

# ***„MODELOWANIE ZJAWISKA KONDENSACJI KAPILARNEJ W MATERIALE POROWATYM”***

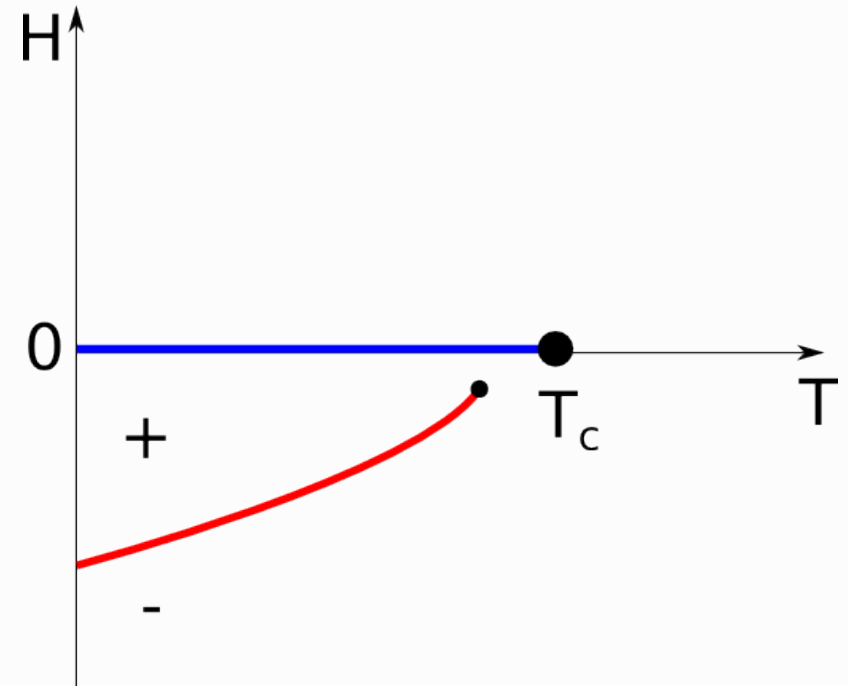
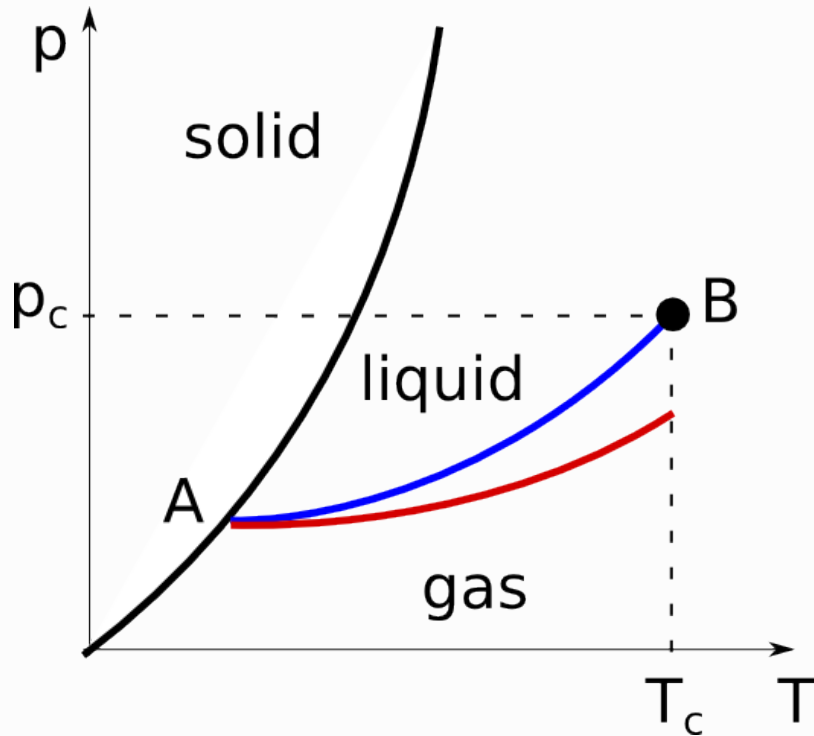


**Małgorzata Zubaszewska**

*Capillary condensation in a square geometry with surface fields,*  
M. Zubaszewska, A. Gendiar, A. Drzewiński, Physical Review E 86, 062104 (2012)

Wrocławskie Centrum Sieciowo-Komputerowe,  
05.02.2013 r

# Kondensacja kapilarna

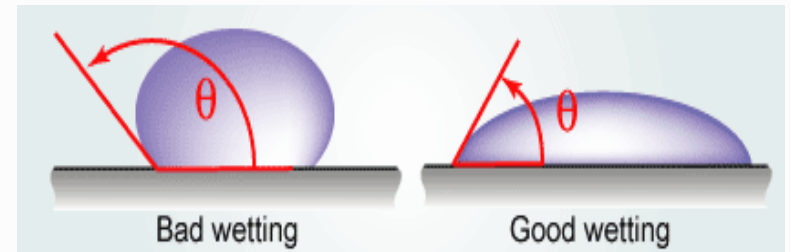


$$H_{coe}(L) = \frac{1}{L} \frac{\sigma_0 \cos(\theta)}{m_b}$$

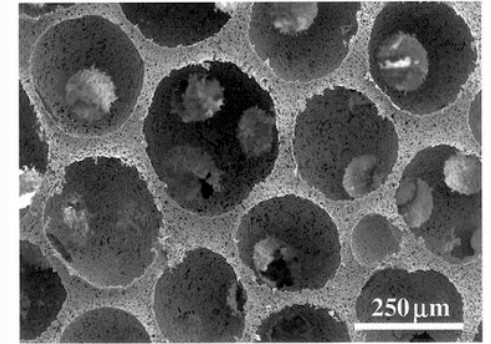
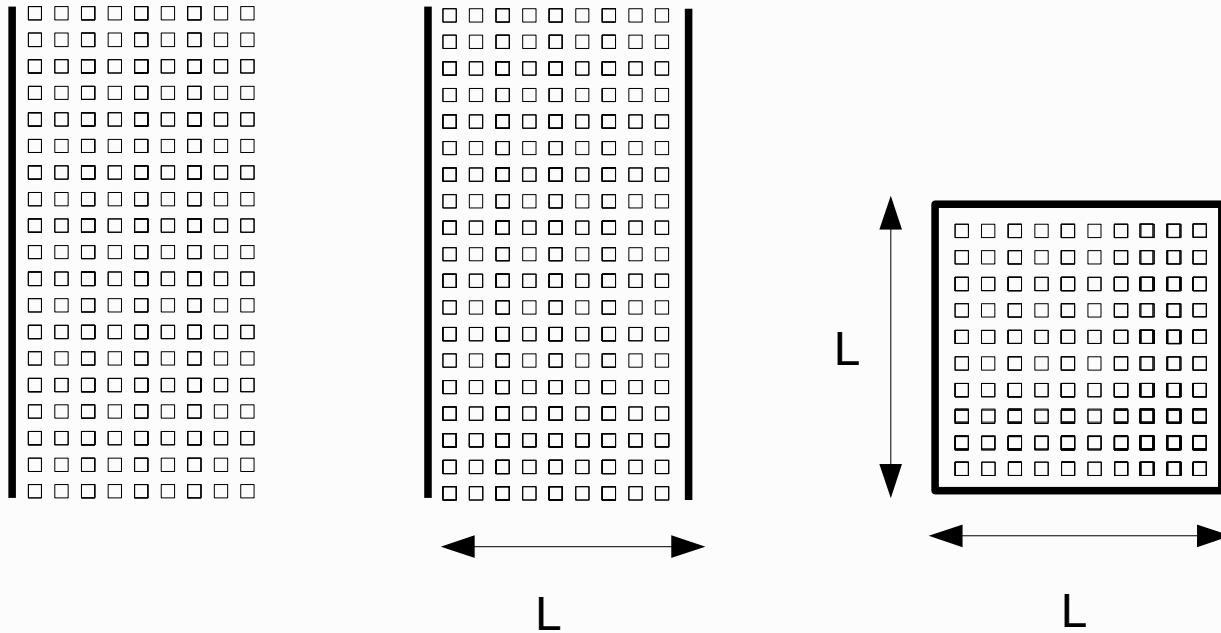
$\sigma_0$  - napięcie powierzchniowe

$m_b$  - spontaniczna magnetyzacja

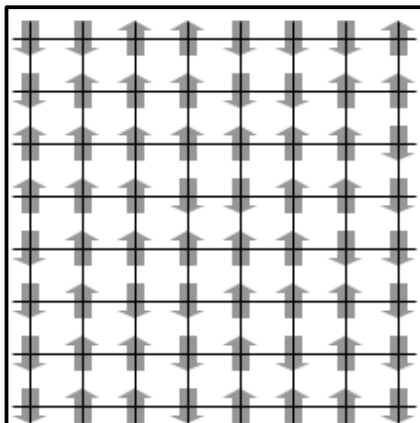
$\theta$  - kąt zwilżania



# Zjawiska krytyczne a geometria układu



## Model Isinga



$$H = -J \left( \sum_{ij} s_i s_j - h_1 \sum_{\text{surface spins}} s_k - H \sum_{\text{all spins}} s_k \right)$$

$$J > 0$$

$$s_i = \pm 1$$

# Formalizm zespołu kanonicznego

$$Z = \sum_{\sigma} \exp\left(\frac{-H(\sigma)}{K_B T}\right)$$

$$f_{N \times M} = \frac{-k_B T}{N \cdot M} \ln Z_{N \times M}$$

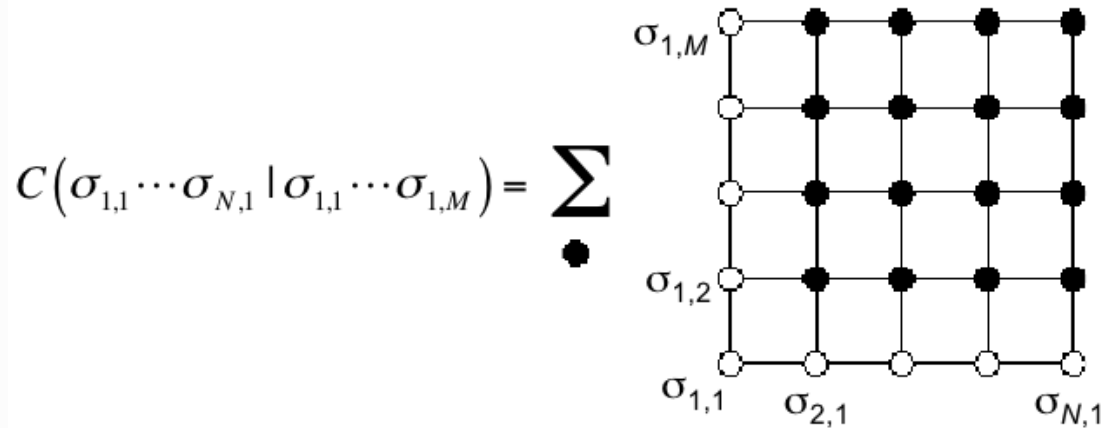
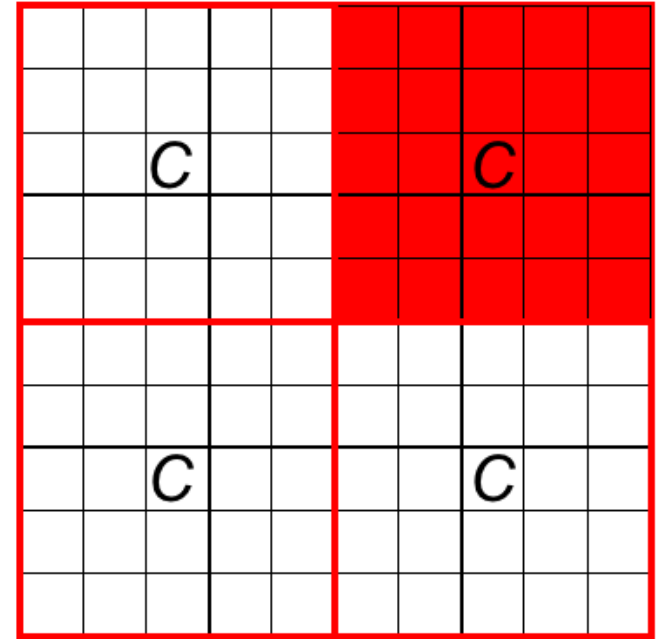
Funkcje termodynamiczne:

$$\begin{array}{ll} U \propto T^2 \frac{\partial f / T}{\partial T} & M \propto \frac{\partial f}{\partial H} \\ C \propto \frac{\partial U}{\partial T} & \chi \propto \frac{\partial f}{\partial H} \end{array}$$

**METODA**

# Co to jest Corner Transfer Matrix?

$$Z = \sum_{\{\sigma\}} C\{\sigma\} \cdot C\{\sigma\} \cdot C\{\sigma\} \cdot C\{\sigma\} \equiv \sum_{\{\sigma\}} C^4$$



$$C(\sigma_{1,1} \cdots \sigma_{N,1} | \sigma_{1,1} \cdots \sigma_{1,M}) = \sum_{i=2}^N \sum_{j=2}^M \prod_{i=1}^{N-1} \prod_{j=1}^{M-1} W_B(\sigma_{i,j} \sigma_{i+1,j} | \sigma_{i,j+1} \sigma_{i+1,j+1})$$

# Jak rozszerzyć CTM

$$C_1 = \sum_{\bullet} \text{Diagram}$$

The diagram shows a square with four white nodes and one black node at the top-right corner. The edges are labeled 'W'.

$$\dim(C_1) = 2^3$$

Expansion

$$C_2 = \sum_{\bullet} \text{Diagram}$$

The diagram shows a 2x2 grid of squares. The top-left square is labeled 'C1'. The top-right square has a black node at its top-right corner and is labeled 'T'. The bottom-left square has a black node at its bottom-left corner and is labeled 'W'. The bottom-right square has a black node at its bottom-right corner and is labeled 'T'.

$$\dim(C_2) = 2^5$$

Expansion

$$C_3 = \sum_{\bullet} \text{Diagram}$$

The diagram shows a 3x2 grid of squares. The top-left square is labeled 'C2'. The top-right square has a black node at its top-right corner and is labeled 'T'. The bottom-left square has a black node at its bottom-left corner and is labeled 'W'. The bottom-right square has a black node at its bottom-right corner and is labeled 'T'.

$$\dim(C_3) = 2^7$$

$$C_{k+1} = \sum W T^2 C_k$$

$$\dim(C_k) = 2^{2k+1}$$

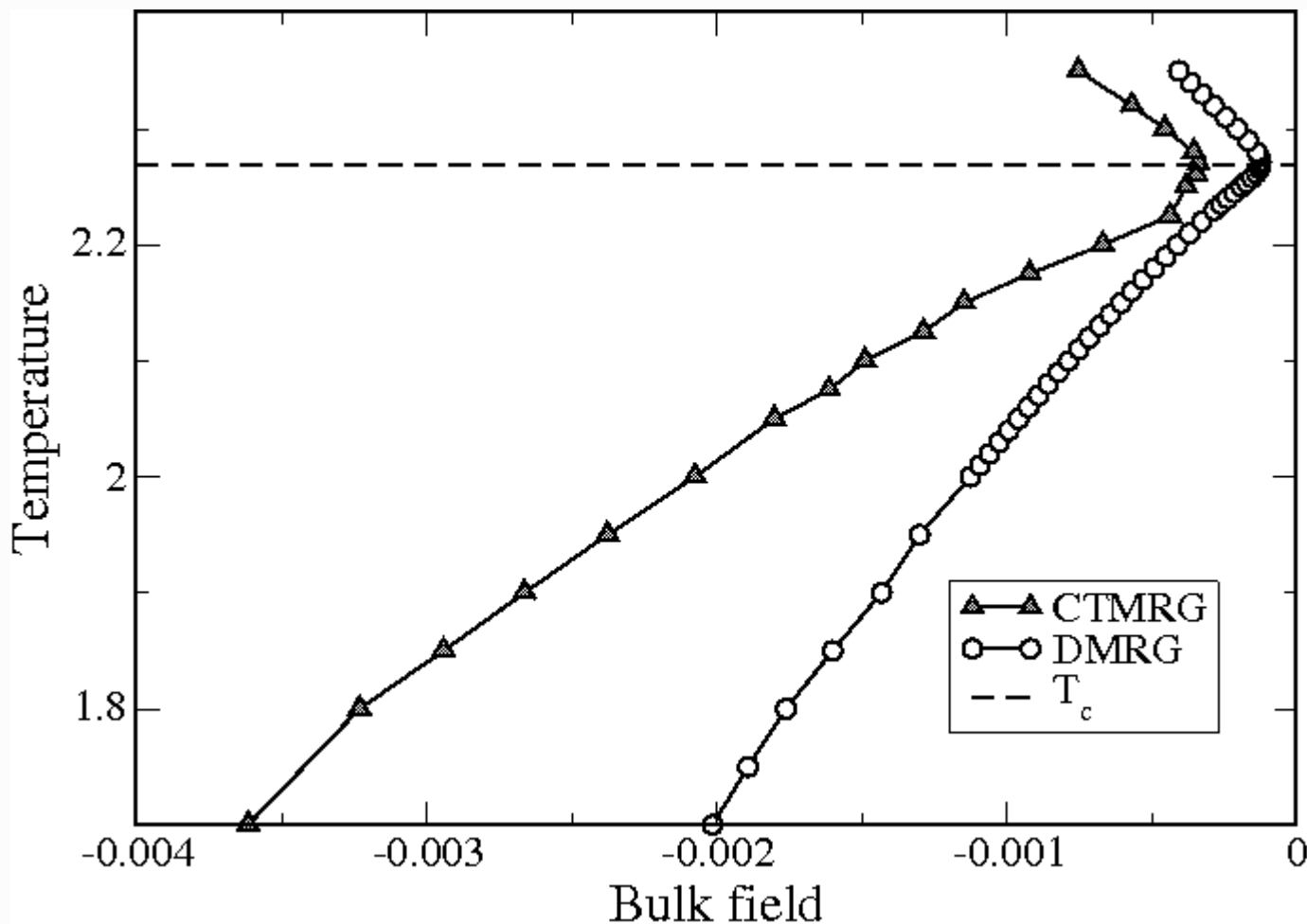
# CTMRG

- Wraz ze wzrostem wielkości układu, liczba stopni swobody rośnie wykładniczo.
- Używamy transformacji grupy renormalizacyjnej, aby zachować stałą liczbę stopni swobody.
- Tworzymy zredukowaną macierz gęstości, której wektory rozpinają przestrzeń najbardziej prawdopodobnych stanów.



Otrzymane wyniki

# Linia współistnienia dla kwadratu i szczeliny



# Wyznaczenie poprawki do równania Kelvina

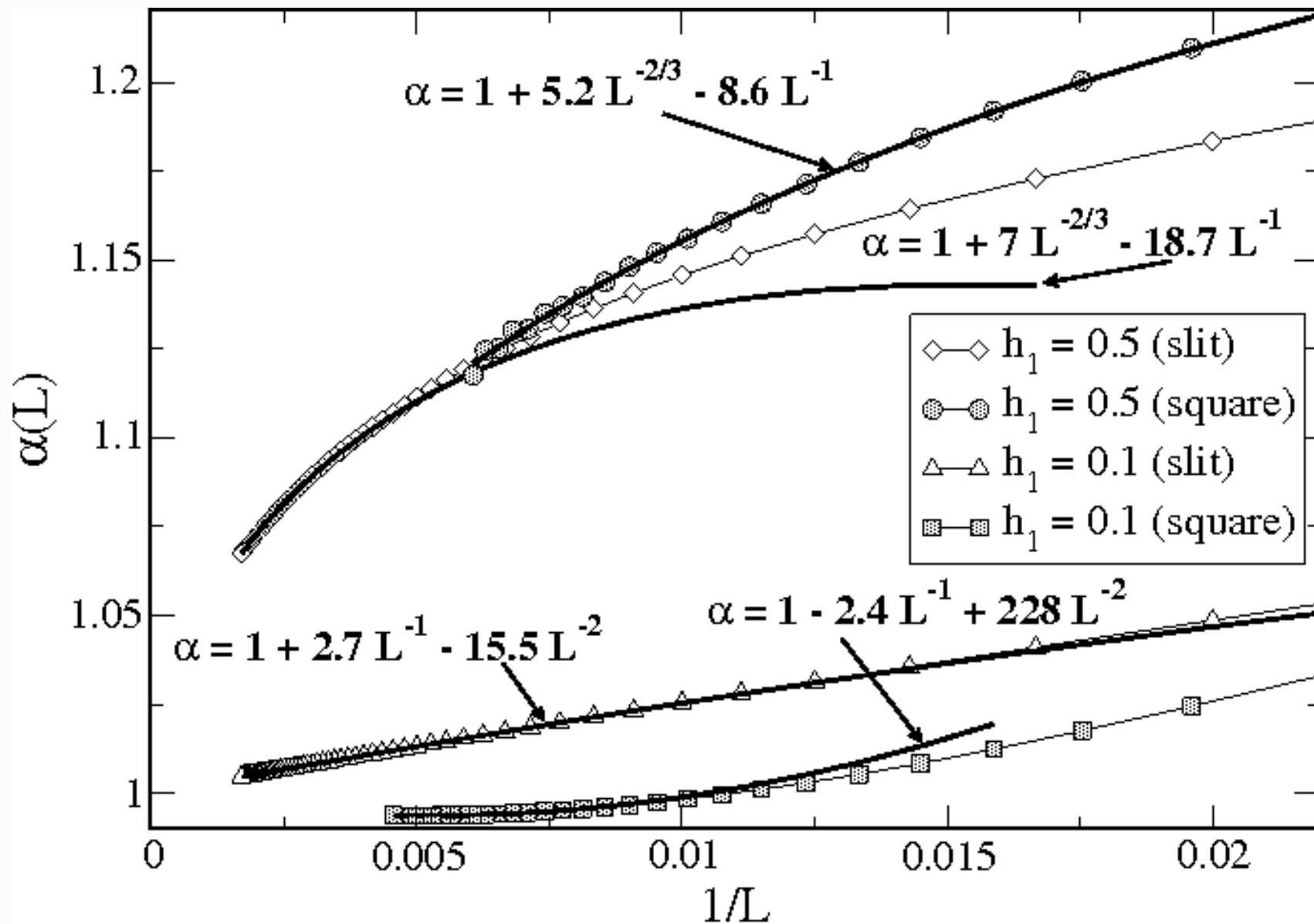
$$H_{coe}(L) = \frac{\sigma_0 \cos \theta}{m_b} \frac{1}{L}$$

$$\alpha(L) = -\frac{\ln[H_{coe}(L + \Delta L)] - \ln[H_{coe}(L)]}{\ln(L + \Delta L) - \ln(L)}$$

$$H_{coe} = \frac{A}{L^\alpha} + \frac{B}{L^\gamma}$$

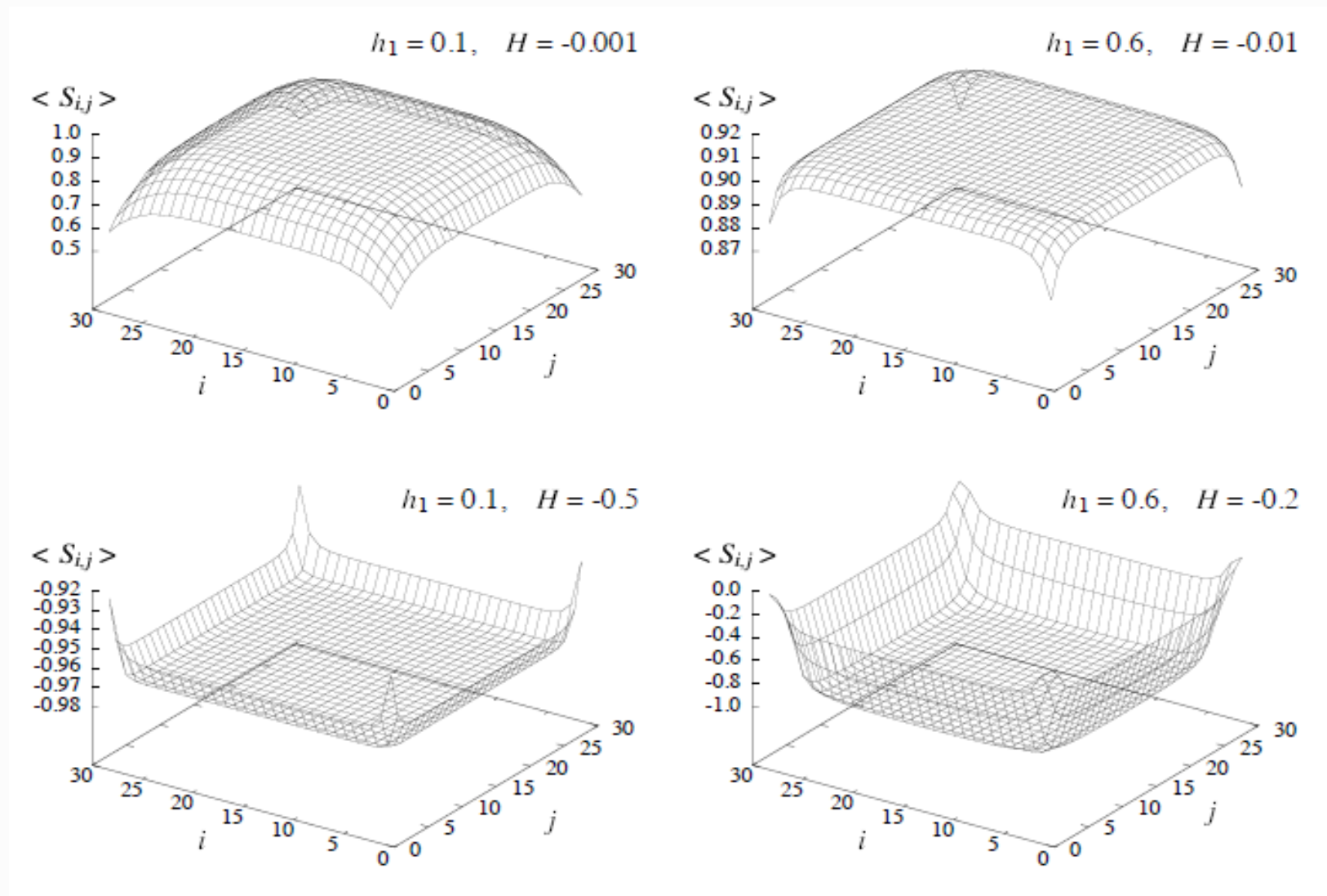
$$\alpha(L) = \alpha + (\gamma - \alpha) \frac{B}{A} \frac{1}{L^{\gamma-\alpha}}$$

# Efektywny wykładnik dla geometrii paska i kwadratu ( $T=2.1$ )





# Profile magnetyzacji 31 x 31 (T=2.0)



$$\langle s_{i,j} \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\sigma} s_{i,j} \exp\left(\frac{-H(\sigma)}{K_B T}\right)$$

# Podsumowanie

- Metoda CTMRG:
  - okazała się odpowiednia i satysfakcjonująca jako narzędzie służące do badania układów cieczy prostych w ograniczonej geometrii kwadratu,
  - nie jest perturbacyjna, może być stosowana dla dowolnych wartości parametrów rozpatrywanego modelu,
  - dostarcza dokładne wyniki, ze względu na ilość utrzymanych stanów.
- Otrzymane wyniki potwierdzają, że dla geometrii kwadratu:
  - przesunięta linia współistnienia jest odwrotnie proporcjonalna do wielkości układu,
  - Główny współczynnik  $A$  jest dwukrotnie większy niż dla geometrii szczeliny,
  - Wykładnik dominującej poprawki jest taki sam jak dla szczeliny
  - Poprawka rządząca do równania Kelvina przyjmuje wartość ujemną w obszarze niezwilżonym.

Dziękuję za uwagę!!!