



INSTITUTE FOR HIGH PRESSURE PHYSICS

Влияние конфайнмента на плавление двумерной системы с потенциалом с отрицательной кривизной

Е.Н. Циок, Ю.Д. Фомин и В.Н. Рыжов

Институт физики высоких давлений
им. Л.Ф. Верещагина РАН

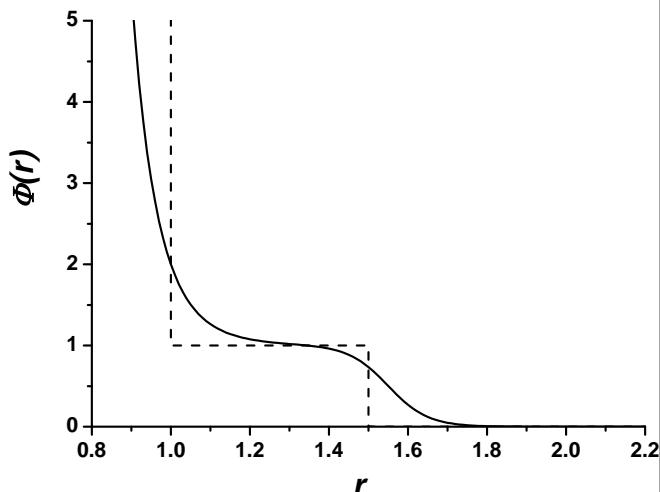
Буревестник – 2016

Smooth Repulsive Shoulder Potentials (Yu. D. Fomin, N.V. Gribova, V.N.Ryzhov, S.M. Stishov, and Daan Frenkel, J. Chem. Phys. 129, 064512 (2008); Yu.D. Fomin, V.N. Ryzhov, and E.N. Tsiok, J. Chem. Phys. 134, 044523 (2011)).

Smooth Repulsive Shoulder System

$$U(r) = \varepsilon \left(\frac{\sigma}{r} \right)^{14} + \frac{1}{2} \varepsilon (1 - \tanh(k_0[r - \sigma_1]))$$

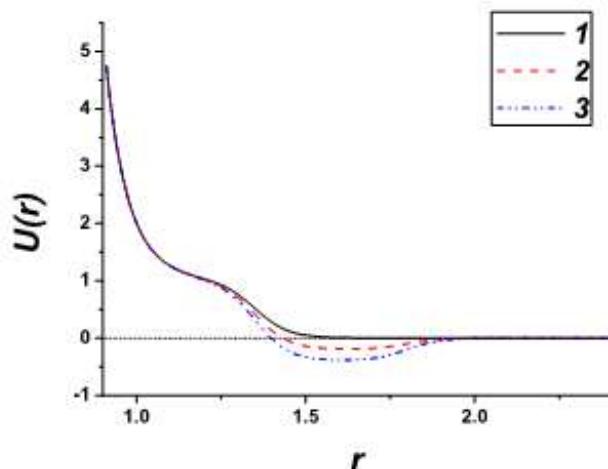
$$\sigma = 1.15, 1.35, 1.45, 1.55, 1.8$$

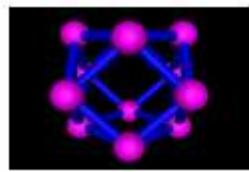


Smooth Repulsive Shoulder System With Attractive Well (SRSS-AW)

$$U(r) = \varepsilon \left(\frac{\sigma}{r} \right)^{14} + \varepsilon (\lambda_0 - \lambda_1 \tanh(k_1[r - \sigma_1]) + \lambda_2 \tanh(k_2[r - \sigma_2])).$$

number	σ_1	σ_2	λ_0	λ_1	λ_2	well depth
1	1.35	0	0.5	0.5	0	0
2	1.35	1.80	0.5	0.60	0.10	0.20
3	1.35	1.80	0.5	0.7	0.20	0.4



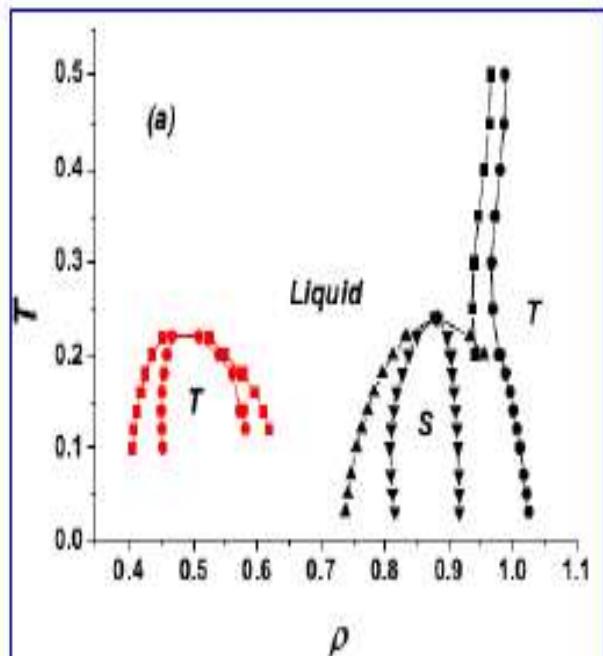
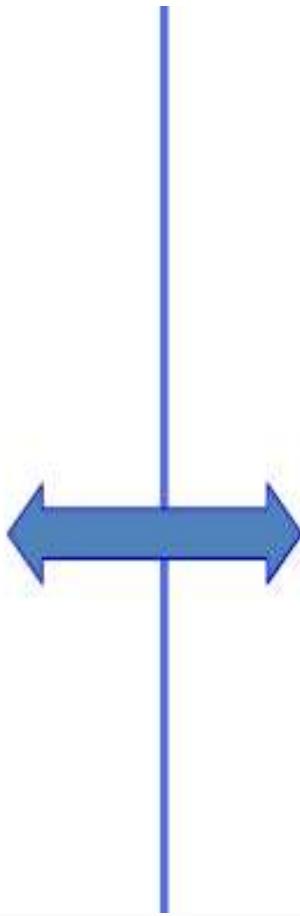
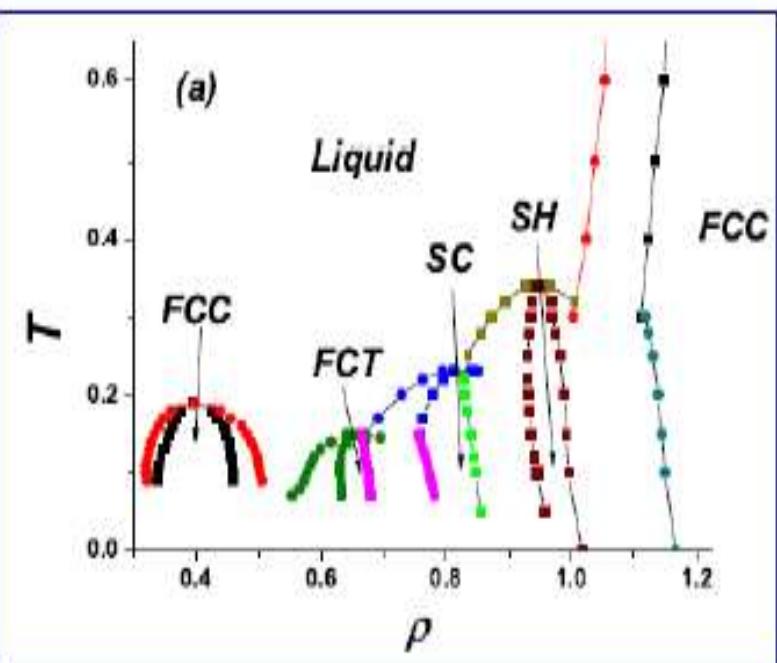


3D

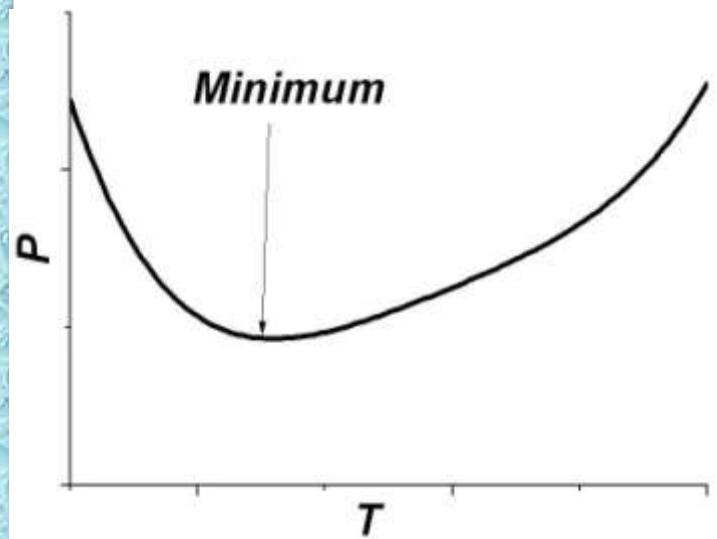
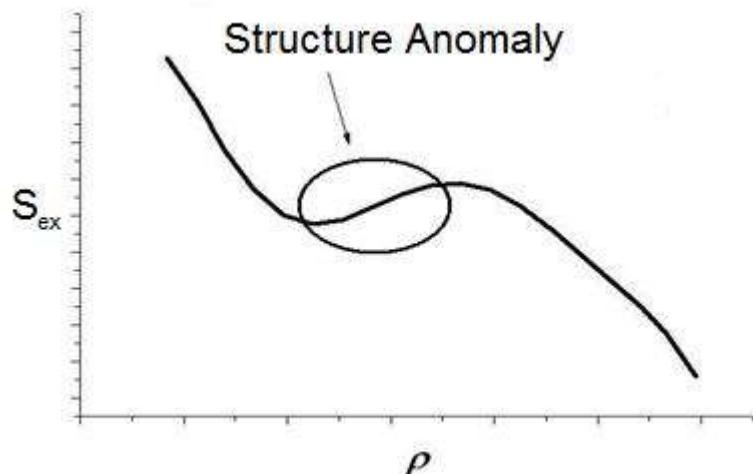
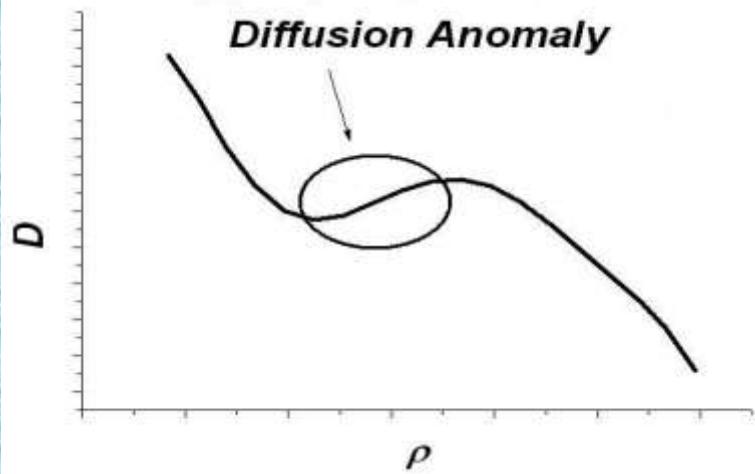


2D

$$\sigma = 1.35$$



Waterlike Anomalies



Density Anomaly

$$\left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_V = \frac{\alpha_P}{\kappa_T}$$

$$\alpha_P < 0$$

-thermal expansion coef.

$$\kappa_T > 0$$

-isothermal compressibility coef.

Модель исследуемой системы

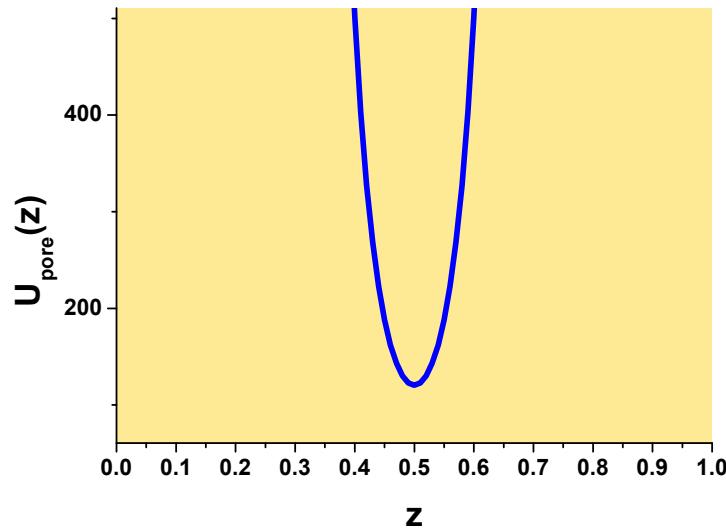
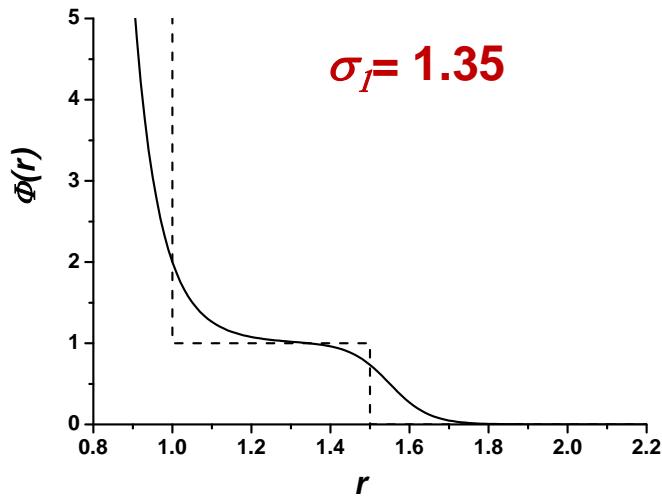
Smooth Repulsive Shoulder Potentials (Yu. D. Fomin, N.V. Gribova, V.N. Ryzhov, S.M. Stishov, and Daan Frenkel, J. Chem. Phys. 129, 064512 (2008))

Smooth Repulsive Shoulder System

$$U(r) = \varepsilon \left(\frac{\sigma}{r} \right)^{14} + \frac{1}{2} \varepsilon (1 - \tanh(k_0[r - \sigma_1]))$$

$$U_{9-3}(r) = \begin{cases} \varepsilon \left[\frac{2}{15} \left(\frac{\sigma}{z} \right)^9 - \left(\frac{\sigma}{z} \right)^3 \right], & r \leq r_c \\ 0, & r > r_c \end{cases}$$

where $r_c = 2.5\sigma$. The width of the pore is $H = 1.0\sigma$.



Метод и Система при $H \geq 1.8$

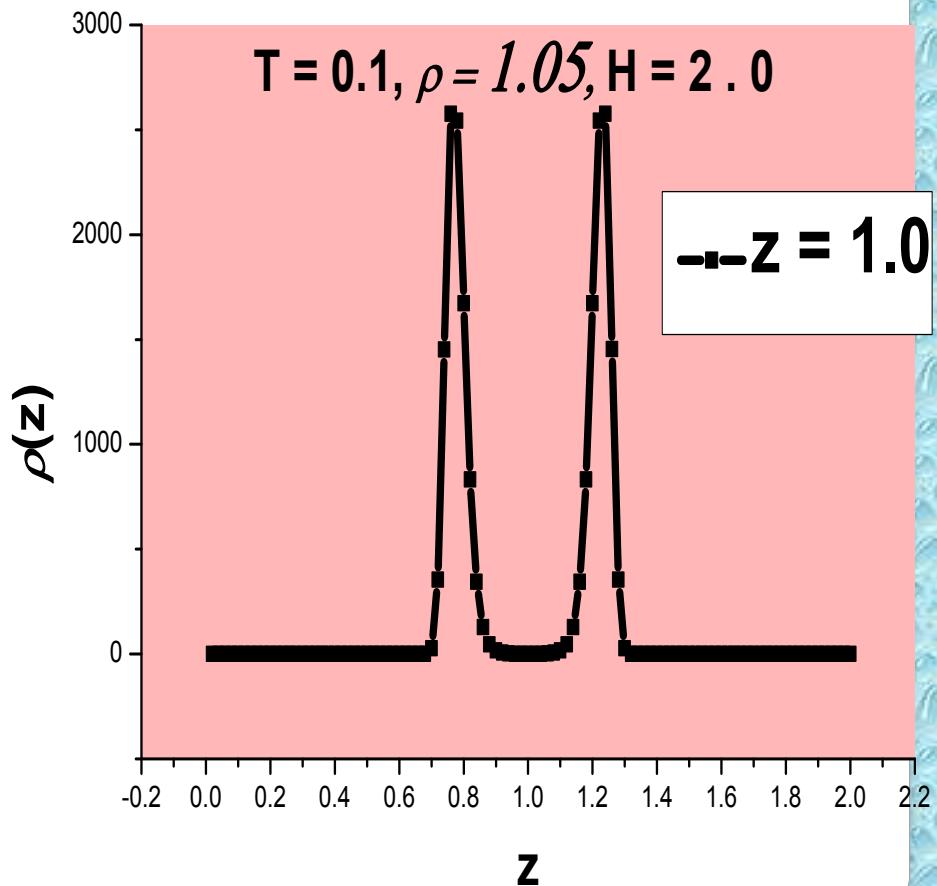
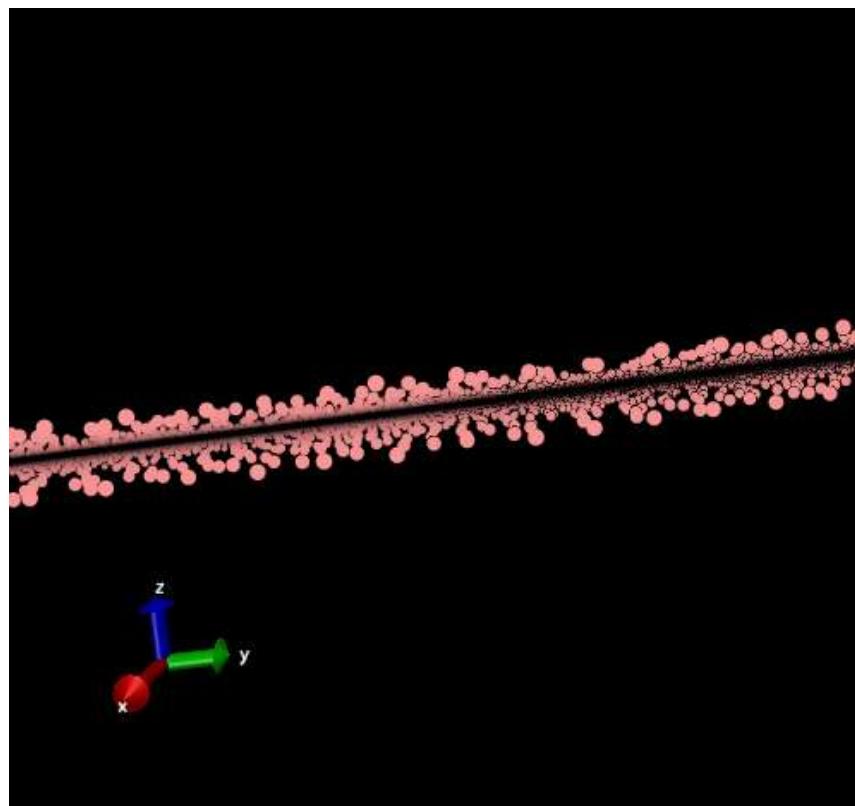
Метод молекулярной динамики (LAMMPS package)

<http://lammps.sandia.gov>

NVT - ансамбль

$N = 20000$

$N_{step} = 20\text{mln.} - 40\text{mln.}$



Метод и Система при $H < 1.8$

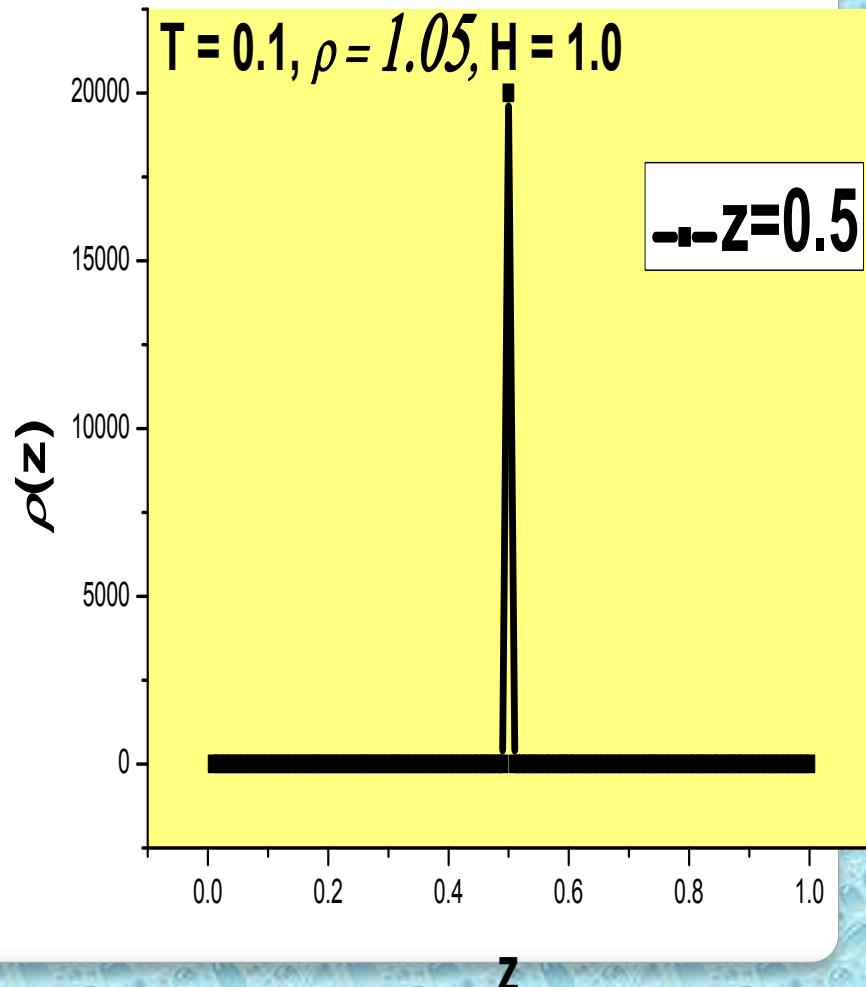
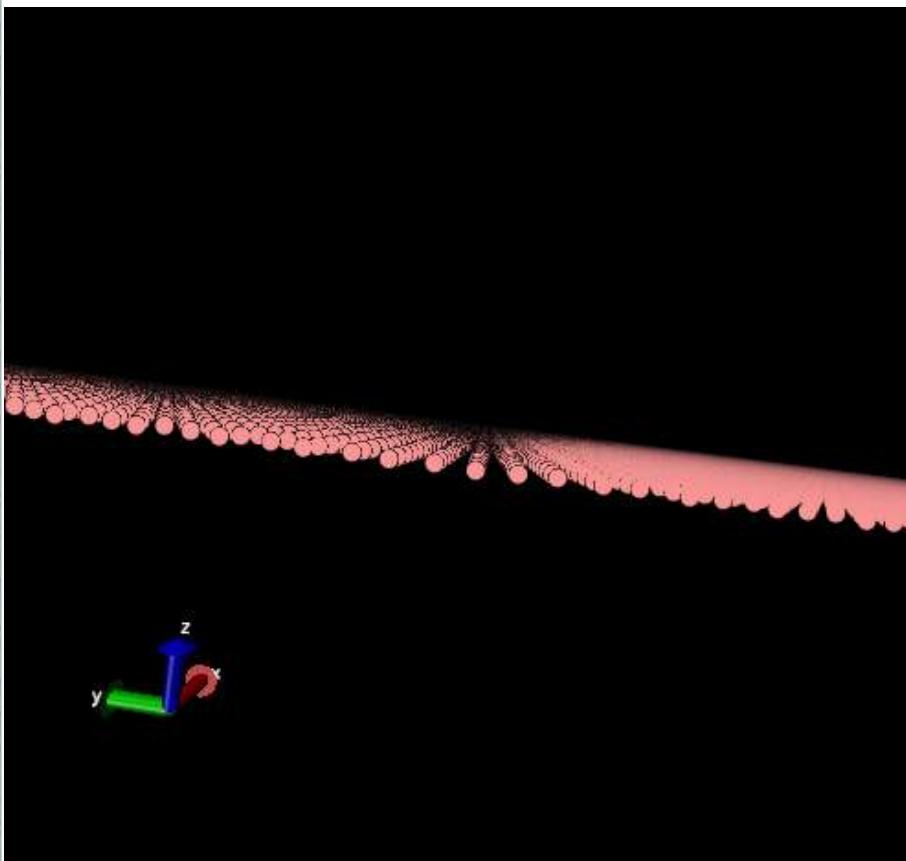
Метод молекулярной динамики (LAMMPS package)

<http://lammps.sandia.gov>

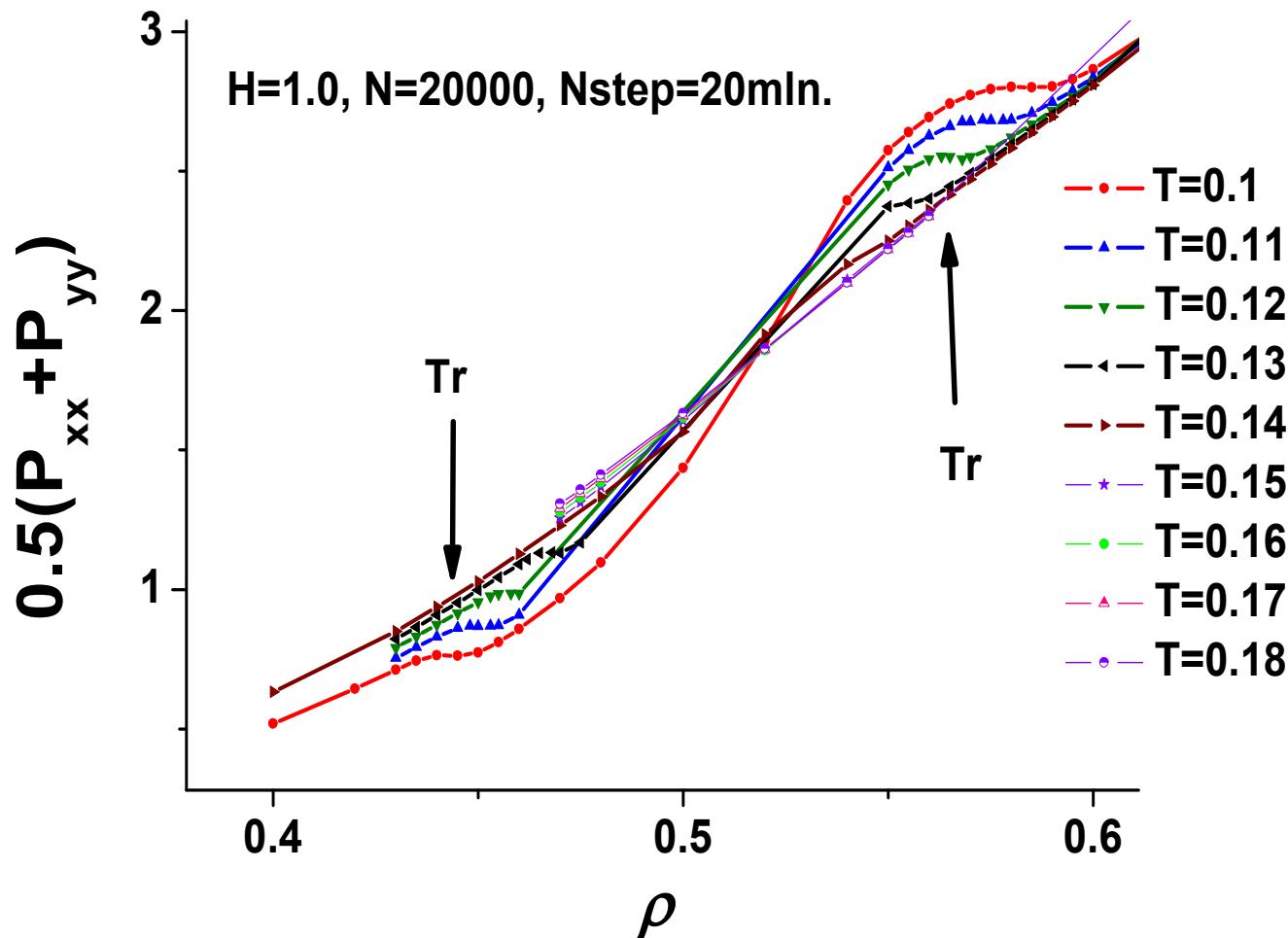
NVT - ансамбль

$N = 20000$

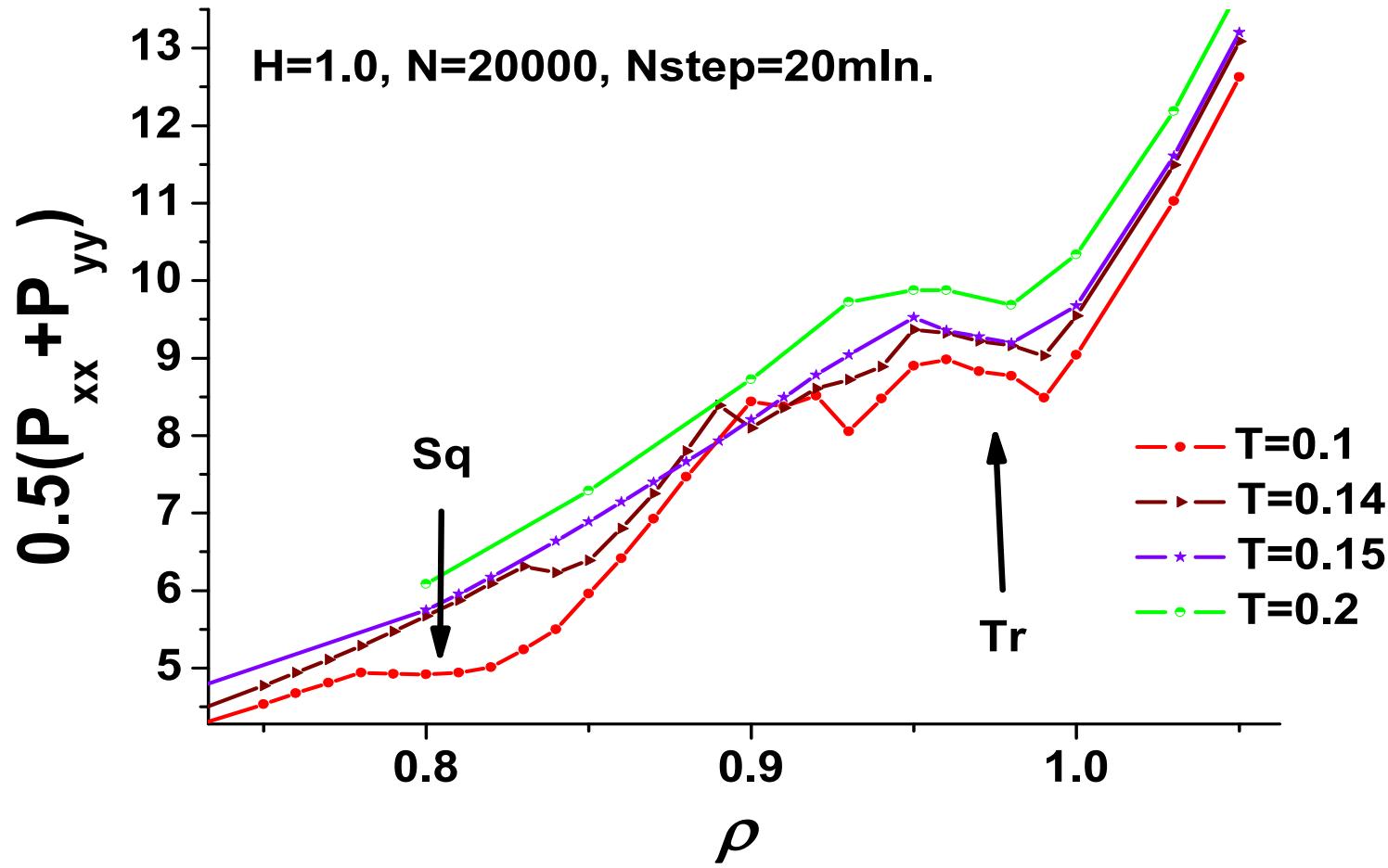
$N_{step} = 20\text{mln.} - 40\text{mln.}$



Уравнение состояния при $H=1.0$ (низкие плотности)



Уравнение состояния при $H=1.0$ (высокие плотности)



Плавление двумерных систем

- Переход первого рода
- Два непрерывных перехода (сценарий Костерлица-Таулеса-Хальперина-Нельсона-Янга)
 - Переход кристалл – гексатическая фаза (ориентационно упорядоченная)
 - Переход гексатическая фаза – нормальная жидкость
- Двухстадийное плавление: переход первого рода (гексатическая фаза – нормальная жидкость) и непрерывный переход (кристалл – гексатическая фаза)

Трансляционный порядок:

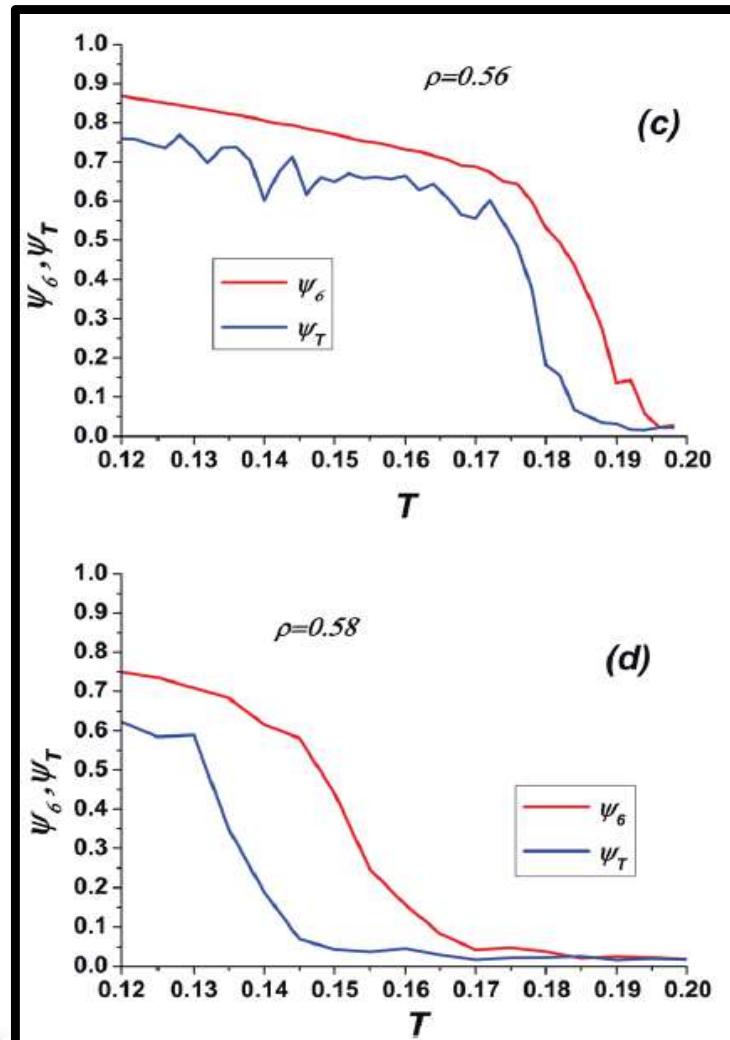
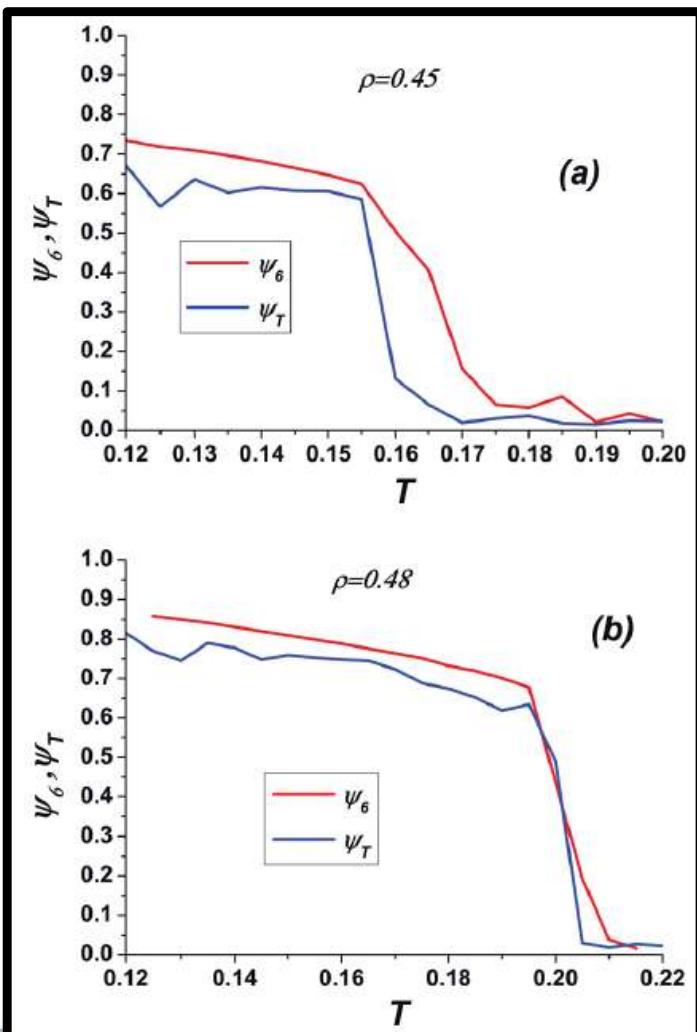
$$\Psi_T = \frac{1}{N} \left\langle \left| \sum_i e^{i \mathbf{G} \mathbf{r}_i} \right| \right\rangle,$$

Ориентационный порядок:

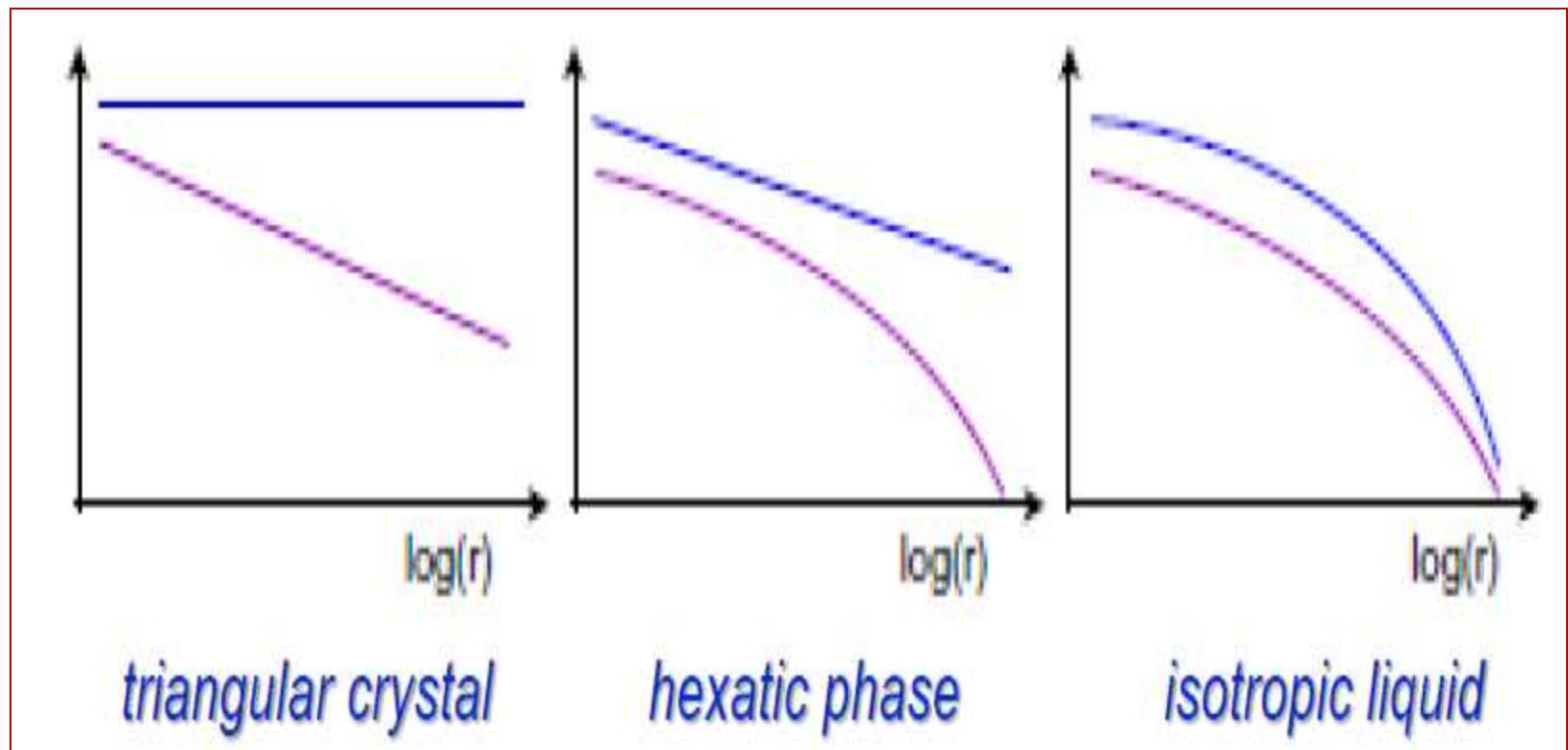
$$\Psi_6 = \frac{1}{N} \left\langle \left| \sum_i \frac{1}{n_c(i)} \sum_{\text{NN}(i)} e^{6i\theta_{\text{NN}}} \right| \right\rangle = \frac{1}{N} \left\langle \left| \sum_i \Psi_6(\mathbf{r}_i) \right| \right\rangle$$

Ψ_6 и Ψ_T как функция температуры для набора плотностей

$$\sigma 1 = 1.35$$

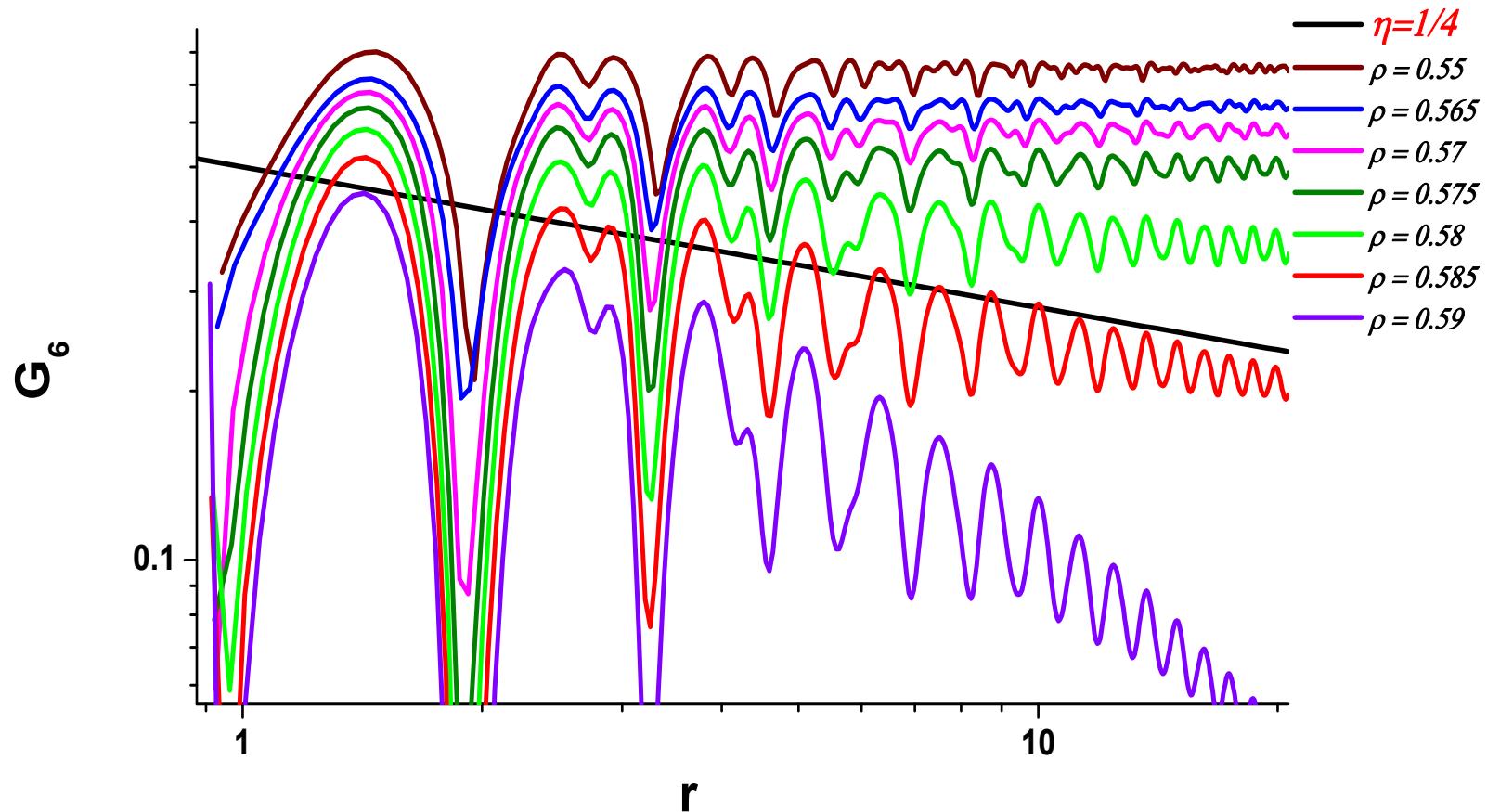


Схематическое поведение ориентационной корреляционной функции $G_6(r)$ (голубая) и трансляционной корреляционной функции $G_t(r)$ (фиолетовая) в логарифмическом масштабе



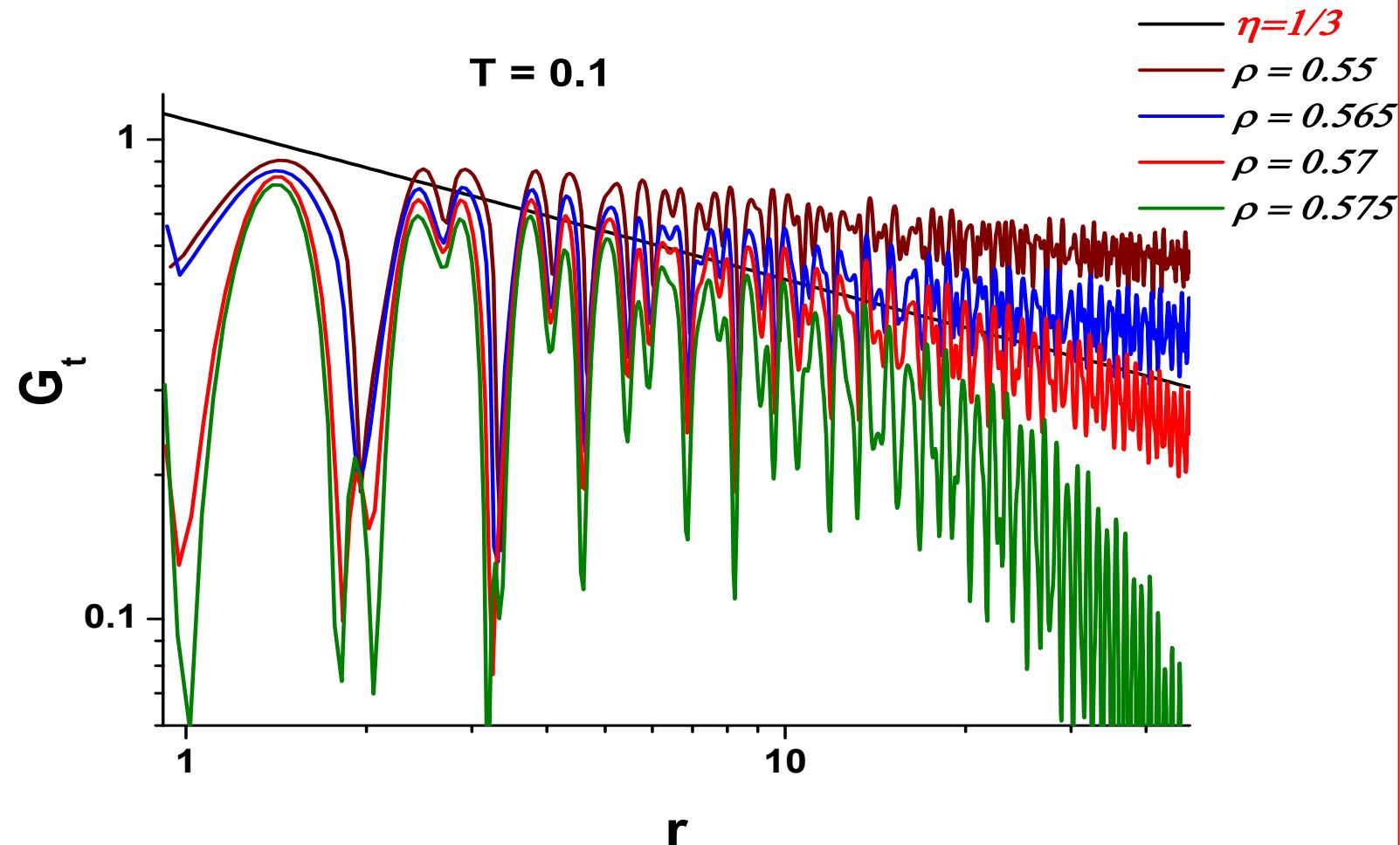
Поведение ориентационной корреляционной функции $G_6(r)$ для $H=1.0$

$$G_6(r) = \left\langle \frac{\langle \Psi_6(\mathbf{r}) \Psi_6^*(\mathbf{0}) \rangle}{g(r)} \right\rangle \quad G_6(r) \propto r^{-\eta_6} \text{ with } 0 \leq \eta_6 \leq \frac{1}{4}$$

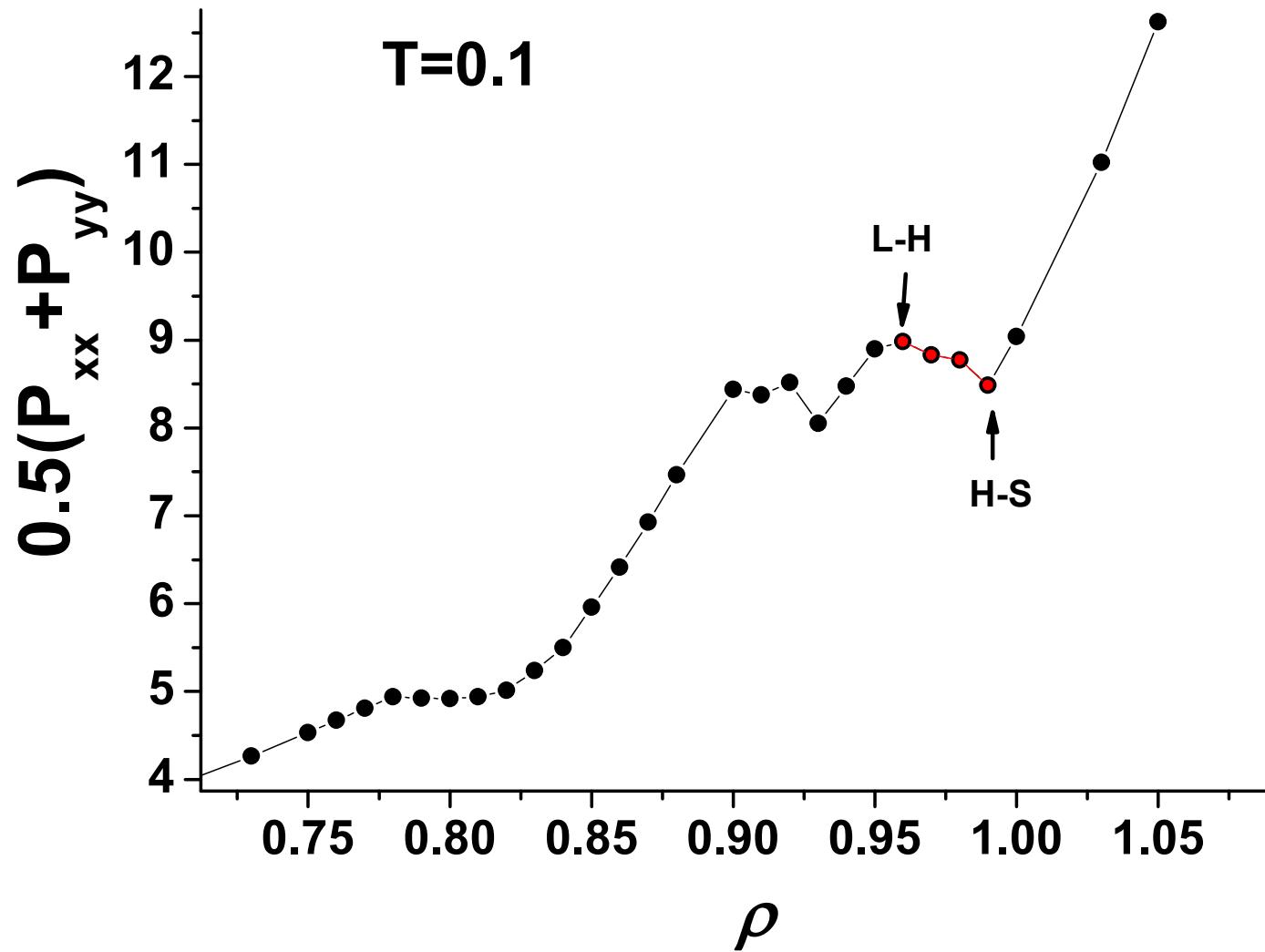


Поведение трансляционной корреляционной функции $G_t(r)$ для $H=1.0$

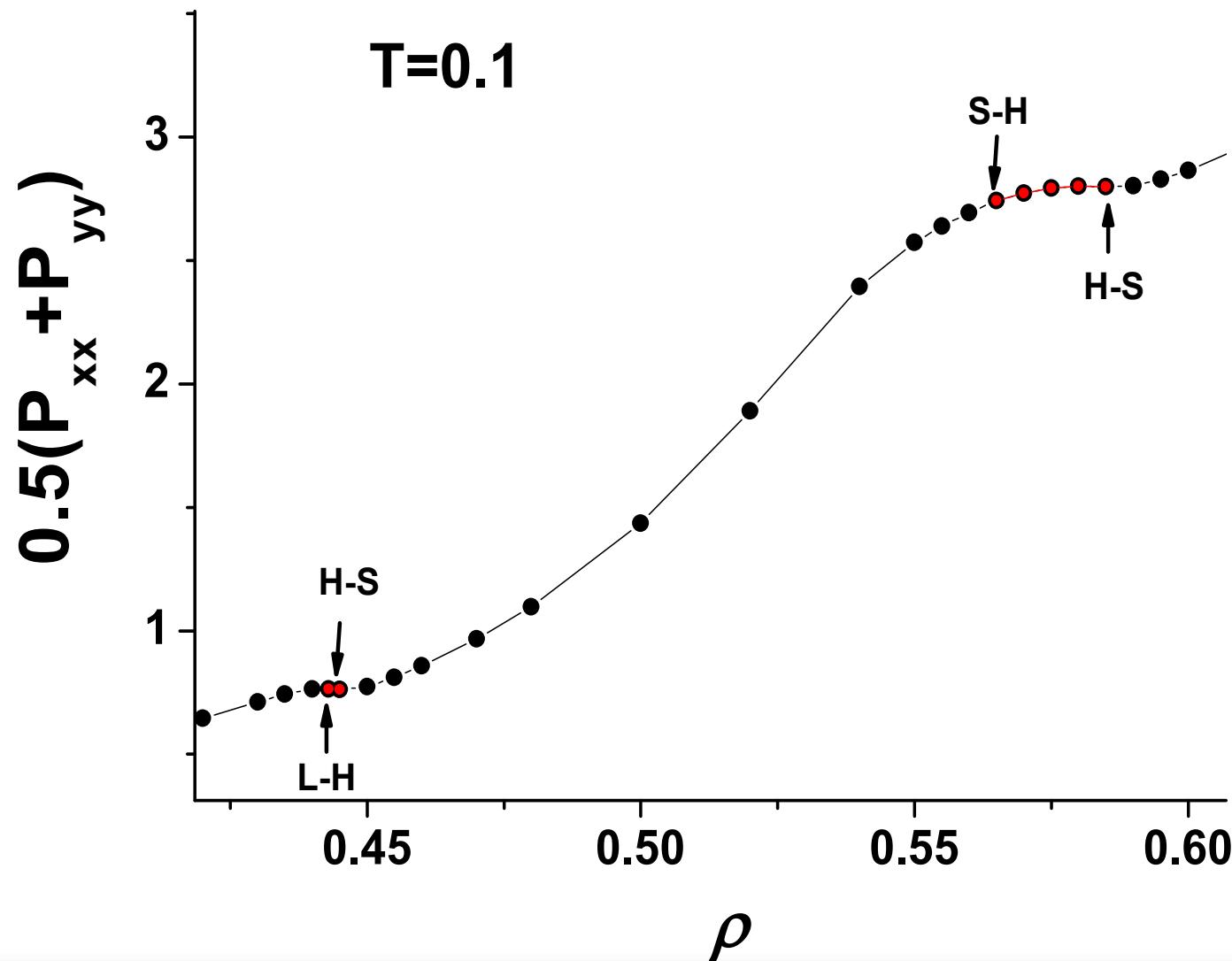
$$G_T(r) = \left\langle \frac{\exp(iG(r_i - r_j))}{g(r)} \right\rangle_{rp} \quad G_T(r) \propto r^{-\eta_T} \text{ with } \frac{1}{4} \leq \eta_T \leq \frac{1}{3}$$



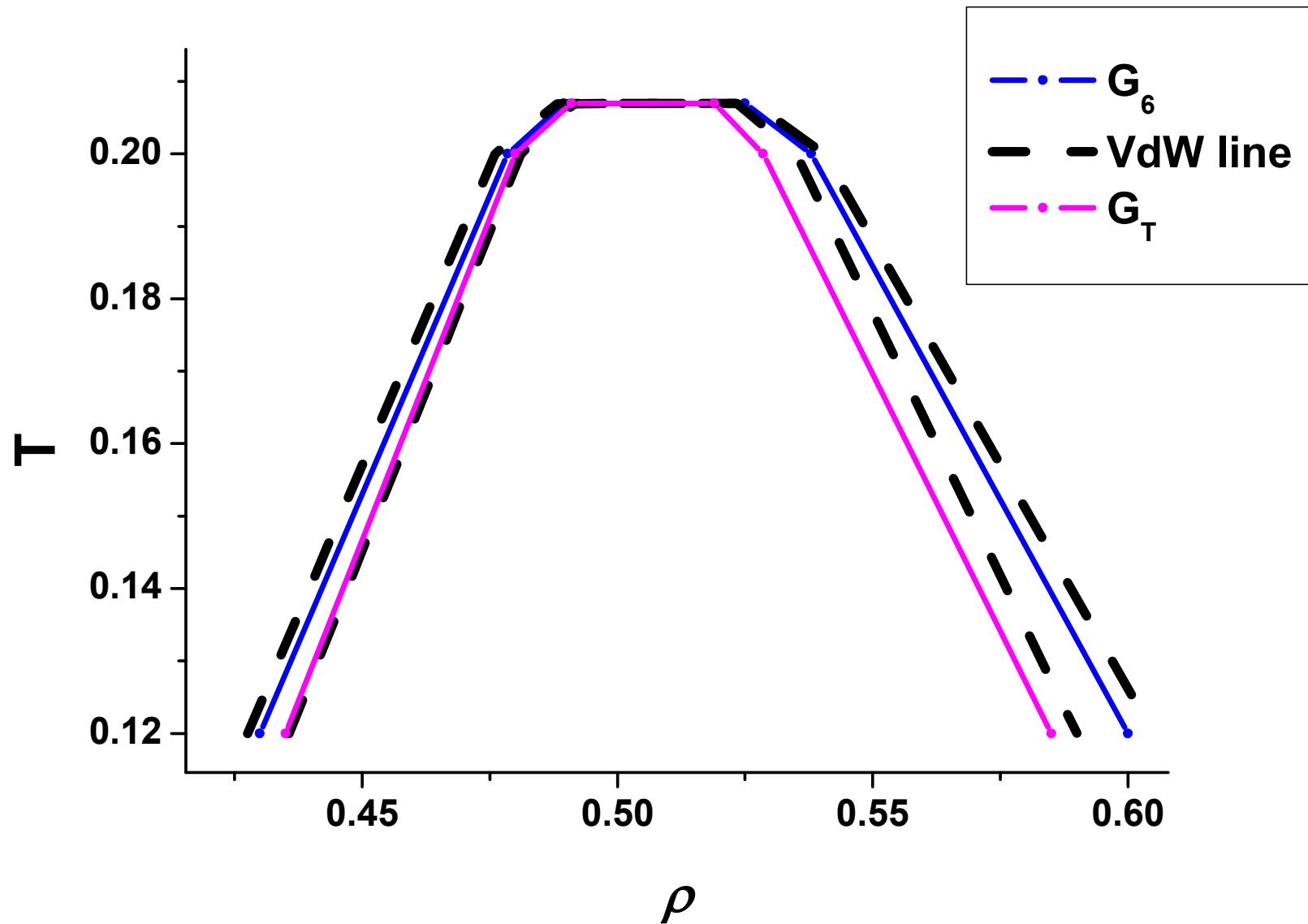
Сценарий фазового перехода при высоких плотностях



Сценарий фазового перехода при низких плотностях



Фазовая диаграмма при низких плотностях



Выводы:

Было проведено исследование поведения системы частиц с потенциалом с отрицательной кривизной в области отталкивания в условиях конфайнмента при различной ширине ограничивающей поры. Был рассмотрен диапазон ширины поры от 0.3 до 3.0 σ .

Было показано, что при $H > 1.8$ система расслаивается на два слоя.

При $H < 1.8$ сценарий плавления качественно совпадает со сценарием плавления чисто двумерной системы. При этом было установлено, что в области высоких плотностей изотропная жидкость переходит в кристалл посредством перехода первого рода. При низких плотностях левая ветвь кривой плавления соответствует переходу первого рода, а правая - двухстадийному плавлению: переход первого рода (гексатическая фаза – нормальная жидкость) и непрерывный переход (кристалл – гексатическая фаза) в соответствии со сценарием Костерлица-Таулеса.

При $H = 0.3$ температура плавления треугольного кристалла при низких плотностях совпадает со случаем чисто двумерного кристалла. Однако, при увеличении H , понижается температура плавления треугольного кристалла при низких плотностях и уменьшается область стабильности треугольного кристалла по сравнению с чисто двумерной системой, не обращаясь в нуль вплоть до расслоения на два слоя.

Работа поддержана грантом РНФ 14-12-00820

- [1] D. E. Dudalov, Yu. D. Fomin, E. N. Tsiok, V. N. Ryzhov, Journal of Physics: Conference Series 510, 012016 (2014).
- [2] D. E. Dudalov, Y. D. Fomin, E. N. Tsiok, V. N. Ryzhov, Soft Matter 10, 4966 (2014).
- [3] D. E. Dudalov, Y. D. Fomin, E. N. Tsiok, V. N. Ryzhov, J. Chem. Phys. 141, 18C522 (2014).
- [4] E. N. Tsiok, D. E. Dudalov, Y. D. Fomin,,V. N. Ryzhov, Phys. Rev. E 92, 032110 (2015).
- [5] E. N. Tsiok, Y. D. Fomin,,V. N. Ryzhov, cond-mat.soft, 1608.05232v1

**Спасибо
за внимание**