

РЕФЕРАТ

Отчет 40 с., 1 ч., 22 рис., 36 источн.

РЕШЕТОЧНЫЙ ФЛЮИД, ДВУХУРОВНЕВАЯ РЕШЕТКА, ТРЕУГОЛЬНАЯ РЕШЕТКА, АЛГОРИТМ МОНТЕ-КАРЛО, ПАРАМЕТР ПОРЯДКА, ФАЗОВАЯ ДИАГРАММА, КВАЗИХИМИЧЕСКОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ, ДИАГРАММНОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ, КИНЕТИЧЕСКИЙ КОЭФФИЦИЕНТ ДИФфуЗИИ.

Объектом исследования служат различные типы двухуровневых решеточных систем, моделирующих процессы самоорганизации и самосборки в физических системах с энергетически неэквивалентными узлами. Их термодинамические, структурные и транспортные характеристики, а также методы исследования определяют предмет исследования.

Целью исследования является разработка аналитических методов изучения, алгоритмов моделирования и исследование с их помощью равновесных и диффузионных свойств решеточного флюида на двухуровневой решетке.

В процессе работы использовались методы равновесной и неравновесной статистической механики, компьютерного моделирования.

При выполнении работы получены следующие результаты:

На базе плоской треугольной решетки предложена модель двухуровневого решеточного флюида на непрямоугольной решетке;

Для определения термодинамических и структурных свойств предложенной модели развиты квазихимическое и диаграммное приближения;

Разработаны алгоритмы и выполнено моделирование по методу Монте-Карло равновесных свойств двухуровневого решеточного флюида с взаимодействием ближайших соседей;

Исследовано влияние концентрации примесных частиц, характера и интенсивности межчастичного взаимодействия на равновесные свойства решеточного флюида на двухуровневой решетке. Результаты развитых аналитических приближений сопоставлены с данными моделирования;

Исследованы диффузионные особенности исследуемой модели. Предложено аналитическое соотношение для оценки кинетического коэффициента диффузии. Исследовано влияние концентрации примесных частиц, температуры и характера межчастичных взаимодействий на транспортные характеристики модели.

ВВЕДЕНИЕ

Модель решеточного газа или решеточного флюида широко используется при описании процессов, протекающих на поверхностях и в объемах твердых тел [1], а также при изучении различных электрохимических систем [2-6].

Суть данной модели состоит в декомпозиции исходной физической системы на две пространственные взаимопроникающие подсистемы, одна из которых достаточно жестко структурирована и играет роль опорной, тогда как частицы второй сохраняют высокую подвижность. Фактически, частицы второй подсистемы движутся в силовом поле, создаваемом опорной подсистемой. При этом предполагается, что данное силовое поле не зависит от распределения подвижных частиц. Таким образом, можно утверждать, что опорная подсистема создает для подвижных частиц потенциальный пространственно-периодический рельеф, в котором существуют достаточно глубокие минимумы потенциальной энергии, образующие ту или иную периодическую решетку.

Еще одним условием возможности применения модели решеточного флюида для описания реальной физической системы является наличие в системе двух существенно отличающихся временных масштабов. Первый из которых, τ_1 , определяется средним временем нахождения подвижной частицы в указанном выше минимуме потенциальной энергии, а второй τ_2 определяется периодом колебаний подвижной частицы вблизи данного положения. При этом для указанных временных масштабов справедливо

$$\tau_1 \gg \tau_2 \quad (1)$$

Выполнение указанных выше условий, стабильности опорной системы и наличия двух существенно различающихся временных масштабов, позволяет ограничиться рассмотрением лишь подсистемы подвижных частиц, а характеристики потенциального рельефа можно рассматривать как исходные параметры модели, полагая их заданными.

Указанные выше минимумы потенциальной энергии выступают в качестве узлов решетки, каждый из которых может быть либо занят частицей, и только одной, либо быть вакантным. При рассмотрении системы заряженных частиц, занимающих решеточные узлы, число возможных состояний каждого решеточного узла очевидным образом увеличивается [7].

Одним из вариантов развития решеточных моделей является переход к моделям решетки с энергетически неэквивалентными решеточными узлами. Например, может быть рассмотрена т.н. двухуровневая система, в которой присутствуют узлы двух разных типов.

Ранее в литературе были представлены несколько версий двухуровневых моделей решеточного флюида [3-5, 8-12]. Так, например, были предложены модели [3, 4, 8, 10] со случайным распределением энергетически более глубоких и менее глубоких узлов, а также модели [6, 9, 11, 12], в которых узлы различных типов образуют некие симметричные структуры. В последнем случае было показано [6], что модель решеточного флюида на двумерной двухуровневой решетке может быть использована для исследования слоистых интеркаляционных

соединений, например, графита интеркалированного ионами лития.

В работе [13] решеточный флюид на плоской прямоугольной двухуровневой решетке был исследован с помощью декорационно-итерационного преобразования, которое позволило свести задачу к рассмотрению решеточного газа на плоской однородной квадратной решетке и провести исследование вида фазовой диаграммы. Другие равновесные [12, 13] и диффузионные [14-21] свойства изучались с помощью компьютерного моделирования системы по методу Монте-Карло. Также можно отметить, что для определения равновесных свойств данной системы был развит ряд приближенных методов относящихся к классу методов среднего поля [22]. В рамках построенных приближенных подходов были исследованы термодинамические, структурные и транспортные свойства систем с отталкиванием и притяжением ближайших соседей [23] на квадратной решетке.