

Кореляційна функція флуктуацій густини граткового газу у фазі $c(2 \times 2)$

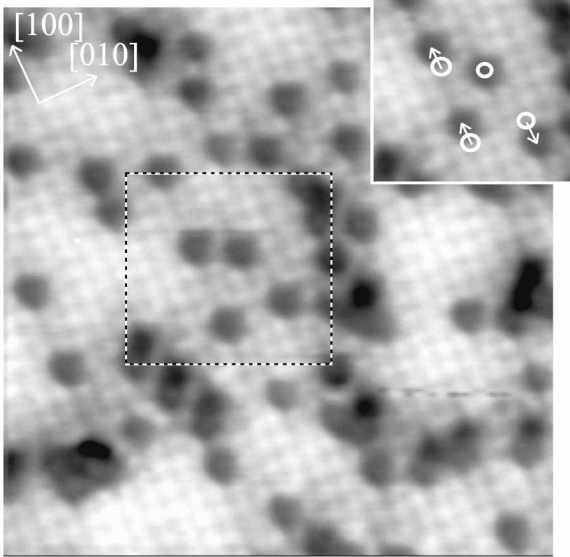


Рис. 1: СТМ зображення:
Дифузія атомів азоту на по-
верхні Fe(100) ($\Delta t = 64$ с)
— М. Pedersen *et al.*, Phys.
Rev. Let. 84, 4898 (2000)

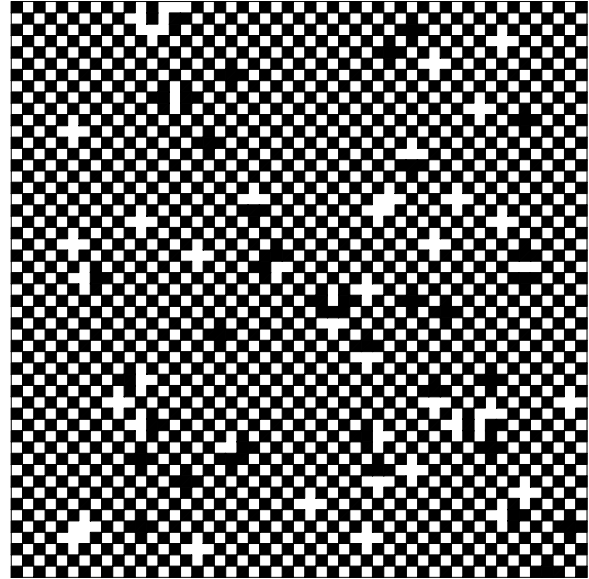


Рис. 2: Комп'ютерне моделюван-
ня: Гратковий газ із відштовху-
ванням між найближчими сусіда-
ми у фазі $c(2 \times 2)$ при половинно-
му покритті і $T = 0.8 T_c$

Співавтори: О. Чумак — генераційно-рекомбінаційний механізм;
Р. Argyrakis, М. Maragakis (Греція) — комп'ютерне моделювання.

Предмет дослідження: Кінетичні явища у двовимірному гра-
тковому газі з відштовхуванням між найближчими сусідами у фа-
зі $c(2 \times 2)$ (“антиферромагнетик”) в умовах малої концентрації стру-
ктурних дефектів. Зокрема, досліджується кореляційна функція

$$S_L(t) = \frac{1}{L^2} \langle \delta N(t) \delta N(0) \rangle \equiv \frac{1}{L^2} \sum_{x,y} \langle \delta n_x(t) \delta n_y(0) \rangle \quad (1)$$

флуктуацій числа частинок у виділеній площадці $L \times L$.

* **PACS:** 05.50.+q (Lattice theory), 68.43.De (Stat. mechanics of adsorbates)

Практичні аспекти роботи

Реальні системи, яким відповідає розглядувана модель:

Фаза $c(2 \times 2)$ зустрічається при адсорбції на поверхню (100) ГЦК ґратки. Якщо при цьому атоми адсорбату хімічно пасивні і мають малі розміри порівняно з атомами поверхні, можна очікувати якісну адекватність розглядуваної моделі. Наприклад, Н на Pd — В. П. Жданов, К. И. Замараев, УФН 149, 635 (1986).

Необхідність переходу до кінетичного опису:

Сучасні методики проведення експерименту дозволяють досліджувати поверхню в масштабах стрибків окремих атомів, де дифузійне наближення незастосовне.

Де можна використати знайдену кореляційну функцію:

- Одним з методів дослідження адсорбатів є вивчення флуктуацій струму в ПЕМ чи СТМ — R. Gomer, Rep. Prog. Phys. 53, 917 (1990); J. Vebem, Y. Suchorski, Prog. Surf. Sci. 74, 3 (2003).
- Інший метод дозволяє дослідити динамічний структурний фактор $S_L(t, k) = L^{-2} \sum_{x,y} \langle \delta n_x(t) \delta n_y(0) \rangle e^{-ik(x-y)}$ по дифракції електронів малих енергій (LEED) — E. H. Conrad et al., Phys. Rev. Lett. 81, 3175 (1998).

Історія проблеми

- Гратковий газ = Модель Ізінга зі зберігаючою спін динамікою.
- Статичні властивості прекрасно вивчені, зокрема $\langle \prod_x n_x \rangle!$
- Основоположні роботи по кінетиці: R. J. Glauber, J. Math. Phys. 4, 294 (1963); K. Kawasaki, Phys. Rev. 145, 224 (1966); S. P. Neims, Phys. Rev. 138, A587 (1965).
- Немає ефективної кінетичної теорії граткового газу аналогічної ланцюжку ББГКІ для класичного газу.
- Основні підходи: чисельне моделювання, методи масштабної інваріантності в околі критичної точки, “гідродинамічне” наближення та інші спецметоди.

Сучасний стан проблеми

- О. Чумак — “гідродинамічне” наближення.
- M. A. Zaluska-Kotur, Z. W. Gortel (2005) — “варіаційний” підхід.
- В. С. Віхренко (2003), О. Тарасенко (2000) — кінетичні коефіцієнти через рівноважні величини.
- Комп’ютерне моделювання: P. Argyrakis, C. Uebing, ...
- Неконструктивні математичні результати (J. Stat. Phys.)
- Кінетика адсорбованих атомів: А. Г. Наумовець, І. М. Яковкін, M. C. Tringides, ...

Основні результати роботи

- Знайдено двоточкову двочасову кореляційну функцію $\langle \delta n_x(t) \delta n_y(0) \rangle$ граткового газу у фазі $c(2 \times 2)$ в наближенні малої концентрації структурних дефектів оригінальним методом, який є узагальненням методики низькотемпературного розкладу на кінетичні процеси.
- Досліджено кореляційну функцію флуктуацій числа частинок у виділеній області $\langle \delta N(t) \delta N(0) \rangle$ з огляду на кінетичні процеси, що визначають її.

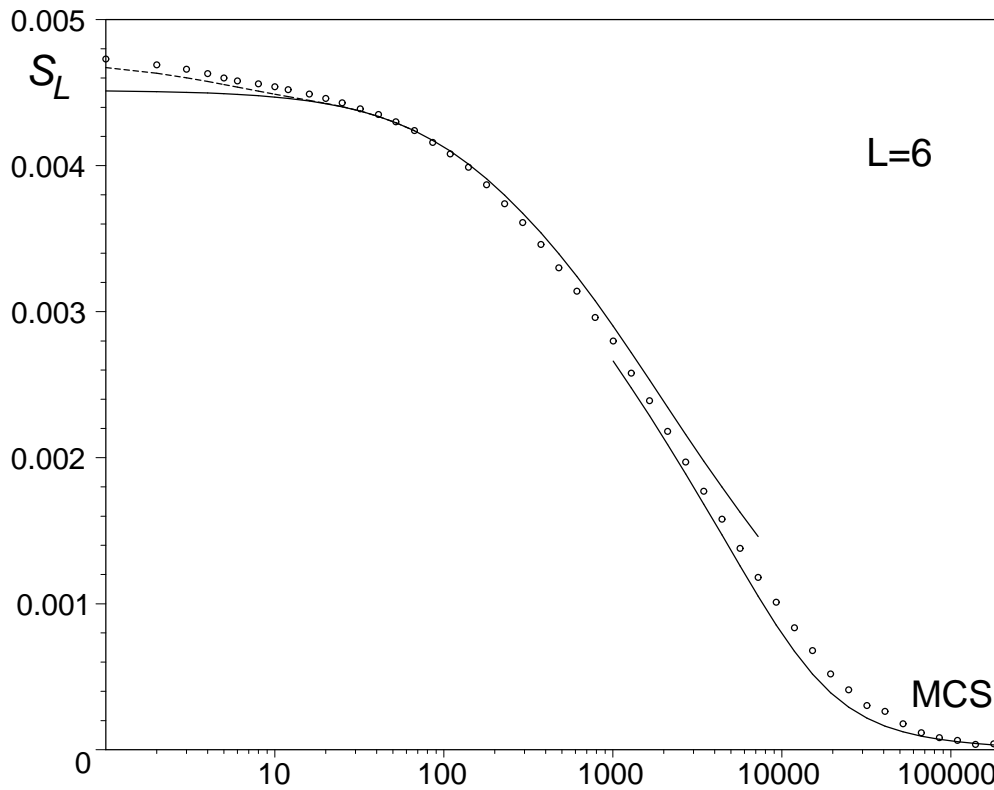


Рис. 3: Кореляційна функція флуктуацій $S_L(t) = L^{-2} \langle \delta N(t) \delta N(0) \rangle$ при половинному заповненні ($\theta = 0.5$) і температурі $0.65 T_c$ ($\phi = 2.70$).

(1) – колективна дифузія, (2) – генераційно-рекомбінаційні процеси, (3) – кінетика стрибків дефектів, (4) – розклад стрибків дефектів на елементарні переміщення частинок + розмаїття короткоживучих конфігурацій, (5) – “фліп-флоп” пари.

Специфікація системи

Система:

- Квадратна гратка $L_0 \times L_0$ з періодичними межевими умовами
- Пару граткових координат позначаємо одною буквою: $x = (x_1, x_2)$
- Дві частинки не можуть займати одну позицію
- Взаємодія частинок зводиться до відштовхування між найближчими сусідами

$$\beta H = \frac{1}{2} \sum_{x,e} \phi n_x n_{x+e}, \quad (2)$$

де $\beta = T^{-1}$, $\phi > 0$ – безрозмірний параметр взаємодії, n_x – число частинок у вузлі x , e означає вектор одиничної довжини (тобто сума по найближчим сусідам)

Маємо два параметри: ϕ і θ (середня концентрація частинок). Система перебуває в таких умовах:

- температура нижче критичної, тобто $\phi > \phi_c \approx 1.76$ так що $q = e^{-\phi}$ – малий параметр.
- θ близьке до $1/2$ так що $s(2 \times 2)$ фаза чітко виражена
- система перебуває в стані термодинамічної рівноваги (і немає доменних стінок)

Динаміка:

- “Single-particle-jump approximation”
- Одиниця часу вибрана так, що кінетичне рівняння для однієї частинки має вигляд $\dot{p}_x = -4p_x + \sum_e p_{x+e}$
- Інтенсивність переходів з даного вузла дорівнює $e^{k\phi}$, де k – число найближчих сусідів (надбар’єрні переходи)

“Фотографії” системи

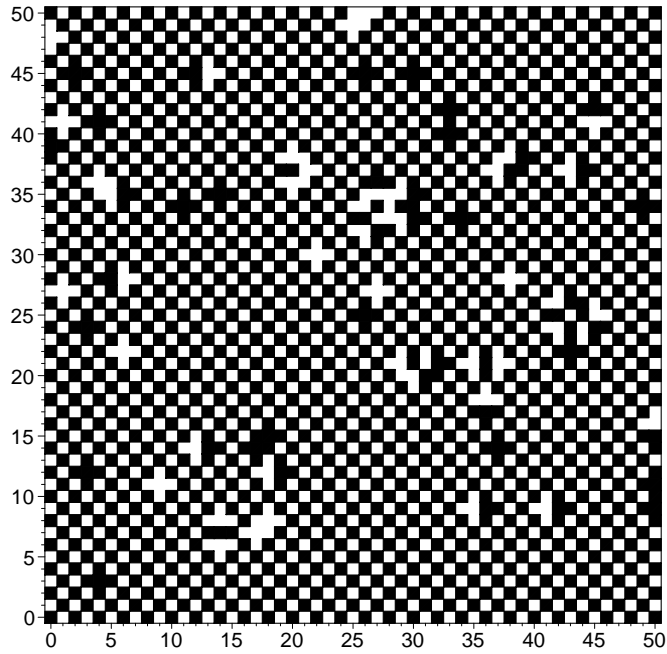


Рис. 4: “Фотографія” системи для $\phi = 2.0$ ($T = 0.8 T_c$) і $\theta = 0.5$.

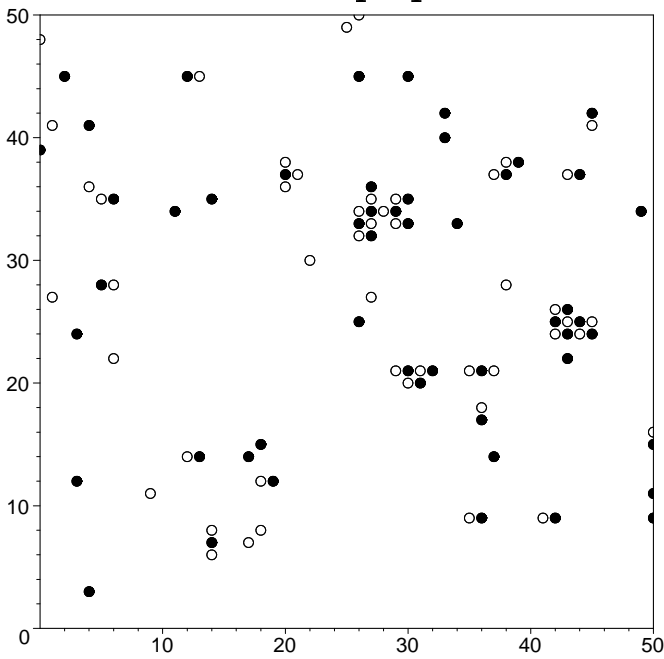


Рис. 5: Тільки дефекти

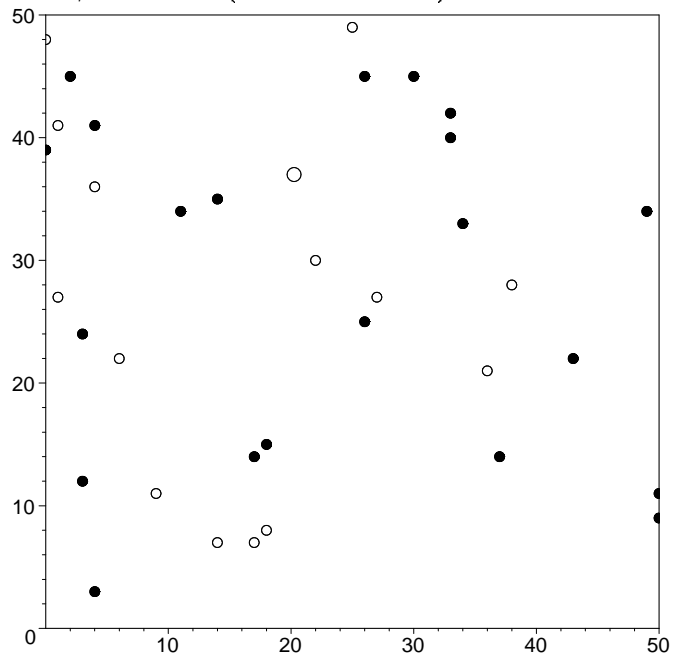
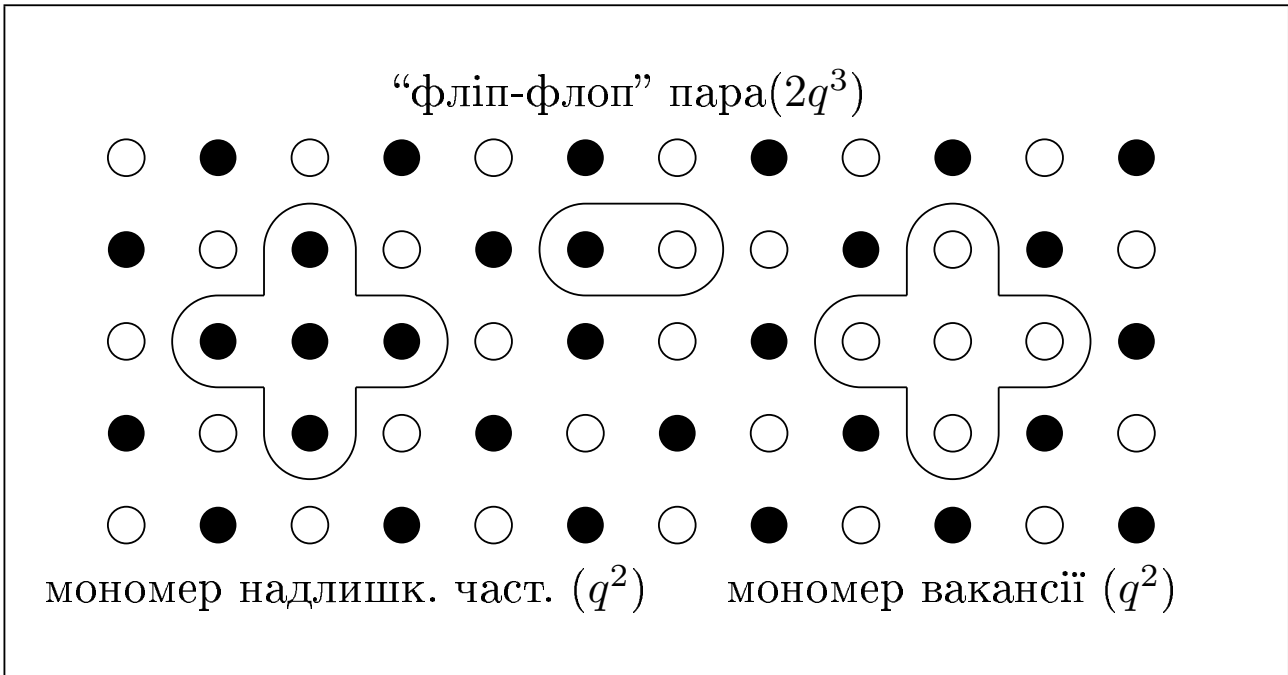


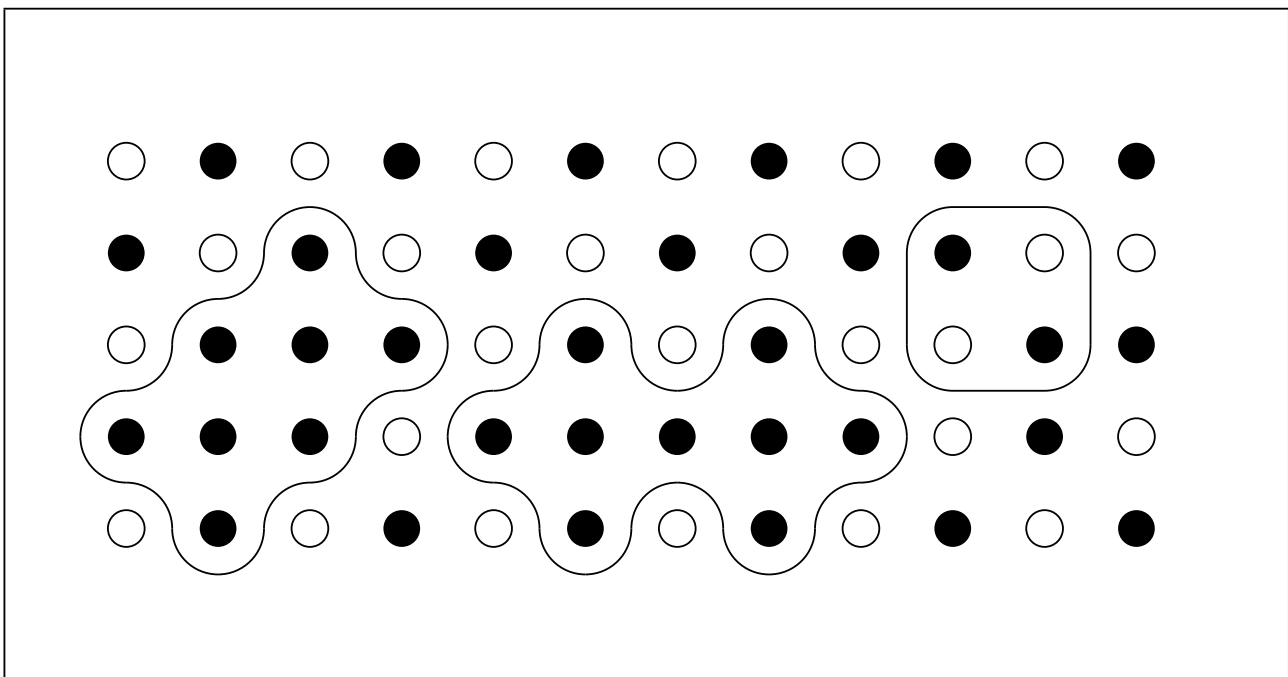
Рис. 6: Топологічні заряди

Структурні дефекти

1) Дефекти, які розрізняються на рівні концентрації q^3 :



2) Дефекти, які розрізняються на рівні концентрації q^4 : ізольовані мономери, бічний і кутовий димери, перехідні конфігурації руху мономерів, ізольовані і подвійні “фліп-флоп” пари



Кінетичне рівняння для мономерів

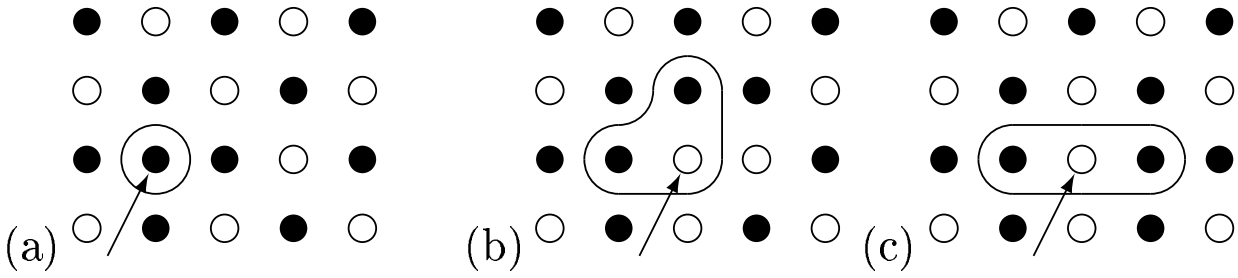


Рис. 7: Істотні конфігурації для мономера надлишкової частинки: а) мономер (p_α); б,с) перехідні стани ($p_\sigma^{ee'}$ and $p_\sigma^{e,-e}$). Центрування вказане стрілкою. Дефектні вузли обведені.

Кінетичне рівняння для мономера надлишкової частинки (розмірність ґратки d вказана явно для наочності):

$$\begin{cases} \dot{p}_\alpha = -2d(2d-1)q^{-1}p_\alpha + q^{1-2d} \sum_{e \neq e'} p_{\alpha-e}^{ee'}, \\ \dot{p}_\sigma^{ee'} = -2q^{1-2d} p_\sigma^{ee'} + q^{-1}(p_{\sigma+e} + p_{\sigma+e'}), \quad e' \neq e. \end{cases} \quad (3)$$

Кінетичне рівняння для “фліп-флоп” пари

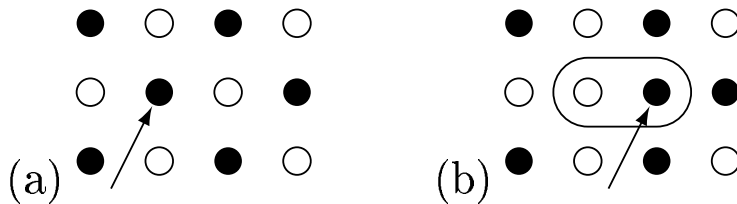


Рис. 8: Істотні конфігурації ((а) – p_0 , (б) – p_e)

Кінетичне рівняння:

$$\begin{cases} \dot{p}_0 = -2dp_0 + q^{1-2d}p_e, \\ \dot{p}_e = -q^{1-2d}p_e + p_0. \end{cases} \quad (4)$$