



ОБЛАСТИ СУЩЕСТВОВАНИЯ СВЕРХСТРУКТУРЫ $C(2 \times 2)$ В ДВУХКОМПОНЕНТНОМ СЛОЕ АДсорБАТА НА ГРАНИ $L(100)$ (КВАЗИХИМИЧЕСКОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ)

Ю.В. Трощев, Т.М. Лысак

Проведено исследование пятипараметрической нелинейной системы уравнений, описывающей стационарные состояния неидеального слоя адсорбата на грани монокристалла $L(100)$ в квазихимическом приближении с учетом формирования сверхструктуры $C(2 \times 2)$. Указаны и классифицированы по признаку ограниченности области существования сверхструктуры. Полученные результаты могут быть использованы при изучении соадсорбции и диффузии двух не реагирующих химических компонентов. Математическая методика исследования представляет самостоятельный интерес, так как может применяться к достаточно произвольным нелинейным математическим моделям.

Введение

Процессы упорядочения в приповерхностном слое катализатора, приводящие к образованию структур с различными химико-физическими свойствами [1-7], представляют большой интерес как для изучения химии поверхности, так и для успешного математического моделирования нелинейных явлений на поверхности катализатора. В частности, для адекватного описания поверхностных процессов очень полезно предварительное исследование математических моделей, включающее в себя такие вопросы, как определение условий возникновения, существования и исчезновения различных структур равновесного слоя адсорбата.

В настоящей работе методами бифуркационного анализа исследуется модель, описывающая стационарные состояния неидеального двухкомпонентного слоя адсорбата на грани монокристалла $L(100)$ в квазихимическом приближении с учетом формирования сверхструктуры $C(2 \times 2)$ [3, 4]. В основе модели лежат уравнения квазихимического приближения модели решеточного газа [5, 6] на двух квадратных подрешетках [6, 8] при учете латеральных взаимодействий на расстоянии первого координационного слоя соседней молекулы. При таких ограничениях квазихимическое приближение совпадает с более строгим приближением Бете - Пайерлса [5]. Наличие двух подрешеток позволяет наряду с неупорядоченным состоянием описать также наблюдаемое в экспериментах упорядоченное состояние - сверхструктуру типа $C(2 \times 2)$. Основной целью работы

явилось исследование условий существования сверхструктуры $C(2 \times 2)$ в пространстве параметров модели.

Поскольку интерес представляют также и использованные математические методы [9-11], в данной работе приводятся не только результаты, но и процедура их получения. Представляется, что примененная техника может быть полезна во многих областях, где возникают нелинейные уравнения с несколькими параметрами.

По характеру исследования данная работа является продолжением работ [11-16], посвященных изучению (расчету структуры) однокомпонентного слоя адсорбата в различных приближениях. Это позволяет избежать подробного описания задачи и уделить основное внимание методике исследования и анализу полученных результатов.

1. Постановка задачи, программные средства и качественные результаты

Постановка задачи. Состояние двухкомпонентного слоя адсорбата с учетом двух подрешеток в квазихимическом приближении описывается следующими переменными:

$$T_{mi}, \quad m = 1, 2, \quad i = 0, 1, 2, \quad (1)$$

- вероятности заполнения подрешетки m компонентом i ($i = 0$ - свободный узел);

$$G_{ij}; \quad i, j = 0, 1, 2, \quad (2)$$

- вероятности заполнения пары соседних узлов по схеме: подрешетка 1 - компонент i , подрешетка 2 - компонент j . Все переменные могут изменяться в пределах $(0,1)$.

В уравнения также входят параметры, являющиеся функциями температуры, парциальных давлений в газовой фазе и энергий взаимодействия адсорбированных частиц с поверхностью и между собой [6,8]

$$P_i \quad (3a)$$

$$E_{ij}, \quad E_{ij} = E_{ji}, \quad E_{i0} = 0, \quad i, j = 0, 1, 2. \quad (3b)$$

Ниже используется следующая информация об этих параметрах: P_i - линейная возрастающая функция логарифма давления компонента i (безразмерное давление); E_{ij} - линейная убывающая функция энергии латерального взаимодействия между компонентами i и j (безразмерная энергия латерального взаимодействия). Положительному значению безразмерной энергии латерального взаимодействия соответствует притяжение между частицами. Все параметры могут изменяться в пределах $(-\infty, +\infty)$.

Исследуемые уравнения имеют вид:

$$\begin{aligned} 3 \ln T_{10} - 3 \ln T_{1i} + 4 \ln G_{i0} - 4 \ln G_{00} - P_i &= 0, \\ 3 \ln T_{20} - 3 \ln T_{2i} + 4 \ln G_{0i} - 4 \ln G_{00} - P_i &= 0, \end{aligned} \quad (4a)$$

$$i = 1, 2;$$

$$G_{ij} \exp(-E_{ij}) G_{kl} \exp(-E_{kl}) = G_{il} \exp(-E_{il}) G_{kj} \exp(-E_{kj}), \quad (4b)$$

$$i, j, k, l = 0, 1, 2;$$

$$1 - T_{m0} - T_{m1} - T_{m2} = 0, \quad m = 1, 2; \quad (4в)$$

$$T_{1i} - G_{i0} - G_{i1} - G_{i2} = 0, \quad i = 0, 1, 2, \quad (4г)$$

$$T_{2i} - G_{0i} - G_{1i} - G_{2i} = 0, \quad i = 0, 1, 2.$$

Данная система уравнений всегда имеет тривиальное решение, определяемое условиями

$$T_{1i} = T_{2i}, \quad G_{ij} = G_{ji}, \quad i, j = 0, 1, 2, \quad (5)$$

и соответствующее бесструктурному покрытию поверхности. В работе ставится вопрос о том, при каких значениях параметров уравнения имеют нетривиальное решение, то есть решение, соответствующее сверхструктуре $C(2 \times 2)$.

Значения параметров, при которых существует нетривиальное решение, образуют в пятимерном пространстве параметров задачи область существования сверхструктуры $C(2 \times 2)$. Поскольку в пятимерном пространстве параметров построение областей и их восприятие является затруднительным, то задача разбита на две подзадачи аналогично [11]. При разбиении пространства параметров использован тот факт, что в отсутствие латеральных взаимодействий слой адсорбата не может образовать сверхструктуру ни при каких давлениях.

Описание области существования опирается на два взаимосвязанных вопроса.

1. В какой области должны лежать значения параметров (3б), чтобы существовали такие значения параметров (3а), при которых существует нетривиальное решение? (В дальнейшем будем называть эту область областью существования в пространстве энергий латерального взаимодействия.) Данная область является проекцией области существования на пространство энергий латерального взаимодействия.

2. Если выбрана точка внутри области существования в пространстве энергий латерального взаимодействия, то в какой области должны лежать значения параметров (3а), чтобы нетривиальное решение действительно существовало? (В дальнейшем будем называть эту область областью существования в плоскости давлений.) Данная область является проекцией сечения области существования на плоскость давлений при заданных значениях параметров латерального взаимодействия.

Программные средства. Система уравнений (5) не поддается полному аналитическому решению. Поэтому ниже используются не только аналитические, но и численные методы. Получаемые при этом результаты достоверны, но отсутствует гарантия полноты исследования. Так, вообще говоря, нельзя утверждать, что построены все области существования, так как некоторые из них могли быть численно не обнаружены. В частности, не были обнаружены изолированные ветви сверхструктуры $C(2 \times 2)$. Поэтому далее всюду предполагается, что существование сверхструктуры эквивалентно существованию точек разрушения симметрии на ветвях тривиальных решений.

Для численного исследования была использована программа АРИАДНА [9, 10], которая позволяет решать задачи трех уровней для конечномерных систем нелинейных уравнений с нетривиальными группами симметрии: 1) продолжать по бифуркационному параметру решения нелинейных уравнений, находить точки бифуркации, переключаться с ветви на ветвь в точках разрушения симметрии; 2) продолжать по параметру точки бифуркации и находить точки вырождения этих бифуркаций; 3) продолжать по параметру вырожденные точки бифуркации и

находить точки их двойного вырождения. При переходе к более высокому уровню увеличивается на единицу число параметров, которым разрешается изменяться в процессе продолжения по параметру. В качестве начальных точек для продолжения по параметру используются вырожденные точки предыдущего уровня либо регулярные точки последующего уровня. Такие переходы вверх и вниз от уровня к уровню, как правило, позволяют получить исчерпывающие решения указанных трех задач. В совокупности получаемые при этом результаты дают полный ответ на вопрос существования, единственности и множественности решений рассматриваемой системы при различных значениях параметров, а также позволяют классифицировать все качественно различные зависимости решений от бифуркационного параметра.

Примеры непосредственного применения упомянутой методики содержатся в [12-16]. Однако в данной работе рассматриваются также бифуркации относительно двух параметров, что повышает коразмерность вырождений. Ниже демонстрируется, каким образом такие бифуркации могут быть исследованы методами, реализованными в программе АРИАДНА.

Большинство рисунков, содержащихся в данной работе, получено путем непосредственного сканирования с экрана монитора. Решение первой задачи называется бифуркационной диаграммой и отмечается на рисунках словом Diagram. Решение второй задачи представляет собой сечения поверхности бифуркаций и отмечается на рисунках словом Section. Решение третьей задачи называется бифуркационной картой, так как при этом строятся проекции складок поверхности бифуркаций на плоскость двух параметров, и в результате получается разбиение этой плоскости на области с качественно различным поведением бифуркационной диаграммы. Решение третьей задачи отмечается на рисунках словом Map.

Если исследуется система (4), то на рисунках это отмечается символами $q2c1$ (q - quasicheical, 2 - два компонента, c - $C(2 \times 2)$, 1 - учет первой координатной сферы соседней молекулы). Если же исследуется система (4) \oplus (18) (см. ниже), описывающая бифуркации разрушения симметрии системы (4), то это отмечается символами $q2cr1$ (r - pitchfork). Сечения для системы $q2c1$ могут быть построены как диаграммы для системы $q2cr1$, а карты для системы $q2c1$ могут быть построены как сечения для системы $q2cr1$. В качестве начальных точек для диаграмм системы $q2cr1$ выбирались точки разрушения симметрии диаграмм системы $q2c1$.

Качественные результаты. В результате проведенного исследования пространство энергий латерального взаимодействия разбито на восемь трехгранных углов C_{pqs} , $p, q, s = 0, 1$ плоскостями Q_i , $i = 1, 2, 3$. Индекс $p(q,s)$ равен нулю, если угол C_{pqs} лежит относительно плоскости Q_1 (Q_2, Q_3) в том же полупространстве, что и начало координат.

Внутри угла C_{000} , содержащего начало координат, в окрестности каждого из ребер построены области R_1, R_2, R_3 , ограниченные гранями угла и поверхностями S_i , $i = 1, 2, 3$. Таким образом, все пространство разбито на 11 областей.

В области $C_{000} \setminus \bigcup_{i=1}^3 R_i$ нетривиальных решений нет. Во всех остальных областях есть такие значения давлений, при которых существуют нетривиальные решения.

В областях R_i , $i=1, 2, 3$, области существования в плоскости давлений являются ограниченными, а в областях C_{pqs} ($p+q+s>0$) - неограниченными.

Направления неограниченности могут быть определены по индексам p, q, s . Если $p=1$, то область существования является неограниченной в направлении $P_2 \rightarrow -\infty$.

Если $q=1$, то область существования неограниченна в направлении $P_1 \rightarrow -\infty$. Если $s=1$, то область существования неограниченна в направлении $P_1+P_2 \rightarrow +\infty$. Таким образом, область существования в плоскости давлений может быть неограниченной в одном, двух или трех направлениях.

2. Описание исследования

Исследование неограниченных областей существования в плоскости давлений. Аналогичное исследование квазихимического приближения для однокомпонентных сверхструктур проведено в [12]. Показано, что при

$$E_{ii} < -2 \ln 2, \quad i = 1, 2 \quad (6)$$

существует интервал значений P_p в котором задача однокомпонентного слоя адсорбата имеет нетривиальное решение. Отсюда ясно, что при любых значениях $E_{i,3-i}$ и $E_{3-i,3-i}$ можно выбрать P_{3-i} настолько малым, что наличие компонента 3- i не окажет существенного влияния, и структура $C(2 \times 2)$ сохранится. Это означает, что при выполнении условия (6) двухкомпонентный слой адсорбата может образовывать сверхструктуру $C(2 \times 2)$, причем область существования в плоскости давлений является неограниченной в направлении $P_{3-i} \rightarrow -\infty$.

Численное исследование позволило предположить, что область существования в плоскости давлений может быть неограниченной и в направлении $P_i+P_{3-i} \rightarrow +\infty$, $i=1,2$; $P_i-P_{3-i}=\text{const}$, что в пределе соответствует сверхструктуре в насыщенном слое, то есть при

$$T_{m0} = G_{i0} = G_{0i} = 0, \quad m = 1, 2; \quad i = 0, 1, 2. \quad (7)$$

Для построения соответствующей границы в пространстве энергий латеральных взаимодействий необходимо сделать предельный переход $P_i+P_j \rightarrow +\infty$ в уравнениях (4). В уравнениях (4б), (4в), (4г) для этого достаточно приравнять нулю переменные T_{m0} , G_{i0} , G_{0i} , $i=0, 1, 2$, $m=1, 2$. Но в уравнениях (4а) такое приравнивание противоречит области определения, поэтому сначала эти уравнения необходимо преобразовать. Складывая и вычитая уравнения (4а), с учетом равенств (4б) получаем

$$\ln[T_{1i}T_{1j}/(T_{10})^2] + 4\ln\{(T_{10})^2G_{i0}G_{j0}/[T_{1i}T_{1j}(G_{00})^2]\} - (P_i + P_j) = 0, \quad (8а)$$

$$\ln[T_{2i}T_{2j}/(T_{20})^2] + 4\ln\{(T_{20})^2G_{0i}G_{0j}/[T_{2i}T_{2j}(G_{00})^2]\} - (P_i + P_j) = 0,$$

$$\ln(T_{1i}/T_{1j}) + 4\ln\{T_{1j}G_{ii}\exp(E_{ji})/[T_{1i}G_{jj}\exp(E_{ii})]\} - (P_i - P_j) = 0, \quad (8б)$$

$$\ln(T_{2i}/T_{2j}) + 4\ln\{T_{2j}G_{ij}\exp(E_{ij})/[T_{2i}G_{ij}\exp(E_{ii})]\} - (P_i - P_j) = 0,$$

$$i, j = 1, 2.$$

Уравнения (8а) при предельном переходе обеспечивают выполнение равенств (7) и в дальнейшем могут быть исключены из рассмотрения. А уравнения (8б) не содержат переменные T_{m0} , G_{i0} , G_{0i} , $i=0, 1, 2$, $m=1, 2$. Таким образом, уравнения (4б), (4в), (4г), (7) и (8б) описывают равновесные состояния насыщенного слоя.

Граница области существования сверхструктуры $C(2 \times 2)$ в насыщенном слое в пространстве энергий латерального взаимодействия есть поверхность, на которой ветви тривиальных решений системы (4б), (4в), (4г), (7) и (8б) имеют

точки разрушения симметрии с вырождениями коразмерности 1 (складка поверхности бифуркаций разрушения симметрии). Численное исследование этих уравнений позволило предположить, что область существования в пространстве энергий латерального взаимодействия определяется неравенством

$$E_{12} > \ln 2 + 0.5(E_{11} + E_{22}), \quad (9)$$

причем точки бифуркации на поверхности

$$E_{12} = \ln 2 + 0.5(E_{11} + E_{22}) \quad (10)$$

удовлетворяют условиям

$$T_{mi} = 0.5, \quad G_{ii} = 1/6, \quad G_{ij} = 1/3; \quad m = 1, 2, \quad ij = 1, 2, \quad j \neq i. \quad (11)$$

Аналитическая проверка показала, что на поверхности (10) рассматриваемая система действительно имеет решения вида (11), являющиеся точками бифуркации. Причем уравнение ветвления [17, 18]

$$f(x, a) = 0 \quad (12)$$

в этих точках удовлетворяет условию зарождения структуры $C(2 \times 2)$

$$\partial/\partial a [f(x, a)/x] = 0. \quad (13)$$

Таким образом, относительно не ограниченных по давлениям областей существования получены следующие результаты.

1) Три плоскости Q_1, Q_2, Q_3

$$Q_i: E_{ii} = -2 \ln 2, \quad i = 1, 2, \quad (14a)$$

$$Q_3: E_{12} = \ln 2 + 0.5(E_{11} + E_{22}) \quad (14b)$$

разбивают пространство энергий латерального взаимодействия на восемь трехгранных углов C_{pqs} , $p, q, s = 0, 1$. Здесь индекс с номером i ($i=1, 2, 3$) полагается равным 0, если угол лежит относительно плоскости Q_i в том же полупространстве, что и начало координат. Плоскости (14) пересекаются по прямым $L_k = Q_i \cap Q_j$, $i, j, k=1, 2, 3, i \neq j, j \neq k, k \neq i$

$$L_i: E_{3-i, 3-i} = -2 \ln 2, \quad E_{12} = 0.5E_{ii}, \quad i = 1, 2, \quad (15a)$$

$$L_3: E_{ii} = -2 \ln 2, \quad i = 1, 2. \quad (15b)$$

Внутри угла C_{000} (содержащего начало координат) область существования в плоскости давлений либо ограничена, либо не существует. А вне этого угла область существует и является неограниченной.

2) Область существования в плоскости давлений может быть неограниченной в одном, двух или трех направлениях. Если выполнено условие

$$E_{ii} < -2 \ln 2, \quad i = 1, 2, \quad (16)$$

то область является неограниченной в направлении $P_{3-i} \rightarrow -\infty$. Если выполнено условие

$$E_{12} > \ln 2 + 0.5(E_{11} + E_{22}), \quad (17)$$

то область является неограниченной в направлении $P_i + P_{3-i} \rightarrow +\infty, i=1, 2; P_i - P_{3-i} = \text{const.}$

На рис. 1 приведены численно построенные области существования в плоскости давлений для точек из углов C_{111} (рис. 1, а, б), C_{101} (рис. 1, в), C_{110} (рис. 1, г). Можно видеть, что область может быть как односвязной, так и многосвязной. Рис. 1, а и б построены как сечения бифуркационной поверхности для системы q2c1, а рис. 1, в и г - как диаграммы для системы q2cp1 (см. раздел 1, описание программных средств).

Исследование ограниченных областей существования в плоскости давлений. Как уже было сказано, внутри трехгранного угла C_{000} область существования в плоскости давлений может либо не существовать, либо быть ограниченной. Границей в пространстве энергий латерального взаимодействия, разделяющей области несуществования и ограниченности, является поверхность вырождения точек разрушения симметрии системы уравнений (4) относительно двух бифуркационных параметров [18], соответствующая стягиванию в точку области существования в плоскости давлений. Для описания такой поверхности к исходной системе необходимо добавить три условия вырождения: $f_x=0, f_{P_1}=0, f_{P_2}=0$, где $f(x, P_1, P_2)=0$ - уравнение ветвления. Программа АРИАДНА непосредственно

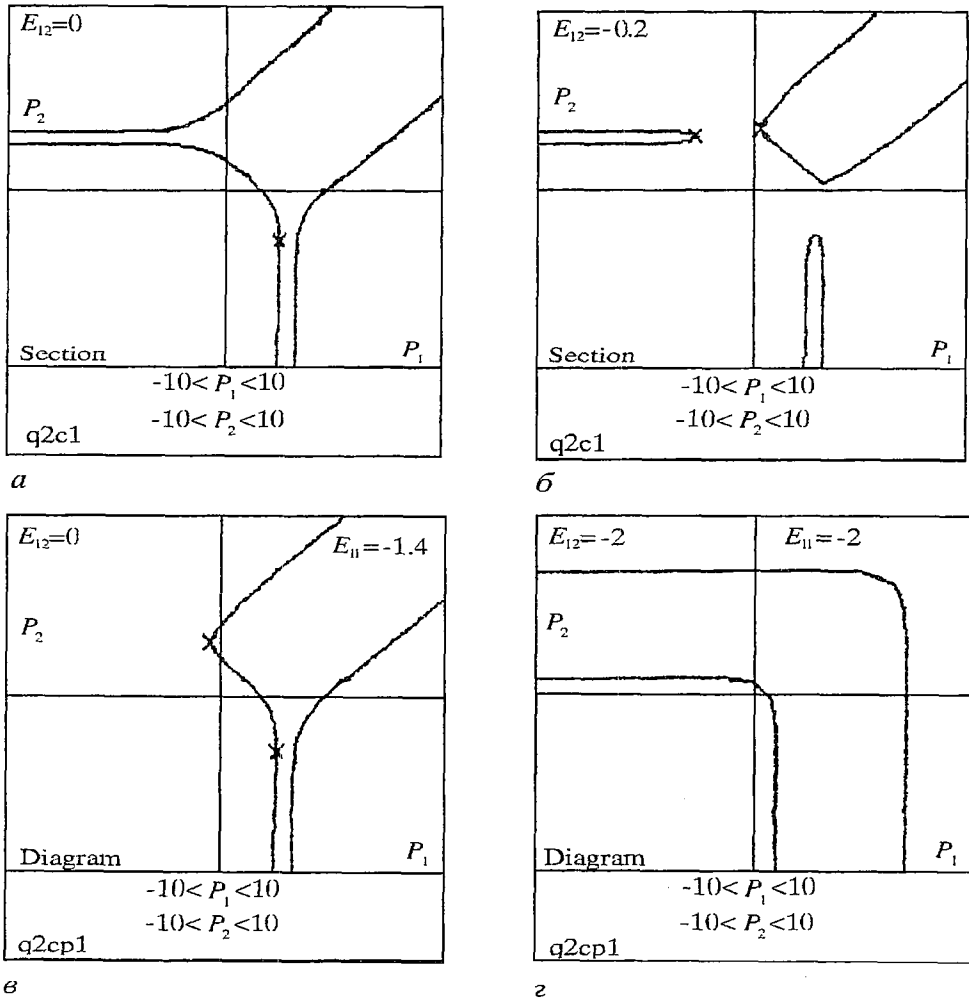


Рис. 1. Неограниченные области существования в плоскости давлений. а - $(E_{11}=E_{22}=-1.4, E_{12}=0) \in C_{111}$; б - $(E_{11}=E_{22}=-1.4, E_{12}=-0.2) \in C_{111}$; в - $(E_{11}=-1.4, E_{22}=-1.3, E_{12}=0) \in C_{101}$; г - $(E_{11}=E_{22}=E_{12}=-2.0) \in C_{110}$

позволяет добавлять к исходной системе только два условия. Тем не менее, рассматриваемая поверхность может быть описана следующим образом. Добавим к системе (4) условие, определяющее бифуркацию разрушения симметрии (частный случай первого из условий вырождения), и для полученной таким образом расширенной системы искомая поверхность будет уже поверхностью бифуркаций однократного вырождения. Причем в программе АРИАДНА указанные три условия входят в виде частного случая в расширенную систему уравнений, описывающую вырождения квадратичных вилок типа Pitf+Pitf [9, 10]. Таким образом, использование расширенной системы позволит строить сечения поверхности раздела областей ограниченности и несуществования как бифуркационные карты.

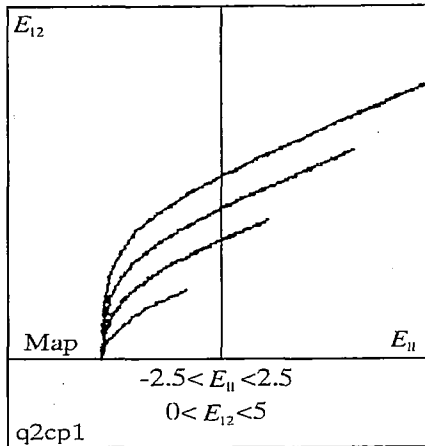
Для вывода условия, определяющего бифуркацию разрушения симметрии, необходимо приравнять нулю определитель системы (4) на тривиальном решении с учетом нетривиальности соответствующего собственного вектора: $dT_{mi}=0$, $dG_{ij}=-dG_{ji}$, $i,j=0,1,2$, $m=1,2$. После ряда преобразований это дает следующее уравнение:

$$\begin{vmatrix} 1/G_{12} & -1/G_{10} & 1/G_{20} \\ -3T_{10} & 4T_{11}T_{10}/G_{10}-3(1-T_{12}) & -3T_{11} \\ 3T_{10} & -3T_{12} & 4T_{12}T_{10}/G_{20}-3(1-T_{11}) \end{vmatrix} = 0. \quad (18)$$

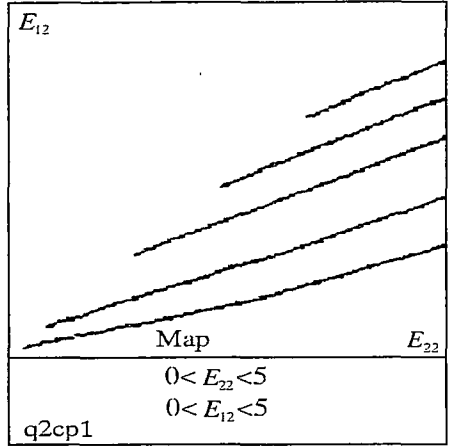
Численное исследование расширенной системы (4)⊕(18) показало, что внутри угла C_{000} существуют три искомые области существования: R_i , $i=1,2,3$, заключенные, соответственно, между поверхностями: S_i , $i=1,2,3$, Q_i и Q_k , $i \neq j$, $i \neq k$, $j \neq k$. Каждый из листов S_i является криволинейной поверхностью, натянутой между двумя лучами L_{ij} и L_{ik} с общим началом на прямой L_i ($i \neq j$, $j \neq k$, $k \neq i$) и имеющей выпуклость в сторону этой прямой.

С хорошей точностью выполняются следующие соотношения. Листы S_i , $i=1,2$ имеют вершину на прямой L_i в точке O_i ($E_{ii}=0$, $E_{3-i,3-i}=-2\ln 2$, $E_{12}=0$) и примыкают к плоскости Q_{3-i} по лучу $L_{i,3-i}$ ($E_{12}=0$, $E_{3-i,3-i}=-2\ln 2$), а к плоскости Q_3 по лучу L_{i3} ($E_{ii}=2\ln 2+E_{3-i,3-i}$, $E_{12}=E_{ii}$). Лист S_3 имеет вершину на прямой L_3 в точке O_3 ($E_{11}=E_{22}=E_{12}=-2\ln 2$) и примыкает к плоскости Q_i , $i=1,2$ по лучу L_{3i} ($E_{ii}=E_{12}=-2\ln 2$). Однако аналитическая проверка этих фактов представляется затруднительной из-за большой размерности системы (4)⊕(18).

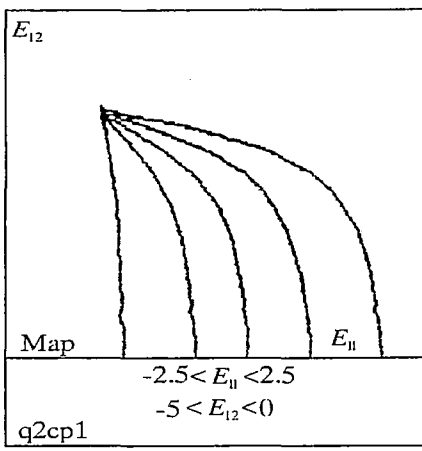
На рис. 2 приведены сечения листов S_2 и S_3 различными плоскостями. На рис. 3 изображены ограниченные области существования в плоскости давлений, соответствующие областям R_3 и R_2 в пространстве энергий латерального взаимодействия. На рис. 4 дано схематическое объемное изображение внутренней части трехгранного угла C_{000} с областями R_1 , R_2 и R_3 внутри него. На рис. 5 приведены различные виды зависимостей решений системы (4) от параметров. Рис. 5, а соответствует сечению рис. 1, а прямой $P_1=0$ и представляет наиболее простой вид бифуркационной диаграммы. Рис. 5, б соответствует сечению рис. 1, б прямой $P_1=3$; имеется многосвязность нетривиальных ветвей. На рис. 5, в имеется множественность как тривиального, так и нетривиального решений. На рис. 5, г изображена зависимость от параметра E_{12} , проходящая через области R_3 , C_{000} и C_{110} . На рис. 6 приведена топологическая структура разбиения пространства латеральных взаимодействий с указанием качественного вида областей существования в плоскости давлений без учета возможной многосвязности. Для наглядности графу придана форма куба, вершины которого соответствуют трехгранным углам C_{pqs} .



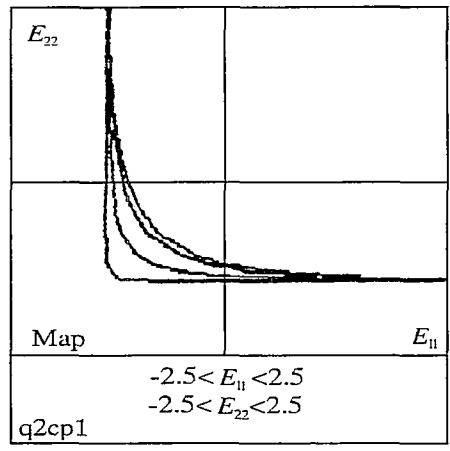
a



б

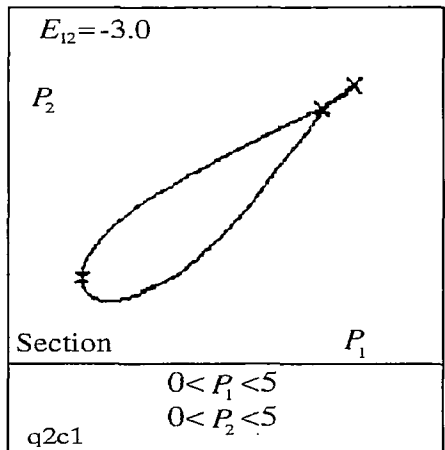


в

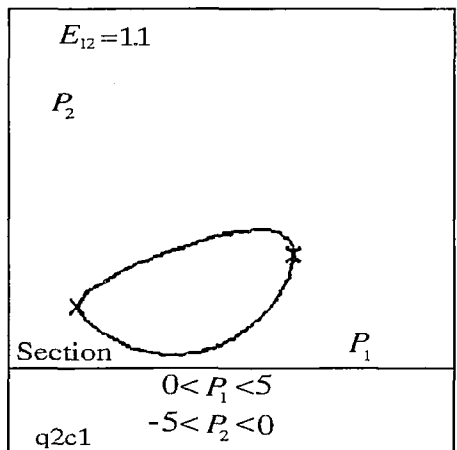


г

Рис. 2. Сечения границ областей существования внутри угла C_{000} . а - сечения листа S_2 плоскостями $E_{22}=1.0, 2.0, 3.0, 4.0$ (снизу вверх); б - сечения листа S_2 плоскостями $E_{11}=-1.3, -1.0, 0, 1.0, 2.0$ (снизу вверх); в - сечения листа S_3 плоскостями $E_{22}=0, -1.0, -1.2, -1.3$ (слева направо); г - сечения листа S_3 плоскостями $E_{12}=-1.5, -2.0, -3.0, -4.0$ (слева направо)



a



б

Рис. 3. Ограниченные области существования в плоскости давлений. а - $(E_{11}=E_{22}=-1.0, E_{12}=-3.0) \in R_3$; б - $(E_{11}=-1.0, E_{22}=2.0, E_{12}=1.1) \in R_2$

Заключение

В данной работе построены области существования сверхструктуры $C(2 \times 2)$, но не исследованы варианты множественности нетривиальных решений и их устойчивости. Не исследованы и возможности односвязности и многосвязности неограниченных областей существования в плоскости давлений. Характер устойчивости часто может быть определен без дополнительного исследования на основании классификации точек бифуркации и известного факта, что единственное решение всегда устойчиво при условии, что рассматриваемая система не допускает бифуркаций Хопфа (в данном случае это условие выполнено). Отметим также, что на основании

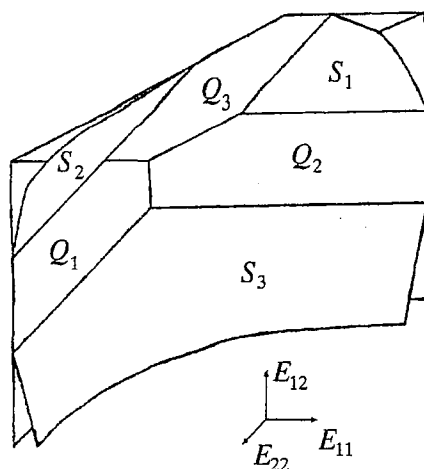
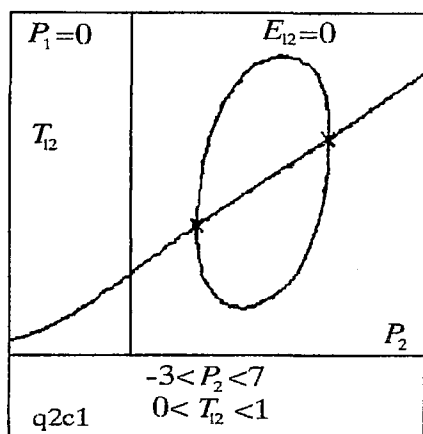
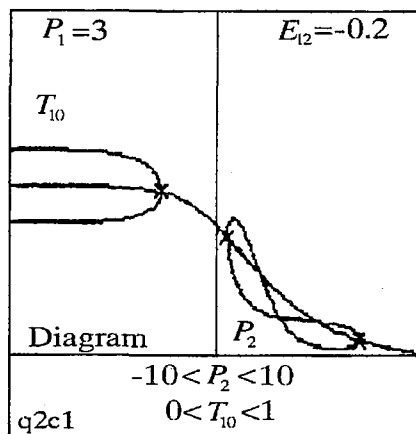


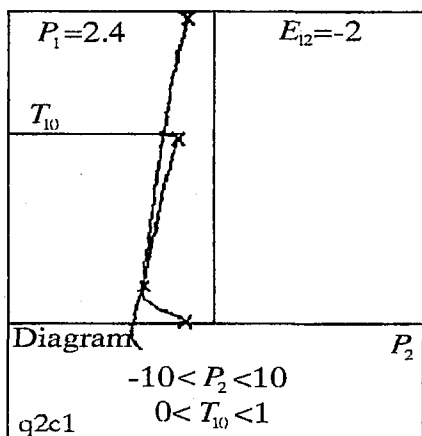
Рис. 4. Схематическое изображение трехгранного угла C_{000} с областями R_1, R_2 и R_3 внутри него



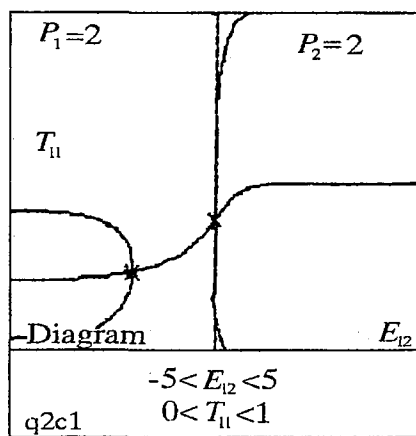
a



б



в



г

Рис. 5. Зависимости решений от параметров. *a* - $E_{11}=E_{22}=-1.4, E_{12}=0, P_1=0$; *б* - $E_{11}=E_{22}=-1.4, E_{12}=-0.2, P_1=3.0$; *в* - $E_{11}=-4.0, E_{22}=2.0, E_{12}=-2.0, P_1=2.4$; *г* - $E_{11}=E_{22}=-1.0, P_1=P_2=2.0$

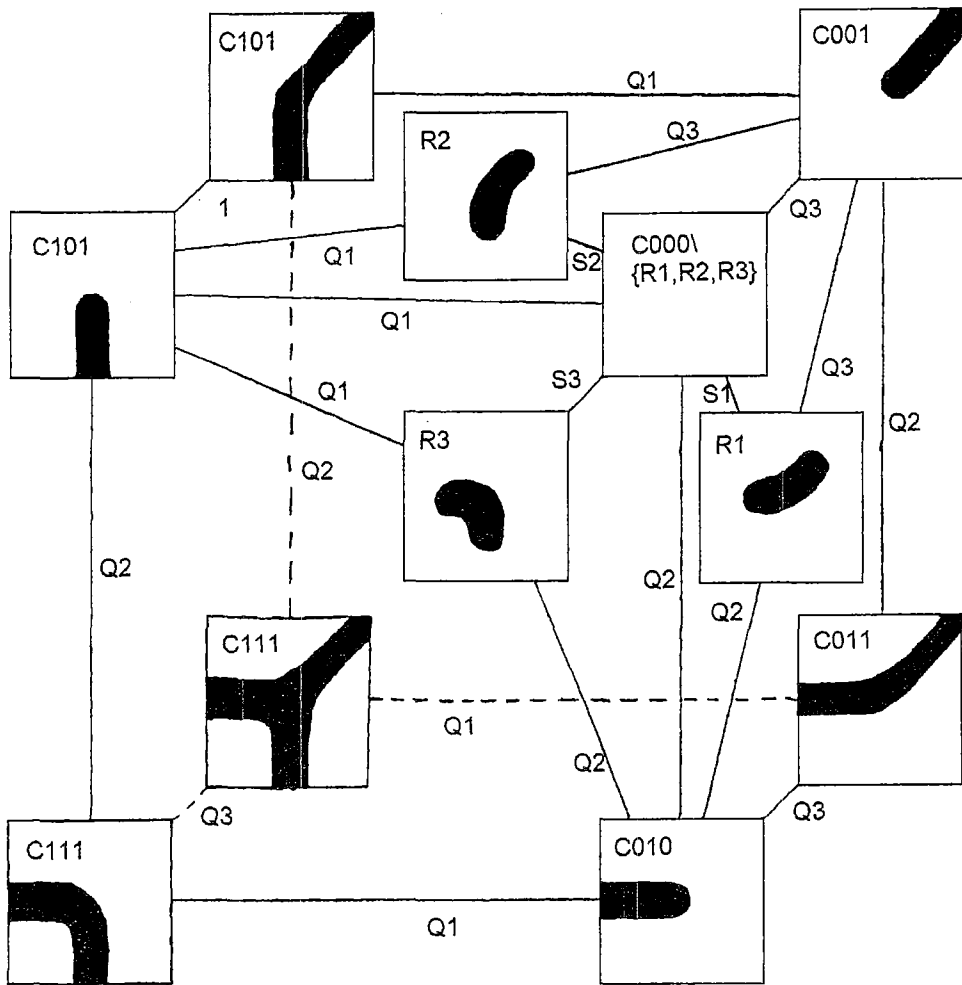


Рис. 6. Топологическая структура разбиения пространства энергий латерального взаимодействия. Вершины графа соответствуют областям в пространстве энергий. Ребра графа - общим поверхностям-границам. Для каждой вершины дан качественный вид области существования в плоскости давлений. Этот качественный вид отражает только ограниченность этих областей и направления неограниченности, но не отражает возможной многосвязности (рис. 1,б) и наличия бифуркаций (рис. 1,е)

проведенного численного исследования можно сделать предположение, что для рассмотренной системы любая нетривиальная ветвь имеет устойчивый участок.

Исследование множественности решений и многосвязности неограниченных областей требует более значительных усилий и будет предпринято, если в этом будет необходимость с прикладной точки зрения.

Отметим также, что полученные результаты, в основном, соответствуют предположению о том, что образованию сверхструктуры $C(2 \times 2)$ способствует увеличение притяжения между частицами разных видов и увеличение отталкивания между частицами одного вида. Однако область R_3 , ограниченная поверхностями Q_1 , Q_2 и S_3 , является исключением, так как здесь сверхструктура возникает при увеличении отталкивания между компонентами. Из рис.5, г ясно, что структура в области R_3 устойчива (согласно классификации структурно устойчивых бифуркаций). Механизм упорядочивания при этом требует дополнительного исследования.

Работа выполнена в 1997 году при частичной финансовой поддержке РФФИ (номер проекта 96-01-00812).

Библиографический список

1. Хилл Т. Статистическая механика. М.: ИЛ, 1960. 486 с.
2. Шулепов С.В., Аксененко Е.В. Решеточный газ. Киев: Наукова думка, 1981, 268 с.
3. Люксютов И.Ф., Наумовец А.Г., Покровский В.М. Двумерные кристаллы. Киев: Наукова думка, 1988. 220 с.
4. Castner D.G., Somorjai G.A. Surface structures of adsorbed gases on solid surfaces // Chem.Rev. 1979. Vol.79, № 3. P. 233.
5. Жданов В.П. Элементарные физико-химические процессы на поверхности. Новосибирск: «Наука». Сиб. отд., 1988. 319 с.
6. Товбин Ю.К. Теория физико-химических процессов на границе газ - твердое тело. М.: Наука, 1988, 285 с.
7. Слинько М.Г., Зеленьяк Т.И., Акрамов Т.А., Лаврентьев-мл. М.М., Шепелев В.С. Нелинейная динамика каталитических реакций и процессов (обзор) // Математическое моделирование. 1997. Т. 9, № 12. С. 87.
8. Еленин Г.Г., Крылов В.В. Уравнения равновесия многокомпонентного неидеального решеточного газа на подрешетках // Математическое моделирование. 1990. Т.2, № 1. С.85.
9. Еленин Г.Г., Троциев Ю.В. АРИАДНА - система нелинейного анализа для IBM PC // Математическое моделирование. 1991. Т. 3, № 10. С. 126.
10. Еленин Г.Г., Троциев Ю.В. Программа для бифуркационного анализа нелинейных задач АРИАДНА. Версия ar98. Часть 1// Москва, препринт Диалог-МГУ, 1997, 21 с.
11. Еленин Г.Г., Лысак Т.М. Необходимые условия мягкого возбуждения диссипативных структур для одного семейства моделей гетерогенно-каталитических реакций // Математическое моделирование. 1989. Т. 1, № 9. С. 92.
12. Еленин Г.Г., Троциев Ю.В. Существование, единственность и множественность решений, соответствующих сверхструктуре $C(2 \times 2)$ в неидеальном слое адсорбата // Математическое моделирование. 1990. Т. 2, № 1. С. 126.
13. Еленин Г.Г., Троциев Ю.В. Параметрический анализ задачи о равновесных сверхструктурах $C(2 \times 2)$ и $P(2 \times 1)$ на решетке $L(100)$; хаотическое приближение // Москва, препринт Диалог-МГУ, 1997, 21 с.
14. Еленин Г.Г. Результаты качественного анализа инвариантных решений распределенных моделей равновесного состояния неидеального слоя адсорбата// Математическое моделирование. 1992. Т. 4, № 6. С. 80.
15. Еленин Г.Г., Лысак Т.М., Троциев Ю.В. Каскады фазовых переходов типа порядок-беспорядок и типа расслоения на фазы на решетке $L(100)$. Хаотическое приближение // Москва, препринт Диалог-МГУ № 1278, 1998, 19с.
16. Еленин Г.Г., Лысак Т.М., Троциев Ю.В. Полный бифуркационный анализ задачи о равновесных сверхструктурах $C(2 \times 2)$ и $P(2 \times 1)$ на решетке $L(100)$. Хаотическое приближение // Москва, препринт Диалог-МГУ № 1279, 1998, 17 с.
17. Golubitski M., Schaeffer D. Singularities and Groups in Bifurcation Theory. New York, Springer. 1985. Vol. 1. P. 463.
18. Vanderbauwhede A. Local bifurcation and symmetry // Pitman Advanced Publishing Program (Boston-London-Melbourne), 1982, 350 p.

Московский государственный
университет

Поступила в редакцию 25.04.02
после доработки 22.07.02

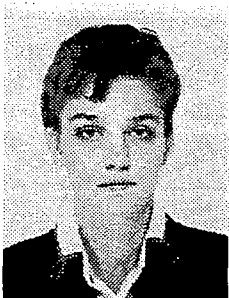
**DOMAINS OF THE SUPERSTRUCTURE $C(2 \times 2)$ EXISTENCE
IN A TWO-COMPONENT ADSORBATE LAYER ON THE $L(100)$ FACET
(QUASICHEMICAL APPROACH)**

Yu.V. Troshchiev, T.M. Lysak

Analysis of a five-parameter nonlinear set of equations for steady states of a non-ideal adsorbate layer at the $L(100)$ facet in the quasicheical approach with regard of the superstructure $C(2 \times 2)$ has been performed. Domains of the superstructure existence have been found and classified with regard of their finite size. The results can be used for investigation of coadsorption and diffusion of two nonreacting chemical components. The used mathematical methods are of self-sufficient interest, because they can be used for rather arbitrary nonlinear mathematical models.



Трошчиев Юрий Витальевич - родился в Арзамасе-75 Горьковской области (1963), окончил Московский государственный университет (1985). Защитил диссертацию на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук в МГУ (1992). Является автором и соавтором 25 научных статей. Старший научный сотрудник лаборатории математического моделирования в физике факультета ВМиК МГУ.



Лысак Татьяна Михайловна - родилась в Москве (1962), окончила Московский государственный университет (1985). Защитила диссертацию на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук в МГУ (1990). Является автором и соавтором более 30 научных работ. Старший научный сотрудник лаборатории математического моделирования в физике факультета ВМиК МГУ.