

Таким образом, предлагаемый алгоритм метода Монте-Карло позволяет моделировать бинарный решеточный газ с целью изучения его равновесных свойств и полученные результаты могут служить экспериментальным базисом для дальнейшего построения приближенных методов исследования этой модели.

ЛИТЕРАТУРА

1. Ising E. // *Zs. f. Phys.* 1925. Vol. 31. – P. 253.
2. Uebing C., Gomer R. A. // *J. Chem. Phys.* 1991. Vol. 95; № 10. P. 7626.
3. Tafa K., Puri S., Kumar D. // *Phys. Rev.* 2002. Vol. 64; № 5. P. 6139.
4. Vikhrenko V.S., Groda Ya.G., Bokun G.S. // *Phys. Let. A.* 2001. Vol. 286; № 2/3. P. 127.
5. Bokun G. S., Groda Ya.G., Belov V.V., Uebing C., Vikhrenko V.S. // *Euro. Phys. Journ. B.* 2000. Vol. 15; № 2. P. 297.
6. Argyrakis P., Groda Ya G., Bokun G.S., Vikhrenko V.S. // *Phys. Rev. E.* 2001. Vol. 64; № 6. P. 6108.
7. Metropolis N., Rosenbluth A.W., Rosenbluth M.N., Teller A.H., Teller E. // *J. Chem. Phys.* 1953. Vol. 21; № 6. P. 1087.
8. Грода Я.Г. // *Труды БГТУ. Сер. физ.-мат. наук и информ.* 2002. Вып. X. С. 47.
9. Bortz A.B., Kalos M.H., Lebowitz J.L., Zendejas M.A. // *Phys. Rev. B.* 1974. Vol. 10; № 2. P. 535.
10. Binder K., Landau D.P. // *Surf. Sci.* 1976. Vol. 61; № 2. P. 577.

УДК 531.19

Р.Н. Ласовский, ассистент; В.С. Вихренко, профессор

СТРУКТУРНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ И НАТЯЖЕНИЕ МЕЖФАЗНОГО СЛОЯ ДВУХМЕРНОЙ РЕШЕТОЧНОЙ МОДЕЛИ

Monte-Carlo simulation results for the system of particles with nearest neighbor attraction interaction on a square lattice are represented. The fractal dimension of boundary phase line, the correlation function of depth of the condensed phase and the density distribution at temperature from 0,6 through 0,9 of its critical value depending on simulation system size are calculated. Temperature dependence of tension of the boundary layer dense phase – gas phase is analyzed.

1. Введение

Поведение решеточных систем взаимодействующих частиц характеризуется широким набором свойств, моделирующих многие реальные процессы и явления. В частности, при наличии притяжения между частицами в решеточной системе возможен фазовый переход первого рода, при котором система расслаивается на две фазы – решеточный газ и решеточную жидкость [1,2]. Равновесные свойства и диффузионные характеристики однородных фаз решеточных систем были достаточно подробно изучены с помощью компьютерного моделирования и статистико-механическими методами (см. напр., [3 – 6] и цитированную там литературу). Для понимания таких процессов, как рост кристаллов, смачивание, динамика кластеров и наноразмерных частиц и др., представляет несомненный интерес исследование структуры и динамики границ раздела фаз, что и является предметом настоящей работы, в которой моделируется система частиц на квадратной решетке с притяжением между ближайшими соседями.

Рассматривалась квадратная решетка размером $L \times L$ узлов с периодическими граничными условиями по горизонтали и нарушенной симметрией по вертикали. Последнее достигалось тем, что нулевой слой (подложка) полностью заполнялся частицами, а в $(L+1)$ слое частицы отсутствовали. Таким образом, у первого слоя частиц всегда есть ближайший сосед снизу, а у слоя L сосед сверху отсутствует. Нарушение симметрии введено с целью фиксировать расположение конденсированной фазы. Моделирование состояний системы осуществлялось в каноническом ансамбле по алгоритму, описанному в работах [3,4,6], модифицированному для рассматриваемого случая.

Один шаг процедуры Монте-Карло (МКШ) состоял из числа попыток перестановки частиц, равного числу частиц в системе. Для перехода системы в равновесное состояние отводилось 10^4 МКШ. Последующее усреднение выполнялось по 10^5 МКШ.

2. Структурные характеристики межфазного слоя

В качестве структурных характеристик межфазного слоя рассматривались следующие параметры: его фрактальная размерность, корреляционная функция и распределение высот столбиков конденсированной фазы и распределение плотности.

Для нахождения фрактальной размерности положение линии раздела фаз определялось по столбцам, в которых, начиная с нижнего слоя, количество вакансий подряд не превышает двух. Линия раздела фаз напоминает фигуру Коха, и ее фрактальная размерность может быть определена по соотношению [7]:

$$L = a(R/a)^D \quad (1)$$

где R – длина линии, разделяющей фазы ($R = L + \sum_{i=1}^{L/a} |h_i - h_{i+a}|$); L – размер решетки; $a = 1, 2, 4, \dots, L/2$ – масштаб; D – фрактальная размерность.

При $a = 1$ имеем полную длину линии раздела фаз, при $a = 2$ горизонтальные линии проводятся в пределе двух ячеек и т. д.

Для определения фрактальной размерности использовалось соотношение

$$D = \frac{\log_2 R - \log_2 a}{\log_2 L - \log_2 a} \quad (2)$$

Зависимости фрактальной размерности от размера решетки и от температуры, измеряемой в единицах критической ($t = T/T_c$) представлены на рис. 1. Из рисунка видно, что фрактальная размерность может рассматриваться не зависящей от размера решетки. При $t = 0,9$ она составляет величину порядка $D \approx 1,3$. Лишь при $L = 128$ флуктуации, связанные с недостатками предложенного алгоритма определения линии раздела фаз, становятся ощутимыми и приводят к более существенным отклонениям от указанной величины. Кроме того, при $a = L/2$ заметно влияние ограниченности размеров системы. При понижении температуры фрактальная размерность существенно уменьшается, что видно из сопоставления кривых 1 ($t = 0,9$) и 6 ($t = 0,6$).

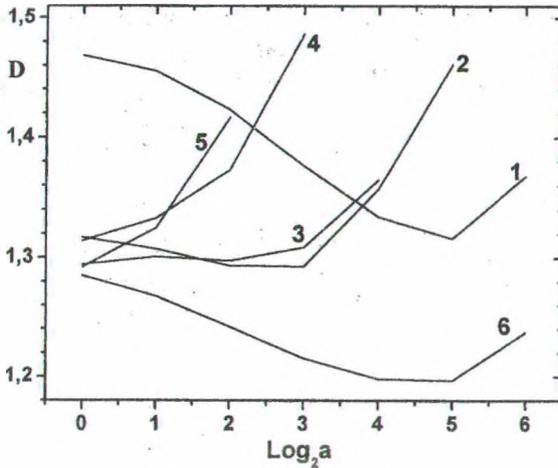


Рис. 1. Зависимость фрактальной размерности от масштаба:

1 - $L = 128, t = 0,9$; 2 - $L = 64, t = 0,9$;
 3 - $L = 32, t = 0,9$; 4 - $L = 16, t = 0,9$;
 5 - $L = 8, t = 0,9$; 6 - $L = 128, t = 0,6$

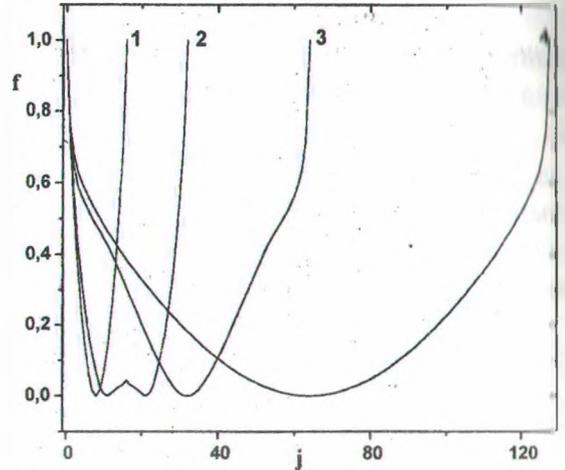


Рис. 2. Корреляционная функция высот столбцов, находящихся на расстоянии j друг от друга:

1 - $L = 16$; 2 - $L = 32$; 3 - $L = 64$;
 4 - $L = 128$; $t = 0,9$

Другой важной характеристикой является корреляционная функция, отражающая взаимную зависимость высот различных столбцов и вычисляемая по формуле

$$f(j) = \left\langle \sum_{i=1}^L h_i h_{(i+j)} \right\rangle / \left\langle \sum_{i=1}^L h_i^2 \right\rangle, \quad (3)$$

где i - номер столбца; $j = 0, 1, 2, \dots$ определяет расстояние между столбцами, а угловые скобки означают статистическое усреднение.

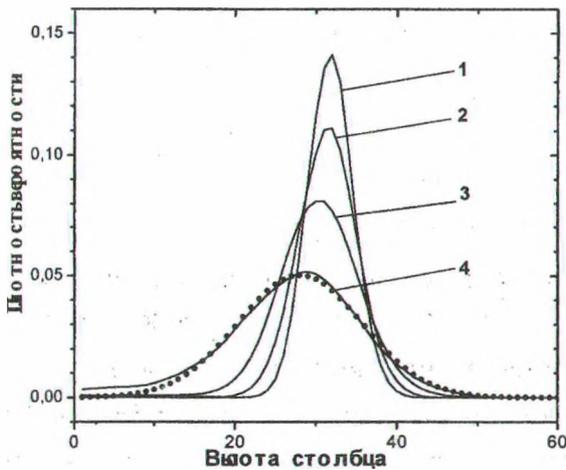


Рис. 3. Распределение высот столбцов при $L = 128$: 1 - $t = 0,6$; 2 - $t = 0,7$; 3 - $t = 0,8$; 4 - $t = 0,9$; точки - распределение Гаусса

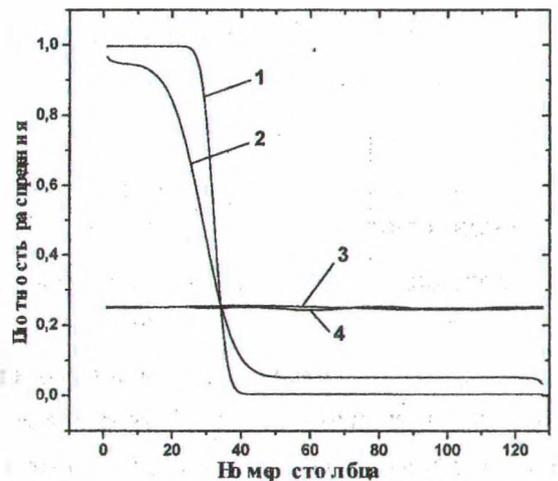


Рис. 4. Распределение плотности частиц при $L = 128$. По вертикали при $t = 0,6$ (кривая 1) и $t = 0,9$ (2); по горизонтали при $t = 0,6$ (3) и $t = 0,9$ (4)

На рис. 2 представлена зависимость корреляционной функции от параметра j . Можно отметить, что ближний порядок ($j < 5$) не зависит от размеров решетки. Как и следовало ожидать, корреляционная функция убывает с ростом расстояния j между столбцами и симметрична относительно середины моделируемой ячейки. Отметим, что здесь четко прослеживается наличие дальних корреляций. Результаты моделирования показывают, что распределение столбцов по высотам (см. рис. 3) хорошо описывается функцией Гаусса, т. е. пропорционально $\exp[-(\Delta h)^2 / 2 \langle h^2 \rangle]$.

График распределения плотности частиц, показанный на рис. 4, демонстрирует, что средняя плотность во всех столбцах почти одинакова, тогда как в горизонтальных слоях зависит от их положения в системе и от температуры. Толщина переходного слоя увеличивается с ростом температуры. Кроме того, концентрация частиц в разреженной фазе также увеличивается с ростом температуры.

3. Натяжение межфазного слоя

Вследствие флуктуаций линия раздела фаз не является прямой и может рассматриваться как образованная случайным набором высот столбцов $h(x_j)$. При этом длина линии раздела фаз возрастает на ΔL и натяжение межфазного слоя σ вводится как величина, определяющая изменение ΔW свободной энергии системы при указанном увеличении длины ΔL :

$$\Delta W = -\sigma \Delta L \quad (4)$$

В соответствии с термодинамической теорией флуктуаций плотность вероятности соответствующих состояний системы определяется как

$$P \sim \exp(\Delta W / k_B T) = \exp(-\sigma \Delta L / k_B T) \quad (5)$$

Для определения ΔL удобно перейти к представлению распределения высот столбцов через распределение амплитуд гармонических функций:

$$h(x_i) = \sum_{k=-L/2}^{L/2} \left[b_k \cos\left(\frac{2\pi}{L} k x_j\right) + a_k \sin\left(\frac{2\pi}{L} k x_j\right) \right], \quad (6)$$

где k – волновое число, принадлежащее первой зоне Бриллюэна [8], $-L/2 \leq k \leq L/2$.

Учитывая свойства симметрии тригонометрических функций, входящих в уравнение (6), запишем

$$b_k = b_{-k}, \quad a_k = -a_{-k}. \quad (7)$$

Переходя от дискретного представления линии раздела к непрерывному (при достаточно больших значениях L), ее длину можно записать как

$$L + \Delta L = \int_{-L/2}^{L/2} ds, \quad (8)$$

где элемент длины линии

$$ds = \sqrt{dx^2 + dh^2} = \sqrt{1 + (dh/dx)^2} dx \approx [1 + 0,5(dh/dx)^2] dx$$

и выполнено разложение в ряд корня квадратного с точностью до членов первого порядка. В результате запишем

$$L + \Delta L = \int_{-L/2}^{L/2} (1 + 0,5(dh/dx)^2) dx \quad (9)$$

Воспользовавшись представлением (6), заметим, что после перехода от произведений тригонометрических функций к их суммам и интегрирования в (9) останутся только слагаемые, содержащие косинусы с $k = l$ или $k = -l$. В результате находим

$$L + \Delta L = L + (2\pi^2/L) \sum_{k=1}^{L/2} k^2 (b_k^2 + a_k^2) \quad (10)$$

Учитывая также выражение (5), можно записать

$$P \sim \exp \left\{ -\frac{2\pi^2\sigma}{Lk_B T} \sum_{k=1}^{L/2} k^2 (b_k^2 + a_k^2) \right\} \quad (11)$$

Таким образом, распределение амплитуд гармоник является гауссовым, что позволяет определить их среднеквадратичные значения:

$$\langle b_k^2 \rangle = \langle a_k^2 \rangle = \frac{Lk_B T}{4\pi^2\sigma} \frac{1}{k^2} \quad (12)$$

Полученный результат позволяет определить средний квадрат отклонения высот столбцов от их среднего значения $\langle h \rangle = b_0$:

$$\langle \langle \Delta h^2 \rangle \rangle = \langle \langle h^2 \rangle \rangle - b_0^2 = \sum_{k=1}^{L/2} \langle (b_k^2 + a_k^2) \rangle \quad (13)$$

Здесь использованы двойные угловые скобки, чтобы подчеркнуть, что, помимо усреднения по распределению амплитуд, выполняется интегрирование по координате x . С учетом (12) получим

$$\langle \langle h^2 \rangle \rangle = \frac{Lk_B T}{4\pi^2\sigma} \sum_{k=1}^{L/2} \frac{1}{k^2} \quad (14)$$

Для достаточно больших L входящая в (14) сумма близка к $\pi^2/6$. Поэтому

$$\sigma = \frac{Lk_B T}{24 \langle \langle h^2 \rangle \rangle} = \frac{k_B T}{24(\langle \langle h^2 \rangle \rangle / L)}, \quad (15)$$

где средний квадрат флуктуаций высот столбцов находится путем аппроксимации кривой распределения высот гауссовой зависимостью.

Отметим, что в соотношениях (4) – (15) величины h и L предполагаются имеющими размерность длины, тогда как в процессе моделирования эти величины рассматривались безразмерными числами. Переход к размерным величинам осуществляется посредством умножения на параметр решетки b (расстояние между узлами $b \approx 0,4$ нм):

$\langle \langle h^2 \rangle \rangle = \alpha b^2$, $L = lb$. С учетом этого выражение (17) принимает вид

$$\sigma = \frac{k_B T}{24b(\alpha/l)} \quad (18)$$

Рис. 5 показывает, что средний квадрат полуширины распределения высот столбцов пропорционален размеру системы. Зависимость натяжения поверхностного слоя от

температуры показана на рис. 6. Для представления натяжения в единицах силы в качестве критической температуры принято 300 К и параметр решетки $b=0,4$ нм. Натяжение практически линейно убывает с ростом температуры. Такое поведение натяжения соответствует тому, что в критической точке ($t=1$) оно должно обращаться в нуль. Полученные значения натяжения сопоставимы с экспериментальными данными для простых веществ, пересчитанными на ширину поверхностного слоя, равную диаметру b частицы. Например, для аргона вблизи тройной точки получим $\sigma \approx 4$ пН.

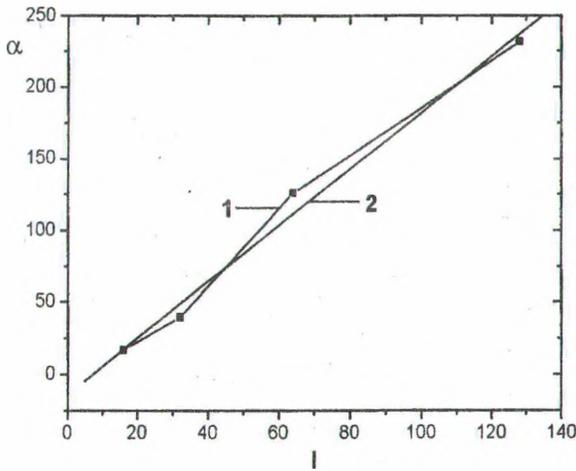


Рис. 5. Зависимость квадрата полуширины гауссова распределения высот столбцов при $T=0,9$: 1 – расчетные значения; 2 – линейная аппроксимация ($\alpha = 1,95l - 14,16$)

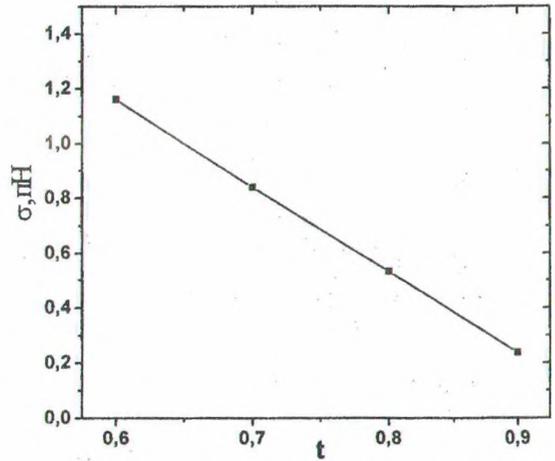


Рис. 6. Зависимость натяжения поверхностного слоя от приведенной температуры

4. Заключение

Полученные результаты показывают, что поверхностный слой двумерной системы обладает рядом особенностей. Фрактальный характер линии раздела плотной и разреженной фаз свидетельствует о том, что при увеличении линейных размеров системы флуктуации толщины слоя неограниченно растут. Отклонения высот столбиков конденсированной фазы хорошо описываются гауссовым распределением со среднеквадратичными значениями, пропорциональными линейному размеру системы и быстро уменьшающимися с уменьшением температуры. Как следствие, размер области, в которой наблюдается переход от плотной к разреженной фазе, пропорционален корню квадратному от линейного размера системы. Корреляционная функция высот столбцов конденсированной фазы состоит из двух участков. Корреляции на малых расстояниях до примерно 5 параметров решетки быстро убывают с расстоянием и практически не зависят от размера системы, тогда как дальние корреляции медленно убывают и охватывают всю систему. Натяжение поверхностного слоя имеет правильную температурную зависимость и по порядку величины согласуется с экспериментальными данными для простых веществ.