

УДК 531.19

**Я. Г. Грода<sup>1</sup>, Э. Э. Бильданов<sup>2</sup>, В. С. Вихренко<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>Белорусский государственный технологический университет

<sup>2</sup>Белорусский государственный университет

## **ОБОБЩЕННОЕ КВАЗИХИМИЧЕСКОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ ДЛЯ РЕШЕТОЧНОЙ СИСТЕМЫ С SALR-ПОТЕНЦИАЛОМ**

Исследована решеточная модель системы наночастиц либо макромолекул, части которой притягиваются на малых расстояниях и отталкиваются на больших (SALR – Short-range Attraction Long-range Repulsion). В качестве модели рассмотрен решеточный флюид с притяжением ближайших и отталкиванием третьих соседей на плоской треугольной решетке. Свободная энергия изучаемой системы представлена в виде суммы энергии базисной системы, определяемой средними потенциалами, и диаграммной части свободной энергии. Статистическая сумма для первой из этих частей может быть легко факторизована, а для второй допускает разложение в ряд по перенормированным с помощью средних потенциалов функциям Майера. При учете двухузловых членов в указанном разложении сформулировано обобщенное квазихимическое приближение (ОКХП), позволяющее получить в замкнутой форме выражения для равновесных характеристик модели. Рассмотрен алгоритм и выполнено моделирование равновесных свойств изучаемой решеточной системы по методу Монте-Карло. Показано, что развитый подход позволяет получать адекватные оценки равновесных термодинамических (химический потенциал, термодинамический фактор) и структурных (двухчастичные функции распределения ближайших соседей) характеристик системы вне области существования в ней упорядоченной фазы.

**Ключевые слова:** решеточный флюид, плоская треугольная решетка, SALR-потенциал, квазихимическое приближение, равновесные свойства, моделирование по методу Монте-Карло.

**Ya. G. Groda<sup>1</sup>, E. E. Bildanau<sup>2</sup>, V. S. Vikhrenko<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>Belarusian State Technological University

<sup>2</sup>Belarusian State University

## **GENERALIZED QUASI-CHEMICAL APPROXIMATION FOR THE LATTICE SYSTEM WITH SALR-POTENTIAL**

The lattice model of systems of nanoparticles or macromolecules, the parts of which are attracted at small distances and repulse at the larger range is considered. The lattice fluid with small distance attractive interaction between nearest neighbors and long range repulsive interaction between next-next-nearest neighbors is considered as a model. The free energy of the lattice system is represented as a sum of free energy of the reference system, which is defined by the mean potentials, and the diagram part of the free energy. The free energy of the reference system is represented in a closed form through elementary functions, whereas the diagram part of the free energy is represented by the diagram expansion in Mayer-like functions with averaging over the states of the reference system. The generalized quasi-chemical approximation (GQChA) for the free energy that nullifies the two-vertex diagram contributions to the free energy diagram expansion is proposed. The resulting expressions for the equilibrium characteristics of the model are given in a closed form. The algorithm of the Monte Carlo simulation of the lattice system is discussed. The equilibrium characteristics of the system under study are simulated. It is shown that GQChA gives possibility to obtain reasonable results for the equilibrium thermodynamic (chemical potential, thermodynamical factor) and structural (the two-particle distribution functions for the nearest neighbors) characteristics beyond the ordered phase area.

**Key words:** lattice fluid, plate triangular lattice, SALR-potential, quasi-chemical approximation, equilibrium properties, Monte Carlo simulation.

**Введение.** При рассмотрении большого числа реальных физико-химических и биологических систем часто возникает ситуация, когда

частицы, из которых эти системы состоят, заряжены и отталкиваются друг от друга в силу электростатического взаимодействия [1–3].

В случае биологических молекул отталкивание может быть также обусловлено упругими деформациями липидных мембран. В свою очередь, эти же частицы могут притягиваться друг к другу вследствие, например, ван-дер-ваальсовых сил [4–7]. Суммирование по всем взаимодействиям часто имеет вид SALR-потенциала, т. е. притяжения на близких расстояниях и отталкивания на более далеких (Short-range Attraction Long-range Repulsion).

В подобного рода системах притяжение обеспечивает разделение фаз, а отталкивание – формирование кластеров. В результате частицы могут образовывать различные конфигурации на поверхностях, границах жидкостей или мембранах. Вид этих конфигураций определяется конкуренцией между тепловым движением частиц, химическим потенциалом, контролирующим число частиц, и двумя частями потенциала взаимодействия.

Рассмотрение SALR-систем целесообразно начать с решеточных моделей [8–10], поскольку, с одной стороны, в их рамках можно получить описание большого числа общих свойств таких систем, а, с другой стороны, решеточные модели достаточно просты, что позволяет провести их детальное исследование как аналитическими методами, так и в рамках компьютерного моделирования по методу Монте-Карло.

В частности, в работе [9] был рассмотрен решеточный флюид с притяжением ближайших соседей и отталкиванием третьих на плоской треугольной решетке. Были исследованы возможные конфигурации ансамбля частиц флюида при  $T=0$ , предложено приближение среднего поля, в рамках которого построена фазовая диаграмма системы. В дальнейшем методами компьютерного моделирования было установлено существование в системе двух ламелярных фаз [10].

В настоящей работе представлены результаты построения для данной модели обобщенного квазихимического приближения (ОКХП) [11], позволяющего получить в замкнутой форме выражения для равновесных характеристик модели и показавшего возможность получения с его помощью адекватных полуколичественных результатов в случае решеточных флюидов с взаимодействием ближайших соседей на плоских решетках.

**Модель.** Рассматриваемая в работе модель представляет собой решеточный флюид, состоящий из  $n$  частиц на плоской треугольной решетке, содержащей  $N$  решеточных узлов. Частицы, занимающие ближайшие решеточные узлы и узлы, являющиеся соседями третьего порядка, взаимодействуют друг с другом. Энергии взаимодействий равны  $J_1$  и  $J_3$  соответственно. При этом полагается, что  $J_1 < 0$ , а

$J_3 > 0$ , что соответствует притяжению ближайших соседей и отталкиванию третьих.

При учете только парных взаимодействий внутренняя энергия системы может быть записана как

$$U_N = \sum_{i=1}^N \sum_{j=i+1}^N J_{ij} n_i n_j, \quad (1)$$

где  $J_{ij}$  – энергия взаимодействия частиц, расположенных в узлах  $i$  и  $j$ , которая зависит от расстояния между узлами;  $n_i$  и  $n_j$  – числа заполнения ( $n_i = 1$ , если узел занят частицей, и  $n_i = 0$ , если узел вакантен). В формализме канонического ансамбля числа заполнения подчинены условию нормировки:

$$n = \sum_{i=1}^N n_i. \quad (2)$$

Очевидно, что в силу симметрии решетки число независимых констант, определяющих взаимодействие, можно существенно сократить, если ввести обозначение  $J_k = J_{ij}$  для энергии взаимодействия частиц на узлах  $i$  и  $j$ , являющихся соседями  $k$ -го порядка ( $k = 1, 2, \dots$  для ближайших, вторых и т. д. соседей). При этом в рамках рассматриваемой модели  $J_k = 0$  при  $k = 2$  и  $k > 3$ .

**Свободная энергия решеточного флюида.** Стандартным приемом, широко используемым при построении приближенных методов анализа свойств решеточных систем, является введение некоторого среднего поля, величина которого может быть как постоянной для всех узлов решетки (метод среднего поля Вейсса – Брэгга – Вильямса [12]), так и определяться состоянием решеточного узла и его ближайшего окружения (КХП [13], метод самосогласованного корреляционного поля [14]).

Для его введения рассмотрим так называемую базисную решеточную систему, определяемую одночастичными средними потенциалами  $\phi_i(n_i)$ , описывающими взаимодействие частицы ( $n_i = 1$ ) или вакансии ( $n_i = 0$ ), занимающей узел  $i$ , с узлом  $j$  [11, 15]. Потенциальная энергия такой системы может быть записана как

$$U_N^{(0)} = \sum_{j=1}^N \sum_{i=1}^N \phi_j(n_i) = \sum_{i=1}^N \sum_k z_k \phi^{(k)}(n_i), \quad (3)$$

где принимается, что  $\phi_i(n_i) = 0$ , т. е. взаимодействие частицы или вакансии самой с собой отсутствует, и  $\phi_j(n_i) = \phi^{(k)}(n_i)$ , если узлы  $i$  и  $j$  являются соседями  $k$ -го порядка;  $z_k$  –  $k$ -е координационное число. В случае плоской треугольной решетки  $z_1 = z_2 = z_3 = 6$ .

Такое совместное рассмотрение двух решеточных систем позволяет представить свободную

энергию исходной системы в расчете на один решеточный узел как сумму свободной энергии базисной системы  $F^{(0)}$  и так называемой диаграммной части свободной энергии  $F^{(d)}$ :

$$F = F^{(0)} + F^{(d)}, \quad (4)$$

где

$$F^{(d)} = -k_B T \left( c_0 \ln \frac{Q_0}{c_0} + c_1 \ln \frac{Q_1}{c_1} \right), \quad (5)$$

$$Q_{n_i} = \exp \left[ -\beta \left( \sum_{j=1}^N \varphi_j(n_i) \right) \right], \quad \beta = \frac{1}{k_B T}, \quad (6)$$

здесь  $c_1$  и  $c_0$  – концентрации частиц и вакансий на решетке соответственно, равные

$$c_1 = c = \frac{n}{N}, \quad c_0 = \frac{N-n}{N} = 1-c, \quad (7)$$

а диаграммная часть свободной энергии  $F^{(d)}$  допускает разложение в ряд по степеням перенормированных функций Майера [11]:

$$f_{ij}^{(k)}(n_i, n_j) = \exp \left\{ -\beta \left( J_k n_i n_j - \varphi^{(k)}(n_i) - \varphi^{(k)}(n_j) \right) \right\} - 1. \quad (8)$$

**Обобщенное квазихимическое приближение.** В качестве первого приближения в предлагаемом разложении могут быть учтены лишь линейные по перенормированным функциям Майера слагаемые. В этом случае выражение для свободной энергии принимает вид [11]

$$\frac{F}{k_B T} = \sum_{i=0}^1 c_i \left( \ln c_i - \sum_k z_k \ln X_i^{(k)} \right) - \sum_k \frac{z_k}{2} \sum_{i,j=0}^1 \left( \frac{W_{ij}^{(k)}}{X_i^{(k)} X_j^{(k)}} - 1 \right), \quad (9)$$

где

$$X_{n_i}^{(k)} = \exp(-\beta \varphi^{(k)}(n_i)), \quad (10)$$

$$W_{ij}^{(k)} = \exp(-\beta J_k n_i n_j).$$

В соотношении (9) суммирование по решеточным узлам заменено суммированием по координационным сферам, нумеруемым индексом  $k$ .

Входящие в выражение для свободной энергии средние потенциалы могут быть определены из условия экстремальности удерживаемой части свободной энергии по отношению к выбору средних потенциалов, которое приводит к следующей системе уравнений для их нахождения [11]:

$$X_i^{(k)} = \sum_{j=1}^1 c_j \frac{W_{ij}^{(k)}}{X_j^{(k)}}. \quad (11)$$

Система уравнений (11) показывает, что средние потенциалы для различных соседей не зависят друг от друга и их радиус действия такой же, как и для прямого взаимодействия, поскольку при  $J_k = 0$   $W_{ij}^{(k)} = 1$  и  $X_i^{(k)} = 1$ , т. е.  $\varphi^{(k)}(i) = 0$ . Решение системы уравнений (11) может быть получено в замкнутой форме, что позволяет записать выражение для свободной энергии в следующем виде:

$$\beta F = (1-c) \ln(1-c) + c \ln c - \sum_k \frac{z_k}{2} (\ln Y_k - (1-2c) \ln \eta_k), \quad (12)$$

где в соответствии с [15]

$$Y_k = 0,5 \left( 1 + \sqrt{1 + 4c(1-c)(W_k - 1)} \right), \quad (13)$$

$$\eta_k = \frac{Y_k - c}{1-c}, \quad W_k = \exp(-\beta J_k).$$

Знание свободной энергии дает возможность в дальнейшем определить любые ее равновесные характеристики. Так, например, для химического потенциала  $\mu$ , термодинамического фактора  $\chi_T$  и вероятности двум узлам, являющимся соседями порядка  $k$ , быть занятыми частицами  $P_k(1; 1)$  получаем:

$$\beta \mu = \left( \frac{\partial(\beta F)}{\partial c} \right)_T = \ln \frac{c}{1-c} - \sum_k z_k \ln \frac{Y_k - c}{1-c}, \quad (14)$$

$$\chi_T = \frac{\partial(\beta \mu)}{\partial \ln c} = \frac{1}{1-c} \left( 1 - \sum_k z_k \frac{Y_k - 1}{2Y_k - 1} \right), \quad (15)$$

$$P_k(1; 1) = \frac{2}{z_k} \left( \frac{\partial F}{\partial J_k} \right)_T = c \frac{Y_k + c - 1}{Y_k}. \quad (16)$$

Также следует отметить, что соотношения (14)–(16) могут применяться для решеток любых типов с произвольным радиусом взаимодействия. Фактически геометрия решетки учитывается в них лишь посредством набора координационных чисел  $z_k$ .

**Алгоритм моделирования.** Как было отмечено выше, одним из достоинств решеточных моделей является возможность их простого и наглядного численного моделирования по методу Монте-Карло (МКМ). Моделирование равновесных характеристик рассматриваемой решеточной системы в большом каноническом ансамбле по методу Монте-Карло может быть выполнено в рамках стандартного алгоритма Метрополиса [16], использование которого к модели решеточного флюида детально описано в работе [17].

Применительно к исследуемой решеточной системе вычислительный алгоритм, предложенный в [16], представляет собой следующее:

первоначально рассматривается произвольное распределение некоторого числа частиц по решетке, содержащей  $N = L^d$  узлов ( $L$  – линейный размер решетки,  $d$  – размерность пространства). Затем произвольным образом выбирается узел решетки. Если этот узел занят частицей, то эта частица изымается, если же он вакантен, то частица добавляется, и определяется изменение энергии  $\delta E_N$ . Если  $\delta E_N \leq 0$ , то новая конфигурация принимается, если  $\delta E_N > 0$ , то она принимается с вероятностью:

$$W = \exp(-\beta \delta E_N). \quad (17)$$

Для этого случайным образом генерируется число  $W_0$  из интервала  $[0; 1]$ , и если  $W \geq W_0$ , то новая конфигурация принимается. В противном случае новая конфигурация отвергается, и система возвращается в прежнее состояние. Повторение описанной процедуры  $n$  раз, где  $n$  – число частиц на решетке, формирует один шаг алгоритма Монте-Карло (МКШ).

Поскольку первоначальное состояние моделируемой системы является произвольным и может существенно отличаться от равновесного, для перехода системы в состояние термодинамического равновесия требуется некоторое число МКШ. При определении средних значений термодинамических величин эти начальные шаги не учитываются.

При моделировании использовалась решетка, содержащая  $10^4$  решеточных узлов. Для снижения влияния конечности размеров моделируемой системы на получаемые результаты применялись периодические граничные условия.

Полная длина процедуры моделирования состояла из 70 000 МКШ. При этом первые 20 000 МКШ отводились на процесс эквипробности и не учитывались при дальнейшем усреднении.

**Сопоставление данных моделирования по методу Монте-Карло и аналитических расчетов.** С целью верификации развитого обобщенного квазихимического приближения и определения границ его применимости было выполнено моделирование решеточного флюида с притяжением ближайших и отталкиванием третьих соседей на плоской треугольной решетке при  $|J_1|/J_2 = 0,5$ .

На рис. 1–6 представлены зависимости от концентрации примесных частиц химического потенциала, термодинамического фактора и корреляционных функций  $g_k(1; 1)$ :

$$g_k(1; 1) = \frac{F_k(1; 1)}{c^2}, \quad (18)$$

вычисленные при параметре взаимодействия  $\beta J_1 = -1,831; -1,373; -0,916$  и  $-0,549$ . В случае

решеточного флюида с взаимодействием ближайших соседей на треугольной решетке выбранные параметры взаимодействия соответствуют температурам  $0,6T_c; 0,8T_c; 1,2T_c$  и  $2,0T_c$  соответственно.

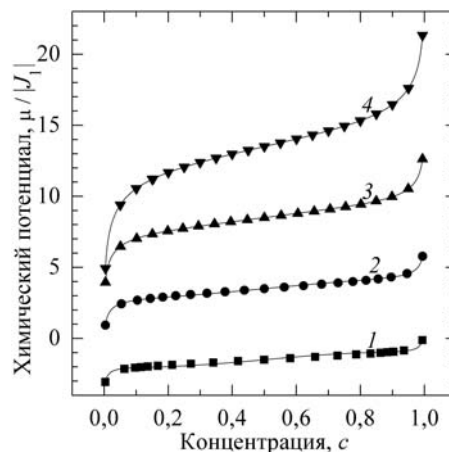


Рис. 1. Концентрационная зависимость химического потенциала решеточного газа с притяжением ближайших и отталкиванием третьих соседей на треугольной решетке. Каждая группа кривых смещена относительно предыдущей на 5 единиц вдоль вертикальной оси (первоначальные положения кривых соответствуют  $\mu/|J_1| = -1,5$  при  $c = 0,5$ ). Линиями представлены результаты ОКХП, точками – МКМ:

- 1 –  $\beta|J_1| = 1,831$ ; 2 –  $\beta|J_1| = 1,373$ ;
- 3 –  $\beta|J_1| = 0,916$ ; 4 –  $\beta|J_1| = 0,549$

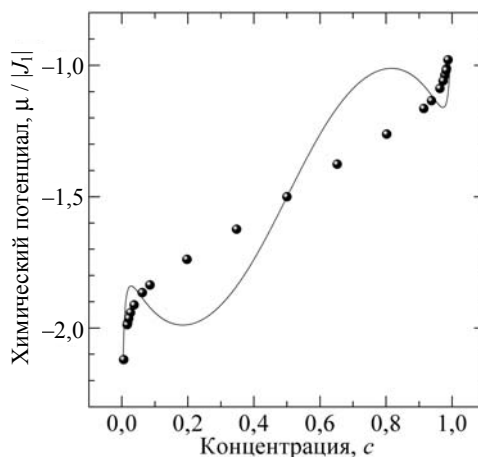


Рис. 2. Концентрационная зависимость химического потенциала решеточного газа с притяжением ближайших и отталкиванием третьих соседей на треугольной решетке при  $\beta|J_1| = 2,747$ . Линией представлены результаты ОКХП, точками – МКМ

В целом можно отметить, что при определении химического потенциала результаты обоих подходов находятся в хорошем качественном соответствии друг с другом в достаточно

широкой области изменения параметра взаимодействия. В то же время имеются заметные расхождения рассматриваемых подходов в области низких температур как при определении химического потенциала, так и термодинамического фактора.

Следует отметить, что при вычислении химического потенциала данное расхождение носит качественный характер. Так, например, из рис. 2 видно, что изотерма химического потенциала, полученная в рамках ОКХП, имеет две ван-дер-ваальсовых петли, что свидетельствует о двух фазовых переходах первого рода. В то же время любые признаки этих фазовых переходов отсутствуют на данных моделирования.

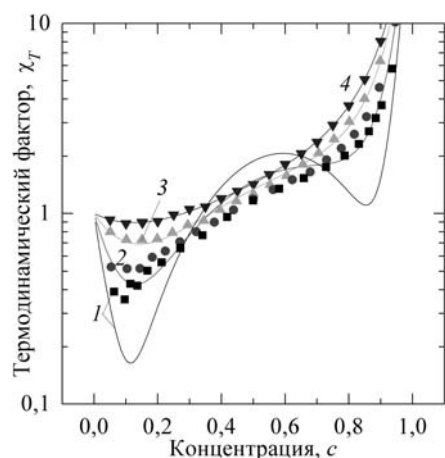


Рис. 3. Концентрационная зависимость термодинамического фактора решеточного газа с притяжением ближайших и отталкиванием третьих соседей на треугольной решетке. Линиями представлены результаты ОКХП, точками – МКМ:

$$1 - \beta|J_1| = 1,831; 2 - \beta|J_1| = 1,373; \\ 3 - \beta|J_1| = 0,916; 4 - \beta|J_1| = 0,549$$

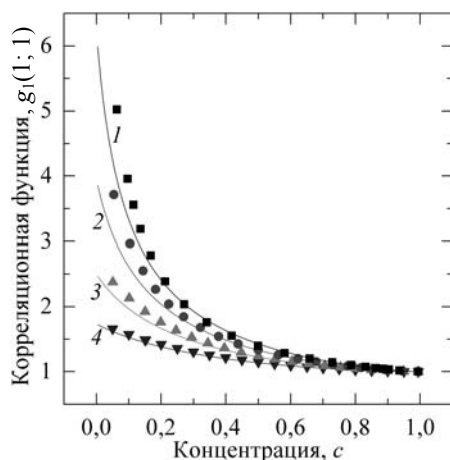


Рис. 4. Концентрационная зависимость корреляционной функции ближайших соседей. Линиями представлены результаты ОКХП, точками – МКМ:

$$1 - \beta|J_1| = 1,831; 2 - \beta|J_1| = 1,373; \\ 3 - \beta|J_1| = 0,916; 4 - \beta|J_1| = 0,549$$

Анализ структурных свойств системы, определяемых корреляционными функциями вида (18), показал, что ОКХП позволяет корректно определить лишь корреляционную функцию для ближайших соседей (рис. 4).

В то же время результаты ОКХП и МКМ для корреляционной функции третьих соседей (рис. 5) заметно расходятся даже при относительно высокой температуре  $\beta J_1 = -0,916$  (кривая 3 на рис. 5). При этом моделирование показывает, что третья корреляционная функция оказывается значительно ближе к 1, чем это следует из ОКХП. Это позволяет сделать вывод, что заполнение частицами узлов, относящихся к третьей координационной сфере, является слабо коррелированным.

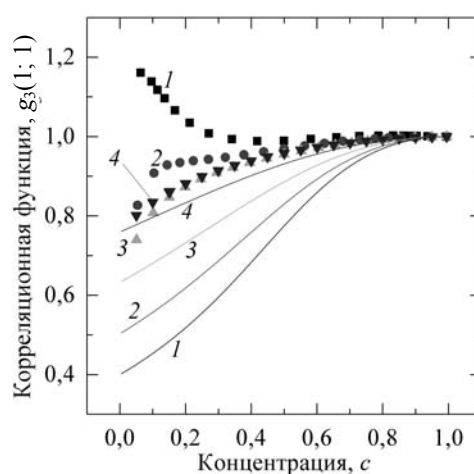


Рис. 5. Концентрационная зависимость корреляционной функции третьих соседей. Линиями представлены результаты ОКХП, точками – МКМ:

$$1 - \beta|J_1| = 1,831; 2 - \beta|J_1| = 1,373; \\ 3 - \beta|J_1| = 0,916; 4 - \beta|J_1| = 0,549$$

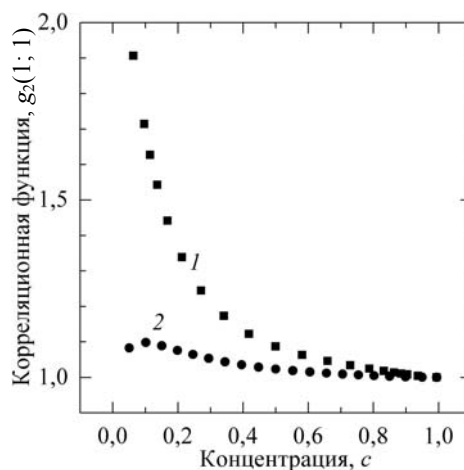


Рис. 6. Концентрационная зависимость корреляционной функции вторых соседей. Точками обозначены результаты МКМ:

$$1 - \beta|J_1| = 1,831; 2 - \beta|J_1| = 0,916$$

Вместе с тем при изучении корреляций в заполнении второй координационной сферы ситуация становится обратной. Как нетрудно видеть из соотношений (16) и (18), при рассмотрении решеточного флюида с взаимодействием первых и третьих соседей в ОКХП  $g_2(1; 1) = 1$ . В то же время результаты МКМ заметно отличаются от этого значения при низких температурах (кривая  $I$  на рис. 6).

Такое расхождение результатов позволяет высказать предположение о том, что при низких температурах в рассматриваемой системе возникает некоторое упорядоченное состояние, обусловленное отталкиванием между третьими соседями и проявляющееся в образовании кластеров частиц. Возможность существования та-

кого состояния не учитывалась при построении развиваемого аналитического подхода, что и приводит к расхождению результатов, в первую очередь при определении структурных свойств системы.

**Заключение.** Развитое обобщенное квази-химическое приближение позволило получить простые аналитические выражения для нахождения термодинамических и структурных характеристик рассматриваемых решеточных систем. Сопоставление полученных с его помощью результатов с данными МК-моделирования показало, что оно может с успехом использоваться для оценки равновесных свойств модели вне области существования в ней упорядоченной фазы.

### Литература

1. Dynamical arrest in attractive colloids: the effect of long-range repulsion / A. I. Campbell [et al.] // *Phys. Rev. Lett.* 2005. Vol. 94. Art. no. 208301 (4 p.).
2. Equilibrium cluster formation in concentrated protein solutions and colloids / A. Stradner [et al.] // *Nature*. 2004. Vol. 432. P. 492–495.
3. Seul M., Andelman D. Domain shapes and patterns: The phenomenology of modulated phases // *Science*. 1995. Vol. 267. P. 476–483.
4. Imperio A., Reatto L. Microphase morphology in two-dimensional fluids under lateral confinement // *Phys. Rev. E*. 2007. Vol. 76. Art. no. 040402 (4 p.).
5. Model colloidal fluid with competing interactions: Bulk and interfacial properties / A. J. Archer [et al.] // *J. Chem. Phys.* 2007. Vol. 126. Art. no. 014104 (14 p.).
6. Enhanced density fluctuations in fluid systems with competing interactions / D. Pinia [et al.] // *Chem. Phys. Lett.* 2000. Vol. 327. P. 209–215.
7. Archer A. J. Two-dimensional fluid with competing interactions exhibiting microphase separation: Theory for bulk and interfacial properties // *Phys. Rev. E*. 2008. Vol. 78. Art. no. 031402 (12 p.).
8. Pekalski J., Ciach A., Almarza N. G. Periodic ordering of clusters in a one-dimensional lattice model // *J. Chem. Phys.* 2013. Vol. 138. Art. no. 144903 (34 p.).
9. Pekalski J., Ciach A., Almarza N. G. Periodic ordering of clusters and stripes in a two-dimensional lattice model. I. Ground state, mean-field phase diagram and structure of the disordered phases // *J. Chem. Phys.* 2014. Vol. 140. Art. no. 114701 (11 p.).
10. Almarza N. G., Pekalski J., Ciach A. Periodic ordering of clusters and stripes in a two-dimensional lattice model. II. Results of Monte Carlo simulation // *J. Chem. Phys.* 2014. Vol. 140. Art. no. 164708 (12 p.).
11. The self-consistent diagram approximation for lattice systems / G. S. Bokun [et al.] // *Euro. Phys. Journ. B*. 2000. Vol. 15. P. 297–304.
12. Bragg W. L., Williams E. J. The effect of thermal agitation on atomic arrangement in alloys // *Proc. Roy. Soc. A*. 1934. Vol. 145. P. 699–730.
13. Weiss P. R. The application of the Bethe – Peierls method to ferromagnetism // *Phys. Rev.* 1948. Vol. 74. P. 1493–1504.
14. Wysin G. M., Kaplan J. Correlated molecular-field theory for Ising models // *Phys. Rev. E*. 2000. Vol. 61. P. 6399–6403.
15. Vikhrenko V. S., Groda Ya. G., Bokun G. S. The diagram approximation for lattice systems // *Phys. Lett. A*. 2001. Vol. 286. P. 127–133.
16. Equation of state calculation by fast computing machines / N. Metropolis [et al.] // *J. Chem. Phys.* 1953. Vol. 21. P. 1087–1092.
17. Uebing C., Gomer R. A Monte Carlo study of surface diffusion coefficients in the presence of adsorbate-adsorbate interactions // *J. Chem. Phys.* 1991. Vol. 95, no. 10. P. 7626–7652.

### References

1. Campbell A. I., Anderson V. J., van Duijneveldt J. S., Bartlett P. Dynamical arrest in attractive colloids: the effect of long-range repulsion. *Phys. Rev. Lett.*, 2005, vol. 94, art. no. 208301 (4 p.).

2. Stradner A., Sedgwick H., Cardinaux F., Poon W., Egelhaaf S., Schurtenberger P. Equilibrium cluster formation in concentrated protein solutions and colloids. *Nature*, 2004, vol. 432, pp. 492–495.
3. Seul M., Andelman D. Domain shapes and patterns: The phenomenology of modulated phases. *Science*, 1995, vol. 267, pp. 476–483.
4. Imperio A., Reatto L. Microphase morphology in two-dimensional fluids under lateral confinement. *Phys. Rev. E*, 2007, vol. 76, art. no. 040402 (4 p.).
5. Archer A. J., Pini D., Evans R., Reatto L. Model colloidal fluid with competing interactions: Bulk and interfacial properties. *J. Chem. Phys.*, 2007, vol. 126, art. no. 014104 (14 p.).
6. Pinia D., Jialin G., Parola A., Reatto L. Enhanced density fluctuations in fluid systems with competing interactions. *Chem. Phys. Lett.*, 2000, vol. 327, pp. 209–215.
7. Archer A. J. Two-dimensional fluid with competing interactions exhibiting microphase separation: Theory for bulk and interfacial properties. *Phys. Rev. E*, 2008, vol. 78, art. no. 031402 (12 p.).
8. Pekalski J., Ciach A., Almarza N. G. Periodic ordering of clusters in a one-dimensional lattice model. *J. Chem. Phys.*, 2013, vol. 138, art. no. 144903 (34 p.).
9. Pekalski J., Ciach A., Almarza N. G. Periodic ordering of clusters and stripes in a two-dimensional lattice model. I. Ground state, mean-field phase diagram and structure of the disordered phases. *J. Chem. Phys.*, 2014, vol. 140, art. no. 114701 (11 p.).
10. Almarza N. G., Pekalski J., Ciach A. Periodic ordering of clusters and stripes in a two-dimensional lattice model. II. Results of Monte Carlo simulation. *J. Chem. Phys.*, 2014, vol. 140, art. no. 164708 (12 p.).
11. Bokun G. S., Groda Ya. G., Belov V. V., Uebing C., Vikhrenko V. S. The self-consistent diagram approximation for lattice systems. *Euro. Phys. Journ. B*, 2000, vol. 15, pp. 297–304.
12. Brag W. L., Williams E. J. The effect of thermal agitation on atomic arrangement in alloys. *Proc. Roy. Soc. A*, 1934, vol. 145, pp. 699–730.
13. Weiss P. R. The application of the Bethe – Peierls method to ferromagnetism. *Phys. Rev.*, 1948, vol. 74, pp. 1493–1504.
14. Wysin G. M., Kaplan J. Correlated molecular-field theory for Ising models. *Phys. Rev. E*, 2000, vol. 61, pp. 6399–6403.
15. Vikhrenko V. S., Groda Ya. G., Bokun G. S. The diagram approximation for lattice systems. *Phys. Lett. A*, 2001, vol. 286, pp. 127–133.
16. Metropolis N., Rosenbluth A. W., Marshall N., Rosenbluth M. N., Teller A. H., Teller E. Equation of state calculation by fast computing machines. *J. Chem. Phys.*, 1953, vol. 21, pp. 1087–1092.
17. Uebing C., Gomer R. A Monte Carlo study of surface diffusion coefficients in the presence of adsorbate-adsorbate interactions. *J. Chem. Phys.*, 1991, vol. 95, no. 10, pp. 7626–7652.

#### Информация об авторах

**Грода Ярослав Геннадьевич** – кандидат физико-математических наук, доцент, заведующий кафедрой теоретической механики. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: groda@belstu.by

**Бильданов Эльдар Эмирович** – студент. Белорусский государственный университет (220030, г. Минск, пр-т Независимости, 4, Республика Беларусь). E-mail: el95dar@icloud.com

**Вихренко Вячеслав Степанович** – доктор физико-математических наук, профессор, профессор кафедры теоретической механики. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: vvikhre@belstu.by

#### Information about the authors

**Groda Yaroslav Gennad'yevich** – PhD (Physics and Mathematics), Associate Professor, Head of the Department of Theoretical Mechanics. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: groda@belstu.by

**Bildanau Eldar Emirovich** – Student. Belarusian State University (4, Nezavisimosti Ave., 220030, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: el95dar@icloud.com

**Vikhrenko Vyacheslav Stepanovich** – DSc (Physics and Mathematics), Professor, Professor, the Department of Theoretical Mechanics. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: vvikhre@belstu.by

Поступила 05.12.2016