ЭВОЛЮЦИЯ ГЕКСАТИЧЕСКОЙ ФАЗЫ С РОСТОМ ЧИСЛА ЧАСТИЦ В ДВУМЕРНЫХ СИСТЕМАХ С ЦИРКУЛЯРНОЙ СИММЕТРИЕЙ

Э.Г. Никонов*, **Р.Г. Назмитдинов, П.И. Глуховцев**

*e.nikonov@jinr.ru

53-я Международная Тулиновская конференция по Физике Взаимодействия Заряженных Частиц с Кристаллами

Москва, МГУ им М.В. Ломоносова, 28 мая – 30 мая 2024

Фазовые переходы в квазидвумерных системах одинаково заряженных частиц с круговым запирающим потенциалом играют важную роль в функционировании различных физических и химических объектов и систем от вихревых структур в сверхпроводниках до латеральных квантовых точек. При исследовании фазовых переходов по числу частиц при нулевой температуре обнаружены ряд особенностей фазового перехода от гексагональной к гексатической фазе. В соответствии с теорией БКТ гексатическая фаза, образующаяся в результате перехода от гексагональной фазы в результате роста температуры, представляет собой жидкость с элементами упорядочения. При нулевой температуре с ростом числа частиц в исследуемых системах центрированная гексагональная решётка конформно деформируется, затем частично разрушается с формированием дисклинаций и дислокаций. В работе представлены результаты анализа ориентационного параметра порядка и топологического заряда, которые позволяют обнаружить рост величины частичной упорядоченности гексатической фазы в исследуемых системах заряженных частиц с ростом числа частиц при нулевой температуре.

ФИЗИЧЕСКАЯ ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Дана система из N одноименно заряженных частиц с кулоновским взаимодействием в двумерном ограничивающем потенциале радиуса R с гамильтонианом

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

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.

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

ЧИСЛЕННЫЙ АЛГОРИТМ

Для поиска устойчивых конфигураций системы заряженных частиц с минимумом энергии с определенным выше гамильтонианом в настоящей работе использовался подход развитый в предыдущих работах авторов.

1. Рассчитывалось распределение количества частиц на n_{ext} − внешних оболочках $N_i(N) = a_i N^{\frac{2}{3}} - b_i, i = 1, \dots n_{ext}$, для полного числа частиц N. Нумерация начинается с внешней оболочки.
2. МД с торможением.
3. Количество запусков для достижения устойчивой конфигурации с энергией, наиболее близкой к глобальному минимуму оценивается как $N_{runs} = 1/P(E_{min} - E_{val})$. Например, для $E_{val} = E_{avr} - 3\sigma$ и $N = 1000$ необходимо $N_{runs} > 741$.

ОРИЕНТАЦИОННЫЙ ПАРАМЕТР СВЯЗИ

$\psi_6(r_k)$ – ориентационный порядок связи.

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

Здесь N_b –число ближайших соседей, θ_{kl} –угол между связью между частицами k и l и произвольно выбранным направлением. ψ_6. Параметр $\psi_6(r_k)$ является важнейшей характеристикой двумерных систем частиц, образующих кристаллическую решётку с симметрией шестого порядка. В соответствии с определением в узлах гексагональной решётки ориентационный порядок связи будет равен единице ($\psi_6(r_k) = 1$)

ТОПОЛОГИЧЕСКИЙ ЗАРЯД

Топологический заряд $s = 6 - C_d$. Координационное число C_d определяется числом сторон выпуклого многоугольника, описанного вокруг частицы в разбиении Вороного. 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) $\psi_6 = 1$. При приближении к границе решетка деформируется и разрушается с появлением дисклинаций.

В соответствии с классической теорией дефектов дисклинация на гексагональной решётке характеризуется тем, что при обходе по замкнутому контуру, содержащему дисклинацию, интеграл от угла поворота $\vartheta(x,y) = \frac{1}{2}\left(\partial_x u_y - \partial_y u_x\right)$, где $\boldsymbol{u}(x,y) = \left(u_x(x,y), u_y(x,y)\right)$– вектор смещения некоторой малой области кристалла вследствие термодинамических флуктуаций при $T \neq 0$, получает приращение, кратное $2\pi/6$:

$$\oint d\vartheta(\mathbf{r}) = -\frac{2\pi}{6} s, \qquad s = \pm 1, \pm 2, \dots$$

Величина s называется топологическим зарядом дисклинации.

Заключение

Таким ориентационный параметр порядка связи позволяет установить не только появление дефектов решетки в результате конкуренции распределения частиц в узлах гексагональной решетки и кольцевой структурой, обусловленной симметрией потенциала, но и обнаружить деформацию решётки задолго до образования дисклинаций. . Кроме того, анализ ориентационного параметра порядка и топологического заряда позволяют обнаружить рост величины частичной упорядоченности гексатической фазы в исследуемых системах заряженных частиц с ростом числа частиц при нулевой температуре.