Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

В. Н. Рыжов, Е. Е. Тареева, Ю. Д. Фомин, Е. Н. Циок,
Е. С. Чумаков, Ренормгрупповое исследование плавления
двумерной системы коллапсирующих твердых дис-
ков, *ТМФ*, 2017, том 191, номер 3, 424–440

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf9272>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru под-
разумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением
<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 54.80.73.141

26 апреля 2023 г., 07:22:50

© 2017 г.

В. Н. Рыжов*, Е. Е. Тареева*,
Ю. Д. Фомин*, Е. Н. Циок*, Е. С. Чумаков*

РЕНОРМГРУППОВОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ПЛАВЛЕНИЯ ДВУМЕРНОЙ СИСТЕМЫ КОЛЛАПСИРУЮЩИХ ТВЕРДЫХ ДИСКОВ

Рассмотрено плавление двумерной системы коллапсирующих твердых дисков (система с потенциалом твердых дисков, к которому добавлена отталкивающая ступенька) для различных значений ширины отталкивающей ступеньки. Фазовая диаграмма системы рассчитана методом функционала плотности в теории кристаллизации с использованием уравнений теории Березинского–Костерлица–Таулесса–Хальперина–Нельсона–Янга для определения линии устойчивости по отношению к диссоциации дислокационных пар, которая соответствует непрерывному переходу из твердой в гексатическую фазу. Показано, что кристаллическая фаза может плавиться как посредством непрерывного перехода при низких плотностях (переход в гексатическую фазу), с последующим переходом из гексатической фазы в изотропную жидкость, так и посредством перехода первого рода. С помощью решения уравнений ренормгруппы, учитывающих наличие в системе сингулярных дефектов (дислокаций), рассмотрено влияние перенормировки упругих модулей на вид фазовой диаграммы.

Ключевые слова: плавление двумерных систем, теория Березинского–Костерлица–Таулесса–Хальперина–Нельсона–Янга, упругие модули, гексатическая фаза.

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf9272>

1. ВВЕДЕНИЕ

В последнее время наблюдается возрастающий интерес к исследованиям поведения жидкостей в условиях наноконфайнмента. Это связано как с применением этих систем в новых современных технологиях, так и с фундаментальными проблемами, касающимися поведения вещества в этих условиях. В случае близости радиуса межмолекулярного взаимодействия и характерной длины корреляции с пространственным масштабом конфайнмента в системе могут возникать структуры и проявляться

Работа поддержана Российским научным фондом (грант № 14-12-00820).

*Институт физики высоких давлений им. Л. Ф. Верещагина РАН, Москва, Россия.
E-mail: ryzhov@hppi.troitsk.ru, etare@ms2.inr.ac.ru

динамические свойства, которые не наблюдаются в объемных образцах. В целом изучение систем в условиях конфайнмента мотивировано тем, что большое количество реальных физических, химических и биологических процессов существенно зависит от параметров данных систем [1]–[6].

Особый интерес представляют фазовые переходы, которые могут происходить в низкоразмерных системах, в частности плавление двумерных систем. Природа двумерного плавления является одной из наиболее долгоживущих проблем физики конденсированного состояния. Несмотря на обилие публикаций по данной тематике за последние 40 лет, противоречия, связанные с микроскопическим описанием плавления в двух измерениях, остаются и даже множатся. В отличие от случая трех измерений, где плавление всегда происходит посредством стандартного перехода первого рода, для микроскопического описания двумерного плавления было предложено несколько сценариев. Главной причиной этого отличия является кардинальное возрастание флуктуаций в двух измерениях по сравнению со случаем трех измерений. Пайерлс, Ландау, а позднее, основываясь на теореме Боголюбова о $1/q^2$ [7], и Мермин [8], показали, что в двух измерениях дальний кристаллический (трансляционный) порядок не может существовать из-за термодинамических флуктуаций и трансформируется в квазидальний порядок, характеризующийся медленным степенным убыванием корреляций. С другой стороны, настоящий дальний ориентационный порядок (порядок в ориентациях “связей”, соединяющих молекулу с ее ближайшими соседями) существует в двух измерениях. При этом при высоких температурах существует обычная изотропная жидкость.

На данный момент наиболее популярна теория двумерного плавления Березинского–Костерлица–Таулесса–Хальперина–Нельсона–Янга (БКТХНЯ) [9]–[12]. В рамках этой теории двумерное плавление происходит посредством двух непрерывных переходов с промежуточной гексатической фазой. Переходы в двумерных системах происходят за счет формирования топологических дефектов. При переходе из кристалла в гексатическую фазу связанные дислокационные пары диссоциируют при некоторой температуре T_m , превращая квазидальний трансляционный порядок в ближний трансляционный порядок, а также дальний ориентационный порядок – в квазидальний ориентационный порядок. Новая фаза, имеющая квазидальний ориентационный порядок и нулевой модуль сдвига, называется гексатической фазой. Образовавшиеся свободные дислокации могут рассматриваться как связанные дисклинационные пары, которые диссоциируют при некоторой температуре T_i , при этом система трансформируется в изотропную жидкость с короткодействующими корреляциями. Оба перехода являются непрерывными типа перехода Березинского–Костерлица–Таулесса, в отличие от обычного плавления в трех измерениях, которое является переходом первого рода.

Теория БКТХНЯ получила подтверждение в ряде экспериментов, например в недавних экспериментах на коллоидных модельных системах с отталкивающим магнитным диполь-дипольным взаимодействием [13]–[17]. С другой стороны, переход первого рода в двумерных системах также возможен [18]–[26]. Например, в работах [25], [26] было показано, что при низких значениях энергии ядра дисклинации система может плавиться посредством перехода первого рода в результате диссоциации дисклинационных квадруполей.

Теория БКТХНЯ не зависит от вида парного потенциала взаимодействия и представляется универсальной, тем не менее многие эксперименты и компьютерное моделирование показывают противоречивые результаты, которые обнаруживают следующую тенденцию: системы с близкодействующими потенциалами и потенциалами твердых сфер плавятся посредством перехода первого рода, в то время как сценарий плавления систем с дальнедействующими потенциалами соответствует теории БКТХНЯ [2], [27]–[51].

В то же время недавно был предложен еще один сценарий плавления [52]–[57]. В отличие от теории БКТХНЯ, методами компьютерного моделирования было показано, что плавление может происходить посредством двух переходов, однако при этом переход от твердого тела к гексатической фазе происходит посредством непрерывного перехода типа Березинского–Костерлица–Таулеса, а переход от гексатической фазы к изотропной жидкости – посредством перехода первого рода. Следует отметить работу [55], где рассматривалось плавление системы мягких дисков, описываемых потенциалом вида $1/r^n$, при этом при $n \leq 6$ система плавится в соответствии с теорией БКТХНЯ, а при $n > 6$ – в соответствии с описанным выше сценарием [52]–[57]. В работе [58] было показано, что система с потенциалом Герца также плавится посредством двух переходов, с непрерывным переходом “кристалл–гексатик” и переходом первого рода “гексатик–изотропная жидкость”.

В случае трех измерений достаточно эффективным подходом к описанию кристаллизации оказался метод функционала плотности [59]–[63], который позднее был обобщен и применен для описания плавления в двумерных системах [20]–[24], [64], при этом было показано, что система твердых дисков плавится посредством фазового перехода первого рода, в то время как плавление систем с кулоновским потенциалом взаимодействия происходит согласно предсказаниям теории БКТХНЯ. В работах [22], [23] метод функционала плотности был использован для описания плавления в двумерных системах с потенциалом твердых сфер, к которому добавлено притяжение в виде прямоугольной ямы. Было показано, что эта система может плавиться как посредством перехода первого рода, так и посредством непрерывного перехода в зависимости от ширины притягивающей ямы.

2. СИСТЕМА И МЕТОДЫ РАСЧЕТА

В данной работе исследуется система коллапсирующих твердых дисков, потенциал взаимодействия которых представляет собой потенциал твердых дисков, к которому добавлена отталкивающая ступенька [65], [66]. Потенциал взаимодействия имеет вид

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

где d – диаметр твердого ядра, σ – ширина отталкивающей ступеньки, а ε – ее высота.

Как было показано ранее [67], [68], в пределе низких температур $\tilde{T} \equiv k_B T / \varepsilon \ll 1$ потенциал эффективно соответствует системе твердых дисков с большим диаметром диска σ , а при высоких температурах – с меньшим d . В этом случае плавление при

низких и высоких температурах описывается простой кривой плавления твердых дисков $P = cT/\sigma'^2$, где σ' – эффективный диаметр твердых дисков (σ и d соответственно). Переход от поведения плавления при низких температурах к поведению при высоких температурах происходит при $\tilde{T} = \mathcal{O}(1)$. Точная форма фазовой диаграммы зависит от отношения $s \equiv \sigma/d$. Для достаточно больших значений s можно ожидать кривую плавления с максимумом, который должен исчезать при $s \rightarrow 1$ [67], [68].

Далее будем использовать приведенные значения $r' = r/d$, $\rho' = \rho d^2$, опуская штрихи.

Сглаженные версии потенциала (1) были использованы для исследования водоподобных аномалий, при этом было показано, что аномальное поведение в системах, описываемых сглаженным потенциалом коллапсирующих сфер, возникает из-за наличия двух характерных длин σ и d в потенциале [68]–[75].

В рамках компьютерного моделирования сценарии плавления двумерных систем со сглаженными потенциалами коллапсирующих дисков были рассмотрены в работах [33]–[36]. Было показано, что при небольшой ширине мягкого ядра, когда система введет себя, как обычная система мягких дисков, плавление происходит посредством одного слабого перехода первого рода [34], однако в недавней работе [76] этот вывод был подвергнут сомнению. При увеличении ширины отталкивающей ступеньки фазовая диаграмма становится намного более сложной. Как и в работе [27], было обнаружено, что фазовая диаграмма состоит из трех различных кристаллических фаз, одна из них с квадратной решеткой и две другие с треугольной решеткой. При высоких плотностях на фазовой диаграмме существуют фазы, имеющие треугольную и квадратную симметрию решетки, которые плавятся посредством одного перехода первого рода. В этой системе присутствуют термодинамические, динамические и структурные аномалии, причем порядок этих аномалий инвертирован по сравнению с порядком аномалий в трех измерениях [35]. В работах [36], [76] было показано, что при наличии случайного пиннинга сценарий плавления меняется кардинальным образом – вместо одного перехода первого рода система плавится посредством двух переходов, при этом переход “кристалл–гексатик” является непрерывным, в то время как гексатическая фаза трансформируется в изотропную жидкость посредством перехода первого рода. В первоначальных работах [33]–[35] предполагалось, что при низких плотностях, когда ядро потенциала является эффективно мягким, плавление треугольной решетки представляет собой последовательность двух непрерывных переходов с промежуточной гексатической фазой в соответствии с теорией БКТХНЯ. Однако в недавней работе [76] было показано, что ситуация является более сложной, в связи с чем дальнейшие исследования с использованием подхода, базирующегося на методе функционала плотности в теории кристаллизации, представляются весьма актуальными.

Для дальнейшего рассмотрения напомним основные идеи теории функционала плотности для двумерного плавления [20]–[24], [59]. Как было отмечено выше, в случае двух измерений из-за флуктуаций не существует дальнего трансляционного порядка. Таким образом, при низких температурах локальная плотность твердого тела, которая пропорциональна одночастичной функции распределения, может быть

записана в виде ряда Фурье по векторам обратной решетки $\mathbf{G}$:

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

где $\rho_{\mathbf{G}}(\mathbf{r})$ – параметры порядка для фазового перехода “жидкость–твердое тело”. Вследствие температурных флуктуаций параметры порядка $\rho_{\mathbf{G}}(\mathbf{r})$ медленно изменяются на расстояниях порядка G^{-1} с амплитудой и фазой:

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

Здесь $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ означает поле смещения, которое в общем случае может быть разложено на гладкую часть, соответствующую фононному полю, и сингулярную часть, которая может быть интерпретирована как вихри Березинского–Костерлица–Таулесса [9] и имеет смысл дислокаций.

Принимая в расчет длинноволновые флуктуации, можно записать разложение Ландау в форме [22]–[24]

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

Величина ΔF соответствует разности свободных энергий кристалла и изотропной жидкости. Первый член в разложении (4) имеет форму свободной энергии деформации твердого тела. Коэффициенты Ламе μ и λ являются функциями от параметров A , B и C и пропорциональны квадрату модуля параметра порядка (2).

С помощью разложения (4) сценарий плавления в двух измерениях может быть описан следующим образом. Если пренебречь флуктуациями параметра порядка (точно так же, как и в трех измерениях), из формулы (4) следует, что при некоторой температуре T_{MF} модуль параметра порядка становится равным нулю в результате перехода первого рода из-за члена третьего порядка в разложении Ландау (4). Тем не менее существует другая возможность: при температуре T_{m} в системе появляются сингулярные флуктуации фазы параметра порядка (вихри), которые соответствуют свободным дислокациям, согласно стандартной парадигме Березинского–Костерлица–Таулесса. В этом случае модуль параметра порядка не равен нулю, тем не менее система реагирует на сдвиг без сопротивления (модуль сдвига $\mu = 0$). Таким образом, фазу при температуре выше T_{m} можно назвать жидкостью. В действительности это гексатическая фаза с квазидальним ориентационным порядком [10]–[12]. Таким образом, существуют две возможности: 1) $T_{\text{m}} < T_{\text{MF}}$, тогда система плавится посредством двух последовательных непрерывных переходов Березинского–Костерлица–Таулесса; 2) $T_{\text{m}} > T_{\text{MF}}$, тогда система плавится посредством перехода первого рода.

T_{m} и T_{MF} можно вычислить с помощью микроскопических выражений для свободной энергии Гельмгольца F твердого тела и модулей упругости [20]–[24], рассчитанных с помощью рассмотрения асимптотического поведения корреляционных функций [64], [77], [78]. В этом случае локальная плотность твердого тела $\rho(\mathbf{r})$ может быть представлена как локализованные гауссианы (ширины $1/\alpha^{1/2}$) в узлах

решетки, т. е. с фурье-компонентами $\rho_{\mathbf{G}} = \rho e^{-G^2/4\alpha}$, где $\rho = \int d\mathbf{r} \rho(\mathbf{r})/V$ – средняя плотность. Так как основная задача в настоящей работе – получение качественно-го описания плавления в системе с отталкивающим потенциалом в виде ступеньки, используется простейшая, но достаточно точная версия теории функционала плотности [20]–[24], [59]–[63]:

$$\beta\Delta F = \int d\mathbf{r} \rho(\mathbf{r}) \ln[\rho(\mathbf{r})/\rho] - \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' c^{(2)}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|, \rho) [\rho(\mathbf{r}) - \rho] [\rho(\mathbf{r}') - \rho], \quad (5)$$

где $c^{(2)}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|, \rho)$ – прямая корреляционная функция [79], $\beta = 1/k_{\text{B}}T$. Параметр α определяется из условия минимума свободной энергии по отношению к нему. В принципе, параметры перехода первого рода должны быть определены из соотношения (5) с использованием построения общих касательных к кривым свободных энергий кристалла и изотропной жидкости, тем не менее, учитывая малость скачка объема при переходе, температуру плавления T_{MF} можно с достаточно высокой точностью получить из уравнения $\Delta F = 0$.

Температура T_{m} может быть определена из критерия БКТХНЯ [10]–[12], который определяет условие, при котором кристаллическая решетка становится неустойчивой вследствие появления свободных дислокаций:

$$K(T_{\text{m}}) = \frac{a_0^2}{k_{\text{B}}T_{\text{m}}} \frac{4\mu(T_{\text{m}})(\mu(T_{\text{m}}) + \lambda(T_{\text{m}}))}{2\mu(T_{\text{m}}) + \lambda(T_{\text{m}})} = 16\pi, \quad (6)$$

где $K(T)$ – модуль Юнга, $\mu(T)$ и $\lambda(T)$ – коэффициенты Ламе, a_0 – постоянная треугольной решетки: $a_0^2 = 2/(\sqrt{3}\rho)$.

Выражения для коэффициентов Ламе имеют вид [20]–[24], [64]

$$\mu = \frac{k_{\text{B}}T}{16\rho} \sum_G \rho_G^2 m_G G^2 (\gamma_G + 2\delta_G), \quad (7)$$

$$\lambda = \frac{k_{\text{B}}T}{16\rho} \sum_G \rho_G^2 m_G G^2 (\gamma_G - 6\delta_G) + k_{\text{B}}T \rho (1 - \rho \tilde{c}^{(2)}(0)), \quad (8)$$

где

$$\gamma_G = 2\pi\rho \int r^3 dr c^{(2)}(r, \hat{\rho}) J_0(Gr),$$

$$\delta_G = 2\pi\rho \int r^3 dr c^{(2)}(r, \hat{\rho}) \frac{J_1(Gr)}{Gr},$$

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

Для дальнейших расчетов необходимо приближенное выражение для прямой корреляционной функции. В этой работе используется простая аппроксимация для

прямой корреляционной функции [79] системы частиц с твердым ядром, предложенная в работе [80] (см. также [22], [23], [81], [82]):

$$c^{(2)}(r, \rho) = \begin{cases} c_{\text{HD}}^{(2)}(r, \rho), & r \leq d, \\ -\frac{\phi(r)}{k_{\text{B}}T}, & r > d, \end{cases} \quad (9)$$

где $c_{\text{HD}}^{(2)}(r, \rho)$ – прямая корреляционная функция твердых дисков, $\phi(r)$ – отталкивающая ступенька или часть потенциала, ответственная за притяжение. Это приближение хорошо работает, если $-\phi(r)/k_{\text{B}}T$ мало. Оно хотя и является довольно грубым, но близко по духу к среднесферической модели, которая является хорошей аппроксимацией во множестве случаев [79]. В случае потенциала (1) уравнение (9) принимает вид

$$c^{(2)}(r, \rho) \approx \begin{cases} c_{\text{HD}}^{(2)}(r, \rho), & r \leq d, \\ \frac{-\varepsilon}{k_{\text{B}}T}, & d < r \leq \sigma, \\ 0, & r > \sigma. \end{cases} \quad (10)$$

Для $c_{\text{HD}}^{(2)}(r, \rho)$ мы используем приближенное аналитическое выражение, полученное в работах [83], [84]:

$$\begin{aligned} c_{\text{HD}}^{(2)}(x, \eta) = & - \left[\frac{\partial}{\partial \eta} (\eta Z(\eta)) \right] \Theta(1-x) \times \\ & \times \left\{ 1 - a^2 \eta + \frac{2}{\pi} a^2 \eta \left[\arccos \frac{x}{a} - \frac{x}{a} \left(1 - \frac{x^2}{a^2} \right)^{1/2} \right] \right\}, \quad (11) \\ Z(\eta) = & \frac{1 + c_2 \eta^2}{(1 - \eta)^2}, \quad a = \frac{2 + \eta \alpha_2(\eta)}{1 + \eta + \eta \alpha_2(\eta)}, \end{aligned}$$

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

Критерий плавления (6) является среднеполевым и не учитывает перенормировку модулей упругости твердого тела при наличии в системе связанных дислокационных пар. Уравнения ренормгруппы, учитывающие наличие в системе сингулярных дефектов (дислокаций), были получены в работах [10]–[12] и представляют собой один из основных результатов теории плавления БКТХНЯ. Эти уравнения имеют вид

$$\begin{aligned} \frac{dK^{-1}(l)}{dl} = & \frac{3}{2} \pi y^2(l) e^{K(l)/8\pi} I_0 \left(\frac{K(l)}{8\pi} \right) - \frac{3}{4} \pi y^2(l) e^{K(l)/8\pi} I_1 \left(\frac{K(l)}{8\pi} \right) + O(y^3), \\ \frac{dy(l)}{dl} = & \left[2 - \frac{K(l)}{8\pi} \right] y(l) + O(y^3), \end{aligned} \quad (12)$$

где K – модуль Юнга (6), $I_0(x)$ и $I_1(x)$ – модифицированные функции Бесселя. Принципиальное значение для теории БКТХНЯ имеет энергия ядра дислокации E_c , которая связана с входящей в уравнения (12) активностью y соотношением $y = e^{-E_c/k_{\text{B}}T}$. Из уравнений (12) видно, что они справедливы лишь при условии достаточно большой энергии ядра дислокации. Как было отмечено в последующих работах (см. [18], [26]), в случае малых значений энергии ядра дислокации система

плавится посредством перехода первого рода. Величина l представляет собой масштабную переменную. Значение $l = 0$ соответствует перенормированным величинам модуля Юнга и активности. В твердой фазе при $l \rightarrow \infty$ модуль Юнга уменьшается, а $y \rightarrow 0$, однако, если решетка плавится, уравнения (12) становятся неприменимыми ($y \rightarrow \infty$). В качестве начальных значений при $l = 0$ можно взять перенормированное значение модуля Юнга K , рассчитанное с использованием упругих модулей (7) и (8). Начальное значение для активности $y = e^{-E_c/k_B T}$ может быть взято в виде $E_c = -3.0K/16\pi$ [20], [21].

В работе [11] было предложено приближенное выражение для перенормированного модуля Юнга, которое имеет вид

$$K_T = K(1 - 2m_0y_0), \quad (13)$$

где $m_0 = 12\pi A/((B^2 + 24A)^{1/2} - B)$, $y_0 = e^{-cK/16\pi}$, $c = 3.0$, $A = 21.937$, $B = 6.1965$.

В следующем разделе описанные соотношения будут применены для анализа поведения фазовой диаграммы системы с потенциалом (1) с учетом перенормировки параметров, входящих в условия, определяющие устойчивость кристаллической фазы (6), за счет существования связанных дислокационных пар.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

В работе [24] система с потенциалом (1) была рассмотрена без учета перенормировки упругих модулей. Рассмотрим кратко некоторые из полученных там результатов, нужные нам для дальнейшего продвижения. В первую очередь нам необходимы перенормированные значения модуля Юнга, которые затем будут использоваться в качестве начальных условий при решении уравнений (12).

На рис. 1а,б показано поведение величины $K_{\text{eff}} = K/16\pi$ (6) как функции T для $\sigma = 1.5$ и двух значений плотности $\rho = 0.34$ (рис. 1а) и $\rho = 0.4$ (рис. 1б). На рис. 1в представлено поведение K_{eff} как функции плотности для фиксированного значения температуры $T = 1.0$. Для $\rho = 0.34$ решение уравнения $\Delta F = 0$, которое определяет температуру перехода первого рода T_{MF} , имеет вид $T_{\text{MF}} = 0.231$ (рис. 1а), в то время как из решения уравнения $K_{\text{eff}} = 1$, определяющего точку устойчивости системы по отношению к образованию свободных дислокаций, следует $T_m = 0.183 < T_{\text{MF}}$. Как было отмечено выше, в этом случае система плавится посредством непрерывного перехода в соответствии со сценарием теории БКТХНЯ. Следует заметить, что в результате нашего рассмотрения мы определяем только границу устойчивости кристалла по отношению к появлению свободных дислокаций и, соответственно, обращению модуля сдвига в нуль, однако ничего не можем сказать о свойствах образующейся новой фазы. Можно предположить, что это будет гексатическая фаза, однако свойства этой новой фазы и последующего перехода в изотропную жидкость требуют дополнительного исследования.

Из рис. 1б можно заключить, что для $\rho = 0.40$ ситуация иная. В этом случае $T_{\text{MF}} = 0.196$, в то время как уравнение $K_{\text{eff}} = 1$ не имеет решения вплоть до предела метастабильности кристаллической решетки $T_{\text{met}} = 0.278$, определяемого из условия существования ненулевого решения для параметра α [24]. В этом случае плавление осуществляется посредством перехода первого рода.

Рис. 1. Зависимость $K_{\text{eff}} = K/16\pi$ от температуры для $\rho = 0.34$ (а) и $\rho = 0.4$ (б) и от плотности при $T = 1.0$ (в).

При высоких плотностях имеется только слабая зависимость плотности плавления от температуры. В этом случае удобнее проводить вычисления, зафиксировав температуру и изменяя плотность. Типичные результаты показаны на рис. 1в для значений $\sigma = 1.5$ и $T = 1.0$. Видно, что при высоких плотностях для $T = 1.0$ происходит плавление посредством перехода первого рода при $\rho_{\text{MF}} = 1.015$. Уравнение $K_{\text{eff}} = 1$ не имеет решения вплоть до предела метастабильности $\rho_{\text{met}} = 1.009$.

На рис. 2 представлена фазовая диаграмма для трех значений ширины отталкивающей ступеньки в потенциале (1): $\sigma = 1.50$, $\sigma = 1.35$ и $\sigma = 1.65$ (см. также [24]). В соответствии с качественным рассмотрением, следующим за уравнением (1), фазовая диаграмма состоит из двух частей – треугольной решетки при низких плотностях с максимумом на кривой плавления и треугольной решетки при высоких плотностях. Интересно, что в области фазовой диаграммы, соответствующей низким плотностям, плавление происходит в соответствии с двумя сценариями: при плотностях ниже максимума на кривой плавления система плавится в результате непрерывного перехода, в то время как при увеличении плотности плавление начи-

Рис. 2. Фазовая диаграмма системы с потенциалом (1) для трех значений ширины отталкивающей ступеньки: $\sigma = 1.50$ (треугольники), $\sigma = 1.35$ (круги), $\sigma = 1.65$ (квадраты). Пустые символы соответствуют непрерывному переходу, закрашенные – переходу первого рода.

нает происходить посредством перехода первого рода. Таким образом, на фазовой диаграмме имеется трикритическая точка, в которой встречаются линии перехода первого рода и непрерывного перехода. В области высоких плотностей система коллапсирующих сфер плавится посредством перехода первого рода. Нужно отметить, что с увеличением температуры поведение системы должно приближаться к поведению системы твердых дисков, плавление которых по результатам разных работ (см., например, [20], [21], [38], [39], [41]) происходит в диапазоне от $\rho = 0.905$ до $\rho = 0.933$. Заметим, что несмотря на очень простую аппроксимацию, результаты, представленные на рис. 2 для высоких температур и плотностей, достаточно хорошо соответствуют предыдущим качественным оценкам. Легко показать, что при $T = 1000$ система плавится при $\rho = 0.9326$.

Заметим, что на фазовой диаграмме (рис. 2) имеется “щель” между кристаллическими состояниями, соответствующими малой и большой плотностям. С помощью компьютерного моделирования поведения системы сглаженных коллапсирующих сфер удалось показать, что в этой области существует квадратная решетка (а возможно, и некоторые другие кристаллические структуры) [33]–[36], [76]. Кроме того, по аналогии с трехмерным случаем можно ожидать появления в этой области

Рис. 4. Области фазовой диаграммы, соответствующие низкой плотности, для трех значений ширины отталкивающей ступеньки $\sigma = 1.35$ (а), $\sigma = 1.50$ (б) и $\sigma = 1.65$ (в). Представлены линии устойчивости кристаллической структуры по отношению к образованию свободных дислокаций (непрерывное плавление), полученные из соотношения $K = 16\pi$ с перенормированным модулем Юнга K (см. рис. 2 и [24]) (звездочки), а также с помощью решения уравнений ренормгруппы (12) (закрашенные прямоугольники) и из приближенного выражения (13) (пустые кружки). Треугольники соответствуют линии фазового перехода первого рода, рассчитанной из условия равенства нулю разности свободных энергий $\Delta F = 0$.

(см. рис. 2), не удастся достичь значений перенормированного модуля Юнга, равных 16π . Таким образом, области фазовых диаграмм, в которых система плавится посредством перехода первого рода, остаются неизменными. Также на рис. 4 нанесены кривые, полученные из приближенного выражения (13). Следует отметить очень хорошее согласие этих результатов с полученными из точных уравнений (12).

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе рассмотрено плавление системы коллапсирующих твердых дисков (1) (системы с потенциалом твердых дисков, к которому добавлена отталкивающая ступенька). Построена фазовая диаграмма системы в зависимости от ширины отталкивающей ступеньки и показано, что фазовая диаграмма состоит из двух частей: треугольной решетки при низких плотностях с максимумом на кривой плавления и треугольной решетки при высоких плотностях. Интересно, что в области фазовой диаграммы, соответствующей низким плотностям, плавление происходит в соответствии с двумя сценариями: при плотностях ниже максимума на кривой плавления система плавится в результате непрерывного перехода, в то время как при увеличении плотности плавление начинает происходить посредством перехода первого рода. Таким образом, на фазовой диаграмме имеется трикритическая точка, в которой встречаются линии перехода первого рода и непрерывного перехода. Подобная смена сценария плавления была обнаружена в недавней работе [58] для системы сфер Герца, однако с обратным порядком следования переходов – переход первого рода при низких плотностях и непрерывный переход при более высоких плотностях. Таким образом, не удастся прийти к однозначному выводу о зависимости сценария плавления от вида потенциала, и дальнейшие исследования в данном направлении необходимы. В области высоких плотностей система коллапсирующих дисков плавится посредством перехода первого рода.

Как и следовало ожидать, учет перенормировки понижает температуру неустойчивости кристаллической решетки по отношению к образованию свободных дислокаций, что соответствует непрерывному переходу типа Березинского–Костерлица–Таулеса, при этом область стабильности кристаллической фазы сужается.

Следует заметить, что условие $K_r = 16\pi$ определяет границу устойчивости кристалла по отношению к появлению свободных дислокаций и, соответственно, к обращению модуля сдвига в нуль, однако из проведенного рассмотрения мы ничего не можем заключить о свойствах образующейся новой фазы. Можно предположить, что это будет гексатическая фаза, однако свойства этой новой фазы и последующего перехода в изотропную жидкость требуют дополнительного рассмотрения. В частности, в рамках традиционной теории БКТХНЯ [10], [11], [13]–[17] переход из гексатической фазы в изотропную жидкость является непрерывным, однако, как было показано в недавних работах [36], [52]–[58], [76], переход первого рода также возможен. При этом последовательная теория перехода первого рода из гексатической фазы в изотропную жидкость в настоящее время отсутствует.

Благодарности. Авторы благодарны С. М. Стишову и В. В. Бражкину за многочисленные полезные обсуждения.

Список литературы

- [1] M. Alcoutlabi, G. B. McKenna, “Effects of confinement on material behaviour at the nanometre size scale”, *J. Phys.: Condens. Matter*, **17**:15 (2005), R461–R524.
- [2] S. A. Rice, “Structure in confined colloid suspensions”, *Chem. Phys. Lett.*, **479**:1–3 (2009), 1–13.
- [3] L. B. Krott, M. C. Barbosa, “Anomalies in a waterlike model confined between plates”, *J. Chem. Phys.*, **138** (2013), 084505, 12 pp.

- [4] A. M. Al mudallal, S. V. Buldyrev, I. Saika-Voivod, “Phase diagram of a two-dimensional system with anomalous liquid properties”, *J. Chem. Phys.*, **137**:3 (2012), 034507, 10 pp.
- [5] L. B. Krott, J. R. Bordin, “Distinct dynamical and structural properties of a core-softened fluid when confined between fluctuating and fixed walls”, *J. Chem. Phys.*, **139**:15 (2013), 154502.
- [6] L. B. Krott, M. C. Barbosa, “Model of waterlike fluid under confinement for hydrophobic and hydrophilic particle-plate interaction potentials”, *Phys. Rev. E*, **89**:1 (2014), 012110, 11 pp.
- [7] Н. Н. Боголюбов, “Квазисредние в задачах статистической механики”, *Собрание научных трудов. Статистическая механика*, т. 6: *Равновесная статистическая механика*: 1945–1986, Наука, М., 2006, 236–360.
- [8] N. D. Mermin, “Crystalline order in two dimensions”, *Phys. Rev.*, **176**:1 (1968), 250–254; Erratum, *Phys. Rev. B*, **20**:11 (1979), 4762–4762; **74**:14 (2006), 149902, 1 pp.
- [9] M. Kosterlitz, D. J. Thouless, “Ordering, metastability and phase transitions in two-dimensional systems”, *J. Phys. C*, **6**:7 (1973), 1181–1203.
- [10] B. I. Halperin, D. R. Nelson, “Theory of two-dimensional melting”, *Phys. Rev. Lett.*, **41**:2 (1978), 121–124; Erratum, **41**:7 (1978), 519.
- [11] D. R. Nelson, B. I. Halperin, “Dislocation-mediated melting in two dimensions”, *Phys. Rev. B*, **19**:5 (1979), 2457–2484.
- [12] A. P. Young, “Melting and the vector Coulomb gas in two dimensions”, *Phys. Rev. B*, **19**:4 (1979), 1855–1866.
- [13] U. Gasser, C. Eisenmann, G. Maret, P. Keim, “Melting of crystals in two dimensions”, *Chem. Phys. Chem.*, **11** (2010), 963–970.
- [14] K. Zahn, G. Maret, “Dynamic criteria for melting in two dimensions”, *Phys. Rev. Lett.*, **85**:17 (2000), 3656–3659.
- [15] P. Keim, G. Maret, H. H. von Grünberg, “Frank’s constant in the hexatic phase”, *Phys. Rev. E*, **75**:3 (2007), 031402, 6 pp.
- [16] S. Deuschländer, T. Horn, H. Löwen, G. Maret, P. Keim, “Two-dimensional melting under quenched disorder”, *Phys. Rev. Lett.*, **111**:9 (2013), 098301, 5 pp.; Erratum, **111**:25, 259901, 1 pp.
- [17] T. Horn, S. Deuschländer, H. Löwen, G. Maret, P. Keim, “Fluctuations of orientational order and clustering in a two-dimensional colloidal system under quenched disorder”, *Phys. Rev. E*, **88**:6 (2013), 062305, 9 pp.
- [18] S. T. Chui, “Grain-boundary theory of melting in two dimensions”, *Phys. Rev. B*, **28**:1 (1983), 178–194.
- [19] W. Janke, H. Kleinert, “Monte Carlo study of two-step defect melting”, *Phys. Rev. B*, **41**:10 (1990), 6848–6863.
- [20] V. N. Ryzhov, E. E. Tareyeva, “Two-stage melting in two dimensions: first-principles approach”, *Phys. Rev. B*, **51**:14 (1995), 8789–8794.
- [21] В. Н. Рыжов, Е. Е. Тареева, “Микроскопическое описание двухстадийного плавления в двух измерениях”, *ЖЭТФ*, **108**:6 (1995), 2044–2060.
- [22] V. N. Ryzhov, E. E. Tareyeva, “Melting in two dimensions: first-order versus continuous transition”, *Physica A*, **314**:1–4 (2002), 396–404.
- [23] Л. М. Помирчи, В. Н. Рыжов, Е. Е. Тареева, “Плавление двумерных систем: зависимость рода перехода от радиуса потенциала”, *ТМФ*, **130**:1 (2002), 119–130.
- [24] E. S. Chumakov, Y. D. Fomin, E. L. Shangina, E. E. Tareyeva, E. N. Tsiok, V. N. Ryzhov, “Phase diagram of the system with the repulsive shoulder potential in two dimensions: density functional approach”, *Physica A*, **432** (2015), 279–286.
- [25] В. Н. Рыжов, “Дисклинационное плавление двумерных решеток”, *ТМФ*, **88**:3 (1991), 449–458.

- [26] В. Н. Рыжов, “Дислокационно-дисциплинационное плавление двумерных решеток”, *ЖЭТФ*, **100**:5 (1991), 1627–1639.
- [27] S. Prestipino, F. Saija, P. V. Giaquinta, “Hexatic phase and water-like anomalies in a two-dimensional fluid of particles with a weakly softened core”, *J. Chem. Phys.*, **137**:10 (2012), 104503.
- [28] P. Bladon, D. Frenkel, “Dislocation unbinding in dense two-dimensional crystals”, *Phys. Rev. Lett.*, **74**:13 (1995), 2519–2522.
- [29] S. I. Lee, S. J. Lee, “Effect of the range of the potential on two-dimensional melting”, *Phys. Rev. E*, **78**:4 (2008), 041504, 9 pp.
- [30] S. Prestipino, F. Saija, P. V. Giaquinta, “Hexatic phase in the two-dimensional gaussian-core model”, *Phys. Rev. Lett.*, **106**:23 (2011), 235701, 4 pp.
- [31] R. Zangi, S. A. Rice, “Phase transitions in a quasi-two-dimensional system”, *Phys. Rev. E*, **58**:6 (1998), 7529–7544.
- [32] D. Frydel, S. A. Rice, “Phase diagram of a quasi-two-dimensional colloid assembly”, *Phys. Rev. E*, **68**:6 (2003), 061405, 16 pp.
- [33] D. E. Dudalov, Yu. D. Fomin, E. N. Tsiok, V. N. Ryzhov, “Melting scenario of the two-dimensional core-softened system: first-order or continuous transition?”, *J. Phys.: Conf. Ser.*, **510**:1 (2014), 012016.
- [34] D. E. Dudalov, Yu. D. Fomin, E. N. Tsiok, V. N. Ryzhov, “Effect of a potential softness on the solid-liquid transition in a two-dimensional core-softened potential system”, *J. Chem. Phys.*, **141**:18 (2014), 18C522.
- [35] D. E. Dudalov, Yu. D. Fomin, E. N. Tsiok, V. N. Ryzhov, “How dimensionality changes the anomalous behavior and melting scenario of a core-softened potential system?”, *Soft Matter*, **10**:27 (2014), 4966–4976.
- [36] E. N. Tsiok, D. E. Dudalov, Yu. D. Fomin, V. N. Ryzhov, “Random pinning changes the melting scenario of a two-dimensional core-softened potential system”, *Phys. Rev. E*, **92**:3 (2015), 032110, 5 pp.
- [37] J. Lee, K. J. Strandburg, “First-order melting transition of the hard-disk system”, *Phys. Rev. B*, **46**:17 (1992), 11190–11193.
- [38] H. Weber, D. Marx, K. Binder, “Melting transition in two dimensions: a finite-size scaling analysis of bond-orientational order in hard disks”, *Phys. Rev. B*, **51**:20 (1995), 14636–14651.
- [39] C. H. Mak, “Large-scale simulations of the two-dimensional melting of hard disks”, *Phys. Rev. E*, **73**:6 (2006), 065104, 4 pp.
- [40] A. Jaster, “Orientational order of the two-dimensional hard-disk system”, *Europhys. Lett.*, **42**:3 (1998), 277–281.
- [41] A. Jaster, “The hexatic phase of the two-dimensional hard disk system”, *Phys. Lett. A*, **330**:1–2 (2004), 120–125.
- [42] K. Bagchi, H. C. Andersen, W. Swope, “Computer simulation study of the melting transition in two dimensions”, *Phys. Rev. Lett.*, **76**:2 (1996), 255–258.
- [43] K. Bagchi, H. C. Andersen, W. Swope, “Observation of a two-stage melting transition in two dimensions”, *Phys. Rev. E*, **53**:4 (1996), 3794–3803.
- [44] K. Binder, S. Sengupta, P. Nielaba, “liquid-solid transition of hard discs: first-order transition or Kosterlitz–Thouless–Halperin–Nelson–Young scenario?”, *J. Phys.: Condens. Matter*, **14**:9 (2002), 2323–2333.
- [45] R. K. Kalia, P. Vashishta, “Interfacial colloidal crystals and melting transition”, *J. Phys. C*, **14**:22 (1981), L643–L648.
- [46] J. Q. Broughton, G. H. Gilmer, J. D. Weeks, “Molecular-dynamics study of melting in two dimensions. Inverse-twelfth-power interaction”, *Phys. Rev. B*, **25**:7 (1982), 4651–4669.
- [47] R. S. Singh, M. Santra, B. Bagchi, “Anisotropy induced crossover from weakly to strongly first order melting of two dimensional solids”, *J. Chem. Phys.*, **138**:18 (2013), 184507.

- [48] K. Wierschem, E. Manousakis, “Simulation of melting of two-dimensional Lennard-Jones solids”, *Phys. Rev. B*, **83**:21 (2011), 214108.
- [49] N. Gribova, A. Arnold, T. Schilling, C. Holm, “How close to two dimensions does a Lennard-Jones system need to be to produce a hexatic phase?”, *J. Chem. Phys.*, **135**:5 (2011), 054514.
- [50] Yu. E. Lozovik, V. M. Farztdinov, “Oscillation spectra and phase diagram of two-dimensional electron crystal: ‘new’ (3 + 4)-self-consistent approximation”, *Solid State Commun.*, **54**:8 (1985), 725–728.
- [51] Yu. E. Lozovik, V. M. Farztdinov, B. Abdullaev, S. A. Kuchеров, “Melting and spectra of two-dimensional classical crystals”, *Phys. Lett. A*, **112**:1–2 (1985), 61–63.
- [52] E. P. Bernard, W. Krauth, “Two-step melting in two dimensions: first-order liquid-hexatic transition”, *Phys. Rev. Lett.*, **107**:15 (2011), 155704, 4 pp.
- [53] M. Engel, J. A. Anderson, S. C. Glotzer, M. Isobe, E. P. Bernard, W. Krauth, “Hard-disk equation of state: first-order liquid-hexatic transition in two dimensions with three simulation methods”, *Phys. Rev. E*, **87**:4 (2013), 042134, 8 pp.
- [54] W. Qi, A. P. Gantapara, M. Dijkstra, “Two-stage melting induced by dislocations and grain boundaries in monolayers of hard spheres”, *Soft Matter*, **10** (2014), 5449–5457.
- [55] S. C. Kapfer, W. Krauth, “Two-dimensional melting: from liquid-hexatic coexistence to continuous transitions”, *Phys. Rev. Lett.*, **114**:3 (2015), 035702, 5 pp.
- [56] W.-K. Qi, S.-M. Qin, X.-Y. Zhao, Y. Chen, “Coexistence of hexatic and isotropic phases in two-dimensional Yukawa systems”, *J. Phys.: Condens. Matter*, **20**:24 (2008), 245102, 9 pp.
- [57] W. Qi, M. Dijkstra, “Destabilisation of the hexatic phase in systems of hard disks by quenched disorder due to pinning on a lattice”, *Soft Matter*, **11** (2015), 2852–2856.
- [58] M. Zu, J. Liu, H. Tong, N. Xu, “Density affects the nature of the hexatic-liquid transition in two-dimensional melting of soft-core systems”, *Phys. Rev. Lett.*, **117**:8 (2016), 085702, 5 pp., arXiv: 1605.00747.
- [59] В. Н. Рыжов, “Статистическая теория кристаллизации в классических системах”, *ТМФ*, **55**:1 (1983), 128–136.
- [60] V. N. Ryzhov, E. E. Tareeva, “Towards a statistical theory of freezing”, *Phys. Lett. A*, **75**:1–2 (1979), 88–90.
- [61] В. Н. Рыжов, Е. Е. Тареева, “К статистической теории кристаллизации в системе твердых сфер”, *ТМФ*, **48**:3 (1981), 416–423.
- [62] M. Baus, “The present status of the density-functional theory of the liquid-solid transition”, *J. Phys.: Condens. Matter*, **2**:9 (1990), 2111–2126.
- [63] Y. Singh, “Density-functional theory of freezing and properties of the ordered phase”, *Phys. Rep.*, **207**:6 (1991), 351–444.
- [64] В. Н. Рыжов, Е. Е. Тареева, “Микроскопический подход к вычислению модулей упругости и модуля Франка в теории двумерного плавления”, *ТМФ*, **92**:2 (1992), 331–343.
- [65] V. N. Ryzhov, S. M. Stishov, “A liquid-liquid phase transition in the ‘collapsing’ hard sphere system”, *ЖЭТФ*, **122**:4 (2002), 820–823.
- [66] V. N. Ryzhov, S. M. Stishov, “Repulsive step potential: a model for a liquid-liquid phase transition”, *Phys. Rev. E*, **67**:1 (2003), 010201, 4 pp.
- [67] S. M. Stishov, “On the phase diagram of a ‘collapsing’ hard-sphere system”, *Phil. Mag. B*, **82**:11 (2002), 1287–1290.
- [68] Y. D. Fomin, N. V. Gribova, V. N. Ryzhov, S. M. Stishov, D. Frenkel, “Quasibinary amorphous phase in a three-dimensional system of particles with repulsive-shoulder interactions”, *J. Chem. Phys.*, **129**:6 (2008), 064512.
- [69] S. V. Buldyrev, G. Malescio, C. A. Angell, N. Giovambattista, S. Prestipino, F. Saija, H. E. Stanley, L. Xu, “Unusual phase behavior of one-component systems with two-scale isotropic interactions”, *J. Phys.: Condens. Matter*, **21**:50 (2009), 504106.

- [70] P. Vilaseca, G. Franzese, “Isotropic soft-core potentials with two characteristic length scales and anomalous behaviour”, *J. Non-Crystalline Solids*, **357**:2 (2011), 419–426.
- [71] N. V. Gribova, Y. D. Fomin, D. Frenkel, V. N. Ryzhov, “Waterlike thermodynamic anomalies in a repulsive-shoulder potential system”, *Phys. Rev. E*, **79**:5 (2009), 051202, 6 pp.
- [72] Yu. D. Fomin, E. N. Tsiok, V. N. Ryzhov, “Inversion of sequence of diffusion and density anomalies in core-softened systems”, *J. Chem. Phys.*, **135**:23 (2011), 234502.
- [73] Y. D. Fomin, E. N. Tsiok, V. N. Ryzhov, “Core-softened system with attraction: trajectory dependence of anomalous behavior”, *J. Chem. Phys.*, **135**:12 (2011), 124512.
- [74] R. E. Ryltsev, N. M. Chtchelkatchev, V. N. Ryzhov, “Superfragile glassy dynamics of a one-component system with isotropic potential: competition of diffusion and frustration”, *Phys. Rev. Lett.*, **110**:2 (2013), 025701, 5 pp.
- [75] Yu. D. Fomin, E. N. Tsiok, V. N. Ryzhov, “Silicalike sequence of anomalies in core-softened systems”, *Phys. Rev. E*, **87**:4 (2013), 042122, 5 pp.
- [76] E. N. Tsiok, Yu. D. Fomin, V. N. Ryzhov, “Influence of random pinning on melting scenario of two-dimensional core-softened potential system”, [arXiv: 1608.05232](https://arxiv.org/abs/1608.05232).
- [77] V. N. Ryzhov, E. E. Tareyeva, “Bond orientational order in simple liquids”, *J. Phys. C: Solid State Phys.*, **21**:5 (1988), 819–824.
- [78] V. N. Ryzhov, “Local structure and bond orientational order in a Lennard-Jones liquid”, *J. Phys.: Condens. Matter*, **2**:26 (1990), 5855–5865.
- [79] J.-P. Hansen, I. R. McDonald, *Theory of Simple Liquids*, Academic Press, New York, 1986.
- [80] R. Lovett, “On the stability of a fluid toward solid formation”, *J. Chem. Phys.*, **66**:3 (1977), 1225.
- [81] В. Н. Рыжов, Е. Е. Тареева, Ю. Д. Фомин, “Особенность типа ‘ласточкин хвост’ и переход стекло–стекло в системе коллапсирующих твердых сфер”, *ТМФ*, **167**:2 (2011), 284–294.
- [82] V. V. Brazhkin, Yu. D. Fomin, V. N. Ryzhov, E. E. Tareyeva, E. N. Tsiok, “True Widom line for a square-well system”, *Phys. Rev. E*, **89**:4 (2014), 042136, 6 pp.
- [83] J. L. Colot, M. Baus, “The freezing of hard disks and hyperspheres”, *Phys. Lett. A*, **119**:3 (1986), 135–139.
- [84] M. Baus, J. L. Colot, “Thermodynamics and structure of a fluid of hard rods, disks, spheres, or hyperspheres from rescaled virial expansions”, *Phys. Rev. A*, **36**:8 (1987), 3912–3925.

Поступила в редакцию 6.09.2016