

Упорядочение взаимодействующих подсистем. Молекулярная динамика

© А.Э. Филиппов

Донецкий физико-технический институт Академии наук Украины,
340114 Донецк, Украина

(Поступила в Редакцию 2 февраля 1998 г.)

Методом молекулярной динамики рассмотрены процессы упорядочения взаимодействующих подсистем в двухкомпонентном двумерном кулоновском газе, состоящем из одинаковых количеств положительно и отрицательно заряженных частиц, который моделирует поведение системы взаимодействующих вихрей. В частности, обнаружено, что при понижении температуры системы от точки перехода Костерлица–Таулесса в ней может иметь место дополнительное упорядочение вихревых цепочек. Отмечено, что описанный процесс может стимулировать возникновение вихревых цепочек, наблюдаемых в реальных сверхтекучих, магнитных и сверхпроводящих системах. Обсуждаются также возможности метода молекулярной динамики применительно к фазовой сепарации и упорядочению адиабатически медленно движущейся подсистемы в коллективном поле быстрой.

Последнее время динамика упорядочения пространственно неоднородных структур и фазовой сепарации находится под пристальным вниманием. Развитие вычислительных возможностей постоянно снижает необходимую степень огрубления задачи количественного описания процессов, которая ранее сводилась к переходу от многочастичной динамической задачи к той или иной форме континуального описания на базе коллективных полей (плотностей), и делает возможным прямое численное моделирование достаточно сложных систем с дальнедействующим взаимодействием. Это позволяет проверить результаты континуальных теорий и обнаружить те структурные особенности системы, которые заведомо теряются при грубом описании.

Интенсивный поток публикаций [1–12] дает примеры обоих направлений. Так, например, компьютерное моделирование фазовой сепарации и спиноподобного распада в простых и бинарных жидкостях [1–3] было в значительной степени ориентировано на воспроизведение результатов аналитической теории [4], тогда как полученные численно запутанные дипольные цепочки [5–7] обнаружить аналитически крайне сложно. Варьируя динамические сценарии, можно предсказывать не только сами структуры, но и пути их экспериментальной реализации. При этом в модель закладываются достаточно реалистические потенциалы, как это имеет место, например, при моделировании кристаллизации молекулярных жидкостей [8,9].

Результаты моделирования стимулируют поиски аналогичных структур методами, основанными на анализе континуальных полей, и в эксперименте. Например, наблюдение в молекулярной динамике ориентационно упорядоченных структур в жидкостях (для системы диполей с твердым сферическим ядром [5,6]) способствовало исследованиям дальнего порядка в дипольных жидкостях на базе функционала плотности [10]. Численные эксперименты по квазикристаллизации вихрей в двумерной турбулентности [10,11] были продолжены

натурными — по наблюдению релаксации хаотического движения намагниченных электронов (воспроизводящих почти идеальную 2D-жидкость) в вихревой кристалл [12].

Как правило, моделирование дальнего ориентационного порядка в дипольных системах основано на комбинации потенциалов Леннарда–Джонса [5–7] $w_{LJ}(r) = 4\epsilon[(\sigma/r)^{12} - (\sigma/r)^6]$ и дипольного потенциала $w_{\text{dip}}(\mathbf{r}) = -3(\mu_2 \cdot \mathbf{r})(\mu_1 \cdot \mathbf{r})/r^5 + \mu_2\mu_1/r^3$, что несет на себе определенный отпечаток аналитической традиции. Можно, однако, ожидать, что объединяясь в пары и группы, заряженные частицы спонтанно формируют (мультипольную) молекулярную жидкость со свойствами, аналогичными использованным в работах [5–7], сохраняя степени свободы (вращательные, колебательные, способность к диссоциации и рекомбинации и т.д.), присущие реальным молекулам. Последнее открывает более широкие возможности, чем при традиционном подходе. Помимо этого численное решение уравнений с простейшей структурой элементарных взаимодействий выполняется существенно быстрее для достаточно больших массивов (порядка 10^3 частиц, движущихся в трех или двух измерениях). В настоящей работе кратко воспроизведены результаты, относящиеся к моделированию дипольных цепочек, а также приведены другие результаты, иллюстрирующие дополнительные возможности, появляющиеся в таком подходе.

1. Дипольные цепочки

В этом разделе приведены некоторые результаты моделирования динамики двумерного электронного газа, в частности, применительно к системе вихрей [13–16]. При некоторых допущениях (см. [16]) к этой модели может быть сведено описание сверхтекучих жидкостей, плавления кристаллов, а также двумерной $x - y$ модели для решетки спинов. Она позволяет дать определение топологического порядка для 2D-систем, где упорядочение в обычном смысле невозможно [17–18], ото-

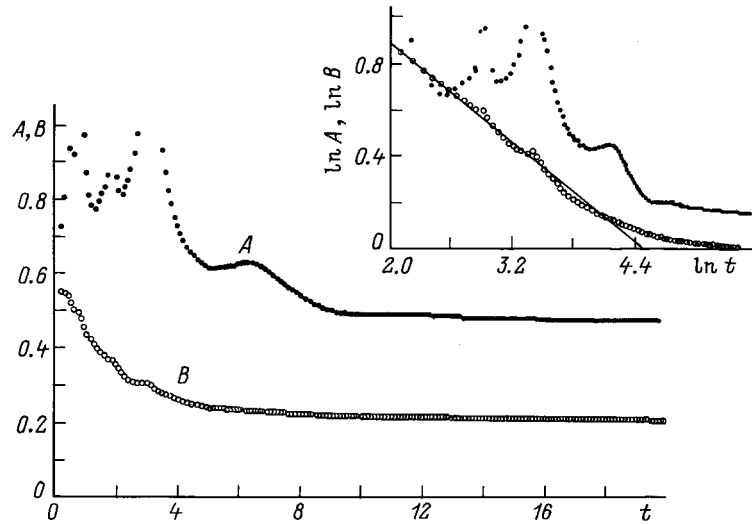


Рис. 1. Эволюция параметров $A = \{\sum_j [1/|\mathbf{r}_{jj'}|] + \sum_i [1/|\mathbf{r}_{ii'}|]\}/2 - \sum_{ij} [1/|\mathbf{r}_{ij'}|]$ и $B = \sum_{kk'} [1/|\mathbf{r}_{kk'}|]$ со временем. На вставке приведены те же кривые в двойном логарифмическом масштабе.

ждевствив фазовый переход с диссоциацией вихревых пар [13–15]. В качестве модельного был использован гамильтониан $H = \sum_{i \neq j} U(\mathbf{r}_{ij}) S_i S_j$, где S_i — кулоновские заряды, а потенциал определен выражением $U(\mathbf{r}_{ij}) = \int d\mathbf{r}' d\mathbf{r}'' f(|\mathbf{r}' - \mathbf{r}''|) V(|\mathbf{r}' - \mathbf{r}''|) f(|\mathbf{r}''|)$. Здесь $U(\mathbf{r})$ — взаимодействие вида $U(\mathbf{r}) \cong \ln(\lambda/\zeta)$ при $\lambda/\zeta \gg 1$, $U(\mathbf{r}) \cong -\ln(r/\lambda)$ при $\zeta \ll r \ll \lambda$ и $U(\mathbf{r}) \sim r^{-1/2} \exp(-r/\lambda)$ при $\lambda \ll r$, а $f(|\mathbf{r}' - \mathbf{r}''|)$ — нормированная плотность пространственного заряда. Уравнение динамики выводится из описания сверхтекучей жидкости [19,20] и для безинерционных вихрей имеет вид уравнения Ланжевена $d\mathbf{r}_i/dt = -\partial U(\mathbf{r}_{ij})/\partial \mathbf{r}_i + \boldsymbol{\xi}(\mathbf{r}_i, t)$ с δ -коррелированным шумом $\langle \boldsymbol{\xi}(\mathbf{r}, t) \rangle = 0$, $\langle \boldsymbol{\xi}(\mathbf{r}, t) \boldsymbol{\xi}(\mathbf{r}', t') \rangle = D \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t')$. Формально его можно рассматривать как предел динамического уравнения

$$d^2 \mathbf{r}_i / dt^2 = -\gamma d\mathbf{r}_i / dt - \partial U(\mathbf{r}_{ij}) / \partial \mathbf{r}_i + \boldsymbol{\xi}(\mathbf{r}_i, t) \quad (1)$$

при бесконечно большой релаксационной постоянной γ . Для дипольных молекул отталкивающий кор на малых расстояниях должен быть просимулирован короткодействующей поправкой к потенциалу $\Delta U(\mathbf{r}_{ij})$. Однако при конечной температуре ($\xi \neq 0$) из-за кинетического вклада в энергию $\Delta U(\mathbf{r}_{ij}) \sim 1/r_{ij}^2$, определяющего средний масштаб минимума энергии $r_0 \sim \xi$, этот эффект возникает уже в чисто кулоновской задаче с затравочным потенциалом $U(\mathbf{r}) \cong -\ln(r/\lambda)$. При заданной плотности частиц (вихрей) $\rho \sim 1/a^2$ соотношение величин r_0 и a определяет вид возникающей структуры. Модель устойчиво воспроизводит известный топологический переход [13–18]. Можно проверить, что при интенсивном шуме (т.е. выше температуры $T \sim \xi = T_{KT} \approx \min[U(\mathbf{r}_{ij}) + \Delta U(\mathbf{r}_{ij})]$) вихри движутся независимо и образуют стабильные пары ниже T_{KT} . Остановимся лишь на новых результатах, связанных с

образованием тонкой структуры и потому отсутствующих в огрубленной теории. К ним относится образование при $r_0 \ll a$ цепочек из пар вихрей, которое можно наблюдать непосредственно в процессе моделирования.

Образование цепочек может быть описано параметром $A = \{\sum_j [1/|\mathbf{r}_{jj'}|] + \sum_i [1/|\mathbf{r}_{ii'}|]\}/2 - \sum_{ij} [1/|\mathbf{r}_{ij'}|]$, характеризующим различие средних расстояний внутри подсистем вихрей ($\mathbf{r}_i \in \mathbf{R}^{(+)}$) и антивихрей ($\mathbf{r}_j \in \mathbf{R}^{(-)}$) и между ними ($\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$) на малых масштабах (рис. 1). Расстояние $B = \sum_k [1/|\mathbf{r}_{kk'}|]$ между вихрями обоих знаков, где $\mathbf{r}_k \in \mathbf{R}^{(+)} \oplus \mathbf{R}^{(-)}$, при этом притягивается к равновесному значению по степенному закону $|B - B_0| \propto t^{1/3}$ (см. вставку к рис. 1). При $r_0 \cong a$ система образует (квази) кристалл, периодическая структура которого отражается как в появлении максимумов при отличных от нуля волновых векторах $\mathbf{q}_i \neq 0$ Фурье-образа корреляционной функции $G(\mathbf{q}) = \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \exp[i(\mathbf{r}\mathbf{q})] \langle \rho(\mathbf{r}) \rho(\mathbf{r} + \mathbf{r}') \rangle$, вычисленной суммированием дискретной плотности по обеим подсистемам $\rho(\mathbf{r}) = \rho_1(\mathbf{r}) + \rho_2(\mathbf{r}) = \sum_k \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_k)$, $\mathbf{r}_k \in \mathbf{R}^{(+)} \oplus \mathbf{R}^{(-)}$, так и на парциальных формфакторах $S_{1,2}(\mathbf{q}) = \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \exp[i(\mathbf{r}\mathbf{q})] [\langle \rho_{1,2}(\mathbf{r}) \rho_{1,2}(\mathbf{r} + \mathbf{r}') \rangle - |\langle \rho_{1,2}(\mathbf{r}) \rangle|^2]$, вычисленных по каждой из них в отдельности. Распределение вихрей на плоскости (x, y) близко к решетке шестого порядка. Оно состоит из по-разному повернутых ромбов, причем локально можно обнаружить оси шестого, пятого и четвертого порядков [21–23].

В свободном пространстве совокупность частиц одного знака стабилизируется суммарным полем частиц противоположного знака. Наблюдаемая в динамике картина близка к упорядоченной структуре, образующейся в положительном столбе тлеющего разряда в Ne [24], где кулоновский квазикристалл был образован заряженными сферическими стеклянными частицами в условиях, близких к рассмотренным здесь условиям численных экспериментов.

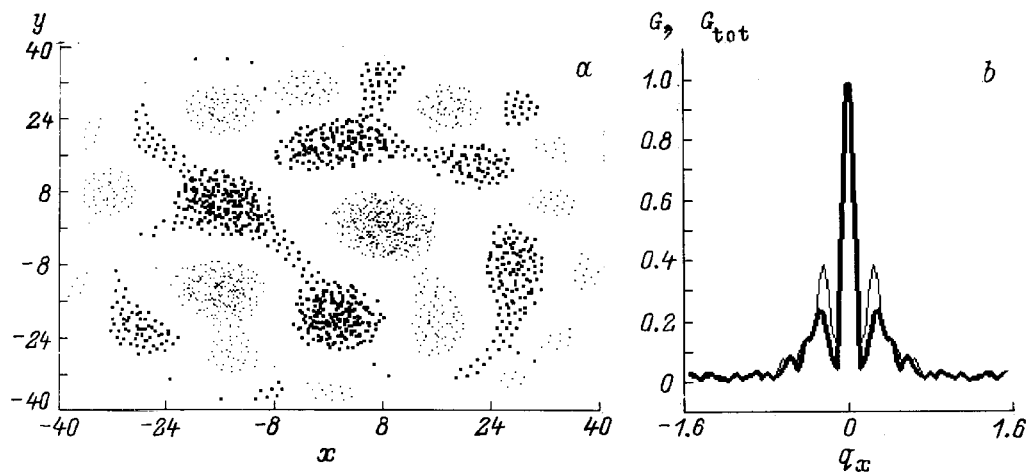


Рис. 2. *a)* Промежуточный этап фазовой сепарации в молекулярной динамике. Частицы разного сорта показаны точками разного размера. *b)* Фурье-образы полной корреляционной функции $G_{\text{tot}}(\mathbf{q}) = \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \exp[i(\mathbf{r}\mathbf{q})] \langle \rho(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r} + \mathbf{r}') \rangle \neq 0$, вычисленной суммированием дискретной плотности по обеим подсистемам $\rho(\mathbf{r}) = \rho_1(\mathbf{r}) + \rho_2(\mathbf{r}) = \sum_k \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_k)$ (тонкая линия), и парциальной функции $G_1(\mathbf{q}) = \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \exp[i(\mathbf{r}\mathbf{q})] \langle \rho(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r} + \mathbf{r}') \rangle$, вычисленной по одной из них в отдельности (жирная линия).

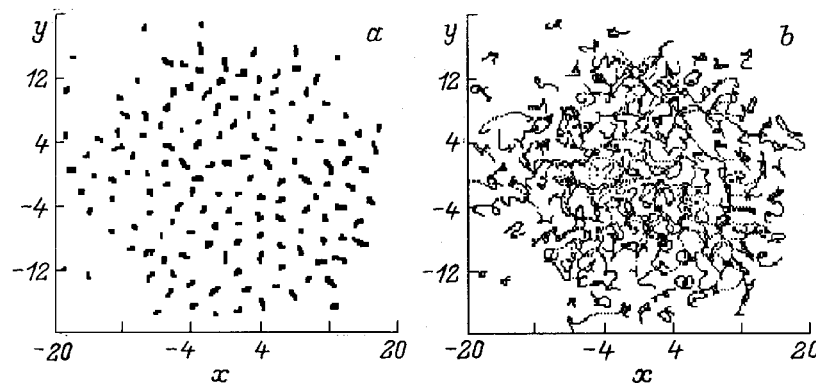


Рис. 3. Типичная квазикристаллическая структура, полученная при отношении масс частиц разного сорта порядка 10^3 . Показаны фрагменты траекторий для тяжелых частиц (без протекания между узлами решетки) (*a*) и легких частиц (с интенсивным перемешиванием) (*b*), иллюстрирующие различную подвижность подсистем.

2. Фазовая сепарация

Аналогичный эффект упорядочения подсистем в самосогласованном поле друг друга с образованием кристаллической решетки имеет место при фазовой сепарации. На рис. 2, *a* показан промежуточный этап процесса сепарации (подробнее о постановке задачи см. [1–3]). Видны уже сформированные фрагменты решеток. На рис. 2, *b* приведены Фурье-образы полной корреляционной функции, вычисленной по всем частицам $G_{\text{tot}}(\mathbf{q}) = \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \exp[i(\mathbf{r}\mathbf{q})] \langle \rho(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r} + \mathbf{r}') \rangle$, и парциальной корреляционной функции одной из подсистем $G_1(\mathbf{q})$ (тонкая и жирная линии соответственно). Помимо общих для обеих функций максимумов при малых $q = q_{0j} \neq 0$, соответствующих доменам большего масштаба в реальном пространстве, на кривой $G_1(\mathbf{q})$ видны также дополнительные максимумы при

больших $q = q_{1j} \neq 0$, соответствующие формирующейся внутри доменов тонкой структуре. Одним из приложений прямого моделирования разделения фаз может быть интенсивно обсуждаемый эффект гигантского магнитосопротивления в магнитных проводниках. Ряд данных [25,26] свидетельствует о том, что состояние этих материалов с ненасыщенным спонтанным магнитным моментом есть двухфазное ферро-антиферромагнитное с вероятным электронным механизмом разделения фаз. Более выгодное ферромагнитное состояние здесь возможно лишь начиная с достаточной концентрации носителей. Если она недостаточна, то все носители могут собраться в локализованных "ферромагнитных каплях". Магнитное поле способствует переходу всего кристалла в ферромагнитное состояние. С перколяцией областей такого упорядочения, как предполагают авторы [25], и связано гигантское магнитосопротивление.

3. Адиабатически быстрое движение одной из подсистем

Идея метода состоит в прямой эксплуатации баланса шума D и релаксации γ в рамках уравнения (1), что, собственно, и приводит к спонтанному поиску системой минимумов энергии (и, вообще говоря, седловых кинетических траекторий [27]) фактически "из первых принципов". Такой подход к некоторым известным задачам представляется даже более удобным, чем численные расчеты по формулам, полученным в аналитической традиции. К их числу, по-видимому, принадлежит

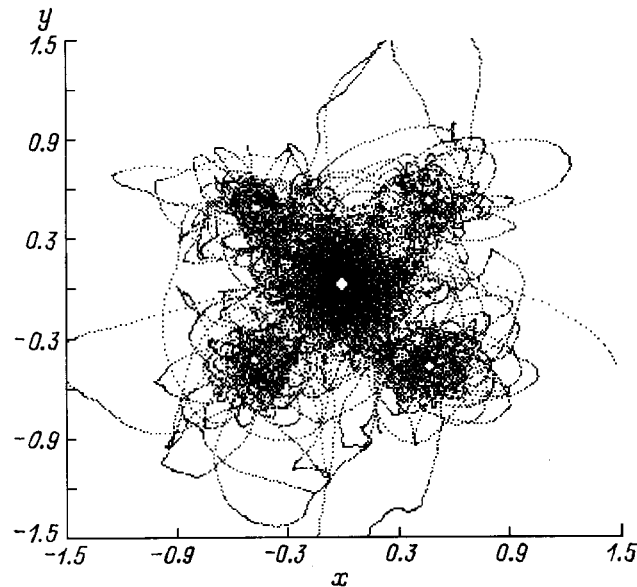


Рис. 4. Типичное распределение электронного облака в модельной молекуле VA_4 . Текущие положения стабилизируемых его полем ионов В и А показаны большим и малыми светлыми кружками соответственно.

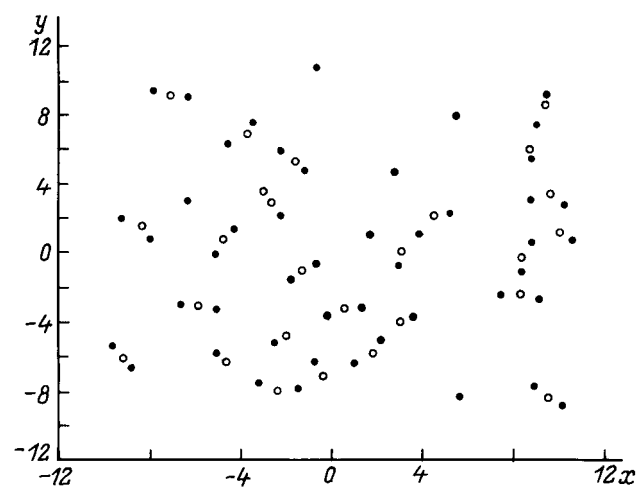


Рис. 5. Промежуточный этап генерации цепочки из молекул типа A_2B . Ионы А и В показаны темными и светлыми кружками соответственно. Показан фрагмент системы, на котором хорошо видны готовые фрагменты цепочек, молекулы A_2B , а также локальные группы типа А-В и A_2B-A .

адиабатическое приближение. Естественно ожидать, что при взаимодействии подсистем с существенно разными массами частиц из взаимное упорядочение сменится упорядочением лишь одной из них в среднем поле другой, тогда как движение быстрой подсистемы можно будет охарактеризовать лишь средней во времени плотностью, согласованной со структурой медленной подсистемы. Этот эффект позволяет напрямую промоделировать упорядочение (ионов и электронов) в кристалле (рис. 3) или ковалентную связь в молекулах, изображенных на рис. 4. При этом применимость метода не связана собственно с адиабатическим приближением и сохраняется в наиболее сложном случае различных, но сопоставимых по величине масс, как это имеет место, например, в случае "водородной связи" в молекулярных цепочках, формирование которых показано на рис. 5.

Работа частично поддержана Фондом фундаментальных исследований Украины, договор № Ф4/72-97 (проект 2.4/199).

Список литературы

- [1] E. Velasco, S. Toxyaerd. Phys. Rev. Lett. **71**, 3, 388 (1993).
- [2] F.J. Alexander, S. Chen, D.W. Grunau. Phys. Rev. **B48**, 1, 634 (1993).
- [3] G. Leptoukh, B. Strickland, C. Roland. Phys. Rev. Lett. **74**, 18, 3636 (1995).
- [4] S. Bastea, J.L. Lebowitz. Phys. Rev. Lett. **75**, 20, 3776 (1995).
- [5] D. Wei, G.N. Patey. Phys. Rev. Lett. **68**, 13, 2043 (1992).
- [6] J.J. Weis, A. Levesque. Phys. Rev. Lett. **71**, 17, 2729 (1993).
- [7] J. Ayton, M.I.P. Gingras, G.N. Patey. Phys. Rev. Lett. **75**, 12, 2360 (1995).
- [8] I.M. Svishchev, P.G. Kusalik. Phys. Rev. Lett. **73**, 5, 975 (1994).
- [9] I.M. Svishchev, P.G. Kusalik. Phys. Rev. Lett. **75**, 18, 3289 (1995).
- [10] N. Kukharkin, S.A. Orszag, V. Yakhot. Phys. Rev. Lett. **75**, 13, 2486 (1995).
- [11] L.M. Smith, V. Yakhot. Phys. Rev. Lett. **71**, 2, 352 (1993).
- [12] K.S. Fine et al. Phys. Rev. Lett. **75**, 17, 3277 (1995).
- [13] В.Л. Березинский. ЖЭТФ **59**, 3, 907 (1970); ЖЭТФ **60**, 5, 1144 (1971).
- [14] J.M. Kosterlitz, D.J. Thouless. J. Phys. C: Sol. Stat. Phys. **C6**, 5, 1181 (1973).
- [15] J.M. Kosterlitz. J. Phys. C: Sol. Stat. Phys. **C7**, 4, 1046 (1974).
- [16] K. Holmlund, P. Minnhagen. Phys. Rev. Lett. **54**, 1, 523 (1996).
- [17] N.D. Mermin, H. Wagner. Phys. Rev. Lett. **17**, 3, 1133 (1966).
- [18] P.C. Hohenberg. Phys. Rev. **B158**, 1, 383 (1967).
- [19] V. Ambegaokar et al. Phys. Rev. **B19**, 5, 1806 (1980).
- [20] S.A. Trugman, S. Doniach. Phys. Rev. **B26**, 10, 3682 (1982).
- [21] D. Shechtman et al. Phys. Rev. Lett. **53**, 5, 1951 (1984).
- [22] П.А. Калугин, А.Ю. Китаев, Л.С. Левитов. Письма в ЖЭТФ **41**, 3, 119 (1985).
- [23] Д.В. Оленев, Ю.Х. Векилов. Письма в ЖЭТФ **64**, 8, 559 (1996).
- [24] В.Е. Фортов и др. Письма в ЖЭТФ **64**, 2, 86 (1996).
- [25] Э.Л. Нагаев. УФН **166**, 5, 833 (1996).
- [26] В.Н. Криворучко. ФНТ **22**, 9, 1047 (1996).
- [27] А.Э. Филиппов. ЖЭТФ **111**, 5, 1775 (1997).