

РАВНОВЕСНЫЕ СВОЙСТВА РЕШЕТОЧНЫХ СИСТЕМ С ОТТАЛКИВАНИЕМ БЛИЖАЙШИХ СОСЕДЕЙ

Я. Г. Грода

Научный руководитель – д-р физ.-мат. наук, проф. В.С. Вихренко
(Белорусский государственный технологический университет)

Решеточные модели нашли широкое применение в моделировании многочисленных физико-химических, механических, информационных и т. п. процессов [1-3]. Для эффективного использования этих моделей необходимы надежные методы расчета их равновесных и кинетических свойств. В представленном докладе рассмотрено обобщение одной из наиболее перспективных методик таких расчетов – самосогласованного диаграммного приближения [4-6] – на случай решеточных систем с отталкиванием ближайших соседей. Для проверки точности предлагаемого подхода проведено сравнение получаемых результатов с результатами моделирования решеточной системы по методу Монте-Карло [7].

Химический потенциал и параметр порядка решеточной системы. Рассмотрим решеточный газ из n частиц, распределенных на плоской квадратной решетке содержащей N узлов ((N, n) -система). Для учета возникающего в данной системе при отталкивании ближайших соседей «далекого» порядка (2×2 -фаза) разобьем решетку на две симметричные квадратные подрешетки (A и B). Анализ будем проводить в формализме большого канонического ансамбля.

Наряду с изучаемой системой рассмотрим обладающую таким же химическим потенциалом μ базисную (N, n) -систему, потенциальная энергия которой описывается одночастичными средними потенциалами. Тогда термодинамический потенциал исходной системы в расчете на один узел может быть записан [4, 5]:

$$\Omega_N = \Omega_N^{(0)} + \Omega_N^{(d)}, \quad (1)$$

где $\Omega_N^{(0)}$ – термодинамический потенциал базисной системы, который ввиду одночастичности потенциальной энергии легко может быть факторизован и записан в явном виде, а $\Omega_N^{(d)}$ – диаграммная часть потенциала.

Введя параметр порядка $\delta c = \delta n / N$ (где $\delta n = n_A - n_B$) и воспользовавшись термодинамическими соотношениями для большого канонического ансамбля, получим систему уравнений, связывающих параметр порядка δc , среднюю концентрацию c и химический потенциал системы μ :

$$(c(1-c) + \delta c^2)(\pi_A - \pi_B) - \delta c(\pi_A + \pi_B) = 0, \quad (2)$$

$$(1-c)(\pi_A + \pi_B) - \delta c(\pi_A - \pi_B) - 2c \exp(-\beta\mu) = 0, \quad (3)$$

где

$$\pi_\alpha = \prod_{k=1}^{\infty} \eta_\alpha^{(k)} = \prod_{k=1}^{\infty} \left(\frac{X_1^{\alpha(k)}}{X_0^{\alpha(k)}} \right)^{z_k}; \quad X_i^{\alpha(k)} = \exp(-\beta\varphi^{(k)}(n_i^\alpha)); \quad \alpha = A, B; \quad (4)$$

z_k – координационное число; $\varphi^{(k)}(n_i^\alpha)$ – средний потенциал взаимодействия частицы ($n_i^\alpha=1$) или вакансии ($n_i^\alpha=0$) находящейся в узле i подрешетки α с любым из узлов k -ой координационной сферы; $\beta=1/(k_B T)$; k_B – постоянная Больцмана.

Величины $X_i^{\alpha(k)}$ будем определять следующим образом: $X_i^{\alpha(k)}=1$ для $k > 2$, $X_i^{\alpha(1)}$ находятся из условия экстремальности функционала

$$\text{вида } \Omega_N^{(1)} = \Omega_N^{(0)} + 2 \bullet \text{---} \bullet, \quad (5)$$

а $X_i^{\alpha(2)}$ – из условия экстремальности функционала

$$\Omega_N^{(2)} = \Omega_N^{(0)} + 2 \bullet \text{---} \bullet + 4 \begin{array}{c} \bullet \\ \diagup \quad \diagdown \\ \bullet \end{array} + 2 \begin{array}{c} \bullet \quad \bullet \\ \diagdown \quad \diagup \\ \bullet \end{array} \quad (6)$$

при постоянных $X_i^{\alpha(1)}$ [4-6]. Здесь введены следующие графические обозначения: вертикальная (горизонтальная) и наклонная линии соответствуют перенормированным с помощью средних потенциалов φ базисной системы маероподобным функциям, отвечающим взаимодействиям первых и вторых соседей соответственно.

На рис. 1 представлена зависимость удвоенного параметра порядка изучаемой системы от концентрации полученная из решения уравнения (2) в квазихимическом (КХП) и самосогласованном диаграммном (СДП) приближениях и с помощью моделирования по методу Монте-Карло (ММК) [7]. Сопоставление зависимостей показывает, что переход от КХП к СДП существенно улучшает точность получаемых результатов, приближая их к результатам ММК.

Анализ концентрационной зависимости химического потенциала (рис. 2) позволяет также заключить, что СДП имеет точность, сопоставимую с точностью ММК во всем диапазоне термодинамических параметров (за исключением, возможно, ближайшей окрестности критической точки), в то время как КХП отражает лишь качественные зависимости.

Переход от КХП к СДП также положительно сказывается и на

виде фазовой диаграммы (рис. 3), причем улучшается как значение критической температуры (1.272 в КХП и 1.021 в СДП, где за единицу принята критическая температура ММК), так и ширина фазовой диаграммы.

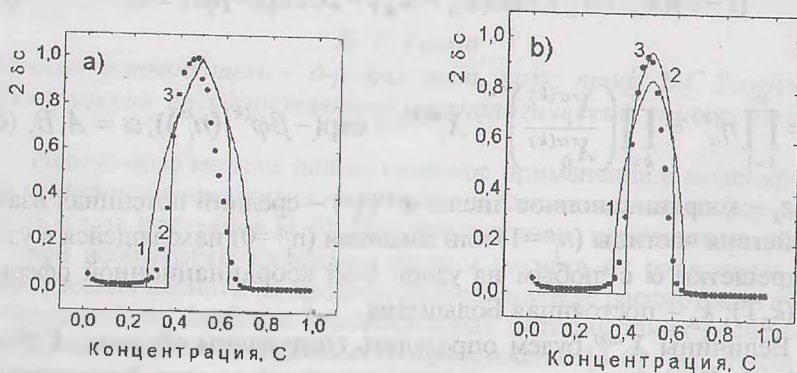


Рис. 1. Зависимость параметра порядка от концентрации полученная в 1-КХП, 2-СДП, 3-ММК при температуре а) $T/T_c=0.5$ б) $T/T_c=0.8$

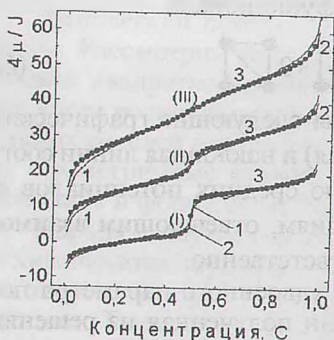


Рис. 2. Зависимость химического потенциала (в единицах энергии взаимодействия ближайших соседей) от концентрации при $T/T_c=0.5$ (I), 0.8 (II), 1.2 (III). 1-КХП, 2-СДП, 3-ММК. Группы кривых (II) и (III) сдвинуты вдоль оси $4\mu/J$ на 15 и 30 единиц соответственно

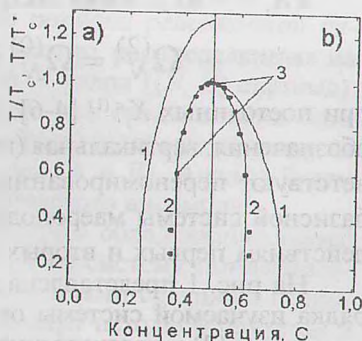


Рис. 3. Фазовая диаграмма решеточного газа с отталкиванием ближайших соседей. 1-КХП, 2-СДП, 3-ММК. Левая часть рисунка (а) приведена в абсолютных единицах, правая (б) - в приведенных

Таким образом, СДП позволяет определять термодинамические характеристики изучаемых систем с точностью порядка точности

ММК и отличается от последнего рядом существенных преимуществ (возможность реализации на ПЭВМ, непосредственная статистико-механическая форма получаемых результатов), что позволяет использовать его для изучения кинетических свойств решеточных систем.

Работа выполнена при поддержке INTAS, грант 96-0533.

Список литературы

1. Phase Transitions and Critical Phenomena, edited by C. Domb and M.S. Green. – New York: Academic Press, 1974. – V.3.
2. Gomer R. Diffusion of adsorbates on metal surfaces // Rep. Prog. Phys. – 1990. – V.53. – P.917.
3. Zhdanov V.P. Elementary physicochemical processes on solid surfaces. – New York: Plenum, 1991. – 324 p.
4. Bokun G.S., Uebing C., Vikhrenko V.S., Zhuk V.A. // Solid State Ionics. 1999. – V.119. – N.1/4. – P.331.
5. Бокун Г.С., Грода Я.Г., Вихренко В.С., Убинг К. // Труды БГТУ, 1999. – Вып. VII. – Сер. IV. Физ.-мат. науки и инф. – С.34.
6. Грода Я.Г. // Труды БГТУ, 1999. Вып. VII. – Сер. IV. Физ.-мат. науки и инф. – С.41.
7. Uebing C., Gomer R. // Journal Chem. Phys. – 1991. – V.95. – N.10. – P.7626.

УДК 681.7.069

ПАССИВНЫЕ ЗАТВОРЫ НА ОСНОВЕ КОБАЛЬТСОДЕРЖАЩИХ ШПИНЕЛЕЙ ДЛЯ ТВЕРДОТЕЛЬНЫХ ЛАЗЕРОВ ДИАПАЗОНА 1.3-1.6 МКМ

И. А. Денисов

*Научный руководитель – канд. физ.-мат. наук,
ст. науч. сотрудник К.В. Юмашев
(Белорусская государственная политехническая академия)*

Модуляция добротности твердотельных лазеров с помощью пассивных затворов обладает рядом преимуществ по сравнению с другими способами. Во-первых, это простота в эксплуатации, во-вторых – компактность, в третьих – более низкая стоимость таких систем. Использование пассивных затворов позволяет получать импульсы субнаносекундной длительности в компактных лазерах с диодной накачкой (так называемых «микрочип»-лазерах). В связи с этим большой актуальностью обладают исследования, направленные на поиск и