Письма в ЖЭТФ, том 116, вып. 10, с. 681 – 685

Двумерная система Юкавы: поведение дефектов вблизи области плавления

Б. А. Клумов[1)]

Объединенный институт высоких температур РАН, 125412 Москва, Россия

Поступила в редакцию 14 сентября 2022 г.
После переработки 28 сентября 2022 г.
Принята к публикации 5 октября 2022 г.

Рассматривается поведение дефектов и кластеров из дефектов вблизи области плавления двумерной системы Юкавы в широком диапазоне значений параметра экранировки κ. Такие характеристики, как концентрация дефектов, их спектр по размерам и ряд других метрик оказываются квазиуниверсальными и не зависят от величины κ. Предлагаются простые индикаторы плавления плотноупакованных двумерных систем.

DOI: 10.31857/S1234567822220062, EDN: lylkhd

Поведение двумерных систем вблизи области их плавления – одна из важнейших проблем физики конденсированного состояния. Двумерные и квазидвумерные системы интенсивно исследуются, начиная с пионерских теоретических работ [1–7], когда было обнаружено, что физика двумерного плавления гораздо богаче, чем трехмерного, в частности, из-за наличия промежуточной гексатической фазы, в которой разрушен трансляционный порядок, но существует квазидальный ориентационный порядок (например, [8]). Дополнительно, интерес к двумерным материалам значительно вырос после открытия графена [9, 10] и наблюдения двумерного плавления в системе квазичастиц – скирмионов [11]. При этом, при изучении топологических дефектов в двумерных системах, основное внимание уделялось свойствам дислокаций и дислокационных пар, а изучение свойств кластеров из дефектов и их влияние на переход "кристалл–жидкость" только начинается [12, 13]). Целью настоящей работы является изучение свойств дефектов и кластеров из дефектов вблизи области плавления плотноупакованных двумерных систем (т.е. систем, имеющих в твердотельном состоянии треугольную (гексагональную) решетку), используя в качестве примера, модельную систему с отталкивательным потенциалом Юкавы (Дебая–Хюккеля). Отметим, что класс плотноупакованных двумерных систем очень широк. К ним, в частности, относятся кулоновские системы, системы мягких сфер, Леннард–Джона и др., а результаты, полученные для системы Юкавы, могут быть распространены на весь класс систем с плотной упаковкой атомов. Парное взаимодействие частиц в системе Юкавы описывается потенциалом:

$$U(r) = (Q/r)\exp(-r/\lambda), \qquad (1)$$

где Q – заряд частицы (заряд и масса всех микрочастиц считаются одинаковыми), 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, [14, 15]). 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 [16]. Типичное число микрочастиц в исследуемой двумерной системе порядка $N \sim 10^5$, это связано с необходимостью изучения дефектов в кристаллической фазе, где их концентрация мала; такие значения N являются рекордными на сегодняшний день.

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 топологические дефекты, в которых число ближайших соседей отличается от шести. Как правило, при низких

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

температурах доминируют дислокации (пары из дефектов (5-7)) (в такой паре у одной частицы пять ближайших соседей, а у другой – семь) и/или результат их объединения – дислокационная пара, состоящая из четырех дефектов различной формы. С повышением температуры в системе появляются кластеры из дефектов, которые возникают в результате их объединения и распределение дефектов и кластеров из дефектов становится значительно более сложным. Ближайшие соседи для плотноупакованных двумерных систем легко определяются с помощью метода Вороного [17], при этом двумерное пространство, занятое частицами, разбивается на многогранники, а каждой частице системы соответствует выпуклый многоугольник, число сторон которого равно числу ближайших соседей $n_{\rm nb}$. Здесь все частицы с числом $n_{\rm nb} \neq 6$ считаются дефектными, а их относительная концентрация $n_{\rm d} = N_{\rm d}/N$ (где $N_{\rm d}$ и N – число дефектных частиц и полное число частиц, соответственно) является важной характеристикой двумерной системы [18, 19].

На рисунке 1 показано, как относительные концентрации $n_{\rm d}$ зависят от приведенной температуры системы $T^* = T/T_{\rm m}$, где $T_{\rm m}$ – температура плавления. Представлены зависимости для двух значений параметра экранировки: $\kappa = 2$ (синяя кривая) и $\kappa = 4$ (красная кривая). Хорошо видно, что данные кривые практически совпадают. Это означает, что концентрация дефектов $n_{\rm d}$ практически не зависит вблизи области плавления от значения параметра κ, т.е. является универсальной характеристикой системы, которая зависит только от параметра T^*. Этот важный результат позволяет, в частности, определить фазовое состояние системы и величину параметра T^* в эксперименте, зная лишь концентрацию дефектов, которая достаточно легко определяется по пространственному расположению частиц. Для жидкостной фазы подобный результат был получен недавно в [19]. Резкий рост $n_{\rm d}$, который наблюдается в узком интервале приведенных температур T^*, соответствует плавлению системы, с характерной величиной $n_{\rm d} \simeq 0.2$ у расплава. На вставках к рис. 1 показаны фрагменты трех фаз: кристаллической (a) (с $n_{\rm d} \simeq 0.05$), гексатической [20] (b) (с $n_{\rm d} \simeq 0.15$) и жидкостной (c) ($n_{\rm d} \simeq 0.2$). Цвет частиц определяется числом ближайших соседей и меняется от синего к красному при его увеличении: дефектным частицам соответствуют синие и красные частицы (с 5-ю и 7-ю ближайшими соседями соответственно), а зеленым цветом выделены кристаллические частицы с 6-ю ближайшими соседями. Видно значительное отличие гексатической и жидкостной фаз от кристаллической по виду и концентрации дефектов и кластеров из дефектов, что сильно упрощает их идентификацию в экспериментах с комплексной и коллоидной плазмой. На вставках (a, c) также показано, как выглядят дислокации и дислокационные пары (на вставке (a)) и точечные дефекты (дисклинации) с 5-ю и 7-ю ближайшими соседями (на вставке (c)) в реальном плазменном кристалле.

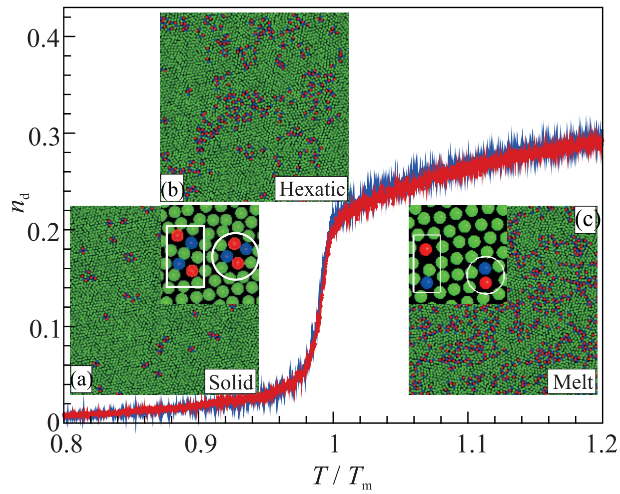

Рис. 1. (Цветной онлайн) Двумерная система Юкавы вблизи области плавления. Представлены относительные концентрации $n_{\rm d}$ дефектных частиц (т.е. частиц с числом ближайших соседей $N_{\rm nb} \neq 6$) в зависимости от приведенной температуры $T^* = T/T_{\rm m}$, где $T_{\rm m}$ – температура плавления для двух значений параметра экранировки: $\kappa = 2$ (синяя кривая) и $\kappa = 4$ (красная кривая). Видно, что данные кривые практически совпадают, что означает квазиуниверсальность зависимости $n_{\rm d}(T^*)$ в рассмотренном диапазоне значений T^*. Резкий рост $n_{\rm d}$, который наблюдается в узком интервале температур, соответствует переходу "кристалл–жидкость", с характерной величиной $n_{\rm d} \simeq 0.2$ у расплава. На вставках показаны фрагменты трех фаз: кристаллической (a) ($n_{\rm d} \simeq 0.05$), гексатической (b) ($n_{\rm d} \simeq 0.15$) и жидкостной (c) ($n_{\rm d} \simeq 0.2$). Цвет частиц соответствует числу ближайших соседей, меняясь от синего к красному при его увеличении: дефектным частицам соответствуют синие частицы, у которых пять ближайших соседей и красные – у которых их семь, зеленым цветом выделены кристаллические частицы с 6-ю ближайшими соседями. Дополнительно, на вставках (a) и (c) показаны дислокации и дислокационные пары (a) и дисклинации с 5-ю и 7-ю ближайшими соседями в реальном кристалле рядом с парной дислокацией (c). Видно, что параметр $n_{\rm d}$ заметно отличается для всех указанных фаз, что позволяет использовать его для их идентификации; зная $n_{\rm d}$, легко определяется приведенная температура системы T^*

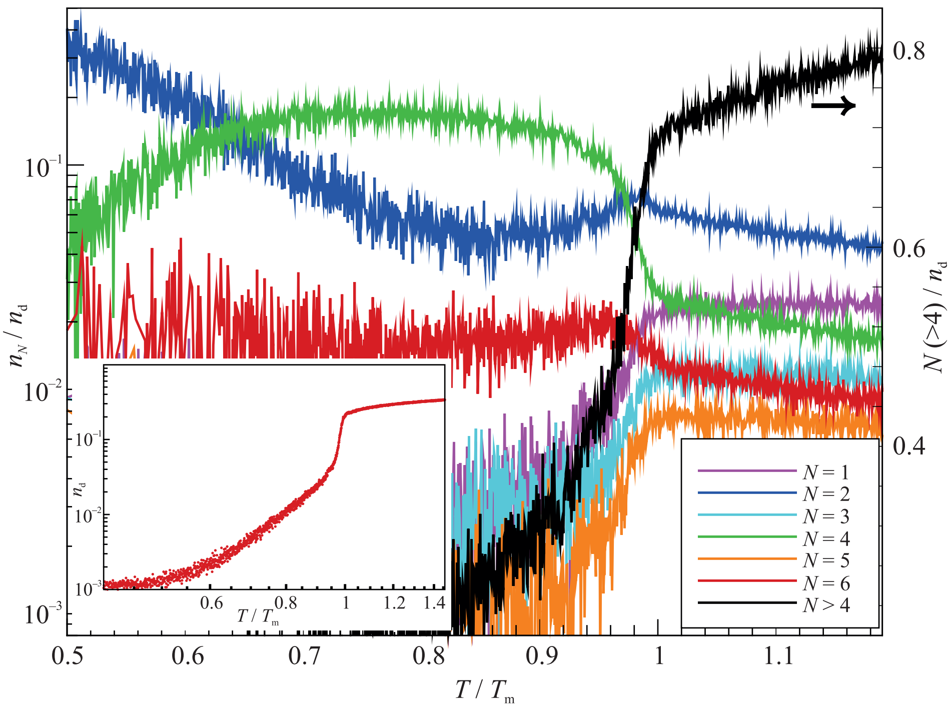

Рис. 2. (Цветной онлайн) Двумерная система Юкавы вблизи области плавления. Показаны относительные концентрации $n_N/n_{\rm d}$ кластеров, состоящих из N дефектов в зависимости от приведенной температуры $T^* = T/T_{\rm m}$. Здесь $n_{\rm d}$ – концентрация всех дефектных частиц в системе (зависимость $n_{\rm d}(T^*)$ является квазиуниверсальной и представлена на вставке в двойном логарифмическом масштабе для иллюстрации степенного роста $n_{\rm d}$ в диапазоне $T^* \simeq 0.6 \div 0.95$). Разным цветом показаны относительные концентрации дефектов: дисклинаций ($N = 1$, лиловый), дислокаций ($N = 2$, синий) и дислокационных пар ($N = 4$, зеленый), а также кластеров из дефектов с $N = 3$ (бирюзовый), $N = 5$ (оранжевый) и $N = 6$ (красный) соответственно. Кумулятивная доля всех дефектных частиц, входящих в кластеры с $N > 4$, показана черным цветом. Видно, что в кристаллической фазе доминируют дефекты – дислокации и дислокационные пары, хотя вклад остальных кластеров довольно значительный ($\simeq 30\,\%$ в кристалле вблизи области плавления). При температурах $T^* \leq 0.6$ в системе превалируют дислокации ($N = 2$), в дальнейшем с ростом температуры начинают доминировать дислокационные пары ($N = 4$), концентрация которых резко уменьшается при переходе "кристалл–жидкость" в результате их диссоциации на пару дислокаций. Хорошо видно, что при плавлении резко увеличивается доля относительно крупных кластеров (с $N > 4$), которая в расплаве составляет $\simeq 70\,\%$

Кроме величины $n_{\rm d}$, важную роль в двумерных системах могут играть кластеры из дефектов различного размера. Это иллюстрирует рис. 2, где показана их концентрация вблизи области плавления для двумерной системы Юкавы с параметром $\kappa = 3$. На нем показаны относительные концентрации (доли) $n_N/n_{\rm d}$ кластеров, состоящих из N дефектных частиц для разных температур T^*. Представлены зависимости для дисклинаций ($N = 1$), дислокаций ($N = 2$) и дислокационных пар ($N = 4$), а также для наиболее распространенных кластеров из дефектов с $N = 3$, $N = 5$ и $N = 6$. Дополнительно приводится кумулятивная доля всех дефектных частиц, входящих в кластеры с $N > 4$, которая показана черным цветом. Видно, что в кристаллической фазе доминируют дефекты – ислокации и дислокационные пары, хотя вклад остальных кластеров довольно значительный (например, для кристалла вблизи области плавления доля таких кластеров составляет $\simeq 0.3$, что может оказывать заметное влияние на плавление такой системы. При температурах $T^* \leq 0.6$ в системе превалируют дислокации (с $N = 2$), в дальнейшем с ростом температуры начинают доминировать дислокационные пары ($N = 4$) (их доли сравниваются: $n_2 \approx n_4$ при $T^* \simeq 0.6$), концентрация которых резко уменьшается при переходе "кристалл–жидкость" в результате диссоциации дислокационных пар на две дислокации, что, по-видимому, говорит в пользу KTHNY сценария перехода (например, [8]). Хорошо видно, что и в гексатической фазе и в расплаве доля относительно крупных кластеров (с $N > 4$) значительно выше, чем в кристалле, что в значительной степени определяет свойства указанных фаз. На вставке к рис. 2 показана зависимость n_d от T^* в двойном логарифмическом масштабе для иллюстрации почти степенного роста n_d в диапазоне $T^* \simeq 0.6 \div 0.95$ с показателем степени $\alpha \sim 5$ ($n_\mathrm{d} \propto (T^*)^\alpha$).

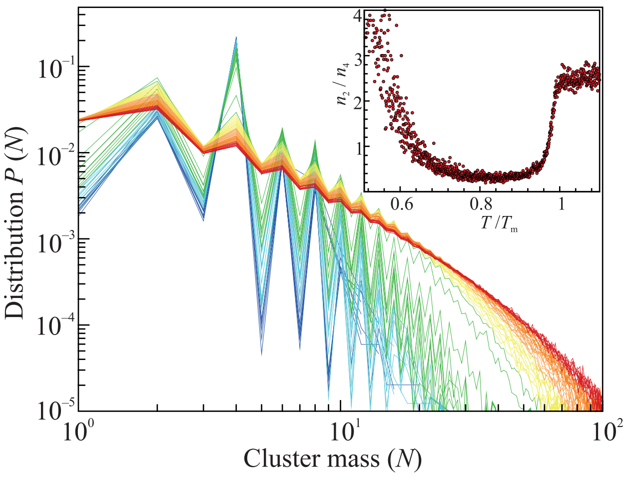

Рис. 3. (Цветной онлайн) Двумерная система Юкавы вблизи области плавления. Распределение кластеров из дефектов $P(N)$ по числу N дефектов, входящих в кластер, вычисленное для разных приведенных температур T^*. Цвет кривых определяется величиной T^* и меняется от синего к красному при ее увеличении. Кривые охватывают диапазон $T^* \simeq 0.8 \div 1.1$ и построены так, что соседним кривым отвечает малое изменение температуры $\delta T^* \sim 10^{-3}$. Резкое увеличение расстояния между ними соответствует плавлению системы. Видно, что в кристаллической фазе распределение $P(N)$ быстро затухает с ростом N, в случае жидкостной фазы ситуация обратная – в зависимости $P(N)$ появляются степенные хвосты. Кроме того, при плавлении сильно меняется форма $P(N)$: доминирование дислокаций и дислокационных пар ($N = 2, 4$) в кристаллической фазе сменяется сложным спектром кластеров, в котором превалируют дислокации ($N = 2$). Это, в частности, позволяет легко различать указанные фазы. На вставке показано, как меняется при нагреве системы безразмерный параметр $n_{2/4} = n_2/n_4$, определяемый как отношение концентрации дислокаций к концентрации дислокационных пар. В кристаллической фазе вблизи области плавления $n_{2/4}^{\mathrm{cr}} \simeq 0.5$ (при $T^* \approx 0.9$), для расплава $n_{2/4}^{\mathrm{melt}} \simeq 2.5$ и эта величина не зависит от параметра экранировки κ, т.е. является универсальной характеристикой двумерного расплава системы Юкавы

Концентрации дефектов и кластеров из дефектов n_N дают важную характеристику двумерной системы – спектр дефектов по их "массе" $P(N)$. Такое распределение кластеров из дефектов $P(N)$ по числу N дефектов, входящих в кластер, показано на рис. 3 для разных температур T^*. Цвет кривых определяется величиной T^* и меняется от синего к красному при ее увеличении. Кривые охватывают диапазон $T^* \simeq 0.8 \div 1.1$ и построены так, что соседним кривым отвечает малое изменение температуры $\delta T^* \sim 10^{-3}$. Резкое увеличение расстояния между соседними кривыми соответствует плавлению системы. Видно, что в кристаллической фазе распределение $P(N)$ быстро затухает с ростом N, в случае жидкостной фазы ситуация обратная – в зависимости $P(N)$ появляются степенные хвосты. Кроме того, при плавлении сильно меняется форма $P(N)$: доминирование дислокаций и дислокационных пар ($N = 2, 4$) в кристаллической фазе сменяется сложным спектром кластеров, в котором превалируют дислокации ($N = 2$). Можно показать [21], что в гексатической фазе $P(2) \sim P(4)$. Это, в частности, позволяет различать указанные фазы в экспериментах с коллоидной и комплексной плазмой. На вставке к рис. 3 показано, как меняется при нагреве системы безразмерный параметр $n_{2/4} = n_2/n_4$, определяемый как отношение концентрации дислокаций к концентрации дислокационных пар. В кристаллической фазе вблизи области плавления $n_{2/4}^{\mathrm{cr}} \simeq 0.5$ (при $T^* \approx 0.9$), для расплава $n_{2/4}^{\mathrm{melt}} \simeq 2.5$ и эта величина не зависит от параметра экранировки κ, т.е. является универсальной характеристикой двумерного расплава системы Юкавы. В заключение отметим, что все полученные выше результаты относятся к однородным системам, например, они могут быть применены к описанию коллоидной плазмы, плавлению скирмионных решеток и др. В комплексной (пылевой) плазме эксперименты, как правило, проводятся с микрочастицами, находящимися в газоразрядной плазме. В такой плазме очень важную роль играет внешнее удерживающее электрическое поле (конфайнмент), которое, в частности, приводит к тому, что у квазидвумерных систем микрочастиц плотность максимальна в центре системы и монотонно спадает к периферии [22, 23, 24], что делает плавление таких систем более сложным [24], хотя все основные результаты статьи могут быть применены и в этом случае.

В настоящей работе впервые рассмотрена кинетика дефектов и кластеров из дефектов вблизи области перехода "кристалл-жидкость" для двумерной системы Юкавы. Показано, что относительная концентрация дефектов n_d зависит только от приведенной температуры T^* и не зависит от параметра экранировки κ в широком диапазоне величин T^*, т.е является универсальной характеристикой системы. Такими же универсальными характеристиками двумерной системы Юкавы являются распределения дефектов по размерам $P(N)$ и их кумулятивные метрики. Отношение концентраций дислокаций и дислокационных пар n_2/n_4 также зависит только от параметра T^*, а величину $n_2/n_4 \approx 2.5$ предлагается использовать как удобный индикатор расплава у всех двумерных плотноупакованных систем.

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. Thouless, J. Phys. C: Solid State Phys. **6**, 1181 (1973).
4. B. I. Halperin and D. R. Nelson, 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. S. T. Chui, Phys. Rev. B **28**, 178 (1983).
8. В. Н. Рыжов, Е. Е. Тареева, Ю. Д. Фомин, Е. Н. Циок, УФН **187**, 921 (2017).
9. K. V. Zakharchenko, M. I. Katsnelson, and A. Fasolino, Phys. Rev. Lett. **102**, 046808 (2009).
10. J. H. Los, Phys. Rev. B **91**, 045415 (2015).
11. P. Huang, T. Schoonenberger, M. Cantoni, L. Heinen, A. Magrez, A. Rosch, F. Carbone, and H. M. Ronnow, Nat. Nanotechnol. **15**, 761 (2020).
12. M. Mazars and R. Salazar, EPL **126**, 56002 (2019).
13. P. Digregorio, D. Levis, L. F. Cugliandolo, G. Gonnella, and I. Pagonabarraga, Soft Matter **18**, 566 (2022).
14. V. Fortov and G. Morfill, *Complex and Dusty Plasmas: From Laboratory to Space*, CRC Press, Boca Raton, FL (2009).
15. C. N. Likos, Phys. Rep. **348**(4–5), 267 (2001).
16. S. Plimpton, J. Comput. Phys. **117**(1), 1 (1995).
17. G. Voronoi, J. Reine Angew. Math. **134**, 198 (1908).
18. B. A. Klumov, Phys.-Uspekhi **53**(10), 1053 (2010).
19. B. A. Klumov, JETP Lett. **115**(2), 108 (2022).
20. B. J. Lin and L. J. Chen, J. Chem. Phys. **126**, 34706 (2007).
21. Б. А. Клумов, УФН (2022); 10.3367/UFNe.2022.09.039237.
22. H. Totsuji, C. Totsuji, and K. Tsuruta, Phys Rev. E **64**, 066402 (2001).
23. D. H. E. Dubin, Phys. Rev. E **55**(4), 4017 (1997).
24. B. A. Klumov, JETP Lett. **110**, 715 (2019).