

РАВНОВЕСНЫЕ И ДИФФУЗИОННЫЕ СВОЙСТВА 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.

Для определения свободной энергии развито обобщенное квазихимическое приближение (ОКХП), позволяющее получить в замкнутой форме выражения для равновесных характеристик модели – химического потенциала μ , термодинамического фактора χ_T и вероятности двум узлам-соседям k -го порядка быть занятыми частицами $P_k(1;1)$

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

$$P_k(1;1) = c \frac{Y_k + c - 1}{Y_k}, \quad Y_k = 0,5 \left(1 + \sqrt{1 + 4c(1-c)(W_k - 1)} \right), \quad W_k = \exp(-\beta J_k),$$

где c – концентрация частиц на решетке, $\beta=1/k_B T$ – обратная температура, k_B – постоянная Больцмана, z – число узлов в k -ой координационной сфере, J – энергия взаимодействия двух частиц, занимающих ближайшие соседние узлы ($k=1$) и узлы, являющиеся соседями 3-го порядка ($k=3$).

Рассмотрен алгоритм и выполнено моделирование равновесных свойств рассматриваемой решеточной системы по методу Монте-Карло. Показано, что развитый подход позволяет получать адекватные оценки равновесных термодинамических и структурных характеристик системы вне области существования в ней упорядоченной фазы.

Предложен оптимальный с точки зрения временных затрат алгоритм моделирования диффузионного процесса в решеточной системе, в рамках которого при эквилибризации модели рассматриваются переходы частиц в произвольные решеточные узлы.

Выполнено моделирование диффузионного процесса и определены кинетический коэффициент диффузии и коэффициент диффузии меченых атомов.