

Особенности основных состояний и термодинамические свойства SRLA системы

В. С. Гришина^a, В. С. Вихренко^a, А. Цях^b

^a Учреждение образования «Белорусский государственный технологический университет», 220006 Минск, Беларусь

^b Институт физической химии Академии наук Польши, 01-224 Варшава, Польша
E-mail: vvikhre@gmail.com

ВВЕДЕНИЕ

Монослои частиц на границах раздела двух жидкостей, имеющих структуру ядро-оболочка, находят применение в плазменных системах, антибликовых покрытиях, подложках с предварительно нанесенным рисунком, при выращивании упорядоченных структур [1,2]. Рассматривается SRLA-система (Short-range Repulsion Long-range Attraction) таких частиц на треугольной решетке, с энергией отталкивания J при расположении частиц на ближайших соседних узлах, и притяжением вторых (пятых) соседей с энергией $-J_{2(5)}J$. Одномерный вариант системы с отталкиванием ближайших и притяжением вторых соседей рассмотрен в работе [3], где было отмечено качественное соответствие полученных результатов с экспериментальными данными. В работе [4] исследовалась система с SRLA взаимодействием для первых и третьих соседей.

1 ЛИНЕЙНОЕ НАТЯЖЕНИЕ В ОСНОВНОМ СОСТОЯНИИ СИСТЕМЫ

Исследованы основные состояния системы при нулевой температуре. Для модели I с отталкиванием первых и притяжением вторых соседей (J_2) состояния системы изменяются последовательно от вакуума (отсутствие частиц) до концентраций $3/9$, $6/9$, 1 (конденсированное состояние) по мере увеличения химического потенциала μ . Полученные состояния разделены линиями сосуществования фаз $\mu = -3J_2$, $\mu = 3 - 3J_2$, $\mu = 6 - 3J_2$. В модели II, где первые соседи отталкиваются, а пятые притягиваются, на линии сосуществования фаз могут образовываться дополнительные структуры с промежуточными концентрациями. Например, для линии, где $\mu = -3J_5$ при одном значении μ стабильны четыре фазы с концентрациями 0 (вакуум), $1/9$, $2/9$, $3/9$. Аналогично и для оставшихся двух линий сосуществования фаз.

Для системы с фиксированным числом частиц возникает эффект сосуществования фаз: при концентрациях, отличных от основного состояния системы, одновременно сосуществуют две фазы. Линейное натяжение σ – это дополнительная энергия образования межфазной границы, отнесенная к единице ее длины. На треугольной решетке в силу симметрии системы межфазные границы могут быть двух типов: параллельны (границы первого типа) или перпендикулярны (границы второго типа) векторам решетки e_i с углом $\pi/3$ между ними. Линейные натяжения для границ первого и второго типов равны $\sigma = 2J_{2(5)}/3a$ и $\sigma = J_{2(5)}/\sqrt{3}a$, соответственно. Границы второго типа более предпочтительны, поскольку имеют меньшую энергию образования. Этот вывод подтверждается моделированием системы по методу Монте-Карло (МК) в каноническом ансамбле при достаточно низкой температуре $T = 0,10$.

2 ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА SRLA СИСТЕМЫ

Выполнены исследования термодинамических характеристик системы при отличных от нуля температурах. При низких температурах на изотермах зависимости концентрации от химического потенциала, полученных в ходе МК-моделирования для

системы с параметром взаимодействия $J_{2(5)}=1/2$, наблюдаются упорядоченные структуры с концентрациями, близкими к концентрациям основных состояний системы в соответствующих областях изменения μ , и горизонтальные участки, соответствующие сосуществующим фазам. При увеличении температуры ступеньки, характеризующие упорядоченные фазы с дефектами (вакансии при концентрациях несколько ниже идеальных значений $3/9$, $6/9$, 1 , или избыточные частицы при концентрациях, несколько выше идеальных значений 0 , $3/9$, $6/9$), постепенно уширяются, и при температуре выше критической переходят в сплошную кривую. По своему виду изотермы для моделей I и II аналогичны, но их критические температуры $T_c \cong 0,93$ и $1,10$, соответственно, несколько отличаются. При моделировании в большом каноническом ансамбле состояния с промежуточными концентрациями не проявляются.

Флуктуации числа частиц обратно пропорциональны термодинамическому фактору χ_T и могут быть определены согласно соотношению:

$$(\langle N^2 \rangle - \langle N \rangle^2) / \langle N \rangle = \chi_T^{-1}, \quad (1)$$

где угловые скобки означают усреднение по ансамблю или по симулируемому ряду состояний. Минимумы обратного термодинамического фактора могут служить индикатором фазовых переходов в системе. Исчезновение минимумов (при концентрациях, близких к $3/9$ и $6/9$) позволяет идентифицировать температуру как критическую температуру системы.

Другим индикатором фазовых переходов являются флуктуации энергии, связанные с теплоемкостью при постоянном химическом потенциале. Флуктуации энергии, как и концентрации частиц, подавляются в наиболее упорядоченных состояниях, и велики в точках фазового перехода.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Установлено, что частицы, имеющие структуру ядро-оболочка, способны при определенных значениях температуры и химического потенциала образовывать упорядоченные поверхностные структуры. В рассмотренных моделях такие упорядоченные структуры образуются вблизи концентраций $1/3$, $2/3$.

БЛАГОДАРНОСТИ

Исследования выполнены при грантовой поддержке научной программы Евросоюза HORIZON-2020 (проект AMD-734276-CONIN) и Министерства образования Беларуси.

ЛИТЕРАТУРА

1. Stable in bulk and aggregating at the interface: Comparing core-shell nanoparticles in suspension and at fluid interfaces / SA Vasudevan [et al.] // *Langmuir*. - 2018. - Vol. 34. P. 886–895.
2. Nanogels and Microgels: From Model Colloids to Applications, Recent Developments, and Future Trends / M. Karg [at al.] // *Langmuir*. - 2019. - Vol. 35. P. 6231–6255.
3. 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.
4. 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.