# ПРОЯВЛЕНИЕ ГЕКСАТИЧЕСКОЙ ФАЗЫ В ОГРАНИЧЕННЫХ ДВУМЕРНЫХ СИСТЕМАХ С ЦИРКУЛЯРНОЙ СИММЕТРИЕЙ

Э.Г. Никонов*, Р.Г. Назмитдинов, П.И. Глуховцев
*e.nikonov@jinr.ru

*52-я Международная Тулиновская конференция по Физике Взаимодействия Заряженных Частиц с Кристаллами*
*Москва, МГУ им М.В. Ломоносова, 30 мая – 1 июня 2023*

Квазидвумерные системы играют важную роль при создании различных устройств для нужд наноэлектроники. Очевидно, что функциональная эффективность таких систем зависит от их структурных свойств. Одним из центральных вопросов в таких системах является анализ условий зарождения гексатической фазы, которая сопровождается появлением дефектов в вигнеровской кристаллической фазе при некоторой температуре. Для современных наносистем возникает как практический, так и фундаментальный вопрос о критическом числе электронов, при котором начнет происходить нарушение симметрии кристаллической решетки в рассматриваемой системе и, как следствие, зарождение дефектов. В работе исследованы зависимости ориентационного параметра порядка и корреляционной функции, характеризующие топологические фазовые переходы, как функции числа частиц при нулевой температуре. Результаты расчетов позволяют установить признаки фазового перехода «гексагональная решетка – гексатик-фаза» для N=92,136,187, рассмотренных в качестве примера.

## ФИЗИЧЕСКАЯ ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Дана система из N одноименно заряженных частиц с кулоновским взаимодействием в двумерном ограничивающем потенциале радиуса $R$. Гамильтониан такой системы записывается следующим образом.

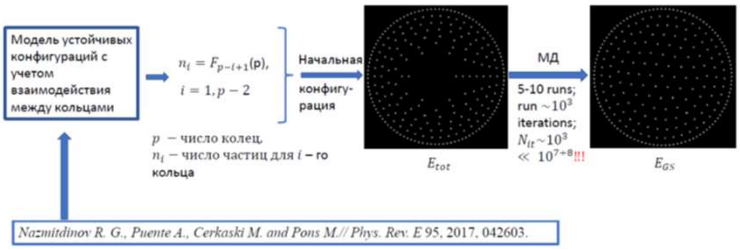
$$H = \sum_{i=1}^{N} V(r_i) + \alpha \sum_{\substack{i,j=1 \\ i<j}}^{N} \frac{1}{|\vec{r_i} - \vec{r_j}|} + \sum_{i=1}^{N} T_i ,$$

Где $r_i = |\vec{r_i}|$ – это расстояние до центра области, ограниченной потенциалом, $\alpha = e^2/4\pi\varepsilon_0\varepsilon_r$ – величина, характеризующая силу взаимодействия зарядов в среде, $T_i$ – кинетическая энергия частицы. Ограничивающий потенциал $V(r)$ определяется следующим образом.

$$V(r) = \begin{cases} 0, & r < R \\ \infty, & r \geq R. \end{cases}$$

## МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ И СХЕМА ВЫЧИСЛЕНИЙ

Для поиска устойчивых конфигураций системы заряженных частиц с минимумом энергии с определенным выше гамильтонианом в настоящей работе использовался подход развитый в предыдущих работах авторов.(КИМ, 2022, Т.14, №3, с. 609; Поверхность, 2023, №2, с. 71)




Например, для достижения основного состояния системы с минимумом энергии для 8000 частиц (см. Рис. 1) методом молекулярной динамики с использованием технологии CUDA потребовалась 841 секунда на компьютерной системе, состоящей из процессора Intel(R) Xeon(R) Gold 6148 CPU @ 2.40GHz и графических процессоров Tesla v100-sxm2-32gb.

## ОРИЕНТАЦИОННЫЙ ПАРАМЕТР ПОРЯДКА

Параметром порядка в соответствии с теорией фазовых переходов Л.Д. Ландау в этом случае может служить следующая величина, которая может быть названа ориентационным параметром порядка.

$$\Psi_6(r_k) = 1 - \psi_6(r_k) - \varepsilon_6.$$

Здесь $\varepsilon_6$ – точность определения степени ориентационной симметрии 6–го порядка, связанный с точностью вычисления функции $\psi_6(r_k)$.

$$\psi_6(r_k) = \frac{1}{N_b} \sum_{l=1}^{N_b} e^{i6\theta_{kl}}$$

Здесь $N_b$ –число ближайших соседей, $\theta_{kl}$ –угол между связью между частицами $k$ и $l$ и произвольно выбранным направлением. $\psi_6$ – так называемый ориентационный порядок связи. Пример визуализации параметра порядка для числа точечных электронов $N = 8000$ и точностью $\varepsilon_6 = 0.2$ приведен на рисунке 1.

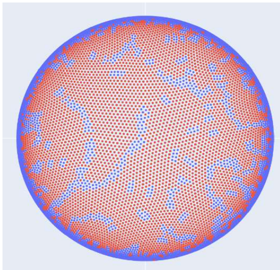


Рис.1

## ТОПОЛОГИЧЕСКИЙ ЗАРЯД И ОРИЕНТАЦИОННАЯ КОРРЕЛЯЦИОННАЯ ФУНКЦИЯ

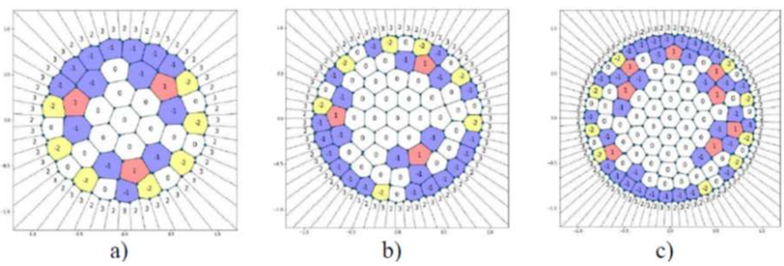



Рис. 2. Распределение топологического заряда для разных значений числа частиц: a) $N = 92$; b) $N = 136$; c) N=187.

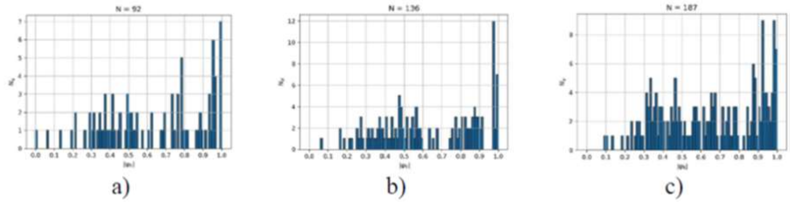



Рис. 3. Распределение величины ориентационного порядка связи $\psi_6$ для разных значений числа частиц: a) N=92; b) N=136; c) N=187.

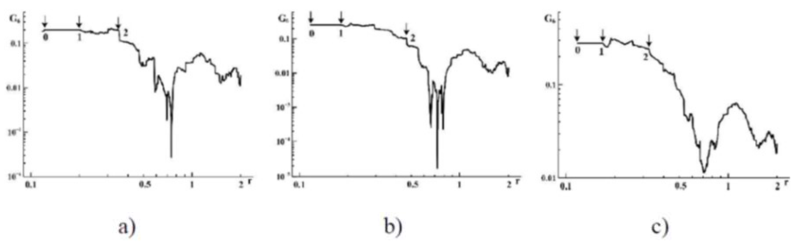



Рис. 4. Ориентационная корреляционная функция $G_6(r)$ (9) для разных значений числа частиц: a) N=92; b) N=136; c) N=187.

Топологический заряд $s = 6 - C_d$. Координационное число $C_d$ определяется числом сторон выпуклого многоугольника, описанного вокруг частицы в разбиении Вороного (рис.2). Дисклинацией называется топологический дефект, при котором топологический заряд частицы не равен нулю. Дислокацией называется дефект, состоящий из нескольких пар дисклинаций, с равными по модулю топологическими зарядами с противоположными знаками (синие и красные многоугольники на рис.2). При этом для недеформированной гексагональной решетки (7 частиц в центре) $\psi_6 = 1$ (Рис.3). При приближении к границе решетка деформируется и разрушается с появлением дисклинаций. На графиках в логарифмическом масштабе для ориентационной корреляционной функций между двумя частицами $i$ и $j$ на расстоянии $\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$ : $G_6(\mathbf{r}_{ij}) = \langle \psi_6(\mathbf{r}_i) \cdot \psi_6^*(\mathbf{r}_j) \rangle$ (Рис. 4) разным фазам соответствуют следующие участки. Участок между точками 0 и 1 соответствует гексагональной решетке. Участок между точками 1 и 2 – гексатик-фазе. После точки 2 происходит резкое падение величины $G_6$, которое сменяется затухающей колебательной кривой, что свидетельствует о преобладании кольцеобразной фазы.

## Заключение

В данной работе предложен подход для поиска сигналов фазового перехода «гексагональная решетка – гексатик-фаза» в зависимости от числа частиц при нулевой температуре в планарных системах одинаково заряженных частиц, взаимодействующих посредством кулоновского потенциала и запертых внешними потенциалами с круговой симметрией. Проведенный анализ продемонстрировал ряд характеристических особенностей фазового перехода. Ориентационное искажение гексагональной решетки и образование дефектов в виде дисклинаций и дислокаций (рис. 2,3,4) представляет собой проявление новой так называемой гексатической фазы и может служить сигналом фазового перехода «гексагональная решетка – гексатическая фаза».