

Gaz sieciowy i kinetyka reakcji w układach niskowymiarowych

- Cząstki gazu znajdują się na $L \times L$ sieci kwadratowej
- Na węźle może znajdować się co najwyżej 1 cząstka
- Periodyczne warunki brzegowe
- Dynamika (bez reakcji chemicznych): wybierz cząstkę oraz kierunek przesunięcia; jeżeli węzeł docelowy jest wolny to dokonaj przemieszczenia; w przeciwnym przypadku nic nie rób

Jednogatunkowa anihilacja: $A+A \rightarrow 0$

Dla układów z silnym mieszaniem

$$\frac{d\rho}{dt} = -2\rho^2$$

$$\rho = N/L^d$$

Jednostka czasu:

$t = 1$ odpowiada N uaktualnieniom

$$\text{Całkując otrzymujemy } \rho(t) = \frac{1}{t + \rho_0^{-1}} \sim t^{-1}$$

Oszacowanie to jest błędne w układach niskowymiarowych.

Dla $d \leq 2$ błądząca cząstka do czasu t przemiotła obszar o rozmiarach $l_D \sim \sqrt{t}$.

W obszarze tym najprawdopodobniej nie ma innych cząstek. Średnia gęstość powinna więc być proporcjonalna do $\rho(t) \sim \frac{1}{l_D^d} \sim t^{-\frac{d}{2}}$. Dla $d \geq 2$ kinetyka procesu

pokrywa się z przewidywaniami w przypadku silnego mieszania.

Dwugatunkowa anihilacja: $A+B \rightarrow 0$

W chwili t obszar o wielkości $l_D \sim \sqrt{t}$ najprawdopodobniej zawiera cząstki wyłącznie jednego gatunku. W objętości l_D^d znajduje się najprawdopodobniej $\sqrt{\rho_0 l_D^d}$ cząstek.

Otrzymujemy więc $\rho(t) \sim \frac{\sqrt{\rho_0 l_D^d}}{l_D^d} \sim t^{\frac{-d}{4}}$. Dla $d \geq 4$ kinetyka procesu pokrywa się z przewidywaniami w przypadku silnego mieszania.

Wniosek: kinetyka reakcji chemicznych w układach niskowymiarowych może różnić się od układów z silnym mieszaniem (opisywanych „standardowymi” równaniami kinetycznymi).

Uogólnienie na trzy gatunki cząstek: A, B i C.

(Kinetics of n-species annihilation: Mean-field and diffusion-controlled limits, PRA (1986))

Dalsze uogólnienia: reakcje odwracalne ($A+B \leftrightarrow C$), reakcje wielocząstkowe ($A+A+A \rightarrow \emptyset$)

(Kang & Redner, Phys.Rev. A **32**, 435 (1985))

Sieciowy model separacji faz

(Widom & Rowlinson (1970))

- Model dwugatunkowy ($\rho_A = \rho_B = \rho$)
- Na węźle może być co najwyżej jedna cząstka
- Sąsiedowanie A i B jest zabronione

Ten atermiczny (!) model dla dostatecznie dużych gęstości (ρ) wykazuje separację faz

W układach atermicznych konfiguracje nie mają przypisanej energii, która określałaby prawdopodobieństwo ich realizacji. Mogą obowiązywać natomiast pewne reguły wykluczania.

Zbliżone własności posiada jednogatunkowy model z zabronionym sąsiedztwem (Gaunt & Fisher (1965), [R. Dickman, Braz. J. Phys. 30, 711 \(2000\)](#)). Dla dostatecznie dużej gęstości w modelu tworzy się faza uporządkowana (A, \emptyset , A, \emptyset , A, \emptyset ...).

Driven systems

driven: kierowany, napędzany, sterowany

Przepływy: ciecze (lattice Boltzmann method), układy porowate, ruch uliczny i korki...

Oblicz strumień cząstek przez górną (N) krawędź w gazie sieciowym o gęstości ρ .

Gaz znajduje się na sieci kwadratowej o rozmiarze liniowym L.

Prawdopodobieństwa przemieszczenia się wynoszą:

$$p_W = p_E = 0.25, p_N, p_S \quad (p_N > p_S, p_N + p_S = 0.5).$$

Odpowiedź: W jednostce czasu ($\Delta t = 1$) przez górną ściankę przechodzi średnio $\rho(1 - \rho)(p_N - p_S)L$ cząstek.

Dlaczego wynik ten jest tylko przybliżeniem?

Driven systems

