

ЛИТЕРАТУРА

1. Stromme M. Li insertion into WO₃: introduction of a new electrochemical analysis method and comparison with impedance spectroscopy and the galvanostatic intermittent titration technique // Solid State Ionics. 2000. Vol. 131. P. 261–273.
2. Groda Ya. G. Equilibrium properties of the lattice fluid with the repulsion between the nearest neighbors on the two-level nonrectangular lattice // Cond. Matt. Phys. accepted for publication.
3. Uebing C., Gomer R. A. Monte Carlo study of surface diffusion coefficients in the presence of adsorbate-adsorbate interactions // J. Chem. Phys. 1991. Vol. 95. P. 7626–7652.
4. Tarasenko A. A., Bohac P., Jastrabik L. Migration of particles on heterogeneous bivariate lattices: The universal analytical expressions for the diffusion coefficients // Physica E. 2015. Vol. 74. P. 556–560.

УДК 538.91

Р.Н. Ласовский¹, доц., канд. физ.-мат. наук;
Я.Г. Грода¹, доц., канд. физ.-мат. наук;
Д.В. Гапанюк¹, доц., канд. физ.-мат. наук;
Т.Н. Пацаган², науч. сотр., д-р. физ.-мат. наук
¹(БГТУ, г. Минск), ²(ИФКС НАНУ, г. Львов)

МОДЕЛИРОВАНИЕ РЕШЕТОЧНЫХ СИСТЕМ С ОТТАЛКИВАНИЕМ БЛИЖАЙШИХ СОСЕДЕЙ

Решеточные модели нашли широкое применение в моделировании многочисленных физико-химических, механических, информационных и т. п. процессов [1–3].

При некоторых условиях, в частности, при межчастичном отталкивании, в решеточном флюиде может наблюдаться фазовый переход второго рода типа порядок – беспорядок [1], и система «раслаивается» на две подрешетки (рис. 1.). Прямое моделирование методом Монте Карло показывает, что такое расслоение обеспечивается при учете короткодействующего отталкивательного взаимодействия между ближайшими соседями при температурах ниже критической и соответствующих плотностях [1, 2].

С энергетической точки зрения понятно, что минимальной (нулевой) энергии взаимодействия частиц системы при половинном заполнении решетки соответствует (в двумерном случае) их распределение по узлам в шахматном порядке. С более общих позиций известно, что радиус статистических корреляций превышает радиус межча-

стичных взаимодействий, что может приводить при определенных условиях к образованию дальнего порядка и фазовым переходам второго рода даже в случае короткодействующих взаимодействий вследствие эстафетного механизма передачи корреляций.

Фазовые переходы второго рода при отталкивании ближайших соседей на квадратной решетке воспроизводятся в квазихимическом приближении [1].

Ранее было исследована временная релаксация параметра порядка в решеточных системах с отталкиванием ближайших соседей [4]. В данной работе исследуется пространственная релаксация параметра порядка.

При учете только парных взаимодействий гамильтониан системы может быть записан в виде

$$H_N = \sum_{i=1}^N \sum_{j=i+1}^N J_{ij} n_i^\alpha n_j^\beta, \quad (1)$$

где n_i^α , n_j^β – числа заполнения узлов, соответствующих различным подрешеткам ($n_i^{\alpha,\beta} = 1$ если узел i занят частицей и $n_i^{\alpha,\beta} = 0$ если он вакантен); J_{ij} – энергия взаимодействия частиц, расположенных в узлах i и j . В силу симметрии решетки число независимых констант, определяющих взаимодействие, можно существенно сократить, если ввести обозначение $J_k = J_{ij}$ для энергии взаимодействия частиц на узлах i и j , являющихся соседями k -го порядка ($k = 1, 2, \dots$ для ближайших, вторых и т. д. соседей). В случае решеточной системы с отталкиванием ближайших соседей $J_1 = J > 0$ и $J_k = 0$ для $k \geq 2$. Средние значения чисел заполнения задаются соответствующими решеточными концентрациями c_i^A и c_i^B , соответствующими различным подрешеткам.

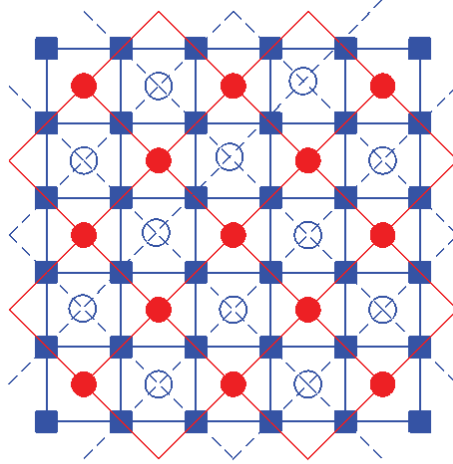
Параметр порядка определяется выражением

$$\delta c_i = (c_i^A - c_i^B) / 2. \quad (2)$$

Для моделирования рассматриваемой системы по методу Монте-Карло случайным образом выбирается подвижная частица, занимающая ячейку i . Затем случайным образом определяется направление ее возможного перехода в один соседних узлов. Если число заполнения ячейки-приемника j оказывается равным 1, то переход считается невозможным. Тем не менее, попытка этого перехода учитывается. Если число заполнения ячейки-приемника равно 0, то переход принимается с вероятностью, определяемой соотношением

$$w_{ij} = \exp(J(z - z_{\max}) / k_B T), \quad (3)$$

где z – число ближайших соседей выбранного узла, $z_{\max} = 3$ – максимальное возможное число ближайших соседей прыгающей частицы (вводится для нормировки максимальной возможной вероятности на единицу), k_B – постоянная Больцмана, T – температура.



**Рисунок 1 – Разбиение решетки на систему из двух подрешеток
Квадраты соответствуют атомам кристаллической поверхности, светлые и темные круги – узлам подрешеток.**

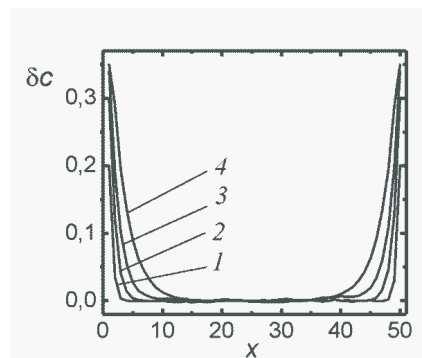
Упорядоченная фаза соответствует случаю, когда концентрация на подрешетках неодинаковая

Далее генерируется равномерно распределенное случайное число p_r из диапазона $[0; 1]$, которое сопоставляется с w_{ij} . Если $w_{ij} \geq p_r$, то переход считается произошедшим, если $w_{ij} < p_r$, то переход отклоняется. Повторение описанной процедуры L раз (равному числу частиц) формирует один шаг алгоритма Монте-Карло (МКШ). На процесс эквilibризации отводилось 1000 МКШ.

Моделировалась система, в которой начальное распределение концентрации не соответствует равновесному, т. е. в неупорядоченной фазе значение параметра порядка задавалось максимально возможным, а в упорядоченной – нулю. В дальнейшем в первом и последнем слоях параметр порядка сохранял указанные значения. В вертикальном направлении на систему накладывались периодические граничные условия.

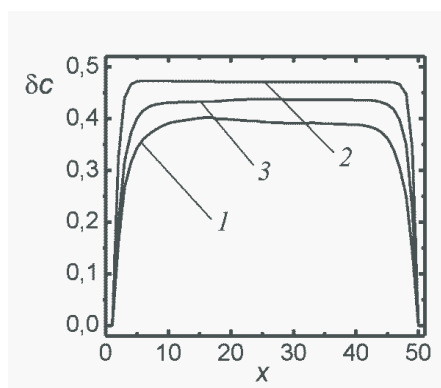
На рисунках 2 и 3 показано распределение параметра порядка в системе.

Как видно из рисунков на краях системы существуют релаксационные области (слои со значением параметра порядка отличным от равновесного).



$c = 0,20$ (1), $0,25$ (2); $0,30$ (3); $0,65$ (4)

Рисунок 2 – Распределение параметра порядка в неупорядоченной фазе при температуре 0,8 в единицах критической и средней концентрации в системе



$c = 0,45$ (1), $0,50$ (2); $0,55$ (3)

Рисунок 3 – Распределение параметра порядка в упорядоченной фазе при температуре 0,8 в единицах критической и средней концентрации в системе

При этом ширина релаксационных областей растет вместе со средней концентрацией в системе, что может быть обусловлено увеличением корреляционных эффектов.

ЛИТЕРАТУРА

1. Вихренко В.С., Грода Я.Г., Бокун Г.С. Равновесные и диффузионные характеристики интеркаляционных систем на основе решеточных моделей: монография. – Минск: БГТУ, 2008. – 326 с.
2. Ласовский Р. Н., Бокун Г. С., Вихренко В. С. Концентрационная кинетика интеркаляционных систем // Электрохимия. 2010. Том 46, № 4. С. 411–422.
3. Kutner R., Binder K., Kehr K. W. Diffusion in concentrated lattice gases. V. Particles with repulsive nearest-neighbor interaction on the face-centered-cubic lattice // Phys. Rev. B. 1983. Vol. 28. P. 1846–1858.
4. Бокун Г.С., Ласовский Р.Н., Вихренко В.С. Кинетика структурных превращений в решеточной системе // Труды БГТУ. Серия VI, Физико-математические науки и информатика. Минск : БГТУ, 2008. Вып. XVI. С. 35–38.