

ОБЗОРЫ АКТУАЛЬНЫХ ПРОБЛЕМ

Переход Березинского – Костерлица – Таулеса
и двумерное плавление*

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

Подробно изложены основные положения теории фазовых переходов в плоских вырожденных системах (переходов Березинского – Костерлица – Таулеса — БКТ). Обсуждаются механизм перехода, применение метода ренормализационной группы для его описания, а также возможные изменения сценария перехода в зависимости от энергии ядра топологического дефекта, в частности, в применении к тонким сверхпроводящим плёнкам. Проведён анализ различных сценариев плавления двумерных систем, современного состояния реальных экспериментов и компьютерного моделирования в данной области. Если в трёхмерном случае плавление всегда происходит посредством перехода первого рода, то в двумерном, как показано Хальпериним, Нельсоном и Янгом, система может плавиться посредством двух непрерывных переходов типа БКТ, при этом в ней возникает промежуточная гексатическая фаза, характеризующаяся квазидальним ориентационным порядком. Однако в системе также может реализоваться фазовый переход первого рода. Недавно был предложен ещё один, отличающийся от такового в рамках теории Березинского – Костерлица – Таулеса – Хальперина – Нельсона – Янга, сценарий плавления, согласно которому плавление может происходить посредством двух переходов: непрерывного перехода типа БКТ твёрдое тело – гексатическая фаза и последующего перехода первого рода гексатическая фаза – изотропная жидкость. Особое внимание уделено зависимости сценария плавления от вида потенциала и влиянию случайного пиннинга на двумерное плавление. В частности, показано, что случайный пиннинг может принципиально изменить сценарий плавления в случае перехода первого рода. Рассмотрено плавление систем с потенциалами с отрицательной кривизной в области отталкивания, которые успешно применяются для описания аномальных свойств воды в трёх и двух измерениях.

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

PACS numbers: 02.70.Ns, 05.70.Ln, **64.10. +h**, 64.60.Ej, 64.70.D–DOI: <https://doi.org/10.3367/UFNr.2017.06.038161>

Содержание

1. Введение (921).
2. Теория Березинского – Костерлица – Таулеса (924).
 - 2.1. Переход Березинского – Костерлица – Таулеса в XY-модели и сверхтекучей плёнке.
 - 2.2. Переход типа Березинского – Костерлица – Таулеса в тонкой сверхпроводящей плёнке (кольцевое приближение).
3. Двумерное плавление (931).
 - 3.1. Особенности кристаллического упорядочения в двух измерениях.
 - 3.2. Теория Березинского – Костерлица – Таулеса – Хальперина – Нельсона – Янга.
 - 3.3. Плавление как переход первого

- рода.
- 3.4. Связь с теорией фазовых переходов Ландау.
- 3.5. Влияние беспорядка на сценарий двумерного плавления.
- 3.6. Эксперимент и компьютерное моделирование.
- 3.7. Плавление двумерных систем с потенциалами с отрицательной кривизной.

4. Заключение (948).

Список литературы (949).

1. Введение

4 октября 2016 г. в Стокгольме были объявлены имена лауреатов Нобелевской премии по физике за 2016 год: английских физиков Дэвида Таулеса (David Thouless), работающего сейчас в Университете им. Вашингтона в Сиэтле (США) и Дункана Халдейна (Duncan Haldane) из

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

Статья поступила 15 мая 2017 г.,
после доработки 23 июня 2017 г.

* Обзор представляет собой расширенное содержание доклада, представленного на научной сессии "Старое и новое в физике фазовых переходов" Отделения физических наук Российской академии наук 21 декабря 2016 г. (см. УФН 187 1021 (2017)). (Примеч. ред.)

Принстонского университета (США), а также Джона Майкла Костерлица (John Michael Kosterlitz) из Университета Брауна в Провиденсе (США) — с формулировкой "за теоретические открытия топологических фазовых переходов и топологических фаз материи". Дункан Халдейн — несомненно, выдающийся физик-теоретик, известный работами по топологическим состояниям в одномерных магнитных цепочках и дробному эффекту Холла, однако в данном обзоре мы ограничимся рассмотрением свойств перехода Костерлица–Таулеса (а точнее, перехода Березинского–Костерлица–Таулеса).

Прежде чем перейти к описанию физических аспектов и приложений разработанной лауреатами теории, следует обязательно остановиться на одном вопросе, который сразу возник у всех, кто хотя бы отдалённо знаком с историей этого открытия. В англоязычной литературе обычно употребляется термин "переход Костерлица–Таулеса", в то время как российские учёные чаще всего говорят о фазовом переходе Березинского–Костерлица–Таулеса (БКТ).

Роль рано умершего талантливого советского физика Вадима Львовича Березинского в разработке теории фазовых переходов в плоских вырожденных системах трудно переоценить. Именно Березинский первым сформулировал основные положения теории [1, 2], которая в 2016 г. была отмечена Нобелевской премией. При этом надо отметить, что в основополагающей статье Костерлица и Таулеса [3] есть корректные ссылки на обе статьи Березинского на эту тему с соответствующими комментариями. Более того, Костерлиц в обзоре [4] 2016 года с выразительным названием "Физика Костерлица–Таулеса: основные вопросы" написал, что они с Таулесом испытали разочарование, когда узнали о работах опередившего их Березинского. Однако Костерлиц там же отмечает, что они с Таулесом не знают русского языка и поэтому не были знакомы с работами Березинского. В связи с последним надо заметить, что *Журнал экспериментальной и теоретической физики (ЖЭТФ)*, в котором была напечатана статья Березинского, и в то время исправно переводился на английский (см., например, [5]).

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 способной описать основные аспекты физики фазовых переходов, была предложена Л.Д. Ландау [6] в 1937 г. Основным пунктом теории Ландау является введённое им представление о параметре порядка — величине, которая равняется нулю при температурах, превышающих температуру перехода, в неупорядоченной фазе, и принимает отличные от нуля значения при переходе в упорядоченную фазу. Параметр порядка характеризует нарушение симметрии, которое имеет место при фазовом переходе.

Фазовые переходы по стандартной классификации бывают двух типов: первого рода, при которых параметр порядка меняется скачком, и непрерывные (часто называемые переходами второго рода), при которых параметр порядка изменяется 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 вы-

соких температурах магнитные моменты свободно вращаются и 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.

Теория Ландау не учитывала тепловых флуктуаций параметра порядка, тем не менее вполне удовлетворительно описывала экспериментальные факты. Самым ярким достижением этой теории стало 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 годам 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, [7–14]), за которую в 1982 г. К. Вильсону была присуждена Нобелевская премия.

Указанные выше и другие авторы обратили внимание на роль размерности пространства, в котором происходит переход, в описании свойств этого перехода. В частности, в работах Пайерлса, Ландау, а затем Боголюбова, Мермина, Вагнера было показано, что в двумерных системах с непрерывной симметрией параметра порядка (гейзенберговский магнетик, модель плоских ротаторов (XY-модель), сверхтекучие и сверхпроводящие системы, а также двумерные кристаллические решётки) тепловые флуктуации разрушают дальний порядок, т.е. ненулевое значение параметра порядка, которое распространяется на всю систему. Отсюда был сделан 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 [15–21], а также ряд исследований на основе компьютерного моделирования твёрдых дисков [22–26] и численных методов в приложении к магнитным системам [27–29], результаты которых противоречили этим выводам.

Ясность в указанные вопросы была внесена именно работами Березинского, Костерлица и Таулеса [1–3, 30, 31]. Березинский [2] впервые показал, что тонкая плёнка жидкого гелия, несмотря на отсутствие в ней дальнего порядка, при низких температурах обладает свойством сверхтекучести. Двумерные кристаллы, хотя в них отсутствует дальний трансляционный порядок, имеют конечный модуль сдвига, т.е. представляют собой твёрдое тело. Двумерные магнетики оказывают сопротивление неоднородному повороту спинов. Березинский понял общую природу этих явлений и дал им название поперечной жёсткости, используемое сейчас в мировой литературе. Березинский показал, что в системах, обладающих поперечной жёсткостью, корреляционные функции, описывающие взаимное влияние параметров порядка, взятых в двух разных точках, медленно, по степенному закону, убывают с увеличением расстояния, причём показатель степени зависит от параметров взаимодействия и температуры. Напомним, что при наличии дальнего по-

рядка аналогичная корреляционная функция стремится к ненулевому пределу при стремлении расстояния между точками к бесконечности, а в высокотемпературной неупорядоченной фазе корреляции убывают экспоненциально быстро.

Новая фаза, иногда называемая фазой Березинского, принципиально отличается от того, что можно наблюдать в трёх измерениях. Учитывая медленное убывание корреляций, принято говорить об этой фазе как о фазе с квазидальним порядком. Аналогичные результаты несколько позднее получили Костерлиц и Таулес [3, 30]. Кроме того, они исправили неточность, допущенную Березинским, который ошибочно полагал, что квазидальний порядок может существовать в двумерном гейзенберговском магнетике — системе с трёхкомпонентными магнитными моментами.

С учётом того, что в низкотемпературной и высокотемпературной фазах корреляции убывают по разным законам, которые не переходят непрерывно один в другой, стало ясно, что между этими фазами должен быть фазовый переход. Березинский 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 (XY-модель) — и дал качественное объяснение механизма перехода. При низких температурах дефекты образуют связанные пары, не разрушающие квазидальнего порядка. Однако при повышении температуры происходит диссоциация связанных пар и образуются свободные дефекты, которые превращают квазидальний порядок в неупорядоченную фазу с быстрым экспоненциальным убыванием корреляций. Метод вычисления температуры перехода был развит в дальнейших работах Костерлица и Таулеса [3, 30, 31].

Разработанная Березинским, Костерлицем и Таулесом теория переходов в плоских вырожденных системах сыграла выдающуюся роль в изучении физики двумерного плавления. Несмотря на почти 40-летнюю историю вопроса, до сих пор не существует теории, непротиворечивым образом описывающей с микроскопической точки зрения плавление двумерных систем. Природа двумерного плавления является одной из наиболее старых нерешённых проблем физики конденсированного состояния. Хотя данной тематике посвящено большое число публикаций, противоречия, связанные с микроскопическим описанием плавления в двух измерениях, остаются и даже множатся. В отличие от плавления в трёхмерном случае, которое всегда происходит посредством стандартного перехода первого рода [32], двумерное плавление может описываться несколькими предложенными сценариями. Главной причиной этого отличия является кардинальное возрастание флуктуаций при переходе от трёх измерений к двум. Пайерлс, Ландау, а позднее на основе теоремы Боголюбова о $1/q^2$ [33–35] и Мермин [36] показали, что в двух измерениях дальний кристаллический (трансляционный) порядок не может существовать из-за термодинамических флуктуаций и трансформируется в квазидальний порядок, характеризуемый медленным степенным убыванием корреляций параметра порядка. С другой стороны, настоящий дальний ориентационный порядок (порядок в ориентациях "связей", соединяющих молекулу с её ближайшими соседями) действительно имеет место в двух измерениях, как

впервые было отмечено Мермином [36]. При этом при высоких температурах существует обычная изотропная жидкость.

Ещё в первоначальной работе [3] Костерлиц и Таулес отметили, что двумерный кристалл должен плавиться посредством диссоциации дислокационных пар, которые в данном случае являются топологическими дефектами. При наличии квазидальнего трансляционного порядка эти дефекты хорошо определены. Так как в двумерном кристалле кроме квазидальнего трансляционного порядка существует дальний ориентационный порядок, т.е. порядок в направлениях векторов, соединяющих частицу с её ближайшими соседями, как позднее заметили Хальперин и Нельсон [37, 38] (см. также [39]), жидкость в состоянии выше точки диссоциации дислокационных пар оказывается неизотропной. Авторы работ [37, 38] установили, что диссоциация дислокационных пар не полностью разрушает дальний ориентационный порядок, а только превращает его в квазидальний. Возникающая в результате новая фаза получила название "гексатической" по аналогии с жидкими кристаллами. В гексатической фазе существуют свободные дислокации, поэтому её модуль сдвига равен нулю, т.е. она представляет собой жидкость с элементами упорядочения.

Заметим, что дислокацию можно представить в виде связанной пары двух дисклинаций. Гексатическая фаза превращается в обычную изотропную жидкость в результате последующего перехода БКТ посредством диссоциации дисклинационных пар. Представленная теория носит название теории Березинского – Костерлица – Таулеса – Хальперина – Нельсона – Янга (БКТХНЯ) (Berezinskii – Kosterlitz – Thouless – Halperin – Nelson – Young — BKT HNY). В рамках этой теории двумерный кристалл должен плавиться посредством двух непрерывных переходов типа БКТ с промежуточной гексатической фазой (напомним, что в трёхмерном случае плавление всегда является переходом первого рода). Как было показано позднее, при малых энергиях ядра дислокации возможен также переход первого рода.

Теория БКТХНЯ представляется крайне привлекательной и универсальной, в каком-то смысле даже можно ставить вопрос о том, что все двумерные кристаллы должны плавиться в рамках данного сценария. Однако в ней есть определённые моменты, которые вызывают сомнения. Например, в рамках этой теории невозможно вычислить энергию ядра топологического дефекта, а также энергию эффективного взаимодействия между дисклинациями в гексатической фазе. Теория БКТХНЯ вызвала поток публикаций, как экспериментальных, так и основывающихся на методах компьютерного моделирования, часть из которых описана далее.

В настоящее время можно сделать вывод о том, что сценарий плавления двумерной системы кардинально зависит от вида взаимодействия между частицами. В частности, показано, что теория БКТХНЯ справедлива для систем с дальнедействующим взаимодействием, в то время как для систем с короткодействующими потенциалами плавление может происходить также посредством двух переходов с промежуточной гексатической фазой, однако при этом переход из кристалла в гексатическую фазу осуществляется в соответствии с теорией БКТ, а гексатическая фаза превращается в изотропную жидкость в результате перехода первого рода (см. обсуждение в разделах 3.7 и 4).

Существует целый ряд книг и обзоров, в которых изложены многие аспекты и приложения теории БКТ. Прежде всего следует упомянуть книгу [40], воспроизводящую диссертацию В.Л. Березинского. Книга [41], изданная к 40-летию первых работ Костерлица и Таулеса, представляет собой сборник статей, посвящённых различным аспектам применения теории БКТ к разнообразным системам (см. обзор этой книги в [42]). Как упоминалось, в 2016 г. был опубликован обзор Дж.М. Костерлица [4], в котором не только рассматриваются многие аспекты и приложения теории БКТ, но и содержатся интересные замечания относительно создания этой теории.

В настоящем обзоре мы представляем основные идеи, положенные в основу теории БКТ, в том числе вопросы, не нашедшие подробного изложения в указанных публикациях, при этом особое внимание уделяется современному состоянию теории и эксперимента в физике двумерного плавления.

2. Теория Березинского – Костерлица – Таулеса

2.1. Переход Березинского – Костерлица – Таулеса в XY-модели и сверхтекучей плёнке

В основе теории БКТХНЯ лежит предложенный Березинским [1, 2], а также Костерлицем и Таулесом [3, 31] механизм разрушения квазидальнего порядка в двумерных системах с непрерывной группой симметрии. Примерами таких систем могут служить двумерные сверхпроводники и сверхтекучие жидкости, в которых параметр порядка имеет вид $\psi = \sqrt{\rho_s} \exp(i\theta)$, где ρ_s — плотность сверхтекучего компонента, θ — фаза параметра порядка, а также классическая XY-модель, описываемая гамильтонианом

$$H = -\frac{J}{2} \sum_{\langle i \neq j \rangle} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j \simeq \frac{J}{2} \int d^2r (\nabla \omega)^2, \quad (1)$$

где J — обменный интеграл, \mathbf{S}_i и \mathbf{S}_j — классические векторы намагниченности, ω — угол между векторами \mathbf{S}_i и \mathbf{S}_j (i и j — ближайшие соседи).

При низких температурах поведение системы определяется гауссовыми флуктуациями. Пользуясь теоремой о средних гауссово распределённых величинах, находим

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

где a_0 — постоянная решётки. Таким образом, в системе существует квазидальний порядок, характеризуемый степенным убыванием корреляций, $\langle \mathbf{S}(\mathbf{r}) \mathbf{S}(\mathbf{r}_0) \rangle \propto r^{-\eta}$, в то время как при высоких температурах корреляции экспоненциально убывают, $\langle \mathbf{S}(\mathbf{r}) \mathbf{S}(\mathbf{r}_0) \rangle \propto \exp(-r/\xi)$ (см., например, [14]). Механизм разрушения квазидальнего порядка предложен в упоминавшихся выше работах Березинского, Костерлица и Таулеса. Ими показано, что разрушение квазидальнего порядка происходит в результате образования в системе свободных топологических дефектов — вихрей, описываемых уравнением

$$\frac{\delta H}{\delta \omega} = J \nabla^2 \omega = 0, \quad (3)$$

решение которого имеет вид

$$\omega = q \arctan \frac{y}{x}, \quad \mathbf{v}_q = \nabla \omega = \frac{q}{r} \mathbf{e}_\varphi. \quad (4)$$

Здесь q — топологический заряд вихря, $q = \pm 1, \pm 2, \dots$, \mathbf{e}_φ — единичный вектор в полярной системе координат с началом в центре вихря. При этом $\oint (\nabla \omega) dl = 2\pi q$, где интеграл берётся по контуру вокруг вихря.

Вихрь представляет собой топологический дефект, который *не может быть* преобразован в основное состояние, в котором все спины направлены в одну сторону, посредством непрерывных вращений. На рисунке 1 показаны два вихря на квадратной решётке с $q = +1$ и $q = -1$, а на рис. 2 приведён диполь, состоящий из вихря и антивихря. Эта конфигурация может быть переведена в основное состояние непрерывным образом.

Температура перехода может быть определена из простых энергетических соображений: энергия отдельного вихря, получаемая из (1), имеет вид

$$E_v = \frac{J}{2} \int_0^L \frac{2\pi}{r} dr = J\pi \ln \frac{L}{a}, \quad (5)$$

где L — размер системы. Изменение свободной энергии при появлении вихря выражается как $F = E_v - TS$, где $S = 2k_B \ln(L/a)$ — энтропия вихря, которая пропорцио-

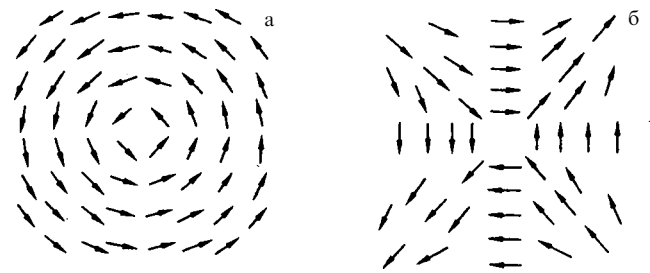


Рис. 1. Положительный (а), $q = +1$, и отрицательный (б), $q = -1$, вихри на квадратной решётке.

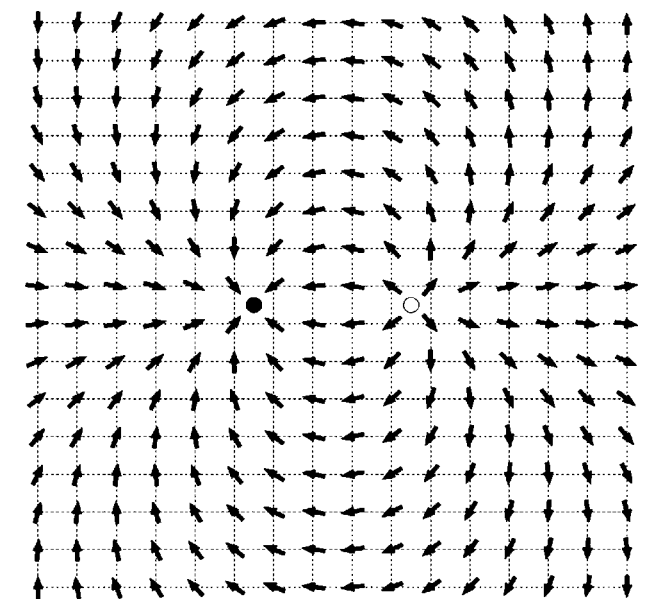


Рис. 2. Диполь положительного и отрицательного вихрей на квадратной решётке.

нальна логарифму площади системы, k_B — постоянная Больцмана. Величина $F = (J\pi - 2k_B T) \ln(L/a)$ при $T \geq T_{\text{BKT}} = \pi J / (2k_B)$ оказывается отрицательной, так что появление вихря становится энергетически выгодным.

Из уравнения (2) следует, что при $T = T_{\text{BKT}}$ корреляционная функция имеет вид $\langle \mathbf{S}(\mathbf{r}) \mathbf{S}(\mathbf{0}) \rangle \propto r^{-1/4}$. Таким образом, в точке перехода значение показателя степени для корреляционной функции $\eta = 1/4$.

Эта простая физическая картина, однако, не является полностью адекватной, так как связанные пары противоположно "заряженных" вихрей не разрушают квазидальнего порядка и имеют конечную энергию (см. рис. 2). Такие пары могут существовать при низких температурах. Приведённый гамильтониан для подсистемы вихрей эквивалентен гамильтониану двухкомпонентного двумерного кулоновского газа [3, 43]:

$$H_c = -\pi J \sum_{i < j} q(\mathbf{r}_i) q(\mathbf{r}_j) \ln \frac{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}{a} + E_c \sum_i q^2(\mathbf{r}_i). \quad (6)$$

Гармоническое приближение, использованное при выводе (6), несправедливо при малых r , поэтому введена энергия ядра E_c , для того чтобы учесть вклад от области малых r порядка диаметра ядра a . E_c играет роль химического потенциала кулоновского газа.

В точке фазового перехода среднеквадратичное расстояние между вихрями $\langle r^2 \rangle$, образующими диполь, обращается в бесконечность:

$$\langle r^2 \rangle \propto \int_a^\infty r^2 \exp\left(-\frac{E(r)}{T}\right) r dr = \int_a^\infty r^{3-1/(2\Delta)} dr, \quad (7)$$

где $\Delta = k_B T / (4\pi J)$. Здесь использована формула (6) для $E(r)$. Интеграл (7) расходится на больших r при $\Delta \geq 1/8$.

Сверхтекучая плёнка описывается гамильтонианом, совпадающим по виду с (1), с заменой $J \rightarrow \hbar^2 \rho_s(T) / m^2$, где m — масса атома ^4He , $\rho_s(T)$ — плотность сверхтекучего компонента. В этом случае $\Delta = k_B T / (4\pi J) = k_B T m^2 / (4\pi \hbar^2 \rho_s(T))$. Из условия $\Delta = 1/8$ получаем, что для плёнки сверхтекучего гелия отношение сверхтекучей плотности к температуре перехода, найденное теоретически Костерлицем и Нельсоном [44] и подтверждённое экспериментально [45, 46], оказалось комбинацией мировых постоянных:

$$\frac{\rho_s(T_{\text{BKT}})}{T_{\text{BKT}}} = \frac{2m^2}{\pi \hbar^2}. \quad (8)$$

Интересно, что фазовый переход БКТ сочетает в себе черты скачкообразности и непрерывности: энтропия, площадь и даже теплоёмкость изменяются непрерывно, но поперечная жёсткость (сверхтекучая плотность) убывает скачком до нуля.

Механизм перехода БКТ [1–3] представляет собой диссоциацию разрежённого газа вихревых пар, при этом необходимо учесть экранирование кулоновского потенциала за счёт термически возбуждённых пар. Диссоциация происходит при температуре, при которой диэлектрическая проницаемость двумерного кулоновского газа расходится.

Теория БКТ представляет собой ренормгрупповое рассмотрение эффектов экранирования. 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_{BKT} к универсальному предельному значению, которое затем скачком обращается в нуль. Уравнения, описывающие перенормировку параметров системы в окрестности перехода, были получены в работе [3], однако из-за не вполне корректного приближения их не удалось правильно решить. Неточность исправлена в работе Янга [47], в результате чего получена система ренормгрупповых уравнений, имеющая в настоящее время хорошо известный вид [4, 14, 31, 43, 47]:

$$\begin{aligned} \frac{dy(l)}{dl} &= (2 - \pi K(l, T)) y(l), \\ \frac{dK^{-1}(l, T)}{dl} &= 4\pi^3 y^2(l), \end{aligned} \quad (9)$$

где $l = \ln r$, y — фугитивность. Решение уравнений (9) обсуждалось неоднократно (см., например, [4, 14, 41, 43]), поэтому мы не будем останавливаться на этом детально. Заметим только, что уравнения (9) справедливы при $y \ll 1$. Учитывая, что $y \propto \exp(-E_c / (k_B T))$, можно заключить, что они соответствуют случаю больших энергий ядра топологического дефекта. Это очень важное обстоятельство, к обсуждению которого мы вернёмся ниже. В результате решения системы (9) 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, определяемой начальными значениями $K_0^{-1}(l, T)$, зависящими от температуры. Температура перехода T_{BKT} определяется как максимальная температура, при которой перенормированное значение $K^{-1}(l, T)$ остаётся конечным при $l \rightarrow \infty$. При $T = T_{\text{BKT}}$ и $l \rightarrow \infty$ получаем соотношение

$$K(l \rightarrow \infty, T_{\text{BKT}}) = \frac{J_T(l \rightarrow \infty, T_{\text{BKT}})}{T_{\text{BKT}}} = \frac{2}{\pi}, \quad (10)$$

где J_T — перенормированное значение обменного интеграла. Следует отметить, что температура перехода, полученная с помощью метода ренормгруппы, формально совпадает с температурой, вычисленной выше из простых энергетических соображений, с заменой константы связи её перенормированным значением. Физический смысл перенормировки достаточно прост: при увеличении $l = \ln r$ исчезает влияние вихрей, связанных в пары, и из перенормированного гамильтониана удаляется часть, соответствующая топологическим дефектам. В результате в этой области устанавливается 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, $y(l, T)$ и $K^{-1}(l, T)$, обращаются в бесконечность при $l \rightarrow \infty$.

При температурах $T > T_{\text{BKT}}$ корреляционная функция убывает экспоненциально, при этом корреляционная длина экспоненциально стремится к бесконечности при приближении температуры к температуре перехода сверху [4, 14, 41, 43]:

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

Уравнения (9) выведены Костерлицем [31] (см. также работу Янга [47]) в рамках модели двумерного кулоновского газа. Позднее они были вновь выведены стандартными методами квантовой теории поля в работах [49–51] с использованием представления статистической суммы двумерного кулоновского газа в рамках теории поля с гамильтонианом в форме синус-Гордона [43]. В работе [51] получено следующее приближение в разложении по малым параметрам y и $2 - \pi K(l, T)$.

Попытка выйти за пределы приближения, соответствующего низшему порядку в разложении по степеням фугитивности y при выводе уравнений ренормгруппы, была сделана в цикле работ Миннхагена с соавторами [43, 52–64]. В рамках теории синус-Гордона и диэлектрического формализма была получена система нелинейных интегро-дифференциальных уравнений, приводящая при малых значениях y к той же точке перехода БКТ. Поведение системы в окрестности этой точки соответствует результатам, полученным из стандартной системы (9) и уравнений, выведенных в [51], однако полная фазовая диаграмма оказалась гораздо сложнее. В пределе малой плотности вихрей (большой энергии ядра топологического дефекта) переход описывается в рамках метода ренормгруппы [31] и является непрерывным переходом бесконечного рода. В случае больших плотностей диссоциация вихрей может происходить посредством перехода первого рода, как показано, например, с помощью ренормгрупповых уравнений [43, 61, 62], а также с помощью метода Монте-Карло [63–69]. Линия перехода первого рода заканчивается в критической точке, при этом линия БКТ-перехода непрерывно примыкает к линии перехода первого рода при температурах, несколько более низких, чем критическая температура. Оказалось, что в области перехода первого рода нарушается универсальность скачка (8), а показатель степени корреляционной функции $\eta \neq 1/4$.

В работах [70, 71] в рамках теории синус-Гордона также обнаружен переход первого рода в двумерном кулоновском газе.

В работе [48] с использованием подходов Дебая–Хюкеля и Больцмана–Пуассона, дополненных методом, описанным в работе [72] (Debye–Hückel–Bjerrum-Dipole-Ion-Hard-Core — DHBjDINC), была рассчитана фазовая диаграмма двумерного кулоновского газа, представленная на рис. 3. Из фазовой диаграммы видно, что при малых плотностях в системе происходит переход типа БКТ, в процессе которого в ней появляются связанные состояния положительных и отрицательных зарядов. При более высоких плотностях диссоциация связанных состояний реализуется посредством перехода первого рода.

Заметим, что применение стандартных методов классической статистической механики, в первую очередь майеровских диаграмм [73], оказалось довольно успешным для описания поведения двумерного кулоновского газа [74–77]. В частности, в работах [76, 77] с использованием майеровских разложений получены ренормгрупповые уравнения (10).

Отдельно следует упомянуть статью [78], в которой за 10 лет до появления работы [3] при рассмотрении поведения двумерных электролитов впервые было найдено условие диссоциации связанных пар в двумерном кулоновском газе, совпадающее с полученным десятилетием позднее в работах Костерлица и Таулеса условием дис-

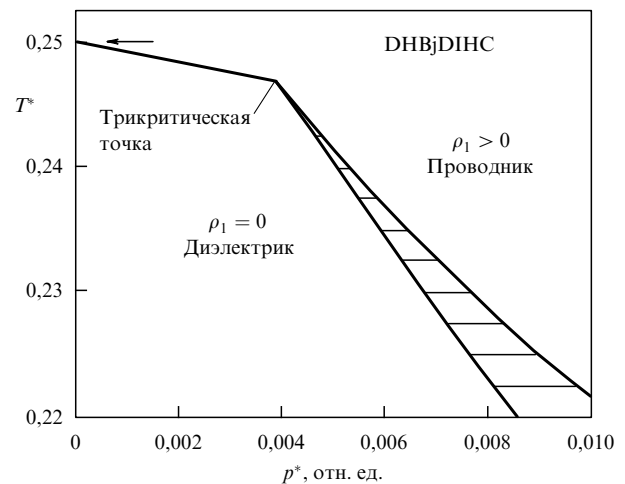


Рис. 3. Фазовая диаграмма двумерного кулоновского газа в переменных температура T^* — плотность ρ^* . Здесь $\rho^* = \rho d^2$, d — диаметр ядра иона, $\rho_1 = \rho_+ + \rho_-$, $T^* = k_B T D / q^2$, D — диэлектрическая проницаемость системы, q — заряд иона. Вычисления проводились в рамках теории Дебая–Хюкеля–Бьеррума для ионных диполей с твёрдым ядром (Debye–Hückel–Bjerrum-Dipole-Ion-Hard-Core — DHBjDINC) [48].

социации топологических дефектов [3, 30]. К сожалению, эта небольшая по объёму (менее одной страницы) статья не получила дальнейшего развития.

2.2. Переход типа Березинского–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 БКТ), придерживаясь однозначной аналогии с XY-моделью или системой вихрей в тонкой сверхтекучей плёнке. Достаточно подробное обсуждение применения теории БКТ к сверхпроводящим двумерным системам можно найти, например, в книге [41], а также в обзорах [4, 43].

В данном разделе рассматривается подход к описанию этого перехода, основанный на использовании кольцевого приближения для вычисления термодинамических величин системы вихрей с дальнедействующим межвихревым взаимодействием.

Как упоминалось, Костерлиц и Таулес [3] предложили теорию для фазового перехода в нейтральных сверхтекучих плёнках, описывающую переход в терминах диссоциации пар вихрь–антивихрь. Однако в [3] ошибочно утверждалось, что в тонкой сверхпроводящей плёнке образование связанных пар вихрь–антивихрь невозможно, поскольку взаимодействие между вихрями в тонкой сверхпроводящей плёнке на большом расстоянии ведёт себя как $1/r$, тогда как для БКТ-перехода необходимо логарифмическое возрастание потенциала взаимодействия.

Применимость теории БКТ для сверхпроводящих плёнок впервые обсуждалась в работе [79]. Для бесконечной сверхпроводящей плёнки с толщиной d и объёмной глубиной проникновения $\lambda_B(T)$ Перл [80] показал, что энергия взаимодействия между вихрями ведёт себя логарифмически при $r \ll \Lambda(T) = 2\lambda_B(T)/d$ и как $1/r$ при $r \gg \Lambda$. Величина Λ может рассматриваться как эффективная глубина проникновения для перпендикулярного к

плоскости плёнки магнитного поля. Можно ожидать, что БКТ-переход произойдёт, если L превысит размер плёнки — последнее условие может быть достигнуто как уменьшением толщины плёнки, так и увеличением степени беспорядка в системе, как впервые было отмечено в [79]. Отсюда можно заключить, что в сверхпроводящей плёнке фазовый переход в строгом смысле отсутствует, так как свободные вихри в ней существуют при всех $T > 0$.

Как показано в работе [79], тонкие плёнки сверхпроводников II рода могут иметь эффективную глубину проникновения порядка нескольких сантиметров, т.е. размер экспериментальных образцов может быть меньше L . В этом случае для описания вихрей в заряженной двумерной сверхтекучей жидкости можно приближённо использовать аналогию с двумерным кулоновским газом [43, 79]. Таким образом, распространив теорию БКТ, развитую для нейтральной сверхтекучей жидкости ^4He , на тонкие сверхпроводящие плёнки, авторы работы [79] показали, что

$$k_B T_{\text{BKT}} = \frac{\varphi_0^2}{16\pi^2} \frac{1}{L(T_{\text{BKT}})}, \quad (11)$$

где $\varphi_0 = hc/(2e)$ — квант потока, при этом оказалось, что в случае сверхпроводников с примесями T_{BKT} ниже критической температуры Бардина – Купера – Шриффера (БКШ) T_c . Заметим, что T_{BKT} не соответствует термодинамической неустойчивости.

Следует отметить, что иногда возникает недопонимание 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 [81].

При $T > 0$ сверхпроводящая плёнка всегда имеет конечную плотность свободных вихрей, ϱ_{\pm} , с магнитным моментом, ориентированным по направлению (+) или противоположно направлению (–) внешнего магнитного поля H . Эти свободные вихри являются ответственными за диссипацию энергии и приводят к образованию "хвоста" сопротивления в области низких температур. Сопротивление описывается формулой Бардина – Стефена [82]

$$\frac{R}{R_N} = 2\pi\xi^2(\varrho_+ + \varrho_-), \quad (12)$$

где R — сопротивление, вызванное движением вихрей, R_N — сопротивление плёнки в нормальном состоянии, ξ — корреляционная длина. Следовательно, для вычисления сопротивления сверхпроводника, обусловленного движением вихрей, должны быть известны соотношения для плотности свободных вихрей как функции температуры и поля. Эти соотношения можно получить с помощью теории двумерного кулоновского газа [43] в рамках метода ренормгруппы [31, 43, 83].

Существование перехода типа БКТ подтверждается экспериментально [43, 55 – 57, 84 – 99].

Вместе с тем имеются очевидные недостатки в описании поведения сверхпроводящей плёнки в рамках модели двумерного кулоновского газа. Вид функции R/R_N , полученной с помощью уравнений ренормгруппы, может быть обоснован только в малом температурном интер-

вале, $T_{\text{BKT}} < T \ll T_c$, в то время как основная масса экспериментальных результатов относится к температурам вне этой области. В области температур, достаточно близкой к T_{BKT} , метод ренормгруппы не применим к сверхпроводникам [43]. Кроме того, "хвост" сопротивления в области низких температур не может быть описан в рамках теории БКТ.

В этом разделе обсуждается статистическая теория плазмы вихрей в двумерных сверхпроводниках, в которой преодолена часть указанных выше трудностей и предложен способ вычисления величин в правой части уравнения (12) во всей области температур $0 < T < T_c$. Изложение основывается на работах [100 – 104].

2.2.1. 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. Тогда свободная энергия вихря может быть выражена в виде [82, 105 – 107]

$$F = \varepsilon N d + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j}^N s_i s_j \int_0^d dz V(\mathbf{r}_i(z) - \mathbf{r}_j(z)) + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \varepsilon \int_0^d dz \left| \frac{d\mathbf{r}_i}{dz} \right|^2, \quad (13)$$

где $dz V(\mathbf{r}_i(z) - \mathbf{r}_j(z))$ — потенциал взаимодействия между слоями толщиной dz двух вихрей, имеющих координаты $\mathbf{r}_i(z)$ и $\mathbf{r}_j(z)$, $s_i = \pm 1$. Последний член в правой части (13) получен из разложения полной энергии линии вихря: $E = \varepsilon \int_0^d (1 + |d\mathbf{r}_i/dz|^2)^{1/2} dz$. Если предположить, что координаты вихря медленно изменяются с изменением z , то можно получить потенциал, локальный по z : вихри взаимодействуют между собой на одинаковой высоте z . Это приближение является справедливым для объёмных образцов только в случае вихрей, параллельных z , в противоположном случае тонкой плёнки оно точно выполняется в пределе $d \rightarrow 0$.

Можно показать [100 – 104], что энергия Гиббса N взаимодействующих вихрей выражается в виде

$$G(H, T) = \left(\varepsilon - \frac{\varphi_0 H}{4\pi} \right) N_+ d + \left(\varepsilon + \frac{\varphi_0 H}{4\pi} \right) N_- d + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j}^N s_i s_j \int_0^d dz V(\mathbf{r}_i(z) - \mathbf{r}_j(z)) + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \varepsilon \int_0^d dz \left| \frac{d\mathbf{r}_i}{dz} \right|^2 - \frac{1}{8\pi} \frac{\mathcal{N} B^2}{1 - \mathcal{N}}, \quad (14)$$

где H — внешнее поле, B — индукция, \mathcal{N} — коэффициент размагничивания.

Каноническая статистическая сумма для системы, описываемой уравнением (14), имеет вид [105, 106]

$$Z_N = \frac{\Gamma^N}{N_+! N_-!} \int d\mathbf{r}'_1 \dots \int d\mathbf{r}'_{N'} \int d\mathbf{r}_1 \dots \int d\mathbf{r}_N \rho(\mathbf{r}'_1, \dots, \mathbf{r}'_{N'}, \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N; d), \quad (15)$$

где $(\Gamma^N / N_+! N_-!) \rho(\mathbf{r}'_1, \dots, \mathbf{r}'_{N'}, \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N; d)$ представляет собой статистическую сумму для N вихрей с закреплён-

ными концами: $(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$ при $z = 0$ и $(\mathbf{r}'_1, \dots, \mathbf{r}'_N)$ при $z = d$. Можно представить $\rho(\mathbf{r}'_1, \dots, \mathbf{r}'_N, \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N; d)$ в виде континуального интеграла по линиям вихрей $\{\mathbf{r}_i(z)\}$:

$$\rho(\mathbf{r}'_1, \dots, \mathbf{r}'_N, \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N; d) = \int D\mathbf{r}_1(z) \dots \int D\mathbf{r}_N(z) \exp(-\beta G), \quad (16)$$

где $\beta = 1/(k_B T)$ и использовано фейнмановское определение функционального интегрирования [108]. В случае конечного d статистическая механика системы, описываемая уравнениями (15) и (16), обсуждалась в деталях Нельсоном и Сеунгом [106].

Здесь мы рассматриваем противоположный случай, $d \rightarrow 0$, который соответствует "высокотемпературному пределу" ($\beta\hbar \rightarrow 0$) для континуального интеграла с мнимым временем [108]. В этом случае свободная энергия Гиббса $G(H, T)$ (см. уравнение (14)) в показателе экспоненты в правой части (16) может быть аппроксимирована выражением

$$G(H, T) = -\mu_+ N_+ - \mu_- N_- + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j}^{N_+ + N_-} s_i s_j \Phi(r_{ij}) + \frac{1}{2} \varepsilon \sum_{i=1}^{N_+ + N_-} \frac{(\mathbf{r}'_i - \mathbf{r}_i)^2}{d} + \delta G, \quad (17)$$

где $\mu_+ = -[\varepsilon - \varphi_0 H / (4\pi)] d$, $\mu_- = -[\varepsilon + \varphi_0 H / (4\pi)] d$, $\Phi(r_{ij}) = dV(\mathbf{r}_i(0) - \mathbf{r}_j(0))$, $\delta G = -(8\pi)^{-1} \mathcal{N} B^2 (1 - \mathcal{N})^{-1} \Omega d$, Ω — площадь сверхпроводящей плёнки.

Для тонкой сверхпроводящей плёнки энергия на единицу длины вихря ε имеет вид [80]

$$\varepsilon = \pi r_0^2 \xi^2 \left(\frac{H_c^2}{8\pi} \right) + \frac{\varphi_0^2}{16\pi \Lambda d} \left(H_0 \left(\frac{\xi}{\Lambda} \right) - Y_0 \left(\frac{\xi}{\Lambda} \right) \right), \quad (18)$$

где первый член представляет собой вклад от ядра вихря, r_0 — радиус ядра вихря (в единицах ξ), H_c — термодинамическое критическое поле, H_0 — функция Струве, Y_0 — функция Неймана. 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 [80]

$$\begin{aligned} \Phi(r_{ij}) &= \frac{\varphi_0^2}{8\pi \Lambda} \left[H_0 \left(\frac{r_{ij}}{\Lambda} \right) - Y_0 \left(\frac{r_{ij}}{\Lambda} \right) \right], \\ \Phi(r_{ij}) &\approx -\frac{\varphi_0^2}{4\pi^2 \Lambda} \ln \frac{r_{ij}}{\Lambda}, \quad r_{ij} \ll \Lambda, \\ \Phi(r_{ij}) &\approx \frac{\varphi_0^2}{4\pi^2 r_{ij}}, \quad r_{ij} \gg \Lambda. \end{aligned} \quad (19)$$

Поправки к этой энергии, обусловленные малой, но конечной толщиной плёнки, получены в работе [81].

Подставляя (17) в (16) и интегрируя в (15) по всем $\{\mathbf{r}'_i\}$, находим

$$Z_N = \exp(-\beta \delta G) \frac{z_+^{N_+} z_-^{N_-}}{N_+! N_-!} \times \int d\mathbf{r}_1 \dots \int d\mathbf{r}_N \exp \left(-\frac{\beta}{2} \sum_{i \neq j} s_i s_j \Phi(r_{ij}) \right), \quad (20)$$

где активности z_+ и z_- имеют вид $z_{\pm} = \Gamma \exp(\beta \mu_{\pm})$.

Оценим константу Γ . Положив $N = 1$ и $H = 0$ в уравнении (20), получим ($z_+ = z_- = z$)

$$Z_1 = z \Omega. \quad (21)$$

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

$$F_{\text{vor}} = \varepsilon d - TS. \quad (22)$$

Энтропия S имеет вид $S = \ln(\Omega/\zeta)$, где ζ — площадь, занимаемая вихрем. Предполагается, что ζ пропорциональна площади области, занимаемой ядром вихря: $\zeta = c \xi^2$, где c — постоянная, не зависящая от температуры [43]. Используя (21) и (22), получим

$$\Gamma = \frac{1}{c \xi^2}. \quad (23)$$

В этом случае большая каноническая сумма имеет вид

$$Z = \exp(-\beta \delta G) \sum_{N_+, N_- = 0}^{\infty} \frac{z_+^{N_+} z_-^{N_-}}{N_+! N_-!} \int d\mathbf{r}_1 \dots \int d\mathbf{r}_N \times \exp \left(-\frac{\beta}{2} \sum_{i \neq j} s_i s_j \Phi(r_{ij}) \right) = \exp(-\beta \delta G) Z'. \quad (24)$$

Сумма в (24) берётся по всем конфигурациям с различными N_+ и N_- .

Свободная энергия Гиббса, связанная с (24), выражается как [73]

$$G = -k_B T \ln Z = \delta G + k_B T \left[\varrho_+ \left(\ln \frac{\varrho_+}{z_+} - 1 \right) + \varrho_- \left(\ln \frac{\varrho_-}{z_-} - 1 \right) - S \right] \Omega, \quad (25)$$

$$S = \sum_{n_+ + n_- \geq 2} \sum_{n_+} \sum_{n_-} \beta_{n_+ n_-} \varrho_+^{n_+} \varrho_-^{n_-}, \quad (26)$$

где $\beta_{n_+ n_-}$ — сумма неприводимых майеровских диаграмм [73]

$$\begin{aligned} \beta_{n_+ n_-} &= (n_+! n_-! \Omega)^{-1} \int d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_v \sum \prod f_{ij}, \\ f_{ij} &= \exp(-\beta \Phi(r_{ij})) - 1. \end{aligned} \quad (27)$$

Здесь $v = n_+ + n_-$, оператор произведения соответствует связанным диаграммам без узловых вершин, для которых $1 < i < j < v$, а сумма берётся по всем этим диаграммам.

Индукция B связана с плотностями свободных вихрей ϱ_+ и ϱ_- соотношением $B = \varphi_0(\varrho_+ - \varrho_-)$. Подстановка последнего выражения в (25) даёт G как функцию T , H , ϱ_+ и ϱ_- .

Чтобы получить уравнения для ϱ_+ и ϱ_- , можно воспользоваться вириальным разложением [73, 109]

$$\varrho_{\pm} = z_{\pm} \exp \left(\frac{\partial}{\partial \varrho_{\pm}} S \right). \quad (28)$$

Заметим, что уравнение (28) может быть выведено из условия экстремума свободной энергии G :

$$\frac{\partial G}{\partial \varrho_+} = \frac{\partial G}{\partial \varrho_-} = 0. \quad (29)$$

Вследствие дальнего действия характера взаимодействия (19) появляется проблема сходимости отдельных членов в майеровском разложении (26). Эта проблема может быть решена с помощью кольцевого приближе-

ния, хорошо известного из физики плазмы. В этом приближении [109]

$$S = \sum_{v \geq 2} S_v, \\ S_v = \sum_{n_+} \sum_{n_-} \frac{(v-1)!}{2} \frac{(-\beta \varrho_+)^{n_+}}{n_+!} \frac{(-\beta \varrho_-)^{n_-}}{n_-!} J_v = \\ = \frac{1}{2^v} [-\beta(\varrho_+ + \varrho_-)]^v J_v, \quad (30)$$

где $J_v = \Omega^{-1} \int d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_v \Phi(r_{12}) \Phi(r_{23}) \dots \Phi(r_{v1})$. Величина J_v может быть вычислена с помощью преобразования Фурье с учётом того, что преобразование Фурье $\tilde{\Phi}(q)$ потенциала (19) имеет вид

$$\tilde{\Phi}(q) = \frac{\varphi_0^2}{2\pi A} \frac{1}{q(q+1/A)}. \quad (31)$$

Вычисления с использованием уравнений (30) и (31) показывают, что

$$-4\pi S = \begin{cases} \frac{1}{2} \kappa^2 - \frac{1}{2} \left(\kappa^2 - \frac{1}{2A^2} \right) \ln(\kappa^2 A^2) - \frac{\omega}{A} \arctan(2\omega A), \\ \kappa^2 - \frac{1}{4A^2} \geq 0, \\ \frac{1}{2} \kappa^2 - \frac{1}{2} \left(\kappa^2 - \frac{1}{2A^2} \right) \ln(\kappa^2 A^2) + \frac{\sigma}{2A} \ln \frac{1+2A\sigma}{1-2A\sigma}, \\ \kappa^2 - \frac{1}{4A^2} < 0, \end{cases} \quad (32)$$

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

2.2.2. Система вихрей в отсутствие магнитного поля. Обсудим свойства сверхпроводящей магнитной плёнки в отсутствие внешнего магнитного поля. В этом случае $\varrho_+ = \varrho_- = \varrho/2$, $z_+ = z_- = z$. Подстановка (32) в (28) даёт

$$\varrho = 2z \exp \left[\beta \frac{\varphi_0^2}{16\pi^2 A} \left(\ln(\kappa^2 A^2) + \frac{1}{\omega A} \arctan(2\omega A) \right) \right], \\ \kappa^2 - \frac{1}{4A^2} \geq 0, \quad (33)$$

$$\varrho = 2z \exp \left[\beta \frac{\varphi_0^2}{16\pi^2 A} \left(\ln(\kappa^2 A^2) + \frac{1}{2\sigma A} \ln \frac{1+2\sigma A}{1-2\sigma A} \right) \right], \\ \kappa^2 - \frac{1}{4A^2} < 0, \quad (34)$$

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

Используя уравнения (25) и (32), можно записать $G(T)$ в виде

$$\frac{G(T)}{k_B T \Omega} = \varrho \left(\ln \frac{\varrho}{2z} - 1 \right) + \frac{1}{4\pi} \times \begin{cases} \frac{1}{2} \kappa^2 - \frac{1}{2} \left(\kappa^2 - \frac{1}{2A^2} \right) \ln(\kappa^2 A^2) - \frac{\omega}{A} \arctan(2\omega A), \\ \kappa^2 - \frac{1}{4A^2} \geq 0, \\ \frac{1}{2} \kappa^2 - \frac{1}{2} \left(\kappa^2 - \frac{1}{2A^2} \right) \ln(\kappa^2 A^2) + \frac{\sigma}{2A} \ln \frac{1+2A\sigma}{1-2A\sigma}, \\ \kappa^2 - \frac{1}{4A^2} < 0. \end{cases} \quad (35)$$

Подставляя уравнения (33) и (34) в (35), можно выразить свободную энергию в виде "уравнения состояния" [73, 109]:

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

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

Поведение ϱ в зависимости от T в окрестности $T_{\text{ВКТ}}$ и для малых T можно получить в явном виде. Рассмотрим эти случаи.

При $T \rightarrow 0$, как видно из уравнения (34), плотность вихрей $\varrho \rightarrow 0$,

$$\varrho = \frac{2}{c\xi^2} \exp \left(-\frac{\varepsilon d}{k_B T} \right). \quad (36)$$

Теперь рассмотрим приближённые решения уравнений (33) и (34) в окрестности $T_{\text{ВКТ}}$. В этом случае необходимо решить уравнение (33), 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 (33), и тогда уравнение (33) сводится к

$$\kappa^2 A^2 = \frac{z\beta\varphi_0^2 A}{\pi} \exp \left[\beta \frac{\varphi_0^2}{16\pi^2 A} \ln(\kappa^2 A^2) \right]. \quad (37)$$

Решение уравнения (37) имеет вид

$$\varrho = \frac{2\pi k_B T}{\varphi_0^2 A} q^{k_B T / (k_B T - \Theta(T))}, \quad (38)$$

где $q = z\beta\varphi_0^2 A / \pi$, $\Theta(T) = \varphi_0^2 / (16\pi^2 A(T))$. Уравнение (38) подобно уравнению, используемому для описания перехода типа Костерлица – Таулеса [43]. В соответствии с уравнением (38) $\varrho \rightarrow 0$ при $T \rightarrow T_{\text{ВКТ}}$ сверху, где $T_{\text{ВКТ}}$ определяется уравнением $k_B T_{\text{ВКТ}} = \Theta(T_{\text{ВКТ}})$ (см. уравнение (11)) (при условии $q < 1$).

Заметим, что для точных уравнений (33) и (34) нет фазового перехода в том смысле, что плотность вихрей ϱ никогда не обращается в нуль точно, однако ϱ изменяется очень быстро в окрестности $T_{\text{ВКТ}}$ вследствие диссоциации пар вихрь – антивихрь.

Параметры для конкретных вычислений взяты из экспериментальной работы [85], в которой подробно изучены свойства плёнки Nb толщиной 20 Å. В этом случае

$$\xi(t) = \xi(0)/\sqrt{1-t} \quad \text{и} \quad \lambda_B(t) = \lambda(0)/\sqrt{1-t},$$

где $t = T/T_c$, $T_c \simeq 3,66$ К, $\xi(0) \simeq 104$ Å, $\lambda(0) \simeq 1600$ Å. T_c определяется как температура, при которой $R = 0,5R_N$. Из этого условия можно определить константу c . Используя (12), (23) и (33), получим $c = 6\pi$. Выбор радиуса ядра r_0 подробно описан ниже. Здесь вычисления сделаны для двух значений r_0 : 1,25 и 2,3. (Последняя оценка взята из [53].) В общем случае r_0 можно рассматривать как подгоночный параметр.

2.2.3. Зависимость фазового перехода от радиуса ядра вихря (или от энергии ядра вихря). Как обсуждалось выше, существует зависимость формы решений уравнений (33) и (34) от радиуса ядра вихря r_0 вследствие связи между r_0 и энергией ядра вихря (18).

Представим уравнение (33) в виде (см. уравнение (38))

$$\varrho = \frac{2\pi k_B T}{\varphi_0^2 \Lambda} q^{k_B T / (k_B T - \Theta(T))} \times \exp \left[\frac{\Theta(T)}{k_B T - \Theta(T)} \frac{1}{\omega \Lambda} \arctan(2\omega \Lambda) \right]. \quad (39)$$

Из уравнения (39) следует, 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 стремится к бесконечности при приближении T к $T_{\text{ВКТ}}$ сверху. Критическое значение радиуса ядра вихря r_0^c может быть найдено из уравнения $q(T_{\text{ВКТ}}, r_0) = 1$: $r_0^c = 1,2237$.

Поведение решений уравнений (33) и (34) (см. [100–102]) можно рассматривать как указание на то, что при $r_0 < r_0^c$ диссоциация вихревых пар происходит посредством перехода первого рода. Однако надо отметить очевидные недостатки этих решений. Прежде всего, плотность свободных вихрей стремится к бесконечности при приближении к $T_{\text{ВКТ}}$ сверху. Кроме того, существует малая окрестность $T_{\text{ВКТ}}$, в которой решение не определено. Возможной причиной стремления к бесконечности плотности свободных вихрей может быть использование при выводе уравнений (33)–(35) предположения о точности вихрей, при котором радиус ядра входит в уравнение только через энергию ядра вихря.

Для учёта конечности размера ядра вихря представим энергию взаимодействия в следующем виде [43, 52]:

$$\tilde{\Phi}(r) = \int d^2 r' d^2 r'' n(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \Phi(|\mathbf{r}' - \mathbf{r}''|) n(r''), \quad (40)$$

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

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

$$\tilde{\Phi}_q = \frac{\varphi_0^2}{2\pi \Lambda} \frac{n_q^2}{q(q+1/\Lambda)}, \quad (41)$$

где n_q — преобразование Фурье распределения заряда отдельного вихря $n(r)$,

$$n_q = \int d^2 r \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}) n(r), \quad (42)$$

$n(r) = 0$ при $r \rightarrow \infty$ и $n(r) \neq 0$ в окрестности $r \leq \xi$.

Используя кольцевое приближение, легко показать, что свободная энергия G для неточечных вихрей с взаимодействием (40) выражается как

$$\frac{G}{k_B T \Omega} = 2\varrho \left(\ln \frac{\varrho}{2z} - 1 \right) + \frac{1}{8\pi^2} \int d^2 q [\ln(1 + \kappa^2 \tilde{u}_q) - \kappa^2 \tilde{u}_q], \quad (43)$$

где

$$\tilde{u}_q = \frac{n_q^2}{q(q+1/\Lambda)}. \quad (44)$$

Для того чтобы получить уравнения для ϱ , можно использовать вириальное разложение [73] или условие экстремума энергии G

$$\frac{\partial G}{\partial \varrho} = 0. \quad (45)$$

Из уравнений (43) и (45) имеем

$$\ln \frac{\varrho}{2z} = -\frac{1}{8\pi^2} \frac{\partial}{\partial \varrho} \int d^2 q [\ln(1 + \kappa^2 \tilde{u}_q) - \kappa^2 \tilde{u}_q]. \quad (46)$$

Выберем следующее распределение $n(r)$:

$$n(r) = \int_{q \leq B} \frac{d^2 q}{4\pi^2} \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r}). \quad (47)$$

Из уравнения (47) получим

$$n_q = \begin{cases} 1, & q \leq B, \\ 0, & q > B. \end{cases} \quad (48)$$

Заметим, что поведение двумерного кулоновского газа мало зависит от детальной формы распределения заряда [53, 54, 70, 71]. Аналогично можно предположить, что простых уравнений (47) и (48) достаточно 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 перпендикулярных плоскости сверхпроводника противоположных вихрей, расположенных на расстоянии r друг от друга, может быть представлена в виде

$$\Delta F_{\text{pair}}(r) = 2\varepsilon + \tilde{\Phi}(r), \quad (49)$$

где энергия отдельного вихря описывается уравнением (см. (18))

$$\varepsilon = \pi r_0^2 \xi^2 d \frac{H_c^2}{8\pi} + \frac{\varphi_0^2}{16\pi \Lambda} \left(H_0 \left(\frac{\xi}{\Lambda} \right) - Y_0 \left(\frac{\xi}{\Lambda} \right) \right). \quad (50)$$

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

Используя уравнения (46) и (48), находим

$$\ln \frac{\varrho}{2z} = \frac{\beta \varphi_0^2}{16\pi^2 \Lambda} \left\{ \ln \left[\frac{(B+1)^2}{B^2 + B + \xi} \zeta \right] + J(B, \zeta) \right\}, \quad (51)$$

где

$$J(B, \zeta) = \begin{cases} \frac{2}{\sqrt{4\zeta-1}} \left(\arctan \frac{2B+1}{\sqrt{4\zeta-1}} - \arctan \frac{1}{\sqrt{4\zeta-1}} \right), & 4\zeta-1 \geq 0, \\ \frac{1}{\sqrt{1-4\zeta}} \ln \left(\frac{2B+1-\sqrt{1-4\zeta}}{2B+1+\sqrt{1-4\zeta}} \frac{1+\sqrt{1-4\zeta}}{1-\sqrt{1-4\zeta}} \right), & 4\zeta-1 \leq 0, \end{cases} \quad (52)$$

$\zeta = \kappa^2 \Lambda^2$. При $B \rightarrow \infty$ уравнение (51) сводится к точечному пределу (33) и (34).

На рисунке 4 показано поведение $\log_{10}(R/R_N)$ в зависимости от температуры. Величина $\log_{10}(R/R_N)$ вычислена из уравнения (51) при $r_0 = 1,25$. Пунктирная кривая представляет решение уравнения (51), соответствующее пределу $B \rightarrow \infty$. Видно, что переход становится шире, однако качественно поведение не изменяется. Как обсуждалось выше, поведение решения качественно меняется при r_0 , меньшем критического значения $r_0^c = 1,22$. На рисунке 5 показано решение уравнения (51) для

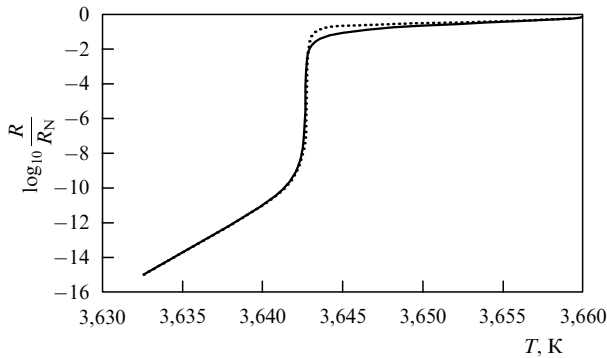


Рис. 4. Величина $\log_{10}(R/R_N)$ как функция температуры, вычисленная с помощью уравнения (51) при $r_0 = 1,25$.

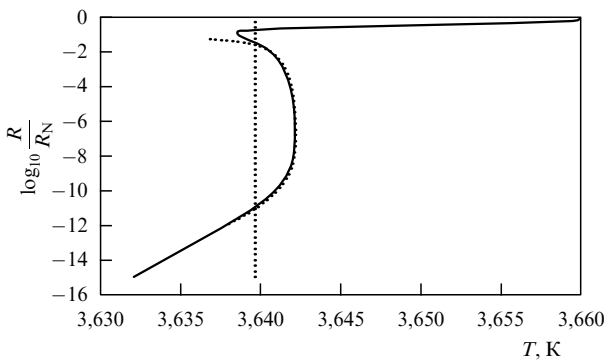


Рис. 5. Величина $\log_{10}(R/R_N)$ как функция температуры, вычисленная с помощью уравнения (51) для $r_0 = 0,9$.

$r_0 = 0,9$, соответствующее неточному пределу (40). Уходящая влево пунктирная кривая на рис. 5 показывает нефизическое решение, соответствующее точечному пределу $B \rightarrow \infty$.

S-образная структура кривой $\log_{10}(R/R_N)$ характерна для перехода первого рода. Температуру перехода можно вычислить с помощью построения, показанного на рис. 6, где представлена свободная энергия Гиббса $G(T)/(k_B\Omega)$, соответствующая сплошной кривой на рис. 5. Температура перехода $T_1 = 3,6396$ К, $T_1 < T_{\text{ВКТ}}$ (вертикальная прямая на рис. 5).

Таким образом, основой представленного рассмотрения являются явные уравнения для плотности свободных вихрей и свободной энергии Гиббса, полученные с по-

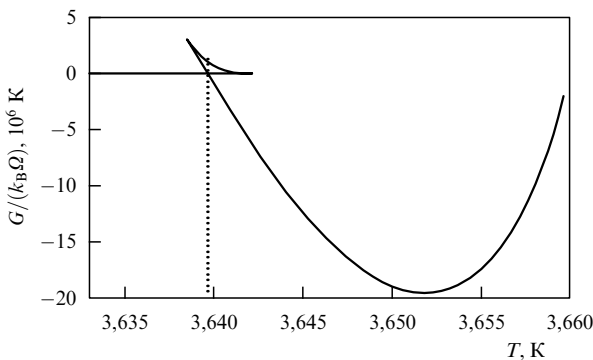


Рис. 6. Свободная энергия Гиббса $G(T)/(k_B\Omega)$, соответствующая сплошной кривой на рис. 5, как функция температуры.

мощью применения кольцевого приближения в случае дальнегодействующего межвихревого потенциала (19). В отсутствие внешнего магнитного поля при больших энергиях ядра плотность свободных вихрей ρ не равна нулю при любых $T \neq 0$, однако можно говорить о переходе типа БКТ в том смысле, что ρ очень быстро изменяется в окрестности температуры $T_{\text{ВКТ}}$. 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 [73, 109]. Было естественным попытаться применить это приближение в двумерном случае. В двух измерениях существуют два вида дальнегодействующих потенциалов, с которыми обычно приходится иметь дело: являющийся решением двумерного уравнения Пуассона логарифмический потенциал, называемый двумерным кулоновским потенциалом (двумерный кулоновский газ [43]), и обычный трёхмерный кулоновский потенциал вида $1/r$, используемый 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. Формула для потенциала межвихревого взаимодействия (19) может рассматриваться как интерполяционное соотношение между формулами, описывающими эти два потенциала, в результате чего в отсутствие магнитного поля изложенная выше теория свободна от расходимостей.

Наблюдаемый экспериментально переход (см., например, рис. 9 в [85]) находится в хорошем качественном согласии с результатами, представленными на рис. 4, однако является более широким. Это 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, [99]), последнее в свою очередь должно вызывать уширение кривых, приведённых на рис. 4.

3. Двумерное плавление

3.1. Особенности кристаллического упорядочения в двух измерениях

Природа двумерного плавления являлась предметом интенсивного обсуждения в течение последних 40 лет [110 – 114]. Значительный прогресс в объяснении плавления в двух измерениях был достигнут после появления теории Хальперина и Нельсона [37, 38] и Янга [39], основанной на идеях Березинского, Костерлица и Таулеса [1 – 3] (теория БКТХНЯ). Эта теория предсказывает, что плавление в двумерном случае может принципиально отличаться от плавления обычных трёхмерных систем [32, 115]. В трёхмерном кристаллическом твёрдом теле нарушены, по сравнению с изотропной жидкостью, две симметрии: трансляционная и вращательная. Эти симметрии не являются независимыми. Действительно, вращение одной части идеального кристалла относительно другой нарушает не только ориентационные, но и трансляционные корреляции. Однако можно

представить состояние конденсированной среды с дальнедействующими корреляциями между направлениями локальных кристаллографических осей, но без дальнего трансляционного порядка [116–121]. Представление об анизотропных жидкостях подобного рода является важной составной частью современных теорий плавления двумерных систем.

Вследствие сильно развитых флуктуаций свойства двумерных кристаллов значительно отличаются от свойств трёхмерных кристаллов. Ещё в середине 1930-х годов Пайерлс и Ландау [122–124] независимо привели аргументы в пользу того, что периодическая решётка не может существовать в случае одного и двух измерений. Аргументы Пайерлса основывались на гармоническом приближении в теории кристаллов. Ландау использовал свою теорию фазовых переходов [14].

Рассмотрим кратко свойства кристаллического упорядочения в двух измерениях [125, 126]. Двумерный аналог обычного трёхмерного кристалла может быть описан с помощью локальной плотности вида $\rho(x, y) = \sum_{\mathbf{R}} \rho_A(\mathbf{r} - \mathbf{R})$, где $\rho_A(\mathbf{r})$ — функция плотности отдельного атома, $\{\mathbf{R}\}$ — узел двумерной решётки. Обозначим через $\mathbf{u}(x, y)$ вектор смещения некоторой малой области кристалла вследствие термодинамических флуктуаций при $T \neq 0$. Вероятность w флуктуации, характеризуемой вектором \mathbf{u} , имеет вид $w \propto \exp[-\delta F/(k_B T)]$, где $\delta F = \int (F - \bar{F}) d^2 r$ — отклонение общей энергии системы от среднего значения \bar{F} , F — свободная энергия на единицу площади двумерной системы. Среднее значение некоторой величины $\langle A \rangle$ вычисляется как [125]

$$\langle A \rangle = \frac{\sum_{\mathbf{u}(\mathbf{r})} A \exp[-\delta F/(k_B T)]}{\sum_{\mathbf{u}(\mathbf{r})} \exp[-\delta F/(k_B T)]},$$

где суммирование проводится по всем возможным значениям вектора $\{\mathbf{u}\}$.

В гармоническом приближении функционал свободной энергии имеет вид

$$\delta F[\mathbf{u}(\mathbf{r})] = \frac{1}{2} \int \lambda_{ijlm} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \frac{\partial u_l}{\partial x_m} d^2 r,$$

где λ_{ijlm} — тензор модулей упругости [127]. Вектор $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ можно разложить в ряд Фурье:

$$\mathbf{u}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{u}_{\mathbf{k}} \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}),$$

где $\mathbf{u}_{-\mathbf{k}} = \mathbf{u}_{\mathbf{k}}^*$, $k \leq 1/d$, d — линейный размер области, характеризуемой вектором $\mathbf{u}(\mathbf{r})$. В этом случае δF принимает вид

$$\delta F[\mathbf{u}] = \frac{1}{2} V \sum_{\mathbf{k}} \lambda_{ijlm} k_j k_m u_{i\mathbf{k}} u_{l\mathbf{k}}^* = \frac{1}{2} V \sum_{\mathbf{k}} \beta_{il}(\mathbf{k}) u_{i\mathbf{k}} u_{l\mathbf{k}}^*,$$

где V — объём системы, а элементы действительного тензора $\beta_{il}(\mathbf{k})$ — квадратичные функции компонент вектора \mathbf{k} . В силу квадратичности выражения для δF среднеквадратичные флуктуации $\mathbf{u}_{\mathbf{k}}$ имеют вид

$$\langle u_{i\mathbf{k}} u_{l\mathbf{k}}^* \rangle = \frac{k_B T}{V} \beta_{il}^{-1}(\mathbf{k}),$$

где β_{ik}^{-1} — тензор, обратный к β_{il} . Тензор $\beta_{il}^{-1}(k)$ можно записать в виде $[A_{il}(\hat{\mathbf{n}})] k^2$, где A_{il} зависит только от направления вектора \mathbf{k} : $\hat{\mathbf{n}} = \mathbf{k}/k$.

Среднеквадратичное смещение $\langle |\mathbf{u}|^2 \rangle$ находится суммированием по \mathbf{k} . Заменяя сумму по \mathbf{k} интегралом,

получим

$$\begin{aligned} \langle |\mathbf{u}|^2 \rangle &= k_B T \int \frac{A_{ii}(\hat{\mathbf{n}})}{k^2} \frac{d^2 k}{(2\pi)^2} = \\ &= \frac{k_B T}{(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} A_{ii}(\varphi) d\varphi \int_0^{1/d} \frac{dk}{k}. \end{aligned} \quad (53)$$

Интеграл по k расходится логарифмически при $k \rightarrow 0$, что приводит к логарифмическому обращению в бесконечность флуктуационного смещения в термодинамическом пределе бесконечной системы. Таким образом, двумерный гармонический кристалл не имеет двумерного трансляционного порядка — этот порядок разрушается при конечной температуре термодинамическими флуктуациями.

Вместе с тем следует отметить, что логарифмическая расходимость — очень медленная (например, оценки [128] показывают, что флуктуационное смещение порядка 10 межатомных расстояний возникает в системе, где число частиц больше числа атомов в видимой части Вселенной). Таким образом, экспериментальные системы могут с достаточно высокой степенью точности рассматриваться как двумерные кристаллы.

Выражение (53) определяет средний квадрат флуктуационного смещения в каждой точке двумерного кристалла. Более строгое объяснение поведения таких систем может быть достигнуто при рассмотрении корреляции флуктуаций в различных точках системы [125].

При $T = 0$ двумерная решётка существует вне зависимости от размеров, так как расходимость связана в первую очередь с тепловыми флуктуациями. Пусть $\rho_0(\mathbf{r})$ — функция плотности системы при $T = 0$. При достаточно низких температурах в системе существуют только длинноволновые флуктуации, т.е. $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ мало изменяется на расстояниях порядка постоянной решётки a (что соответствует флуктуациям с малыми волновыми векторами). В этом случае плотность можно представить в виде $\rho(\mathbf{r}) = \rho_0(\mathbf{r} - \mathbf{u}(\mathbf{r}))$, а корреляция флуктуаций определяется выражением

$$\langle \rho(\mathbf{r}_1) \rho(\mathbf{r}_2) \rangle = \langle \rho_0[\mathbf{r}_1 - \mathbf{u}(\mathbf{r}_1)] \rho_0[\mathbf{r}_2 - \mathbf{u}(\mathbf{r}_2)] \rangle. \quad (54)$$

Функция $\rho_0(\mathbf{r})$ может быть разложена в ряд Фурье по векторам обратной решётки:

$$\rho_0(\mathbf{r}) = \bar{\rho} + \sum_{\mathbf{G} \neq 0} \rho_{\mathbf{G}} \exp(i\mathbf{G}\mathbf{r}).$$

Подставляя последнее выражение в (54) и используя среднее вида

$$\langle \exp[-i\mathbf{G}(\mathbf{u}_1 - \mathbf{u}_2)] \rangle = \exp\left(-\frac{1}{2} G_i G_l \chi_{il}\right),$$

$$\begin{aligned} \chi_{il}(\mathbf{r}) &= \langle (u_{i1} - u_{i2})(u_{l1} - u_{l2}) \rangle = \\ &= k_B T \int \frac{A_{ii}(\hat{\mathbf{n}})}{k^2} 2[1 - \cos(\mathbf{k}\mathbf{r})] \frac{dk_x dk_y}{(2\pi)^2} \approx \\ &\approx \frac{k_B T}{\pi} \bar{A}_{il} \ln(k_{\max} r), \end{aligned}$$

получаем

$$\begin{aligned} g_{\mathbf{G}}(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) &= \langle \rho(\mathbf{r}_1) \rho(\mathbf{r}_2) \rangle - \bar{\rho}^2 \propto \frac{1}{r^{k_B T a_{\mathbf{G}}}} \cos(\mathbf{G}\mathbf{r}), \\ \alpha_{\mathbf{G}} &= \frac{G_i G_l \bar{A}_{il}}{2\pi}, \end{aligned} \quad (55)$$

где для \mathbf{G} берётся тот из основных периодов обратной решётки, для которого α_G имеет наименьшее значение, A_{ij} — среднее по направлениям вектора \mathbf{k} в плоскости.

Хотя убывающие степенным образом корреляции формально исключают дальний порядок, двумерный гармонический кристалл, тем не менее, обладает высокой степенью упорядочения. Структурный фактор двумерного кристалла имеет вид

$$\begin{aligned} S(q) &= \beta \int d\mathbf{r} \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r}) \langle \rho(0) \rho(\mathbf{r}) \rangle = \\ &= \beta \int d\mathbf{r} \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r}) \frac{\exp(i\mathbf{G}\mathbf{r})}{r^{n_G}} = \\ &= \frac{\beta}{|\mathbf{G}-\mathbf{q}|^{2-n_G}} \int_0^\infty x^{1-n_G} dx \int_0^{2\pi} d\phi \exp(-ix \cos \phi). \end{aligned} \quad (56)$$

Оставшийся интеграл не зависит от вида модели и равняется постоянной, зависимость от температуры сосредоточена в первом множителе. Таким образом, степенная сингулярность заменяет δ -образную, характерную для трёхмерного кристалла. В реальных экспериментах иногда достаточно сложно отличить степенное убывание корреляционной функции от настоящего дальнего порядка. Упорядочение с медленным степенным убыванием корреляций принято называть квазидальным порядком. Квазидальний порядок является следствием размерности системы.

Вместе с тем в двумерных системах существует настоящий дальний порядок — ориентационное упорядочение связей. В 1968 г. Мермин [36] рассмотрел поведение кристаллического упорядочения в двумерной системе частиц, взаимодействующих посредством парного потенциала. Предполагая довольно общие граничные условия, он показал, что фурье-компоненты плотности с $k \neq 0$ исчезают в термодинамическом пределе, т.е. в системе отсутствует периодический дальний порядок. Мермин также показал, что усреднённое направление вектора, соединяющего два любых соседних атома, при конечной температуре не отличается от направления этого вектора при $T = 0$, т.е. в двумерной решётке, хотя она и не обладает периодическим дальним порядком, существует дальний ориентационный порядок.

Для иллюстрации поведения ориентационного упорядочения рассмотрим гармонический кристалл. В континуальном приближении угол между локальной кристаллографической осью и некоторой осью идеальной решётки имеет вид

$$\vartheta(x, y) = \frac{1}{2} (\partial_x u_y - \partial_y u_x). \quad (57)$$

Используя фурье-разложение $\vartheta(x, y)$,

$$\vartheta(x, y) = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} (ik_x u_{y,\mathbf{k}} - ik_y u_{x,\mathbf{k}}) \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}), \quad (58)$$

получаем для среднего $\langle \vartheta^2 \rangle$ выражение

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

где $f_x(\varphi) = \cos \varphi$, $f_y(\varphi) = \sin \varphi$. Таким образом, средний квадрат флуктуаций угла $\vartheta(x, y)$ остаётся конечным даже для бесконечного образца, т.е. ориентация направления связи "передаётся" через весь кристалл.

Корреляционная функция направлений связей имеет вид

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

Это выражение конечно даже при $r \rightarrow \infty$, т.е. ориентационный порядок является дальнедействующим.

Прежде чем перейти к рассмотрению современных теорий двумерного плавления, подчеркнём, что вследствие высокой упорядоченности двумерной решётки такие топологические дефекты, как дислокации и дисклинации, оказываются хорошо определёнными, несмотря на отсутствие дальнего периодического трансляционного порядка. Это существенно, так как именно дислокации и дисклинации играют основную роль в современных теориях двумерного плавления.

3.2. Теория Березинского – Костерлица – Таулеса – Хальперина – Нельсона – Янга

Как обсуждалось в разделе 3.1, теория БКТХНЯ, которая основывается на рассмотрении поведения топологических дефектов — дислокаций и дисклинаций, предсказывает, что плавление может происходить посредством двух непрерывных переходов. В то же время существует ряд теорий, предсказывающих, что плавление может осуществляться посредством перехода первого рода. Это противоречие инициировало большое количество как экспериментальных работ, так и работ по компьютерному моделированию, однако полная ясность в этом вопросе до сих пор отсутствует.

Рассмотрение двумерного плавления в теории БКТХНЯ проведено в рамках теории БКТ, но с учётом усложнений, накладываемых спецификой симметрии кристаллической решётки. Как упоминалось в разделе 2, кристаллическая решётка характеризуется двумя видами нарушенной симметрии: трансляционной и вращательной, которым соответствуют два разных параметра порядка и соответственно два типа топологических дефектов: дислокации (рис. 7) и дисклинации (рис. 8). Ниже мы кратко опишем основные результаты теории Березинского – Костерлица – Таулеса – Хальперина – Нельсона – Янга.

Теория БКТХНЯ основывается на рассмотрении упругого гамильтониана для двумерной треугольной решётки [127]:

$$H_E = \frac{1}{2} \int d^2r (2\mu u_{ij}^2 + \lambda u_{kk}^2), \quad (59)$$

где

$$u_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i(\mathbf{r})}{\partial r_j} + \frac{\partial u_j(\mathbf{r})}{\partial r_i} \right), \quad (60)$$

μ и λ — коэффициенты Ламэ.

Квазидальний периодический трансляционный порядок разрушается вследствие появления свободных дислокаций (которые играют роль вихрей в XY-модели). Появление свободных дислокаций приводит к обращению в нуль модуля сдвига μ . Основное отличие теории дислокационного плавления от описанной в разделе 2

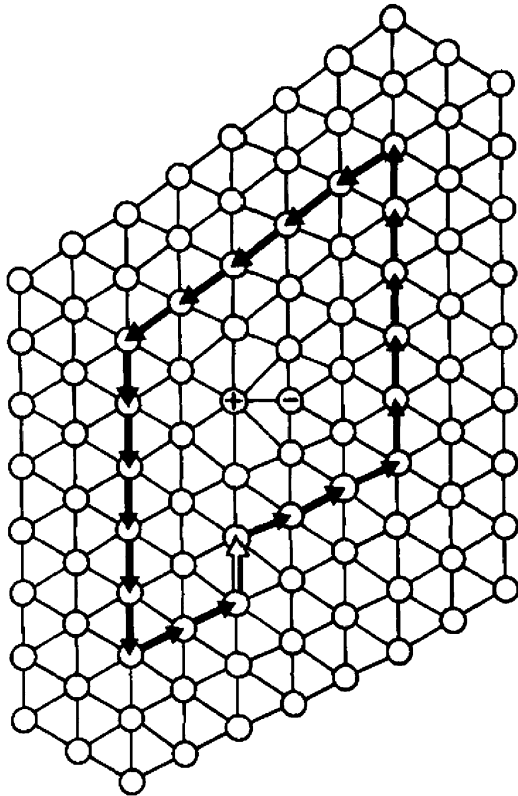


Рис. 7. Дислокация как дисклинационный диполь.

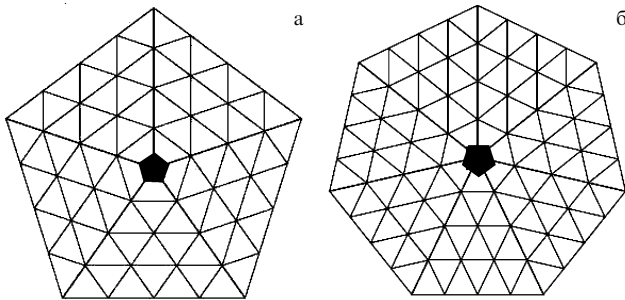


Рис. 8. Положительная (а), $s = +1$, и отрицательная (б), $s = -1$, дисклинации.

диссоциации пар вихрь – антивихрь в XY-модели состоит в том, что дислокация характеризуется не скалярным зарядом (см. (6)), а вектором Бюргерса \mathbf{b} . Дислокация в точке \mathbf{r} определяется величиной приращения, которое получает контурный интеграл от поля смещений при обходе по замкнутому контуру, содержащему дислокацию [127] (см. рис. 7):

$$\oint d\mathbf{u} = a_0 \mathbf{b}(\mathbf{r}) = -n(\mathbf{r}) a_0 \mathbf{e}_1 - m(\mathbf{r}) a_0 \mathbf{e}_2, \quad (61)$$

где $\mathbf{b}(\mathbf{r})$ — безразмерный вектор Бюргерса, a_0 — период рассматриваемой треугольной решётки, \mathbf{e}_1 и \mathbf{e}_2 — базисные векторы решётки, m и n — целые числа.

Дисклинация на треугольной решётке характеризуется тем, что при обходе по замкнутому контуру, содержащему дисклинацию, интеграл от угла поворота (57) получает приращение, кратное $2\pi/6$ (см. рис. 8):

$$\oint d\vartheta(\mathbf{r}) = -\frac{2\pi}{6} s, \quad s = \pm 1, \pm 2, \dots \quad (62)$$

(Контур в (61) и (62) обходится против часовой стрелки.) Как видно из рис. 7, дислокация может рассматриваться как связанная пара дисклинаций.

Энергия отдельной дислокации расходится как логарифм размера системы. Гамильтониан системы дислокаций имеет вид [37, 39]

$$H_{\text{dis}} = -\frac{a_0^2 K}{8\pi} \sum_{i \neq j}^M \left[\mathbf{b}(\mathbf{r}_i) \mathbf{b}(\mathbf{r}_j) \ln \frac{r_{ij}}{a} - \frac{(\mathbf{b}(\mathbf{r}_i) \mathbf{r}_{ij})(\mathbf{b}(\mathbf{r}_j) \mathbf{r}_{ij})}{r_{ij}^2} \right] + E_c \sum_{i=1}^M \mathbf{b}^2(\mathbf{r}_i), \quad (63)$$

где E_c — энергия ядра дислокации, K — модуль Юнга,

$$K = \frac{4\mu(\mu + \lambda)}{2\mu + \lambda}. \quad (64)$$

Диссоциация дислокационных пар, приводящая к плавлению при температуре T_m и являющаяся аналогом диссоциации вихрь – антивихрь при стандартном БКТ-переходе, происходит при условии [3, 37, 39]

$$k_B T_m = \frac{K a_0^2}{16\pi}. \quad (65)$$

В работах Хальперина и Нельсона [37, 38] и Янга [39] получены уравнения, учитывающие перенормировку модулей μ и λ за счёт связанных дислокационных пар. Эти уравнения, являющиеся аналогом уравнений (9), имеют вид

$$\begin{aligned} \frac{d\mu^{-1}(l)}{dl} &= 3\pi y^2(l) \exp\left(\frac{K(l)}{8\pi}\right) I_0\left(\frac{K(l)}{8\pi}\right) + O(y^3), \\ \frac{d[\mu(l) + \lambda(l)]^{-1}}{dl} &= 3\pi y^2(l) \exp\left(\frac{K(l)}{8\pi}\right) \times \\ &\times \left[I_0\left(\frac{K(l)}{8\pi}\right) - I_1\left(\frac{K(l)}{8\pi}\right) \right] + O(y^3), \end{aligned}$$

где $I_0(x)$ и $I_1(x)$ — модифицированные функции Бесселя. Величины $K(l)$ и $y(l)$ определяются из уравнений

$$\begin{aligned} \frac{dK^{-1}(l)}{dl} &= \frac{3}{2} \pi y^2(l) \exp\left(\frac{K(l)}{8\pi}\right) I_0\left(\frac{K(l)}{8\pi}\right) - \\ &- \frac{3}{4} \pi y^2(l) \exp\left(\frac{K(l)}{8\pi}\right) I_1\left(\frac{K(l)}{8\pi}\right) + O(y^3), \\ \frac{dy(l)}{dl} &= \left(2 - \frac{K(l)}{8\pi}\right) y(l) + O(y^3). \end{aligned} \quad (66)$$

Здесь фугитивность y имеет вид $y = \exp[-E_c/(k_B T)]$. В работах [37–39] с помощью ренормгруппового анализа системы, описываемой гамильтонианом (63), получен ряд предсказаний для параметров, характеризующих двумерное плавление.

Показатель η_G в корреляционной функции плотность – плотность (55) $g_G(r) \propto r^{-\eta_G}$ в точке плавления T_m имеет значения $1/4 \leq \eta_G(T_m) \leq 1/3$. При T , стремящейся к T_m снизу ($T \rightarrow T_m^-$) [38],

$$\frac{a_0^2 K}{k_B T} \simeq \frac{16\pi}{1 - c|t|^v}, \quad (67)$$

где $t = (T - T_m)/T_m$, $v = 0,3696$, a_0 — расстояние до ближайшего соседа. Ниже точки перехода корреляционная функция и структурный фактор имеют вид [38]:

$$\begin{aligned} g_G(r) &\propto r^{-\eta_G(T)}, \\ \eta_G(T) &= k_B T |\mathbf{G}|^2 \frac{3\mu_R + \lambda_R}{4\pi\mu_R(2\mu_R + \lambda_R)}, \\ S(q) &\propto |\mathbf{q} - \mathbf{G}|^{-2+\eta_G(T)}. \end{aligned} \quad (68)$$

Здесь μ_R и λ_R — перенормированные коэффициенты Ламэ.

Выше точки перехода конечная плотность дислокаций приводит к экспоненциальному убыванию корреляционной функции: $g_G(r) \propto \exp(-r/\xi_+(T))$, где $\xi_+(T) \propto \exp(c/|t|^n)$. Пик теплоёмкости имеет место при температурах выше T_m , причём форма пика зависит от вида модели.

Свойства плавления в теории БКТХНЯ подобны свойствам обычного БКТ-перехода. Однако Хальперин и Нельсон [37, 38] отметили, что жидкость выше точки диссоциации дислокационных пар оказывается неизотропной. Авторы [37, 38] установили, что диссоциация дислокационных пар не полностью разрушает дальний ориентационный порядок, а только превращает его в квазидальний. Качественно это можно пояснить простыми оценками [129]: при наличии свободной дислокации поле смещений имеет вид $u \propto \ln L$, где L — размер системы, т.е. появление дислокации должно разрушить дальний трансляционный порядок. В то же время связанный с этим полем смещений угол поворота (57) $\omega \propto 1/L$, т.е. ориентационный порядок не должен разрушаться полностью.

Хальперин и Нельсон [38] предложили рассматривать в качестве феноменологического ориентационного параметра порядка для треугольной решётки величину

$$\psi(\mathbf{r}) = \exp(6i\vartheta(\mathbf{r})), \quad (69)$$

где $\vartheta(\mathbf{r})$ — ориентация связи между двумя ближайшими соседями по отношению к некоторой фиксированной оси (57). Квазидальний порядок при температуре выше T_m характеризуется степенным убыванием корреляций:

$$\langle \psi^*(\mathbf{r}) \psi(0) \rangle \propto r^{-\eta_6(T)}. \quad (70)$$

Подобное степенное убывание корреляций должно наблюдаться в двумерных нематических жидких кристаллах [130], однако параметр порядка тогда имеет вид $\exp(2i\vartheta(\mathbf{r}))$, что отражает симметрию второго порядка жидкого кристалла. В случае плавления треугольной решётки параметр порядка имеет симметрию шестого порядка, поэтому анизотропная фаза названа гексатической.

В твёрдом теле дисклинация сильно связаны в дислокации, так как потенциал взаимодействия между дисклинами пропорционален квадрату расстояния. Однако в гексатической фазе это взаимодействие экранируется свободными дислокациями, что приводит к логарифмическому виду потенциала взаимодействия [38].

Хальперин и Нельсон [38] предложили для описания длинноволновых флуктуаций в анизотропной жидкости феноменологический гамильтониан

$$H_A = \frac{1}{2} K_A(T) \int d^2r (\nabla\vartheta(\mathbf{r}))^2, \quad (71)$$

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

$$\eta_6(T) = \frac{18k_B T}{\pi K_A(T)}. \quad (72)$$

Используя (71), можно показать [38], что гамильтониан взаимодействия дисклинаций в гексатической фазе имеет вид (ср. (6))

$$H_{\text{disc}} = -\frac{\pi K_A(T)}{36} \sum_{i < j} s(\mathbf{r}_i) s(\mathbf{r}_j) \ln \frac{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}{a} + E_{\text{cd}} \sum_i s^2(\mathbf{r}_i), \quad (73)$$

где E_{cd} — энергия ядра дисклинации, $s(\mathbf{r}) = -1$ для атома с семью ближайшими соседями и $s(\mathbf{r}) = +1$ для атома с пятью ближайшими соседями (см. рис. 8).

Дисклинационный гамильтониан (73) приведён к виду (6), поэтому все результаты теории БКТ для XY-модели могут быть использованы для описания перехода гексатическая фаза – изотропная жидкость, который связан с диссоциацией дисклинационных пар.

Хальперин и Нельсон предположили [38], что диссоциация дисклинационных пар происходит при $T_i > T_m$. Уравнение для определения T_i имеет вид

$$T_i = \frac{\pi K_A(T_i)}{72k_B T_i}. \quad (74)$$

При температуре $T > T_i$ константа Франка скачком обращается в нуль. При $T \rightarrow T_m$ сверху $K_A(T) \propto \xi_+^2(T)$. Показатель $\eta_6(T_i) = 1/4$. Ориентационная корреляционная длина $\xi_6 \propto \exp(b/|T - T_i|^{1/2})$ при $T \rightarrow T_i$ сверху.

Заметим, что гамильтониан (71) по виду совпадает с гамильтонианом XY-модели (1), что, очевидно, приводит к совпадению уравнений ренормгруппы и критического поведения в окрестности фазового перехода.

Таким образом, теория БКТХНЯ предсказывает, что плавление двумерных решёток может осуществляться посредством двух непрерывных переходов, при первом из которых происходит диссоциация дислокационных пар и образуется промежуточная гексатическая фаза, превращающаяся затем в изотропную жидкость посредством второго непрерывного перехода, при котором имеет место диссоциация дисклинационных пар.

Как упоминалось, теория БКТХНЯ включает в себя ряд существенных приближений. В первую очередь это предположение о большой энергии ядра дислокации, что соответствует малой величине активности $y \propto \exp[-E_c/(k_B T)]$, по которой проводится разложение. Можно ожидать, что вид перехода может измениться при изменении величины энергии E_c . Подобное изменение, наблюдаемое в обычной теории БКТ, обсуждалось в разделе 3.1 [43, 62, 63, 66, 69, 131 – 133].

К сожалению, пока отсутствуют подходы, позволяющие последовательно вычислять E_c . Следует также учитывать тот факт, что в настоящее время отсутствует теория гексатической фазы, которая должна включать в себя микроскопическое выражение для модуля Франка $K_A(T)$ (см., однако, [134, 135]). Кроме того, канонический вариант теории [38, 39] был развит для простейшего (и на тот момент фактически единственного экспериментально наблюдаемого) случая плотноупакованной треугольной решётки. Сейчас ситуация изменилась, что будет обсуждаться в разделах 3.6 и 3.7. В качестве примера можно указать различные варианты решёток, обнару-

женных в компьютерных [136–146] и реальных экспериментах, для которых теория БКТХНЯ должна быть приспособлена. В частности, в последнее время появились экспериментальные работы, в которых квадратная фаза была обнаружена в тонкой плёнке воды, заключённой между графеновыми листами [147], а также в железе в графеновых порах [148]. Есть указания на существование нетривиальных двумерных структур в ансамбле вихрей в системе из нескольких тонких сверхпроводящих плёнок [149], в системе с потенциалом Герца, которая описывает двумерные незаряженные коллоидные ансамбли [150], а также в комплексах дезоксирибонуклеиновой кислоты (ДНК) [151].

Ренормгрупповые уравнения для кристаллических решёток других типов в настоящее время отсутствуют, что значительно усложняет описание в них плавления.

3.3. Плавление как переход первого рода

Вместе с тем существуют теории, в которых предсказывается, что плавление двумерной системы происходит посредством одного перехода первого рода в отсутствие гексатической фазы. С.Т. Чуи развил теорию [152, 153], в которой рассмотрел возможность плавления посредством образования границ зёрен (grain boundaries). Границы зёрен представляют собой струны дислокаций, которые приводят к вращению одной части кристалла по отношению к другой. Множественное рождение границ зёрен приводит к плавлению кристалла посредством перехода первого рода, которое предшествует диссоциации дислокационных пар. Конкуренция между случайными дислокациями и образованием границ зёрен зависит от плотности дислокаций. Чуи нашёл слабый переход первого рода для низких плотностей дислокаций (большая энергия ядра дислокации $E_c/(k_B T) > 2,84$) и переход первого рода для низких энергий E_c .

В связи с этим отметим результаты моделирования дисклинационной системы [132], которые показывают, что возможно изменение вида перехода от БКТХНЯ-типа до первого рода при энергии ядра дислокации $E_c/(k_B T) \leq 2,84$. Этот результат соответствует результатам Чуи в той части, которая говорит о существовании переходной энергии ядра, но при высоких энергиях ядра дислокации плавление, в противоречии с результатами Чуи [152, 153], является двухстадийным процессом.

Клейнерт и Янке в серии статей [154–156] рассмотрели возможность одновременного образования в системе свободных дислокаций и дисклинаций и показали аналитически в рамках теории среднего поля и с помощью моделирования по методу Монте-Карло, что плавление в этом случае является переходом первого рода. Используемая ими модель основывается на возможности представления дислокации как дисклинационного диполя. Эта модель, предложенная Нельсоном [157], известна как LRM (Laplacian roughening model — модель с лапласовским огрублением). LRM была предметом интенсивного изучения методом Монте-Карло, причём были получены противоречивые результаты. Янке и Клейнерт [158] пришли к выводу о том, что система должна плавиться посредством одного перехода первого рода, в то время как Страндбург с соавторами [132, 159] показали, что в системе существуют два непрерывных перехода.

Позднее Клейнерт предложил решёточную модель, в явном виде учитывающую ротационную жёсткость ре-

шётки. Модель была исследована аналитически и с помощью метода Монте-Карло [113, 160–163] и было показано, что существует критическое значение ротационной жёсткости α_c , при превышении которого плавление происходит посредством двух непрерывных переходов, тогда как при $\alpha < \alpha_c$ система плавится посредством перехода первого рода.

Континуальный вариант модели, учитывающей существование ориентационного порядка (и формально эквивалентный модели, предложенной Клейнертом), рассмотрен в работах [129, 164]. При этом результат идентичен предыдущему при $l > l_c$, однако при $l < l_c$ ситуация оказывается более сложной: в зависимости от энергии ядра плавление может осуществляться как переходом первого рода, так и двумя непрерывными переходами. В данной модели свободная энергия деформированного изотропного твёрдого тела может быть представлена в виде

$$F = \frac{1}{2} \int d^2r (2\mu u_{ij}^2 + \lambda u_{kk}^2) + 2\alpha \int d^2r \varepsilon_{ij} \varepsilon_{lm} \partial_i u_{jk} \partial_l u_{mk}. \quad (75)$$

Здесь подразумевается суммирование по повторяющимся индексам, ε_{ij} — антисимметричный тензор ($\varepsilon_{ii} = 0$, $\varepsilon_{21} = -1$, $\varepsilon_{12} = 1$), $\partial_i = \partial/\partial r_i$, μ и λ — коэффициенты Ламэ [127], параметр α характеризует ориентационную жёсткость решётки, $u_{ij} = 1/2(\partial_i u_j(\mathbf{r}) + \partial_j u_i(\mathbf{r}))$ — тензор деформаций. Исходя из (75) можно представить энергию дислокаций и дисклинаций в виде

$$\begin{aligned} F^s = & \frac{\pi}{18} \sum_{i \neq j}^N s_i s_j \left(\frac{K}{8} r_{ij}^2 \ln \frac{r_{ij}}{a} - 2\alpha \ln \frac{r_{ij}}{a} \right) + E_c \sum_{i=1}^N s_i^2 + \\ & + \frac{a_0 K}{12} \sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^N s_j \varepsilon_{mn} b_n(\mathbf{r}_i) (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)_m \left(\ln \frac{r_{ij}}{a} + C \right) - \\ & - \frac{a_0^2 K}{8\pi} \sum_{i \neq j}^M \left[\mathbf{b}(\mathbf{r}_i) \mathbf{b}(\mathbf{r}_j) \ln \frac{r_{ij}}{a} - \frac{(\mathbf{b}(\mathbf{r}_i) \mathbf{r}_{ij})(\mathbf{b}(\mathbf{r}_j) \mathbf{r}_{ij})}{r_{ij}^2} \right] + \\ & + E_d \sum_{i=1}^M \mathbf{b}^2(\mathbf{r}_i), \end{aligned} \quad (76)$$

где E_c и E_d — энергии ядер дисклиниаций и дислокаций, $\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$,

$$K = \frac{4\mu(\mu + \lambda)}{2\mu + \lambda}. \quad (77)$$

Первые два члена в правой части (76) описывают энергию взаимодействующих дисклинаций, третий — описывает взаимодействие дислокаций с дисклинациями, а последние два соответствуют энергии взаимодействия дислокаций. Можно показать, что энергия заданной конфигурации дисклинационных и дислокационных зарядов конечна лишь при выполнении условий

$$\sum_j s_j = 0, \quad \sum_j \mathbf{r}_j s_j = 0, \quad \sum_j \mathbf{b}(\mathbf{r}_j) = 0. \quad (78)$$

Заметим, что последний член в правой части (75) не даёт вклада в дальнедействующее взаимодействие между дислокациями (хотя и вносит вклад в E_d). Нетрудно увидеть, что взаимодействие между дислокациями совпадает с диполь-дипольным дисклинационным взаимодействием (при этом вектор Бюргерса \mathbf{b} ортогонален вектору дипольного дисклинационного момента \mathbf{d} : $d_1 = b_2$, $d_2 = -b_1$, $d^2 = b^2$). Как упоминалось, дислока-

ция может рассматриваться как дисклинационный диполь, поэтому в дальнейшем вместо вектора Бюргера \mathbf{b} будем использовать дипольный момент \mathbf{d} . Условия (78) показывают, что в двумерной решётке отсутствуют свободные дисклинации и дисклинационные диполи (дислокации).

В низкотемпературной фазе дислокации могут существовать лишь в виде пар с нулевым вектором Бюргера, а дисклинации — в виде сильно связанных квадрупольных комплексов. При повышении температуры в системе в соответствии с описанными выше сценариями плавления могут возникать свободные дислокации или сразу свободные дисклинации. В первом случае свободные дислокационные заряды экранируют заряды противоположного знака, приводя к короткодействующему (экспоненциально убывающему) взаимодействию между дислокациями. При этом взаимодействие между дисклинациями модифицируется и, оставаясь дальнедействующим, возрастает только как $\ln r$. В обычную жидкость система превращается после появления свободных дисклинаций. Во втором случае система переходит в жидкость посредством одного перехода, при этом в результате экранирования взаимодействие между дисклинациями становится короткодействующим.

В работе [129] гамильтониан (76) рассматривался в рамках приближения, аналогичного приближению Дебая–Хюккеля в теории двумерного кулоновского газа [43]. Было показано, что сценарий двумерного плавления кардинально зависит от параметра ориентационной упругости α , энергии ядра E_c и относительного размера ядра дисклинации $t = r_0/a_0$. Оказалось, что, в согласии с результатами работ [113, 160–163], двумерная решётка при $\alpha > \alpha_c = Ka_0^2[9/(4\pi^2) + t^2/16]$ плавится посредством двух непрерывных переходов, происходящих в результате последовательной диссоциации дислокационных и дисклинационных пар соответственно, при этом параметры переходов совпадают с таковыми теории БКТХНЯ. В частности, показано, что величина плотности дислокаций на линии перехода гексатической фазы — обычная жидкость имеет вид

$$a_0^2 n_0(T) = \frac{\pi}{108}. \quad (79)$$

Это значение можно сравнить с результатом, найденным позднее методом компьютерного моделирования [165]: $n_0 \approx 1/(22a_0^2)$. Заметим также, что значение (79) критической плотности свободных дислокаций находится в качественном согласии с результатами, полученными при рассмотрении плавления решётки вихрей в высокотемпературных сверхпроводниках [166].

Сравнивая (74) и (79), найдём выражения для модуля Франка и показателя η_6 :

$$K_A(T) = \frac{2k_B T}{3a_0^2 n_0(T)}, \quad (80)$$

$$\eta_6(T) = \frac{27a_0^2 n_0(T)}{\pi}. \quad (81)$$

Из соотношений (80), (81) видно, что при приближении к линии плавления, $n_0(T) \rightarrow 0$, имеем $K_A(T) \rightarrow \infty$, $\eta_6(T) \rightarrow 0$, что соответствует существованию дальнего ориентационного порядка в двумерном кристалле. Условие перехода гексатическая фаза — обычная жидкость (79), а также выражение для показателя η_6 не зависят от

деталей взаимодействия конкретной системы (но зависят от симметрии решётки). Появление свободной дислокации порождает поле смещений $u \propto \ln R$, разрушающее квазидальний трансляционный порядок. Однако возникающий при этом угол поворота $\omega \propto 1/R$, поэтому квазидальний ориентационный порядок сохраняется до тех пор, пока плотность свободных дислокаций не достигает критического значения (79). Заметим также, что, используя (79), можно получить выражение для числа узлов исходной гексагональной решётки, приходящихся на одну дислокацию: $n_0(T)^{-1}/A = 216/(\pi\sqrt{3}) \approx 40$, т.е. в окрестности линии плавления одна дислокация приходится на 40 узлов решётки и является хорошо определённым дефектом.

Однако кристалл может плавиться посредством не только описанных выше двух переходов, но и одного перехода, при котором в системе происходит диссоциация дисклинационных комплексов и появляются свободные дисклинации. Вследствие экранирования взаимодействие между дисклинациями становится короткодействующим. При наличии дисклинаций поле смещений на больших расстояниях имеет вид $u \propto R \ln R$, поэтому фаза, в которую переходит кристалл, оказывается полностью разупорядоченной. Таким образом, дисклинационное плавление происходит как переход первого рода.

В работе [129] показано, что температура дисклинационного перехода возрастает с увеличением энергии ядра дисклинации E_c и при некотором E_c^* превышает температуру дислокационного перехода (65). Таким образом, при $E_c < E_c^*$ плавление происходит как переход первого рода, а при $E_c > E_c^*$ — как два непрерывных перехода. В [129] энергия E_c^* оценена как функции α и t . Важность величины энергии ядра дефекта для определения перехода отмечалась в многочисленных работах (см., например, [112, 131, 132]) по моделированию двумерного плавления. К сожалению, однозначной величины энергии ядра дефекта для реалистической модели взаимодействующих частиц получено не было. Обычно для моделирования используются различные решёточные представления упругого гамильтониана (59) (или гамильтониана (75) с $\alpha = 0$). Положив $t = 3$ (достаточно реалистическое значение для размера ядра дефекта [167]), при $\alpha = 0$ находим $E \approx 2,24$, где $E = 16\pi E_c^*/(Ka_0^2)$. Учитывая, что энергия ядра дислокации $\approx 2E$, приходим к неплохому согласию с оценками, полученными с помощью моделирования [112, 131, 132].

Оказалось, что существуют значения α^* , при которых E_c^* обращается в нуль. Вероятно, при $\alpha < \alpha^*$ следует ожидать, что плавление всегда будет происходить посредством двух непрерывных переходов (заметим, что α^* зависит от t). Также существуют значения t^* , при которых $E_c^* = 0$, и при $t > t^*$ следует ожидать двухстадийного плавления. К сожалению, нам не известны ни реальные, ни компьютерные эксперименты, в которых была бы исследована зависимость плавления от размера ядра дефекта.

Очевидно, что рассмотренная модель является значительным упрощением по отношению к реальным системам, тем не менее, на наш взгляд, она позволяет описать большое количество переходов, наблюдаемых при двумерном плавлении. Для рассмотрения плавления конкретных систем необходимо связать параметры, входящие в гамильтониан (75), а также энергии ядер дефектов и величину размера дефекта t с микроскопическими пара-

метрами системы. К сожалению, пока это удалось сделать только для коэффициентов Ламэ в упругом гамилтониане (59). Отметим также работы Лозовика и Фарзтинова [168, 169], в которых фазовый переход первого рода предсказывается на основе анализа ангармонической фононной неустойчивости двумерной решётки.

3.4. Связь с теорией фазовых переходов Ландау

Рассмотрим простую качественную картину двумерного плавления в рамках теории фазовых переходов Ландау [170–175]. Для этого определим соответствующий параметр порядка.

В идеальном кристалле одночастичная функция распределения имеет симметрию кристаллической решётки. При нулевой температуре, $T = 0$, локальная плотность системы, пропорциональная одночастичной функции распределения, имеет симметрию двумерной кристаллической решётки и может быть разложена в ряд Фурье по векторам обратной решётки \mathbf{G} , при этом коэффициенты Фурье являются параметрами порядка для перехода жидкость–кристалл. При $T \neq 0$ дальний трансляционный порядок размывается тепловыми флуктуациями, однако для достаточно низких температур разложение в ряд Фурье сохраняется, но коэффициенты Фурье приобретают зависимость от \mathbf{r} :

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} \rho_{\mathbf{G}}(\mathbf{r}) \exp(i\mathbf{G}\mathbf{r}). \quad (82)$$

Параметры порядка $\rho_{\mathbf{G}}(\mathbf{r})$ слабо изменяются на расстояниях $\sim G^{-1}$ и имеют амплитуду и фазу:

$$\rho_{\mathbf{G}}(\mathbf{r}) = \rho_{\mathbf{G}} \exp(i\mathbf{G}\mathbf{u}(\mathbf{r})). \quad (83)$$

Здесь $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ имеет смысл поля смещений в кристалле. В двух измерениях наиболее сильно флуктуирует фаза параметра порядка [14], поэтому флуктуации модуля мы в дальнейшем рассматривать не будем. Поле смещений можно разложить на две составляющие, одна из которых плавно изменяется и соответствует фононному полю, в то время как другая является сингулярной и соответствует дислокациям и дисклинациям.

Разложение Ландау свободной энергии, учитывающее длинноволновые флуктуации параметров порядка, может быть записано в виде

$$\begin{aligned} F = & \frac{1}{2} \int d^2r \sum_{\mathbf{G}} [A|\mathbf{G} \times \nabla \rho_{\mathbf{G}}|^2 + B|\mathbf{G}\nabla \rho_{\mathbf{G}}|^2 + \\ & + C|\rho_{\mathbf{G}}(\mathbf{G}\nabla) \rho_{\mathbf{G}}|] + \frac{1}{2} a_T \sum_{\mathbf{G}} |\rho_{\mathbf{G}}|^2 + \\ & + b_T \sum_{\mathbf{G}_1+\mathbf{G}_2+\mathbf{G}_3=0} \rho_{\mathbf{G}_1} \rho_{\mathbf{G}_2} \rho_{\mathbf{G}_3} + O(\rho^4). \end{aligned} \quad (84)$$

При подстановке (83) в (84) легко увидеть, что первый член в разложении (84) представляет собой свободную энергию деформированного тела (59), при этом коэффициенты Ламэ μ и λ являются функциями параметров A , B , C и пропорциональны квадрату модуля параметра порядка (82).

Используя разложение (84), плавление можно описать следующим образом: при $T = 0$ в системе существуют дальние трансляционный и ориентационный порядки. При $T > 0$ дальний трансляционный порядок разрушается плавными флуктуациями фазы и превра-

щается в квазидальний порядок, характеризуемый медленным степенным убыванием корреляционной функции параметра порядка, при этом дальний ориентационный порядок сохраняется и модуль сдвига $\mu \neq 0$. При повышении температуры в системе появляются свободные дислокации, соответствующие сингулярным флуктуациям (вихрям) фазы параметра порядка. Появление свободных дислокаций приводит к тому, что система перестаёт оказывать сопротивление сдвигу ($\mu = 0$), т.е. становится жидкостью. Температура T_m , при которой появляются свободные дислокации, определяется параметрами первого члена в разложении (84) и является температурой плавления.

Следует подчеркнуть, что модуль параметра порядка $\rho_{\mathbf{G}}$ определяется из условия минимума разложения (84) (без учёта первого члена) и при температуре T_m обращается в нуль, а квазидальний порядок в системе разрушают сингулярные флуктуации фазы параметра порядка. Модуль параметра порядка становится равным нулю при некоторой температуре T_{MF} , которая может быть определена из условия равенства свободных энергий жидкой и твёрдой фаз как функционалов параметра порядка (или локальной плотности). В терминах разложения (84) уравнение $a_T = 0$ соответствует линии абсолютной неустойчивости жидкой фазы. Температура T_{MF} соответствует переходу в приближении среднего поля. Возможны два случая: 1) $T_m < T_{MF}$, система плавится посредством двух непрерывных переходов типа БКТ при диссоциации дислокационных пар; 2) $T_{MF} < T_m$, система плавится посредством перехода первого рода вследствие наличия членов третьего порядка в разложении (84).

Идеи, основанные на использовании разложения (84), привели к разработке микроскопической теории двумерного плавления — метода функционала плотности в теории кристаллизации [134, 135, 170, 171, 173–179], с помощью которого рассмотрено плавление системы твёрдых дисков [170, 171], кулоновской системы [170, 171], решётки вихрей в тонкой сверхпроводящей плёнке [171], а также систем с потенциалом твёрдых дисков, к которому добавлены притягивающая яма [173, 174] и отталкивающая ступенька [175, 176]. При этом получено неплохое (а для системы твёрдых дисков хорошее) согласие с результатами компьютерного моделирования и показано, что системы с короткодействующими потенциалами должны плавиться посредством перехода первого рода, тогда как для далекодействующих потенциалов квазидальний порядок исчезает в результате непрерывного перехода типа БКТ. В то же время данная теория не позволяет определить характер жидкой фазы.

3.5. Влияние беспорядка на сценарий двумерного плавления

В реальных экспериментах по исследованию двумерного плавления экспериментальные системы, как правило, содержат замороженные случайные поля различной природы: замороженные короткодействующие и далекодействующие примеси, случайный рельеф подложки, пиннирующая случайная сила, обязанная своим происхождением неоднородности подложки.

С интуитивной точки зрения понятно, что введение беспорядка, действующего на частицы, должно по-разному воздействовать на трансляционный и ориентационный порядки. 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 изменяться вследствие наличия точечных дефектов, поэтому трансляционный порядок должен достаточно легко разрушаться беспорядком, тогда 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 оставаться практически неизменной. Эта простая физическая картина получила подтверждение в работах Нельсона [180, 181], где рассмотрен гамильтониан:

$$H_{\text{dis}} = \frac{1}{2} \int d^2r [2\mu u_{ij}^2 + \lambda u_{kk}^2 - 2\omega \delta c(\mathbf{r}) u_{kk}]. \quad (85)$$

Здесь $\delta c(\mathbf{r})$ — распределённые по Гауссу флуктуации концентрации примесей, ω — параметр, связанный с модулями упругости. В этом случае показатель $\eta_G(T)$ имеет вид

$$\eta_G(T) = \left[k_B T \frac{3\mu + \lambda}{4\pi\mu(2\mu + \lambda)} + \frac{\sigma\omega^2}{4\pi(2\mu + \lambda)^2} \right] |\mathbf{G}|^2, \quad (86)$$

где σ — среднеквадратичное отклонение для распределения Гаусса, описывающего вероятность реализации определённой конфигурации беспорядка. Из уравнения (86) видно, что даже при $T = 0$ наличие примесей приводит к тому, что квазидальний трансляционный порядок уменьшается степенным образом. Гамильтониан (85) изучался методом ренормгруппы, при этом оказалось, что в рамках теории БКТХНЯ в системе должно наблюдаться возвратное плавление — термически возбуждённые дислокационные пары разрываются под действием потенциала случайной примеси при низких температурах и твёрдое тело оказывается неустойчивым при $T = 0$ [180–182]. При больших концентрациях примесей твёрдая фаза становится полностью неустойчивой. При этом гексатическая фаза оказывается весьма устойчивой по отношению к случайному полю.

Однако с физической точки зрения подобное поведение кажется весьма странным. Противоречие разрешено в работе [183] на основе континуальной модели (85), а также моделирования методом молекулярной динамики. Было показано, что возвратное плавление при низких температурах отсутствует — это объясняется тем, что применявшийся Нельсоном метод ренормгруппы справедлив только при малых фугитивностях, в то же время в системе возможны конфигурации, которые не удовлетворяют этим условиям. Однако при высоких температурах фазовая диаграмма соответствует диаграммам, полученным в [180, 182]. На рисунке 9 приведена качественная фазовая диаграмма двумерной системы с беспорядком, полученная аналитическими методами, а также посредством молекулярно-динамического моделирования системы коллоидов с дальнедействующим диполь-дипольным взаимодействием [184].

Эти результаты подтверждены в экспериментах по изучению поведения парамагнитных коллоидных частиц с диполь-дипольным взаимодействием [185, 186]. Беспорядок в системе образуется в результате пиннингования некоторых частиц к подложке в случайных положениях.

Заметим также, что пиннинг и тем самым исключение случайного набора частиц из динамики в положениях,

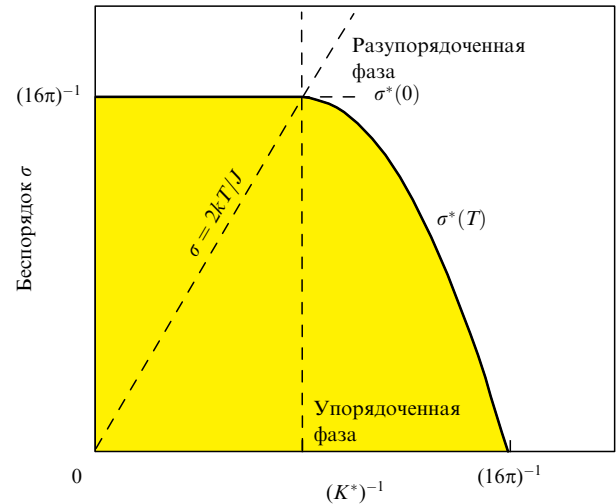


Рис. 9. Фазовая диаграмма двумерной системы при наличии беспорядка (см. [184]). $K^* = Ka_0^2/(k_B T)$ (см. уравнение (65)).

соответствующих узлам кристаллической решётки, наоборот, приводит к стабилизации кристалла и практически к исчезновению гексатической фазы [187].

В работе [182] показано, что поведение двумерного электронного кристалла — вигнеровского кристалла — зависит от характера примеси. При этом в случае анизотропного случайного поля, соответствующего неоднородности подложки, в системе имеется лишь ближний кристаллический порядок и истинное критическое поведение невозможно.

3.6. Эксперимент и компьютерное моделирование

Как легко увидеть, потенциал взаимодействия не входит в явном виде в уравнения теории БКТХНЯ. Единственные ограничения, которые имеются в основных уравнениях, — это треугольная решётка и большая величина энергии ядра топологического дефекта (см., например, (66)). В этом смысле, как упоминалось во введении, теория представляется универсальной, и в момент её появления даже можно было ставить вопрос о том, что все двумерные системы должны плавиться в соответствии с этим сценарием.

Теория дислокационного плавления двумерных решёток инициировала множество экспериментальных работ, а также работ по компьютерному моделированию, целью которых была проверка её предсказаний. Эксперименты проводятся на широком круге объектов, который включает в себя двумерные коллоиды, электроны на поверхности жидкого гелия, атомы инертных газов на подложках (в частности, ксенон на графите), двумерные гранулированные системы, цилиндрические магнитные домены в тонкой плёнке, системы вихрей в высокотемпературных сверхпроводниках (ВТСП) и тонких сверхпроводящих плёнках в магнитном поле, пылевую плазму, тонкие плёнки жидкостей (воды) и т.д. Число таких работ настолько велико, что остановиться на каждой из них не представляется возможным (см. обзоры [4, 41, 110–114, 188]), поэтому ниже мы кратко перечислим лишь основные результаты.

Следует заметить, что одновременно стали появляться работы по компьютерному моделированию поведения различных систем с целью как объяснения резуль-

татов реальных экспериментов, так и рассмотрения модельных систем с различными потенциалами взаимодействия для выяснения влияния вида потенциала на характер плавления, о чём более подробно будет сказано ниже.

Одной из наиболее известных двумерных экспериментальных систем, в которых наблюдалось двумерное плавление, является система электронов над поверхностью жидкого гелия. Работы в этом направлении начались практически сразу после появления теории БКТХНЯ. Электроны удерживаются над поверхностью сверхтекучего ^4He вертикальным электрическим полем, создаваемым конденсатором с положительной обкладкой под поверхностью жидкого гелия, и силами отталкивания между электронами и поверхностью гелия. Плотность электронов достаточно мала: $\rho_e \approx 10^8 - 10^9 \text{ см}^{-2}$, поэтому система является классической. Для кулоновского потенциала все свойства системы являются функцией одного параметра: $\Gamma = e^2(\pi\rho_e)^{1/2}/(k_B T)$. При малых значениях Γ электроны образуют жидкость, а при увеличении Γ — электронный вигнеровский кристалл. Наблюдения проводились посредством изучения поведения связанных продольных колебаний вигнеровского кристалла и капиллярных волн на поверхности жидкого гелия (риплон) [111, 189–195]. Вигнеровский кристалл плавится при $\Gamma_M = 137 \pm 15$, при этом совокупность экспериментальных данных подтверждает теорию БКТХНЯ. К сожалению, эти эксперименты не дают информации об ориентационном порядке связей, т.е. не позволяют проверить предсказания о существовании гексатической фазы.

Результаты компьютерного моделирования методом молекулярной динамики [196, 197], а также методом Монте-Карло [198] двумерной системы с кулоновским потенциалом тоже подтверждают теорию БКТХНЯ и находятся в хорошем согласии с экспериментальными данными.

Другой экспериментальной системой, которая широко использовалась для изучения плавления двумерных систем, являются инертные газы, адсорбированные на различных подложках, в первую очередь на графите. Структура монослоя инертных газов несоизмерима с решёткой подложки, поскольку атомы углерода гораздо меньше атомов инертных газов, поэтому в ряде случаев можно пренебречь ориентационным влиянием подложки [111, 112]. Эксперименты по рассеянию рентгеновских лучей показывают, что система плавится посредством непрерывного перехода: в случае аргона [199, 200] и криптона [201] на графите — при плотностях более одного монослоя, в случае ксенона [202–204] — при плотностях более 0,9 монослоя.

Эксперименты по рассеянию рентгеновских лучей показывают существование непрерывного перехода в гексатическую фазу в монослое ксенона [205, 206] на графите с гексагональной симметрией подложки, а также на слабо взаимодействующей поверхности серебра [207]. В последнем эксперименте [207] низкотемпературная фаза была интерпретирована как гексатическое стекло, образующееся в результате пиннинга границами зёрен и ступеньками подложки.

Однако некоторые из этих экспериментов вступили в противоречие с компьютерными экспериментами, а также с более поздними измерениями теплоёмкости. Для интерпретации экспериментов по изучению поведения ксенона с плотностью 1,1 монослоя было проведено

компьютерное моделирование методом молекулярной динамики [208–210], при этом было показано, что наблюдаемый переход [202, 203] представляет собой переход первого рода, а кажущееся непрерывное поведение является результатом обмена атомами между первым и вторым слоями. Кроме того, ряд параметров теории БКТХНЯ, полученных в этих экспериментах, не совпадает с предсказаниями теории [203, 211]. В работе [212] для плотностей ксенона выше и ниже 1 монослоя был обнаружен пик теплоёмкости, характерный для перехода первого рода.

Непрерывное плавление аргона на графите при плотностях, меньших 1 монослоя, было установлено с помощью рассеяния рентгеновских лучей [199], а также измерения теплоёмкости [200], однако более точные измерения с использованием подложки с более высокой однородностью показали поведение теплоёмкости, характерное для перехода первого рода [213]. Таким образом, совокупность результатов экспериментов по изучению поведения системы адсорбированных атомов инертных газов, по-видимому, указывает на невозможность интерпретации в терминах теории БКТХНЯ и демонстрирует слабый переход первого рода [212, 213].

Важные результаты для объяснения двумерного плавления получены при изучении модельной системы, состоящей из полистироновых сфер в жидкости между двумя стеклянными пластинами. Пластины расположены под небольшим углом друг к другу, что позволяет непрерывно изменять плотность системы в пространстве [214, 215]. Поведение системы можно наблюдать в реальном времени и реальном пространстве, что даёт существенные преимущества по сравнению с компьютерными экспериментами.

Мюррей с соавторами [214–218] провели исследования монодисперсной системы заряженных полистироновых сфер в воде, взаимодействующих посредством экранированного кулоновского потенциала. Поведение системы изучалось с помощью видеомикроскопии как функция плотности, которая возрастает с увеличением расстояния между пластинами. В этих работах было обнаружено двухстадийное плавление, согласующееся с теорией БКТХНЯ.

В работе [219] рассматривались две системы полистироновых сфер на поверхности воды. Система с размером сфер 2,88 мкм продемонстрировала признаки плавления в соответствии со сценарием БКТХНЯ, в том числе существование гексатической фазы. В то же время в системе сфер с размером 1,01 мкм гексатическая фаза отсутствовала и структура дефектов при плавлении отличалась от простой картины двухстадийного плавления. В работах [220, 221] рассматривалось свободное расширение системы диспергированных в воде 1,01-микрометровых сфер, заключённых между двумя стеклянными пластинами. Хотя в [220, 221] наблюдался двухстадийный процесс плавления, структура дефектов оказалась более согласующейся с переходом первого рода, так как дислокации явно образовывали границы зёрен. До сих пор не ясно, являются ли различия в наблюдаемых процессах плавления результатом проблем с установлением равновесия в различных системах, или дело заключается в различии потенциалов взаимодействия.

В работе [222] изучалось поведение 1,9-микрометровых полистироновых сфер в ферромагнитной жидкости между двумя стеклянными пластинами в магнитном

поле, перпендикулярном пластинам. Образовавшиеся таким образом в ферросреде "пустоты" взаимодействуют между собой посредством магнитного диполь-дипольного потенциала. Система плавилась при уменьшении поля посредством перехода первого рода при значении константы $\Gamma = V(r_s)/(k_B T_m) = 62 \pm 3$, где $V(r)$ — потенциал, r_s — радиус Вигнера–Зейтца. Эти результаты согласуются с результатами моделирования методом молекулярной динамики [223]. В эксперименте [222], а также в эксперименте [227] беспорядок в системе был обусловлен границами зёрен, присутствовавших в первоначальном кристалле.

В работах [228, 229] рассмотрено плавление в системах 1,6- и 2,0-микрометровых полистироновых сфер, взаимодействующих посредством диполь-дипольного потенциала, наводимого внешним электрическим полем, перпендикулярным плоскости системы. При высоких полях система кристаллизуется. Трансляционная и ориентационная корреляционные функции и критические показатели для степенного убывания этих корреляторов согласуются с теорией БКТХНЯ. Наблюдавшиеся дефекты соответствуют предсказаниям для кристаллической, гексатической и изотропной фаз, при этом образования границ зёрен не наблюдалось. Ориентационная корреляционная функция показывает явный переход из гексатической фазы в изотропную. Следует отметить, что значение параметра $\Gamma = 61 \pm 3$, при котором наблюдается плавление, находится в хорошем согласии с упоминавшимся результатом компьютерного моделирования [223], но вид перехода не совпадает с переходом первого рода, полученным с помощью метода молекулярной динамики [197, 223].

Интересные результаты получены в работе Маркуса и Райса, где рассматривалась система коллоидных частиц, покрытых "щёткой" из олигомеров. Эффективный потенциал взаимодействия представляет собой твёрдую сферу диаметром 0,928 мкм, к которой добавлена отталкивающая ступенька шириной 300 Å. Были обнаружены два перехода первого рода: кристалл – гексатик и гексатик – изотропная жидкость. Эти результаты качественно подтверждают результаты Бледона и Френкеля [225] (см. также [226]).

Самое убедительное экспериментальное подтверждение теории БКТХНЯ получено в цикле работ Кейма и Марета с соавторами [185, 186, 230 – 236], который вклю-

чает в себя результаты как реальных экспериментов, так и компьютерного моделирования методом Монте-Карло частиц, взаимодействующих посредством диполь-дипольного потенциала $V(r)$. Авторы указанного цикла работ рассматривали систему сферических парамагнитных коллоидных частиц диаметром $d = 4,5$ мкм, которые силой тяжести прижимались к границе раздела между водой и воздухом. Граница раздела формировалась в капле диаметром 8 мм, которая образовывалась под действием сил поверхностного натяжения в закрытой сверху стеклянной поре. Направленное перпендикулярно к поверхности магнитное поле создало в коллоидных частицах дипольный момент. Безразмерное взаимодействие между частицами имеет вид [232]

$$V(r) = \frac{\Gamma}{r^3}, \quad (87)$$

$$\Gamma = \frac{\mu_0 \chi^2 H^2 (\pi \rho)^3}{4\pi k_B T} \propto \frac{1}{T_{\text{eff}}}, \quad (88)$$

где ρ — плотность системы. Из уравнения (88) видно, что увеличение магнитного поля эквивалентно понижению температуры. На поверхности капли имеется порядка 100000 частиц, координаты и скорости которых определяются с помощью видеомикроскопии. В объектив попадает около 3000 частиц. На основе полученной информации удалось провести расчёт корреляционных и термодинамических функций системы, которые сравнивались с предсказаниями теории БКТХНЯ, при этом достигнуто замечательное согласие между результатами теории и эксперимента. На рисунке 10 показаны полученные из обработки экспериментальных данных [232] структурные факторы, соответствующие кристаллической и гексатической фазам, а также изотропной жидкости.

Упомянем также работу [237], в которой рассмотрено поведение разбавленной двухкомпонентной двумерной системы, состоящей на $\approx 99\%$ из полистироновых сфер диаметром 2,2 мкм и $\approx 1\%$ сфер диаметром 3,0 мкм, взаимодействующих посредством диполь-дипольного потенциала. При этом система находится в состоянии гексатического стекла, в котором дислокации пиннируются более крупными частицами. Переход в результате плавления в изотропную фазу согласуется с механизмом диссоциации дисклинационных пар.

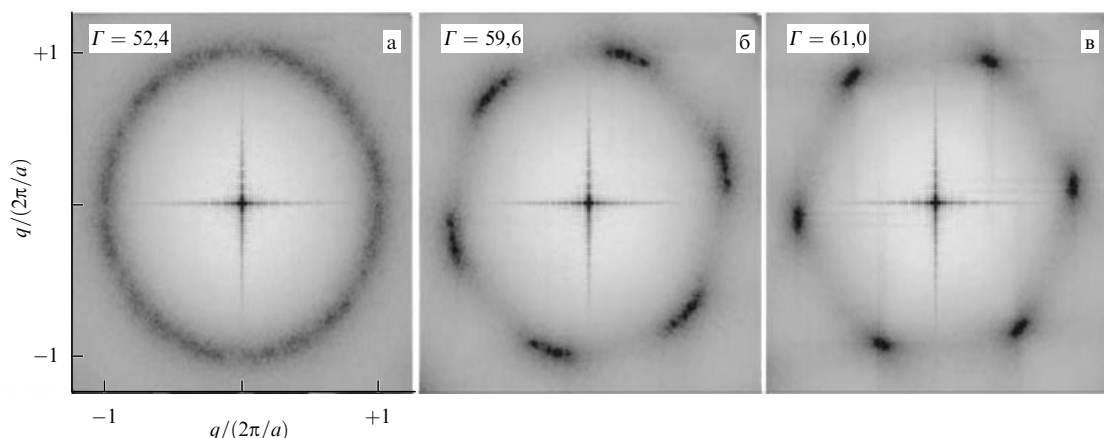


Рис. 10. Структурные факторы системы коллоидов, соответствующие кристаллической (а), гексатической (б) фазам и изотропной жидкости (в). (Из работы [232].)

Похожие результаты получены при изучении системы цилиндрических магнитных доменов с противоположной направленностью в тонкой плёнке [238–240]. Эти домены взаимодействуют посредством диполь-дипольного потенциала. Намагниченность, перпендикулярная плёнке, совпадает по направлению (противоположна в случае домена) с приложенным магнитным полем. Система образует гексатическое стекло при больших значениях плотности магнитных доменов (большие Γ) вследствие пиннинга доменов. При уменьшении Γ (увеличении поля) наблюдался непрерывный переход в изотропную жидкость.

Заметим, что существование гексатического стекла находится в согласии с результатами теоретического анализа Чудновского [241], который показал, что в двумерных системах с микроскопическим беспорядком переход кристалл–гексатическая фаза отсутствует, а наиболее упорядоченным состоянием является гексатическое стекло (т.е. гексатическая фаза, модуль сдвига которой может быть не равным нулю).

Проведённый анализ экспериментальных результатов позволяет сделать вывод о том, что вряд ли можно говорить о существовании единого сценария плавления в двух измерениях. Механизм плавления, по-видимому, зависит от конкретного вида взаимодействия между частицами, при этом возможны как переходы первого рода, так и сценарий, соответствующий теории БКТХНЯ. Более того, можно достаточно уверенно говорить о том, что в случае дальнедействующих (кулоновский и диполь-дипольный) потенциалов плавление происходит посредством двух непрерывных переходов с промежуточной гексатической фазой (теория БКТХНЯ). Дальнейшие подтверждения этого вывода получены в результате компьютерного моделирования. Вместе с тем было показано, что возможен и более сложный сценарий.

Для проверки теорий двумерного плавления было проведено множество работ по компьютерному моделированию двумерных систем. Обзоры этих работ можно найти, например, в [4, 41, 110, 112–114, 188, 230, 242]. Как уже говорилось, экспериментальные результаты приводят к выводу о том, что, вероятнее всего, не существует единого сценария плавления в двух измерениях. Аналогичная ситуация имеет место и в работах по компьютерному моделированию. В качестве примера можно привести ряд работ, в которых получено подтверждение двухстадийного сценария плавления [243–248]. В то же время в большинстве работ был найден традиционный переход первого рода [223, 249–258]. Кроме того, в рамках компьютерного моделирования недавно был предложен ещё один сценарий: показано, что плавление может происходить посредством двух переходов с промежуточной гексатической фазой, при этом кристалл переходит в гексатическую фазу посредством непрерывного БКТ-перехода, а гексатик превращается в изотропную жидкость через переход первого рода [141, 142, 187, 270, 271, 279–282].

Следует отметить, что моделирование двумерных систем связано со значительными трудностями, возникающими из-за сильных флуктуаций. Это приводит к тому, что характерные корреляционные длины и времена релаксации становятся очень большими при приближении к линии плавления, в связи с чем возникает необходимость рассматривать системы, состоящие из большого числа частиц, которые приходится термализо-

вать в течение очень длительного времени для получения надёжных результатов. Поэтому схожие техники моделирования иногда приводят к противоположным результатам даже тогда, когда применяются к системам с одинаковыми потенциалами.

Для определения сценария и параметров перехода используются различные методики. Как следует из рассмотрения разложения Ландау (84), для определения сценария плавления надо сравнить температуры перехода первого рода T_{MF} и температуры неустойчивости по отношению к образованию свободных дислокаций T_m . Для определения T_{MF} используются или метод построения общих касательных к свободной энергии Гельмгольца [259], или построение Максвелла к петлям Вандер-Ваальса (Майера–Вуда [260]) на изотермах. При увеличении числа частиц петли сглаживаются, но не исчезают даже при очень большом числе частиц [266].

Подробный анализ поведения петель Майера–Вуда при изменении числа частиц проведён в работах [271, 272]. В принципе, как показано в [272] методом Монте-Карло на примере системы твёрдых дисков и двумерной модели Изинга, петли Майера–Вуда на изотермах наблюдаются при конечном числе частиц как для систем, демонстрирующих переход первого рода, так и для систем с непрерывным переходом. Однако поведение этих петель при увеличении числа частиц различно. Для перехода первого рода петля присутствует в двухфазной области и определяется поверхностной свободной энергией раздела фаз ΔF [260]. При фиксированной плотности энергии на один диск $\Delta f = \Delta F/N$, которая может быть вычислена из уравнения состояния [270], ведёт себя как $\Delta f \propto N^{-1/2}$. В то же время для непрерывного перехода асимптотика имеет вид $\Delta f \propto N^{-1}$ и петли на изотермах быстро сглаживаются при увеличении числа частиц в системе.

Иллюстрация подобного скейлинга представлена в работе [261] на примере двух моделей Поттса с 8 и 10 состояниями, демонстрирующими фазовый переход первого рода. В работе [271] проведён анализ поведения петель Майера–Вуда для твёрдых дисков при $N = 256^2, 512^2, 1024^2$, который показал, что положение петель, несмотря на уменьшение высоты их максимумов, практически не изменяется. При применении этих методов получается фазовая диаграмма, которая фактически представляет собой линии термодинамической стабильности системы. При температурах выше T_{MF} кристаллическая фаза существовать не может.

Заметим, что если плавление происходит в соответствии со сценарием БКТХНЯ, то на изотермах также обнаруживается немонотонное поведение, вызванное наличием гексатической фазы, однако петли Майера–Вуда при большом числе частиц практически отсутствуют [265].

Вместе с тем, как обсуждалось при рассмотрении разложения Ландау (84), существует температура T_m , при которой в системе возникают свободные топологические дефекты (дислокации) и модуль сдвига обращается в нуль, т.е. кристаллическая решётка плавится. Если $T_m < T_{MF}$, то система плавится посредством непрерывного БКТ-перехода. Для определения T_m используются ориентационный и трансляционный параметры порядка, а также корреляционные функции этих параметров (см. уравнения (91)–(94) в разделе 3.7). При этом использование параметров порядка даёт приблизитель-

ную оценку значения температур перехода кристалла в гексатическую фазу T_m и перехода гексатической фазы в изотропную жидкость T_i , особенно если учесть зависимость параметров порядка от числа частиц в системе (строго говоря, в пределе бесконечно большой системы трансляционный параметр порядка равен нулю в кристаллической фазе с квазидальним трансляционным порядком, а ориентационный параметр порядка равен нулю в гексатической фазе с бесконечно большим числом частиц). Для получения информации о поведении системы в данном случае следует прибегнуть к масштабированию поведения данных параметров, используя последовательность возрастающих по величине ансамблей (см., например, [258]). Однако при достаточном больших размерах рассматриваемых систем использование параметров порядка даёт приемлемые качественные оценки T_m и T_i .

Для корректного определения точек неустойчивости кристаллической и гексатической фаз, на наш взгляд, следует провести анализ асимптотического поведения корреляционных функций трансляционного и ориентационного параметров порядка, а точки перехода определять из условий достижения показателями критических значений $\eta_T(T_m) = 1/3$ и $\eta_6(T_i) = 1/4$. Благодаря учёту масштабной инвариантности этих корреляционных функций в соответствующих фазах с квазидальним порядком такой подход позволяет получать результаты, которые не зависят от числа частиц в системе, если она достаточно велика для получения корректной асимптотики корреляционных функций. Подробное изложение применения данного подхода к конкретной системе дано в разделе 3.7.

Следует также отметить, что гексатическая фаза, как правило, оказывается очень узкой и в некоторых случаях, когда наблюдается переход первого рода между гексатиком и изотропной жидкостью и непрерывный переход кристалл–гексатик, это может привести к неверному определению сценария плавления. В связи с этим представляется перспективным изучение плавления при наличии случайного беспорядка, который приводит к уширению гексатической фазы без изменения сценария плавления, а в случае плавления посредством перехода первого рода может изменить и сценарий плавления, как показано в разделе 3.7.

Простейшей системой, которая демонстрирует переход твёрдое тело – жидкость в двух измерениях, является система твёрдых дисков. Система твёрдых дисков изучалась методами компьютерного моделирования начиная с классических работ Олдера и Вайнрайта [22–25]. Из рассмотрения ван-дер-ваальсовой петли на кривой давление – плотность, часто называемой в случае двух измерений петлёй Майера–Вуда [260], Олдер и Вайнрайт заключили, что плавление происходит как переход первого рода, при этом приведённые плотности $\rho\sigma^2$, где σ — диаметр твёрдого диска, сосуществующих жидкой и твёрдой фаз составляли: $\rho_f\sigma^2 = 0,880$ и $\rho_s\sigma^2 = 0,912$. Эти результаты подтверждены в работе Хувера и Ри [262], которые получили $\rho_f\sigma^2 = 0,878$ и $\rho_s\sigma^2 = 0,922$. В этих ранних работах размер системы не превышал 870 частиц и не исследовалась зависимость перехода от размера системы.

В работе [245] показано, что основные параметры системы, включая модуль сдвига и параметр порядка для ориентационного порядка связей, существенно зави-

сят от размера системы в окрестности линии плавления. В связи с этими размерными эффектами в работе [249] была рассмотрена гораздо бóльшая система, состоящая из 16384 частиц, при этом получены значения $\rho_f\sigma^2 = 0,887$ и $\rho_s\sigma^2 = 0,904$. В работе [250] в рамках метода Монте-Карло для ансамбля с постоянным давлением проведён анализ зависимости плавления от размера с использованием метода масштабирования Ли–Костерлица [263]. Результаты были интерпретированы как "строгое" доказательство существования перехода первого рода. В системе, видимо, было достигнуто истинное термодинамическое равновесие, однако степень строгости рассмотрения в работе [263] достаточно иллюзорна, так как размер системы был всё же гораздо меньше корреляционной длины.

Размерный анализ ориентационного параметра порядка, восприимчивости по отношению к этому параметру и сжимаемости на больших системах (до 16384) проведён в работах [251, 258], при этом был получен переход первого рода, а значения параметров перехода совпали с результатами работы [249]. Однако следует упомянуть недавнюю работу [264] с использованием метода Монте-Карло, авторы которой пришли к выводу о том, что система плавится посредством одного непрерывного перехода, без гексатической фазы, при $\rho\sigma^2 = 0,794$. По-видимому, причина расхождений состоит в трудностях с достижением истинного термодинамического равновесия. Хорошей иллюстрацией этого тезиса служат работы классика компьютерного моделирования Курта Биндера [258, 265], 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.

В работе Мака [266] рассмотрено плавление системы твёрдых дисков, при этом число частиц в моделировании методом Монте-Карло варьировалось в пределах $N = 512^2, 1024^2, 2048^2$. При этом оказалось, что петля Ван-дер-Ваальса становится менее выраженной при увеличении числа частиц, хотя даже для самых больших значений N переход остаётся слабым переходом первого рода. Плотность перехода была оценена как $\rho = 0,920$ (см. также [267–269]). Вместе с тем скейлинговый анализ ориентационной корреляционной функции показал, что в непосредственной окрестности плотности перехода наблюдается поведение, характерное для гексатической фазы, хотя двухстадийного перехода найдено не было. Сравнительно недавно появились работы Крауса с соавторами [270, 271], в которых предложен совершенно иной взгляд на плавление твёрдых дисков. Эти работы обсуждаются ниже.

Ситуация с системами с непрерывными потенциалами оказывается ещё более сложной. Вискс [273] аналитически показал, что для потенциалов вида $1/r^n$ при плавлении не может быть скачка объёма при $n < d$, где d — размерность пространства. Таким образом, в двумерном случае плавление системы с кулоновским потенциалом $1/r$ должно происходить без скачка объёма. С этим согласуются выводы работы [197], в которой показано, что система с потенциалом $1/r$ плавится посредством двух непрерывных переходов, в то время как система с дипольным потенциалом $1/r^3$ плавится посредством перехода первого рода. К аналогичному выводу приводит изучение систем с потенциалом вида

$1/r^n$, $3 \leq n \leq 6$ [223, 252, 253]. Наконец, упомянем работу [224], в которой приведены результаты изучения методом молекулярной динамики системы из 780 частиц, взаимодействующих посредством потенциала мягких сфер $1/r^{12}$. При этом из рассмотрения петли Майера–Вуда и сравнения свободных энергий показано, что система плавится посредством слабого перехода первого рода.

Совокупность результатов большинства ранних компьютерных экспериментов (см. также обзор [112]) привела большинство исследователей к выводу о том, что системы с дальнедействующим потенциалом (например, кулоновским) плавятся в соответствии со сценарием теории БКТХНЯ, в то время как короткодействующий потенциал приводит к плавлению посредством перехода первого рода. Вместе с тем в работах [247, 248] было достаточно убедительно (с анализом размерных эффектов и на больших, до 65536 частиц, системах) показано, что система с потенциалом $1/r^{12}$ плавится посредством двух непрерывных переходов с промежуточной гексатической фазой в соответствии с теорией БКТХНЯ. Авторы более поздней статьи [274] с помощью моделирования методом Монте-Карло системы с потенциалом Леннарда-Джонса для большого числа частиц (более 100000) также пришли к выводу о том, что плавление происходит посредством двух непрерывных переходов, в соответствии с теорией БКТХНЯ.

Как упоминалось выше, все эти расхождения могут быть естественным следствием ошибок, возникающих при изучении фазовых переходов с помощью моделирования. Вблизи фазовой границы корреляционная длина параметра порядка может быть настолько велика, что может превысить конечные размеры системы и тем самым привести к ложным результатам. Помимо того, большие времена релаксации делают термодинамическое равновесие трудно достижимым, что приводит к необходимости значительно увеличивать время моделирования для уменьшения статистических ошибок. В работе [275] при изучении системы с потенциалом r^{-12} показано, что результат очень чувствителен к выбору граничных и начальных условий. Скейлинговый размерный анализ, который был изобретён для преодоления некоторых из этих трудностей [263], также трудно применим в случае плавления из-за наличия двух расходящихся корреляционных длин, соответствующих ориентационному порядку связей и трансляционному порядку.

Отметим также работы по изучению поведения системы с потенциалом Юкавы, который, в частности, может быть применён для описания пылевой плазмы [276–278].

В этой ситуации определённой сенсацией оказалось появление работ Крауса с соавторами [270, 271]. В результате применения трёх методов компьютерного моделирования (двух вариантов метода Монте-Карло и метода молекулярной динамики) для больших систем (до 1024^2 частиц) с помощью достаточно тщательного анализа полученных результатов, включающего в себя рассмотрение скейлингового поведения петель Майера–Вуда на изотермах, а также ориентационного и трансляционного параметров порядка, недавно был предложен ещё один сценарий плавления [179, 270, 271] (см. также [280, 281, 283]). Оказалось, что плавление может происходить посредством двух переходов, однако при этом, вопреки теории БКТХНЯ, переход твёрдое тело –

гексатическая фаза представляет собой непрерывный переход типа БКТ, а переход гексатическая фаза – изотропная жидкость является переходом первого рода**.

Особенно следует отметить работу [279], в которой рассматривалось плавление системы мягких дисков, описываемых потенциалом вида $1/r^n$, при этом было показано, что для $n \leq 6$ система плавится в соответствии с теорией БКТХНЯ, а при $n > 6$ — в соответствии с описанным выше сценарием [187, 270, 271, 279–281]. Этот сценарий плавления обсуждается в заключении (раздел 4).

В работе [282] показано, что система с потенциалом Герца также плавится посредством двух переходов: непрерывного перехода кристалл–гексатик и перехода первого рода гексатик–изотропная жидкость. Следует отметить, что область гексатической фазы на фазовой диаграмме обычно оказывается очень узкой, что вполне могло быть интерпретировано в компьютерных и реальных экспериментах как простой переход первого рода между кристаллом и изотропной жидкостью. В этой ситуации полезным оказывается применение случайного пиннинга, для того чтобы увеличить область гексатической фазы и более подробно изучить её свойства (см. [141, 142], а также раздел 3.7).

Теория БКТХНЯ вскоре после своего появления была применена в работах [284, 285] к описанию плавления системы вихрей в тонких сверхпроводящих плёнках. Используя полученные ранее выражения для модулей упругости вихревой решётки [286] и критерий плавления БКТ (65), авторы [284, 285] получили оценки для кривых плавления системы вихрей. Однако никаких оценок для перехода гексатическая фаза – изотропная жидкость сделано не было. Существование плавления вихревой решётки в тонких сверхпроводящих плёнках подтверждено экспериментально [166, 287–289], причём авторы интерпретировали результаты в рамках теории БКТХНЯ.

В работе [290] высокотемпературное разложение использовалось для вычисления свободных энергий решётки вихрей и вихревой жидкости, при этом показано, что эти энергии очень близки между собой, таким образом, плавление решётки не может быть ярко выраженным переходом первого рода.

Большое число работ посвящено компьютерному моделированию плавления вихревой решётки. При анализе этих работ следует учитывать, что в такой системе существует ещё один (отсутствующий в обычной двумерной решётке) сильно флуктуирующий параметр порядка — плотность сверхпроводящих электронов (в теории Гинзбурга–Ландау). Это приводит к тому, что упоминавшиеся выше проблемы с достижением равновесия в системе усугубляются в случае сверхпроводящих плёнок, вследствие чего полученные результаты оказываются достаточно противоречивыми.

** После написания данного обзора появилась работа [313], в которой представлено остроумное экспериментальное подтверждение результатов работ [270, 271]. Авторы [313] рассмотрели поведение монослоя 2,79 мкм коллоидных частиц в смеси воды и этанола в наклонной геометрии и определили уравнение состояния, а также области существования жидкой, гексатической и кристаллической фаз. Оказалось, что переход из кристаллической фазы в гексатическую является непрерывным БКТ-переходом, а гексатическая фаза переходит в изотропную жидкость посредством перехода первого рода. Следует заметить, что авторы [313] получили количественное согласие с результатами моделирования [270, 271].

В работе [291] авторы исходили из гамильтониана Гинзбурга – Ландау, при этом было показано, что плавление решётки существует, но вид перехода не был установлен. В работах [292–295] показано, что плавление вихревой решётки происходит посредством слабого перехода первого рода. В работе [296] найдено плавление решётки, при этом численные параметры перехода согласуются с теорией БКТХНЯ и теоретическими оценками [285], однако не обнаружено признаков гексатической фазы, и в итоге сделан вывод, что плавление вихревой решётки происходит как слабый переход первого рода.

Вместе с тем следует отметить работы [297–300], авторы которых на основе моделирования по методу Монте-Карло системы вихрей в высокотемпературной области пришли к заключению, что плавление решётки вихрей отсутствует. Таким образом, не только вид перехода, но и само существование плавления вихревой решётки остаётся нерешённым вопросом.

Отметим также экспериментальные работы [301, 302], в которых показано, что плавление решётки вихрей в изотропную жидкость происходит посредством трёх переходов через гексатическую и смектикоподобную фазы.

В целом, анализ результатов компьютерных и реальных экспериментов позволяет сделать вывод, что в зависимости от вида потенциала двумерная система может плавиться в соответствии с тремя сценариями. Может наблюдаться обычный переход первого рода, однако для дальнедействующих потенциалов, скорее всего, реализуется сценарий БКТХНЯ. Недавно был предложен новый сценарий плавления, согласно которому система может плавиться посредством двух переходов, при этом переход из кристалла в гексатик является непрерывным переходом типа БКТХНЯ, однако гексатик переходит в изотропную жидкость в результате перехода первого рода.

3.7. Плавление двумерных систем с потенциалами с отрицательной кривизной

Кратко обсудим результаты компьютерного моделирования методом молекулярной динамики системы, описываемой потенциалом с отрицательной кривизной в области отталкивания. Этот потенциал, который обладает двумя характерными длинами [138, 139], имеет вид

$$U(r) = \varepsilon \left(\frac{\sigma}{r} \right)^n + \frac{1}{2} \varepsilon \{ 1 - \tanh [k_1(r - \sigma_1)] \}, \quad (89)$$

где σ — диаметр ядра потенциала, $n = 14$ и $k_1\sigma_1/\sigma = 10,0$. Мы рассматриваем системы с двумя диаметрами: $\sigma_1/\sigma = 1,15; 1,35$ (рис. 11).

Потенциал (89) ранее был предложен для того, чтобы качественно описать особенности фазовой диаграммы водоподобных жидкостей, в том числе хорошо известные аномалии, наблюдаемые в воде [138–142, 303–311]. В трёхмерном случае на фазовой диаграмме системы, описываемой потенциалом (89), наблюдаются максимумы и минимумы на кривой плавления, структурный полиморфизм, аномалии диффузии, структуры и коэффициента теплового расширения, наблюдаемые в воде, а также область, в которой имеется состояние стекла [303–311]. В случае двух измерений при $\sigma = 1,35$ также имеются полиморфизм и аномальное поведение, но порядок следования аномалий соответствует не воде, а жидкому кремнезёму [138–142]. Далее мы кратко обсудим фазо-

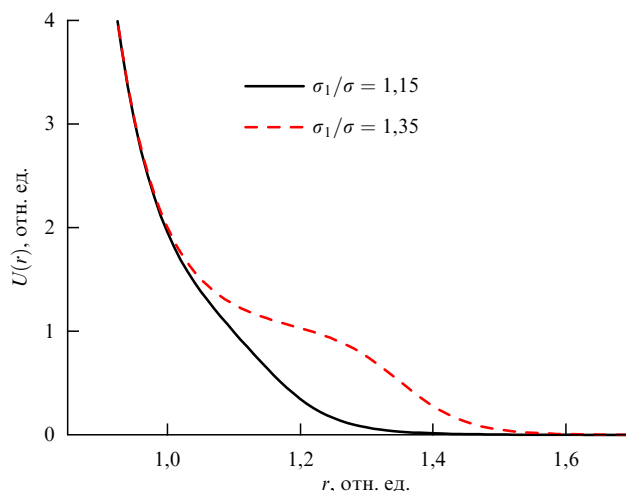


Рис. 11. Потенциал (89) для двух диаметров ядра: $\sigma_1/\sigma = 1,15$ и $1,35$.

вые диаграммы и нетривиальные сценарии плавления, получающиеся для потенциала (89) в двумерном случае без случайного беспорядка и при наличии случайного пиннинга.

В этом разделе используются безразмерные величины: $\tilde{\mathbf{r}} \equiv \mathbf{r}/\sigma$, $\tilde{P} \equiv P\sigma^2/\varepsilon$, $\tilde{V} \equiv V/N\sigma^2 \equiv 1/\tilde{\rho}$, $\tilde{T} \equiv k_B T/\varepsilon$, $\tilde{\sigma} = \sigma_1/\sigma$. (Далее тильды опускаются.)

Исследование плавления систем с числом частиц от 20000 до 100000 проводилось методом молекулярной динамики (пакет LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator)) [312] в ансамблях вида NVT ($N = \text{const}$, $V = \text{const}$, $T = \text{const}$) и NVE ($N = \text{const}$, $V = \text{const}$, $E = \text{const}$). Нами рассматривались системы с концентрацией дефектов 0,1 %, моделирование выполнялось для 10 конфигураций пиннинговых частиц, по которым проводилось усреднение.

Для определения границ фазовых переходов применялось несколько методов. Первичная оценка проводилась на основе анализа уравнений состояния. В случае переходов первого рода на изотермах должны наблюдаться петли Майера – Вуда, которые при таком числе частиц практически отсутствуют для непрерывных переходов. Уравнения состояния весьма надёжно отражают области перехода, т.е. области сосуществования двух фаз, но не дают информации о сценарии перехода. Для определения точных границ гексатической фазы и кристалла в данных вычислениях мы использовали предложенный нами впервые в работе [141] подход, связанный с дальнедействующим поведением ориентационных и трансляционных корреляционных функций параметров порядка.

Как обсуждалось в разделе 3.2 (см. также [38]), граница устойчивости гексатической фазы может быть определена из условия равенства показателя степени ориентационной корреляционной функции (ОКФ) $\eta_6 = 1/4$, в то время как трансляционная корреляционная функция (ТКФ) при переходе кристалл – гексатик также убывает степенным образом с показателем $\eta_T = 1/3$. При наличии пиннинга нами обнаружено [141], что огибающая ТКФ в логарифмических координатах в зависимости от расстояния имеет излом, после которого и применим критерий убывания ТКФ степенным образом с показателем $\eta_T = 1/3$, для определения границы стабильности кристалла при переходе в гексатическую фазу.

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

Для оценки степени ориентационного упорядочения применялся параметр порядка

$$\Psi_6(\mathbf{r}_i) = \frac{1}{n(i)} \sum_{j=1}^{n(i)} \exp(i6\theta_{ij}), \quad (90)$$

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

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

$$\psi_6 = \frac{1}{N} \left\langle \left\langle \left| \sum_i \Psi_6(\mathbf{r}_i) \right| \right\rangle \right\rangle_{\text{гр}}. \quad (91)$$

Внешние угловые скобки $\langle \dots \rangle_{\text{гр}}$ обозначают усреднение по конфигурациям, соответствующим различным распределениям центров пиннинга.

Трансляционное упорядочение в системе определяется из параметра порядка

$$\psi_T = \frac{1}{N} \left\langle \left\langle \left| \sum_i \exp(i\mathbf{G}\mathbf{r}_i) \right| \right\rangle \right\rangle_{\text{гр}}, \quad (92)$$

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

Трансляционная корреляционная функция имеет вид

$$G_T(r) = \left\langle \frac{\langle \exp(i\mathbf{G}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)) \rangle}{g(r)} \right\rangle_{\text{гр}}, \quad (93)$$

где $r = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$, $g(r) = \langle \delta(\mathbf{r}_i) \delta(\mathbf{r}_j) \rangle$ — радиальная функция распределения. В кристаллической фазе без замороженного беспорядка в пределе $r \rightarrow \infty$ $G_T(r) \propto r^{-\eta_T}$, где $\eta_T \leq 1/3$ [38].

Похожим образом определяется и ОКФ $G_6(r)$:

$$G_6(r) = \left\langle \frac{\langle \Psi_6(\mathbf{r}) \Psi_6^*(\mathbf{0}) \rangle}{g(r)} \right\rangle_{\text{гр}}, \quad (94)$$

где $\Psi_6(\mathbf{r})$ — локальный ориентационный параметр порядка (90). В гексатической фазе ОКФ убывает по степенному закону: $G_6(r) \propto r^{-\eta_6}$, где $0 \leq \eta_6 \leq 1/4$ [38]. Гексатическая фаза теряет стабильность при достижении условия $\eta_6(T_i) = 1/4$.

Ситуация с $\sigma = 1,15$ достаточно проста. Как видно из рис. 11, в этом случае потенциал близок к потенциалу мягких сфер $1/r^{14}$, а сценарий плавления согласуется со сценарием, предложенным в работе [279]: система плавится посредством двух переходов, при этом переход кристалл–гексатик — непрерывный переход типа БКТХНЯ, а гексатик переходит в изотропную жидкость посредством перехода первого рода. Наличие случайного пиннинга понижает температуру перехода из кристалла в гексатическую фазу, практически не влияя на переход из гексатика в изотропную жидкость, тем самым расширяя область гексатической фазы [142].

Случай $\sigma = 1,35$ гораздо более интересен. Применяя

Гельмгольца кристаллической и жидкой фаз [259], а также построение Максвелла к петле Майера–Вуда, можно рассчитать фазовую диаграмму, соответствующую предположению о том, что все переходы являются переходами первого рода. Как обсуждалось выше, эта фазовая диаграмма представляет собой область абсолютной устойчивости кристалла. В то же время при более низкой температуре T_m может возникнуть неустойчивость по отношению к диссоциации дислокационных пар, что приводит к плавлению посредством непрерывного перехода типа БКТ. Применение критериев, основывающихся на поведении корреляционных функций ориентационных и трансляционных параметров порядка, позволяет уточнить сценарий плавления. На рисунке 12 показана фазовая диаграмма системы, детали которой разъясняются ниже.

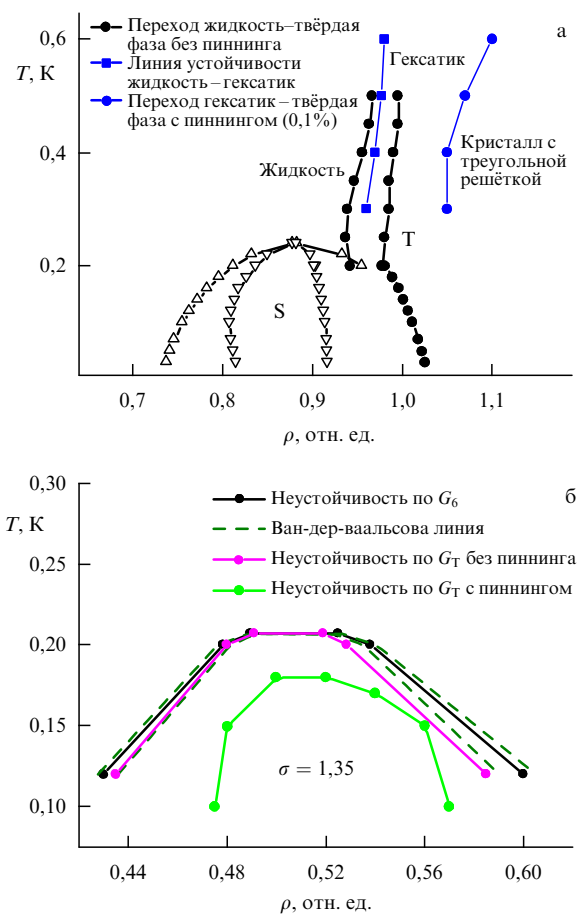


Рис. 12. (В цвете онлайн.) Фазовая диаграмма системы с $\sigma = 1,35$. (а) S — квадратная решётка, T — треугольная. В отсутствие пиннинга плавление происходит посредством перехода первого рода. При включении случайного пиннинга (концентрация 0,1 %) линия перехода из кристалла в гексатическую фазу сдвигается в сторону более высоких плотностей, тем самым с изменением сценария плавления переход из кристалла в гексатик становится непрерывным, а переход гексатик — изотропная жидкость остаётся переходом первого рода. (б) Фазовая диаграмма при низких плотностях. Из построения Максвелла и поведения корреляционных функций показано, что в отсутствие пиннинга плавление на левой ветви фазовой диаграммы происходит посредством перехода первого рода, а на правой — в результате непрерывного перехода из кристалла в гексатик и перехода первого рода из гексатика в изотропную жидкость. При наличии пиннинга на обеих ветвях реализуется последний описанный сценарий.

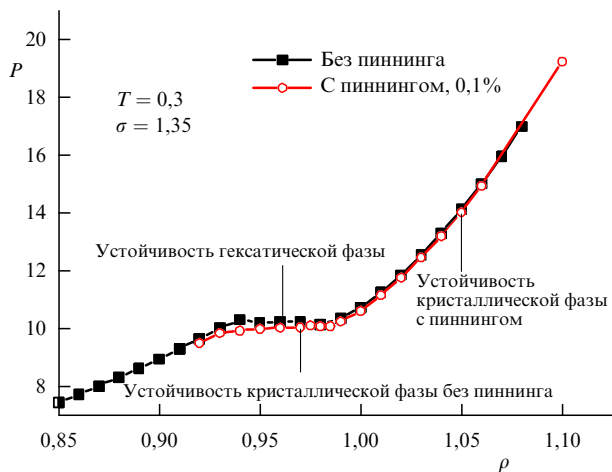


Рис. 13. Уравнение состояния при $T = 0,3$ без пиннинга и при наличии пиннинга с концентрацией 0,1 % .

На рисунке 13 представлено уравнение состояния, соответствующее рис. 12а. Из рисунка видно, что при наличии пиннинга уравнение состояния практически не изменяется. Корреляционные функции ориентационного, G_6 , и трансляционного, G_T , параметров порядка без пиннинга и с пиннингом изображены на рис. 14а, б и в, г соответственно. Во-первых, видно, что случайный пиннинг практически не влияет на поведение G_6 , в то время как трансляционная корреляционная функция G_T изменяется значительно. В частности, на рис. 14г виден излом, соответствующий дополнительному увеличению показателя η_T , обусловленному беспорядком (см. (86)). Из рисунка 13 видно, что в отсутствие случайного пиннинга точки неустойчивости, соответствующие усло-

виям $\eta_6 = 1/4$ и $\eta_T = 1/3$, оказываются внутри двухфазной области, что свидетельствует о реализации перехода первого рода. В то же время при наличии пиннинга кристалл становится неустойчивым при плотностях, заметно превышающих плотность, при которой наблюдается двухфазная область, тогда как плотность, соответствующая неустойчивости гексатической фазы, остаётся внутри петли Майера – Вуда. Таким образом, случайный пиннинг меняет сценарий плавления в случае перехода первого рода, превращая этот переход в два: в непрерывный переход типа БКТХНЯ кристалл – гексатик и переход первого рода из гексатика в изотропную жидкость.

Аналогичный анализ для области низкой плотности на фазовой диаграмме (рис. 12б) показывает, что в отсутствие пиннинга плавление на левой ветви фазовой диаграммы происходит посредством перехода первого рода, а на правой — в результате непрерывного перехода из кристалла в гексатик и перехода первого рода из гексатика в изотропную жидкость. При наличии пиннинга на обеих ветвях реализуется последний описанный сценарий [141, 142].

На рисунке 15 показано поведение коэффициента диффузии как функции температуры, соответствующее рис. 12б. Из рисунка видно, что наличие пиннинга действительно приводит к превращению кристалла в гексатическую фазу с коэффициентом диффузии, отличным от такового как для твёрдого тела, так и для изотропной жидкости.

Следует также отметить, что для потенциала (89) на фазовой диаграмме выявлена область с нетривиальной квадратной симметрией кристаллической решётки. Недавно подобная структура была обнаружена при экспериментальном исследовании свойств воды, заключённой между двумя графеновыми листами [147].

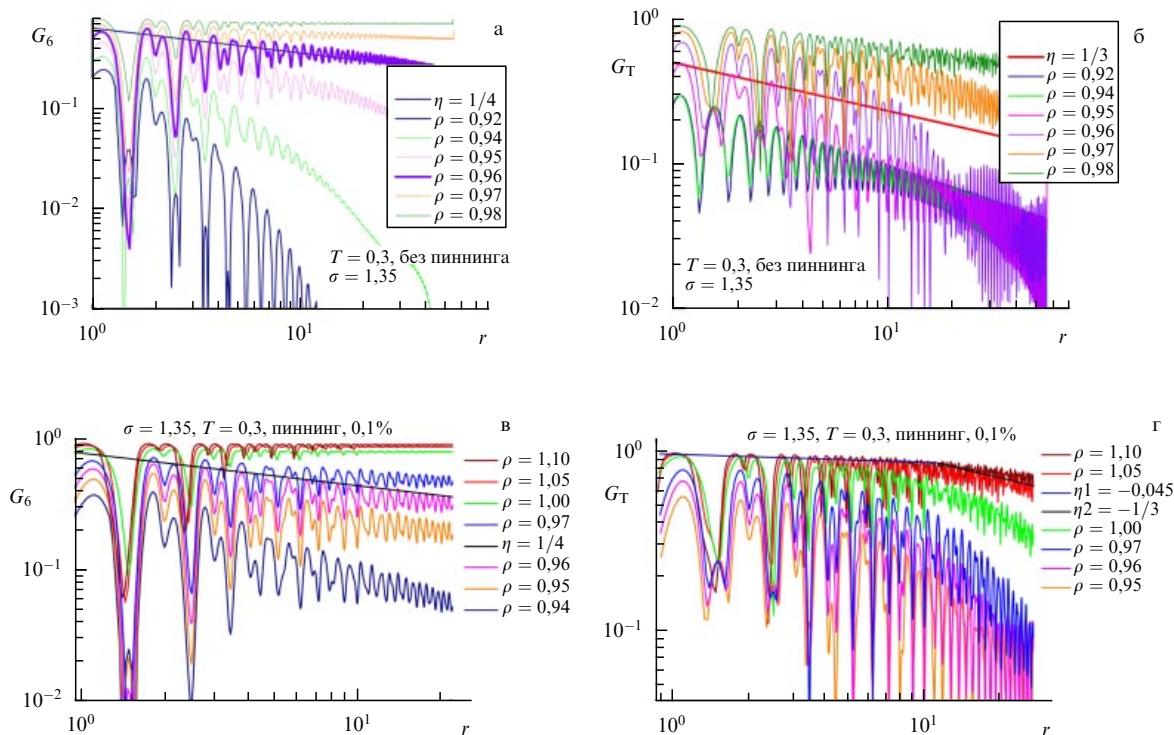


Рис. 14. (В цвете онлайн.) Корреляционные функции G_6 и G_T без пиннинга (а, б) и с пиннингом (в, г).

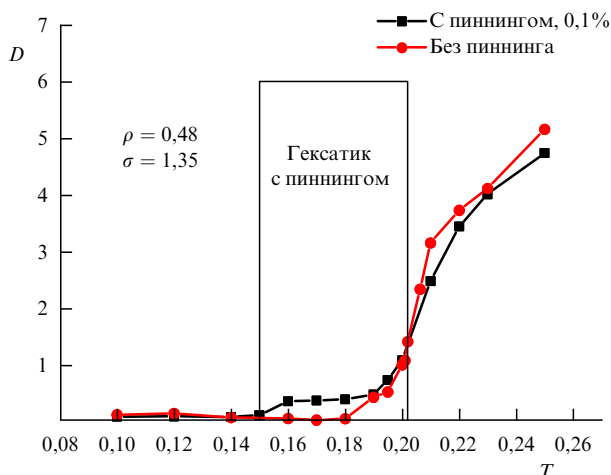


Рис. 15. Коэффициент диффузии D без пиннинга и при наличии пиннинга с концентрацией 0,1 %.

4. Заключение

Разработанная более 45 лет назад теория Березинского – Костерлица – Таулеса за прошедшее время превратилась из довольно необычного на тот момент подхода к описанию фазовых переходов в системах, где с точки зрения стандартной на тот момент теории никаких фазовых переходов и быть не должно, в мощный метод, широко применяемый при исследовании не только плоских магнетиков и плёнок сверхтекучего ^4He , которым в первую очередь были посвящены пионерские работы [1 – 3, 30], но и широкого спектра самых различных низкоразмерных систем, включая сверхпроводники и системы джозефсоновских контактов, квазидвумерные системы ультрахолодных атомов в оптомагнитных ловушках, жидкокристаллические плёнки, двумерные коллоиды, электроны на поверхности жидкого гелия, атомы инертных газов на подложках (в частности, 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 (в том числе воды) и т.д. (см., например, [4, 41]).

Отдельно следует упомянуть получившие в результате этих работ мощное развитие теории двумерного плавления, прежде всего теорию Березинского – Костерлица – Таулеса – Хальперина – Нельсона – Янга [38, 39], предложившую нестандартный сценарий плавления двумерных кристаллов посредством двух непрерывных переходов с промежуточной гексатической фазой. Эта теория инициировала огромное число экспериментальных и теоретических работ, частично описанных выше. В настоящее время можно с достаточной степенью уверенности, опираясь на результаты как эксперимента (см. например, [111, 185, 186, 189 – 195, 230 – 236]), так и компьютерного моделирования [279], 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 в настоящем обзоре, плавление также может происходить как посредством стандартного пере-

хода первого рода, так и в соответствии с недавно предложенным сценарием, согласно которому переход из кристалла в гексатическую фазу является непрерывным переходом типа БКТХНЯ, в то время как переход гексатическая фаза – изотропная жидкость представляет собой переход первого рода. Последний сценарий, видимо, справедлив для некоторых систем с короткодействующими потенциалами (например, в [279] показано, что в случае потенциала вида $1/r^n$ этот сценарий имеет место при $n > 6$).

В настоящее время отсутствуют чёткие теоретические критерии, позволяющие однозначно определить исходя из вида потенциала, по какому сценарию произойдёт плавление. Как обсуждалось выше, в ранних работах в основном преобладала точка зрения, согласно которой 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 [141, 142, 270, 271, 279, 280] стало ясно, что гексатическая фаза может существовать и для короткодействующих потенциалов, в том числе в твёрдых дисках. Более того, как обсуждалось в разделе 3.7 (см. также [141, 142]), 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.

Переход первого рода из гексатической фазы в изотропную жидкость можно объяснить тем, что энергия ядра топологического дефекта (дисклинация) достаточно мала (см. рис. 3 и обсуждение в разделах 2.1 и 2.2), однако не ясно, как эта энергия и модуль Франка гексатической фазы связаны с межчастичным потенциалом. Более того, при обсуждении фазовых переходов представляется естественным исходить из универсальной теории Ландау. Если качественное объяснение перехода из кристаллической фазы в гексатик или изотропную жидкость можно получить из разложения типа (84), то аналогичная теория для перехода первого рода гексатик – изотропная жидкость отсутствует, и пока не ясно, как её можно построить, принимая во внимание симметрию соответствующего параметра порядка. Вообще, проблема вычисления энергии ядра топологического дефекта исходя из межчастичного потенциала остаётся далёкой от полного решения.

Как 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 разным, иногда весьма экзотическим потенциалам. Адаптация теории БКТХНЯ к данным структурам и получение соответствующих критериев устойчивости кристаллических фаз также представляется важной задачей.

В завершение хотелось бы ещё раз подчеркнуть, что разработанная более 45 лет назад Березинским, Костерлицем и Таулесом теория, за которую в 2016 г. Костерлиц и Таулес заслуженно получили Нобелевскую премию, до

сих пор служит мощным стимулом к изучению двумерных систем самой различной природы.

Авторы благодарны С.М. Стишову, В.В. Бражкину, В.М. Винокуру, М.В. Садовскому, А.К. Муртазаеву, А.В. Михеенкову за полезные обсуждения различных аспектов обзора. Раздел 2 написан при поддержке Российским фондом фундаментальных исследований (грант 17-02-00320), раздел 3 — при поддержке Российским научным фондом (грант 14-22-00093).

Список литературы

- 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)
- Амбегаокар В *УФН* **178** 1359 (2008); Ambegaokar V *Phys. Usp.* **51** 1287 (2008)
- Ландау Л Д *ЖЭТФ* **7** 627 (1937); Ландау Л Д *Собрание трудов Т. 1* (М.: Наука, 1969) с. 253; Landau L *Phys. Z. Sowjetunion* **11** 545 (1937)
- 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* **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. 1-го русск. изд.: Patashinskii A Z, Pokrovskii V L *Fluctuation Theory of Phase Transitions* (Oxford: Pergamon Press, 1979)
- Kagiwada 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 T E *J. Chem. Phys.* **27** 1208 (1957)
- Alder B J, Wainwright T E *J. Chem. Phys.* **31** 459 (1959)
- Alder B J, Wainwright T E *J. Chem. Phys.* **33** 1439 (1960)
- Alder B J, Wainwright T E *Phys. Rev.* **127** 359 (1962)
- Wood W W, Jacobson J D *J. Chem. Phys.* **27** 1207 (1957)
- 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)
- Стишов С М *УФН* **114** 3 (1974); Stishov S M *Sov. Phys. Usp.* **18** 625 (1975)
- Боголюбов Н Н "Квазисредние в задачах статистической механики", в кн. *Собрание научных трудов в 12-ти 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 D *Phys. Rev.* **176** 250 (1968)
- 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)
- Березинский В Л "Низкотемпературные свойства двумерных систем с непрерывной группой симметрии", Дисс. ... канд. физ.-мат. наук (М.: Институт теоретической физики им. Л.Д. Ландау, 1971); Березинский В Л *Низкотемпературные свойства двумерных систем с непрерывной группой симметрии* (М.: Физматлит, 2007)
- José J V (Ed.) *40 Years of Berezinskii – Kosterlitz – Thouless Theory* (Singapore: World Scientific, 2013)
- Рыжов В Н *УФН* **187** 125 (2017); Ryzhov V N *Phys. Usp.* **60** 114 (2017)
- Minnhagen P *Rev. Mod. Phys.* **59** 1001 (1987)
- Nelson D R, Kosterlitz J M *Phys. Rev. Lett.* **39** 1201 (1977)
- Bishop D J, Reppy J D *Phys. Rev. Lett.* **40** 1727 (1978)
- Rudnick I *Phys. Rev. Lett.* **40** 1454 (1978)
- Young A P *J. Phys. C* **11** L453 (1978)
- Levin Y, Li X, Fisher M E *Phys. Rev. Lett.* **73** 2716 (1994)
- Ohta T *Prog. Theor. Phys.* **60** 968 (1978)
- Wiegmann P B *J. Phys. C* **11** 1583 (1978)
- Amit D J, Goldschmidt Y Y, Grinstein S J *Phys. A* **13** 585 (1980)
- Minnhagen P, Nylén M *Phys. Rev. B* **31** 5768 (1985)
- Minnhagen P, Weber H *Phys. Rev. B* **32** 3337(R) (1985)
- Weber H, Minnhagen P *Phys. Rev. B* **38** 8730 (1988)
- Minnhagen P *Phys. Rev. B* **27** 2807 (1983)
- Minnhagen P *Phys. Rev. B* **28** 2463 (1983)
- Minnhagen P *Phys. Rev. B* **29** 1440 (1984)
- Minnhagen P *Phys. Rev. B* **32** 3088 (1985)
- Minnhagen P *Phys. Rev. Lett.* **54** 2351 (1985)
- Minnhagen P *Phys. Rev. B* **32** 7548 (1985)
- Minnhagen P, Wallin M *Phys. Rev. B* **36** 5620 (1987)
- Minnhagen P, Wallin M *Phys. Rev. B* **40** 5109 (1989)
- Jonsson A, Minnhagen P, Nylén M *Phys. Rev. Lett.* **70** 1327 (1993)
- Théron R et al. *Phys. Rev. Lett.* **71** 1246 (1993)
- Thijssen J M, Knops H J F *Phys. Rev. B* **38** 9080 (1988)
- Lee J-R, Teitel S *Phys. Rev. Lett.* **64** 1483 (1990)
- Lee J-R, Teitel S *Phys. Rev. Lett.* **66** 2100 (1991)
- Lee J-R, Teitel S *Phys. Rev. B* **46** 3247 (1992)
- Caillol J M, Levesque D *Phys. Rev. B* **33** 499 (1986)
- Xu B-W, Zhang Y-M *Phys. Rev. B* **50** 18651 (1994)
- Ding G-H, Xu B-W *Phys. Rev. B* **51** 12653 (1995)
- Hansen J P, Viot P *J. Stat. Phys.* **38** 823 (1985)
- Mayer J E, Mayer M G *Statistical Mechanics* (New York: Wiley, 1977)
- Deusch C, Lavaud M *Phys. Rev. A* **9** 2598 (1974)
- Everts H U, Koch W Z *Phys. B* **28** 117 (1977)
- Høye J S, Olaussen K *Physica A* **104** 447 (1980)
- Høye J S, Olaussen K *Physica A* **107** 241 (1981)
- Salzberg A M, Prager S J *Chem. Phys.* **38** 2587 (1963)
- Beasley M R, Mooij J E, Orlando T P *Phys. Rev. Lett.* **42** 1165 (1979)
- 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 Yu, Ryzhov V N, Tareyeva E E *Phys. Lett. A* **207** 374 (1995)
- Tinkham M *Introduction to Superconductivity* (New York: McGraw-Hill, 1975)
- Halperin B I, Nelson D R *J. Low Temp. Phys.* **36** 599 (1979)
- Garland J C, Lee H J *Phys. Rev. B* **36** 3638 (1987)
- Hsu J W P, Kapitulnik A *Phys. Rev. B* **45** 4819 (1992)
- Epstein K, Goldman A M, Kadin A M *Phys. Rev. Lett.* **47** 534 (1981)
- Fiory A T, Hebard A F, Glaberson W I *Phys. Rev. B* **28** 5075 (1983)
- Jeanneret B et al. *Phys. Rev. B* **40** 11374(R) (1989)
- Wallin M *Phys. Rev. B* **41** 6575 (1990)
- Turneure S J, Lemberger T R, Graybeal J M *Phys. Rev. Lett.* **84** 987 (2000)
- Crane R W et al. *Phys. Rev. B* **75** 094506 (2007)
- Liu W et al. *Phys. Rev. B* **84** 024511 (2011)
- Kamlapure A et al. *Appl. Phys. Lett.* **96** 072509 (2010)
- Mondal M et al. *Phys. Rev. Lett.* **107** 217003 (2011)
- Lin Y-H, Nelson J, Goldman A M *Phys. Rev. Lett.* **109** 017002 (2012)
- Misra S et al. *Phys. Rev. Lett.* **110** 037002 (2013)
- Baity P G et al. *Phys. Rev. B* **93** 024519 (2016)
- Daptary G N et al. *Phys. Rev. B* **94** 085104 (2016)
- Maccari I, Benfatto L, Castellani C, arXiv:1702.05930
- Рыжов В Н, Тареева Е Е *ТМФ* **96** 425 (1993); Ryzhov V N, Tareeva E E *Theor. Math. Phys.* **96** 1062 (1993)
- Ryzhov V N, Tareyeva E E *Phys. Rev. B* **48** 12907 (1993)
- Ryzhov V N, Tareyeva E E *Phys. Rev. B* **49** 6162 (1994)
- Ирз Д Ю, Рыжов В Н, Тареева Е Е *ТМФ* **107** 100 (1996); Irz D Yu, Ryzhov V N, Tareeva E E *Theor. Math. Phys.* **107** 499 (1996)
- Irz D Yu, Ryzhov V N, Tareyeva E E *Phys. Rev. B* **54** 3051 (1996)
- Nelson D R *Phys. Rev. Lett.* **60** 1973 (1988)
- Nelson D R, Seung H S *Phys. Rev. B* **39** 9153 (1989)
- Fetter A L, Hohenberg P C, in *Superconductivity* (Ed. R D Parks) (New York: M. Dekker, 1969) p. 817
- Feynman R P, Hibbs A R *Quantum Mechanics and Path Integrals* (New York: McGraw-Hill, 1965)

109. Balescu R *Equilibrium and Nonequilibrium Statistical Mechanics* (New York: Wiley, 1975); Пер. на русск. яз.: Балеску Р *Равновесная и неравновесная статистическая механика* Т. 1 (М.: Мир, 1978)
110. Strandburg K J (Ed.) *Bond-Orientational Order in Condensed Matter Systems* (New York: Springer-Verlag, 1992)
111. Brinkman W F, Fisher D S, Moncton D E *Science* **217** 693 (1982)
112. Strandburg K J *Rev. Mod. Phys.* **60** 161 (1988)
113. Kleinert H *Gauge Fields in Condensed Matter* Vol. 2 (Singapore: World Scientific, 1989)
114. Glaser M A, Clark N A *Adv. Chem. Phys.* **83** 543 (1993)
115. Стишов С М *УФН* **154** 93 (1988); Stishov S M *Sov. Phys. Usp.* **31** 52 (1988)
116. Рыжов В Н, Тареева Е Е *ТМФ* **73** 463 (1987); Ryzhov V N, Tareeva E E *Theor. Math. Phys.* **73** 1344 (1987)
117. Ryzhov V N, Tareyeva E E *J. Phys. C* **21** 819 (1988)
118. Рыжов В Н *ТМФ* **80** 107 (1989); Ryzhov V N *Theor. Math. Phys.* **80** 745 (1989)
119. Ryzhov V N *J. Phys. Condens. Matter* **2** 5855 (1990)
120. Levine D, Steinhardt P J *Phys. Rev. Lett.* **53** 2477 (1984)
121. Steinhardt P J, Nelson D R, Ronchetti M *Phys. Rev. B* **28** 784 (1983)
122. Ландау Л Д *ЖЭТФ* **7** 19 (1937); Landau L D *Phys. Z. Sowjetunion* **11** 26 (1937)
123. Peierls R E *Helv. Phys. Acta* **7** 81 (1934)
124. Peierls R E *Ann. Inst. Henri Poincaré* **5** 177 (1935)
125. 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)
126. Brock J D, in *Bond-Orientational Order in Condensed Matter Systems* (Ed. K J Strandburg) (New York: Springer-Verlag, 1992) p. 1
127. Ландау Л Д, Лифшиц Е М *Теория упругости* (М.: Наука, 1987); Пер. на англ. яз.: Landau L D, Lifshitz E M *Theory of Elasticity* (Oxford: Pergamon Press, 1986)
128. Barker J A, Henderson D *Rev. Mod. Phys.* **48** 587 (1976)
129. Рыжов В Н *ЖЭТФ* **100** 1627 (1991); Ryzhov V N *Sov. Phys. JETP* **73** 899 (1991)
130. Nelson D R, Pelcovits R A *Phys. Rev. B* **16** 2191 (1977)
131. Saito Y *Phys. Rev. B* **26** 6239 (1982)
132. Strandburg K J *Phys. Rev. B* **34** 3536(R) (1986)
133. Saito Y *Phys. Rev. Lett.* **48** 1114 (1982)
134. Ryzhov V N, Tareyeva E E *Phys. Lett. A* **158** 321 (1991)
135. Рыжов В Н, Тареева Е Е *ТМФ* **92** 331 (1992); Ryzhov V N, Tareeva E E *Theor. Math. Phys.* **92** 922 (1992)
136. Prestipino S, Saija F, Giaquinta P V *J. Chem. Phys.* **137** 104503 (2012)
137. Prestipino S, Saija F, Giaquinta P V *Phys. Rev. Lett.* **106** 235701 (2011)
138. Dudalov D E et al. *J. Phys. Conf. Ser.* **510** 012016 (2014)
139. Dudalov D E et al. *J. Chem. Phys.* **141** 18C522 (2014)
140. Dudalov D E et al. *Soft Matter* **10** 4966 (2014)
141. Tsiok E N et al. *Phys. Rev. E* **92** 032110 (2015)
142. Tsiok E N, Fomin Yu D, Ryzhov V N, arXiv:1701.03643
143. Krott L B, Barbosa M C J. *Chem. Phys.* **138** 084505 (2013)
144. Krott L B, Barbosa M C *Phys. Rev. E* **89** 012110 (2014)
145. Krott L B, Bordin J R, Barbosa M C J. *Phys. Chem. B* **119** 291 (2015)
146. Almodallal A M, Buldyrev S V, Saika-Voivod I J. *Chem. Phys.* **137** 034507 (2012)
147. Algara-Siller G et al. *Nature* **519** 443 (2015)
148. Zhao J et al. *Science* **343** 1228 (2014)
149. Meng Q et al. *Phys. Rev. B* **90** 020509(R) (2014)
150. Miller W L, Cacciuto A *Soft Matter* **7** 7552 (2011)
151. Zhang F, Liu Y, Yan H *J. Am. Chem. Soc.* **135** 7458 (2013)
152. Chui S T *Phys. Rev. B* **28** 178 (1983)
153. Chui S T *Phys. Rev. Lett.* **48** 933 (1982)
154. Kleinert H *Phys. Lett. A* **95** 381 (1983)
155. Kleinert H *Phys. Lett. A* **96** 302 (1983)
156. Janke W, Kleinert H *Phys. Lett. A* **105** 134 (1984)
157. Nelson D R *Phys. Rev. B* **26** 269 (1982)
158. Janke W, Kleinert H *Phys. Lett. A* **114** 255 (1986)
159. Strandburg K J, Solla S A, Chester G V *Phys. Rev. B* **28** 2717 (1983)
160. Kleinert H *Phys. Lett. A* **130** 443 (1988)
161. Janke W, Kleinert H *Phys. Rev. Lett.* **61** 2344 (1988)
162. Kleinert H *Phys. Lett. A* **136** 468 (1989)
163. Janke W, Kleinert H *Phys. Rev. B* **41** 6848 (1990)
164. Рыжов В Н *ТМФ* **88** 449 (1991); Ryzhov V N *Theor. Math. Phys.* **88** 990 (1991)
165. Cha M-C, Fertig H A *Phys. Rev. Lett.* **73** 870 (1994)
166. Grier D G et al. *Phys. Rev. Lett.* **66** 2270 (1991)
167. Fisher D S, Halperin B I, Morf R *Phys. Rev. B* **20** 4692 (1979)
168. Lozovik Yu E, Farztdinov V M *Solid State Commun.* **54** 725 (1985)
169. Lozovik Yu E et al. *Phys. Lett. A* **112** 61 (1985)
170. Ryzhov V N, Tareyeva E E *Phys. Rev. B* **51** 8789 (1995)
171. Рыжов В Н, Тареева Е Е *ЖЭТФ* **108** 2044 (1995); Ryzhov V N, Tareeva E E *JETP* **81** 1115 (1995)
172. Ryzhov V N, Tareyeva E E *Physica C* **205** 55 (1993)
173. Ryzhov V N, Tareyeva E E *Physica A* **314** 396 (2002)
174. 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)
175. Chumakov E S et al. *Physica A* **432** 279 (2015)
176. Рыжов В Н и др. *ТМФ* **191** 424 (2017); Ryzhov V N et al. *Theor. Math. Phys.* **191** 842 (2017)
177. Ryzhov V N, Tareyeva E E *Phys. Lett. A* **75** 88 (1979)
178. Рыжов В Н, Тареева Е Е *ТМФ* **48** 416 (1981); Ryzhov V N, Tareeva E E *Theor. Math. Phys.* **48** 835 (1981)
179. Рыжов В Н *ТМФ* **55** 128 (1983); Ryzhov V N *Theor. Math. Phys.* **55** 399 (1983)
180. Nelson D R *Phys. Rev. B* **27** 2902 (1983)
181. Sachdev S, Nelson D R *J. Phys. C* **17** 5473 (1984)
182. Дзюбенко А В, Лозовик Ю Е *ЖЭТФ* **102** 284 (1992); Dzyubenko A B, Lozovik Yu E *Sov. Phys. JETP* **75** 149 (1992)
183. Cha M-C, Fertig H A *Phys. Rev. Lett.* **74** 4867 (1995)
184. Herrera-Velarde S, von Grünberg H H *Soft Matter* **5** 391 (2009)
185. Deuschländer S et al. *Phys. Rev. Lett.* **111** 098301 (2013)
186. Horn T et al. *Phys. Rev. E* **88** 062305 (2013)
187. Qi W, Dijkstra M *Soft Matter* **11** 2852 (2015)
188. Mansoori G A, Rice S A *Adv. Chem. Phys.* **156** 197 (2015)
189. Grimes C C, Adams G *Phys. Rev. Lett.* **42** 795 (1979)
190. Mehrotra R, Guenin B M, Dahm A J *Phys. Rev. Lett.* **48** 641 (1982)
191. Gallet F et al. *Phys. Rev. Lett.* **49** 212 (1982)
192. Deville G et al. *Phys. Rev. Lett.* **53** 588 (1984)
193. Mehrotra R et al. *Phys. Rev. B* **29** 5239(R) (1984)
194. Stan M A, Dahm A J *Phys. Rev. B* **40** 8995 (1989)
195. Guo C J et al. *Phys. Rev. Lett.* **51** 1461 (1983)
196. Morf R H *Phys. Rev. Lett.* **43** 931 (1979)
197. Беданов В М, Гадиак Г В, Лозовик Ю Е *ЖЭТФ* **88** 1622 (1985); Bedanov V M, Gadiyak G V, Lozovik Yu E *Sov. Phys. JETP* **61** 967 (1985)
198. Gann R C, Chakravarty S, Chester G V *Phys. Rev. B* **20** 326 (1979)
199. Taub H et al. *Phys. Rev. B* **16** 4551 (1977)
200. McTague J P et al. *Phys. Rev. B* **25** 7765 (1982)
201. Specht E D et al. *Phys. Rev. B* **30** 1589(R) (1984)
202. Heiney P A et al. *Phys. Rev. Lett.* **48** 104 (1982)
203. Heiney P A et al. *Phys. Rev. B* **28** 6416 (1983)
204. Dimon P et al. *Phys. Rev. B* **31** 437 (1985)
205. Rosenbaum T F et al. *Phys. Rev. Lett.* **50** 1791 (1983)
206. Nagler S E et al. *Phys. Rev. B* **32** 7373 (1985)
207. Greiser N et al. *Phys. Rev. Lett.* **59** 1706 (1987)
208. Koch S W, Abraham F F *Phys. Rev. B* **27** 2964 (1983)
209. Abraham F F *Phys. Rev. Lett.* **50** 978 (1983)
210. Abraham F F *Phys. Rev. B* **29** 2606 (1984)
211. Dahm A J *Phys. Rev. B* **29** 484 (1984)
212. Jin A J, Bjustrom M R, Chan M H W *Phys. Rev. Lett.* **62** 1372 (1989)
213. Migone A D, Li Z R, Chan M H W *Phys. Rev. Lett.* **53** 810 (1984)
214. Murray C A, in *Bond-Orientational Order in Condensed Matter Systems* (Ed. K J Strandburg) (New York: Springer-Verlag, 1992) p. 137
215. Murray C A, Van Winkle D H *Phys. Rev. Lett.* **58** 1200 (1987)
216. Murray C A, Wenk R A *Phys. Rev. Lett.* **62** 1643 (1989)
217. Murray C A, Van Winkle D H, Wenk R A *Phase Trans.* **21** 93 (1990)
218. Murray C A, Sprenger W O, Wenk R A *Phys. Rev. B* **42** 688 (1990)
219. Armstrong A J, Mockler R C, O'Sullivan W J *J. Phys. Condens. Matter* **1** 1707 (1989)
220. Tang Y et al. *Phys. Rev. Lett.* **62** 2401 (1989)
221. Tang Y et al. *Phase Trans.* **21** 75 (1990)
222. Skjeltorp A T *Phys. Rev. Lett.* **51** 2306 (1983)
223. Kalia R K, Vashishta P *J. Phys. C* **14** L643 (1981)
224. Broughton J Q, Gilmer G H, Weeks J D *Phys. Rev. B* **25** 4651 (1982)
225. Bladon P, Frenkel D *Phys. Rev. Lett.* **74** 2519 (1995)
226. Chou T, Nelson D R *Phys. Rev. E* **53** 2560 (1996)
227. Helgesen G, Skjeltorp A T *Physica A* **170** 488 (1991)
228. Kusner R E et al. *Phys. Rev. Lett.* **73** 3113 (1994)
229. Kusner R E et al. *Phys. Rev. B* **51** 5746 (1995)
230. Gasser U et al. *ChemPhysChem* **11** 963 (2010)
231. Zahn K, Maret G *Phys. Rev. Lett.* **85** 3656 (2000)
232. Keim P, Maret G, von Grünberg H H *Phys. Rev. E* **75** 031402 (2007)

233. von Grünberg H H et al. *Phys. Rev. Lett.* **93** 255703 (2004)
234. Dillmann P, Maret G, Keim P *J. Phys. Condens. Matter* **20** 404216 (2008)
235. Assoud L et al. *Phys. Rev. Lett.* **102** 238301 (2009)
236. Deutschländer S et al. *Phys. Rev. Lett.* **113** 127801 (2014)
237. Kusner R E, Mann J A, Dahm A J *Phys. Rev. B* **49** 9190 (1994)
238. Seshadri R, Westervelt R M *Phys. Rev. Lett.* **66** 2774 (1991)
239. Seshadri R, Westervelt R M *Phys. Rev. B* **46** 5142 (1992)
240. Seshadri R, Westervelt R M *Phys. Rev. B* **46** 5150 (1992)
241. Chudnovsky E M *Phys. Rev. B* **40** 11355(R) (1989)
242. Rice S A *Chem. Phys. Lett.* **479** 1 (2009)
243. Naidoo K J, Schmitker J J *Chem. Phys.* **100** 3114 (1994)
244. Frenkel D, McTague J P *Phys. Rev. Lett.* **42** 1632 (1979)
245. Zollweg J A, Chester G V, Leung P W *Phys. Rev. B* **39** 9518 (1989)
246. Chen K, Kaplan T, Mostoller M *Phys. Rev. Lett.* **74** 4019 (1995)
247. Bagchi K, Andersen H C, Swope W *Phys. Rev. Lett.* **76** 255 (1996)
248. Bagchi K, Andersen H C, Swope W *Phys. Rev. E* **53** 3794 (1996)
249. Zollweg J A, Chester G V *Phys. Rev. B* **46** 11186(R) (1992)
250. Lee J, Strandburg K J *Phys. Rev. B* **46** 11190(R) (1992)
251. Weber H, Marx D *Europhys. Lett.* **27** 593 (1994)
252. Allen M P et al. *J. Chem. Phys.* **78** 4206 (1983)
253. Novaco A D, Shea P A *Phys. Rev. B* **26** 284 (1982)
254. Abraham F F *Phys. Rev. Lett.* **44** 463 (1980)
255. Barker J A, Hendersen D, Abraham F F *Physica A* **106** 226 (1981)
256. Toxvaerd S *Phys. Rev. Lett.* **44** 1002 (1980)
257. Broughton J Q, Gilmer G H, Weeks J D *Phys. Rev. B* **25** 4651 (1982)
258. Weber H, Marx D, Binder K *Phys. Rev. B* **51** 14636 (1995)
259. Frenkel D, Smit B *Understanding Molecular Simulation: from Algorithms to Applications* (Computational Science Series, Vol. 1) 2nd ed. (San Diego: Academic Press, 2002)
260. Mayer J E, Wood W W *J. Chem. Phys.* **42** 4268 (1965)
261. Lee J, Kosterlitz J M *Phys. Rev. B* **43** 3265 (1991)
262. Hoover W G, Ree F H *J. Chem. Phys.* **49** 3609 (1968)
263. Lee J, Kosterlitz J M *Phys. Rev. Lett.* **65** 137 (1990)
264. Fernández J F, Alonso J J, Stankiewicz J *Phys. Rev. Lett.* **75** 3477 (1995)
265. Binder K, Sengupta S, Nielaba P *J. Phys. Condens. Matter* **14** 2323 (2002)
266. Mak C H *Phys. Rev. E* **73** 065104(R) (2006)
267. Jaster A *Europhys. Lett.* **42** 277 (1998)
268. Jaster A *Physica A* **264** 134 (1999)
269. Jaster A *Phys. Rev. E* **59** 2594 (1999)
270. Bernard E P, Krauth W *Phys. Rev. Lett.* **107** 155704 (2011)
271. Engel M et al. *Phys. Rev. E* **87** 042134 (2013)
272. Alonso J J, Fernández J F *Phys. Rev. E* **59** 2659 (1999)
273. Weeks J D *Phys. Rev. B* **24** 1530 (1981)
274. Wierschem K, Manousakis E *Phys. Rev. B* **83** 214108 (2011)
275. Naidoo K, Schmitker J, Weeks J D *Mol. Phys.* **80** 1 (1993)
276. Vaulina O S, Koss (Adamovich) X G *Phys. Lett. A* **373** 3330 (2009)
277. Vaulina O S, Vasilieva E V *Phys. Lett. A* **378** 719 (2014)
278. Koss X G, Vaulina O S *J. Phys. Conf. Ser.* **653** 012103 (2015)
279. Kapfer S C, Krauth W *Phys. Rev. Lett.* **114** 035702 (2015)
280. Qi W, Gantapara A P, Dijkstra M *Soft Matter* **10** 5449 (2014)
281. Qi W-K et al. *J. Phys. Condens. Matter* **20** 245102 (2008)
282. Zu M et al. *Phys. Rev. Lett.* **117** 085702 (2016)
283. Zhang H et al. *Phys. Rev. E* **89** 062410 (2014)
284. Huberman B A, Doniach S *Phys. Rev. Lett.* **43** 950 (1979)
285. Fisher D S *Phys. Rev. B* **22** 1190 (1980)
286. Conen E, Schmid A J *Low Temp. Phys.* **17** 331 (1974)
287. Gammel P L, Hebard A F, Bishop D J *Phys. Rev. B* **40** 7354(R) (1989)
288. Hebard A F, Fiory A T *Physica B+C* **109–110** 1637 (1982)
289. Berghuis P, van der Slot A L F, Kes P H *Phys. Rev. Lett.* **65** 2583 (1990)
290. Hikami S, Fujita A, Larkin A I *Phys. Rev. B* **44** 10400(R) (1991)
291. Tešanović Z, Xing L *Phys. Rev. Lett.* **67** 2729 (1991)
292. Kato Y, Nagaosa N *Phys. Rev. B* **47** 2932(R) (1993)
293. Kato Y, Nagaosa N *Phys. Rev. B* **48** 7383 (1993)
294. Hu J, MacDonald A H *Phys. Rev. Lett.* **71** 432 (1993)
295. Šášík R, Stroud D *Phys. Rev. B* **49** 16074(R) (1994)
296. Franz M, Teitel S *Phys. Rev. B* **51** 6551 (1995)
297. O'Neil J A, Moore M A *Phys. Rev. Lett.* **69** 2582 (1992)
298. O'Neil J A, Moore M A *Phys. Rev. B* **48** 374 (1993)
299. Moore M A *Phys. Rev. B* **39** 136 (1989)
300. Moore M A *Phys. Rev. B* **45** 7336 (1992)
301. Guillamon I et al. *Nature Phys.* **5** 651 (2009)
302. Guillamon I et al. *Nature Phys.* **10** 851 (2014)
303. Fomin Yu D et al. *J. Chem. Phys.* **129** 064512 (2008)
304. Gribova N V et al. *Phys. Rev. E* **79** 051202 (2009)
305. Fomin Yu D, Tsiok E N, Ryzhov V N *J. Chem. Phys.* **135** 234502 (2011)
306. Fomin Yu D, Tsiok E N, Ryzhov V N *J. Chem. Phys.* **135** 124512 (2011)
307. Ryltsev R E, Chtchelkatchev N M, Ryzhov V N *Phys. Rev. Lett.* **110** 025701 (2013)
308. Fomin Yu D, Tsiok E N, Ryzhov V N *Phys. Rev. E* **87** 042122 (2013)
309. Fomin Yu D et al. *J. Chem. Phys.* **141** 034508 (2014)
310. Fomin Yu D, Ryzhov V N, Gribova N V *Phys. Rev. E* **81** 061201 (2010)
311. Fomin Yu D, Tsiok E N, Ryzhov V N *J. Chem. Phys.* **134** 044523 (2011)
312. LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator), <http://lammps.sandia.gov/>
313. Thorneywork A L et al. *Phys. Rev. Lett.* **118** 158001 (2017)

Berezinskii – Kosterlitz – Thouless transition and two-dimensional melting

V.N. Ryzhov, E.E. Tareyeva, Yu.D. Fomin, E.N. Tsiok

L.F. Vereshchagin Institute for High Pressure Physics, Russian Academy of Sciences,

Kaluzhskoe shosse 14, 108840 Troitsk, Moscow, Russian Federation

E-mail: ryzhov@hppi.troitsk.ru, etare@ms2.inr.ac.ru, fomin314@mail.ru, elena.tsiok@gmail.com

The main aspects of the theory of phase transitions in two-dimensional degenerate systems (Berezinskii – Kosterlitz – Thouless, or BKT, transitions) are reviewed in detail, including the transition mechanism, the renormalization group as a tool for describing the transition, and how the transition scenario can possibly depend on the core energy of topological defects (in particular, in thin superconducting films). Various melting scenarios in two-dimensional systems are analyzed, and the current status of actual experiments and computer simulations in the field is examined. Whereas in three dimensions melting always occurs as a single first-order transition, in two dimensions, as shown by Halperin, Nelson and Young, melting via two continuous BKT transitions with an intermediate hexatic phase characterized by quasi-long range orientational order is possible. There is also a possibility, however, for a first-order phase transition to occur. Recently, one further melting scenario, different from that occurring in the Berezinskii – Kosterlitz – Thouless – Halperin – Nelson – Young (BKTHNY) theory, has been proposed, according to which a solid can melt in two stages — a continuous BKT type solid-hexatic transition and then a first order hexatic phase – isotropic liquid one. Particular attention is given to the melting scenario as a function of the potential shape and to the random pinning effect on two-dimensional melting. In particular, it is shown that random pinning can alter the melting scenario fundamentally in the case of a first-order transition. Also considered is the melting of systems with potentials having a negative curvature in the repulsion region — potentials that are successfully used in describing the anomalous properties of water in two dimensions.

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

PACS numbers: 02.70.Ns, 05.70.Ln, **64.10. +h**, 64.60.Ej, 64.70.D –

Bibliography — 313 references

Uspekhi Fizicheskikh Nauk **187** (9) 921 – 951 (2017)

DOI: <https://doi.org/10.3367/UFNr.2017.06.038161>

Received 15 May 2017, revised 23 June 2017

Physics – Uspekhi **60** (9) (2017)

DOI: <https://doi.org/10.3367/UFNe.2017.06.038161>