

УДК 531.19+544.72

В. С. Гришина, асп.; В. С. Вихренко, проф., д-р физ.-мат. наук
(БГТУ, г. Минск);

А. Цях, проф., доктор (ИФХ ПАН, г. Варшава, Польша)

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ ОСОБЕННОСТИ SRLA СИСТЕМЫ

Рассматривается SRLA (Short-range Repulsion Long-range Attraction) система на треугольной решетке, частицы которой отталкиваются с энергией J при расположении на ближайших соседних узлах. Если частицы удалены на расстояние вторых соседей, они притягиваются с энергией $-J_2J$. Одномерный вариант подобной системы рассмотрен в работе [1], где было отмечено качественное соответствие полученных результатов с экспериментальными данными. В работе [2] исследовалась система с взаимодействием первых и третьих соседей.

Основные состояния (в пределе низких температур) рассматриваемой системы характеризуются наличием дальнего порядка в распределении частиц при концентрациях 0 (вакуумное состояние), $1/3$ (заполнена одна подрешетка из трех), $2/3$ (заполнены две подрешетки) и 1 (конденсированное состояние).

При отличных от нуля, но не слишком высоких температурах упорядоченные состояния сохраняются, последовательно переходя от вакуума до конденсированного состояния по мере увеличения химического потенциала μ (все энергетические величины, включая абсолютную температуру, умноженную на постоянную Больцмана, обезразмерены по параметру J). Результаты моделирования системы по методу Монте Карло в большом каноническом ансамбле представлены на рисунке 1. Для минимизации размерных эффектов моделировалась достаточно большая система, содержащая 96×96 узлов при периодических граничных условиях. При моделировании первые 1000 Монте Карло шагов (МКШ) отводились на эквilibризацию системы; средние значения определялись по последующим 10000 МКШ.

На концентрационных изотермах при $T \leq 0,70$ хорошо видно, что на больших интервалах изменения концентрации отсутствуют точки моделирования, и при увеличении химического потенциала система скачком изменяет концентрацию на более высокую. Пунктирные горизонтальные линии, обозначенные цифрами с номерами 1, 2, 3, соответствуют сосуществованию двух упорядоченных фаз: вакуума и $c = 1/3$, $c = 1/3$ и $c = 2/3$, $c = 2/3$ и конденсированная фаза. Несколько точек на этих интервалах соответствуют метастабильным состояниям, которые иногда могут быть реализованы в ходе моделирования. При

увеличении температуры ступеньки, характеризующие упорядоченные фазы с дефектами (вакансии при концентрациях несколько ниже идеальных значений $1/3$, $2/3$, 1 , или избыточных частиц на других подрешетках при концентрациях несколько выше идеальных значений 0 , $1/3$, $2/3$), постепенно уширяются и при температуре выше критической ($T_c \cong 0,93$) переходят в сплошную кривую.

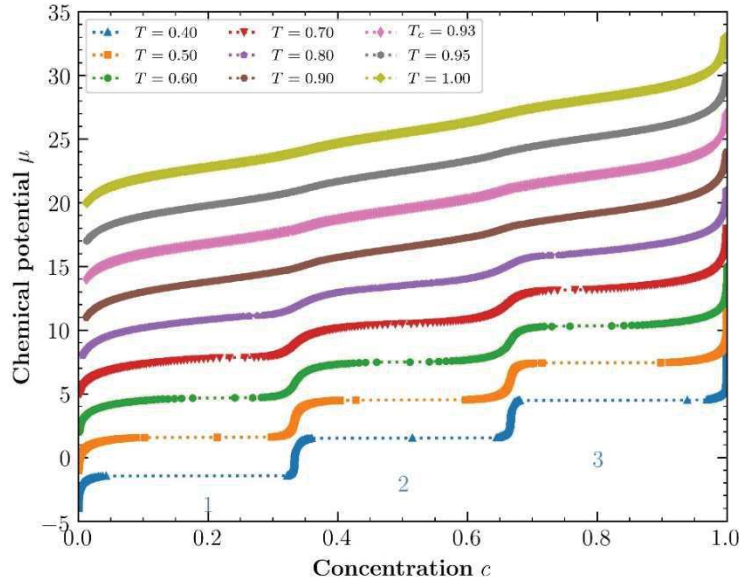


Рисунок 1 – Изотермы концентрации при $J_2 = 1/2$. Для наглядности изотермы смещены по вертикали вверх на 3 единицы друг относительно друга.

Не смещенной является изотерма при $T = 0,40$.

$T_c \cong 0,93$ – критическая температура

Дополнительными индикаторами фазовых переходов являются флуктуации числа частиц и энергии. Последние связаны с теплоемкостью при постоянном химическом потенциале, которая в безразмерной форме может быть записана как:

$$C_\mu = (\partial E / \partial T)_\mu / \langle N \rangle = (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2) / \langle N \rangle T^2, \quad (1)$$

где E – энергия системы, а угловые скобки означают усреднение по ансамблю или по симулируемому ряду состояний.

Флуктуации подавляются в наиболее упорядоченных состояниях и достигают больших значений на границах фаз (рисунок 2.). Характер зависимости теплоемкости от концентрации изменяется при $T_c \cong 0,93$ (исчезают минимумы при концентрациях, близких к $1/3$ и $2/3$), что позволяет идентифицировать эту температуру как критическую. Данный вывод также подтверждается поведением среднеквадратичных флуктуаций числа частиц.

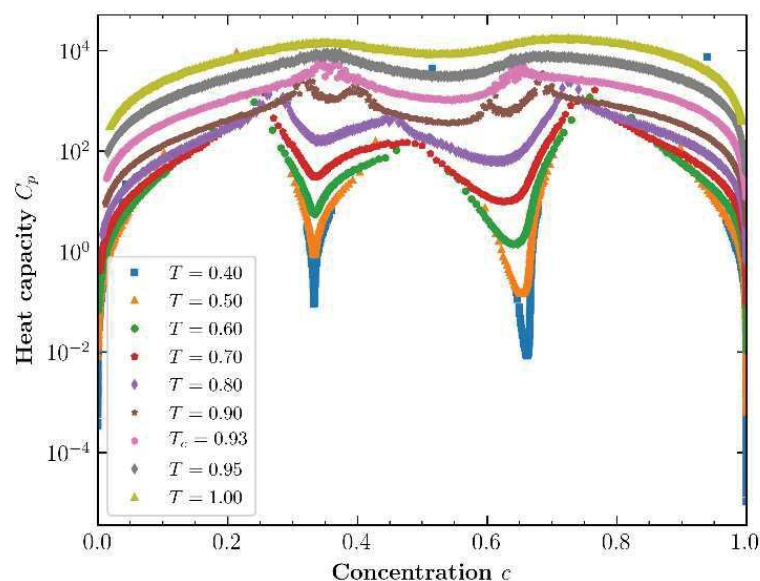


Рисунок 2 – Зависимость теплоемкости от концентрации. Для наглядного представления данных по вертикали использовалась логарифмическая шкала и каждая кривая смещена на 3^n единиц вверх относительно предыдущей, где n принимает значения от 1 до 8. Кривая при $T = 0,4$ не смещена.

Помимо флуктуаций анализировалось поведение параметра порядка, отражающего различие в заполнении подрешеток частицами. В областях, близких к идеальным концентрациям $1/3$ и $2/3$ и при низких температурах, параметр порядка близок к единице. По мере приближения к критической температуре или границе упорядоченных фаз этот параметр прогрессивно уменьшается. При температурах вблизи и выше критической система проявляет более сложное фазовое поведение [3].

ЛИТЕРАТУРА

1. Ciach A. Exactly solvable model for self-assembly of hard core - soft shell particles at interfaces / A. Ciach, J. Pekalski // Soft Matter. 2017. Vol. 13. P. 2603–2608.
2. Фазовая диаграмма решеточного флюида с SRLA-потенциалом на плоской треугольной решетке / Я. Г. Грода [и др.] // Журнал Белорусского государственного университета. Физика. 2019. №3. С. 81–91.
3. Landau D. P. Critical and multicritical behavior in a triangular-lattice-gas Ising model: Repulsive nearest-neighbor and attractive next-nearest-neighbor coupling // Phys. Rev. B. 1983. Vol. 27. P. 5604–5617.