

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ И СТРУКТУРНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ДВУХКОМПОНЕНТНОГО РЕШЕТОЧНОГО ГАЗА

В.С. Вихренко, Д.В. Гапанюк, Я.Г. Грода

Белорусский государственный технологический университет,
Республика Беларусь, 220050, г. Минск, ул. Свердлова 13а
Тел.: +375-17-227-30-35, e-mail: vvikhre@bstu.unibel.by

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 тоже время достаточно простыми для решения конкретных задач. К числу таких моделей относятся решеточные системы.

Простейшая модель однокомпонентного решеточного газа с взаимодействием ближайших соседей (или модель Изинга со спином 1/2) позволяет описывать фазовые переходы первого и второго рода. Для описания систем фазовых переходов необходимо использование более сложных решеточных моделей. Одним из примеров таких моделей является многокомпонентный, в частности, двухкомпонентный решеточный газ с взаимодействием ближайших соседей.

Наиболее общим методом изучения как равновесных, так и неравновесных свойств решеточных систем является компьютерное моделирование по методу Монте Карло. В работе рассматривается модернизация классического алгоритма Метрополиса на случай многокомпонентных решеточных систем. Такая модернизация оказывается необходимой с силу того, что в отличие от однокомпонентного решеточного газа, в котором каждый решеточный узел может находиться лишь в двух возможных состояниях, в двухкомпонентной системе число возможных состояний равно трем. Это влечет необходимость дополнительного выбора направления изменения состояния решеточного узла. Показано, что такой выбор может быть осуществлен случайным образом.

В качестве примера рассмотрено моделирование двухкомпонентного решеточного газа с взаимодействием ближайших соседей на плоской квадратной решетке, содержащей $64 \times 64 = 4096$ узлов с периодическими граничными условиями. Моделирование равновесных характеристик проведено в большом каноническом ансамбле, т.е. при заданных значениях параметров взаимодействия и химических потенциалов.

Детальный пошаговый анализ процесса моделирования при температуре ниже критической показал, что при произвольном начальном состоянии моделируемая система достаточно быстро стремится к термодинамически равновесному состоянию. При моделировании системы с межчастичным притяжением уже через 20 шагов алгоритма (МКШ) можно наблюдать ярко выраженную сгруппированность частиц одного сорта в "островки", а к сотому шагу практически все эти островки группируются в "материки". Дальнейшая эволюция системы затрагивает лишь вид "береговой линии" этих "материки" стремясь сократить ее до минимума. Если сравнить 5000 и 25000 МКШ, то можно отметить, что различия во взаимном распределении частиц практически отсутствуют. 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 относятся, например, средние концентрации частиц различных сортов, термодинамические факторы, а также парные корреляционные функции, отражающие структурные характеристики системы.