

САМООРГАНИЗАЦИЯ ДВУМЕРНЫХ СИСТЕМ — РОЛЬ ТРАНСЛЯЦИОННОГО И ОРИЕНТАЦИОННОГО ПАРАМЕТРОВ ПОРЯДКА

В. Н. Рыжов¹, Е. А. Гайдук, Ю. Д. Фомин, Е. Н. Циок

Институт физики высоких давлений им. Л. Ф. Верещагина РАН, Москва

Обсуждаются современные теории плавления двумерных систем, базирующиеся в основном на представлениях теории Березинского–Костерлица–Таулеса (БКТ) фазовых переходов в двумерных системах с непрерывной симметрией. В статье приведен критический анализ применяемых подходов для определения параметров и сценария перехода методами компьютерного моделирования. Описанные методы используются для рассмотрения плавления системы мягких дисков с потенциалом $\propto 1/r^{12}$.

The article discusses modern theories of melting of two-dimensional systems, based mainly on the concepts of the Berezinsky–Kosterlitz–Thouless (BKT) theory of phase transitions in two-dimensional systems with continuous symmetries. The article provides a critical analysis of the approaches used to determine the parameters and type of transition using computer simulation methods. The described methods are used to consider the melting of a system of soft disks with the potential $\propto 1/r^{12}$.

PACS: 44.25.+f; 44.90.+c

ВВЕДЕНИЕ

Фундаментальные работы Березинского [1] и Костерлица и Таулеса [2] (БКТ), посвященные фазовым переходам в двумерных системах с непрерывной симметрией, породили вал работ в изучении самых разнообразных двумерных систем: сверхтекучих и сверхпроводящих пленок, тонких магнитных и жидкокристаллических пленок, систем джозефсоновских контактов, двумерных систем ультрахолодных атомов в оптомагнитных ловушках [3]. Березинский показал, что в двумерных системах с непрерывной симметрией при низких температурах корреляционные функции параметра порядка демонстрируют медленное степенное убывание с расстоянием, в то время как при высоких температурах они демонстрируют стандартное экспоненциальное убывание. Ясно, что так как в высокотемпературной и низкотемпературной фазах корреляции убывают по разным законам, которые не переходят друг в друга непрерывным образом, должен существовать фазовый переход между этими фазами. Березинский первым обнаружил важную роль топологических дефектов при переходе

¹E-mail: ryzhov@hppi.troitsk.ru

и дал качественное объяснение механизма перехода. При низких температурах дефекты образуют связанные пары, которые не разрушают квазидальний порядок. Однако при повышении температуры происходит диссоциация связанных пар, и образуются свободные дефекты, которые превращают квазидальний порядок в неупорядоченную фазу с быстрым экспоненциальным убыванием корреляций. Следует заметить, что переход БКТ является непрерывным переходом бесконечного рода [3]. Вид перехода зависит от энергии ядра топологического дефекта. При малых значениях этой энергии БКТ-переход превращается в переход первого рода [3].

1. СЦЕНАРИИ ДВУМЕРНОГО ПЛАВЛЕНИЯ

Отдельным и важным ответвлением теории БКТ является теория двумерного плавления, начало которой было положено в конце 1970-х гг. в знаменитых работах Хальперина, Нельсона и Янга [4, 5]. Еще в первоначальных работах Березинский [1] и Костерлиц и Таулесс [2] отметили, что двумерный кристалл должен плавиться посредством диссоциации дислокационных пар, которые в данном случае являются топологическими дефектами. При наличии квазидального трансляционного порядка эти дефекты хорошо определены. Это наблюдение было положено в основу наиболее популярной теории двумерного плавления — теории Березинского–Костерлица–Таулеса–Хальперина–Нельсона–Янга (БКТХНЯ). Так как в двумерном кристалле кроме квазидального трансляционного порядка существует дальний ориентационный порядок, т. е. порядок в направлениях векторов, соединяющих частицу с ее ближайшими соседями, как заметили позднее Хальперин и Нельсон [4], жидкость выше точки диссоциации дислокационных пар оказывается неизотропной. Они нашли, что диссоциация дислокационных пар не полностью разрушает дальний ориентационный порядок, а только превращает его в квазидальний. Получающаяся в результате новая фаза имеет название «гексатической» по аналогии с жидкими кристаллами. В гексатической фазе существуют свободные дислокации, поэтому ее модуль сдвига равен нулю, т. е. она представляет собой жидкость с элементами упорядочения. Заметим, что дислокацию можно представить в виде связанной пары двух дисклинаций. Гексатическая фаза превращается в обычную изотропную жидкость в результате следующего перехода Березинского–Костерлица–Таулеса посредством диссоциации дисклинационных пар. Таким образом, в рамках теории БКТХНЯ двумерный кристалл должен плавиться посредством двух непрерывных переходов типа Березинского–Костерлица–Таулеса с промежуточной гексатической фазой (напомним, что в случае трех измерений плавление всегда является переходом первого рода).

Квазидальний периодический трансляционный порядок разрушается за счет диссоциации дислокационных пар и появления свободных дислокаций, что приводит к обращению в нуль модуля сдвига μ . Диссоциация дислокационных пар, приводящая к плавлению при температуре T_m , происходит при условии [3, 2, 4, 5]

$$k_B T_m = \frac{K a_0^2}{16\pi}, \quad (1)$$

где a_0 — период рассматриваемой треугольной решетки, модуль Юнга K дается уравнением

$$K = \frac{4\mu(\mu + \lambda)}{2\mu + \lambda}. \quad (2)$$

Здесь μ и λ — коэффициенты Ламе [3, 2, 4, 5]. Коэффициент Ламе λ связан с объемным модулем $B = (dP/d\rho)_T = \mu + \lambda$.

Необходимо учесть перенормировку упругих модулей за счет связанных дислокационных пар, приводящих к уменьшению модулей. Ренормгрупповые уравнения для модуля Юнга треугольного кристалла имеют вид [4, 5]:

$$\frac{dK^{*-1}(l)}{dl} = \frac{3\pi}{4} y^2(l) \exp\left(\frac{K^*(l)}{8\pi}\right) \left(2I_0\left(\frac{K^*(l)}{8\pi}\right) - I_1\left(\frac{K^*(l)}{8\pi}\right)\right), \quad (3)$$

$$\frac{dy(l)}{dl} = \left(2 - \frac{K^*(l)}{8\pi}\right) y(l) + 2\pi y^2(l) \exp\left(\frac{K^*(l)}{16\pi}\right) I_0\left(\frac{K^*(l)}{8\pi}\right), \quad (4)$$

где $K^* = a_0^2 K / (k_B T)$, l — масштабная переменная и I_0 и I_1 — модифицированные функции Бесселя. Предел бесконечной системы соответствует $l = \infty$. Неперенормированный модуль Юнга $K(l=0)$ и фугитивность $y(l=0) = \exp(-E_c/k_B T)$ служат начальными условиями для системы уравнений (3) и (4); E_c — энергия ядра дислокации.

В рамках компьютерного моделирования E_c и $K(0)$ могут быть получены следующим образом. Для вычисления модуля Юнга K необходимо рассчитать коэффициенты Ламе λ и μ . Модуль сдвига μ может быть вычислен с помощью метода, предложенного в [6]. В рамках этого метода система подвергается деформации, при этом недиагональная компонента тензора напряжений P_{xy} пропорциональна тензору деформации с коэффициентом пропорциональности, равным модулю сдвига μ :

$$P_{xy} = \mu u_{xy} + O(u_{xy}^2), \quad (5)$$

где u_{xy} — тензор деформаций. Коэффициент Ламе λ может быть получен из объемного модуля $B = (dP/d\rho)_T$:

$$B = \left(\frac{dP}{d\rho}\right)_T = \mu + \lambda. \quad (6)$$

Энергию ядра дислокации можно оценить из приближенного соотношения, которое определяет вероятность обнаружения связанной пары дислокаций [7]:

$$p_d = \frac{16\sqrt{3}\pi^2}{K^* - 8\pi} I_0\left(\frac{K^*}{8\pi}\right) \exp\left(\frac{K^*}{8\pi}\right) \exp\left(-\frac{2E_c}{k_B T}\right), \quad (7)$$

где I_0 — модифицированная функция Бесселя; $p_d = n_{dp}/N$, где n_{dp} — число дислокационных пар и N — число частиц в системе.

Наличие ориентационного и трансляционного упорядочения в системе оценивается изучением поведения соответствующих параметров порядка и их корреляционных функций.

Трансляционное упорядочение в системе определяется из параметра порядка

$$\psi_T = \frac{1}{N} \left\langle \left| \sum_i e^{i\mathbf{G}\mathbf{r}_i} \right| \right\rangle, \quad (8)$$

где \mathbf{r}_i — радиус-вектор i -й частицы, а \mathbf{G} — вектор обратной решетки.

Трансляционная корреляционная функция имеет вид

$$G_T(r) = \frac{\langle \exp(i\mathbf{G}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)) \rangle}{g(r)}, \quad (9)$$

где $r = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$, а $g(r) = \langle \delta(\mathbf{r}_i)\delta(\mathbf{r}_j) \rangle$ — радиальная функция распределения. В кристаллической фазе в пределе $r \rightarrow \infty$ $G_T(r) \propto r^{-\eta_T}$, где $\eta_T \leq 1/3$ [4]. Это соотношение соответствует неустойчивости кристаллической фазы по отношению к диссоциации дислокационных пар.

Для оценки степени ориентационного упорядочения применяется параметр порядка, имеющий вид

$$\Psi_6(\mathbf{r}_i) = \frac{1}{n(i)} \sum_{j=1}^{n(i)} e^{i6\theta_{ij}}, \quad (10)$$

где θ_{ij} — угол между вектором \mathbf{r}_{ij} , соединяющим i -ю и j -ю частицы, и произвольной осью. Сумма берется по всем ближайшим соседям i -й частицы $n(i)$. Соседи определяются по построению Вороного.

Кроме локального параметра порядка $\Psi_6(\mathbf{r}_i)$ можно ввести еще глобальный параметр ψ_6 , который является средним по системе от $\Psi_6(\mathbf{r}_i)$:

$$\psi_6 = \frac{1}{N} \left\langle \left| \sum_i \Psi_6(\mathbf{r}_i) \right| \right\rangle. \quad (11)$$

Похожим образом определяется и ориентационная корреляционная функция $G_6(r)$ (ОКФ):

$$G_6(r) = \frac{\langle \Psi_6(\mathbf{r})\Psi_6^*(\mathbf{0}) \rangle}{g(r)}, \quad (12)$$

где $\Psi_6(\mathbf{r})$ — локальный ориентационный параметр порядка (10). В гексатической фазе ОКФ спадает по степенному закону: $G_6(r) \propto r^{-\eta_6}$, где $0 \leq \eta_6 \leq 1/4$ [4]. Гексатическая фаза теряет свою стабильность при достижении условия $\eta_6(T_i) = 1/4$.

Можно с достаточной степенью уверенности, опираясь как на эксперимент, так и на компьютерное моделирование [8], утверждать, что системы с дальнедействующим взаимодействием (например, кулоновское или диполь-дипольное взаимодействие, мягкие сферы $1/r^n$ с показателем $n \leq 6$) плавятся в соответствии со сценарием БКТХНЯ.

В то же время стандартный переход первого рода также может реализоваться. Возможный механизм перехода первого рода, вызванного появлением границ зерен и соответствующим резким ростом числа свободных дислокаций, был предложен в работе С. Т. Чуи [9], где было показано, что переход первого рода предшествует плавлению в соответствии со сценарием БКТХНЯ при условии $E_c < 2,84 k_B T_m$, где T_m — температура диссоциации дислокационных пар (1). Кристалл также может плавиться посредством одного перехода первого рода, при котором происходит диссоциация дисклинационных комплексов и появление в системе свободных дисклинаций [3]. При этом энергия ядра дислокации должна быть $E_c < 2,26 k_B T_m$.

Вместе с тем существует еще один возможный сценарий плавления. Как упоминалось выше, при уменьшении энергии ядра топологического дефекта переход БКТ превращается в переход первого рода [3]. В связи с этим возможна ситуация, при

которой кристалл переходит в гексатическую фазу посредством перехода БКТ, а гексатическая фаза переходит в изотропную жидкость посредством перехода первого рода. Возможность такого сценария была продемонстрирована методами компьютерного моделирования для системы твердых дисков в статье Бернарда и Крауса (БК) [10].

2. ПЛАВЛЕНИЕ СИСТЕМЫ МЯГКИХ ДИСКОВ

Рассмотрим плавление системы мягких дисков $U(r) = \epsilon(\sigma/r)^{12}$ (далее используется приведенная плотность $\rho^* = \rho\sigma^2$ и температура $T^* = T/\epsilon$, и звездочка в дальнейших выражениях опускается). Система из 20 000 частиц рассматривалась методом молекулярной динамики в ансамбле NVT (число частиц N , объем V и температура T) с использованием пакета LAMMPS. С учетом скейлинговых соотношений для систем с чисто степенными потенциалами для расчета кривой фазового перехода достаточно получить параметры перехода при одной температуре $T = 1,0$.

Прежде всего рассчитывалось уравнение состояния. Уравнения состояния весьма надежно отражают область сосуществования двух фаз, но не дают информации о сценарии перехода. Для определения точных границ гексатической фазы и кристалла следует использовать подход, связанный с рассмотрением дальнедействующего поведения ориентационных и трансляционных корреляционных функций параметров порядка. В случае переходов первого рода на уравнениях состояния должны наблюдаться петли Майера–Вуда — аналоги петель Ван дер Ваальса, из которых с помощью построения Максвелла можно определить границы перехода. Построение Максвелла дает $\rho_l = 0,998$ для плотности изотропной жидкости при переходе жидкость – гексатическая фаза и $\rho_{lh} = 1,006$ для плотности гексатической фазы. Критическое значение показателя трансляционной корреляционной функции $\eta_T = 1/3$ достигается при $\rho_{sh} = 1,014$. Эта плотность выше, чем плотность перехода первого рода $\rho_{lh} = 1,006$, полученная с помощью построения Максвелла для петли Майера–Вуда. Предел устойчивости гексатической фазы $\eta_6 = 1/4$ достигается при $\rho_h = 1,0$ и находится внутри петли Майера–Вуда. Эти плотности хорошо согласуются с приведенными в [8] величинами ($\rho_l = 0,998$, $\rho_{lh} = 1,005$, $\rho_{sh} = 1,015$). Из представленных результатов видно, что плавление рассматриваемой системы происходит по сценарию БК, т.е. имеет место переход БКТ из кристалла в гексатическую фазу и переход первого рода из гексатической фазы в изотропную жидкость.

Для установления самосогласованности описанных выше подходов определим параметры перехода из кристалла в гексатическую фазу с помощью уравнений ренорм-группы (3) и (4). Из уравнения (5) можно получить поведение недиагональной компоненты тензора напряжений как функции тензора деформации. Оказывается, что для сравнительно высоких плотностей зависимость с высокой точностью линейная, что объясняется тем, что при высоких плотностях имеет место хороший кристалл, который реагирует на сдвиг в соответствии с законом Гука. При понижении плотности и приближении к линии плавления линейная зависимость сохраняется только для небольших деформаций, однако этой области линейности оказывается достаточно для вычисления модуля Юнга (2). Рассчитанная с помощью данного модуля Юнга и уравнения (7) энергия ядра дислокации E_c используется в качестве начального значения для решений уравнений ренормгруппы. Заметим, что данная энергия заметно выше критической энергии ядра дислокации, ниже которой можно

ожидать плавления системы посредством перехода первого рода. Из решений ренормгрупповых уравнений (3) и (4) получено, что переход происходит при плотности $\rho = 1,019811 \approx 1,02$. Это значение хорошо совпадает с полученной из рассмотрения поведения трансляционной корреляционной функции G_T величиной плотности, при которой происходит переход $\rho_{sh} = 1,014$. В [8] для плотности перехода приведено значение $\rho_{HS} = 1,015 \pm 0,005$. Таким образом, расчет, использующий ренормгрупповые уравнения, дает достаточно надежные оценки для параметров перехода, однако этот подход более трудоемкий, нежели использование уравнения состояния и анализ поведения ориентационной и трансляционной корреляционной функций. Вместе с тем бывают ситуации, когда данный подход оказывается необходимым для подтверждения результатов, полученных с помощью более простых методов [11].

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Последовательная микроскопическая теория двумерного плавления в настоящее время отсутствует, в связи с чем возрастает роль компьютерного моделирования. Рассмотренные в статье методы определения параметров и сценариев плавления двумерных систем достаточно эффективны и могут применяться для исследования плавления различных двумерных систем с заданными потенциалами взаимодействия.

Исследование выполнено при поддержке Российского научного фонда (грант № 19-12-00092), <https://rscf.ru/project/19-12-00092/>.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Berezinskii V. L.* Destruction of Long Range Order in One-Dimensional and Two-Dimensional Systems Having a Continuous Symmetry Group. I. Classical Systems // *Sov. Phys. JETP*. 1971. V. 32. P. 493–500.
2. *Kosterlitz J. M., Thouless D. J.* Ordering, Metastability and Phase Transitions in Two-Dimensional Systems // *J. Phys. C: Solid State Phys.* 1973. V. 6. P. 1181–1203.
3. *Ryzhov V. N., Tareyeva E. E., Fomin Y. D., Tsiok E. N.* Berezinskii–Kosterlitz–Thouless Transition and Two-Dimensional Melting // *Phys. Usp.* 2017. V. 60. P. 857–885.
4. *Nelson D. R., Halperin B. I.* Dislocation-Mediated Melting in Two Dimensions // *Phys. Rev. B*. 1979. V. 19. P. 2457–2484.
5. *Young A. P.* Melting and the Vector Coulomb Gas in Two Dimensions // *Ibid.* P. 1855–1866.
6. *Broughton J. Q., Gilmer G. H., Weeks J. D.* Molecular-Dynamics Study of Melting in Two Dimensions. Inverse-Twelfth-Power Interaction // *Phys. Rev. B*. 1982. V. 25. P. 4651.
7. *Sengupta S., Nielaba P., Binder K.* Elastic Moduli, Dislocation Core Energy, and Melting of Hard Disks in Two Dimensions // *Phys. Rev. E*. 2000. V. 61. P. 6294.
8. *Kapfer S. C., Krauth W.* Two-Dimensional Melting: From Liquid-Hexatic Coexistence to Continuous Transitions // *Phys. Rev. Lett.* 2015. V. 114. P. 035702.
9. *Chui S. T.* Grain-Boundary Theory of Melting in Two Dimensions // *Phys. Rev. B*. 1983. V. 28. P. 178–194.
10. *Bernard E. P., Krauth W.* Two-Step Melting in Two Dimensions: First-Order Liquid-Hexatic Transition // *Phys. Rev. Lett.* 2011. V. 107. P. 155704.
11. *Tsiok E. N., Fomin Yu. D., Gaiduk E. A., Ryzhov V. N.* Structural Transition in Two-Dimensional Hertzian Spheres in the Presence of Random Pinning // *Phys. Rev. E*. 2021. V. 103. P. 062612.