



INSTITUTE FOR HIGH PRESSURE PHYSICS

Влияние случайного пиннинга на плавление двумерной системы с потенциалом с отрицательной кривизной

Е.Н. Циок, Д.Е. Дудалов, Ю.Д. Фомин, В.Н. Рыжов

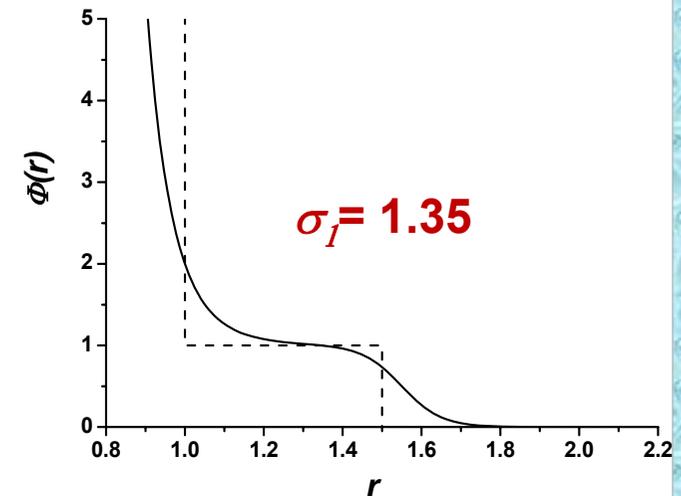
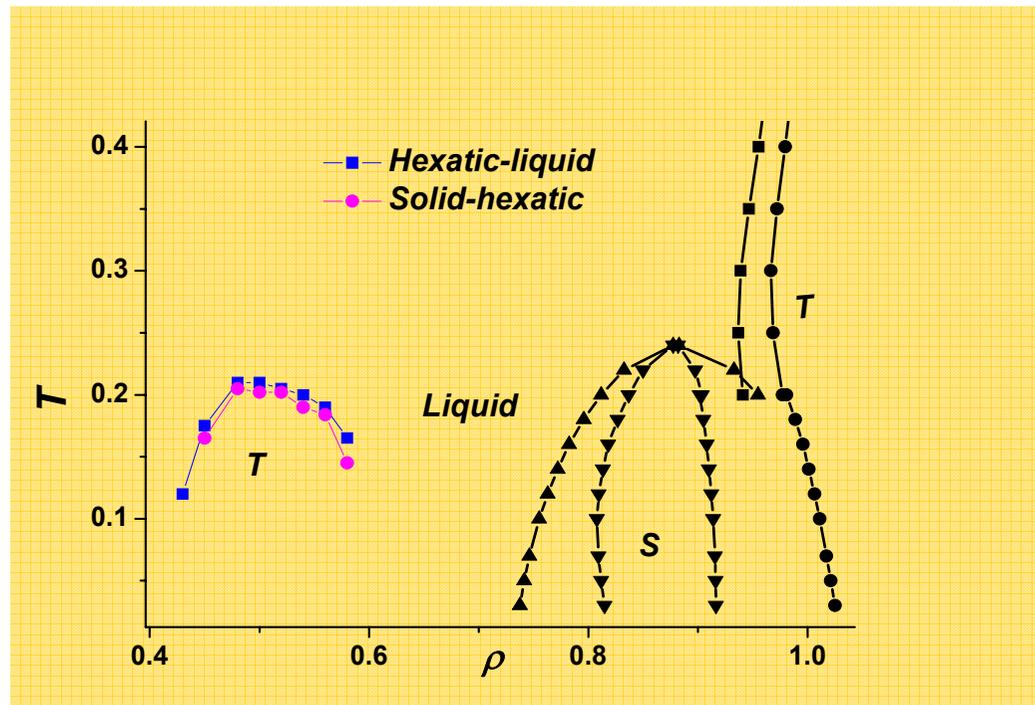
Институт физики высоких давлений
им. Л.Ф. Верещагина РАН

Буревестник - 2015

Smooth Repulsive Shoulder Potentials (Yu. D. Fomin, N.V. Gribova, V.N.Ryzhov, S.M. Stishov, and Daan Frenkel, J. Chem. Phys. 129, 064512 (2008))

Smooth Repulsive Shoulder System

$$U(r) = \varepsilon \left(\frac{\sigma}{r} \right)^{14} + \frac{1}{2} \varepsilon (1 - \tanh(k_0[r - \sigma_1]))$$



D. R. Nelson, Phys. Rev. B 27, 2902 (1983).

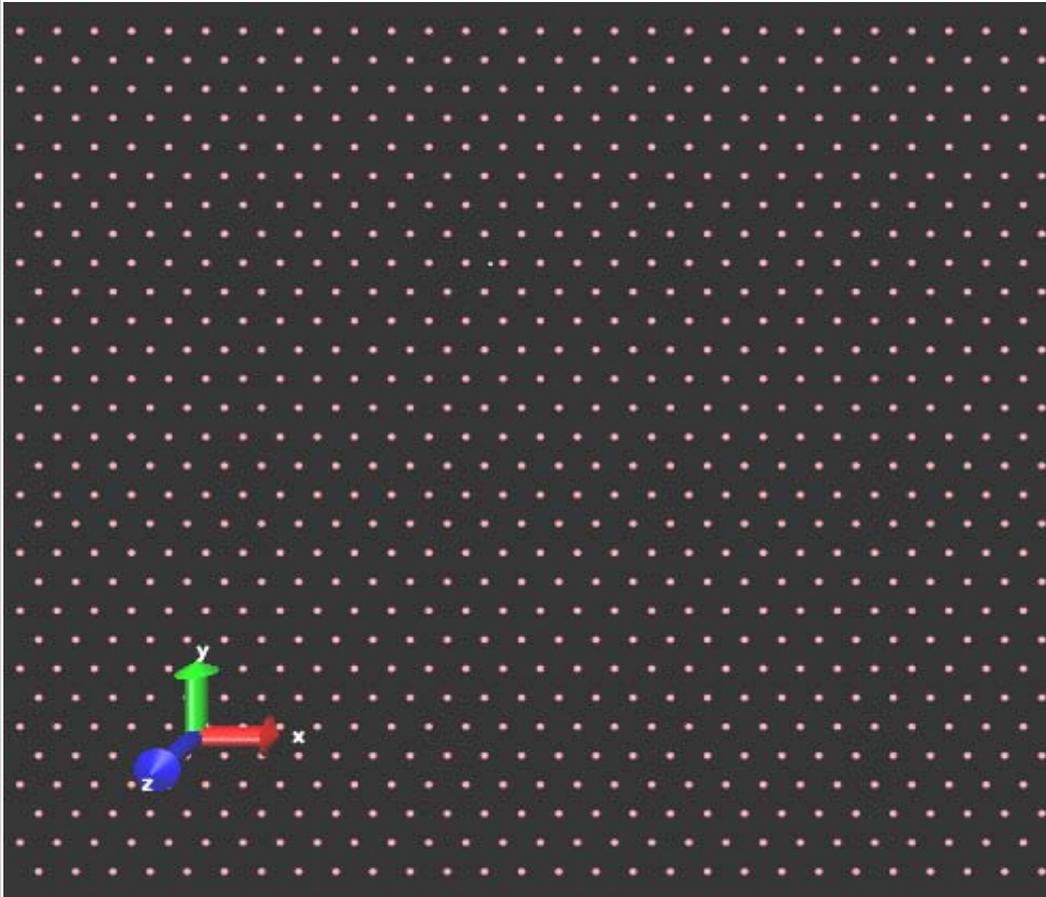
S. Sachdev and D. R. Nelson, J. Phys. C- Solid State Physics 17, 5473 (1984).

S. Deutschlander, T. Horn, H. Lowen, G. Maret, and P. Keim, Phys. Rev. Lett. 111, 098301 (2013).

Сценарий Березинского-Костерлица-Таулеса-Хальперина-Нельсона-Янга

D.E. Dudalov, Yu.D. Fomin, E.N. Tsiok, and V.N. Ryzhov, Soft Matter 10, 4966 (2014); . Chem. Phys. 141, 18C522 (2014); Journal of Physics: Conference Series 510, 012016 (2014).

Система и Метод



Метод молекулярной
динамики (LAMMPS package
<http://lammmps.sandia.gov>

NVT - ансамбль

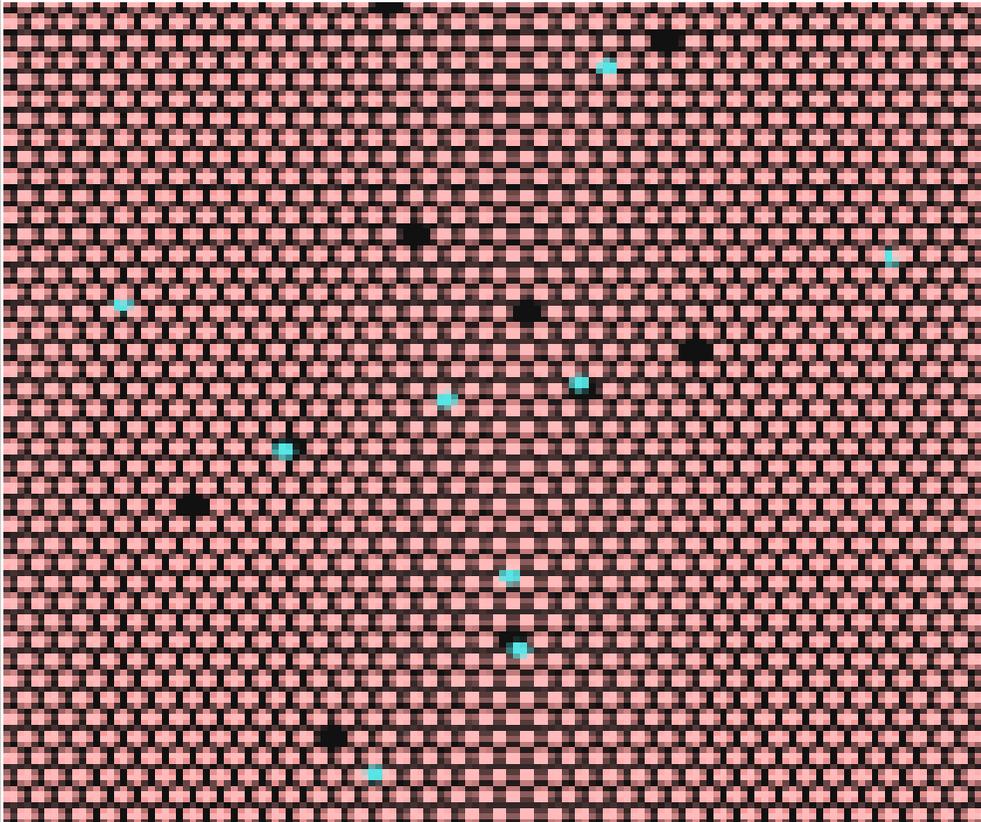
$N = 20000$

% pin	N pin
0.05	10
0.1	20
0.125	25
0.15	30
0.2	40
0.5	100

Не менее 10 независимых конфигураций со случайно выбранными пиннинговыми частицами в случайных положениях. Концентрация пиннинговых частиц менялась от 0.05% до 0.5%

```
group many    type 1    #ОСНОВНАЯ ЧАСТЬ ЧАСТИЦ
group mobile  type 2    #ПИННИНГОВЫЕ ЧАСТИЦЫ
```

```
#fix 3 many  nvt temp 0.12 0.12 0.01
fix 3 mobile nvt temp 75 75 0.01
```



T up to 10^5 of the melting
temperature

```
fix 3 many  nvt temp 0.12 0.12 0.01
#fix 3 mobile nvt temp 75 75 0.01
```

Плавление двумерных систем

- Переход первого рода
- Два непрерывных перехода (сценарий Костерлица-Таулеса Хальперина-Нельсона-Янга)
 - Переход кристалл – гексатическая фаза (ориентационно упорядоченная)
 - Переход гексатическая фаза – нормальная жидкость

Трансляционный порядок:

$$\Psi_T = \frac{1}{N} \left\langle \left| \sum_i e^{i\mathbf{G}\mathbf{r}_i} \right| \right\rangle,$$

Ориентационный порядок:

$$\Psi_6 = \frac{1}{N} \left\langle \left| \sum_i \frac{1}{n_c(i)} \sum_{\text{NN}(i)} e^{6i\theta_{\text{NN}}} \right| \right\rangle = \frac{1}{N} \left\langle \left| \sum_i \Psi_6(\mathbf{r}_i) \right| \right\rangle$$

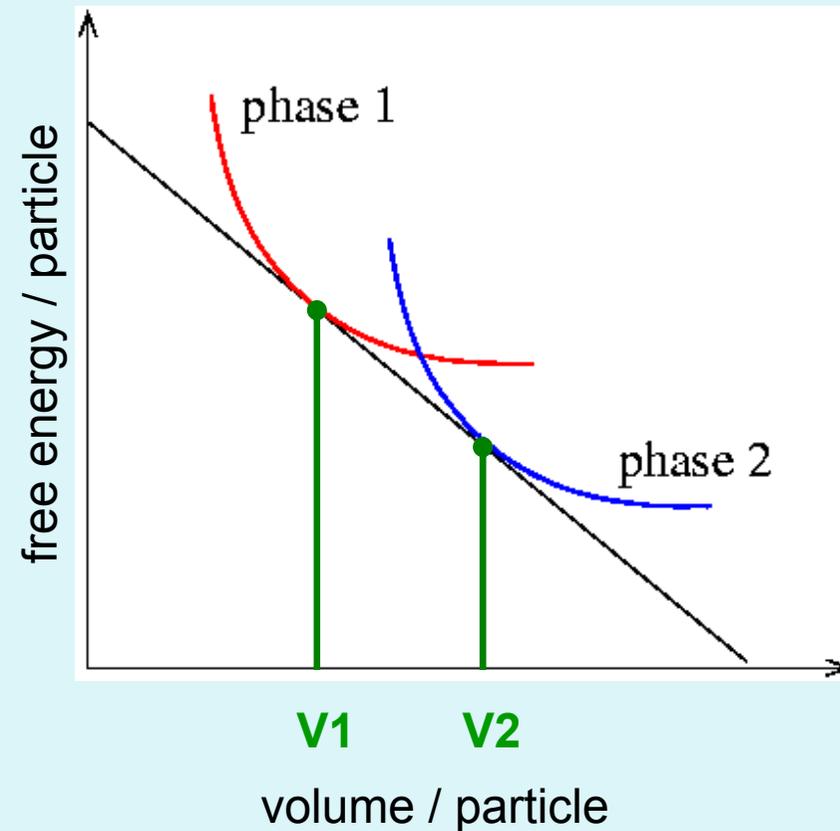
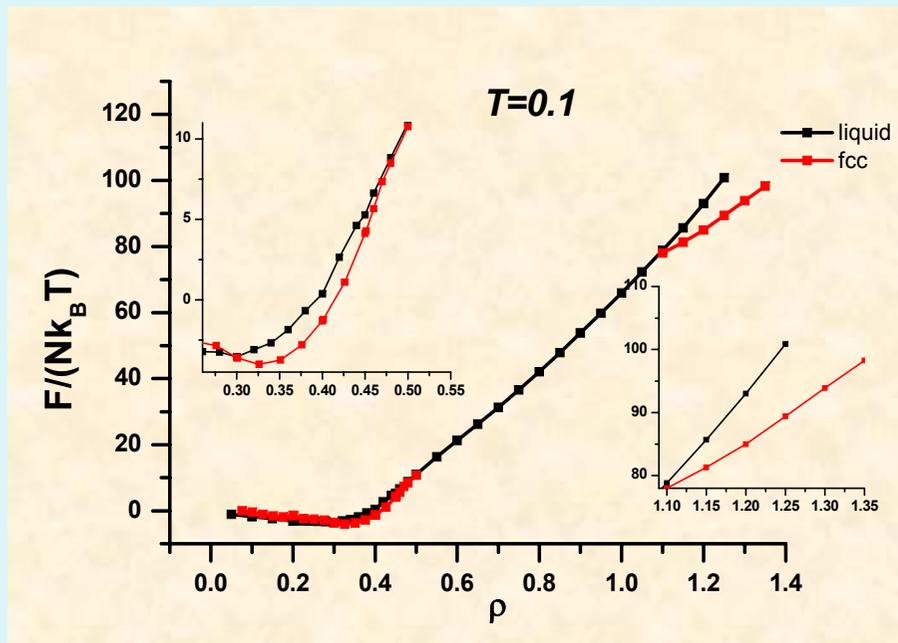
K. Binder, W. Kob “Glassy Materials and Disordered Solids: An Introduction to Their Statistical Mechanics”, 2005, World Scientific Publishing Company

B.I. Halperin and D.R.Nelson, Phys. Rev. Lett. 41, 121 (1978).

Свободная энергия жидкости и кристалла

Положение переходов первого рода определяется построением общих касательных к кривым свободных энергий фаз

$$P = - (\partial F / \partial V)_{N,T}$$



Плавление двумерных систем

- Переход первого рода

- Два непрерывных перехода (сценарий Костерлица-Таулеса-Гальперина- Нельсона-Юнга)

- Переход кристалл – гексатическая фаза (ориентационно упорядоченная)

- Переход гексатическая фаза – нормальная жидкость

Трансляционный порядок:
$$\Psi_T = \frac{1}{N} \left\langle \left| \sum_i e^{i\mathbf{G}\mathbf{r}_i} \right| \right\rangle,$$

Ориентационный порядок:

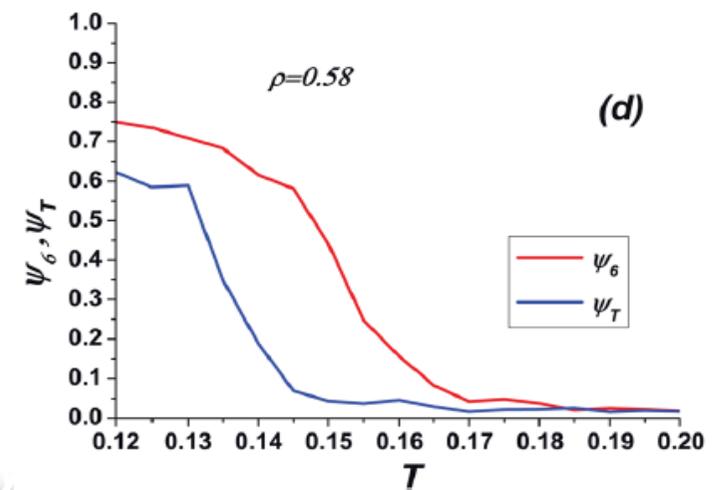
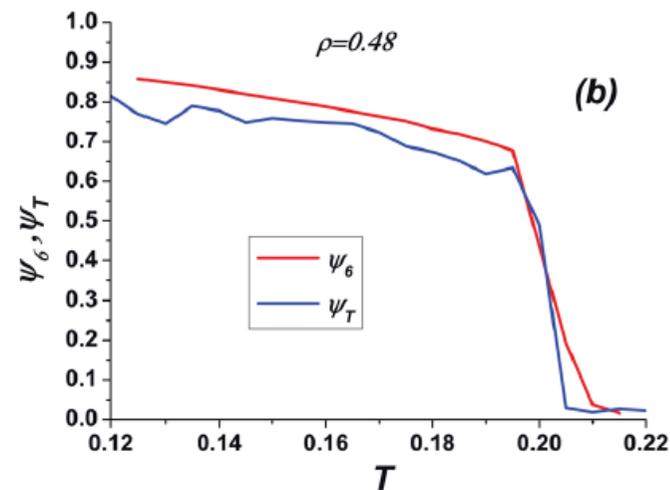
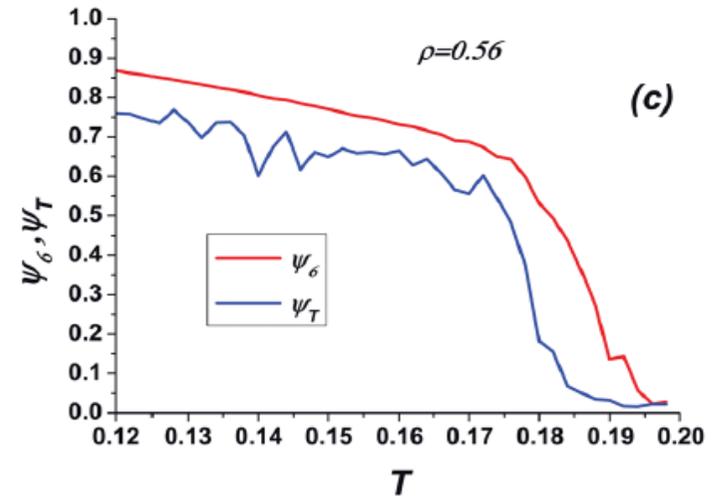
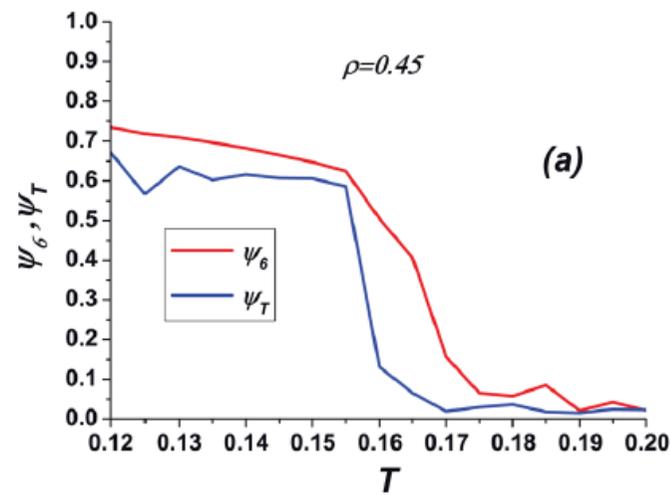
$$\Psi_6 = \frac{1}{N} \left\langle \left| \sum_i \frac{1}{n_c(i)} \sum_{\text{NN}(i)} e^{6i\theta_{\text{NN}}} \right| \right\rangle = \frac{1}{N} \left\langle \left| \sum_i \Psi_6(\mathbf{r}_i) \right| \right\rangle$$

K. Binder, W. Kob “Glassy Materials and Disordered Solids: An Introduction to Their Statistical Mechanics”, 2005, World Scientific Publishing Company

B.I. Halperin and D.R.Nelson, Phys. Rev. Lett. 41, 121 (1978).

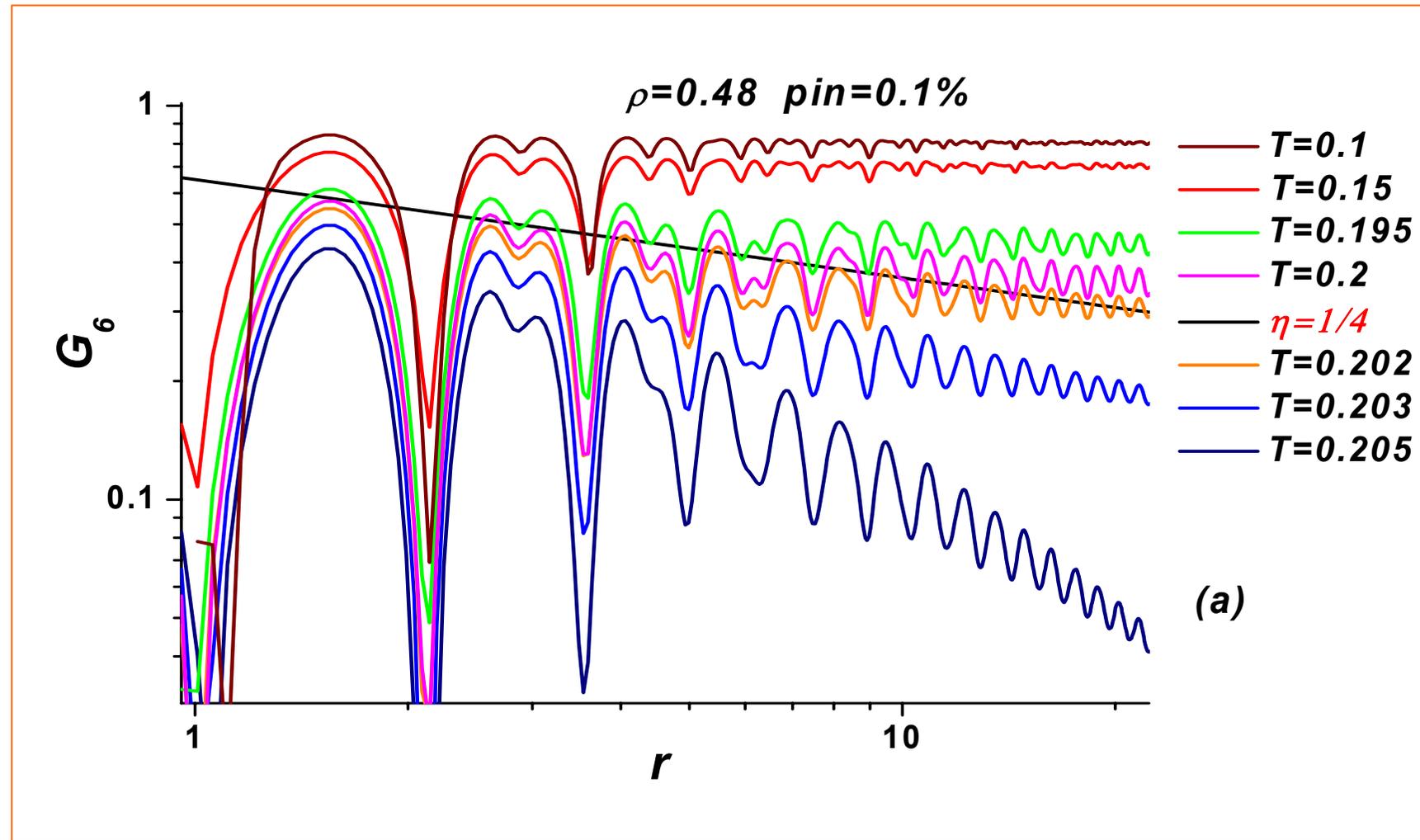
Ψ_6 и Ψ_T как функция температуры для набора плотностей

$$\sigma_1 = 1.35$$



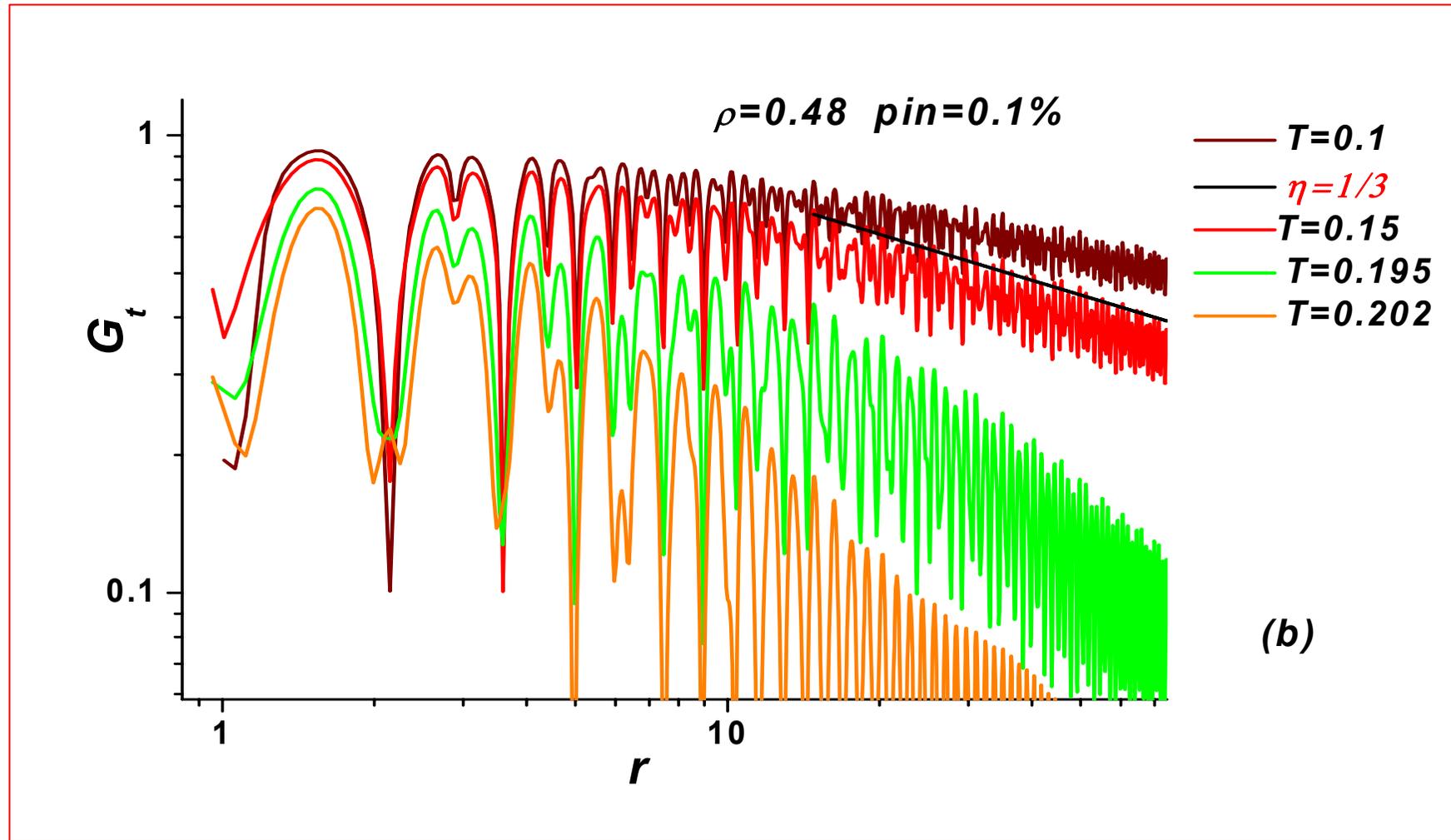
Поведение ориентационной корреляционной функции $G_6(r)$

$$G_6(r) = \left\langle \frac{\langle \Psi_6(\mathbf{r}) \Psi_6^*(\mathbf{0}) \rangle}{g(r)} \right\rangle \quad \bar{G}_6(r) \propto r^{-\eta_6} \quad \text{with } 0 \leq \eta_6 \leq \frac{1}{4}$$

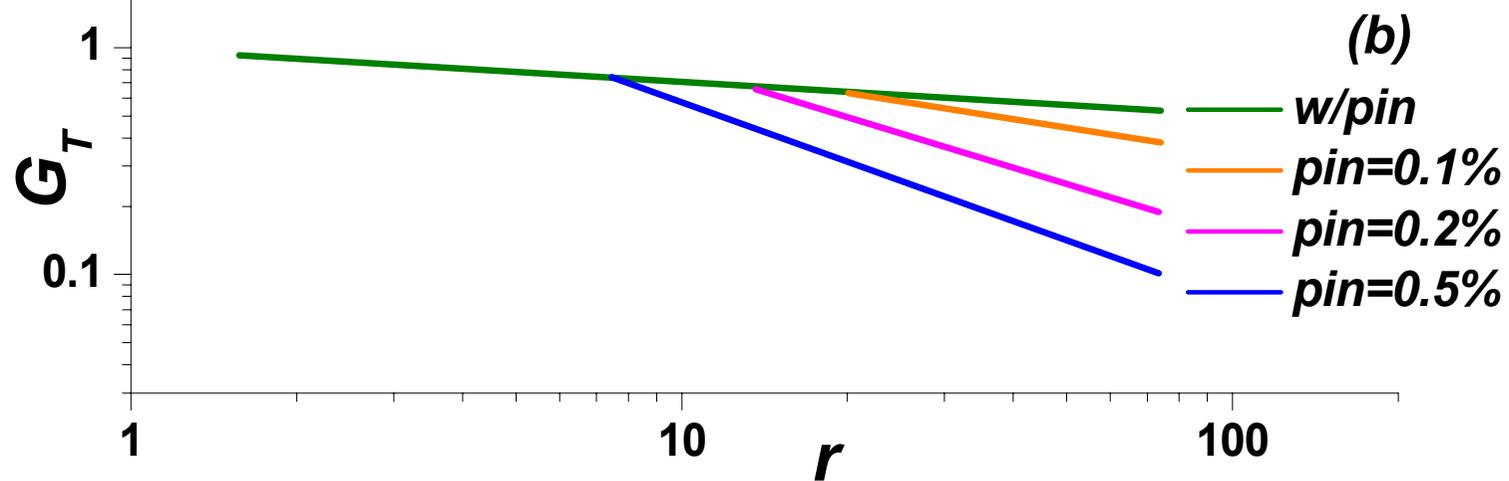
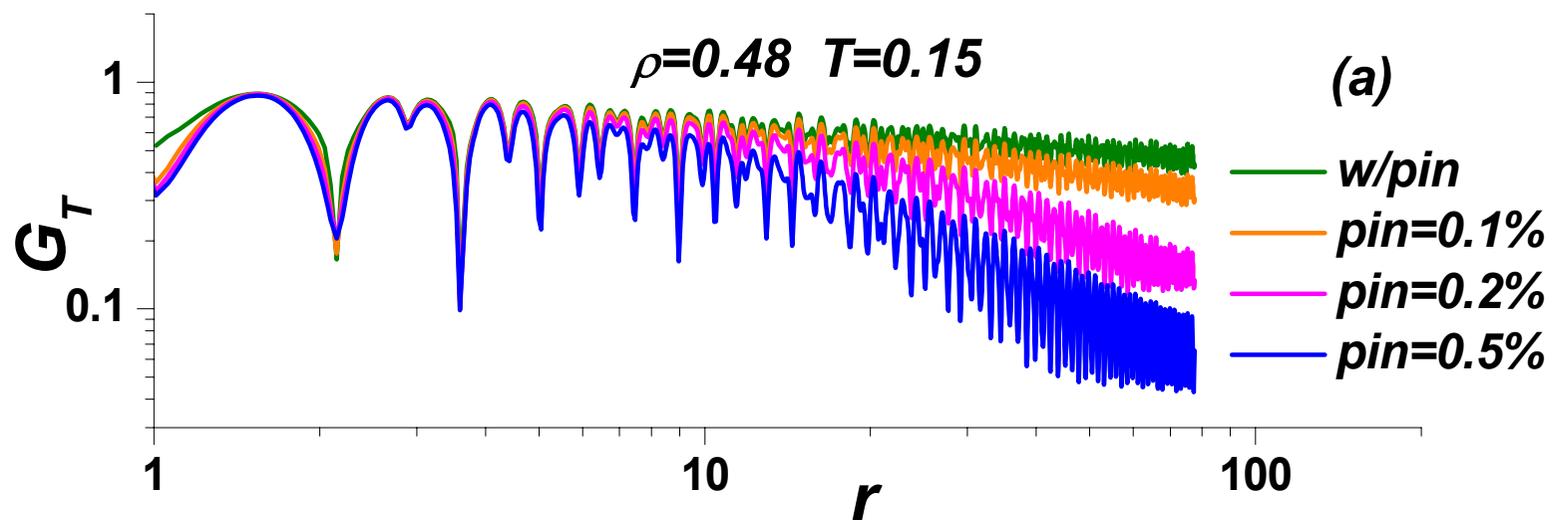


Поведение трансляционной корреляционной функции $G_T(r)$

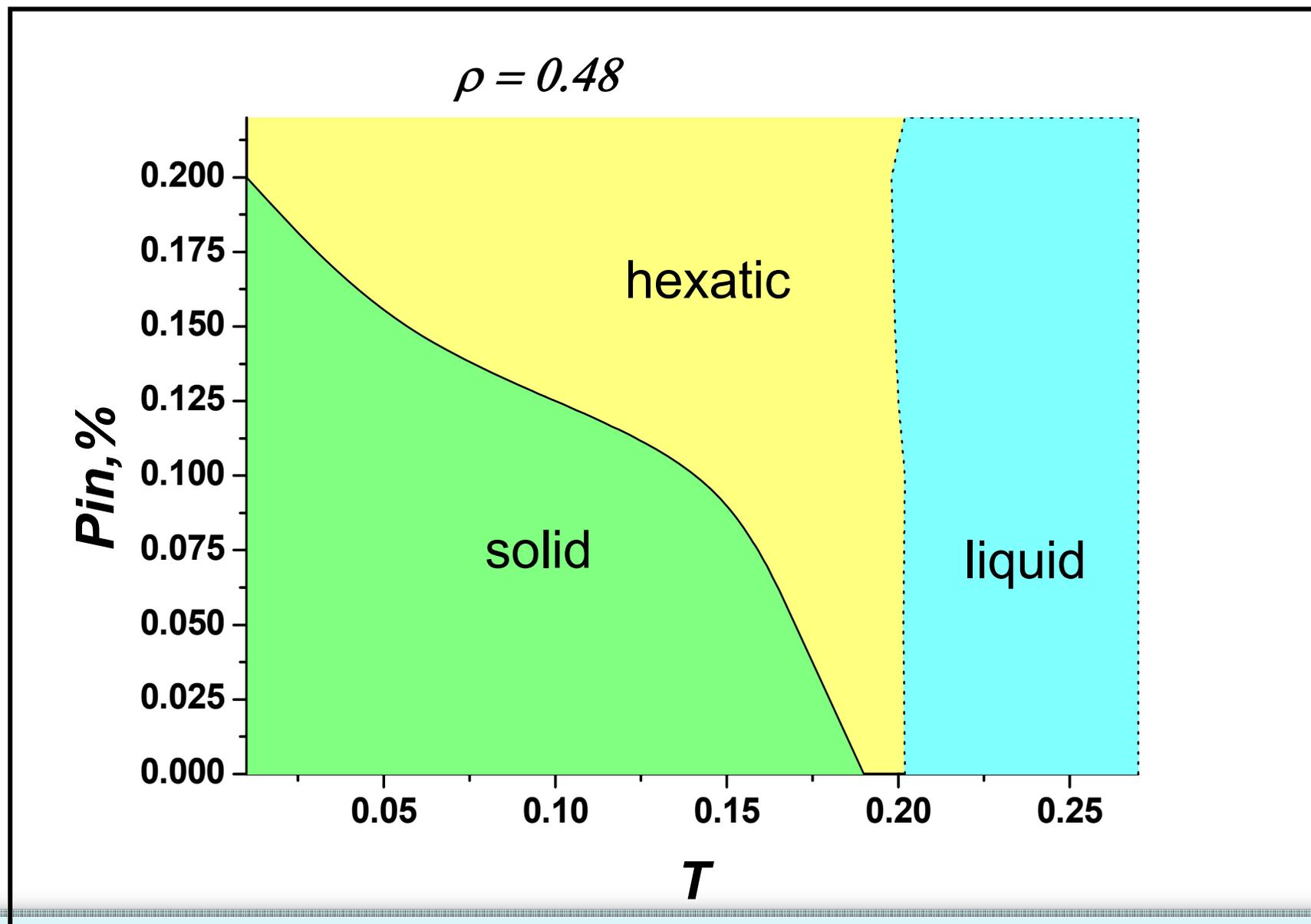
$$G_T(r) = \left\langle \frac{\langle \exp(iG(r_i - r_j)) \rangle}{g(r)} \right\rangle_{rp} \quad G_T(r) \propto r^{-\bar{\eta}_T} \text{ with } \frac{1}{4} \leq \bar{\eta}_T \leq \frac{1}{3}$$



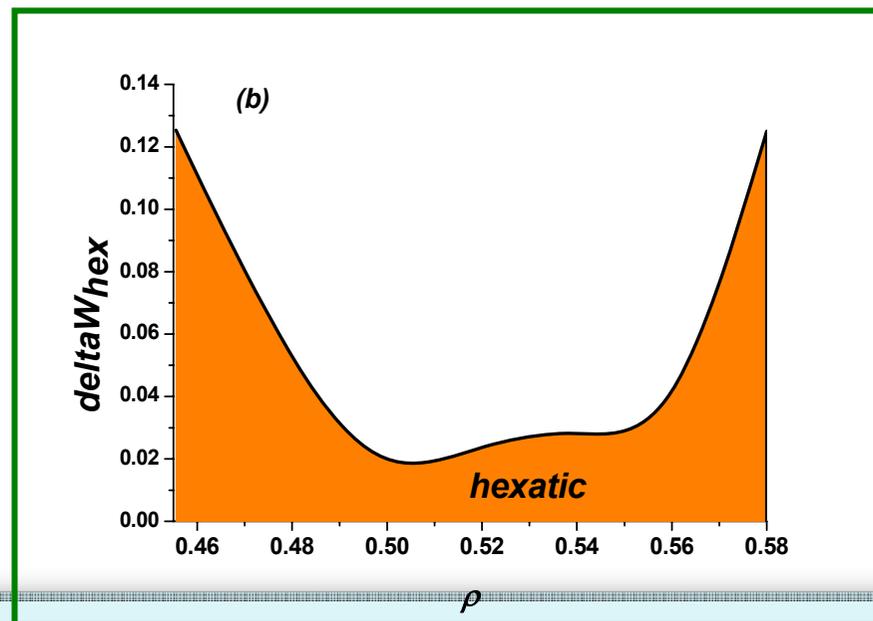
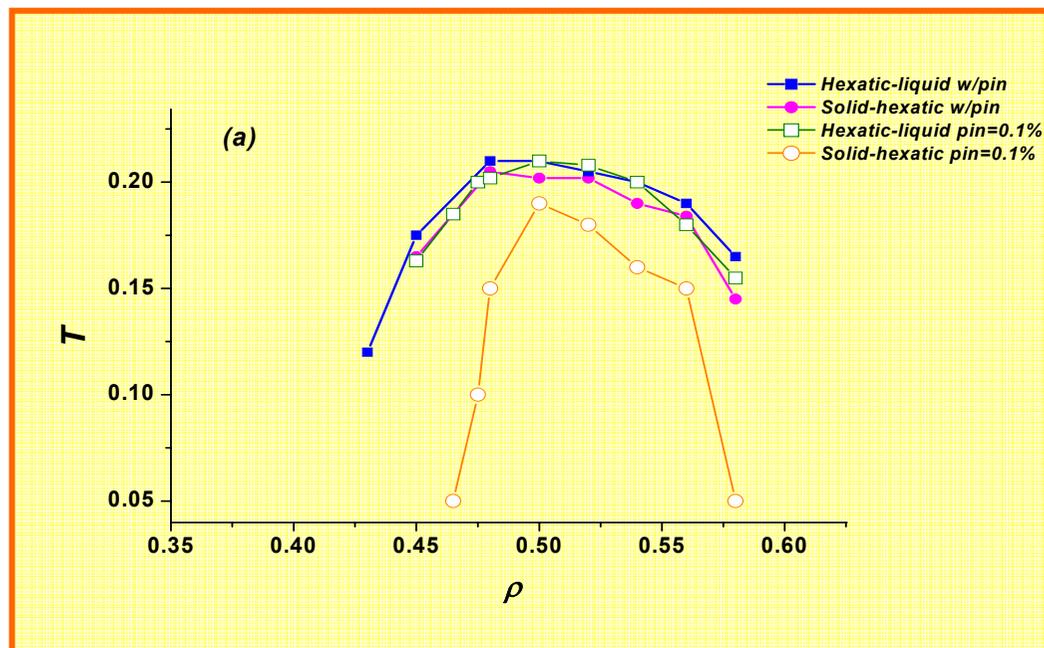
Трансляционная корреляционная функция $G_T(r)$



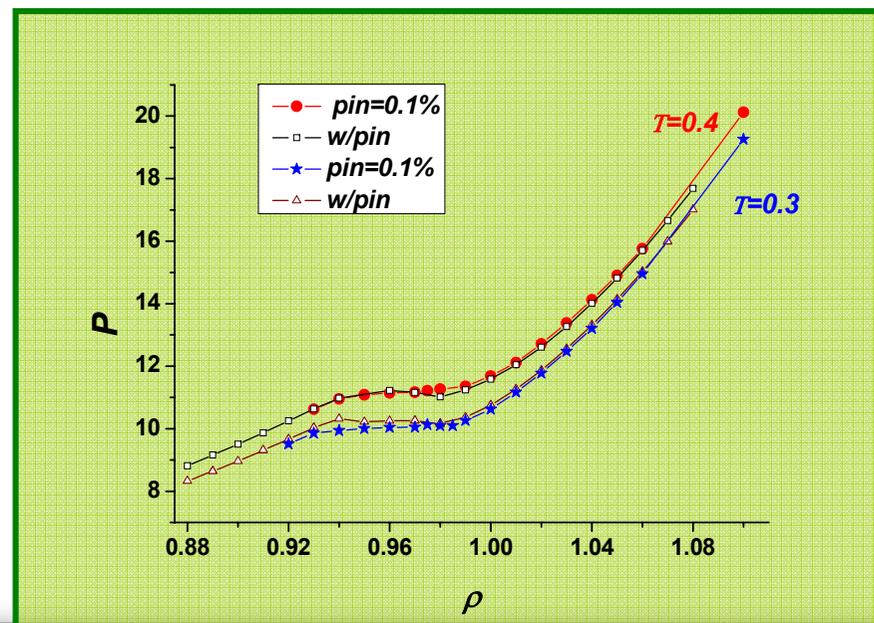
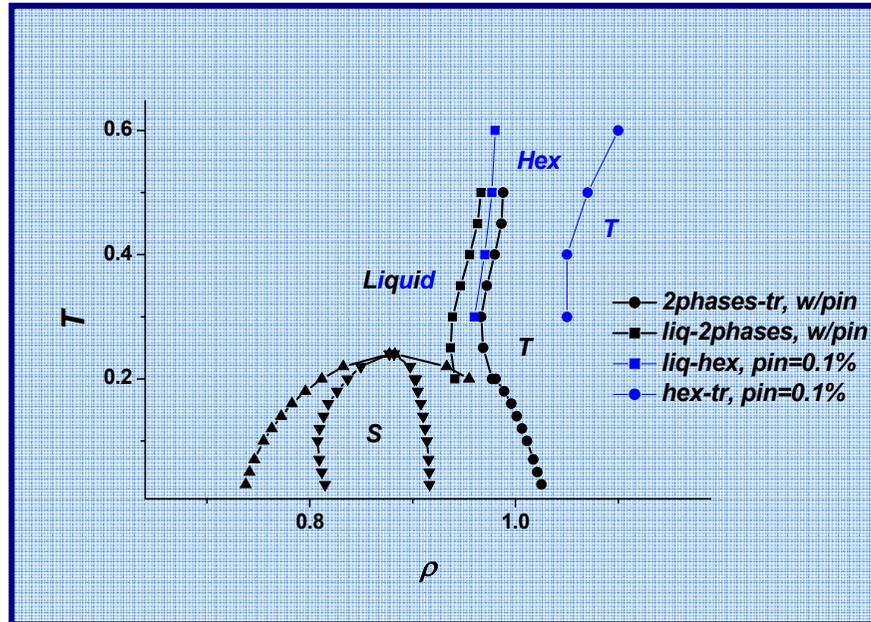
Влияние силы пиннинга на фазовую диаграмму



Фазовая диаграмма в области низких плотностей (пиннинг 0.1%)



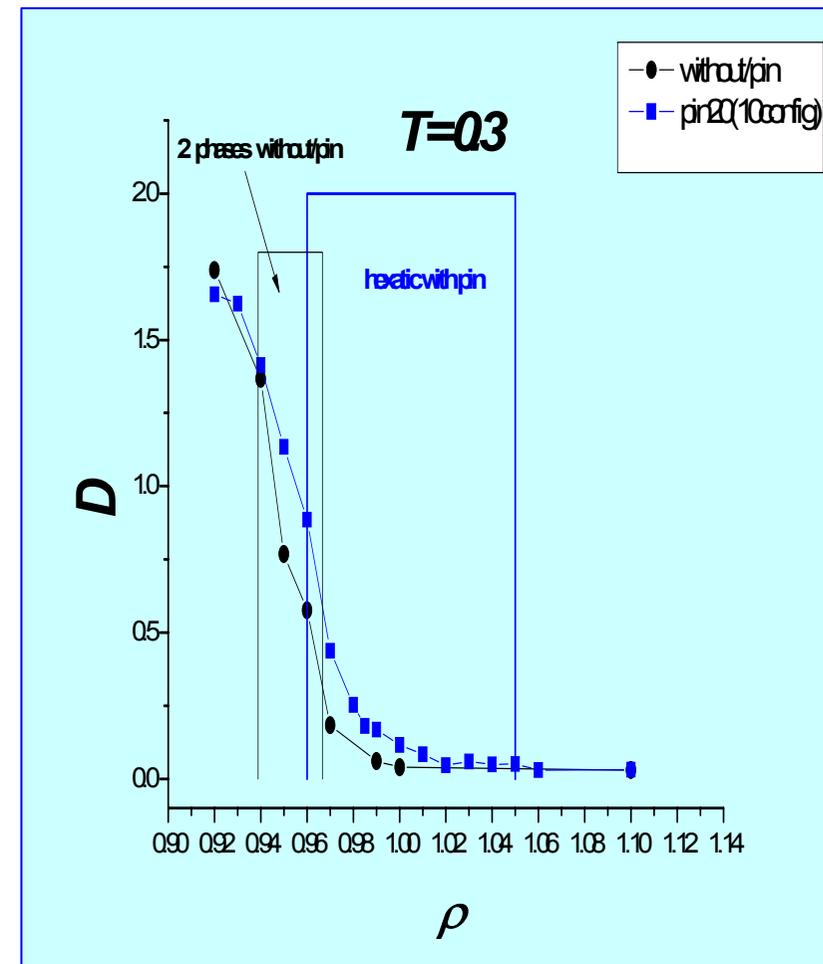
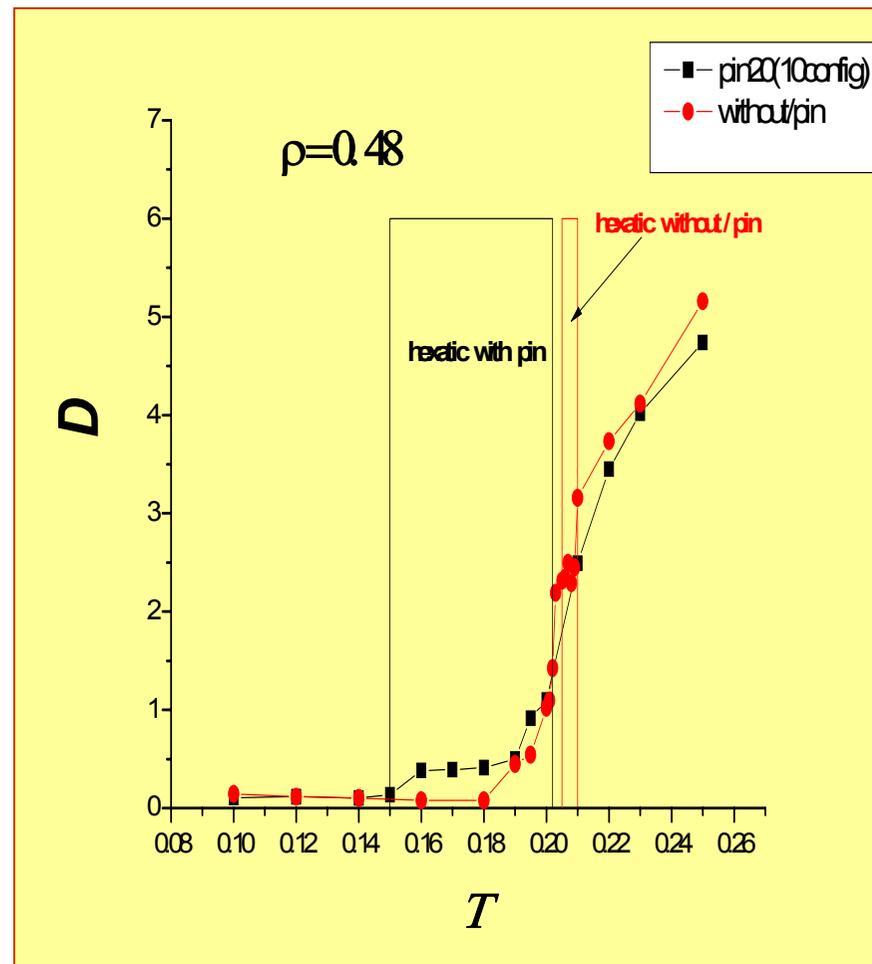
Фазовая диаграмма в области высоких плотностей (пиннинг 0.1%)



Диффузия в гексатической фазе

$$\langle \Delta r^2(t) \rangle \equiv \langle [r(t+t_0) - r(t_0)]^2 \rangle$$

$$D = \frac{1}{2d} \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\langle \Delta r^2(t) \rangle}{t}$$



ВЫВОДЫ:

- 1. Исследование влияние случайного пиннинга на плавление двумерной системы показало, что область гексатической фазы резко возрастает с увеличением концентрации пиннинговых атомов в решетке от 0,05% до 0,5% в области низких плотностей на фазовой диаграмме. Причем, сценарий плавления в области низких плотностей не изменился по сравнению с плавлением системы без пиннинга и соответствует КТНУ. Было установлено, что в области высоких плотностей сценарий плавления кардинально изменился: изотропная жидкость превращается в гексатическую фазу посредством перехода первого рода, а переход из кристалла в гексатическую фазу происходит в соответствии со сценарием Костерлица-Таулеса.**
- 2. Проведены исследования поведения коэффициента диффузии в гексатической фазе, значение которого на порядок меньше по сравнению с коэффициентом диффузии в изотропной жидкости.**

Работа поддержана грантом РФФ 14-12-00820

- [1] D. E. Dudalov, Yu. D. Fomin, E. N. Tsiok, V. N. Ryzhov, Journal of Physics: Conference Series 510, 012016 (2014).
- [2] D. E. Dudalov, Y. D. Fomin, E. N. Tsiok, V. N. Ryzhov, Soft Matter 10, 4966 (2014).
- [3] D. E. Dudalov, Y. D. Fomin, E. N. Tsiok, V. N. Ryzhov, J. Chem. Phys. 141, 18C522 (2014).
- [4] E. N. Tsiok, D. E. Dudalov, Y. D. Fomin, V. N. Ryzhov, PRE (in press).

***Спасибо
за внимание***