Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

Л. М. Помирчи, В. Н. Рыжов, Е. Е. Тареева, Плавление двумерных систем: зависимость рода перехода от радиуса потенциала, *ТМФ*, 2002, том 130, номер 1, 119–130

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf294>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением

<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 3.89.197.203

26 апреля 2023 г., 15:17:39

© 2002 г. Л. М. Помирчи*, В. Н. Рыжов*, Е. Е. Тареева*

ПЛАВЛЕНИЕ ДВУМЕРНЫХ СИСТЕМ: ЗАВИСИМОСТЬ РОДА ПЕРЕХОДА ОТ РАДИУСА ПОТЕНЦИАЛА

В рамках теории двумерного плавления, базирующейся на методе функционала плотности, а также с помощью компьютерного моделирования методом Монте-Карло рассмотрено плавление двумерной системы твердых дисков с потенциалом притяжения в виде прямоугольной ямы. Показано, что в зависимости от радиуса притяжения плавление может происходить как посредством одного перехода первого рода, так и непрерывным образом в соответствии с теорией Костерлица–Таулеса–Гальперина–Нельсона–Янга.

После появления теории плавления двумерных систем Костерлица–Таулеса–Гальперина–Нельсона–Янга [1]–[3] (теория КТНУ) природа двумерного плавления вот уже более 20 лет является предметом интенсивного обсуждения [4]. Согласно предсказаниям теории КТНУ в случае двух измерений переход может принципиально отличаться от обычного трехмерного плавления посредством перехода первого рода. Сценарий, предложенный в работах [1]–[3], предполагает, что переход между кристаллом и изотропной жидкостью может происходить посредством двух непрерывных фазовых переходов. Первый из этих переходов соответствует разрушению квазидальнего трансляционного порядка через диссоциацию дислокационных пар. Вместе с тем в результате этого перехода в системе сохраняется квазидальний порядок в ориентациях локальных кристаллографических осей (ориентационный порядок). Состояние системы с квазидальним ориентационным порядком называется гексатической фазой. Гексатическая фаза обладает нулевым модулем сдвига (т.е. является жидкостью) и переходит в изотропную жидкость в результате диссоциации дисклинационных пар посредством непрерывного фазового перехода.

Ряд экспериментальных результатов был интерпретирован в рамках теории КТНУ. В качестве примера можно назвать исследование поведения системы электронов на поверхности жидкого гелия [5], [6], а также двумерных заряженных коллоидных систем [7], [8].

Вместе с тем плавление двумерной системы может происходить и посредством одного перехода первого рода аналогично тому, как это происходит в случае трех измерений. Возможные механизмы подобного плавления рассматривались в работах [9]–[11],

*Институт физики высоких давлений РАН, г. Троицк, Московская область, Россия

где было показано, что в рамках феноменологических теорий сценарий плавления в значительной степени определяется величиной энергии ядра дислокации.

С момента появления теории КТННУ предпринимались многочисленные попытки проверить ее предсказания методами компьютерного моделирования [4], однако достоверность полученных результатов вызывает определенные сомнения: даже похожие методы моделирования, применяемые разными авторами к одинаковым системам, часто приводят к взаимоисключающим результатам. Связано это в первую очередь с наличием двух корреляционных длин (ориентационной и трансляционной), которые в окрестности непрерывного перехода становятся очень большими, что приводит к неверным результатам для конечных систем. Аналогично время релаксации резко возрастает, что затрудняет достижение термодинамического равновесия и также ведет к серьезным ошибкам. Даже для системы с простейшим потенциалом твердых дисков с помощью моделирования не удалось прийти к однозначным выводам о роде перехода: в то время как большинство авторов считает, что двумерная система твердых дисков плавится посредством перехода первого рода (см., например, [12]–[14]), в работах [15], [16] утверждается, что плавление происходит посредством одного непрерывного перехода, а в [17] получено согласие с предсказаниями теории КТННУ.

Не менее противоречивая ситуация сложилась с моделированием систем с непрерывными потенциалами вида $1/r^n$ [4], [18], [19]. В настоящее время можно считать достаточно обоснованным утверждение о том, что система с дальнодействующим потенциалом $1/r$ (описывающая систему электронов на поверхности гелия) плавится посредством двух непрерывных переходов. Однако встречавшееся в ранних работах [4], [18] утверждение о том, что при $n \geq 3$ плавление происходит посредством перехода первого рода, опровергается более поздними работами [19], в которых показано, что система с потенциалом $1/r^{12}$ плавится по сценарию, согласующемуся с теорией КТННУ.

В связи с этим большой интерес представляет теоретическое изучение моделей, в которых изменение параметров взаимодействия приводит к изменению типа перехода. Заметим, что практически единственной систематической попыткой изучения подобной зависимости был цикл работ Лозовика с соавторами [20], в которых методом самосогласованных фононов для ангармонизмов 3-го и 4-го порядков рассматривалась устойчивость кристаллических решеток с потенциалами взаимодействия вида $1/r^n$. При этом было показано, что при $n \leq 2$ выполняется критерий Костерлица–Таулеса для образования свободных дислокаций. В то же время для более жестких потенциалов решение уравнения, описывающего неустойчивость по отношению к образованию свободных дислокаций, отсутствует, в связи с чем авторы делают вывод о большей вероятности сценария плавления посредством перехода первого рода. Однако, с одной стороны, применимость используемого в [20] метода ухудшается с ростом n , с другой – авторы не учитывают перенормировку модуля сдвига за счет связанных дислокационных пар, что в принципе может привести к возникновению неустойчивости. Именно этим можно объяснить расхождение полученных в [20] результатов с более поздним компьютерным моделированием системы с потенциалом $1/r^{12}$.

В наших предыдущих работах [21], [22] был предложен подход к описанию плавления двумерных систем, базирующийся на методе функционала плотности в теории кристаллизации. Было показано, что системы с “мягкими” потенциалами вида $1/r$ плавятся

посредством двух непрерывных переходов, в то время как система твердых дисков плавится в результате перехода первого рода. Более того, удалось показать, что для потенциала вида e^{-kr}/r плавление осуществляется в соответствии со сценарием КТНУ при любом радиусе взаимодействия $1/k$, т.е. переход первого рода можно ожидать только в случае сингулярных отталкивательных потенциалов типа потенциала твердых дисков.

В данной статье предпринята попытка анализа плавления модельной системы с потенциалом взаимодействия твердых дисков, к которому добавлено притяжение в виде прямоугольной ямы

$$U(r) = \begin{cases} \infty, & r \leq d, \\ -\varepsilon, & d < r \leq h, \\ 0, & r > h. \end{cases} \quad (1)$$

Здесь d – диаметр твердого диска, ε – глубина притягивающего потенциала и h – радиус притягивающей части.

В рамках рассмотренной модели показано, что в зависимости от величины отношения h/d плавление может происходить как посредством перехода первого рода, так и через непрерывный переход, при этом зависимость сценария плавления от величины h/d имеет простую физическую интерпретацию.

Прежде чем перейти к подробному описанию результатов рассмотрим простую качественную картину двумерного плавления в рамках теории фазовых переходов Ландау. Для этого определим соответствующий параметр порядка.

В идеальном кристалле одночастичная функция распределения имеет симметрию кристаллической решетки. При нулевой температуре $T = 0$ локальная плотность системы, пропорциональная одночастичной функции распределения, имеет симметрию двумерной кристаллической решетки и может быть разложена в ряд Фурье по векторам обратной решетки $\mathbf{G}$, при этом коэффициенты Фурье являются параметрами порядка для перехода жидкость – кристалл. При $T \neq 0$ дальний трансляционный порядок размывается тепловыми флуктуациями, однако для достаточно низких температур разложение в ряд Фурье сохраняется, но коэффициенты Фурье приобретают зависимость от $\mathbf{r}$:

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} \rho_{\mathbf{G}}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{G}\mathbf{r}}. \quad (2)$$

Параметры порядка $\rho_{\mathbf{G}}(\mathbf{r})$ слабо меняются на расстояниях порядка G^{-1} и имеют амплитуду и фазу

$$\rho_{\mathbf{G}}(\mathbf{r}) = \rho_{\mathbf{G}} e^{i\mathbf{G}\mathbf{u}(\mathbf{r})}. \quad (3)$$

Здесь $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ имеет смысл поля смещений в кристалле. В двух измерениях наиболее сильно флуктуирует фаза параметра порядка [23], поэтому флуктуации модуля мы в дальнейшем рассматривать не будем. Поле смещений можно разложить на две части, одна из которых плавно меняется и соответствует фононному полю, в то время как вторая является сингулярной и соответствует дислокациям и дисклинациям.

Параметр порядка f_6 , описывающий гексатическую фазу, определяется с помощью фурье-преобразования условной двухчастичной функции распределения [22] и соответствует возникновению выделенных направлений в ориентациях векторов, соединяющих

некоторую частицу с ее ближайшим окружением. Сингулярные флуктуации фазы параметра f_6 соответствуют дисклинациям.

Разложение Ландау свободной энергии, учитывающее длинноволновые флуктуации параметров порядка, может быть записано в виде

$$F = \frac{1}{2} \int \sum_{\mathbf{G}} [A |\mathbf{G} \times \nabla \rho_{\mathbf{G}}|^2 + B |\mathbf{G} \cdot \nabla \rho_{\mathbf{G}}|^2 + C |\rho_{\mathbf{G}} (\mathbf{G} \cdot \nabla) \rho_{\mathbf{G}}|] d^2 r + \\ + \frac{1}{2} a_T \sum_{\mathbf{G}} |\rho_{\mathbf{G}}|^2 + b_T \sum_{\mathbf{G}_1 + \mathbf{G}_2 + \mathbf{G}_3 = 0} \rho_{\mathbf{G}_1} \rho_{\mathbf{G}_2} \rho_{\mathbf{G}_3} + O(\rho^4). \quad (4)$$

При подстановке (3) в (4) легко видеть, что первый член в разложении (4) представляет собой свободную энергию деформированного тела, при этом коэффициенты Ламэ μ и λ оказываются функциями параметров A, B, C и пропорциональны квадрату модуля параметра порядка (2).

Используя разложение (4), мы можем описать плавление следующим образом. При $T = 0$ в системе существуют дальние трансляционный и ориентационный порядки. При $T > 0$ дальний трансляционный порядок в системе разрушается плавными флуктуациями фазы и превращается в квазидальний порядок, характеризующий медленным степенным убыванием корреляционной функции параметра порядка, при этом дальний ориентационный порядок в системе сохраняется и модуль сдвига $\mu \neq 0$. При повышении температуры в системе появляются свободные дислокации, соответствующие сингулярным флуктуациям (вихрям) фазы параметра порядка. Появление свободных дислокаций приводит к тому, что система перестает оказывать сопротивление сдвигу ($\mu = 0$), т.е. система становится жидкостью. Температура T_m , при которой появляются свободные дислокации, определяется параметрами первого члена в разложении (4) и является температурой плавления. Следует подчеркнуть, что модуль параметра порядка $\rho_{\mathbf{G}}$ определяется из условия минимума разложения (4) (без учета первого члена) и при температуре T_m не обращается в нуль, а квазидальний порядок в системе разрушают сингулярные флуктуации фазы параметра порядка. Модуль параметра порядка становится равным нулю при некоторой температуре T_{MF} , которая может быть определена из условия равенства свободных энергий жидкой и твердой фаз как функционалов параметра порядка (или локальной плотности). В терминах разложения (4) уравнение $a_T = 0$ соответствует линии абсолютной неустойчивости жидкой фазы. Температура T_{MF} соответствует переходу в приближении среднего поля. Возможны два случая:

- 1) $T_m < T_{MF}$, система плавится посредством двух непрерывных переходов типа Костерлица–Таулеса при диссоциации дислокационных пар;
- 2) $T_{MF} < T_m$, система плавится посредством перехода первого рода в силу наличия членов 3-го порядка в разложении (4).

Для количественного анализа поведения системы, описываемой потенциалом (1), воспользуемся методом функционала плотности в теории кристаллизации [24]–[26]. Достаточно простой и точный вариант этого метода – приближение эффективной жидкости [26] – был применен в наших работах [21], [22] для описания кристаллизации двумерных систем. Фактически приближение эффективной жидкости представляет собой

вариационный подход к вычислению свободной энергии твердого тела как функционала локальной плотности $\rho(\mathbf{r})$. В этом приближении разность свободных энергий ΔF твердого тела и жидкости, имеющих одинаковую плотность, имеет вид ($\beta = 1/k_B T$):

$$\beta \Delta F = \int d\mathbf{r} \rho(\mathbf{r}) \ln \left[\frac{\rho(\mathbf{r})}{\rho} \right] - \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' c^{(2)}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|; \hat{\rho}_{\text{ELA}}[\rho]) [\rho(\mathbf{r}) - \rho] [\rho(\mathbf{r}') - \rho], \quad (5)$$

где $c^{(2)}(r; \hat{\rho}_{\text{ELA}})$ – парная прямая корреляционная функция “эффективной” жидкости с плотностью $\hat{\rho}_{\text{ELA}}$, которая соответствует твердому телу со средней плотностью ρ . При этом эффективная плотность $\hat{\rho}_{\text{ELA}}$ выбирается таким образом, чтобы прямая корреляционная функция (структурный фактор) эффективной жидкости наилучшим образом моделировала прямую корреляционную функцию твердого тела. Для этого $\hat{\rho}_{\text{ELA}}$ определяется из условия совпадения положения первого пика статического структурного фактора эффективной жидкости с наименьшим вектором обратной решетки твердого тела со средней плотностью ρ . Заметим, что уравнение (5) представляет собой обобщение разложения (4), учитывающее бесконечное число членов разложения.

В большинстве современных приложений метода функционала плотности [24] используется представление локальной плотности $\rho(\mathbf{r})$ как суммы по решетке,

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^N \varphi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i), \quad (6)$$

где функция $\varphi(\mathbf{r})$ описывает распределение плотности в окрестности узла $\mathbf{R}_i$ и выбирается в виде сферически симметричного гауссовского распределения, т.е.

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^N \frac{\alpha}{\pi} \exp[-\alpha(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)^2]. \quad (7)$$

Эта функция хорошо согласуется с одночастичной плотностью, полученной в компьютерном моделировании даже для сильно ангармонической системы твердых дисков. Параметр α является параметром локализации: случай $\alpha = 0$ соответствует пределу однородной изотропной жидкости, увеличение α соответствует возрастанию локализации частиц относительно узлов решетки. Совершая преобразование Фурье уравнения (7), получаем выражение для модуля параметра порядка

$$\rho_{\mathbf{G}} = \rho \exp \left(-\frac{G^2}{4\alpha} \right).$$

Параметр локализации α определяется из условия локального минимума ΔF по отношению к α , при этом температура T_{MF} определяется из условия $\Delta F = 0$ при α , соответствующем минимуму свободной энергии.

Для определения температуры T_m воспользуемся критерием КТНУ [1]–[3], который определяет неустойчивость системы по отношению к образованию свободных дислокаций,

$$K(T_m) = \frac{a_0^2}{k_B T_m} \frac{4\mu(T_m)(\mu(T_m) + \lambda(T_m))}{2\mu(T_m) + \lambda(T_m)} = 16\pi, \quad (8)$$

где $\mu(T)$ и $\lambda(T)$ – коэффициенты Ламэ, a_0 – постоянная решетки, $a_0^2 = 2/(\sqrt{3}\rho)$ для треугольной решетки.

Выражения для коэффициентов Ламэ в рамках метода функционала плотности были получены ранее и имеют вид [21], [22], [27]

$$\mu = \frac{k_B T}{16\rho} \sum_G \rho_G^2 m_G G^2 (\gamma_G + 2\delta_G), \quad (9)$$

$$\lambda = \frac{k_B T}{16\rho} \sum_G \rho_G^2 m_G G^2 (\gamma_G - 6\delta_G) + k_B T \rho (1 - \rho \tilde{c}^{(2)}(0)), \quad (10)$$

где

$$\begin{aligned} \gamma_G &= 2\pi\rho \int r^3 dr c^{(2)}(r; \hat{\rho}) J_0(Gr), \\ \delta_G &= 2\pi\rho \int r^3 dr c^{(2)}(r; \hat{\rho}) J_1(Gr)/(Gr), \end{aligned}$$

$J_0(x)$ и $J_1(x)$ – функции Бесселя, m_G – число векторов обратной решетки, имеющих одинаковую длину, $\tilde{c}^{(2)}(q)$ – фурье-образ прямой корреляционной функции.

Для проведения конкретных вычислений необходимо выражение для прямой корреляционной функции с потенциалом (1). Мы воспользуемся предложенным в наших предыдущих работах [21], [22] приближением

$$c^{(2)}(r, \rho) \approx \begin{cases} c_{\text{HS}}^{(2)}(r, \rho), & r \leq d, \\ \frac{\varepsilon}{k_B T}, & d < r \leq h, \\ 0, & r > h. \end{cases} \quad (11)$$

Здесь $c_{\text{HS}}^{(2)}(r, \rho)$ – прямая корреляционная функция системы твердых дисков диаметра d , член $\varepsilon/k_B T$ качественно учитывает наличие притягивающей части в потенциале (1). В качестве $c_{\text{HS}}^{(2)}(r'; \rho)$ мы используем приближенное аналитическое выражение, полученное в работах [28], [29]

$$\begin{aligned} c_{\text{HS}}^{(2)}(x; \eta) &= - \left[\frac{\partial}{\partial \eta} (\eta Z(\eta)) \right] \Theta(1-x) \left\{ 1 - a^2 \eta + \frac{2}{\pi} a^2 \eta \left[\arccos \frac{x}{a} - \frac{x}{a} \left(1 - \frac{x^2}{a^2} \right)^{\frac{1}{2}} \right] \right\}, \\ Z(\eta) &= \frac{1 + c_2 \eta^2}{(1 - \eta)^2}, \quad a = \frac{2 + \eta \alpha_2(\eta)}{1 + \eta + \eta \alpha_2(\eta)}, \end{aligned}$$

Рис. 1

Рис. 2

где $c_2 = 0.128$; $\alpha_2(\eta) = -0.2836 + 0.2733\eta$; $\eta = \pi\rho d^2/4$.

На рис. 1 представлена зависимость приведенной плотности плавления ρ_m , полученная из уравнения $\Delta F = 0$ для треугольной решетки, как функция радиуса потенциала h (в единицах d) при $\epsilon/k_B T = 0.25$ (пунктирная линия), $\epsilon/k_B T = 0.4$ (штриховая линия), $\epsilon/k_B T = 0.5$ (сплошная линия).

На рис. 2 наряду со сплошной линией, описывающей решения уравнения $\Delta F = 0$ при $\epsilon/k_B T = 0.5$, штриховой линией представлено решение уравнения (8), полученное с ис-

пользованием уравнений (9), (10) без учета перенормировки, штрих-пунктирная линия — линия непрерывного перехода с учетом перенормировки за счет связанных дислокационных пар. Треугольниками показаны точки перехода первого рода, вычисленные методом Монте-Карло (см. ниже). Области, в которых штриховая и штрих-пунктирная линии расположены ниже сплошной, соответствуют диссоциации дислокационных пар в неустойчивом твердом теле, свободная энергия которого выше свободной энергии жидкости, имеющей ту же плотность. Заметим, что даже в метастабильной области существуют значения h , при которых уравнение (8) не имеет решений. В частности, это имеет место для твердых дисков ($h = 1$), для которых плавление всегда происходит посредством перехода первого рода (это было отмечено в наших предыдущих работах [21], [22]). Система плавится посредством двух непрерывных переходов в областях значений h , где кривые, полученные из уравнения (8), расположены выше сплошной кривой. Заметим, что учет перенормировки коэффициентов Ламэ за счет связанных дислокационных пар, которую можно оценить с помощью уравнений ренормгруппы, полученных Гальпериным и Нельсоном [2], приводит к расширению области непрерывного перехода. Положение кривой неустойчивости в этом случае зависит от величины энергии ядра дислокации, которая в нашем случае неизвестна. Штрих-пунктирной линией на рис. 2 показана линия диссоциации дислокационных пар, полученная в предположении, что энергия ядра дислокации может быть записана в виде $E_c = cK/16\pi$ при $c = 3$. Как было показано ранее, это значение дает правильный порядок E_c [21], [22].

С повышением температуры (уменьшением отношения $\varepsilon/k_B T$) линия перехода первого рода (в области минимумов кривых на рис. 1) повышается, что приводит к возникновению критической температуры, выше которой область непрерывных переходов исчезает. Без учета перенормировки коэффициентов Ламэ критическое значение $\varepsilon/k_B T \approx 0.24$. Существование критической температуры объясняется тем, что при повышении температуры свойства системы приближаются к свойствам системы твердых дисков, в которой плавление происходит посредством перехода первого рода.

Немонотонный (“косинусоидальный”) характер зависимости плотности перехода ρ_m от h легко объясняется свойствами притягивающей части потенциала. Действительно, включение притяжения понижает энергию и стабилизирует кристалл, что приводит к понижению плотности, при которой наступает плавление. Однако при $h \geq 1.5$ частицы из ближайшего окружения выделенной частицы оказываются в положении “безразличного равновесия” из-за того, что притягивающая часть потенциала постоянна. Это приводит к увеличению плотности перехода, так как кристалл стабилизируется только при более высоких плотностях. Этим объясняется наличие максимума на зависимости ρ_m от h при $h \approx 1.6 \div 1.9$. В свою очередь при $h \geq 2.0$ в область притяжения попадают частицы из второй координационной сферы, что снова приводит к стабилизации кристалла и понижению плотности плавления. Заметим, что в областях максимумов на кривой $\rho_m(h)$ приведенная плотность кристалла настолько велика, что возникновение свободной дислокации в нем, по-видимому, невозможно. Это приводит к тому, что потеря устойчивости кристаллов происходит посредством перехода первого рода. С другой стороны, в области минимумов $\rho_m(h)$ кристалл становится более “рыхлым”, что приводит к возможности возникновения свободной дислокации без кардинального разрушения упорядоченности в системе (сохранению квазидальнего ориентационного порядка),

т.е. образованию гексатической фазы посредством непрерывного перехода.

Для проверки описанной выше картины двумерного плавления нами было проведено компьютерное моделирование методом Монте-Карло системы, описываемой потенциалом (1). Для того чтобы определить характер перехода для различных значений h , было вычислено значение критического показателя η как функции плотности. Критический индекс η характеризует спадание корреляционной функции плотность–плотность в кристаллической фазе

$$g_G(R) = \langle \rho_{\mathbf{G}}(\mathbf{R}) \rho_{\mathbf{G}}(\mathbf{0}) \rangle \propto R^{-\eta}. \quad (12)$$

Поведение, описываемое уравнением (12), характерно для системы с квазидальним трансляционным порядком. Мы предполагаем, что в случае если плавление происходит посредством перехода первого рода, то величина η претерпевает скачок при пересечении линии перехода. С другой стороны, в случае перехода кристалл – гексатическая фаза структура системы меняется плавно, что приводит к отсутствию скачка η . Подчеркнем, что, строго говоря, в жидкой или гексатической фазе корреляционная функция (12) приобретает экспоненциальную асимптотику $g_G(r) \propto \exp(-r/\xi)$ с корреляционной длиной ξ , однако вблизи от точки перехода $g_G(r)$ может быть аппроксимирована с достаточной точностью степенной функцией (12).

Как уже упоминалось, моделирование системы в окрестности точки перехода осложняется критическим замедлением релаксационных процессов. Однако в последнее время был предложен метод [16], [30]–[32], который позволяет определить критический индекс из рассмотрения коротковременной динамики системы. Суть метода состоит в том, что релаксация параметра порядка на коротких временах происходит по универсальному закону, который устанавливается после некоторого времени $t_{\min}$, в течение которого релаксируют хаотические неуниверсальные процессы [30].

Трансляционный порядок в системе будем характеризовать параметром [16]

$$\psi_{\text{pos}}^2 = \left| \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N e^{i\mathbf{G}\mathbf{r}_i} \right|^2, \quad (13)$$

где $\mathbf{G}$ – вектор обратной решетки. Временная зависимость параметра порядка на начальном этапе эволюции достаточно большой системы из полностью упорядоченного состояния определяется степенным законом [16]

$$\psi_{\text{pos}}^2 \propto t^{-\frac{\eta}{z}}, \quad (14)$$

где z – динамический критический индекс. Для определения индекса z используется зависящий от времени кумулянт [16], [33]

$$U(t) = \frac{\langle \psi_{\text{pos}}^4(t) \rangle}{\langle \psi_{\text{pos}}^2 \rangle^2} - 1, \quad (15)$$

поведение которого для достаточно больших систем имеет вид

$$U(t) \propto t^{\frac{D}{z}}, \quad (16)$$

где D – размерность системы.

Из уравнений (14) и (16) можно определить критические индексы η и z .

Вычисления проводились методом Монте-Карло по схеме Метрополиса в NVT -ансамбле, т.е. при постоянных температуре, объеме (плотности) и числе частиц. Число частиц $N = 4012$. Ячейка Монте-Карло имела почти квадратную форму с периодическими граничными условиями. Вычисления проводились для двух значений вектора обратной решетки, в качестве результата бралась полусумма полученных величин. За единицу времени бралось 10^5 шагов Монте-Карло, т.е. приблизительно 25 проходов, где шаг определен как одно смещение одной частицы, а проход приблизительно соответствует одному смещению каждой частицы в системе. Результаты моделирования показывают, что такого числа проходов достаточно для исключения области неуниверсального поведения релаксации системы. Для определения критических индексов η и z строились зависимости $\psi_{\text{pos}}^2(t)$ и $U(t)$ как функций $\ln t$. Из наклона прямых, проведенных по методу наименьших квадратов, определялись индексы η и z .

На рис. 3 показано поведение показателя η как функции плотности при $\varepsilon/k_B T = 0.5$ для трех значений радиуса притяжения: $h = 1.1$, $h = 1.3$ и $h = 1.85$. Из рисунка видно, что для $h = 1.1$ и $h = 1.85$ индекс η претерпевает скачок, в то время как при $h = 1.3$ он ведет себя непрерывным образом. Как уже упоминалось, мы интерпретируем скачки как фазовые переходы первого рода. На рис. 2 треугольниками показаны точки, в которых мы обнаружили скачки показателя η . Мы предполагаем, что в областях, в которых эти точки отсутствуют, плавление происходит посредством непрерывного перехода.

Отсутствие точек в области слева от $h \approx 1.7$ связано с тем, что здесь не удалось достичь универсальной релаксации системы. Это может быть связано с существованием при этих значениях h нескольких квазикристаллических структур, имеющих близкую энергию [34].

К сожалению, в рамках метода коротковременной динамики очень сложно определить значения плотности плавления в точке непрерывного перехода (что характерно для систем с переходом типа Костерлица–Таулеса [35], хотя грубую оценку можно получить, если вспомнить, что согласно теории КТНУ в точке перехода $1/4 \leq \eta \leq 1/3$). Значение плотности в точке непрерывного перехода можно получить, используя метод конечно-размерного масштабирования [13], [16], [19], однако использование этого метода превышает наши вычислительные возможности.

В целом, из рассмотрения рис. 2 и 3 можно заключить, что моделирование качественно подтверждает физическую картину плавления двумерной системы с потенциалом (1), которая была получена с помощью теории двумерного плавления, базирующейся на методе функционала плотности. Вместе с тем применимость метода коротковременной динамики для описания переходов первого рода еще недостаточно изучена [36], и необходимы дальнейшие исследования в этом направлении. Однако даже если метод неприменим в полной мере для детального количественного описания перехода первого рода, появление скачков на рис. 3 с высокой степенью достоверности указывает на изменение характера перехода с непрерывного, согласующегося со сценарием КТНУ, на переход первого рода.

Итак, в работе впервые показано, что сценарий двумерного плавления в системе твердых дисков с прямоугольным потенциалом притяжения (1) определяется радиусом при-

Рис. 3

тягивающей части потенциала. Если ширина притягивающей части потенциала равна нулю (система твердых дисков), плавление происходит как переход первого рода. При увеличении радиуса притяжения переход первого рода сменяется непрерывным переходом типа Костерлица–Таулеса. Однако при дальнейшем увеличении радиуса потенциала снова наблюдается переход первого рода. При увеличении ширины притягивающей части настолько, что в область притяжения начинают попадать частицы из второй координационной сферы, плавление опять происходит посредством двух непрерывных переходов.

Благодарности. Авторы благодарны С. М. Стишову, В. В. Бражкину и К. Биндеру за интерес к работе и ценные обсуждения. Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 98-02-16805).

Список литературы

- [1] *M. Kosterlitz, D. J. Thouless.* J. Phys. C. 1973. V. 6. P. 1181.
- [2] *B. I. Halperin, D. R. Nelson.* Phys. Rev. Lett. 1978. V. 41. P. 121; *D. R. Nelson, B. I. Halperin.* Phys. Rev. B. 1979. V. 19. P. 2457.
- [3] *A. P. Young.* Phys. Rev. B. 1979. V. 19. P. 1855.
- [4] *K. J. Strandburg.* Rev. Mod. Phys. 1988. V. 60. P. 161.
- [5] *C. C. Grimes, G. Adams.* Phys. Rev. Lett. 1979. V. 42. P. 795.
- [6] *R. Mehrotra, B. M. Guenin, A. J. Dahm.* Phys. Rev. Lett. 1982. V. 48. P. 641; *F. Gallet, G. Deville, A. Valdes, F. I. Williams.* ibid. 1982. V. 49. P. 212; *G. Deville, A. Valdes, E. Y. Andrei, F. I. Williams.* ibid. 1984. V. 53. P. 588; *R. Mehrotra, C. J. Guo, Y. Z. Ruan, D. B. Mast, A. J. Dahm.* Phys. Rev. B. 1984. V. 29. P. 5239; *M. A. Stan, A. J. Dahm.* Phys. Rev. B. 1989. V. 40. P. 8995.
- [7] *C. A. Murray, D. H. Van Winkle.* Phys. Rev. Lett. 1987. V. 58. P. 1200.
- [8] *R. E. Kusner, J. A. Mann, A. J. Dahm.* Phys. Rev. B. 1995. V. 51. P. 5746.
- [9] *S. T. Chui.* Phys. Rev. B. 1983. V. 28. P. 178.
- [10] *H. Kleinert.* Phys. Lett. A. 1983. V. 95. P. 381; *W. Janke, H. Kleinert.* Phys. Rev. B. 1990. V. 41. P. 6848.
- [11] *В. Н. Рыжов.* ТМФ. 1991. Т. 88. С. 449; *В. Н. Рыжов.* ЖЭТФ. 1991. Т. 100. С. 1627.
- [12] *B. J. Alder, T. E. Wainright.* Phys. Rev. 1962. V. 127. P. 359; *W. G. Hoover, F. H. Ree.* J. Chem. Phys. 1968. V. 49. P. 3609.
- [13] *J. Lee, K. J. Strandburg.* Phys. Rev. B. 1992. V. 46. P. 11190.
- [14] *H. Weber, D. Marx, K. Binder.* Phys. Rev. B. 1995. V. 51. P. 14636.
- [15] *J. F. Fernandez, J. J. Alonso, J. Stankiewicz.* Phys. Rev. Lett. 1995. V. 75. P. 3477; *Phys. Rev. E.* 1997. V. 55. P. 750.
- [16] *A. Jaster.* Phys. Lett. A. 1999. V. 258. P. 59.
- [17] *A. Jaster.* Europhys. Lett. 1998. V. 42. P. 277.
- [18] *В. М. Беданов, Г. В. Гадуак, Ю. Е. Лозовик.* ЖЭТФ. 1985. Т. 88. С. 1622.
- [19] *K. Bagchi, H. C. Andersen, W. Swope.* Phys. Rev. Lett. 1996. V. 76. P. 255; *Phys. Rev. E.* 1996. V. 53. P. 3794.
- [20] *Yu. E. Lozovik, V. M. Farztdinov.* Solid State Commun. 1985. V. 54. P. 725; *Yu. E. Lozovik, V. M. Farztdinov, B. Abdullaev, S. A. Kuchеров.* Phys. Lett. A. 1985. V. 112. P. 61.
- [21] *V. N. Ryzhov, E. E. Tareeva.* Phys. Rev. B. 1995. V. 51. P. 8789.
- [22] *В. Н. Рыжов, Е. Е. Тареева.* ЖЭТФ. 1995. Т. 108. С. 2044.
- [23] *А. З. Паташинский, В. Л. Покровский.* Флуктуационная теория фазовых переходов. М.: Наука, 1982.
- [24] *T. V. Ramakrishnan, M. Yussouff.* Phys. Rev. B. 1979. V. 19. P. 2775; *В. Н. Рыжов.* ТМФ. 1983. Т. 55. С. 128; *A. D. J. Haymet, D. W. Oxtoby.* J. Chem. Phys. 1981. V. 74. P. 2559.
- [25] *M. Baus.* J. Phys.: Condens. Matter. 1990. V. 2. P. 2111; *Y. Singh.* Phys. Rep. 1991. V. 207. P. 351.
- [26] *M. Baus, J. L. Colot.* Mol. Phys. 1985. V. 55. P. 653; *J. L. Colot, M. Baus.* ibid. 1985. V. 56. P. 807; *J. L. Colot, M. Baus, H. Xu.* ibid. 1986. V. 57. P. 809.
- [27] *В. Н. Рыжов, Е. Е. Тареева.* ТМФ. 1992. Т. 92. С. 331.
- [28] *J. L. Colot, M. Baus.* Phys. Lett. A. 1986. V. 119. P. 135.
- [29] *M. Baus, J. L. Colot.* Phys. Rev. A. 1987. V. 36. P. 3912.
- [30] *H. K. Jansen, B. Schaub, B. Schmittmann.* Z. Phys. B. 1989. V. 73. P. 539.
- [31] *A. D. Huse.* Phys. Rev. B. 1989. V. 40. P. 304.
- [32] *Z. B. Li, L. Schuelke, B. Zheng.* Phys. Rev. E. 1996. V. 53. P. 2940.
- [33] *К. Бундер, Д. В. Хеерман.* Моделирование методом Монте-Карло в статистической физике. М.: Наука, 1995.
- [34] *A. Skibinsky, S. V. Buldyrev, A. Scala, S. Havlin, H. E. Stanley.* Phys. Rev. E. 1999. V. 60. P. 2664.
- [35] *K. Okano, L. Schuelke, K. Yamagishi, B. Zheng.* J. Phys. A. 1997. V. 30. P. 4527.
- [36] *K. Binder* (частное сообщение).

Поступила в редакцию 7.VI.2001 г.