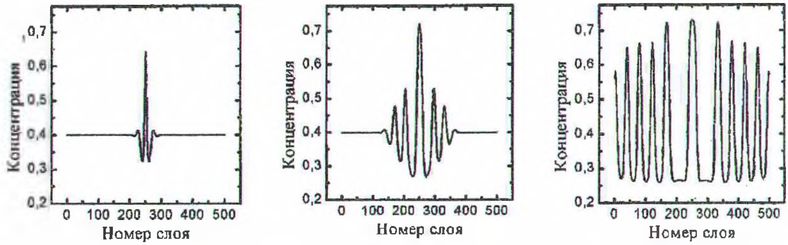

а) б) в)

а – 10^4 ; *б* – $5\cdot10^4$; *в* – $5\cdot10^5$ (время указано в шагах алгоритма Эйлера)

Рисунок 1 – Эволюция решеточной системы

Таким образом, можно сделать вывод, что наноструктурное состояние является достаточно устойчивым конечным состоянием метастабильной решеточной системы вне зависимости от способа ее выведения из состояния неустойчивого равновесия.

ЛИТЕРАТУРА

1 Колобова, Ю. Р. Зернограничная диффузия и свойства наноструктурных материалов / Ю. Р. Колобова, Р. З. Валиева // Новосибирск : Наука, 2000.– 231 с.

2 Lasovsky, R. N. Phase transition kinetics in lattice models of intercalation compounds / R. N. Lasovsky, G. S. Bokun, V. S. Vikhrenko // Solid State Ionics. – 2011. – Vol. 188. – P.15-20.

УДК 621.01+004.02

Г. С. Бокун, доц., канд. физ.-мат. наук;
Д. В. Гапанюк, ст. преп., канд. физ.-мат. наук (БГТУ, г. Минск)

ПРИМЕНЕНИЕ МНОГОЧАСТИЧНЫХ ПОТЕНЦИАЛОВ ДЛЯ ВЫЧИСЛЕНИЯ СТАТИСТИЧЕСКОЙ СУММЫ РЕШЕТОЧНОЙ СИСТЕМЫ

Для расчета статистической суммы плоской квадратной решетки были использованы одно частичные потенциалы средних сил [1]. Покажем возможность уточнения полученных результатов при переходе к много частичным потенциалам. Для введения последних необходимо, как это показано ранее [2],объединить узлы решетки в многоузельные аналоги (комплексы) Это позволяет представить энергию системы как сумму собственной энергии комплексов и энергию взаимодействия комплексов между собой. Здесь ограничимся случаем, когда в качестве комплекса используются два соседних узла, в результате решетка представляется системой димеров.

С помощью димер потенциалов статсумма представляется средним от произведения некоторых сомножителей, наибольшее и наименьшее значения которых используются для формирования верхней и нижней границ искомой величины. Зависимость названных граничных значений от введенных потенциалов используется для минимизации расстояния между обеими границами и определения статсуммы с соответствующей точностью.

Рассматривается плоская квадратная решетка из N узлов, заселенность которых характеризуется числами заполнения $n_l = 0, 1$.Так как пространство квадратной представляется системой димеров, в соответствии с моделью Изинга, энергия системы представляется в форме суммы собственной энергии комплексов и энергию взаимодействия комплексов между собой. Таким образом, каждый произвольный l-й димер содержит два узла (l, l^*) и характеризуется собственной энергией

$$\Phi_l = J \cdot n_l \cdot n_{l^*}$$

С каждым димером связывается внешнее поле, характеризуемое одно частичными потенциалами β_{n_l} и γ_{n_l}, обозначенными на рисунке 1 одинарными и двойными стрелками ($\uparrow$, $\Uparrow$) соответственно, и двухчастичными потенциалами $\alpha_{n_l n_{l^*}}$, представленными на рисунке «скобами».

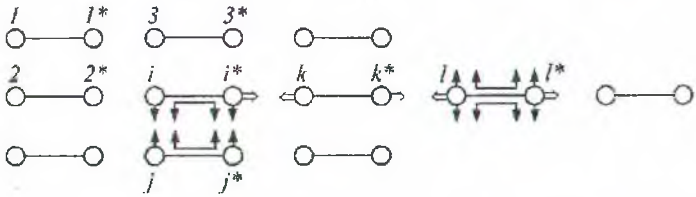

Рисунок 1 - Представление двумерной квадратной решетки системой димеров

Таким образом, собственная энергия кластера представляется в форме

$$\Phi_l = Jn_l n_{l^*} + 2\beta_{n_l} + 2\beta_{n_{l^*}} + \gamma_{n_l} + \gamma_{n_{l^*}} + 2\alpha_{n_l n_{l^*}} \qquad (1)$$

для однородной среды все φ_j одинаковы, т.е. $\varphi_j = \varphi$.

Сначала рассмотрим упрощенный вариант, когда в (1) содержится только три варьируемые параметра, т. е. примем

$$\Phi_l = Jn_l n_{l^*} + U_l \, , \qquad (2)$$

где

$$U_l = 2\alpha n_l n_{l^*} + 2\beta(n_l + n_{l^*}) + \gamma(n_l + n_{l^*}) \qquad (3)$$

При выбранном представлении (2) и (3) роль базисной системы играет система, энергия которой характеризуется величиной

$$U_N^0 = \sum_{n_l,...} (\Phi_l + \mu(n_l + n_{l^*}))$$
. (4)

Энергию межкластерного взаимодействия запишем в форме

$$\Delta U_N = \sum_{i=1}^{N/2} \Big(\mathrm{I}(n_i n_j + n_{i^*} n_{j^*} + n_{i^*} n_k) - \alpha n_i n_{i^*} - \alpha n_j n_{j^*} - \beta(n_i + n_j + n_{i^*} + n_{j^*}) - \gamma(n_{i^*} + n_k) \Big)$$
. (5)

Отметим, что здесь потенциалы распределены в (3) и (4) так, что отвечают тождественному условию

$$U_N^0 + \Delta U_N = U_N = \sum_{i<j} \mathrm{I} n_i n_j + \mu \sum n_i$$

В соответствии с этим тождеством выражение для большой статистической суммы исходной системы представим в форме

$$Z_N = \sum_{\bar{n}_1,...\bar{n}_i...} \exp\left(-\frac{1}{\theta} U_N^0 \right) \exp\left(-\frac{1}{\theta} \Delta U_N \right)$$
. (6)

Пренебрегая в (6) пограничными эффектами, выделим в (6) слагаемые, отвечающие первому димеру (рисунок 1) и представим (6) в форме (10)

$$Z_N = \sum_{n_2, n_{2^*}, n_3} K(n_2, n_{2^*}, n_3) \cdot S(n_2, n_{2^*}, n_3)$$
. (7)

Входящие в (7) множители $S(n_2, n_{2^*}, n_3)$ удовлетворяют условию

$$\sum_{n_2, n_{2^*}, n_3} S(n_2, n_{2^*}, n_3) = Z_{N-Z}$$
(8)

где Z_{N-Z} – статсумма для системы уже из $N-2$ узлов. В свою очередь из (1–6) следует, что K в (7) имеет вид

$$K(n_2, n_{2^*}, n_3) = \exp\left(-\frac{1}{\theta}\Phi_1 + \frac{1}{\theta}\mu(n_1 + n_{1^*}) \right) \cdot$$
$$\cdot \exp\left\{ -\frac{1}{\theta} \mathrm{I}(n_1 n_2 + n_{1^*} n_{2^*} + n_{1^*} n_k) - \alpha n_1 n_{1^*} - \alpha n_2 n_{2^*} - \beta(n_1 + n_2 + n_{1^*} + n_{2^*}) - \gamma(n_{1^*} + n_3) \right\}$$
. (9)

С учетом представлений (1) и (2), получим для произвольного i–димера

$$K(n_j, n_{j^*}, n_k) = \sum_{n_i, n_{i^*}} \exp\left\{ -\frac{1}{\theta} \mathrm{I}\left(n_i n_{i^*} + n_i n_j + n_{i^*} n_{j^*} + n_{i^*} n_k \right) \right\} \cdot$$
$$\cdot \exp\left(\frac{1}{\theta} \mu(n_i + n_{i^*}) \right) \cdot \exp\left\{ -\frac{1}{\beta\alpha}(n_i n_{i^*} - n_j n_{j^*}) \right\} \cdot$$
$$\cdot \exp\left\{ -\frac{1}{\beta}\left(n_i + n_{i^*} - n_j - n_{j^*} \right) \right\} \exp\{ -\gamma(n_i - n_k) \}$$
. (10)

В свою очередь, из (7), с учетом (8) следует, что для статистической суммы Z, отнесенной к одному узлу решетки справедливо неравенство

$$\min_{(n_2,n_{2^*},n_3)} \sqrt{K(n_2,n_{2^*},n_3)} < Z < \max_{(n_2,n_{2^*},n_3)} \sqrt{K(n_2,n_{2^*},n_3)} \quad (11)$$

Соотношение (11) определяет верхнюю и нижнюю границу для искомого значения Z. Отметим далее, что (11) справедливо при любых α,β,γ, содержащихся в (10). Это обстоятельство используем для сближения границ «колебания» Z, записав

$$m1 < Z < m2, \quad (12)$$

где

$$m1 = \max_{(\alpha,\beta,\gamma)} \min_{\{n_1,n_{2^*},n_3\}} \sqrt{K(n_2,n_{2^*},n_3)}, \quad (13)$$

$$m2 = \min_{(\alpha,\beta,\gamma)} \max_{\{n_1,n_{2^*},n_3\}} \sqrt{K(n_2,n_{2^*},n_3)}. \quad (14)$$

Теперь получим явные выражения для функций (10) и примем упрощающие обозначения

$$\exp\left(-\frac{I}{\theta}\right) = W,\ \exp\left(-\frac{\mu}{\theta}\right) = M,\ \exp\left(-\frac{\alpha}{\theta}\right) = A,$$

$$\exp\left(-\frac{\beta}{\theta}\right) = B,\ \exp\left(-\frac{\gamma}{\theta}\right) = C \quad (15)$$

Тогда (10) принимает форму

$$K(n_j,n_{j^*},n_k) = \frac{1}{A^{n_j n_{j^*}} B^{(n_j+n_{j^*})} C^{n_k}} \cdot \sum_{n_i,n_{i^*}} W^{n_i n_{i^*}} W^{n_i n_j} W^{n_{i^*}(n_k+n_{j^*})} \cdot$$

$$\cdot M^{(n_i+n_{i^*})} \cdot A^{n_i n_{i^*}} \cdot B^{(n_i+n_{i^*})} \cdot C^{n_i} = A^{-n_j n_{j^*}} B^{-(n_j+n_{j^*})} C^{-n_k}. \quad (16)$$

Последнее выражение позволяет записать в явном виде формулы для

$$K(0,0,n_k), K(0,1,n_k), K(1,0,n_k) \text{ и } K(1,1,n_k). \quad (17)$$

$$K(0,0,n_k = \frac{1}{C^{n_k}}\left[1 + MBW^{n_k} + MBC + AB^2CM^2W^{(1+n_k)}\right], \quad (18)$$

$$K(0,1,n_k = \frac{1}{BC^{n_k}}\left[1 + MBW^{(1+n_k)} + MBC + AB^2CM^2W^{(2+n_k)}\right], \quad (19)$$

$$K(1,0,n_k = \frac{1}{BC^{n_k}}\left[1 + MBW^{n_k} + MBCW + AB^2CM^2W^{(2+n_k)}\right], \quad (20)$$

$$K(1,1,n_k = \frac{1}{AB^2C^{n_k}}\left[1 + MBW^{(1+n_k)} + MBCW + AB^2CM^2W^{(3+n_k)}\right]. \quad (21)$$

Полученную последовательность при $n_k = 0,1$ представляем векторной функцией

$$F(A,B,C) = \left[K(0,0,0)K(0,1,0)\,K(1,0,0)\,K(1,1,0)\,K(0,0,1)\,K(0,1,1)\,K(1,0,1)\,K(1,1,1)\right]^T \quad (22)$$

Далее, определив новые функции операцией

$$F1(A,B,C) = \min()F(A,B,C))$$

$$T2(ABC) = \max(F(A,B,C)), \quad (23)$$

находим величины $\min\limits_{\{n_j,n_{j'},n_k\}} K(n_j,n_{j'},n_k)$ и $\max\limits_{\{n_j,n_{j'},n_k\}} K(n_j,n_{j'},n_k)$, для определения которых используем процедуры Minimize и Maximize.

Расчеты, выполненные в соответствии с изложенным алгоритмом, показывают, что максимальная погрешность в оценке статистической суммы по сравнению с точным результатом [3] не превышает 5%.

ЛИТЕРАТУРА

1 Бокун, Г. С. Прямая оценка точности расчета статистической суммы решеточной системы с помощью потенциалов средних сил/ Г. С. Бокун, В. С. Вихренко, Д.В. Гапанюк // Труды. БГТУ – 2012. – С. 45-47.

2 Вихренко, В. С. Равновесные и диффузионные характеристики интеркаляционных систем на основе решеточных моделей: монография / В. С. Вихренко, Я. Г. Грода, Г.С. Бокун. – Минск: БГТУ, 2008. – 326 с.

3 Ландау, Л. Д. Теоретическая физика. Т. 5. Статистическая физика / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. – М. : Наука, 1976. – 583 с.

УДК 536.758+539.311

И. И. Наркевич, проф., д-р физ.-мат. наук;
Е. В. Фарафонтова, мл. науч. сотр. (БГТУ, г. Минск);
А. К. Щекин, проф. д-р физ.-мат. наук (СПбГУ, г. Санкт-Петербург);

ЗАМКНУТАЯ СИСТЕМА ИНТЕГРАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ ДЛЯ ПОТЕНЦИАЛОВ СРЕДНИХ СИЛ МАЛОЙ ПОДСИСТЕМЫ МОЛЕКУЛ СРЕДЫ, НАХОДЯЩЕЙСЯ В СРЕДНЕМ ПОЛЕ ОСТАЛЬНЫХ МОЛЕКУЛ ОДНОРОДНОЙ МАКРОСКОПИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ

Ранее в рамках двухуровневого молекулярно-статистического подхода [1] была разработана единая модель [2] конденсированной молекулярной среды, которая позволила получить всефазное уравнение состояния, обобщающее известное уравнение состояния М. Планка для разреженного газа [3]. В процессе обобщения был статистически введен энергоэнтропийный параметр всефазного уравнения состояния вместо энергетического параметра в уравнениях М. Планка и Ван-дер-Ваальса. Энергоэнтропийный параметр выражается через потенциалы средних сил модифицированного метода условных коррелятивных функций [1]. Эти потенциалы должны быть определены в результате решения системы интегральных уравнений для первых, вторых и т. д. координационных сфер гранецентрированной кубической