

## شبیه سازی ذوب سیستمهای دوبعدی

سید مصطفی حسینی<sup>۱</sup> و سید محمد امینی<sup>۲</sup>

۱- دانشکده علوم انسانی و پایه، دانشگاه ایلام

۲- دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی اصفهان

(دریافت مقاله: ۷۹/۴/۱۳ دریافت نسخه نهایی: ۷۹/۱۱/۱۹)

### چکیده

در این مقاله، سیستمهای دوبعدی از دیدگاه نظری، تجربی و شبیه سازی کامپیوتری مورد بررسی قرار گرفته و سپس مراحل انجام شبیه سازی دینامیک مولکولی تشریح شده است. ذوب یک بلور نمک یونی دوبعدی را توضیح داده و نتایج شبیه سازی سیستمهایی با ۱۶، ۶۴ و ۲۵۶ ذره ارایه می گردد. نتایج نشان می دهد که گذار ذوب مورد شبیه سازی از نوع مرتبه اول است. سیستم مورد شبیه سازی را پس از ذوب گرم کرده و سپس مایع گرم را سرد کرده تا منجمد شود، که در این دما سیستم به ساختار بلوری برمی گردد.

واژه های کلیدی: شبیه سازی، دینامیک مولکولی، ذوب دوبعدی، KCl

### ۱. مقدمه

توپولوژیکی مبتنی هستند. این ناراستیها انواع مختلفی دارد که هر نظریه یکی یا بیشتر از این انواع را بررسی می کند. نظریه کاسترلیز و تولس، (KT) [۲ و ۱]، عامل ذوب را «گردابها» می داند. نظریه هالپرین، نلسن و یانگ (HNY) [۳-۵] پیشنهاد می کند که ذوب در اثر «گسیختگی در رفتگیها و ضد انحرافها<sup>۱</sup>» اتفاق می افتد. جوی [۶-۸] نشان داد که «مرز دانه هایی» با زاویه کم می توانند جامد را از طریق یک گذر مرتبه اول به مایع همگن تبدیل کنند، در حالی که جوز و دوسبری [۹] نتیجه گرفتند که گذار ذوب بیشتر به علت «تهیجاها و ذرات میانین» است.

عامل گذار KT، گسیختگی زوج گردابها می باشد. گسیختگی گردابها در دمایی رخ می دهد که ضریب جفت شدگی  $k$  به سمت صفر میل کند. نظریه KT گذاری پیوسته (مرتبه دوم) از فاز دمای پایین، که به وسیله نظم بلند برد مشخص می شود، به فاز

در چند دهه اخیر بررسی سیستمهای دوبعدی به طور جدی مورد توجه قرار گرفته است. علت این امر در اهمیت لایه های نازک در بیشتر رشته های علوم و مهندسی مانند نیمه رساناها، ابر رساناها، ابر سیالها، اپتیک و غیره نهفته است. به همین علت نظریه پردازان سعی کردند نظریه جامعی درباره رفتار سیستمهای دوبعدی ارایه دهند که به دنبال آنها کارهای تجربی وسیعی انجام شده و در نتیجه هم نظریه ها و هم آزمایشها به طور چشمگیری تکامل یافتند. کارهای شبیه سازی کامپیوتری را که می توان به عنوان پلی بین نظریه و آزمایش محسوب کرد، در این روند تکامل سهم بسزایی داشته است.

### ۱-۱. مفاهیم اساسی و نظریه ها

نظریه های ذوب دوبعدی معمولاً بر ایده فیزیکی ناراستیهای

1. disclinations

ناراستیهای نقطه‌ای مانند تهیجاها و ذرات میانین هم ممکن است نقش مهمی در فرایند ذوب بازی کنند. به علت مغز سخت بودن بیشتر برهمکنشهای اتمی، معمولاً انرژی تهیجاها از ذرات میانین خیلی پایینتر است. جوز و دوسیری [۹] اخیراً محاسبات دمای صفر انرژیهای ناراستی در سیستمهای گازهای کمیاب را انجام دادند. انرژی پایینی که برای تهیجاها جایگزیده محاسبه شد، آنها را بر آن داشت که نتیجه بگیرند که گذار ذوب بیشتر به علت تهیجاهاست تا اینکه به علت گسیختگی دررفتگیها.

#### ۲-۱. بحثهای تجربی گذار ذوب دوبعدی

در بررسی طبیعی گذار ذوب دوبعدی، چهار نوع سیستم تجربی بحث شده است: (الف) فازهای لایه‌ای بلور - مایع، (ب) الکترونها روی سطح هلیوم مایع، (ج) انواع گازهایی که روی گرافیت جذب سطحی می‌شوند و (د) کره‌های باردار معلق در آب با اندازه کمتر از میکرون.

گازهای جذب سطحی و لایه‌های بلور - مایع به علت برهمکنش با زیرلایه و تشکیل لایه‌های اضافی نمی‌توانند سیستمهای دوبعدی ایده‌آلی باشند. در حالی که الکترونها معلق روی هلیوم مایع مثال تقریباً خوبی از یک دستگاه دوبعدی است. البته اعتبار اندازه‌گیریها حتی برای این دستگاه محدود است. همچنین تفسیر این اندازه‌گیریها مستلزم داشتن داده‌های نظری زیادی است که یک امر سراسر نخواهد بود. سیستم کره‌های باردار زیرمیکرونی نوعاً پلی بین آزمایش و شبیه سازی محسوب می‌شود. چون کره‌ها ماکروسکوپی هستند حرکت آنها مستقیماً مشاهده می‌شود و برای مثال، تابعهای همبستگی با عکس برداری محاسبه می‌شود.

در فیلمهای بلور - مایع فاز هگزاتیک دوربرد مشاهده شده است. این فاز در آزمایشهای پراکندگی اشعه ایکس به وسیله نظم موقعیتی کوتاه برد شبه مایعی مشخص می‌شود. در فاز هگزاتیک ستاره‌ای پیدا می‌شود که دستهای آن مناطقی را جدا می‌کنند که در آنها محورهای مولکولی (و در نتیجه جهت‌های پیوند) منظم می‌ماند. این امر توافق خوبی را با نظریه KTHNY نشان می‌دهد.

گذار ذوب الکترونها روی سطح هلیوم مایع ممکن است به وسیله یک پارامتر  $T$  که با ریشه مربعی چگالی تقسیم بر دما متناسب است بیان شود. همه داده‌های تجربی روی سیستم

غیر منظم دمای بالا را پیشگویی می‌کند. گذار فقط به وسیله تکینه‌های اصلی در انرژی و گرمای ویژه مشخص می‌شود. پیشگوییهای نظریه KT برای ابرسیالها، ابرساناها و مدل XY دوبعدی به وسیله آزمایش [۱۰] و شبیه سازی کامپیوتری [۱۱ و ۱۲] تایید شده است.

به علت اشکالاتی که در نظریه KT پیدا شده است، مانند تشخیص دو نوع از ناراستیهای توپولوژیکی، نظریه (HNY) به وجود آمد. نظریه این گذار نوعاً با آنچه که در بالا درباره گسیختگی گرداب گفته شد متفاوت است و به این حقیقت مربوط است که دررفتگی نه به وسیله یک اسکالر (بار) توصیف می‌شود بلکه به وسیله یک بردار به نام بردار برگرا<sup>۱</sup> تعریف می‌شود. این بردار عبارت از میزان مسیر بسته نشده اطراف یک دررفتگی است.

علاوه بر دررفتگی، در جهت‌گیری پیوندهای نزدیکترین همسایه نظم بلند برد وجود دارد. هالپرین و نلسن دریافتند با وجود اینکه گسیختگی جفتهای دررفتگی نظم موقعیتی شبه بلند برد را در می‌شکنند، ولی جهت‌گیری پیوندهای نزدیکترین همسایه سیال هنوز نظم شبه بلند برد را دارد. نوع دومی از ناراستیهای بلوری که این نظم زاویه پیوند را می‌شکنند، ضد انحراف نام دارد. یک ضد انحراف می‌تواند به صورت اتمی باشد که دارای تعداد نادرستی از نزدیکترین همسایه‌ها است. یک گذار گسیختگی دررفتگی با دمای  $T_m$  مشخص می‌شود و یک گذار گسیختگی ضد انحراف با دمای  $T_i$  و فاز بین این دو دما به فاز هگزاتیک معروف شده است.

چوی پیشنهاد کرد که ذوب ممکن است به علت تکثیر مرز دانه‌ها باشد [۸]. مرز دانه‌ها تحریکهای دسته جمعی دررفتگیها هستند. مرز دانه اثر چرخاندن قسمتی از بلور نسبت به قسمت دیگر را دارد. با وجود اینکه این مرزدانه ممکن است به صورت زنجیره‌ای از دررفتگیها دیده شود، مرزدانه‌های موازی بیشمار با یک پتانسیل غیربلند برد بر همکنش دارند. لذا یک گذار KTHNY با یک گذار مرزدانه‌ای متفاوت است.

فیشر، هالپرین و مورف [۶] اظهار داشتند که همبستگی دررفتگیها در فاز هگزاتیک یک بستگی زاویه‌ای را نشان می‌دهد که ممکن است به صورت تمایل شدید دررفتگیها برای تنظیم خود در مرزدانه‌هایی با زاویه کوچک توصیف شود. لذا حضور حلقه‌های مرزدانه‌های در نقشه‌های ناراستی که از شبیه سازیها به دست می‌آیند نباید به عنوان مدرکی بر علیه فاز هگزاتیک و به نفع گذار به مایع همسانگرد تفسیر شود.

1. Burger

اندازه یک فاصله کوچک است. طول این گام زمانی باید طوری انتخاب شود که از مرتبه مقیاس واقعی زمان میکروسکوپی سیستم باشد. دینامیک مولکولی این مزیت را دارد که اجازه می دهد به دینامیک واقعی ذرات رسیدگی شود. روش دینامیک مولکولی در مجموعه آماری میکروکانونی (انرژی ثابت) شبیه سازی مناسبی از یک سیستم فیزیکی است، گرچه بسط و تعمیم این روش به مجموعه های آماری دیگر در سالهای اخیر انجام شده است [۱۶]. در روش مونت کارلو [۱۷]، همان طوری که از نامش پیدا است، روی حرکتیهای که از یک توزیع تصادفی انتخاب می شوند متکی است. این حرکتها با مقایسه احتمال آماری مناسب با یک عدد تصادفی پذیرفته و یا رد می شوند.

انتخاب مجموعه آماری می تواند روی نتایج کار تأثیر مهمی داشته باشد. مثلاً در مجموعه آماری با چگالی ثابت این مزیت وجود دارد که افت و خیزهای محلی چگالی (و در نتیجه ناراستیهای محلی مانند تهیجاها) در سیستمها اتفاق نمی افتد. در شبیه سازی مجموعه آماری با فشار ثابت هیچ فاز هگزاتیک مشاهده نشده است [۱۸]. در حالی که یک منطقه همزیستی جامد - مایع مشاهده شده است [۱۹]. در مجموعه آماری با پتانسیل شیمیایی ثابت افت و خیزهای محلی اجازه دارند که رخ دهند [۲۰].

در انتخاب شرایط مرزی باز هم آزادی وجود دارد. بیشتر بررسیهای شبیه سازی ذوب دوبعدی از شرایط مرزی دوره ای استفاده می کنند [۲۱]. در سالهای اخیر از شرایط مرزی آزاد هم استفاده شده است [۲۲]. هر کدام از این انتخابها مزیتها و معایبی دارند.

محدودیت اندازه نمونه شبیه سازی شده نیز روی نتایج کار مؤثر است [۲۳]. واضح ترین اثر محدودیت اندازه، از میان بردن تفاوت بین گذار مرتبه اول و گذار پیوسته است. چون در شبیه سازیها، رسیدن سیستم به حالت تعادل یک مسئله سرنوشت ساز است، بررسی محدودیت زمانی نیز یک امر مهم است [۲۴]. مثلاً به علت کوتاه بودن زمان شبیه سازی نمی توان از پسماند به عنوان شاخص مفیدی برای گذار مرتبه اول استفاده کرد، چون ممکن است پسماند به گرم کردن و یا سرد کردن سریع در حین گذار مربوط باشد.

با توجه به مشکلاتی که در بالا به آنها اشاره شد ممکن است این سوال مطرح شود که آیا شبیه سازی در بررسی این زمینه مفید است یا خیر؟ البته چند مزیت در استفاده از شبیه سازیهای کامپیوتری برای بررسی ذوب دوبعدی وجود دارد. شبیه

الکترون دوبعدی نظریه ذوب KTHNY را تایید می کنند. متأسفانه این آزمایشها اطلاعاتی درباره نظم جهتی پیوند دربر ندارند که در نتیجه نمی توان درباره پیشگوییهای فاز هگزاتیک HNY توضیحاتی داد.

سیستم جذب سطحی کریپتون روی گرافیت به خوبی به وسیله پتانسیل لنارد - جونز توصیف می شود. حالتیهای زمینه این سیستم یک جهت ارجح نسبت به محورهای بلور گرافیت را دارند. نظم جهتی پیوند بلندبرد همیشه به وسیله زیرلایه اعمال می شود. اثر این نظم از بین بردن هر گذار ممکن از حالت هگزاتیک به حالت همسانگرد می باشد. فازهای مایع دوبعدی در این سیستمها همیشه نظم جهتی پیوند بلندبرد زیرلایه القایی دارند.

آزمایشهای جدید [۱۳]، گذار ذوب کره های باردار زیرمیکرونی معلق در آب و محبوس بین صفحه های شیشه ای را به خوبی بررسی کرده اند. چون کره ها به وسیله صفحه ها دفع می شوند، فشردن صفحات به همدیگر چگالی کره ها را کم می کند. این آزمایشها در یک گوه شیشه ای انجام شده است. عکس برداری از نقاط مختلف گوه اطلاعاتی در گستره ای از چگالیها می دهد. هر عکس حدوداً حاوی ۲۰۰۰ کره است. تجزیه و تحلیل این عکسها و مقایسه آنها با تصویر KTHNY درباره جفتی ناراستی کار ساده ای نمی باشد. نظریه KTHNY رفتار در مقیاسهای بزرگ را توصیف می کند و تصویر واضحی از اینکه فاز هگزاتیک در مقیاس اتمی چگونه باید ظاهر شود نمی دهد. فقدان چنین تصویری، این دو موضوع را که آیا ناحیه میانی مشاهده شده در بعضی شبیه سازیها یک فاز هگزاتیک است و یا یک ناحیه همزیستی، تفکیک ناپذیر می سازد. به هر حال، سیستم کره ای باردار برای تحقیق درباره مسئله واقعی ذوب دوبعدی در یک سیستم تجربی بسیار امیدبخش است.

### ۱-۳. شبیه سازیهای کامپیوتری

دو روش شبیه سازی معمولاً مورد استفاده قرار می گیرد، دینامیک مولکولی و مونت کارلو. در هر دو روش نتایج مربوط به مقادیر مورد توجه به صورت میانگین گیری روی ترکیبهای تولید شده به وسیله تکرار یک الگوریتم ساده به دست می آیند که این الگوریتم حرکت تمام ذرات را تنظیم می کند.

روش دینامیک مولکولی [۱۴-۱۶]، به وسیله انتگرال گیری عددی معادلات حرکت نیوتن محاسبه می شود. پیشرفت زمانی در انتگرال گیری «گام زمانی» نام دارد و متضمن حرکت هر ذره به

شده است، سیستم بزرگتری انتخاب شده است (۲۵۶ ذره به صورت  $16 \times 16$ ) که از لحاظ آماری بتوان نتایج بهتری را به دست آورد. شرایط مرزی استفاده شده شرایط مرزی آزاد و سیستم آماری انتخاب شده سیستمی با انرژی و تعداد ذرات ثابت است. نیروی برهمکنش بین دو یون  $i$  و  $j$  به فاصله  $r_{ij}$  از یکدیگر قرار دادند از دو جمله سخت و نرم تشکیل شده است.

$$F(r_{ij}) = \frac{q_i q_j}{|r_{ij}|^2} \left[ 1 + \text{sign}(q_i q_j) \left( \frac{S_i + S_j}{|r_{ij}|} \right)^P \right] r_{ij} \quad (1)$$

در این رابطه  $q$  بار الکتریکی و  $S$  نشان دهنده اندازه یون و متناسب با شعاع یونی است و پارامتر  $P$  مشخص کننده سختی نیروی دافعه میان یونها است که در این شبیه سازی  $P=8$  انتخاب شده است. منظور از  $\text{sign}$  علامت حاصلضرب  $q_i$  و  $q_j$  است. معادلات حرکت به صورت زیر هستند.

$$\frac{dr_i}{dt} = v_i \quad (2)$$

$$m_i \frac{d^2 r_i}{dt^2} = \sum_{j \neq i, j=1}^N F_{ij} (r_i, r_j) \quad (3)$$

برای حل معادله دیفرانسیلی (۳) روش استاندارد، استفاده از تفاضلهای متناهی است [۲۷]. در دینامیک مولکولی برای حل معادلات از الگوریتمهای متفاوتی استفاده شده است. در بین این الگوریتمها روشی ساده به نام پرش قورباغه‌ای<sup>۱</sup> [۲۸ و ۲۹] را انتخاب کردیم زیرا که ساده است، برای گام زمانی بزرگ پایدار است و تقارن دارد و در نتیجه برگشت پذیر است. این روش به شکل زیر است:

$$v_{n+\frac{1}{2}} = v_{n-\frac{1}{2}} - \frac{F_n}{m} DT \quad (4)$$

$$r_{n+1} = r_n - v_{n+\frac{1}{2}} DT \quad (5)$$

در این روابط،  $r_n$  و  $F_n/m$  مکان و شتاب در گام زمانی  $n$  و  $v_{n+\frac{1}{2}}$  سرعت در گام زمانی  $n+\frac{1}{2}$  و  $DT$  گام زمانی است که در این شبیه سازی با توجه به نوع یونها، ساختار بلور و شرایط تعادلی سیستم،  $DT=4$  fs برای سیستم ۶۴ ذره‌ای و  $DT=6$  fs برای سیستم ۲۵۶ ذره‌ای انتخاب شده است. سرعت در گام زمانی  $n$  نیز از میانگین حسابی در نیم گام قبل و بعد از گام

سازیهای کامپیوتری به ما امکان تغییر برهمکنشهای ذره‌ای را می‌دهند تا اینکه بستگی رفتار ذوب به نوع پتانسیل مورد بررسی قرار گیرد. همچنین شبیه سازیها اجازه می‌دهند سیستمهای دقیقاً دوبعدی بررسی شوند. اثر میدانهای نظم زیرلایه هم ممکن است بحث شود و از اثرات حرکت در بعد سوم تمیز داده شود. و در پایان، شبیه سازیها اجازه ورود به پیکربندهای میکروسکوپی می‌دهند و حدسهای لازم برای تفسیر نتایج تجربی را برطرف می‌سازند. برای مثال، می‌توان عکس آتی از ناراستیهای بلور و حرکت ذرات به دست آورد.

اخیراً ری و همکاران [۲۵] در یک شبیه سازی دینامیک مولکولی به مطالعه خوشه‌های کوچک پرداختند. در این مطالعه از پتانسیل عکس توانی عمومی  $m-n$  استفاده شده و مطالعه گسترده‌ای برای بررسی اثر تغییرات نرمی مغز (با تغییر  $m$  و  $n$ ) در فرایند ذوب انجام گرفته است. آنها دریافتند که اگر نرمی مغز پتانسیل تغییر کند در فرایند ذوب دو مرحله‌ای تأثیر خواهد گذاشت. در بعضی خوشه‌ها با اندازه‌های خاص پدیده ذوب پیش‌رس اتفاق می‌افتد. همچنین فاز شبه پایدار هنگامی که پتانسیل سخت‌تر انتخاب شود بیشتر قابل مشاهده است.

در مطالعه شبیه سازی دینامیک مولکولی دیگری که اخیراً به وسیله سن و گانگ [۲۶] انجام شده یک خوشه فلزی آلومینیومی شامل  $n$  ذره ( $n=13,55,147, \dots$ ) را از دمای بالا سرد می‌کنند و تغییرات کمیتهای فیزیکی و ساختاری سیستم را برحسب دما مطالعه می‌کنند. در این شبیه سازی اثر اندازه خوشه در ساختار نهایی آن مطالعه شده. در این بررسی همزیستی دوفاز شبه مایع و شبه جامد به صراحت تایید شده است. همچنین برای خوشه‌های بزرگ گذار ذوب مرتبه اول مشاهده شده است.

## ۲. شبیه سازی حاضر و نتایج آن

در بررسی حاضر با استفاده از روش دینامیک مولکولی بلوری شامل  $N$  یون را به طور دوبعدی بررسی می‌کنیم. بلور انتخاب شده نمک یونی پتاسیم کلرید (KCl) است و پارامترهای به کار رفته بهنجار نشده، یعنی همان پارامترهای واقعی مثل شعاع یونها، جرم یونها و غیره به کار رفته‌اند. اندازه سیستم یک بار خیلی کوچک انتخاب شده است (۶۴ ذره به صورت  $8 \times 8$ ) تا برنامه نوشته شده با وقت کمتری آزمایش شود. وقتی که این کار برای چندین بار انجام شد و تغییرات لازم روی برنامه صورت گرفت و اطمینان کافی حاصل شد که برنامه از هر لحاظ کامل

زمانی  $m$  به دست می آید. یعنی:

$$v_n = \left[ v_{n-\frac{1}{2}} + v_{n+\frac{1}{2}} \right] / 2 \quad (6)$$

تذکر این نکته نیز لازم است که چون یونها در این شبیه سازی دوبعدی دارای دو درجه آزادی هستند و به صورت کلاسیک بررسی می شوند، دما به صورت زیر به انرژی جنبشی کل میانگین وابسته است:

$$\sum_{i=1}^N \frac{1}{2} m_i v_i^2 = N k_B T \quad (7)$$

که در آن  $N$  تعداد ذرات سیستم،  $k_B$  ثابت بولتزمن و  $T$  دمای سیستم برحسب کلوین می باشد.

#### ۲-۱. روند کلی برنامه

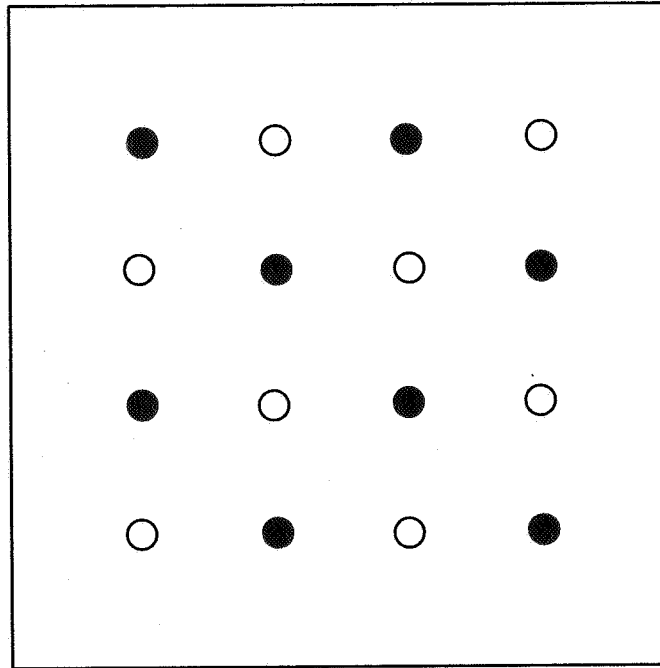
در این برنامه بلورهای ساده دو اتمی را می سازیم. روش ایجاد بلور به این ترتیب است که فضای گسسته را به صورت برداری (با دو جهت  $x$  و  $y$ ) در نظر گرفته و هر کدام از این محورها را شماره گذاری می کنیم، اگر مجموعه دو شماره فضا زوج شد، این محل مختص یون مثبت است و اگر فرد شد به یون منفی تعلق دارد. به این ترتیب در هر دو راستای فوق، یونهای مثبت و منفی به صورت یک در میان قرار خواهند گرفت. شمای ۱۶ ذره ای این روند در شکل ۱ نشان داده شده است.

ابتدا فاصله شبکه و همچنین تعداد یونهای بلور از طریق صفحه کلید دریافت می شوند و با اجرای برنامه مختصات و سرعت یونهای مثبت و منفی به ترتیب در فایل ثبت می شوند به طوری که هر سطر معرف اطلاعات یک یون و هر ستون بیانگر مؤلفه بردار مختصه مکان و سرعت باشد. البته در بلوری که ساخته شده، به علت عدم تقارن نیروها برای یونهای سطحی، در وضع تعادل فاصله شبکه این یونها کوچکتر از فاصله شبکه یونهای مرکزی می باشد و در نتیجه بلور ایجاد شده در پایینترین سطح انرژی خود قرار ندارد و به این ترتیب انرژی پتانسیل نسبتاً بزرگی در بلور ذخیره کرده ایم و اگر بنا باشد بلور را به همین صورت رها کنیم پس از گذشت چند گام زمانی فرو می ریزد. برای جلوگیری از این عمل لازم است برای مدت معینی از بلور گرما و یا معادل آن انرژی بگیریم و شرط دمای ثابت معینی را بر روی آن اعمال کنیم. این عمل را با تعیین نسبت انرژی جنبشی میانگین یک یون بلور به انرژی جنبشی میانگین یک یون بلوری

که در دمای معینی قرار دارد و تقسیم تمام سرعتهای یونها بر جذر این نسبت انجام داده و به این ترتیب بلور را برای مدت مشخص در دمای معینی نگه می داریم و پس از آن بلور را برای یک دوره چند هزار گام زمانی که دوره تعادل اولیه می نامیم، آزاد می گذاریم تا به تعادل برسد.

پس از این مرحله دوره گرمادهی شروع می شود. طول هر دوره گرمادهی بسته به تعداد ذرات سیستم ۱۰۰۰ (یا ۱۵۰۰) گام زمانی انتخاب شده است. در طی ۱۰ گام اولیه همه سرعتها در ضریب ۱/۰۰۱ ضرب می شوند و به این ترتیب پالس گرمایی به بلور داده می شود. پس از آن در ۶۰۰ (یا ۱۰۰۰) گام بعدی بلور را به حال خود رها می کنیم تا به تعادل در آید. ۳۹۰ (یا ۴۹۰) گام باقی مانده نیز صرف محاسبات میانگین و تعیین دمای بلور می شود (داخل پراتنر مربوط به سیستم ۶۴ ذره ای می باشند). این دوره گرمادهی تا ذوب شدن بلور و کمی پس از آن ادامه پیدا می کند. با تکرار همین مرحله از برنامه و تبدیل ضریب گرمادهی از ۱/۰۰۱ به ۰/۹۹۹ می توان مذاب حاصله را سرد و تبدیل به بلور کرد. البته شرایط اولیه ای که بر سیستم اعمال می شود، فرض سرعت معین برای ذرات است به شرطی که تکانه خطی کل و تکانه زاویه ای کل سیستم صفر باشد. لذا دو زیر برنامه که به همین منظور نوشته شده اند در اول هر دوره اجرا می شوند.

در طول دوره ۱۰۰۰ (یا ۱۵۰۰) گام زمانی، سه زیر برنامه مرتباً اجرا می شوند. در زیر برنامه اول در هر گام زمانی نیروی کلی وارد بر هر یون و همچنین انرژی پتانسیل هر یون محاسبه می گردد. در این قسمت به علت اینکه نیروی وارد بر ذره  $\lambda$  از طرف ذره  $\lambda$  مساوی و خلاف جهت نیروی وارد بر ذره  $\lambda$  از طرف ذره  $\lambda$  است (قانون سوم نیوتن)، محاسبه نیروها در بالای قطر اصلی ماتریس یونها انجام می گیرد و مقادیر زیر قطر اصلی با توجه به مقادیر فوق محاسبه می گردند (مقادیر قطر اصلی صفر هستند). دو حلقه متداخل که روند فوق را پیگیری می کنند، در ابتدا اندازه بردار فاصله بین دو یون با توجه به مقادیر مؤلفه های بردار مکان این دو یون محاسبه می گردد، پس از این مرحله با توجه به نوع یونها و برهمکنش مربوطه نیروی بین این دو یون و انرژی پتانسیل مربوط به این دو یون محاسبه می گردند. پس از این مرحله مقادیر نیروها و انرژی پتانسیل در بردارهای نیروها و انرژی پتانسیل کل هر یون ریخته می شود. نکته قابل توجه در این مرحله این است که به ترتیب فوق برای هر یون دو بار انرژی پتانسیل را به حساب آورده ایم و باید



شکل ۱. شمای قرار گرفتن یونها در یک بلور دوبعدی KCl ۱۶ ذره‌ای.

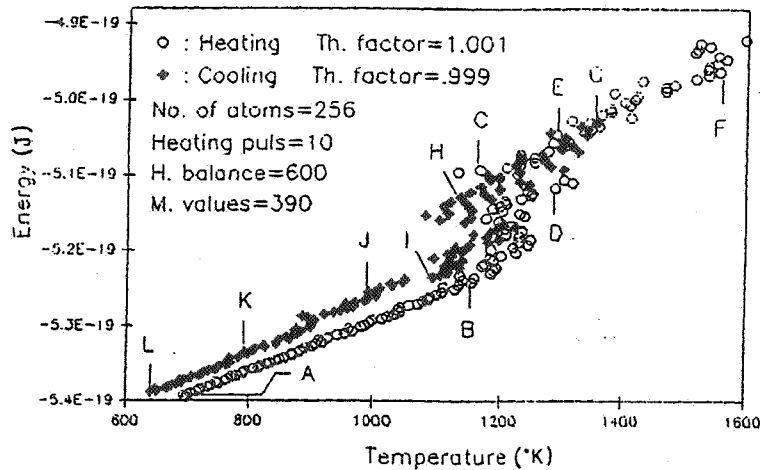
جابجایی ذرات (MSD) (شکل ۳، ۴، ۵، ۶ و ۷)، و تابع توزیع زاویه پیوند (شکل ۸ و ۹). همچنین عکسهای آنی (شکل ۱۰ و ۱۱) و عکسهایی از پیشرفت زمانی سیستم (شکل ۱۲ و ۱۳) یا چند ذره انتخابی (شکل ۱۴ و ۱۵) نیز نشان داده شده‌اند.

در شکل ۲ سیستم را از حالت تعادل در نقطه A که در دمایی در حدود  $700\text{ K}$  است شروع کرده و به نحوی که در بخش ۲ گفته شد گرم کرده‌ایم. نتایج به دست آمده برای انرژی برحسب دما در انتهای هر دوره گرمادهی به صورت دایره‌های توخالی رسم شده‌اند. سیستم با گذر از نقطه B به C می‌رسد. در فاصله B تا C می‌توان گفت که سیستم ذوب می‌شود و مایع حاصله در فاصله C تا F با عبور از نقاط D و E گرم می‌شود. وقتی دمای سیستم به حدود  $1600\text{ K}$  (نقطه F) رسید، با وارونه کردن فرایند گرمادهی (انتخاب ضریب  $0/999$ ) سیستم را سرد می‌کنیم و با عبور از نقطه G بین نقاط H و I یک گذر فاز مرتبه اول مشاهده می‌شود که با برخی نتایج شبیه سازیهای سه بعدی که نشان می‌دهند در حالت سرد کردن، گذر مرتبه دوم می‌باشد [۳۰]، متفاوت است. با ادامه فرایند سرد کردن، سیستم از نقاط K، و L عبور می‌کند و به یک بلور منظم می‌رسد ولی روی

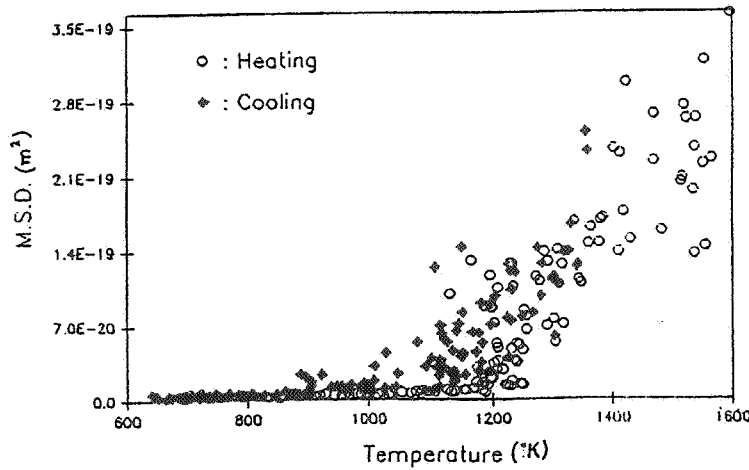
ضریب ۲ را از محاسباتمان حذف کنیم. در زیربرنامه دوم سرعتهای یونها و موقعیتهای مربوط به آنها در گام بعدی محاسبه می‌شود. در این قسمت در ابتدا سرعت طبق رابطه (۴) محاسبه می‌شود. پس از آن با توجه به سرعتهای به دست آمده، مختصات مربوط به یونها از رابطه (۵) محاسبه می‌گردند. در زیربرنامه سوم، در صورت لزوم، دمای بلور تثبیت می‌گردد. در این زیربرنامه ابتدا انرژی جنبشی کل بلور محاسبه می‌گردد و پس از آن نسبت این انرژی جنبشی به انرژی جنبشی یونها بلوری که در دمای معین T می‌باشد محاسبه و جذر گرفته می‌شود و پس از این مرحله تمام سرعتها بر این ضریب به دست آمده تقسیم می‌گردند. البته این کار فقط در مواقع خاصی انجام می‌گیرد.

## ۲-۲. نتیجه گیری

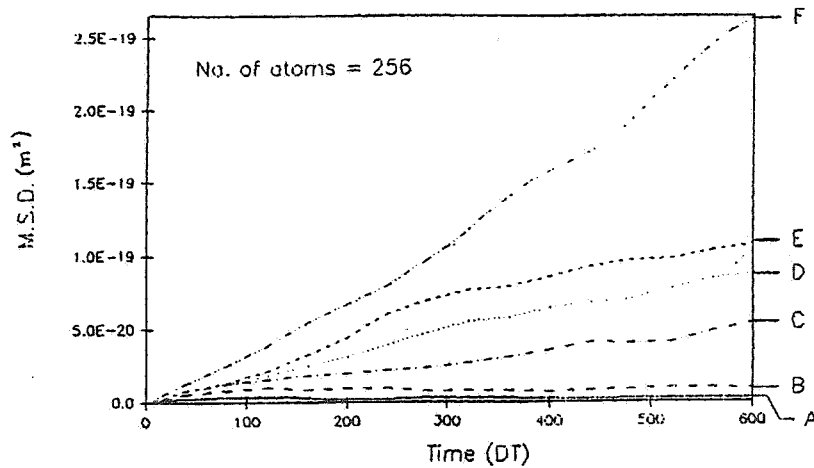
بعضی از نتایج به دست آمده از شبیه سازی ذوب و سرد کردن سیستم ۲۵۶ ذره‌ای به شکل نمودارهایی برحسب دما و یا زمان در شکلهای مستقل رسم شده‌اند. کمیتهایی که نمودار آنها نشان داده شده، عبارتند از: انرژی کل (شکل ۲)، میانگین مربع



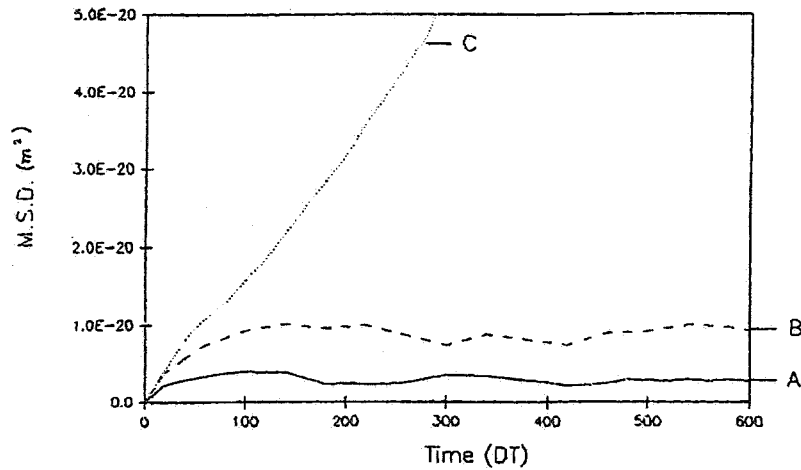
شکل ۲. نمودار تغییرات انرژی کل سیستم ۲۵۶ ذره‌ای برحسب دما در هنگام گرم کردن و سرد کردن سیستم. نتایج به دست آمده در هنگام گرم کردن با دایره توخالی و هنگام سرد کردن با نقاط توپر نشان داده شده است. پارامترهای به کار رفته در شبیه سازی روی شکل مشخص شده‌اند.



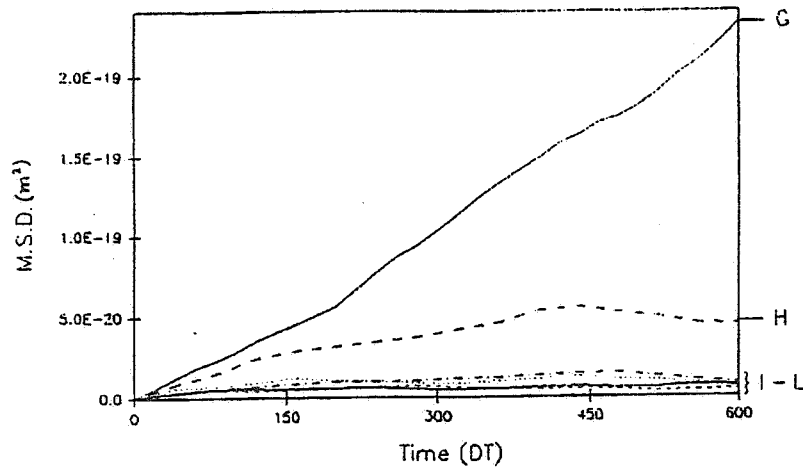
شکل ۳. نمودار میانگین مربع جابه‌جایی ذرات پس از زمان  $600 \text{ DT}$  برحسب دما برای سیستم مورد شبیه سازی مذکور.



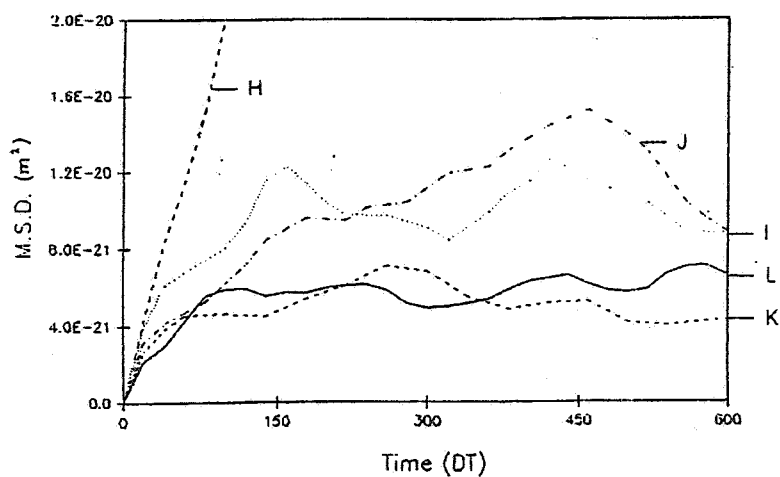
شکل ۴. تغییرات میانگین مربع جابه‌جایی برحسب زمان در طی یک دوره گرمادهی برای نقاط مشخص شده در شکل ۲.



شکل ۵. قسمتی از شکل ۴ با بزرگنمایی زیاد. دقت در این شکل نشان می‌دهد که نقاط A و B نشان دهنده فاز جامد و نقطه C مبین حالت مذاب است.

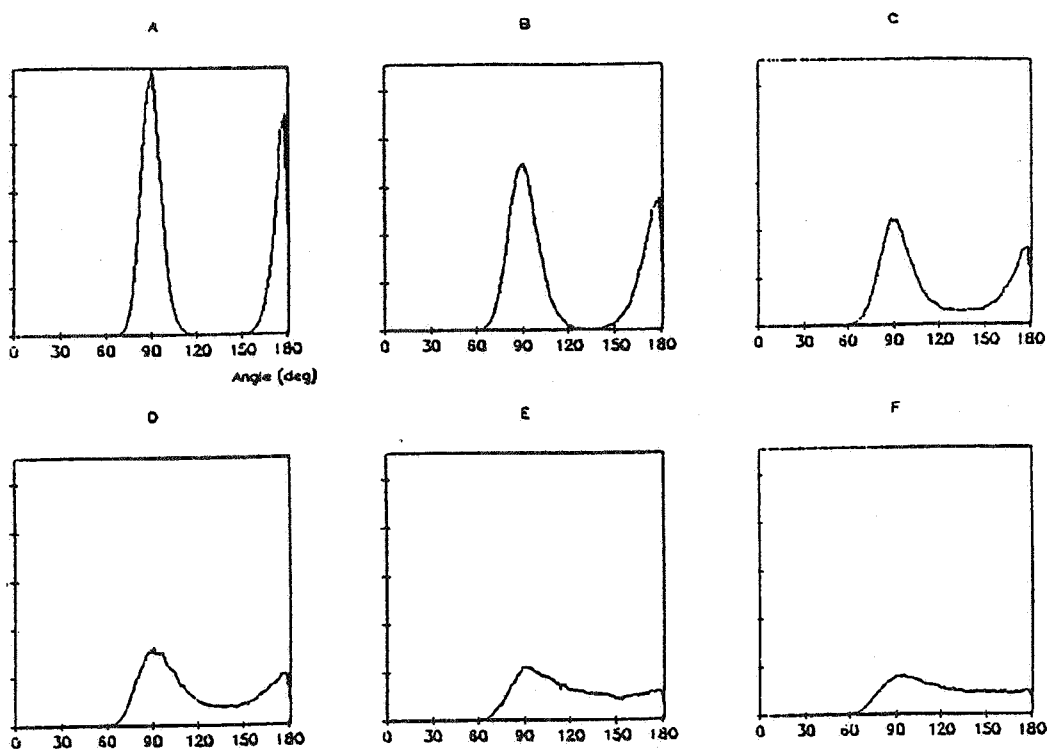


شکل ۶. نمودار تغییرات میانگین مربع جابه‌جایی ذرات بر حسب زمان برای نقاط G تا L مذکور. این شکل نشان می‌دهد که در نقطه G سیستم در فاز مایع است در حالی که در نقاط I تا L جامد می‌باشد.

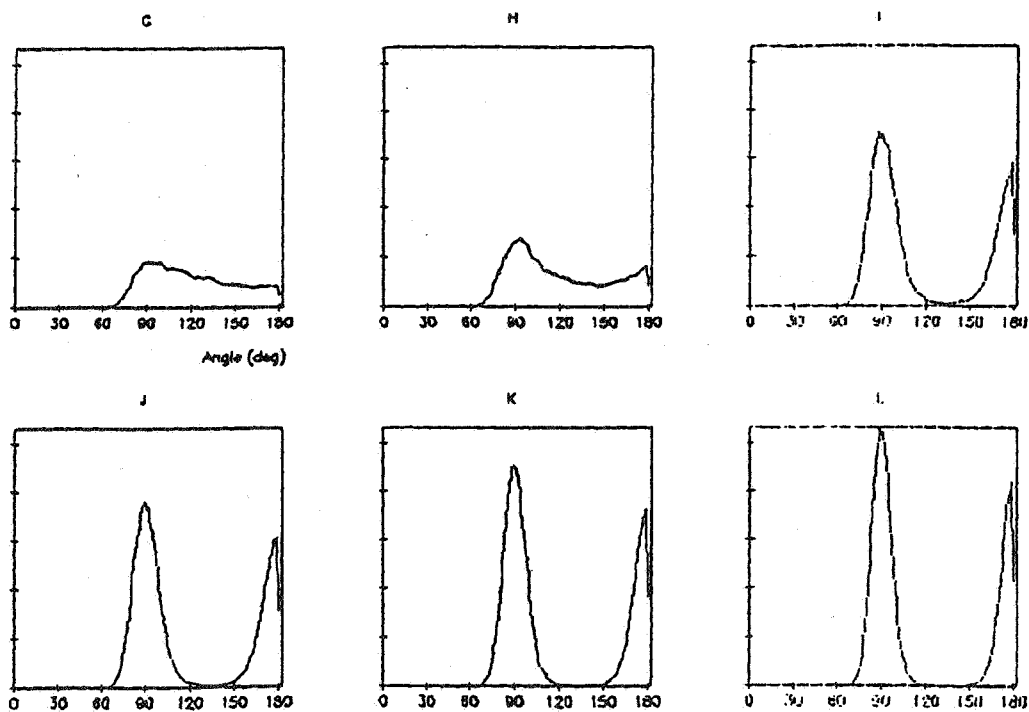


شکل ۷. مانند شکل ۶ با بزرگنمایی بیشتر است.

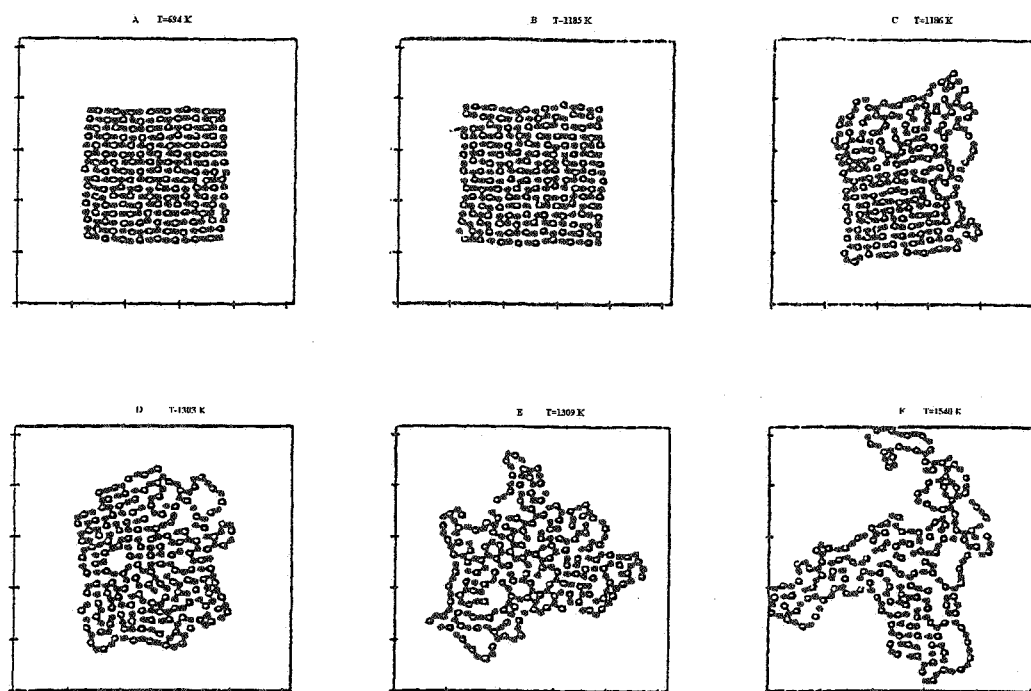




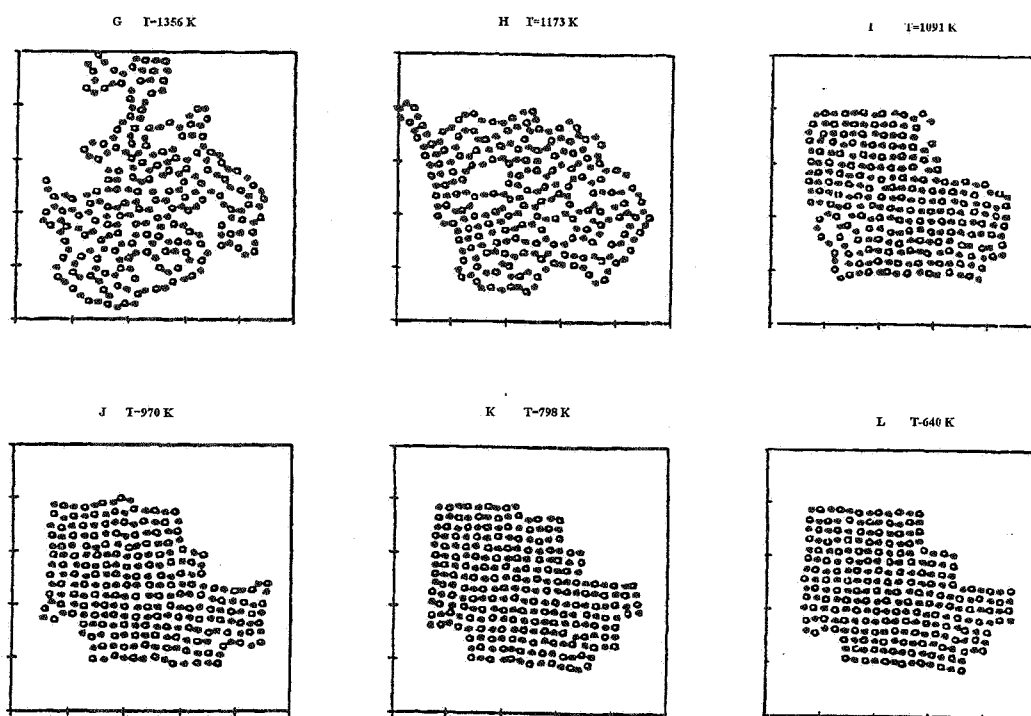
شکل ۸. توزیع زاویه پیوند سیستم در نقاط منتخب هنگام گرم کردن. در نقاط A، B و C زوایای غالب  $90^\circ$  و  $180^\circ$  می باشند که همان ساختار بلوری است، در حالی که در E و F سیستم کاملاً ذوب شده است.



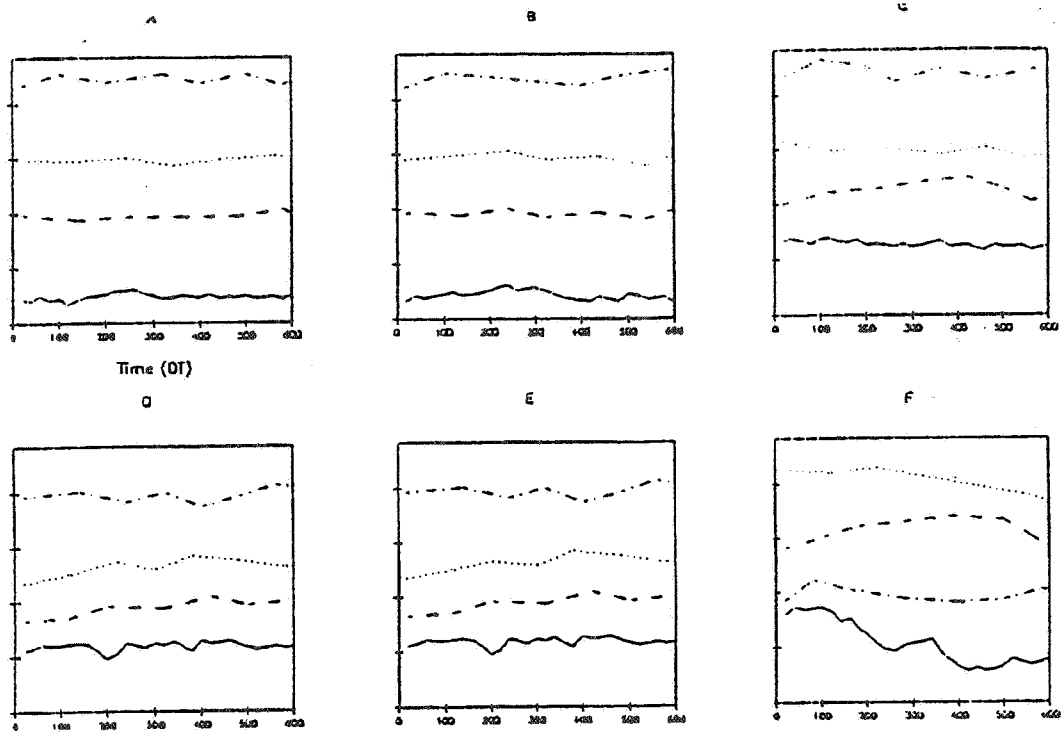
شکل ۹. مانند شکل ۸ است برای نقاط منتخب در فرایند سرد کردن سیستم.



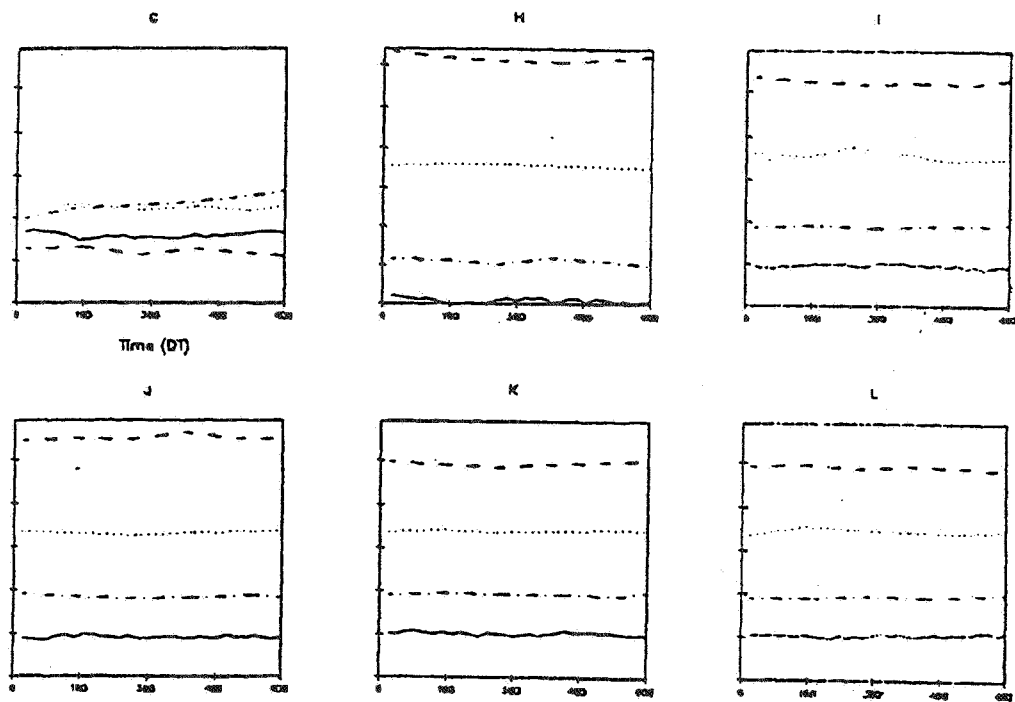
شکل ۱۰. عکس آنی سیستم در نقاط A تا F. یونهای Cl و K به ترتیب با دایره‌های خالی و توپر مشخص شده‌اند.



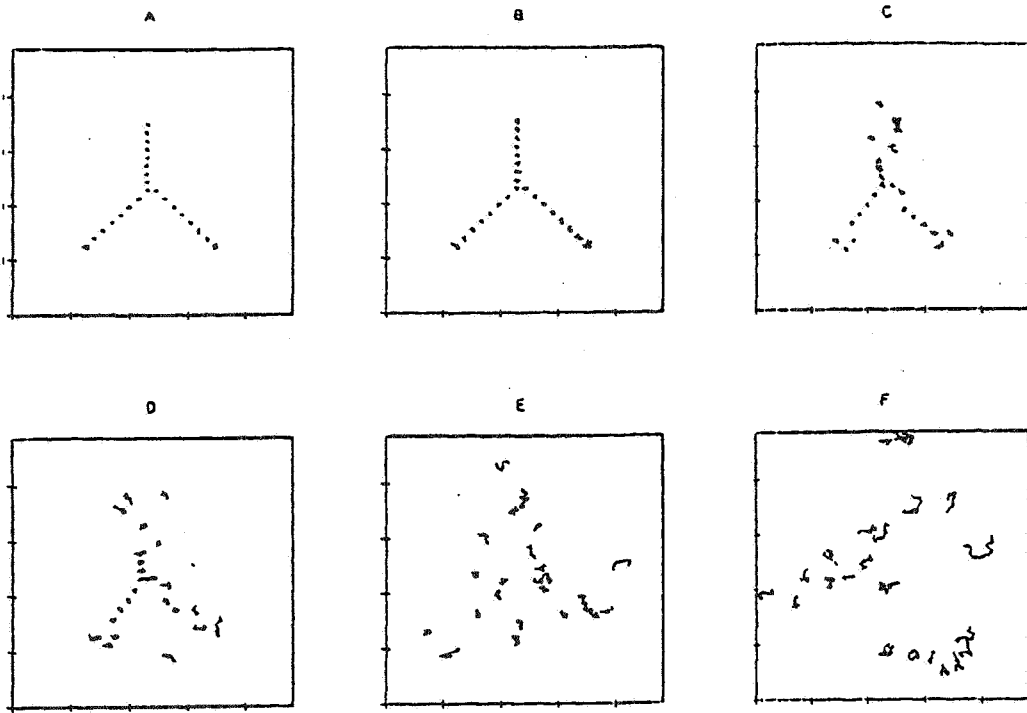
شکل ۱۱. مانند شکل ۱۰ است برای نقاط منتخب در فرایند سرد کردن.



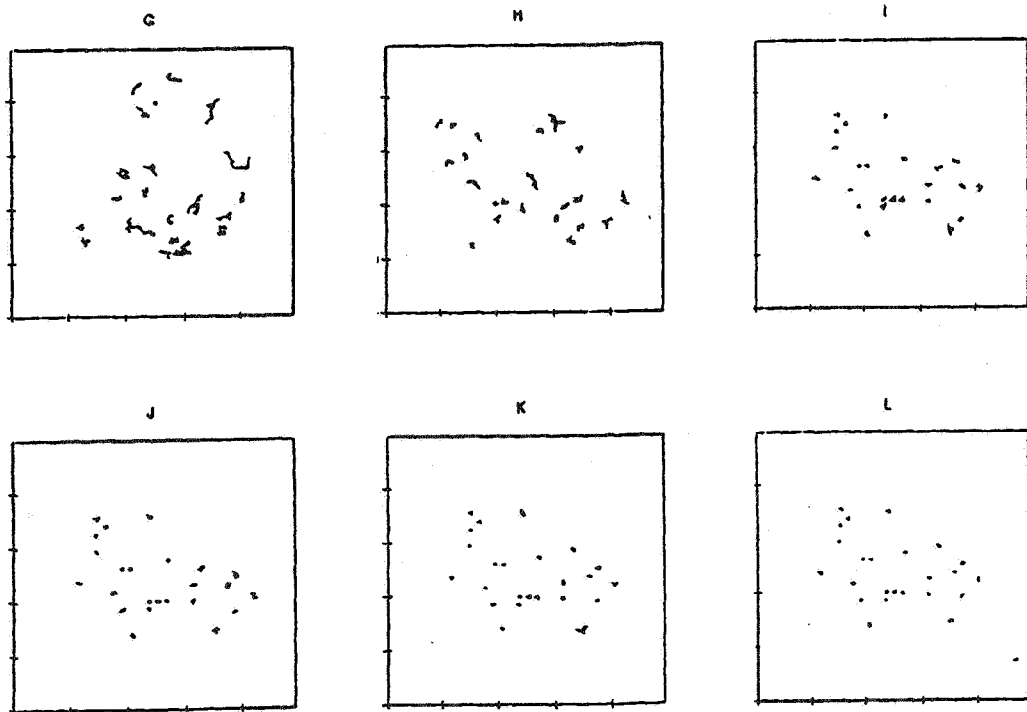
شکل ۱۲. نمودار تغییرات یک بعد (Y یا X) چند ذره انتخابی بر حسب زمان برای نقاط A تا F



شکل ۱۳. مانند شکل ۱۲ است برای نقاط منتخب G تا L.



شکل ۱۴. نمایش رد چند ذره انتخابی در صفحه  $X-Y$  برحسب زمان برای نقاط انتخابی A تا F در فرایند گرم کردن سیستم. در نقطه‌ای مانند A که سیستم بلوری است هر ذره در حوالی مکان خود می‌ماند در حالی که پس از ذوب شدن رد ذرات گویای اتفاق است.



شکل ۱۵. مانند شکل ۱۴ است برای نقاط منتخب G تا L فرایند سرد کردن.

سیستم (شکل ۱۰ و ۱۱) و رسم حرکت یک بعدی (شکل ۱۲) و (۱۳) و دوبعدی (شکل ۱۴ و ۱۵) بعضی از ذرات انتخابی در طی زمان می‌توان تشخیص داد.

همه نمودارهای ذکر شده (شکل‌های ۲-۱۵) در توافق با هم دلالت بر حالت بلوری سیستم در نقاط A، B و همچنین I، J، K و L دارند.

درخصوص بررسیهای شبیه سازی کامپیوتری برای ذوب دوبعدی، با بررسی سه اندازه متفاوت ( $N=256, 64, 16$ ) توانستیم طبیعت گذار که مرتبه اول است را مشاهده کنیم. که این امر برخلاف پیشنهاد نظریه KTHNY و نتایج تعداد کمی از آزمایشها مبنی بر پیوسته (مرتبه دوم) بودن گذار، با بیشتر آزمایشها و شبیه سازها توافق دارد. با افزایش تعداد ذرات سیستم (از ۱۶ به ۶۴ و بالاخره به ۲۵۶) گرمای نهان و در نتیجه گذار ذوب مرتبه اول خیلی واضحتر دیده می‌شود. البته ممکن است اندازه کوچک سیستم و زمان محدود اجرای برنامه درستی طبیعت گذار ذوب را مشکوک سازد. در نمودارهای انرژی کل، دقت بالایی برای واریسی کردن اثرات مربوط به اندازه‌های مختلف سیستم و مقدار گام زمانی اعمال شده بود. نمی‌توان با قطعیت درباره مشاهده فاز هگزاتیک سخن گفت، به هر حال بین فاز منظم جامد و فاز نامنظم مایع، فازی با نظم میانی مشاهده شده است که ممکن است فاز هگزاتیک باشد و یا ناحیه همزیستی دوفاز جامد و مایع است. دمای گذار به دست آمده حدوداً با نتایج تجربی سیستم سه بعدی در توافق است. یکی از نتایجی که در این شبیه سازی به دست آمده برگشت پذیری به حالت بلوری بود. هر چند زمان شبیه سازی محدود بود ولی موفق شدیم سرعت سرد کردن سیستم را تا حدودی کند کنیم و به جای رسیدن به شیشه توانستیم به ساختمان بلوری آشکاری برسیم.

همچنین در مورد طبیعت گذار مرتبه اول، نتایج به دست آمده با نتایجی که اخیراً در مورد ذوب خوشه‌ها که توسط ری، گارسیا، گالیجو، و گریسون [۲۵] به دست آمده‌اند کاملاً در توافق است. از طرفی هم در مورد احتمال حضور فاز همزیستی

همان نقاط متناظر حالت گرم کردن نمی‌افتد و انرژی حالت سرد کردن همیشه برای یک دمای معین از حالت گرم کردن بیشتر است و علت این امر در این است که سیستم دقیقاً به همان نظم اولیه برنمی‌گردد و افزایش انرژی مربوط به میزان بی‌نظمی حالت جدید است.

برای تمیز حالت مایع از جامد می‌توان از بررسی میانگین مربع جابه‌جایی ذرات، عکس آنی سیستم، و توزیع زاویه پیوند یونها استفاده کرد. در شکل ۳ مقدار ذخیره شده میانگین مربع جابه‌جایی همه یونها، پس از ۶۰۰ گام زمانی، برحسب دما رسم شده است. در این شکل نیز نتایج به دست آمده در هنگام گرم کردن سیستم با دایره توخالی نشان داده شده‌اند. این شکل به وضوح گذار فاز را از حالت جامد به مایع و برعکس نشان می‌دهد. می‌دانیم که شیب خط میانگین مربع جابه‌جایی برحسب زمان متناسب با ثابت پخش است. انتظار می‌رود که در حالت جامد این چنین خطی افقی و در مورد مایع دارای شیب مثبت باشد. این موضوع در بررسی نقاط منتخب شکل ۲ یعنی A تا F (هنگام گرم کردن) و G تا L (نتایج هنگام سرد کردن) روشن است. در شکل‌های ۴-۷ مقادیر میانگین مربع جابه‌جایی یونهای سیستم برحسب زمان برای آخرین DT ۶۰۰ هر دوره گرمادهی رسم شده است.

هنگامی که سیستم شکل منظم بلوری داشته باشد انتظار داریم که یونها K و Cl یکی در میان در رأسهای مربعهای هم‌اندازه قرار گیرند. اگر در این وضعیت زاویه پیوند K-Cl-K یا Cl-K-Cl را اندازه بگیریم نزدیک به  $90^\circ$  و  $180^\circ$  است، ولی در فاز مایع این زاویه‌های پیوند (یا زاویه‌ای که نزدیکترین همسایگان می‌سازند) توزیع تقریباً یکنواختی از  $180^\circ-60^\circ$  درجه را دارند. در شکل‌های ۸ و ۹ توزیع زاویه‌های پیوندی سیستم در نقاط منتخب A-F و G-L رسم شده است. دقت در این نمودارها گذار بلور به مایع و مایع به بلور به وضوح مشاهده می‌شود. توجه به شکل ۹ به وضوح ساختار بلوری سیستم در نقاط I، J، K و L را نشان می‌دهد.

تغییر فاز بلور به مایع و برعکس را با مطالعه عکس آنی

۱۳ تا ۱۴۷ ذره است که با ۱۶ تا ۲۵۶ ذره مورد مطالعه قابل مقایسه است.

#### قدردانی

مؤلفین از زحمات و راهنماییهای مفید و بی دریغ آقای دکتر هادی اکبرزاده در تحلیل نتایج و تصحیح متن صمیمانه قدردانی می‌کنند.

جامد - مایع، نتایجی که به دست آوردیم با نتایجی که اخیراً در مورد ذوب خوشه‌ای که توسط سن و گانگ [۲۶] به دست آمده‌اند توافق بسیار خوبی را نشان می‌دهند. با اینکه این دو شبیه سازی مربوط به خوشه‌ها است ولی با کار حاضر دارای شباهتهای زیادی است. اولاً هر دو شبیه سازی از شرایط مرزی دوره‌ای استفاده نمی‌کنند و از این بابت با کار حاضر قابل مقایسه هستند. ثانیاً تعداد ذرات مورد استفاده در این شبیه سازیها بین

#### مراجع

1. J M Kosterlitz and D J Thouless, "Progresses in Low Temperature Physics," Vol. VII-B, edited by D F Brewer, North-Holland, Amsterdam (1978), p. 373.
2. J M Kosterlitz and D J Thouless, *J. Phys.* C6, (1973), 1181.
3. B L Halperin and D R Nelson, *Phys. Rev. Lett* 41 (1978), 121.
4. D R Nelson and B I Halperin, *Phys. Rev.* B19, (1979), 2457.
5. A P Young, *Phys. Rev.* B19, (1979), 1855.
6. D S Fisher, B L Halperin and R Morf, *Phys. Rev* B34, 20, (1979), 4692.
7. S T Chui, *Phys. Rev. Lett*, 48, (1982), 933.
8. S T Chui, *Phys. Rev.* B28, (1983), 178.
9. B Joos and M S Duesbery, *Phys. Rev. Lett.* 55, (1985), 1997.
10. J F Fernaldz and M F Ferrcirra, *Phys. Rev.* B34, (1986), 292.
11. Y Saito and H Muller-Krumbhaar, "Applications of the Monte Carlo Method in Statistical Physics", edited by K. Binder, Topics in Current Physics, Vol. 36, (Springer, New York), (1984), p. 223.
12. K J Strandburg, *Phys. Rev.* B34, (1986), 3536.
13. C A Murray and D H van Winkle, *Phys. Rev. Lett.* 58, (1987), 1200.
14. A Rahman, *Phys. Rev.* 136A, (1964), 405.
15. L Verlet, *Phys. Rev.* 159, (1967), 98.
16. H C Andersen, *J. Chem. Phys.* 72, (1980), 2384.
17. K Binder, Ed., "Monte Carlo Methods in Statistical Physics," Topics in Current Physics, Vol. 7, Springer New York, (1979).
18. F F Abraham, *Phys. Rev. Lett* 44, (1980), 463.
19. F F Abraham, *Phys. Rep.* 80, (1981), 339.
20. M E Fisher and D A Huse, "Melting, Localization, and Chaos", edited by R K Kalia and P Vashishta, North Holland, Amsterdam, (1982), p. 259.
21. F F Abraham, *Phys. Rev.* B23, (1981), 6145.
22. Ph Choquard and J Clerouin, *Phys. Rev. Lett.* 50, (1983), 2986.
23. M O Robbins, et. al., *Phys. Rev.* B42, (1990), 5579.
24. K J Strandburg, *Rev. of Modern Phys.* 60, (1988), 161.
25. C Rey J Garcia-Rodeja, L J Gallego and M J Grimson, *Phys. Rev.* E57, (1998), 4420.
26. D Y Sun and X G Gong, *Phys. Rev.* B57, (1998), 4730.
27. S Gupta, *Comp. Phys. Comm.* 70, (1992), 243.
28. O Buneman, *J. Comput. Phys.* 1, (1967), 517.
29. R W Hockney, *Meth. Comput. Phys.* 9, (1970), 517.
30. M Amini and R W Hockney, *J. Non-Cryst. Solids*, 31, (1979), 447-452.