Письма в ЖЭТФ, том 115, вып. 2, с. 117 – 122

Структурные универсальности в двумерной жидкости Юкавы

Б. А. Клумов[1)]

Объединенный институт высоких температур РАН, 125412 Москва, Россия

Поступила в редакцию 18 ноября 2021 г.
После переработки 30 ноября 2021 г.
Принята к публикации 9 декабря 2021 г.

На примере системы Дебая–Хюккеля (Юкавы) рассматриваются структурные свойства двумерной жидкости в широком диапазоне значений параметра экранировки κ. Поведение ряда структурных индикаторов оказывается универсальным и не зависит от величины κ. Это, в частности, позволяет легко и неинвазивно определить ключевые параметры межчастичного взаимодействия по конфигурации частиц, наблюдаемой в экспериментах с комплексной (пылевой) и коллоидной плазмой.

DOI: 10.31857/S1234567822020094

Поведение сильно коррелированных двумерных систем – одна из важнейших проблем физики конденсированного состояния. Такие двумерные и квазидвумерные системы интенсивно исследуются, начиная с пионерских теоретических работ [1–6], за которые недавно была вручена Нобелевская премия по физике. При этом основное внимание уделялось типу и свойствам двумерного перехода "кристалл–жидкость", физика которого оказалась гораздо богаче физики плавления трехмерных систем, в частности, из за наличия промежуточной гексатической фазы, которая характеризуется наличием квазидальнего ориентационного порядка [7–14]. Свойства же двумерной жидкости (и особенно, жидкости вдали от кривой плавления) оказались изучены значительно слабее. В настоящей работе рассматриваются структурные свойства двумерной жидкости, используя в качестве примера модельную двумерную систему с отталкивательным потенциалом Юкавы (Дебая–Хюккеля). Парное взаимодействие частиц в системе Юкавы описывается потенциалом:

$$U(r) = (Q/r)\exp(-r/\lambda), \tag{1}$$

где Q – заряд частицы, а λ – длина экранирования. Известно, что фазовое состояние такой системы описывается двумя параметрами – параметром неидеальности $\Gamma = Q^2 \times \exp(-\kappa)/(TD)$ и параметром экранировки $\kappa = D/\lambda$, где D – среднее межчастичное расстояние в системе, а T – температура частиц. Система Юкава часто используется для описания экспериментов в пылевой (комплексной) плазме и в коллоидных системах (см., например, [15, 16]). В настоящей работе основным инструментом получения конфигураций частиц является метод классической молекулярной динамики, реализованный для канонического ансамбля (NVT) с термостатом Нозе–Хувера (Nose–Hoover) и периодическими граничными условиями [17]. Типичное число микрочастиц в исследуемой системе порядка $N \sim 10^5$.

При нулевой температуре двумерная система Юкавы при всех значениях параметра экранировки κ представляет из себя кристалл с треугольной (гексагональной решеткой) и 6-ю ближайшими соседями у каждого атома, которые расположены в вершинах правильного шестиугольника. При конечной температуре в такой системе появляются дефекты, в которых число ближайших соседей отличается от шести. Как правило, при низких температурах доминируют дислокационные пары из дефектов (5–7) (в которой у одной частицы пять ближайших соседей, а у другой – семь) и/или результат их объединения – дислокационная четверка, состоящая из четырех дефектов различной формы. Возможно также образование одиночных дефектов – дисклинаций (с 5-ю или 7-ю ближайшими соседями), но их концентрация обычно заметно ниже, чем у дислокационных пар и четверок, поскольку они создают сильное локальное упругое натяжение в системе, при котором им энергетически выгодно превратиться в дислокацию.

На рисунке 1 показаны три фазовых состояния двумерной системы Юкавы: фрагменты кристалла (a), гексатической фазы (b), которая наблюдалась в эксперименте с коллоидной плазмой [18] и равновесной жидкости вблизи линии плавления (c). Дефекты выделены синим и красным цветом; зеленый цвет соответствует кристаллическим кластерам с шестью ближайшими соседями у центральной частицы. На вставке к рис. 1a показано, как выглядят наиболее

[1)]e-mai: klumov@ihed.ras.ru

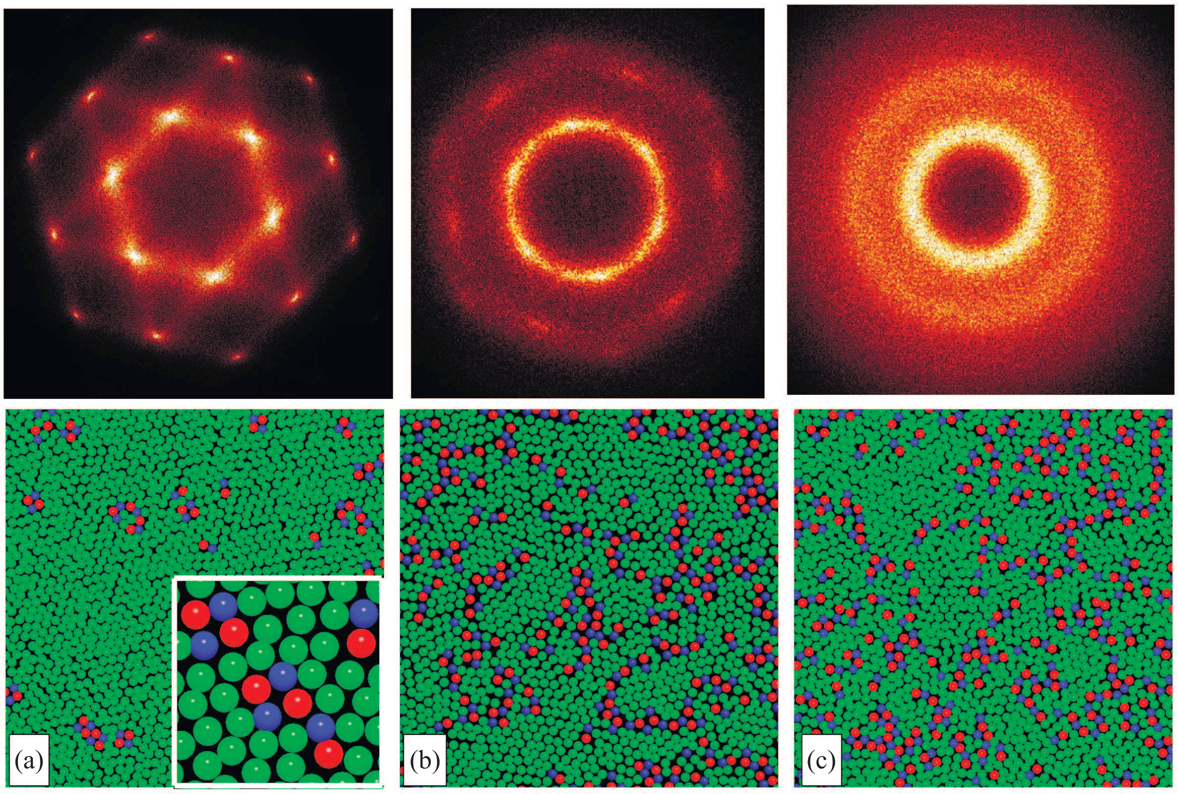

Рис. 1. (Цветной онлайн) Двумерная система Юкавы. Представлены фрагменты трех фаз: кристаллической, гексатической и жидкостной. Результаты численного моделирования показаны на панелях (a), (c), а результаты эксперимента на панели (b). Панель (a) соответствует кристаллической фазе, (c) – равновесной жидкости вблизи линии плавления, (b) – гексатической фазе, наблюдавшейся в эксперименте с коллоидной плазмой [18]. Цвет частиц соответствует числу ближайших соседей, меняясь от синего к красному при их увеличении: дефектам соответствуют синие частицы, у которых пять ближайших соседей и красные – у которых их семь, зеленым цветом выделены кристаллиты с 6-ю ближайшими соседями. На панели (a) вставка демонстрирует, как выглядят наиболее распространенные вблизи линии плавления кластеры из дефектов: дислокационные пары и четверки. Для каждой конфигурации над ней приводится соответствующий двумерный статический структурный фактор, который наглядно демонстрирует структурные различия указанных фаз

распространенные вблизи линии плавления кластеры из дефектов: дислокационные пары и четверки. Сравнивая рис. 1b и c, видно, что визуально очень сложно различить гексатическую фазу и расплав, однако вычисляя двумерный структурный фактор (которой приведен для каждой фазы), это делается достаточно легко, поскольку у двумерной жидкости пропадают тонкие детали углового распределения ближайших соседей и структурный фактор становится изотропным в пространстве волновых векторов (например, [7, 19, 20]).

Простейшей характеристикой двумерных систем является парная корреляционная функция (ПКФ) $g(r)$, которая определяется из: $g(r) = 1/N\langle\sum_{j\neq k}\delta(r - |\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_k|)\rangle$, а такие ее характеристики, как первый пик $g_{\max}$ и первый ненулевой минимум $g_{\min}$ могут быть использованы для количественного описания фазового состояния ансамбля частиц, как и в трехмерном случае (например, [21, 22]). На рисунке 2 показано, как меняются вид $g(r)$ при плавлении системы Юкавы, а также параметры $g_{\max}$ и $g_{\min}$ двумерной жидкости вблизи линии плавления для разных значений параметра экранировки κ. На вставке к рис. 2 показаны типичные функции $g(r)$ вблизи линии перехода кристалл-жидкость, при этом цвет кривых определяется безразмерной температурой $T^* \equiv T/T_m$, где T_m – температура плавления системы: синим кривым соответствует кристаллическое состояние, а красным – жидкостное. Хорошо видно разрушение трансляционного порядка (исчезновение далеких корреляций) при плавлении системы.

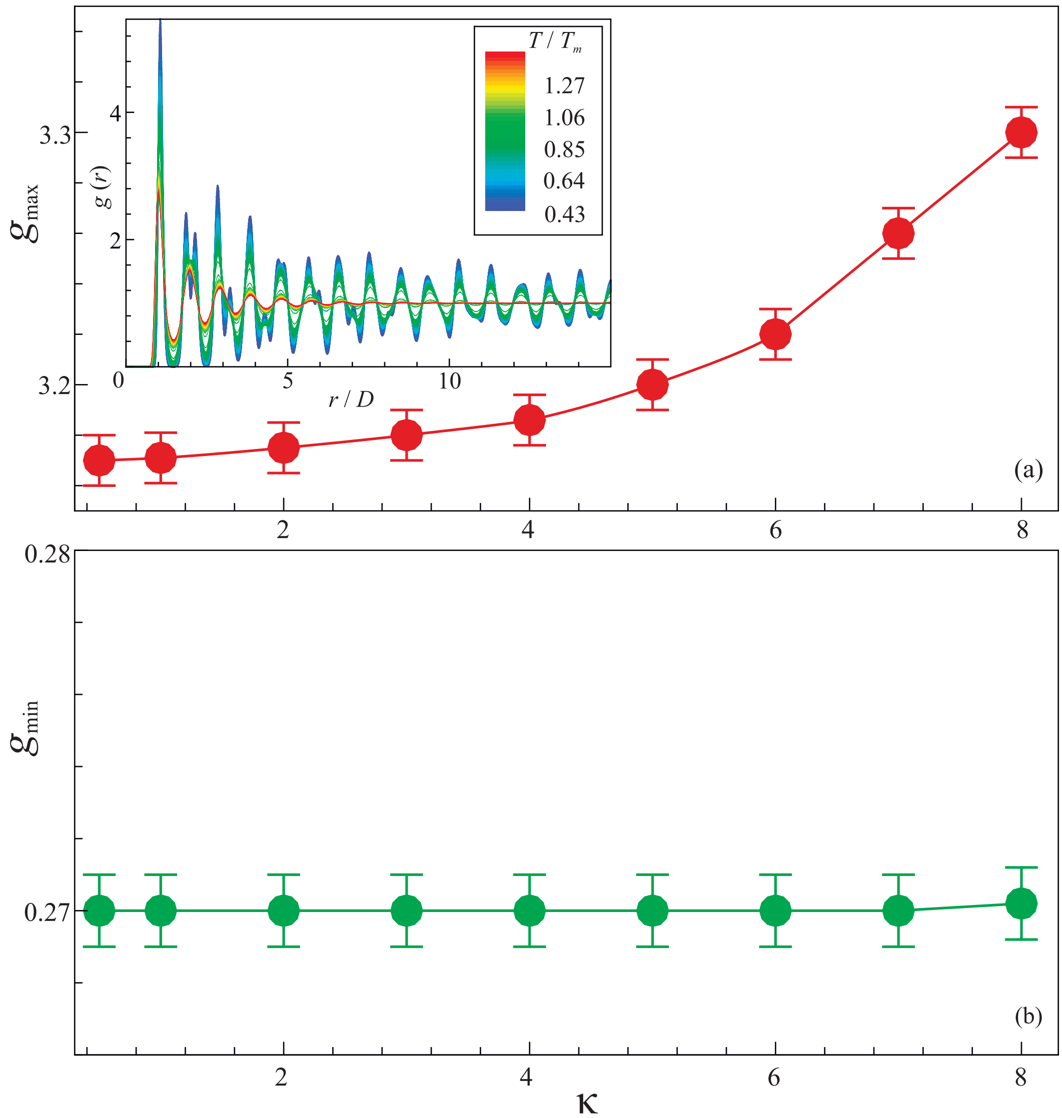

Рис. 2. (Цветной онлайн) Двумерная система Юкавы вблизи линии плавления. Показаны параметры $g_{\max}$ (красная линия, панель (a)) и $g_{\min}$ (зеленая линия, панель (b)) расплава в зависимости от параметра экранировки κ. На вставке к панели (a) показаны функции $g(r)$ вблизи линии перехода кристалл-жидкость для $\kappa = 3$. Цвет кривых определяется безразмерной температурой системы T/T_m, где T_m – температура плавления двумерной системы Юкавы. Синим кривым соответствует кристаллическое состояние частиц, а красным – жидкостное. Хорошо видна квазиуниверсальность параметра $g_{\min}$ в широком диапазоне значений κ. Монотонное увеличение $g_{\max}$ с ростом жесткости взаимодействия (параметра κ) и квазиуниверсальность параметра $g_{\min}$ позволяют неинвазивно определять ключевые параметры взаимодействия в экспериментах с комплексной и коллоидной плазмой. Число частиц в системе $N = 8 \times 10^4$

Зависимости параметров $g_{\max}$ и $g_{\min}$ от величины κ обнаруживают для расплавов системы Юкавы интересный эффект: пик ПКФ $g_{\max}$ растет с ростом жесткости межчастичного взаимодействия (т.е. с увеличением κ), а параметр $g_{\min}$ практически не меняется на линии плавления в рассмотренном диапазоне изменений параметра экранировки и $g_{\min} \approx 0.27$ (для $\kappa \simeq 0 \div 8$). Отметим, что подобное поведение параметров $g_{\max}$ и $g_{\min}$ в зависимости от жесткости парного взаимодействия наблюдалось и для трехмерных расплавов системы с обратным степенным отталкиванием [22]. Это делает параметры $g_{\max}$ и $g_{\min}$ важными характеристиками двумерной жидкости, одну из которых ($g_{\min}$) можно использовать как квазиуниверсальный индикатор плавления широкого класса систем, по крайней мере, для двумерных систем Юкавы и кулоновских систем.

Дополнительно, использование параметров $g_{\max}$ и $g_{\min}$ позволяет легко и неинвазивно определить ключевые параметры парного взаимодействия в двумерных экспериментах с расплавами комплексной и коллоидной плазмы: по величине $g_{\min}$ определяется, что исследуемая жидкость – расплав, а из параметра $g_{\max}$ находится жесткость взаимодействия (параметр экранировки κ). Для этого вполне достаточно одной конфигурации с $N \sim 10^3 \div 10^4$ частиц в системе. Такие значения N легко достижимы в экспериментах с двумерной коллоидной (например, [11]) и комплексной плазмой (например, [23, 24]). Можно показать, что для двумерной жидкости Юкавы при $T/T_m > 1$ параметр $g_{\min}$ зависит только от одного параметра – безразмерной температуры T^*. Это иллюстрирует рис. 3, на котором показаны такие зависимости $g_{\min}(T^*)$ для ряда значений параметра экранировки κ. Хорошо видно, $g_{\min}(T^*)$ практически не зависит от κ в широком диапазоне значений $\kappa \simeq (0 \div 8)$ и $T^* \simeq (1 \div 2.5)$. Это делает параметр $g_{\min}$ простым и удобным индикатором, позволяющим (вместе с $g_{\max}$) определить место исследуемой двумерной жидкости на фазовой диаграмме, даже если такая жидкость находится вдали от кривой плавления. Для трехмерных систем Юкавы такая универсальность была обнаружена в [25].

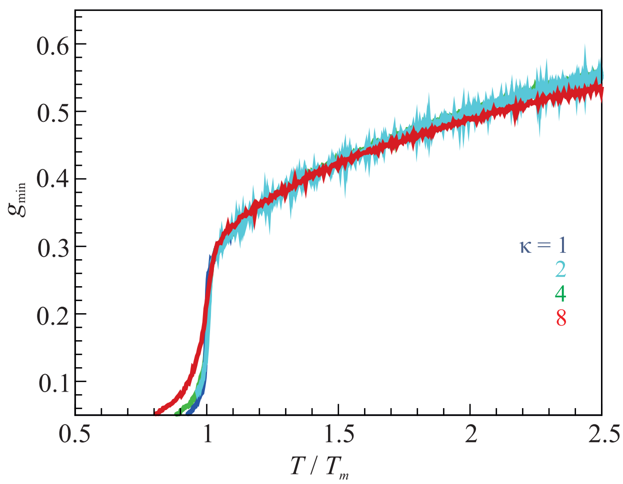

Рис. 3. (Цветной онлайн) Двумерная система Юкавы вблизи линии плавления. Зависимость параметра $g_{\min}$ от безразмерной температуры T^* для ряда значений параметра экранировки κ. Цвет кривых зависит от величины κ и меняется от синего ($\kappa = 1$) к красному ($\kappa = 8$), охватывая широкий диапазон жесткости межчастичного взаимодействия. Хорошо видно, что после перехода "кристалл–жидкость" (для $T^* > 1$) все кривые практически совпадают, т.е. $g_{\min}$ зависит только от T^*, а зависимость от параметра экранировки практически пропадает, по крайней мере, до температур $T \simeq 2.5T_m$

Отметим, что интегральные характеристики ПКФ, такие как, например, парная энтропия s_2 [26] и кумулятивная парная энтропия C_{s2} также могут использоваться для характеризации двумерной жидкости [27–30]. Функции s_2 и C_{s2} определяются из:

$$s_2 = -\frac{n}{2}\int_0^\infty [g(r)\ln g(r) - g(r) + 1]\, d\mathbf{r}, \qquad (2)$$

$$C_{s2}(r) = -\pi\int_0^r [g(x)\ln g(x) - g(x) + 1]\, x dx, \qquad (3)$$

где n – плотность частиц. Можно показать [27], что для двумерных систем s_2 расходится для кристаллической и гексатической фаз и сходится для жидкости, при этом кумулятивная функция C_{s2} служит характеристикой указанной сходимости (поскольку $C_{s2}(\infty) \equiv s_2$) и довольно легко позволяет отличить жидкость от других, упомянутых выше, фаз двумерной материи. На рисунке 4 показано поведение s_2 в зависимости от безразмерной температуры системы T^* для двух значений параметра κ, а вставка иллюстрирует поведение кумулятивной парной энтропии $C_{s2}(r)$ для разных значений T^* и разных фазовых состояний вещества и, в частности, ее расходимость

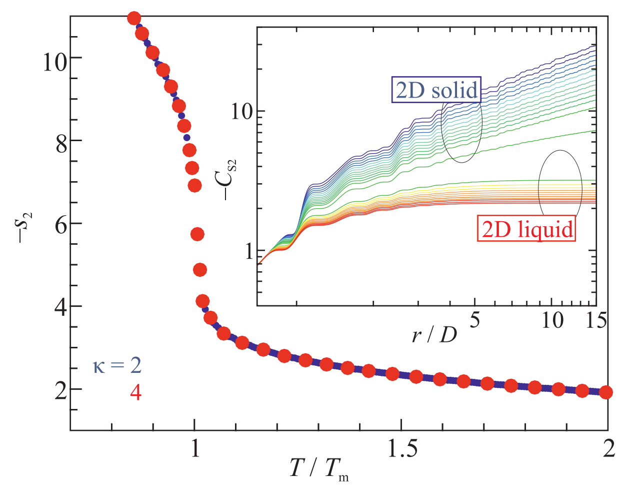

Рис. 4. (Цветной онлайн) Двумерная система Юкавы вблизи линии плавления. Парная энтропия s_2 в зависимости от приведенной температуры $T^* \equiv T/T_m$ для двух значений параметра экранировки κ. Резкое уменьшение s_2 с ростом температуры T^* соответствует плавлению системы. Вставка показывает поведение кумулятивной парной энтропии $C_{s2}(r)$ для разных температур системы, охватывая твердотельную и жидкостную фазы. Функция $C_{s2}(r)$ сходится только для жидкостной фазы, поэтому зависимость $s_2(T^*)$ имеет физический смысл только при $T^* > 1$

для твердотельной фазы. Видно, что s_2 определена только для жидкости и на рис. 4 имеет физический смысл только часть кривой с $T^* > 1$. Квазиуниверсальность s_2 для жидкости вблизи кривой плавления продемонстрирована для двух значений κ, однако с практической точки зрения использование параметра $g_{\min}$ предпочтительнее.

Очень важной характеристикой двумерных систем является концентрация дефектов n_d и геометрические свойства кластеров из дефектов [31]. Дефекты для треугольной решетки легко определяются разбиением Вороного области, занятой частицами (например, [31–33]). При этом каждой частице системы соответствует выпуклый многоугольник число сторон которого равно числу ближайших соседей n_{nn}. Дефектами считаются частицы с $n_{nn} \neq 6$, а их число в системе равно n_d. Кластеры из дефектов определяются как объединение дефектных частиц при условии, что указанные частицы являются ближайшими соседями (подробнее в [31]).

Здесь мы рассмотрим только поведение n_d вблизи кривой плавления для разных значений параметра экранировки κ. Такие зависимости представлены на рис. 5, где показаны относительные концентрации дефектов n_d в зависимости от температуры T^* для ряда значений κ. Резкое увеличение n_d при $T^* \approx 1$ соответствует плавлению системы, дальнейшее (при $T^* > 1$) поведение функции $n_d(T^*)$ квазиуниверсально и практически не зависит от величины параметра экранировки κ, по крайней мере, вплоть до температур $T/T_m \simeq 10$. Важной особенностью двумерной жидкости является то, что с ростом температуры концентрация дефектов растет медленно (логарифмически), например, при $T/T_m \simeq 10$ только половина атомов являются дефектами. Это иллюстрирует вставка на рис. 5, где показан фрагмент двумерной жидкости Юкавы при $T/T_m \approx 5$, демонстрирующий распределение дефектов в системе. Частицы с 5-ю, 6-ю, 7-ю ближайшими соседями показаны синим, зеленым и красным цветом, соответственно. Видно значительное количество кристаллических кластеров. На линии плавления $n_d \sim 0.25$ для всех рассмотренных величин κ, что, в частности, означает, что двумерный расплав системы Юкавы состоит в основном из кристаллитов (т.е. кластеров, состоящих из частиц с 6-ю ближайшими соседями). Это кардинально отличает двумерные системы от трехмерных (у которых расплав практически не содержит кристаллических кластеров).

В настоящей работе на примере системы Юкавы рассмотрены структурные особенности двумерной жидкости. Показано, что такие простые пара-

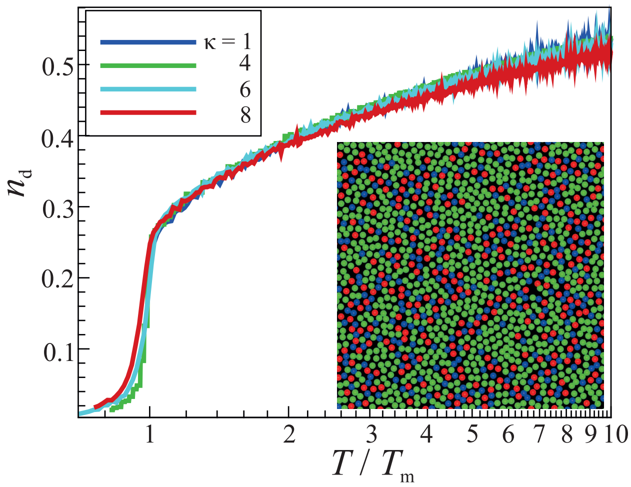

Рис. 5. (Цветной онлайн) Двумерная система Юкавы вблизи линии плавления. Показана относительная концентрация дефектов n_d как функция безразмерной температуры $T^* \equiv T/T_m$ для ряда значений параметра экранировки κ (указаны на графике). Резкое увеличение n_d при $T^* \approx 1$ соответствует плавлению системы, дальнейшее ($T^* > 1$) поведение функции $n_d(T^*)$ квазиуниверсально и практически не зависит от величины параметра экранировки κ. Отметим, что на линии плавления $n_d \simeq 0.25$, что означает, что двумерный расплав системы Юкавы состоит в основном из кристаллитов (кластеров из частиц с 6-ю ближайшими соседями). На вставке показано распределение дефектов в двумерной жидкости при $T/T_m \approx 5$. Частицы с 5-ю, 6-ю, 7-ю ближайшими соседями показаны синим, зеленым и красным цветом, соответственно

метры, ассоциированные с парной корреляционной функцией $g(r)$, как ее первый пик $g_{\max}$ и первый ненулевой минимум $g_{\min}$, являются важными метриками, характеризующими двумерные системы. В частности, обнаружена квазиуниверсальность параметра $g_{\min}$ для расплавов двумерной системы Юкавы в широком диапазоне жесткости межчастичного взаимодействия (т.е. значений параметра экранировки κ), что делает параметр $g_{\min}$ простым индикатором двумерного плавления и позволяет легко идентифицировать расплав такой системы. Указанная квазиуниверсальность параметра $g_{\min}$, по-видимому, отражает универсальность расплавов всех двумерных плотно упакованных систем, к которым, помимо систем Юкавы, относятся кулоновские системы, мягкие сферы (системы с обратным степенным отталкиванием) и др.

Монотонный рост параметра $g_{\max}$ с увеличением κ вместе с универсальностью индикатора $g_{\min}$ позволяет легко и неинвазивно определить ключевые характеристики межчастичного взаимодействия в экспериментах с расплавами комплексной (пылевой) и коллоидной плазмы, прежде требовавших значительных усилий. Установлена универсальность относительной концентрации дефектов n_d в двумерной жидкости Юкавы, которая зависит в широком диапазоне значений κ только от приведенной температуры $T^* = T/T_m$. Наконец, двумерные расплавы состоят в основном (*ca* 75 %) из кристаллитов, что кардинально отличает двумерные системы от трехмерных.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (соглашение с ОИВТ РАН # 075-15-2020-785 от 23 сентября 2020 г.)

---

1. V. L. Berezinskii, Sov. Phys. JETP **32**, 493 (1971).
2. V. L. Berezinskii, Sov. Phys. JETP **34**, 610 (1972).
3. J. M. Kosterlitz and D. J. J. Thouless, Phys. C **6**, 1181 (1973).
4. B. I.Halperin and D. R.Nelson, J. Phys. Rev. Lett. **41** 121 (1978).
5. D. R. Nelson and B. I. Halperin, Phys. Rev. B **19**, 2457 (1979).
6. A. P. Young, Phys. Rev. B **19**, 1855 (1979).
7. В. Н. Рыжов, Е. Е. Тареева, Ю. Д. Фомин, Е. Н. Циок, УФН **187**, 921 (2017).
8. S. T. Chui, Phys. Rev. B **28**, 178 (1983).
9. V. M. Bedanov, G. V. Gadiyak, and Yu. E. Lozovik, Phys. Lett. A **109**(6), 239 (1985).
10. K. Zahn, R. Lenke, and G. Maret, Phys. Rev. Lett. **82**(13), 2721 (1999).
11. U. Gasser, C. Eisenmann, G. Maret, and P. Keim, ChemPhysChem **11**, 963 (2010).
12. Z. Wang, A. M. Alsayed, A. G. Yodh, and Y. Han, J. Chem. Phys. **132**, 154501 (2010).
13. S. C. Kapfer and W. Krauth, Phys. Rev. Lett. **114**, 035702 (2015).
14. P. Hartmann, G. J. Kalman, Z. Donko, and K. Kutasi, Phys. Rev. E **72**, 026409 (2005).
15. V. Fortov and G. Morfill, *Complex and Dusty Plasmas: From Laboratory to Space*, CRC Press, Boca Raton, FL (2009).
16. C. N. Likos, Phys. Rep. **348**(4–5), 267 (2001).
17. S. Plimpton, J. Comput. Phys. **117**(1), 1 (1995).
18. B. J. Lin and L. J. Chen, J. Chem. Phys. **126**, 34706 (2007).
19. Z. Krebs, A. B. Roitman, L. M. Nowack, C. Liepold, B. Lin, and S. A. Rice, J. Chem. Phys. **149**, 034503 (2018).
20. X. Sun, Y. Li, Y. Ma, and Z. Zhang, Sci. Rep. **6**, 24056 (2016).
21. R. Agrawal and D. A. Kofke, Mol. Phys. **85**, 23 (1995).
22. S. Khrapak, B. Klumov, and L. Couedel, Sci. Rep. **7**, 7985 (2017).
23. G. E. Morfill, A. V. Ivlev, S. A. Khrapak, B. A. Klumov, M. Rubin-Zuzic, U. Konopka, and H. M. Thomas, Contrib. Plasmas Phys. **44**(5–6), 450 (2004).
24. G. E. Morfill, S. A. Khrapak, A. V. Ivlev, B. A. Klumov, M. Rubin-Zuzic, and H. M. Thomas, Phys. Scr. T **107**, 59 (2004).
25. S. Khrapak and B. Klumov, Phys Plasmas. **27**, 0245017 (2020).
26. A. Baranyai and D. J. Evans, Phys. Rev. A **40**, 3817 (1989).
27. B. A. Klumov and S. A. Khrapak, Res. Phys. **17**, 103020 (2020).
28. Z. Wang, W. Qi, Y. Peng, A. M. Alsayed, Y. Chen, P. Tong, and Y. Han, J. Chem. Phys. **134**, 034506 (2011).
29. A. L. Thorneywork, R. E. Rozas, R. P. A. Dullens, and J. Horbach, Phys. Rev. Lett. **115**, 268301 (2015).
30. A. L. Thorneywork, J. L. Abbott, D. Aarts, P. Keim, and R. P. A. Dullens, J. Phys. Condens. Matter **30**, 104003 (2018).
31. B. A. Klumov, Phys.-Uspekhi **53**(10), 1053 (2010).
32. W. Qi, Z. Wang, Y. Han, and Y. Chen, J. Chem. Phys. **133**, 234508 (2010).
33. E. V. Vasilieva, O. F. Petrov, and M. M. Vasiliev, Sci. Rep. **11**, 523 (2021).