

МЕХАНИКА MECHANICS

УДК 531.19

Р. Н. Ласовский, Э. Э. Бильданов, Д. В. Гапанюк
Белорусский государственный технологический университет

РЕЛАКСАЦИЯ ПАРАМЕТРА ПОРЯДКА В РЕШЕТОЧНЫХ СИСТЕМАХ С ОТТАЛКИВАНИЕМ БЛИЖАЙШИХ СОСЕДЕЙ

Исследована двумерная решеточная модель с отталкиванием ближайших соседей. В данной модели с помощью численного решения уравнения баланса числа частиц по алгоритму Эйлера и компьютерного моделирования по методу Монте-Карло изучено пространственное распределение параметра порядка. Параметр порядка определялся в упорядоченной и неупорядоченной фазах при начальном распределении концентрации на подрешетках, не соответствующем равновесному. Показано появление релаксационных областей (слоев со значением параметра порядка, отличным от равновесного), ширина которых растет вместе со средней концентрацией в системе, что может быть обусловлено увеличением корреляционных эффектов. Сравнение результатов численного решения уравнения баланса числа частиц и результатов моделирования по методу Монте-Карло выявило заметное отличие ширины указанных областей.

Ключевые слова: решеточная система, химический потенциал, отталкивание ближайших соседей, метод Монте-Карло, параметр порядка.

Для цитирования: Ласовский Р. Н., Бильданов Э. Э., Гапанюк Д. В. Релаксация параметра порядка в решеточных системах с отталкиванием ближайших соседей // Труды БГТУ. Сер. 3, Физико-математические науки и информатика. 2023. № 1 (266). С. 24–28. DOI: 10.52065/2520-6141-2023-266-1-5.

R. N. Lasovsky, E. E. Bildanau, D. V. Gapanjuk
Belarusian State Technological University

RELAXATION OF THE ORDER PARAMETER IN LATTICE SYSTEMS WITH NEAREST NEIGHBOR REPULSION

A two-dimensional lattice model with repulsion of nearest neighbors is studied. In this model, using the numerical solution of the balance equation for the number of particles by the Euler algorithm and computer simulation by the Monte Carlo method, the spatial distribution of the order parameter was studied. The order parameter was determined in the ordered and disordered phases at an initial concentration distribution on the sublattices that did not correspond to the equilibrium one. The appearance of relaxation regions (layers with a value of the order parameter different from the equilibrium value) is shown. The width of these regions increases with the average concentration in the system, which may be due to an increase in correlation effects. Comparison of the results of the numerical solution of the equation for the balance of the number of particles and the results of simulation by the Monte Carlo method revealed a noticeable difference in the widths of these regions.

Keywords: lattice system, chemical potential, nearest neighbor repulsion, Monte-Carlo method, order parameter.

For citation: Lasovsky R. N., Bildanau E. E., Gapanjuk D. V. Relaxation of the order parameter in lattice systems with nearest neighbor repulsion. *Proceedings of BSTU, issue 3, Physics and Mathematics. Informatics*, 2023, no. 1 (266), pp. 24–28. DOI: 10.52065/2520-6141-2023-266-1-5 (In Russian).

Введение. При помощи решеточных систем взаимодействующих частиц можно моделировать многие физико-химические, механические, информационные процессы и явления. В частности, при наличии притяжения между подвиж-

ными частицами (атомами или молекулами) в решеточной системе возникает фазовый переход первого рода, при котором система расслаивается на две фазы – решеточный газ и решеточную жидкость [1, 2]. Равновесные свойства

и диффузионные характеристики решеточных систем при учете взаимодействия между ближайшими соседями были достаточно подробно изучены с помощью компьютерного моделирования и статистико-механических методов [2, 3]. При некоторых условиях, в частности, при отталкивании между частицами, в решеточном флюиде наблюдается фазовый переход второго рода типа порядок – беспорядок [4], и система «расслаивается» 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 [2, 3].

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 межчастичных 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.

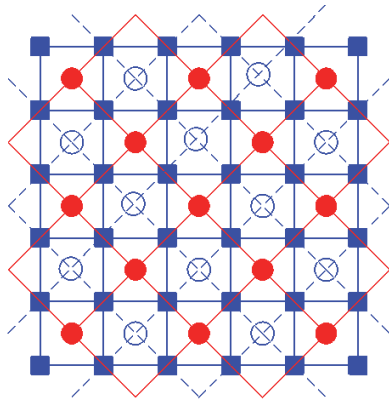


Рис. 1. Разделение решетки на систему из двух подрешеток. Квадраты соответствуют атомам кристаллической подложки, светлые и темные круги – узлам подрешеток a и b . Упорядоченная фаза соответствует случаю, когда концентрация на подрешетках неодинаковая

Фазовые переходы второго рода при отталкивании ближайших соседей на квадратной решетке воспроизведены в квазихимическом приближении в монографии [2]. В работе [5] было исследована временная релаксация параметра порядка в решеточных системах с отталкиванием ближайших соседей. При этом распределение концентрации частиц в этих системах было одинаковым во всех слоях.

В данной работе исследуется пространственная релаксация параметра порядка в сильно неравновесной решеточной системе.

Исследование параметра порядка с помощью уравнения баланса числа частиц. Как было показано в работе [5], скорость изменения средней плотности ρ_i^α ($\alpha = a, b$) частиц в i -м узле решеточной модели определяется уравнением баланса числа частиц:

$$\frac{\partial \rho_i^\alpha}{\partial t} = \sum_{j=1}^z I_{ji}^{\bar{\alpha}\alpha}, \quad (1)$$

где $I_{ji}^{\bar{\alpha}\alpha}$ – средний поток частиц из оккупированного узла с радиус-вектором $\mathbf{r}_j^{\bar{\alpha}}$ в соседний свободный узел с радиус-вектором \mathbf{r}_i^α через общую границу их ячеек. Черта над греческим индексом используется для обозначения сопряженной подрешетки: если $\alpha = a$, то $\bar{\alpha} = b$, если $\alpha = b$, то $\bar{\alpha} = a$.

$$I_{ji}^{\bar{\alpha}\alpha} = (U_j^{\bar{\alpha}} - U_i^\alpha) F(0_j^{\bar{\alpha}}, 0_i^\alpha). \quad (2)$$

Здесь $F(0_i^\alpha, 0_j^{\bar{\alpha}})$ – неравновесная функция распределения вакансий, равная вероятности двум узлам i и j быть не занятыми частицами;

$$U_i^\alpha = w_0 e^{\beta \mu_i^\alpha}, \quad (3)$$

w_0 – характерная частота колебаний частиц вблизи решеточных узлов; $\beta = (k_B T)^{-1}$ – обратная температура; μ_i^α – значения неравновесных химических потенциалов.

Величины, определяющие потоки (2), находятся с помощью выражений [5], в которых приняты обозначения $\rho_i^\alpha = \rho_{i_i}^\alpha$ и $\rho_{0_i}^\alpha = 1 - \rho_{i_i}^\alpha$:

$$e^{\beta \mu_i^\alpha} = \left(\rho_{i_i}^\alpha / \rho_{0_i}^\alpha \right) / \prod_{j \neq i} \zeta_{ji}^{\bar{\alpha}\alpha}; \quad (4)$$

$$F(n_i^\alpha, n_j^{\bar{\alpha}}) = \frac{W_{(n_i, n_j)}^{\alpha \bar{\alpha}} \rho_{n_i}^\alpha \rho_{n_j}^{\bar{\alpha}} M_{n_i}^\alpha M_{n_j}^{\bar{\alpha}}}{\eta_{ji}^{\bar{\alpha}\alpha}(n_i) \eta_{ij}^{\alpha\bar{\alpha}}(n_j) K_{ji}^{\bar{\alpha}\alpha}}; \quad (5)$$

$$W_{(n_i, n_j)}^{\alpha \bar{\alpha}} = \exp(-\beta J n_i^\alpha n_j^{\bar{\alpha}}); \quad (6)$$

$$M_{n_i}^\alpha = e^{\beta \mu_i^\alpha n_i}, \quad K_{ij}^{\alpha \bar{\alpha}} = \chi_j^{\bar{\alpha}}(0_i^\alpha) \chi_i^\alpha(0_j^{\bar{\alpha}}); \quad (7)$$

$$\chi_j^{\bar{\alpha}}(n_i^\alpha) = e^{-\beta \varphi_j^{\bar{\alpha}}(n_i^\alpha)}; \quad (8)$$

$$\eta_{ji}^{\bar{\alpha}\alpha}(0_i) = 1, \quad \eta_{ji}^{\bar{\alpha}\alpha}(1_i) = \zeta_{ji}^{\bar{\alpha}\alpha}, \quad (9)$$

где $\varphi_j^{\bar{\alpha}}(n_i^\alpha)$ – средний потенциал частицы, фиксированной в узле i подрешетки α в поле частицы, расположенной в узле j подрешетки $\bar{\alpha}$; n_i – числа заполнения ($n_i = 1$, если узел i занят частицей, и $n_i = 0$, если он вакантен); J – энергия взаимодействия частиц, расположенных в двух

соседних узлах, принадлежащих разным подрешеткам; функции $\zeta_{ji}^{\alpha\alpha}$ и $\zeta_{ij}^{\alpha\bar{\alpha}}$ находятся как положительные корни системы квадратных уравнений:

$$\rho_{0_i}^{\alpha} (\zeta_{ji}^{\alpha\bar{\alpha}})^2 + \zeta_{ji}^{\alpha\bar{\alpha}} (\rho_{1_j}^{\alpha} - \rho_{0_j}^{\bar{\alpha}} - W(\rho_{1_j}^{\bar{\alpha}} - \rho_{1_j}^{\alpha})) - W\rho_{1_j}^{\alpha} = 0; \quad (10)$$

$$\rho_{0_j}^{\bar{\alpha}} (\zeta_{ij}^{\alpha\bar{\alpha}})^2 + \zeta_{ij}^{\alpha\bar{\alpha}} (\rho_{1_j}^{\bar{\alpha}} - \rho_{0_i}^{\alpha} - W(\rho_{1_j}^{\alpha} - \rho_{1_j}^{\bar{\alpha}})) - W\rho_{1_j}^{\bar{\alpha}} = 0, \quad (11)$$

где $W = \exp(-\beta J)$.

Для исследования параметра порядка в решеточной системе, определяемого выражением $\delta\rho_i = (\rho_i^a - \rho_i^b) / 2$, задавалось начальное распределение концентрации на подрешетках. Далее с использованием формул (4)–(11) вычислялись потоки (2). Затем с помощью алгоритма Эйлера численно интегрировалось уравнение (1), что позволило найти изменения плотностей в каждом узле подрешеток a и b исходной решетки. При этом шаг интегрирования по времени Δt выбирался так, чтобы обеспечить сходимость решения и его точность ($\Delta t = 10^{-4}$).

Моделирование по методу Монте-Карло.

Для моделирования рассматриваемой системы по методу Монте-Карло (МКМ) с помощью генератора случайных чисел выбирается подвижная частица, занимающая ячейку i . После этого случайным образом определяется направление ее возможного перехода в одну из соседних ячеек, называемую ячейкой-приемником. 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 определяется вероятность перехода частицы:

$$w_i = \exp(J(z_i - z_{\max}) / k_B T), \quad (12)$$

где z_i – число ближайших соседей выбранного узла; $z_{\max} = 3$ – максимально возможное число ближайших соседей прыгающей частицы (вводится для того, чтобы максимально возможная вероятность не превышала единицу).

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

Моделировалась система размером 100×100 ячеек, 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.

Результаты и их обсуждение. На рис. 2 и 3 показано распределение параметра порядка в описанной выше системе в упорядоченной и неупорядоченной фазах, полученные с помощью прямого моделирования по методу Монте-Карло.

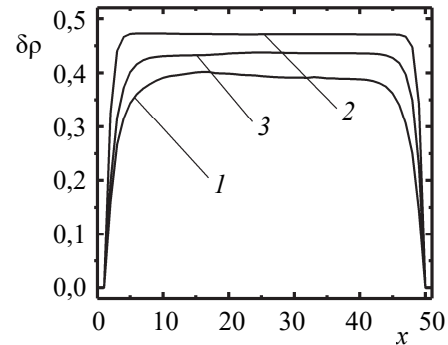


Рис. 2. Распределение параметра порядка в упорядоченной фазе при температуре 0,8 в единицах критической и средней концентрации в системе $c = 0,45$ (1); 0,50 (2); 0,55 (3)

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

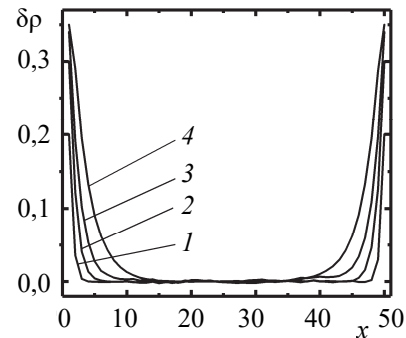


Рис. 3. Распределение параметра порядка в неупорядоченной фазе при температуре 0,8 в единицах критической и средней концентрации в системе $c = 0,20$ (1); 0,25 (2); 0,30 (3); 0,65 (4)

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

На рис. 4 и 5 показано сравнение результатов, полученных с помощью моделирования по методу Монте-Карло и численного решения уравнения баланса (1). Как видно из рисунков, ширина релаксационных областей, полученных численным решением, заметно меньше. Это может быть результатом флуктуаций при МКМ.

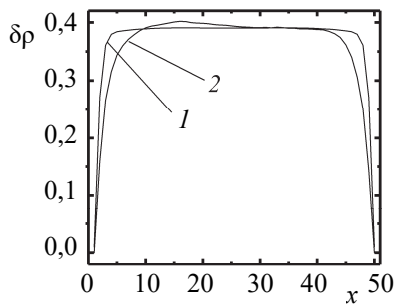


Рис. 4. Распределение параметра порядка в упорядоченной фазе при температуре 0,8 в единицах критической и средней концентрации в системе $c = 0,45$. 1 – определено решением уравнения баланса; 2 – МКМ

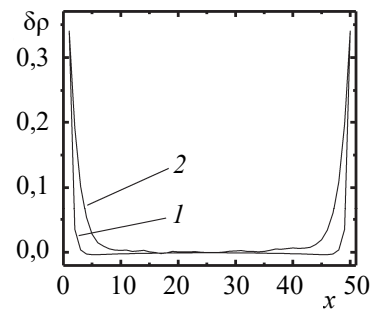


Рис. 5. Распределение параметра порядка в неупорядоченной фазе при температуре 0,8 в единицах критической и средней концентрации в системе $c = 0,35$. 1 – определено решением уравнения баланса; 2 – МКМ

Заключение. Исследована двумерная решеточная модель с отталкиванием ближайших соседей. В данной модели с помощью численного решения уравнения баланса числа частиц и компьютерного моделирования по методу Монте-Карло исследовано пространственное распределение параметра порядка в упорядоченной и неупорядоченной фазах при начальном распределении концентрации на подрешетках, не соответствующем равновесному.

Показано, появление релаксационных областей (слоев со значением параметра порядка, отличным от равновесного), ширина которых растет вместе со средней концентрацией в системе, что может быть обусловлено увеличением корреляционных эффектов. Сравнение результатов численного решения и результатов моделирования по методу Монте-Карло выявило заметное отличие ширины указанных областей.

Список литературы

1. Хуанг К. Статистическая механика. М.: Мир, 1966. 521 с.
2. 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.
3. Ласовский Р. Н., Бокун Г. С., Вихренко В. С. Концентрационная кинетика интеркаляционных систем // Электрохимия. 2010. Т. 46, № 4. С. 411–422.
4. 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.
5. Бокун Г. С., Ласовский Р. Н., Вихренко В. С. Кинетика структурных превращений в решеточной системе // Труды БГТУ. Сер. VI, Физ.-мат. науки и информатика. 2008. Вып. XVI С. 35–38.

References

1. Huang K. *Statisticheskaya mekhanika* [Statistical mechanics]. Moscow, Mir Publ., 1966. 521 p. (In Russian).
2. Vikhrenko V. S., Groda Ya. G., Bokun G. S. *Ravnovesnyye i diffuzionnyye kharakteristiki interkalyatsionnykh system na osnove reshetochnykh modeley: monografiya* [Equilibrium and diffusion characteristics of intercalation systems based on lattice models: monograph]. Minsk, BGTU Publ., 2008. 326 p. (In Russian).
3. Lasovsky R. N., Bokun G. S., Vikhrenko V. S. Concentration kinetics of intercalation systems. *Elektrokhimia* [Electrochemistry], 2010, vol. 46, no. 4, pp. 389–400 (In Russian).
4. 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, pp. 1846–1858.
5. Bokun G. S., Lasovsky R. N., Vikhrenko V. S. Kinetics of structural transformations in a lattice system. *Trudy BGTU* [Proceedings of BSTU], series VI, Physics and Mathematics. Informatics, 2008, issue XVI, pp. 35–38 (In Russian).

Информация об авторах

Ласовский Руслан Николаевич – кандидат физико-математических наук, доцент, доцент кафедры механики и конструирования. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: lasovsky@tut.by

Бильданов Эльдар Эмирович – магистр технических наук, ассистент кафедры механики и конструирования. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: eldar.bildanov@gmail.com

Гапанюк Дмитрий Владимирович – кандидат физико-математических наук, проректор по воспитательной работе. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: gapdm@mail.ru

Information about the authors

Lasovsky Ruslan Nikolaevich – PhD (Physics and Mathematics), Associate Professor, Assistant Professor, the Department of Mechanics and Engineering. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: lasovsky@tut.by

Bildanau Eldar Emiravich – Master of Engineering, PhD student, the Department of Mechanics and Engineering. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: eldar.bildanov@gmail.com

Gapanjuk Dmitry Vladimirovich – PhD (Physics and Mathematics), Vice-rector for Student Affairs. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: gapdm@mail.ru

Поступила после доработки 27.01.2023