



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)).

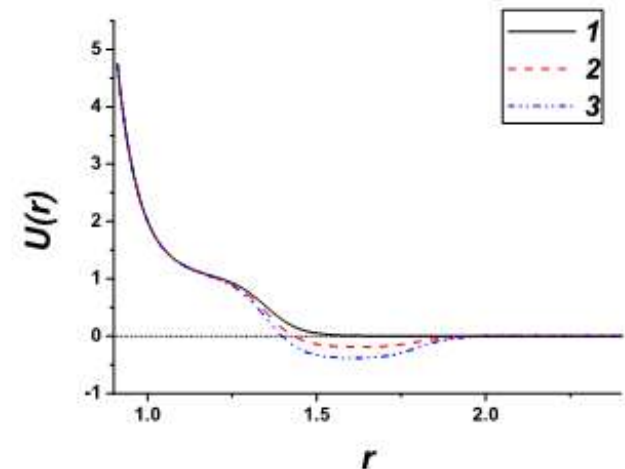
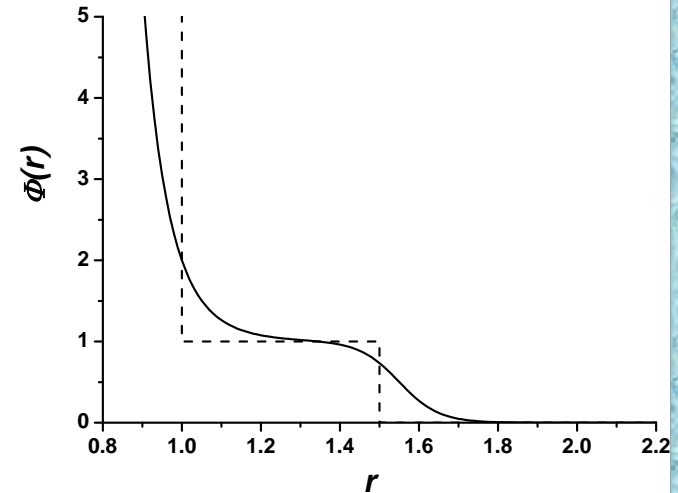
Smooth Repulsive Shoulder System

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

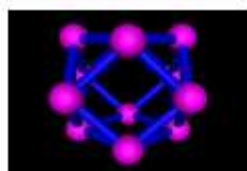
$$\sigma = 1.15, 1.35, 1.45, 1.55, 1.8$$

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

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

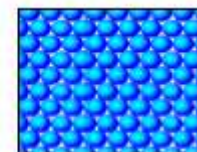


number	σ_1	σ_2	λ_0	λ_1	λ_2	well depth
1	1.35	0	0.5	0.5	0	0
2	1.35	1.80	0.5	0.60	0.10	0.20
3	1.35	1.80	0.5	0.7	0.20	0.4



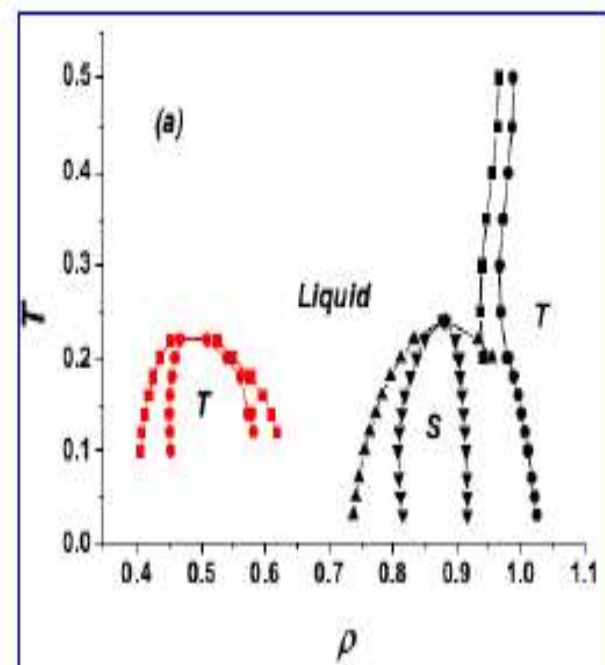
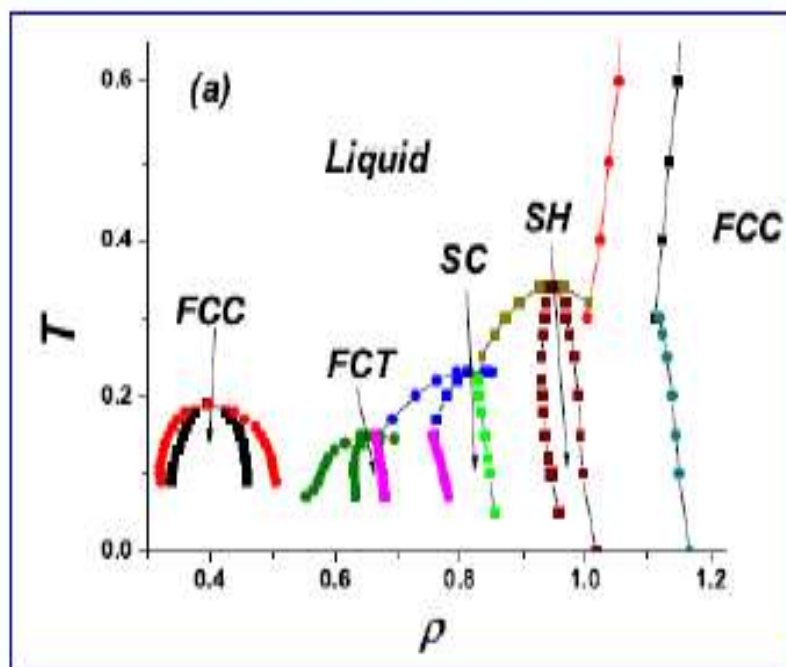
3D

2D

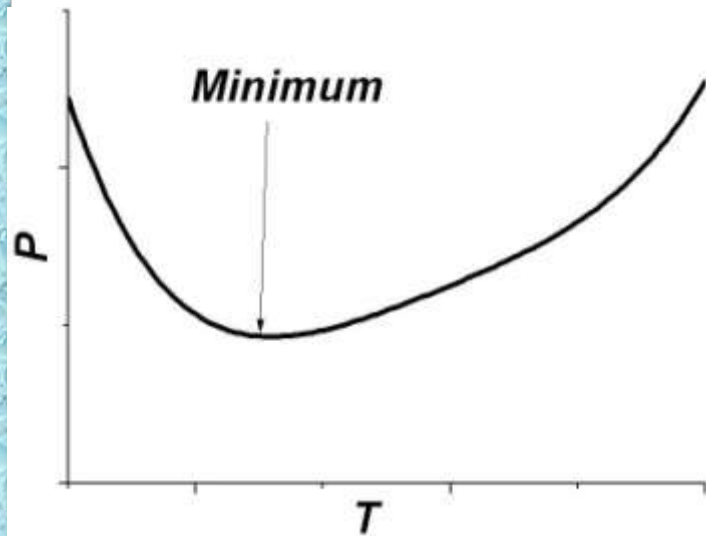
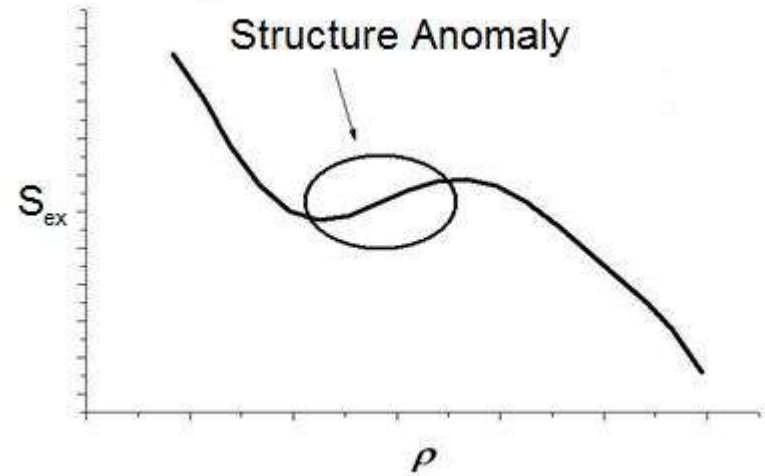
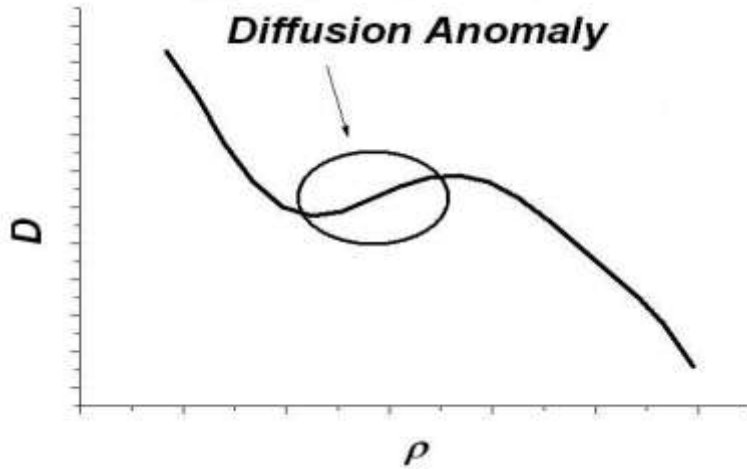


$$\sigma = 1.35$$

$$\sigma = 1.35$$



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))

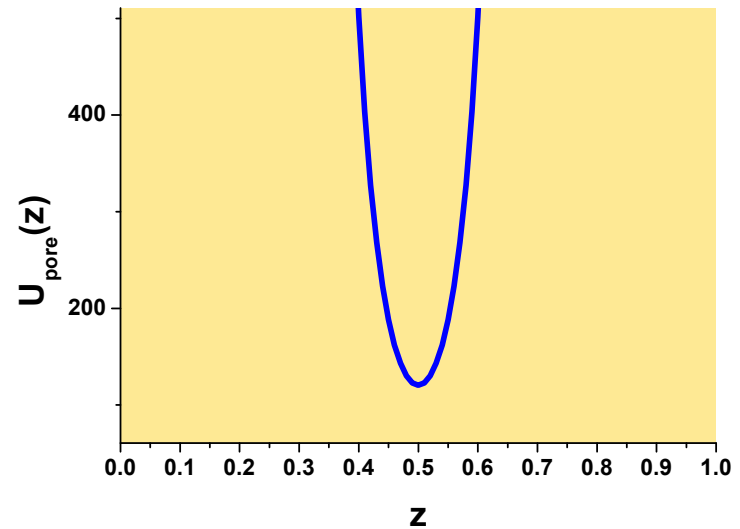
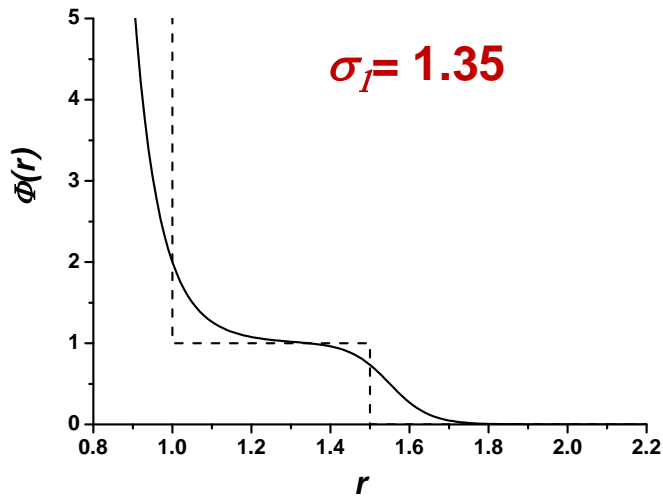
Smooth Repulsive Shoulder System

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

Lennard-Jones 9-3 potential

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

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



$H = 2z = \text{от } 0.3 \text{ до } 3.0.$

Метод и Система при $H \geq 1.8$

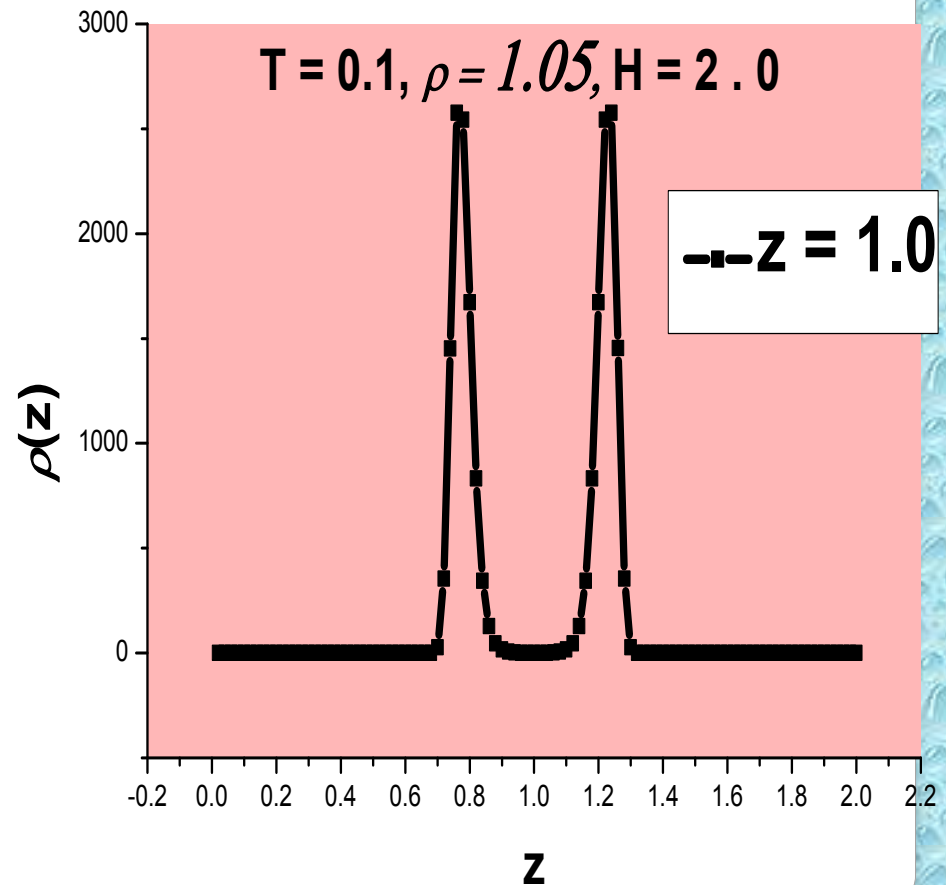
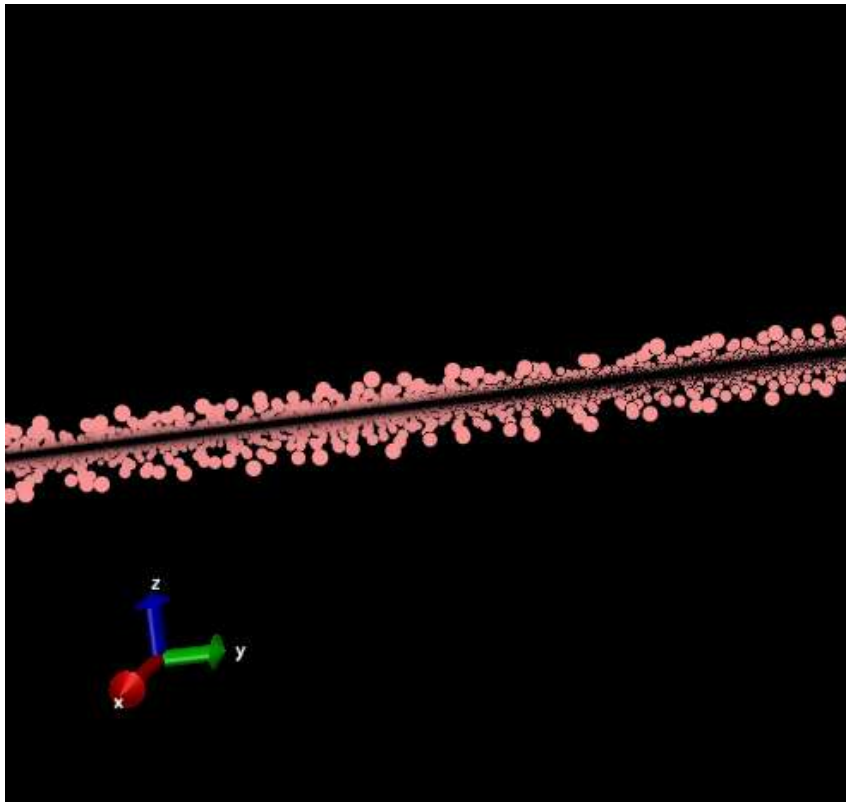
Метод молекулярной динамики (LAMMPS package)

<http://lammmps.sandia.gov>

NVT - ансамбль

$N = 20000$

Nstep = 20mln.- 40mln.



Метод и Система при $H < 1.8$

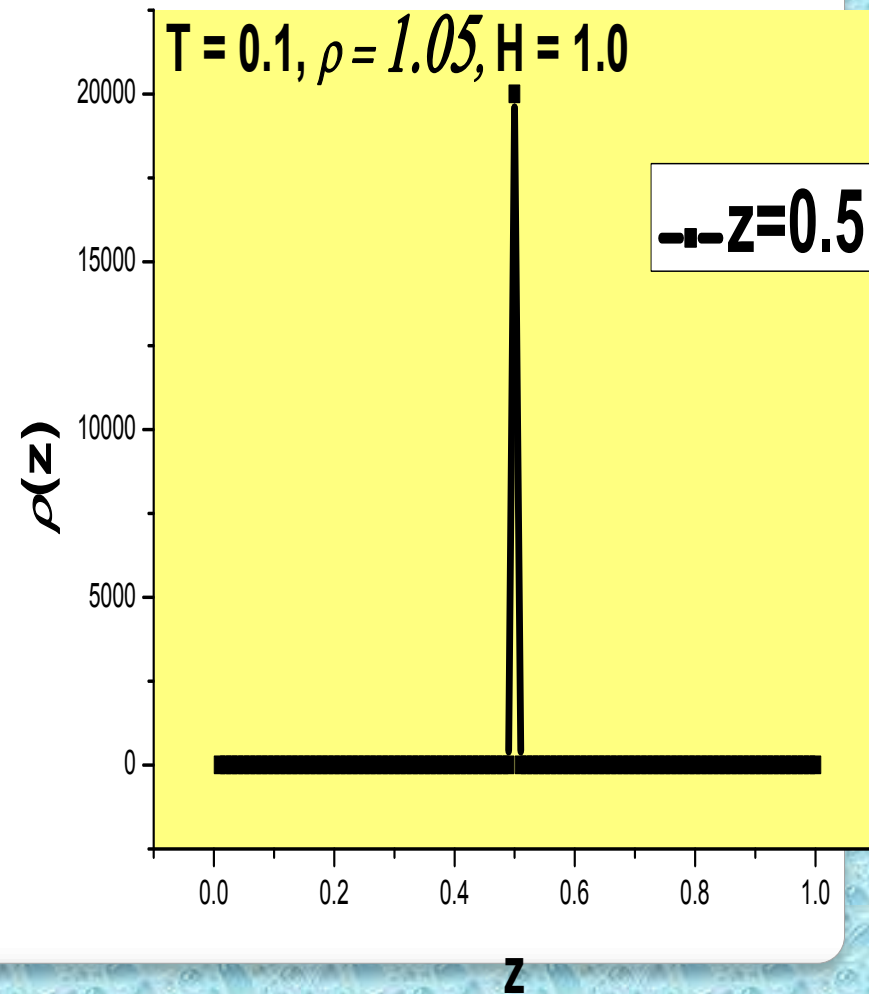
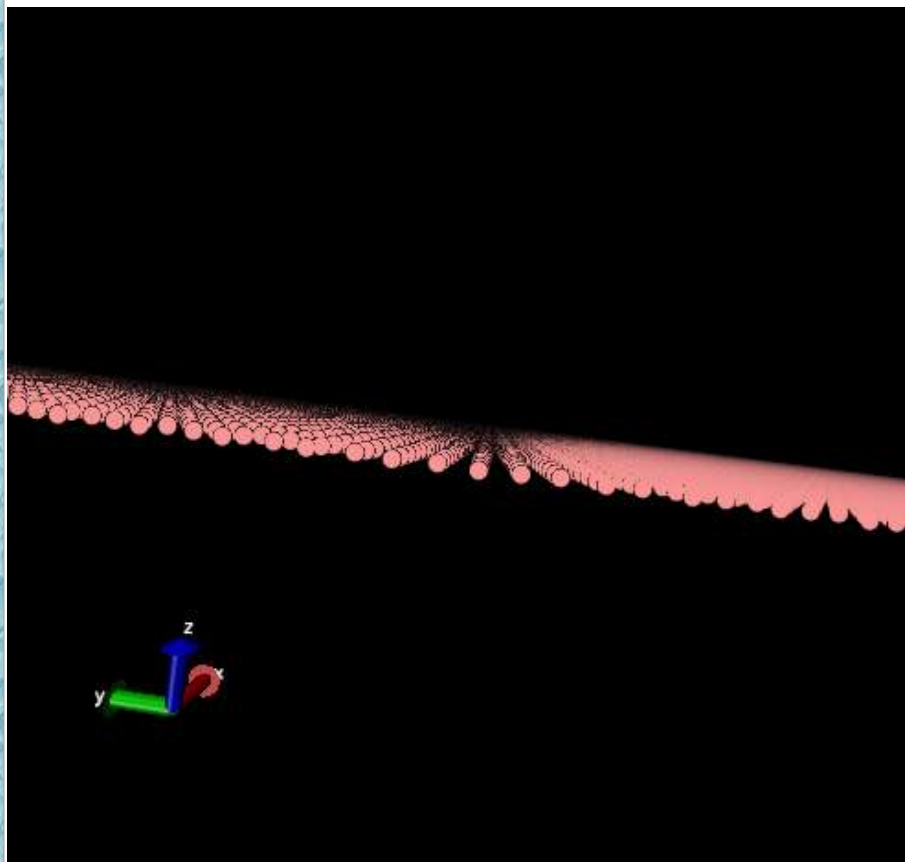
Метод молекулярной динамики (LAMMPS package)

<http://lammps.sandia.gov>

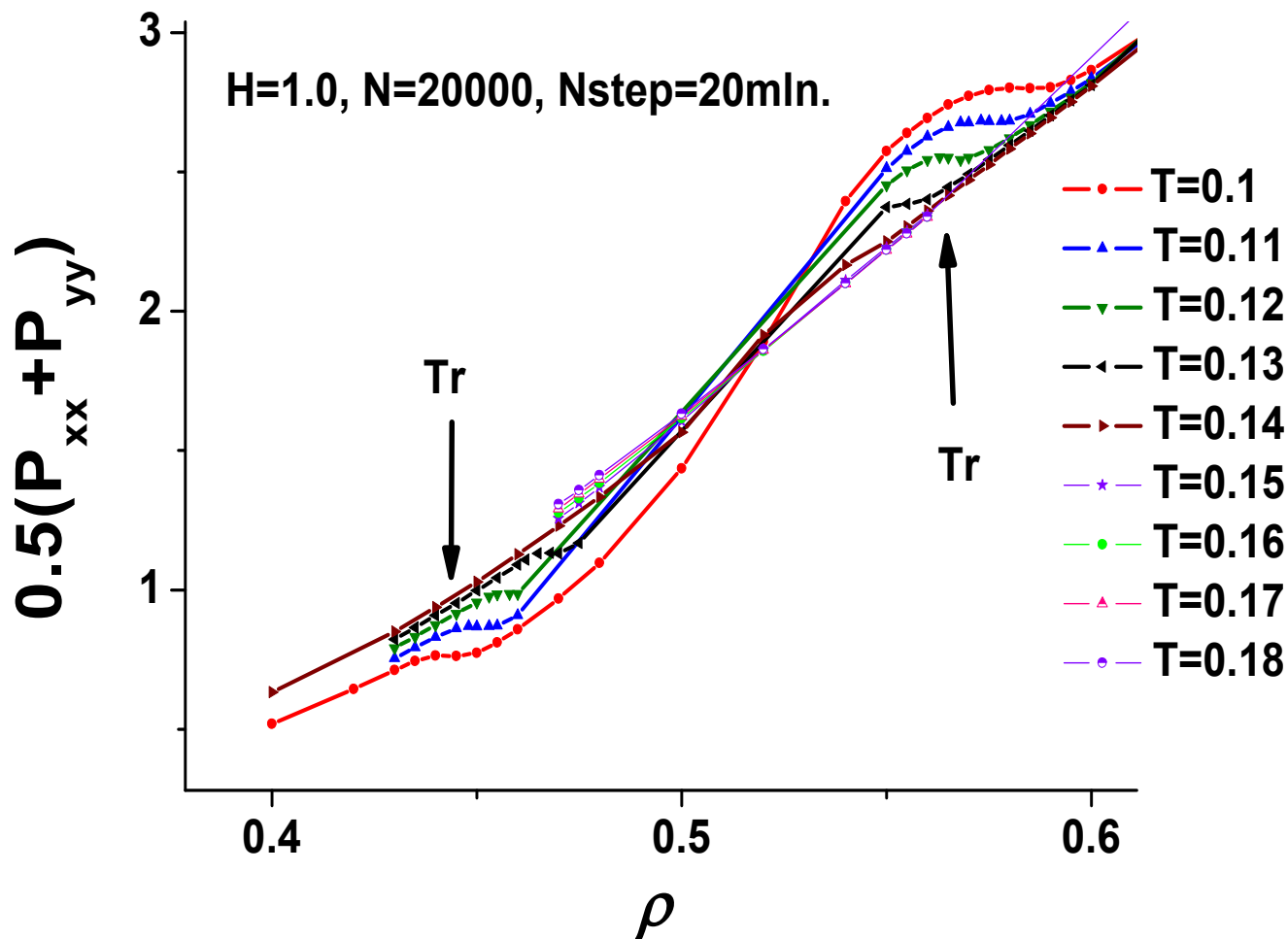
NVT - ансамбль

$N = 20000$

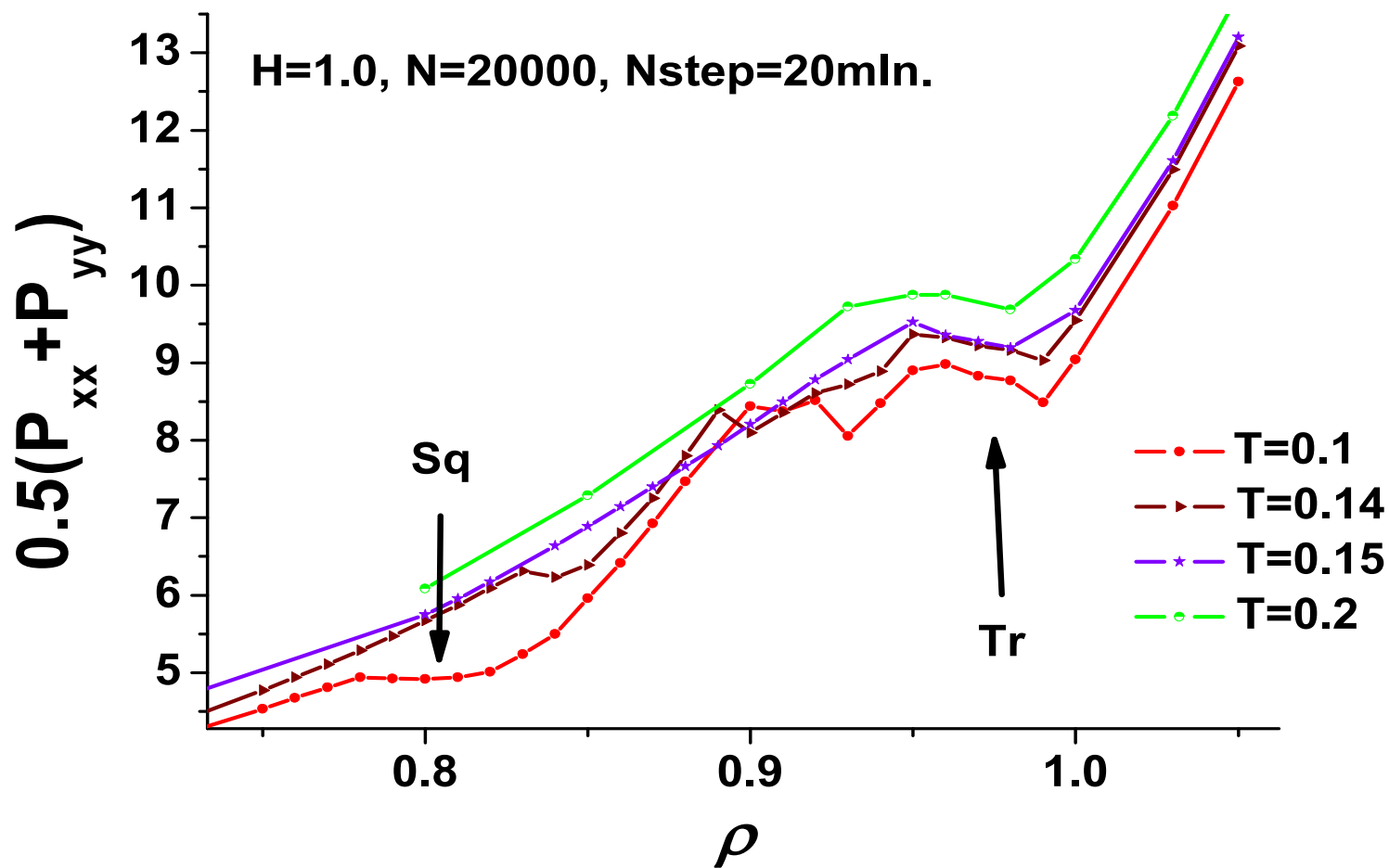
$N_{\text{step}} = 20\text{mln.} - 40\text{mln.}$



Уравнение состояния при $N=1.0$ (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:

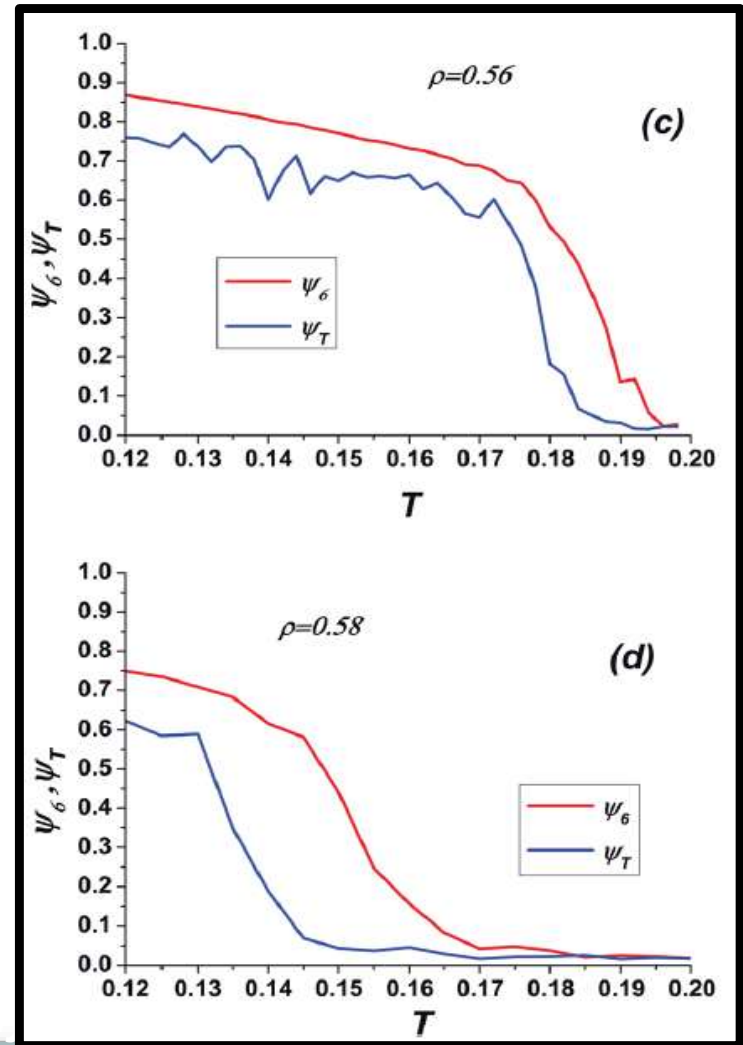
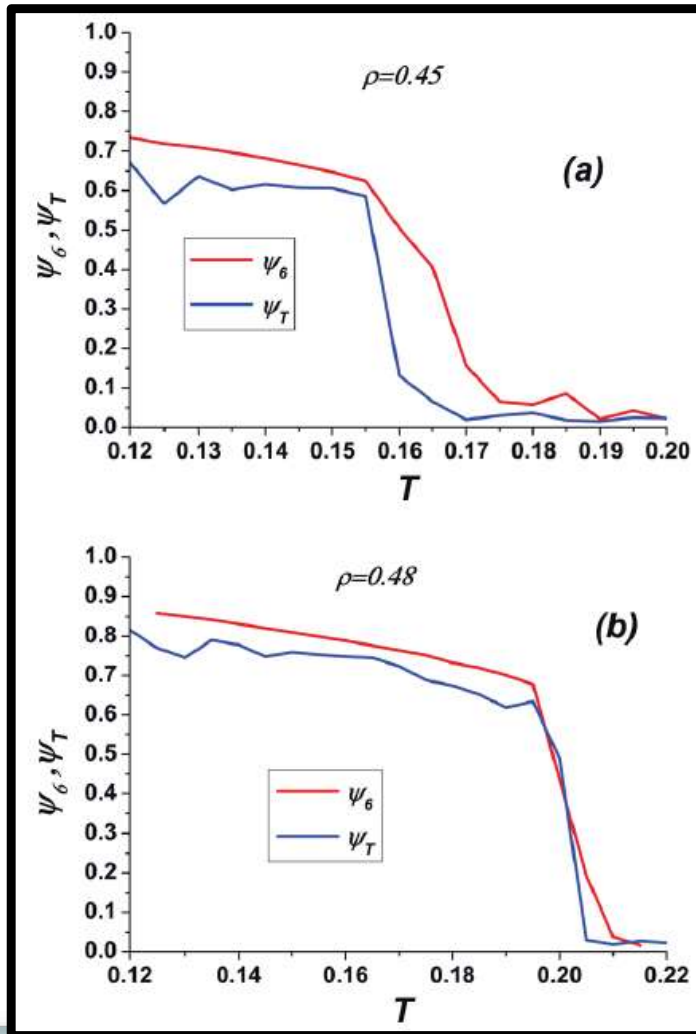
$$\Psi_T = \frac{1}{N} \left\langle \left| \sum_i e^{i\mathbf{G}\mathbf{r}_i} \right| \right\rangle,$$

Ориентационный порядок:

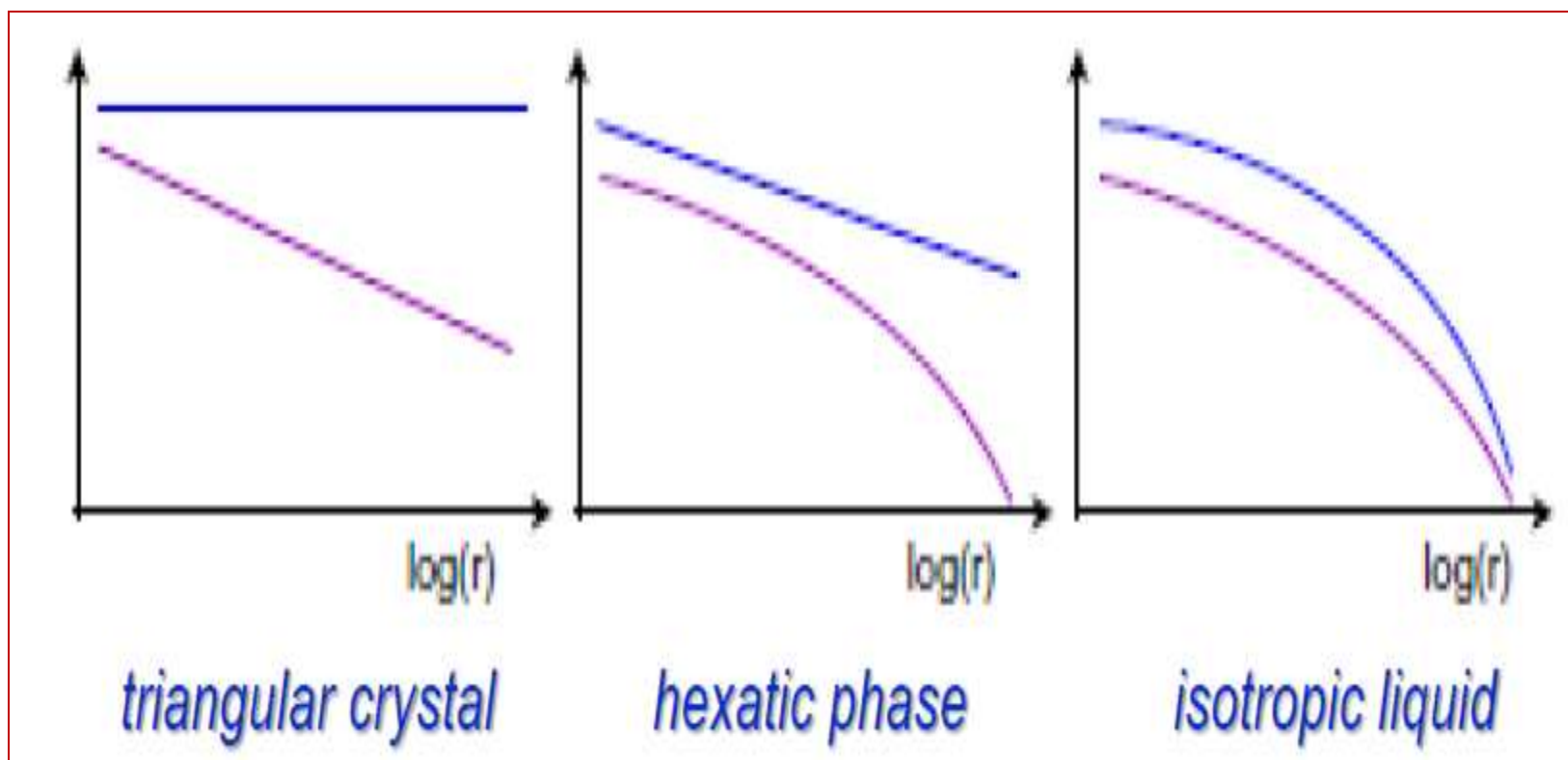
$$\Psi_6 = \frac{1}{N} \left\langle \left| \sum_i \frac{1}{n_c(i)} \sum_{\text{NN}(i)} e^{6i\theta_{\text{NN}}} \right| \right\rangle = \frac{1}{N} \left\langle \left| \sum_i \Psi_6(\mathbf{r}_i) \right| \right\rangle$$

Ψ_6 и Ψ_T как функция температуры для набора плотностей

$$\sigma_1 = 1.35$$

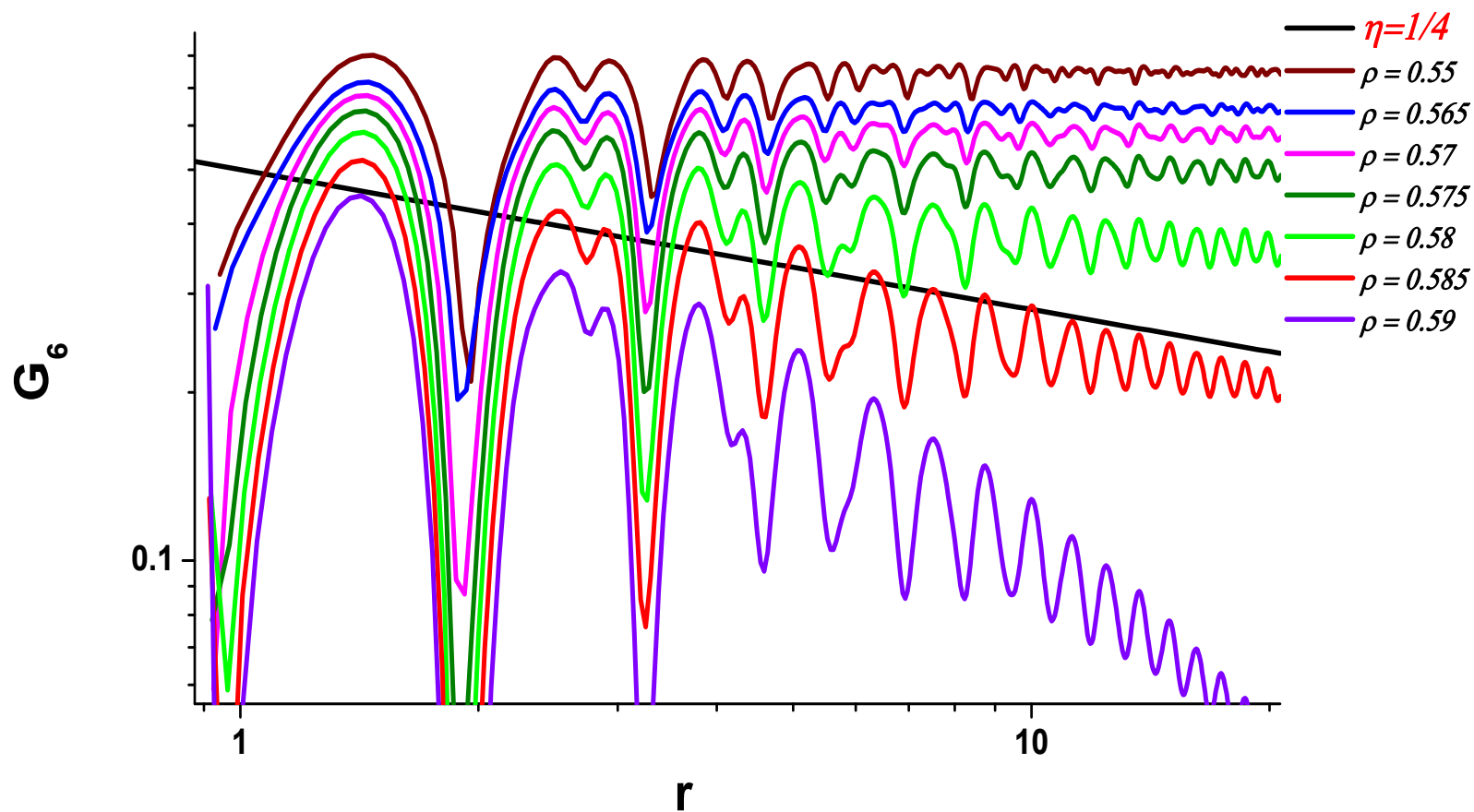


**Схематическое поведение
ориентационной корреляционной функции $G_6(r)$ (голубая) и
трансляционной корреляционной функции $G_t(r)$ (фиолетовая)
в логарифмическом масштабе**



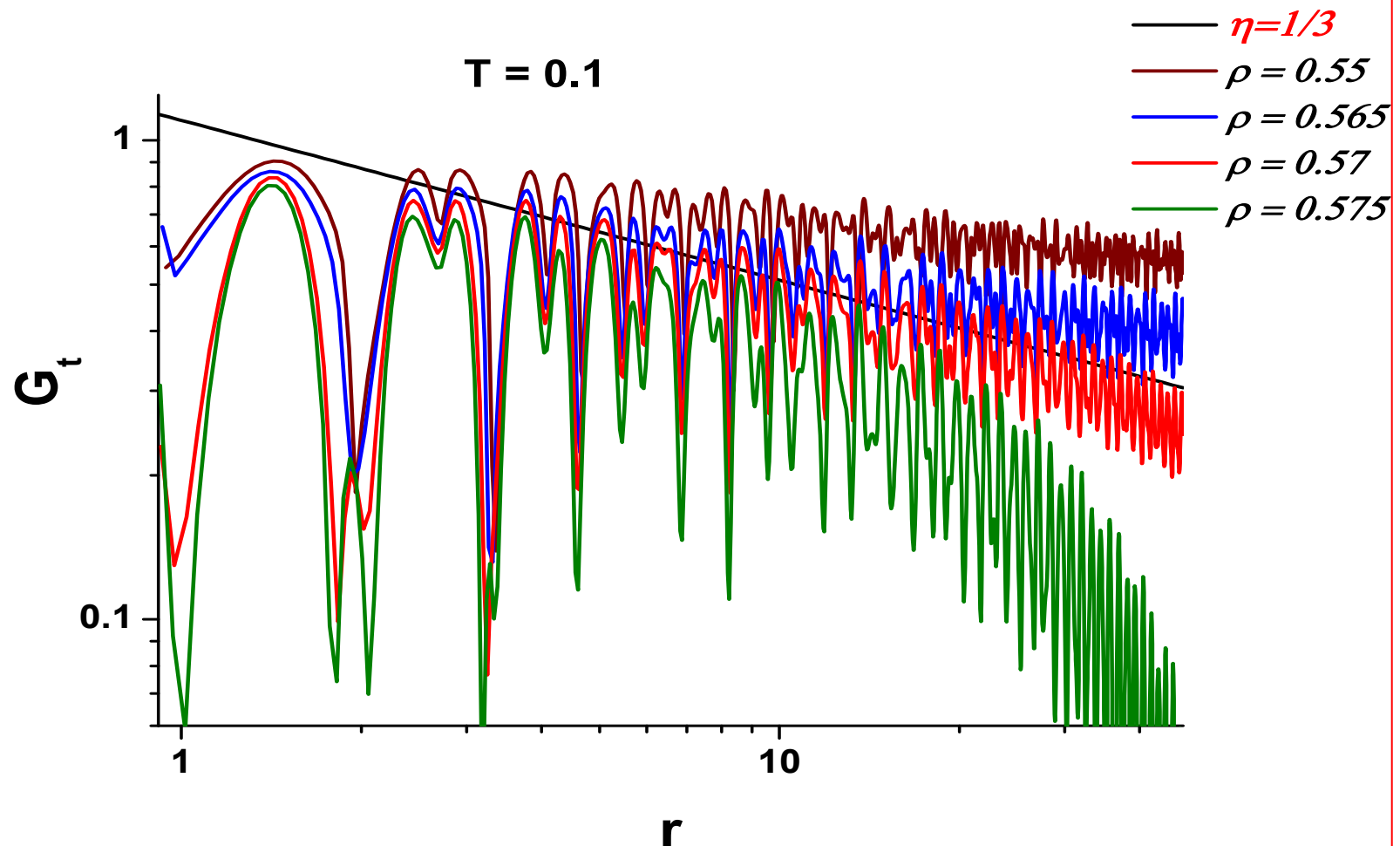
Поведение ориентационной корреляционной функции $G_6(r)$ для $H=1.0$

$$G_6(r) = \left\langle \frac{\langle \Psi_6(\mathbf{r}) \Psi_6^*(\mathbf{0}) \rangle}{g(r)} \right\rangle \quad \bar{G}_6(r) \propto r^{-\eta_6} \quad \text{with } 0 \leq \eta_6 \leq \frac{1}{4}$$

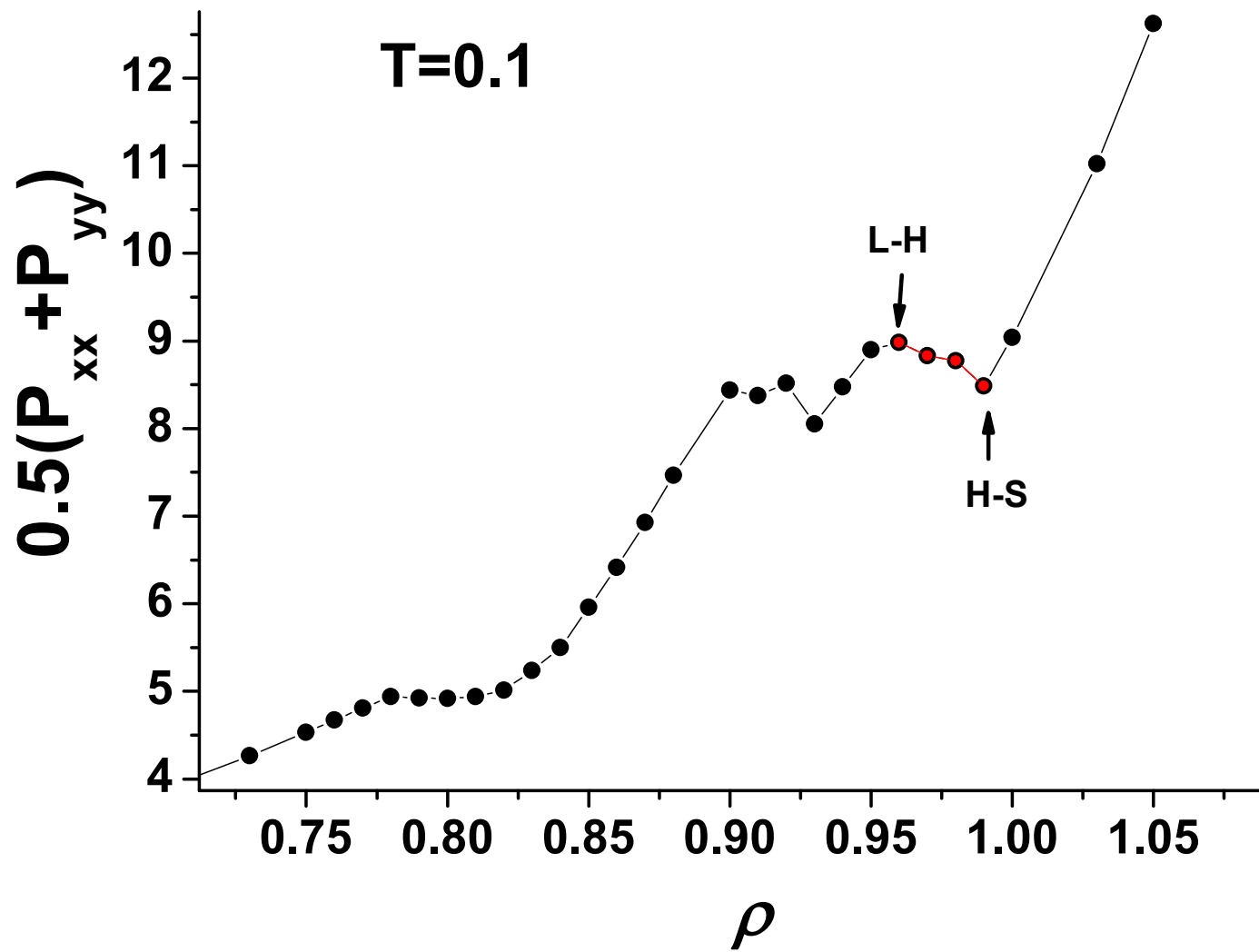


Поведение трансляционной корреляционной функции $G_T(r)$ для $H=1.0$

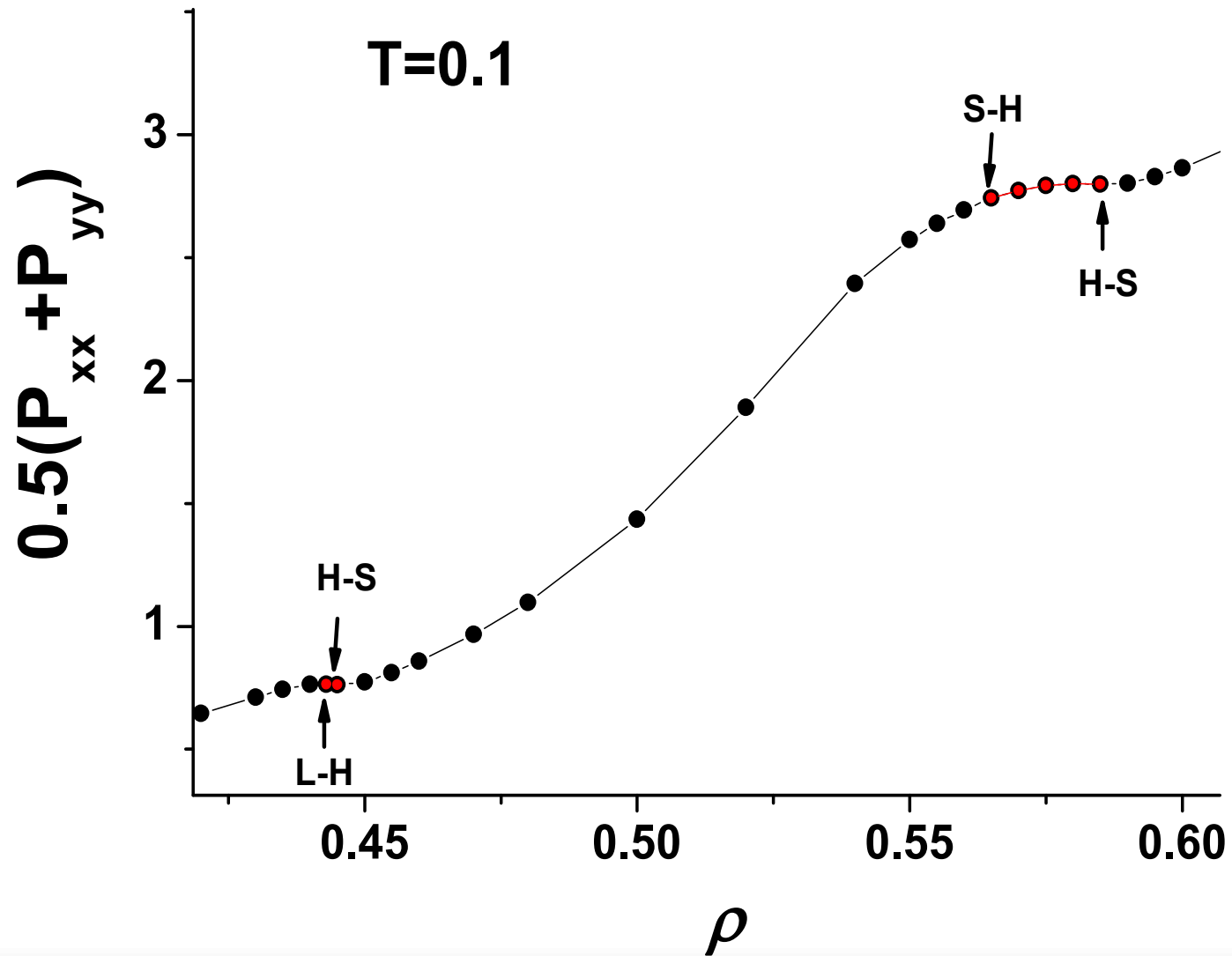
$$G_T(r) = \left\langle \frac{\langle \exp(iG(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)) \rangle}{g(r)} \right\rangle_{rp} \quad G_T(r) \propto r^{-\bar{\eta}_T} \text{ with } \frac{1}{4} \leq \bar{\eta}_T \leq \frac{1}{3}$$



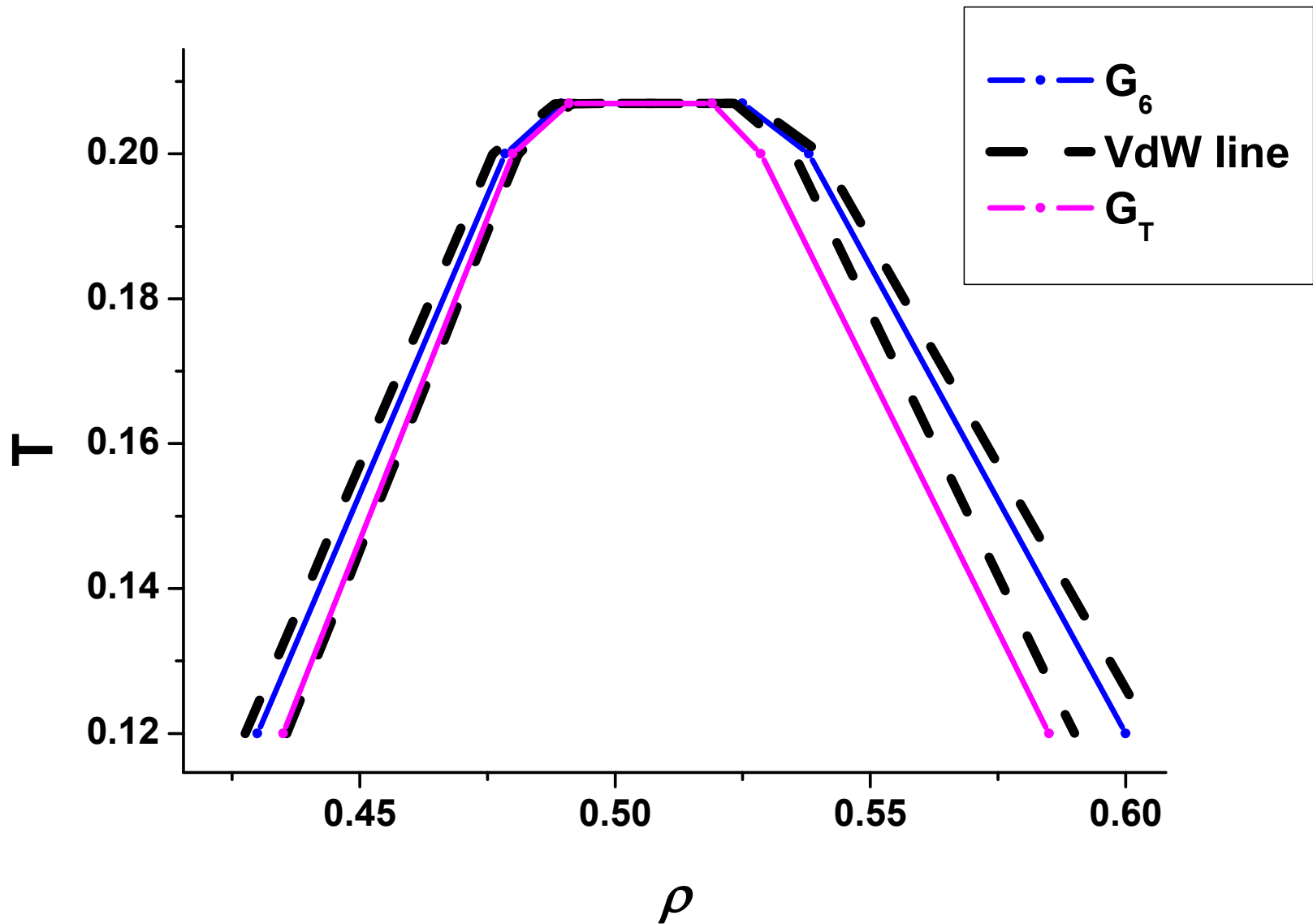
Сценарий фазового перехода при высоких плотностях



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 РФФ 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***