

# Кластеризация дефектов и кристаллитов в двумерной жидкости Юкавы

Б. А. Клумов<sup>1)</sup>

Объединенный институт высоких температур РАН, 125412 Москва, Россия

Поступила в редакцию 11 сентября 2024 г.

После переработки 11 сентября 2024 г.

Принята к публикации 3 октября 2024 г.

Для двумерной жидкости Юкавы впервые рассматриваются различные свойства кристаллических кластеров (т.е. кластеров, состоящих из частиц с 6-ю ближайшими соседями). Свойства таких кластеров рассматриваются в широком диапазоне температур, начиная с расплава. С ростом температуры наблюдается медленное падение концентрации кристаллических частиц (которые заметно превалируют в расплаве) и рост концентрации дефектов, что приводит к образованию в рассматриваемой двумерной жидкости крупных кластеров, состоящих из дефектов и к деградации крупных кристаллических кластеров. При этом в узком температурном диапазоне резко меняется их характерный размер и форма. Проводится сравнительный анализ кристаллических кластеров с кластерами, состоящих из топологических дефектов, получены их распределения по размерам и другие структурные характеристики.

DOI: 10.31857/S0370274X24110049, EDN: LAEGVB

Поведение двумерных систем – одна из важнейших проблем физики конденсированного состояния. Двумерные и квазидвумерные системы интенсивно исследуются начиная с пионерских теоретических работ [1–6], за которые Костерлицу и Таулессу была вручена Нобелевская премия по физике за 2016 г. В подавляющем большинстве таких работ основное внимание уделяется механизму и свойствам фазового перехода “кристалл–жидкость” в разных двумерных системах и физике образования и свойствам промежуточной (между кристаллом и жидкостью) гексагональной фазы (например, [7–14]).

Свойства же двумерной жидкости, особенно жидкости вдали от кривой плавления изучены намного хуже [15]. Известно [16, 17], что в расплавах двумерных плотно упакованных систем (таких как, например, кулоновские системы, модельные системы Юкавы, мягкие и твердые сферы и др.) содержится около 80% кристаллических частиц (т.е. частиц с 6-ю ближайшими соседями), доля которых медленно (логарифмически) падает с ростом температуры. Это является фундаментальным отличием таких систем от трехмерных систем с плотной упаковкой (в расплавах которых доля кристаллических атомов ничтожно мала). Это обстоятельство в значительной степени определяет физические свойства двумерных жидкостей [18].

В настоящей работе изучаются свойства кристаллических кластеров и кластеров, состоящих из дефектов в двумерной плотно упакованной жидкости. Отметим, что двумерные системы с плотной упаковкой имеют в твердотельном состоянии треугольную (гексагональную) решетку. Здесь, в качестве примера, используется модельная система с отталкивательным потенциалом Юкавы (Дебая–Хюккеля); такие системы часто используются для описания двумерной и трехмерной коллоидной и комплексной (пылевой) плазмы (например, [19–21]). Парное взаимодействие частиц в системе Юкавы описывается потенциалом:

$$U(r) = (Q/r) \exp(-r/\lambda), \quad (1)$$

где  $Q$  – заряд частицы (заряд и масса всех микрочастиц считаются одинаковыми), а  $\lambda$  – длина экранирования. Известно, что фазовое состояние такой системы описывается двумя параметрами – параметром неидеальности  $\Gamma = Q^2 \times \exp(-\kappa)/(TD)$  и параметром экранировки  $\kappa = D/\lambda$ , где  $D$  – среднее межчастичное расстояние в системе, а  $T$  – температура частиц. В настоящей работе основным инструментом получения жидкостных конфигураций атомов является метод классической молекулярной динамики, реализованный для канонического ансамбля (NVT) с термостатом Нозе–Хувера (Nose–Hoover) и периодически граничными условиями [22]. Типичное число микрочастиц в исследуемой двумерной жидкости порядка  $N_p \sim 10^5$ , что заметно выше современных экспе-

<sup>1)</sup>e-mail: klumov@ihed.ras.ru

риментальных возможностей, но дает необходимую статистику для описания дефектов и кристаллических частиц в системе и кластеров, из них состоящих.

При нулевой температуре двумерная система Юкавы при всех значениях параметра экранировки  $\kappa$  представляет из себя кристалл с треугольной (гексагональной решеткой) и 6-ю ближайшими соседями у каждого атома, которые расположены в вершинах правильного шестиугольника. При конечной температуре в такой системе появляются топологические дефекты, в которых число ближайших соседей отличается от шести. Ближайшие соседи для двумерных систем легко определяются с помощью метода Вороного [23], при котором двумерное пространство, занятое частицами, разбивается на многогранники, а каждой частице системы соответствует выпуклый многоугольник, число сторон которого равно числу ближайших соседей  $n_{nb}$ . Все частицы с числом  $n_{nb} \neq 6$  считаются дефектными, а с  $n_{nb} = 6$  – кристаллическими. Концентрации таких частиц являются важной характеристикой фазового состояния двумерной системы [24, 25]. При моделировании происходило плавление двумерного кристалла, и полученный равновесный расплав (для его получения использовалось примерно  $10^7$  временных шагов) использовался в качестве начальной конфигурации жидкости [16], которая нагревалась затем до температур  $T \simeq 10 T_m$ , где  $T_m$  – температура плавления системы. Для количественного описания системы удобно использовать приведенную температуру  $T^* \equiv T/T_m$ , которая при моделировании менялась от 1 до 10. Недавно [17] было показано, что распределение дефектов по размерам и их концентрация в двумерной жидкости Юкавы не зависят от параметра экранировки  $\kappa$ , а определяются только значением приведенной температуры  $T^*$  (т.е. указанные характеристики являются универсальными при заданной  $T^*$ ). Это позволяет, исследуя кластеризацию дефектов и кристаллитов, ограничиться при моделировании одним значением  $\kappa$ . Здесь все представленные результаты моделирования относятся к случаю, когда параметр экранировки  $\kappa = 1$ .

На рисунке 1 показаны зависимости от приведенной температуры  $T^*$  таких важных характеристик двумерной жидкости, как полная концентрация  $n_d$  дефектных частиц (т.е. частиц с  $n_{nb} \neq 6$ ), концентрация дефектов, входящих в дислокации (в пары 5–7, которые состоят из двух частиц с 5-ю и 7-ю ближайшими соседями), и концентрация  $n_{cr}$  кристаллических частиц (так называемых 6-fold atoms с  $n_{nb} = 6$ ). Видно, что с ростом температуры концентрация дефектных частиц медленно (логарифмически) и мо-

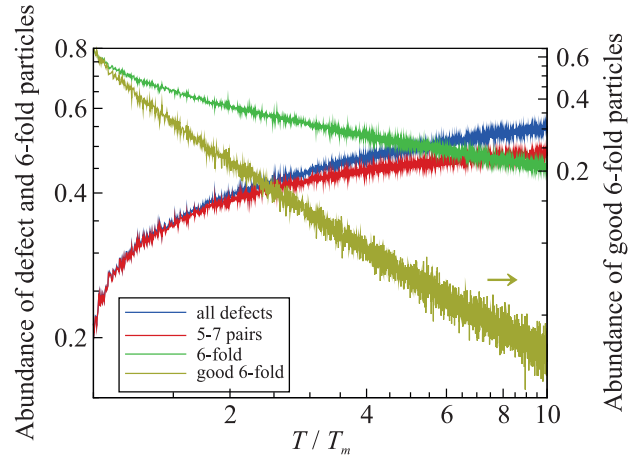


Рис. 1. (Цветной онлайн) Двумерная жидкость Юкавы на разных расстояниях от линии плавления (в единицах приведенной температуры  $T^* = T/T_m$ , где  $T_m$  – температура плавления). Представлены относительные концентрации  $n_d$  всех дефектных частиц (т.е. частиц с числом ближайших соседей  $n_{nb} \neq 6$ ) (синяя кривая), дефектных частиц, входящих в дислокации (в пары из дефектов 5–7) (красная кривая), кристаллитов – частиц с 6-ю ближайшими соседями ( $N_{nb} = 6$ ) (зеленая кривая) и “хороших” кристаллитов – частиц, у которых  $n_{nb} = 6$  и у центральной частицы и у всех 6-ти ближайших соседей (оливковая кривая, обсуждается в тексте). С ростом температуры концентрация дефектных частиц медленно (логарифмически) растет, а концентрация кристаллитов соответственно падает. Видно, что до  $T^* \sim 6$  в системе доминируют кристаллиты (а среди дефектных частиц – частицы, входящие в дислокации 5–7; можно также показать, что при  $T^* \geq 2$  появляются также точечные дефекты с  $n_{nb} = 4, 8$ , но их доля относительно мала). Представленные кривые универсальны в рассмотренном диапазоне температур  $T^*$  и не зависят от параметра экранировки  $\kappa$

нонно растет – при изменении  $T^*$  от 1 до 10, концентрация  $n_d$  меняется относительно мало от примерно 0.2 до 0.5, что является следствием размерности системы. Концентрация же кристаллических частиц  $n_{cr}$  монотонно спадает с ростом  $T^*$ , выходя на степенной спад при  $T^* > 2$  и сравниваясь с  $n_d$  при  $T^* \simeq 6$  (а с концентрацией дефектных частиц в дислокациях при  $T^* \simeq 7$ ). При  $T^* < 2$  ключевыми дефектными частицами в такой жидкости являются частицы, входящие в дислокации, при более высоких температурах за счет диссоциации кластеров из дефектов появляются точечные дефекты (можно показать, что доминируют дефекты с  $n_{nb} = 4$  и 8).

Дополнительно к кристаллическим частицам здесь вводится важное понятие – “хороший” кристаллит, которым называется частица с 6-ю

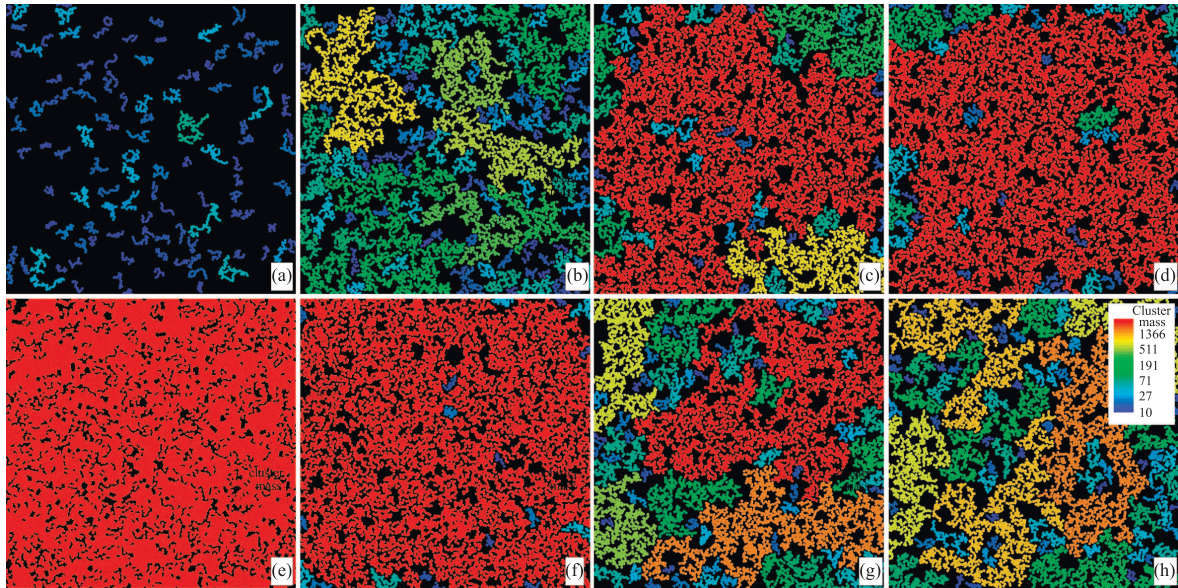


Рис. 2. (Цветной онлайн) Двумерная жидкость Юкавы при разных приведенных температурах  $T^* = T/T_m$ , где  $T_m$  – температура плавления. Показано пространственное распределение кластеров из дефектов (верхняя панель, (a)–(d)) и кристаллитов (нижняя панель, (e)–(h)) при  $T^* = 1$  ((a), (e)),  $T^* = 3$  ((b), (f)),  $T^* = 4$  ((c), (g)) и  $T^* = 5$  ((d), (h)) соответственно. Цвет каждого кластера определяется числом  $N$  входящих в него частиц и меняется от синего к красному при увеличении  $N$ . В расплаве ( $T^* = 1$ ) кластеры из дефектов относительно небольшие (здесь показаны только кластеры с  $N > 10$ ), а кристаллический кластер один и включает практически все кристаллические частицы системы. С ростом температуры наблюдается агломерация дефектов (в основном дислокаций) в более крупные кластеры с образованием при  $T^* \simeq 5$  одного крупного кластера. Кристаллические кластеры проявляют обратную тенденцию: крупный кластер деградирует и разрушается с образованием более мелких кластеров. Отметим, что при  $T^* \simeq 5$  ((d), (h)) концентрации дефектных и кристаллических частиц примерно одинаковы при качественно разном виде соответствующих кластеров

ближайшими соседями, у которой дополнительно все 6 соседних частиц также являются кристаллическими (т.е. с  $n_{\text{нб}} = 6$ ). Концентрация  $n_{\text{сг}}^g$  таких частиц показана на рис. 1 (оливковая кривая), хорошо видно, что  $n_{\text{сг}}^g$  спадает с ростом  $T^*$  гораздо сильнее, чем концентрация кристаллических частиц  $n_{\text{сг}}$ . Отметим, что в расплаве (жидкости вблизи линии плавления) большая часть (около 75%) кристаллических частиц входит в состав “хороших” кристаллитов, поведение кластеров из таких кристаллитов будет обсуждаться ниже, а сначала обсудим свойства кластеров, состоящих из дефектных частиц и из кристаллических.

В двумерном расплаве системы Юкавы дефектных частиц примерно 20%, среди них доминируют дислокации [17, 24], доля агломератов (т.е. крупных кластеров) невелика, но с ростом температуры дислокации объединяются и образуют более крупные кластеры из дефектов. Алгоритм поиска всех частиц, входящих в рассматриваемый кластер, является довольно сложным [24] и здесь приводятся только результаты его применения. Отметим, указанный

метод успешно использовался при описании твердотельных кластеров, образующихся при охлаждении ряда многокомпонентных трехмерных расплавов [26, 27]. Многообразие крупных кластеров обоих рассматриваемых видов иллюстрирует рис. 2, на котором показано, как в двумерной жидкости Юкавы при разных температурах выглядят кластеры, состоящие как из дефектных частиц (верхняя панель), так и из кристаллических (нижняя панель). Частицы, принадлежащие одному и тому же кластеру, выделены отдельным цветом, который определяется числом частиц  $N$ , входящих в кластер, и меняется от синего цвета к красному при увеличении размера кластера (числа  $N$ ). Видно, что в расплаве (при  $T^* \simeq 1$ ) кластеры из дефектов относительно небольшие (на рис. 2а показаны только кластеры с  $N > 10$ ), а кристаллический кластер один и включает практически все кристаллические частицы системы. С ростом температуры наблюдается объединение дефектов (которыми при рассматриваемых температурах системы в основном являются дислокации) в более крупные кластеры с образованием одного крупно-

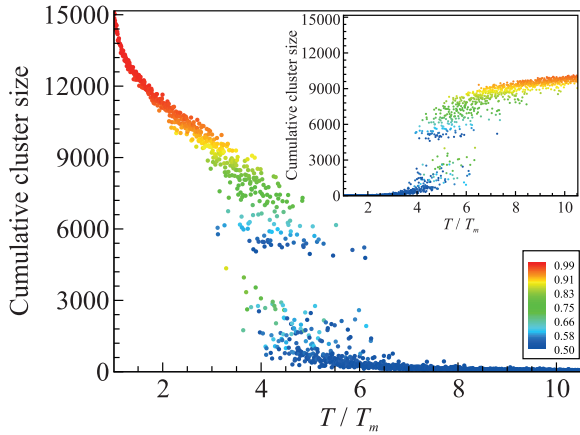


Рис. 3. (Цветной онлайн) Двумерная жидкость Юкавы. Кумулятивные характеристики кластеров, состоящих из кристаллических частиц в зависимости от приведенной температуры  $T^*$ . Показано изменение с температурой параметра  $N_{1/2}$ , который определяется из условия, что в кластерах с  $N > N_{1/2}$  содержится половина всех частиц (дефектных или кристаллических, в зависимости от рассматриваемых кластеров). Цвет частиц определяется долей кластеров, состоящих из числа частиц больше  $N$ , и меняется от синего к красному в диапазоне  $(\frac{1}{2} \div 1)$ . В случае расплава в одном крупном кластере содержатся почти все кристаллические частицы. С ростом температуры такой кластер разрушается и деградирует, так что в системе возникают кластеры разных размеров, что видно из наблюдаемого кроссовера в поведении кумулянта  $N_{1/2}$  в диапазоне температур  $T^* \simeq 4 \div 6$ , в котором величина  $N_{1/2}$  резко падает. На вставке представлены те же зависимости, но для кластеров из дефектов. Так же, как и в случае кристаллических кластеров, наблюдается резкое изменение параметра  $N_{1/2}$  в том же температурном интервале ( $4 \div 6$ )

го кластера при  $T^* \simeq 5$ . Кристаллические кластеры проявляют обратную тенденцию: крупный кластер деградирует и разрушается на более мелкие с ростом температуры. Отметим, что при  $T^* \simeq 5$  (рис. 2d, h) концентрации дефектов и кристаллических частиц примерно одинаковы, при качественно совершенно разном виде соответствующих кластеров. Дополнительно, фрактальная структура кластеров обоих типов также хорошо видна на данном рисунке и отражает перколяционный характер их формирования.

Для количественного описания данных кластеров удобно использовать кумулятивные распределения  $C(>N)$ , которые определяют долю частиц, входящих в кластеры, содержащие больше  $N$  атомов и интегральные характеристики такого распределения, например, величину  $N_{1/2}$ , которая определяется из условия  $C(< N_{1/2}) = \frac{1}{2}$ , т.е. в кластерах с  $N > N_{1/2}$  содержится половина всех частиц (дефектных или

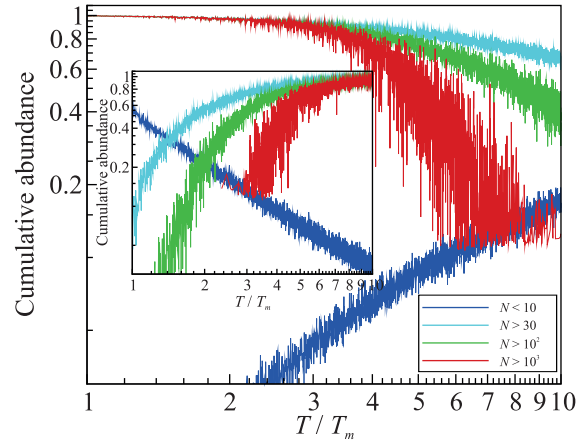


Рис. 4. (Цветной онлайн) Двумерная жидкость Юкавы. Представлены кумулянты  $C(>N)$  для ряда значений  $N$  в зависимости от приведенной температуры  $T^*$  для кластеров, состоящих из кристаллических частиц. Кумулянт  $C(>N)$  определяет долю всех кластеров в системе, число частиц в которых превышает  $N$ . Показаны распределения для  $N < 10$  (синяя кривая),  $N > 30$  (бирюзовая кривая),  $N > 10^2$  (зеленая кривая) и  $N > 10^3$  (красная кривая). На вставке показаны те же распределения, но для кластеров из дефектов

кристаллических, в зависимости от рассматриваемого кластера). Такие кумулятивные характеристики более наглядны, чем, например, спектр кластеров по размерам (особенно в случаях вырождения, когда почти все частицы входят в один кластер). На рисунке 3 показаны зависимости кумулянта  $N_{1/2}$  в зависимости от приведенной температуры  $T^*$  для обоих видов кластеров. Обе зависимости демонстрируют важный результат – резкое изменение (кроссовер) разнообразия кластеров в исследуемой двумерной жидкости при температурах  $T^* \simeq 4 \div 6$ . Красным цветом на данном рисунке показаны температурный интервал, в котором в системе существует только один крупный кластер (для кластеров обоих видов), а синим – область разнообразия, где присутствуют кластеры самых разных размеров. Кумулятивные распределения  $C(>N)$  для разных значений  $N$  показаны на рис. 4. для кластеров обоих видов (на вставке показаны зависимости  $C(>N)$ , но для кластеров, состоящих из дефектов). Хорошо видно, что с ростом температуры концентрация небольших кластеров растет среди кристаллитов и падает среди кластеров из дефектов, крупные же кластеры появляются и исчезают в одном температурном интервале, указанном выше.

В заключение рассмотрим свойства кластеров, состоящих из “хороших” кристаллических частиц, концентрация которых показана на рис. 1 (оливко-

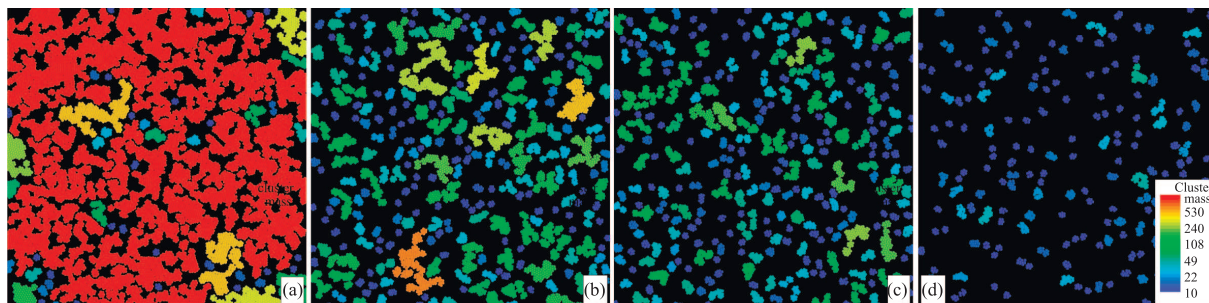


Рис. 5. (Цветной онлайн) Двумерная жидкость Юкавы. Пространственное распределение кластеров, состоящих из “хороших” кристаллитов (концентрация которых представлена на рис. 1) при разных значениях приведенной температуры системы  $T^*$ . Цвет кластера определяется числом частиц  $N$ , входящих в кластер и меняется от синего к красному при увеличении  $N$ . Рисунок соответствует значениям  $T^* \simeq 1$  (расплав) (a),  $T^* \simeq 1.5$  (b),  $T^* \simeq 2$  (c) и  $T^* \simeq 3$  (d), соответственно. В расплаве число частиц, входящих в “хорошие” кристаллиты, близко (около 75%) к полному числу кристаллических частиц, но уже при относительно небольшом повышении температуры, такие кластеры (в отличие от кристаллических) разрушаются и исчезают из системы, что выделяет двумерную жидкость Юкавы вблизи линии плавления в отдельный класс, с точки зрения свойств кристаллитов в ней

вая кривая). Такие кристаллиты также могут объединяться в кластеры, пространственное распределение которых при разных температурах показано на рис. 5. На рисунке 5a показаны такие кластеры в расплаве двумерной системы Юкавы (при  $T^* \simeq 1$ ). Здесь, как и выше, цвет кластера определяется числом частиц, входящих в кластер и меняется от синего к красному при его увеличении. Практически все “хорошие” кристаллиты объединены в расплаве в один большой кластер, который выделен красным цветом. Он содержит примерно половину всех кристаллических частиц системы. Можно показать, что все “хорошие” кристаллиты (центральная частица и ее 6 ближайших соседей) имеют форму, близкую к гексагональной, так что двумерный расплав системы Юкавы содержит в своем составе большие кластеры из сильноупорядоченных атомов. Однако при повышении температуры число “хороших” кристаллитов в системе быстро падает (гораздо быстрее, чем число кристаллических частиц) и характерные размер таких кластеров также заметно уменьшается, что иллюстрируют рис. 5b, c и d, на которых они показаны при температурах  $T^* \simeq 1.5$ ,  $T^* \simeq 2$  и  $T^* \simeq 3$  соответственно. Таким образом двумерная жидкость вблизи линии плавления сильно отличается от жидкости в остальной части фазовой диаграммы (находящейся при более высоких температурах).

В настоящей работе, на примере двумерной системы Юкавы, впервые рассмотрены свойства кластеров (как кристаллических, так и кластеров, состоящих из дефектов), образующихся в двумерной плотно упакованной жидкости в широком диапазоне температур системы. Исследованы распределения ука-

занных кластеров по размерам и изучены структурные свойства кластеров обоих видов. В диапазоне приведенных температур  $T^* \simeq (4 \div 6)$  обнаружен переход (кроссовер), в котором резко меняются свойства кластеров. Наконец, для описания кристаллических кластеров предложено использовать концепцию “хороших кристаллитов”, что позволяет выделить двумерную жидкость вблизи линии плавления в отдельный класс, с точки зрения свойств кристаллитов в ней.

**Финансирование работы.** Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (соглашение с Объединенным институтом высоких температур Российской академии наук # 075-00270-24-00.)

**Конфликт интересов.** Автор данной работы заявляет, что у него нет конфликта интересов.

1. V. L. Berezinskii, Sov. Phys. JETP **32**, 493 (1971).
2. V. L. Berezinskii, Sov. Phys. JETP **34**, 610 (1972).
3. J. M. Kosterlitz, D. J. J. Thouless, Phys. C **6**, 1181 (1973).
4. B. I. Halperin and D. R. Nelson, Phys. Rev. Lett. **41**, 121 (1978).
5. D. R. Nelson and B. I. Halperin, Phys. Rev. B **19**, 2457 (1979).
6. A. P. Young, Phys. Rev. B **19**, 1855 (1979).
7. S. T. Chui, Phys. Rev. B **28**, 178 (1983).
8. K. J. Strandburg, Rev. Mod. Phys. **60**, 161 (1988).
9. K. Zahn, R. Lenke, and G. Maret, Phys. Rev. Lett. **82**(13), 2721 (1999).
10. U. Gasser, ChemPhysChem **11**, 963 (2010).

11. Z. Wang, A.M. Alsayed, A.G. Yodh, and Y. Han, *J. Chem. Phys.* **132**, 154501 (2010).
12. S.C. Kapfer and W. Krauth, *Phys. Rev. Lett.* **114**, 035702 (2015).
13. A.L. Thorneywork, J.L. Abbott, D.L. Aarts, and R.P. Dullens, *Phys. Rev. Lett.* **118**, 158001 (2017).
14. В. Н. Рыжов, Е. Е. Тареева, Ю. Д. Фомин, Е. Н. Циок, *УФН* **187**, 921 (2017).
15. P. Hartmann, G. J. Kalman, Z. Donko, and K. Kutasi, *Phys. Rev. E* **72**, 026409 (2005).
16. B. A. Klumov, *JETP Lett.* **115**(2), 108 (2022).
17. B. A. Klumov, *JETP Lett.* **116**(10), 703 (2022).
18. B. A. Klumov, *Phys.-Uspekhi* **66**, 288 (2023).
19. V.E. Fortov and G.E. Morfill, *Complex and dusty plasmas: From Laboratory to Space*, CRC Press, N.Y. (2010).
20. C.N. Likos, *Phys. Rep.* **348**, 267 (2001).
21. A.P. Hynninen and M. Dijkstra, *Phys. Rev. E* **68**, 021407 (2003).
22. S. Plimpton, *J. Comput. Phys.* **117**(1), 1 (1995).
23. G. Voronoi, *J. Reine Angew. Math.* **134**, 198 (1908).
24. B. A. Klumov, *Phys.-Uspekhi* **53**(10), 1053 (2010).
25. W. Qi, A.P. Gantapara, and M. Dijkstra, *Soft Matter* **10**, 5449 (2014).
26. R. E. Ryltsev, B. A. Klumov, N. M. Chtchelkatchev, and K. Yu. Shunyaev, *J. Chem. Phys.* **149**, 164502 (2018).
27. B. A. Klumov, R. E. Ryltsev, and N. M. Chtchelkatchev, *J. Chem. Phys.* **149**, 134501 (2018).