

УДК 531.19

Я. Г. Грода, доц., канд. физ.-мат. наук (БГТУ, г. Минск);
 Д. ди Каприо, научн. сотр., д-р философии
 (Высшая национальная школа химии Парижа, Франция);
 Д. В. Гапанюк, зам. декана ф-та ХТиТ, канд. физ.-мат. наук
 (БГТУ, г. Минск)

ФАЗОВАЯ ДИАГРАММА РЕШЕТОЧНОГО ФЛЮИДА С SALR-ПОТЕНЦИАЛОМ НА КВАДРАТНОЙ РЕШЕТКЕ

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 квадратной решетке.

В докладе представлены результаты исследования методами компьютерного моделирования указанной модели.

Моделирование равновесных характеристик рассматриваемой системы по методу Монте-Карло было выполнено в рамках стандартного алгоритма Метрополиса. При моделировании использовалась решетка, содержащая 2^{14} решеточных узлов в сочетании с периодически граничными условиями. Полная длина процедуры моделирования состояла из 70 000 шагов алгоритма Монте-Карло (МКШ). При этом первые 20 000 МКШ отводились на процесс эквilibризации и не учитывались при дальнейшем усреднении.

Для описания обеих упорядоченных фаз может быть осуществлено разбиение исходной квадратной решетки на систему 8 идентичных подрешеток с постоянной $2a\sqrt{2}$, где a – решеточная постоянная исходной решетки. В случае полной упорядоченности системы при концентрации решеточного флюида с равной 0.5 четыре подрешетки оказываются полностью заполненными, а четыре – полностью вакантными. Это позволяет определить параметр порядка системы δ_c как разность максимальной и минимальной концентраций на подрешетках.

С помощью введенного параметра порядка определен критический параметр системы и рассмотрена его зависимость от отношения интенсивностей взаимодействия первых и третьих соседей и размера моделируемой системы. Также сделана попытка построения фазовой диаграммы решеточного флюида с притяжением первых и отталкиванием третьих соседей на плоской квадратной решетке.