

СЦЕНАРИИ ПЛАВЛЕНИЯ ДВУМЕРНЫХ СИСТЕМ — ВОЗМОЖНОСТИ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

В. Н. Рыжов, Е. А. Гайдук, Е. Е. Тареева, Ю. Д. Фомин, Е. Н. Циок*

*Институт физики высоких давлений им. Л. Ф. Верещагина Российской академии наук
108840, Троицк, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 2 февраля 2023 г.,
после переработки 21 марта 2023 г.
Принята к публикации 21 марта 2023 г.

Обсуждаются современные теории плавления двумерных систем, базирующиеся в основном на представлениях теории Березинского–Костерлица–Таулеса (БКТ) фазовых переходов в двумерных системах с непрерывной симметрией. В настоящее время существуют три основных сценария плавления двумерных кристаллов. Прежде всего, это теория Березинского–Костерлица–Таулеса–Хальперина–Нельсона–Янга (БКТХНЯ), в рамках которой двумерные кристаллы плавятся посредством двух непрерывных переходов типа БКТ с промежуточной гексатической фазой. При этом фазовый переход первого рода также может реализоваться. Третий сценарий был недавно предложен Бернардом и Краусом (БК), в рамках которого плавление также может происходить посредством двух переходов, при этом переход кристалл–гексатическая фаза происходит как переход типа БКТ, а переход гексатическая фаза–изотропная жидкость — переход первого рода. В обзоре приведен критический анализ применяемых подходов для определения параметров и вида перехода методами компьютерного моделирования.

EDN: GGQXZA

DOI: 10.31857/S0044451023070131

СОДЕРЖАНИЕ

1. Введение	143	3.3. Сценарий Бернарда и Крауса (БК)	153
2. Теория Березинского–Костерлица– Таулеса (БКТ)	144	4. Определение параметров двумерно- го плавления методами компьютерного моделирования	154
3. Сценарии двумерного плавления	148	5. Двумерная система с n - m -потенциалом	161
3.1. Теория плавления Березинского–Костер- лица–Таулеса–Хальперина–Нельсона– Янга (БКТХНЯ)	148	6. Заключение	165
3.2. Плавление двумерных решеток посред- ством перехода первого рода	150	Литература	166

1. ВВЕДЕНИЕ

После появления основополагающих работ Березинского [1, 2], Костерлица и Таулеса (БКТ) [3–6] (Нобелевская премия 2016 года) физика двумерных систем получила мощный стимул к развитию. Теория Березинского–Костерлица–Таулеса (БКТ) нашла и продолжает находить применение при рассмотрении самых разных двумерных систем: сверх-

текучих и сверхпроводящих пленок, тонких магнитных и жидкокристаллических пленок, систем джозефсоновских контактов, двумерных систем ультрахолодных атомов в оптомагнитных ловушках (см., например, [7–11]).

Отдельным и очень важным ответвлением теории БКТ является теория двумерного плавления, развитая в конце 70-х в знаменитых работах Хальперина, Нельсона и Янга [12–14], в которых было показано, что в отличие от случая трех измерений,

* E-mail: ryzhov@hppi.troitsk.ru

где плавление всегда происходит посредством одного перехода первого рода, в двух измерениях система может плавиться посредством двух непрерывных переходов типа БКТ. Причиной этого являются сильно развитые флуктуации в двумерной системе. Впоследствии было обнаружено, что существуют еще два сценария двумерного плавления, которые будут подробно обсуждены в разд. 3.

Понимание процессов упорядочения в двумерных системах имеет важное значение для широкого круга различных физических направлений: фотоники и электроники, физики мягкой материи, разработки новых материалов и биотехнологии, поскольку знание фазового поведения открывает путь к созданию систем с заданными свойствами. Несмотря на многочисленные исследования в данном направлении, остаются фундаментальные вопросы, связанные в первую очередь с зависимостью фазового поведения от конкретного вида взаимодействия между частицами [8, 15–17].

Изучение так называемой мягкой материи (soft matter), включающей растворы протеинов, полимеры, коллоиды, пылевую плазму и т. д., в определенной степени возобновило интерес к статистической механике систем, описываемых достаточно простыми изотропными эффективными потенциалами [15], которые хорошо подходят для использования их в рамках методов компьютерного моделирования. В последние годы появилось большое количество экспериментальных и теоретических (в первую очередь, связанных с использованием методов компьютерного моделирования) работ, посвященных этим вопросам [18–50].

Предсказание свойств этих систем возможно в основном только с использованием эффективных потенциалов, которые определяют структуру мягкой материи, ее коллективную динамику и термодинамику. Фазовые диаграммы, полученные с помощью эффективных потенциалов, могут качественно отличаться от случая стандартных молекулярных систем типа инертных газов. Простейшим эффективным потенциалом, сыгравшим большую роль в понимании механизмов кристаллизации и плавления двумерных систем является потенциал твердых дисков [51–76], однако даже для него результаты носили крайне противоречивый характер, и только в последнее время появились работы, внесшие ясность в этот вопрос [75, 76].

Для качественного описания коллоидов, полимерных глобул, звездообразных полимеров, используются различные феноменологические потенциалы, включая потенциалы с отрицательной кривиз-

ной в области отталкивания (или потенциалы с мягким ядром — soft-core potentials) [15, 33–35, 37–40, 78–83], ограниченные потенциалы типа гауссовского потенциала [84–86] или потенциала Герца [15, 16, 87–96]. Для этих систем фазовые диаграммы по сравнению с фазовыми диаграммами для стандартных потенциалов типа потенциала Леннарда-Джонса или твердых и мягких дисков (потенциал вида $1/r^n$) кардинальным образом изменяются и усложняются — появляется большое число новых кристаллических фаз, максимумы и минимумы на кривой плавления, стекольные состояния, а также аномальное поведение в жидкой фазе, которое соответствует хорошо известным водоподобным аномалиям. В этом случае в системах наблюдаются не только разнообразные кристаллические фазы и аномалии в жидкой фазе, но и удивительная возможность наблюдать различные сценарии плавления в различных областях фазовой диаграммы.

Двумерное плавление наблюдается в целом ряде самых разнообразных физических систем, кардинально отличающихся друг от друга по физическим свойствам и видам взаимодействий — вихревые решетки в тонких сверхпроводящих пленках [97–103], решетки скирмионов в магнетиках [104–106], вода в конфайнменте [107, 108], вихри в бозе-эйнштейновских конденсатах ультрахолодных атомов [109].

Вместе с тем зависимость сценариев двумерного плавления от вида потенциала до конца не изучена даже для такой, казалось бы, хорошо изученной системы, как система с потенциалом типа Леннарда-Джонса, для которой остается большое количество вопросов и противоречий, связанных со сценариями плавления и типами фазовых переходов [110–122].

В предлагаемом обзоре мы обсуждаем наиболее популярные в настоящее время модели плавления двумерных систем, описываем существующие подходы для определения параметров плавления и сценариев плавления и иллюстрируем эти подходы на примере потенциала мягких дисков и n - m -потенциала, являющегося обобщением потенциала Леннарда-Джонса.

2. ТЕОРИЯ БЕРЕЗИНСКОГО – КОСТЕРЛИЦА – ТАУЛЕССА (БКТ)

В работах Березинского, Костерлица и Таулесса [1, 4]) (см. также [8, 10]) было показано, что квазидальний порядок в двумерных вырожденных системах, к которым относятся и двумерные кристаллы, разрушается в результате диссоциации связанных топологических дефектов. Рассмотрим это бо-

лее подробно на примере X – Y -модели [8]. Гамильтониан модели имеет вид

$$H = -\frac{J}{2} \sum_{\langle i \neq j \rangle} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j = -\frac{J}{2} \sum_{\langle i \neq j \rangle} \cos(\omega_i - \omega_j) \approx \approx \frac{J}{2} \int d^2 r (\nabla \omega)^2, \quad (1)$$

где ω_i — угол, определяющий направление вектора $\mathbf{S}_i$ по отношению к произвольной оси, i и j — ближайшие соседи, J — обменный интеграл.

При низких температурах поведение системы определяется гауссовскими флуктуациями. Пользуясь теоремой о средних гауссовски распределенных величин, находим

$$\langle \mathbf{S}(\mathbf{r}) \mathbf{S}(\mathbf{r}_0) \rangle \propto \left\langle e^{i(\omega(\mathbf{r}) - \omega(\mathbf{r}_0))} \right\rangle \propto \left(\frac{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|}{a_0} \right)^{-k_B T / 2\pi J}, \quad (2)$$

где a_0 — постоянная решетки. Таким образом, в системе существует квазидальний порядок, характеризующийся степенным убыванием корреляций

$$\langle \mathbf{S}(\mathbf{r}) \mathbf{S}(\mathbf{r}_0) \rangle \propto r^{-\eta},$$

в то время как при высоких температурах существует экспоненциальное убывание корреляций

$$\langle \mathbf{S}(\mathbf{r}) \mathbf{S}(\mathbf{r}_0) \rangle \propto \exp(-r/\xi)$$

(см., например, [124]). Механизм разрушения квазидальнего порядка был предложен в упоминавшихся работах Березинского, Костерлица и Таулеса. Ими было показано, что разрушение квазидальнего порядка происходит посредством образования в системе свободных топологических дефектов — вихрей, которые описываются уравнением

$$\frac{\delta H}{\delta \omega} = J \nabla^2 \omega = 0, \quad (3)$$

решение которого имеет вид

$$\omega = q \arctg \frac{y}{x}, \quad \mathbf{v}_q = \nabla \omega = \frac{q}{r} \mathbf{e}_\varphi. \quad (4)$$

Здесь x и y — координаты на плоскости, q — топологический заряд вихря, при этом

$$\oint (\nabla \omega) dl = 2\pi q,$$

где интеграл берется по контуру вокруг вихря, $\mathbf{e}_\varphi$ — единичный вектор в полярной системе координат с началом в центре вихря, $q = \pm 1, \pm 2, \dots$. Вихрь представляет собой топологический дефект, который не может быть преобразован в основное состояние, в котором все спины направлены в одну сторону, посредством непрерывных вращений.

Температура перехода может быть определена из простых энергетических соображений: энергия отдельного вихря получается из (1) и (4) и имеет вид

$$E_\nu = \frac{J}{2} \int_0^L \frac{2\pi}{r} dr = J\pi \ln \frac{L}{a}, \quad (5)$$

где L — размер системы. Изменение свободной энергии при появлении вихря равно

$$F = E_\nu - TS,$$

где

$$S = 2k_B \ln(L/a)$$

— энтропия вихря, которая пропорциональна логарифму площади системы. Величина

$$F = (J\pi - 2k_B T) \ln(L/a)$$

при

$$T \geq T_{BKT} = \pi J / 2k_B$$

становится отрицательной, так что появление вихря становится энергетически выгодным.

Из уравнения (2) следует, что при $T = T_{BKT}$ корреляционная функция имеет вид

$$\langle \mathbf{S}(\mathbf{r}) \mathbf{S}(\mathbf{0}) \rangle \propto r^{-1/4}.$$

Таким образом, в точке перехода значение показателя степени для корреляционной функции $\eta = 1/4$.

Эта простая физическая картина, однако, не является полностью физически адекватной, так как связанные пары противоположно «заряженных» вихрей не разрушают квазидальний порядок и имеют конечную энергию. Такие пары могут существовать при низких температурах. Приведенный гамильтониан для подсистемы вихрей эквивалентен гамильтониану двухкомпонентного двумерного кулоновского газа [4, 7]:

$$H_c = -\pi J \sum_{i < j} q(\mathbf{r}_i) q(\mathbf{r}_j) \ln \frac{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}{a} + E_c \sum_i q^2(\mathbf{r}_i). \quad (6)$$

Гармоническое приближение, использованное при выводе (6), неадекватно при малых r , поэтому введена энергия ядра E_c , чтобы учесть вклад от области малых r порядка диаметра ядра a ; E_c играет роль химического потенциала кулоновского газа.

Механизм перехода БКТ [1, 4] представляет собой диссоциацию разреженного газа вихревых пар, при этом необходимо учесть экранирование кулоновского потенциала за счет термически возбужденных пар. Диссоциация происходит при температуре, при которой диэлектрическая постоянная системы расходится.

Теория БКТ включает в себя ренормгрупповое рассмотрение эффектов экранировки. Теория предсказывает непрерывный переход из низкотемпературной фазы, характериземой квазидальним порядком, в высокотемпературную неупорядоченную фазу. При этом величина $K = J/k_B T$ перенормируется в точке перехода T_{BKT} к универсальному предельному значению, которое затем скачком обращается в нуль. Уравнения, описывающие перенормировку параметров системы в окрестности перехода, были получены в работе [4], однако из-за не вполне корректного приближения их не удалось правильно решить. Неточность была исправлена в работе Янга [125], в результате чего была получена система ренормгрупповых уравнений, имеющая в настоящее время хорошо известный вид [7, 10, 124–126]:

$$\frac{dy(l)}{dl} = (2 - \pi K(l, T))y(l), \quad (7)$$

$$\frac{dK^{-1}(l, T)}{dl} = 4\pi^3 y^2(l), \quad (8)$$

где $l = \ln(r/a)$, y — фугитивность. Решение уравнений (7), (8) обсуждалось неоднократно (см., например, [7, 10, 124]), поэтому мы не будем останавливаться на этом детально. Заметим только, что эти уравнения справедливы при $y \ll 1$. Учитывая, что $y \propto e^{-E_c/k_B T}$, можно заключить, что они соответствуют случаю большой энергии ядра топологического дефекта. Это очень важное обстоятельство, к обсуждению которого мы вернемся ниже. В результате решения системы (7), (8) плоскость $y - K^{-1}$ разбивается на три области, в первой из которых при $l \rightarrow \infty$ величина $y \rightarrow 0$, а $K^{-1}(l, T)$ стремится к конечной перенормированной величине, которая определяется начальными значениями $K_0^{-1}(l = 0, T)$, зависящими от температуры. Температура перехода T_{BKT} определяется как максимальная температура, при которой перенормированное значение $K^{-1}(l, T)$ остается конечным при $l \rightarrow \infty$. При $T = T_{BKT}$ и $l \rightarrow \infty$ получаем соотношение

$$K(l \rightarrow \infty, T_{BKT}) = \frac{J_r(l \rightarrow \infty, T_{BKT})}{k_B T_{BKT}} = \frac{2}{\pi}, \quad (9)$$

где J_r — перенормированное значение обменного интеграла. Следует отметить, что температура перехода, полученная с помощью метода ренормгруппы, формально совпадает с температурой, вычисленной выше из простых энергетических соображений, с заменой константы связи на ее перенормированное значение. Физический смысл перенормировки достаточно прост — при увеличении $l = \ln(r/a)$ пропадает влияние вихрей, связанных в

пары, и из перенормированного гамильтониана исчезает часть, соответствующая топологическим дефектам. В результате, в этой области существует квазидальний порядок. Обе оставшиеся области фазовой диаграммы в плоскости (y, K^{-1}) характеризуются тем, что при любых начальных значениях $y_0(l, T)$ и $K_0^{-1}(l, T)$ обе величины обращаются в бесконечность при $l \rightarrow \infty$.

Выше T_{BKT} корреляционная функция спадает экспоненциально, при этом корреляционная длина экспоненциально расходится при приближении к температуре перехода сверху [7, 10]:

$$\xi \propto \exp \frac{\text{const}}{|T - T_{BKT}|^{1/2}}. \quad (10)$$

Уравнения (7), (8) были выведены Костерлицем [126] (см. также работу Янга [125]) в рамках модели двумерного кулоновского газа. Позже они были перевыведены стандартными методами квантовой теории поля в работах [127–129] с использованием представления статистической суммы двумерного кулоновского газа через теорию поля с гамильтонианом в форме синус-Гордон [7]. В работе [129] было получено следующее приближение в разложении по малым параметрам y и $2 - \pi K(l, T)$.

Существенной особенностью перехода БКТ является тот факт, что производные свободной энергии любого порядка справа и слева от точки перехода совпадают [7], т. е. в соответствии с классификацией Эренфеста это непрерывный переход бесконечного рода.

При учете флуктуаций в системе наблюдается экспоненциальная расходимость изохорной теплоемкости $C_V(T)$ [130], при этом сингулярная часть теплоемкости в окрестности точки перехода имеет вид

$$C_V^{\text{sing}}(T) \propto \xi^{-2}. \quad (11)$$

Из уравнений (11) и (10) видно, что этой расходимости соответствует очень узкий и высокий пик, поэтому ни в реальном, ни в компьютерном эксперименте ее невозможно обнаружить [130]. Схематическое поведение $C_V(T)$ для X - Y -модели показано на рис. 9.4.3 в [130]: $C_V(T)$ имеет ненаблюдаемую существенную особенность при T_{BKT} и неуниверсальный зависящий от модели максимум выше T_{BKT} , связанный с энтропией, высвобождаемой при диссоциации связанных пар топологических дефектов (вихрей).

Как уже упоминалось, ренормгрупповые уравнения справедливы при больших значениях энергии ядра дефекта E_c . В то же время при малых значениях E_c поведение системы качественно изменяется — непрерывный БКТ-переход превращается в переход первого рода [7, 78–80, 131]. Это свойство перехода

БКТ играет существенную роль при описании двумерного плавления.

В разложении косинуса в уравнении (1) мы ограничились первым порядком по $(\nabla\omega)^2$. В то же время безвихревые флуктуации должны перенормировать J за счет ангармонизмов вида $(\nabla\omega)^n$. Рассмотрим, например, ангармонизм вида $(\nabla\omega)^4$, следуя методам, описанным в книге Паташинского и Покровского [124]. Представим приближенно $(\nabla\omega)^4$ в виде $\langle(\nabla\omega)^2\rangle(\nabla\omega)^2$. В этом случае измененный гамильтониан для поля ω примет вид

$$H_{eff} = \frac{J}{2}(1 - c\langle(\nabla\omega)^2\rangle) \int d^2r (\nabla\omega)^2, \quad (12)$$

где c — некоторая константа. Вычисляя $\langle(\nabla\omega)^2\rangle$ с помощью гамильтониана (1), получим

$$\langle(\nabla\omega)^2\rangle = \frac{T}{J} \int d^2k \frac{k^2}{k^2} \propto \frac{T}{J}. \quad (13)$$

Таким образом, получается линейная по температуре поправка к перенормированному обменному интегралу $\propto -T/J$. В принципе, подобным образом можно вычислить и следующие поправки, однако, как отмечено в [124], получающийся ряд будет асимптотическим, и разложение неприменимо в окрестности перехода.

Чтобы обойти эту трудность, в [124] был предложен вариационный подход, базирующийся на рассмотрении квадратичного гамильтониана

$$H_0 = \rho_s \frac{J}{2} \int d^2r (\nabla\omega)^2, \quad (14)$$

где ρ_s — вариационный параметр. Вариационная свободная энергия системы имеет вид

$$F_{var} = \langle H \rangle_0 - TS_0, \quad (15)$$

где H — точный гамильтониан системы (1), усреднение проводится по ансамблю Гиббса с гамильтонианом H_0 , S_0 — энтропия системы с гамильтонианом H_0 . После минимизации F_{var} получается уравнение для ρ_s :

$$\rho_s = \exp(-\theta/\rho_s), \quad (16)$$

где $\theta = T/(4J)$. При $\theta = 0$ величина $\rho_s = 1$. Уравнение (16) всегда имеет тривиальное решение $\rho_s = 0$. При $\theta_c = \exp(-1)$ появляется ненулевое решение. Оказалось [124], что при температуре $T = T_{BKT}$ вклад ангармонизмов в ρ_s численно мал.

В первые годы после появления работ Березинского [1, 2] и Костерлица и Таулеса [3, 4] интерес к теории был не очень высок. Ситуация изменилась после того, как Костерлиц и Нельсон [132] применили теорию БКТ к описанию фазового перехода в пленке сверхтекучего гелия.

Сверхтекучая пленка описывается гамильтонианом, совпадающим по форме с (1), с заменой J на $\hbar^2 \rho_s(T)/m^2$, где m — масса атома ^4He , $\rho_s(T)$ — плотность сверхтекучей компоненты. Из уравнения (9) получаем, что для пленки сверхтекучего гелия отношение сверхтекучей плотности к температуре перехода, найденное теоретически Костерлицем и Нельсоном [132], оказалось комбинацией мировых постоянных, не зависящим от толщины пленки:

$$\frac{\rho_s(T_{BKT})}{k_B T_{BKT}} = \frac{2m^2}{\pi \hbar^2} = 3.491 \cdot 10^{-9} \text{ г} \cdot \text{см}^{-2} \cdot \text{К}^{-1}. \quad (17)$$

Теория БКТ является статической. Динамический вариант теории был вскоре разработан [133, 134] и использован для подтверждения экспериментом уравнения (17) [135–137]. Интересно отметить, что фазовый переход БКТ комбинирует черты скачкообразности и дискретности: энтропия, площадь и даже теплоемкость изменяются непрерывно, но поперечная жесткость (сверхтекучая плотность) падает скачком до нуля. В настоящее время экспериментальное изучение БКТ-перехода в бозе-конденсатах сосредоточено в первую очередь на исследовании сверхтекучих состояний, включая поведение вихрей, в двумерных системах ультрахолодных атомов в экстремально анизотропных квазидвумерных оптомангнитных ловушках (см., например, [138–141]).

Сверхпроводящие пленки также обладают непрерывной симметрией параметра порядка и в определенном смысле аналогичны сверхтекучим пленкам. В них также квазидальний порядок разрушается в результате диссоциации пар вихрь–антивихрь (БКТ-переход). Следует заметить, что в работе [4] ошибочно утверждалось, что в тонкой сверхпроводящей пленке образование связанных пар вихрь–антивихрь невозможно из-за того, что взаимодействие между вихрями на большом расстоянии ведет себя как $1/r$, в то время как для БКТ-перехода нужно логарифмическое возрастание потенциала взаимодействия. Применимость теории БКТ для сверхпроводящих пленок впервые обсуждалась в работе [142]. Для бесконечной сверхпроводящей пленки толщиной d и имеющей объемную глубину проникновения $\lambda_B(T)$ энергия взаимодействия между вихрями ведет себя логарифмически при $r \ll \Lambda(T) = 2\lambda_B(T)/d$ и как $1/r$ при $r \gg \Lambda$ [143, 144]. $\Lambda(T)$ может рассматриваться как эффективная глубина проникновения для перпендикулярного к плоскости пленки магнитного поля. Можно ожидать, что БКТ-переход может происходить, если $\Lambda(T)$ превышает размер пленки, что может быть достигнуто как уменьшением

толщины пленки, так и увеличением степени беспорядка в системе, как впервые было отмечено в [142]. Отсюда можно заключить, что в сверхпроводящей пленке фазовый переход в строгом смысле отсутствует, так как свободные вихри существуют в сверхпроводящей пленке при всех $T > 0$.

Энергия взаимодействия двух вихрей, расположенных в точках $\mathbf{r}_i$ и $\mathbf{r}_j$, имеет вид [143]

$$\begin{aligned}\Phi(r_{ij}) &= \frac{\varphi_0^2}{8\pi\Lambda} \left[H_0 \left(\frac{r_{ij}}{\Lambda} \right) - Y_0 \left(\frac{r_{ij}}{\Lambda} \right) \right], \\ \Phi(r_{ij}) &\approx -\frac{\varphi_0^2}{4\pi^2\Lambda} \ln \left(\frac{r_{ij}}{\Lambda} \right), & r_{ij} \ll \Lambda, \\ \Phi(r_{ij}) &\approx \frac{\varphi_0^2}{4\pi^2 r_{ij}}, & r_{ij} \gg \Lambda,\end{aligned}\quad (18)$$

H_0 — функция Струве и Y_0 — функция Неймана. Поправки к этой энергии за счет малой, но конечной толщины пленки, получены в работе [144]. Если ограничиться логарифмическим взаимодействием, которое имеет место при $r_{ij} \ll \Lambda$, как это было сделано в работе [142], по аналогии со сверхтекучими пленками получаем из (18) приближенное выражение для температуры БКТ-перехода:

$$k_B T_{BKT} = \frac{\varphi_0^2}{16\pi^2} \frac{1}{\Lambda(T_{BKT})}, \quad (19)$$

где $\phi_0 = hc/(2e)$ — квант потока, при этом оказалось, что в случае сверхпроводников с примесями T_{BKT} ниже критической температуры БКШ T_c . Статистическая механика системы, описываемой потенциалом (18), может быть построена в рамках кольцевого приближения, хорошо известного из физики плазмы [8, 145–150]. При $T > 0$ сверхпроводящая пленка всегда имеет конечную плотность свободных вихрей. Эти свободные вихри ответственны за диссипацию энергии и вызывают «хвост» сопротивления в области низких температур, при этом фазовый переход отсутствует, а имеет место резкий кроссовер при температуре, определяемой уравнением (19). Имеется большое количество экспериментальных работ, в которых рассматривается поведение тонких сверхпроводящих пленок из различных сверхпроводящих материалов на основе приближений, соответствующих уравнению (19) [151–156].

3. СЦЕНАРИИ ДВУМЕРНОГО ПЛАВЛЕНИЯ

3.1. Теория плавления

Березинского – Костерлица – Таулесса – Хальперина – Нельсона – Янга (БКТХНЯ)

Еще в первоначальных работах Березинский [1], а также Костерлиц и Таулесс [4] отметили, что

двумерный кристалл должен плавиться посредством диссоциации дислокационных пар, которые в данном случае являются топологическими дефектами. При наличии квазидальнего трансляционного порядка эти дефекты хорошо определены. Это наблюдение было положено в основу наиболее популярной теории двумерного плавления — теории Березинского – Костерлица – Таулесса – Хальперина – Нельсона – Янга (БКТХНЯ). Кристаллическая решетка характеризуется двумя видами нарушенной симметрии — трансляционной и вращательной, которым соответствуют два разных параметра порядка и, соответственно, два типа топологических дефектов — дислокации и дисклинации, при этом дислокация может быть представлена в виде дисклинационного диполя (рис. 1). Наличие двух параметров порядка и, соответственно, двух видов топологических дефектов наводит на мысль, что плавление двумерного кристалла в изотропную жидкость может происходить посредством двух переходов. Рассмотрим более подробно механизм плавления, положенный в основу теории БКТХНЯ.

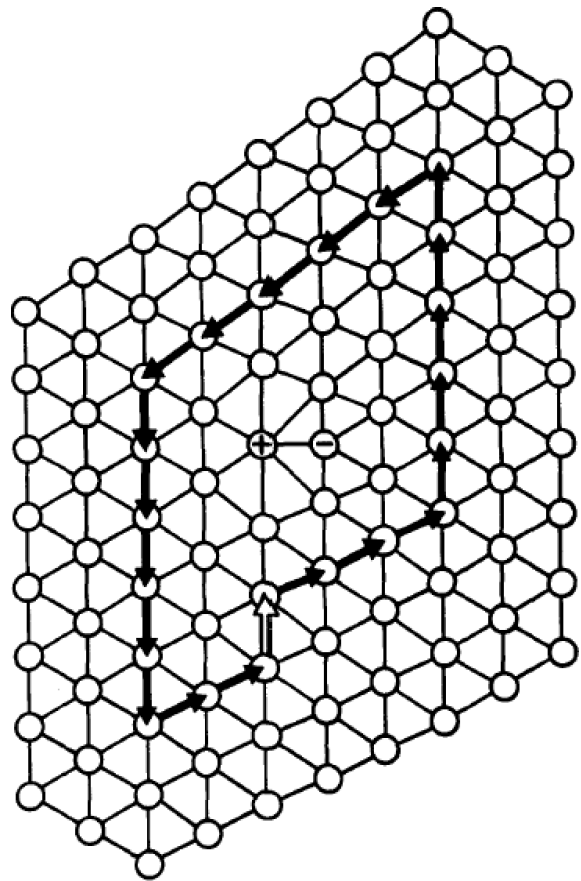


Рис. 1. Дислокация как дисклинационный диполь. Значки «+» и «-» обозначают частицы с числом ближайших соседей, равным 7 и 5 [8]

Квазидальний періодический трансляционный порядок разрушается за счет диссоциации дислокационных пар и появления свободных дислокаций (которые играют роль вихрей в X - Y -модели), что приводит к обращению в нуль модуля сдвига μ . Гамильтониан, описывающий систему дислокаций в треугольном кристалле, имеет вид [8, 12, 14]

$$H_{dis} = -\frac{a_0^2 K}{8\pi} \sum_{i \neq j}^M \left\{ \mathbf{b}(\mathbf{r}_i) \mathbf{b}(\mathbf{r}_j) \ln \frac{r_{ij}}{a} - \frac{(\mathbf{b}(\mathbf{r}_i) \mathbf{r}_{ij})(\mathbf{b}(\mathbf{r}_j) \mathbf{r}_{ij})}{r_{ij}^2} \right\} + E_c \sum_{i=1}^M \mathbf{b}^2(\mathbf{r}_i), \quad (20)$$

где E_c — энергия ядра дислокации, a_0 — период рассматриваемой треугольной решетки, $\mathbf{b}$ — вектор Бюргерса, модуль Юнга K дается уравнением

$$K = \frac{4\mu(\mu + \lambda)}{2\mu + \lambda}. \quad (21)$$

Здесь μ и λ — коэффициенты Ламе [4, 8, 12–14]. Коэффициент Ламе λ связан с объемным модулем

$$B = (dP/d\rho)_T = \mu + \lambda.$$

Гамильтониан (20) аналогичен гамильтониану двумерного кулоновского газа (6) с той только разницей, что вместо скалярного «заряда» $q(\mathbf{r})$ появляется вектор Бюргерса $\mathbf{b}(\mathbf{r})$, поэтому систему, описываемую этим гамильтонианом, иногда называют векторным кулоновским газом.

Диссоциация дислокационных пар, приводящая к плавлению при температуре T_m и являющаяся аналогом диссоциации вихрь–антивихрь при стандартном переходе БКТ, происходит при условии [4, 12, 14]

$$k_B T_m = \frac{K a_0^2}{16\pi}. \quad (22)$$

Как и в случае стандартного перехода БКТ, необходимо учесть перенормировку модулей упругости за счет связанных дислокационных пар. Ренормгрупповые уравнения для модуля Юнга треугольного кристалла имеют вид [13, 14]:

$$\frac{dK^{*-1}(l)}{dl} = \frac{3\pi}{4} y^2(l) e^{\frac{K^*(l)}{8\pi}} \times \left(2I_0 \left(\frac{K^*(l)}{8\pi} \right) - I_1 \left(\frac{K^*(l)}{8\pi} \right) \right), \quad (23)$$

$$\frac{dy(l)}{dl} = \left(2 - \frac{K^*(l)}{8\pi} \right) y(l) + 2\pi y^2(l) e^{\frac{K^*(l)}{16\pi}} I_0 \left(\frac{K^*(l)}{8\pi} \right), \quad (24)$$

где

$$K^* = \frac{a_0^2 K}{k_B T},$$

l — масштабная переменная, I_0 и I_1 — модифицированные функции Бесселя. Предел бесконечной системы соответствует $l = \infty$. Неперенормированный модуль Юнга K ($l = 0$) и фугитивность

$$y(l = 0) = \exp(-E_c/k_B T)$$

служат начальными условиями для системы уравнений (23) и (24).

Температура перехода T_m дается уравнением (22), в котором учтена перенормировка упругих коэффициентов за счет наличия в системе связанных дислокационных пар, понижающих упругость системы.

Характеризующая квазидальний трансляционный порядок корреляционная функция плотность-плотность $G_T(r)$ имеет вид [12, 13]

$$G_T(r) \propto r^{-\eta_T(T)}, \quad (25)$$

где показатель η_T ниже температуры плавления T_m имеет значения

$$\eta_T(T) \leq 1/3, \quad (26)$$

$\eta_T(T_m) = 1/3$ соответствует неустойчивости кристаллической фазы по отношению к диссоциации дислокационных пар. Как и в случае X - Y -модели, пик теплоемкости имеет место выше T_m , при этом форма пика зависит от вида системы. Неравенство (26) играет принципиально важную роль для определения сценария плавления и параметров перехода. В связи с этим следует подчеркнуть, что соотношение (26) строго справедливо только для плавления треугольной решетки, которая описывается теорией БКТХНЯ.

В то же время нетрехугольные кристаллические структуры были обнаружены в работах по компьютерному моделированию двумерных систем, например, в системах с потенциалами с двумя пространственными масштабами [15, 82, 93, 157–162], а также в воде [33, 163]. В работах [78–80, 164, 165] было показано существование квадратных кристаллов, в работах [164, 165] была также обнаружена гексагональная структура. Решетка Кагоме была найдена в [33, 166]. В ряде публикаций сообщалось о возможности существования в двух измерениях квазикристаллических структур [82, 167–169]. Точные ренормгрупповые уравнения типа (23) и (24) для нетрехугольных структур отсутствуют даже для простейшего случая квадратной решетки, в связи с этим возможен только приближенный анализ сценариев плавления, базирующийся на использовании неравенства (26). При этом вывод соответствующих ренормгрупповых уравнений остается достаточно важной теоретической задачей.

Поскольку в двумерном кристалле кроме квазидальнего трансляционного порядка существует дальний ориентационный порядок, то, как заметили Хальперин и Нельсон [12, 13], жидкость выше точки диссоциации дислокационных пар оказывается неизотропной. Они нашли, что диссоциация дислокационных пар не полностью разрушает дальний ориентационный порядок, а только превращает его в квазидальний [8]. Получающаяся в результате новая фаза была названа «гексатической» по аналогии с жидкими кристаллами, однако в отличие от жидких кристаллов, она реализуется в системах с изотропными потенциалами. В рамках достаточно грубой аналогии гексатическую фазу можно представить как упорядоченную систему шестиугольных кластеров, состоящих из молекулы и ее шести ближайших соседей. При этом корреляционная функция ориентационного параметра порядка для системы шестиугольников спадает с расстоянием по степенному закону (квазидальний ориентационный порядок). В гексатической фазе существуют свободные дислокации, поэтому ее модуль сдвига равен нулю, т. е. она представляет собой жидкость с элементами упорядочения. Дислокацию можно представить в виде связанной пары двух дисклинаций (рис. 1). Гексатическая фаза превращается в обычную изотропную жидкость в результате следующего перехода БКТ посредством диссоциации дисклинационных пар.

Хальперин и Нельсон [13] предложили рассматривать в качестве феноменологического ориентационного параметра порядка для треугольной решетки величину

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{6i\vartheta(\mathbf{r})}, \quad (27)$$

где $\vartheta(\mathbf{r})$ — ориентация связи между двумя ближайшими соседями по отношению к некоторой фиксированной оси. Квазидальний порядок при температуре выше T_m характеризуется степенным убыванием корреляций:

$$G_6(r) \propto r^{-\eta_6(T)}. \quad (28)$$

Для описания длинноволновых флуктуаций в анизотропной жидкости Хальпериным и Нельсоном был введен феноменологический гамильтониан, аналогичный гамильтониану X – Y -модели [13]:

$$H_A = \frac{1}{2} K_A(T) \int d^2r (\nabla \vartheta(\mathbf{r}))^2, \quad (29)$$

где константа Франка $K_A(T)$ связана с η_6 соотношением

$$\eta_6(T) = \frac{18k_B T}{\pi K_A(T)}. \quad (30)$$

Диссоциация дисклинационных пар происходит при $T_i > T_m$. Уравнение для определения T_i имеет вид

$$k_B T_i = \frac{\pi K_A(T_i)}{72}, \quad (31)$$

при этом $\eta_6(T_i) = 1/4$. Это значение показателя соответствует температуре неустойчивости гексатической фазы по отношению к образованию свободных дисклинаций, приводящих к появлению изотропной жидкости.

Представленная теория носит название теории БКТХНЯ. В рамках этой теории двумерный кристалл должен плавиться посредством двух непрерывных переходов типа БКТ с промежуточной гексатической фазой.

Теория БКТХНЯ долгое время была наиболее популярной и породила большое количество как экспериментальных, так и теоретических работ, основанных на компьютерном моделировании [8], включая такие экзотические системы, как система вихрей в тонких сверхпроводящих пленках [97–101] и скирмионная решетка [104–106]. В настоящее время можно с достаточной степенью уверенности, опираясь как на эксперимент, так и на компьютерное моделирование [170], утверждать, что системы с дальнедействующим взаимодействием (например, кулоновское или диполь-дипольное взаимодействие, мягкие диски $1/r^n$ с показателем $n \leq 6$) плавятся в соответствии со сценарием БКТХНЯ.

3.2. Плавление двумерных решеток посредством перехода первого рода

В то же время стандартный переход первого рода также может реализоваться. Возможный механизм перехода первого рода, вызванного появлением границ зерен и соответствующим резким ростом числа свободных дислокаций, который происходит прежде диссоциации дислокационных пар и соответствующего перехода БКТ, был предложен в работе Чуи [171] (см. также [8, 17]). Граница зерна представляет собой коллективное возбуждение дислокаций, являющееся «струной» дислокаций (см. рис. 2). Появление границы зерна приводит к вращению одной части кристалла по отношению к другим. Бесконечные параллельные границы зерен взаимодействуют посредством короткодействующего потенциала [17, 171], что приводит к тому, что плавление происходит в соответствии со сценарием, отличным от БКТХНЯ. Были рассчитаны свободные энергии возможных конфигураций малоугловых границ зерен в приближении малой плотности границ зерен и дислокационных пар, при этом не рассмат-

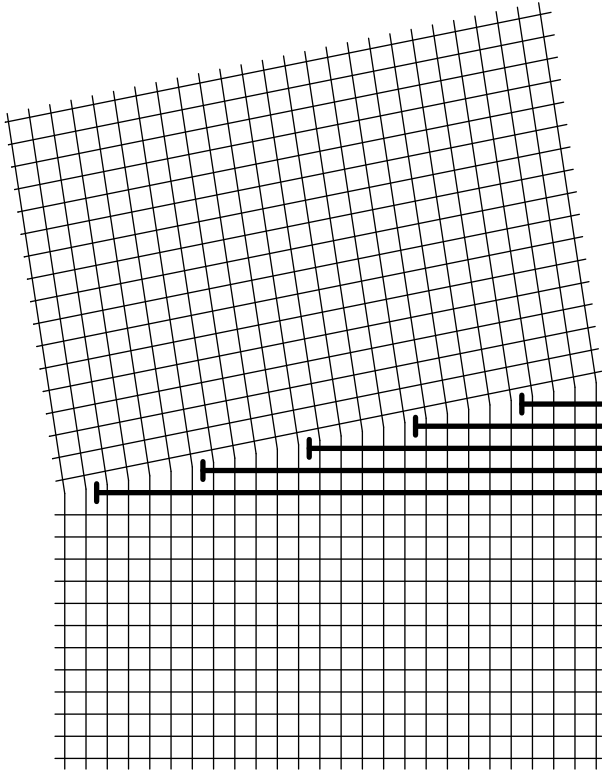


Рис. 2. Малоугловая граница зерна, состоящая из линии дислокаций [17]

ривалась перенормировка энергии ядра дислокации и упругих констант. В результате Чуи пришел к выводу, что до перехода БКТХНЯ происходит переход первого рода вне зависимости от величины энергии ядра дислокации, однако при энергии ядра $E_c / > E_c^* > 2.84 k_B T_m$, где T_m — температура диссоциации дислокационных пар (22), переход первого рода становится близким к непрерывному, но без гексатической фазы. Вычисления в работе [171] базируются на предположении, что расстояние s между дислокациями в границах зерен мало по сравнению с расстояниями z между самими границами зерен. Для $E_c > E_c^*$ это приближение перестает работать и расстояние s становится большим, поэтому предсказание о переходе первого рода при $E_c > E_c^*$ вызывает сомнения. Кроме того, следует отметить, что в представленной теории не рассматривается размер ядра дислокации. Скорее всего, теория Чуи справедлива для $E_c < E_c^*$, однако при более высоких значениях энергии ядра дислокации справедлива теория БКТХНЯ. В работе [172] методом Монте-Карло была рассмотрена так называемая огрубленная модель Лапласа, в рамках которой удалось показать, что при больших значениях энергии ядра дислокации имеет место сценарий БКТХНЯ, в то время как при $E_c < E_c^*$ — переход первого рода.

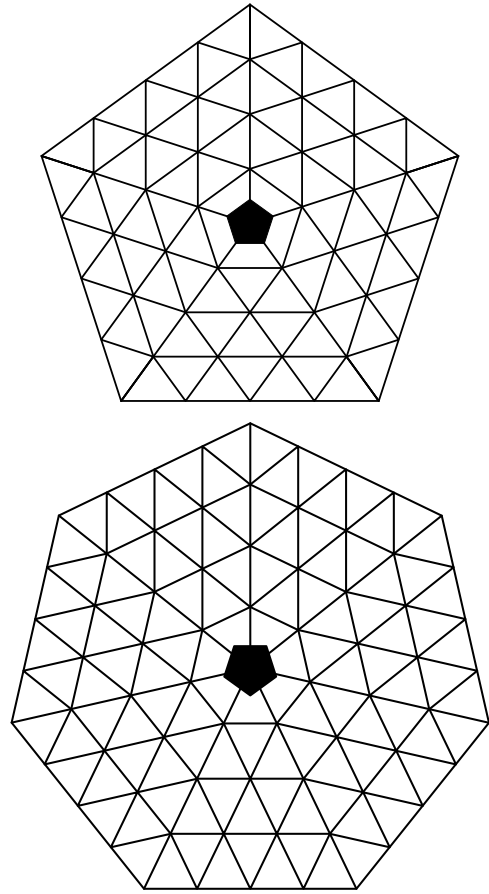


Рис. 3. Положительная ($s = +1$) и отрицательная ($s = -1$) дисклинации [8]

Кристалл также может плавиться посредством одного перехода первого рода, при котором происходит диссоциация дисклинационных комплексов и появление в системе свободных дисклинаций. Свободная дисклинация приводит к повороту части кристалла по отношению к другим (см. рис. 3), что полностью разрушает как квазидальний трансляционный порядок, так и ориентационный порядок. Гамильтониан системы дислокаций и дисклинаций имеет вид [173]

$$\begin{aligned}
 H_{disl-disc} = & \frac{\pi}{18} \sum_{i \neq j}^N s_i s_j \left\{ \frac{K}{8} r_{ij}^2 \ln \frac{r_{ij}}{a} \right\} + E_d \sum_{i=1}^N s_i^2 + \\
 & + \frac{a_0 K}{12} \sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^N s_j \epsilon_{mn} b_n(\mathbf{r}_i) (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)_m \left(\ln \frac{r_{ij}}{a} + C \right) - \\
 & - \frac{a_0^2 K}{8\pi} \sum_{i \neq j}^M \left\{ \mathbf{b}(\mathbf{r}_i) \mathbf{b}(\mathbf{r}_j) \ln \frac{r_{ij}}{a} - \frac{(\mathbf{b}(\mathbf{r}_i) \mathbf{r}_{ij})(\mathbf{b}(\mathbf{r}_j) \mathbf{r}_{ij})}{r_{ij}^2} \right\} + \\
 & + E_c \sum_{i=1}^M \mathbf{b}^2(\mathbf{r}_i), \quad (32)
 \end{aligned}$$

где E_d и E_c — энергии ядер дисклинаций и дислокаций, $\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$, K дается уравнением (21).

Первые два члена описывают энергию взаимодействующих дисклинаций, третий — взаимодействие дислокаций с дисклинациями, последние два — энергию взаимодействия дислокаций (см. (20)). Можно показать, что энергия заданной конфигурации дисклинационных и дислокационных зарядов конечна лишь при выполнении условий

$$\sum_j s_j = 0, \quad \sum_j \mathbf{r}_j s_j = 0, \quad \sum_j \mathbf{b}(\mathbf{r}_j) = 0. \quad (33)$$

Благодаря экранированию при наличии свободных дисклинаций взаимодействие между дисклинациями становится короткодействующим [173, 174],

$$U_{disc-disc} \propto \exp(-r/\xi).$$

Радиус экранирования имеет вид [173]

$$\xi = \frac{1}{2} \left(\frac{\pi^2 K m_0}{9 k_B T} \right)^{1/4}. \quad (34)$$

Здесь m_0 — плотность свободных дисклинаций.

При наличии дисклинации поле смещений на больших расстояниях имеет вид $u \propto R \ln R$, поэтому фаза, в которую переходит кристалл, оказывается полностью разупорядоченной. Считая, что в жидкой фазе нет дислокаций, получим уравнение для радиуса экранирования ξ [173, 174]:

$$\Phi(x) = x^\vartheta - z \exp(-Q/x^2) = 0, \quad (35)$$

где

$$\vartheta = 4 + \frac{\pi K a_0^2 t^2}{144 k_B T}, \quad Q = \frac{\pi^2 K a_0^2 t^2}{576 k_B T},$$

$$z = \frac{\pi^2 K a_0^2 t^4}{72 \sqrt{3} k_B T} \exp\left(-\frac{E_d}{k_B T}\right) \exp\left[-\frac{\pi K a_0^2 t^2 (1-C)}{144 k_B T}\right],$$

$C \approx 0.577$ — постоянная Эйлера, $x = r_0/\xi$, $t = r_0/a_0$. Вид функции $\Phi(x)$ для нескольких значений приведенной энергии ядра дисклинации

$$E'_d = \frac{16\pi E_d}{a_0^2 K}$$

и температуры

$$T^* = \frac{16\pi k_B T}{a_0^2 K}$$

приведен на рис. 4.

Уравнение (35) всегда имеет решение $x = 0$, соответствующее кристаллической фазе. Легко видеть, что нетривиальное решение впервые возникает при условии

$$\Phi'(x) = 0. \quad (36)$$

Из уравнений (35) и (36) получаем выражение для скачка корреляционной длины ξ , связанной с плотностью свободных дисклинаций при переходе:

$$x^2 = 2Q/\vartheta. \quad (37)$$

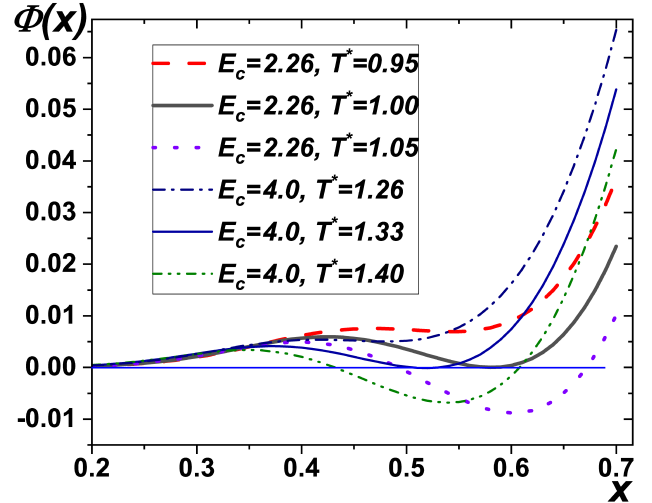


Рис. 4. Вид функции $\Phi(x)$ для нескольких значений приведенной энергии ядра дисклинации $E'_d = 16\pi E_d/(a_0^2 K)$ и температуры $T^* = 16\pi k_B T/(a_0^2 K)$

Таким образом, дисклинационное плавление происходит как переход первого рода.

В коэффициенты уравнения (35) входят энергия ядра дисклинации E_d и относительный размер ядра t , при этом поведение системы существенно зависит от этих величин.

Подставляя (37) в (35), получим уравнение для определения температуры перехода:

$$\exp\left(-\frac{E_d}{k_B T}\right) = \left(\frac{2Q}{\vartheta}\right)^{\vartheta/2} e^{\vartheta/2} \frac{72\sqrt{3}k_B T}{\pi^2 K a_0^2 t^4} \times \exp\left\{\frac{\pi K a_0^2 t^2 (1-C)}{144 k_B T}\right\}. \quad (38)$$

Из уравнения (38) следует, что температура перехода растет с ростом E_d и при некотором E_d^* превышает температуру дислокационного перехода (22). Таким образом, при $E_d < E_d^*$ плавление происходит как переход первого рода, при $E_d > E_d^*$ — как дванепрерывных перехода. Подставив (22) в (38), получим уравнение для определения E_d^* как функции t . Положив $t = 1.0$, получим из (38) $E_d^* = 1.13$. Таким образом, получаем критическое значение энергии ядра дислокации $E_c^* \approx 2E_d^* = 2.26$, что качественно совпадает с полученным в работе [171] результатом (см. также [17, 172]).

Важность величины энергии ядра дефекта для определения типа перехода отмечалась в многочисленных работах (см., например, [172] и обзор [17]) по моделированию двумерного плавления. К сожалению, однозначной величины энергии ядра дефекта для реалистической модели взаимодействующих

частиц там получено не было. В рамках метода функционала плотности в теории кристаллизации было показано, что сценарий плавления зависит от вида межмолекулярного потенциала [175–183], однако детальное описание зависимости сценариев двумерного плавления от вида потенциала в большинстве случаев требует использования методов компьютерного моделирования [8, 15].

3.3. Сценарий Бернарда и Крауса (БК)

В 2011 году появилась статья Бернарда и Крауса [75], получившая развитие в работах [76, 170, 185–188], в которой методами компьютерного моделирования было рассмотрено плавление двумерной системы твердых дисков и был предложен еще один сценарий, в соответствии с которым переход из кристалла в гексатическую фазу является непрерывным переходом типа БКТ, в то время как гексатическая фаза переходит в изотропную жидкость в результате перехода первого рода. Авторы предложили быстрый алгоритм метода Монте-Карло [184], который был применен к набору систем, число частиц в которых меняется от $N = 256^2$ до $N = 1024^2$. Рассматриваемые системы достаточно велики, а учитывая, что была применена экстремально длительная термализация, можно надеяться, что полученные результаты верны для равновесной системы в термодинамическом пределе. Предложенный сценарий получил экспериментальное подтверждение в работе [71], в которой исследовалось поведение жестких коллоидов, заключенных между прозрачными пластинами, расположенными под небольшим углом, что позволило смоделировать изменение локальной плотности в системе.

В связи с этим следует сделать следующее замечание. Изучение плавления двумерных систем имеет долгую историю и началось еще с первоначальных работ Олдера и Вайнрайта [51–54], в которых рассматривалась система твердых дисков. При этом в большинстве работ авторы приходили к выводу, что плавление данной системы происходит как переход первого рода [8, 55–66]. Вместе с тем следует упомянуть работу [67], авторы которой с использованием метода Монте-Карло пришли к выводу, что система плавится посредством одного непрерывного перехода без гексатической фазы. По-видимому, причины расхождений связаны трудностями с достижением истинного термодинамического равновесия и недостаточностью размера системы. В этой связи следует упомянуть работы классика компьютерного моделирования Курта Биндера [63, 68], в первой из которых обнаружен переход первого рода

в твердых дисках, а во второй с использованием молекулярного моделирования и метода ренормгруппы плавление этой системы описывается как непрерывный переход без гексатической фазы. Причина противоречий состоит, скорее всего, в том, что размер системы и время моделирования были недостаточны для того, чтобы приблизиться к равновесному термодинамическому пределу. Следует также заметить, что, как показано в [71, 75, 76], ширина области существования гексатической фазы в системе твердых дисков настолько мала, что ее трудно заметить на фоне двухфазной области при переходе первого рода. В следующем разделе мы вернемся к обсуждению данного вопроса.

В определенном смысле переход первого рода из гексатической фазы в изотропную жидкость является контринтуитивным. Фазовый переход в системе, описываемой гамильтонианом (29), в двух и трех измерениях в приближении среднего поля является непрерывным переходом, поэтому тот факт, что исчезновение квазидально порядка происходит посредством перехода первого рода, вызывает удивление. В настоящее время отсутствует однозначная последовательная теория перехода первого рода гексатик–изотропная жидкость. Вероятный механизм состоит в том, что переход БКТ может стать переходом первого рода при уменьшении энергии ядра топологического дефекта [7, 8, 131, 145–147], однако последовательный расчет энергии ядра дисклинации на данный момент отсутствует, что не позволяет прогнозировать характер перехода в зависимости от вида межмолекулярного потенциала.

В настоящее время можно с достаточной степенью уверенности, опираясь как на эксперимент, так и на компьютерное моделирование [8, 170], утверждать, что системы с дальнедействующим взаимодействием (например, кулоновское или диполь-дипольное взаимодействие, мягкие диски $1/r^n$ с показателем $n \leq 6$) плавятся в соответствии со сценарием БКТХНЯ, в то время как переход в системе мягких дисков с $n > 6$ происходит в соответствии с описанным выше сценарием БК.

Следует заметить, что в данный момент нет четких теоретических критериев, позволяющих однозначно определить, исходя из вида потенциала, по какому сценарию пойдет плавление. При этом следует учесть тот факт, что теория БКТХНЯ, как и компьютерное моделирование мягких дисков [170, 188] и эксперименты с двумерными твердыми сферами [186], относилась к треугольной кристаллической решетке. Однако в последнее время были обнаружены двумерные системы с квадратными и более

сложными решетками, для исследования сценариев плавления которых существующие теории могут быть применены только условно. Более того, как обсуждалось в [81, 188, 189], случайный пиннинг способен изменить сценарий плавления и превратить переход первого рода в двухстадийное плавление с непрерывным переходом из кристалла в гексатическую фазу и переходом первого рода из гексатической фазы в изотропную жидкость. Таким образом, изучение связи между формой межчастичного потенциала и существованием гексатической фазы является интересной задачей, которая пока далека от однозначного решения.

4. ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПАРАМЕТРОВ ДВУМЕРНОГО ПЛАВЛЕНИЯ МЕТОДАМИ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Для определения границ фазовых переходов применяется несколько взаимодополняющих методов. Прежде всего рассчитывается уравнение состояния. На рис. 5а, б, в представлены уравнения состояния, соответствующие описанным выше сценариям плавления.

В случае переходов первого рода на уравнениях состояния должны наблюдаться петли Майера–Вуда [190] — аналоги петель Ван дер Ваальса (рис. 5а), из которых с помощью построения Максвелла можно определить границы перехода. Вид петель Майера–Вуда зависит от числа частиц в системе. При увеличении числа частиц петли сглаживаются и в термодинамическом пределе вместо петли оказывается прямая линия, совпадающая с линией перехода, получаемой из построения Максвелла. В принципе, петли Майера–Вуда наблюдаются не только в случае перехода первого рода, но и в случае стандартного непрерывного перехода типа перехода в двумерной модели Изинга [65], однако поведение петель при увеличении числа частиц в этих случаях различается. Для перехода первого рода петля находится в области сосуществования и обусловлена свободной энергией интерфейса ΔF . При заданной плотности свободная энергия поверхности раздела на частицу, $\Delta f = \Delta F/N$, может быть вычислена путем интегрирования уравнения состояния [65, 75, 76]. В двух измерениях она масштабируется как $\Delta f \propto 1/\sqrt{N}$. Напротив, для непрерывного перехода Δf затухает быстрее, так что ΔF постоянна, т. е. $\Delta f \propto N^{-1}$, и уравнение состояния становится монотонным при достаточно больших размерах системы [65]. Масштабирование Δf в зависимости от размера системы для больших размеров системы является надежным индикатором фазового перехода первого ро-

да [77]. Базируясь на этом различии, авторы сценария БК доказывали, что они наблюдают переход первого рода. Однако в этом рассмотрении не учитывается принципиальное различие перехода в двумерной модели Изинга и перехода БКТ.

Следует отметить, что существует некоторое недопонимание термина непрерывный переход при обсуждении поведения уравнения состояния в случае перехода первого рода и непрерывного перехода. Чтобы сравнить поведение систем с переходом первого рода и непрерывным переходом, авторы [65] рассмотрели поведение системы жестких дисков и модели Изинга и попытались применить результаты исследования перехода в двумерной модели Изинга для интерпретации результатов компьютерного моделирования двумерного плавления. В этой статье было проанализировано поведение петель Майера–Вуда для перехода в модели Изинга и системы жестких дисков и получена представленная выше зависимость от числа частиц. Однако при этом не учитывалась принципиальная разница между переходом второго рода в модели Изинга и переходом БКТ. В двух пространственных измерениях теорема Мермина–Вагнера строго показывает, что в двумерных системах с непрерывной симметрией дальний порядок не может существовать при любой конечной температуре, в отличие от двумерной модели Изинга. Например, X – Y -модель не может иметь упорядоченную фазу при низкой температуре, как у двумерной модели Изинга. В двумерных системах с непрерывной симметрией, как обсуждалось во Введении, имеется непрерывный БКТ-переход, однако по сравнению с непрерывным переходом второго рода в модели Изинга переход БКТ является переходом бесконечного рода, т. е. по обе стороны от перехода производные бесконечного порядка от термодинамического потенциала равны друг другу, что делает переход более «плавным» по сравнению со стандартным переходом второго рода [7]. БКТ-переход происходит в результате диссоциации пар топологических дефектов (вихрей в случае X – Y -модели, дислокаций в случае двумерного перехода кристалл–гексатическая фаза и дисклинаций для перехода гексатическая фаза–изотропная жидкость). Появление единственного свободного топологического дефекта качественно меняет поведение корреляционной функции параметра порядка от степенного к экспоненциальному затуханию. В частности, свободная дислокация делает модуль сдвига двумерного кристалла равным нулю. В этом случае отсутствуют границы фаз, которые создают петли Майера–Вуда в случае перехода второго рода в конечной

системе, например, в двумерной модели Изинга, поэтому в случае БКТ-перехода петля Майера – Вуда вообще невозможна. Это приводит к тому, что для сценария плавления БКТХНЯ уравнение состояния должно быть монотонным, без каких-либо петель и, в принципе, почти без явного изгиба (см. рис. 5б). Как уже было сказано выше, увеличение числа частиц в случае перехода первого рода действительно делало петли более плоскими и незначительно изменяло размер двухфазной области, но не устраняло петли Майера – Вуда [64, 75, 76]. В то же время в случае сценария БКТХНЯ изменение числа частиц может незначительно изменить количественные характеристики перехода плавления, но не может изменить качественную форму уравнения состояния.

Уравнения состояния весьма надежно отражают область сосуществования двух фаз, но не дают информацию о сценарии перехода. Для определения точных границ гексатической фазы и кристалла следует использовать подход, связанный с дальнедействующим поведением ориентационных и трансляционных корреляционных функций параметров порядка [78–82, 93]. Как обсуждалось выше (см. также [13]), граница устойчивости гексатической фазы может быть определена из условия равенства показателя степени ориентационной корреляционной функции (ОКФ) $G_6(r)$ (28) $\eta_6 = 1/4$, в то время как трансляционная корреляционная функция (ТКФ) $G_T(r)$ при переходе кристалл–гексатик также убывает степенным образом (25) с показателем, равным $\eta_T = 1/3$. На рис. 5 схематически показано положение границ устойчивости для различных сценариев. В случае перехода первого рода (см. рис. 5а) эти границы устойчивости оказываются внутри двухфазной области, в то время как в случае сценария БК (рис. 5б) граница устойчивости для перехода гексатик–изотропная жидкость попадает в двухфазную область, в то время как граница БКТ-перехода кристалл–гексатик находится в области стабильности твердого тела, что приводит к существованию гексатической фазы.

Область существования гексатической фазы обычно довольно узкая, что делает ее изучение методами компьютерного моделирования довольно затруднительным. В то же время в реальных экспериментах по исследованию двумерного плавления рассматриваемые системы, как правило, содержат случайные поля различной природы — замороженные короткодействующие и дальнедействующие примеси, случайный рельеф подложки, пиннингующая случайная сила, обязанная своим происхождением неоднородности подложки.

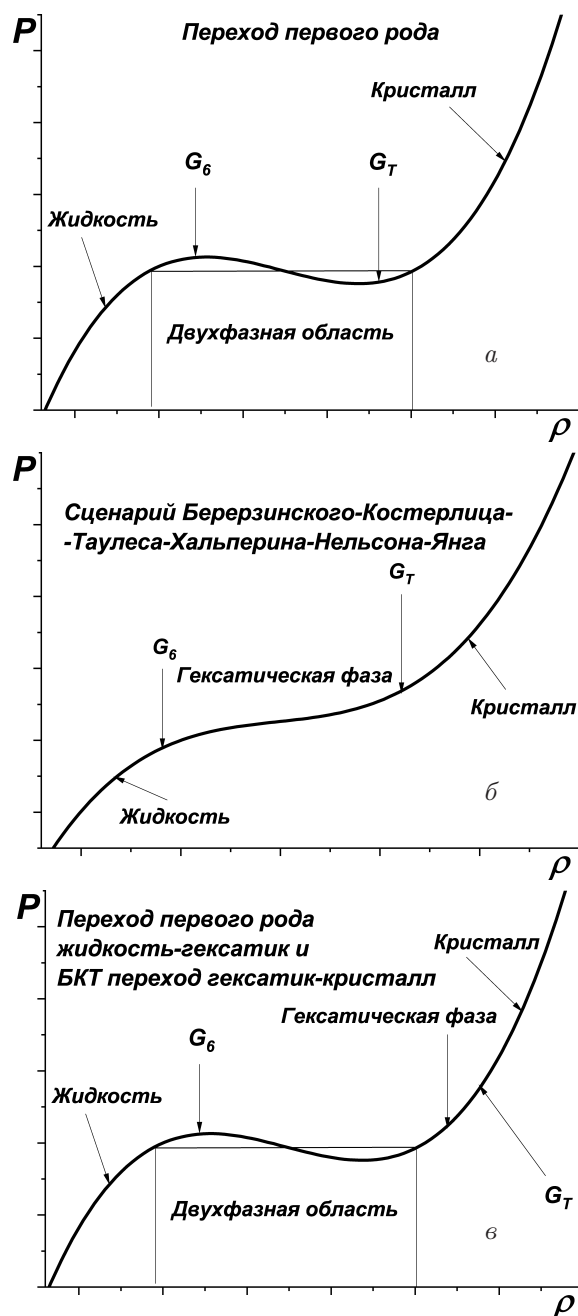


Рис. 5. Типичные уравнения состояния, соответствующие описанным в тексте сценариям двумерного плавления. Стрелками указаны границы устойчивости кристаллической и гексатической фаз, полученные из анализа поведения корреляционных функций трансляционного и ориентационного параметров порядка. а) Типичное уравнение состояния для перехода первого рода. Границы перехода определяются из построения Максвелла. б) Уравнение состояния в случае сценария БКТХНЯ. На уравнении состояния отсутствуют петли Майера – Вуда. в) Уравнение состояния, соответствующее сценарию плавления БК. Границы перехода гексатик–изотропная жидкость определяются из построения Максвелла

В работах Нельсона [191, 192], а затем в последующих исследованиях [43, 44, 193–195] было показано, что введение беспорядка, действующего на частицы, по-разному должно действовать на трансляционный и ориентационный порядки. Очевидно, что даже небольшой беспорядок должен сильно нарушать расположение частиц по узлам решетки, в то же время ориентация векторов, направленных на ближайших соседей, не должна значительно меняться от наличия точечных дефектов, поэтому трансляционный порядок должен достаточно легко разрушаться беспорядком, в то время как влияние беспорядка на ориентационный порядок должно быть незначительным. В результате температура перехода из кристалла в гексатическую фазу должна понижаться, в то время как температура перехода из гексатической фазы в изотропную жидкость должна быть практически неизменной, что приводит к увеличению области существования гексатической фазы за счет уменьшения области кристалла. В этом случае даже возможна ситуация, когда переход первого рода трансформируется в два перехода в соответствии со сценарием БК [81, 94, 189].

Наличие ориентационного и трансляционного упорядочения в системе оценивается из изучения поведения соответствующих параметров порядка и их корреляционных функций.

Для оценки степени ориентационного упорядочения применяется параметр порядка, имеющий вид

$$\Psi_6(\mathbf{r}_i) = \frac{1}{n(i)} \sum_{j=1}^{n(i)} e^{i6\theta_{ij}}, \quad (39)$$

где θ_{ij} — угол между вектором $\mathbf{r}_{ij}$, соединяющим i -ю и j -ю частицы и произвольной осью. Сумма проводится по всем ближайшим соседям i -й частицы $n(i)$. Соседи определяются по построению Вороного.

Кроме локального параметра порядка $\Psi_6(\mathbf{r}_i)$ можно ввести еще глобальный параметр ψ_6 , который является средним по системе от $\Psi_6(\mathbf{r}_i)$:

$$\psi_6 = \frac{1}{N} \left\langle \left| \sum_i \Psi_6(\mathbf{r}_i) \right| \right\rangle. \quad (40)$$

Трансляционное упорядочение в системе определяется из параметра порядка

$$\psi_T = \frac{1}{N} \left\langle \left| \sum_i e^{i\mathbf{G}\mathbf{r}_i} \right| \right\rangle, \quad (41)$$

где $\mathbf{r}_i$ — радиус-вектор i -й частицы, а $\mathbf{G}$ вектор обратной решетки.

Трансляционная корреляционная функция имеет вид

$$G_T(r) = \frac{\langle \exp(i\mathbf{G}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)) \rangle}{g(r)}, \quad (42)$$

где

$$r = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|,$$

$$g(r) = \langle \delta(\mathbf{r}_i) \delta(\mathbf{r}_j) \rangle$$

— радиальная функция распределения. В кристаллической фазе без замороженного беспорядка в пределе $r \rightarrow \infty$ имеем

$$G_T(r) \propto r^{-\eta_T},$$

где $\eta_T \leq 1/3$ [13].

Похожим образом определяется и ОКФ $G_6(r)$:

$$G_6(r) = \frac{\langle \Psi_6(\mathbf{r}) \Psi_6^*(\mathbf{0}) \rangle}{g(r)}, \quad (43)$$

где $\Psi_6(\mathbf{r})$ — локальный ориентационный параметр порядка (39). В гексатической фазе ОКФ убывает по степенному закону:

$$G_6(r) \propto r^{-\eta_6},$$

где $0 \leq \eta_6 \leq 1/4$ [13]. Гексатическая фаза теряет свою стабильность при достижении условия $\eta_6(T_i) = 1/4$.

В присутствии пиннинга нами было обнаружено [81], что огибающая ТКФ в логарифмических координатах в зависимости от расстояния имеет излом, после которого и применим критерий убывания ТКФ степенным образом с показателем, равным $\eta_T = 1/3$ для определения границы стабильности кристалла при переходе в гексатическую фазу.

Описанные выше подходы для определения сценариев и параметров плавления систем с конкретными потенциалами являются наиболее используемыми в случае проведения исследований методами компьютерного моделирования.

В качестве иллюстрации применения уравнений ренормгруппы (23) и (24) рассмотрим плавление системы мягких дисков $U(r) = \epsilon(\sigma/r)^{12}$ [189] (далее используется приведенная плотность $\rho^* = \rho\sigma^2$ и температура $T^* = T/\epsilon$ и звездочка в дальнейших выражениях опускается). Эта система, как уже упоминалось выше [170], плавится в соответствии со сценарием БК, т. е. происходит БКТ-переход из кристалла в гексатик, а затем переход первого рода из гексатика в изотропную жидкость. С помощью уравнений ренормгруппы можно определить параметры первого перехода, что и было сделано в нашей работе [189]. Мы рассматривали методом молекулярной динамики систему из 20000 частиц. Система моделировалась в ансамбле NVT (число частиц N , объ-

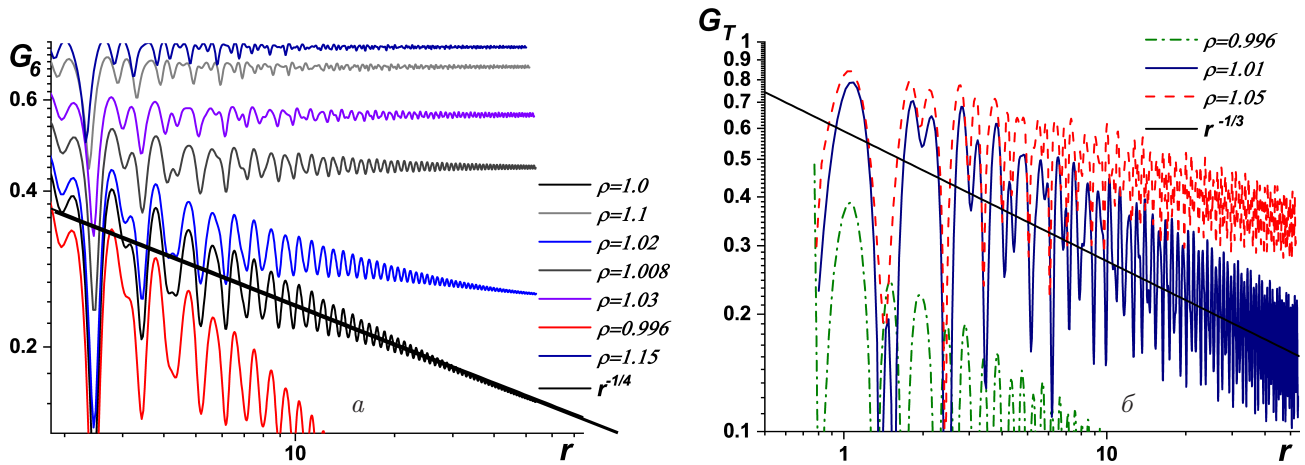


Рис. 6. Корреляционные функции трансляционного G_T и ориентационного G_6 параметров порядка [189]. а) Корреляционная функция ориентационного параметра порядка. Прямая линия соответствует условию $\eta_6 = 1/4$. б) Корреляционная функция трансляционного параметра порядка спадает по степенному закону. Прямая линия соответствует условию $\eta_T = 1/3$

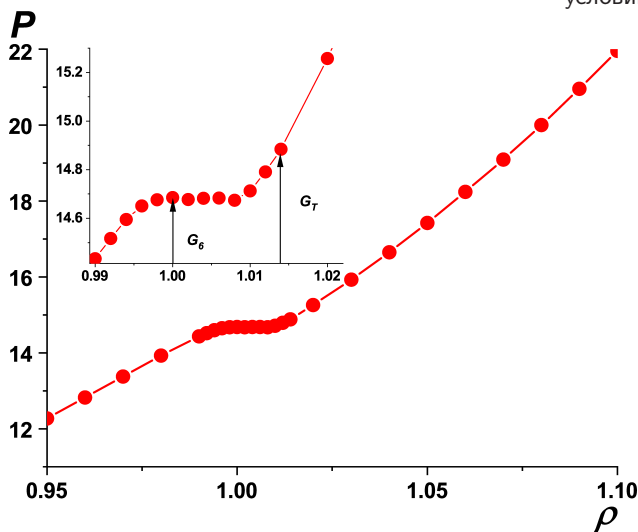


Рис. 7. Уравнение состояния рассматриваемой системы с потенциалом мягких дисков $1/r^{12}$. Стрелками указаны границы устойчивости кристаллической и гексатической фаз, полученные из анализа поведения корреляционных функций трансляционного G_T и ориентационного G_6 параметров порядка. Границы перехода гексатик–изотропная жидкость определяются из построения Максвелла для наблюдаемой петли Майера–Вуда. Представленная картина соответствует сценарию плавления БК

ем V и температура T) с использованием пакета LAMMPS [196]. С учетом скейлинговых соотношений для систем с чисто степенными потенциалами для расчета кривой фазового перехода достаточно получить параметры перехода при одной температуре $T = 1.0$. На рис. 6 представлены корреляционные функции ориентационного G_6 и трансляционного G_T параметров порядка. Видно, что при высоких плотностях ориентационная корреляционная функция не затухает, что соответствует наличию

дальнего ориентационного порядка в системе. В то же время трансляционная корреляционная функция затухает по степенному закону при всех плотностях. При низких плотностях как ориентационные, так и трансляционные корреляционные функции демонстрируют экспоненциальное затухание, т. е. наблюдается изотропная жидкость. На рис. 7 представлено уравнение состояния рассматриваемой системы. Построение Максвелла дает $\rho_l = 0.998$ для плотности изотропной жидкости при переходе жидкость–гексатическая фаза и $\rho_{lh} = 1.006$ для плотности гексатической фазы. Критическое значение показателя трансляционной корреляционной функции $\eta_T = 1/3$ достигается при $\rho_{sh} = 1.014$. Эта плотность выше, чем плотность перехода первого рода, полученная с помощью построения Максвелла для петли Майера–Вуда (рис. 7). Предел устойчивости гексатической фазы $\eta_6 = 1/4$ достигается при $\rho_h = 1.0$ и находится внутри петли Майера–Вуда. Эти плотности хорошо согласуются с приведенными в [170] величинами ($\rho_l = 0.998$, $\rho_{lh} = 1.005$, $\rho_{sh} = 1.015$). На рис. 8 представлено поведение параметров порядка (40) и (41). Заметим, что представленные на рис. 8 параметры порядка не обращаются в нуль при плотностях ниже точки соответствующего перехода, что связано с конечностью используемых при моделировании систем. Из представленных результатов видно, что плавление рассматриваемой системы происходит по сценарию БК.

Для определения параметров перехода кристалл–гексатическая фаза можно также использовать уравнения, полученные из рассмотрения поведения векторного кулоновского газа (20). Однако для использования уравнения (22) и уравнений ре-

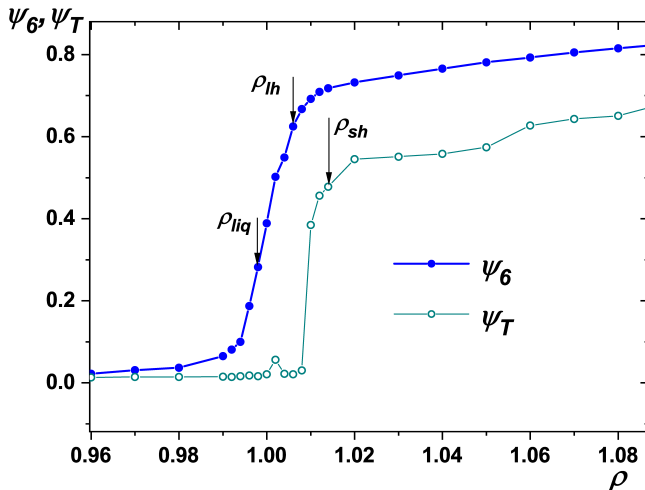


Рис. 8. Ориентационный (ψ_6) и трансляционный (ψ_T) параметры порядка (40) и (41). Стрелка ρ_{sh} указывает границу устойчивости кристаллической фазы, полученную из анализа поведения корреляционной функции трансляционного G_T параметра порядка. Границы перехода гексатик–изотропная жидкость (стрелки ρ_{lh} и ρ_{liq}) определяются из построения Максвелла для наблюдаемой петли Майера–Вуда. Представленная картина соответствует сценарию плавления БК

нормгруппы (23) и (24) необходимы начальные условия для модуля Юнга (21) и фугитивности

$$y(l=0) = \exp(-E_c/k_B T),$$

E_c — энергия ядра дислокации.

Для вычисления модуля Юнга необходимо рассчитать коэффициенты Ламэ λ и μ . Модуль сдвига μ может быть вычислен с помощью метода, предложенного в [197]. В рамках этого метода система подвергается деформации, при этом недиагональная компонента тензора напряжений P_{xy} пропорциональна тензору деформации с коэффициентом пропорциональности, равном модулю сдвига μ :

$$P_{xy} = \mu u_{xy} + O(u_{xy}^2), \quad (44)$$

где u_{xy} — тензор деформаций. Коэффициент Ламэ λ может быть получен из объемного модуля $B = (dP/d\rho)_T$:

$$B = (dP/d\rho)_T = \mu + \lambda. \quad (45)$$

Энергию ядра дислокации можно оценить из приближенного соотношения, которое определяет вероятность обнаружения связанной пары дислокаций [198–200]:

$$p_d = \frac{16\sqrt{3}\pi^2}{K^* - 8\pi} I_0\left(\frac{K^*}{8\pi}\right) e^{\frac{K^*}{8\pi}} e^{-\frac{2E_c}{k_B T}}. \quad (46)$$

Здесь I_0 — модифицированная функция Бесселя,

$$K^* = a_0^2 K / (k_B T), \quad p_d = n_{dp} / N,$$

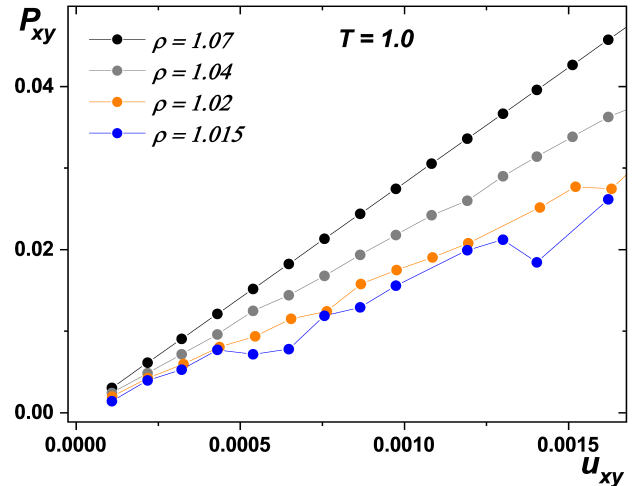


Рис. 9. Недиagonalная компонента тензора напряжений P_{xy} как функция тензора деформации u_{xy}

где n_{dp} — число дислокационных пар, N — число частиц в системе.

На рис. 9 представлено поведение недиагональной компоненты тензора напряжений как функции тензора деформации. Видно, что для сравнительно высоких плотностей зависимость с высокой точностью линейная, что объясняется тем, что при высоких плотностях имеет место хороший кристалл, который реагирует на сдвиг в соответствии с законом Гука. При понижении плотности и приближении к линии плавления линейная зависимость сохраняется только для небольших деформаций, однако этой области линейности оказывается достаточно для вычисления модуля Юнга, представленного на рис. 10. Рассчитанная с помощью данного

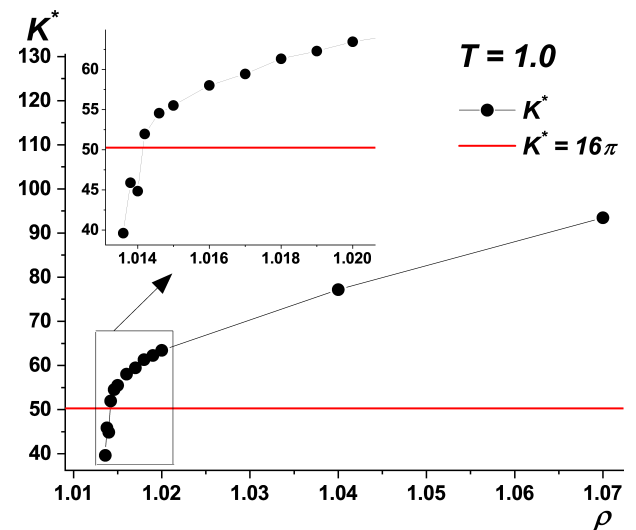


Рис. 10. Приведенный модуль Юнга $K^* = a_0^2 K / (k_B T)$ как функция плотности ρ . Горизонтальная линия соответствует равенству $K^* = 16\pi$, определяющую плотность перехода при заданной температуре (см. уравнение (22))

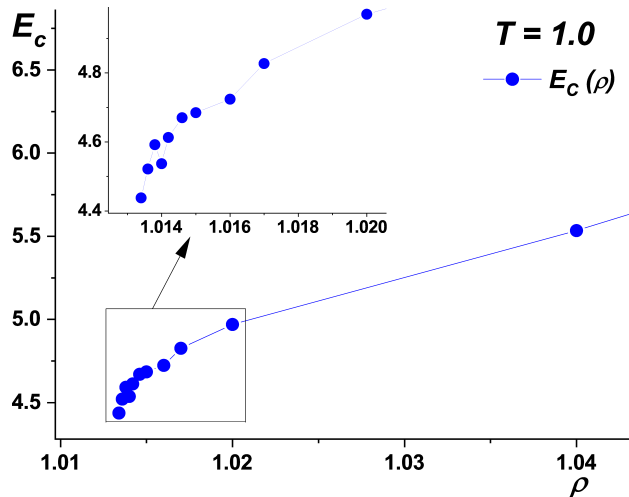


Рис. 11. Энергия ядра дислокации E_c как функция плотности ρ

модуля Юнга и уравнения (46) энергия ядра дислокации E_c как функция плотности приведена на рис. 11. Заметим, что данная энергия заметно выше обсуждавшейся в разд. 2.2 критической энергии ядра дислокации, ниже которой можно ожидать плавления системы посредством перехода первого рода. Решения ренормгрупповых уравнений (23) и (24) представлены на рис. 12. Из представленных решений видно, что переход происходит при плотности $\rho = 1.019811 \approx 1.02$. Это значение хорошо совпадает с полученной в этой же статье из рассмотрения поведения трансляционной корреляционной функции G_T величиной плотности, при которой происходит переход $\rho_{sh} = 1.014$. В работе [170] для плотности перехода приведено значение $\rho_{HS} = 1.015 \pm 0.005$. Таким образом расчет, использующий ренормгрупповые уравнения, дает достаточно надежные оценки для параметров перехода, однако этот подход более трудоемкий, нежели использование уравнения состояния и анализ поведения ориентационной и трансляционной корреляционных функций. Вместе с тем бывают ситуации, когда данный подход оказывается необходим для подтверждения результатов, полученных с помощью более простых методов [94].

Достаточно эффективным методом исследования фазовых переходов в различных системах в случае двух и трех измерений является метод, базирующийся в первую очередь на конечно-размерном анализе кумулянтов Биндера, связанных с параметром порядка и энергией [63, 68, 201–214]:

$$U_L(T, \rho) = 1 - \frac{\langle \psi_6^4 \rangle_L}{3 \langle \psi_6^2 \rangle_L^2}, \quad (47)$$

$$V_L(T, \rho) = 1 - \frac{\langle E^4 \rangle_L}{3 \langle E^2 \rangle_L^2}, \quad (48)$$

где ψ_6 — ориентационный параметр порядка, E — энергия и L — линейный размер рассматриваемой системы. В случае обычного непрерывного перехода (например, двумерной модели Изинга) кумулянты (47) и (48) демонстрируют следующее поведение: вдали от критической точки в пределе бесконечной системы $L \rightarrow \infty$ кумулянты имеют различные предельные значения выше и ниже температуры перехода. Для конечных систем кумулянт (47) имеет различную величину в зависимости от размера системы — чем меньше размер системы, тем больше отклонение. Однако в точке фазового перехода второго рода, в которой наблюдается степенное поведение корреляционной функции параметра порядка и, соответственно, масштабная инвариантность этой функции, кумулянт U_L приобретает универсальное значение U_L^* , не зависящее от размера системы [201, 202, 204]. В силу этого кумулянты U_L как функции температуры или плотности пересекаются в одной точке для разных значений L . В случае перехода первого рода было показано [213], что кумулянты U_L для различных L не пересекаются в одной точке, которую можно было бы считать точкой фазового перехода, однако расстояние между точкой пересечения и точкой перехода уменьшается в термодинамическом пределе. Под точкой перехода в данном случае понимается точка в двухфазной области, в которой фазы имеют одинаковый статистический «вес» [215, 216]. В целом, полную картину определения рода фазовых переходов и расчета критических температур можно получить, если одновременно провести тщательный анализ кумулянтов по параметру порядка и энергии. Кумулянты по энергии не только позволяют доказать наличие фазового перехода первого рода, но и дают много сопутствующей информации [203, 207–214].

В случае перехода БКТ в фазе с квазидальним порядком корреляционные функции всегда имеют степенное масштабно-инвариантное поведение (2), в силу чего кумулянты для различных размеров системы должны собираться на одну линию критических значений U_L^* . Пример подобного поведения представлен в работах [205, 206], в которых была рассмотрена ферромагнитная модель Поттса с шестью состояниями на квадратной решетке. В системе имеется интервал температур, в котором существует фаза, подобная X – Y -модели, при этом для достаточно больших размеров системы в этом температурном интервале кумулянты U_L^* оказываются на одной линии. Учитывая, что в гексатической фазе также наблюдается степенное поведение ориентационной корреляционной функции (28), представ-

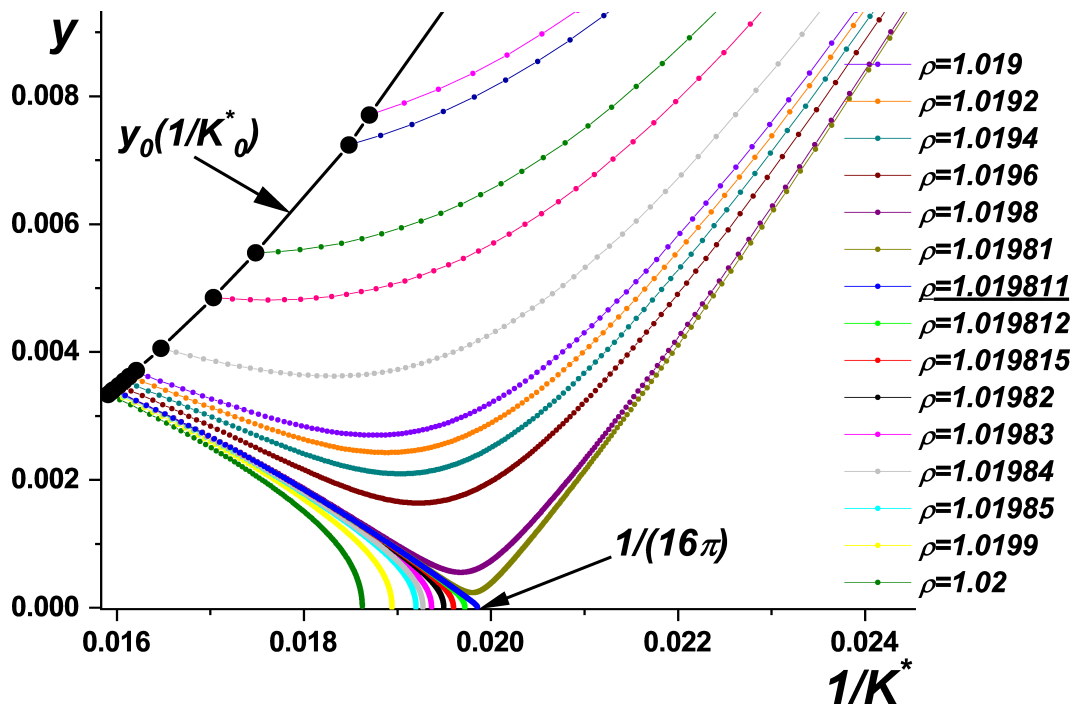


Рис. 12. Решения ренормгрупповых уравнений (23) и (24). Плотность перехода $\rho = 1.019811 \approx 1.02$

ляется естественным применить этот подход для определения границ гексатической фазы на фазовой диаграмме. При этом нужно учитывать, что «ширина» гексатической фазы довольно мала (см., например, [75, 76, 170, 189]). В работах [63, 68] была предпринята попытка исследовать с помощью метода кумулянтов возможность появления гексатической фазы при плавлении системы твердых дисков, однако полученные результаты оказались противоречивыми — в работе [63] утверждается, что система плавится посредством одного фазового перехода первого рода, в то время как в [68] авторы пришли к выводу, что система переходит из изотропной жидкости в гексатическую фазу посредством непрерывного БКТ-перехода, однако авторы не были уверены, что смогли достичь термодинамического равновесия и получить гексатическую фазу. Эти результаты находятся в очевидном противоречии с более поздними работами [75, 76], в которых рассматривались системы гораздо большего размера и проводилось очень длительное моделирование для достижения термодинамического равновесия. Заметим, что тем не менее метод кумулянтов может оказаться полезным при изучении возникновения гексатической фазы, если рассмотреть систему при наличии случайного пиннинга. Известно, что введение беспорядка приводит к довольно значительному уширению области гексатика на фазовой диаграмме [8, 81, 188, 189, 191, 192], в связи с чем при наличии

случайного беспорядка использование метода кумулянтов для определения границ гексатической фазы может оказаться достаточно эффективным, однако это пока задача для будущих исследований.

Следует также упомянуть использование модифицированного критерия Линдемана для описания плавления двумерных систем [22–24, 28, 217–219]. Знаменитый критерий плавления Линдемана [220] утверждает, что плавление трехмерного кристалла происходит, когда отношение γ квадратного корня из среднеквадратичного смещения частицы из положения равновесия $\sqrt{\langle u^2 \rangle}$ к межатомному расстоянию в твердом теле a достигает порогового значения ($\gamma \approx 0.1$)

$$\gamma = \frac{\sqrt{\langle u^2 \rangle}}{a} \approx 0.1. \quad (49)$$

Это самый старый и, по-видимому, наиболее широко используемый метод приблизительной оценки параметров плавления реальных и модельных систем.

Очевидно, что традиционный критерий Линдемана неприменим к двумерным кристаллам, поскольку, как уже обсуждалось в разд. 3, длинноволновые флуктуации плотности приводят к логарифмической расходимости среднеквадратичного смещения с размером системы, что характерно для квазидальнего кристаллического порядка. Достаточно успешная попытка модифицировать критерий Линдемана для описания плавления двумерных систем была предпринята в серии работ [217–219]. В ра-

ботах [217, 218] в рамках самосогласованного приближения были учтены ангармонизмы третьего и четвертого порядков для системы мягких дисков $U(r) \propto 1/r^n$ для $n = 1, \dots, 12$ и рассчитаны температуры появления неустойчивостей кристаллических решеток. Оказалось, что величина модифицированного параметра плавления

$$\gamma_{2D} = \frac{\langle (\mathbf{u}_i - \mathbf{u}_{i+1})^2 \rangle}{a^2},$$

где $\mathbf{u}_i$ — смещение i -го атома, практически не зависит от n . С помощью моделирования методом молекулярной динамики [219] было показано, что γ_{2D} практически не зависит от природы двумерного классического кристалла. Для двумерных дипольных кристаллов и двумерных кристаллов Леннарда-Джонса $\gamma_{2D} = 0.12$. Для двумерного электронного кристалла $\gamma_{2D} = 0.10$ [219]. При этом значения γ_{2D} различны в квантовой и классической областях [217, 218]. К сожалению, критерий Линдемана является однофазным критерием, не учитывающим термодинамику перехода, а величина γ_{2D} не связана с критерием, используемым в теории БКТХНЯ. Попытка проследить эту связь была предпринята в работах [24, 28].

5. ДВУМЕРНАЯ СИСТЕМА С n - m -ПОТЕНЦИАЛОМ

Как обсуждалось выше, для чисто отталкивательных потенциалов мягкость отталкивания кардинальным образом влияет на сценарии плавления, термодинамику и спектры возбуждений в двумерных системах. Однако, насколько нам известно, роль притяжения в сценариях плавления двумерных систем систематически не изучалась. Системы с потенциалом Леннарда-Джонса (ЛДЖ) были одними из первых, которые рассматривались с целью прояснения роли притяжения в двумерном плавлении. При этом многие опубликованные результаты по критической точке и сценарию двумерного плавления ЛДЖ-кристаллов достаточно противоречивы [110–123]. В ранних работах сообщалось о различных сценариях плавления треугольного кристалла, включая два непрерывных перехода с промежуточной гексатической фазой согласно теории БКТХНЯ [110] и один переход первого рода [110–116]. Благодаря росту вычислительных возможностей моделирование больших систем ($\geq 10^5$ частиц) привело к новым результатам по двумерному плавлению ЛДЖ-кристаллов и родственных систем. Моделирование систем с последующим анализом их уравнения состояния и дальнедействующей

асимптотики трансляционной корреляционной функции (ТКФ) (которая определяет предел устойчивости кристалла) позволило однозначно определить сценарии плавления. Например, об изменении сценария плавления сообщалось в работе [122], в которой авторы изучали двумерные системы частиц, взаимодействующих посредством обобщенного потенциала ЛДЖ с различными отталкивающими частями ($\propto 1/r^{12}$ и $\propto 1/r^{64}$). В работе было показано, что система плавится посредством фазового перехода первого рода при низких температурах и через два непрерывных БКТ-перехода (по теории БКТХНЯ) при высоких температурах. Однако система ЛДЖ при высоких температурах обычно считается близкой к системе мягких дисков $1/r^{12}$, таким образом можно ожидать, что в высокотемпературной области фазовой диаграммы плавление должно происходить в соответствии с БК-сценарием (см., однако, [123]).

В работе [117] было показано, что в двумерной ЛДЖ-системе при высоких температурах наблюдается переход первого рода гексатик–жидкость и непрерывный БКТ-переход кристалл–гексатик (БК-сценарий), в то время как при низких температурах система плавится посредством одного перехода первого рода. Результаты моделирования двумерной ЛДЖ-системы притягивающихся многоугольников [118] (квадраты, пятиугольники, и шестиугольники) показали, что при низких температурах, когда роль притяжения преобладает, все системы плавятся посредством перехода первого рода за счет подавления гексатической фазы. При высоких температурах мягкие диски плавятся в соответствии с БК-сценарием, тогда как шестиугольники и квадраты плавятся в рамках теории БКТХНЯ с промежуточными гексатической и тетраэдрической фазами соответственно. Сценарий плавления пентагонов не меняется с повышением температуры и является переходом первого рода.

Здесь мы рассмотрим моделирование системы с обобщенным потенциалом ЛДЖ — n - m -потенциалом (см. рис. 13) при постоянном $n = 12$ и $m = 6, 9$ и 11:

$$U_{nm}(r) = \frac{\epsilon}{n-m} \left[m \left(\frac{\sigma}{r} \right)^n - n \left(\frac{\sigma}{r} \right)^m \right], \quad (50)$$

где n и m — показатели степени для отталкивающей и притягивающей частей соответственно, и σ и ϵ — масштаб длины и глубина потенциала. В дальнейшем мы используем безразмерные величины $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r}/\sigma$, $T \rightarrow T/\epsilon$.

Система состояла из 20000 частиц. Моделирование проводилось методом молекулярной динамики

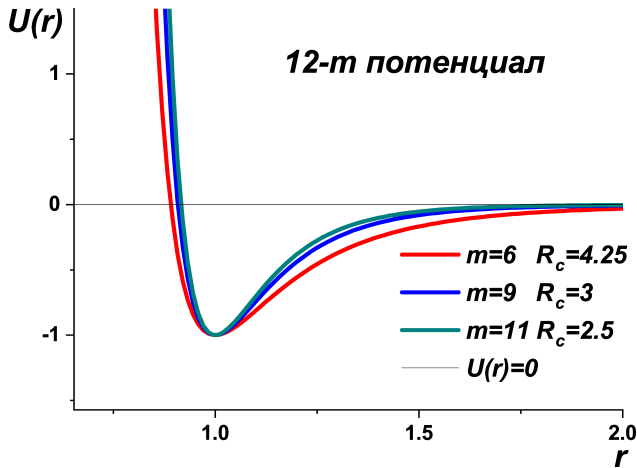


Рис. 13. n - m -потенциал при $n = 12$ и $m = 6, 9$ и 11 . R_c — радиус обрезания потенциала, используемый при моделировании

в NVT -ансамбле в широком диапазоне плотностей и температур (от $T = 0.3$ до $T = 50.0$) с использованием пакета LAMMPS [196]. Плавление кристалла в некоторых случаях исследовалось и для больших систем $N = 256^2$ и 512^2 для более точного определения границ двухфазной области.

Уравнения состояния (изотермы) для всех рассматриваемых систем вели себя сходным образом и имели особенности, которые в зависимости от температуры и плотности связаны с переходом газ-жидкость или плавлением кристалла соответственно. Это показано на рис. 14а для $m = 6$: здесь на изотерме $T = 0.45$ видна широкая петля, свойственная переходу газ-жидкость и узкая петля, связанная с плавлением кристалла, тогда как только одна петля, связанная с плавлением кристалла, видна выше критической точки для перехода газ-жидкость при $T = 1.0$. Ниже тройной точки при $T = 0.3$ имеется только одна широкая петля, соответствующая переходу газ-кристалл. Бинодали газ-жидкость были рассчитаны с помощью построения Максвелла для петель на изотермах в координатах P - V , при этом критическая температура $T_c \approx 0.51$ и температура тройной точки $T_t \approx 0.4$.

Было обнаружено, что с увеличением m (соответствующем уменьшению радиуса дальнего действия притяжения) критическая температура перехода газ-жидкость понижается, двухфазная область сужается, сдвигаясь к низким плотностям, а отношение между температурами критической и тройной точек становится близким к единице при $m = 11$ (рис. 15).

Петля Майера-Вуда наблюдалась во всех рассмотренных системах при высоких температурах, что свидетельствует о переходе первого рода. Одна-

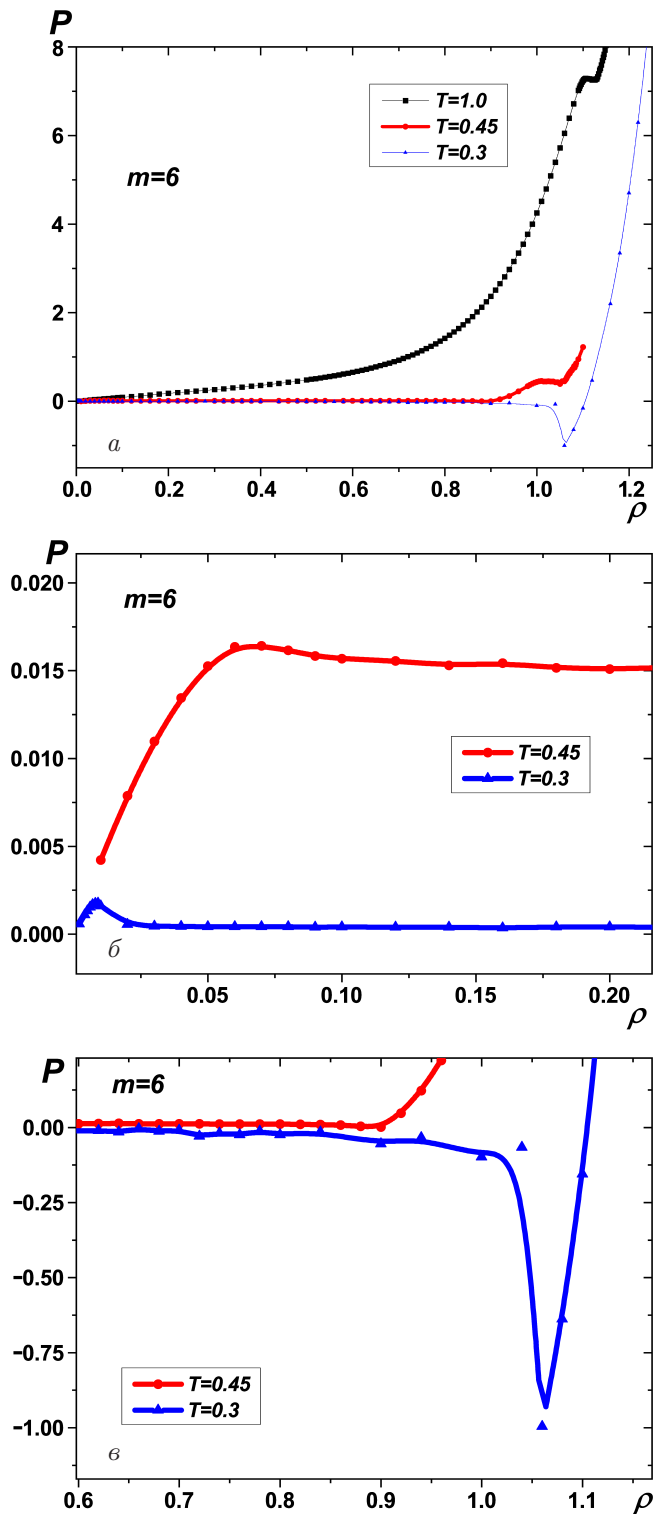


Рис. 14. Уравнение состояния для двумерной n - m -системы ($m = 6$). а) Изотермы системы с $m = 6$ ниже ($T = 0.3$) и выше ($T = 0.45$) тройной точки и выше критической точки $T = 1.0$. б) Изотерма $T = 0.45$ газ-жидкость и изотерма $T = 0.3$ газ-кристалл при низких плотностях. в) Изотерма $T = 0.45$ газ-жидкость и изотерма $T = 0.3$ газ-кристалл при высоких плотностях

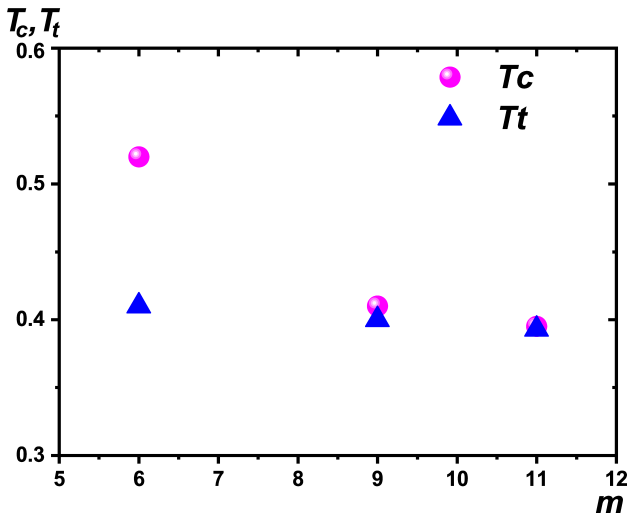


Рис. 15. Зависимости температур тройной и критической точек от показателя притяжения m

ко, чтобы определить подходящий сценарий плавления, нужно сравнить границы стабильности кристалла и гексатической фазы с границами петли Майера–Вуда. Пределы устойчивости гексатической и кристаллической фаз были получены из асимптотического поведения корреляционных функций ориентационного и трансляционного параметров порядка соответственно. Пример эволюции корреляционных функций на изотерме системы с $m = 6$ при $T = 3.0$ представлен на рис. 16б, в. На рис. 16а показано уравнение состояния при $T = 3.0$, полученное путем усреднения по 20 независимым репликам для системы с $m = 6$, состоящей из $N = 512^2$ частиц. Видна четко выраженная петля Майера–Вуда, присущая переходам первого рода. Петля очень гладкая, что позволяет определить границы двухфазной области с высокой точностью ($\rho = 1.010$ – 1.0206) с помощью правила Максвелла.

Анализируя корреляционные функции на рис. 16б и 16в, можно видеть, что петля соответствует двухфазной области гексатик–жидкость, при этом имеет место БК-сценарий плавления с непрерывным переходом БКТ из кристалла в гексатик и переходом первого рода из гексатика в изотропную жидкость. Гексатическая фаза становится неустойчивой при плотности $\rho_{hex-liq} = 1.014$ (рис. 16б), находящейся внутри петли. При этой плотности ориентационная корреляционная функция убывает по степенному закону с показателем $\eta_6 = 1/4$. Кристалл становится неустойчивым при плотности $\rho_{sol-hex} = 1.038$ (рис. 16в), которая выходит далеко за пределы петли Майера–Вуда. При этой плотности трансляционная корреляционная функция убывает степенным образом с показателем $\eta_T = 1/3$, что указывает на наличие квазидально

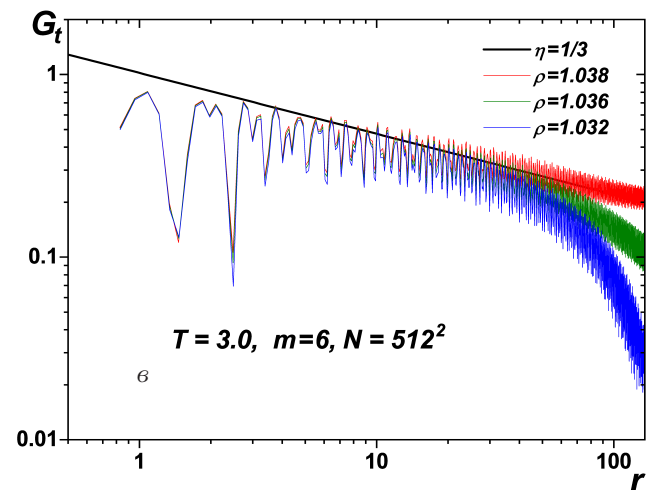
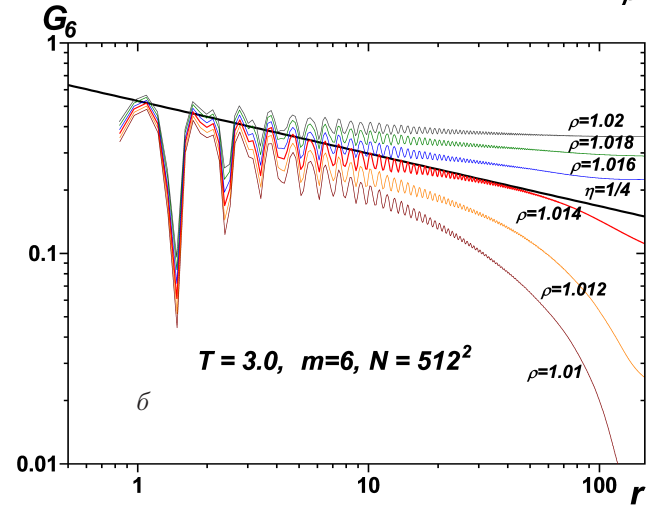
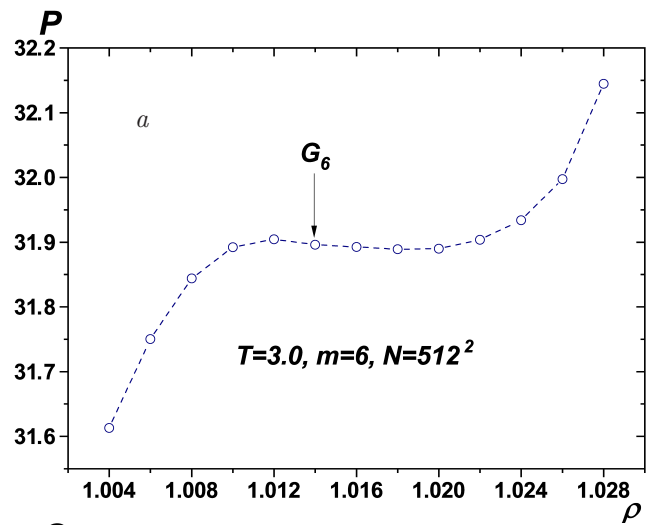


Рис. 16. Эволюция корреляционных функций на изотерме $T = 3.0$. а) Изотерма $T = 3.0$ для системы с $m = 6$, состоящей из $N = 512^2$, полученная усреднением более 20 независимых реплик. Стрелкой указан предел устойчивости G_6 гексатической фазы. б), в) Ориентационная G_6 и трансляционная G_t корреляционные функции для одной и той же системы $m = 6$ при разных плотностях

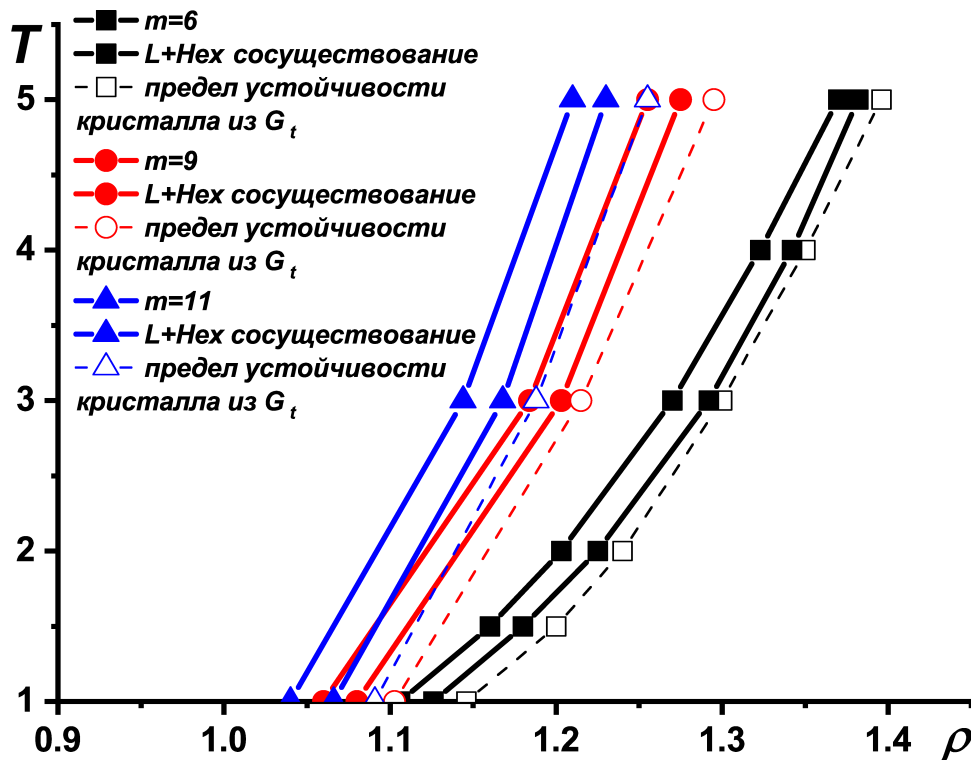


Рис. 17. БК-сценарий плавления треугольных кристаллов при высоких температурах и плотностях. Сплошные линии — границы петли Майера–Вуда, соответствующие двухфазной области гесатическая фаза — изотропная жидкость. Штриховые линии — границы перехода БКТ из кристалла в гексатическую фазу. Результаты приведены для случаев $m = 6$, 9 и 11, как указано на рисунке

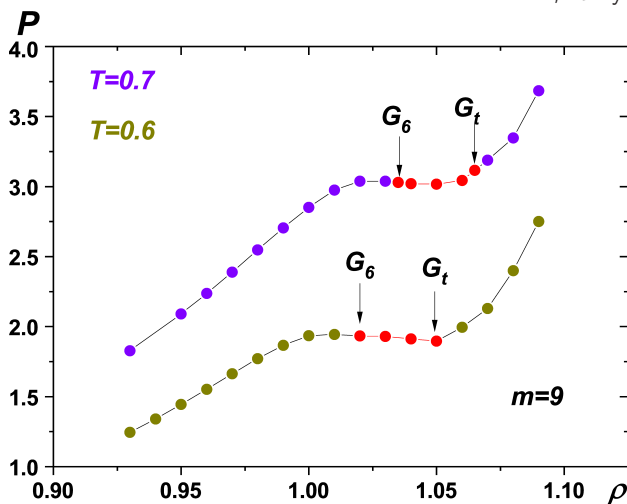


Рис. 18. Изменение сценария плавления для случая $m = 9$: Сценарий плавления меняется с перехода первого рода ($T = 0.6$) на БК-сценарий ($T = 0.7$). Стрелками показаны пределы стабильности гексатической фазы G_6 , полученные с использованием ориентационной корреляционной функции и пределы стабильности кристаллической фазы G_t , полученные с помощью трансляционной корреляционной функции, которые оказываются внутри петли при понижении температуры. Точки, расположенные в пределах стабильности гексатической фазы, окрашены в красный цвет

трансляционного порядка. Полученные результаты хорошо согласуются со сценарием плавления для мягких дисков $1/r^{12}$ (см. [117, 170, 189]), но, в отличие от [123], не демонстрирует двух непрерывных переходов БКТ в системе Леннарда-Джонса при высоких температурах.

Было обнаружено, что все исследованные нами треугольные кристаллы плавятся при высоких температурах по БК-сценарию независимо от показателя притяжения m . Линии плавления в этой области фазовой диаграммы с увеличением m смещаются в сторону малых плотностей и ведут себя подобно системе мягких дисков $1/r^{12}$, как показано на рис. 17.

Однако с понижением температуры плавления баланс влияния отталкивающей и притягивающей ветвей меняется. В результате мы наблюдали, что при низких температурах происходит изменение сценария плавления с БК на переход первого рода (без гексатической фазы) в системах с $m = 6$, 9 и 11. Смена сценария плавления показана для двух изотерм системы с $m = 9$ на рис. 18. Температура T_m , при которой происходит изменение сценария плавления для разных m , были определены в [121]: для $m = 6$ эта температура $T_m = 0.6$; для $m = 9$ температура $T_m = 0.65$; а для $m = 11$ температура

$T_m = 0.7$. Температура изменения сценария плавления уменьшалась с уменьшением m (в сторону более мягкого и дальнего притяжения). Диапазон притяжения существенно влияет на область перехода газ–жидкость и критическую температуру T_c , а также температуру T_m , при которой происходит смена сценария плавления и возникает гексатическая фаза. Для случая $m = 3$ изменение сценария плавления происходит в метастабильной области кристалла, и, как показано в [121], приводит к очень сложной фазовой диаграмме с двумя тройными точками: так как в данном случае плавление является двухстадийным процессом, в силу правила Гиббса одна тройная точка соответствует равновесию гексатик–жидкость–газ, которой соответствует температура T_{t1} , а вторая — равновесию кристалл–гексатик–газ. Этой точке отвечает температура T_{t2} , при этом температура T_{t2} ниже температуры T_{t1} . В интервале $T_{t2} < T_{t1}$ на изотермах наблюдается непрерывный переход типа БКТ из кристалла в гексатическую фазу и переход первого рода из гексатика в газ вплоть до линии сублимации кристалл–газ, на которой происходит переход первого рода из кристалла в газ.

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В обзоре обсуждаются основные современные представления о сценариях плавления двумерных систем, базирующиеся в значительной степени на теории Березинского – Костерлица – Таулеса (БКТ) [1, 4], а также различные методы компьютерного моделирования, которые используются для определения сценариев и параметров плавления. В настоящее время можно говорить о трех основных сценариях двумерного плавления. Прежде всего, это теория Березинского – Костерлица – Таулеса – Хальперина – Нельсона – Янга (БКТХНЯ) [8], в которой был предложен нестандартный по сравнению со случаем трех измерений сценарий плавления двумерных кристаллов посредством двух непрерывных переходов типа БКТ с промежуточной гексатической фазой. При этом фазовый переход первого рода также может реализоваться. Сравнительно недавно Бернардом и Краусом (БК) [75, 76] был предложен еще один сценарий плавления, в рамках которого плавление также может происходить посредством двух переходов, однако при этом переход твердое тело–гексатическая фаза происходит через непрерывный переход типа БКТ, а переход гексатическая фаза–изотропная жидкость — посредством перехода первого рода.

Физический механизм рассматриваемых переходов определяется поведением топологических дефектов — дислокаций, дисклинаций, доменных стенок, связанных с трансляционным и ориентационным параметрами порядка. В настоящее время отсутствует универсальная теория двумерного плавления, которая позволила бы однозначно определить механизм плавления двумерной системы в зависимости от вида межчастичного потенциала, что делает принципиально важным использование методов компьютерного моделирования. В обзоре описаны различные подходы, которые позволяют в рамках компьютерного моделирования определить параметры и механизм плавления двумерных систем. В частности, подробно показано, как построить фазовую диаграмму и определить тип перехода, исходя из вида уравнения состояния и асимптотического поведения корреляционных функций ориентационного и трансляционного параметров порядка, определяющих пределы устойчивости гексатической и кристаллической фаз соответственно. Нужно учитывать, что принципиально важным для определения типа перехода является наличие петель Майера–Вуда на уравнении состояния. При этом нужно учитывать, что переход БКТ является переходом бесконечного рода, поэтому, как обсуждается в обзоре, на уравнении состояния в области перехода из кристаллической фазы в гексатическую петли в принципе не могут существовать, хотя в некоторых работах (см., например, [65, 75, 76]) утверждается обратное. На наш взгляд, представленный подход является наиболее простым и эффективным для изучения плавления двумерных систем с различными потенциалами взаимодействия. В качестве примеров рассмотрены потенциалы мягких дисков $1/r^{12}$ и n - m -потенциал. Для потенциала мягких дисков также приведен расчет, базирующийся на рассмотрении ренормгрупповых уравнений, позволяющий рассчитать параметры БКТ-перехода из кристаллической в гексатическую фазу, и показано хорошее согласие с результатами, полученными из рассмотрения асимптотического поведения корреляционной функции трансляционного параметра порядка. Примеры применения описанных подходов для более сложных потенциалов можно найти в работах [8, 15, 16, 79–82, 93–96].

В последние годы появились работы, в которых рассматриваются двумерные решетки, отличающиеся от треугольной — квадратные, кагоме, додекагональный квазикристалл и т. д. (см., например, [82, 93]). К сожалению, как отмечалось выше, уравнения ренормгруппы были выведены толь-

ко для треугольной решетки. Даже для простейшей из оставшихся, квадратной, эти уравнения не были выведены. В связи с этим отсутствует точная асимптотика корреляционных функций параметров порядка, что вынуждает при анализе сценариев плавления решеток, отличных от треугольной, использовать те же показатели для асимптотик корреляционных функций ориентационного ($\eta_6 = 1/4$) и трансляционного ($\eta_T = 1/3$) параметров порядка в надежде, что полученные результаты достаточно хорошо описывают реальную ситуацию. При том можно ожидать, что показатель для ориентационной корреляционной функции останется тем же и для других симметрий, вопрос о показателе трансляционной корреляционной функции, строго говоря, остается открытым [74, 91, 93].

Вместе с тем построение микроскопической теории БКТ-перехода из кристаллической фазы в гексатическую в принципе возможно, исходя из имеющихся подходов для расчета упругих модулей (например, самосогласованного квазигармонического приближения для расчета фононных спектров [221]) и алгоритма вычисления энергии ядра дислокации [198–200], которые могут использоваться в качестве начальных условий для решения ренормгрупповых уравнений, по крайней мере, в случае треугольных решеток. Однако ситуация с построением микроскопической теории перехода из гексатической фазы в изотропную жидкость более сложная. Несмотря на то, что в этом случае нет проблем с уравнениями ренормгруппы для этого перехода, в силу отсутствия даже квазидально-го трансляционного порядка в гексатической фазе и равенства нулю модуля сдвига, до сих пор нет надежных микроскопических выражений для модуля Франка и энергии ядра дисклинации, которые необходимы в качестве начальных значений для уравнений ренормгруппы.

Таким образом, адаптация теории БКТХНЯ для описания устойчивости кристаллических фаз, отличных от треугольной, а также поиск подходов для микроскопического описания параметров гамильтониана, описывающего гексатическую фазу, представляются важными и интересными задачами, ожидающими решения.

Благодарности. Авторы благодарны В. В. Бражкину и А. К. Муртазаеву за интерес к работе и полезные обсуждения различных аспектов тематики.

Финансирование. Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант 19-12-00092, <https://rscf.ru/project/19-12-00092>), а так-

же с использованием оборудования центра коллективного пользования «Комплекс моделирования и обработки данных исследовательских установок мега-класса» НИЦ «Курчатовский институт» (<http://cpk.nrcki.ru>) и вычислительных ресурсов Межведомственного суперкомпьютерного центра Российской академии наук (МСЦ РАН).

ЛИТЕРАТУРА

1. В. Л. Березинский ЖЭТФ **59**, 907 (1970); V. L. Berezinskii, Sov. Phys. JETP **32**, 493 (1971).
2. В. Л. Березинский, ЖЭТФ **61**, 1144 (1971); V. L. Berezinskii, Sov. Phys. JETP **34**, 610 (1972).
3. J. M. Kosterlitz and D. J. Thouless, J. Phys. C: Solid State Phys. **5**, L124 (1972).
4. J. M. Kosterlitz and D. J. Thouless, J. Phys. C **6**, 1181 (1973).
5. J. M. Kosterlitz, J. Phys. C: Solid State Phys. **7**, 1046 (1974).
6. D. R. Nelson and J. M. Kosterlitz, Phys. Rev. Lett. **39**, 1201 (1977).
7. P. Minnhagen, Rev. Mod. Phys. **59**, 1001 (1987).
8. В. Н. Рыжов, Е. Е. Тареева, Ю. Д. Фомин, Е. Н. Циок, УФН **187**, 921 (2017); V. N. Ryzhov, E. E. Tareyeva, Y. D. Fomin and E. N. Tsiok, Phys.-Usp. **60**, 857 (2017).
9. В. Н. Рыжов, УФН **187**, 125 (2017); V. N. Ryzhov, Phys.-Usp. **60**, 114 (2017).
10. J. M. Kosterlitz, Rep. Prog. Phys. **79**, 026001 (2016).
11. *40 Years of Berezinskii-Kosterlitz-Thouless Theory*, ed. by J. V. Jose, World Scientific, Singapore (2013).
12. B. I. Halperin and D. R. Nelson, Phys. Rev. Lett. **41**, 121 (1978).
13. D. R. Nelson and B. I. Halperin, Phys. Rev. B. **19**, 2457 (1979).
14. A. P. Young, Phys. Rev. B **19**, 1855 (1979).
15. В. Н. Рыжов, Е. Е. Тареева, Ю. Д. Фомин, Е. Н. Циок, УФН **190**, 449 (2020); V. N. Ryzhov, E. E. Tareyeva, Y. D. Fomin and E. N. Tsiok, Phys.-Usp. **63**, 417 (2020).
16. V. N. Ryzhov, E. A. Gaiduk, E. E. Tareyeva, Yu. D. Fomin and E. N. Tsiok, Phys. Part. and Nuclei **51**, 786 (2020).

17. K. J. Strandburg, *Rev. Mod. Phys.* **60**, 161 (1988).
18. N. Shankaraiah, S. Sengupta and G. I. Menon, *J. Chem. Phys.* **151**, 124501 (2019).
19. D. Du, M. Doxastakis, E. Hiloua and S. L. Biswal, *Soft Matter* **13**, 1548 (2017).
20. L. A. Padilla and A. Ramirez-Hernandez, *J. Phys.: Condens. Matter* **32**, 275103 (2020).
21. H. Arjun and P. Chaudhuri, *J. Phys.: Condens. Matter* **32**, 414001 (2020).
22. P. Dillmann, G. Maret and P. Keim, *J. Phys.: Condens. Matter* **24**, 464118 (2012).
23. K. Zahn and G. Maret, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 3656 (2000).
24. S. A. Khrapak, *Phys. Rev. Res.* **2**, 012040(R) (2020).
25. W. D. Pineros, M. Baldea and Th. M. Truskett, *J. Chem. Phys.* **145**, 054901 (2016).
26. Z. Krebs, A. B. Roitman, L. M. Nowack, C. Liepold, B. Lin and S. A. Rice, *J. Chem. Phys.* **149**, 034503 (2018).
27. V. V. Hoang and N. T. Hieu, *J. Phys. Chem. C* **120**, 18340 (2016).
28. S. Khrapak, *J. Chem. Phys.* **148**, 146101 (2018).
29. H. Schmiddle, C. K. Hall, O. D. Velez and S. H. L. Klapp, *Soft Matter* **8**, 1521 (2012).
30. N. Shankaraiah, S. Sengupta and G. I. Menon, *J. Phys.: Condens. Matter* **32**, 184003 (2020).
31. J. A. Anderson, J. Antonaglia, J. A. Millan, M. Engel and S. C. Glotzer, *Phys. Rev. X* **7**, 021001 (2017).
32. L. A. Padilla, A. A. Leon-Islas, J. Funkhouser, J. C. Armas-Perez and A. Ramirez-Hernandez, *J. Chem. Phys.* **155**, 214901 (2021).
33. L. Nowack and S. A. Rice, *J. Chem. Phys.* **151**, 244504 (2019).
34. W. D. Pineros, M. Baldea and T. M. Truskett, *J. Chem. Phys.* **145**, 054901 (2016).
35. A. Jain, J. R. Errington and T. M. Truskett, *Phys. Rev. X* **4**, 031049 (2014).
36. Y. Chen, X. Tan, H. Wang, Z. Zhang, J. M. Kosterlitz and X. S. Ling, *Phys. Rev. Lett.* **127**, 018004 (2021).
37. D. S. Cardoso, V. F. Hernandez, T. P. O. Nogueira and J. R. Bordin, *Physica A* **566**, 125628 (2021).
38. G. Campos-Villalobos, M. Dijkstra and A. Patti, *Phys. Rev. Lett.* **126**, 158001 (2021).
39. A. M. Almudallal, S. V. Buldyrev and I. Saika-Voivod, *J. Chem. Phys.* **137**, 034507 (2012).
40. S. A. Rice, *Chem. Phys. Lett.* **479**, 1 (2009).
41. P. Keim, G. Maret and H. H. von Grunberg, *Phys. Rev. E* **75**, 031402 (2007).
42. P. Keim, G. Maret, U. Herz and H. H. von Grunberg, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 215504 (2004).
43. S. Deutschlander et al., *Phys. Rev. Lett.* **111**, 098301 (2013).
44. T. Horn et al., *Phys. Rev. E* **88**, 062305 (2013).
45. J. Zanghellini, P. Keim and H. H. von Grunberg, *J. Phys.: Condens. Matter* **17**, S3579 (2005).
46. S. Deutschlander, A. M. Puertas, G. Maret and P. Keim, *Phys. Rev. Lett.* **113**, 127801 (2014).
47. E. V. Vasilieva, O. F. Petrov and M. M. Vasiliev, *Sci. Rep.* **11**, 523 (2021).
48. O. S. Vulina and X. G. Kossa, *Phys. Lett. A* **378**, 3475 (2014).
49. X. S. Koss and O. S. Vulina, *J. Phys.: Conference Series* **653**, 012103 (2015).
50. X. Qi, Y. Chen, Y. Jin and Y.-H. Yang, *J. Korean Phys. Soc.* **49**, 1682 (2006).
51. B. J. Alder and A. W. Wainwright, *J. Chem. Phys.* **27**, 1208 (1957).
52. B. J. Alder and A. W. Wainwright, *J. Chem. Phys.* **33**, 1439 (1960).
53. B. J. Alder and A. W. Wainwright, *J. Chem. Phys.* **31**, 459 (1959).
54. B. J. Alder and A. W. Wainwright, *Phys. Rev.* **127**, 359 (1962).
55. J. A. Zollweg and G. V. Chester, *Phys. Rev. B* **46**, 11186 (1992).
56. H. Weber and D. Marx, *Europhys. Lett.* **27**, 593 (1994).
57. M. P. Allen, D. Frenkel and W. Gignac, *J. Chem. Phys.* **78**, 4206 (1983).
58. A. D. Novaco and P. A. Shea, *Phys. Rev. B* **26**, 284 (1982).
59. F. F. Abraham, *Phys. Rev. Lett.* **44**, 463 (1980).
60. J. A. Barker, D. Henderson and F. F. Abraham, *Physica A* **106**, 226 (1981).
61. S. Toxvaerd, *Phys. Rev. Lett.* **44**, 1002 (1980).

62. J. Q. Broughton, G. H. Gilmer and J. D. Weeks, *Phys. Rev. B* **25**, 4651 (1982).
63. H. Weber, D. Marx and K. Binder, *Phys. Rev. B* **51**, 14636 (1995).
64. C. H. Mak, *Phys. Rev. E* **73**, 065104 (2006).
65. J. J. Alonso and J. F. Fernandez, *Phys. Rev. E* **59**, 2659 (1999).
66. J. Lee and K. J. Strandburg, *Phys. Rev. B* **46**, 11190 (1992).
67. J. F. Fernandez, J. J. Alonso and J. Stankiewicz, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 3477 (1995).
68. K. Binder, S. Sengupta and P. Nielaba, *J. Phys.: Condens. Matter* **14**, 2323 (2002).
69. W. Qi, A. P. Gantapara and M. Dijkstra, *Soft Matter* **10**, 5449 (2014).
70. J. Russo and N. B. Wilding, *Phys. Rev. Lett.* **119**, 115702 (2017).
71. A. L. Thorneywork, J. L. Abbott, D. G. A. L. Aarts and R. P. A. T. Dullens, *Phys. Rev. Lett.* **118**, 158001 (2017).
72. P. S. Ruiz, Q.-L. Lei and R. Ni, *Commun. Phys.* **2**, 70 (2019).
73. X. Xu and S. A. Rice, *Phys. Rev. E* **78**, 011602 (2008).
74. D. Abutbul and D. Podolsky, *Phys. Rev. Lett.* **128**, 255501 (2022).
75. E. P. Bernard and W. Krauth, *Phys. Rev. Lett.* **107**, 155704 (2011).
76. M. Engel, J. A. Anderson, S. C. Glotzer, M. Isobe, E. P. Bernard and W. Krauth, *Phys. Rev. E* **87**, 042134 (2013).
77. J. Lee and J. M. Kosterlitz, *Phys. Rev. B* **43**, 3265 (1991).
78. D. E. Dudalov, Yu. D. Fomin, E. N. Tsiok and V. N. Ryzhov, *J. Phys.: Conference Series* **510**, 012016 (2014).
79. D. E. Dudalov, Yu. D. Fomin, E. N. Tsiok and V. N. Ryzhov, *J. Chem. Phys.* **141**, 18C522 (2014).
80. D. E. Dudalov, Yu. D. Fomin, E. N. Tsiok and V. N. Ryzhov, *Soft Matter* **10**, 4966 (2014).
81. E. N. Tsiok, D. E. Dudalov, Yu. D. Fomin and V. N. Ryzhov, *Phys. Rev. E* **92**, 032110 (2015).
82. N. P. Kryuchkov, S. O. Yurchenko, Yu. D. Fomin, E. N. Tsiok and V. N. Ryzhov, *Soft Matter* **14**, 2152 (2018).
83. Y. D. Fomin, E. N. Tsiok and V. N. Ryzhov, *Physica A* **527**, 121401 (2019).
84. A. Mendoza-Coto, V. Mattiello, R. Cenci, N. Defenu and L. Nicolao, *arXiv:2209.02802v1* (2022).
85. S. Prestipino, F. Saija and P. V. Giaquinta, *Phys. Rev. Lett.* **106**, 235701 (2011).
86. S. Prestipino and F. Saija, *J. Chem. Phys.* **141**, 184502 (2014).
87. Yu. D. Fomin, V. N. Ryzhov and N. V. Gribova, *Phys. Rev. E* **81**, 061201 (2010).
88. J. C. Pamies, A. Cacciuto and D. Frenkel, *J. Chem. Phys.* **131**, 044514 (2009).
89. B. K. Mandal and P. Mishra, *Mol. Phys.* **118**, e1706774 (2020).
90. W. L. Miller and A. Cacciuto, *Soft Matter* **7**, 7552 (2011).
91. M. Zu, J. Liu, H. Tong and N. Xu, *Phys. Rev. Lett.* **117**, 085702 (2016).
92. T. Terao, *J. Chem. Phys.* **139**, 134501 (2013).
93. Yu. D. Fomin, E. A. Gaiduk, E. N. Tsiok and V. N. Ryzhov, *Molecular Phys.* **116**, 3258 (2018).
94. E. N. Tsiok, Yu. D. Fomin, E. A. Gaiduk and V. N. Ryzhov, *Phys. Rev. E* **103**, 062612 (2021).
95. E. N. Tsiok, E. A. Gaiduk, Yu. D. Fomin and V. N. Ryzhov, *Soft Matter* **16**, 3962 (2020).
96. E. A. Gaiduk, Y. D. Fomin, E. N. Tsiok and V. N. Ryzhov, *Phys. Rev. E* **106**, 024602 (2022).
97. I. Roy, S. Dutta, A. N. R. Choudhury, S. Basistha, I. Maccari, S. Mandal, J. Jesudasan, V. Bagwe, C. Castellani, L. Benfatto and P. Raychaudhuri, *Phys. Rev. Lett.* **122**, 047001 (2019).
98. M. Franz and S. Teitel, *Phys. Rev. B* **51**, 6551 (1995).
99. В. Н. Рыжов, Е. Е. Тареева, *ЖЭТФ* **108**, 2044 (1995); V. N. Ryzhov and E. E. Tareyeva, *JETP* **81**, 1115 (1995).
100. S. C. Ganguli, H. Singh, I. Roy, V. Bagwe, D. Bala, A. Thamizhavel and P. Raychaudhuri, *Phys. Rev. B* **93**, 144503 (2016).
101. I. Guillamon, H. Suderow, A. Fernandez-Pacheco, J. Sese, R. Cordoba, J. M. De Teresa, M. R. Ibarra and S. Vieira, *Nature Phys.* **5**, 651 (2009).
102. M. Gabay and A. Kapitulnik, *Phys. Rev. Lett.* **71**, 2138 (1993).

103. M. A. Altvater, N. Tilak, S. Rao, G. Li, C.-J. Won, S.-W. Cheong and E. Y. Andrei, *Nano Lett.* **21**, 6132 (2021).
104. D. A. Garanin and E. M. Chudnovsky, *Phys. Rev. B* **107**, 014419 (2023).
105. P. Huang, T. Schonenberger, M. Cantoni, L. Heinen, A. Magrez, A. Rosch, F. Carbone and H. M. Ronnow, *Nature Nanotechnol.* **15**, 761 (2020).
106. A. R. C. McCray, Y. Li, R. Basnet, K. Pandey, J. Hu, J. Phelan, X. Ma, A. K. Petford-Long and C. Phatak, *Nano Lett.* **22**, 7804 (2022).
107. J. Zubeltzu, F. Corsetti, M. V. Fernandez-Serra and E. Artacho, *Phys. Rev. E* **93**, 062137 (2016).
108. V. Kapil, C. Schran, A. Zen, J. Chen, C. J. Pickard and A. Michaelides, *Nature* **609**, 512 (2022).
109. T. Mithun, S. C. Ganguli, P. Raychaudhuri and B. Dey, *Europhys. Lett.* **123**, 20004 (2018).
110. D. Frenkel and J. P. McTague, *Phys. Rev. Lett.* **42**, 1632 (1979).
111. S. Toxvaerd, *J. Chem. Phys.* **69**, 4750 (1978).
112. F. F. Abraham, *Phys. Rev. Lett.* **44**, 463 (1980).
113. J. M. Phillips, L. W. Bruch and R. D. Murphy, *J. Chem. Phys.* **75**, 5097 (1981).
114. A. F. Bakker, C. Bruin and H. J. Hilhorst, *Phys. Rev. Lett.* **52**, 449 (1984).
115. K. J. Strandburg, J. A. Zollweg and G. V. Chester, *Phys. Rev. B* **30**, 2755 (1984).
116. A. Hajibabaei and K. S. Kim, *Phys. Rev. E* **99**, 022145 (2019).
117. Y.-W. Li and M. P. Ciamarra, *Phys. Rev. E* **102**, 062101 (2020).
118. Y.-W. Li and M. P. Ciamarra, *Phys. Rev. Lett.* **124**, 218002 (2020).
119. H. Zhang, S. Peng, L. Mao, X. Zhou, J. Liang, C. Wan, J. Zheng and X. Ju, *Phys. Rev. E* **89**, 062410 (2014).
120. K. Wierschem and E. Manousakis, *Phys. Rev. B* **83**, 214108 (2011).
121. E. N. Tsiok, Y. D. Fomin, E. A. Gaiduk, E. E. Tareyeva, V. N. Ryzhov, P. A. Libet, N. A. Dmitryuk, N. P. Kryuchkov and S. O. Yurchenko, *J. Chem. Phys.* **156**, 114703 (2022).
122. A. Hajibabaei and K. S. Kim, *Phys. Rev. E* **99**, 022145 (2019).
123. S. S. Khali, D. Chakraborty and D. Chaudhuri, *Soft Matter* **17**, 3473 (2021).
124. А. З. Паташинский, В. Л. Покровский *Флуктуационная теория фазовых переходов*, Наука, Москва (1982); A. Z. Patashinskii, V. L. Pokrovskii *Fluctuation Theory of Phase Transitions* Pergamon Press, Oxford (1979).
125. A. P. Young, *J. Phys. C* **11**, L453 (1978).
126. J. M. Kosterlitz, *J. Phys. C* **7**, 1046 (1974).
127. T. Ohta, *Prog. Theor. Phys.* **60**, 968 (1978).
128. P. B. Wiegman, *J. Phys. C* **11**, 1583 (1978).
129. D. J. Amit, Y. Y. Goldschmidt and G. Grinstein, *J. Phys. A* **13**, 585 (1980).
130. P. M. Chaikin and T. C. Lubensky, *Principles of condensed matter physics*, Cambridge University Press (1995).
131. I. Herbut, *A modern approach to critical phenomena*, Cambridge University Press (2007).
132. D. R. Nelson and J. M. Kosterlitz, *Phys. Rev. Lett.* **39**, 1201 (1977).
133. V. Ambegaokar, B. I. Halperin, D. R. Nelson and E. D. Siggia, *Phys. Rev. Lett.* **40**, 576 (1978).
134. B. A. Huberman, R. J. Myerson and S. Doniach, *Phys. Rev. Lett.* **40**, 780 (1978).
135. D. J. Bishop and J. D. Reppy, *Phys. Rev. Lett.* **40**, 1727 (1978).
136. I. Rudnik, *Phys. Rev. Lett.* **40**, 1454 (1978).
137. J. G. Dash, *Phys. Rev. Lett.* **41**, 1178 (1978).
138. S. Tung, G. Lamporesi, D. Lobser, L. Xia and E. A. Cornell, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 230408 (2010).
139. C.-L. Huang, X. Zhang, N. Gemelke and C. Chin, *Nature* **470**, 236 (2011).
140. P. Clade, C. Ryu, A. Ramanathan, K. Helmerson and W. D. Phillips, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 170401 (2009).
141. S. P. Rath, T. Yefsah, K. J. Gunter, M. M. Cheneau, R. Desbuquois, M. Holzmann, W. Krauth and J. Dalibard, *Phys. Rev. A* **82**, 013609 (2010).
142. M. R. Beasley, J. E. Mooij and T. P. Orlando, *Phys. Rev. Lett.* **42**, 1165 (1979).
143. J. Pearl, *Appl. Phys. Lett.* **5**, 65 (1964).
144. D. Y. Irz, V. N. Ryzhov and E. E. Tareyeva, *Phys. Lett. A* **207**, 374 (1995).

145. V. N. Ryzhov and E. E. Tareyeva, *Phys. Rev. B* **48**, 12907 (1993).
146. V. N. Ryzhov and E. E. Tareyeva, *Phys. Rev. B* **49**, 6162 (1994).
147. D. Y. Irz, V. N. Ryzhov and E. E. Tareyeva, *Phys. Rev. B* **54**, 3051 (1996).
148. В. Н. РЫЖОВ, Е. Е. Тареева, *ТМФ* **96**, 425 (1993).
149. Д. Ю. Ирз, В. Н. РЫЖОВ, Е. Е. Тареева, *ТМФ* **104**, 337 (1995).
150. Д. Ю. Ирз, В. Н. РЫЖОВ, Е. Е. Тареева, *ТМФ* **107**, 100 (1996).
151. J. M. Hsu and A. Kapitulnik, *Phys. Rev. B* **45**, 4819 (1992).
152. I. Guillaumon, R. Cordoba, J. Sese et al. *Nature Phys.* **10**, 851 (2014).
153. A. F. Hebard and A. T. Fiory, *Phys. Rev. Lett.* **50**, 1603 (1983).
154. P. G. Baity, Xiaoyan Shi, Zhenzhong Shi, L. Benfatto and Dragana Popovic, *Phys. Rev. B* **93**, 024519 (2016).
155. L. Benfatto, C. Castellani and T. Giamarchi, *Phys. Rev. B* **77**, 100506(R) (2008).
156. Yen-Hsiang Lin, J. Nelson and A. M. Goldman, *Phys. Rev. Lett.* **109**, 017002 (2012).
157. F. Leoni and G. Franzese, *J. Chem. Phys.* **141**, 174501 (2014).
158. S. A. Rice, *Chem. Phys. Lett.* **479**, 1 (2009).
159. Z. Krebs, A. B. Roitman, L. M. Nowack, C. Liepold, B. Lin and S. A. Rice, *J. Chem. Phys.* **149**, 034503 (2018).
160. E. N. Tsiok, Yu. D. Fomin and V. N. Ryzhov, *Physica A* **550**, 124521 (2020).
161. L. A. Padilla and A. Ramirez-Hernandez, *J. Phys.: Condensed Matter* **32**, 275103 (2020).
162. D. S. Cardoso, V. F. Hernandez, P. T. O. Nogueira and J. R. Bordin, *Physica A* **566**, 125628 (2021).
163. F. Martelli, H.-Y. Ko, C. Calero and G. Franzese, *Front. Phys.* **13**, 136801 (2018).
164. A. Jain, J. R. Errington and Th. M. Truskett, *Phys. Rev. X* **4**, 031049 (2014).
165. E. Marcotte, F. H. Stillinger and S. Torquato, *J. Chem. Phys.* **134**, 164105 (2011).
166. W. D. Pineros, M. Baldea and T. M. Truskett, *J. Chem. Phys.* **145**, 054901 (2016).
167. M. Engel and H.-R. Trebin, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 225505 (2007).
168. T. Dotera, T. Oshiro and P. Ziherl, *Nature* **506**, 208 (2014).
169. H. Pattabhiraman and M. Dijkstra, *J. Chem. Phys.* **146**, 114901 (2017).
170. S. C. Kapfer and W. Krauth, *Phys. Rev. Lett.* **114**, 035702 (2015).
171. S. T. Chui, *Phys. Rev. B* **28**, 178 (1983).
172. K. J. Strandburg, *Phys. Rev. B* **34**, 3536 (1986).
173. В. Н. РЫЖОВ, *ЖЭТФ* **100**, 1627 (1991); V. N. Ryzhov, *Sov. Phys. JETP* **73**, 899 (1991).
174. В. Н. РЫЖОВ, *ТМФ* **88**, 449 (1991); V. N. Ryzhov, *Theor. Math. Phys.* **88**, 990 (1991).
175. V. N. Ryzhov and E. E. Tareyeva, *Phys. Lett. A* **75**, 88 (1979).
176. В. Н. РЫЖОВ, Е. Е. Тареева, *ТМФ* **48**, 416 (1981); V. N. Ryzhov and E. E. Tareyeva, *Theor. Math. Phys.* **48**, 835 (1981).
177. V. N. Ryzhov and E. E. Tareyeva, *Phys. Rev. B* **51**, 8789 (1995).
178. V. N. Ryzhov and E. E. Tareyeva, *Physica A* **314**, 396 (2002).
179. E. S. Chumakov, Y. D. Fomin, E. L. Shangina, E. E. Tareyeva, E. N. Tsiok and V. N. Ryzhov, *Physica A* **432**, 279 (2015).
180. В. Н. РЫЖОВ, Е. Е. Тареева, *ТМФ* **200**, 147 (2019); V. N. Ryzhov and E. E. Tareyeva, *Theor. Math. Phys.* **200**, 1053 (2019).
181. В. Н. РЫЖОВ, *ТМФ* **55**, 128 (1983); V. N. Ryzhov, *Theor. Math. Phys.* **55**, 399 (1983).
182. Л. М. Помирчи, В. Н. РЫЖОВ, Е. Е. Тареева, *ТМФ* **130**, 119 (2002); L. M. Pomirchi, V. N. Ryzhov and E. E. Tareyeva, *Theor. Math. Phys.* **130**, 101 (2002).
183. V. N. Ryzhov and E. E. Tareyeva, *Physica A* **314**, 396 (2002).
184. E. P. Bernard, W. Krauth and D. B. Wilson, *Phys. Rev. E* **80**, 056704 (2009).
185. W. Qi, A. P. Gantapara and M. Dijkstra, *Soft Matter* **10**, 5449 (2014).
186. W. K. Qi, S. M. Qin, X. Y. Zhao and Chen Yong, *J. Phys.: Condens. Matter* **20**, 245102 (2008).
187. W. Qi and M. Dijkstra, *Soft Matter* **11**, 2852 (2015).

188. E. N. Tsiok, Y. D. Fomin and V. N. Ryzhov, *Physica A* **490**, 819 (2018).
189. E. A. Gaiduk, Y. D. Fomin, E. N. Tsiok and V. N. Ryzhov, *Molecular Phys.* **117**, 2910 (2019).
190. J. E. Mayer and W. W. Wood, *J. Chem. Phys.* **42**, 4268 (1965).
191. D. R. Nelson, *Phys. Rev. B* **27**, 2902 (1983).
192. S. Sachdev and D. R. Nelson, *J. Phys. C* **17**, 5473 (1984).
193. А. Б. Дзюбенко, Ю. Е. Лозовик, *ЖЭТФ* **102**, 284 (1992); A. B. Dzyubenko and Y. E. Lozovik, *Sov. Phys. JETP* **75**, 149 (1992).
194. M. Cha and H. A. Fertig, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 4867 (1995).
195. S. Herrera-Velarde and H. H. von Grunberg, *Soft Matter* **5**, 391 (2009).
196. <http://lammps.sandia.gov/>; S. Plimpton, *J. Comp. Phys.* **117**, 1 (1995).
197. J. Q. Broughton, G. H. Gilmer and J. D. Weeks, *Phys. Rev. B* **25**, 4651 (1982).
198. S. Sengupta, P. Nielaba and K. Binder, *Phys. Rev. E* **61**, 6294 (2000).
199. S. Sengupta, P. Nielaba, M. Rao and K. Binder, *Phys. Rev. E* **61**, 1072 (2000).
200. D. S. Fisher, B. I. Halperin and R. Morf, *Phys. Rev. B: Condens. Matter Mater. Phys.* **20**, 4692 (1979).
201. K. Binder, *Z. Physik B* **43**, 119 (1981).
202. K. Binder, *Phys. Rev. Lett.* **47**, 693 (1981).
203. M. S. S. Challa, D. P. Landau and K. Binder, *Phys. Rev. B* **34**, 1841 (1986).
204. K. Binder, *Ferroelectrics* **73**, 43 (1987).
205. M. S. S. Challa and D. P. Landau, *Phys. Rev. B* **33**, 437 (1986).
206. E. Rastelli, S. Regina and A. Tassi, *J. Magn. Magn. Mater.* **272–276**, 997 (2004).
207. A. K. Murtazaev and A. B. Babaev, *J. Magn. Magn. Mater.* **324**, 3870 (2012).
208. А. Б. Бабаев, М. А. Магомедов, А. К. Муртазаев, Ф. А. Кассан-Оглы, А. И. Прошкин, *ЖЭТФ* **149**, 357 (2016).
209. A. K. Murtazaev and A. B. Babaev, *Mater. Lett.* **258**, 126771 (2020).
210. K. S. Murtazaev, A. K. Murtazaev, M. K. Ramazanov, M. A. Magomedov and A. A. Murtazaeva, *Low Temp. Phys.* **47**, 515 (2021).
211. A. K. Murtazaev, D. R. Kurbanova and M. K. Ramazanov, *Physica A* **545**, 123548 (2020).
212. А. К. Муртазаев, А. Б. Бабаев, *ЖЭТФ* **159**, 1041 (2021).
213. K. Vollmayr, J. D. Reger, M. Scheucher and K. Binder, *Z. Phys. B* **91**, 113 (1993).
214. K. Eichhorn and K. Binder, *Journal of Physics: Condensed Matter* **8**, 5209 (1996).
215. C. Borgs and R. Kotecky, *J. Stat. Phys.* **61**, 79 (1990).
216. C. Borgs and R. Kotecky, *Phys. Rev. Lett.* **68**, 1738 (1992).
217. Yu. E. Lozovik and V. M. Farztdinov, *Sol. State Commun.* **54**, 725 (1985).
218. Y. E. Lozovik, V. M. Farztdinov, B. Abdullaev and S. A. Kuchero, *Phys. Lett. A* **112**, 61 (1985).
219. V. Bedanov, G. Gadiyak and Y. E. Lozovik, *Phys. Lett. A* **109**, 289 (1985).
220. F. Lindemann, *Z. Phys.* **11**, 609 (1910).
221. P. M. Platzman and H. Fukuyama, *Phys. Rev. B* **10**, 3150 (1974).