

## УПОРЯДОЧЕНИЕ ЦЕПОЧЕК В МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКЕ И КИНЕТИКЕ

*А. Э. Филиппов*

*Донецкий физико-технический институт Национальной академии наук Украины  
340114, Донецк, Украина*

Поступила в редакцию 23 января 1997 г.

При помощи метода молекулярной динамики рассмотрены процессы упорядочения в двухкомпонентном двумерном кулоновском газе, состоящем из одинаковых количеств положительно и отрицательно заряженных частиц, который моделирует поведение системы взаимодействующих вихрей. Обнаружено, что при понижении температуры системы от известного перехода Костерлица–Таулесса в ней может иметь место дополнительное упорядочение вихревых цепочек. Отмечено, что описанный процесс может стимулировать возникновение вихревых цепочек, наблюдаемых в реальных сверхтекучих, магнитных и сверхпроводящих системах. Результаты сопоставлены с моделированием кинетики в аналогичных системах в рамках континуальной зависящей от времени модели Гинзбурга–Ландау.

### 1. ВВЕДЕНИЕ

На протяжении последних десятилетий динамика упорядочения пространственно-неоднородных структур и фазовой сепарации привлекает внимание исследователей. Все это время развитие вычислительных возможностей все более снижало степень огрубления задачи, необходимого для количественного описания процессов. Как правило, такое огрубление состояло в преобразовании проблемы, которая изначально восходит к многочастичной динамической задаче о движении ансамбля взаимодействующих подсистем, к той или иной форме континуального описания на базе коллективных полей (плотностей). Текущий уровень вычислительных возможностей делает возможным прямое численное моделирование достаточно сложных систем с дальнедействующим взаимодействием. Этот метод позволяет, с одной стороны, проверить результаты континуальных теорий, а с другой — обнаружить те структурные особенности системы, которые заведомо утеряны в огрубленном описании.

Интенсивный поток публикаций [1–12] дает примеры обоих направлений. Так, например, компьютерное моделирование фазовой сепарации и спиноподобного распада в простых и бинарных жидкостях [1–3] было в значительной степени ориентировано на воспроизведение результатов аналитической теории [4], тогда как полученные численно запутанные дипольные цепочки [5–7] обнаружить аналитически крайне сложно. Варьируя динамические сценарии можно предсказывать не только сами структуры, но и пути их экспериментальной реализации. При этом в модель закладываются достаточно реалистические потенциалы, как это имеет место, например, при моделировании кристаллизации молекулярных жидкостей [8,9].

Нетривиальные результаты моделирования методом молекулярной динамики, в свою очередь, стимулируют поиски аналогичных структур как методами, основанными

на анализе континуальных полей, так и экспериментально. Например, свидетельства формирования ориентационно-упорядоченных структур в жидкостях, полученные методом молекулярной динамики для системы диполей с твердым сферическим ядром [5, 6], способствовали исследованиям дальнего порядка в дипольных жидкостях на базе функционала плотности [10]. Численные эксперименты по квазикристаллизации вихрей в двумерной турбулентности [10, 11] были продолжены экспериментами по наблюдению релаксации хаотического движения намагниченных электронов, воспроизводящих почти идеальную  $2D$ -жидкость, в вихревой кристалл [12].

## 2. ДИПОЛЬНЫЕ И ВИХРЕВЫЕ ЦЕПОЧКИ

В этой работе приведены некоторые результаты моделирования динамики двумерного электронного газа применительно к описанию системы вихрей. Со времени известных работ Березинского [13], Костерлица и Таулесса [14, 15] модель двумерного кулоновского газа широко использовалась для описания термодинамики различных систем (см., [16]). При некоторых допущениях к ней может быть сведено описание сверхтекучих жидкостей, плавления кристаллов, а также двумерной  $x-y$ -модели для решетки спинов. Это позволило дать определение топологического порядка для двумерных систем, для которых в соответствии с теоремой Мермина–Вагнера–Хоенберга [17, 18] упорядоченное состояние в обычном смысле невозможно. Фазовый переход в таких системах был сопоставлен с диссоциацией вихревых пар, при которой среднее расстояние между вихрем и антивихрем в возникающей флуктуационной паре возбуждений неограниченно нарастает. Принимая во внимание пространственную зависимость взаимодействия между вихрями, в качестве модельного мы использовали гамильтониан

$$H = \sum_{i \neq j} U(\mathbf{r}_{ij}) S_i S_j,$$

где  $S_i$  — кулоновские заряды, а потенциал определен выражением

$$U(\mathbf{r}_{ij}) = \int d\mathbf{r}' d\mathbf{r}'' f(|\mathbf{r}' - \mathbf{r}''|) V(|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|) f(|\mathbf{r}''|),$$

где  $f(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$  — нормированная плотность пространственного распределения заряда, а взаимодействие имеет следующие предельные формы:

$$\begin{aligned} U(\mathbf{r}) &\simeq \ln(\lambda/\zeta) \text{ при } r \ll \zeta \ll \lambda, \\ U(\mathbf{r}) &\simeq -\ln(r/\lambda) \text{ при } \zeta \ll r \ll \lambda, \\ U(\mathbf{r}) &\sim r^{-1/2} \exp(-r/\lambda) \text{ при } \lambda \ll r, \end{aligned}$$

что адекватно обеспечивает ультрафиолетовое и инфракрасное обрезание [16]. Аналогичное обрезание может быть использовано и в численных экспериментах.

Соответствующее уравнение динамики для таких систем было мотивировано исходя из описания движения сверхтекучей (сверхпроводящей) жидкости [19, 20]. В низшем кинетическом приближении (в частности, в пренебрежении электростатическим вкладом в энергию) вихри не имеют инерции [16]. В этом приближении их движение определяется условием того, что полная сила, действующая на вихрь (составленная из

$-\partial U(\mathbf{r}_{ij})/\partial \mathbf{r}_i$ , шума и релаксации), равна нулю, так что уравнение движения имеет форму уравнения Ланжевена [16]

$$d\mathbf{r}_i/dt = -\gamma \partial U(\mathbf{r}_{ij})/\partial \mathbf{r}_i + \xi(\mathbf{r}_i, t) \quad (1)$$

с дельта-коррелированным шумом  $\xi$

$$\langle \xi(\mathbf{r}, t) \rangle = 0, \quad \langle \xi(\mathbf{r}, t) \xi(\mathbf{r}', t') \rangle = 2D \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t'). \quad (2)$$

В общем случае уравнение содержит также  $d^2 \mathbf{r}_i/dt^2$ :

$$d^2 \mathbf{r}_i/dt^2 = -\gamma d\mathbf{r}_i/dt - \partial U(\mathbf{r}_{ij})/\partial \mathbf{r}_i + \xi(\mathbf{r}_i, t). \quad (3)$$

В таком виде модель применима к гораздо более широкому кругу объектов. Так, например, можно ожидать, что, объединяясь в пары, заряженные частицы формируют дипольную молекулярную жидкость со свойствами, аналогичными обнаруженным в работах [5–7], сохраняя при этом все степени свободы (вращательные, колебательные, способность к диссоциации и рекомбинации и т. д.), присущие реальным молекулам. Последнее открывает более широкие возможности, чем при традиционном моделировании дальнего ориентационного порядка в дипольных системах, основанном на комбинации потенциалов Леннарда–Джонса [5–7, 21]

$$w_{LJ}(r) = 4\epsilon [(\sigma/r)^{12} - (\sigma/r)^6], \quad (4)$$

используемого для симуляции сферических частиц (молекул, несущих на себе диполь) и дипольного потенциала

$$w_{dip}(r) = -3(\mu_2 \mathbf{r})(\mu_1 \mathbf{r})/r^5 + \mu_2 \mu_1 / r^3, \quad (5)$$

где  $\mu$  — дипольный момент.

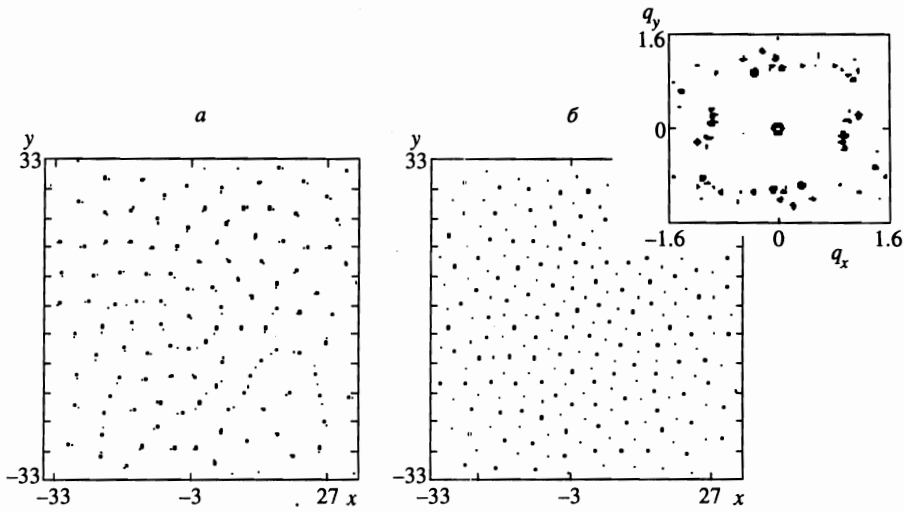
Помимо этого численное решение уравнений с простейшей структурой элементарных взаимодействий выполняется существенно быстрее, так что все процессы можно наблюдать на экране дисплея непосредственно в режиме «реального времени» для достаточно больших (порядка  $10^3$  частиц, движущихся в 3-х или 2-х измерениях) массивов данных.

При моделировании дипольных молекул отталкивательный кор на малых расстояниях должен быть промоделирован соответствующей короткодействующей поправкой в потенциал  $\Delta U(\mathbf{r}_{ij})$ . Однако при конечной температуре ( $D \neq 0$ ) из-за кулоновского вклада в энергию

$$\Delta U(\mathbf{r}_{ij}) \sim 1/r_{ij}^2, \quad (6)$$

определяющего средний масштаб минимума энергии  $r_0 \sim D$ , этот эффект возникает уже в чисто кулоновской задаче с затравочным потенциалом  $U(\mathbf{r}) \simeq -\ln(r/\lambda)$ . При заданной плотности частиц (вихрей)  $\rho \sim 1/a^2$  соотношение величин  $r_0$  и  $a$  определяет вид возникающей структуры.

Непосредственным экспериментированием можно проверить, что при достаточно интенсивном шуме (т. е. выше температуры  $T \sim D = T_{KT} \approx \min[U(\mathbf{r}_{ij}) + \Delta U(\mathbf{r}_{ij})]$ ) все вихри движутся независимо и образуют стабильные пары ниже  $T_{KT}$ , так что модель



**Рис. 1.** Фрагменты двух характерных структур, возникающих при  $T \ll T_{KT}$  и хаотическом начальном распределении вихрей: *а*) цепочки из пар вихрей ( $r_0 \ll a$ ); *б*) квазикристаллическая вихревая структура ( $r_0 \simeq a$ ). Частицы разного сорта (вихри и антивихри) изображены точками разного размера. На вставке показано распределение максимумов фурье-образа корреляционной функции

устойчиво воспроизводит известный топологический переход. Далее мы остановимся лишь на новых результатах, связанных с образованием тонкой структуры в системе при моделировании ее поведения методом молекулярной динамики и отсутствующих в огрубленной теории.

На рис. 1 показаны фрагменты двух характерных структур (содержащих по  $N = 10^3$  частиц), возникающих при  $T \ll T_{KT}$  и хаотическом начальном распределении вихрей соответственно для  $r_0 \ll a$  и  $r_0 \simeq a$ . Непосредственно наблюдаемые цепочки из пар вихрей могут быть описаны параметром

$$A = \left\{ \sum_j [1/|\mathbf{r}_{jj'}|] + \sum_i [1/|\mathbf{r}_{ii'}|] \right\} / 2 - \sum_{ij} [1/|\mathbf{r}_{ij}|], \tag{7}$$

характеризующим различие средних расстояний внутри подсистем вихрей ( $\mathbf{r}_{ii'} \in \mathbf{R}^{(+)}$ ) и антивихрей ( $\mathbf{r}_{jj'} \in \mathbf{R}^{(-)}$ ) и между ними ( $\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$ ) на малых масштабах.

Кривая для параметра  $A$  на рис. 2 показывает, что он быстро увеличивается на ранних стадиях эволюции системы (случайно распределенной в момент времени  $t = 0$ ), когда происходит быстрый процесс экранировки кулоновского взаимодействия посредством спаривания. В дальнейшем система медленно притягивается к аттрактору, на котором происходит рост корреляции пар в цепочках и объединение самих цепочек. Связанные с этим перестройки структуры приводят к временным всплескам величины  $A$ , особенно хорошо заметным для систем с относительно малым числом частиц (для наглядности на рис. 2 приведены кривые для случая  $N = 10^2$ ). Характерное расстояние

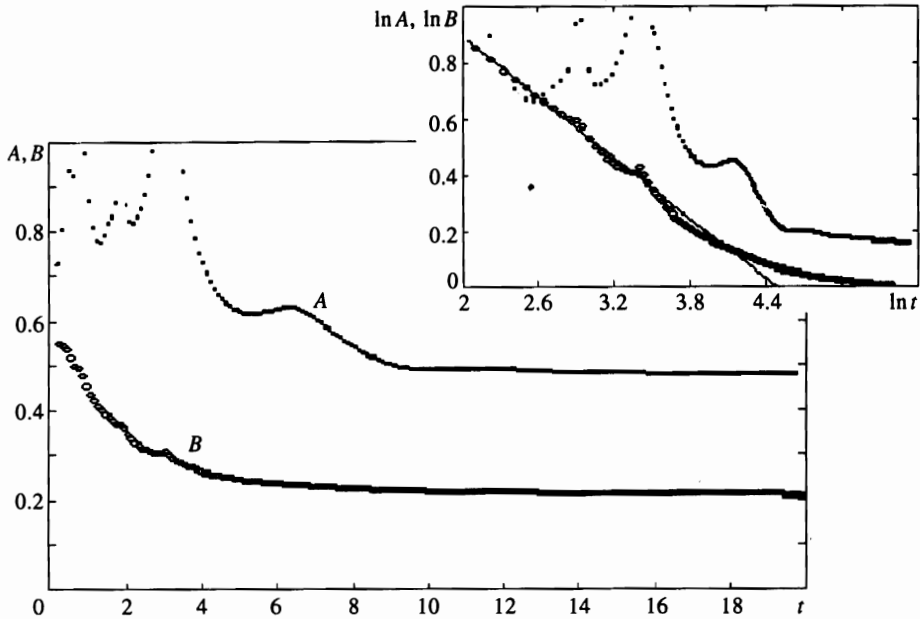


Рис. 2. Эволюция параметров  $A = \{\sum_j [1/|r_{jj'}|] + \sum_i [1/|r_{ii'}|]\}/2 - \sum_{ij} [1/|r_{ij}|]$  и  $B = \sum_k [1/|r_{kk'}|]$  со временем. На вставке приведены те же кривые в двойном логарифмическом масштабе

между вихрями обоих знаков

$$B = \sum_k [1/|r_{kk'}|], \tag{8}$$

где  $r_{kk'} \in \mathbf{R}^{(+)} \oplus \mathbf{R}^{(-)}$ , при этом изменяется более плавно и притягивается к равновесному значению по степенному закону  $|B - B_0| \propto t^{1/3}$  (см. вставку к рис. 2, выполненную в двойном логарифмическом масштабе).

При  $t_0 \approx a$  система образует вихревой (квази-)кристалл (см. вторую структуру из представленных на рис. 1), периодическая структура которого отражается в максимумах фурье-образа корреляционной функции

$$G(\mathbf{q}) = \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \exp[i(\mathbf{r}\mathbf{q})] \langle \rho(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r} + \mathbf{r}') \rangle \tag{9}$$

при отличных от нуля волновых векторах  $\mathbf{q}_j \neq 0$ . Эти нетривиальные максимумы хорошо видны на рис. 3 как на полной функции  $G(\mathbf{q})$ , вычисленной суммированием дискретной плотности по обеим подсистемам

$$\rho(\mathbf{r}) = \rho_1(\mathbf{r}) + \rho_2(\mathbf{r}) = \sum_k \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_k) \quad (\mathbf{r}_k \in \mathbf{R}^{(+)} \oplus \mathbf{R}^{(-)}), \tag{10}$$

так и на парциальных формфакторах

$$S_{1,2}(\mathbf{q}) = \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \exp[i(\mathbf{r}\mathbf{q})] [\langle \rho_{1,2}(\mathbf{r})\rho_{1,2}(\mathbf{r} + \mathbf{r}') \rangle - |\langle \rho_{1,2}(\mathbf{r}) \rangle|^2], \tag{11}$$

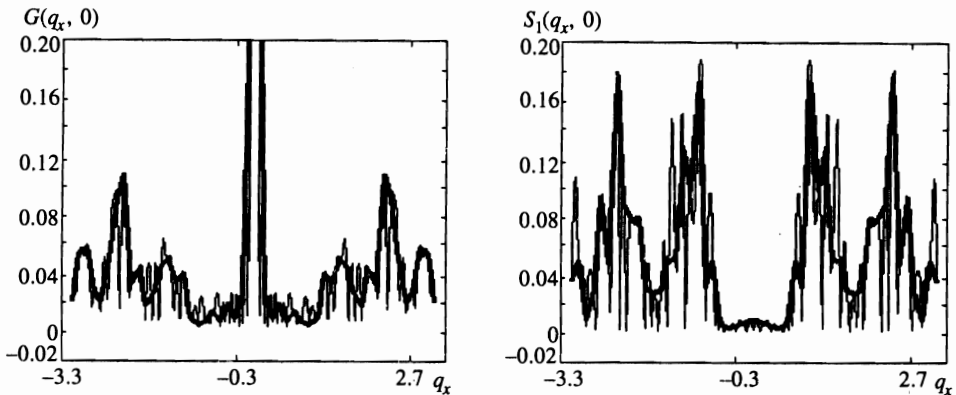


Рис. 3. Фурье-образы (тонкие линии): а) полной корреляционной функции  $G(\mathbf{q}) = \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \exp[i(\mathbf{r}\mathbf{q})] \langle \rho(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r} + \mathbf{r}') \rangle \neq 0$ , вычисленной суммированием дискретной плотности по обеим подсистемам  $\rho(\mathbf{r}) = \rho_1(\mathbf{r}) + \rho_2(\mathbf{r}) = \sum_k \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_k)$ ; б) частичного формфактора  $S_1(\mathbf{q}) = \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \exp[i(\mathbf{r}\mathbf{q})] \langle [\rho_1(\mathbf{r})\rho_1(\mathbf{r} + \mathbf{r}')] - |\rho_1(\mathbf{r})|^2 \rangle$ , вычисленного по одной из них в отдельности. Жирной линией показаны те же величины, усредненные по 10 соседним волновым векторам

вычисленных по каждой из них в отдельности. На рис. 3 в качестве примера приведено сечение одного из них  $S_1(\mathbf{q})$  вдоль направления  $q_y = 0$ , нормированное на ту же величину, что и  $G(\mathbf{q})$ , для удобства сравнения с корреляционной функцией.

Визуально распределение вихрей на плоскости  $(x, y)$  напоминает решетку шестого порядка, однако типичное распределение максимумов  $G(\mathbf{q})$  на плоскости  $(q_x, q_y)$ , показанное на вставке к рис. 1, имеет, скорее, симметрию близкую к ромбической. Периодичность имеет место лишь в среднем. Максимумы функций  $G(\mathbf{q})$  и  $S_{1,2}(\mathbf{q})$  распределены фрактально, так что периоды хорошо выражены лишь для сглаженных величин  $\bar{G}(\mathbf{q})$  и  $\bar{S}_{1,2}(\mathbf{q})$  (жирные линии на рис. 2).

Возникающая в динамике структура состоит, как правило, из множества по-разному повернутых ромбов. Причем визуально в ней можно обнаружить локальные оси 6-го, 5-го и 4-го порядков, что делает структуру похожей, скорее, на двумерный квазикристалл [22–24], чем на просто «слегка расплавленный» кристалл. В этом можно убедиться, построив функцию распределения углов для пар векторов, связывающих каждый узел структуры с двумя ближайшими соседями, которая имеет хорошо выраженные максимумы при соответствующих углах (вместо единственного сглаженного максимума при  $\pi/6$ ).

В свободном пространстве конечное количество частиц (вихрей) одного знака, стабилизируемое суммарным полем частиц противоположного знака, образует пятно, составленное из фрагментов ромбической решетки и скоррелированных с ними цепочек. Наблюдаемая в динамике картина близка к обнаруженной недавно упорядоченной структуре, образующейся в положительном столбе тлеющего разряда в Ne [25]. Кулоновский квазикристалл был образован заряженными сферическими стеклянными частицами в условиях, близких к постановке описанных здесь численных экспериментов. Для моделирования данного процесса этот эксперимент может быть даже несколько упрощен заменой коллективного поля одной из подсистем внешним потенциалом.

Само по себе появление вихревых цепочек в упорядоченном состоянии не является новым фактом. Так, например, вихревые цепочки были исследованы в работе [26], где была изучена магнитная структура вихрей в сверхпроводниках с одноосной анизотропией. Было описано явление инверсии магнитного поля, связанное с тем, что в некоторых направлениях анизотропного кристалла магнитное поле направлено противоположно суммарному магнитному потоку вихрей. Благодаря этому, вихри притягиваются друг к другу и образуют цепочки, ориентированные вдоль оси симметрии кристалла. Это явление оказалось особенно актуальным после обнаружения сильно анизотропных высокотемпературных сверхпроводников [27, 28], где такие цепочки оказались реально наблюдаемыми.

Следует отметить, что многокомпонентность параметра порядка в новых сверхпроводниках, системах с тяжелыми фермионами и других сверхтекучих системах сама по себе может служить причиной появления цепочек вихрей [29–32]. В этом случае в параметре порядка формируются низкоразмерные области (каналы) с пониженным суммарным модулем. Сингулярные вихри (содержащие прокол модуля параметра порядка до нуля) тяготеют к этим областям и упорядочиваются внутри них в вихревые цепочки. Как было недавно показано разными авторами, это явление должно иметь место как в сверхтекучих [29–31], так и в сверхпроводящих [32] системах.

Метод молекулярной динамики имеет определенные ограничения, которые могут оказаться существенными при его применении к описанию реальных систем. Обнаруженные в рамках этого подхода явления могут быть связаны, в принципе, с такими особенностями метода как, например, фиксация числа вихрей или конкретный вид взаимодействия. Обойти эти трудности сейчас не представляется возможным. Однако можно попытаться получить схожие эффекты в рамках других подходов, рассматривая их как косвенное подтверждение правильности результатов молекулярной динамики.

Традиционно, в том числе и в упомянутых работах [29–32], формирование структур, образованных взаимодействующими вихрями, численно исследовалось в рамках кинетической теории, основанной на использовании зависящей от времени модели Гинзбурга–Ландау (ЗВМГЛ) [33]. В своей калибровочно-инвариантной форме эта модель основана на анализе системы нескольких взаимодействующих флуктуирующих полей (компонент параметра порядка  $\varphi_j$  и вектор-потенциала  $\mathbf{A}$ ) при учете шума и релаксации [34–37]. Градиентное разложение в этом подходе сводит проблему к системе локальных уравнений, которые могут быть записаны с помощью вещественных компонент комплексного параметра порядка

$$\Psi = [\varphi_1, i\varphi_2]$$

в следующем виде:

$$\begin{aligned} \gamma_1^{-1} \partial \varphi_1 / \partial t &= \Delta \varphi_1 + g(2\mathbf{A} \nabla \varphi_2 + \varphi_2 \nabla \mathbf{A}) - \varphi_1 [(\tau + g^2 A^2) + \beta(\varphi_1^2 + \varphi_2^2)] + \xi_1(\mathbf{r}, t), \\ \gamma_2^{-1} \partial \varphi_2 / \partial t &= \Delta \varphi_2 - g(2\mathbf{A} \nabla \varphi_1 + \varphi_1 \nabla \mathbf{A}) - \varphi_2 [(\tau + g^2 A^2) + \beta(\varphi_1^2 + \varphi_2^2)] + \xi_2(\mathbf{r}, t), \\ \gamma_3^{-1} \partial \mathbf{A} / \partial t &= \theta[\Delta \mathbf{A} - \mathbf{A} \nabla \mathbf{A}] - g(\varphi_1 \nabla \varphi_2 - \varphi_2 \nabla \varphi_1) - g^2 \mathbf{A}(\varphi_1^2 + \varphi_2^2) + \xi_3(\mathbf{r}, t). \end{aligned} \quad (12)$$

Все поля предполагаются флуктуирующими независимо, так что

$$\langle \xi_j(\mathbf{r}, t) \rangle = 0, \quad \langle \xi_j(\mathbf{r}, t) \xi_k(\mathbf{r}', t') \rangle = \delta_{jk} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t'). \quad (13)$$

В дискретной версии уравнений ЗВМГЛ реально учитываются взаимодействия лишь нескольких ближайших соседей. Такое огрубление описания понижает количество вычислительных операций (делая его пропорциональным числу элементов массива) и позволяет относительно быстро воспроизвести упорядочение системы с большим числом вихрей. В то же время оно стирает информацию о реальном дальнем действии в системе, учет которого приводит, как минимум, к существенно нелокальной добавке к квадратичной части производящего функционала ЗВМГЛ

$$\delta \mathcal{F}[\varphi] = \sum_j \int dr' dr'' \varphi_j(\mathbf{r}') \Lambda(\mathbf{r}' - \mathbf{r}'') \varphi_j(\mathbf{r}''), \quad (14)$$

с логарифмическим ядром

$$\Lambda(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) \propto \ln |\mathbf{r}' - \mathbf{r}|, \quad (15)$$

при которой, вообще говоря, следует учитывать взаимодействие всех точек массива друг с другом, что сводит на нет вычислительные преимущества метода.

Однако, учитывая сопоставление результатов, получаемых методами молекулярной динамики и кинетики, интересно получить свидетельства существования обнаруженных выше цепочек хотя бы в локальном подходе. Как отмечено ранее в работах [36, 38, 39], простейшей топологической причиной возникновения вихрей в рамках ЗВМГЛ является пересечение линий нулей различных компонент параметра порядка. Эффект генерации калибровочного магнитного поля током

$$\gamma_3^1 \partial \mathbf{A} / \partial t = -g(\varphi_1 \nabla \varphi_2 - \varphi_2 \nabla \varphi_1) + \dots$$

проявляется на относительно поздних этапах кинетики в качестве вклада в их взаимодействие. Это означает, что в кинетическом подходе вихревые цепочки должны появляться уже в простейшей нетривиальной версии модели:

$$\begin{aligned} \gamma_1^{-1} \partial \varphi_1 / \partial t &= \Delta \varphi_1 - \varphi_1 [\tau + \beta(\varphi_1^2 + \varphi_2^2)] + \xi_1(\mathbf{r}, t), \\ \gamma_2^{-1} \partial \varphi_2 / \partial t &= \Delta \varphi_2 - \varphi_2 [\tau + \beta(\varphi_1^2 + \varphi_2^2)] + \xi_2(\mathbf{r}, t). \end{aligned} \quad (16)$$

С формальной точки зрения мы имеем здесь дело с двумя параметрами порядка, взаимодействие которых

$$\delta \mathcal{F}_{int}[\varphi] = \beta \int d\mathbf{r} \varphi_1^2(\mathbf{r}) \varphi_2^2(\mathbf{r}) / 2 \quad (17)$$

таково, что большая флуктуация одного из полей в данной точке пространства препятствует упорядочению другого. Их упорядоченные домены растут вдоль границ друг друга и сколь угодно малого (флуктуационного) локального нарушения симметрии в данной мезоскопической области пространства достаточно для формирования цепочки доменов одного из полей вдоль длинной границы другого поля.

Вихревая структура такого упорядочения может быть описана ротором тока  $\mathbf{J} = g(\varphi_1 \nabla \varphi_2 - \varphi_2 \nabla \varphi_1)$ , т. е. для двумерной задачи — следующей комбинацией компонент параметра порядка:

$$\text{rot } \mathbf{J} = 2g \left( \frac{\partial \varphi_1}{\partial y} \frac{\partial \varphi_2}{\partial x} - \frac{\partial \varphi_2}{\partial y} \frac{\partial \varphi_1}{\partial x} \right). \quad (18)$$



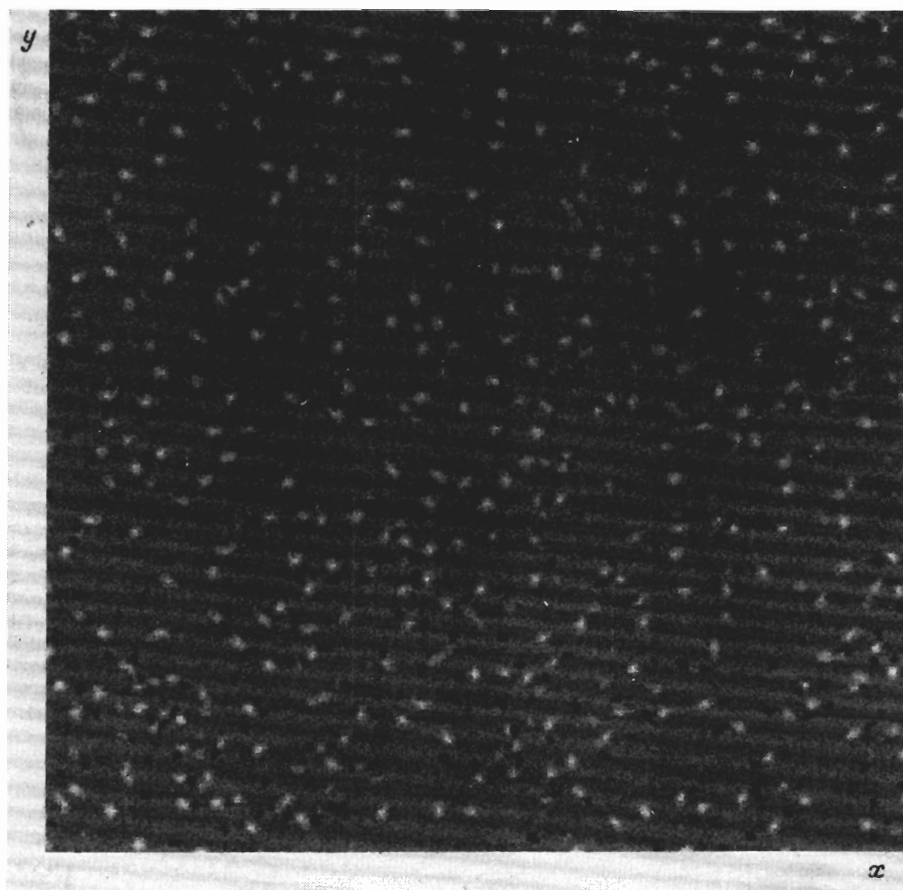


Рис. 4. Вихревая структура в зависящей от времени модели Гинзбурга–Ландау. Серым цветом разной интенсивности показано распределение плотности (18) для типичного этапа эволюции флуктуирующей двухкомпонентной системы

На рис. 4 серым цветом разной интенсивности эта комбинация показана для типичного этапа эволюции флуктуирующей двухкомпонентной системы. Цепочки вихрей и антивихрей видны непосредственно.

Рисунок 5 иллюстрирует взаимосвязь между этими цепочками и величиной  $M = |\varphi_2 \varphi_1|$ , интегрально отражающей как пересечения линий нулей, так и локализацию областей, где эти компоненты одновременно отличны от нуля и, следовательно, их вклад в ток не мал.

### 3. ЗАПОМИНАНИЕ ЦЕПОЧЕК ПРИ ФАЗОВОЙ СЕПАРАЦИИ

Математически исследованная выше задача есть частный случай фазовой сепарации. Дальнейший кинетический сценарий ее состоит в росте крупных доменов и исчезновении малых [34, 35]. Этот процесс сопровождается слиянием точек пересечения

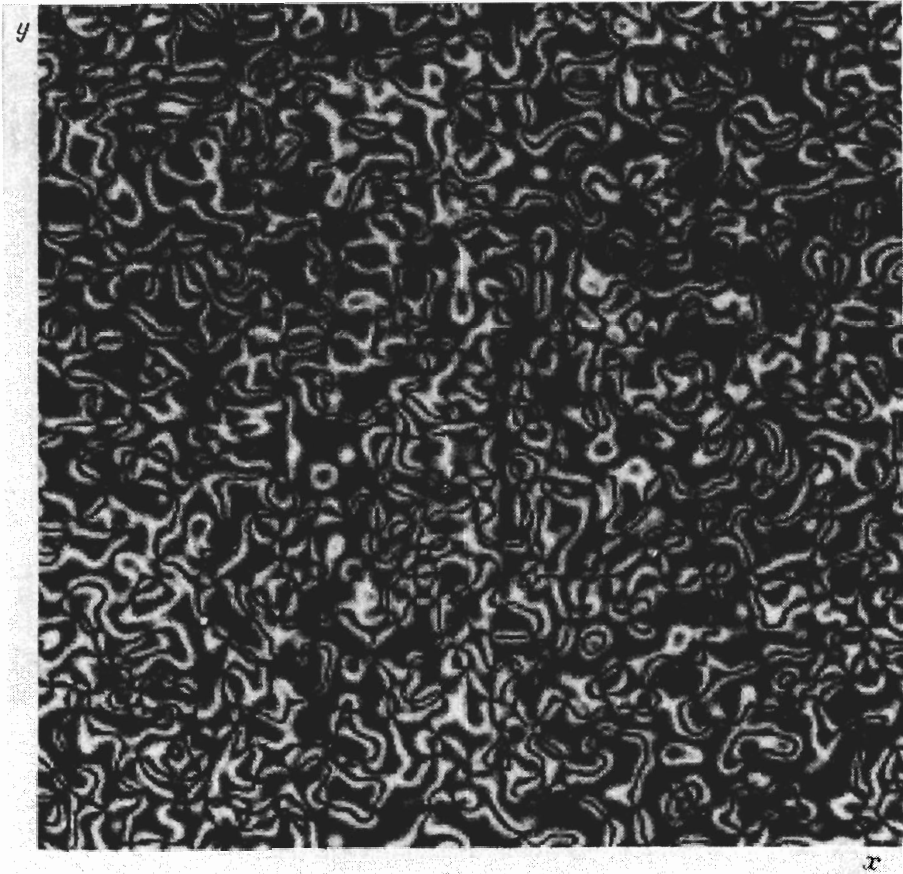


Рис. 5. Взаимосвязь между цепочками вихрей на рис. 4 и величиной  $M = |\varphi_2\varphi_1|$

нулей. Вихри и антивихри «притягиваются и аннигилируют». Если суммарный ротор не равен нулю, то флуктуационно возникающие «антивихри» подавляются и остается система вихрей заданной плотности и одного знака. Это, в частности, имеет место для сверхпроводника во внешнем магнитном поле [38]. При наличии пиннинга вихри остаются локализованными вблизи мест своего формирования в составе цепочек.

По сути мы имеем здесь дело со взаимным перекрытием крупномасштабных свойств флуктуирующих полей [37], порождающих низкоразмерные структуры из складок плотности, и локализованных топологических возбуждений в многокомпонентных системах различной природы (см. также работу [40] и ссылки в ней). Следовательно, кинетическое запоминание низкоразмерных образований, в том числе и вихревых цепочек, должно быть достаточно универсальным явлением для такого рода систем. Так, например, недавно Богдановым и Хубертом [40, 41] было показано, что наряду с одномерными структурами параметра порядка в системах с взаимодействием Дзялошинского–

Мория

$$W_D = \mathbf{J}_j \partial \mathbf{J}_k / \partial \mathbf{r} - \mathbf{J}_k \partial \mathbf{J}_j / \partial \mathbf{r} \quad (19)$$

возможно формирование двумерных структур вихревого типа. Однако в работах [40, 41] предполагалось, что магнитные вихри формируют правильную гексагональную решетку. Как было показано затем в работе [42], такая структура не возникает спонтанно при упорядочении из парафазы, а может быть стимулирована лишь специальным образом организованным кинетическим сценарием. Континуальное описание при этом может быть выполнено на базе уравнения

$$\partial \mathbf{m} / \partial t = \alpha \Delta \mathbf{m} - \beta \operatorname{rot}(\mathbf{m}) + \mathbf{h} - \delta \Phi[\mathbf{m}] / \delta \mathbf{m} + \xi(\mathbf{r}, t), \quad (20)$$

где трехкомпонентный вектор  $\mathbf{m} = \{m_x, m_y, m_z\}$  может принимать произвольные значения в процессе упорядочения, а фиксация модуля  $m^2 = 1$  обеспечивается подходящим выбором локальной части функционала свободной энергии  $\delta \Phi[\mathbf{m}]$ . При численных экспериментах с такой системой действительно удается получить фрагменты плотно упакованной гексагональной структуры вихрей и корреляционной функцией с осью шестого порядка [42]. Однако формируемая системой крупномасштабная структура, как правило, содержит также большое количество цепочек. На рис. 6 показан фрагмент типичной вихревой структуры, который удается получить с помощью механизма, описанного в работе [42]. Хорошо видны как фрагменты компактной структуры, близкой к гексагональной, так и многочисленные цепочки вихрей, разделенные пустотами, возникшие в результате «запоминания» кинетического этапа эволюции. Несколько этапов процесса «запоминания» показаны на рис. 7. Легко видеть, что на флуктуационном этапе (когда энергии областей с противоположным  $m_z$  близки) области с  $m_z > 0$ , предшествующие цилиндрическим вихрям данного знака, захватываются вдоль доменных границ пространства с  $m_z < 0$ . Энергия возникающей позже вихревой структуры мало отличается от энергии правильной решетки, тогда как добавление новых топологических возбуждений требует преодоления большого барьера.

Такой сценарий замораживания цепочек совпадает с описанным в работах [43, 44] механизмом возникновения «виртуальных фаз». На раннем этапе система быстро уравнивает различные нелокальные вклады в энергию. При этом нарастающий во времени корреляционный радиус  $\zeta(t) \rightarrow \infty$  последовательно достигает масштаба убывания различных взаимодействий, что и определяет пространственные структуры. В данном случае — это поверхностная энергия доменов  $\Xi = \alpha (\nabla \mathbf{m})^2 / 2$  и дальнедействующая энергия Дзялошинского–Мория  $W_D = \beta \mathbf{m} \operatorname{rot}(\mathbf{m})$ . Дальнейший процесс идет логарифмически медленно и останавливается любым проявлением неидеальности (в численном счете достаточно граничных условий).

Конкуренции взаимодействий разного радиуса может быть достаточно для порождения эффективной многокомпонентности (как, например, в системе с конкурирующими ферро- и антиферромагнитным взаимодействиями [45]). Так что цепочки одних доменов на границах других можно наблюдать при любом числе флуктуирующих полей и даже для одного скалярного поля. Для скалярной плотности  $\phi(\mathbf{r})$  суть процесса проявляется даже в более чистом виде. На рис. 8 в качестве примера показаны два этапа запоминания таких структур в скалярной магнитной системе, нелокальная часть

$$\delta \mathcal{F}[\phi(\mathbf{r})] = \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' \phi(\mathbf{r}) \Lambda(\mathbf{r}' - \mathbf{r}'') \phi(\mathbf{r}') / 2 =$$

$$= \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' \phi(\mathbf{r}) \Lambda_a(\mathbf{r}' - \mathbf{r}'') \phi(\mathbf{r}') / 2 + \int d\mathbf{r} (\nabla \phi(\mathbf{r}))^2 / 2 \tag{21}$$

функционала свободной энергии

$$\mathcal{F}[\phi(\mathbf{r})] = \int d\mathbf{r} \left[ \int d\mathbf{r}' \phi(\mathbf{r}) \Lambda(\mathbf{r}' - \mathbf{r}'') \phi(\mathbf{r}') / 2 + \tau \phi^2(\mathbf{r}) / 2 + b \phi^4(\mathbf{r}) / 4 \right] \tag{22}$$

которой содержит близкие по энергии ферромагнитный

$$\delta \mathcal{F}_{ferro}[\phi(\mathbf{r})] = \int d\mathbf{r} (\nabla \phi(\mathbf{r}))^2 / 2$$

и антиферромагнитный

$$\delta \mathcal{F}_{anti}[\phi(\mathbf{r})] = \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' \phi(\mathbf{r}) \Lambda_a(\mathbf{r}' - \mathbf{r}'') \phi(\mathbf{r}') / 2$$

вклады ( $\delta \mathcal{F}_{ferro}[\phi(\mathbf{r})] \geq \delta \mathcal{F}_{anti}[\phi(\mathbf{r})]$ ). По мере роста  $\zeta(t) \rightarrow \infty$  в кинетике антиферромагнитные домены возникают раньше и локализуют более выгодные однородные домены в области границ. В случае близких энергий  $\delta \mathcal{F}_{ferro}[\phi(\mathbf{r})] \simeq \delta \mathcal{F}_{anti}[\phi(\mathbf{r})]$  (показанном на рис. 8) эта «виртуальная фаза» [43, 44] стабилизируется.

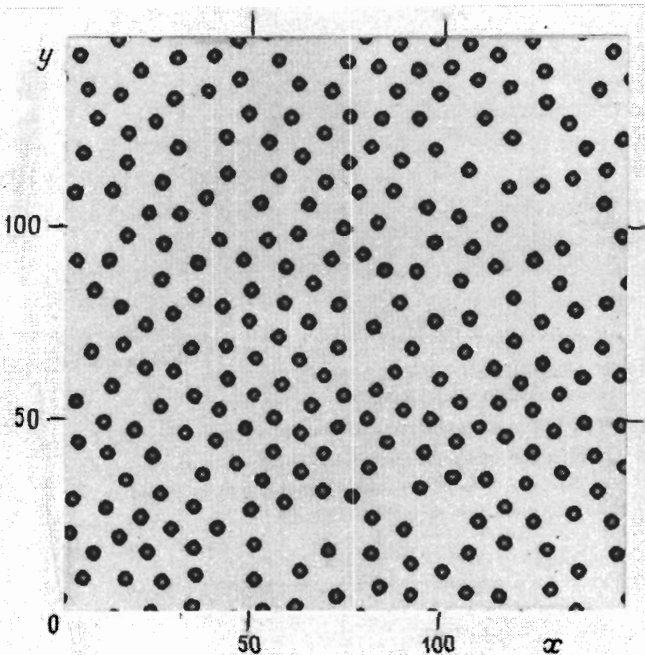


Рис. 6. Фрагмент типичной вихревой структуры, полученной с помощью метода, описанного в работе [42] на базе уравнения  $\partial \mathbf{m} / \partial t = \alpha \Delta \mathbf{m} - \beta \text{rot}(\mathbf{m}) + \mathbf{h} - \delta \Phi[\mathbf{m}] / \delta \mathbf{m} + \xi(\mathbf{r}, t)$

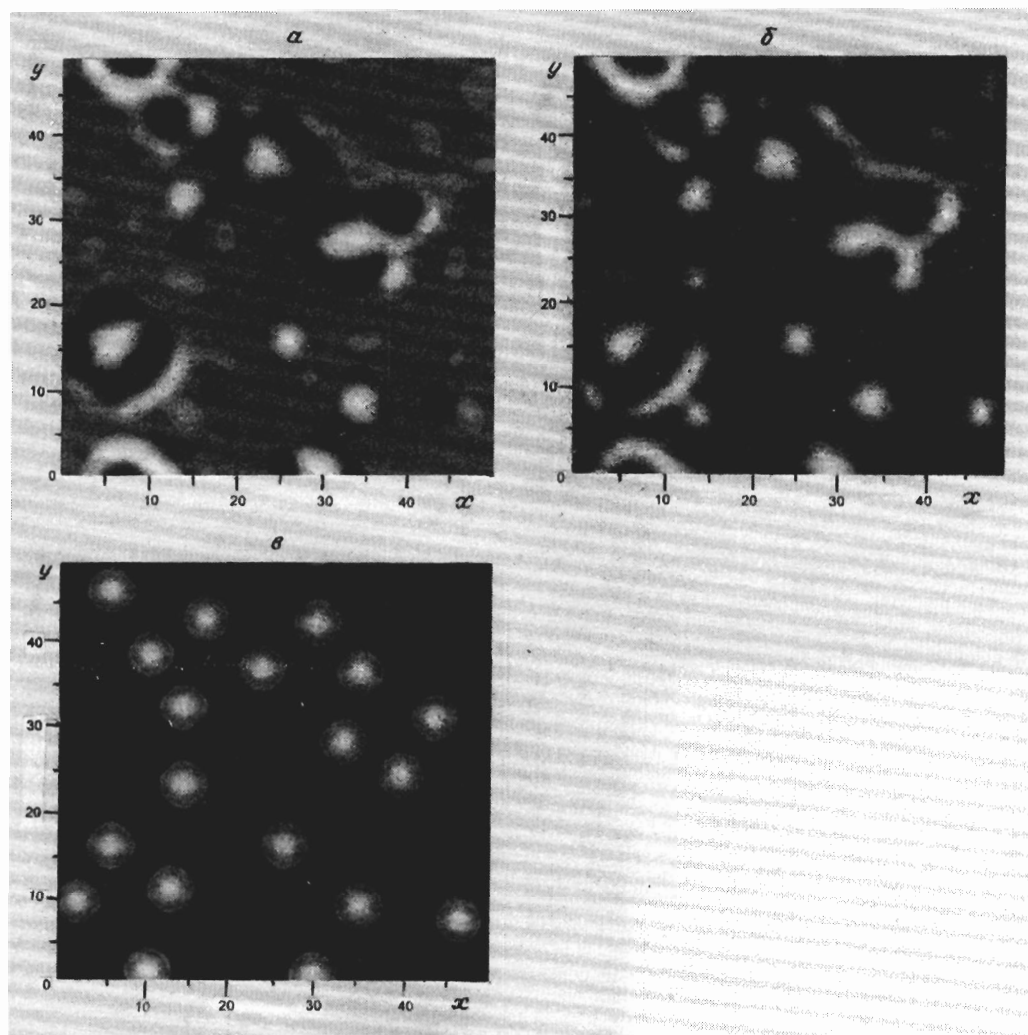


Рис. 7. Процесс генерации вихревой цепочки для структуры, показанной на рис. 6

В работах [1–3] аналогичные процессы наблюдались и в рамках молекулярной динамики при фазовой сепарации. Для сохраняющихся средних плотностей этот подход даже более адекватен, так как не требует искусственного баланса потоков. Работы [1–3] были направлены в основном на воспроизведение известного из аналитики скейлинга роста среднего радиуса ( $\langle R(t) \rangle \rightarrow \infty$  при  $t \rightarrow \infty$ ) доменов при фазовой сепарации. Вместе с тем метод позволяет обнаружить более тонкие эффекты.

Здесь мы приведем кратко лишь один такой эффект, интересный в контексте настоящей работы: упорядочение подсистем в самосогласованном поле друг друга с образованием кристаллической решетки. На рис. 9 показан промежуточный этап процесса сепарации (подробнее о постановке задачи см. [1–3]). Хорошо видны «усы», свя-

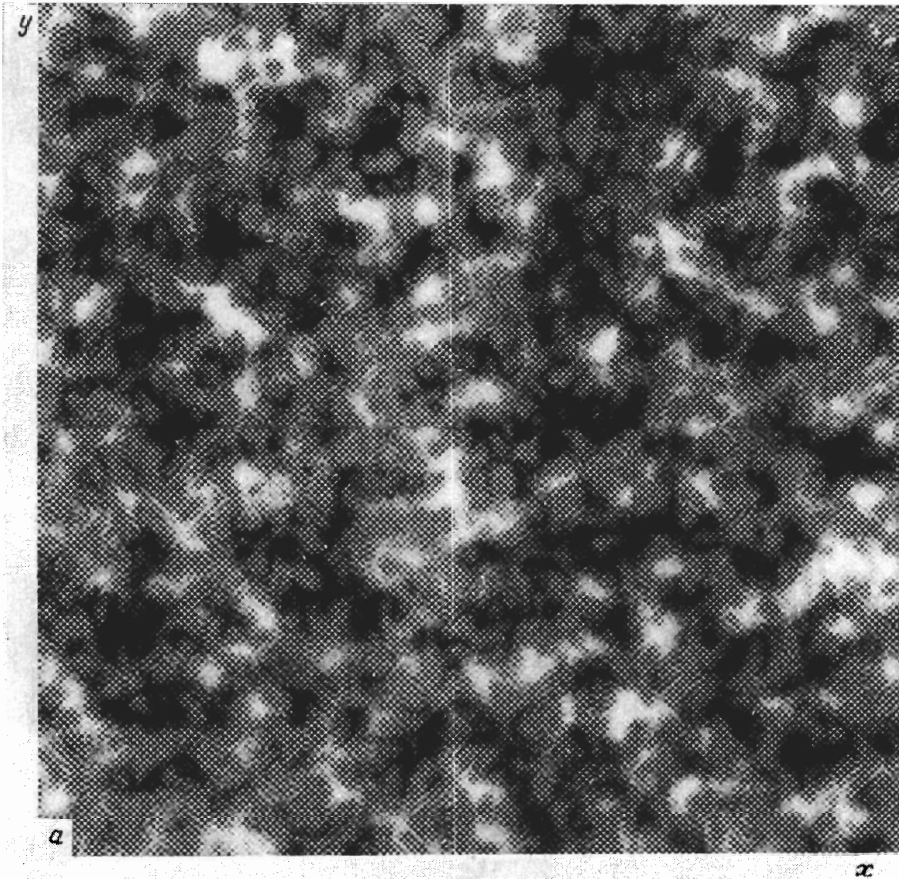


Рис. 8а. Первый этап запоминания «виртуальной фазы» в скалярной системе

зываются домены одного типа в области границ доменов другой подсистемы. Внутри них видны уже сформированные фрагменты решеток. На вставке к рис. 9 приведены фурье-образ полной корреляционной функции, вычисленный по всем частицам  $G_{tot}(\mathbf{q}) = \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \exp[i(\mathbf{r}\mathbf{q})] \langle \rho(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r}+\mathbf{r}') \rangle$ , и парциальная корреляционная функция одной из подсистем  $G_1(\mathbf{q})$  (соответственно тонкая и жирная линии). Помимо общих для обеих функций максимумов при малых  $\mathbf{q} = \mathbf{q}_{0j} \neq 0$ , соответствующих доменам большого масштаба в реальном пространстве, на кривой  $G_1(\mathbf{q})$  видны также дополнительные максимумы при больших  $\mathbf{q} = \mathbf{q}_{1j} \neq 0$ , соответствующие формирующейся внутри доменов тонкой структуре. При короткодействии различные подсистемы можно рассматривать в форме граничных условий друг для друга. Однако, строго говоря, как и при описанном выше упорядочении системы (анти-)вихрей, кристаллизация каждой из них происходит в среднем поле другой.

Одним из перспективных приложений прямого моделирования разделения фаз в динамических системах может быть интенсивно обсуждаемый в последнее время эф-

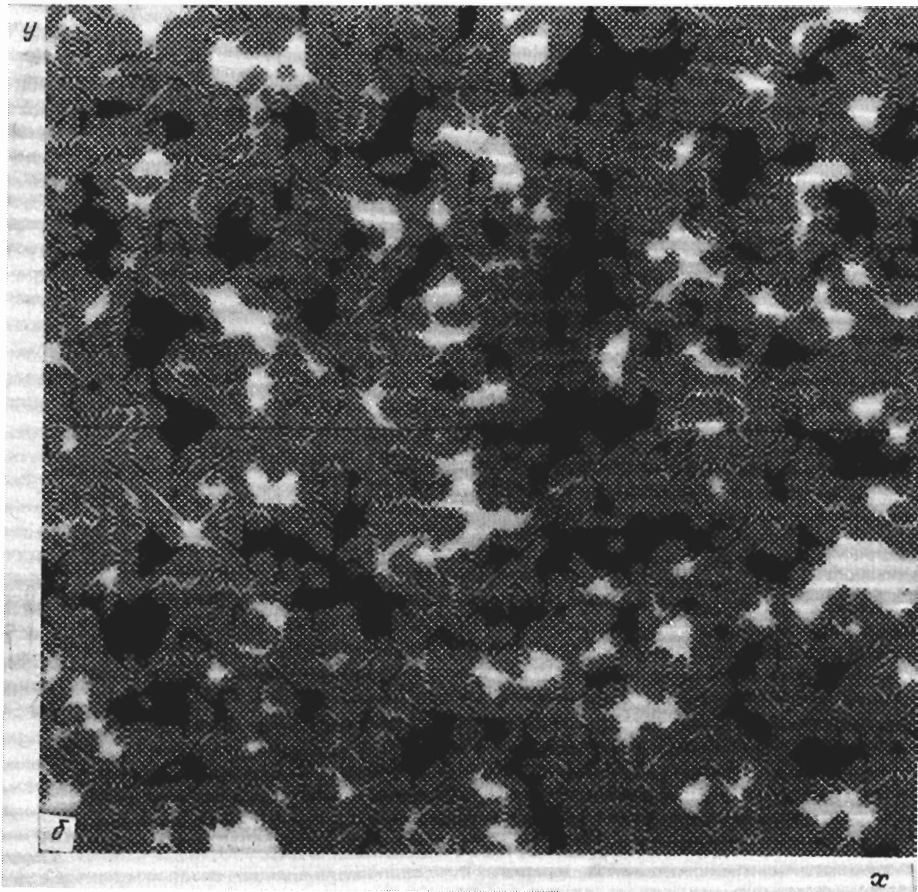


Рис. 86. Второй этап запоминания «виртуальной фазы» в скалярной системе

фekt гигантского магнитосопротивления в манганитах лантана и других магнитных проводниках. Ряд экспериментальных данных [46] свидетельствует, что состояние этих материалов с ненасыщенным спонтанным магнитным моментом есть двухфазное ферро-антиферромагнитное. Причем вероятным механизмом разделения фаз является электронный. Более выгодное ферромагнитное состояние здесь возможно лишь начиная с достаточной концентрации носителей. Если она недостаточна, то все носители могут собраться в локализованных «ферромагнитных каплях». Магнитное поле способствует переходу всего кристалла в ферромагнитное состояние, в результате чего наступает перколяция областей такого упорядочения, с чем, как предполагают [46], и связано гигантское магнитосопротивление.

В работе [47] была рассмотрена феноменологическая модель магнитнеоднoфазного состояния и было, в частности, констатировано, что макроскопическое описание применимо в том случае, когда доля ферромагнитной фазы в антиферромагнитной матрице мала. В общем случае в явном виде получить выражения для проводимости не удаст-

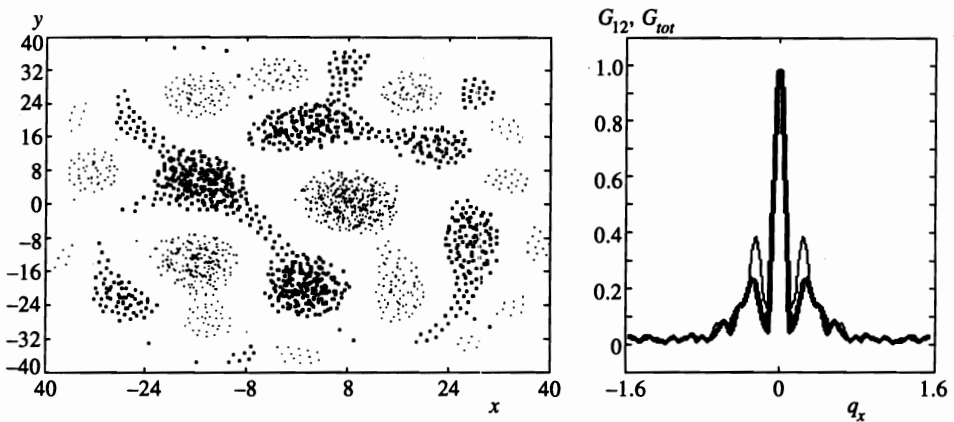


Рис. 9. Промежуточный этап фазовой сепарации в молекулярной динамике. Частицы разного сорта показаны точками разного размера

ся, хотя физика явления сохраняется, и, следовательно, описанный эффект протекания электронов в магнитном поле можно воспроизвести прямым численным моделированием.

## Литература

1. E. Velasco and S. Toxyaerd, Phys. Rev. Lett. **71**, 388 (1993).
2. F. J. Alexander, S. Chen, and D. W. Grunau, Phys. Rev. B **48**, 634 (1993).
3. G. Leptoukh, B. Strickland, and C. Roland, Phys. Rev. Lett. **74**, 3636 (1995).
4. S. Bastea and J. L. Lebowitz, Phys. Rev. Lett. **75**, 3776 (1995).
5. D. Wei and G. N. Patey, Phys. Rev. Lett. **68**, 2043 (1992).
6. J. J. Weis and Levesque, Phys. Rev. Lett. **71**, 2729 (1993).
7. J. Ayton, M. I. P. Gingras, and G. N. Patey, Phys. Rev. Lett. **75**, 2360 (1995).
8. I. M. Svishchev and P. G. Kusalik, Phys. Rev. Lett. **73**, 975 (1994).
9. I. M. Svishchev and P. G. Kusalik, Phys. Rev. Lett. **75**, 3289 (1995).
10. N. Kukharkin, S. A. Orszag, and V. Yakhot, Phys. Rev. Lett. **75**, 2486 (1995).
11. L. M. Smith and V. Yakhot, Phys. Rev. Lett. **71**, 352 (1993).
12. K. S. Fine et al., Phys. Rev. Lett. **75**, 3277 (1995).
13. В. Л. Березинский, ЖЭТФ **59**, 907 (1970); ЖЭТФ **60**, 1144 (1971).
14. J. M. Kosterlitz and D. J. Thouless, J. Phys. C: Solid State Phys. **6**, 1181 (1973).
15. J. M. Kosterlitz, J. Phys. C: Solid State Phys. **7**, 1046 (1974).
16. P. Minnhagen, Rev. Mod. Phys. **59**, 1001 (1987).
17. N. D. Mermin and H. Wagner, Phys. Rev. Lett. **17**, 1133 (1966).
18. P. C. Hohenberg, Phys. Rev. B **158**, 383 (1967).
19. V. Ambegaokar et al., Phys. Rev. B. **19**, 1806 (1980).
20. S. A. Trugman and S. Doniach, Phys. Rev. B **26**, 3682 (1982).
21. B. Groh and S. Dietrich, Phys. Rev. Lett. **72**, 2422 (1994).
22. D. Shechtman et al., Phys. Rev. Lett. **53**, 1951 (1984).
23. П. А. Калугин, А. Ю. Китаев, Л. С. Левитов, Письма в ЖЭТФ **41**, 119 (1985).
24. Д. В. Оленев, Ю. Х. Векилов, Письма в ЖЭТФ **64**, 559 (1996).



25. В. Е. Форгов, А. П. Нефедов, В. М. Торчинский, В. Н. Молотков, А. Г. Храмак, О. Ф. Петров, К. Ф. Вольхин, Письма в ЖЭТФ **64**, 86 (1996).
26. А. М. Гришин, А. Ю. Мартынович, С. В. Ямпольский, ЖЭТФ **101**, 649 (1992).
27. L. A. Gurevich et al., Physica C **195**, 323 (1992).
28. I. V. Grigorieva, L. A. Gurevich, and L. Ya. Vinnikov, Physica C **195**, 327 (1992).
29. U. Parts et al., Phys. Rev. Lett. **72**, 3839 (1994).
30. M. Heinila and G. E. Volovik, Physika B **210**, 300 (1995).
31. T. Sh. Misirpashaev and G. E. Volovik, Physika B **210**, 338 (1995).
32. A. E. Filippov, A. V. Radievsky, and A. S. Zeltser, Phys. Rev. B **54**, 3504 (1996).
33. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Статистическая физика*, Наука, Москва (1988).
34. T. M. Rogers, K. R. Elder, and R. C. Desai, Phys. Rev. B **37**, 9638 (1988).
35. K. R. Elder and R. C. Desai, Phys. Rev. B **40**, 243 (1989).
36. А. С. Зельцер, А. Э. Филиппов, ЖЭТФ **106**, 1117 (1994).
37. А. С. Зельцер, А. Э. Филиппов, Письма в ЖЭТФ **62**, 604 (1995).
38. A. E. Filippov, A. V. Radievsky, and A. S. Zeltser, Phys. Lett. A **192**, 131 (1994).
39. N. Shvartsman and I. Freud, Phys. Rev. Lett. **72**, 1008 (1994).
40. А. Богданов, Письма в ЖЭТФ **62**, 231 (1995).
41. A. Bogdanov and A. Hubert, JMMM **138**, 255 (1994).
42. А. Э. Филиппов, ЖЭТФ **111**, 1775 (1997).
43. S. Semenovskaya and A. G. Khachatryan, Phys. Rev. Lett. **67**, 2223 (1991).
44. Long-Qing Chen and A. G. Khachatryan, Phys. Rev. B **46**, 5899 (1992).
45. Ю. М. Иванченко, А. А. Лисянский, А. Э. Филиппов, ЖЭТФ **87**, 1019 (1984).
46. Э. Л. Нагаев, УФН **166**, 833 (1996).
47. В. Н. Криворучко, ФНТ **22**, 1047 (1996).