ВЛИЯНИЕ РАЗМЕРНОСТИ И ГЕОМЕТРИИ РЕШЕТКИ НА ДИФФУЗИОННЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ РЕШЕТОЧНОГО ФЛЮИДА С ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ В СЕДЛОВОЙ ТОЧКЕ.

Грода Я.Г., Вихренко В.С.

Белорусский государственный технологический университет, г. Минск, Беларусь.

Рассматриваемая в работе модель представляет собой систему из n частиц, расположенных в узлах регулярных плоских квадратной или треугольной, или простой кубической решеток, содержащих N узлов. Каждый узел может быть занят частицей, либо быть вакантным. Состояние узла i определяется числом заполнения $n_i = 1$ или $n_i = 0$ в зависимости от того, занят узел частицей или вакантен. Заполнение узла более чем одной частицей запрещено.

Находящаяся в некотором узле частица может взаимодействовать с энергией J с частицами, занимающими ближайшие соседние узлы. При ее переходе в один из ближайших вакантных узлов при прохождении седловой точки она также взаимодействует с узлами, являющимися ближайшими соседями к этой седловой точке. Энергия взаимодействия в данном случае принимается равной J_Σ.

В рамках общей теории диффузионных процессов в решеточных системах и суперпозиционного приближения, при котором корреляции в заполнении решеточных узлов определяются только парными корреляциями для ближайших соседей, получены приближенные выражения при $J=J_\Sigma$ для кинетических коэффициентов диффузии решеточного флюида на квадратной, треугольной и кубической решетках, соответственно

$$D_J / D_0 = (1-\theta g)(1+\gamma\theta g)^2(1+\sigma\theta g) + 2\xi\theta\left(1-\theta g^2\right)(1+\sigma\theta g)\times$$

$$\times[1+\gamma^2\theta^2 g^3 + \gamma\theta g(g+1)] + \xi^2\theta^2\left(1-\theta g^3\right)\left(1+\gamma\theta g^2\right)^2(1+\sigma\theta g),$$

$$D_J / D_0 = (1-\theta g)\left[(1+\sigma\theta g)^2 + \sigma\theta g\left(1+\sigma\theta g^2\right)^2\right] + 2\gamma g\theta\left(1-\theta g^2\right)\left(1+\sigma\theta g^2\right)\times$$

$$\times\left[1+2\sigma\theta g+\sigma^2\theta^2 g^4\right] + \gamma^2\theta^2 g^2\left(1-\theta g^3\right)\left[\left(1+\sigma\theta g^2\right)^2 + \sigma\theta g\left(1+\sigma\theta g^3\right)^2\right],$$

$$D_J / D_0 = (1+\theta g\sigma)\left[(1-\theta g) + 4\theta\xi\left(1-\theta g^2\right) + 6\theta^2\xi^2\left(1-\theta g^3\right) + \right.$$

$$\left. +4\theta^3\xi^3\left(1-\theta g^4\right) + 6\theta^4\xi^4\left(1-\theta g^5\right)\right],$$

где

$$\sigma = \exp(\beta J) - 1, \quad \gamma = \exp(\beta\Delta) - 1, \quad , \quad \xi = \exp(-\beta J_\Sigma) - 1, \quad \Delta = J - J_\Sigma,$$

D_0 – коэффициент диффузии решеточного флюида в пределе низких концентраций; $\beta = 1/k_B T$ – обратная температура; k_B – постоянная Больцмана; T – температура; θ – равновесное значение концентрации частиц; g – парная корреляционная функция двух ближайших соседних узлов, которая может быть найдена, например, в рамках диаграммного приближения.

Сопоставление с результатами компьютерного моделирования по методу Монте-Карло показало, что предлагаемый подход к определению кинетического коэффициента диффузии позволяет получать адекватное качественное описание транспортных процессов в решеточном флюиде, а при не очень низких температурах приводит и к верным количественным результатам.