

УДК 531.19

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

ВЛИЯНИЕ РАЗМЕРНОСТИ И ГЕОМЕТРИИ РЕШЕТКИ НА ТРАНСПОРТНЫЕ СВОЙСТВА РЕШЕТОЧНОГО ФЛЮИДА С ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ В СЕДЛОВОЙ ТОЧКЕ

Модель решеточного флюида является одной из стандартных моделей физики конденсированного состояния и широко используется для описания физико-химических процессов в объеме и на поверхностях твердых тел. В частности, она оказывается полезной при изучении диффузионных процессов.

В докладе рассмотрен процесс диффузии в системе состоящей из n частиц, расположенных в узлах регулярных плоских квадратной и треугольной решеток, а также пространственных кубической и объемно-центрированной кубической решеток. Каждый узел может либо быть занятым одной частицей, либо быть вакантным.

Находящаяся в некотором узле частица может взаимодействовать с энергией J с частицами, занимающими ближайшие соседние узлы. При ее переходе в один из ближайших вакантных узлов при прохождении седловой точки она также взаимодействует с узлами, являющимися ближайшими соседями к этой седловой точке. Энергия взаимодействия в данном случае принимается равной J_{Σ} .

В рамках общей теории диффузионных процессов в решеточных системах и суперпозиционного приближения, при котором корреляции в заполнении решеточных узлов определяются только парными корреляциями для ближайших соседей, предложены приближенные выражения для кинетических коэффициентов диффузии решеточного флюида на квадратной, треугольной, кубической (при $J=J_{\Sigma}$) и объемно-центрированной кубической ($J=J_{\Sigma}$) решетках.

Для верификации предложенных выражений выполнено компьютерное моделирование диффузионных процессов по динамическому методу Монте-Карло с помощью алгоритма Метрополиса, модифицированного с целью учета взаимодействия в седловой точке.

Сопоставление с результатами компьютерного моделирования по методу Монте-Карло показало, что предлагаемый подход к определению кинетического коэффициента диффузии позволяет получать адекватное качественное описание транспортных процессов в решеточном флюиде, а при не очень низких температурах приводит и к верным количественным результатам.