

В целом анализ равновесных свойств решеточного газа показывает, что переход от плоской квадратной [3] и простой кубической [5] решеток к шестиугольной приводит лишь к незначительным количественным изменениям в этих свойствах. Для изотерм химического потенциала, например, это выражается в величине химического потенциала, измеряемого в единицах параметра взаимодействия при концентрации частиц 0.5, которая определяется числом ближайших соседей на решетке.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Бокун Г. С., Вихренко В. С., Убинг К. // Труды БГТУ. Сер. физ.-мат. наук и информ. 1998. Вып. VI. С. 28.
2. Бокун Г. С., Грода Я. Г., Вихренко В. С., Убинг К. // Труды БГТУ. Сер. физ.-мат. наук и информ. 1999. Вып. VII. С. 34.
3. Bokun G. S., Groda Ya. G., Belov V. V. et al. // Euro. Phys. Journ. B. 2000. Vol.15; № 2. P. 297.
4. Bokun G. S., Groda Ya. G., Uebing C., Vikhrenko V. S. // Physica A. 2000. Vol. 296; №1/2. P. 83.
5. Argyrakis P., Groda Ya. G., Bokun G. S., Vikhrenko V. S. // Phys. Rev. E. 2001. Vol. 64; № 6. P. 6108.
6. Грода Я. Г. // Труды БГТУ. Сер. физ.-мат. наук и информ. 1999. Вып. VII. С. 41.
7. Vikhrenko V. S., Groda Ya. G., Bokun G. S. // Phys. Let. A. 2001. Vol. 286; № 2/3. P. 127.
8. Naya S. // Prog. Theor. Phys. 1954. Vol. 11; № 1. P. 53.
9. Metropolis N., Rosenbluth A. W., Rosenbluth M. N., Teller A. H., Teller E. // J. Chem. Phys. 1953. Vol. 21; № 6. P. 1087.
10. Хуанг К. Статистическая физика. – М.: Мир, 1966. – 520 с.
11. Балеску Р. Равновесная и неравновесная статистическая механика: В 2 т. – М.: Мир, 1978. – 408 с.

УДК 531.19

Я.Г. Грода, ассистент; Д.В. Гапанюк, ассистент

#### МОДЕЛИРОВАНИЕ ПО МЕТОДУ МОНТЕ-КАРЛО ДВУХКОМПОНЕНТНЫХ РЕШЕТОЧНЫХ СИСТЕМ

Equilibrium properties (chemical potential versus concentration dependencies, correlation functions) of a two component lattice gas with attractive interaction are investigated on the basis of Monte Carlo simulation. The Metropolis-type algorithm for the simulation is proposed.

#### Введение

В настоящее время изучение таких сложных и практически значимых явлений, как фазовые переходы, невозможно без использования модельных систем, которые позволяют учитывать межчастичные взаимодействия при высоких концентрациях частиц, оставаясь в то же время достаточно простыми для решения конкретных задач. ЯК числу таких моделей относятся так называемые решеточные системы.

Простейшая решеточная модель – модель однокомпонентного решеточного газа со взаимодействием ближайших соседей (модель Изинга со спином 1/2 [1]) позволяет описывать фазовые переходы первого и второго рода [2]. Для расширения возможно-

стей описания фазовых переходов используются более сложные решеточные модели. Одним из примеров таких моделей является многокомпонентный, в частности двухкомпонентный, решеточный газ со взаимодействием ближайших соседей.

Рассмотрим плоскую квадратную решетку, каждый узел которой может быть занят либо частицей сорта  $A$ , либо частицей сорта  $B$ , либо быть вакантным ( $ABV$ -модель) [3]. Частицы, занимающие соседние узлы, взаимодействуют друг с другом, энергия и характер этого взаимодействия определяются типами взаимодействующих частиц.

$ABV$ -модель является естественным развитием модели однокомпонентного решеточного газа, что позволяет надеяться на возможность обобщения на случай многокомпонентных систем, приближенных методов анализа равновесных свойств решеточных систем, показавших свою высокую точность в однокомпонентном случае. К таким методам относятся диаграммное и самосогласованное диаграммное приближения [4–6].

Наиболее общим методом контроля точности результатов, получаемых с помощью этих приближенных методов, является сравнение их результатов с результатами прямого компьютерного моделирования решеточных систем по методу Монте-Карло. В данной работе рассматривается модернизация классического алгоритма моделирования по методу Монте-Карло – алгоритма Метрополиса [7] – на случай многокомпонентных решеточных систем.

### 1. Гамильтониан модели.

#### Бинарный решеточный газ и модель Изинга со спином $s=1$

По аналогии с числами заполнения и энергией взаимодействия ближайших соседей, применяемых в случае однокомпонентного решеточного газа, для бинарной системы в рассмотрение могут быть введены вектор состояния решеточного узла  $i$  –  $\mathbf{n}_i$  и матрица взаимодействия  $\mathbf{J}$ , определенные следующим образом:

$$\begin{aligned} \mathbf{n}_i &= (1, 0, 0), & \text{если узел } i \text{ занят частицей сорта } A; \\ \mathbf{n}_i &= (0, 1, 0), & \text{если узел } i \text{ вакантен;} \\ \mathbf{n}_i &= (0, 0, 1), & \text{если узел } i \text{ занят частицей сорта } B; \end{aligned} \quad (14)$$

$$\mathbf{J} = \begin{pmatrix} J_{AA} & 0 & J_{AB} \\ 0 & 0 & 0 \\ J_{AB} & 0 & J_{BB} \end{pmatrix}, \quad (15)$$

где  $J_{\alpha\beta}$  – энергия взаимодействия двух ближайших узлов, занятых частицами сортов  $\alpha$  и  $\beta$  ( $\alpha, \beta=A, B$ ).

В этом случае гамильтониан системы может быть записан в виде суммы полных сверток матрицы взаимодействия и векторов состояния решеточных узлов:

$$H = \sum_{\langle ij \rangle} \mathbf{n}_i \mathbf{J} \mathbf{n}_j, \quad (16)$$

где сумма по  $\langle ij \rangle$  в (16) обозначает суммирование по всем парам ближайших соседей.

Как известно, модель однокомпонентного решеточного газа является полностью эквивалентной модели ферромагнетика Изинга со спином  $s=1/2$  [8]. Подобного рода аналогия может быть проведена и между двухкомпонентным решеточным газом и моделью Изинга со спином  $s=1$ . При этом узлу, занятому частицей сорта  $A$ , соответствует узел со спином, равным  $-1$ , узлу, занятому частицей сорта  $B$ , со спином, равным  $1$ , а вакантный узел соответствует узлу с нулевым спином. Вместе с тем необходимо отме-

туть, что для бинарного газа такая эквивалентность моделей не является полной, поскольку в модели Изинга со спином  $s=1$  узлы, имеющие одинаковые (ненулевые) значения спина, отталкиваются, а различные – притягиваются, причем интенсивность этих взаимодействий одинакова. Таким образом, бинарный решеточный газ оказывается более общей моделью и переходит в модель Изинга при наложении двух дополнительных условий: частицы одинаковых сортов отталкиваются, а различных – притягиваются, и интенсивность всех взаимодействий в системе одинакова.

## 2. Алгоритм моделирования решеточного газа по методу Монте-Карло

Как и в случае однокомпонентного решеточного газа [7], моделирование бинарного газа по методу Монте-Карло может быть проведено как в каноническом, так и в большом каноническом ансамблях. При изучении равновесных свойств системы с целью экономии машинного времени более предпочтительным оказывается моделирование в большом каноническом ансамбле, поскольку в этом случае выход на равновесное состояние происходит по экспоненциальному закону [9], в то время как в каноническом ансамбле – по степенному [10]. Независимыми параметрами, определяющими свойства модели, являются температура и химический потенциал каждого из компонентов, а число частиц на решетке изменяется в процессе эволюции системы из некоторого произвольного состояния в равновесное гибсовское состояние.

Как и для однокомпонентного газа, исходным состоянием может служить любое распределение частиц по решеточным узлам. Выбрав случайным образом  $i$ -й узел решетки, находящийся в состоянии  $n_i$ , необходимо изменить его состояние и определить соответствующее изменение энергии системы  $\delta H$ . Однако в отличие от однокомпонентного газа, где переход между различными состояниями решеточного узла мог быть осуществлен одним единственным образом (вакансия (частица)  $\rightarrow$  частица (вакансия)), в двухкомпонентном газе он может быть реализован двумя различными способами в соответствии с определением (14) вектора состояний узла. Поэтому перед изменением состояния решеточного узла необходимо произвести выбор направления этого перехода. В предлагаемом алгоритме выбор направления перехода производится случайным образом. Если изменение состояния решеточного узла приводит к понижению энергии системы, то оно принимается, если же энергия возрастает, то оно принимается с вероятностью  $\exp(-\beta\delta H)$ , где  $\beta=1/k_B T$  – обратная температура. Повторение указанной процедуры  $n$  раз, где  $n$  – суммарное число частиц в системе, формирует один шаг алгоритма Монте-Карло (МКШ). После выполнения заданного количества МКШ ( $\sim 10^4 \div 10^5$ ) искомая макроскопическая характеристика может быть найдена усреднением соответствующей микроскопической величины по реализациям системы в процессе моделирования. При этом некоторое начальное число МКШ отводится для процесса эквilibризации системы и не учитывается при усреднении.

Для доказательства того, что данный алгоритм приводит систему к состоянию гибсовского равновесия, рассмотрим ансамбль решеточных систем. Состояние каждой системы ансамбля может быть описано заданием вектора состояния системы  $\mathbf{x}$ :

$$\mathbf{x} = (\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2, \dots, \mathbf{n}_N), \quad (17)$$

где  $N$  – число узлов в решетке.

Предположим, что  $N_v$  систем ансамбля находятся в состоянии  $\mathbf{x}_v$ , а  $N_\mu$  систем – в состоянии  $\mathbf{x}_\mu$ , причем  $H_N(\mathbf{x}_\mu) > H_N(\mathbf{x}_v)$ . При выборе вероятности переходов  $\mathbf{x}_v \leftrightarrow \mathbf{x}_\mu$  в описанном выше виде число переходов из состояния  $\mathbf{x}_v$  в состояние  $\mathbf{x}_\mu$  определяется как

$$N_{\nu \rightarrow \mu} = N_{\nu} W_{\nu\mu} W(\mathbf{x}_{\nu} \rightarrow \mathbf{x}_{\mu}) = N_{\nu} \exp \left[ -\frac{H_N(\mathbf{x}_{\mu}) - H_N(\mathbf{x}_{\nu})}{k_B T} \right], \quad (18)$$

а число обратных переходов  $\mathbf{x}_{\mu} \rightarrow \mathbf{x}_{\nu}$  равно

$$N_{\mu \rightarrow \nu} = N_{\mu} W_{\mu\nu} W(\mathbf{x}_{\mu} \rightarrow \mathbf{x}_{\nu}) = N_{\mu} W_{\mu\nu}, \quad (19)$$

где  $W_{\nu\mu} = W_{\mu\nu} = 0.5$  – априорная вероятность направления переходов  $\mathbf{x}_{\nu} \leftrightarrow \mathbf{x}_{\mu}$ .

Суммарное число переходов  $\Delta N_{\nu \rightarrow \mu} = N_{\nu \rightarrow \mu} - N_{\mu \rightarrow \nu}$  равно

$$\Delta N_{\nu \rightarrow \mu} = N_{\nu} W_{\nu\mu} \left[ \frac{\exp(-H_N(\mathbf{n}_{\mu})/k_B T)}{\exp(-H_N(\mathbf{n}_{\nu})/k_B T)} - \frac{N_{\mu}}{N_{\nu}} \right]. \quad (20)$$

При  $N_{\mu}/N_{\nu}$  меньшем канонического значения,  $\Delta N_{\nu \rightarrow \mu} > 0$  и, следовательно,  $N_{\mu}/N_{\nu}$  возрастает, в то время как при значениях  $N_{\mu}/N_{\nu}$  больших канонического,  $\Delta N_{\nu \rightarrow \mu} < 0$  и  $N_{\mu}/N_{\nu}$  убывает. Устойчивое состояние  $\Delta N_{\nu \rightarrow \mu} = 0$  наступает только в случае, когда  $N_{\mu}/N_{\nu}$  в точности равно каноническому значению. Это позволяет сделать вывод о том, что предложенный выбор вероятности обеспечивает сходимость марковского процесса к равновесному каноническому распределению.

### 3. Результаты моделирования и их обсуждение

В качестве примера было рассмотрено моделирование двухкомпонентного решеточного газа с отталкиванием между ближайшими соседями на плоской квадратной решетке, содержащей  $64 \times 64 = 4096$  узлов с периодическими граничными условиями. Энергию взаимодействия частиц сорта  $A$  примем равной энергии взаимодействия однокомпонентного решеточного газа с взаимодействием ближайших соседей  $J_{AA} = J$ , где  $k_B T_c / J = -0.567$ ,  $T_c$  – критическая температура однокомпонентного решеточного газа на квадратной решетке,  $J_{BB} = 1.44 J_{AA}$  и  $J_{AB} = (J_{AA} \times J_{AA})^{0.5} = 1.2 J_{AA}$  при  $t = T/T_c = 0.5$ ,  $\mu_A / k_B T_c = -7.0508$ ,  $\mu_B / k_B T_c = -17.0508$ .

Проведенное моделирование показало, что система быстро избавляется от "лишних" частиц и фактически достигает равновесного значения за 30 МКШ. Помимо этого, процесс кластеризации в системе протекает также достаточно быстро. Уже через 20 шагов можно наблюдать ярко выраженную сгруппированность частиц сорта  $A$  в островки, а к сотому шагу практически все эти островки группируются в "материки". Дальнейшая эволюция системы затрагивает лишь вид береговой линии этих материков, стремясь сократить ее до минимума. Если сравнить между собой 5000 и 25000 МКШ, то можно отметить, что различия между двумя снимками практически отсутствуют и наблюдается четкое разделение системы на две фазы, причем концентрация частиц сорта  $B$  так мала, что можно говорить о практически однокомпонентном решеточном газе. Это позволяет утверждать, что к 5000 шагу процесс эквипризации в системе завершен и может проводиться статистическое усреднение измеряемых в процессе моделирования величин.

К числу таких величин относится, например, концентрация частиц в системе и парные корреляционные функции. На рис. 1 представлена зависимость химического потенциала компонента  $B$  от парциальной концентрации этого компонента при различных температурах. Для моделирования системы было выполнено 25000 МКШ, из которых первые 5000 отводились для процесса эквипризации, а химический потенциал компонента  $A$  выбирался равным  $\mu_A / k_B T_c = -3.5254$  для всех кривых.

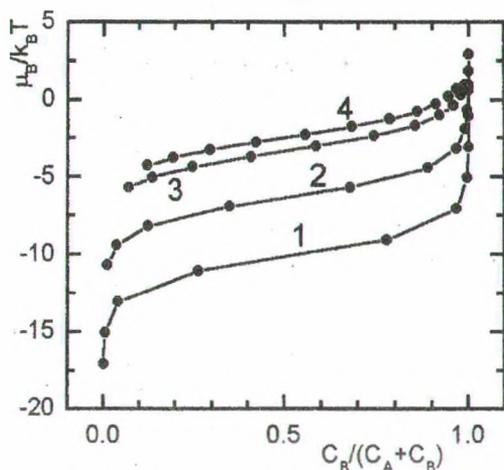


Рис. 1. Зависимость химического потенциала компонента  $B$  от парциальной концентрации этого компонента, полученная в результате моделирования решеточной системы по методу Монте-Карло.  $t = 0.5$  (кривая 1);  $0.8$  (2);  $1.5$  (3);  $2.0$  (4).  $\mu_A/k_B T_c = -3.5254$

Зависимости парных функций распределения от парциальной концентрации при тех же температурах и том же химическом потенциале компоненты  $B$  приведены на рис. 2. Необходимо отметить, что эти функции могут быть определены и при моделировании бинарного решеточного газа в каноническом ансамбле. Как уже отмечалось, алгоритм такого моделирования не отличается от случая однокомпонентного решеточного газа и позволяет получать значения корреляционных функций при фиксированных значениях концентрации частиц, а не химических потенциалов. Сопоставление результатов для корреляционных функций, полученных двумя этими методами и соответствующих одинаковым значениям концентраций частиц, показало, что эти результаты являются практически идентичными.

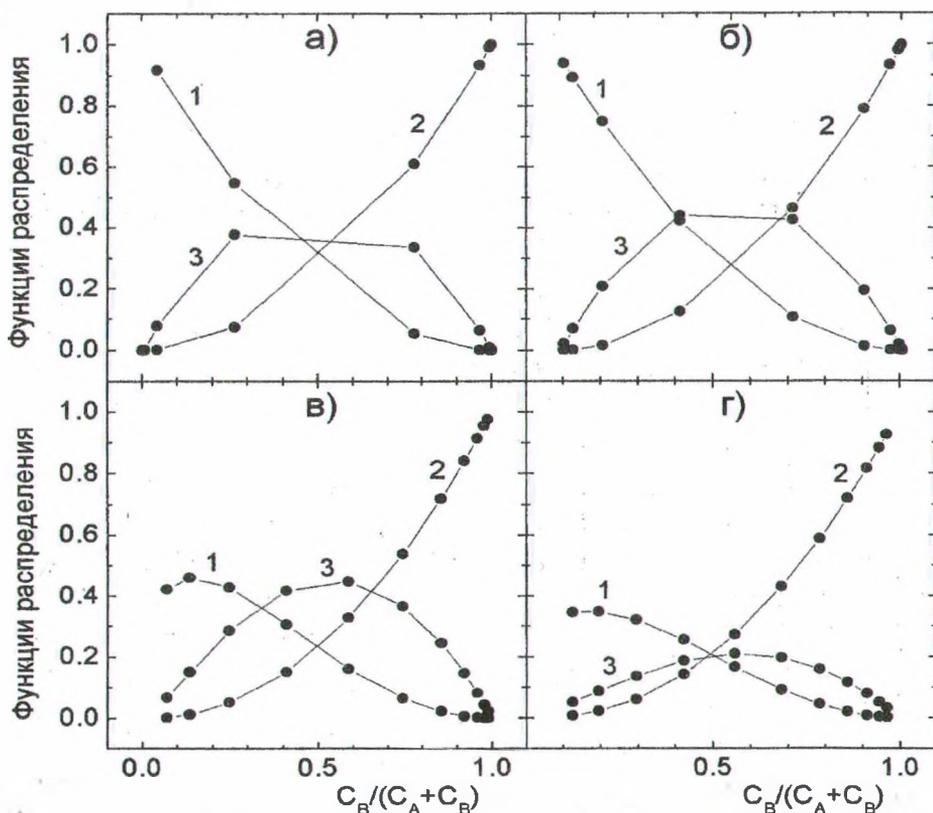


Рис. 2. Зависимости парных функций распределения  $g_{AA}$  (кривые 1),  $g_{BB}$  (2) и  $g_{AB}$  (3) от парциальной концентрации компонента  $B$ , полученные в результате моделирования решеточной системы по методу Монте-Карло.  $t = 0.5$  (а);  $0.8$  (б);  $1.5$  (в);  $2.0$  (г).  $\mu_A/k_B T_c = -3.5254$

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.