МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И КОМПЬЮТЕРНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ТОПОЛОГИЧЕСКИХ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ В ДВУМЕРНЫХ И ТРЕХМЕРНЫХ ДИСКРЕТНЫХ СИСТЕМАХ. ПОИСК СИГНАЛОВ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ ПЕРВОГО И ВТОРОГО РОДА

Никонов Э. Г.

Осенняя Школа по информационным технологиям ОИЯИ

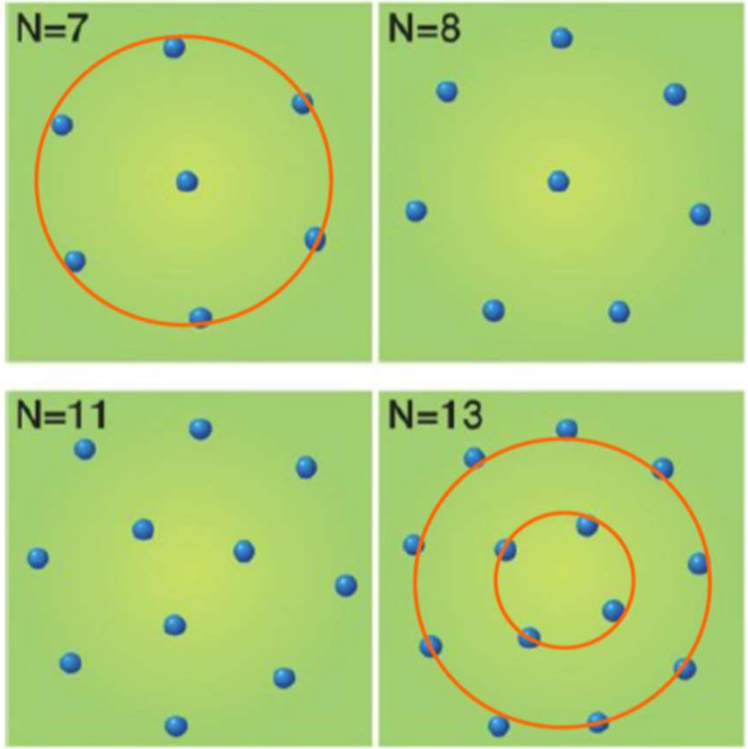
17 октября 2023 года

Мотивация

Проблема распределения одноименно-заряженных частиц в планарных системах является актуальной на протяжении многих десятилетий. В частности, данная проблема возникает при анализе поведения квантовых вихрей в Бозе конденсате; электронов в квантовых точках; коллоидных систем, в которых коллоидные частицы самоорганизуются на границе раздела двух различных жидкостей.

Физическая проблема

Исследование эволюции равновесных конфигураций конечного числа одноименно заряженных частиц в планарных системах с круговой симметрией при увеличении числа частиц. Поиск глобального минимума энергии равновесной конфигурации.



Дж. Дж. Томсон открыл, что для числа частиц $n \leq 10$ устойчивые конфигурации электронов, погруженных в поле кругового параболического потенциала, представляют собой систему концентрических колец (оболочек).
J.J. Thomson, Philos. Mag. 7, 237 (1904).

Математическая постановка задачи

$$H = \sum_{i=1}^{N} V(r_i) + \alpha \sum_{i<j}^{N} \frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}$$

$$r_i = |\mathbf{r}_i|, \qquad \alpha = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\varepsilon_r}$$

$$V(r) = \begin{cases} 0, & r < R \\ \infty, & r \geq R \end{cases}$$

$1 < N \leq 1000$ – число частиц

$\xrightarrow{\text{АВ}}$

$\xrightarrow{\text{МД}}$

$\xrightarrow{\text{МК}}$

$\xrightarrow{\text{МГО}}$

n_i – распределение частиц в равновесном состоянии

E_{GS} – энергия равновесного состояния

АВ	–	Аналитические вычисления
МД	–	Методы молекулярной динамики.
МК	–	Методы Монте-Карло.
МГО	–	Методы глобальной оптимизации.

Эволюция подходов к решению задачи

Вычисления координат частиц и энергии равновесного состояния на основе модели Томсона.

Численные методы: методы частиц (метод молекулярной динамики, методы Монте-Карло), методы минимизации функционалов (метод сопряженных градиентов, метод наискорейшего спуска) и другие.

Вычисления с использованием модели устойчивых конфигураций, учитывающей взаимодействие между оболочками заряженных частиц.

Вычисления координат частиц и энергии равновесной конфигурации с использованием полученных авторами аналитических зависимостей распределения частиц и энергии равновесной конфигурации от полного числа частиц в системе.

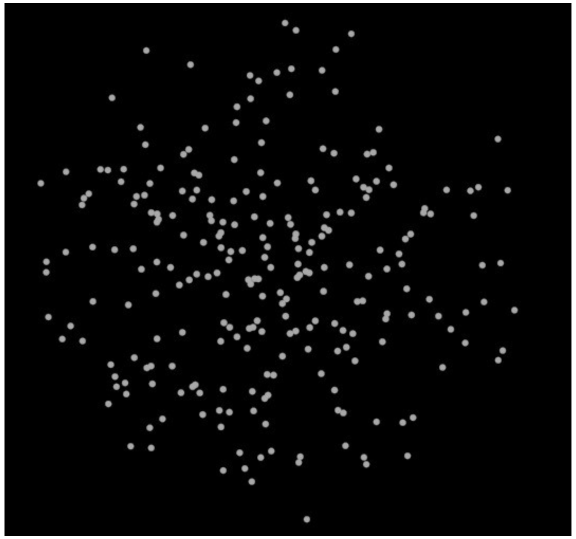
Модель Томсона

$$E_n(r) = \frac{\alpha}{2r}\sum_{i=1}^{n-1}\sum_{j=i+1}^{n}\frac{1}{\sin\frac{\pi}{n}(|i-j|)} = \frac{\alpha n S_n}{4r},$$

$$S_n = \sum_{k=1}^{n-1}\frac{1}{\sin\frac{\pi}{n}k}.$$

$E_n(r)$ - кулоновская энергия n одинаково заряженных частиц с зарядом e, равномерно распределенных по окружности радиуса r.
$\alpha = e^2/4\pi\varepsilon_0\varepsilon_r$ – величина, характеризующая силу взаимодействия зарядов в среде.
Без потери общности в дальнейшем в качестве заряженных частиц рассматриваются электроны с зарядом e.

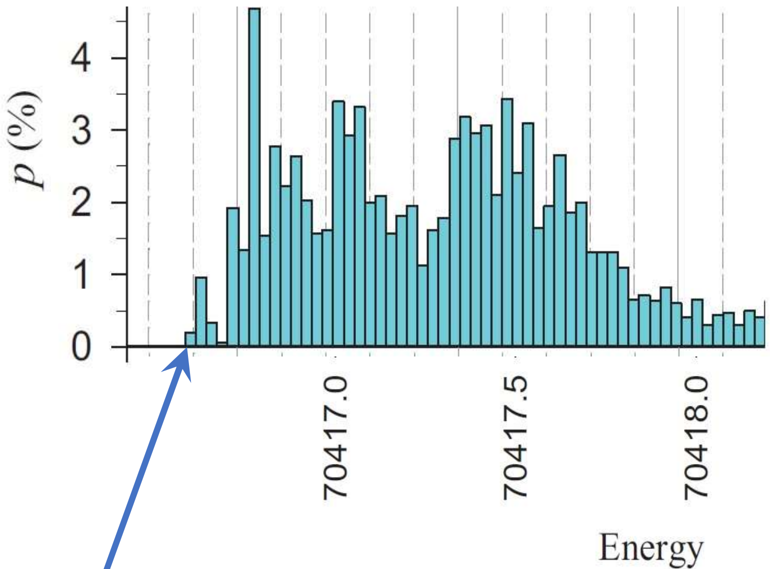
Традиционный подход к численному решению методом молекулярной динамики



E_{tot}

МД

$\sim 10^3 \div 10^4$ runs;
run $\sim 10^7$iterations;
$N \sim 10^2$



$E_{GS} = min\ E_{tot}$

Nazmitdinov R. G., Puente A., Cerkaski M. and Pons M.// Phys. Rev. E 95, 2017, 042603.

Модель устойчивых конфигураций*

$$\mathcal{F}_i = 0, \qquad i = 2, \dots, p.$$

$$\mathcal{F}_i = r_i^2 \sum_{j=i+1}^{p} \frac{n_j \mathrm{E}\left[\left(r_j/r_i\right)^2\right]}{r_j^2 - r_i^2} - \frac{\pi}{8} \sum_{k=1}^{n_i - 1} \frac{1}{\sin \frac{\pi}{n_i} k} + r_i \sum_{j=1}^{i-1} n_j \left(\frac{r_j \mathrm{E}\left[\left(r_i/r_j\right)^2\right]}{r_j^2 - r_i^2} - \frac{\mathrm{K}\left[\left(r_i/r_j\right)^2\right]}{r_j} \right)$$

r_i — значение $i-$го оптимального радиуса для заданной устойчивой конфигурации заряженных частиц.

n_i — количество частиц на $i-$той оболочке.

*Nazmitdinov R. G., Puente A., Cerkaski M. and Pons M.// Phys. Rev. E 95, 2017, 042603.

Схема вычислений с использованием модели устойчивых конфигураций

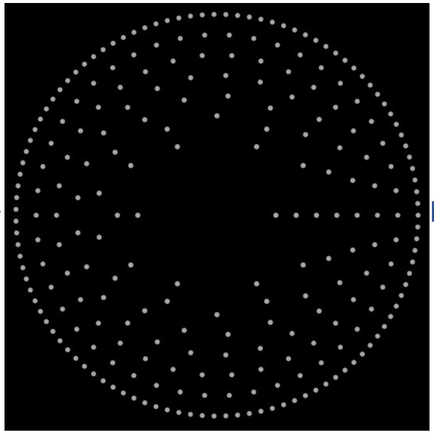
Модель устойчивых конфигураций с учетом взаимодействия между кольцами

$n_i = F_{p-i+1}(\mathrm{p}),$

$i = 1, p-2$

Начальная конфигурация

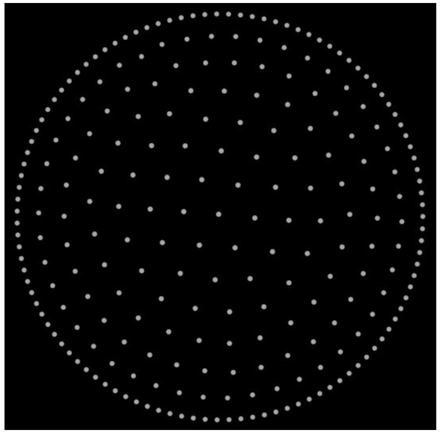
p – число колец,
n_i – число частиц для i – го кольца



E_{tot}

МД

5-10 runs;
run $\sim 10^3$ iterations;
$N_{it} \sim 10^3 \ll 10^{7 \div 8}$!!!



E_{GS}

Nazmitdinov R. G., Puente A., Cerkaski M. and Pons M.// Phys. Rev. E 95, 2017, 042603.

Формулы для зависимости n_i и E_{GS} от N

$$N(p) = 4.1988 + 7.27 \cdot p^{1.66} + 0.48 \cdot p^{2.48}$$

$$n_i(N) = a_i N^{\frac{2}{3}} - b_i$$

i	1	2	3	4	5	6
a_i	2.7948	1.3439	1.1323	1.0127	0.9482	0.8517
b_i	3.9444	7.2999	10.845	14.850	19.128	21.732

$$E_{GS}(N) = \frac{\pi}{4} N^2 - \frac{\pi}{2} \cdot N^{\frac{3}{2}} + 1.1701 \cdot N$$

Сравнение аналитических расчетов E_{GS} и методом МД для $N = 482$

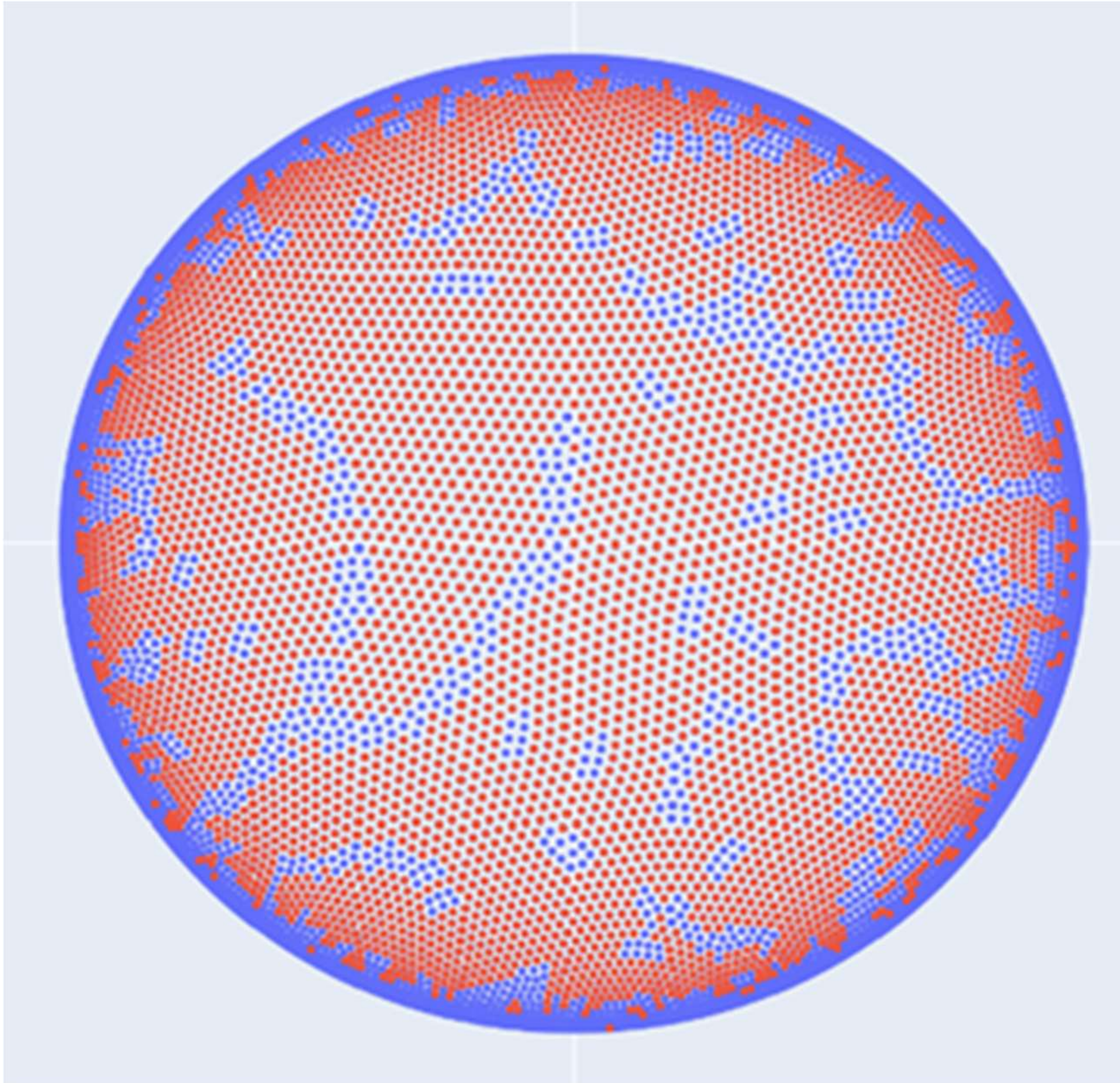
Метод	E_{GS}
МД	166408.5903
(1)	**166408.5**572
(2)	**1**59916.3296

$$E_{GS}(N) = \frac{\pi}{4} \cdot N^2 - \frac{\pi}{2} \cdot N^{\frac{3}{2}} + 1.1701 \cdot N \quad (1)$$

$$E_{GS}(N) = \left(N^2 + 9.9 \cdot N^{\frac{3}{2}} - 785.8898 \cdot \sqrt{N}\right)/2 \quad (2)$$

МД – значение полученное с использованием метода молекулярной динамики
(1) – формула, полученная авторами
(2) – Shota Ono, Phys. Rev. B , т. 104, с. 094105, 2021.

Данный подход позволяет за разумное время производить расчеты для моделирования эволюции описанной системы, состоящей из нескольких тысяч заряженных частиц. Например, для достижения основного состояния системы с минимумом энергии для 8000 частиц методом молекулярной динамики с использованием технологии CUDA потребовалась 841 секунда на компьютерной системе, состоящей из процессора Intel(R) Xeon(R) Gold 6148 CPU @ 2.40GHz и графических процессоров Tesla v100-sxm2-32gb.



Цель исследования

Цель – исследование фазовых характеристик, поиск параметра порядка и сигналов фазового перехода типа «гексагональная решетка – гексатик-фаза» в зависимости от N при $T = 0$.

- Конечное число частиц N.
- Круговая граница.
- Потенциал – «твердая стенка».
- Множество метастабильных состояний.

Влияние границы существенно меняет поведение системы и природу фазового перехода от гексагональной решетки к гексатической фазе и далее к изотропному «квазижидкому состоянию» в отличие от бесконечных систем.

ФИЗИЧЕСКАЯ ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Дана система из N одноименно заряженных частиц с кулоновским взаимодействием в двумерном ограничивающем потенциале радиуса R. Гамильтониан такой системы записывается следующим образом (1).

$$H = \sum_{i=1}^{N} V(r_i) + \alpha \sum_{\substack{i,j=1 \\ i<j}}^{N} \frac{1}{|\vec{r_i} - \vec{r_j}|} + \sum_{i=1}^{N} T_i \,,$$

где $r_i = |\vec{r_i}|$ – это расстояние до центра области, ограниченной потенциалом, $\alpha = e^2/4\pi\varepsilon_0\varepsilon_r$ – величина, характеризующая силу взаимодействия зарядов в среде, T_i – кинетическая энергия частицы. Ограничивающий потенциал $V(r)$ определяется следующим образом.

$$V(r) = \begin{cases} 0, & r < R \\ \infty, & r \geq R. \end{cases}$$

ФИЗИЧЕСКАЯ ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Для того, чтобы избежать большого числа метастабильных состояний (локальных минимумов), система рассматривается при близких к нулю температурах, при которых потенциальная энергия доминирует над кинетической. Вследствие чего можно переписать функцию полной энергии системы следующим образом:

$$H = \sum_{i=1}^{N} V(r_i) + \alpha \sum_{\substack{i,j=1 \\ i<j}}^{N} \frac{1}{|\vec{r_i} - \vec{r_j}|} \qquad (3)$$

В качестве основных инструментов для исследовании природы фазовых переходов используется анализ поведения ориентационной корреляционной функции с использованием ориентационного параметра порядка, как функции числа частиц.

ТОПОЛОГИЧЕСКИЙ ФАЗОВЫЙ ПЕРЕХОД

В соответствии с теорией Березинского – Костерлица – Таулеса – Хальперина – Нельсона – Янга (БКТХНЯ) , фазовый переход «гексагональная решетка – гексатик-фаза» в описанных выше двумерных системах является топологическим фазовым переходом, т.е. переходом между двумя топологическими фазами. Топологическая фаза материи — состояние двумерной системы из большого числа сильновзаимодействующих частиц (конденсированной среды), характеризуемая определённым топологическим инвариантом. В рассматриваемом случае топологическим инвариантом является тип упорядоченности частиц, характеризуемый определенными группами симметрии [*].

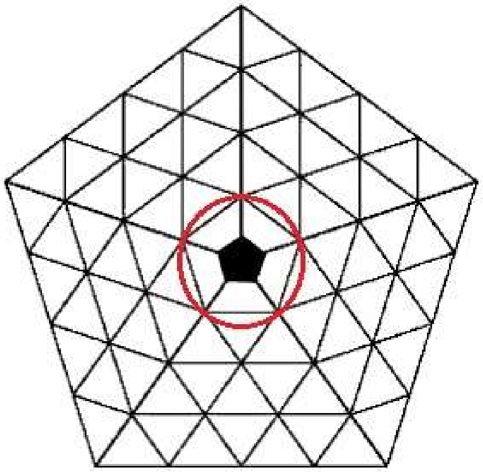
[*] *Nelson D.R.* Defects and geometry in condensed matter physics. // Cambridge University Press, Cambridge, 2002, 392 P.

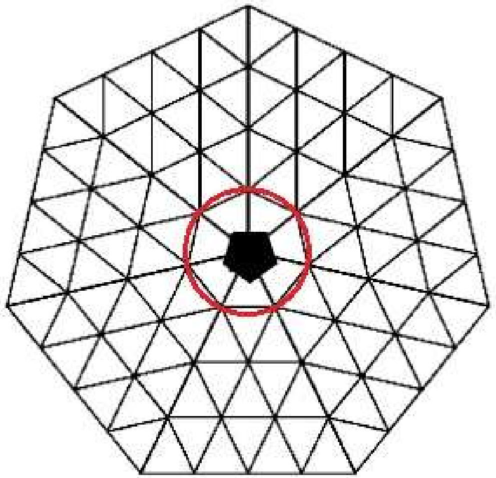
ТОПОЛОГИЧЕСКИЙ ФАЗОВЫЙ ПЕРЕХОД

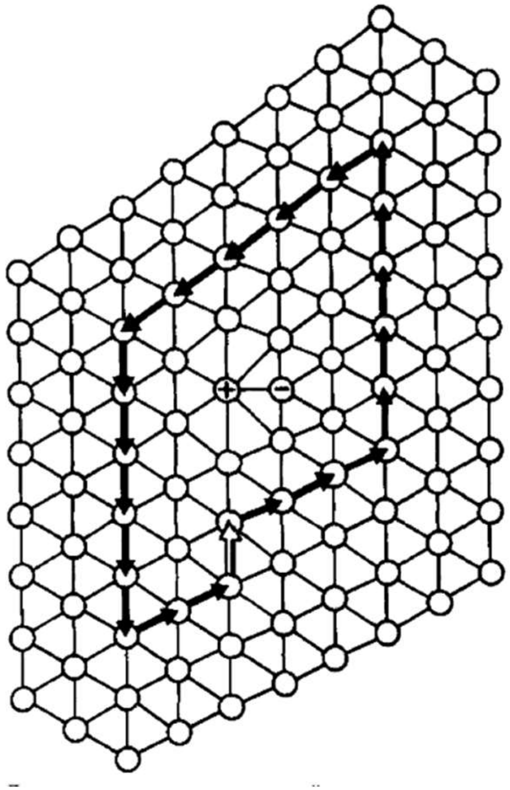
Гексагональная решетка характеризуется трансляционной и ориентационной дискретными симметриями 6-го порядка (диэдральной группой симметрии 6-го порядка). Как следствие, в гексагональной фазе реализуется так называемый дальний порядок. В гексатик-фазе трансляционная симметрия нарушается за счет топологических дефектов, тогда как ориентационная симметрия 6-го порядка может сохраняться. Поэтому в гексатик-фазе реализуется так называемый квазидальний порядок. Таким образом переход из одной фазы в другую происходит вследствие появления топологических дефектов, нарушающих трансляционную симметрию периодической гексагональной структуры.

ДЕФЕКТЫ

В соответствии с теорией Березинского – Костерлица – Таулеса – Хальперина – Нельсона – Янга (БКТХНЯ) для двумерных кристаллических решеток существует два типа топологических дефектов: **дисклинации** и **дислокации**, - которые характеризуют нарушение трансляционной и вращательной симметрий.

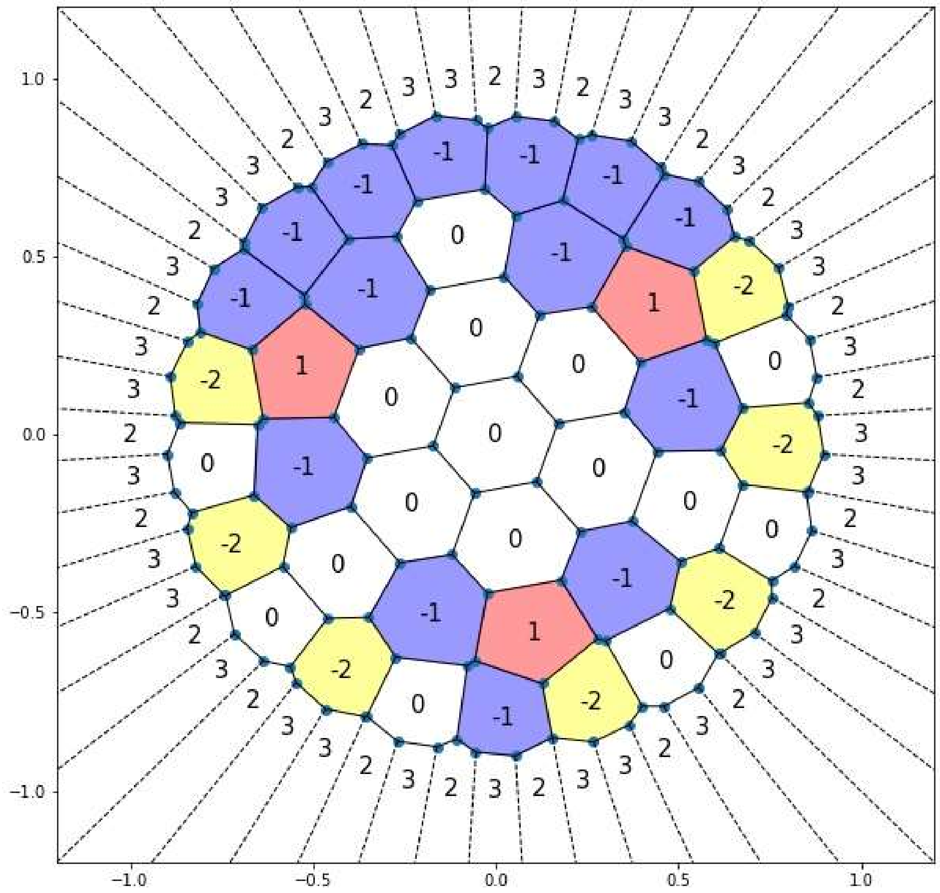






РАЗБИЕНИЕ ВОРОНОГО

Для определения координат и формы дефектов мы использовали подход, основанный на алгоритме Вороного. В основе алгоритма лежит разбиение пространства на ячейки. Каждая ячейка состоит из таких точек, которые расположены ближе всех к данной конкретной частице, чем к какой-либо другой частице из данного множества.

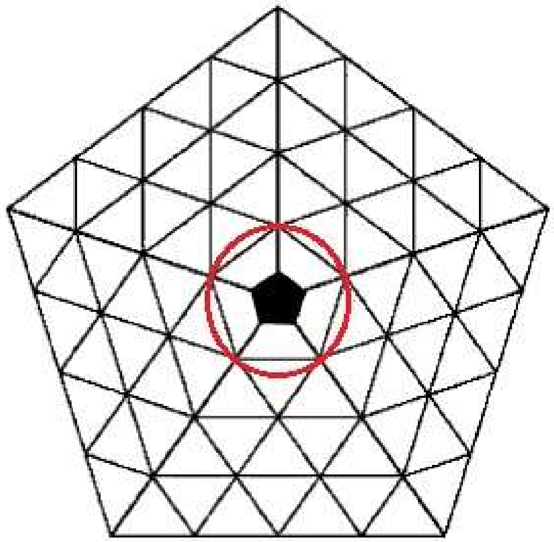


$\boldsymbol{N = 92}$

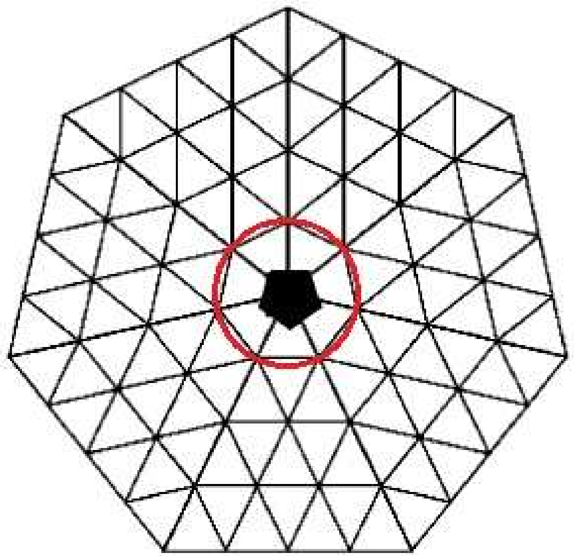
КООРДИНАЦИОННОЕ ЧИСЛО

При таком разбиении можно непосредственно наблюдать два вида дефектов: дисклинации и дислокации. При этом дисклинацией называется ориентационный дефект с координационным числом $C_d = 5$ или $C_d = 7$. Координационное число определяется числом сторон выпуклого многоугольника, описанного вокруг частицы в разбиении Вороного. В случае шестиугольника координационное число будет равно $C_d = 6$.

$$C_d = 5$$



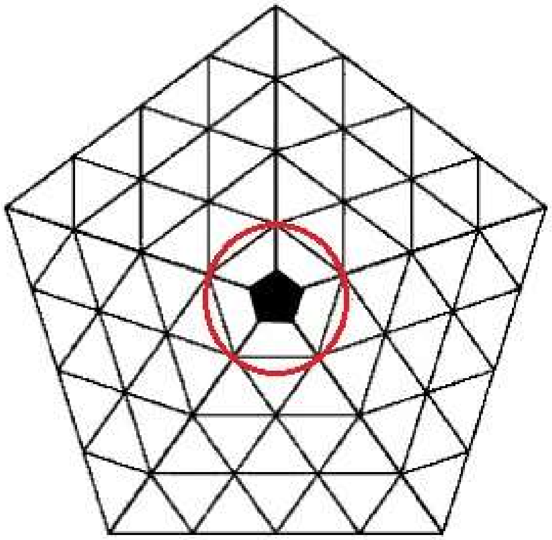
$$C_d = 7$$



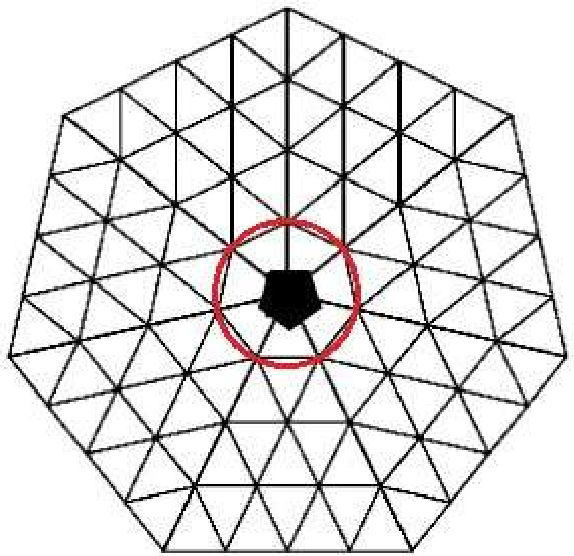
ТОПОЛОГИЧЕСКИЙ ЗАРЯД

Учитывая вышеизложенные факты и определение координационного числа, можно естественным образом ввести такую величину, как топологический заряд посредством соотношения $\boldsymbol{s = 6 - C_d}$. Таким образом, **дисклинацией** называется топологический дефект, при котором топологический заряд частицы не равен нулю.

$s = +1$

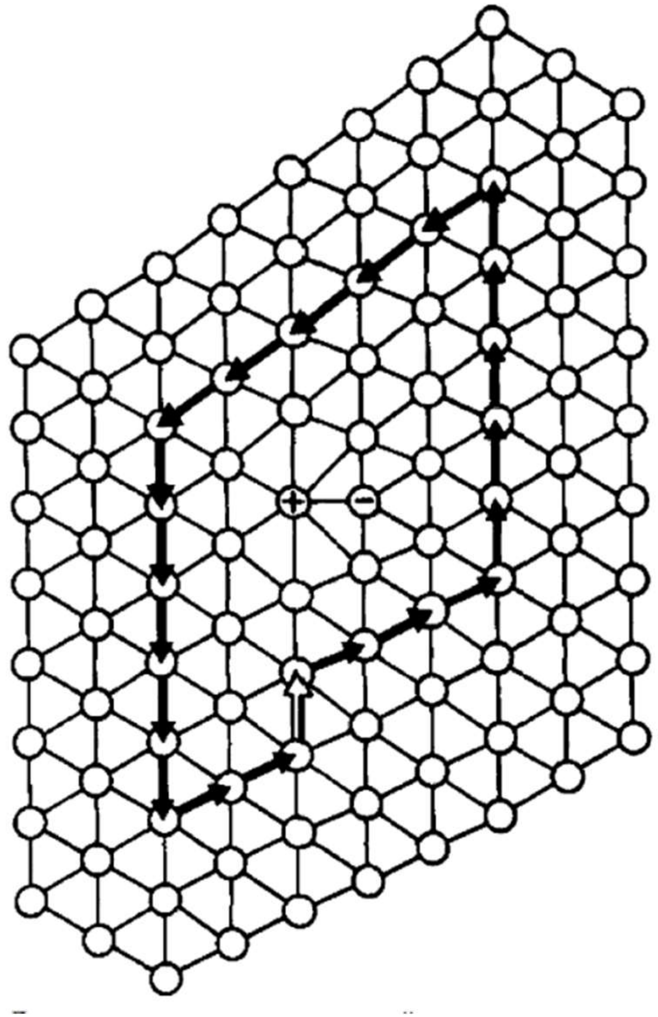


$s = -1$



ТОПОЛОГИЧЕСКИЙ ЗАРЯД

Дислокацией называется дефект, состоящий из нескольких пар дисклинаций, при этом соседние дисклинации в паре имеют равные по модулю топологические заряды с противоположными знаками. Топологический заряд узлов гексагональной решетки без дефектов в соответствии с определением равен нулю.



ТОПОЛОГИЧЕСКИЙ ЗАРЯД: ДИСКЛИНАЦИЯ

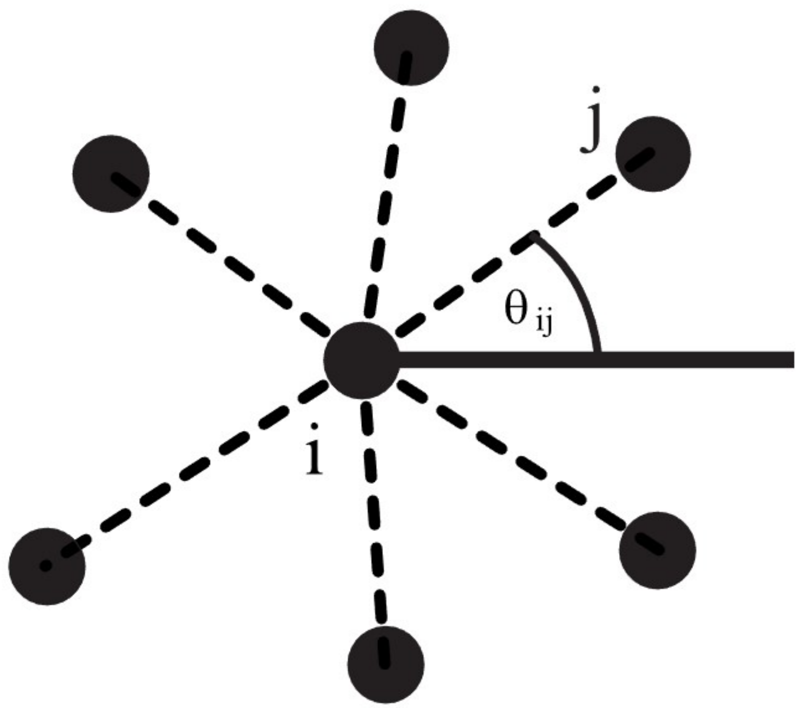
Дисклинация на гексагональной решетке

характеризуется тем, что при обходе по

замкнутому контуру, содержащему дисклинацию,

интеграл от угла поворота

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



где $\boldsymbol{u}(x,y) = \left(u_x(x,y), u_y(x,y)\right)$ – вектор смещения некоторой малой области кристалла вследствие термодинамических флуктуаций при $T \neq 0$, получает приращение кратное $2\pi/6$:

$$\oint d\vartheta(\mathbf{r}) = -\frac{2\pi}{6}s, \qquad s = \pm 1, \pm 2, \qquad ...$$

ОРИЕНТАЦИОННЫЙ ПАРАМЕТР ПОРЯДКА

Одним из возможных кандидатов на роль параметра порядка для фазового перехода «гексагональная решетка – гексатик-фаза» может служить так называемый ориентационный порядок связи [*]

$$\psi_6(r_k) = \frac{1}{N_b}\sum_{l=1}^{N_b} e^{i6\theta_{kl}}$$

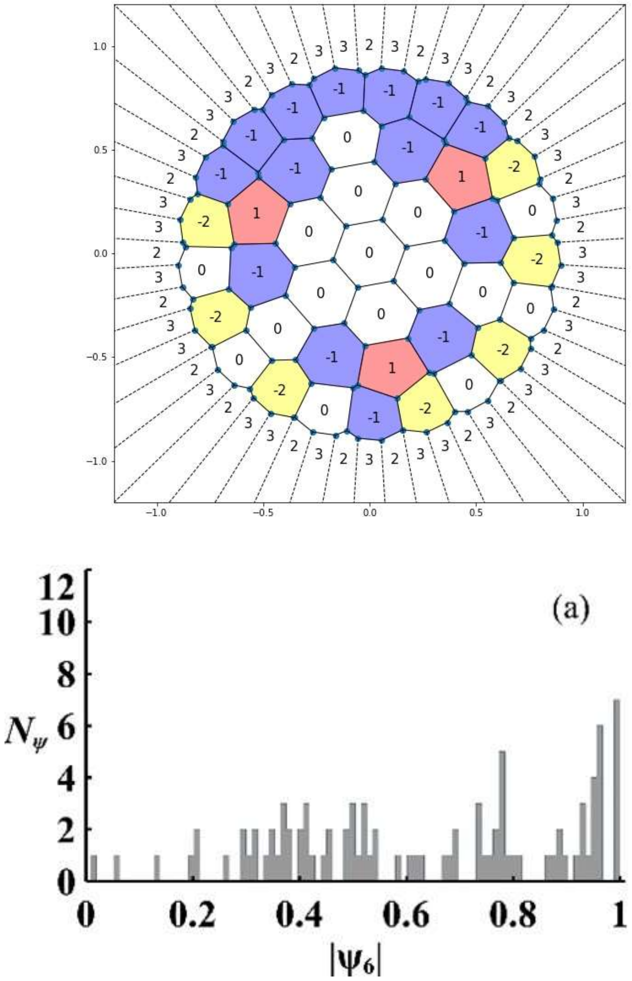
Ориентационный параметр порядка

$$\Psi_6(r_k) = 1 - \psi_6(r_k) - \varepsilon_6.$$

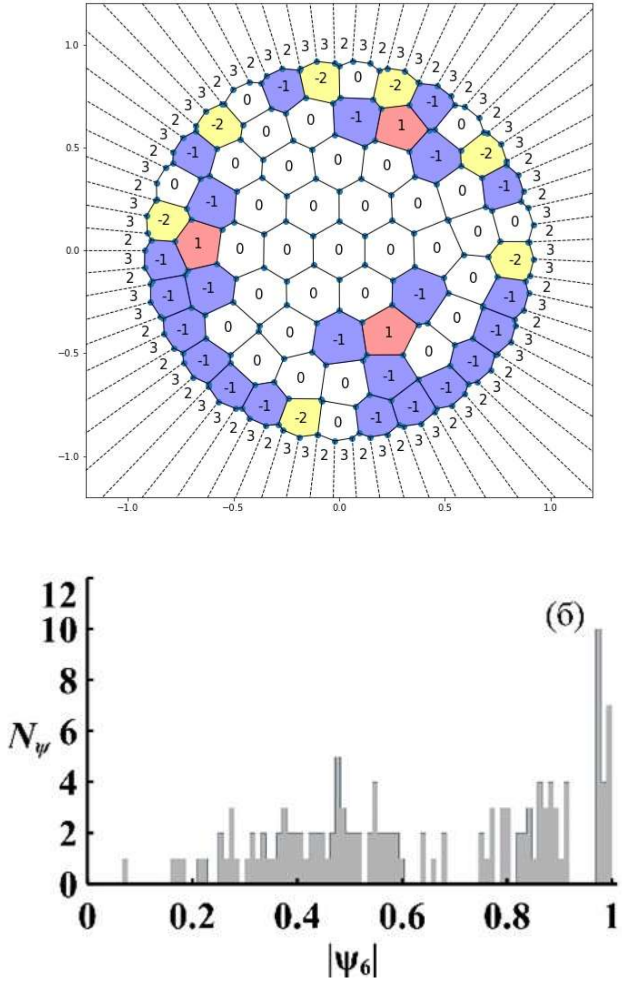
Здесь ε_6 – точность определения степени ориентационной симметрии 6–го порядка, связанный с точностью вычисления функции $\psi_6(r_k)$. В этом случае в узлах гексагональной решетки параметр порядка будет равен 0 ($\Psi_6(r_k) = 0$).

[*] *Halperin B. I., Nelson D. R.* // Phys. Rev. Lett., 1978, V. 41, P. 121.

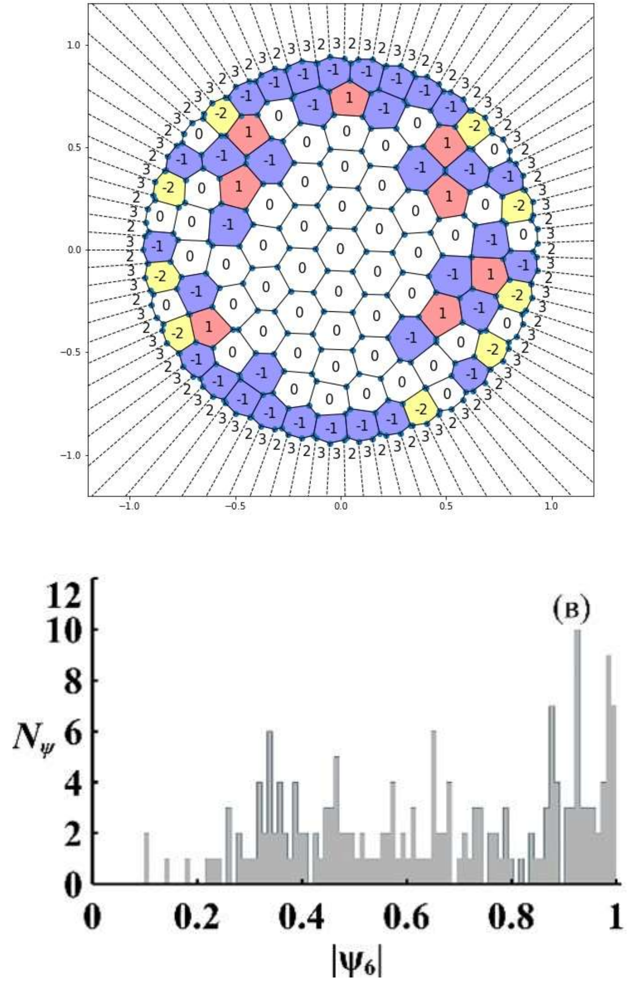
ОРИЕНТАЦИОННЫЙ ПАРАМЕТР ПОРЯДКА



$N = 92$

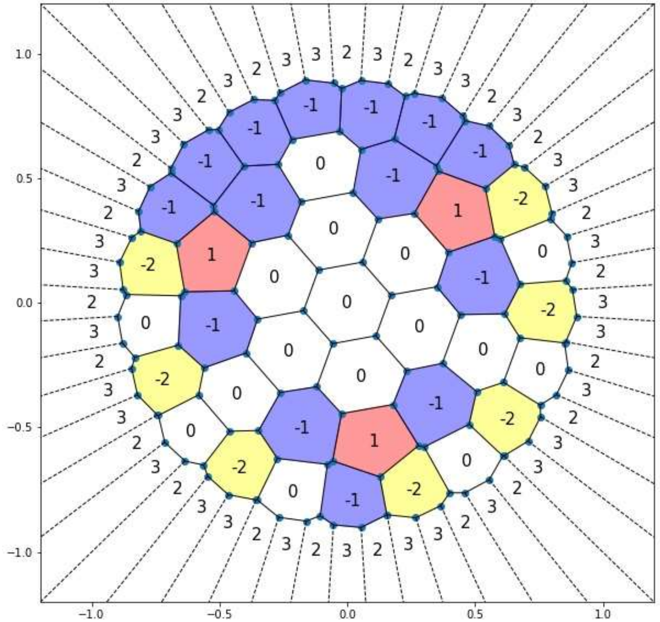


$N = 136$

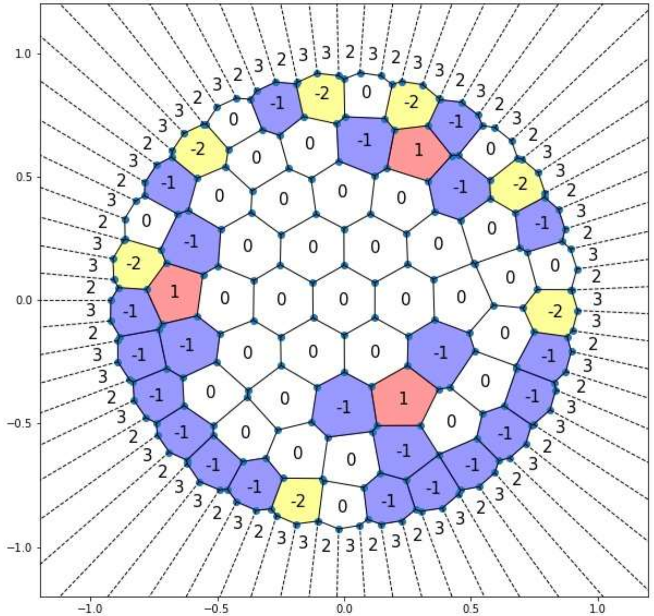


$N = 187$

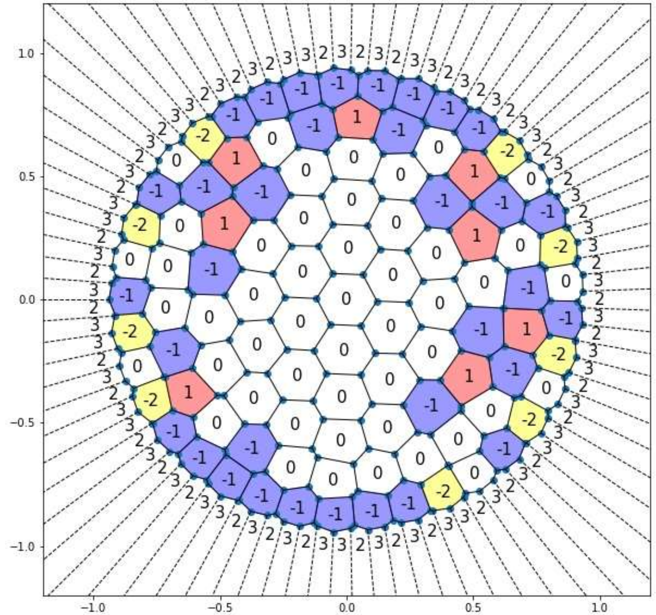
РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ТОПОЛОГИЧЕСКОГО ЗАРЯДА



$N = 92$



$N = 136$



$N = 187$

N	$s = 0$	$s = -1$	$s = 1$	$s = -2$	$s = 2$	$s = 3$
92	16	14	3	7	21	31
136	34	25	3	7	29	38
187	49	34	8	9	37	40

Qingyou Meng and Gregory M. Grason
// Physical Review E104, 034614 (2021)
($s = -1 > s = +1$ $N \uparrow$)

ОРИЕНТАЦИОННАЯ КОРРЕЛЯЦИОННАЯ ФУНКЦИЯ

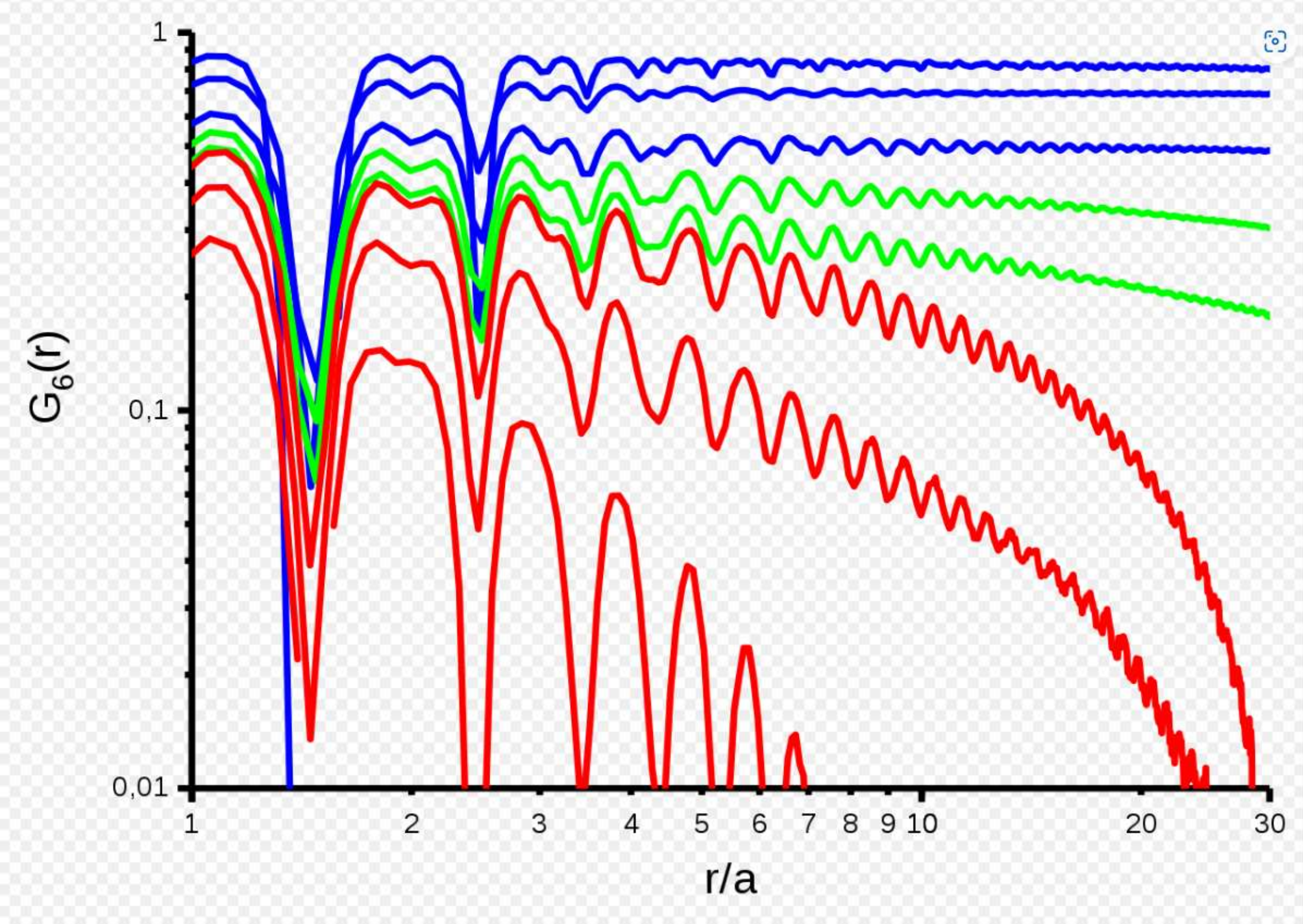
При описании фазовых переходов в двумерных системах одной из важнейших характеристик является поведение ориентационной корреляционной функции между двумя частицами i и j на расстоянии $\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$, которая определяется следующим образом.

$$G_6\left(\mathbf{r}_{ij}\right) = \langle \psi_6(\mathbf{r}_i) \cdot \psi_6^*\left(\mathbf{r}_j\right) \rangle.$$

Здесь угловые скобки обозначают среднее статистическое значение для всех пар частиц с расстоянием $\left|\mathbf{r}_{ij}\right|$.

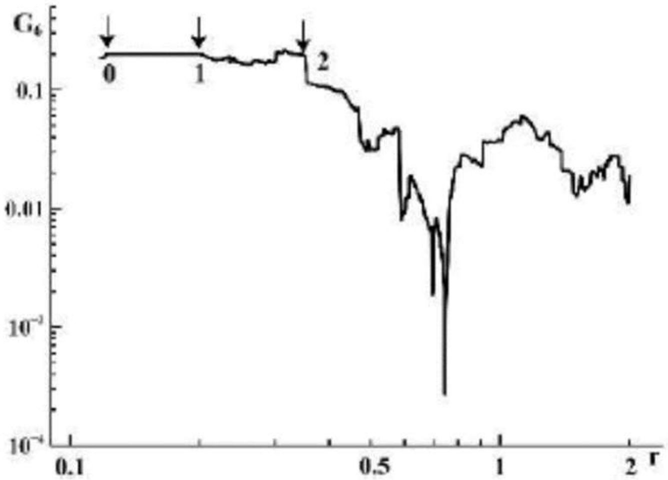
ОРИЕНТАЦИОННАЯ КОРРЕЛЯЦИОННАЯ ФУНКЦИЯ

Пример расчетов для ориентационной корреляционной функции как функции расстояния представлена в масштабе log-log для неограниченного образца. Синяя кривая – гексагональная решетка, зеленая – гексатик-фаза красная – изотропная жидкость,

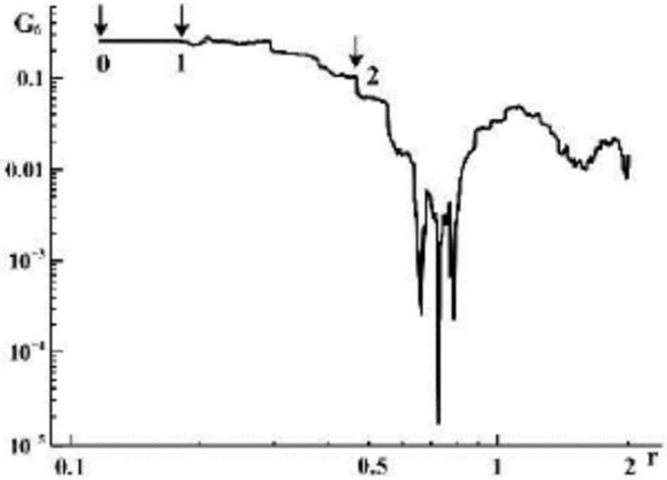


Рыжов В. Н., Тареева Е. Е., Фомин Ю. Д., Циок Е. Н. // УФН, 2017, Т. 187, № 9, С. 921

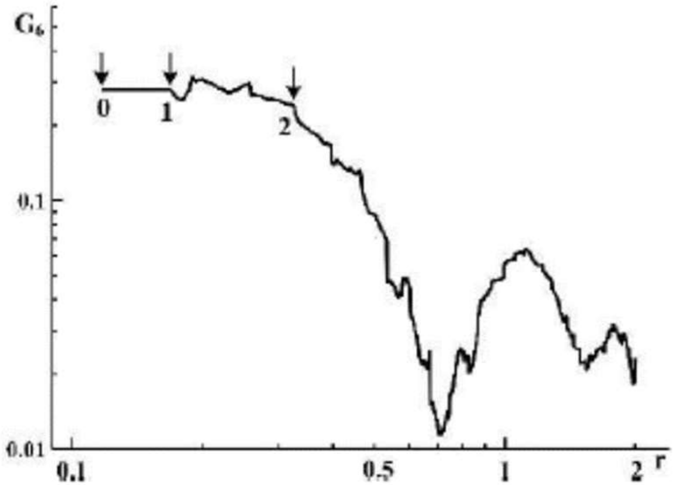
ОРИЕНТАЦИОННАЯ КОРРЕЛЯЦИОННАЯ ФУНКЦИЯ



$N = 92$



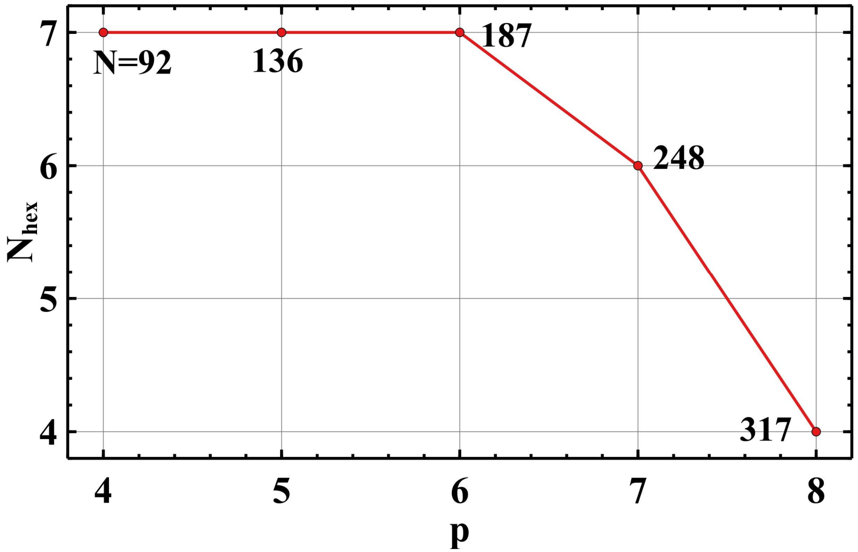
$N = 136$



$N = 187$

Ориентационная корреляционная функция $G_6(r)$ (9) для разных значений числа частиц: a) $N = 92$; b) $N = 136$; c) $N = 187$.

ДЕФОРМАЦИЯ ЦЕНТРИРОВАННОЙ ГЕКСАГОНАЛЬНОЙ РЕШЕТКИ



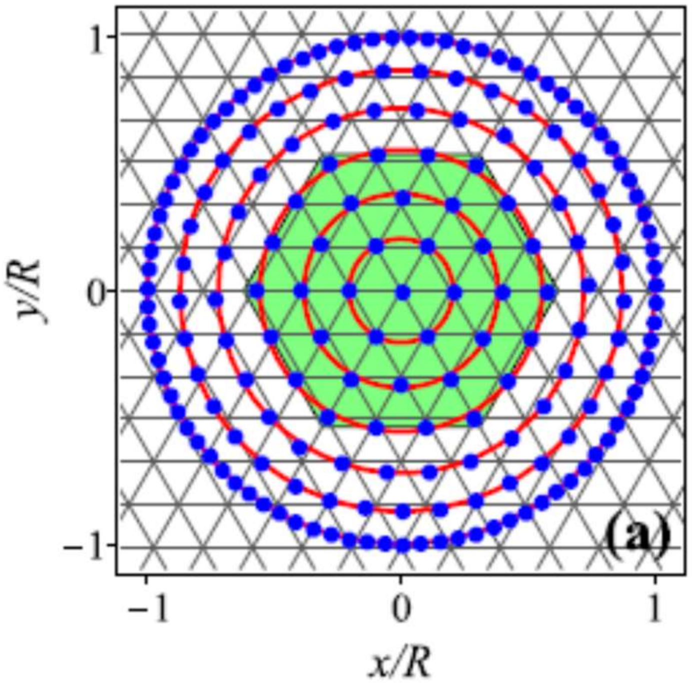
$\boldsymbol{N}$ − полное число частиц в системе.

$\boldsymbol{p}$ − количество заполненных оболочек (колец).

$\boldsymbol{N_{hex}}$ − количество правильных гексагональных ячеек.

$\boldsymbol{N_p}$ − число частиц в заполненной $\boldsymbol{p}$-той оболочке. $\boldsymbol{N_p = 6p}$.

(a) *Nazmitdinov R. G., Puente A., Cerkaski M. and Pons M.// Phys. Rev. E* 95, 2017, 042603.



Векторы решетки Браве $\vec{a}_1 = a(1,0)$, $\vec{a}_2 = a(1/2, \sqrt{3}/2)$, a − постоянная решетки. Узлы центрированной гексагональной решетки $\vec{x}_{k,l} = k\vec{a}_1 + l\vec{a}_2$. $R_{kl} = a\sqrt{k^2 + l^2 + kl}$ радиус p-той оболочки, $p = k + l$ и $0 \le l \le k$, состоящих из 6 (если $l = 0, k$) или12 частиц $l \neq 0, k$).

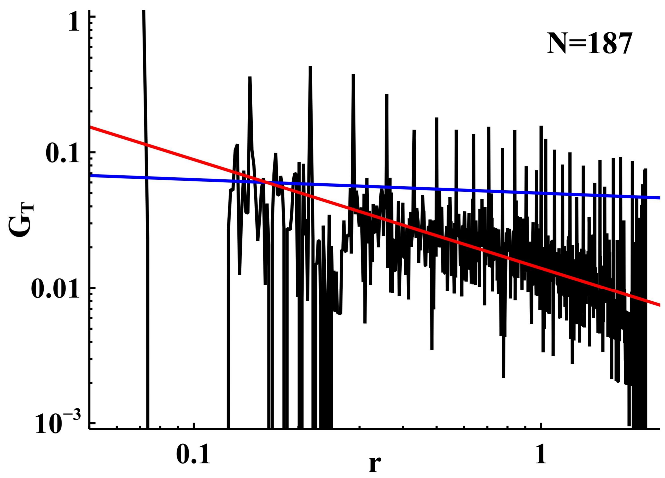
До $p = 7$ все это радиусу are упорядочены внутри между соседними оболочками. В соответствии с моделью частицы группируются в одном кольце с числом частиц $N_p = 6p$. Однако, с седьмой оболочки кольца начинают перекрываться (например, $R_{7,0} > R_{4,4}$), все больше нарушая эту последовательность вдали от центра.

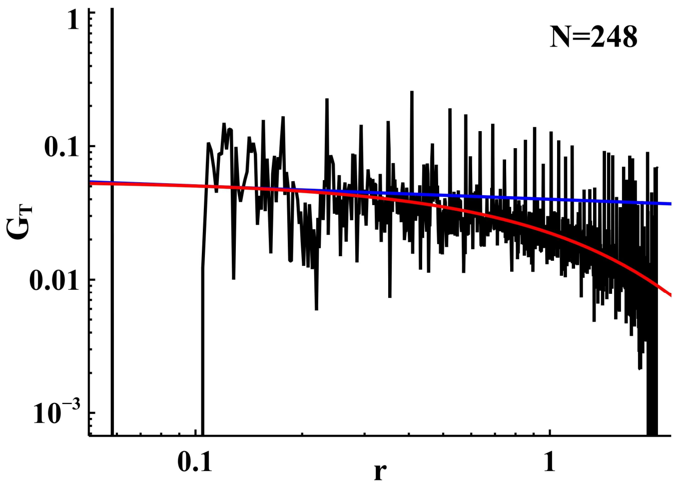
Трансляционная корреляционная функция

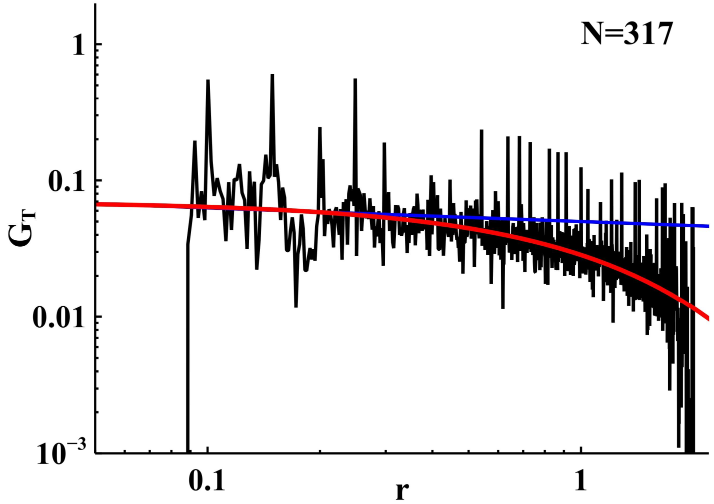
При описании фазовых переходов в двумерных системах одной из наиболее важных характеристик является трансляционная корреляционная функция, которая представляет собой вероятность обнаружения двух частиц на расстоянии r, является мерой трансляционного порядка рассматриваемой дискретной структуры и определяется следующим образом.

$$G_T(r) = \frac{1}{2\pi r N} \sum_{i=1}^{N} \sum_{j\neq i=1}^{N} \langle \delta\left(r - \left|\vec{r}_i - \vec{r}_j\right|\right) \rangle$$

НАРУШЕНИЕ ДАЛЬНЕГО ТРАНСЛЯЦИОННОГО ПОРЯДКА







$G_T(r) \propto r^{-0.8}$

$G_T(r) \propto r^{-0.1} (r \to \infty)$

$G_T(r) \propto e^{-0.9r}$

$G_T(r) \propto r^{-0.1} (r \to \infty)$

$G_T(r) \propto e^{-0.9r}$

$G_T(r) \propto r^{-0.1} (r \to \infty)$

Направления дальнейших исследований

- Определение типа и свойств фазового перехода гексагональная - гексатическая фаза – квази-жидкость.
- Зависимость фазовых переходов от типа запирающего потенциала.
- Зависимость топологических характеристик от числа частиц и типа запирающего потенциала.
- Поиск сигналов фазовых переходов.
- Численное исследование «холодного плавления» в двумерных системах.

32