

ПЛАВЛЕНИЕ ДВУМЕРНОЙ СИСТЕМЫ ЛЕННАРДА-ДЖОНСА: СВОЙСТВА СРЕДНЕГО ПОРЯДКА

Б. А. Клумов*

Объединенный институт высоких температур Российской академии наук
125412, Москва, Россия

Поступила в редакцию 13 января 2026 г.,
после переработки 25 февраля 2026 г.
Принята к публикации 20 марта 2026 г.

Методом классической молекулярной динамики исследуется двумерная система Леннарда-Джонса в области перехода кристалл–жидкость. В широком диапазоне температур рассматриваются свойства среднего порядка, определяемые из парной корреляционной функции. Показано, что поведение среднего порядка говорит в пользу мягкого (crossover-like) перехода кристалл–жидкость в двумерной системе Леннарда-Джонса. Об этом же говорит и зависимость концентрации дефектов от приведенной температуры T^* ; указанная зависимость, как показано, является квазиуниверсальной и практически не зависит от плотности системы ρ^* (в рассмотренном диапазоне значений ρ^*). Проводится сравнение характеристик среднего порядка при плавлении двумерных систем Леннарда-Джонса и Юкавы.

Ключевые слова: двумерное плавление, средний порядок, топологические дефекты, двумерная жидкость

DOI: 10.31857/S0044451026050077

Поведение двумерной материи вблизи области перехода кристалл–жидкость — одно из важных направлений физики конденсированного состояния. Двумерные системы интенсивно исследуются, начиная с классических работ Березинского, Костерлица, Таулесса и др. [1–7], в которых было обнаружено, что в двумерном веществе между кристаллом и жидкостью может существовать промежуточная (так называемая гексатическая) фаза, в которой трансляционный порядок разрушен, но существует ориентационный порядок, который убывает с увеличением расстояния алгебраически, что делает физику плавления таких систем гораздо более сложной, чем плавление трехмерных систем. Предложенная в классических работах теория двумерного плавления (так называемая теория ВКТНУ (Berezinsky, Kosterlitz, Thouless, Halperin, Nelson, Young)) является на сегодняшний день наиболее разработанной и широко используется в исследовании перехода кристалл–жидкость у самых разных систем (например, [8, 9]).

Помимо теоретических и численных исследований, за последние десятилетия сильно вырос интерес к экспериментальному изучению двумерных и квазидвумерных систем, среди которых необходимо выделить коллоидную и пылевую плазму (например, [10]). В указанных системах парное взаимодействие между частицами часто описывается с помощью потенциала Юкавы $U(r) = (Q/r) \exp(-r/\lambda)$, где Q — заряд частицы, λ — длина экранирования; переход кристалл–жидкость в них подробно изучен как экспериментально [10, 11], так и численно [12–17]. Отдельно отметим интерес к волнам кристаллизации в комплексной плазме [18, 19].

Система Леннарда-Джонса (LJ), как и система Юкавы, относится к широкому классу систем с плотной упаковкой (т. е. систем, которые в твердотельном состоянии имеют гексагональную кристаллическую решетку). Сравнительный анализ таких систем представляется важным для выявления универсальных характеристик двумерных систем с плотной упаковкой [20].

Целью настоящей работы является изучение свойств среднего порядка (medium range order, MRO) в системе LJ вблизи области ее плавления и сравнение с MRO для системы Юкавы. Отме-

* E-mail: klumov@ihed.ras.ru

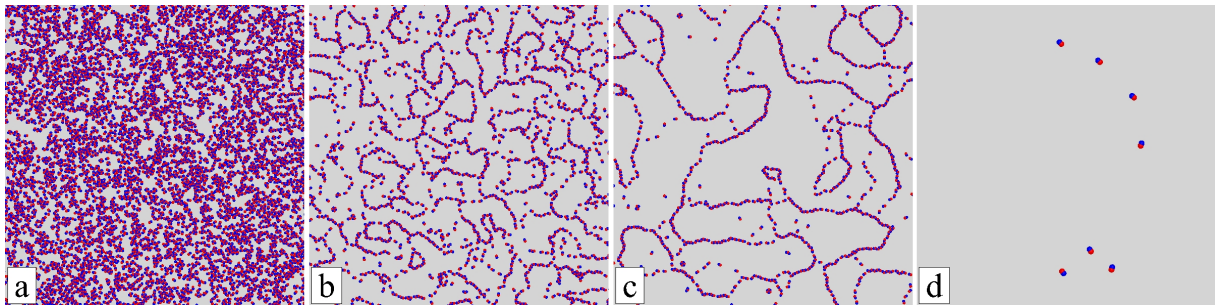


Рис. 1. Различные стадии формирования начальной конфигурации двумерной системы LJ. Представлены только дефекты и кластеры из дефектов, цвет которых меняется в зависимости от числа ближайших соседей (синий для пяти и красный для семи)

тим, что двумерная система LJ изучалась в большом числе публикаций (например, [21,22]), но основное внимание уделялось типу перехода между различными фазами. Ряд работ посвящен универсальным свойствам двумерных систем [14, 23], а также простым параметрам, характеризующим их плавление [24]. Свойства среднего порядка, насколько нам известно, изучаются для такой системы впервые. Под средним порядком здесь понимаются структурные особенности второй и третьей координационных сфер. В двумерном кристалле с плотной упаковкой в первой, второй и третьей координационных сферах находится по шесть атомов, расположенных от центрального атома на относительных расстояниях соответственно 1, $\sqrt{3}$ и 2. При переходе кристалл-жидкость вторая и третья координационные сферы объединяются и характер такого объединения может использоваться как структурный параметр, характеризующий указанный переход.

Здесь основным инструментом получения 2D-конфигураций частиц является метод классической молекулярной динамики, реализованный в пакете LAMMPS для канонического ансамбля (NVT) с термостатом Нозе–Хувера (Nose–Hoover) и периодическими граничными условиями [25]. Типичное число микрочастиц в исследуемой двумерной системе порядка $N \sim 10^5$. Парное взаимодействие частиц описывается потенциалом $U_{LJ}(r)$ Леннарда-Джонса, который в безразмерном виде записывается как

$$U_{LJ}(r) = 4 \left[\left(\frac{1}{r} \right)^{12} - \left(\frac{1}{r} \right)^6 \right].$$

Численно переход кристалл–жидкость был реализован следующим образом. Сначала двумерная система LJ медленно охлаждалась из жидкого состояния (расплава) до кристаллического с ничтожным

содержанием дефектов (которые, как правило, являлись дислокациями, т. е. парами, состоящими из дефектов с пятью и семью ближайшими соседями).

На рис. 1 представлены различные стадии формирования начальной конфигурации атомов при таком «отжиге». Здесь показаны для простоты только дефекты и кластеры из дефектов. Цвет частиц меняется в зависимости от числа ближайших соседей (nearest neighbors, NN) для каждой заданной частицы (синий цвет используется для частиц с пятью NN, а красный — для частиц с семью NN). Отметим, что доля частиц с $NN < 5$ и $NN > 7$ очень мала и такие частицы практически не оказывают никакого влияния на кинетику дефектов в области плавления двумерной системы. Первоначально двумерная жидкость с концентрацией дефектов $n_d \approx 0.2$ (рис. 1 a) медленно охлаждается до температуры приблизительно $0.1T_m^*$, где T_m^* — температура двумерного расплава. Затем происходит быстрая рекомбинация дефектов в 2D-объеме и образуются линейные (string-like) дефектные кластеры, объединенные в петлевые структуры (рис. 1 b). На этой стадии двумерная система LJ является неравновесным кристаллом с $n_d \sim 0.1$. На следующей стадии (рис. 1 c) петлевые дефектные структуры коллапсируют из-за взаимного притяжения дислокаций и образуется кристалл с ничтожным содержанием дефектов, $n_d \sim 10^{-5}$ (рис. 1 d), который используется в дальнейшем в качестве начальной конфигурации системы LJ.

Потом система медленно нагревалась до нескольких температур плавления T_m^* (за время $(10^7 \div 10^8)\delta t^* \sim (10^4 \div 10^5)$, где δt^* — расчетный шаг по времени в единицах LJ). Для каждой заданной температуры T^* находились квазиравновесные конфигурации частиц, которые использовались в дальнейшем для нахождения различных свойств

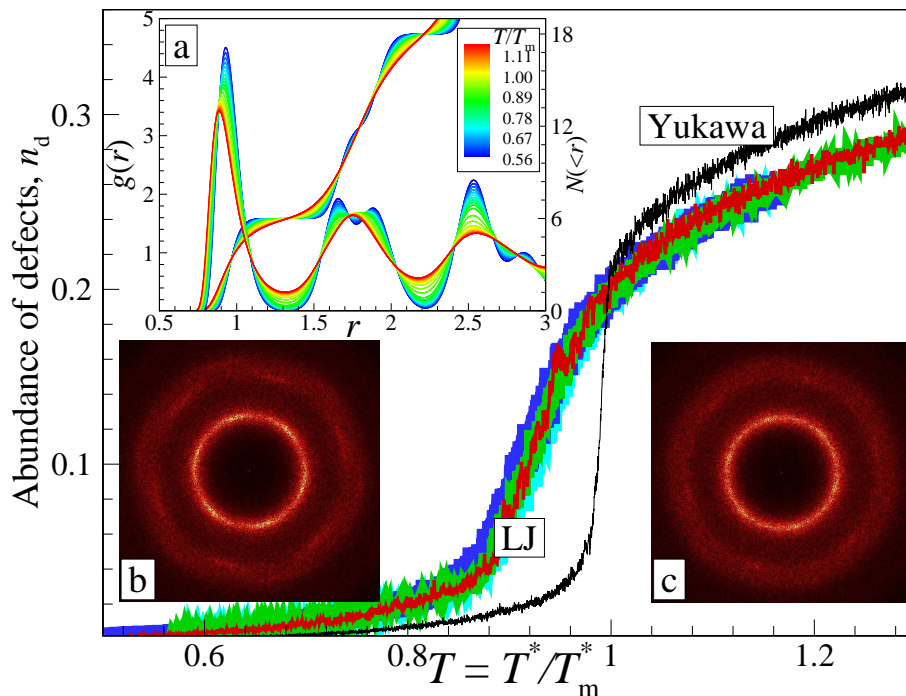


Рис. 2. Двумерная система Леннарда-Джонса вблизи перехода кристалл–жидкость. Концентрации дефектов n_d в зависимости от приведенной температуры T для ряда значений плотности: $\rho^* = 1$ (синяя кривая), 1.5 (бирюзовая), 2 (зеленая), 2.5 (красная). Черная кривая — результаты для системы Юкавы. На вставке *a* показаны парные корреляционные функции $g(r)$ при разных значениях T для $\rho^* = 1$, а также кумулятивные функции $N(<r)$, ассоциированные с $g(r)$. На вставках *b* и *c* показаны двумерные статические структурные факторы системы LJ при $T = 0.98$ (*b*), 1 (*c*)

изучаемой системы. Расчеты проводились для разных значений безразмерной плотности ρ^* системы LJ в интервале $1 \div 2.5$, что охватывает важный участок фазовой диаграммы, где и кристалл, и жидкость являются системами практически с плотной упаковкой (а газовая фаза отсутствует), т.е. среднее число ближайших соседей у каждого атома близко к шести [26].

При нулевой температуре двумерная система LJ при указанной плотности ρ^* является кристаллом с треугольной (гексагональной решеткой) и шестью ближайшими соседями у каждого атома, которые расположены в вершинах правильного шестиугольника. При конечной температуре в такой системе появляются топологические дефекты, в которых число ближайших соседей отличается от шести (для двумерных систем с плотной упаковкой они легко определяются методом Вороного [27]); относительная концентрация дефектов $n_d = N_d/N$ (где N_d и N — число дефектных частиц и полное число частиц соответственно) является очень важной характеристикой двумерной системы, которая, в частности, определяет ее фазовое состояние [20, 28, 29].

На рис. 2 показаны некоторые структурные характеристики двумерной системы LJ вблизи перехода кристалл–жидкость, в частности, представлены концентрации дефектов n_d в зависимости от приведенной температуры T , которая определяется как $T = T^*/T_m^*$, где T_m^* — температура плавления. Здесь температура плавления системы T_m^* определяется концентрацией дефектов: при $T = T_m^*$ плотность дефектов $n_d \approx 0.2$. К примеру, значения T_m^* для величин плотности $\rho^* = 1, 1.25, 1.5, 2.5$ равны соответственно 3, 13.75, 44, 1025 (в единицах LJ), что хорошо согласуется с известными кривыми плавления двумерной системы LJ (например, [26]).

Зависимости $n_d(T)$ приведены для ряда значений плотности системы LJ. Цвет данных кривых зависит от плотности и меняется от синего к красному при ее увеличении. Все указанные кривые практически совпадают в рассмотренном диапазоне приведенных температур $0.5 \div 1.3$, что означает универсальность зависимости $n_d(T)$, т.е. она не зависит от значения ρ^* (по крайней мере, в диапазоне значений плотности $1 \div 2.5$). Черная кривая показывает результаты для системы Юкавы, которые также яв-

ляются универсальными и не зависят от параметра экранировки κ . Это было показано нами в работах [14, 15, 20] для широкого диапазона значений $\kappa \simeq 0.5 \div 8$. Здесь представлены данные именно для этого диапазона значений параметра экранировки. Отметим, что есть указания на то, что при увеличении жесткости взаимодействия (параметра κ) и в пределах твердых дисков меняется сам тип перехода кристалл–жидкость. Эта тема требует отдельного исследования.

Плавление системы Юкавы сопровождается гораздо более резким ростом n_d по сравнению с системой LJ, в которой наблюдается мягкий (crossover-like) рост n_d с ростом приведенной температуры. Кроме того, заметно различие концентрации дефектов в жидкой фазе для этих двух систем: у системы Юкавы зависимость $n_d(T)$ проходит заметно выше, чем у системы LJ; различаются также и концентрации дефектов в расплаве указанных систем. Это означает, что свойства плотных двумерных расплавов и жидкости зависят от типа перехода кристалл–жидкость, что представляется чрезвычайно важным результатом, поскольку говорит в пользу неуниверсальности плавления двумерных систем с плотной упаковкой.

На рис. 2 а показаны парные корреляционные функции (ПКФ) $g(r)$ при разных значениях T для $\rho^* = 1$. Также показаны кумулятивные функции $N(<r)$, ассоциированные с $g(r)$ (функция $N(<r) \equiv \int_0^r 2\pi r g(r) dr$ определяет среднее число частиц в диске радиусом r). Цвет кривых зависит от температуры системы и меняется от синего к красному при ее увеличении. Поведение второго пика $g(r)$, расположенного в диапазоне расстояний r около $1.2 \div 2.2$, который характеризует средний порядок и описывает свойства второй и третьей координационных сфер, будет подробно рассмотрено ниже. На рис. 2 b, c показаны двумерные статические структурные факторы системы LJ для двух значений температуры: $T = 0.98$ (b), $T = 1$ (c). Хорошо видно, что в случае (b) в системе сохраняется ориентационный порядок, а в случае (c) система LJ является изотропной жидкостью.

Как отмечено выше, свойства среднего порядка в двумерных системах с плотной упаковкой можно характеризовать структурой второй и третьей координационной сфер. На рис. 3 показаны соответствующие участки парной корреляционной функции $g(r)$ и поведение вблизи перехода кристалл–жидкость. Представлены данные для двумерных систем Юкавы и Леннарда-Джонса при разных значениях приведенной температуры T . В обоих слу-

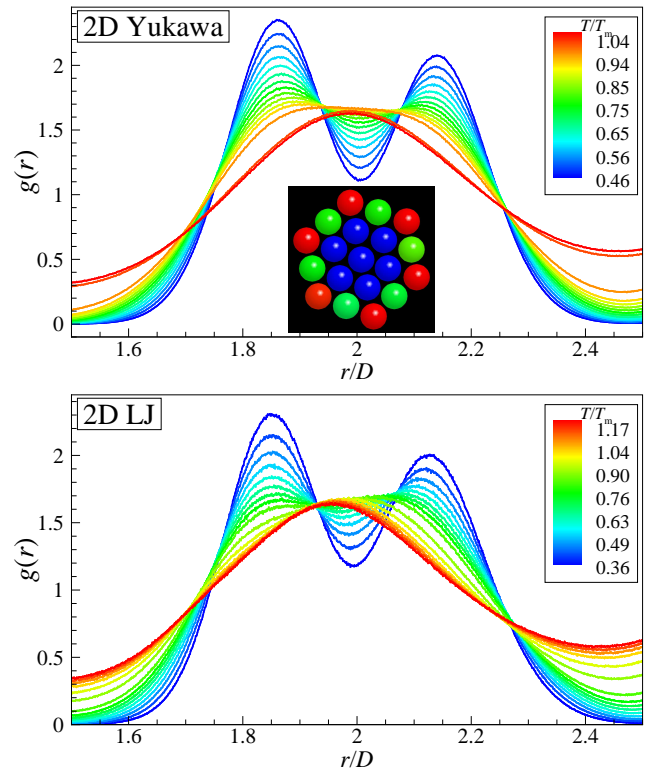


Рис. 3. (Color online). Средний порядок в двумерных системах Юкавы (верхняя панель) и Леннарда-Джонса (нижняя панель). Представлены участки парной корреляционной функции $g(r)$, характеризующие структуру второй и третьей координационных сфер при разных значениях приведенной температуры T , с небольшим постоянным шагом dT между соседними кривыми. Цвет кривых определяется величиной T и меняется от синего к красному при ее увеличении. На вставке показано расположение первых трех координационных сфер в кристаллической фазе: первая выделена синим цветом, вторая и третья — зеленым и красным соответственно

чаях расстояние между соседними кривыми соответствует небольшому изменению dT температуры ($dT \ll 1$). На вставке показаны первые три координационные сферы (КС) в кристалле с плотной упаковкой. Синим цветом показаны шесть атомов (вместе с центральным атомом) первой КС, зеленым — шесть атомов второй КС, красным — шесть атомов третьей КС, так что MRO определяется положением 12 атомов второй и третьей КС. Между атомами второй и третьей КС небольшое расстояние $(2 - \sqrt{3})D$, где D — расстояние между центральным атомом и атомами из первой КС.

Поэтому при нагреве такой системы формируются два максимума в ПКФ, которые при плавлении объединяются в один. Тонкие детали такого объ-

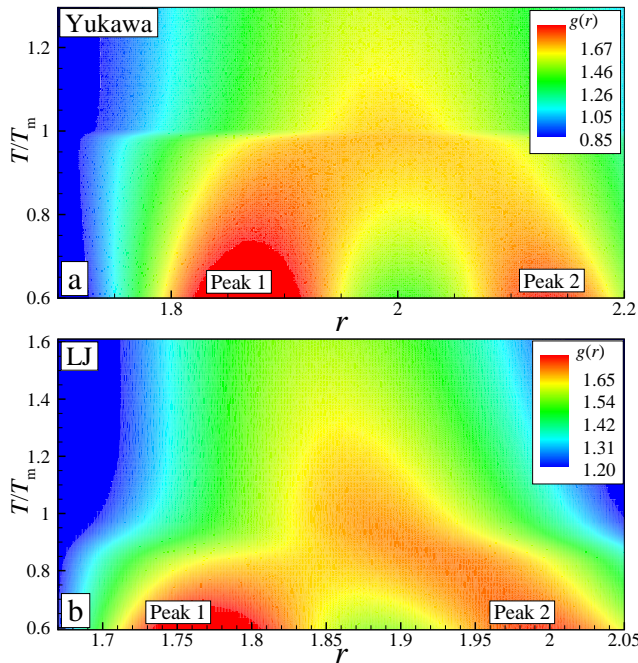


Рис. 4. Средний порядок в двумерных системах Юкавы (верхняя панель) и Леннарда-Джонса (нижняя панель). Представлены зависимости $g(r)$ от приведенной температуры T вблизи перехода кристалл–жидкость. Максимумы парной корреляционной функции, соответствующие структурным особенностям второй и третьей координационных сфер, обозначены как Peak 1 и Peak 2

единения показаны на рис. 3 для обеих рассматриваемых систем. Хорошо видны их качественные различия: у системы Юкавы слияние двух пиков ПКФ и формирование одиночного пика (при $r_p \approx 2$, $g(r_p) \approx 1.65$) происходит в очень узком диапазоне приведенных температур $T \approx 1$. Предшествует этому образованию плато в ПКФ (при $r \approx 1.9 \div 2.1$). В расплаве и в жидкой фазе вблизи области плавления величина пика медленно снижается с ростом температуры. У системы, если смотреть на характеристики MRO, переход кристалл–жидкость происходит непрерывно (crossover-like) и без резких изменений. При этом у расплава LJ величина второго пика ПКФ $g(r_p)$ близка к его же значению у системы Юкавы, $g(r_p) \approx 1.65$. Это, в частности, означает, что величину $g(r_p)$ можно использовать как один из параметров, характеризующих плавление двумерных систем с плотной упаковкой.

Еще более наглядно эволюция среднего порядка с ростом температуры показана на рис. 4, на котором представлены функции ПКФ в области MRO в зависимости от приведенной температуры. Хорошо видны детали объединения двум максимумов ПКФ для обеих рассматриваемых систем. Также хорошо

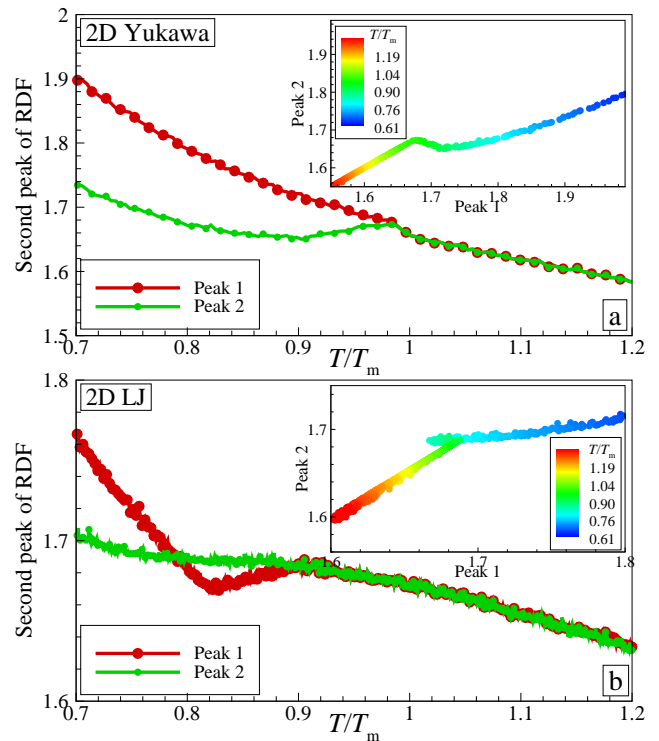


Рис. 5. Характеристики MRO в двумерных системах Юкавы (а) и Леннарда-Джонса (b) вблизи перехода кристалл–жидкость. Представлены величины обоих пиков (максимумов) парной корреляционной функции $g(r)$ (отвечающих второй и третьей координационным сферам) в зависимости от приведенной температуры T . Вставки на панелях а и b — фазовые портреты систем Юкавы и LJ в пространстве (Peak 1, Peak 2) при их плавлении. Цвет траектории определяется температурой и меняется от синего к красному при ее увеличении

видно резкое изменение MRO в области перехода у системы Юкавы и кроссовер — для системы LJ. Таким образом, структурные свойства среднего порядка у этих двух систем качественно различаются. Количественное описание характеристик среднего порядка вблизи области плавления для указанных систем показано на рис. 5, на котором представлены значения пиков ПКФ в области MRO (т. е. связанных с положением второй и третьей координационных сфер) в зависимости от температуры T для двумерных систем Юкавы и Леннарда-Джонса. В кристаллической фазе при низких температурах в обоих случаях у ПКФ наблюдаются два максимума (Peak 1 и Peak 2) в области MRO. При повышении температуры в системе Юкавы происходит монотонное снижение значений обоих пиков, их объединение и формирование одиночного пика в области жидкой фазы. В случае же системы LJ перед объединением пиков (которое происходит при $T \approx 0.9$, т. е. до

плавления системы) величина второго пика (второй координационной сферы) начинает превышать значение первого пика (второй координационной сферы) и растет при нагреве, что означает некоторое упорядочение третьей координационной сферы перед плавлением. Возможно, это связано с непрерывным переходом системы из кристалла в гексатическую фазу, это требует отдельного исследования. На вставках рис. 5 *a*, *b* представлены фазовые портреты систем Юкавы и LJ в пространстве (Peak 1, Peak 2) при их плавлении. Также хорошо видны качественные различия поведения этих систем в области перехода, что наиболее вероятно означает, что в рассмотренных системах реализуются разные типы перехода кристалл–жидкость.

В настоящей работе исследовались структурные свойства среднего порядка (MRO) в двумерной системе Леннарда-Джонса вблизи перехода кристалл–жидкость и проведено сравнение с MRO двумерной системы Юкавы. Детально исследовано поведение двух пиков, характеризующих структуру второй и третьей координационных сфер, и показано, что в двумерной системе с плотной упаковкой плавление сопровождается объединением двух указанных пиков, а тонкие детали такого объединения могут использоваться как параметры, характеризующие переход кристалл–жидкость в моделировании и интерпретации экспериментальных данных. При этом свойства MRO у систем LJ и Юкавы качественно различаются, что, видимо, свидетельствует о разных типах перехода кристалл–жидкость в них. Структурные особенности плавления 2D-системы LJ говорят в пользу двух непрерывных переходов (кристалл–гексатическая фаза и гексатическая фаза–жидкость), т. е. переход кристалл–жидкость в системе LJ реализуется, по-видимому, по сценарию VKTHNY. В системе же Юкавы, скорее всего, как минимум один из двух переходов является переходом первого рода. Дополнительно сделан важный вывод о неуниверсальном характере плавления у двумерных систем с плотной упаковкой (при этом структурные свойства 2D-системы LJ универсальны и не зависят от величины ρ^* , а только от значения приведенной температуры T): свойства и расплава, и двумерной жидкости зависят от типа перехода кристалл–жидкость.

Финансирование. Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (соглашение № 075-00270-24-00).

Конфликт интересов. Автор заявляет об отсутствии конфликта интересов.

ЛИТЕРАТУРА

1. V. L. Berezinskii, Sov. Phys. JETP **32**, 493 (1971) [В. Л. Березинский, ЖЭТФ **59**, 907 (1971)].
2. V. L. Berezinskii, Sov. Phys. JETP **34**, 610 (1972) [В. Л. Березинский, ЖЭТФ **61**, 1144 (1972)].
3. J. M. Kosterlitz and D. J. Thouless, J. Phys. C: Solid State Phys. **6**, 1181 (1973).
4. B. I. Halperin and D. R. Nelson, Phys. Rev. Lett. **41**, 121 (1978).
5. D. R. Nelson and B. I. Halperin, Phys. Rev. B **19**, 2457 (1979).
6. A. P. Young, Phys. Rev. B **19**, 1855 (1979).
7. S. T. Chui, Phys. Rev. B **28**, 178 (1983).
8. V. N. Ryzhov, E. E. Tareyeva, Y. D. Fomin, and E. N. Tsiok, Phys. Usp. **60**, 857 (2017) [В. Н. Рыжов, Е. Е. Тареева, Ю. Д. Фомин, Е. Н. Циок, УФН **187**, 921 (2017)].
9. V. N. Ryzhov, E. A. Gaiduk, E. E. Tareeva, Yu. D. Fomin, and E. N. Tsiok, JETP **137**, 125 (2023) [В. Н. Рыжов, Е. А. Гайдук, Е. Е. Тареева, Ю. Д. Фомин, Е. Н. Циок, ЖЭТФ **164**, 143 (2023)].
10. V. Fortov and G. Morfill, *Complex and Dusty Plasmas: From Laboratory to Space*, CRC Press, Boca Raton, FL (2009).
11. C. N. Likos, Phys. Rep. **348**, 267 (2001).
12. C. H. Mak, Phys. Rev. E **73**, 065104 (2006).
13. W. Qi, A. P. Gantapara, and M. Dijkstra, Soft Matter **10**, 5449 (2014).
14. B. A. Klumov, JETP Lett. **115**, 108 (2022) [Б. А. Клумов, Письма в ЖЭТФ **115**, 117 (2022)].
15. B. A. Klumov, JETP Lett. **116**, 703 (2022) [Б. А. Клумов, Письма в ЖЭТФ **116**, 681 (2022)].
16. M. Y. Pustyl'nik, B. Klumov, M. Rubin-Zuzic et al., Phys. Rev. Res. **2**, 033314 (2020).
17. N. Yu, D. Huang, and Y. Feng, Phys. Rev. E **109**, 065212 (2024).
18. B. A. Klumov, M. Rubin-Zuzic, and G. E. Morfill, JETP Lett. **84**, 542 (2007) [Б. А. Клумов, М. Рубин-Зузич, Г. Е. Морфилл, Письма в ЖЭТФ **84**, 636 (2006)].

19. B. A. Klumov and G. E. Morfill, JETP **107**, 908 (2008) [Б. А. Клумов, Г. Е. Морфилл, ЖЭТФ **134**, 1059 (2008)].
20. B. A. Klumov, Phys. Usp. **66**, 288 (2023) [Б. А. Клумов, УФН **193**, 305 (2023)].
21. A. Hajibabaei and K. S. Kim, Phys. Rev. E **99**, 022145 (2019).
22. Y. W. Li and M. P. Ciamarra, Phys. Rev. E **102**, 062101 (2020).
23. N. Yu, D. Huang, S. Lu, S. Khrapak, and Y. Feng, Phys. Rev. E **109**, 035202 (2024).
24. B. A. Klumov and S. A. Khrapak, Results Phys. **17**, 103020 (2020).
25. S. Plimpton, J. Comput. Phys. **117**, 1 (1995).
26. A. Z. Patashinski, R. Orlik, A. C. Mitus et al., J. Phys. Chem. C **114**, 20749 (2010).
27. G. Voronoi, J. Reine Angew. Math. **134**, 198 (1908).
28. B. A. Klumov, High Temp. (2025) [Б. А. Клумов, ТВТ **6**, 706 (2025)].
29. B. A. Klumov, Phys. Usp. **53**, 1053 (2010) [Б. А. Клумов, УФН **180**, 1095 (2010)].

Melting of a Two-Dimensional Lennard-Jones System: Medium Range Order Properties

*B. A. Klumov**

Joint Institute for High Temperatures of the Russian Academy of Sciences
125412, Москва, Россия

*E-mail: klumov@ihed.ras.ru

Received January 13, 2026

Revised February 25, 2026

Accepted March 20, 2026

Abstract

Two-dimensional Lennard-Jones system in the crystal–liquid transition region is studied by the method of classical molecular dynamics. Medium range order (MRO) properties determined from a pair correlation function are considered in a wide temperature range. It is shown that the behavior of MRO says in favor of a continuous crystal–liquid transition in the two-dimensional Lennard-Jones system. This is also can be found from the dependence of the defect concentration on the reduced temperature T^* ; this dependence is shown to be quasi-universal and practically independent of the density ρ^* of the system (in a wide range of 2D-system density ρ^*). Finally, we compare the MRO characteristics of the two-dimensional Lennard-Jones and Yukawa systems at melting.

Keywords: 2D-melting, medium range order, topological defects, 2D-liquid

Funding. This work was supported by the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (state assignment No. 075-00270-24-00).

Conflict of interest. The author of this work declares that he has no conflict of interest.