



INSTITUTE FOR HIGH PRESSURE PHYSICS

Переход Березинского-Костерлица- Таулеса

и двумерное плавление

В. Н. РЫЖОВ,

Ю. Д. ФОМИН, Е. Н. ЦИОК

Институт физики высоких давлений РАН

ОФН 2016.12.21

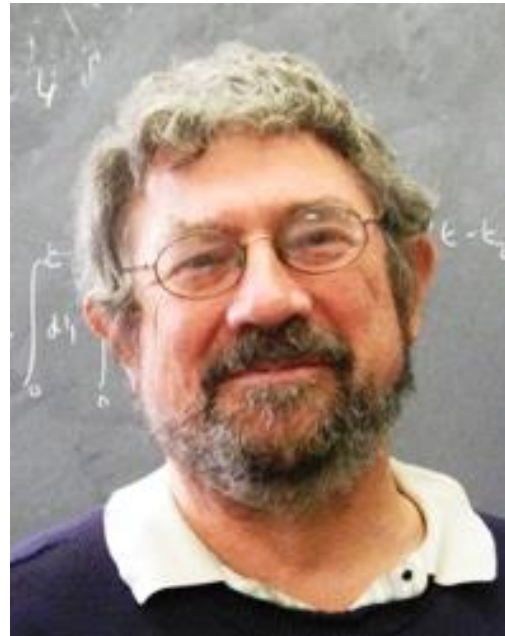
Содержание

- *Фазовый переход в двумерных вырожденных системах – переход Березинского-Костерлица-Таулеса*
- *Непрерывное двухстадийное плавление двумерных кристаллических решеток – теория Березинского-Костерлица-Таулеса -Хальперина-Нельсона-Янга (BKTNY)*
- *Переход первого рода в двух измерениях*
- *Влияние случайного пиннинга на сценарий плавления*
- *Эксперимент и компьютерное моделирование*
- *Потенциалы с отрицательной кривизной в области отталкивания – компьютерное моделирование*
- *Новый сценарий двумерного плавления*

Переходы Березинского - Костерлица - Таулеса



ВАДИМ ЛЬВОВИЧ
БЕРЕЗИНСКИЙ
(1935—1980)



J. Michael Kosterlitz



David Thouless

Переходы Березинского – Костерлица – Таулеса : фазовый переход в плоских вырожденных системах

В плоских и одномерных вырожденных системах не может существовать отличного от нуля спонтанного параметра порядка (Л.Д. Ландау, ЖЭТФ 7, 627 (1937); R. Peierls, Helv. Phys. Acta, v.VII, suppl. 2, 81 (1936); Н.Н. Боголюбов, Квазисредние в задачах статистической механики, Препринт R-1451, ОИЯИ, Дубна, 1963; P.C. Hohenberg, Phys. Rev. 158, 383 (1967); N. Mermin, H. Wagner, Phys. Rev. Lett. 17, 1133 (1967)).

Среднеквадратичные флуктуации в заданной точке

$$\langle \delta\varphi_{\perp}(x)\delta\varphi_{\perp}(x') \rangle = G_{\perp}(x, x') = \frac{1}{(2\pi)^d} \int \langle |\delta\varphi_{\perp}(q)|^2 \rangle e^{iq(x - x')} d^d q$$

$$\langle \delta\varphi_{\perp}^2(x) \rangle = G_{\perp}(x, x) = \frac{T}{(2\pi)^d} \int \frac{d^d q}{(h/q) + Jq^2}$$

Переходы Березинского – Костерлица – Таулеса: фазовый переход в плоских вырожденных системах

Корреляционные функции в системах с короткодействием (высокие температуры)

$$\langle \varphi(\mathbf{x}) \varphi(\mathbf{x} + \mathbf{a}) \rangle \sim J/T \ll 1.$$

$$\langle \varphi(\mathbf{x}) \varphi(\mathbf{x}') \rangle \sim \langle \varphi(\mathbf{x}) \varphi(\mathbf{x} + \mathbf{a}) \rangle \langle \varphi(\mathbf{x} + \mathbf{a}) \varphi(\mathbf{x} + 2\mathbf{a}) \rangle \dots$$

$$\dots \langle \varphi(\mathbf{x} + (N - 1)\mathbf{a}) \varphi(\mathbf{x}') \rangle \sim \left(\frac{J}{T} \right)^{\frac{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|}{a}} \sim$$

$$\sim \exp \left(- \frac{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|}{a} \ln \frac{T}{J} \right)$$

**Радиус корреляций меньше радиуса
действия сил!**

Переходы Березинского – Костерлица – Таулеса: фазовый переход в плоских вырожденных системах ($n=2$)

Ориентационные корреляции (низкие температуры).

Пример: X-Y модель:

$$H = -\frac{J}{2} \sum_{\langle i \neq j \rangle} S_i S_j \approx \frac{J}{2} \int d^d r (\nabla \omega)^2$$

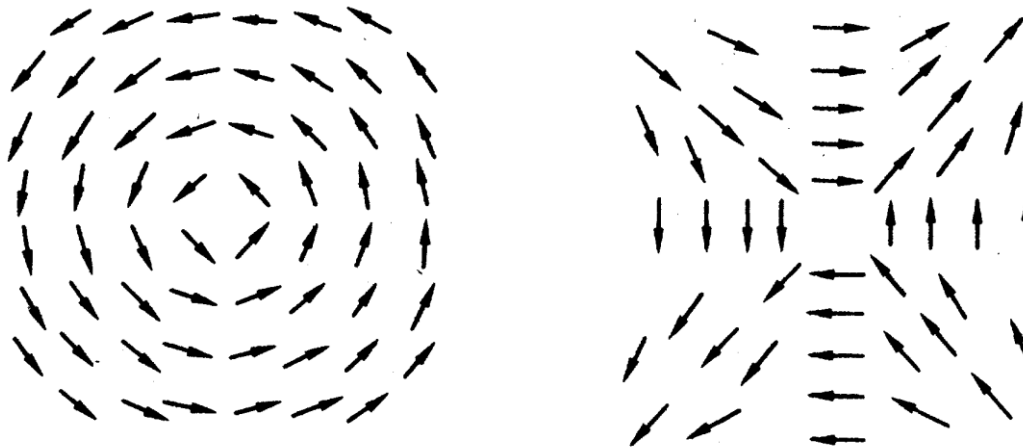
$$2G(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \langle \cos(\omega(\mathbf{x}) - \omega(\mathbf{x}')) \rangle = \langle e^{i(\omega(\mathbf{x}) - \omega(\mathbf{x}'))} \rangle$$

$$2G(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \text{const} \left(\frac{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|}{a} \right)^{-T/2\pi J} \quad (d=2)$$

Отличная от нуля поперечная жесткость!

Переходы Березинского – Костерлица – Таулеса: фазовый переход в плоских вырожденных системах

Механизм перехода – возникновение сингулярных топологических дефектов (вихрей) (В.Л. Березинский, ЖЭТФ 59, 907 (1970); ЖЭТФ 61, 1144 (1971); J.M. Kosterlitz and D. Thouless, J.Phys. C 5 L124–6 (1972); 6, 1181 (1973).



$$\frac{\delta H}{\delta \omega} = J \nabla^2 \omega = 0 \quad \oint d\omega = 2\pi s, s = 0; \pm 1; \pm 2 \dots$$

$$\omega = s \arctan(y/x); \vec{v}_s = \nabla \omega = \frac{s}{r} \vec{e}_\varphi$$

Переходы Березинского – Костерлица – Таулеса: фазовый переход в плоских вырожденных системах

Энергия вихря

$$E = \frac{J}{2} \int d^2r (\nabla \omega)^2 = \pi s^2 J \int_a^R \frac{dr}{r} = \pi s^2 J \ln(R/a)$$

Энтропия вихря

$$\Delta S = k_B \ln(R/a)^2$$

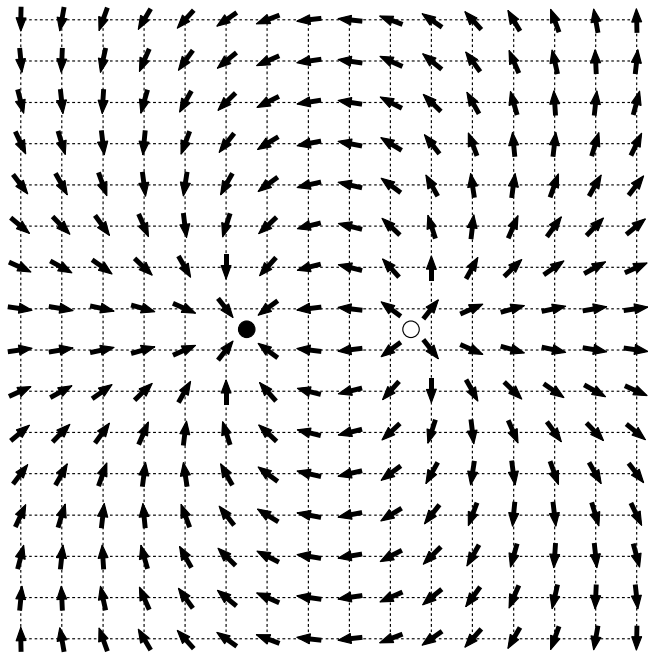
Свободная энергия

$$\Delta F = E - T \Delta S = \pi s^2 J \ln(R/a) - 2k_B T \ln(R/a)$$

Температура перехода

$$T_c = \frac{\pi s^2 J}{2}$$

Переходы Березинского-Костерлица-Таулеса (фазовый переход в плоских вырожденных системах)



$$E_{s,-s} = 2\pi J s^2 \ln \frac{|x - x'|}{a}; |x - x'| \gg a$$

Двумерный кулоновский газ

$$H_q = -\pi J \sum_{i \neq j} s_i s_j \ln \frac{|x - x'|}{a} + E_c \sum_i s_i^2$$

Теория двумерного плавления Березинского-Костерлица-Таулеса-Хальперина-Нельсона-Янга (BKTHNY) (*M. Kosterlitz and D.J. Thouless, J. Phys. C 6, 1181 (1973); B.I. Halperin and D.R. Nelson, Phys. Rev. Lett. 41, 121 (1978); D.R. Nelson and B.I. Halperin, Phys. Rev. B 19, 2457 (1979); A.P. Young, Phys. Rev. B 19, 1855 (1979)*)



B.I. Halperin



D.R. Nelson



A.P. Young

Теория двумерного плавления Березинского-Костерлица-Таулеса-Хальперина-Нельсона-Янга (BKTNY)

Трансляционный и ориентационный порядок в двумерном кристалле

(N. D. Mermin, Phys. Rev. 176, 250 (1968))

Трансляционный порядок

$$\langle |\mathbf{u}|^2 \rangle = k_B T \int \frac{A_{ii}(\hat{n})}{k^2} \frac{d^2 k}{(2\pi)^2} = \frac{k_B T}{(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} A_{ii}(\varphi) d\varphi \int_0^{1/d} \frac{dk}{k}$$

$$g_{\mathbf{G}}(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) = \langle \rho(\mathbf{r}_1) \rho(\mathbf{r}_2) \rangle - \bar{\rho}^2 \propto \frac{1}{r^{k_B T \alpha_G}} \cos \mathbf{G} \mathbf{r},$$

$$\alpha_G = \frac{G_i G_l A_{il}}{2\pi}$$

Теория двумерного плавления Березинского-Костерлица-Таулеса-Хальперина-Нельсона-Янга (ВКТННУ)

Ориентационный порядок

$$\vartheta(x, y) = \frac{1}{2}(\partial_x u_y - \partial_y u_x)$$

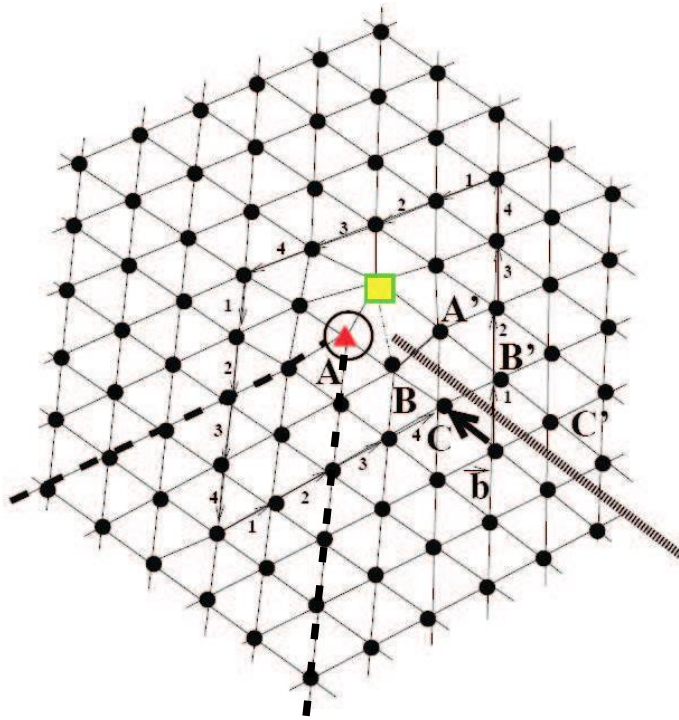
$$\langle \vartheta^2 \rangle = \frac{k_B T}{(4\pi)^2} \sum_{ij} \int_0^{2\pi} f_i(\varphi) f_j(\varphi) A_{ij}(\hat{n}) d\varphi \int_0^{1/d} k dk,$$

$$\langle \vartheta(\mathbf{r}_1) \vartheta(\mathbf{r}_2) \rangle = \frac{k_B T}{(4\pi)^2} \sum_{ij} \int_0^{2\pi} f_i(\varphi) f_j(\varphi) A_{ij}(\hat{n}) d\varphi \int_0^{1/d} \cos \mathbf{k}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) k dk.$$

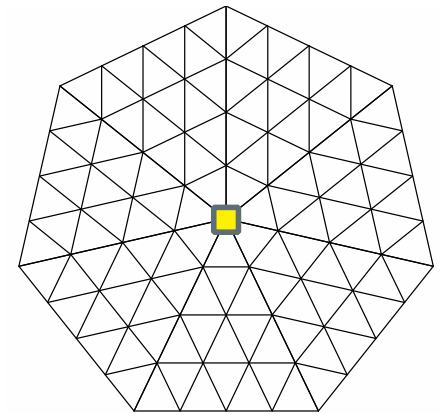
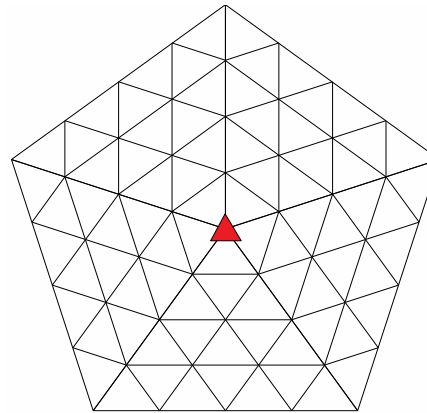
Ориентационный порядок дальнего действия!

Теория двумерного плавления Березинского-Костерлица-Таулеса-Хальперина-Нельсона-Янга (ВКТННУ)

Дислокации и дисклинации – базовые топологические дефекты в теории ВКТННУ



Дислокация может рассматриваться как дисклинационный диполь!



Теория двумерного плавления Березинского-Костерлица-Таулеса-Хальперина-Нельсона-Янга (ВКТННУ)

Упругий гамильтониан для двумерной треугольной решетки

$$H_E = \frac{1}{2} \int d^2r \left[2\mu u_{ij}^2 + \lambda u_{kk}^2 \right],$$

где

$$u_{ij} = \frac{1}{2} \left[\frac{\partial u_i(\mathbf{r})}{\partial r_j} + \frac{\partial u_j(\mathbf{r})}{\partial r_i} \right]$$

и μ и λ - коэффициенты Ламэ.

Дислокация

$$\oint d\mathbf{u} = a_0 \mathbf{b}(\mathbf{r}) = -n(\mathbf{r})a_0 \mathbf{e}_1 - m(\mathbf{r})a_0 \mathbf{e}_2$$

Дисклинация

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

Теория двумерного плавления Березинского-Костерлица-Таулеса-Хальперина-Нельсона-Янга (BKTHNY)

Гамильтониан дислокаций – векторный Кулоновский газ

$$H_{dis} = -\frac{a_0^2 K}{8\pi} \sum_{i \neq j}^M \left\{ \mathbf{b}(\mathbf{r}_i) \mathbf{b}(\mathbf{r}_j) \ln \frac{r_{ij}}{a} - \frac{(\mathbf{b}(\mathbf{r}_i) \mathbf{r}_{ij})(\mathbf{b}(\mathbf{r}_j) \mathbf{r}_{ij})}{r_{ij}^2} \right\} +$$
$$+ E_d \sum_{i=1}^M \mathbf{b}^2(\mathbf{r}_i), \quad K = \frac{4\mu(\mu + \lambda)}{2\mu + \lambda}$$

Механизм плавления – диссоциация дислокационных пар!

В точке перехода $g_G(r) \propto r^{-\eta_G}$ $1/4 \leq \eta_G(T_m) \leq 1/3$

Выше точки перехода $\frac{a_0^2 K}{k_B T} \simeq 16\pi / (1 - c|t|^\nu)$

где $t = (T - T_m)/T_m$, $\nu = 0.3696$.

Теория двумерного плавления Березинского-Костерлица-Таулеса-Хальперина-Нельсона-Янга (BKTНNY)

Гексатическая фаза: квазидальний ориентационный порядок при наличии дислокации!

$$u \propto \ln L \longrightarrow \omega \propto 1/L$$

Ориентационный параметр порядка для треугольной решетки

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{6i\vartheta(\mathbf{r})}$$

Гамильтониан

$$H_A = \frac{1}{2} K_A(T) \int d^2r (\nabla \vartheta(\mathbf{r}))^2$$

$$H_{disc} = -\frac{\pi K_A(T)}{36} \sum_{\mathbf{r} \neq \mathbf{r}'} s(\mathbf{r}) s(\mathbf{r}') \ln \frac{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}{a} + E_{cd} \sum_{\mathbf{r}} s^2(\mathbf{r})$$

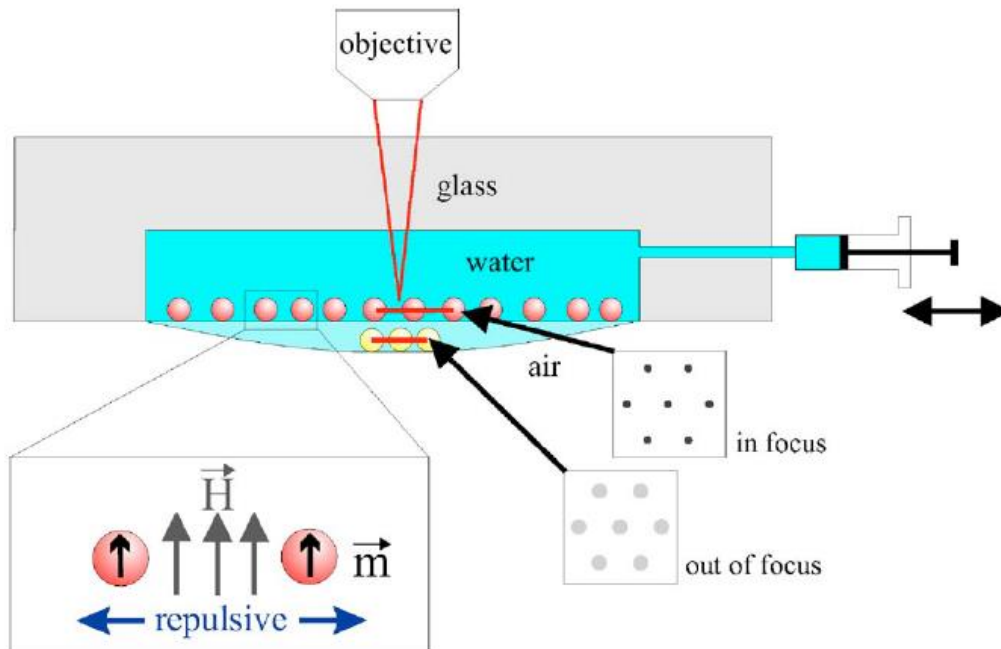
$$T_i = \frac{\pi K_A(T_i)}{72 k_B T_i} \quad \langle \psi^*(\mathbf{r}) \psi(0) \rangle \propto r^{-\eta_6(T)} \quad \eta_6(T_i) = 1/4$$

Нерешенная проблема – нет микроскопического определения модуля Франка и энергии ядра дефекта

Теория двумерного плавления Березинского-Костерлица-Таулеса-Хальперина-Нельсона-Янга (BKTHNY) – экспериментальная проверка

Экспериментальная проверка – парамагнитные коллоиды

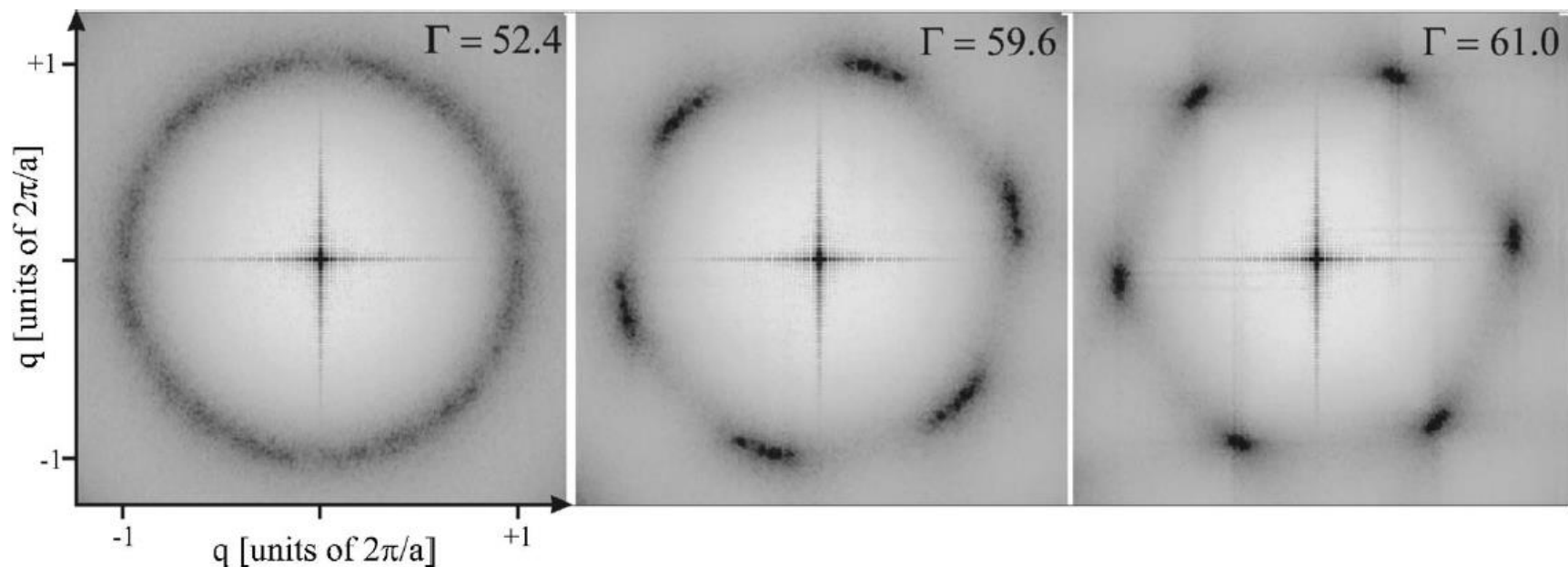
(G.Maret et al, Phys. Rev. Lett. 82, 2721 (1999); Phys. Rev. Lett. 85, 3656 (2000); Phys. Rev. Lett. 79, 175 (1997); Phys. Rev. Lett. 92, 215504 (2004); Phys. Rev. E 75, 031402 (2007); Phys. Rev. Lett. 113, 127801 (2014); Phys. Rev. E 88, 062305 (2013); Phys. Rev. Lett. 111, 098301 (2013))



$$\beta v(r) = \frac{\Gamma}{(r/d_{nn})^3}$$

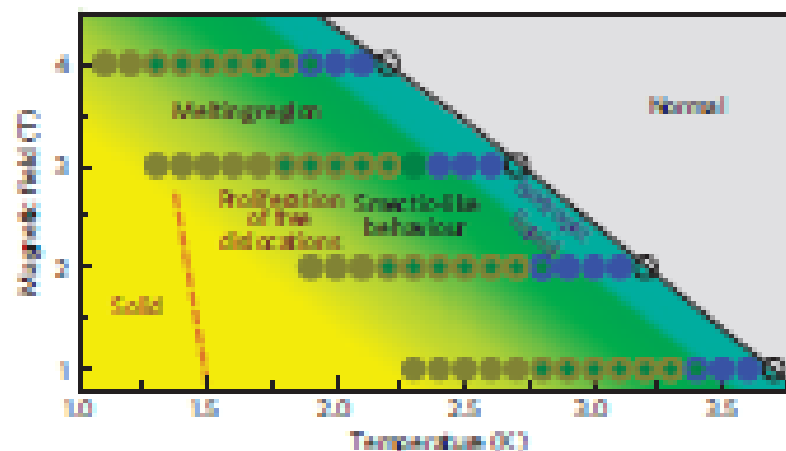
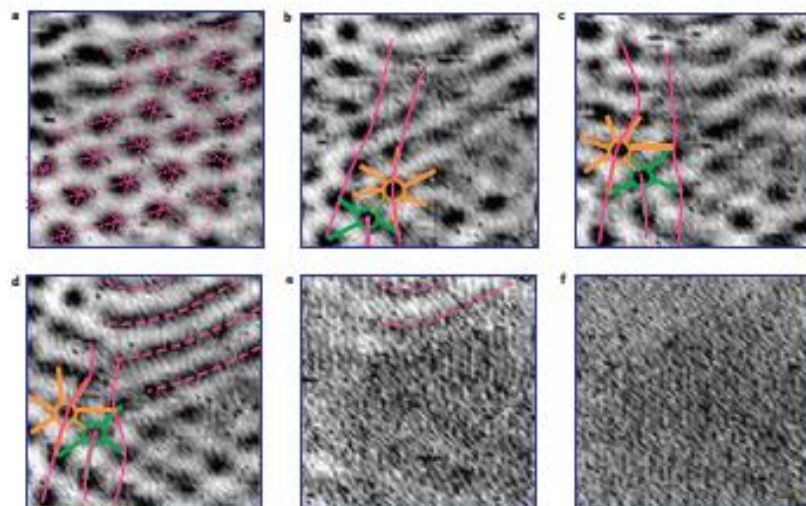
Теория двумерного плавления Березинского-Костерлица-Таулеса-Хальперина-Нельсона-Янга (BKTHNY) – экспериментальная проверка

Structure factor $S(\vec{q})$



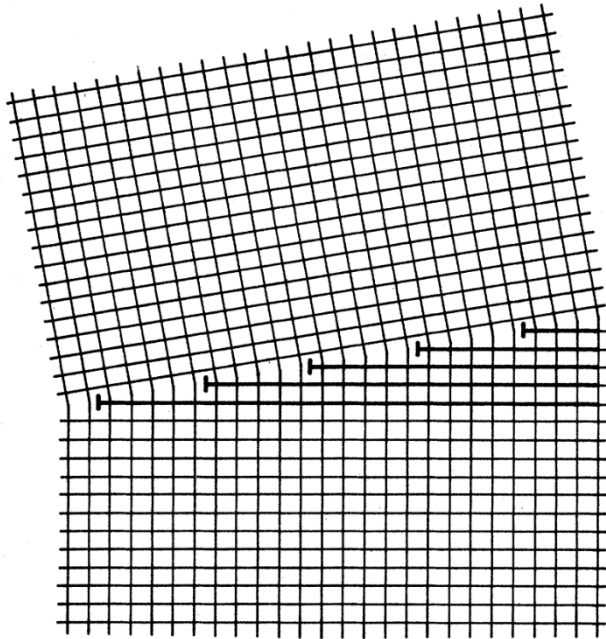
Direct observation of melting in a two-dimensional superconducting vortex lattice

I. Guillamón¹, H. Suderow^{1*}, A. Fernández-Pacheco^{2,3,4}, J. Sesé^{2,4}, R. Córdoba^{2,4}, J. M. De Teresa^{3,4}, M. R. Ibarra^{2,3,4} and S. Vieira¹



Теории двумерного плавления – переход первого рода

**Плавление посредством образования границ зерен
(S.T. Chui, Phys. Rev. Lett. 48, 933 (1982); Phys. Rev. B 28, 178 (1983))**



$$E_c/k_B T \leq 2.84$$

Dissociation of disclination quadrupoles (V.N. Ryzhov, Zh. Eksp. Theor. Phys. 100, 1627 (1991)),

Теории двумерного плавления – переход первого рода

**V.N. Ryzhov, Dislocation-disclination melting of two-dimensional lattices,
Zh. Tksp. Theor. Phys. 100, 1627 – 1639 (1991)**

$$\begin{aligned} F^s = & \frac{\pi}{18} \sum_{i \neq j}^N s_i s_j \left\{ \frac{K}{8} r_{ij}^2 \ln \frac{r_{ij}}{a} - 2\alpha \ln \frac{r_{ij}}{a} \right\} + E_c \sum_{i=1}^N s_i^2 + \\ & + \frac{a_0 K}{12} \sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^N s_j \epsilon_{mn} b_n(\mathbf{r}_i) (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)_m \left(\ln \frac{r_{ij}}{a} + C \right) - \\ & - \frac{a_0^2 K}{8\pi} \sum_{i \neq j}^M \left\{ \mathbf{b}(\mathbf{r}_i) \mathbf{b}(\mathbf{r}_j) \ln \frac{r_{ij}}{a} - \frac{(\mathbf{b}(\mathbf{r}_i) \mathbf{r}_{ij})(\mathbf{b}(\mathbf{r}_i) \mathbf{r}_{ij})}{r_{ij}^2} \right\} + E_d \sum_{i=1}^M \mathbf{b}^2(\mathbf{r}_i) \end{aligned}$$

Поле смещений при наличии свободной дисклинации

$$u \propto R \ln R$$

Квазидальний ориентационный порядок отсутствует!

**Критическое значение энергии ядра дислокации
зависит от его размера!**

Сценарии двумерного плавления – теория ВКТНУ или переход первого рода?

На основе ранних экспериментов (электроны на поверхности жидкого гелия) и компьютерного моделирования предполагалось, что в случае дальнедействующих взаимодействий (кулоновское, диполь-дипольное) система плавится в соответствии со сценарием ВКТНУ посредством двух непрерывных переходов с промежуточной гексатической фазой. В случае короткодействующих потенциалов (включая потенциал твердых дисков) плавление, вероятно, происходит посредством перехода первого рода.

В.М. Беданов, Г.В. Гадиак, Ю.Е. Лозовик, ЖЭТФ 88, 1622 (1985).

Yu. E. Lozovik and V. M. Farztdinov, Solid State Commun. 54, 725 (1985).

V.N. Ryzhov and E.E. Tareyeva, Phys. Rev. B 51, 8789 (1995).

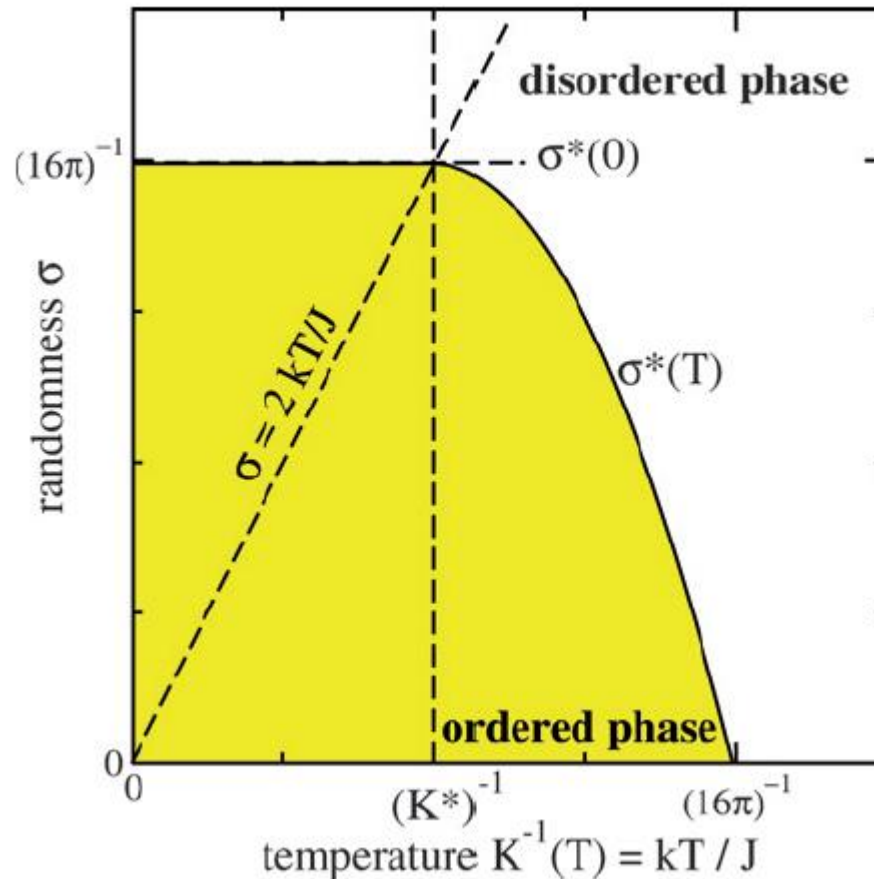
V.N. Ryzhov and E.E. Tareeva, Zh. Eksp. Teor. Fiz. 108, 2044 (1995).

V.N. Ryzhov and E.E. Tareyeva, Physica A 314, 396 (2002).

Влияние случайного пиннига на сценарий плавления в теории ВКТНУ

In experim
on an int
substrate
to some r

As it wa
scenario
Phys. Re
C-Solid
Fertig, P
the hexa
predicted
increasir
establish



dsorption
on solid
order due

ge melting
R. Nelson,
n, J. Phys.
and H. A.
y range of
hile T_i is
ases with
te can be

Корреляционные функции ориентационного и трансляционного параметров порядка (компьютерное моделирование)

Ориентационный и трансляционный параметры порядка

$$\Psi_6(\mathbf{r}_i) = \frac{1}{n(i)} \sum_{j=1}^{n(i)} e^{in\theta_{ij}} \quad \psi_6 = \frac{1}{N} \left\langle \left\langle \left| \sum_i \Psi_6(\mathbf{r}_i) \right| \right\rangle \right\rangle_{rp} \quad \psi_T = \frac{1}{N} \left\langle \left\langle \left| \sum_i e^{i\mathbf{G}\mathbf{r}_i} \right| \right\rangle \right\rangle_{rp}$$

**Корреляционная функция
ориентационного параметра
порядка $G_6(r)$**

**Корреляционная функция
трансляционного параметра
порядка $G_T(r)$**

$$G_6(r) = \left\langle \frac{\langle \Psi_6(\mathbf{r}) \Psi_6^*(\mathbf{0}) \rangle}{g(r)} \right\rangle_{rp} \quad G_T(r) = \left\langle \frac{\langle \exp(i\mathbf{G}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)) \rangle}{g(r)} \right\rangle_{rp}$$

Корреляционные функции ориентационного и трансляционного параметров порядка

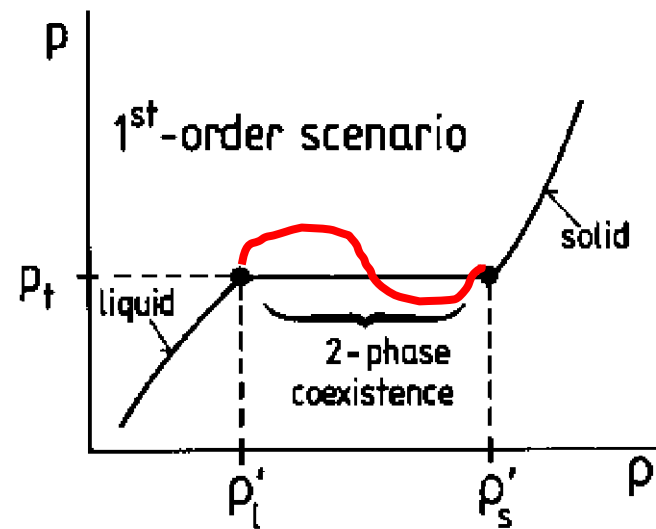
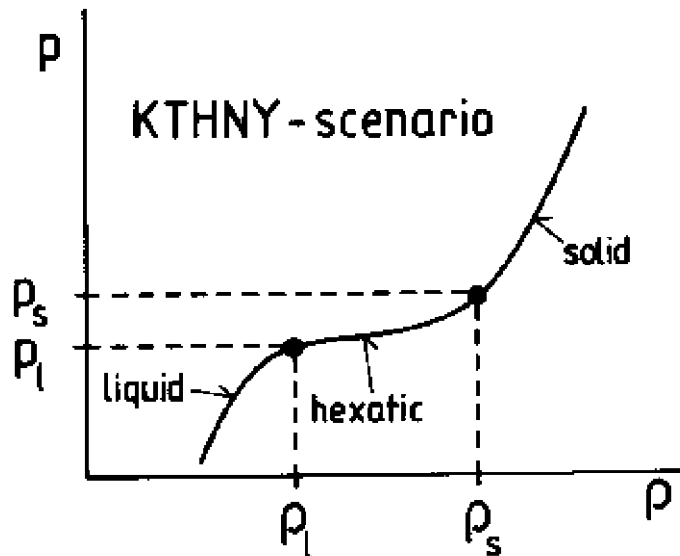
$$C_G(\mathbf{r}) \sim \begin{cases} r^{-\eta_G(T)}, & T \leq T_m, \\ e^{-r/\xi_+(T)}, & T > T_m \end{cases}$$

$$C_6(\mathbf{r}) \sim \begin{cases} r^{-\eta_6(T)}, & T_m < T \leq T_l, \\ e^{-r/\xi_6(T)}, & T > T_l \end{cases},$$

Сценарии плавления в двух измерениях: Переход первого рода или непрерывный переход. Вопрос: как отличить первый род от непрерывного перехода в компьютерном моделировании?

K. Binder, S. Sengupta, P. Nielaba, J. Phys.: Condens. Matter 14, 2323 (2002)

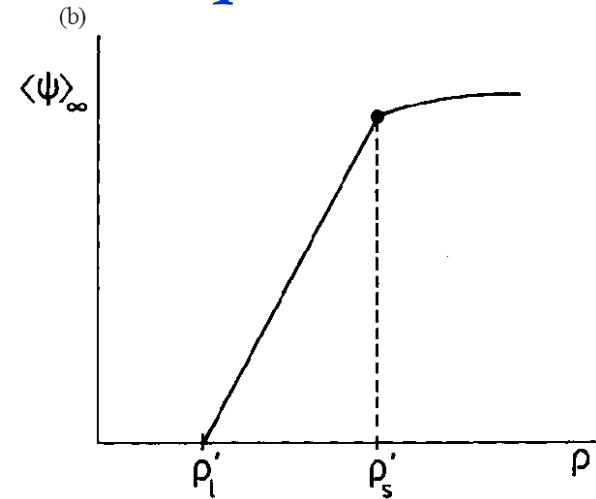
1. Isotherms



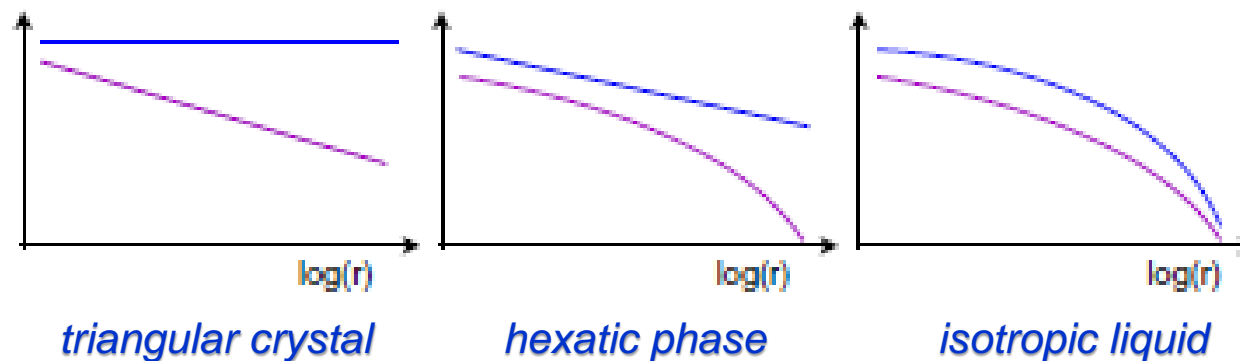
Qualitative view of the isotherms according to the BKTNY theory (left) and for the case of the first-order transition (right)

Сценарии плавления в двух измерениях: Переход первого рода или непрерывный переход.

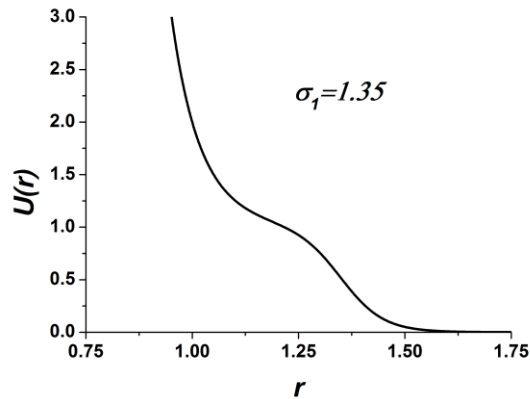
2. A schematic diagram of the variation of the bond-orientational order parameter expected in the case of the first-order transition



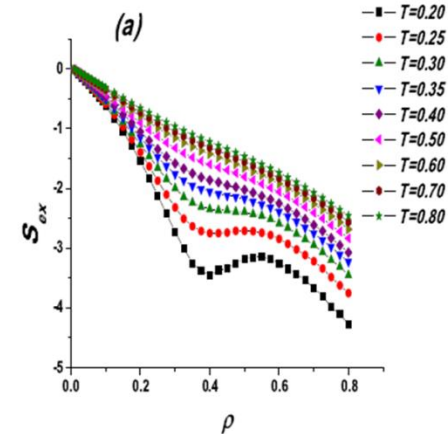
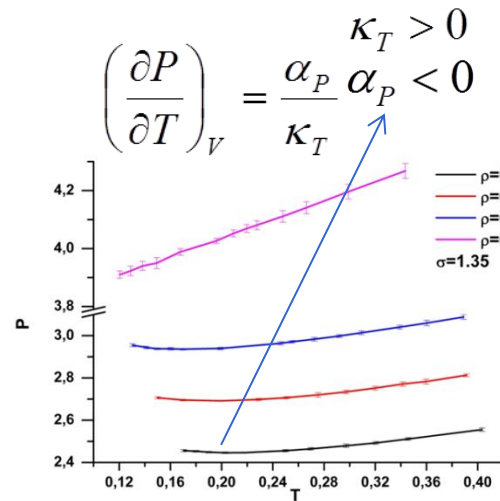
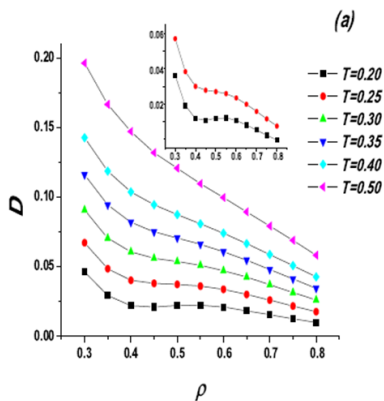
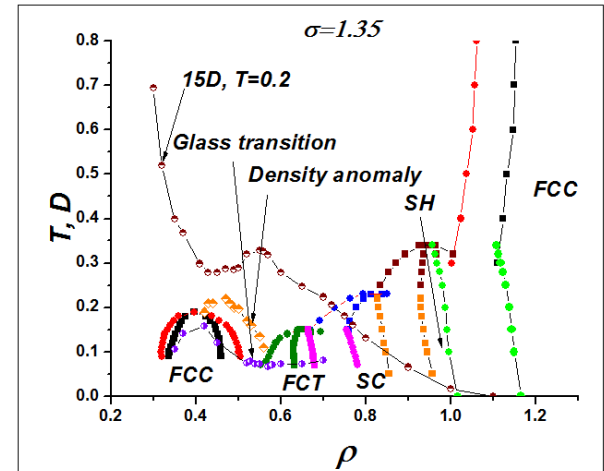
3. The schematic behaviors of the logarithms of the bond-order correlation function (blue) and the translational correlation function (purple).



Phase diagrams and anomalies for SRSS (Yu. D. Fomin, N.V. Gribova, V.N.Ryzhov, S.M. Stishov, and Daan Frenkel, J. Chem. Phys. 129, 064512 (2008); Yu.D. Fomin, V.N. Ryzhov, and E.N. Tsiok, J. Chem. Phys. 134, 044523 (2011); Phys. Rev. E 87, 042122 (2013); R.E. Ryltsev, N.M. Chtchelkatchev, and V.N. Ryzhov, Phys. Rev. Lett. 110, 025701 (2013)).



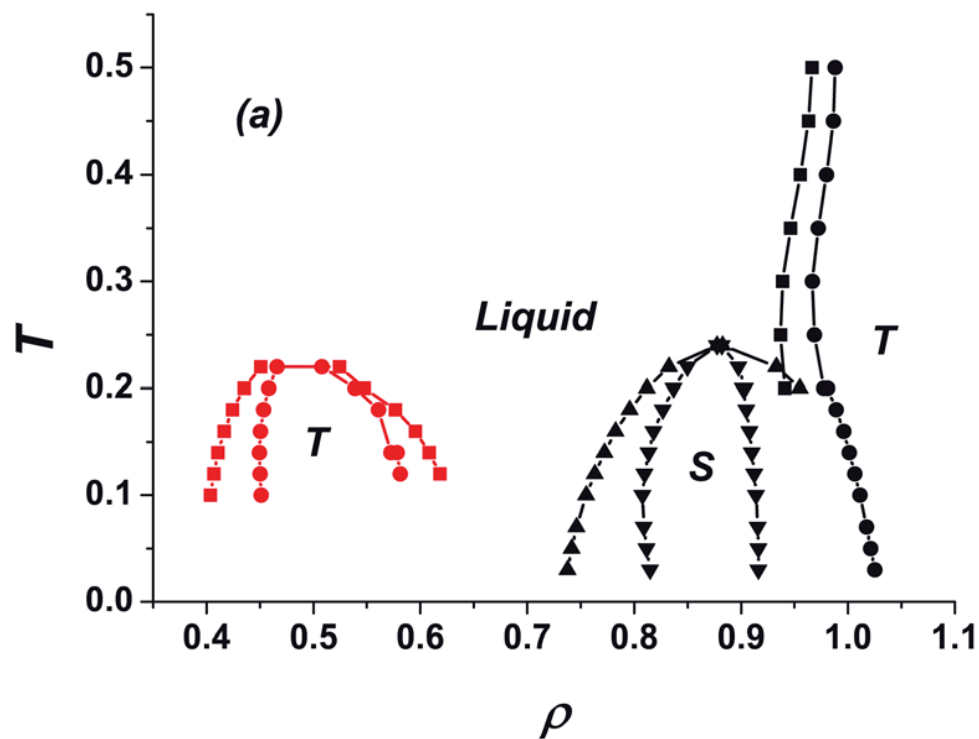
Phase diagram for $\sigma = 1.35$
(with diffusion and density anomalies and glass transition).



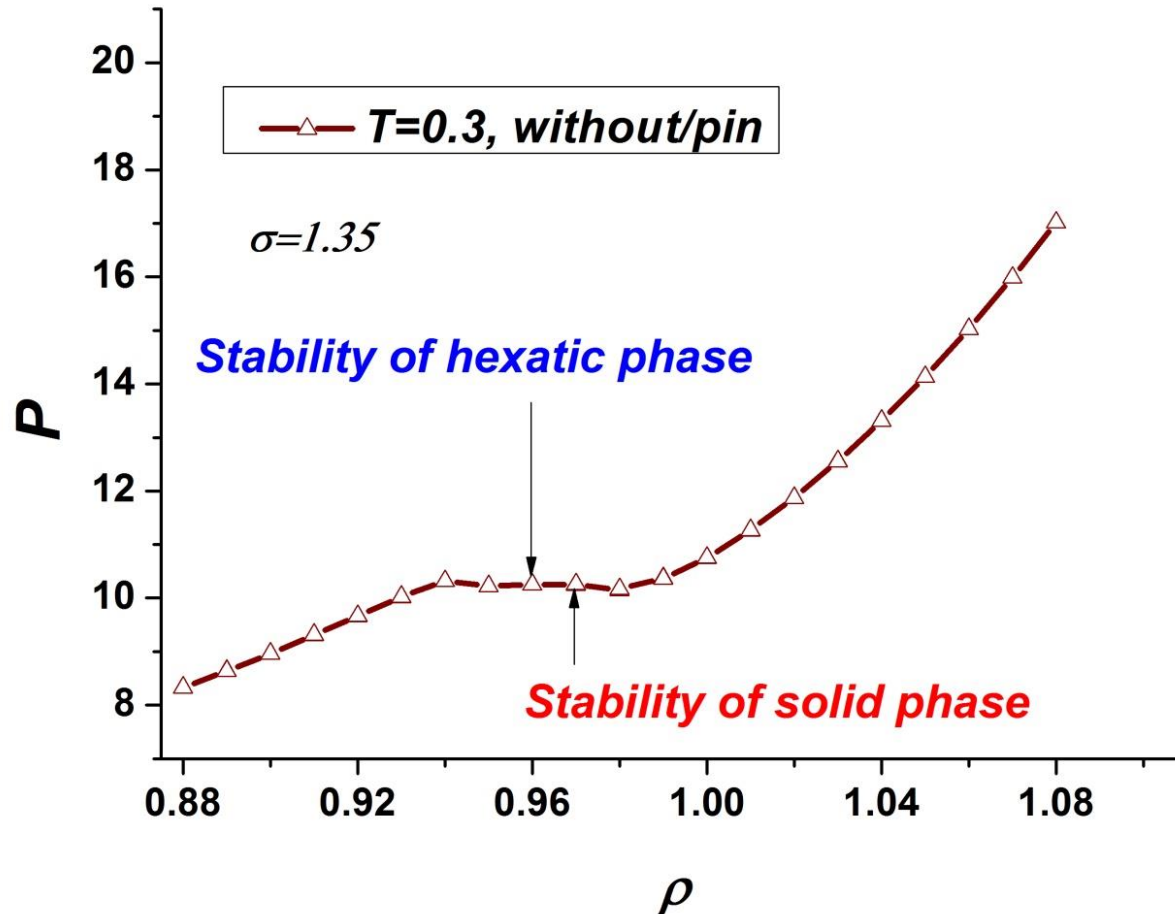
Фазовая диаграмма из вычисления свободной энергии $\sigma=1.35$

(D. E. Dudalov, Y. D. Fomin, E. N. Tsiok and V. N. Ryzhov, Soft Matter 10, 4966 (2014) ; J. Chem. Phys. 141, 18C522 (2014); Phys. Rev. E 92, 032110 (2015); arXiv: 1608.05232v1).

Helmholtz free energy calculations for different phases and a common tangent to them (D. Frenkel and B. Smit, *Understanding Molecular Simulation* (Academic, New York, 2002))

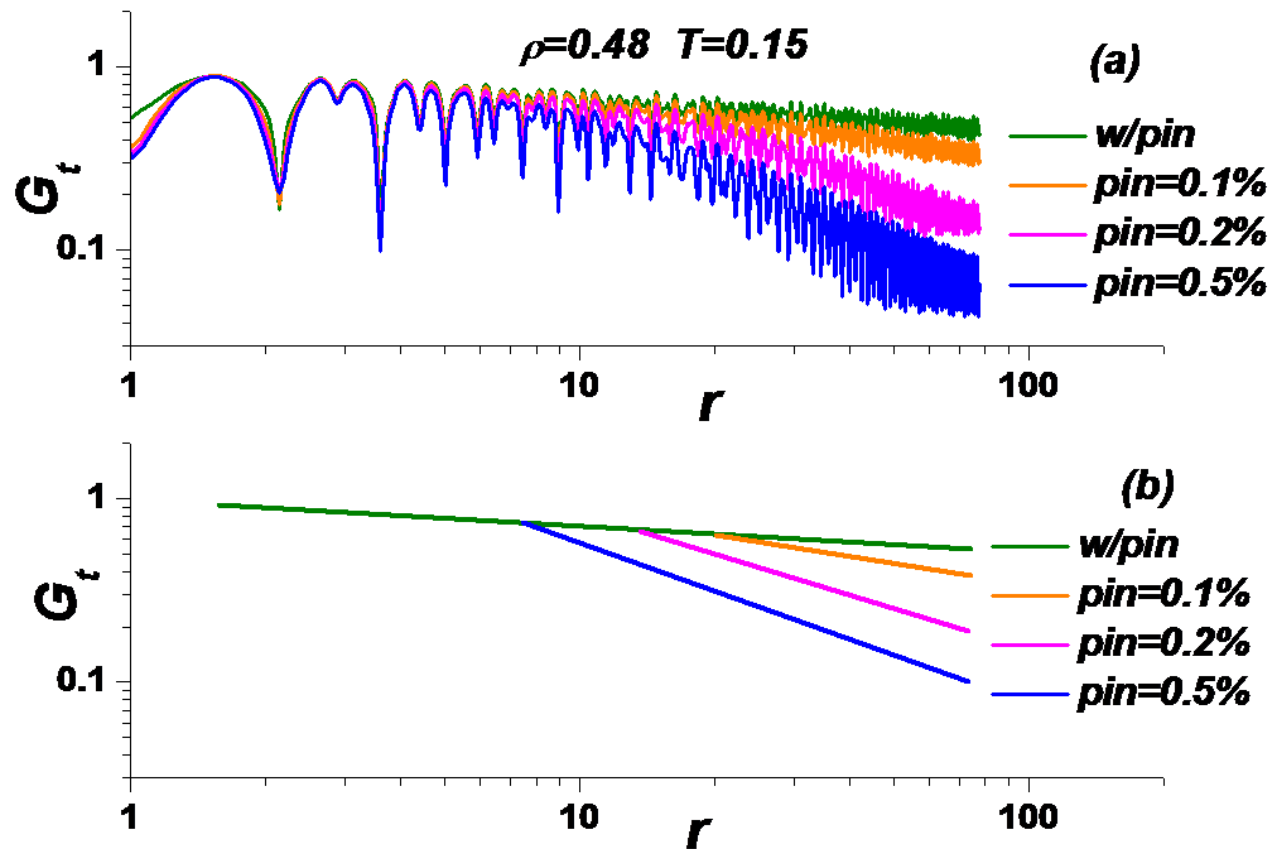


Melting transition in core-softened system with $\sigma=1.35$ at high densities without pinning

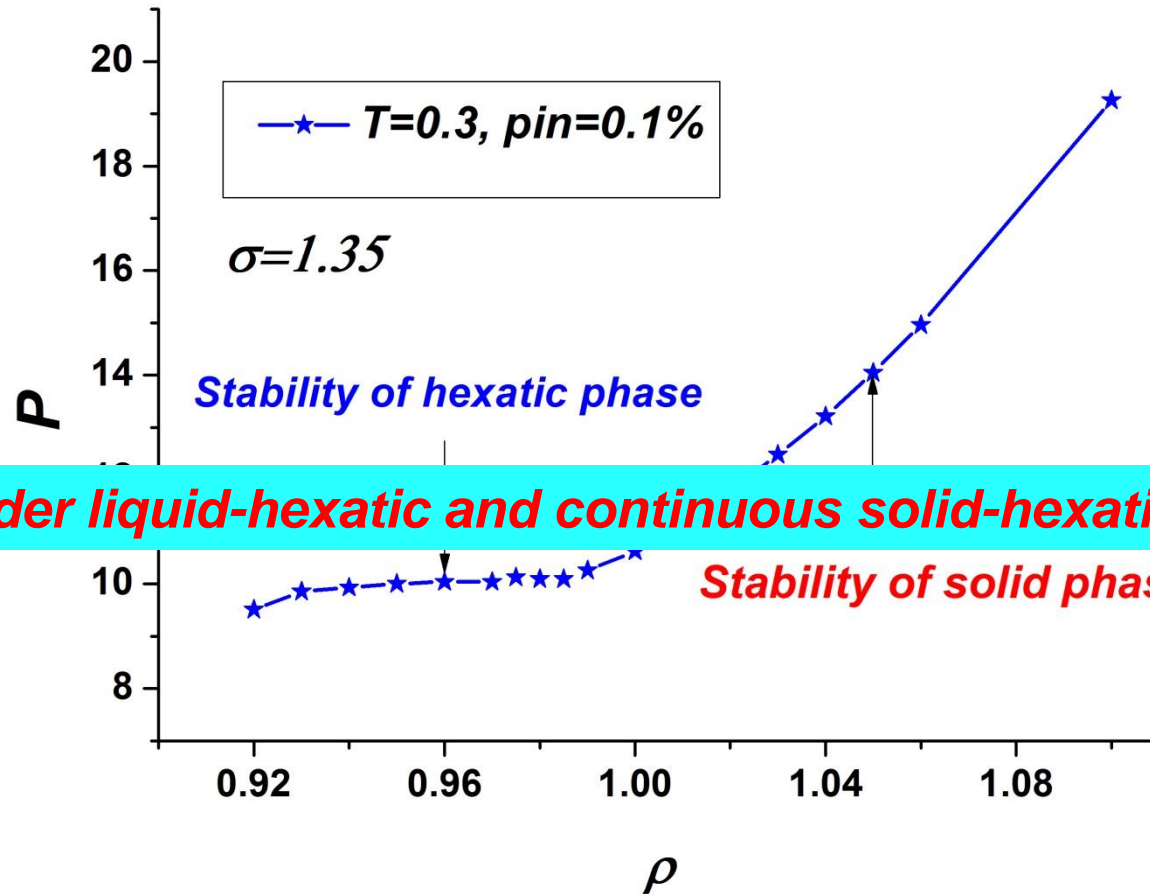


First-order transition!

Зависимость корреляционной функции трансляционного параметра порядка (E. N. Tsiok, D.E. Dudalov, Yu. D. Fomin, and V. N. Ryzhov, Phys. Rev. E 92, 032110 (2015)).



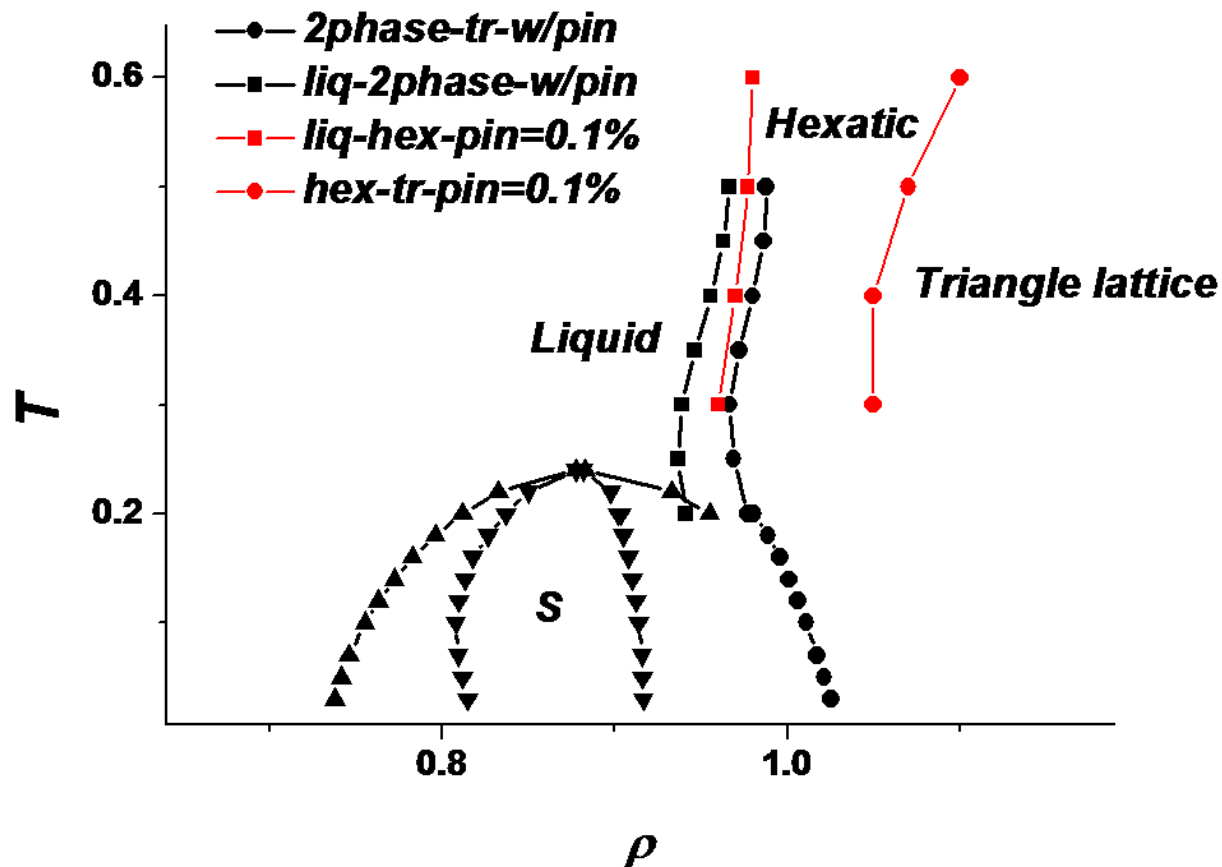
Melting transition in core-softened system with $\sigma=1.35$ at high densities with random pinning



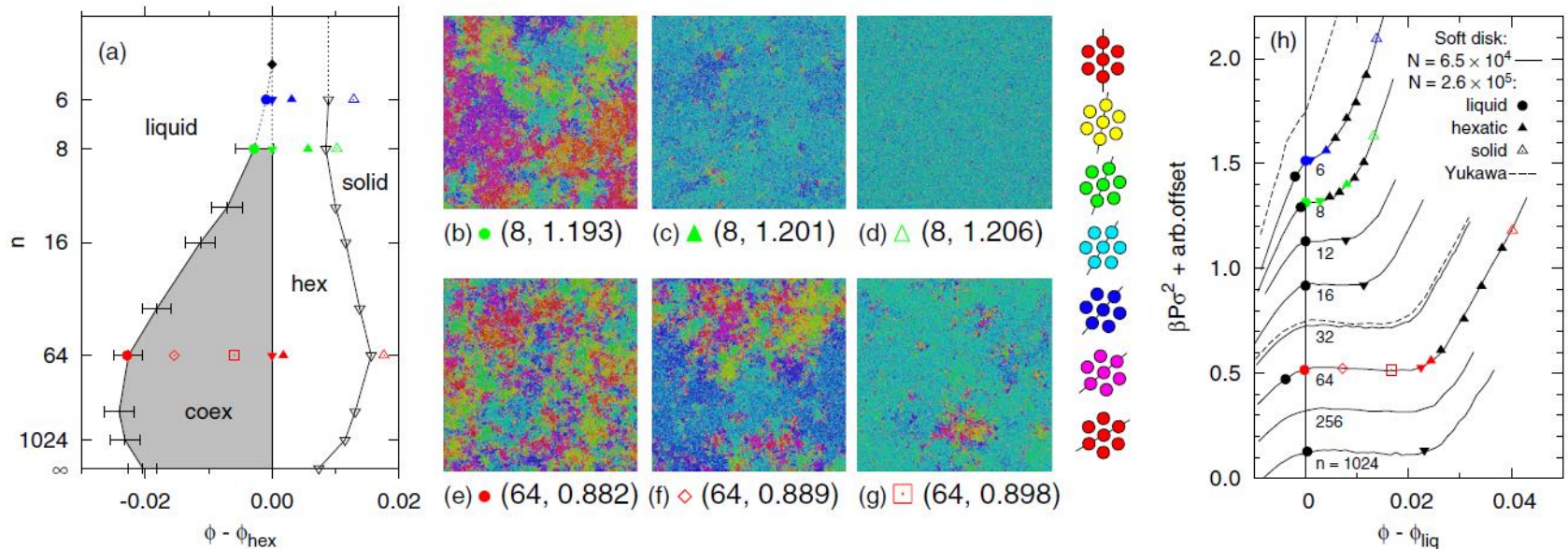
First-order liquid-hexatic and continuous solid-hexatic transitions

Stability of solid phase

*Фазовая диаграмма в присутствии пиннинга $\sigma=1.35$ – **НОВЫЙ** сценарий двумерного плавления (E. N. Tsiok, D.E. Dudalov, Yu. D. Fomin, and V. N. Ryzhov, Phys. Rev. E 92, 032110 (2015)).*

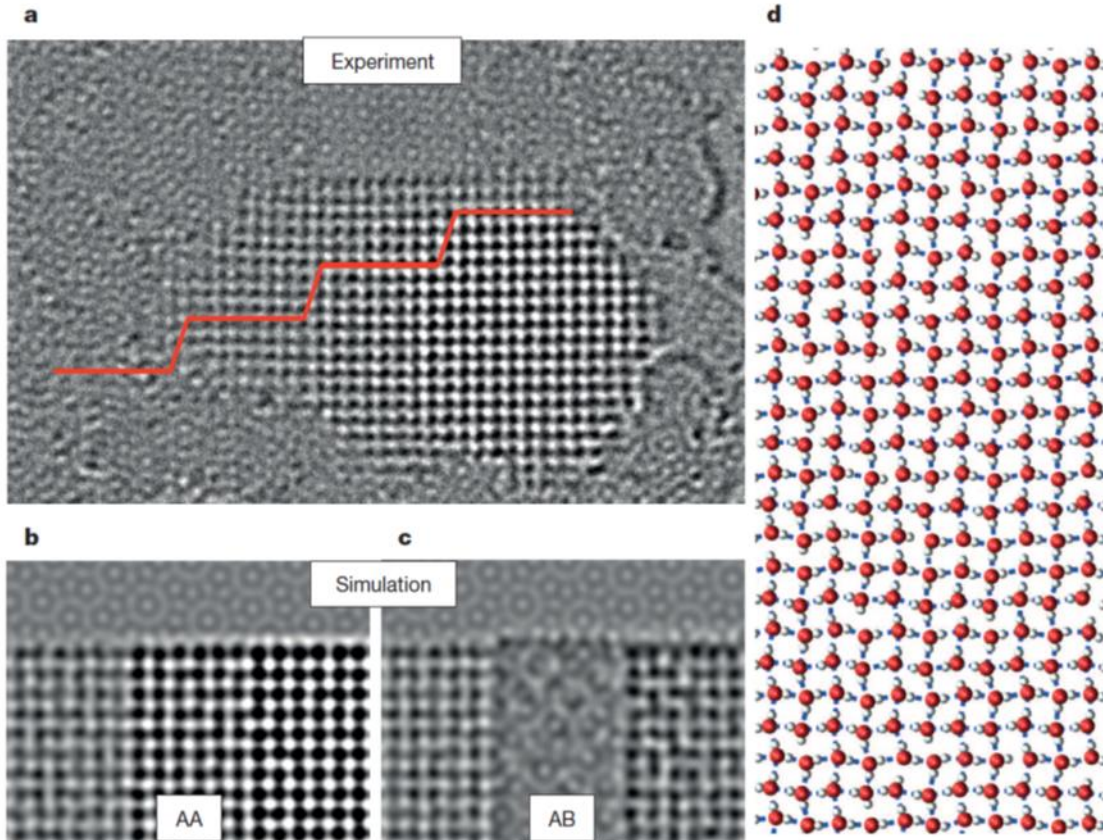


Плавление системы «МЯГКИХ ДИСКОВ» (Е.Р. Bernard and W. Krauth, *Phys. Rev. Lett.* 107, 155704 (2011); S.C. Kapfer and W. Krauth, *Phys. Rev. Lett.* 114, 035702 (2015))



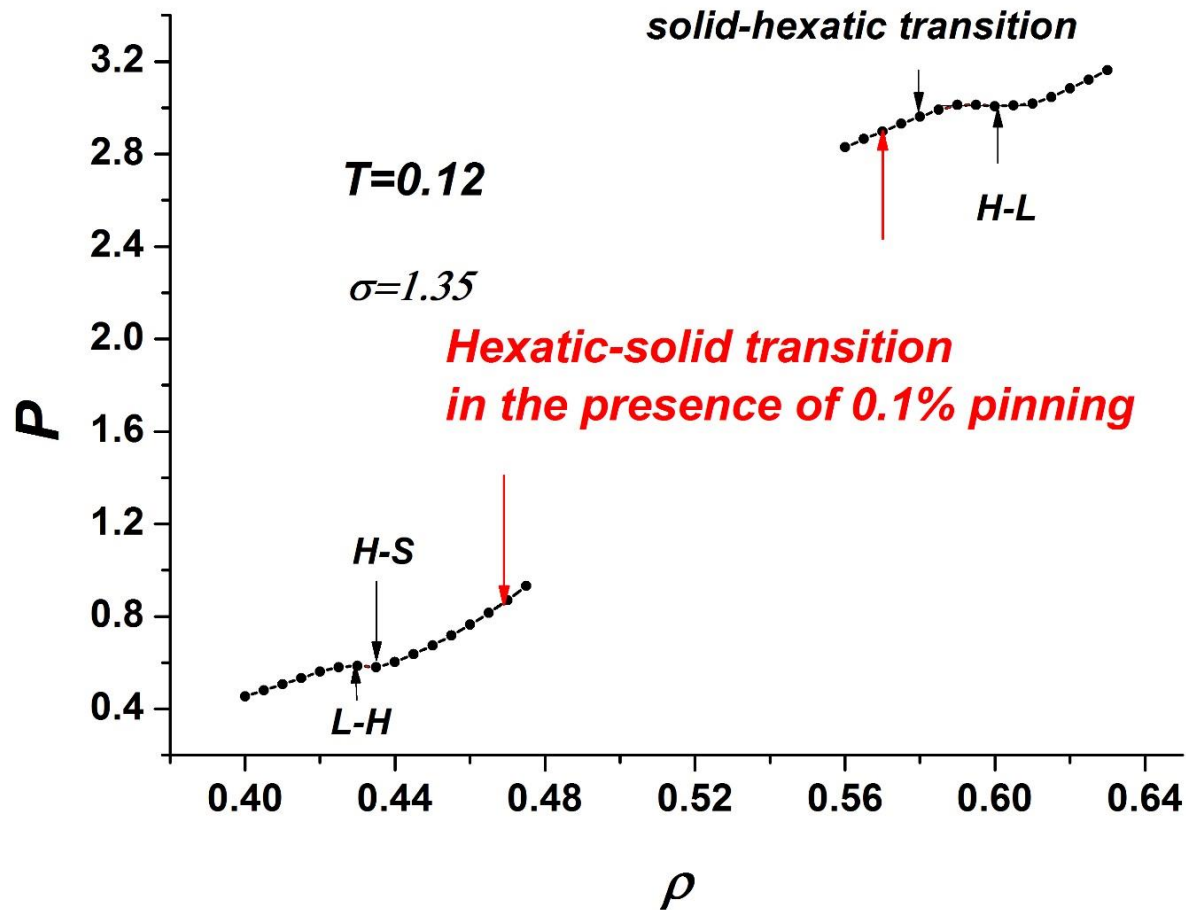
При $n < 6$ – сценарий ВКТНУ, при $n > 6$ система плавится посредством двух переходов – непрерывного перехода из твердой в гексатическую фазу и перехода первого рода из гексатической фазы в изотропную жидкость.

Water between two graphene sheets

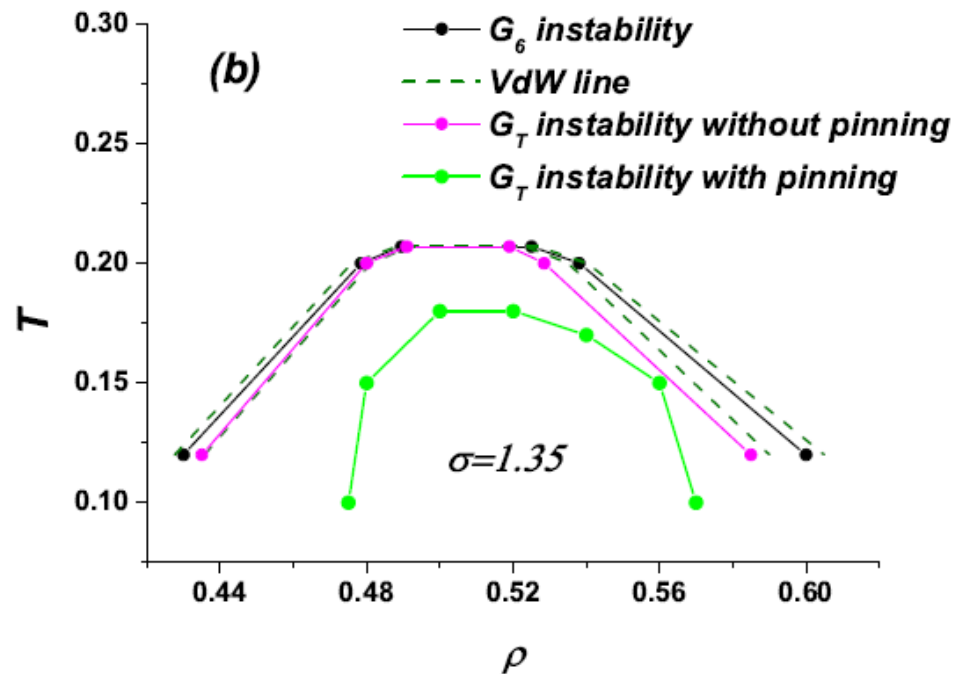


The nanoconfined water between two graphene sheets at room temperature forms 'square ice' - a phase having symmetry qualitatively different from the conventional tetrahedral geometry of hydrogen bonding between water molecules. Square ice has a high packing density with a lattice constant of 2.83\AA and can assemble in bilayer and trilayer crystallites (G. Algara-Siller, O. Lehtinen, F. C. Wang, R. R. Nair, U. Kaiser, H. A. Wu, A. K. Geim & I. V. Grigorieva, *NATURE* 519, 443 (2015)).

Фазовая диаграмма в присутствии пиннинга – низкие плотности $\sigma=1.35$



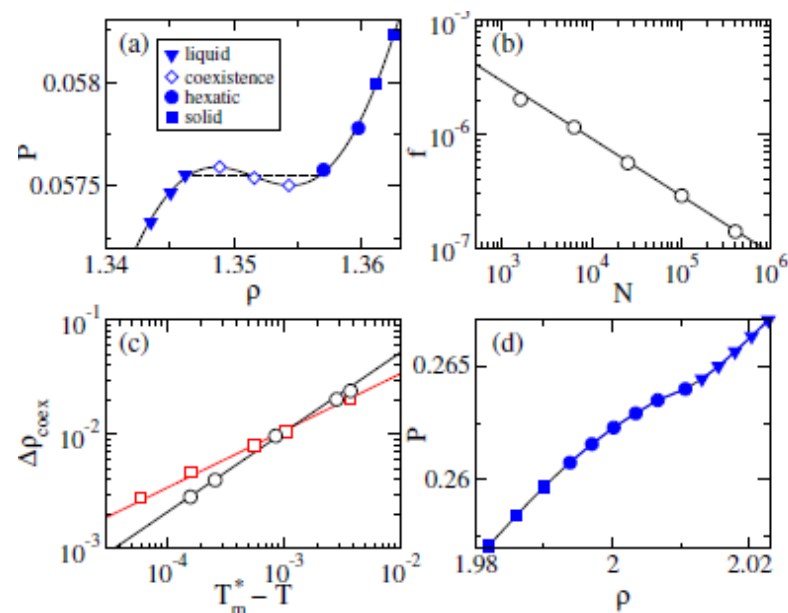
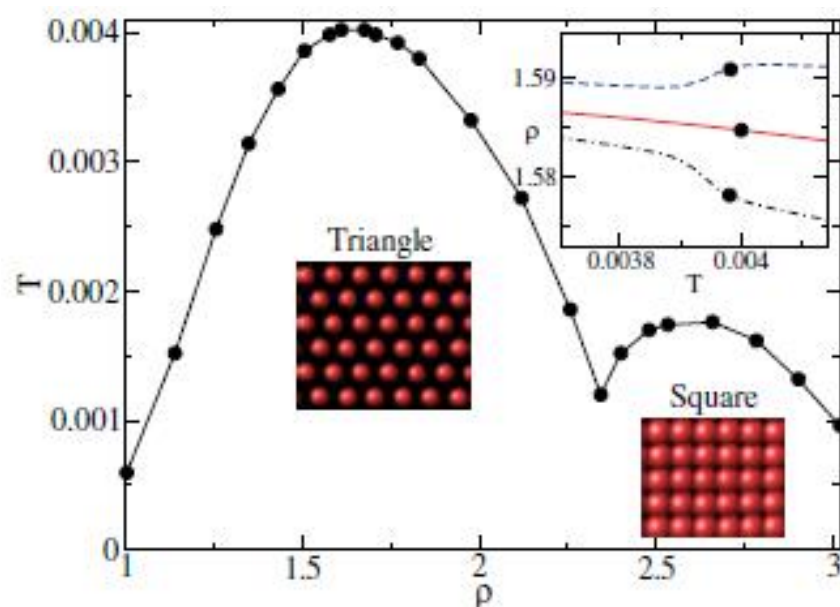
Фазовая диаграмма в присутствии пиннинга – низкие плотности $\sigma=1.35$ (E. N. Tsiok, Yu. D. Fomin, and V. N. Ryzhov, Influence of random pinning on melting scenario of two-dimensional core-softened potential system, arXiv:1608.05232v1)



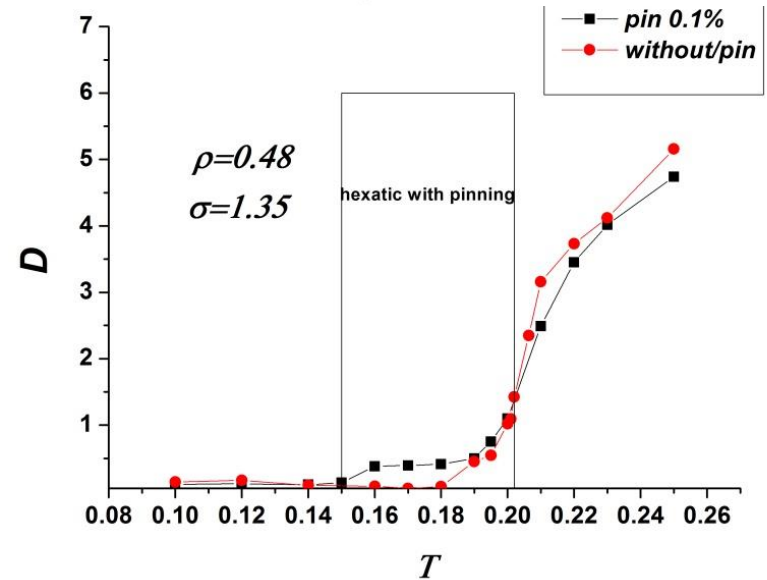
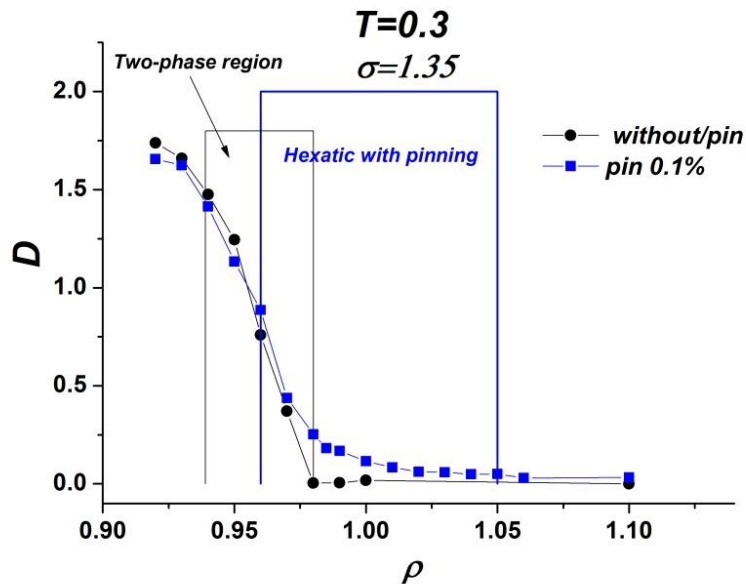
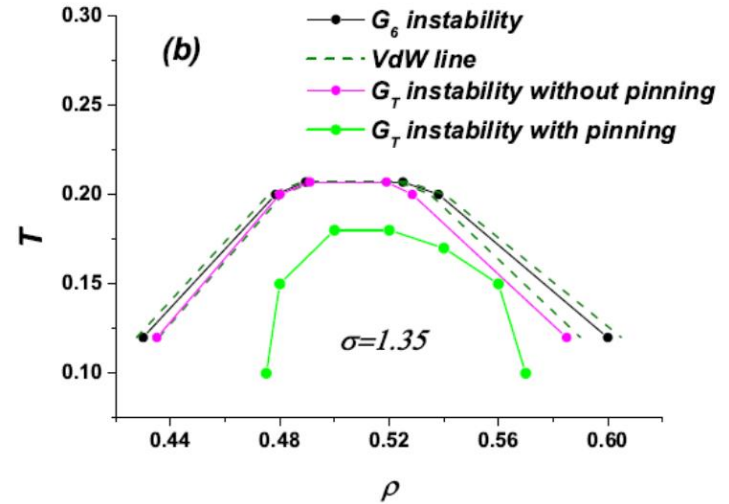
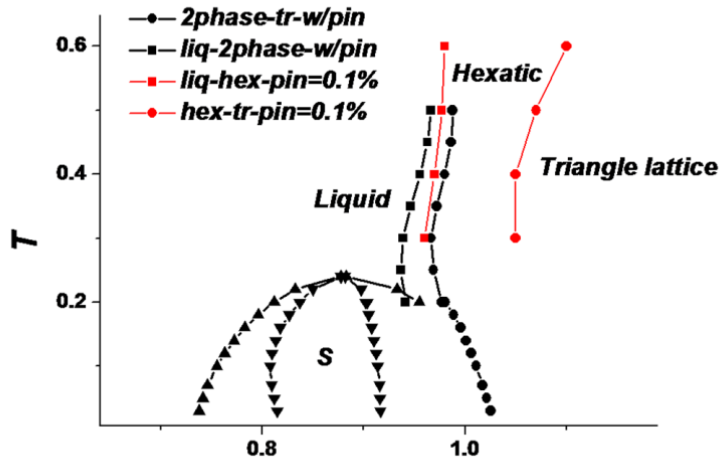
Density Affects the Nature of the Hexatic-Liquid Transition in Two-Dimensional Melting of Soft-Core Systems

Mengjie Zu, Jun Liu, Hua Tong, and Ning Xu*

$$U(r_{ij}) = \frac{\epsilon}{\alpha} \left(1 - \frac{r_{ij}}{\sigma}\right)^\alpha \Theta\left(1 - \frac{r_{ij}}{\sigma}\right),$$



Diffusion in the presence of random pinning $\sigma=1.35$



ВЫВОДЫ

- 1). В отличие от трех измерений, где плавление всегда происходит посредством перехода первого рода, в случае двух измерений сценарий плавления зависит от вида потенциала взаимодействия. По-видимому, в случае дальнодействующих взаимодействий (кулоновское, диполь-дипольное) система плавится в соответствии со сценарием ВКТНУ посредством двух непрерывных переходов с промежуточной гексатической фазой.
- 2). В случае короткодействующих потенциалов (включая потенциал твердых дисков) плавление, вероятно, происходит посредством двухстадийного плавления с непрерывным переходом между кристаллической и гексатической фазой и переходом первого рода между гексатической фазой и изотропной жидкостью, однако этот вопрос требует дополнительного изучения. Пока относительно ясна ситуация только с «мягкими дисками» - ВКТНУ сценарий при $n < 6$ и двухстадийное плавление с переходом первого рода гексатик-изотропная жидкость при $n > 6$.

ВЫВОДЫ

- 3). С помощью компьютерного моделирования нами рассмотрено плавление двумерной системы с водоподобным потенциалом. Показано, что при высоких плотностях система плавится посредством перехода первого рода. При наличии случайного пиннинга переход первого рода расщепляется на два перехода с промежуточной гексатической фазой, при этом переход между гексатиком и кристаллом является непрерывным переходом, а переход гексатик – изотропная жидкость происходит посредством перехода первого рода.
- 4). Нет адекватной теории перехода первого рода из гексатической фазы в изотропную жидкость – этот переход невозможно описать в рамках существующих теорий.*

Спасибо за внимание!
