

ОРИЕНТАЦИОННЫЙ ПОРЯДОК И ФОРМИРОВАНИЕ ТОПОЛОГИЧЕСКИХ ДЕФЕКТОВ В ДВУМЕРНЫХ СИСТЕМАХ

*Е. В. Васильева**, *О. С. Ваулина***

*Объединенный институт высоких температур Российской академии наук
127412, Москва, Россия*

*Московский физико-технический институт
141700, Долгопрудный, Московская обл., Россия*

Поступила в редакцию 25 декабря 2012 г.

Представлены результаты численного моделирования динамики формирования топологических дефектов и ориентационного порядка в неидеальных системах частиц, взаимодействующих с экранированным кулоновским потенциалом. Расчеты выполнялись в широком диапазоне параметров, соответствующих условиям экспериментов в лабораторной пылевой плазме. Получено соотношение между количеством дефектов, формой ориентационной корреляционной функции и параметром неидеальности системы. Предложены новые аппроксимации для ориентационной корреляционной функции в жидкостной и гексатической фазах анализируемых структур.

DOI: 10.7868/S0044451013070201

1. ВВЕДЕНИЕ

Структурные свойства неидеальных сред отражают их тип симметрии, фазовое состояние и условия фазовых превращений. Исследования таких свойств представляют значительный интерес с фундаментальной точки зрения и являются предметом интенсивных теоретических и экспериментальных исследований в различных областях физики [1–6]. Особое внимание уделяется двумерным системам. Одной из причин данного обстоятельства является возможность непосредственной экспериментальной проверки существующих аналитических и численных результатов, например, в экспериментах с монослойными пылевыми структурами в плазме емкостного высокочастотного (ВЧ) разряда [5, 6]. Помимо фундаментальных аспектов, исследования структурных свойств двумерных неидеальных систем представляют особый прикладной интерес в области нано- и микротехнологий, а также при разработке покрытий и материалов с заданными свойствами [5, 6].

Для количественного и качественного анализа

фазового состояния системы обычно используют парные, $g(r)$, и ориентационные, $g_6(r)$, корреляционные функции, а также результаты изучения динамики формирования различных топологических дефектов [4–9]. Напомним, что парная функция $g(r)$ определяет вероятность нахождения двух частиц на некотором расстоянии r друг от друга и является мерой трансляционного порядка в системе взаимодействующих частиц, при этом в случае идеальных газов $g(r) \rightarrow 1$. Ориентационная функция $g_6(r)$ является мерой ориентационного порядка. Для идеальной гексагональной структуры $g_6(r) \equiv 1$, тогда как для других состояний эта функция убывает с увеличением расстояния. Топологическим дефектом является любое нарушение трансляционной симметрии изначально идеальной кристаллической структуры, а количество таких дефектов зависит от фазового состояния системы.

На настоящий момент существуют две основные аналитические модели плавления двумерных систем. Обе они базируются на анализе формирования различных топологических дефектов. Первая из них — это КТНУ-теория (Kosterlitz–Thouless–Halperin–Nelson–Young), которая прогнозирует двухстадийный процесс перехода от кристаллической фазы к жидкостному состоянию системы через формирование промежуточной, так называемой гексатиче-

*E-mail: elen_vasilieva@mail.ru

**E-mail: olga.vaulina@bk.ru

ской фазы [7–9]. При этом полагается, что для гексатической фазы пространственное ослабление пиков (g^s) парных корреляционных функций $g(r)$ описывается экспоненциальным законом $g^s \propto \exp(-\mu r)$, $\mu \equiv \text{const}$, а ориентационная корреляционная функция $g_6(r)$ имеет степенную асимптотику $g_6(r) \propto r^{-\eta}$ при $\eta < 0.25$. Вторая из упомянутых моделей — это GBI-теория (Grain Boundary Induced melting), которая описывает плавление двумерных систем как фазовый переход первого рода от кристалла к жидкости без формирования промежуточной фазы [10, 11].

Убедительные доказательства справедливости КТНУ-теории для двумерных систем с различными потенциалами межчастичного взаимодействия были представлены в ряде экспериментальных и расчетных работ [12–19]. Так, например, детальное численное исследование динамики частиц, взаимодействующих с экранированным кулоновским потенциалом (типа Юкавы) $\varphi(r) = eZ \exp(-r/\lambda)/r$, где λ — длина экранирования, а eZ — заряд частиц, представлено в работах [18, 19]. Численное моделирование [18, 19] показывает, что физические свойства таких систем имеют две особые точки. Первая из них относится к фазовому переходу «жидкость — гексатическая фаза» и наблюдается, когда эффективный параметр неидеальности системы $\Gamma^* \approx 98 \pm 3$; вторая особая точка (при $\Gamma^* \approx 154 \pm 4$) соответствует переходу от гексатической фазы к идеальному кристаллу, где коэффициент диффузии частиц равен нулю. Здесь

$$\Gamma^* = 1.5(eZ)^2 \left(1 + \kappa + \frac{\kappa^2}{2} \right) \frac{\exp(-\kappa)}{Tr_p},$$

где $\kappa = r_p/\lambda$, T — температура частиц в энергетических единицах, r_p — среднее межчастичное расстояние. Сравнение теоретических предсказаний с результатами существующих лабораторных экспериментов в пылевой плазме не выявило убедительного соответствия со сценариями плавления, описанными как в КТНУ-теории, так и в GBI-теории [20–22]. Тем не менее авторы недавних работ [22, 23] все больше склоняются в пользу справедливости GBI-теории для описания сценария плавления двумерных пылевых структур, формирующихся в плазме ВЧ-разрядов.

В настоящей работе представлены новые результаты численного исследования процесса формирования числа топологических дефектов, а также трансляционного и ориентационного порядка в двумерных системах Юкавы в широком диапазоне параметров, соответствующих условиям экспериментов в лабораторной пылевой плазме.

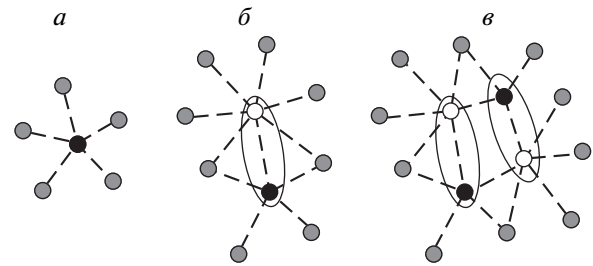


Рис. 1. *a* — Свободная дисклинация (5 связей), *б* — свободная дислокация (пара из 5-связной и 7-связной дисклинаций), *в* — пара дислокаций. Штриховые линии показывают связи между ближайшими соседями (бонды); \circ — узлы решетки с 7 связями, \bullet — с 5 связями

2. МЕТОДЫ РАСЧЕТА

2.1. Топологические дефекты и ориентационные корреляционные функции

Для двумерных систем возможными топологическими дефектами являются дисклинации, т.е. наличие вакансий или внедренных «атомов». Решетка вокруг такого изолированного дефекта искажается таким образом, что кристаллическая структура при этом сохраняется. В идеальной гексагональной (примитивной треугольной) решетке каждая частица, расположенная в ее узле, имеет ровно шесть ближайших соседей. А наиболее распространенными дефектами такой решетки являются 5-связные (вакансии) и 7-связные (внедренные частицы), см. рис. 1.

Положения точечных дефектов в двумерной решетке находят при помощи триангуляции Делоне [24, 25]. Такая триангуляция покрывает двумерную xu -поверхность сеткой треугольников, вершинами которых являются соседние частицы, причем линии сторон треугольников не должны пересекаться. В этом случае каждый узел решетки будет n раз соединен с ближайшими n узлами. Эти связи определяют количество и положение всех ближайших соседей частиц. В гексагональной двумерной решетке узел будет являться точечным дефектом при $n \neq 6$. Иллюстрация триангуляции Делоне представлена на рис. 2.

Напомним, что триангуляцией Делоне называют такую триангуляцию, при которой никакая точка A из множества точек S на плоскости не содержится внутри окружности, описанной вокруг любого треугольника, вершиной которого не является точка A . Как следствие: если никакие четыре точки не лежат на одной окружности, триангуляция Делоне един-

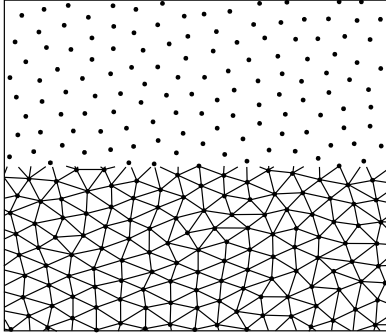


Рис. 2. Пример триангуляции Делоне для системы, полученной при численном моделировании задачи с параметрами $\xi = 1$ и $\Gamma^* \approx 137$. Точки показывают расположение частиц; отрезки — это бонды, соединяющие ближайших соседей

ственная. Триангуляция Делоне взаимно однозначно соответствует диаграмме Вороного для того же набора точек [24, 25].

Мерой ориентационного порядка частиц в структуре, зависящего от количества разнообразных топологических дефектов, является ориентационная корреляционная функция $g_6(r)$. Для двумерных систем такая функция определяется углами $\theta(\mathbf{r})$ между любыми двумя умозрительными отрезками (бондами), соединяющими соседние частицы, в произвольно выбранном направлении \mathbf{r} [7]:

$$g_6(\mathbf{r}) = \langle \psi^*(\mathbf{r})\psi(\mathbf{0}) \rangle, \quad (1)$$

где $\psi(\mathbf{r}) = \exp(6i\theta(\mathbf{r}))$ — локальный параметр порядка, а $\theta(\mathbf{r})$ определяет ориентацию бонда относительно фиксированной оси.

Стоит отметить, что у разных авторов точное математическое определение функции $g_6(r)$ несколько различается, а следовательно, различается и способ ее расчета и интерпретации. Можно выделить два основных метода вычисления $g_6(r)$, описанных в литературе. Так, например, в работе [22] ориентационную корреляционную функцию рассчитывают как

$$g_6(r) = \left| \frac{1}{N_B} \sum_{l=1}^{N_B} \frac{1}{n(l)} \sum_{k=1}^{n(l)} \exp \{i \cdot 6 (\theta(\mathbf{r}_k) - \theta(\mathbf{r}_l))\} \right|, \quad (2)$$

где N_B — общее количество рассматриваемых бондов в кристалле, $n(l)$ — число бондов, находящихся на расстоянии r от l -го бонда, $\theta(\mathbf{r}_{k,l})$ — соответствующие углы бондов в точках $\mathbf{r}_{k,l}$ относительно фиксированной оси. В работе [20] используется похожая

формула, но усредняют подобным образом не экспоненты, а косинусы соответствующих углов (т. е. рассматривается только реальная часть) и все выражение не берется по модулю:

$$g_6(r) = \frac{1}{N_B} \sum_{l=1}^{N_B} \frac{1}{n(l)} \sum_{k=1}^{n(l)} \cos \{6 (\theta(\mathbf{r}_k) - \theta(\mathbf{r}_l))\}. \quad (3)$$

При этом процедура расчета $g_6(r)$ состоит в следующем. Сначала выполняют триангуляцию Делоне — в итоге получают сетку бондов, соединяющих соседние частицы. Затем находят координаты середины \mathbf{r}_i каждого бонда (так называемая «центральная точка») и угол наклона θ_i бонда относительно заданной оси. Далее, рассматривая «поле» (\mathbf{r}_i, θ_i) , фиксируют одну из центральных точек и относительно нее считают количество бондов (и соответствующую сумму экспонент или косинусов углов), находящихся на расстоянии r , с последующим усреднением по ансамблю и времени.

Немного отличающийся способ расчета $g_6(r)$ описан в работах [11, 12]:

$$g_6(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{\langle \psi_6^*(\mathbf{r})\psi_6(\mathbf{r}') \rangle}{\langle \rho(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r}') \rangle}. \quad (4)$$

Здесь

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^N \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i),$$

а

$$\psi_6(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^N \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)\psi_{6,i}$$

— микроскопическая плотность ориентационного параметра порядка

$$\psi_{6,i} = \frac{1}{N_i} \sum_{j=1}^{N_i} \exp(6i\theta_{ij}),$$

где суммирование ведется по всем ближайшим соседям i -й частицы, а угол θ_{ij} образован бондом между i -й и j -й частицей и заданной осью. Отличие процедуры расчета в этом случае состоит в том, что вначале для каждой частицы находят локальный ориентационный порядок, а затем считают число частиц, расположенных на расстоянии r от фиксированной частицы. Далее проводится усреднение по ансамблю и времени, а также нормировка на среднюю плотность частиц. Если принять $\mathbf{r}' = 0$, то функция примет вид, аналогичный формуле (1) с учетом нормировки на $\langle \rho(\mathbf{r})\rho(\mathbf{0}) \rangle$.

Отметим, что все вычисления, представленные в данной работе, проводились по формуле (4), так

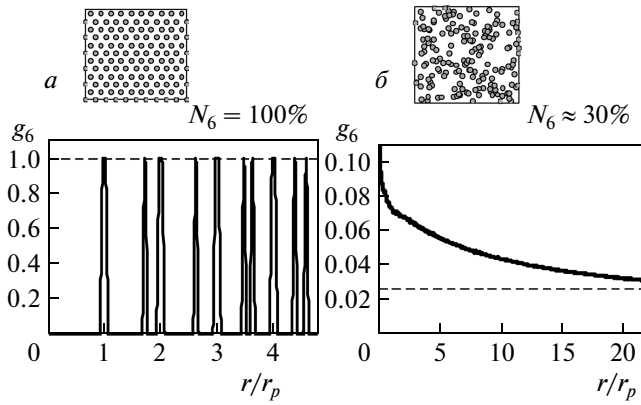


Рис. 3. Зависимости $g_6(r)$ для идеальной гексагональной решетки (а) и для системы случайно расположенных частиц (б)

как расчет функций $g_6(r)$ по формулам (2) и (3) не дает согласия с теорией, прогнозирующей для идеальной гексагональной решетки величину $g_6(r) \equiv 1$ вне зависимости от шага разбиения Δr , выбранного для ее расчетов. Таким образом, соотношения (2) и (3) нельзя использовать для анализа ориентационного порядка в кристаллических системах, а физическое обоснование их применимости для жидкостных систем требует дополнительной проверки. Иллюстрация расчета функций $g_6(r)$ по формуле (4) для идеальной гексагональной решетки и для системы случайно расположенных частиц (имитирующей идеальный газ) показана на рис. 3. Отметим, что процентное содержание N_6 частиц с шестью ближайшими соседями в идеальной решетке составляло при этом 100 %, а для случая «идеального газа» $N_6 \approx 30$ %.

2.2. Параметры численной задачи

Расчеты проводились методом молекулярной динамики Ланжевена, основанным на решении системы из N_p обыкновенных дифференциальных уравнений движения, (где N_p — число частиц в расчетной ячейке) с учетом силы Ланжевена F_{ran} , отвечающей за стохастический характер движения частиц с заданной кинетической температурой T . Техника моделирования подробно описана в работах [5, 6]. При этом наряду со случайными силами F_{ran} учитывались силы парного межчастичного взаимодействия F_{int} [5, 6]:

$$M \frac{d^2 \mathbf{r}_k}{dt^2} = \sum_j F_{int}(r_{kj}) \frac{\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_j}{r_{kj}} - M \nu_{fr} \frac{d\mathbf{r}_k}{dt} + F_{ran}. \quad (5)$$

Здесь

$$F_{int}(r) = -eZ_p \frac{\partial \varphi}{\partial r},$$

$r_{kj} = |\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_j|$ — межчастичное расстояние, M — масса частицы, ν_{fr} — коэффициент трения пылевых частиц за счет их столкновений с нейтральными частицами окружающего газа, $\varphi(r)$ — парный потенциал межчастичного взаимодействия. В качестве потенциала межчастичного взаимодействия рассматривался экранированный кулоновский потенциал (типа Юкавы): $\varphi(r) = eZ \exp(-r/\lambda)/r$, где r — расстояние между частицами, eZ — их заряд, λ — длина экранирования (см. разд. 1). Данная модель парного потенциала позволяет учесть влияние разноименно заряженных частиц и представляет особый интерес с точки зрения теоретических исследований свойств пылевой плазмы [5, 6], а также широко используется для численного моделирования отталкивания в кинетике взаимодействующих частиц (включая физику плазмы, медицину, биологию, физику полимеров и т. д.) [1–6].

Расчеты были выполнены для однородных двумерных систем Юкавы с параметрами экранирования $\kappa \equiv r_p/\lambda = 1, 2, 3, 4$ (где $r_p = (N_p/S)^{-1/2}$, а S — площадь моделируемой ячейки). Для моделирования протяженного однородного слоя задавались периодические граничные условия в двух выбранных направлениях (x и y). Число независимых частиц в центральной счетной ячейке N_p варьировалось от 256 до 4096. В зависимости от числа частиц длина обрезания потенциала r_{cut} менялась от $5r_p$ до $25r_p$. Основные расчеты были выполнены для $N_p = 1024$ независимых частиц при длине обрезания потенциала $r_{cut} = 12r_p$.

Для анализа структурных свойств моделируемых систем уравнения движения (5) решались для различных эффективных параметров: параметра неидеальности Γ^* и параметра масштабирования $\xi = \omega^*/\nu_{fr}$, где

$$\omega^* = \left\{ 2(eZ)^2 \left(1 + \kappa + \frac{\kappa^2}{2} \right) \frac{\exp(-\kappa)}{r_p^3 \pi M} \right\}^{1/2}.$$

Величина параметра масштабирования варьировалась от $\xi \approx 0.1$ до $\xi \approx 4$, а величина эффективного параметра неидеальности Γ^* менялась в пределах от 0.5 до 225. (Выбранный диапазон параметров ξ и Γ^* является типичным для условий экспериментов в плазме газовых разрядов [5, 6].)

Для корректного моделирования задачи шаг интегрирования в наших расчетах соответствовал

$$\Delta t = \frac{1}{20 \max\{\nu_{fr}, \omega^*\}},$$

время численных экспериментов варьировалось в диапазоне от $\sim 10 / \min\{\nu_{fr}, \omega^*\}$ до $\sim 1000 / \min\{\nu_{fr}, \omega^*\}$ [5, 6].

3. РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Результаты численного моделирования проиллюстрированы на рис. 4–10. Для наглядного представления о том, как формируются топологические дефекты, на рис. 4 представлены диаграммы Вороного для различных фазовых состояний моделируемой системы — кристалла, гексатической фазы и жидкости. Видно, что при плавлении число дефектов (черные и белые ячейки) резко возрастает, причем в кристалле дефекты представлены преимущественно дислокационными парами, а в гексатической фазе — преимущественно свободными дислокациями и формированием несвязанных дисклинаций, образующихся в результате плавления дислокационных пар (рис. 4*а,б*), как и было предсказано Костерлицем и Тауллесом.

На рис. 5 представлены ориентационные корреляционные функции $g_6(r/r_p)$ для различных фазовых состояний (параметров Γ^*), диаграммы Вороного для которых показаны на рис. 4. Легко заметить, что функции $g_6(r)$ для кристаллического состояния системы практически сразу принимает некоторое постоянное значение, что также находится в согласии с КТНУ-теорией. На рис. 6 в качестве иллюстрации приведены парные корреляционные функции $g(r/r_p)$ и распределения частиц по числу ближай-

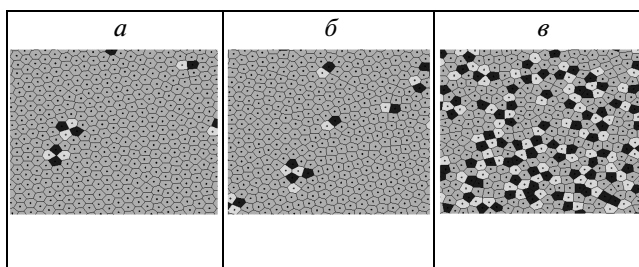


Рис. 4. Иллюстрация диаграмм Вороного для $\xi = 1$ и различных Γ^* и N_6 : *а* — $\Gamma^* \approx 163$, $N_6 \approx 96\%$ (кристалл); *б* — $\Gamma^* \approx 137$, $N_6 \approx 83\%$ («гексатическая» фаза); *в* — $\Gamma^* \approx 61$, $N_6 \approx 61\%$ (жидкость). Серые ячейки соответствуют частицам с 6 ближайшими соседями, белые — с 7 ближайшими соседями для кристаллической и «гексатической» фаз (и более 7 для жидкости), черные — с 5 ближайшими соседями (и менее 5 для жидкости)

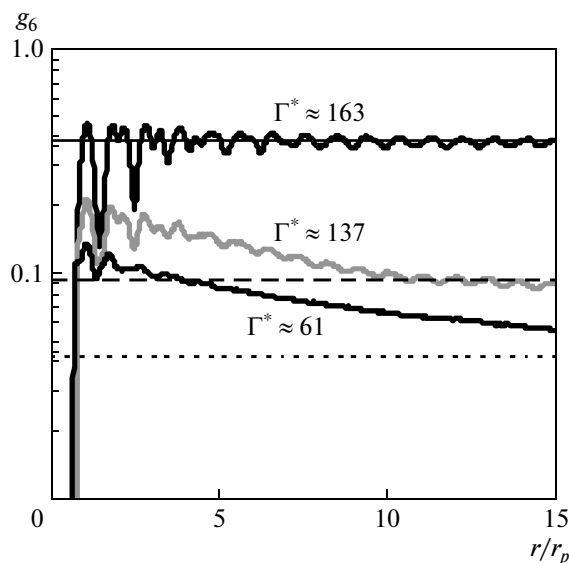


Рис. 5. Ориентационные корреляционные функции для различных значений параметров Γ^* , указанных на рисунке

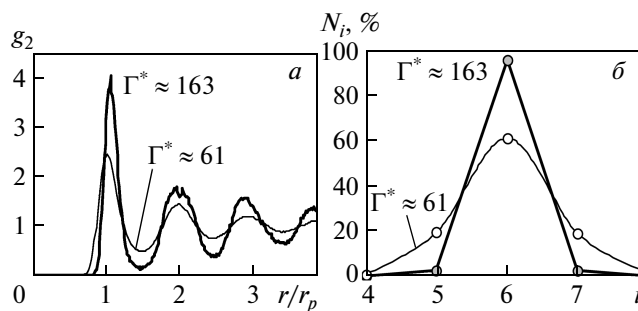


Рис. 6. Парные корреляционные функции $g(r/r_p)$ (*а*) и распределения числа ближайших соседей $N_i(i)$ (*б*) для различных значений параметров Γ^* , указанных на рисунке

ших соседей $N_i(i)$ (здесь i — количество ближайших соседей) для жидкостного и кристаллического состояний системы для тех же значений параметров Γ^* , что и на двух предыдущих рисунках.

Максимум g_{max} парной корреляционной функции $g(r)$ в зависимости от Γ^* для моделируемых двумерных систем представлен на рис. 7. Эти результаты согласуются с ранее полученными данными [18, 19] и иллюстрируют две особые точки на кривой $g_{max}(\Gamma^*)$ в области перехода от жидкости к гексатической фазе (точка перегиба) и от гексатической фазы к кристаллическому состоянию системы (скачок). Обычно такое поведение физических

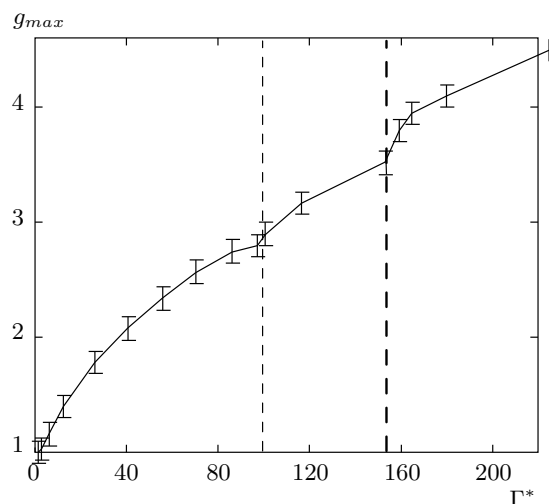


Рис. 7. Максимум g_{max} парной корреляционной функции в зависимости от Γ^* для двумерных систем. Тонкая штриховая линия соответствует переходу жидкость – гексатическая фаза, жирная штриховая линия — переходу гексатическая фаза – кристалл

характеристик связывают с наличием фазовых переходов второго рода (точка перегиба) и первого рода (скачок). Схожий вид имеют зависимости числа частиц с шестью ближайшими соседями N_6 [%] от Γ^* (см. рис. 8а) и числа дефектов δN [%] = $100 - N_6$ от $2/\Gamma^*$ (см. рис. 8б), полученные в настоящей работе. (Следует подчеркнуть, что на рис. 8б представлено общее количество дефектов, вне зависимости от их типа.)

Диапазон погрешностей, указанных на рис. 7 и 8, соответствует расчетам для систем с различными параметрами κ и ξ . Следует отметить, что с учетом полученных ошибок точку перегиба (переход от жидкостной к гексатической фазе) трудно распознать уже на этапе численного моделирования задачи, в отличие от точки кристаллизации системы, где наблюдается достаточно резкое изменение значений $g_{max}(\Gamma^*)$, $N_6(\Gamma^*)$ и $\delta N(\Gamma^*)$ при малом изменении параметра Γ^* . Данное обстоятельство может служить объяснением того, что убедительные экспериментальные наблюдения перехода между жидкостью и гексатической фазой отсутствуют по настоящее время, а для анализа плавления пылевых монослоев в лабораторной плазме все чаще отдается предпочтение GVI-теории, которая описывает плавление двумерных систем как фазовый переход первого рода от кристалла к жидкости без формирования промежуточной фазы [10, 11]. Здесь следует осо-

бо подчеркнуть, что трудности обнаружения точки фазового перехода от жидкости к гексатической фазе не могут являться каким-либо доказательством отсутствия промежуточной фазы в исследуемых системах.

Еще раз напомним, что для количественного и качественного анализа фазового состояния системы широко используется исследование пространственной асимптотики парных, $g(r)$, и ориентационных, $g_6(r)$, корреляционных функций. Асимптотика парных корреляционных функций $g(r)$ для двумерных систем подробно исследовалась в работах [18, 19], где было получено, что вне зависимости от выбора аппроксимирующей функции (степенной или экспоненциальной) пространственная асимптотика функции $g(r) - 1$ не изменяется для гексатической фазы двумерной структуры. При этом для жидкостной фазы системы величина показателя экспоненты или степенной функции уменьшается с ростом параметра неидеальности системы Γ^* .

Следует отметить, что на настоящий момент результаты численных и экспериментальных исследований пространственной асимптотики функций $g_6(r)$, представленные в работах различных авторов, весьма разнообразны. Данное обстоятельство может быть связано как с анализом расчетов, выполненных для разного количества частиц, так и с различным выбором формы аппроксимирующих функций, а также пространственного отрезка для поиска наиболее подходящей аппроксимации (имеется в виду либо анализ затухания первых пиков $g_6(r)$, либо же исследование асимптотики хвоста функции). Кроме того, в существующих литературных источниках нет определенного согласия в вопросе о том, как именно надо аппроксимировать $g_6(r)$ — с учетом пиков или минимумов, с учетом свободного постоянного члена или без него (в зависимости от наличия последнего функция $g_6(r)$ будет стремиться либо к нулю, либо к постоянному значению). И почти нигде не приводится сама функция, а только ее аппроксимация, поэтому сложно судить о том, насколько правомерны предлагаемые аппроксимации.

Что касается влияния числа частиц, то наши исследования показали, что количество частиц в анализируемой структуре заметно влияет на форму функции $g_6(r)$, т. е. на ее величину и пространственную асимптотику. При этом для жидкости достаточно являлось 600–700 анализируемых частиц (с дальнейшим увеличением числа частиц форма $g_6(r)$ не изменялась). Для гексатической и кристаллической фаз это влияние пропадало только тогда, когда общее число анализируемых частиц составляло

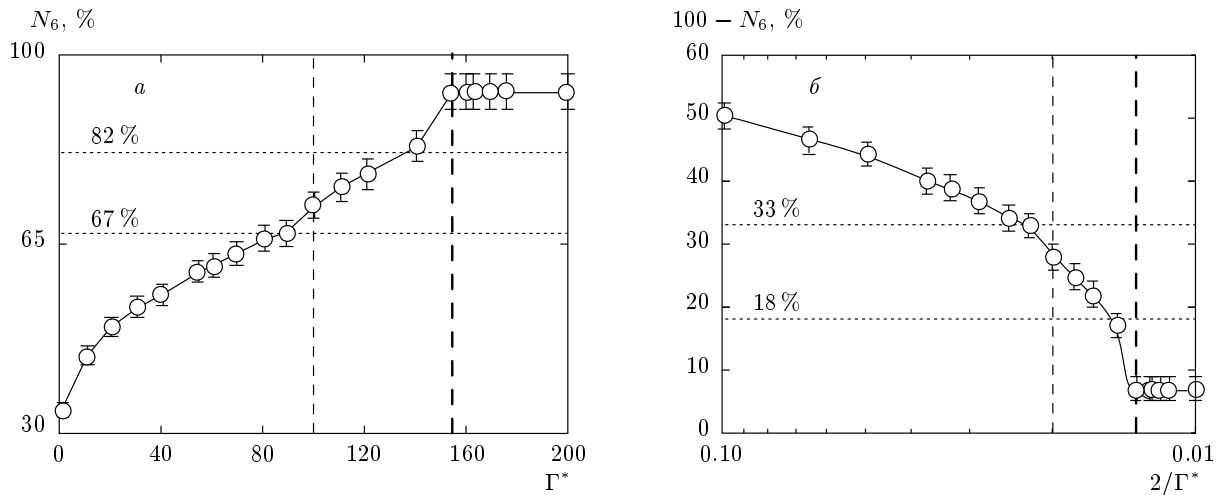


Рис. 8. Зависимости числа частиц с 6 ближайшими соседями N_6 от Γ^* (а) и числа дефектов $100 - N_6$ от $2/\Gamma^*$ (б) для систем с параметрами ξ от 0.1 до 4. Тонкие штриховые линии соответствуют переходу жидкость – гексатическая фаза, жирные штриховые линии — переходу гексатическая фаза – кристалл

1500–2500 (число независимых частиц в центральной счетной ячейке 200–300 и более). Таким образом, при недостаточном количестве частиц в поле зрения исследуемой структуры применение функций $g_6(r)$ для анализа гексатической или кристаллической фаз не будет корректным. (Это особенно важно учитывать при постановке реальных экспериментов в лабораторной пылевой плазме.)

Здесь мы представляем новые результаты исследования пространственной асимптотики ориентационных корреляционных функций $g_6(r)$. Численные расчеты функции $g_6(r)$ для различных параметров неидеальности Γ^* представлены на рис. 9 и 10 соответственно для жидкости и гексатической фазы. Наиболее важным итогом проведенных исследований является вывод о том, что форма ориентационных корреляционных функций $g_6(r)$ различна для жидкостной и гексатической фаз и сохраняется в пределах указанных состояний структуры. При этом величина функций $g_6(r)$ полностью определяется количеством возникающих дефектов (значением N_6). Нормированные значения $g_6^* = 100g_6(r/r_p)/N_6$ для жидкостных структур и гексатической фазы при различных параметрах Γ^* приведены соответственно на рис. 9б и 10б.

Поскольку выбор аппроксимации для пространственной асимптотики g_6 носит весьма условный характер, в качестве аппроксимирующих функций использовались экспоненциальные соотношения. Так, для жидкостного состояния системы (в результате наилучшего согласования между аналитическими и

численными данными) получено, что

$$g_6 = a_2 \exp\left(-\frac{r}{7.5r_p}\right) + a_3, \quad (6)$$

где $a_2 = 1.815a_3$, $a_3 = 0.069N_6$ [%]/100 (см. рис. 9б). А для гексатической фазы наилучшая аппроксимация численных данных имеет вид

$$g_6 = b_2 \exp\left(-\frac{r}{4r_p}\right) + b_3, \quad (7)$$

где $b_2 = 1.65b_3$, $b_3 = 0.12N_6$ [%]/100 (см. рис. 10б). Легко заметить (см. рис. 9б), что форма ориентационных корреляционных функций существенно различается для жидкостного и гексатического состояний исследуемых систем.

Для сравнения наших результатов с ранее существующими численными данными на рис. 10б приведена одна из типичных степенных аппроксимаций пространственной асимптотики функции $g_6(r)$ для гексатической фазы:

$$g_6 = b_1(r_p/r)^{1/5}, \quad (8)$$

где $b_1 = 0.217N_6$ [%]/100. Такая аппроксимация достаточно хорошо описывает затухание пиков функции g_6 , однако стремится к нулю при $r \rightarrow \infty$, что не соответствует результатам численного моделирования.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе представлены результаты численного моделирования динамики формирова-

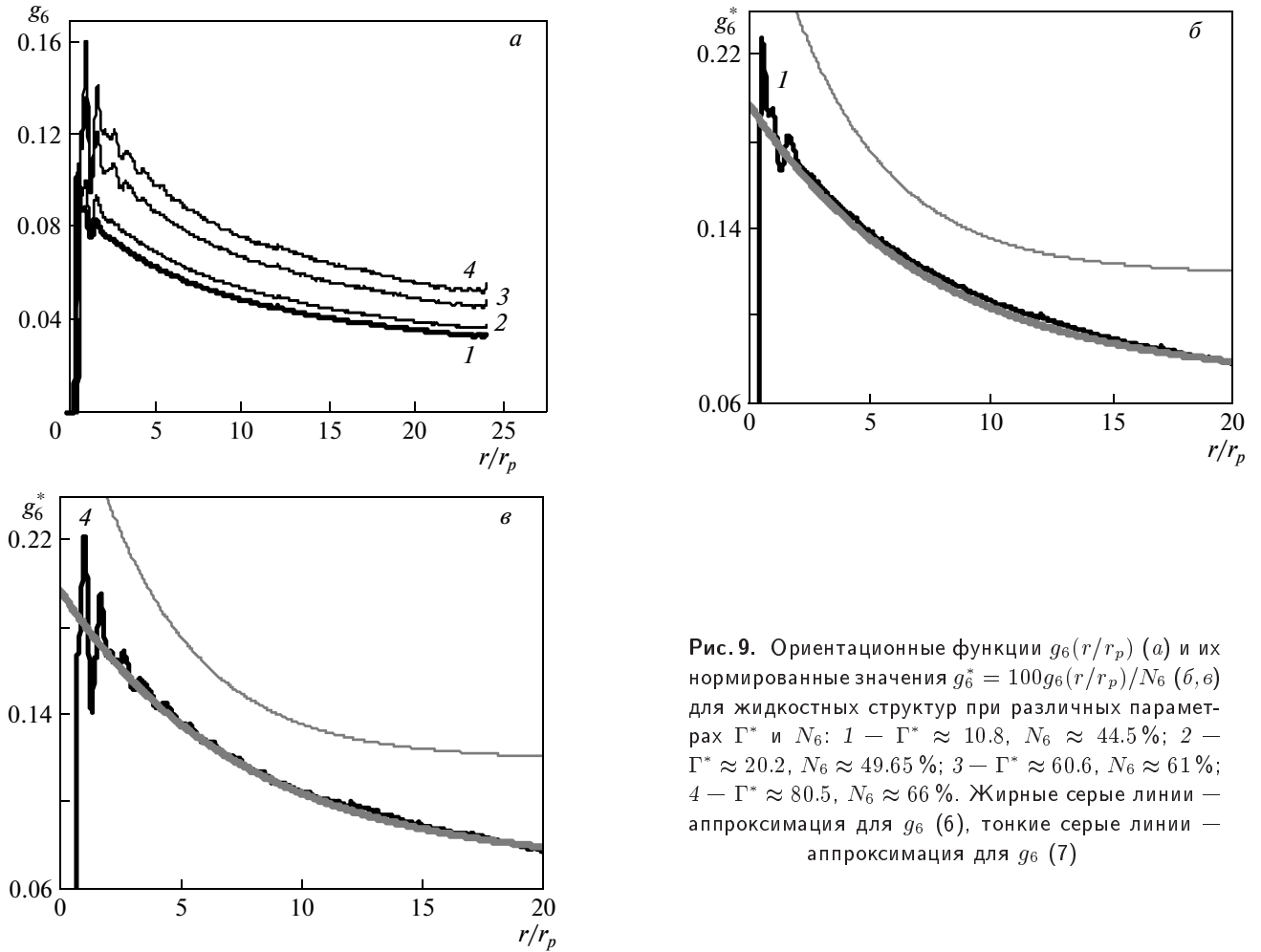


Рис. 9. Ориентационные функции $g_6(r/r_p)$ (а) и их нормированные значения $g_6^* = 100g_6(r/r_p)/N_6$ (б, в) для жидкостных структур при различных параметрах Γ^* и N_6 : 1 – $\Gamma^* \approx 10.8$, $N_6 \approx 44.5\%$; 2 – $\Gamma^* \approx 20.2$, $N_6 \approx 49.65\%$; 3 – $\Gamma^* \approx 60.6$, $N_6 \approx 61\%$; 4 – $\Gamma^* \approx 80.5$, $N_6 \approx 66\%$. Жирные серые линии – аппроксимация для g_6 (б), тонкие серые линии – аппроксимация для g_6^* (в)

ния топологических дефектов и ориентационного порядка в неидеальных системах частиц, взаимодействующих с экранированным кулоновским потенциалом. Расчеты выполнялись в широком диапазоне параметров, соответствующих условиям экспериментов в лабораторной пылевой плазме.

Найдена связь между количеством дефектов и параметром неидеальности системы. Какие-либо данные о соотношении между количеством дефектов и параметром неидеальности системы отсутствовали в научной литературе до настоящего времени. Получены новые данные о зависимости формы ориентационной корреляционной функции от количества топологических дефектов системы. Предложены новые аппроксимации для описания пространственной асимптотики ориентационной корреляционной функции в жидкостной и гексатической фазах системы.

Наиболее важным результатом проведенных исследований является вывод о том, что форма ориентационных корреляционных функций $g_6(r)$ различна для жидкостной и гексатической фаз, однако сохраняется в пределах указанных состояний структуры. При этом величина функций $g_6(r)$ полностью определяется количеством возникающих дефектов.

Одна из наиболее вероятных причин, не позволяющих обнаружить формирование гексатической фазы в реальных лабораторных экспериментах, связана с существенным влиянием любых малых возмущений системы (например, силы трения, пространственной неоднородности или граничных условий системы) на идентификацию точки фазового перехода гексатическая фаза – жидкость. Данное обстоятельство может служить объяснением того, что убедительные экспериментальные наблюдения перехода между жидкостью и гексатической фазой отсутству-

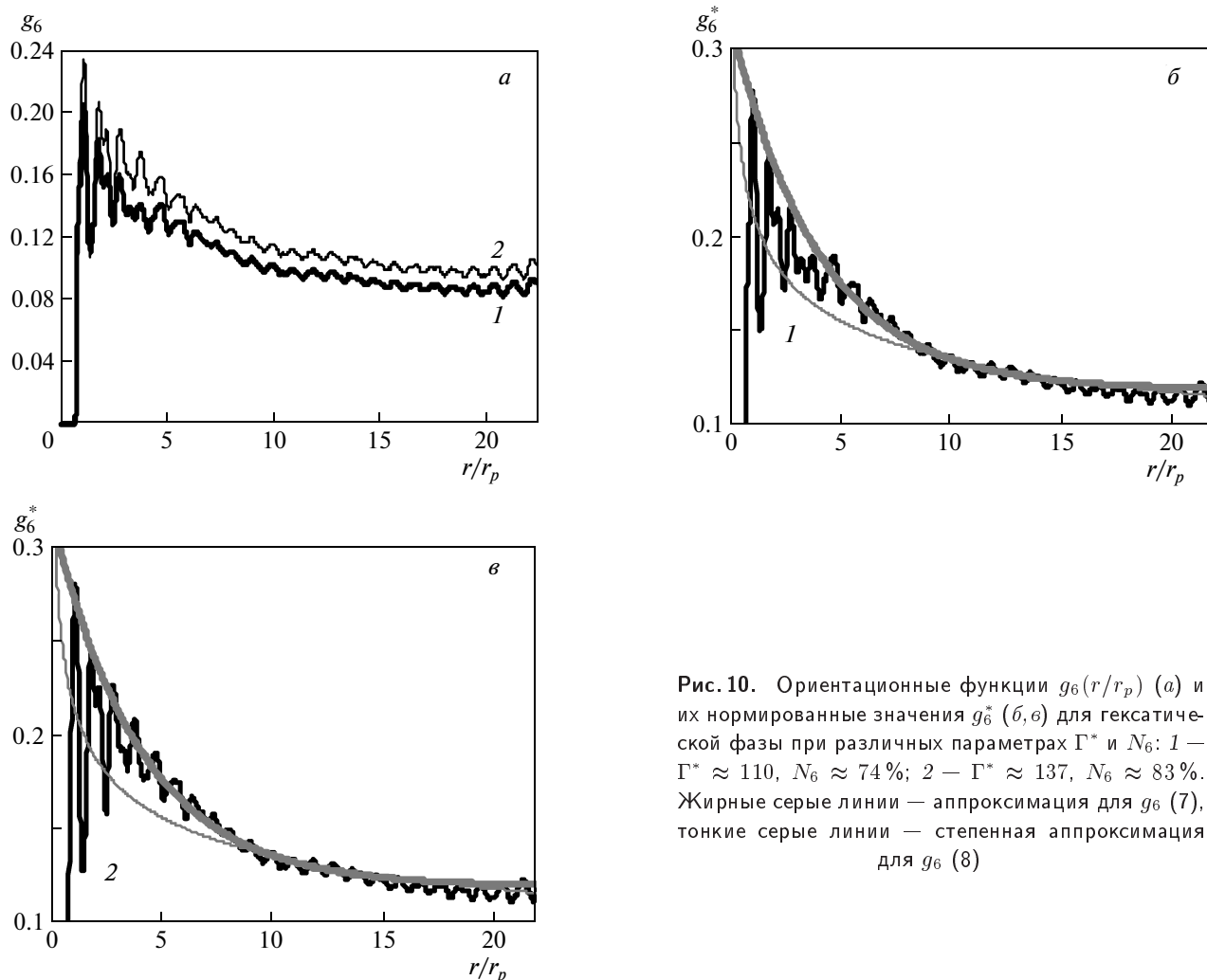


Рис. 10. Ориентационные функции $g_6(r/r_p)$ (а) и их нормированные значения g_6^* (б, в) для гексатической фазы при различных параметрах Γ^* и N_6 : 1 — $\Gamma^* \approx 110$, $N_6 \approx 74\%$; 2 — $\Gamma^* \approx 137$, $N_6 \approx 83\%$. Жирные серые линии — аппроксимация для g_6 (7), тонкие серые линии — степенная аппроксимация для g_6 (8)

ют по настоящее время. Однако трудности обнаружения точки этого фазового перехода не могут являться доказательством отсутствия формирования промежуточной гексатической фазы в исследуемых системах.

Результаты представленного исследования могут быть легко обобщены для случая двумерных систем с широким кругом изотропных парных потенциалов, а также будут полезны для разработки новых методов пассивной диагностики и развития существующих экспериментальных техник исследования разнообразных неидеальных систем, таких как, например, пылевая плазма, биологические и медицинские растворы, полимеры и другие коллоидные системы.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ (гранты №№ 10-08-00389-а, 11-02-01333-а), Министерства образования и науки Российской Федерации, а также Программы Президиума РАН.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Photon Correlation and Light Beating Spectroscopy*, ed. by H. Z. Cummins and E. R. Pike, Plenum, New York (1974).
2. *Intermolecular Interactions: From Diatomics to Biopolymers*, ed. by B. Pullman, Wiley Interscience, Chichester (1978).

3. A. A. Ovchinnikov, S. F. Timashev, and A. A. Belyy, *Kinetics of Diffusion Controlled Chemical Processes*, Nova Sci. Publ., Commack, New York (1989).
4. N. H. March and M. P. Tosi, *Introduction to Liquid State Physics*, World Sci. (1995).
5. О. С. Ваулина, О. Ф. Петров, В. Е. Фортов и др., *Пылевая плазма (эксперимент и теория)*, Физматлит, Москва (2009).
6. *Complex and Dusty Plasmas*, ed. by V. E. Fortov and G. E. Morfill, CRC Press (2010).
7. D. R. Nelson and B. I. Halperin, *Phys. Rev. B* **19**, 2457 (1979).
8. J. M. Kosterlitz and D. J. Thouless, *J. Phys. C* **6**, 1181 (1973).
9. A. P. Young, *Phys. Rev. B* **19**, 1855 (1979).
10. S. T. Chui, *Phys. Rev. B* **28**, 178 (1983).
11. K. Strandburg, *Rev. Mod. Phys.* **60**, 161 (1988).
12. A. Jaster, *Phys. Rev. E* **59**, 2594 (1999).
13. D. C. Glattli et al., *Phys. Rev. Lett.* **60**, 420 (1988).
14. C. A. Murray and R. A. Wenk, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 1643 (1989).
15. R. E. Kusner et al., *Phys. Rev. Lett.* **73**, 3113 (1994).
16. R. Seshadri and R. Westervelt, *Phys. Rev. Lett.* **66**, 2774 (1991).
17. K. Zahn and G. Maret, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 3656 (2000).
18. O. S. Vaulina and I. E. Drangevski, *Phys. Scripta* **73**, 577 (2006).
19. O. S. Vaulina et al., *Phys. Rev. Lett.* **97**, 195001 (2006).
20. R. A. Quinn et al., *Phys. Rev. E* **53**, 2049 (1996).
21. A. Melzer et al., *Phys. Rev. E* **53**, 2757 (1996).
22. C. A. Knappek, D. Samsonov, S. Zhdanov et al., *Phys. Rev. Lett.* **98**, 015004 (2007).
23. V. Nosenko, S. K. Zhdanov, A. V. Ivlev et al., *Phys. Rev. Lett.* **103**, 015001 (2009).
24. А. В. Скворцов, *Триангуляция Делоне и ее применение*, Изд. Томского унив., Томск (2002).
25. B. C. Barber, D. P. Dobkin, and H. Huhdanpaa, *ACM Trans. Math. Software* **22**, 469 (1996).