

УДК 531.19

П. Аргиракис<sup>1</sup>, В. С. Вихренко<sup>2</sup>, П. Гиазитидис<sup>1</sup>, Я. Г. Грода<sup>2</sup>

**ПАРАМЕТР ПОРЯДКА РЕШЕТОЧНОГО ФЛЮИДА С ОТТАЛКИВАНИЕМ  
БЛИЖАЙШИХ СОСЕДЕЙ НА ПЛОСКОЙ КВАДРАТНОЙ РЕШЕТКЕ С  
БЛОКИРОВАННЫМИ УЗЛАМИ**

<sup>1</sup> Университет имени Аристотеля, 54124, Салоники, Греция[panos@auth.gr](mailto:panos@auth.gr), [pgiazi@auth.gr](mailto:pgiazi@auth.gr)<sup>2</sup> Учреждение образования «Белорусский государственный технологический университет», ул. Свердлова, 13а, 220006 Минск, Беларусь[vvikhre@gmail.com](mailto:vvikhre@gmail.com), [groda@belstu.by](mailto:groda@belstu.by)

Рассматриваемая в работе модель представляет собой решеточный флюид на плоской квадратной решетке, часть узлов которой заблокирована, т.е. недоступна для частиц флюида. В свою очередь, частицы, занимающие ближайшие соседние узлы, взаимодействуют друг с другом с энергией  $J$ , причем  $J > 0$ , что соответствует отталкиванию между частицами. Данная модель может, например, использоваться для описания поведения атомарного кислорода или водорода на вольфрамовой подложке [1]. В этом случае заблокированные узлы соответствуют микрозагрязнениям подложки.

В работе [2] для такой системы было предложено квазихимическое приближение (КХП). При этом исходная решетка была представлена в виде системы двух идентичных подрешеток (условно подрешеток  $A$  и  $B$ ), концентрации частиц на которых могут различаться. В этом случае в рамках КХП для свободной энергии решеточного флюида может быть записано следующее выражение

$$\beta F = \frac{1}{2} \sum_{\alpha=A}^B \sum_{i=-1}^1 c_i^\alpha (\ln c_i^\alpha - z \ln \eta_\alpha) - \frac{z}{2} \ln (X_0^A X_0^B), \quad (1)$$

где  $\beta = (k_B T)^{-1}$ ;  $k_B$  – постоянная Больцмана;  $T$  – температура;  $z$  – число ближайших соседей (для плоской квадратной решетки  $z = 4$ );  $c_{-1}^\alpha$ ,  $c_0^\alpha$  и  $c_1^\alpha = c_\alpha$  – концентрации заблокированных, вакантных и занятых частицами узлов на подрешетке  $\alpha$ ;

$$\eta_\alpha = -\frac{c_\beta + c_\alpha - 1 - W(c_\beta - c_\alpha)}{2(1 - c_\alpha)} + \sqrt{\left(\frac{c_\beta + c_\alpha - 1 - W(c_\beta - c_\alpha)}{2(1 - c_\alpha)}\right)^2 + \frac{c_\alpha W}{1 - c_\alpha}}; \quad (2)$$

$$W = \exp(-\beta J); \quad X_0^A X_0^B = 1 - c_\alpha + \frac{c_\alpha}{\eta_\alpha}, \quad \alpha, \beta = A, B, \quad \alpha \neq \beta. \quad (3)$$

Для описания возможной макроскопической упорядоченности системы в работе [2] был использован параметр порядка

$$\delta c = \frac{c_A - c_B}{2}. \quad (4)$$

В этом случае для концентрации частиц на каждой из подрешеток получим

$$c_A = c + \delta c, \quad c_B = c - \delta c. \quad (5)$$

Величина параметра порядка  $\delta c$  определяется путем численного решения уравнения, полученного из условия экстремальности свободной энергии, которое эквивалентно условию равенства химических потенциалов на обеих подрешетках

$$\left(\frac{\partial F}{\partial \delta c}\right)_T = 0, \quad \mu_A = \mu_B. \quad (6)$$

Знание свободной энергии позволяет в дальнейшем определить ее равновесные характеристики: химический потенциал  $\mu$ , термодинамический фактор  $\chi_T$  и вероятность двум ближайшим узлам быть занятыми частицами  $F(1; 1)$ :

$$\beta\mu = \left(\frac{\partial(\beta F)}{\partial c}\right)_T, \quad \chi_T = \frac{\partial(\beta\mu)}{\partial \ln c}, \quad F(1;1) = \frac{2}{z} \left(\frac{\partial F}{\partial J}\right)_T. \quad (7)$$

Сопоставление результатов аналитических расчетов по соотношениям (1)–(7) с данными компьютерного моделирования по методу Монте-Карло (МКМ) показало, что в рамках КХП удастся достаточно хорошо воспроизвести как термодинамические, так и структурные свойства модели, за исключением параметра порядка. Трудности при определении последнего объясняются тем, что наличие в системе заблокированных узлов нарушает ее глобальную упорядоченность, в результате чего решетка распадается на отдельные упорядоченные домены, положение и размер которых определяется положением заблокированных узлов.

Для преодоления отмеченных трудностей может быть предложен алгоритм вычисления параметра порядка по данным МКМ, согласно которому частица, имеющая два или более соседей второго порядка, считается принадлежащей к преимущественно заполненной подрешетке. Частицы, являющиеся ближайшими соседями к ней, напротив, принадлежат к преимущественно вакантной подрешетке. Разность в количестве частиц, отнесенная к полному числу решеточных узлов, определяет параметр порядка системы.

Данный алгоритм расчета может использоваться только в той области термодинамических параметров, где существует ярко выраженная упорядоченная фаза, и является непригодным для точной локализации точек фазовых переходов. При концентрации частиц, превышающей 0.5, целесообразным является подсчет параметра порядка, основанный не на подсчете числа частиц на решетке, а на подсчете числе вакантных и заблокированных узлов. Результаты сопоставления данных моделирования и аналитических расчетов представлены на рис. 1 для системы, имеющей 10% заблокированных узлов при  $\beta J = 2.94$ . В целом можно утверждать, что КХП адекватно воспроизводит зависимость параметра порядка от концентрации.

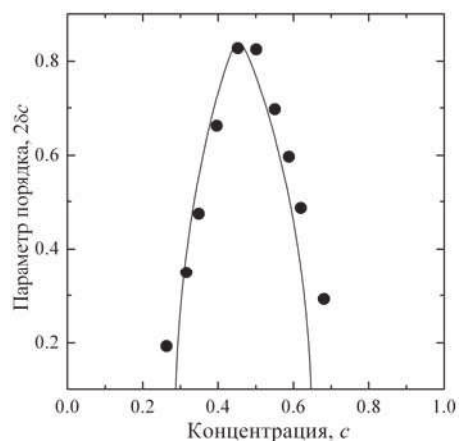


Рис. 1. Зависимость от концентрации параметра  $\delta c$  при  $\beta J = 2.94$  и  $c_1 = 0.1$

- [1] Tringides, M. A Monte Carlo study of oxygen diffusion on the (110) plane of tungsten / M. Tringides, R. Gomer // Surface Science. – 1984. – Vol. 145, no. 1. – P. 121–144.
- [2] Аргиракис, П. Термодинамические и структурные свойства решеточного флюида на плоской квадратной решетке с заблокированными узлами: квазихимическое приближение / П. Аргиракис, П. Гиазитзидис, Я. Г. Грода // Труды БГТУ. – 2015. – № 6 (179): Физ.-мат. науки и информатика. – С. 48-52.