

КОНФЕРЕНЦИИ И СИМПОЗИУМЫ

Физика фазовых переходов в двух измерениях: за пределами Березинского – Костерлица – Таулеса*

В.Н. Рыжов, В.В. Бражкин, Е.Е. Тареева, Ю.Д. Фомин, Е.Н. Циок

Данный обзор подготовлен на основе доклада авторов на Научной сессии Отделения физических наук Российской академии наук (РАН). В обзоре обсуждается переход Березинского–Костерлица–Таулеса (БКТ) в двумерных системах с непрерывной симметрией, включая переход в двумерных магнитных системах (X – Y -модель), переход в сверхтекучее состояние в тонких плёнках ^4He , переход в тонких сверхпроводящих плёнках. Рассматриваются сценарии двумерного плавления в различных системах, включая мягкую материю, решётки вихрей в сверхпроводящих плёнках и решётки скирмионов. Особое внимание уделено отклонениям от стандартного сценария БКТ для различных систем в зависимости от параметров, характеризующих систему: вида потенциала, что особенно важно для двумерного плавления, и величины энергии ядра топологического дефекта.

Ключевые слова: двумерные системы, переход Березинского – Костерлица – Таулеса, сверхтекучие плёнки, сверхпроводящие плёнки, X – Y -модель, двумерные кристаллы, топологические дефекты, вихри, дислокации, дисклинации, гексатическая фаза, двумерное плавление, теория Березинского – Костерлица – Таулеса – Хальперина – Нельсона – Янга, переход первого рода, сценарий Бернарда – Крауса

PACS numbers: 61.20.Gy, 61.20.Ne, 64.60.Kw

DOI: <https://doi.org/10.3367/UFNr.2025.04.040000>

Содержание

1. Введение (537).
 2. Переход Березинского – Костерлица – Таулеса (539).
 3. Тонкие сверхпроводящие плёнки (543).
 - 3.1. Каноническая теория Березинского – Костерлица – Таулеса.
 - 3.2. Переход типа Березинского – Костерлица – Таулеса в тонкой сверхпроводящей плёнке (кольцевое приближение).
 4. Плавление в двух измерениях. Сценарии двумерного плавления (550).
 - 4.1. Теория плавления Березинского – Костерлица – Таулеса – Хальперина – Нельсона – Янга (БКТХНЯ).
 - 4.2. Плавление двумерных решёток посредством перехода первого рода.
 - 4.3. Сценарий Бернарда и Крауса (БК).
 - 4.4. Определение параметров двумерного плавления методами компьютерного моделирования.
 - 4.5. Метод функционала плотности в теории двумерного плавления.
 5. Заключение (557).
- Список литературы (559).

1. Введение

Фазовые переходы представляют собой одно из наиболее распространённых и интересных явлений, с которыми приходится сталкиваться как в обыденной жизни, так и в фундаментальных научных исследованиях и технологических приложениях. Теория, которая оказалась способна описать основные аспекты физики фазовых переходов, была предложена в 1937 г. Л.Д. Ландау [1]. Теория фазовых переходов Ландау, представляет собой один из фундаментальных подходов к описанию критических явлений в системах, претерпевающих фазовые превращения. В основе теории лежит концепция параметра порядка — макроскопической величины, характеризующей степень упорядоченности системы, и анализ свободной энергии как функции этого параметра. Используя методы термодинамики и симметричного анализа, Ландау предложил универсальный формализм, позволяющий классифицировать фазовые переходы и предсказывать их основные свойства. Основным пунктом теории Ландау является введённое им представление о параметре порядка — величине, которая равна нулю выше температуры перехода в неупорядоченной фазе, и становится ненулевой при переходе в упорядоченную фазу. Параметр порядка характеризует нарушение симметрии, которое имеет место при фазовом переходе. Фазовые переходы по стандартной классификации бывают двух

В.Н. Рыжов^(a), В.В. Бражкин^(b), Е.Е. Тареева^(c),
Ю.Д. Фомин^(d), Е.Н. Циок^(e)
Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина РАН,
Калужское шоссе 14, 108840 Троицк, Москва,
Российская Федерация
E-mail: ^(a)ryzhov@hppi.troitsk.ru, ^(b)brazhkin@hppi.troitsk.ru,
^(c)etare@ms2.inr.ac.ru, ^(d)fomin314@mail.ru,
^(e)elena.tsiok@gmail.com

Статья поступила 18 июля 2025 г.

* Статья написана на основе доклада, представленного на Научной сессии Отделения физических наук Российской академии наук, 23 апреля 2025 г. (см. УФН 196 (5) 449 (2026)).

типов — первого рода, когда параметр порядка меняется скачком, и непрерывные (часто называемые переходами второго рода), при которых параметр порядка меняется непрерывно. Простейшим примером параметра порядка является намагниченность (среднее значение магнитного момента) в ферромагнетике. На качественном уровне переход в магнетике может быть представлен следующим образом — при высоких температурах магнитные моменты свободно вращаются, при этом в системе нет выделенного направления, она изотропна. Однако при понижении температуры, при некотором критическом значении температуры T_c , в системе спонтанно появляется ненулевое значение намагниченности (параметра порядка), т.е. происходит фазовый переход в ферромагнитное состояние, при этом возникает выделенное направление, совпадающее с направлением вектора намагниченности, т.е. система перестаёт быть изотропной.

Несмотря на свою простоту и феноменологический характер, теория Ландау оказала огромное влияние на развитие статистической физики и теории конденсированного состояния. Она успешно описывает переходы второго рода в самых разных системах — от ферромагнетиков и сверхпроводников до жидких кристаллов и структурных фазовых превращений в твёрдых телах. Самым ярким достижением этой теории оказалось феноменологическое описание сверхпроводимости, за которое в 2003 г. А.А. Абрикосов и В.Л. Гинзбург были удостоены Нобелевской премии. Вместе с тем к 1960-м гг. стало ясно, что учёт флуктуаций имеет решающее значение для корректного описания поведения системы в окрестности фазового перехода второго рода. Всё это привело к созданию флуктуационной теории фазовых переходов (А.З. Паташинский, В.Л. Покровский, Л. Каданов, М. Фишер, К. Вильсон) (см., например, [2–10]). При этом в теоретических работах было показано, что размерность пространства играет принципиальную роль в физике фазовых переходов. В частности, для фактически базовой модели, которая активно используется для описания фазовых переходов в магнитных системах — модели Изинга с короткодействующим взаимодействием (см., например, [9, 10, 23]) оказалось, что фазовый переход отсутствует в одном измерении, а параметры перехода, в частности поведение параметра порядка в окрестности температуры перехода для двух и трёх измерений, существенно отличаются.

Симметрия параметра порядка также играет принципиально важную роль. В частности, в работах Ландау [1], Пайерлса [11, 12], а затем Боголюбова, Мермина, Вагнера [24–28] было показано, что в двумерных системах с непрерывной симметрией параметра порядка, таких, как гейзенберговский магнетик, X – Y -модель, сверхтекучие и сверхпроводящие системы, а также двумерные кристаллические решётки, тепловые флуктуации становятся бесконечно большими и разрушают дальний порядок.

Для того, чтобы продемонстрировать это, рассмотрим поведение корреляционной функции флуктуаций параметра порядка в вырожденных плоских системах [9]. Термодинамический потенциал поперечных флуктуаций параметра порядка Φ_{\perp} может быть записан в виде

$$\Phi_{\perp} = \frac{1}{2} \int \left(\frac{h}{\varphi} \varphi_{\perp}^2 + J (\nabla \varphi_{\perp})^2 \right) d^d r. \quad (1)$$

где h — внешнее поле и d — размерность пространства. Среднеквадратичная флуктуация фурье-образа параметра порядка имеет вид:

$$\langle |\varphi_{\perp}(q)|^2 \rangle = \frac{T}{h/\varphi + Jq^2}. \quad (2)$$

Среднеквадратичная флуктуация параметра порядка в заданной точке может быть записана в виде:

$$\langle \varphi_{\perp}^2(\mathbf{r}) \rangle = \frac{T}{(2\pi)^d} \int \frac{d^d q}{h/\varphi + Jq^2}. \quad (3)$$

Из уравнения (3) видно, что при $h = 0$ поперечные флуктуации становятся бесконечно большими при $d = 1, 2$, но остаются конечными в случае трёх измерений. Противоречие можно устранить, если предположить, что $\varphi \rightarrow 0$ при $h \rightarrow 0$, откуда был сделан вывод, что в системах с размерностью $d = 1$ и $d = 2$ дальний порядок отсутствует при $T \neq 0$.

Следствием этого был вывод о том, что в таких системах фазовый переход возможен только при нулевой температуре. Вместе с тем появились экспериментальные работы по сверхтекучести в тонких плёнках жидкого ^4He [29–35], а также ряд исследований, базирующихся на компьютерном моделировании твёрдых дисков [36–39] и численных методах в приложении к магнитным системам [40–42], результаты которых противоречили этому выводу.

Ясность в эти вопросы была внесена в работах Березинского, Костерлица и Таулеса [13–15, 43, 44]. Оказалось, что несмотря на отсутствие дальнего порядка, двумерные магнетики оказывают сопротивление неоднородному повороту спинов, тонкая плёнка жидкого гелия при низких температурах обладает свойством сверхтекучести. Двумерные кристаллы, несмотря на отсутствие дальнего трансляционного порядка, имеют конечный модуль сдвига, т.е. представляют собой твёрдое тело. Березинский понял общую природу этих явлений и дал им название поперечной жёсткости, используемое сейчас в мировой литературе.

Он показал, что в системах, обладающих поперечной жёсткостью, корреляционные функции параметра порядка медленно, по степенному закону, спадают с расстоянием, при этом показатель степени зависит от параметров взаимодействия и температуры. Эта новая фаза, которую иногда называют фазой Березинского, обладает квазидальним порядком. Учитывая, что в высокотемпературной неупорядоченной фазе корреляции спадают экспоненциально быстро, можно заключить, что при некоторой температуре происходит фазовый переход, при котором происходит смена асимптотического поведения корреляционных функций.

Березинский [13, 14] первым обнаружил важную роль топологических дефектов при переходе: вихрей в плёнке сверхтекучего гелия, дислокаций в двумерном кристалле, вихревых конфигураций в двумерном магнетике с двухкомпонентными магнитными моментами (X – Y -модель) и дал качественное объяснение механизма перехода. При низких температурах дефекты образуют связанные пары, которые не разрушают квазидальний порядок. Однако при повышении температуры происходит диссоциация связанных пар, и образуются свободные дефекты, которые превращают квазидальний порядок в неупорядочен-

ную фазу с быстрым экспоненциальным убыванием корреляций. Метод вычисления температуры перехода был развит в дальнейших работах Костерлица и Таулеса [15, 43, 44].

Более 50-ти лет спустя после основополагающих работ Березинского [13, 14] и Костерлица и Таулеса [15, 16] переход Березинского – Костерлица – Таулеса (БКТ) остается одним из самых актуальных примеров топологических фазовых переходов в конденсированных системах и всё ещё является предметом интенсивных экспериментальных и теоретических исследований. Этот переход, связанный с топологическими дефектами в двумерных системах, открыл новые горизонты в понимании явлений, происходящих в двумерных и квазидвумерных системах, таких как сверхтекучесть тонких плёнок, двумерные магнетики, тонкие сверхпроводящие плёнки и даже высокотемпературные сверхпроводники.

В класс универсальности перехода БКТ попадает несколько систем, включая одномерную электронную систему, в которой происходит квантовый переход металл – изолятор, кулоновский газ в двух измерениях и, конечно, сверхтекучие и сверхпроводящие системы в двух измерениях [16 – 18, 22, 45, 46]. Переход в сверхтекучее состояние был исследован в нейтральных сверхтекучих жидкостях, таких как, например, тонкие плёнки ^4He [47 – 49] и системы ультрахолодных атомов в оптоманнитных ловушках, состоящие из бозонов [50] или нейтральных фермионов [51]. Следует отметить, что именно эксперименты по обнаружению перехода БКТ в тонких плёнках ^4He [47, 49] послужили толчком к лавинообразному росту интереса к этой проблематике. Тем не менее, несмотря на то, что в оригинальной статье Костерлица и Таулеса [15] авторы утверждали, что переход БКТ не должен наблюдаться в (квази)двумерных сверхпроводниках, это, безусловно, область, где он наиболее широко обсуждается. Несмотря на то, что условия, при которых физика БКТ может наблюдаться в квазидвумерных сверхпроводниках, не всегда выполняются, идеи, лежащие в основе перехода БКТ, активно используются для приближенного объяснения явлений, наблюдаемых в широком классе систем: тонких плёнках обычных [84, 85, 87, 88, 91, 99 – 109] и нетрадиционных [110 – 112] сверхпроводников, а также в двумерном электронном газе, сформированном на границе между двумя изоляторами в искусственных гетероструктурах [113 – 115] или в верхнем слое ионно-управляемых сверхпроводящих систем [116].

Теория БКТ представляется универсальной и относящейся ко всем двумерным системам с непрерывной симметрией, однако существует целый ряд задач, в которых требуется дополнительное развитие теории для корректного описания экспериментальной ситуации. Например, в экспериментах [88, 102 – 104] можно ясно видеть, что с уменьшением толщины плёнки поведение температурной зависимости плотности сверхпроводящих электронов начинает резко отклоняться от соответствующей температурной зависимости, диктуемой теорией БКШ, однако такое отклонение, по-видимому, происходит при температуре ниже, чем предсказывает стандартное выражение для температуры перехода БКТ, что ставит под сомнение универсальность соотношения между сверхтекучей плотностью и критической температурой, которое является одним из признаков перехода БКТ. Кроме того, взаимодействие между вихрями в X – Y -модели и тонкой плёнке ^4He существенно отличается от взаимодействия

вихрей в тонкой сверхпроводящей плёнке, что приводит к тому, что теория БКТ может быть только приближенно применена для описания перехода в этой системе.

Ещё более разительные отклонения от стандартной теории БКТ имеются в теории двумерного плавления. Теория двумерного плавления, развитая в конце 1970-х гг. в знаменитых работах Хальперина, Нельсона и Янга [17 – 19, 52 – 54], является отдельным и очень важным ответвлением теории БКТ. В этих работах было показано, что в отличие от случая трёх измерений, где плавление всегда происходит посредством одного перехода первого рода, в двух измерениях система может плавиться посредством двух непрерывных переходов типа БКТ с промежуточной гексатической (ориентационно упорядоченной) фазой между кристаллом и изотропной жидкостью. Причиной этого являются сильно развитые флуктуации в двумерной системе. Эта теория обычно называется теорией Березинского – Костерлица – Таулеса – Хальперина – Нельсона – Янга (БКТХНЯ). Появление теории БКТХНЯ привело к появлению огромного количества экспериментальных и теоретических работ, а также работ по компьютерному моделированию различных двумерных систем, направленных на её проверку. Это привело к пониманию того, что кроме сценария БКТХНЯ существуют ещё два, которые также будут обсуждаться далее, и в которых плавление может происходить или посредством перехода первого рода, или в результате двух переходов, один из которых — это переход БКТ, а второй — переход первого рода. Подробное описание ситуации с компьютерным моделированием плавления двумерных систем и обширный список публикаций по этому вопросу можно найти в обзорах [17, 19, 20].

2. Переход Березинского – Костерлица – Таулеса

Как уже упоминалось выше, переход БКТ имеет отношение к трем различным физическим системам, которые принадлежат к одному и тому же классу универсальности и в которых происходят схожие физические явления. Это диссоциация пар вихрей в X – Y -модели, экранирование заряда в 2D кулоновском газе и квантовый переход металл – изолятор в 1D жидкости Латтинжера, описываемый моделью синус-Гордона [45, 46, 55]. В первых двух случаях мы имеем дело с классической моделью точечных объектов (вихрей или зарядов), взаимодействующих посредством логарифмического потенциала, который становится короткодействующим, когда эти объекты могут свободно перемещаться и экранировать взаимодействие. В последнем случае мы имеем дело с квантовой 1D моделью, которая становится фактически 2D при $T = 0$. В этом случае динамические степени свободы обеспечивают дополнительное измерение [45, 46].

Переход БКТ был первоначально сформулирован в контексте двумерной X – Y -модели, которая описывает обменное взаимодействие между классическими двухкомпонентными спинами с фиксированной длиной $S = 1$.

В работах Березинского, Костерлица и Таулеса (БКТ) [13, 15] (см., также [16, 17]) было показано, что квазидальний порядок в двумерных вырожденных системах, к которым относится и X – Y -модель, разрушается в результате диссоциации связанных топологических дефектов. Рассмотрим это более подробно. Гамильтониан мо-

дели имеет вид:

$$H = -\frac{J}{2} \sum_{(i \neq j)} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j = -\frac{J}{2} \sum_{(i \neq j)} \cos(\omega_i - \omega_j) \approx \frac{J}{2} \int d^2r (\nabla \omega)^2, \quad (4)$$

где ω_i — угол, определяющий направление вектора \mathbf{S}_i по отношению к произвольной оси, i и j — ближайшие соседи, J — обменный интеграл.

При низких температурах поведение системы определяется гауссовскими флуктуациями. Пользуясь теоремой о средних гауссовски распределенных величин, находим

$$\langle \mathbf{S}(\mathbf{r}) \mathbf{S}(\mathbf{r}_0) \rangle \propto \langle \exp(i(\omega(\mathbf{r}) - \omega(\mathbf{r}_0))) \rangle \propto \left(\frac{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|}{a_0} \right)^{-k_B T / 2\pi J}, \quad (5)$$

где a_0 — постоянная решётки. Таким образом, в системе существует квазидальний порядок, характеризуемый степенным убыванием корреляций

$$\langle \mathbf{S}(\mathbf{r}) \mathbf{S}(\mathbf{r}_0) \rangle \propto r^{-\eta}, \quad (6)$$

в то время, как при высоких температурах имеет место экспоненциальное убывание корреляций

$$\langle \mathbf{S}(\mathbf{r}) \mathbf{S}(\mathbf{r}_0) \rangle \propto \exp\left(-\frac{r}{\xi}\right) \quad (7)$$

(см., например, [9]). Механизм разрушения квазидальнего порядка был предложен в упорминавшихся работах Березинского, Костерлица и Таулеса. Ими было показано, что разрушение квазидальнего порядка происходит посредством образования в системе свободных топологических дефектов — вихрей, которые описываются уравнением:

$$\frac{\delta H}{\delta \omega} = J \nabla^2 \omega = 0, \quad (8)$$

решение которого имеет вид:

$$\omega = q \arctan\left(\frac{y}{x}\right); \quad \mathbf{v}_q = \nabla \omega = \frac{q}{r} \mathbf{e}_\varphi, \quad (9)$$

Здесь x и y — координаты на плоскости, q — топологический заряд вихря, при этом $\oint (\nabla \omega) dl = 2\pi q$, где интеграл берётся по контуру вокруг вихря, \mathbf{e}_φ — единичный вектор в полярной системе координат с началом в центре вихря, $q = \pm 1, \pm 2, \dots$. Вихрь представляет собой топологический дефект, который не может быть преобразован в основное состояние, в котором все спины направлены в одну сторону, посредством непрерывных вращений.

Температура перехода может быть определена из простых соображений: энергия отдельного вихря получается из соотношений (4) и (9) и имеет вид:

$$E_v = \frac{J}{2} \int_0^L \frac{2\pi}{r} dr = J\pi \ln\left(\frac{L}{a}\right), \quad (10)$$

где L — размер системы. Изменение свободной энергии при появлении вихря равно $F = E_v - TS$, где $S = 2k_B \ln(L/a)$ — энтропия вихря, которая пропорциональна логарифму площади системы. Величина $F = (J\pi - 2k_B T) \ln(L/a)$ при $T \geq T_{\text{ВКТ}}$ становится отрицательной, так что появление вихря становится энергетически

выгодным, где

$$k_B T_{\text{ВКТ}} = \frac{\pi J}{2}. \quad (11)$$

Из уравнения (5) следует, что при $T = T_{\text{ВКТ}}$ корреляционная функция имеет вид: $\langle \mathbf{S}(\mathbf{r}) \mathbf{S}(0) \rangle \propto r^{-1/4}$. Таким образом, в точке перехода значение показателя степени для корреляционной функции $\eta = 1/4$.

Эта простая физическая картина, однако, не является полностью физически адекватной, так как связанные пары противоположно "заряженных" вихрей не разрушают квазидальний порядок и имеют конечную энергию. Такие пары могут существовать при низких температурах. Приведённый гамильтониан для подсистемы вихрей эквивалентен гамильтониану двухкомпонентного двумерного кулоновского газа [15, 55]:

$$H_c = -\pi J \sum_{i < j} q_i q_j \ln \frac{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}{a} + E_c \sum_i q_i^2. \quad (12)$$

Гармоническое приближение, использованное при выводе (12), неадекватно при малых r , поэтому введена энергия ядра E_c , чтобы учесть вклад от области малых r порядка диаметра ядра a . E_c играет роль химического потенциала двумерного кулоновского газа. Для X - Y -модели на квадратной решётке химический потенциал имеет вид [77]:

$$E_c = \frac{\pi^2 J}{2}, \quad (13)$$

однако эта величина может, в принципе, меняться, в частности для случая сверхпроводников, что приводит к серьезным изменениям вида перехода. Далее мы рассматриваем только нейтральные конфигурации системы вихрей, в которых имеется m вихрей одного знака ($\sum_i q_i^+ = \sum_i q_i^- = m$). В этом случае статистическая сумма, соответствующая гамильтониану (12) может быть записана в виде:

$$Z = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(n!)^2} y^{2n} \int d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_{2n} \exp\left[\sum_{i < j}^{2n} 2\pi J \ln\left(\frac{r_{ij}}{a}\right) q_i q_j\right], \quad (14)$$

где

$$y = \exp(-\beta E_c). \quad (15)$$

Название "двумерный кулоновский газ" проистекает из того, что $V(r) = -1/2\pi \ln(r)$ является фундаментальным решением уравнения Пуассона в двух измерениях:

$$\Delta V(r) = -2\pi \delta(\mathbf{r}). \quad (16)$$

Механизм перехода Березинского–Костерлица–Таулеса [13, 15] представляет собой диссоциацию разреженного газа вихревых пар, при этом необходимо учесть экранирование кулоновского потенциала за счёт термически возбужденных пар. Диссоциация происходит при температуре, при которой диэлектрическая постоянная системы расходится. В приближении среднего поля механизм диссоциации пар вихрь–антивихрь можно исследовать помощью уравнения Пуассона–Больцмана [23, 55, 57], которое для экранированного свободными

зарядами потенциала $V_s(r)$ имеет вид:

$$\Delta V_s(r) = -2\pi\delta(\mathbf{r}) + \frac{2\pi\rho_F}{T} V_s(r), \quad (17)$$

где $\rho_F = \rho_F^+ + \rho_F^-$ — полная плотность свободных частиц (вихрей). Преобразование Фурье уравнения (17) может быть записано в виде:

$$V_s(q) = \frac{2\pi}{q^2 + \lambda^{-2}}, \quad (18)$$

где

$$\lambda^{-2} = \frac{2\pi\rho_F}{T}. \quad (19)$$

Обратное преобразование Фурье даёт выражение для экранированного потенциала:

$$V_s(r) \sim \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{r}} \exp\left(-\frac{r}{\lambda}\right), & \lambda \neq \infty, \\ -\ln(r), & \lambda = \infty \end{cases}. \quad (20)$$

В рамках картины, описываемой уравнениями (19) и (20), видно, что длина экранирования λ связана с присутствием свободных кулоновских зарядов ρ_F .

Формализм двумерного кулоновского газа, описываемый гамильтонианом (12), может быть представлен в виде теории синус-Гордона [45, 46, 55, 77]. Рассмотрим гамильтониан

$$H_{sG} = \frac{1}{2\pi K_{sG}} \int d\mathbf{r} (\nabla\varphi)^2 - \frac{g}{\pi} \int d\mathbf{r} \cos(2\varphi). \quad (21)$$

Статистическая сумма Z_{sG} , соответствующая гамильтониану (21), может быть представлена в виде функционального интеграла по полю φ [78]:

$$Z_{sG} = \int D\varphi \exp(-H_0) \sum_{p=0}^{\infty} \frac{1}{p!} \int d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_p \left(\frac{g}{\pi}\right)^p \times \\ \times \cos(2\varphi(\mathbf{r}_1)) \dots \cos(2\varphi(\mathbf{r}_p)). \quad (22)$$

Здесь H_0 — первый член в гамильтониане (21). Используя соотношение

$$\cos(2\varphi(\mathbf{r}_i)) = \frac{\exp(2i\varphi(\mathbf{r}_i)) + \exp(-2i\varphi(\mathbf{r}_i))}{2} = \\ = \sum_{q=\pm 1} \frac{\exp(2iq\varphi(\mathbf{r}_i))}{2}, \quad (23)$$

и вычисляя Гауссовский интеграл по H_0 от экспоненты (23), получаем (см. также (5)):

$$\left\langle \exp\left(2i \sum_i q_i \varphi(\mathbf{r}_i)\right) \right\rangle = \exp\left(2K \sum_{i<j} \ln\left(\frac{r_{ij}}{a}\right) q_i q_j\right). \quad (24)$$

Используя уравнения (22) и (24), можно записать статистическую сумму системы синус-Гордона в виде:

$$Z_{sG} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(n!)^2} \left(\frac{g}{2\pi}\right)^{2n} \int d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_{2n} \times \\ \times \exp\left(\sum_{i<j}^{2n} 2K_{sG} \ln\left(\frac{r_{ij}}{a}\right) q_i q_j\right), \quad (25)$$

которая совпадает с уравнением (14) после замены $K_{sG} = \pi J/k_B T$ и $y = 2\pi \exp(-\beta E_c)$.

Теория Березинского–Костерлица–Таулеса включает в себя ренормгрупповое рассмотрение эффектов экранировки. Теория предсказывает непрерывный переход из низкотемпературной фазы, характеризуемой квазидальним порядком, в высокотемпературную неупорядоченную фазу. При этом величина $K = J/k_B T$ перенормируется в точке перехода $T_{\text{ВКТ}}$ к универсальному предельному значению, которое затем скачком обращается в нуль. Уравнения, описывающие перенормировку параметров системы в окрестности перехода, были получены в работе [15], однако из-за не вполне корректного приближения их не удалось правильно решить. Неточность была исправлена в работе Янга [56], в результате чего была получена система ренормгрупповых уравнений, имеющая в настоящее время хорошо известный вид [9, 16, 44, 55, 56]:

$$\frac{dy(l)}{dl} = (2 - \pi K(l, T))y(l), \quad (26)$$

$$\frac{dK^{-1}(l, T)}{dl} = 4\pi^3 y^2(l), \quad (27)$$

где $l = \ln(r/a)$ и y — фугитивность [57]. Решение уравнений (26), (27) обсуждалось неоднократно (см, например, [9, 16, 55]), поэтому мы не будем останавливаться на этом детально. Заметим только, что эти уравнения справедливы при $y \ll 1$. Учитывая, что $y \propto \exp(-E_c/k_B T)$, можно заключить, что они соответствуют случаю большой энергии ядра топологического дефекта. Это очень важное обстоятельство, к обсуждению которого мы вернемся ниже. В результате решения системы (26), (27) плоскость $y - K^{-1}$ разбивается на три области, в первой из которых при $l \rightarrow \infty$ величина $y \rightarrow 0$, а $K^{-1}(l, T)$ стремится к конечной перенормированной величине, которая определяется начальными значениями $K_0^{-1}(l=0, T)$, зависящими от температуры. Температура перехода $T_{\text{ВКТ}}$ определяется как максимальная температура, при которой перенормированное значение $K^{-1}(l, T)$ остаётся конечным при $l \rightarrow \infty$. При $T = T_{\text{ВКТ}}$ и $l \rightarrow \infty$ получаем соотношение

$$K(l \rightarrow \infty, T_{\text{ВКТ}}) = \frac{J_r(l \rightarrow \infty, T_{\text{ВКТ}})}{k_B T_{\text{ВКТ}}} = \frac{2}{\pi}, \quad (28)$$

где J_r — перенормированное значение обменного интеграла.

Следует отметить, что выражение для температуры перехода, полученное с помощью метода ренормгруппы, формально совпадает с выражением для температуры, выведенной выше из простых энергетических соображений, с заменой константы связи на её перенормированное значение. Физический смысл перенормировки достаточно прост — при увеличении $l = \ln(r/a)$ пропадает влияние вихрей, связанных в пары, и из перенормированного гамильтониана исчезает часть, соответствующая топологическим дефектам. В результате в этой области существует квазидальний порядок. Обе оставшиеся области фазовой диаграммы в плоскости $(y - K^{-1})$ характеризуются тем, что при любых начальных значениях $y_0(l, T)$ и $K_0^{-1}(l, T)$ обе величины обращаются в бесконечность при $l \rightarrow \infty$.

Выше $T_{\text{БКТ}}$ корреляционная функция спадает экспоненциально, при этом корреляционная длина экспоненциально расходится при приближении к температуре перехода сверху [16, 55, 58]

$$\xi \propto \exp\left(\frac{\text{const}}{|T - T_{\text{БКТ}}|^{1/2}}\right). \quad (29)$$

Уравнения (26), (27) были выведены Костерлицем [44] (см. также работу Янга [56]) в рамках модели двумерного кулоновского газа. Позже они были перевыведены стандартными методами квантовой теории поля в работах [59–61] с использованием представления статистической суммы двумерного кулоновского газа через теорию поля с гамильтонианом в форме синус-Гордона [55].

В пределе малой плотности вихрей (большой энергии ядра топологического дефекта) переход описывается в рамках метода ренормгруппы [44] и является непрерывным переходом бесконечного рода.

В работах [62, 63] в рамках теории синус-Гордона также был обнаружен переход первого рода в двумерном кулоновском газе.

При учёте флуктуаций в системе наблюдается экспоненциальная расходимость изохорной теплоёмкости $C_V(T)$ [58], при этом сингулярная часть теплоёмкости в окрестности точки перехода имеет вид:

$$C_V^{\text{sing}}(T) \propto \xi^{-2}. \quad (30)$$

Из уравнений (29) и (30) видно, что этой расходимости соответствует очень узкий и высокий пик, поэтому ни в реальном, ни в компьютерном эксперименте её невозможно обнаружить [58]. Схематическое поведение $C_V(T)$ для X – Y -модели показано на рис. 9.4.3 в [58]: $C_V(T)$ имеет ненаблюдаемую существенную особенность при $T_{\text{БКТ}}$ и неуниверсальный, зависящий от модели максимум выше $T_{\text{БКТ}}$, связанный с энтропией, высвобождаемой при диссоциации связанных пар топологических дефектов (вихрей).

Существенной особенностью перехода БКТ является тот факт, что производные свободной энергии любого порядка справа и слева от точки перехода совпадают [43, 55, 58], т.е. в соответствии с классификацией Эренфеста это непрерывный переход бесконечного рода. Свободная энергия и её производные непрерывны при $T_{\text{БКТ}}$, но зависимость корреляционной длины (29) и других величин (например, теплоёмкости (30)) имеет экспоненциально-сингулярный характер и не описывается конечным числом производных, что соответствует бесконечному роду перехода.

Как уже упоминалось, ренормгрупповые уравнения справедливы при больших значениях энергии ядра дефекта E_c . В то же время при малых значениях E_c поведение системы качественно изменяется — непрерывный БКТ переход превращается в переход первого рода [55, 64–67]. Это свойство перехода Березинского–Костерлица–Таулеса играет существенную роль при описании двумерного плавления.

В разложении косинуса в уравнении (4) мы ограничились первым порядком по $(\nabla\omega)^2$. В то же время безвихревые флуктуации должны перенормировать J за счёт ангармонизмов вида $(\nabla\omega)^n$. Рассмотрим, например, ангармонизм вида $(\nabla\omega)^4$, следуя методам, описанным в книге Паташинского и Покровского [9]. Представим прибли-

женно $(\nabla\omega)^4$ в виде $\langle(\nabla\omega)^2\rangle(\nabla\omega)^2$. В этом случае изменённый гамильтониан для поля ω примет вид:

$$H_{\text{eff}} = \frac{J}{2} (1 - c\langle(\nabla\omega)^2\rangle) \int d^2r (\nabla\omega)^2, \quad (31)$$

где c — некоторая константа. Вычисляя $\langle(\nabla\omega)^2\rangle$ с помощью гамильтониана (4), получим:

$$\langle(\nabla\omega)^2\rangle = \frac{T}{J} \int d^2k \frac{k^2}{k^2} \propto \frac{T}{J}. \quad (32)$$

Таким образом, получается линейная по температуре поправка к перенормированному обменному интегралу $\propto -T/J$. В принципе, подобным образом можно вычислить и следующие поправки, однако, как отмечено в [9], получающийся ряд будет асимптотическим, и разложение неприменимо в окрестности перехода.

Чтобы обойти эту трудность, в [9] был предложен вариационный подход, базирующийся на рассмотрении квадратичного гамильтониана

$$H_0 = \rho_s \frac{J}{2} \int d^2r (\nabla\omega)^2, \quad (33)$$

где ρ_s — вариационный параметр. Вариационная свободная энергия системы имеет вид

$$F_{\text{var}} = \langle H \rangle_0 - TS_0, \quad (34)$$

где H — точный гамильтониан системы (4), усреднение производится по ансамблю Гиббса с гамильтонианом H_0 . S_0 — энтропия системы с гамильтонианом H_0 . После минимизации F_{var} получается уравнение для ρ_s :

$$\rho_s = \exp\left(-\frac{\theta}{\rho_s}\right), \quad (35)$$

где $\theta = T/(4J)$. При $\theta = 0$ $\rho_s = 1$. Уравнение (35) всегда имеет тривиальное решение $\rho_s = 0$. При критическом значении $\theta_c = \exp(-1)$ скачком появляется ненулевое решение (см. рис. 29 в [9]). Оказалось [9], что при температуре $T = T_{\text{БКТ}}$ вклад ангармонизмов в ρ_s численно мал.

В первые годы после появления работ Березинского [13, 14] и Костерлица и Таулеса [15, 43] интерес к теории был не очень высок. Ситуация изменилась после того, как Костерлиц и Нельсон [68] применили теорию БКТ к описанию фазового перехода в плёнке сверхтекучего гелия.

Плотность энергии для сверхтекучей плёнки имеет вид [9, 68]:

$$H_{\text{bose}} = \frac{1}{2} \rho_s \int d^2r \mathbf{v}_s^2(\mathbf{r}), \quad (36)$$

где сверхтекучая скорость \mathbf{v}_s имеет вид

$$\mathbf{v}_s(\mathbf{r}) = \frac{\hbar}{m} \nabla\omega(\mathbf{r}). \quad (37)$$

Таким образом, сверхтекучая плёнка описывается гамильтонианом, совпадающим по форме с (4), с заменой J на $\hbar^2 \rho_s(T)/m^2$, где m — масса атома ^4He , $\rho_s(T)$ — плотность сверхтекучей компоненты. Гамильтониан системы в этом случае может быть записан в виде:

$$H_{\text{bose}} = \frac{\rho_s(T)\hbar^2}{2m^2} \int d^2r (\nabla\omega)^2. \quad (38)$$

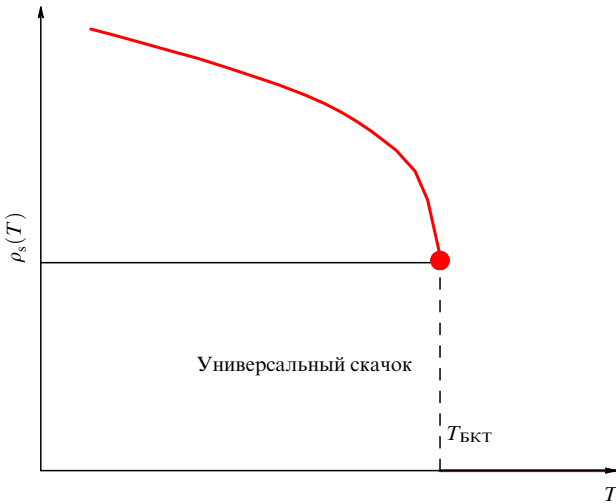


Рис. 1. Схематическое поведение сверхтекучей плотности $\rho_s(T)$. Рисунок иллюстрирует скачок сверхтекучей плотности при $T = T_{\text{БКТ}}$ (см. уравнение (39)).

Из уравнения (28) получаем, что для плёнки сверхтекучего гелия отношение сверхтекучей плотности к температуре перехода, найденное теоретически Костерлицем и Нельсоном [68], оказалось комбинацией постоянных, не зависящей от толщины плёнки:

$$\frac{\rho_s(T_{\text{БКТ}})}{k_{\text{B}} T_{\text{БКТ}}} = \frac{2m^2}{\pi \hbar^2} = 3,491 \times 10^{-9} \text{ г см}^{-2} \text{ К}^{-1}. \quad (39)$$

Эксперимент [47–49, 69] с удивительной точностью подтвердил соотношение (39), что не только вселило уверенность в корректности теории БКТ, но и стимулировало интерес к распространению идей, заложенных в работах Березинского, Костерлица и Таулеса на другие системы, в первую очередь на переходы в тонких сверхпроводящих плёнках и плавление двумерных систем.

Интересно отметить, что фазовый переход Березинского–Костерлица–Таулеса комбинирует черты скачкообразности и непрерывности: энтропия, площадь и даже теплоёмкость изменяются непрерывно, но поперечная жёсткость (сверхтекучая плотность) падает скачком до нуля. Схематически поведение сверхтекучей плотности $\rho_s(T)$ приведено на рис. 1.

В настоящее время экспериментальное изучение БКТ перехода в бозе-конденсатах сосредоточено в первую очередь на исследовании сверхтекучих состояний, включая поведение вихрей, в двумерных системах ультрахолодных атомов в экстремально анизотропных квазидвумерных опто-магнитных ловушках (см, например, [70–73]).

3. Тонкие сверхпроводящие плёнки

3.1. Каноническая теория

Березинского–Костерлица–Таулеса

Одно из наиболее важных проявлений перехода Березинского–Костерлица–Таулеса имеет место в квазидвумерных сверхпроводящих системах. Экспериментальные успехи, достигнутые за последние десятилетия в исследовании сверхпроводимости в низкоразмерных коррелированных электронных системах, подняли

новые вопросы о природе переходов БКТ в реальных материалах, прежде всего вопрос о возможных ограничениях теоретических предсказаний, основанных на базовых идеях теории БКТ, прежде всего на X – Y -модели, подробно обсуждавшейся в предыдущей главе.

Сверхпроводящие плёнки также обладают непрерывной симметрией параметра порядка и в определенном смысле аналогичны сверхтекучим плёнкам. В них также квазидальний порядок разрушается в результате диссоциации пар вихрь–антивихрь (БКТ переход). Следует заметить, что в работе [15] ошибочно утверждалось, что в тонкой сверхпроводящей плёнке образование связанных пар вихрь–антивихрь невозможно из-за того, что взаимодействие между вихрями на большом расстоянии ведет себя как $1/r$, в то время, как для БКТ перехода нужно логарифмическое возрастание потенциала взаимодействия. Однако позднее было выяснено, что хотя в заряженной сверхтекучей жидкости логарифмическое взаимодействие между вихрями экранируется сверхтоками [74, 75], для достаточно тонких "грязных" плёнок с большой объёмной глубиной проникновения $\lambda_{\text{В}}$ эффекты электромагнитного экранирования достаточно слабы, поэтому можно было ожидать возникновения перехода БКТ. Применимость теории БКТ для сверхпроводящих плёнок впервые обсуждалась в работе [76]. Для бесконечной сверхпроводящей плёнки толщиной d и имеющей объёмную глубину проникновения $\lambda_{\text{В}}(T)$ энергия взаимодействия между вихрями ведёт себя логарифмически при $r \ll \Lambda(T) = 2\lambda_{\text{В}}(T)/d$ и как $1/r$ при $r \gg \Lambda$ [74, 75]. $\Lambda(T)$ может рассматриваться как эффективная глубина проникновения для перпендикулярного к плоскости плёнки магнитного поля. Можно ожидать, что БКТ переход может происходить, если $\Lambda(T)$ превышает размер плёнки, что может быть достигнуто как уменьшением толщины плёнки, так и увеличением степени беспорядка в системе, как впервые было отмечено в [76]. Отсюда можно заключить, что в сверхпроводящей плёнке фазовый переход в строгом смысле отсутствует, так как свободные вихри существуют в сверхпроводящей плёнке при всех $T > 0$.

В работе [76] была предпринята первая попытка построения феноменологической теории БКТ перехода в тонкой сверхпроводящей плёнке. Используя универсальное соотношение между температурой перехода БКТ и сверхтекучей плотностью (39), полученное Нельсоном и Костерлицем, авторы по аналогии вывели выражение, связывающее $T_{\text{БКТ}}$ со среднеполевой температурой перехода Бардина–Купера–Шриффера $T_{\text{ВКС}}$. Соотношение между $T_{\text{БКТ}}$ и $T_{\text{ВКС}}$ зависит от сопротивления плёнки [76–78]. Для получения этого соотношения будем исходить из известного разложения Гинзбурга–Ландау (ГЛ) полной свободной энергии F в отсутствие магнитного поля, которое имеет вид [23, 78, 79]:

$$F = F_n + \int d^3r \left[\frac{\hbar^2}{4m} |\nabla\Psi|^2 + a|\Psi|^2 + \frac{b}{2} |\Psi|^4 \right], \quad (40)$$

где параметр порядка имеет вид [80] $\Psi = \sqrt{\rho_s/2} \exp(i\varphi)$. В случае двух измерений фаза флуктуирует наиболее сильно, поэтому для тонких плёнок получаем из (40) гамильтониан для тонкой сверхпроводящей плёнки:

$$H_s^{2\text{D}} = d \int d^2r \frac{\hbar^2}{4m} \frac{\rho_s}{2} (\nabla\varphi)^2 = \frac{\hbar^2 \rho_s^{2\text{D}}}{8m} \int d^2r (\nabla\varphi)^2. \quad (41)$$

Здесь d — толщина плёнки, $\rho_s^{2D} = \rho_s d$ — сверхтекучая плотность в двух измерениях. Используя выражение для глубины проникновения [23, 79, 80]:

$$\lambda^2 = \frac{mc^2}{4\pi e^2 \rho_s} = \frac{mc^2 d}{4\pi e^2 \rho_s^{2D}}, \quad (42)$$

из (42) получаем

$$\rho_s^{2D} = \frac{\hbar^2 c^2 d}{16\pi e^2 \lambda^2}. \quad (43)$$

Сравнивая (41) с (4) и используя (42) и (43), получаем выражение для обменного интеграла

$$J = \frac{\hbar^2 c^2 d}{16\pi e^2 \lambda^2}. \quad (44)$$

Температура перехода определяется соотношением (11)

$$k_B T_{\text{ВКТ}} = \frac{\pi J}{2} = \frac{\varphi_0^2}{16\pi^2} \frac{1}{A(T_{\text{ВКТ}})}, \quad (45)$$

где $A = 2\lambda^2/d$ — эффективная глубина проникновения, которая значительно превышает λ , а $\varphi_0 = hc/(2e)$ — квант потока, при этом оказалось, что в случае сверхпроводников с примесями $T_{\text{ВКТ}}$ ниже критической температуры БКШ $T_{\text{ВКС}}$. При $T_{\text{ВКТ}}$ величина эффективной глубины проникновения может быть приблизительно оценена, как [76, 78]:

$$A(T_{\text{ВКТ}}) = \frac{\varphi_0^2}{16\pi^2} \frac{1}{T_{\text{ВКТ}}} \approx \frac{1}{T_{\text{ВКТ}}} \text{ см.} \quad (46)$$

Затем, используя выражение грязного предела [81] для глубины проникновения для очень тонких плёнок, в [76] была получена оценка A и $T_{\text{ВКТ}}$ в терминах материальных параметров системы:

$$A = \frac{\lambda_L^2(0)}{2d} \frac{\xi_0}{l} \left\{ \frac{A(T)}{A(0)} \tanh \left[\frac{\beta A(T)}{2} \right] \right\}^{-1}. \quad (47)$$

Здесь λ_L — Лондоновская глубина проникновения, A — энергетическая щель, ξ_0 — БКШ корреляционная длина, и l — длина свободного пробега. Это выражение может быть переписано в виде:

$$A = 1,78 \frac{\varphi_0^2 e^2}{8\pi^5 \hbar} \frac{R}{k_B T_{\text{ВКС}}} f^{-1} \left(\frac{T}{T_{\text{ВКС}}} \right). \quad (48)$$

$R = \rho/d$ — сопротивление плёнки, $T_{\text{ВКС}}$ — среднеполевая БКШ температура перехода плёнки, и $f(T/T_{\text{ВКС}})$ — выражение в фигурных скобках в (47). Подставляя уравнение (48) в уравнение (46), можно прийти к неявному соотношению между $T_{\text{ВКТ}}$ и $T_{\text{ВКС}}$, которое зависит от фундаментальных констант и сопротивления плёнки и имеет вид:

$$\frac{T_{\text{ВКТ}}}{T_{\text{ВКС}}} f^{-1} \left(\frac{T}{T_{\text{ВКС}}} \right) = 0,561 \frac{\pi^3}{8} \left(\frac{\hbar}{e^2} \right) \frac{1}{R} \approx 2,18 \frac{R_c}{R}, \quad (49)$$

где $R_c = \hbar/e^2$ соответствует сопротивлению плёнки на единицу площади S , равному $4,12 \text{ кОм}/S$. Вблизи температуры перехода уравнение (49) принимает вид:

$$\frac{T_{\text{ВКТ}}}{T_{\text{ВКС}}} = \left[1 + 0,173 \frac{R}{R_c} \right]^{-1}. \quad (50)$$

Из (50) следует, что любое существенное снижение $T_{\text{ВКТ}}$ ниже $T_{\text{ВКС}}$ требует большого сопротивления плёнки. Для тонких и высокоомных плёнок при понижении температуры будет достигнута температура перехода БКШ или среднего поля, а затем где-то ниже этой температуры будет достигнута температура БКТ. Этот сценарий, включающий две характерные температуры, является общей чертой применения этих идей к физическим системам. Полное решение уравнения (49) на основе литературных данных представлено на рис. 1 в [76]. Поскольку свободные вихри будут продвигаться по образцу токами смещения и, следовательно, вызывать диссипацию, тонкоплёночные сверхпроводники демонстрируют конечное сопротивление для $T_{\text{ВКТ}} < T < T_{\text{ВКС}}$. Хотя кривые $R(T)$ являются гладкими и непрерывными при $T_{\text{ВКС}}$, это температура, при которой сверхпроводящая щель фактически закрывается, т.е. параметр порядка существует выше $T_{\text{ВКТ}}$ вплоть до $T_{\text{ВКС}}$, и эта $T_{\text{ВКС}}$ должна согласовываться с $T_{\text{ВКС}}$, определённой из анализа флуктуационной проводимости. В рамках теории БКТ следует ожидать, как предполагали Гальперин и Нельсон в [82], что при уменьшении T сначала наблюдается режим флуктуаций ГЛ, а затем режим флуктуаций БКТ между температурой среднего поля $T_{\text{ВКС}}$ (которую можно было бы наблюдать в трёхмерном случае) и температурой $T_{\text{ВКТ}}$. Гальперин и Нельсон рассмотрели переход в сверхпроводящих плёнках, объединив феноменологическую картину ГЛ с аналогом теоретически предсказанного скачка сверхтекучей плотности в нейтральных сверхтекучих жидкостях, что позволило получить полезное выражение для сопротивления [82]:

$$\frac{R}{R_n} = 10,8b \exp \left(-2\sqrt{\frac{b\tau_c}{\tau}} \right), \quad (51)$$

где $\tau = (T - T_{\text{ВКТ}})/T_{\text{ВКТ}}$, $\tau_c = (T_{\text{ВКС}} - T_{\text{ВКТ}})/T_{\text{ВКТ}}$ и $\tau \ll \tau_c$ и b — безразмерный подгоночный параметр порядка единицы. В этой области температур сопротивление обусловлено движением несвязанных вихрей под действием приложенных токов. В пределах теории БКТ корреляционная длина сверхпроводящих флуктуаций $\xi \propto \exp(\text{const}/|T - T_{\text{ВКТ}}|^{1/2})$ спадает экспоненциально (29) [16, 55], в отличие от зависимости $\xi_{\text{ГЛ}}^2 \propto 1/(T - T_c)$, ожидаемой в теории Гинзбурга–Ландау (ГЛ) [79, 80]. Как следствие, путём прямого измерения парапроводимости или диамагнетизма вблизи перехода оказалось возможным обнаружить начало возникновения вихревых флуктуаций, которые и приводят к экспоненциальной температурной зависимости длины сверхпроводящих корреляций.

Зависимость температуры $T_{\text{ВКТ}}$ от толщины сверхпроводящих плёнок и поведение разности между температурами БКТ и БКШ экспериментально изучались в ряде работ. В [83] рассматривались кристаллические атомно-плоские плёнки Pb, содержащие целое число атомных слоёв, выращенных на Si(111) методом молекулярно-

лучевой эпитаксии, что дало возможность систематически исследовать природу сверхпроводимости в двумерных плёнках с помощью комбинации сканирующей туннельной микроскопии/спектроскопии (СТМ/СТС) и транспортных измерений. Оказалось, что наблюдаемые особенности в достаточно тонких плёнках согласуются с физикой БКТ. В частности, спаривание Купера и сверхпроводимость исчезают при двух различных температурах, вольт-амперные характеристики в промежуточной фазе являются неомическими, а температурные и токовые зависимости сопротивления согласуются с ожиданиями теории БКТ. В частности, авторы показали, что уравнение (51) хорошо описывает поведение R/R_n и даёт разумные температуры перехода для плёнок с d менее 16 атомных слоёв. Для более толстых плёнок R/R_n резко падает при температуре сверхпроводящего перехода, напоминая поведение для объёмного сверхпроводника. Для плёнок с $d \leq 9$ атомных слоёв значение $T_{\text{ВКТ}}$, выведенное с помощью уравнения (51), резко насыщается при $6,6 \pm 0,15$ К, что идентично $T_{\text{ВКС}}$ плёнок, указывая на то, что эти плёнки находятся в пределе 3D и переход имеет природу БКШ. Зависимость сверхпроводящей плотности от толщины плёнки также рассматривалась в [84, 85].

В [86] был рассмотрен переход БКТ в сверхпроводящих наноплёнках NbN толщиной менее 15 нм на разных подложках для разной толщины плёнки. Для этого рассматривался предсказываемый теорией БКТ универсальный скачок сверхпроводящей электронной плотности при температуре $T_{\text{ВКТ}}$. Этот скачок связан с формированием связанных пар вихрь – антивихрь через логарифмический потенциал взаимодействия между свободными вихрями. Проходящий по образцу ток может разрывать связанные пары, создавая свободные вихри, вызывающие нелинейные эффекты в кривых $I-V$. Идея заключается в том, что ток действует на вихрь с силой Магнуса (аналогичной гидродинамической силе, возникающей при обтекании шара потоком) в направлении, перпендикулярном току. Эта сила противоположна для вихрей и антивихрей и, таким образом, способна разрывать пары вихрь – антивихрь. Свободные вихри приводят к диссипации и возникновению сопротивления. При этом возникает нелинейная вольт-амперная зависимость [77, 78]:

$$V \propto I^{a(T)}, \quad a(T) = \frac{\pi J_s(T)}{T} + 1. \quad (52)$$

Из уравнения (28) следует, что a должно скачкообразно изменяться от $a = 3$ при $T_{\text{ВКТ}}^-$ до $a = 1$ при $T_{\text{ВКТ}}^+$. Ниже $T_{\text{ВКТ}}$ ожидается увеличение показателя степени a с уменьшением T , поскольку увеличивается сверхтекучая плотность. Обнаружение скачка сверхтекучей плотности из показателя степени a было одним из первых проявлений физики БКТ в тонких плёнках сверхпроводников [87, 88]. Позднее оно использовалось для описания перехода БКТ в нескольких системах [86, 89], даже когда его применение может быть поставлено под сомнение (см., например, [89] и обсуждение в нём). Основная проблема заключается в определении правильного диапазона температур и токов, где можно применять уравнение (52). Нелинейность ожидается только ниже $T_{\text{ВКТ}}$. В реальных образцах даже ниже $T_{\text{ВКТ}}$ эффекты конечного размера всегда приводят к конечному числу свободных вихрей ρ_v даже для $I \rightarrow 0$, что на порядки меньше значения этой величины в нормальном состоянии [90]. Таким образом, эффект появления свободных вихрей будет проявляться в

экспериментах как отклонение от линейного (омического) поведения вольт-амперной характеристики к нелинейной при превышении I порогового значения I^* для диссоциации пар вихрь – антивихрь [86, 89, 91]. Это также означает, что следует избегать путаницы между пороговым током разрыва вихревых пар и реальным критическим током сверхпроводника, при котором куперовские пары разрушаются. В работе [89] было показано, как, учитывая влияние неоднородности на размытие скачка сверхтекучей плотности, можно получить согласие между зависимостью $J_s(T)$, полученной из прямых измерений обратной глубины проникновения через взаимную индукцию двух катушек в NbN, и зависимостью, полученной из показателя ВАХ (52).

Как обсуждалось выше, для наблюдения перехода БКТ в тонких сверхпроводящих плёнках прежде всего необходимо, чтобы ширина образца была меньше λ . Кроме того, внешнее поле должно быть достаточно мало. Это связано с тем, что сопротивление в поле $H > H_{c1}$ пропорционально общему числу свободных вихрей, включая вклады как от созданных полем вихрей, так и от несвязанных пар [92]. Кроме того, поскольку в поле энергетически более выгодно иметь вихри, чем антивихри, внешнее поле может вызвать диссоциацию пар ниже $T_{\text{ВКТ}}$. Следовательно, чтобы гарантировать, что измеренное значение R/R_n соответствует переходу БКТ, т.е. определяется диссоциацией пар вихрь – антивихрь выше $T_{\text{ВКТ}}$, необходимо проводить измерение в достаточно слабых внешних полях. В связи с этим отметим недавнюю работу [93], в которой переход БКТ в сверхтонких плёнках NbN исследуется в присутствии слабых перпендикулярных магнитных полей. Скачок фазовой жёсткости при переходе БКТ обнаруживается до 5 Гс, в то время как особенности БКТ размываются между 5 Гс и 50 Гс, полностью исчезая при 100 Гс, где наблюдается обычное поведение тока – напряжения, соответствующее переходу БКШ. Полученные результаты показывают, что слабые магнитные поля, незначительные в объёмных системах, существенно влияют на сверхтонкую плёнку, способствуя переходу от флуктуаций Гальперина – Нельсона к состоянию, подобному БКШ, с флуктуациями Гинзбурга – Ландау по мере увеличения поля. Это поведение связано с индуцированными полем свободными вихрями, которые экранируют взаимодействие вихря – антивихря и размывают переход БКТ.

Также необходимо, чтобы пиннинг вихрей был достаточно слабым. Хотя все разработанные теоретические модели пока не рассматривали последовательно влияние случайного пиннинга на переход в тонкой сверхпроводящей плёнке, пиннинг неизбежен, особенно когда используется "грязный" сверхпроводник с высоким сопротивлением. Если вихрь связанной пары запиннигован, под влиянием токов смещения ему может быть выгоднее не двигаться и разрушить пару, чем оставаться в составе пары. Поэтому при наличии закрепления дополнительное разъединение пар вихрь – антивихрь и захват свободных вихрей могут привести к изменению температурной зависимости сопротивления и расширить переход. Все эти факторы усложняют анализ экспериментальных результатов.

Таким образом, случай тонких сверхпроводящих плёнок представляет собой один из самых изученных примеров применения физики БКТ. В принципе, в этом случае есть несколько возможностей для эксперименталь-

ного изучения конкретных проявлений физики БКТ. Например, при приближении к переходу при $T < T_{\text{БКТ}}$, по аналогии с тонкой сверхтекучей плёнкой ожидается, что сверхтекучая плотность ρ_s будет стремиться к нулю при приближении к температуре БКТ $T_{\text{БКТ}}$ (см. рис. 1), с универсальным отношением между $\rho_s(T_{\text{БКТ}})$ и самой температурой $T_{\text{БКТ}}$ (39). При приближении к переходу сверху, в принципе есть возможность идентифицировать переход БКТ с помощью температурной зависимости сверхпроводящих флуктуаций.

Интересно, что измерения универсального прыжка БКТ сверхпроводящей плотности стали доступны сравнительно недавно [84, 85, 94–97], из-за улучшения экспериментальных методов, вызванных в основном исследованием высокотемпературных сверхпроводников в конце девяностых годов. В частности, использование техники взаимной индуктивности двух катушек [98] оказалось решающим для получения абсолютного значения сверхтекучей плотности при нулевой температуре, которая необходима для сравнения экспериментальных данных с предсказаниями БКТ. Очень продуктивными оказались исследования с использованием терагерцовой спектроскопии [99–101], которая позволяет измерять величину аналога прыжка сверхпроводящей плотности при конечном значении частоты.

Из приведённого выше краткого обзора имеющихся экспериментальных и теоретических результатов можно сделать вывод, что физика БКТ в некоторых случаях чётко наблюдалась, но зачастую в литературе наблюдения проявлений БКТ основывалось на наивном применении знаменитых канонических формул БКТ. Необходимо учитывать это, чтобы относиться достаточно критически к проявлениям перехода БКТ в эксперименте. В первую очередь это относится к проблеме уширения наблюдаемого перехода, которое пытаются объяснить полуфеноменологически с привлечением парапроводимости, влияния неупорядоченности и т.д. Вместе с тем в значительной степени проблема кроется в том, что рассматривается усеченная форма межвихревого взаимодействия, в которой учитывается только логарифмическая часть. Вариант расчёта, базирующегося на полном потенциале, представлен в разделе 3.2.

3.2. Переход типа Костерлица–Таулеса в тонкой сверхпроводящей плёнке (кольцевое приближение)

Специфика взаимодействия между вихрями в тонкой сверхпроводящей плёнке не позволяет описать диссоциацию пар вихрь–антивихрь (переход типа Березинского–Костерлица–Таулеса (БКТ)), придерживаясь однозначной аналогии с X – Y -моделью или системой вихрей в тонкой сверхтекучей плёнке.

В этом разделе рассматривается подход к описанию этого перехода, базирующийся на использовании кольцевого приближения для вычисления термодинамических величин системы вихрей с дальнедействующим межвихревым взаимодействием, полученным в знаменитой работе Перла [74]. Следует отметить, что иногда возникает недопонимание относительно природы вихрей в тонкой сверхпроводящей плёнке, которые вызывают переход типа БКТ. Эти вихри имеют ту же природу, что и абрикосовские вихри в объёмном сверхпроводнике, и переходят в них при увеличении толщины плёнки. Вид поправочных членов к решению Перла при учёте толщины плёнки получен в работе [75].

В силу того, что взаимодействие между вихрями на больших расстояниях имеет вид $\Phi \propto 1/r$, при $T > 0$ сверхпроводящая плёнка всегда имеет конечную плотность свободных вихрей, ϱ_{\pm} , с магнитным моментом, параллельным (+) или антипараллельным (–) внешнему магнитному полю H , соответственно. Эти свободные вихри ответственны за диссипацию энергии и вызывают "хвост" сопротивления в области низких температур. Сопротивление даётся формулой Бардина–Стефена [81]

$$\frac{R}{R_N} = 2\pi\xi^2(\varrho_+ + \varrho_-), \quad (53)$$

где R — сопротивление, вызванное движением вихрей и R_N — сопротивление плёнки в нормальном состоянии, ξ — корреляционная длина. Следовательно, для того, чтобы вычислить сопротивление сверхпроводника вследствие движения вихрей, необходимо получить соотношения для плотности свободных вихрей как функции температуры и поля.

Как обсуждалось в разделе 3, существование перехода типа Костерлица–Таулеса подтверждается экспериментально [55, 84, 85, 87, 88, 94, 99, 100, 102–106].

Вместе с тем существуют очевидные недостатки в теоретическом описании поведения сверхпроводящей плёнки с помощью модели двумерного кулоновского газа. Вид функции R/R_N , полученной с помощью уравнений ренормгруппы, может быть обоснован только в узком температурном интервале $T_{\text{БКТ}} < T \ll T_{\text{ВКС}}$, в то время, как основная масса экспериментальных результатов относится к температурам вне этой области. В области температур, достаточно близкой к $T_{\text{БКТ}}$, метод ренормгруппы неприменим к сверхпроводникам [55]. Кроме того, "хвост" сопротивления в области низких температур не может быть описан в рамках теории Березинского–Костерлица–Таулеса, а требует привлечения дополнительных полуфеноменологических подходов (парапроводимость, пиннинг).

В этом разделе обсуждается статистическая теория плазмы вихрей в двумерных сверхпроводниках, в которой преодолены некоторые из указанных выше трудностей, и которая предлагает способ вычисления величин в правой части уравнения (53) во всей области температур $0 < T < T_c$. Изложение базируется на работах [107–111].

Кольцевое приближение для системы вихрей в двумерном сверхпроводнике. Рассмотрим свободную энергию системы из N вихрей ($N = N_+ + N_-$), координаты которых в образце толщиной d имеют вид $\mathbf{r}_i(z) = (x_i(z), y_i(z))$, $i = 1, \dots, N$ (внешнее поле H направлено вдоль оси z). Пусть ε — энергия, приходящаяся на единицу длины вихря и $\varphi_0 = hc/2e$ — квант потока.

Энергия взаимодействия двух вихрей, расположенных в точках \mathbf{r}_i и \mathbf{r}_j ($r_{ij} = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j| \gg \xi$) имеет вид [74]

$$\begin{aligned} \Phi(r_{ij}) &= \frac{\varphi_0^2}{8\pi\Lambda} \left[H_0 \left(\frac{r_{ij}}{\Lambda} \right) - Y_0 \left(\frac{r_{ij}}{\Lambda} \right) \right] \\ \Phi(r_{ij}) &\approx -\frac{\varphi_0^2}{4\pi^2\Lambda} \ln \left(\frac{r_{ij}}{\Lambda} \right) \quad r_{ij} \ll \Lambda \\ \Phi(r_{ij}) &\approx \frac{\varphi_0^2}{4\pi^2 r_{ij}} \quad r_{ij} \gg \Lambda. \end{aligned} \quad (54)$$

Здесь H_0 — функция Струве и Y_0 — функция Неймана. Поправки к этой энергии за счёт малой, но конечной толщины плёнки, получены в работе [75].

Для тонкой сверхпроводящей плёнки энергия на единицу длины вихря ε имеет вид [74]

$$\varepsilon = \pi r_0^2 \xi^2 \left(\frac{H_c^2}{8\pi} \right) + \frac{\varphi_0^2}{16\pi\lambda d} \left(H_0 \left(\frac{\xi}{\lambda} \right) - Y_0 \left(\frac{\xi}{\lambda} \right) \right), \quad (55)$$

где первый член представляет собой вклад от ядра вихря, r_0 — радиус ядра вихря (в единицах ξ), H_c — термодинамическое критическое поле.

Каноническая статистическая сумма для системы, описываемой уравнением (54), имеет вид [107–111]:

$$Z_N = \frac{z_+^{N_+} z_-^{N_-}}{N_+! N_-!} \int \mathbf{dr}_1 \dots \int \mathbf{dr}_N \exp \left\{ -\frac{\beta}{2} \sum_{i \neq j} s_i s_j \Phi(r_{ij}) \right\}, \quad (56)$$

где $\beta = 1/k_B T$, активности z_+ и z_- имеют вид $z_{\pm} = \Gamma \exp(\beta \mu_{\pm})$ и $\mu_+ = -(\varepsilon - \varphi_0 H/4\pi)d$; $\mu_- = -(\varepsilon + \varphi_0 H/4\pi)d$.

Оценим константу Γ . Положив $N = 1$ и $H = 0$ в уравнении (56), получим ($z_+ = z_- = z$)

$$Z_1 = z\Omega. \quad (57)$$

Свободная энергия вихря, соответствующая статсумме Z_1 , должна быть равна энергии образования одиночного вихря, ориентированного перпендикулярно к плёнке (при этом предполагается предел $L \rightarrow \infty$)

$$F_{\text{vor}} = \varepsilon d - TS. \quad (58)$$

Энтропия S имеет вид $S = \ln(\Omega/\zeta)$, где ζ — площадь, занимаемая вихрем, Ω — площадь плёнки. Предполагается, что ζ пропорционально области, занимаемой ядром вихря $\zeta = c\xi^2$, где c — постоянная, не зависящая от температуры [55]. Используя (57) и (58), получим:

$$\Gamma = \frac{1}{c\xi^2}. \quad (59)$$

В этом случае большая каноническая сумма имеет вид

$$Z = \sum_{N_+, N_- = 0} \frac{z_+^{N_+} z_-^{N_-}}{N_+! N_-!} \int \mathbf{dr}_1 \dots \int \mathbf{dr}_N \exp \left\{ -\frac{\beta}{2} \sum_{i \neq j} s_i s_j \Phi(r_{ij}) \right\}. \quad (60)$$

Сумма берётся по всем конфигурациям с различными N_+ и N_- .

Свободная энергия Гиббса, связанная с (60), равна [112]

$$G = -k_B T \ln Z = k_B T \left\{ \varrho_+ \left[\ln \left(\frac{\varrho_+}{z_+} \right) - 1 \right] + \varrho_- \left[\ln \left(\frac{\varrho_-}{z_-} \right) - 1 \right] - S \right\} \Omega, \quad (61)$$

$$S = \sum_{n_+ + n_- \geq 2} \sum_{n_+} \sum_{n_-} \beta_{n_+ n_-} \varrho_+^{n_+} \varrho_-^{n_-}, \quad (62)$$

где $\beta_{n_+ n_-}$ — сумма неприводимых Майеровских диаграмм [112] ($v = n_+ + n_-$),

$$\beta_{n_+ n_-} = [n_+! n_-! \Omega]^{-1} \int \mathbf{dr}_1 \dots \mathbf{dr}_v \sum \prod f_{ij}, \quad (63)$$

$$f_{ij} = \exp[-\beta \Phi(r_{ij})] - 1.$$

Индукция B связана с плотностями свободных вихрей ϱ_+ и ϱ_- соотношением $B = \varphi_0(\varrho_+ - \varrho_-)$. Подстановка этого выражения в (61) даёт G как функцию T, H, ϱ_+ и ϱ_- .

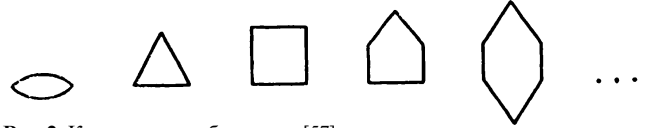


Рис. 2. Кольцевое приближение [57].

Чтобы получить уравнения для ϱ_+ и ϱ_- , можно использовать вириальное разложение [57, 112]

$$\varrho_{\pm} = z_{\pm} \exp \left\{ \frac{\partial}{\partial \varrho_{\pm}} S \right\}. \quad (64)$$

Заметим, что уравнение (64) может быть получено из условия экстремума свободной энергии G :

$$\frac{\partial G}{\partial \varrho_+} = \frac{\partial G}{\partial \varrho_-} = 0. \quad (65)$$

Вследствие дальнедействующего характера взаимодействия (54) появляется проблема сходимости отдельных членов в Майеровском разложении (62). Эта проблема может быть решена с помощью кольцевого приближения, хорошо известного из физики плазмы (2).

В этом приближении мы имеем [57]

$$S = \sum_{v \geq 2} S_v$$

$$S_v = \sum_{n_+} \sum_{n_-} \frac{(v-1)!}{2} \frac{(-\beta \varrho_+)^{n_+}}{n_+!} \frac{(-\beta \varrho_-)^{n_-}}{n_-!} J_v =$$

$$= \frac{1}{2^v} [-\beta(\varrho_+ + \varrho_-)]^v J_v, \quad (66)$$

где $J_v = \Omega^{-1} \int \mathbf{dr}_1 \dots \mathbf{dr}_v \Phi(r_{12}) \Phi(r_{23}) \dots \Phi(r_{v1})$. J_v может быть вычислена с помощью преобразования Фурье, учитывая, что преобразование Фурье $\tilde{\Phi}(q)$ потенциала (54) имеет вид:

$$\tilde{\Phi}(q) = \frac{\varphi_0^2}{2\pi\lambda} \frac{1}{q(q+1/\lambda)}. \quad (67)$$

Возможность вычисления сумм кольцевых диаграмм основана на специальном виде величины (67). Легко видеть, что для стандартного кулоновского потенциала $\Phi_c \propto 1/r$, Фурье-образ которого имеет вид $\propto 1/k^2$, суммы кольцевых диаграмм расходятся. Вычисления с использованием уравнений (66) и (67) показывают, что

$$-4\pi S = \begin{cases} \frac{1}{2} \kappa^2 - \frac{1}{2} \left(\kappa^2 - \frac{1}{2A^2} \right) \ln(\kappa^2 A^2) - \frac{\omega}{A} \arctan(2\omega A), & \kappa^2 - \frac{1}{4A^2} \geq 0, \\ \frac{1}{2} \kappa^2 - \frac{1}{2} \left(\kappa^2 - \frac{1}{2A^2} \right) \ln(\kappa^2 A^2) + \frac{\sigma}{2A} \ln \frac{1+2A\sigma}{1-2A\sigma}, & \kappa^2 - \frac{1}{4A^2} < 0, \end{cases} \quad (68)$$

где $\kappa^2 = \beta(\varrho_+ + \varrho_-)\varphi_0^2/2\pi\lambda$, $\omega = \sqrt{\kappa^2 - 1/4A^2}$, $\sigma = \sqrt{1/4A^2 - \kappa^2}$.

Система вихрей в отсутствие магнитного поля. Обсудим свойства сверхпроводящей магнитной плёнки в отсутствие внешнего магнитного поля. В этом случае

$\varrho_+ = \varrho_- = 1/2 \varrho$, $z_+ = z_- = z$. Подстановка (68) в (64) даёт

$$\varrho = 2z \exp \left\{ \beta \frac{\varphi_0^2}{16\pi^2 A} \left(\ln(\kappa^2 A^2) + \frac{1}{\omega A} \arctan(2\omega A) \right) \right\},$$

$$\kappa^2 - \frac{1}{4A^2} \geq 0, \quad (69)$$

$$\varrho = 2z \exp \left\{ \beta \frac{\varphi_0^2}{16\pi^2 A} \left(\ln(\kappa^2 A^2) + \frac{1}{2\sigma A} \ln \frac{1+2\sigma A}{1-2\sigma A} \right) \right\},$$

$$\kappa^2 - \frac{1}{4A^2} < 0, \quad (70)$$

где $\kappa^2 = \beta \varrho \varphi_0^2 / 2\pi A$.

Используя уравнения (61) и (68), можно записать $G(T)$ в виде

$$\frac{G(T)}{k_B T \Omega} = \varrho \left[\ln \left(\frac{\varrho}{2z} \right) - 1 \right] + \frac{1}{4\pi} \times$$

$$\begin{cases} \frac{1}{2} \kappa^2 - \frac{1}{2} \left(\kappa^2 - \frac{1}{2A^2} \right) \ln(\kappa^2 A^2) - \frac{\omega}{A} \arctan(2\omega A), \\ \kappa^2 - \frac{1}{4A^2} \geq 0, \\ \frac{1}{2} \kappa^2 - \frac{1}{2} \left(\kappa^2 - \frac{1}{2A^2} \right) \ln(\kappa^2 A^2) + \frac{\sigma}{2A} \ln \frac{1+2A\sigma}{1-2A\sigma}, \\ \kappa^2 - \frac{1}{4A^2} < 0. \end{cases} \quad (71)$$

Подставляя уравнения (69) и (70) в (72), можно записать свободную энергию в форме "уравнения состояния" [57, 107–112]

$$\frac{P}{k_B T} = \varrho - 2\varrho \frac{\partial S}{\partial \varrho} + S,$$

где давление в плазме вихрей имеет вид $P = -G(T)/\Omega$.

Поведение ϱ для T в окрестности $T_{\text{ВКТ}}$ и для малых T можно получить в явной форме. Рассмотрим эти случаи.

При $T \rightarrow 0$, как видно из уравнения (70), плотность вихрей $\varrho \rightarrow 0$

$$\varrho = \frac{2}{c\xi^2} \exp \left(-\frac{\varepsilon d}{k_B T} \right). \quad (72)$$

Теперь рассмотрим приближенные решения уравнений (69) и (70) в окрестности $T_{\text{ВКТ}}$. В этом случае необходимо решить уравнение (69), так как неравенство $\kappa^2 - 1/4A^2 \geq 0$ выполняется для ненулевых ϱ и достаточно малой толщины d . В пределе малых d можно пренебречь вторым членом в показателе (69), и уравнение (69) сводится к

$$\kappa^2 A^2 = \frac{z\beta\varphi_0^2 A}{\pi} \exp \left\{ \beta \frac{\varphi_0^2}{16\pi^2 A} \ln(\kappa^2 A^2) \right\}. \quad (73)$$

Решение уравнения (73) имеет вид

$$\varrho = \frac{2\pi k_B T}{\varphi_0^2 A} q^{k_B T / (k_B T - \Theta(T))}, \quad (74)$$

где $q = z\beta\varphi_0^2 A / \pi$ и $\Theta(T) = \varphi_0^2 / (16\pi^2 A(T))$. Уравнение (74) подобно уравнению, используемому для описания перехода типа Костерлица–Таулеса [55]. В соответствии с уравнением (74), $\varrho \rightarrow 0$ при $T \rightarrow T_{\text{ВКТ}}$ сверху, где $T_{\text{ВКТ}}$ определяется уравнением $k_B T_{\text{ВКТ}} = \Theta(T_{\text{ВКТ}})$ (см. уравнение (45)) (при условии $q < 1$). Нужно заметить, что для точных уравнений (69) и (70) нет фазового перехода в том смысле, что плотность вихрей ϱ никогда не обращается в

нуль точно, однако ϱ меняется очень быстро в окрестности $T_{\text{ВКТ}}$ благодаря диссоциации пар вихрь–антивихрь.

Параметры для конкретных вычислений взяты из экспериментальной работы [106], в которой подробно изучены свойства плёнки Nb толщиной 20 Å. В этом случае

$$\xi(t) = \frac{\xi(0)}{\sqrt{1-t}}, \quad \lambda_B(t) = \frac{\lambda(0)}{\sqrt{1-t}}, \quad (75)$$

где $t = T/T_{\text{ВКС}}$, $T_{\text{ВКС}} \simeq 3,66$ К, $\xi(0) \simeq 104$ Å, и $\lambda(0) \simeq 1600$ Å. T_c определяется как температура, при которой $R = 0,5R_N$. Из этого условия можно определить константу c . Используя (53), (59) и (69), получим $c = 6\pi$. Поведение системы зависит от выбора радиуса ядра r_0 . В общем случае можно рассматривать r_0 как подгоночный параметр.

Зависимость фазового перехода от радиуса ядра вихря (или от энергии ядра вихря). Как уже обсуждалось выше, существует зависимость формы решений уравнений (69) и (70) от радиуса ядра вихря r_0 благодаря связи между r_0 и энергией ядра вихря (55).

Перепишем уравнение (69) в виде (см. уравнение (74))

$$\varrho = \frac{2\pi k_B T}{\varphi_0^2 A} q^{k_B T / (k_B T - \Theta(T))} \times$$

$$\times \exp \left\{ \frac{\Theta(T)}{k_B T - \Theta(T)} \frac{1}{\omega A} \arctan(2\omega A) \right\}. \quad (76)$$

Из уравнения (76) видно, что при $q < 1$ плотность свободных вихрей $\varrho \rightarrow \infty$ при T стремящейся к $T_{\text{ВКТ}}$ снизу. С другой стороны, при $q > 1$ плотность ϱ расходится при приближении к $T_{\text{ВКТ}}$ сверху. Критическое значение радиуса ядра вихря r_0^c может быть получено из уравнения $q(T_{\text{ВКТ}}, r_0) = 1$ и равно 1,2237.

Поведение решений уравнений (69) и (70) (см. [107–109]) можно рассматривать как указание на то, что при $r_0 < r_0^c$ диссоциация вихревых пар происходит посредством перехода первого рода. Однако нужно заметить, что существуют очевидные недостатки этих решений. Прежде всего, плотность свободных вихрей расходится при приближении к $T_{\text{ВКТ}}$ сверху. Кроме того, существует узкая область в окрестности $T_{\text{ВКТ}}$, в которой решение не определено. Возможной причиной расходимости плотности свободных вихрей может быть предположение о точечности вихрей, которое использовалось при выводе уравнений (69), (70) и (72), при этом радиус ядра входит в уравнения только через энергию ядра вихря.

Для учёта конечности размера ядра вихря запишем энергию взаимодействия в виде [55]:

$$\tilde{\Phi}(r) = \int d^2 r' d^2 r'' n(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \Phi(|\mathbf{r}' - \mathbf{r}''|) n(r''), \quad (77)$$

где $n(r)$ обозначает распределение "заряда" единичного вихря, $\int n(r) d^2 r = 1$.

Преобразование Фурье потенциала $\tilde{\Phi}(r)$ имеет вид:

$$\tilde{\Phi}_q = \frac{\varphi_0^2}{2\pi A} \frac{n_q^2}{q(q+1/A)}, \quad (78)$$

где

$$n_q = \int d^2 r \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}) n(r) \quad (79)$$

— преобразование Фурье распределения заряда отдельного вихря $n(r)$. $n(r)$ равно нулю при $r \rightarrow \infty$ и $n(r) \neq 0$ в окрестности $r \leq \xi$.

Используя кольцевое приближение можно легко показать, что свободная энергия для неточечных вихрей с взаимодействием (77) имеет вид:

$$\frac{G}{k_B T \Omega} = 2\rho \left[\ln \left(\frac{\rho}{2z} \right) - 1 \right] + \frac{1}{8\pi^2} \int d^2q \left\{ \ln (1 + \kappa^2 \tilde{u}_q) - \kappa^2 \tilde{u}_q \right\}, \quad (80)$$

где

$$\tilde{u}_q = \frac{n_q^2}{q(q + 1/\Lambda)}. \quad (81)$$

Для получения уравнения для ρ можно использовать вириальное разложение [112] или условие экстремума для энергии G :

$$\frac{\partial G}{\partial \rho} = 0. \quad (82)$$

Из уравнений (80) и (82) имеем:

$$\ln \left(\frac{\rho}{2z} \right) = -\frac{1}{8\pi^2} \frac{\partial}{\partial \rho} \int d^2q \left\{ \ln (1 + \kappa^2 \tilde{u}_q) - \kappa^2 \tilde{u}_q \right\}. \quad (83)$$

Выберем распределение $n(r)$ в виде:

$$n(r) = \int_{q \leq B} \frac{d^2q}{4\pi^2} \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r}). \quad (84)$$

Из этого уравнения получим:

$$n_q = \begin{cases} 1, & q \leq B \\ 0, & q > B \end{cases} \quad (85)$$

Заметим, что поведение двумерного кулоновского газа мало зависит от детальной формы распределения заряда [62, 63]. Аналогично, можно предположить, что простые уравнения (84) и (85) достаточны для описания диссоциации пар вихрь–антивихрь в двумерном сверхпроводнике. Для того, чтобы определить параметр B , заметим, что два вихря противоположных знаков, помещённые в одну точку, должны аннигилировать. Энергия двух противоположных вихрей, перпендикулярных плоскости сверхпроводника и расположенных на расстоянии r друг от друга, может быть записана в виде

$$\Delta F_{\text{pair}}(r) = 2\varepsilon + \tilde{\Phi}(r), \quad (86)$$

где энергия отдельного вихря даётся уравнением (55):

$$\varepsilon = \pi r_0^2 \xi^2 d \left(\frac{H_c^2}{8\pi} \right) + \frac{\varphi_0^2}{16\pi\Lambda} \left(H_0 \left(\frac{\xi}{\Lambda} \right) - Y_0 \left(\frac{\xi}{\Lambda} \right) \right). \quad (87)$$

Используя условие $\Delta F_{\text{pair}}(0) = 0$, получим уравнение для B . Можно показать, что $B \simeq 1/\xi$ в случае $\xi \ll \Lambda$, т.е. в пределе $\xi \rightarrow 0$ имеем $n(r) \rightarrow \delta(r)$.

Используя уравнения (85) и (83), получим

$$\ln \left(\frac{\rho}{2z} \right) = \frac{\beta\varphi_0^2}{16\pi^2\Lambda} \left\{ \ln \left(\frac{(B+1)^2}{B^2 + B + \xi\zeta} \right) + J(B, \zeta) \right\}, \quad (88)$$

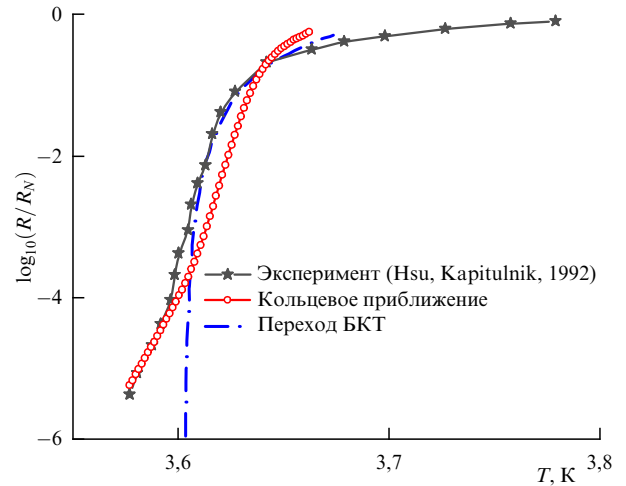


Рис. 3. Поведение $\log_{10}(R/R_N)$ как функции температуры, вычисленное с помощью уравнения (88) для $r_0 = 2,3$ (красные кружки). Чёрные звёздочки — экспериментальные точки, взятые из [106]. Пунктир — подгонка под БКТ поведение [106], полученное с помощью (53) (ср. рис. 1).

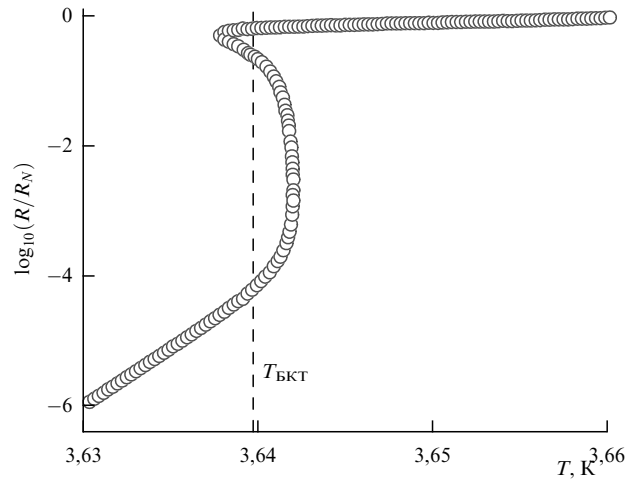


Рис. 4. Поведение $\log_{10}(R/R_N)$ как функции температуры, вычисленное с помощью уравнения (88) для $r_0 = 0,9$.

где

$$J(B, \zeta) = \frac{2}{\sqrt{4\zeta - 1}} \left\{ \arctan \frac{2B + 1}{\sqrt{4\zeta - 1}} - \arctan \frac{1}{\sqrt{4\zeta - 1}} \right\}, \quad 4\zeta - 1 \geq 0, \\ J(B, \zeta) = \frac{1}{\sqrt{4\zeta - 1}} \ln \left(\frac{2B + 1 - \sqrt{1 - 4\zeta}}{2B + 1 + \sqrt{1 - 4\zeta}} \right) \left(\frac{1 + \sqrt{1 - 4\zeta}}{1 - \sqrt{1 - 4\zeta}} \right), \quad 4\zeta - 1 \leq 0, \quad (89)$$

и $\zeta = \kappa^2 \Lambda^2$. При $B \rightarrow \infty$ уравнение (88) сводится к точечному пределу (69) и (70).

На рисунке 3 показано поведение $\log_{10}(R/R_N)$ как функции температуры, вычисленное с помощью уравнения (88) для $r_0 = 2,3$. Пунктирная кривая представляет решение уравнения (88), соответствующее пределу $B \rightarrow \infty$. Видно, что переход становится шире, однако качественное поведение не изменяется. Как обсуждалось выше, поведение решения качественно меняется при r_0 меньше критического значения $r_0^c = 1,22$. На рисунке 4

показано решение уравнения (88) для $r_0 = 0,9$, соответствующее неточечному пределу (77).

S-образная структура кривой $\log_{10}(R/R_N)$ характерна для перехода первого рода. Значение температуры перехода можно вычислить с помощью расчёта свободной энергии Гиббса $G(T)/k_B\Omega$ [107–109] и соответствует пунктирной линии на рис. 4. Температура перехода равна $T_1 = 3,6396$ К, $T_1 < T_{\text{вкт}}$ (вертикальная линия на рис. 4).

Таким образом, основой представленного рассмотрения являются явные уравнения для плотности свободных вихрей и свободной энергии Гиббса, полученные с помощью применения кольцевого приближения для работы с дальнедействующим межвихревым потенциалом (54). В отсутствие внешнего магнитного поля при больших энергиях ядра плотность свободных вихрей ρ не равна нулю при всех $T \neq 0$, однако можно говорить о переходе типа Костерлица – Таулеса в том смысле, что ρ очень быстро изменяется в окрестности температуры $T_{\text{кт}}$. При малых энергиях ядра диссоциация пар вихрь – антивихрь происходит посредством перехода первого рода с температурой перехода, зависящей от энергии ядра.

Кольцевое приближение было разработано для изучения свойств трёхмерной плазмы [57, 112]. Было естественным попытаться применить это приближение в случае двух измерений. В двух измерениях существуют два вида дальнедействующих потенциалов, с которыми обычно приходится иметь дело: это логарифмический потенциал, который является решением уравнения Пуассона в двух измерениях и называется двумерным кулоновским потенциалом (двумерный кулоновский газ [55]), и обычный трёхмерный кулоновский потенциал вида $1/r$, который используется для описания, например, двумерной системы электронов. Можно показать, что применение кольцевого приближения к вышеуказанным потенциалам приводит к расходимостям в термодинамических функциях: инфракрасной и ультрафиолетовой, соответственно. Потенциал межвихревого взаимодействия (54) может рассматриваться как интерполяция между этими двумя потенциалами, что приводит к тому, что в отсутствие магнитного поля изложенная выше теория свободна от расходимостей.

Наблюдаемый экспериментально переход (см., например, рис. 9 в [106]) находится в хорошем качественном согласии с полученными результатами, представленными на рис. 3, однако наблюдаемый переход шире. Расхождение, на наш взгляд, объясняется тем, что в предложенной теории не учитывается пиннинг, который всегда присутствует в экспериментальных образцах. Влияние пиннинга приводит к дополнительной диссоциации пар вихрь – антивихрь (см., например, [94]), что, в свою очередь, должно приводить к уширению кривых на рис. 3.

4. Плавление в двух измерениях. Сценарии двумерного плавления

Отдельным и очень важным ответвлением теории БКТ является теория двумерного плавления, развитая в конце 1970-х гг. в знаменитых работах Хальперина, Нельсона и Янга [52–54], в которых было показано, что в отличие от случая трёх измерений, где плавление всегда происходит посредством одного перехода первого рода, в двух

измерениях система может плавиться посредством двух непрерывных переходов типа БКТ. Причиной этого являются сильно развитые флуктуации в двумерной системе. Впоследствии было обнаружено, что существуют ещё два сценария двумерного плавления, которые будут подробно обсуждены ниже.

Понимание процессов упорядочения в 2D-системах имеет важное значение для широкого круга различных физических направлений: фотоники и электроники, физики мягкой материи, разработки новых материалов и биотехнологии, поскольку знание фазового поведения открывает путь к созданию систем с заданными свойствами. Несмотря на многочисленные исследования в данном направлении, остаются фундаментальные вопросы, связанные в первую очередь с зависимостью фазового поведения от конкретного вида взаимодействия между частицами [17, 20, 21, 113].

Изучение так называемой мягкой материи (soft matter), включающей растворы протеинов, полимеры, коллоиды, пылевую плазму и т.д., в определённой степени возобновило интерес к статистической механике систем, описываемых достаточно простыми изотропными эффективными потенциалами [20], которые хорошо подходят для использования их в рамках методов компьютерного моделирования. В последние годы появилось большое количество экспериментальных и теоретических (в первую очередь, связанных с использованием методов компьютерного моделирования) работ, посвящённых этим вопросам [114–135, 140, 141, 144, 146–151].

Предсказание свойств этих систем возможно в основном только с использованием эффективных потенциалов, которые определяют структуру мягкой материи, её коллективную динамику и термодинамику. Фазовые диаграммы, полученные с помощью эффективных потенциалов, могут качественно отличаться от случая стандартных молекулярных систем типа инертных газов. Простейшим эффективным потенциалом, сыгравшим большую роль в понимании механизмов кристаллизации и плавления двумерных систем является потенциал твёрдых дисков [36–39, 136–139, 152–169], однако даже для него результаты носили крайне противоречивый характер, и только в последнее время появились работы, внесшие ясность в этот вопрос [154, 155].

Для качественного описания коллоидов, полимерных глобул, звездообразных полимеров, используются различные феноменологические потенциалы, включая потенциалы с отрицательной кривизной в области отталкивания (или потенциалы с мягким ядром — soft-core potentials) [20, 65–67, 121, 129, 130, 132–135, 170–176, 181–183, 187], ограниченные потенциалы типа Гауссовского потенциала [188–190] или потенциала Герца [20, 21, 177–180, 184–186]. Для этих систем фазовые диаграммы по сравнению с фазовыми диаграммами для стандартных потенциалов типа потенциала Леннарда – Джонса или твёрдых и мягких дисков (потенциал вида $U(r) = (\epsilon/r)^{12}$) кардинальным образом изменяются и усложняются — появляется большое число новых кристаллических фаз, максимумы и минимумы на кривой плавления, стекольные состояния, а также аномальное поведение в жидкой фазе, которое соответствует хорошо известным водоподобным аномалиям. В этом случае в двумерных системах наблюдаются не только разнообразные кристаллические фазы и аномалии в жидкой фазе, но и удивительная возможность наблюдать различ-

ные сценарии плавления в различных областях одной фазовой диаграммы.

Двумерное плавление наблюдается в целом ряде самых разнообразных физических систем, кардинально отличающихся друг от друга по физическим свойствам и видам взаимодействий — вихревые решётки в тонких сверхпроводящих плёнках [191–201], решётки скирмионов в магнетиках [202–205], вихри в бозе-эйнштейновских конденсатах ультрахолодных атомов [206].

Вместе с тем зависимость сценариев двумерного плавления от вида потенциала до конца не изучена даже для такой, казалось бы, хорошо изученной системы, как система с потенциалом типа Леннарда–Джонса, для которой остаётся большое количество вопросов и противоречий, связанных со сценариями плавления и типами фазовых переходов [207–220].

4.1. Теория плавления Березинского–Костерлица–Таулеса–Хальперина–Нельсона–Янга (БКТХНЯ)

Ещё в первоначальных работах Березинский [13] и Костерлица и Таулес [15] отметили, что двумерный кристалл должен плавиться посредством диссоциации дислокационных пар, которые в данном случае являются топологическими дефектами (рис. 5). При наличии квазидальнего трансляционного порядка эти дефекты хорошо определены. Это наблюдение было положено в основу наиболее популярной теории двумерного плавления — теории Березинского–Костерлица–Таулеса–Хальперина–Нельсона–Янга (БКТХНЯ). Кристаллическая решётка характеризуется двумя видами нарушенной симметрии — трансляционной и вращательной, которым соответствуют два разных параметра порядка и, соответственно, два типа топологических дефектов — дислокации и дисклинации, при этом дислокация может быть представлена в виде дисклинационного диполя (см. рис. 5). Наличие двух параметров порядка и, соответственно, двух видов топологических дефектов наводит на мысль, что плавление двумерного кристалла в изотропную жидкость может происходить посредством двух переходов. Рассмотрим более подробно механизм плавления, положенный в основу теории БКТХНЯ.

Квазидальний периодический трансляционный порядок разрушается за счёт диссоциации дислокационных пар и появления свободных дислокаций (которые играют роль вихрей в $X-Y$ -модели), что приводит к обращению в нуль модуля сдвига μ . Гамильтониан, описывающий систему дислокаций в треугольном кристалле, имеет вид [17, 52, 54]:

$$H_{\text{dis}} = -\frac{a_0^2 K}{8\pi} \sum_{i \neq j}^M \left\{ \mathbf{b}(\mathbf{r}_i) \mathbf{b}(\mathbf{r}_j) \ln \frac{r_{ij}}{a} - \frac{(\mathbf{b}(\mathbf{r}_i) \mathbf{r}_{ij})(\mathbf{b}(\mathbf{r}_j) \mathbf{r}_{ij})}{r_{ij}^2} \right\} + E_c \sum_{i=1}^M \mathbf{b}^2(\mathbf{r}_i), \quad (90)$$

где E_c — энергия ядра дислокации, a_0 — период рассматриваемой треугольной решётки, \mathbf{b} — вектор Бюргерса, модуль Юнга K даётся уравнением:

$$K = \frac{4\mu(\mu + \lambda)}{2\mu + \lambda}. \quad (91)$$

Здесь μ и λ — коэффициенты Ламе [15, 17, 52–54]. Коэффициент Ламе λ связан с объёмным модулем

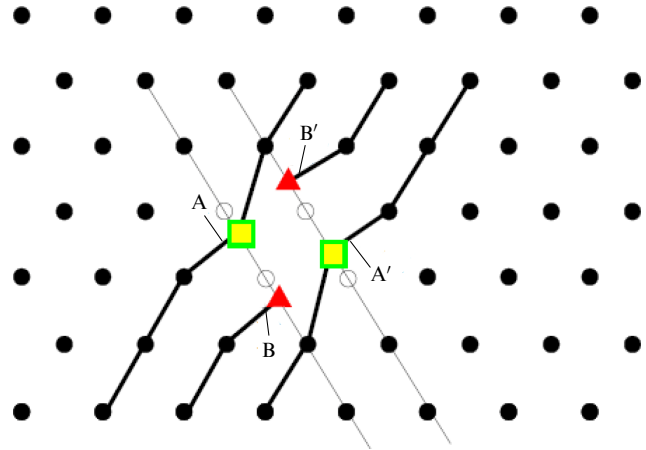


Рис. 5. Пара дислокаций, каждая из которых представляет дисклинационный диполь. Узлы А имеют 7 ближайших соседей, а В — 5 соседей.

$B = (dP/d\rho)_T = \mu + \lambda$. Гамильтониан (90) аналогичен гамильтониану двумерного кулоновского газа (12) с той только разницей, что вместо скалярного "заряда" $q(\mathbf{r})$ появляется вектор Бюргерса $\mathbf{b}(\mathbf{r})$, поэтому систему, описываемую этим гамильтонианом, иногда называют векторным кулоновским газом.

Диссоциация дислокационных пар, приводящая к плавлению при температуре T_m и являющаяся аналогом диссоциации пары вихрь–антивихрь при стандартном переходе Березинского–Костерлица–Таулеса, происходит при условии [15, 52, 54]:

$$k_B T_m = \frac{K a_0^2}{16\pi}. \quad (92)$$

Как и в случае стандартного перехода БКТ, необходимо учесть перенормировку упругих модулей за счёт связанных дислокационных пар. Ренормгрупповые уравнения для модуля Юнга треугольного кристалла имеют вид [53, 54]:

$$\frac{dK^{*-1}(l)}{dl} = \frac{3\pi}{4} y^2(l) \exp\left(\frac{K^*(l)}{8\pi}\right) \left(2I_0\left(\frac{K^*(l)}{8\pi}\right) - I_1\left(\frac{K^*(l)}{8\pi}\right) \right), \quad (93)$$

$$\frac{dy(l)}{dl} = \left(2 - \frac{K^*(l)}{8\pi} \right) y(l) + 2\pi y^2(l) \exp\left(\frac{K^*(l)}{16\pi}\right) I_0\left(\frac{K^*(l)}{8\pi}\right), \quad (94)$$

где $K^* = a_0^2 K / (k_B T)$, l — масштабная переменная и I_0 и I_1 — модифицированные функции Бесселя. Предел бесконечной системы соответствует $l = \infty$. Неперенормированный модуль Юнга $K(l=0)$ и фугитивность $y(l=0) = \exp(-E_c/k_B T)$ служат начальными условиями для системы уравнений (93) и (94).

Температура перехода T_m даётся уравнением (92), в котором учтена перенормировка упругих коэффициентов за счёт наличия в системе связанных дислокационных пар, понижающих упругость системы.

Характеризующая квазидальний трансляционный порядок корреляционная функция плотность–плотность

$G_T(r)$ имеет вид [52, 53]:

$$G_T(r) \propto r^{-\eta_T(T)}, \quad (95)$$

где показатель η_T ниже температуры плавления T_m имеет значения

$$\eta_T(T) \leq \frac{1}{3}. \quad (96)$$

$\eta_T(T_m) = 1/3$ соответствует неустойчивости кристаллической фазы по отношению к диссоциации дислокационных пар. Как и в случае $X-Y$ -модели, пик теплоёмкости имеет место выше T_m , при этом форма пика зависит от вида системы. Неравенство (96) играет принципиально важную роль для определения сценария плавления и параметров перехода. В связи с этим следует подчеркнуть, что соотношение (96) *строго справедливо только для плавления треугольной решётки*, которая описывается теорией БКТХНЯ.

В то же время нетрехугольные кристаллические структуры были обнаружены в работах по компьютерному моделированию двумерных систем, например, в системах с потенциалами с двумя пространственными масштабами [20, 135, 177, 187, 221–225], а также в воде [129, 226]. В работах [65–67, 130, 227] было показано существование квадратных кристаллов, в работах [130, 227] была также обнаружена гексагональная структура. Решётка Кагоме была найдена в [121, 129]. В ряде публикаций сообщалось о возможности существования в двух измерениях квазикристаллических структур [187, 228–230]. Точные ренормгрупповые уравнения типа (93) и (94) для нетрехугольных структур отсутствуют даже для простейшего случая квадратной решётки, в связи с этим возможен только приближенный анализ сценариев плавления, базирующийся на использовании неравенства (96). При этом вывод соответствующих ренормгрупповых уравнений остаётся достаточно важной теоретической задачей.

Так как в двумерном кристалле кроме квазидальнего трансляционного порядка существует дальний ориентационный порядок, то, как заметили Хальперин и Нельсон [52, 53], жидкость выше точки диссоциации дислокационных пар оказывается неизотропной. Они нашли, что диссоциация дислокационных пар не полностью разрушает дальний ориентационный порядок, а только превращает его в квазидальний [17, 19]. Получающаяся в результате новая фаза была названа "гексатической" по аналогии с жидкими кристаллами, однако в отличие от жидких кристаллов, она реализуется в системах с изотропными потенциалами. В рамках достаточно грубой аналогии гексатическую фазу можно представить как упорядоченную систему шестиугольных кластеров, состоящих из молекулы и её шести ближайших соседей. При этом корреляционная функция ориентационного параметра порядка для системы шестиугольников спадает с расстоянием по степенному закону (квазидальний ориентационный порядок). В гексатической фазе существуют свободные дислокации, поэтому её модуль сдвига равен нулю, т.е. она представляет собой жидкость с элементами упорядочения. Дислокацию можно представить в виде связанной пары двух дисклинаций (см. рис. 5). Гексатическая фаза превращается в обычную изотропную жидкость в результате следующего перехода Березинского – Костерлица – Таулеса посредством диссоциации дисклинационных пар.

Хальперин и Нельсон [53] предложили рассматривать в качестве феноменологического ориентационного параметра порядка для треугольной решётки величину:

$$\psi(\mathbf{r}) = \exp(6i\vartheta(\mathbf{r})), \quad (97)$$

где $\vartheta(\mathbf{r})$ — ориентация связи между двумя ближайшими соседями по отношению к некоторой фиксированной оси. Квазидальний порядок при температуре выше T_m характеризуется степенным убыванием корреляций:

$$G_6(r) \propto r^{-\eta_6(T)}. \quad (98)$$

Для описания длинноволновых флуктуаций в анизотропной жидкости Хальперин и Нельсон ввели феноменологический гамильтониан, аналогичный гамильтониану $X-Y$ -модели [53]:

$$H_A = \frac{1}{2} K_A(T) \int d^2r (\nabla\vartheta(\mathbf{r}))^2, \quad (99)$$

где константа Франка $K_A(T)$ связана с η_6 соотношением:

$$\eta_6(T) = \frac{18k_B T}{\pi K_A(T)}. \quad (100)$$

Диссоциация дисклинационных пар происходит при $T_i > T_m$. Уравнение для определения T_i имеет вид:

$$k_B T_i = \frac{\pi K_A(T_i)}{72}, \quad (101)$$

при этом $\eta_6(T_i) = 1/4$. Это значение показателя соответствует температуре неустойчивости гексатической фазы по отношению к образованию свободных дисклинаций, приводящих к появлению изотропной жидкости.

Представленная теория носит название теории Березинского – Костерлица – Таулеса – Хальперина – Нельсона – Янга. В рамках этой теории двумерный кристалл должен плавиться посредством двух непрерывных переходов типа БКТ с промежуточной гексатической фазой.

Теория БКТХНЯ долгое время была наиболее популярной и породила большое количество как экспериментальных, так и теоретических работ, основанных на компьютерном моделировании [17], включая такие экзотические системы, как система вихрей в тонких сверхпроводящих плёнках [191–197] и скирмионная решётка [202–205]. В настоящее время можно с достаточной степенью уверенности, опираясь как на эксперимент, так и на компьютерное моделирование [231], утверждать, что системы с дальнедействующим взаимодействием (например, кулоновское или диполь-дипольное взаимодействие, мягкие сферы $1/r^n$ с показателем $n \leq 6$) плаваются в соответствии со сценарием БКТХНЯ.

4.2. Плавление двумерных решёток посредством перехода первого рода

В то же время стандартный переход первого рода также может реализоваться. Возможный механизм перехода первого рода, вызванного появлением границ зёрен и соответствующим резким ростом числа свободных дислокаций, который происходит прежде диссоциации дислокационных пар и соответствующего перехода БКТ, был предложен в работе С.Т. Чуи [232] (см. также [17, 19, 113]). Граница зерна представляет собой коллективное

возбуждение дислокаций, являющееся "струной" дислокаций. Появление границы зерна приводит к вращению одной части кристалла по отношению к другим. Бесконечные параллельные границы зёрен взаимодействуют посредством короткодействующего потенциала [113, 232], что приводит к тому, что плавление происходит в соответствии со сценарием, отличным от БКТХНЯ. Были рассчитаны свободные энергии возможных конфигураций малоугловых границ зёрен в приближении малой плотности границ зёрен и дислокационных пар, при этом не рассматривалась перенормировка энергии ядра дислокации и упругих констант. В результате С.Т. Чуи пришёл к выводу, что до перехода БКТХНЯ происходит переход первого рода вне зависимости от величины энергии ядра дислокации, однако при энергии ядра $E_c^* > 2,84k_B T_m$, где T_m — температура диссоциации дислокационных пар (92), переход первого рода становится близким к непрерывному, но без гексатической фазы. Скорее всего, теория С.Т. Чуи справедлива для $E_c < E_c^*$, однако при более высоких значениях энергии ядра дислокации справедлива теория БКТХНЯ. В работе [233] методом Монте-Карло была рассмотрена так называемая огрубленная модель Лапласа, в рамках которой удалось показать, что при больших значениях энергии ядра дислокации имеет место сценарий БКТХНЯ, в то время, как при $E_c < E_c^*$ — переход первого рода.

Кристалл также может плавиться посредством одного перехода первого рода, при котором происходит диссоциация дисклинационных комплексов и появление в системе свободных дисклинаций. Свободная дисклинация приводит к повороту части кристалла по отношению к другим, что полностью разрушает как квазидальний трансляционный порядок, так и ориентационный порядок. Гамильтониан системы дислокаций и дисклинаций имеет вид [19, 234, 235]:

$$\begin{aligned}
 H_{\text{disl-disc}} = & \frac{\pi}{18} \sum_{i \neq j}^N s_i s_j \left\{ \frac{K}{8} r_{ij}^2 \ln \frac{r_{ij}}{a} \right\} + E_d \sum_{i=1}^N s_i^2 + \\
 & + \frac{a_0 K}{12} \sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^N s_j \epsilon_{nm} b_n(\mathbf{r}_i) (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)_m \left(\ln \frac{r_{ij}}{a} + C \right) - \\
 & - \frac{a_0^2 K}{8\pi} \sum_{i \neq j}^M \left\{ \mathbf{b}(\mathbf{r}_i) \mathbf{b}(\mathbf{r}_j) \ln \frac{r_{ij}}{a} - \frac{\mathbf{b}(\mathbf{r}_i) \mathbf{r}_{ij} \mathbf{b}(\mathbf{r}_j) \mathbf{r}_{ij}}{r_{ij}^2} \right\} + \\
 & + E_c \sum_{i=1}^M \mathbf{b}^2(\mathbf{r}_i), \quad (102)
 \end{aligned}$$

где E_d и E_c — энергии ядер дисклинаций и дислокаций, $\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$, K даётся уравнением (91).

Первые два члена описывают энергию взаимодействующих дисклинаций, третий — взаимодействие дислокаций с дисклинациями, последние два — энергию взаимодействия дислокаций (см. (90)). Можно показать, что энергия заданной конфигурации дисклинационных и дислокационных зарядов конечна лишь при выполнении условий:

$$\sum_j s_j = 0, \quad \sum_j \mathbf{r}_j s_j = 0, \quad \sum_j \mathbf{b}(\mathbf{r}_j) = 0. \quad (103)$$

Используя приближение Дебая–Хюккеля, в [17, 19, 234, 235] было показано, что плавление происходит как переход первого рода при энергии ядра дислокации

$E_c < 2,26$, и в соответствии со сценарием БКТХНЯ при более высоких энергиях ядра, что качественно совпадает с полученным в работе [232] результатом (см. также [113, 233]).

4.3. Сценарий Бернарда и Крауса (БК)

В 2011 году появилась статья Бернарда и Крауса [154], получившая развитие в работах [142, 155, 231, 236–238], в которой методами компьютерного моделирования было рассмотрено плавление двумерной системы твёрдых дисков и был предложен ещё один сценарий, в соответствии с которым переход из кристалла в гексатическую фазу является непрерывным переходом типа БКТ, в то время, как гексатическая фаза переходит в изотропную жидкость в результате перехода первого рода. Авторы предложили быстрый алгоритм метода Монте-Карло, который был применен к набору систем, число частиц в которых меняется от $N = 256^2$ до $N = 1024^2$. Рассматриваемые системы достаточно велики, а учитывая, что была применена экстремально длительная термализация, можно надеяться, что полученные результаты верны для равновесной системы в термодинамическом пределе. Предложенный сценарий получил экспериментальное подтверждение в работе [138], в которой исследовалось поведение жёстких коллоидов, заключённых между прозрачными пластинами, расположенными под небольшим углом, что позволило смоделировать изменение локальной плотности в системе.

В связи с этим следует сделать следующее замечание. Изучение плавления двумерных систем имеет долгую историю и началось ещё с первоначальных работ Олдера и Вайнрайта [36–39], в которых рассматривалась система твёрдых дисков. При этом в большинстве работ авторы приходили к выводу, что плавление данной системы происходит как переход первого рода [17, 19, 156–166, 168]. Вместе с тем следует упомянуть работу [167], авторы которой с использованием метода Монте-Карло пришли к выводу, что система плавится посредством одного непрерывного перехода без гексатической фазы. По-видимому, причины расхождений связаны с трудностями достижения истинного термодинамического равновесия и недостаточно большим размером системы. В этой связи следует упомянуть работы классика компьютерного моделирования Курта Биндера [166, 239], в первой из которых обнаружен переход первого рода в твёрдых дисках, а во второй, с использованием молекулярного моделирования и метода ренормгруппы, плавление этой системы описывается, как непрерывный переход без гексатической фазы. Причина противоречий состоит, скорее всего, в том, что размер системы и время моделирования были недостаточны для того, чтобы приблизиться к равновесному термодинамическому пределу. Следует также заметить, что, как показано в [138, 154, 155], ширина области существования гексатической фазы в системе твёрдых дисков настолько мала, что её трудно заметить на фоне двухфазной области при переходе первого рода. В следующем разделе мы вернемся к обсуждению данного вопроса.

В настоящее время отсутствует однозначная последовательная теория перехода первого рода гексатик-изотропная жидкость. Вероятный механизм состоит в том, что переход БКТ может стать переходом первого рода при уменьшении энергии ядра топологического дефекта [17, 55, 64, 108, 109, 111], однако последовательный расчёт

энергии ядра дисклинации на данный момент отсутствует, что не позволяет прогнозировать характер перехода в зависимости от вида межмолекулярного потенциала.

В настоящее время можно с достаточной степенью уверенности, опираясь как на эксперимент, так и на компьютерное моделирование [17, 231], утверждать, что системы с дальнедействующим взаимодействием (например, кулоновское или диполь-дипольное взаимодействие, мягкие диски $1/r^n$ с показателем $n \leq 6$) плавятся в соответствии со сценарием БКТХНЯ, в то время, как переход в системе мягких дисков с $n > 6$ происходит в соответствии с описанным выше сценарием БК.

Следует заметить, что в данный момент нет чётких теоретических критериев, позволяющих однозначно определить, исходя из вида потенциала, по какому сценарию пойдет плавление. При этом следует учесть тот факт, что теория БКТХНЯ, как и компьютерное моделирование мягких дисков [231, 236] и эксперименты с двумерными твёрдыми дисками [238] относились к треугольной кристаллической решётке. Однако в последнее время были обнаружены двумерные системы с квадратными и более сложными решётками, для исследования сценариев плавления которых существующие теории могут быть применены только условно. Более того, как обсуждалось в [170, 236, 240], случайный пиннинг способен изменить сценарий плавления и превратить переход первого рода в двухстадийное плавление с непрерывным переходом из кристалла в гексатическую фазу и переходом первого рода из гексатической фазы в изотропную жидкость. Таким образом, изучение связи между формой межчастичного потенциала и существованием гексатической фазы является интересной задачей, которая пока далека от однозначного решения.

4.4. Определение параметров двумерного плавления методами компьютерного моделирования

Для определения границ фазовых переходов применяется несколько взаимодополняющих методов. Прежде всего рассчитывается уравнение состояния. На рисунке ба – в представлены уравнения состояния, соответствующие описанным выше сценариям плавления.

В случае переходов первого рода на уравнениях состояния должны наблюдаться петли Майера – Вуда [241] — аналоги петель Ван дер Ваальса (рис. ба), из которых с помощью построения Максвелла можно определить границы перехода. Вид петель Майера – Вуда зависит от числа частиц в системе. При увеличении числа частиц петли сглаживаются, и в термодинамическом пределе вместо петли оказывается прямая линия, совпадающая с линией перехода, получаемой из построения Максвелла. В принципе, петли Майера – Вуда наблюдаются не только в случае перехода первого рода, но и в случае стандартного непрерывного перехода типа перехода в двумерной модели Изинга [156], однако поведение петель при увеличении числа частиц в этих случаях отличается. Для перехода первого рода петля находится в области сосуществования и обусловлена свободной энергией интерфейса ΔF . При заданной плотности свободная энергия поверхности раздела, $\Delta f = \Delta F/N$, может быть вычислена путём интегрирования уравнения состояния [154–156]. В двух измерениях она масштабируется как $\Delta f \propto 1/\sqrt{N}$. Напротив, для непрерывного перехода Δf затухает быстрее, так что ΔF постоянна, т.е.

$\Delta f \propto N^{-1}$, и уравнение состояния становится монотонным при достаточно больших размерах системы [156]. Масштабирование Δf в зависимости от размера системы для больших размеров системы является надёжным индикатором фазового перехода первого рода [169]. Базируясь на этом отличии, авторы сценария БК доказывали, что они наблюдают переход первого рода. Однако в этом рассмотрении не учитывается принципиальное отличие перехода в двумерной модели Изинга и перехода Березинского – Костерлица – Таулеса.

Следует отметить, что существует некоторое недопонимание термина непрерывный переход при обсуждении поведения уравнения состояния в случае перехода первого рода и непрерывного перехода. Чтобы сравнить поведение систем с переходом первого рода и непрерывным переходом, авторы [156] рассмотрели поведение системы жёстких дисков и модели Изинга и попытались применить результаты исследования перехода в двумерной модели Изинга для интерпретации результатов компьютерного моделирования двумерного плавления. В этой статье было проанализировано поведение петель Майера – Вуда для перехода в модели Изинга и системы жёстких дисков и получена представленная выше зависимость от числа частиц. Однако при этом не учитывалась принципиальная разница между переходом второго рода в модели Изинга и переходом Березинского – Костерлица – Таулеса. В двух пространственных измерениях теорема Мермина – Вагнера строго показывает, что в двумерных системах с непрерывной симметрией дальний порядок не может существовать при любой конечной температуре, в отличие от двумерной модели Изинга. Например, X – Y -модель не может иметь упорядоченную фазу при низкой температуре, как у двумерной модели Изинга. В двумерных системах с непрерывной симметрией, как обсуждалось во Введении, имеется непрерывный БКТ-переход, однако по сравнению с непрерывным переходом второго рода в модели Изинга переход БКТ является переходом бесконечного рода, т.е. по обе стороны от перехода производные бесконечного порядка от термодинамического потенциала равны друг другу, что делает переход более "плавным" по сравнению со стандартным переходом второго рода [55]. БКТ переход происходит в результате диссоциации пар топологических дефектов (вихрей в случае X – Y -модели, дислокаций в случае двумерного перехода кристалл – гексатическая фаза и дисклинаций для перехода гексатическая фаза – изотропная жидкость). Появление единственного свободного топологического дефекта качественно меняет поведение корреляционной функции параметра порядка от степенного к экспоненциальному затуханию. В частности, свободная дислокация делает модуль сдвига двумерного кристалла равным нулю. В этом случае отсутствуют границы фаз, которые создают петли Майера – Вуда в случае перехода второго рода в конечной системе, например, в двумерной модели Изинга, поэтому в случае БКТ перехода петля Майера – Вуда вообще невозможна. Это приводит к тому, что для сценария плавления БКТХНЯ уравнение состояния должно быть монотонным, без каких-либо петель и, в принципе, почти без явного изгиба (рис. бб). Как уже было сказано выше, увеличение числа частиц в случае перехода первого рода действительно делало петли более плоскими и незначительно изменяло размер двухфазной области, но не устраняло петли Майера – Вуда [154, 155, 168]. В то же

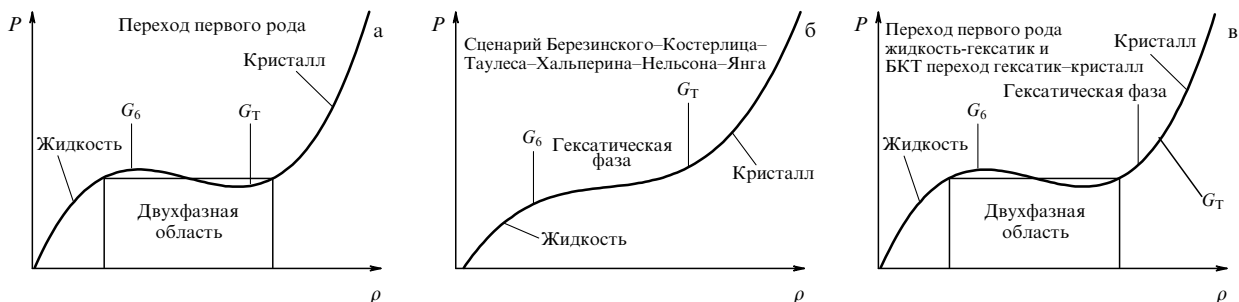


Рис. 6. Типичные уравнения состояния, соответствующие описанным в тексте сценариям двумерного плавления. Стрелками указаны границы устойчивости кристаллической и гексатической фаз, полученные из анализа поведения корреляционных функций трансляционного и ориентационного параметров порядка. (а) Типичное уравнение состояния для перехода первого рода. Границы перехода определяются из построения Максвелла. (б) Уравнение состояния в случае сценария БКТХНЯ. На уравнении состояния отсутствуют петли Майера – Вуда. (в) Уравнение состояния, соответствующее сценарию плавления БК. Границы перехода гексатик – изотропная жидкость определяются из построения Максвелла.

время в случае сценария БКТХНЯ изменение числа частиц может незначительно изменить количественные характеристики перехода плавления, но не может изменить качественную форму уравнения состояния.

Уравнения состояния весьма надёжно отражают область сосуществования двух фаз, но не дают информацию о сценарии перехода. Для определения точных границ гексатической фазы и кристалла следует использовать подход, связанный с дальнедействующим поведением ориентационных и трансляционных корреляционных функций параметров порядка [65–67, 170, 177, 187]. Как обсуждалось выше (см. также [53]), граница устойчивости гексатической фазы может быть определена из условия равенства показателя степени ориентационной корреляционной функции (ОКФ) $G_6(r)$ (98) $\eta_6 = 1/4$, в то время, как трансляционная корреляционная функция (ТКФ) $G_T(r)$ при переходе кристалл – гексатик также убывает степенным образом (107) с показателем, равным $\eta_T = 1/3$. На рисунке 6 схематически показано положение границ устойчивости для различных сценариев. В случае перехода первого рода (рис. 6а) эти границы устойчивости оказываются внутри двухфазной области, в то время, как в случае сценария БК (рис. в) граница устойчивости для перехода гексатик – изотропная жидкость попадает в двухфазную область, в то время, как граница БКТ перехода кристалл – гексатик находится в области стабильности твёрдого тела, что приводит к существованию гексатической фазы.

Область существования гексатической фазы обычно довольно узкая, что делает её изучение методами компьютерного моделирования довольно затруднительным. В то же время в реальных экспериментах по исследованию двумерного плавления рассматриваемые системы, как правило, содержат случайные поля различной природы — замороженные примеси, случайный рельеф подложки, пиннинговая случайная сила, обязанная своим происхождением неоднородности подложки.

В работах Нельсона [242, 243], а затем в последующих исследованиях [140, 141, 244–246] было показано, что введение беспорядка, действующего на частицы, по-разному должно действовать на трансляционный и ориентационный порядок. Очевидно, что даже небольшой беспорядок должен сильно нарушать расположение частиц по узлам решётки, в то же время ориентация векторов, направленных на ближайших соседей, не должна значительно меняться от наличия точечных дефектов, поэтому

трансляционный порядок должен достаточно легко разрушаться беспорядком, в то время, как влияние беспорядка на ориентационный порядок должно быть незначительным. В результате температура перехода из кристалла в гексатическую фазу должна понижаться, в то время, как температура перехода из гексатической фазы в изотропную жидкость должна быть практически неизменной, что приводит к увеличению области существования гексатической фазы за счёт уменьшения области кристалла. В этом случае даже возможна ситуация, когда переход первого рода трансформируется в два перехода в соответствии со сценарием БК [170, 186, 240].

Наличие ориентационного и трансляционного упорядочения в системе оценивается из изучения поведения соответствующих параметров порядка и их корреляционных функций.

Для оценки степени ориентационного упорядочения применяется параметр порядка, имеющий вид

$$\Psi_6(\mathbf{r}_i) = \frac{1}{n(i)} \sum_{j=1}^{n(i)} \exp(i6\theta_{ij}), \tag{104}$$

где θ_{ij} — угол между вектором \mathbf{r}_{ij} , соединяющим i -ю и j -ю частицы и произвольной осью. Суммирование производится по всем ближайшим соседям i -й частицы $n(i)$. Ближайшие соседи определяются по построению Вороного.

Кроме локального параметра порядка $\Psi_6(\mathbf{r}_i)$ можно ввести ещё глобальный параметр ψ_6 , который является средним по системе от $\Psi_6(\mathbf{r}_i)$:

$$\psi_6 = \frac{1}{N} \left\langle \left| \sum_i \Psi_6(\mathbf{r}_i) \right| \right\rangle. \tag{105}$$

Трансляционное упорядочение в системе определяется из параметра порядка

$$\psi_T = \frac{1}{N} \left\langle \left| \sum_i \exp(i\mathbf{G}\mathbf{r}_i) \right| \right\rangle, \tag{106}$$

где \mathbf{r}_i — радиус-вектор i -й частицы, а \mathbf{G} — вектор обратной решётки.

Трансляционная корреляционная функция имеет вид:

$$G_T(r) = \frac{\langle \exp(i\mathbf{G}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)) \rangle}{g(r)}, \tag{107}$$

где $r = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$, а $g(r) = \langle \delta(\mathbf{r}_i) \delta(\mathbf{r}_j) \rangle$ — радиальная функция распределения. В кристаллической фазе без замороженного беспорядка в пределе $r \rightarrow \infty$ $G_T(r) \propto r^{-\eta_T}$, где $\eta_T \leq 1/3$ [53].

Похожим образом определяется и ориентационная корреляционная функция $G_6(r)$ (ОКФ):

$$G_6(r) = \frac{\langle \Psi_6(\mathbf{r}) \Psi_6^*(\mathbf{0}) \rangle}{g(r)}, \quad (108)$$

где $\Psi_6(\mathbf{r})$ — локальный ориентационный параметр порядка (104). В гексатической фазе ОКФ спадает по степенному закону: $G_6(r) \propto r^{-\eta_6}$, где $0 \leq \eta_6 \leq 1/4$ [53]. Гексатическая фаза теряет свою стабильность при достижении условия $\eta_6(T_i) = 1/4$.

В присутствии пиннинга нами было обнаружено [170], что огибающая ТКФ в логарифмических координатах в зависимости от расстояния имеет излом, после которого и применим критерий убывания ТКФ степенным образом с показателем, равным $\eta_T = 1/3$ для определения границы стабильности кристалла при переходе в гексатическую фазу.

Описанные выше подходы для определения сценариев и параметров плавления систем с конкретными потенциалами являются наиболее удобными и точными в случае проведения исследований методами компьютерного моделирования.

4.5. Метод функционала плотности в теории двумерного плавления

Для дальнейшего рассмотрения напомним основные идеи теории функционала плотности для двумерного плавления [193, 247–251]. Как было отмечено выше, в случае двух измерений из-за флуктуаций не существует дальнего трансляционного порядка. Таким образом, при низких температурах локальная плотность твёрдого тела, которая пропорциональна одночастичной функции распределения, может быть записана в виде ряда Фурье по векторам обратной решётки \mathbf{G} :

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} \rho_{\mathbf{G}}(\mathbf{r}) \exp(i\mathbf{G}\mathbf{r}), \quad (109)$$

где $\rho_{\mathbf{G}}(\mathbf{r})$ параметры порядка для фазового перехода жидкость–твёрдое тело. Вследствии температурных флуктуаций, параметры порядка $\rho_{\mathbf{G}}(\mathbf{r})$ медленно изменяются на расстояниях порядка G^{-1} с амплитудой и фазой:

$$\rho_{\mathbf{G}}(\mathbf{r}) = \rho_{\mathbf{G}} \exp(i\mathbf{G}\mathbf{u}(\mathbf{r})). \quad (110)$$

Здесь $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ означает поле смещения, которое, в общем случае, может быть разложено на гладкую часть, соответствующую фонному полю и сингулярную часть, которая может быть интерпретирована как вихри Березинского–Костерлица–Таулеса [15] и имеет смысл дислокаций.

Принимая в расчёт длинноволновые флуктуации, можно записать разложение Ландау в форме [249–251]:

$$\begin{aligned} \Delta F = & \frac{1}{2} \int d^2r \sum_{\mathbf{G}} [A|\mathbf{G} \times \nabla \rho_{\mathbf{G}}|^2 + B|\mathbf{G} \cdot \nabla \rho_{\mathbf{G}}|^2 + \\ & + C|\rho_{\mathbf{G}}(\mathbf{G} \cdot \nabla) \rho_{\mathbf{G}}|] + \\ & + \frac{1}{2} a_T \sum_{\mathbf{G}} |\rho_{\mathbf{G}}|^2 + b_T \sum_{\mathbf{G}_1 + \mathbf{G}_2 + \mathbf{G}_3 = 0} \rho_{\mathbf{G}_1} \rho_{\mathbf{G}_2} \rho_{\mathbf{G}_3} + O(\rho^4). \end{aligned} \quad (111)$$

ΔF соответствует разности свободных энергий кристалла и изотропной жидкости. Первый член в разложении (111) имеет форму свободной энергии деформации твёрдого тела. Коэффициенты Ламе μ и λ являются функциями от параметров A , B , и C и пропорциональны квадрату модуля параметра порядка (109).

С помощью уравнения (111), сценарий плавления в двух измерениях может быть описан следующим образом. Если пренебречь флуктуациями параметра порядка (точно так же, как и в трёх измерениях), из уравнения (111) следует, что при некоторой температуре T_{MF} модуль параметра порядка становится равным нулю посредством перехода первого рода из-за члена третьего порядка в разложении Ландау (111). Тем не менее существует другая возможность: при температуре T_m в системе появляются сингулярные флуктуации фазы параметра порядка (вихри), которые соответствуют свободным дислокациям, в соответствии со стандартной парадигмой Костерлица–Таулеса. В этом случае модуль параметра порядка не равен нулю, тем не менее система реагирует на сдвиг без сопротивления (модуль сдвига $\mu = 0$), таким образом фазу при температуре выше T_m можно назвать жидкостью. В действительности это гексатическая фаза с квазидальним ориентационным порядком [17, 19, 52, 53]. Таким образом, существуют две возможности: (i) $T_m < T_{MF}$, тогда система плавится посредством двух последовательных непрерывных переходов Березинского–Костерлица–Таулеса; (ii) $T_m > T_{MF}$, тогда система плавится посредством перехода первого рода.

T_m и T_{MF} могут быть вычислены с помощью микроскопических выражений для свободной энергии Гельмгольца F твёрдого тела и модулей упругости [193, 248–251], рассчитанных с помощью рассмотрения асимптотического поведения корреляционных функций [252–256]. В этом случае локальная плотность твёрдого тела, $\rho(\mathbf{r})$, может быть представлена как локализованные гауссианы (ширины $1/\alpha^{1/2}$) в узлах решётки, т.е., с Фурье компонентами $\rho_{\mathbf{G}} = \rho \exp(-G^2/4\alpha)$, где $\rho = \int d\mathbf{r} \rho(\mathbf{r})/V$ средняя плотность. Так как основная задача в этой работе получить качественное описание плавления в системе с отталкивающим потенциалом в виде ступеньки, используется простейшая, но достаточно точная версия теории функционала плотности [193, 247–252, 255, 257, 258]:

$$\begin{aligned} \beta \Delta F = & \int d\mathbf{r} \rho(\mathbf{r}) \ln \left[\frac{\rho(\mathbf{r})}{\rho} \right] - \\ & - \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' c^{(2)}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|, \rho) [\rho(\mathbf{r}) - \rho] [\rho(\mathbf{r}') - \rho], \end{aligned} \quad (112)$$

где $c^{(2)}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|, \rho)$ прямая корреляционная функция [259], $\beta = 1/k_B T$. Параметр α определяется из условия минимума свободной энергии по отношению к нему. В принципе, параметры перехода первого рода должны быть определены из соотношения (112), используя построение общих касательных к кривым свободных энергий кристалла и изотропной жидкости, тем не менее, учитывая малость скачка объёма при переходе, температура плавления T_{MF} может быть с достаточно высокой точностью получена из уравнения $\Delta F = 0$.

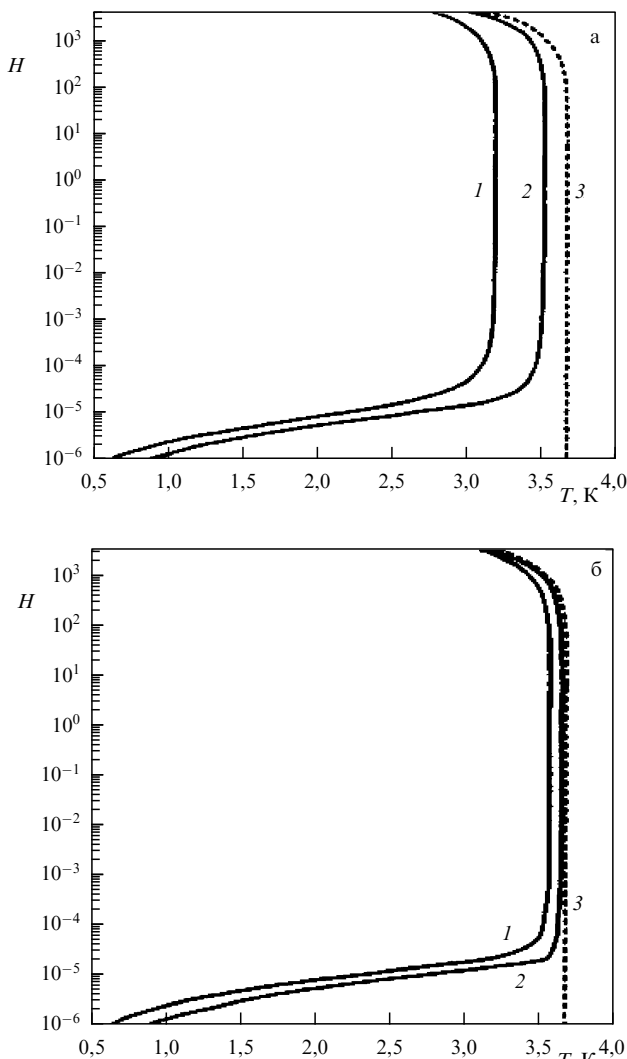


Рис. 7. (а) Фазовая диаграмма системы вихрей в плёнке ниобия толщиной 20 нм. (б) То же самое для 100 нм (см. [193]). Линии (1) соответствуют переходу вихревой кристалл — гексатическая вихревая фаза, (2) — переход между гексатической вихревой фазой и вихревой жидкостью, (3) — верхнее критическое поле H_{c2} .

Температура T_m может быть определена из критерия БКТХНЯ [17, 19, 52, 53], который определяет условие, при котором кристаллическая решётка становится неустойчивой вследствие появления свободных дислокаций.

$$K(T_m) = \frac{a_0^2}{k_B T_m} \frac{4\mu(T_m)(\mu(T_m) + \lambda(T_m))}{2\mu(T_m) + \lambda(T_m)} = 16\pi, \quad (113)$$

где $K(T)$ — модуль Юнга, $\mu(T)$ и $\lambda(T)$ коэффициенты Ламе, a_0 постоянная треугольной решётки: $a_0^2 = 2/(\sqrt{3}\rho)$.

Выражения для коэффициентов Ламе имеют вид [193, 248–251, 256]:

$$\mu = \frac{k_B T}{16\rho} \sum_G \rho_G^2 m_G G^2 (\gamma_G + 2\delta_G), \quad (114)$$

$$\lambda = \frac{k_B T}{16\rho} \sum_G \rho_G^2 m_G G^2 (\gamma_G - 6\delta_G) + k_B T \rho (1 - \rho \tilde{c}^{(2)}(0)), \quad (115)$$

где

$$\gamma_G = 2\pi\rho \int r^3 dr c^{(2)}(r; \rho) J_0(Gr),$$

$$\delta_G = 2\pi\rho \int r^3 dr c^{(2)}(r; \rho) \frac{J_1(Gr)}{(Gr)},$$

$J_0(x)$ и $J_1(x)$ функции Бесселя, m_G — количество векторов обратной решётки одинаковой длины, и $\tilde{c}^{(2)}(q)$ — Фурье-образ прямой корреляционной функции.

Для дальнейших расчётов необходимо приближенное выражение для прямой корреляционной функции. В этом случае удобно стартовать с аналитического выражения для прямой корреляционной функции твёрдых дисков $c_{HD}^{(2)}(r, \rho)$ [259], полученного в работах [257, 258] (см. также [249, 250, 260, 261]).

Полученные соотношения использовались для расчётов фазовых диаграмм целого ряда двумерных систем: системы твёрдых дисков и потенциала $U \propto 1/r$ [193, 248, 262], системы с потенциалом твёрдых дисков, к которому добавлена притягивающая яма [249, 250] или отталкивающая ступенька [251, 256].

На рисунке 7 представлены фазовые диаграммы систем вихрей в тонких плёнках Nb толщиной 20 нм и 100 нм, рассчитанные с использованием параметров из [106] (см. (75)) потенциала межвихревого взаимодействия (54). На рисунках кривые (1) соответствуют переходу вихревой кристалл — гексатическая вихревая фаза, (2) — переход между гексатической вихревой фазой и вихревой жидкостью, (3) — верхнее критическое поле H_{c2} . Из рисунка видно, что с увеличением толщины плёнки флуктуационная область уменьшается, при этом области существования гексатической и жидкой вихревых фаз сужаются. Следует заметить, что к моменту проведения цитируемых расчётов чётких фазовых диаграмм системы вихрей ещё не было опубликовано. В настоящее время можно, например, сослаться на фазовую диаграмму системы вихрей в тонкой плёнке α -MoGe [198] (рис. 5 в этой статье), которая качественно соответствует рис. 7. Следует заметить, что насколько нам известно, это был первый расчёт фазовой диаграммы системы вихрей, базирующийся на полном межвихревом потенциале (54).

В рамках метода функционала плотности в теории кристаллизации было показано, что сценарий плавления зависит от вида межмолекулярного потенциала [247, 249, 252, 255, 263–268], однако детальное описание зависимости сценариев двумерного плавления от вида потенциала в большинстве случаев требует использования методов компьютерного моделирования [17, 19, 20].

5. Заключение

В настоящее время прошло уже более 50-ти лет с момента публикации основополагающих работ Березинского — Костерлица — Таулеса, заложивших основы новой физики двумерных систем — физики БКТ [13–15]. Разработанная более 50 лет назад теория БКТ за прошедшее время превратилась из довольно экзотического на тот момент подхода к описанию фазовых переходов в системах, в которых, с точки зрения стандартной на тот момент теории, никаких фазовых переходов и быть не должно [18], в мощный метод, который был затем распространён на целый ряд физических систем за

пределами стандартной X – Y -модели и плёнок сверхтекучего ^4He , которым в первую очередь были посвящены пионерские работы [13–15, 43]. В настоящее время идеи, развитые в первоначальных статьях Березинского–Костерлица–Таулеса, успешно применяются к исследованиям широкого спектра самых различных низкоразмерных систем, включающего сверхпроводники и системы джозефсоновских контактов, квазидвумерные системы ультрахолодных атомов в опто-магнитных ловушках, жидкокристаллические плёнки, двумерные коллоиды, электроны на поверхности жидкого гелия, атомы инертных газов на подложках (ксенон на графите), двумерные гранулированные системы, цилиндрические магнитные домены в тонкой плёнке, системы вихрей в ВТСП и тонких сверхпроводящих плёнках в магнитном поле, пылевую плазму, тонкие плёнки жидкостей (воды) и т.д. (см., например, [16, 17, 19, 22]).

Теория БКТ привлекла к себе пристальное внимания после появления работы Костерлица и Нельсона [68], посвящённой сверхтекучему переходу в тонкой плёнке ^4He , и последующему блестящему экспериментальному подтверждению этой теории [47–49, 69].

Практически одновременно появилась разработанная Хальпериним и Нельсоном [53, 54] теория двумерного плавления (теория Березинского–Костерлица–Таулеса–Хальперина–Нельсона–Янга (БКТХНЯ)), базирующаяся на представлениях о диссоциации пар топологических дефектов (дислокаций, дисклинаций), приводящих к разрушению квазидальнего трансляционного и ориентационного порядка посредством двух переходов. Принципиальным отличием двумерного плавления от случая трёх измерений является возможность того, что система должна плавиться посредством двух переходов бесконечного рода типа БКТ с промежуточной ориентационно упорядоченной гексатической фазой. Теория БКТХНЯ долгое время была самой популярной теорией двумерного плавления. Характерной особенностью этой теории является то, что в уравнения не входит в явном виде потенциал взаимодействия, что позволяет данной теории претендовать на универсальность.

Эта теория породила огромное число экспериментальных и теоретических работ. В настоящее время можно с достаточной степенью уверенности, опираясь как на эксперимент (см. например, [19, 140, 141, 143–150, 269]), так и на компьютерное моделирование [19, 231], утверждать, что системы с дальнедействующим взаимодействием (например, кулоновское или диполь-дипольное взаимодействие, мягкие сферы $1/r^n$ с показателем $n \leq 6$) плавятся в соответствии с теорией БКТХНЯ.

Вместе с тем ситуация с описанием двумерного плавления остаётся достаточно противоречивой. Как обсуждалось выше, плавление также может происходить как посредством стандартного перехода первого рода, так и в соответствии со сценарием Бернарда–Крауса, согласно которому переход из кристалла в гексатическую фазу является непрерывным переходом типа БКТХНЯ, в то время, как гексатическая фаза переходит в изотропную жидкость в результате перехода первого рода. Последний сценарий, видимо, справедлив для систем с короткодействующими потенциалами [19] (например, в [231] показано, что в случае потенциала вида $1/r^n$ этот сценарий имеет место при $n > 6$). Таким образом, можно с достаточной степенью уверенности утверждать, что теория двумерного плавления

только частично соответствует канонической теории БКТ, в связи с этим при компьютерном моделировании необходимо руководствоваться методологией, описанной выше (см. [19]).

В настоящее время отсутствуют чёткие теоретические критерии, позволяющие однозначно определить исходя из вида потенциала, по какому сценарию пойдет плавление. В ранних работах в основном преобладала точка зрения, что системы с короткодействующими потенциалами плавятся посредством перехода первого рода, в то время, как системы с дальнедействующими потенциалами плавятся в результате двух непрерывных переходов с промежуточной гексатической фазой в соответствии с теорией БКТХНЯ. Однако после появления работ [154, 155, 170, 231, 237] стало ясно, что гексатическая фаза может существовать и для короткодействующих потенциалов, включая твёрдые диски. Более того, как обсуждалось выше (см., также, [170–175]), случайный пиннинг способен изменить сценарий плавления и превратить переход первого рода в двухстадийное плавление с непрерывным переходом из кристалла в гексатическую фазу и переходом первого рода из гексатической фазы в изотропную жидкость. Таким образом, изучение связи между формой межчастичного потенциала и существованием гексатической фазы является интересной задачей, которая пока далека от однозначного решения. Видимо, переход первого рода из гексатической фазы в изотропную жидкость можно объяснить тем, что энергия ядра топологического дефекта (дисклинации) достаточно мала, однако не ясно, как эта энергия и модуль Франка гексатической фазы связаны с межчастичным потенциалом. Вообще, проблема вычисления энергии ядра топологического дефекта, исходя из межчастичного потенциала, остается далекой от полного решения.

Как уже упоминалось, теория БКТХНЯ строилась исходя из предположения о том, что структура кристалла является треугольной. В настоящее время появилось большое количество различных вариантов двумерных кристаллических решёток, соответствующих различным, иногда весьма экзотическим, потенциалам. Адаптация теории БКТХНЯ к данным структурам, вывод соответствующих ренормгрупповых уравнений и получение соответствующих критериев устойчивости кристаллических фаз также представляется важной задачей.

Тонкие сверхпроводящие плёнки дают очень обширный материал для изучения возможности перехода БКТ. Как обсуждалось выше, из большинства имеющихся экспериментальных и теоретических результатов можно сделать вывод, что физика БКТ в некоторых случаях чётко наблюдалась, но зачастую в литературе наблюдения проявлений БКТ основывались на наивном применении знаменитых канонических формул БКТ. В этом случае не учитывается дальнедействующее поведение потенциала межвихревого взаимодействия, а также неизбежный пиннинг и влияние слабого магнитного поля на переход. В первую очередь это относится к проблеме уширения наблюдаемого перехода, которое пытаются объяснить полуфеноменологически с привлечением парпроводимости и феноменологического учёта пиннинга. Однако как показано в разделе 3.2 [107–111], использование полного потенциала в рамках кольцевого приближения (т.е. выход за пределы стандартных уравнений БКТ) позволяет последовательно описать кроссовер в сверхпроводящей плёнке и значительно улучшить ка-

чественное описание поведения системы, в частности уширение перехода. Необходимо учитывать это, чтобы относиться достаточно критически к проявлениям перехода БКТ в эксперименте.

В заключение хотелось бы ещё раз подчеркнуть, что разработанная более 50-ти лет назад Березинским, Костерлицем и Таулесом теория, за которую в 2016 г. Костерлиц и Таулес заслуженно получили Нобелевскую премию, до сих пор остается мощным стимулом к изучению двумерных систем самой различной природы.

После написания обзора появилась статья [270], в которой были выведены ренормгрупповые уравнения для квадратной решётки. Принципиальным изменением по сравнению с показателем для треугольной решётки (96) является то, что для квадратной решётки $\eta_T \leq 1/4$ что должно существенно изменить результаты расчётов фазовых диаграмм квадратных решёток.

Работа поддержана грантом Российского научного фонда № 24-12-00037.

Список литературы

- Ландау Л Д *ЖЭТФ* 7 627 (1937); Landau L *Phys. Z. Sowjetunion* 11 545 (1937); Ландау Л Д *Собрание трудов* Т. 1 (М.: Наука, 1969) с. 253
- Паташинский А З, Покровский В Л *ЖЭТФ* 46 994 (1964); Patashinskii A Z, Pokrovskii V L *Sov. Phys. JETP* 19 677 (1964)
- Паташинский А З, Покровский В Л *ЖЭТФ* 50 439 (1966); Patashinskii A Z, Pokrovskii V L *Sov. Phys. JETP* 23 292 (1966)
- Kadanoff L P *Physics Physique Fizika* 2 263 (1966)
- Fisher M E *Rep. Prog. Phys.* 30 615 (1967)
- Wilson K G *Phys. Rev. B* 4 3174 (1971); *Phys. Rev. B* 4 3184 (1971)
- Wilson K G, Fisher M E *Phys. Rev. Lett.* 28 240 (1972)
- Wilson K G *Phys. Rev. Lett.* 28 548 (1972)
- Паташинский А З, Покровский В Л *Флуктуационная теория фазовых переходов* (М.: Наука, 1982); Пер. на англ. яз.: Patashinskii A Z, Pokrovskii V L *Fluctuation Theory of Phase Transitions* (Oxford: Pergamon Press, 1979)
- Stanley H E *Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena* (Oxford: Clarendon Press, 1971)
- Peierls R E *Helv. Phys. Acta* 7 (Suppl. 2) 81 (1934)
- Peierls R E *Ann. Inst. Henri Poincaré* 5 177 (1935)
- Березинский В Л *ЖЭТФ* 59 907 (1970); Berezinskii V L *Sov. Phys. JETP* 32 493 (1971)
- Березинский В Л *ЖЭТФ* 61 1144 (1971); Berezinskii V L *Sov. Phys. JETP* 34 610 (1972)
- Kosterlitz J M, Thouless D J *J. Phys. C* 6 1181 (1973)
- Kosterlitz J M *Rep. Prog. Phys.* 79 026001 (2016)
- Рыжов В Н, Тареева Е Е, Фомин Ю Д, Циок Е Н *УФН* 187 921 (2017); Ryzhov V N, Tareyeva E E, Fomin Yu D, Tsiok E N *Phys. Usp.* 60 857 (2017)
- Рыжов В Н *УФН* 187 125 (2017); Ryzhov V N *Phys. Usp.* 60 114 (2017)
- Рыжов В Н, Гайдук Е А, Тареева Е Е, Фомин Ю Д, Циок Е Н *ЖЭТФ* 164 143 (2023); Ryzhov V N, Gaiduk E A, Tareyeva E E, Fomin Yu D, Tsiok E N *J. Exp. Theor. Phys.* 137 125 (2023)
- Рыжов В Н, Тареева Е Е, Фомин Ю Д, Циок Е Н *УФН* 190 449 (2020); Ryzhov V N, Tareyeva E E, Fomin Yu D, Tsiok E N *Phys. Usp.* 63 417 (2020)
- Рыжов В Н, Гайдук Е А, Тареева Е Е, Фомин Ю Д, Циок Е Н *ЭЧАЯ* 51 923 (2020); Ryzhov V N, Gaiduk E A, Tareyeva E E, Fomin Yu D, Tsiok E N *Phys. Part. Nucl.* 51 786 (2020)
- José J V (Ed.) *40 Years of Berezinskii–Kosterlitz–Thouless Theory* (Singapore: World Scientific, 2013)
- Ландау Л Д, Лифшиц Е М *Статистическая физика* Ч. 1 (М.: Наука, 1976); Пер. на англ. яз.: Landau L D, Lifshitz E M *Statistical Physics* Vol. 1 (Oxford: Pergamon Press, 1980)
- Боголюбов Н Н "Квазисредние в задачах статистической механики", в сб. *Собрание научных трудов в двенадцати томах* Т. 6 (М.: Наука, 2006) с. 236; Пер. на англ. яз.: Bogolubov N N (Jr.) "Quasi-averages in problems of statistical mechanics", in *Quantum Statistical Mechanics: Selected Works* (Hackensack, NJ: World Scientific, 2015)
- Садовников Б И, Федянин В К *ТМФ* 16 368 (1973); Sadovnikov B I, Fedyanin V K *Theor. Math. Phys.* 16 901 (1973)
- Садовников Б И, Сорокина Е М *ДАН СССР* 188 788 (1969); Sadovnikov B I, Sorokina E M *Sov. Phys. Dokl.* 14 968 (1970)
- Mermin N, Wagner H *Phys. Rev. Lett.* 17 1133 (1966)
- Mermin N D *Phys. Rev.* 176 250 (1968)
- Kagiyada R S et al. *Phys. Rev. Lett.* 22 338 (1969)
- Chester M, Yang L C, Stephens J B *Phys. Rev. Lett.* 29 211 (1972)
- Henkel R P, Smith E N, Reppy J D *Phys. Rev. Lett.* 23 1276 (1969)
- Kukich G, Henkel R P, Reppy J D *Phys. Rev. Lett.* 21 197 (1968)
- Clow J R, Reppy J D *Phys. Rev. Lett.* 19 291 (1967)
- Amit D J *Phys. Lett. A* 26 448 (1968)
- Amit D J *Phys. Lett. A* 26 466 (1968)
- Alder B J, Wainwright A W *J. Chem. Phys.* 27 1208 (1957)
- Alder B J, Wainwright A W *J. Chem. Phys.* 31 459 (1959)
- Alder B J, Wainwright A W *J. Chem. Phys.* 33 1439 (1960)
- Alder B J, Wainwright A W *Phys. Rev.* 127 359 (1962)
- Stanley H E, Kaplan T A *Phys. Rev. Lett.* 17 913 (1966)
- Stanley H E *Phys. Rev. Lett.* 20 589 (1968)
- Moore M A *Phys. Rev. Lett.* 23 861 (1969)
- Kosterlitz J M, Thouless D J *J. Phys. C* 5 L124 (1972)
- Kosterlitz J M *J. Phys. C* 7 1046 (1974)
- Nagaosa N *Quantum Field Theory in Condensed Matter Physics* (New York: Springer, 1999) DOI:10.1007/978-3-662-03774-4
- Giamarchi T *Quantum Physics in One Dimension* (Oxford: Oxford Univ. Press, 2004)
- Bishop D J, Reppy J D *Phys. Rev. Lett.* 40 1727 (1978)
- Rudnik I *Phys. Rev. Lett.* 40 1454 (1978)
- McQueeney D, Agnolet G, Reppy J D *Phys. Rev. Lett.* 52 1325 (1984)
- Hadzibabic Z et al. *Nature* 44 1118 (2006)
- Murthy P A et al. *Phys. Rev. Lett.* 115 010401 (2015)
- Halperin B I, Nelson D R *Phys. Rev. Lett.* 41 121 (1978)
- Nelson D R, Halperin B I *Phys. Rev. B* 19 2457 (1979)
- Young A P *Phys. Rev. B* 19 1855 (1979)
- Minnhagen P *Rev. Mod. Phys.* 59 1001 (1987)
- Young A P *J. Phys. C* 11 L453 (1978)
- Балеску Р *Равновесная и неравновесная статистическая механика* Т. 1 (М.: Мир, 1978); Пер. с англ. яз.: Balescu R *Equilibrium and Non-Equilibrium Statistical Mechanics* Vol. 1 (New York: Wiley, 1975)
- Chaikin P M, Lubensky T C *Principles of Condensed Matter Physics* (Cambridge: Cambridge Univ. Press, 1995)
- Ohta T *Prog. Theor. Phys.* 60 968 (1978)
- Wiegman P B *J. Phys. C* 11 1583 (1978)
- Amit D J, Goldschmidt Y Y, Grinstein G *J. Phys. A* 13 585 (1980)
- Xu B-W, Zhang Y-M *Phys. Rev. B* 50 18651 (1994)
- Ding G-H, Xu B-W *Phys. Rev. B* 51 12653 (1995)
- Herbut I A *Modern Approach to Critical Phenomena* (Cambridge: Cambridge Univ. Press, 2007) DOI:10.1017/CBO9780511755521
- Dudalov D E et al. *J. Phys. Conf. Ser.* 510 012016 (2014)
- Dudalov D E et al. *J. Chem. Phys.* 141 18C522 (2014)
- Dudalov D E et al. *Soft Matter* 10 4966 (2014)
- Nelson D R, Kosterlitz J M *Phys. Rev. Lett.* 39 1201 (1977)
- Dash J G *Phys. Rev. Lett.* 41 1178 (1978)
- Tung S et al. *Phys. Rev. Lett.* 105 230408 (2010)
- Huang C-L et al. *Nature* 470 236 (2011)
- Clade P et al. *Phys. Rev. Lett.* 102 170401 (2009)
- Rath S P et al. *Phys. Rev. A* 82 013609 (2010)
- Pearl J, in *Proc. of the 9th Intern. Conf. on Low Temperature Physics LT-9, 1964* (Eds J G Daunt et al.) (New York: Plenum Press, 1965) p. 566
- Irz D Y, Ryzhov V N, Tareyeva E E *Phys. Lett. A* 207 374 (1995)
- Beasley M R, Mooij J E, Orlando T P *Phys. Rev. Lett.* 42 1165 (1979)
- Benfatto L, Castellani C, Giamarchi T "Berezinskii–Kosterlitz–Thouless transition within the sine-Gordon approach: the role of the vortex-core energy", in *40 Years of Berezinskii–Kosterlitz–Thouless Theory* (Ed. J V José) (Singapore: World Scientific, 2013)
- Sadovskii M V *Quantum Field Theory* 2nd ed. (Berlin: De Gruyter, 2019)
- Лифшиц Е М, Питаевский Л П *Статистическая физика* Ч. 2 *Теория конденсированного состояния* (М.: Наука, 1978); Пер. на англ. яз.: Lifshitz E M, Pitaevskii L P *Statistical Physics* Vol. 2 *Theory of the Condensed State* (Oxford: Butterworth-Heinemann, 1980)
- Sadovskii M V *Statistical Physics* 2nd ed. (Berlin: De Gruyter, 2019)
- Tinkham M *Introduction to Superconductivity* (New York: McGraw-Hill, 1975)

82. Halperin B I, Nelson D R *J. Low Temp. Phys.* **36** 599 (1979)
83. Zhao W et al. *Solid State Commun.* **165** 59 (2013)
84. Kamlapure A et al. *Appl. Phys. Lett.* **96** 072509 (2010)
85. Mondal M et al. *Phys. Rev. Lett.* **107** 217003 (2011)
86. Sharma M et al. *Nanomaterials* **12** 4109 (2022)
87. Epstein K, Goldman A M, Kadin A M *Phys. Rev. Lett.* **47** 534 (1981)
88. Fiory A T, Hebard A F, Glaberson W I *Phys. Rev. B* **28** 5075 (1983)
89. Venditti G et al. *Phys. Rev. B* **100** 064506 (2019)
90. Benfatto L, Castellani C, Giamarchi T *Phys. Rev. B* **80** 214506 (2009)
91. Baity P G et al. *Phys. Rev. B* **93** 024519 (2016)
92. Doniach S, Huberman B A *Phys. Rev. Lett.* **42** 1169 (1979)
93. Sharma M et al., arXiv:2403.11685
94. Hetel I, Lemberger T R, Randeria M *Nature Phys.* **3** 700 (2007)
95. Yong J et al. *Phys. Rev. B* **85** 180507 (2012)
96. Turneure S J, Lemberger T R, Graybeal J M *Phys. Rev. B* **63** 174505 (2001)
97. Rüfenacht A et al. *Phys. Rev. Lett.* **96** 227002 (2006)
98. Turneure S J, Ulm E R, Lemberger T R *J. Appl. Phys.* **79** 4221 (1996)
99. Crane R W et al. *Phys. Rev. B* **75** 094506 (2007)
100. Liu W et al. *Phys. Rev. B* **84** 024511 (2011)
101. Bilbro L S et al. *Nature Phys.* **7** 298 (2011)
102. Jeanneret B et al. *Phys. Rev. B* **40** 11374 (1989)
103. Wallin M *Phys. Rev. B* **41** 6575 (1990)
104. Turneure S J, Lemberger T R, Graybeal J M *Phys. Rev. Lett.* **84** 987 (2000)
105. Lin Y-H, Nelson J, Goldman A M *Phys. Rev. Lett.* **109** 017002 (2012)
106. Hsu J W P, Kapitulnik A *Phys. Rev. B* **45** 4819 (1992)
107. Hebard A F, Fiory A T *Phys. Rev. Lett.* **50** 1603 (1983)
108. Misra S et al. *Phys. Rev. Lett.* **110** 037002 (2013)
109. Daptary G N et al. *Phys. Rev. B* **94** 085104 (2016)
110. Hetel I, Lemberger T R, Randeria M *Nature Phys.* **3** 700 (2007)
111. Yong J et al. *Phys. Rev. B* **85** 180507 (2012)
112. Baity P G et al. *Phys. Rev. B* **93** 024519 (2016)
113. Bert J A et al. *Phys. Rev. B* **86** 060503 (2012)
114. Caviglia A D et al. *Nature* **456** 624 (2008)
115. Mallik S et al. *Nature Commun.* **13** 4625 (2022)
116. Saito Y et al. *Science* **350** 409 (2015)
117. Arjun H, Chaudhuri P *J. Phys. Condens. Matter* **32** 414001 (2020)
118. Dillmann P, Maret G, Keim P *J. Phys. Condens. Matter* **24** 464118 (2012)
119. Zahn K, Maret G *Phys. Rev. Lett.* **85** 3656 (2000)
120. Khrapak S A *Phys. Rev. Research* **2** 012040 (2020)
121. Piñeros W D, Baldea M, Truskett Th M *J. Chem. Phys.* **145** 054901 (2016)
122. Krebs Z et al. *J. Chem. Phys.* **149** 034503 (2018)
123. Hoang V V, Hieu N T *J. Phys. Chem. C* **120** 18340 (2016)
124. Khrapak S *J. Chem. Phys.* **148** 146101 (2018)
125. Schmidle H et al. *Soft Matter* **8** 1521 (2012)
126. Shankaraiah N, Sengupta S, Menon G I *J. Phys. Condens. Matter* **32** 184003 (2020)
127. Anderson J A et al. *Phys. Rev. X* **7** 021001 (2017)
128. Padilla L A et al. *J. Chem. Phys.* **155** 214901 (2021)
129. Nowack L, Rice S A *J. Chem. Phys.* **151** 244504 (2019)
130. Jain A, Errington J R, Truskett T M *Phys. Rev. X* **4** 031049 (2014)
131. Chen Y et al. *Phys. Rev. Lett.* **127** 018004 (2021)
132. Cardoso D S et al. *Physica A* **566** 125628 (2021)
133. Campos-Villalobos G, Dijkstra M, Patti A *Phys. Rev. Lett.* **126** 158001 (2021)
134. Almudallal A M, Buldyrev S V, Saika-Voivod I *J. Chem. Phys.* **137** 034507 (2012)
135. Rice S A *Chem. Phys. Lett.* **479** 1 (2009)
136. Qi W, Gantapara A P, Dijkstra M *Soft Matter* **10** 5449 (2014)
137. Russo J, Wilding N B *Phys. Rev. Lett.* **119** 115702 (2017)
138. Thorneywork A L et al. *Phys. Rev. Lett.* **118** 158001 (2017)
139. Sampedro Ruiz P, Lei Q, Ni R *Commun. Phys.* **2** 70 (2019)
140. Deutschländer S et al. *Phys. Rev. Lett.* **111** 098301 (2013)
141. Horn T et al. *Phys. Rev. E* **88** 062305 (2013)
142. Qi W, Dijkstra M *Soft Matter* **11** 2852 (2015)
143. Grimes C C, Adams G *Phys. Rev. Lett.* **42** 795 (1979)
144. Gasser U et al. *ChemPhysChem* **11** 963 (2010)
145. Фомин Ю Д, Циок Е Н, Рыжов В Н *Письма в ЭЧАЯ* **22** 402 (2025); Fomin Yu D, Tsiok E N, Ryzhov V N *Phys. Part. Nucl. Lett.* **22** 509 (2025)
146. Keim P, Maret G, von Grünberg H H *Phys. Rev. E* **75** 031402 (2007)
147. von Grünberg H H et al. *Phys. Rev. Lett.* **93** 255703 (2004)
148. Dillmann P, Maret G, Keim P *J. Phys. Condens. Matter* **20** 404216 (2008)
149. Assoud L et al. *Phys. Rev. Lett.* **102** 238301 (2009)
150. Deutschländer S et al. *Phys. Rev. Lett.* **113** 127801 (2014)
151. Vasilieva E V, Petrov O F, Vasiliev M M *Sci. Rep.* **11** 523 (2021)
152. Xu X, Rice S A *Phys. Rev. E* **78** 011602 (2008)
153. Abutbul D, Podolsky D *Phys. Rev. Lett.* **128** 255501 (2022)
154. Bernard E P, Krauth W *Phys. Rev. Lett.* **107** 155704 (2011)
155. Engel M et al. *Phys. Rev. E* **87** 042134 (2013)
156. Alonso J J, Fernandez J F *Phys. Rev. E* **59** 2659 (1999)
157. Zollweg J A, Chester G V *Phys. Rev. B* **46** 11186 (1992)
158. Lee J, Strandburg K J *Phys. Rev. B* **46** 11190 (1992)
159. Weber H, Marx D *Europhys. Lett.* **27** 593 (1994)
160. Allen M P, Frenkel D, Gignac W J. *Chem. Phys.* **78** 4206 (1983)
161. Novaco A D, Shea P A *Phys. Rev. B* **26** 284 (1982)
162. Abraham F F *Phys. Rev. Lett.* **44** 463 (1980)
163. Barker J A, Hendersen D, Abraham F F *Physica A* **106** 226 (1981)
164. Toxvaerd S *Phys. Rev. Lett.* **44** 1002 (1980)
165. Broughton J Q, Gilmer G H, Weeks J D *Phys. Rev. B* **25** 4651 (1982)
166. Weber H, Marx D, Binder K *Phys. Rev. B* **51** 14636 (1995)
167. Fernandez J F, Alonso J J, Stankiewicz J *Phys. Rev. Lett.* **75** 3477 (1995)
168. Mak C H *Phys. Rev. E* **73** 065104 (2006)
169. Lee J, Kosterlitz J M *Phys. Rev. B* **43** 3265 (1991)
170. Tsiok E N et al. *Phys. Rev. E* **92** 032110 (2015)
171. Tsiok E N *Phys. Wave Phenomena* **33** 169 (2025)
172. Циок Е Н и др. *Письма в ЭЧАЯ* **22** (3) 396 (2025); Tsiok E N et al. *Phys. Part. Nucl. Lett.* **22** 505 (2025)
173. Рыжов В Н, Тареева Е Е, Фомин Ю Д, Циок Е Н *Письма в ЭЧАЯ* **22** (3) 391 (2025); Ryzhov V N, Tareyeva E E, Fomin Yu D, Tsiok E N *Phys. Part. Nucl. Lett.* **22** 501 (2025)
174. Tsiok E N, Bobkov S A, Gaiduk E A, Tareyeva E E, Fomin Yu D, Ryzhov V N *Phys. Wave Phenomena* **32** 171 (2024)
175. Fomin Yu D, Gaiduk Eu A, Tsiok E N, Ryzhov E N *Physica A* **644** 129841 (2024)
176. Fomin Yu D, Tsiok E N, Ryzhov V N *Physica A* **527** 121401 (2019)
177. Fomin Yu D, Gaiduk E A, Tsiok E N, Ryzhov V N *Mol. Phys.* **116** 3258 (2018)
178. Tsiok E N, Gaiduk E A, Fomin Yu D, Ryzhov V N *Soft Matter.* **16** 3962 (2020)
179. Gaiduk Eu A, Fomin Yu D, Tsiok E N, Ryzhov V N *Phys. Rev. E* **106** 024602 (2022)
180. Fomin Yu D, Ryzhov V N, Gribova N V *Phys. Rev. E* **81** 061201 (2010)
181. Pàmies J C, Cacciuto A, Frenkel D *J. Chem. Phys.* **131** 044514 (2009)
182. Mandal B K, Mishra P *Mol. Phys.* **118** e1706774 (2020)
183. Miller W L, Cacciuto A *Soft Matter* **7** 7552 (2011)
184. Zu M et al. *Phys. Rev. Lett.* **117** 085702 (2016)
185. Terao T *J. Chem. Phys.* **139** 134501 (2013)
186. Tsiok E N, Fomin Yu D, Gaiduk E A, Ryzhov E A *Phys. Rev. E* **103** 062612 (2021)
187. Kryuchkov N P, Yurchenko S O, Fomin Yu D, Tsiok E N, Ryzhov V N *Soft Matter* **14** 2152 (2018)
188. Mendoza-Coto A et al. *Phys. Rev. B* **109** 064101 (2024); arXiv:2209.02802v1
189. Prestipino S, Saija F, Giaquinta P V *Phys. Rev. Lett.* **106** 235701 (2011)
190. Prestipino S, Saija F *J. Chem. Phys.* **141** 184502 (2014)
191. Roy I et al. *Phys. Rev. Lett.* **122** 047001 (2019)
192. Franz M, Teitel S *Phys. Rev. B* **51** 6551 (1995)
193. Рыжов В Н, Тареева Е Е *ЖЭТФ* **108** 2044 (1995); Ryzhov V N, Tareyeva E E *J. Exp. Theor. Phys.* **81** 1115 (1995)
194. Ganguli S C et al. *Phys. Rev. B* **93** 144503 (2016)
195. Guillaumon I et al. *Nature Phys.* **5** 651 (2009)
196. Gabay M, Kapitulnik A *Phys. Rev. Lett.* **71** 2138 (1993)
197. Altwater M A et al. *Nano Lett.* **21** 6132 (2021)
198. Roy I et al. *Phys. Rev. Lett.* **122** 047001 (2019)
199. Maccari I et al. *Phys. Rev. B* **107** 014509 (2023)
200. Correa A et al. *Commun. Phys.* **2** 31 (2019)
201. Maccari I et al. *Phys. Rev. Research* **7** 013160 (2025)
202. Garanin D A, Chudnovsky E M *Phys. Rev. B* **107** 014419 (2023)
203. Huang P et al. *Nature Nanotechnol.* **15** 761 (2020)
204. McCray A R C et al. *Nano Lett.* **22** 7804 (2022)
205. Garanin D A, Chudnovsky E M *J. Magn. Magn. Mater.* **606** 172395 (2024)
206. Mithun T et al. *Europhys. Lett.* **123** 20004 (2018)

207. Tsiok E N et al. *J. Chem. Phys.* **156** 114703 (2022)
208. Frenkel D, McTague J P *Phys. Rev. Lett.* **42** 1632 (1979)
209. Toxvaerd S *J. Chem. Phys.* **69** 4750 (1978)
210. Abraham F F *Phys. Rev. Lett.* **44** 463 (1980)
211. Phillips J M, Bruch L W, Murphy R D *J. Chem. Phys.* **75** 5097 (1981)
212. Bakker A F, Bruin C, Hilhorst H J *Phys. Rev. Lett.* **52** 449 (1984)
213. Strandburg K J, Zollweg J A, Chester G V *Phys. Rev. B* **30** 2755 (1984)
214. Hajibabaei A, Kim K S *Phys. Rev. E* **99** 022145 (2019)
215. Li Y-W, Ciamarra M P *Phys. Rev. E* **102** 062101 (2020)
216. Li Y-W, Ciamarra M P *Phys. Rev. Lett.* **124** 218002 (2020)
217. Zhang H et al. *Phys. Rev. E* **89** 062410 (2014)
218. Wierschem K, Manousakis E *Phys. Rev. B* **83** 214108 (2011)
219. Hajibabaei A, Kim K S *Phys. Rev. E* **99** 022145 (2019)
220. Khali S S, Chakraborty D, Chaudhuri D *Soft Matter* **17** 3473 (2021)
221. Leoni F, Franzese G *J. Chem. Phys.* **141** 174501 (2014)
222. Krebs Z et al. *J. Chem. Phys.* **149** 034503 (2018)
223. Tsiok E N, Fomin Yu D, Ryzhov V N *Physica A* **550** 124521 (2020)
224. Padilla L A, Ramírez-Hernández A *J. Phys. Condens. Matter* **32** 275103 (2020)
225. Cardoso D S et al. *Physica A* **566** 125628 (2021)
226. Martelli F et al. *Front. Phys.* **13** 136801 (2018)
227. Marcotte É, Stillinger F H, Torquato S *J. Chem. Phys.* **134** 164105 (2011)
228. Engel M, Trebin H-R *Phys. Rev. Lett.* **98** 225505 (2007)
229. Dotera T, Oshiro T, Zihler P *Nature* **506** 208 (2014)
230. Pattabhiraman H, Dijkstra M *J. Chem. Phys.* **146** 114901 (2017)
231. Kapfer S C, Krauth W *Phys. Rev. Lett.* **114** 035702 (2015)
232. Chui S T *Phys. Rev. B* **28** 178 (1983)
233. Strandburg K J *Phys. Rev. B* **34** 3536 (1986)
234. Рыжов В Н *ТМФ* **88** 449 (1991); Ryzhov V N *Theor. Math. Phys.* **88** 990 (1991)
235. Рыжов В Н *ЖЭТФ* **100** 1627 (1991); Ryzhov V N *Sov. Phys. JETP* **73** 899 (1991)
236. Tsiok E N, Fomin Y D, Ryzhov V N *Physica A* **490** 819 (2018)
237. Qi W, Gantapara A P, Dijkstra M *Soft Matter*. **10** 5449 (2014)
238. Qi W et al. *J. Phys. Condens. Matter* **20** 245102 (2008)
239. Binder K, Sengupta S, Nielaba P *J. Phys. Condens. Matter* **14** 2323 (2002)
240. Gaiduk E A, Fomin Yu D, Tsiok E N, Ryzhov V N *Mol. Phys.* **117** 2910 (2019)
241. Mayer J E, Wood Wm W *J. Chem. Phys.* **42** 4268 (1965)
242. Nelson D R *Phys. Rev. B* **27** 2902 (1983)
243. Sachdev S, Nelson D R *J. Phys. C* **17** 5473 (1984)
244. Дзюбенко А Б, Лозовик Ю Е *ЖЭТФ* **102** 284 (1992); Dzyubenko A B, Lozovik Yu E *Sov. Phys. JETP* **75** 149 (1992)
245. Cha M-C, Fertig H A *Phys. Rev. Lett.* **74** 4867 (1995)
246. Herrera-Velarde S, von Grünberg H H *Soft Matter* **5** 391 (2009)
247. Рыжов В Н *ТМФ* **55** 128 (1983); Ryzhov V N *Theor. Math. Phys.* **55** 399 (1983)
248. Ryzhov V N, Tareyeva E E *Phys. Rev. B* **51** 8789 (1995)
249. Ryzhov V N, Tareyeva E E *Physica A* **314** 396 (2002)
250. Помирчи Л М, Рыжов В Н, Тареева Е Е *ТМФ* **130** 119 (2002); Pomirchi L M, Ryzhov V N, Tareyeva E E *Theor. Math. Phys.* **130** 101 (2002)
251. Chumakov E S et al. *Physica A* **432** 279 (2015)
252. Ryzhov V N, Tareyeva E E *Phys. Lett. A* **75** 88 (1979)
253. Ryzhov V N, Tareyeva E E *J. Phys. C* **21** 819 (1988)
254. Ryzhov V N *J. Phys. Condens. Matter* **2** 5855 (1990)
255. Рыжов В Н, Тареева Е Е *ТМФ* **48** 416 (1981); Ryzhov V N, Tareyeva E E *Theor. Math. Phys.* **48** 835 (1992)
256. Рыжов В Н, Тареева Е Е *ТМФ* **92** 331 (1992); Ryzhov V N, Tareyeva E E *Theor. Math. Phys.* **92** 922 (1992)
257. Colot J L, Baus M *Phys. Lett. A* **119** 135 (1986)
258. Baus M, Colot J L *Phys. Rev. A* **36** 3912 (1987)
259. Hansen J P, McDonald I R *Theory of Simple Liquids* (London: Academic Press, 1986)
260. Рыжов В Н, Тареева Е Е, Фомин Ю Д *ТМФ* **167** 284 (2011); Ryzhov V N, Tareyeva E E, Fomin Yu D *Theor. Math. Phys.* **167** 645 (2011)
261. Brazhkin V V, Fomin Yu D, Ryzhov V N, Tareyeva E E, Tsiok E N *Phys. Rev. E* **89** 042136 (2014)
262. Ryzhov V N, Tareyeva E E *Physica C* **205** 55 (1993)
263. Fomin Yu D, Mikheyenkov A V, Tsiok E N, Ryzhov V N *J. Chem. Phys.* **163** 224503 (2025)
264. Ryzhov V N, Tareyeva E E *Phys. Lett. A* **158** 321 (1991)
265. Рыжов В Н, Тареева Е Е *ТМФ* **200** 147 (2019); Ryzhov V N, Tareyeva E E *Theor. Math. Phys.* **200** 1053 (2019)
266. Рыжов В Н, Тареева Е Е *ТМФ* **189** 464 (2016); Tareyeva E E, Ryzhov V N *Theor. Math. Phys.* **189** 1806 (2016)
267. Ryzhov V N, Tareyeva E E *Phys. Lett. A* **378** 3567 (2014)
268. Рыжов В Н и др. *ТМФ* **191** 424 (2017); Ryzhov V N et al. *Theor. Math. Phys.* **191** 842 (2017)
269. Brinkman W F, Fisher D S, Moncton D E *Science* **217** 693 (1982)
270. Grampel W, Podolsky D, arXiv:2507.16418

Physics of phase transitions in two dimensions: Berezinskii–Kosterlitz–Thouless and beyond

V.N. Ryzhov^(a), V.V. Brazhkin^(b), E.E. Tareyeva^(c), Yu.D. Fomin^(d), E.N. Tsiok^(e)

Vereshchagin Institute for High Pressure Physics, Russian Academy of Sciences,

Kaluzhskoe shosse 14, 108840 Troitsk, Moscow, Russian Federation

E-mail: ^(a)ryzhov@hppi.troitsk.ru, ^(b)brazhkin@hppi.troitsk.ru, ^(c)etare@ms2.inr.ac.ru,

^(d)fomin314@mail.ru, ^(e)elena.tsiok@gmail.com

This review is based on the authors' report at the Scientific Session of the Physical Sciences Division of the Russian Academy of Sciences (RAS). The review discusses the Berezinskii–Kosterlitz–Thouless (BKT) transition in two-dimensional systems with continuous symmetry, including the transition in two-dimensional magnetic systems (X – Y -model), the transition to the superfluid state in ^4He thin films, and the superconducting transition in thin films. Scenarios of two-dimensional melting in various systems are considered, including soft matter, vortex lattices in superconducting films, and skyrmion lattices. Particular attention is paid to deviations from the standard BKT scenario for various systems depending on the parameters characterizing the system: the type of potential, which is especially important for two-dimensional melting, and the energy of the core of a topological defect.

Keywords: two-dimensional systems, Berezinskii–Kosterlitz–Thouless transition, superfluid films, superconducting films, X – Y -model, two-dimensional crystals, topological defects, vortices, dislocations, disclinations, hexatic phase, two-dimensional melting, Berezinskii–Kosterlitz–Thouless–Halperin–Nelson–Young theory, first order transition, Bernard–Krauth scenario

PACS numbers: 61.20.Gy, 61.20.Ne, 64.60.Kw

Bibliography — 270 references

Received 18 July 2025

Uspekhi Fizicheskikh Nauk **196** (5) 537–561 (2026)

Physics–Uspekhi **69** (5) (2026)

DOI: <https://doi.org/10.3367/UFNr.2025.04.040000>

DOI: <https://doi.org/10.3367/UFNe.2025.04.040000>