

УДК 531.19

Я. Г. Грода, зав. кафедрой, доц., канд. физ.-мат. наук (БГТУ, г. Минск)

РАВНОВЕСНЫЕ СВОЙСТВА РЕШЕТОЧНОГО ФЛЮИДА НА ПРОСТОЙ КУБИЧЕСКОЙ РЕШЕТКЕ С ЗАБЛОКИРОВАННЫМИ УЗЛАМИ

В докладе рассмотрена модель решеточного флюида с притяжением ближайших соседей на простой кубической решетке, в которой некоторая часть решеточных узлов является заблокированной, т.е. недоступной как для частиц, так и для вакансий.

С практической точки зрения построенная модель пригодна для описания свойств ансамбля примесных частиц, абсорбированных кристаллом. В этом случае реальные атомы кристаллической структуры взаимодействуя друг с другом формируют некоторый профиль потенциальной энергии, минимумы которого являются наиболее предпочтительными положениями для размещения в них примесных частиц. Данные положения рассматриваются в качестве узлов решеточной модели. В свою очередь дефекты кристалла блокируют часть предложенных решеточных узлов.

В докладе представлены результаты для системы, содержащей 10% заблокированных узлов. Рассмотрение равновесных свойств модели выполнено как в рамках предложенного ранее квазихимического приближения [1], так и путем компьютерного моделирования ее равновесных характеристик по методу Монте-Карло. Моделируемая система содержала $24^3 = 13\,824$ решеточных узла. Моделирование равновесных свойств было выполнено в большом каноническом ансамбле (алгоритмом Метрополиса) в сочетании с периодическими граничными условиями.

Проведенное сопоставление результатов двух методов исследования, выполненное при одинаковых абсолютных температурах, показало, что квазихимическое приближение позволяет получать адекватные результаты для термодинамических (химический потенциал, термодинамический фактор) и структурных (корреляционные функции ближайших соседей) характеристик рассматриваемой системы. При этом расхождение данных моделирования и аналитических расчетов оказывается даже меньшим, чем в случае плоских решеток. На основе квазихимического приближения могут быть построены приближения следующих порядков.

ЛИТЕРАТУРА

1. Аргиракис П., Гиазитзидис П., Грода Я. Г. Термодинамические и структурные свойства решеточного флюида на плоской квадратной решетке с заблокированными узлами: квазихимическое приближение // Труды БГТУ. 2015. № 6: Физ.-мат. науки и информатика. С. 48–52.