

# Применение метода Монте-Карло в изучении простейшей модели димеров на ступенчатой поверхности

ЕВСЕЕВА СВЕТЛАНА ИВАНОВНА

*Омский государственный технический университет (Омск), Россия*

e-mail: evseevasve@rambler.ru

МЫШЛЯВЦЕВ АЛЕКСАНДР ВЛАДИМИРОВИЧ

*Омский государственный технический университет (Омск), Россия*

## ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА МОНТЕ-КАРЛО В ИЗУЧЕНИИ ПРОСТЕЙШЕЙ МОДЕЛИ ДИМЕРОВ НА СТУПЕНЧАТОЙ ПОВЕРХНОСТИ.

*Евсеева С.И., Мышлявцев А.В.*

Омский Государственный Технический Университет, г. Омск

Если при вычислении средних параметров системы генерировать конфигурации случайным образом, то мы очень часто будем получать маловероятные состояния, которые делают малый вклад в общую картину. Реализуемая методом Монте-Карло случайная траектория системы, чаще всего проходит через состояния, близкие к оптимальным с энтропийно-энергетической точки зрения.

Цель данной работы - исследование ступенчатых поверхностей при помощи имитационного моделирования. Адсорбция, десорбция и реакция на таких поверхностях имеют свою специфику. Ранее мы изучили адсорбцию мономеров и димеров и построили локальные и общие изотермы.

В этой статье мы рассматриваем модель димеров на ступенчатой поверхности с шириной ступеньки, равной 3. В модели разрешены трансверсальная и планарная адсорбции. Учитывая собственный размер молекул и их химическую структуру, мы ввели бесконечно сильное отталкивание между ближайшими соседними частицами. Предполагается, что адсорбированный димер не может быть расположен на двух различных террасах одновременно.

Наша задача заключается в определении критических значений химического потенциала при различных температурах и построении фазовых диаграмм. Для расчета критических значений химического потенциала, мы ввели параметр порядка и изучили график его восприимчивости.

Параметры, встречающиеся в формулах для вычисления параметра порядка и его восприимчивости, были рассчитаны методом Монте-Карло, так как он позволяет исследовать самые сложные случаи модели газовой решетки. При моделировании мы использовали упрощенный вариант кинетического метода Монте-Карло, немного преобразовав его.

По полученным данным, были построены графики параметра порядка, его восприимчивости, отслежены пики восприимчивости и построены фазовые диаграммы для нашей модели. Особенности фазовых диаграмм объясняются соразмерностью ширины ступеньки и собственного размера димера. Метод Монте-Карло показал свою высокую эффективность в исследовании модели ступенчатой поверхности.