УДК 531.19

Я. Г. Грода, Э. Э. Бильданов

ПАРАМЕТР ПОРЯДКА И КРИТИЧЕСКИЙ ПАРАММЕТР РЕШЕТОЧНОГО ФЛЮИДА С SALR-ПОТЕНЦИАЛОМ НА ПЛОСКОЙ КВАДРАТНОЙ РЕШЕТКЕ

Учреждение образования «Белорусский государственный технологический университет», ул. Свердлова, 13а, 220006 Минск, Беларусь
groda@belstu.by
el95dar@icloud.com

В настоящее время наблюдается большой интерес к изучению процессов самоорганизации и самосборки в сложных системах. Примерами таких систем являются различные растворы белковых молекул, глины и грунтовые взвеси. Взаимодействие между их составными элементами носит весьма сложный характер, и часто имеет вид SALR-потенциала, т. е. притяжения на близких расстояниях и отталкивания на более далеких (Short-range Attraction Long-range Repulsion). В этом случае притяжение обеспечивает разделение фаз, а отталкивание – формирование кластеров.

Рассмотрение SALR-систем целесообразно начать с решеточных моделей, допускающих исследование как аналитическими методами, так и в рамках компьютерного моделирования по методу Монте-Карло. В частности, в работе [1] был рассмотрен решеточный флюид с притяжением ближайших соседей и отталкиванием третьих на плоской треугольной решетке. Были исследованы возможные конфигурации ансамбля частиц флюида при $T = 0$, предложено приближение среднего поля, в рамках которого построена фазовая диаграмма системы. В дальнейшем методами компьютерного моделирования авторами было установлено существование в системе двух ламелярных фаз.

В настоящей работе представлены результаты исследования методами компьютерного моделирования аналогичной модели на квадратной решетке: рассмотрены виды образующихся в ней упорядоченных фаз, предложен параметр порядка и определен критический параметр модели.

Моделирование равновесных характеристик рассматриваемой системы по методу Монте-Карло было выполнено в рамках стандартного алгоритма Метрополиса, применение которого к изучаемой системы подробно описано в работе [2].

При моделировании использовалась решетка, содержащая 2^{14} решеточных узлов в сочетании с периодическими граничными условиями. Полная длина процедуры моделирования состояла из 70 000 шагов алгоритма Монте-Карло (МКШ). При этом первые 20 000 МКШ отводились на процесс эквилибризации и не учитывались при дальнейшем усреднении.

По аналогии с работой [1] принималось, что $J_3/|J_1| = 3$, где J_1 и J_3 энергия взаимодействия частиц, занимающих ближайшие решеточные узлы и узлы, являющиеся соседями 3-го порядка, соответственно. При этом полагалось, что $J_1 < 0$, а $J_3 > 0$, что соответствует притяжению ближайших соседей и отталкиванию третьих.

Предварительное моделирование на решетке, содержащей 2^{10} решеточных узлов, показало, что при достаточно низких температурах, и, соответственно, высоких значениях параметра взаимодействия $|J_1|/k_BT$, в зависимости от заданного значения химического потенциала μ и выбранного значения параметра взаимодействия в системе образуются упорядоченные фазы двух различных типов. Виды этих фаз представлены на рис. 1.

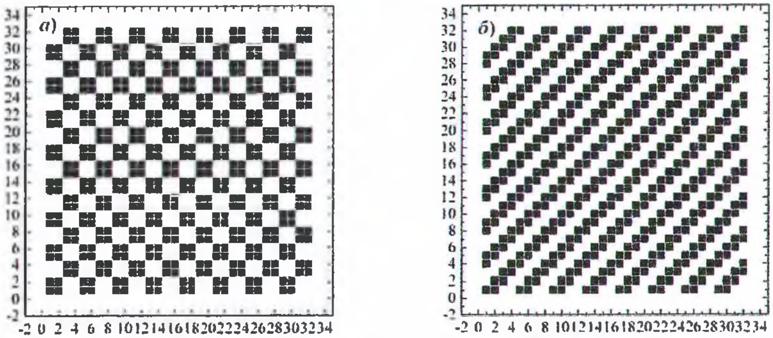

Рис. 1. Упорядоченные фазы решеточного флюида при $\mu = 4|J_1|$ и $|J_1|/k_BT = 2.0$ (*а*) и 3.0 (*б*)

Для описания обеих упорядоченных фаз может быть осуществлено разбиение исходной квадратной решетки на систему 8 идентичных подрешеток с постоянной $2a\sqrt{2}$, где a – решеточная постоянная исходной решетки. В случае полной упорядоченности системы при концентрации решеточного флюида c равной 0.5 четыре подрешетки оказываются полностью заполненными, а четыре – полностью вакантными. Это позволяет определить параметр порядка системы δc как разность максимальной и минимальной концентраций на подрешетках.

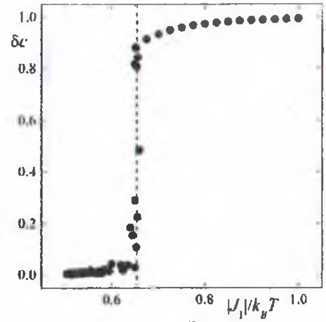

Рис. 2. Зависимость параметра порядка от параметра взаимодействия при $\mu = 4|J_1|$

На рис. 2 представлена зависимость введенного параметра порядка от параметра взаимодействия при $\mu = 4|J_1|$, что соответствует концентрации $c = 0.5$. Анализ данной зависимости позволяет утверждать, что критический параметр системы $|J_1|/k_BT_c$ равен 0.655±0.005.

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

[1] Pekalski, J. Periodic ordering of clusters and stripes in a two-dimensional lattice model. I. Ground state, mean-field phase diagram and structure of the disordered phases / J. Pekalski, A. Ciach, N. G. Almarza // J. Chem. Phys. – 2014. – Vol. 140. – art. no. 114701 (11 p.).

[3] Грода, Я. Г. Обобщенное квазихимическое приближение для решеточной системы с SALR-потенциалом / Я. Г. Грода, Э. Э. Бильданов, В. С. Вихренко // Труды БГТУ. – 2017. – № 1 (194). – С. 14-20.