

Я. Г. Грода, доц., канд. физ.-мат. наук;
 Д. В. Гапанюк, зам. декана ф-та ХТиТ, канд. физ.-мат. наук
 (БГТУ, г. Минск)

КРИТИЧЕСКИЙ ПАРАМЕТР РЕШЕТОЧНОГО ФЛЮИДА С ПРИТЯЖЕНИЕМ БЛИЖАЙШИХ И ОТТАЛКИВАНИЕМ ЧЕТВЕРТЫХ СОСЕДЕЙ НА КВАДРАТНОЙ РЕШЕТКЕ

Рассматриваемая модель представляет собой решеточный флюид, состоящий из n частиц на плоской квадратной решетке, содержащей N решеточных узлов. Частицы, занимающие ближайшие решеточные узлы и узлы, являющиеся соседями четвертого порядка, взаимодействуют друг с другом. Энергии взаимодействий равны J_1 и J_4 соответственно. При этом полагается, что $J_1 < 0$, а $J_4 > 0$, что соответствует притяжению ближайших соседей и отталкиванию третьих:

$$J_1 = -J, \quad J_4 = J^* J, \quad J^* = |J_4 / J_1|$$

Алгоритм моделирования данной системы по методу Монте-Карло (МК-моделирования) был подробно описан в работах [1, 2].

Предварительное моделирование на решетке, содержащей 2^{12} решеточных узлов, показало, что при достаточно низких температурах, и соответственно высоких значениях параметра взаимодействия $J/k_B T$, в системе могут образовываться упорядоченные фазы двух различных типов, вид которых представлен на рисунке 1.

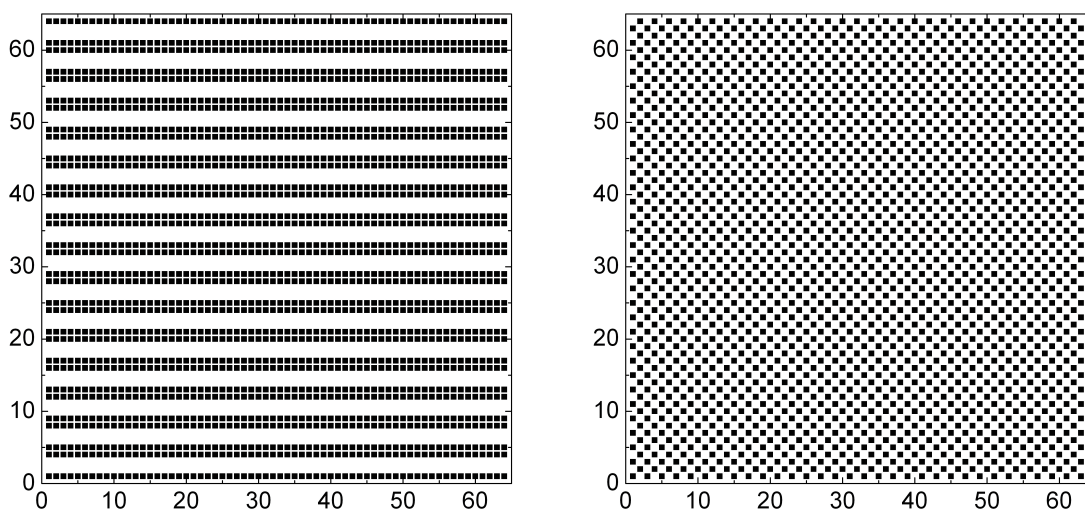


Рисунок 1 – Типы упорядоченных фаз в системе при $c = 0,5$, $J/k_B T_c = 2,0$, $J^* = 1,2$ (левая панель) и $2,5$ (правая панель)

Простейший аналитический анализ основного энергетического состояния исследуемой модели показал, что при $J^* < 1,5$ в системе воз-

никает упорядоченное состояние, представляющее собой чередующиеся наборы из двух полностью заполненных и полностью пустых вертикальных либо горизонтальных полос. В тоже время при $J^* > 1,5$ энергетически более выгодным является т.н. «шахматный» порядок, изображенный на правой панели рисунка 1.

Данные теоретические результаты были впоследствии полностью подтверждены в ходе МК-моделирования рассматриваемой системы и при конечных температурах.

Для обоих типов упорядоченных фаз может быть предложено разбиение исходной квадратной решетки на систему 16 идентичных квадратных подрешеток с постоянной $4a$, где a – решеточная постоянная исходной решетки. После определения средней концентрации частиц на каждой из введенных подрешеток параметр порядка системы может быть определен как

$$\delta c = 0,5(c_{\max} - c_{\min}),$$

где c_{\max} и c_{\min} – концентрации частиц на наиболее и наименее заполненных подрешетках, соответственно.

Для описания «шахматного» порядка может быть предложен более простой подход, в котором исходная решетка разбивается только на две подрешетки. При этом отнесение решеточного угла к одной из них определяется тем, является ли сумма координат решеточного узла четным либо нечетным целым числом. После этого также могут быть определены соответствующие подрешеточные концентрации c_{2k} и c_{2k+1} , а на их основе и параметр порядка

$$\delta c = 0,5|c_{2k} - c_{2k+1}|.$$

Анализ левой панели рисунка 1 однозначно свидетельствует о том, что второй подход к определению параметра порядка является менее универсальным. Введенный с его помощью параметр оказывается равным 0 даже в случае полной упорядоченности, если упорядоченное состояние соответствует чередованию из пустых и заполненных полос.

Тем не менее, наличие двух подходов к описанию упорядоченных состояний не только позволяет сравнить их результаты, но и дает возможность контролировать изменение типа упорядоченности в системе.

Проведенное МК-моделирование показало (см. рисунок 2), что в случае системы с $J^* = 3$ параметр порядка возрастает при $J / k_B T_c = 0,266$ для химического потенциала $\mu = 10J$, что соответствует средней концентрации $c = 0,5$.

Подобного рода возрастание параметра порядка соответствует фазовому переходу порядок-беспорядок, который является фазовым

переходом второго рода и подобен фазовому переходу в системах с отталкиванием ближайших соседей [3]. В этом случае величина 0,266 может быть интерпретирована как критический параметр системы.

Аналогичным образом может быть определен критический параметр системы и при иных значениях параметра $J^* = 3$, отвечающего различным типам упорядоченности системы. На рисунке 3 представлена зависимость безразмерной критической температуры модели от параметра $J^* = 3$.

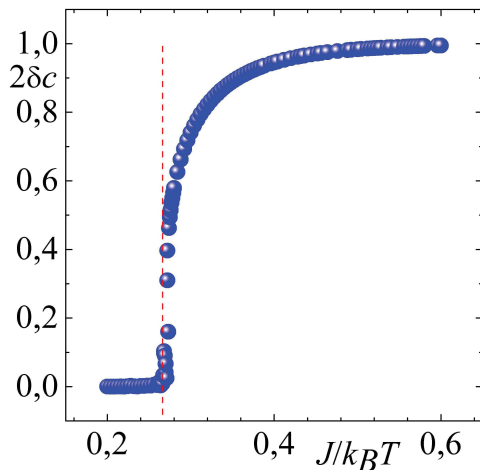


Рисунок 2 – Зависимость параметра порядка от параметра взаимодействия при $\mu = 10J$ ($c = 0,5$) и $J^* = 3$

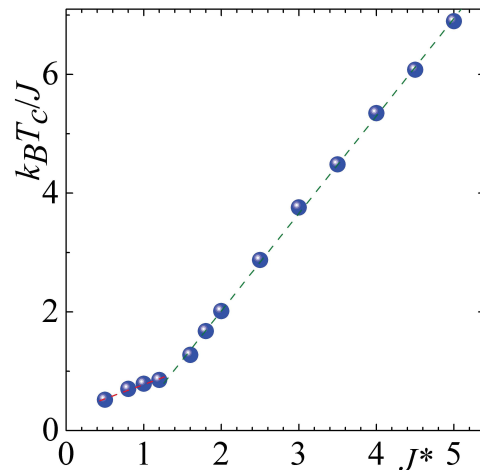


Рисунок 3 – Зависимость безразмерной критической температуры $k_B T_c / J$ от параметра J^*

Как видно из приведенного рисунка данная зависимость является приблизительно линейной при фиксированном типе упорядоченности системы и обладает ярко выраженной особенностью в окрестности $J^* \approx 1,5$. Данная точка, как было отмечено выше, соответствует изменению вида упорядоченного состояния системы.

ЛИТЕРАТУРА

1. Groda, Ya.G. Equilibrium properties of the lattice system with SALR interaction potential on a square lattice: quasi-chemical approximation versus Monte Carlo simulation / Ya.G. Groda, V.S. Vikhrenko, D. di Caprio // Cond. Matt. Phys. – 2018. – Vol. 21, no. 4. – art. no. 43002 (10 p.).
2. Грода, Я.Г. Решеточный флюид с притяжением ближайших и отталкиванием третьих соседей на простой кубической решетке / Я.Г. Грода, В.С. Вихренко, Д. ди Каприо // Журнал БГУ. Физика. – 2019. – № 2. – С. 84–95.
3. Groda, Ya.G. SCDA for 3D lattice gases with repulsive interaction / Ya.G. Groda, P. Argyrakis, G.S. Bokun, V.S. Vikhrenko // The European Physical Journal B. – 2003. – Vol. 32. – P. 527–535.