некоторого количества колец. После этого запускают расчеты методом молекулярной динамики при условии постепенного понижения температуры системы (“с торможением”). При достижении нулевой температуры расчеты

**Таблица 1.** Число частиц  $n_i$  на  $i$ -й оболочке и коэффициентов для этой оболочке, соответствующих формуле (6)

$i$	1	2	3	4	5	6
$a_i$	2.7948	1.3439	1.1323	1.0127	0.9482	0.8517
$b_i$	3.9444	7.2999	10.845	14.850	19.128	21.732

временной эволюции системы считают завершенными, после чего рассчитывают энергию полученной устойчивой конфигурации частиц в системе. Последний этап реализован аналогично традиционной схеме метода молекулярной динамики. Общее количество итераций, необходимое для достижения глобального минимума энергии уменьшается на 3–4 порядка по сравнению с расчетами в рамках традиционной схемы использования метода молекулярной динамики.

В настоящей работе представлены формулы, позволяющие описать функциональные зависимости полного числа частиц системы  $N$  от количества колец  $p$  (6) и энергии равновесной конфигурации  $E_{GS}$  от полного числа частиц  $N$  (7). Упомянутые формулы получены на основании анализа модели устойчивых конфигураций, учитывающей взаимодействие между оболочками (кольцами), состоящими из заряженных частиц.

$$N(p) = \frac{3}{2}p^2 + \frac{17}{2}p^3 + \frac{2}{3}p^5, \quad n_i(N) = a_i N^{\frac{2}{3}} - b_i, \quad (6)$$

$$E_{GS}(N) = \frac{\pi}{4}N^2 - \frac{\pi}{2}N^{\frac{3}{2}} + 1.1701N. \quad (7)$$

Формула (6) описывает зависимость полного числа частиц от числа колец в устойчивой конфигурации с заполненными оболочками. В табл. 1 показано соответствие числа частиц  $n_i$  на  $i$ -й оболочке и коэффициентов для этой оболочке. Нумерация начинается с внешней оболочке. И наконец, формула (7) описывает зависимость энергии равновесной устойчивой конфигурации от общего числа частиц в системе.

Интересно отметить, что поиск формул, адекватно и с хорошей точностью описывающих зависимость энергии равновесной устойчивой конфигурации от общего числа частиц в системе, не прекращается в течение последних трех десятилетий. Все полученные до сих пор формулы не позволяют получить с приемлемой точностью значения энергии равновесной устойчивой кон-

**Таблица 2.** Сравнение результатов расчетов по формулам (7)–(9) с расчетами методом молекулярной динамики  $E_{GS}^{МД}$ . Точность полученных результатов расчетов представлена в виде относительной погрешности  $\delta E_{GS} = \left| E_{GS} - E_{GS}^{МД} \right| / E_{GS}^{МД}$ . Например, если электроны локализованы в GaAs, эффективные массы частиц  $m = 0.067m_e$ ,  $\epsilon_r \approx 12.4$ ,  $R = 1$  мкм, согласно формулам (1)–(3) [14]

Метод	$E_{GS}$ , эВ	$\delta E_{GS}$
МД	166408.5903	–
(7)	166408.5572	$2.0 \times 10^{-7}$
(8)	166421.5365	$7.8 \times 10^{-5}$
(9)	159916.3296	$3.9 \times 10^{-2}$

фигурации для достаточно большого (порядка  $10^2$ – $10^3$ ) числа частиц в системе. Полученные в настоящей работе значения энергии равновесной устойчивой конфигурации с хорошей точностью совпадают с аналогичными значениями, полученными с использованием метода молекулярной динамики в отличие от результатов, полученных с использованием формул (8), (9), приведенных в работах других авторов [22–24].

$$E_{GS}(N) = \frac{\pi}{4} N^2 - 1.56 N^{\frac{3}{2}} + 0.96 N, \quad (8)$$

$$E_{GS}(N) = \left( N^2 + 9.9 N^{\frac{3}{2}} - 785.8898 \sqrt{N} \right) / 2. \quad (9)$$

В табл. 2 приведены значения энергии равновесной устойчивой конфигурации, полученные методом молекулярной динамики для полного числа частиц в системе  $N = 482$ , вычисленные по формуле (8) авторами настоящей работы, а также результаты расчетов по формулам (8) и (9) из работ [22–24].

### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Предложенный в настоящей работе подход, основанный на использовании аналитического описания функциональных зависимостей полного числа частиц системы от количества колец в равновесной конфигурации и энергии основного состояния от полного числа частиц, позволяет значительно упростить численно-аналитическое исследование планарных систем одноименно заряженных частиц в ограниченных круговых областях с бесконечным потенциалом запираения на границе.

Разработанные авторами алгоритмы и программы могут быть использованы для численного исследования устойчивости систем заряженных частиц в различных областях физики, химии, молекулярной биологии и нанотехнологий, вклю-

чая, например, исследования таких нано-объектов, как квантовые точки.

### БЛАГОДАРНОСТИ

Работа выполнена в рамках проекта ОИЯИ № 05-6-1118-2014/2023 с использованием ресурсов гетерогенного кластера HybriLIT Лаборатории информационных технологий Объединенного института ядерных исследований.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Kepler J.* The Six-Cornered Snowflake. Oxford, UK: Clarendon Press, 1966. 150 p.
2. *Saarikoski H., Reimann S.M., Harju A., Manninen M.* // Rev. Mod. Phys. 2010. V. 82. Iss. 3. P. 2785.
3. *Birman J.L., Nazmitdinov R.G., Yukalov V.I.* // Phys. Rep. 2013. V. 526. P. 1.
4. *Binks B.P., Horozov T.S.* Colloidal Particles at Liquid Interfaces. Cambridge, UK: Cambridge University Press, 2006. 519 p.
5. *Leunissen M.E., van Blaaderen A., Hollingsworth A.D., Sullivan M.T., Chaikin P.M.* // Proc. Natl. Acad. Sci. 2007. V. 104. № 8. P. 2585.
6. *Niazi M.S.* // R. Soc. Open Sci. 2017. V. 4. P. 170503.
7. *Saint J.M., Even C., Guthmann C.* // Eur. Phys. Lett. 2001. V. 55. P. 45.
8. *Thomson J.J.* // Phil. Mag. 1904. V. 7. Iss. 39. P. 237.
9. *Lozovik Yu.E., Mandelshtam V.A.* // Phys. Lett. A. 1992. V. 165. Iss. 5–6. P. 469.
10. *Bedanov V.M., Peeters F.M.* // Phys. Rev. B. 1994. V. 49. № 4. P. 2667.
11. *Bolton F., Rössler U.* // Superlatt. Microstruct. 1993. V. 13. Iss. 2. P. 139.
12. *Bonsall L., Maradudin A.A.* // Phys. Rev. B. 1977. V. 15. P. 1959.
13. *Wigner E.P.* // Phys. Rev. 1934. V. 46. P. 1002.
14. *Cerkaski M., Nazmitdinov R.G., Puente A.* // Phys. Rev. E. 2015. V. 91. P. 032312.
15. *Nazmitdinov R.G., Puente A., Cerkaski M., Pons M.* // Phys. Rev. E. 2017. V. 95. P. 042603.
16. *Matulis A., Peeters F.M.* // Sol. St. Comm. 2001/V. 117/ P. 655.

17. Puente A., Pons M., Nazmitdinov R.G. // J. Phys.: Conf. Ser. 2010. V. 248. P. 012017.
18. Koulakov A.A., Shklovskii B.I. // Philos. Mag. B. 1998. V. 77. P. 1235.
19. Koulakov A.A., Shklovskii B.I. // Phys. Rev. B. 1998. V. 57. № 4. P. 2352.
20. Mughal A., Moore M.A. // Phys. Rev. E. 2007. V. 76. Iss. 1. P. 011606.
21. Frenkel D., Smit B. Understanding Molecular Simulation: from algorithms to applications. Academic Press, 2001. 661 p.
22. Oymak H., Erkoç S. // Int. J. Mod. Phys. C. 2000. V. 11. P. 891.
23. Erkoç S., Oymak H. // Phys. Lett. A. 2001. V. 290. P. 28.
24. Ono S. // Phys. Rev. B. 2021. V. 104. P. 094105.

## On Equilibrium Configurations of Charged Ions in Planar Systems with Circular Symmetry

E. G. Nikonov<sup>1, 2, \*</sup>, R. G. Nazmitdinov<sup>1, 2</sup>, P. I. Glukhovtsev<sup>1, 2</sup>

<sup>1</sup>Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, 141980 Russia

<sup>2</sup>Dubna University, Dubna, 141980 Russia

\*e-mail: e.nikonov@jinr.ru

The problem of finding equilibrium configurations of one-component charged particles, induced by external electrostatic fields in planar systems, is a subject of active studies in fundamental as well in experimental investigations. In this paper the results of numerical analysis of the equilibrium configurations of charged particles (electrons), confined in a circular region by an infinite external potential at its boundary are presented. Equilibrium configurations with minimal energy are searched by means of the hybrid numerical algorithm. The algorithm is based on the interpolation formulas, that are obtained from the analysis of the equilibrium configurations for an arbitrary finite number of charged particles, provided by the variational principle, developed in the circular model. The solution of the nonlinear equations of the circular model yields the formation of the shell structure which is composed of the series of rings. Each ring contains a certain number of particles, which decreases as one moves from the boundary ring to the central one. The number of rings depends on the total number of electrons. The interpolation formulas provide the initial configurations for the molecular dynamics calculations. Our results demonstrate a significant efficiency of using the method of classical molecular dynamics (MD) when using the interpolation formulas in comparison with algorithms based on Monte Carlo methods and global optimization. This approach makes it possible to significantly increase the speed at which an equilibrium configuration is reached for an arbitrarily chosen number of particles compared to the Metropolis annealing simulation algorithm and other algorithms based on global optimization methods.

**Keywords:** Thomson atom, Wigner crystal, molecular dynamics, surfaces.