

ВЛИЯНИЕ СЛУЧАЙНОГО БЕСПОРЯДКА НА СЦЕНАРИИ ДВУМЕРНОГО ПЛАВЛЕНИЯ

В. Н. Рыжов¹, Е. Е. Тареева, Ю. Д. Фомин, Е. Н. Циок

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

На основе методов компьютерного моделирования исследуется влияние случайного беспорядка на процессы плавления двумерных (2D) систем. Эти процессы в основном описываются с помощью теории фазовых переходов Березинского–Костерлица–Таулеса (БКТ), которая применяется к двумерным системам с непрерывной симметрией. Показано, что случайный беспорядок не оказывает существенного влияния на процесс плавления, если он идет через два непрерывных БКТ-перехода с промежуточной гексатической фазой. Однако если плавление происходит через один переход первого рода, то беспорядок может кардинально изменить его характер. Вместо одного перехода возникает два: первый — это переход БКТ из кристалла в гексатическую фазу, а второй — переход первого рода из гексатической фазы в изотропную жидкость.

The influence of random disorder on the melting processes of two-dimensional systems is investigated using computer modeling methods. These processes are mainly described using the Berezinskii–Kosterlitz–Thouless (BKT) phase transition theory, which is applied to two-dimensional systems with continuous symmetry. The paper shows that random disorder does not significantly affect the melting process if it occurs through two continuous BKT transitions with an intermediate hexatic phase. However, if melting occurs through a single first-order transition, disorder can radically change its nature. Instead of one transition, two occur: the first is a BKT transition from a crystal to a hexatic phase, and the second is a first-order transition from the hexatic phase to an isotropic liquid.

PACS: 44.25.+f; 44.90.+c

1. ВВЕДЕНИЕ. СЦЕНАРИИ ДВУМЕРНОГО ПЛАВЛЕНИЯ

При переходе изотропной жидкости в кристалл происходит нарушение двух симметрий — трансляционной и ориентационной. Ориентационная симметрия соответствует упорядочению в направлениях связей, соединяющих частицу с ее ближайшими соседями. Трансляционный порядок определяет периодическое расположение частиц в кристалле. В трех измерениях в соответствии с теорией Ландау плавление всегда является переходом первого рода [1, 2], однако в двух измерениях сильно развитые флуктуации принципиально меняют характер перехода. Как известно

¹E-mail: ryzhov@hppt.troitsk.ru

(см. обзор [1, 2]), в двух измерениях дальний трансляционный порядок преобразуется в квазидальний со степенным убыванием корреляций. При этом дальний ориентационный порядок в двумерном кристалле сохраняется. Взаимодействие трансляционного и ориентационного порядков приводит к возникновению новых сценариев плавления [1, 2].

Появление теории Березинского–Костерлица–Таулеса послужило мощным толчком для развития теорий 2D-плавления. Согласно теории БКТ, фазовый переход в 2D-системах с непрерывной симметрией происходит в результате диссоциации связанных пар топологических дефектов (вихрей в случае, например, X - Y модели), что приводит к появлению в системе свободных дефектов, разрушающих квазидальний порядок, в результате чего корреляции начинают убывать по экспоненциальному закону. Учитывая, что система вихрей изоморфна двумерному кулоновскому газу [3], можно показать, что переход БКТ является непрерывным переходом бесконечного рода [2, 3]. Переход БКТ может менять характер в зависимости от энергии ядра дефекта: при уменьшении этой энергии переход становится переходом первого рода [1, 3, 4].

В случае 2D-кристаллов роль топологических дефектов играют дислокации и дисклинации. В результате диссоциации дислокационных пар квазидальний трансляционный порядок становится короткодействующим, однако дальний ориентационный порядок при этом преобразуется в квазидальний, который, в свою очередь, превращается в короткодействующий в результате диссоциации дисклинационных пар. Новая фаза с квазидальним ориентационным порядком получила название «гексатической» по аналогии с жидкими кристаллами. В гексатической фазе модуль сдвига μ равен нулю. Таким образом, 2D-кристалл может плавиться посредством двух непрерывных переходов типа БКТ с промежуточной гексатической фазой. Теория, описывающая такой вариант плавления, получила название теории Березинского–Костерлица–Таулеса–Хальперина–Нельсона–Янга (БКТХНЯ) [1, 2].

В кристаллической фазе в пределе $r \rightarrow \infty$ трансляционная корреляционная функция имеет вид $G_T(r) \propto r^{-\eta_T}$, где $\eta_T \leq 1/3$. Неустойчивость кристаллической фазы по отношению к диссоциации дислокационных пар определяется из условия $\eta_T = 1/3$. Точка неустойчивости гексатической фазы определяется из условия $\eta_6(T_i) = 1/4$, где $\eta_6(T_i)$ определяет скорость убывания ориентационной корреляционной функции $G_6(r) \propto r^{-\eta_6}$.

При малых значениях энергии ядра дислокации плавление может происходить посредством одного перехода первого рода. При этом возможными механизмами перехода могут быть как формирование границ зерен, так и диссоциация дисклинационных комплексов и появление в системе свободных дисклинаций [1, 2].

Еще один сценарий был предложен Бернардом и Краусом (БК) [5] на основе компьютерного моделирования системы твердых дисков. В рамках этого сценария плавление может происходить посредством двух переходов, при этом переход кристалл – гексатическая фаза происходит как переход типа БКТ, а гексатическая фаза превращается в изотропную жидкость посредством перехода первого рода.

Способы определения параметров перехода и сценариев 2D-плавления методами компьютерного моделирования подробно обсуждаются в [2, 14]. В рассмотренных далее случаях прежде всего рассчитывалось уравнение состояния. В случае сценария БКТХНЯ кривые уравнения состояния монотонно возрастают с увеличением плотности, в противоположность сценарию БК или переходу первого рода, когда на уравнениях состояния наблюдаются петли Майера–Вуда — аналоги петель Ван дер

Ваальса, из которых с помощью построения Максвелла можно определить область сосуществования двух фаз. В первом случае это гексатическая фаза – изотропная жидкость, во втором — кристалл – изотропная жидкость. Различить два сценария можно из анализа дальнедействующего поведения ориентационной $G_6(r)$ и трансляционной $G_T(r)$ корреляционных функций параметров порядка. Если на уравнении состояния имеется петля и границы устойчивости кристаллической $\eta_T = 1/3$ и гексатической $\eta_6(T_i) = 1/4$ фаз попадают в область петли, система плавится посредством одного перехода первого рода. Сценарий БК реализуется, если граница неустойчивости кристаллической фазы оказывается вне петли, а неустойчивость гексатической фазы оказывается внутри петли.

2. ВЛИЯНИЕ СЛУЧАЙНОГО БЕСПОРЯДКА НА СЦЕНАРИИ ДВУМЕРНОГО ПЛАВЛЕНИЯ

В экспериментах двумерная система обычно реализуется путем адсорбции на твердой подложке, которая вносит замороженный беспорядок из-за некоторой шероховатости или внутренних дефектов. Беспорядок может влиять на сценарии плавления 2D-систем. Как показано в [6–8], сценарий плавления БКТХНЯ сохраняется при наличии слабого беспорядка. В наших работах [9–11,13] методами компьютерного моделирования было проанализировано влияние случайного пиннинга различной природы на ориентационный и трансляционный параметры порядка и показано, что пиннинг практически не влияет на ориентационный порядок, но разрушает трансляционный порядок и существенно понижает температуру перехода кристалл – гексатическая фаза. В результате область существования гексатической фазы расширяется за счет уменьшения области стабильности кристаллической фазы. Более того, в случае перехода первого рода он может превратиться в два перехода — переход БКТ из кристалла в гексатическую фазу и переход первого рода в изотропную жидкость, т.е. плавление

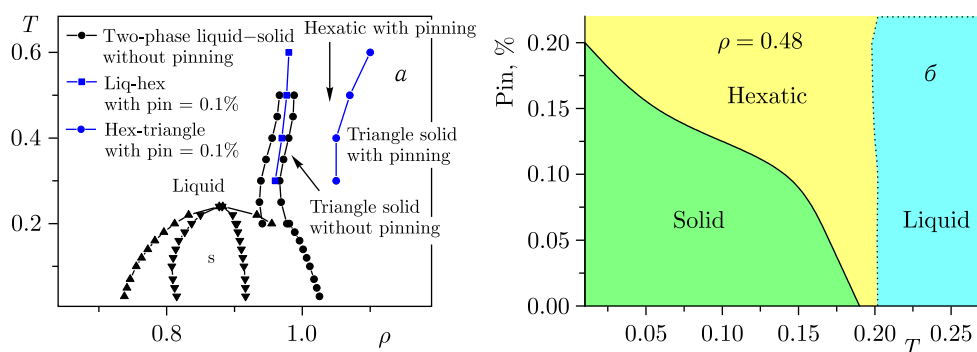


Рис. 1. а) Фазовая диаграмма без случайного пиннинга и при концентрации центров пиннинга в 0,1%. Без пиннинга плавление происходит посредством перехода первого рода, при наличии пиннинга линия неустойчивости гексатической фазы оказывается внутри двухфазной области. Линия неустойчивости треугольного кристалла отодвигается в область высоких плотностей, приводя к формированию гексатической фазы. б) Зависимость фазовой диаграммы от концентрации центров пиннинга в области низких плотностей, где плавление происходит в соответствии со сценарием БКТХНЯ. Видно расширение области гексатической фазы при увеличении концентрации центров пиннинга [9–11]

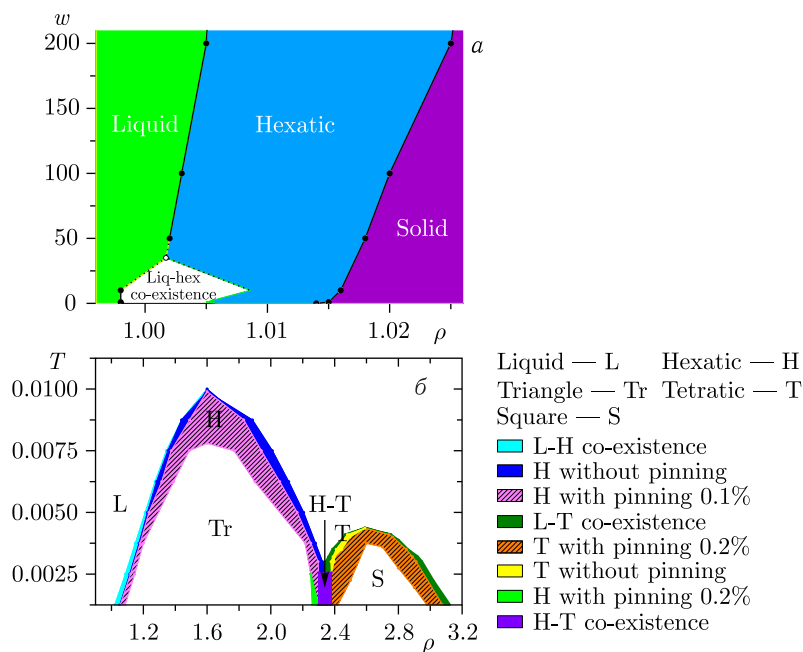


Рис. 2. а) Зависимость сценария плавления системы мягких дисков с потенциалом вида $\varepsilon(\sigma/r)^{12}$ от величины притяжения w . При малых значениях w система плавится в соответствии со сценарием БК, а при увеличении w происходит смена сценария на БКТХНЯ [12]. б) Фазовая диаграмма системы сфер Герца со случайным пиннингом и без пиннинга [13]

ние происходит в соответствии со сценарием БК [9–11]. На рис. 1 показано подобное поведение для системы с потенциалом с отрицательной кривизной в области отталкивания [9, 10].

Гауссовский пиннинг [12], представляющий собой случайно расположенные центры притяжения вида $U_{\text{pin}} = -w e^{-r^2}$, за счет формирования вокруг этих центров более плотных кластеров из частиц может превращать сценарий типа БК в БКТХНЯ (рис. 2, а).

На рис. 2, б представлена фазовая диаграмма системы с деформируемым потенциалом, применяемым для описания поведения коллоидов, — потенциалом Герца [13]. В этом случае в присутствии случайного пиннинга структурный переход первого рода в кристаллической фазе между треугольным и квадратным кристаллами превращается в три перехода: 1) переход треугольного кристалла в гексатическую фазу; 2) переход между гексатической и тетратической фазами; 3) переход из тетратической фазы в квадратный кристалл.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В реальных экспериментах для получения двумерной системы в большинстве случаев используются подложки, которые могут вносить случайный беспорядок в поведение системы. В данной статье показано, что влияние случайного беспорядка способно качественно изменить фазовую диаграмму системы, которая определяется не только

видом потенциала взаимодействия между частицами, но и характером случайного беспорядка, привносимого внешними факторами, что может потребовать специально-го анализа полученных результатов.

Благодарности. Работа выполнена с использованием оборудования Межведомственного суперкомпьютерного центра и центра коллективного пользования «Комплекс моделирования и обработки данных исследовательских установок мега-класса», входящих в состав НИЦ «Курчатовский институт».

Финансирование. Данная работа финансировалась за счет средств бюджета Института физики высоких давлений РАН. Никаких дополнительных грантов на проведение или руководство данным конкретным исследованием получено не было.

Конфликт интересов. Авторы данной работы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. 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.
2. Ryzhov V.N., Gaiduk E.A., Tareyeva E.E., Fomin Yu.D., Tsiok E.N. Melting Scenarios of Two-Dimensional Systems: Possibilities of Computer Simulation // *JETP*. 2023. V. 137. P. 125–150.
3. Minnhagen P. The Two-Dimensional Coulomb Gas, Vortex Unbinding, and Superfluid-Superconducting Films // *Rev. Mod. Phys.* 1987. V. 59. P. 1001.
4. Irz D. Yu., Ryzhov V.N., Tareyeva E.E. First Order Vortex-Unbinding Transition in Thin Superconducting Films // *Phys. Rev. B*. 1996. V. 54. P. 3051.
5. Bernard E.P., Krauth W. Two-Step Melting in Two Dimensions: First-Order Liquid–Hexatic Transition // *Phys. Rev. Lett.* 2011. V. 107. P. 155704.
6. Nelson D.R. Reentrant Melting in Solid Films with Quenched Random Impurities // *Phys. Rev. B*. 1983. V. 27. P. 2902.
7. Cha Min-Chul, Fertig H.A. Disorder-Induced Phase Transitions in Two-Dimensional Crystals // *Phys. Rev. Lett.* 1995. V. 74. P. 4867.
8. Herrera-Velarde S., von Grunberg H.H. Disorder-Induced vs Temperature-Induced Melting of Two-Dimensional Colloidal Crystals // *Soft Matter*. 2009. V. 5. P. 391–399.
9. Tsiok E.N., Dudalov D.E., Fomin Yu.D., Ryzhov V.N. Random Pinning Changes the Melting Scenario of a Two-Dimensional Core-Softened Potential System // *Phys. Rev. E*. 2015. V. 92. P. 032110.
10. Tsiok E.N., Fomin Yu.D., Ryzhov V.N. Random Pinning Elucidates the Nature of Melting Transition in Two-Dimensional Core-Softened Potential System // *Physica A*. 2018. V. 490. P. 819–827.
11. Gaiduk E.A., Fomin Yu.D., Tsiok E.N., Ryzhov V.N. The Influence of Random Pinning on the Melting Scenario of Two-Dimensional Soft-Disk Systems // *Molec. Phys.* 2019. V. 117. P. 2910–2919.
12. Fomin Yu.D., Gaiduk E.A., Tsiok E.N., Ryzhov V.N. The Influence of Gaussian Pinning on the Melting Scenario of a Two-Dimensional Soft-Disk System: First-Order versus Continuous Transition // *Physica A*. 2024. V. 644. P. 129841.
13. 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.
14. Ryzhov V.N., Gaiduk E.A., Fomin Yu.D., Tsiok E.N. Self-Organization of Two-Dimensional Systems: The Role of Translational and Orientational Order Parameters // *Phys. Part. Nucl. Lett.* 2023. V. 20. P. 1124–1127.

Получено 31 октября 2024 г.