

Я. Г. Грода, доц., канд. физ.-мат. наук;
Д. В. Гапанюк, зам. декана, канд. физ.-мат. наук;
Р. Н. Ласовский, доц., канд. физ.-мат. наук; Э. Э. Бильданов, асп.
(БГТУ, г. Минск)

КИНЕТИЧЕСКИЙ КОЭФФИЦИЕНТ ДИФФУЗИИ РЕШЕТОЧНОГО ФЛЮИДА С КОНКУРИРУЮЩИМИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯМИ НА ПРОСТОЙ КУБИЧЕСКОЙ РЕШЕТКЕ

Рассматриваемая модель представляет собой решеточный флюид, состоящий из n частиц на простой кубической решетке, содержащей N решеточных узлов. Каждый из данных решеточных узлов может находиться в одном из двух состояний – быть занятым частицей либо быть вакантным.

Для описания конкурирующих сил межчастичных взаимодействий, имеющих место в реальных физико-химических и биологических системах, положим, что частицы, занимающие ближайшие решеточные узлы и узлы, являющиеся соседями третьего порядка, взаимодействуют друг с другом. Энергии взаимодействий равны J_1 и J_3 соответственно. При этом $J_1 < 0$, а $J_3 > 0$, что соответствует притяжению ближайших соседей и отталкиванию третьих (SALR-модель).

По аналогии с работой [1], в которой были рассмотрены равновесные свойства описанной модели, примем, что $J_1 = -J$ и $J_3 = J^*J$, где $J^* = 3$. При этом в силу геометрии рассматриваемой системы $z_1 = 6$ и $z_3 = 8$, где z_k – k -е координационное число, т.е. число узлов-соседей k -го порядка к каждому решеточному узлу.

Несмотря на относительную геометрическую схожесть квадратной и простой кубической решеток, моделирование процесса миграции частиц в последней решетке имеет ряд важных особенностей. В частности, применение описанного в [2] алгоритма моделирования диффузионного процесса в каноническом ансамбле приводит к тому, что при температурах ниже критической переход системы из произвольного начального состояния в равновесное упорядоченное состояние происходит чрезвычайно медленно. Вместе с тем вид этого упорядоченного состояния, чередование преимущественно заполненных и преимущественно пустых слоев решетки [1], оказывает существенное влияние на движение примесных частиц по решеточным узлам.

Для ускорения перехода системы в равновесное состояние может быть предложен алгоритм моделирования, сочетающий в себе моделирование системы в большом каноническом и каноническом ан-

самбле. В рамках данного подхода на первом этапе задается химический потенциал моделируемой системы, а число частиц в ней считается переменным и определяется в ходе симуляции.

После перехода системы в равновесное состояние число частиц в ней фиксируется, после чего выполняется моделирование диффузионного процесса в соответствии с алгоритмом, описанным в работе [2]. Применение такого двухступенчатого алгоритма позволяет кардинально сократить время моделирования. При этом величинами, непосредственно определяемыми в процессе моделирования, являются зависимости от времени среднего квадрата смещения центра масс системы частиц и среднего квадрата смещения отдельной частицы.

Проведенное моделирование показало, что зависимости от времени, измеренного в шагах алгоритма Монте-Карло, среднего квадрата смещения центра масс системы частиц и среднего квадрата смещения отдельной частицы являются с высокой степенью точности линейными. Соответственно их аппроксимация аналитической линейной функцией позволяет определить кинетический коэффициент диффузии D_J и коэффициент самодиффузии D_{tr} . Зависимость кинетического коэффициента диффузии от концентрации примесных частиц представлена на рисунке 1.

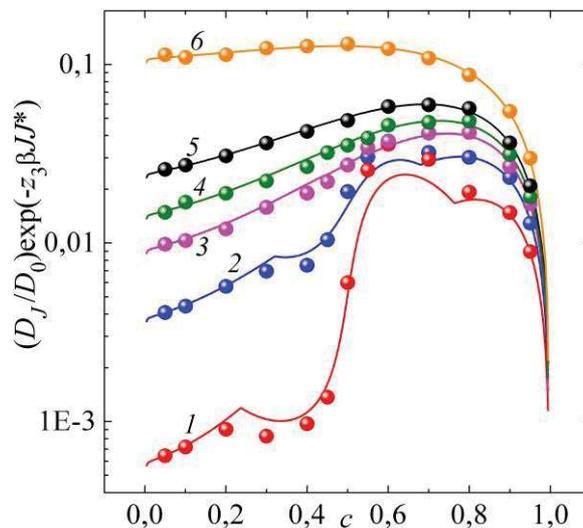


Рисунок 1 – Зависимость от концентрации кинетического коэффициента диффузии решеточного флюида на простой кубической решетке при $\beta J = 0,31$ (кривая 1); 0,2325 (2); 0,1958 (3); 0,1771 (4); 0,155 (5) и 0,093 (6). Линиями представлены результаты аналитических расчетов, точками – данные моделирования

На этом же рисунке производится сопоставление результатов моделирования с результатами аналитической оценки кинетического коэффициента диффузии в соответствии с соотношением Жданова [3]

$$D_J = D_0 \frac{\exp[\beta\mu]}{c} F(0; 0), \quad (1)$$

где μ , c и $F(0;0)$ – равновесные значения химического потенциала, концентрации частиц и вероятности двум ближайшим решеточным узлам быть вакантными, соответственно; D_0 – коэффициент диффузии невзаимодействующего (ленгмюровского) решеточного газа

$$D_0 = \frac{z_1 w a^2}{2d}, \quad (2)$$

где z_1 – число ближайших соседних узлов ($z_1 = 6$ для простой кубической решетки); w – вероятность прыжка частицы в свободный соседний узел; a – расстояние между узлами решетки (длина прыжка частицы); d – размерность пространства ($d = 3$ для пространственных решеток).

Проведенное сопоставление результатов показало, что, как и в случае решеточного флюида на квадратной решетке, соотношение Жданова позволяет получать адекватные оценки для кинетического коэффициента диффузии во всей области изменения термодинамических параметров за исключением области существования в системе упорядоченной фазы.

Также анализ полученных зависимостей выявил одну важную особенность диффузионных характеристик пространственной системы, которая отсутствует у ее двумерного аналога: при концентрациях примесных частиц равных 0,6 и 0,7 величины коэффициентов диффузии, определенные при моделировании для температур $0,6T_c$, $0,8T_c$, $0,95T_c$ и $1,05T_c$, являются очень близкими друг к другу. Указанное обстоятельство позволяет ожидать, что зависимость коэффициентов диффузии от обратной температуры будет отличаться от линейной.

ЛИТЕРАТУРА

1. 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.
2. Грода, Я.Г. Транспортные свойства решеточного флюида с SALR-потенциалом на плоской квадратной решетке / Я.Г. Грода, Р.Н. Ласовский // Журнал БГУ. Физика. – 2020. – в печати.
3. Zhdanov, V.P. General equation for description of surface diffusion in the framework of the lattice gas model / V.P. Zhdanov // Surf. Sci. – 1985. – Vol. 149, no. 1. – P. L13–L17.