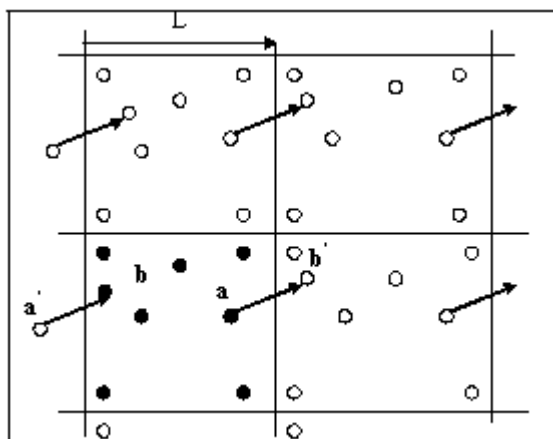


## Лекция № 5. Метрополис схемасы және периодты шекаралық шарттар

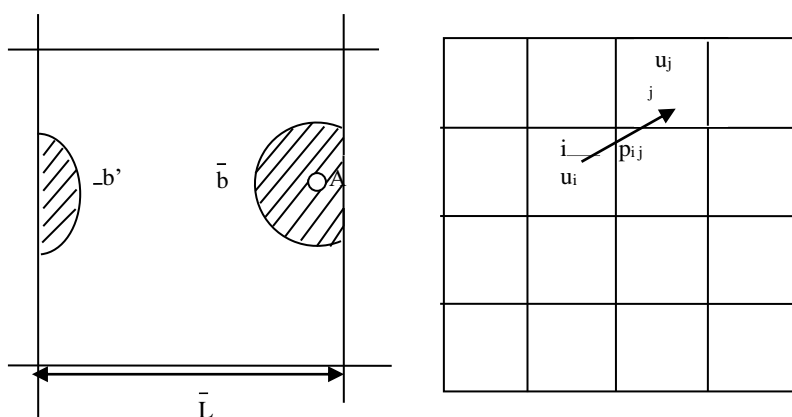
Біз бұл бөлімде Гиббстің каноникалық ансамбліне ( $NVT$  – ансамблі) қолданылатын Марков тізбегін алуға толығырақ тоқталамыз. Монте-Карло әдісін алғашқы рет осы ансамбльге қолдану ұсынылған болатын, себебі қазіргі уақытта Гиббс ансамбліне арналған мәліметтер саны өте көп. Бұл бөлімде алғаш рет Метрополис ұсынған Монте-Карло әдісін қарастырамыз.

Температурасы  $T$  болатын,  $V$  көлемде орналасқан,  $NVT$  – ансамблімен сипатталатын, саны  $N$ -ге тең бөлшектер жүйесін қарастырамыз. Барлық үшөлшемді кеңістік әрқайсысының ішінде  $N$  бөлшегі болатын, көлемі  $V$  -ға тең ұяшықтарға бөлінеді. Қарапайым болу үшін ұяшықтар куб ретінде таңдап алынады да, ұяшықтардың бірі негізгі ұяшық (Монте-Карлоның негізгі ұяшығы) деп саналады. Осы ұяшықтағы бөлшектер конфигурациясы және ауысулар кезінде олардың координаттары басқа барлық ұяшықтарда да қайталаынады. Осыған байланысты, негізгі ұяшықтағы бөлшектер және басқа ұяшықтардағы (репликалардағы) олардың образдары туралы айтуға болады.

Алайда қандай да бір бөлшектің орын ауыстыруы кезінде ол негізгі ұяшықтан шығып кетуі мүмкін, осының салдарынан негізгі ұяшықтағы бөлшектер саны сақталмайды. Бұл қиындықтан арылу үшін периодты шекаралық шарттарды пайдаланамыз. Егер кез-келген бір бөлшек ( $a$ ) координатының өзгеруі салдарынан Монте-Карло ұяшығының шекарасынан қандай да бір қашықтыққа орын ауыстырып ( $b'$ ) нүктесіне көшсе, онда осы уақытта көрші ұяшықтағы оның образы ( $a''$ ) негізгі ұяшыққа орын ауыстырып,  $b$  нүктесіне орналасады: осыған сәйкес басқа ұяшықтарда да осындай орын ауыстырулар болады (1-сурет). Нәтижесінде Монте-Карло ұяшығында  $N$  бөлшектің саны сақталып отырады. Осыған орай шексіз жүйе туралы сөз етілгенімен, тек негізгі ұяшықтағы  $N$  бөлшектің қозғалысын ескерген жеткілікті, себебі басқа барлық ұяшықтардағы қозғалыс осы қозғалыс арқылы беріледі деп санау керек. Кез-келген бөлшектер конфигурациясының энергиясын есептеу барысында қорытынды энергия тек қана негізгі ұяшықтардағы бөлшектер арқылы табылған энергия ғана емес, сонымен қатар барлық ұяшықтар үшін алынған энергиялардың қосындысына тең. Осыған байланысты шекаралық эффектілердің есептеу дәлдігіне тигізетін әсері аз. Қарапайым болу үшін екі өлшемді жүйемен шектелейік.  $A$  бөлшегінің молекулааралық күш потенциалының әсер ету аймағы 2-суретте боялып көрсетілген. Әрине  $bb'$  әсерлесу туындамас үшін ұяшық өлшемі үлкен болу керек.



1- сурет. Периодты шекаралық шарттар.  
Тұтас боялған дөңгелекшелер негізгі ұяшықтың бөлшектері.



2- сурет. а)- периодты шекаралық шарттармен екіөлшемді ұяшықтың схемалық көрінісі; б)-  $i$  және  $j$  конфигурациялық күйлер арасындағы ауысулар.

Ендігі кезекте Марков тізбегін құрастырудың нақты жолдарына тоқталайық. Марков тізбегінде бірлік қадам ретінде бір бөлшектің координатасының өзгерісін аламыз, егер  $A_i$ ,  $A_j$  конфигурациялары екі немесе одан жоғары бөлшектер санының орналасуымен айрықшаланатын болса, онда

$$P_{ij} = 0 \quad (13)$$

$q_r^\alpha(i)$  – жүйедегі  $i$ -ші күйдегі  $r$ -ші бөлшектің  $\alpha$ -ші декарттық координатасын білдіреді, мұндағы

$$\begin{aligned}
\alpha &= 1,2,3; \\
r &= 1,2,\dots,N; \\
i &= 1,2,\dots,S;
\end{aligned}
\tag{14}$$

Ендігі алдағы мақсат ауысу матрицасын  $P_{ij}$  таңдау.  $P_{ij}$  ауысу матрицасының ең көп тараған түрі ассимметриялық ауысу матрицасы болып саналады:

$$\begin{aligned}
P_{ij} &= const & U_j &\leq U_i; \\
P_{ij} &= const \cdot \exp\left\{-\frac{U_j - U_i}{kT}\right\} & U_j &> U_i \quad j \neq i \\
P_{ii} &= 1 - \sum_{1 \leq j \leq S} P_{ij} & j &= i
\end{aligned}
\tag{15}$$

Келесі кезекте қандай да бір кез-келген (бірақ белгіленген)  $\delta$  ұзындықты аламыз. Алайда практикада  $\delta$  мәнін дұрыс таңдау маңызды. Өйткені  $\delta$ -ның өте аз мәнінде қадам айтарлықтай аз болады да, аса ұзын тізбекті генерациялауға тура келеді, ал  $\delta$ -ның үлкен мәндерінде кейбір күйлер ескерілмей кетуі мүмкін. Сондықтан алғашында  $\delta$ -ның мәнін  $\frac{L}{3N}$  шамасына тең етіп алады да, жүйе Марков тізбегіндегі квазистационар күйге жеткенде  $\delta$ -ның сан мәнін азайтуға тура келеді.

Бөлшектер жүйесін үзілісті потенциалдарды қолдану арқылы модельдеу кезінде бөлшектердің арақашықтығы олардың диаметрінен кем болуы мүмкін, бұл эргодикалық шарттың бұзылуына әкеліп соқтырады. Алайда бұл күйлерді қарастырмауға болады, онда конфигурациялық кеңістіктің басқа бөлігі эргодикалық шартты қанағаттандырады.