

简立方格点自避行走所模拟的高分子链吸附和塌缩*

李晓毅 李 鑫** 吴大诚***

(四川大学纺织学院 成都 610065)

赵得禄

(中国科学院化学研究所 高分子物理及化学国家重点实验室 北京 100080)

摘 要 采用复合 Markov 链法, 针对简立方格点上的自避行走模型, 研究了同时具有对壁的吸附作用 ϵ_1 和最近邻相互作用 ϵ_2 的高分子链的热力学性质. 相互作用能量参数 ϵ_1 和 ϵ_2 分别联系于参数 α 和 β . 令链长 $N = 100$, 由这种 Monte Carlo 方法可得出链的自由能 $F_N(\alpha, \beta)$, 热容 $\partial^2 F_N(\alpha, \beta)/\partial^2 \alpha$ 和 $\partial^2 F_N(\alpha, \beta)/\partial^2 \beta$, 吸附点平均数 $\langle m \rangle/N$, 最近邻相互作用对平均数 $\langle n \rangle/N$ 和均方末端距对壁的垂直分量 R_z^2 . 除已有方法由热容数据可绘出 α - β 相图外, 建议由结构参数 $\langle m \rangle/N$, $\langle n \rangle/N$ 和 R_z^2 绘制相图, 并发现二者基本一致. 所得相图表明, 存在 4 个相区, 分别是解吸-膨胀相(DE), 吸附-膨胀相(AE), 解吸-紧密相(DC)和吸附-紧密相(AC). 在伸展区和塌缩区, 随着吸附作用的增强, 会出现吸附相转变. 在解吸区和吸附区, 随着自相互作用的增大, 也将出现塌缩相转变. 相图出现了两个三相点, 即 AE-AC-DC 三相点和 AE-DE-DC 三相点.

关键词 自避行走, 吸附, 塌缩, 最近邻相互作用, 相图

自避行走(Self-avoiding walk, 简称 SAW)模型不仅是研究溶液中高分子性质的标准模型, 还可以作为界面吸附的模型基础^[1,2]. 界面吸附问题可以通过对有吸附壁存在的二维和三维格点上 SAW 的研究来模拟, 引入 SAW 与壁之间的吸引相互作用, 结果发现该体系可能有吸附相变^[3-6]发生. 吸附不仅可以在良溶剂溶液中进行, 也可以在不良溶剂溶液中进行, 这种情况与大部分实际情况相符合.

为了模拟高分子在不同溶剂中的性质, 可以在 SAW 模型中引入最近邻相互作用能 ϵ . 采用 Monte Carlo 模拟, 精确计数和重整化群等一些方法研究这个体系, 结果表明有塌缩相变的存在^[7-9], 这一相变点的问题引起了人们广泛的关注^[10-14].

过去大多数研究工作中对高分子链的吸附和塌缩现象是分别研究的. 然而, 在实际体系中, 吸附和塌缩可能同时发生, 二者可能相互协同或竞争, 是一种相当复杂的现象, 显然不能得到简单的解析表示. 同时考虑吸引相互作用和最近邻相互作用比较复杂, 尚需进一步研究. 吸附-塌缩模型可以用场论方法进行理论研究, 也有人用 SAW 模

型作二维的模拟. 直到最近才有一些报道^[15-18]. Vrbov 和 Whittington^[15] 曾经从理论上预示过模型链在吸附和塌缩相互作用时的相图, 认为存在四个相, 它们分别是解析-膨胀相(Desorbed-expanded, 简称 DE)、吸附-膨胀相(Adsorbed-expanded, 简称 AE)、解析-紧密相(Desorbed-compact, 简称 DC)和吸附-紧密相(Adsorbed-compact, 简称 AC).

本工作采用简立方格点上的 SAW 为模型链, 应用复合 Markov 链法, 研究了在吸附壁和最近邻相互作用同时存在的条件下, 高分子链的形状和热力学性质.

1 模型和算法

1.1 模型

在三维简立方格子(x, y, z)中, 令 $z = 0$ 的平面为一吸附壁, SAW 的起点在壁上, 整个模型链都不能穿透壁, 即自避行走每一步的坐标必须满足条件自避和 $z \geq 0$. 令模型链上每个走到吸附壁上的点(即坐标 $z_i = 0$ 的点)贡献吸附作用能 ϵ_1 , 令每一对最近邻点(即在高分子链上并不顺序

* 2000-11-09 收稿, 2000-12-12 修稿; 国家自然科学基金资助项目(基金号 29774016); 国家基础性重大关键项目——高分子凝聚态基本物理问题研究; 国家重点基础研究专项经费资助(G1999064800); ** 现在中国纺织科学研究院; *** 通讯联系人

相连,但有一个坐标值相差 1,其它两个坐标值相等的点)贡献最近邻作用能 ϵ_2 . 例如,在图 1 中,点 0, $i+1$, $i+2$ 都是吸附壁上的点,贡献吸附作用能 ϵ_1 ,点对 2-5 和 $i-i+3$ 是两对最近邻点,每对贡献最近邻作用能 ϵ_2 . 统计每一个样本链的吸附点数 m 和最近邻点数 n ,就能求出每个样本链的内能,再统计平均,从而求出这些和其它的统计热力学量.

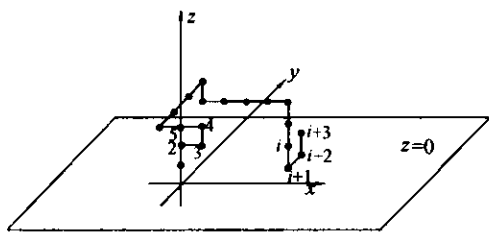


Fig. 1 Representation of a model polymer chain terminally

1.2 复合 Markov 链算法

我们所计算 SAW 的链长 $N = 100$, 采用 Monte Carlo 模拟中的枢轴算法^[19]. 首先初始化一条链,然后随机选取链上一点作为轴点进行枢轴运动.若新构象满足自避和 $z \geq 0$ 条件,则被接受,统计所求量;若新构象不满足条件,则旧构象被重新统计一次.

为了研究模型链热力学性质随温度的变化,需要在不同的温度下分别进行模拟.当温度较低时,Markov 链收敛到平衡态的速度很慢,而且还可能因为不能翻越一个小的能垒而长时间在一个小的构象空间内抽样,从而导致在有限的样本数内统计效果较差.为了便于更好统计低温性质,我们采用了多重马可夫链法(Multiple markov chains method)^[20].

多重马可夫链法的主要思想是同时构造一组不同温度的 Markov 链平行运动,每隔一段时间任意选取一对相邻温度的 Markov 链,以概率 W 进行交换^[21].其交换概率 W 为:

$$W(T, T') = \exp\{-E(T)/k_B T' + E(T')/k_B T - E(T)/k_B T - E(T')/k_B T'\} \quad (1)$$

式中 T 和 T' 为绝对温度, $E(T)$ 为温度 T 所对应的势能, $E(T')$ 为温度 T' 所对应的势能, k_B 为 Boltzmann 常数.这样就能避免因为低温而长时间在一个小范围构象空间抽样的问题.

但是,用多重马可夫链法时要注意最高温度应足够高,一般最高温度取无穷大,以使在此温度

下很容易到达各个构象空间.每个相邻温度温差不可太大,以保证交换概率足够高.

1.3 所需统计的物理量

定义配分函数为

$$Z_N(\alpha, \beta) = \sum_{m,n} C_N(m, n) \exp(\alpha m + \beta n) \quad (2)$$

其中 α 为吸附点与吸附壁的作用参数(Vertex-plane interaction parameter), β 为链段近邻作用参数(Vertex-vertex interaction parameter), 定义为:

$$\alpha = -\epsilon_1/k_B T \quad (3)$$

$$\beta = -\epsilon_2/k_B T \quad (4)$$

$C_N(m, n)$ 是链长为 N , 吸附点数(Number of visits) 为 m , 最近邻相互作用对数(Number of contacts) 为 n 的构象数, k_B 是 Boltzmann 常数.根据热力学基本原理,自由能 $F_N(\alpha, \beta)$ 为

$$F_N(\alpha, \beta) = N^{-1} \ln Z_N(\alpha, \beta) \quad (5)$$

热容为

$$\frac{\partial^2 F_N(\alpha, \beta)}{\partial \alpha^2} = N^{-1} (\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2) \quad (6)$$

$$\frac{\partial^2 F_N(\alpha, \beta)}{\partial \beta^2} = N^{-1} (\langle n^2 \rangle - \langle n \rangle^2) \quad (7)$$

令 M 为样本数, 吸附点平均数(Mean number of visits per edge) 为

$$\langle m \rangle / N = \frac{1}{MN} \sum_m m \quad (8)$$

最近邻相互作用对平均数(Mean number of contacts per edge) 为

$$\langle n \rangle / N = \frac{1}{MN} \sum_n n \quad (9)$$

均方末端距垂直分量统计平均值为

$$\langle R_z^2 \rangle = \frac{1}{M} \sum (z_n - z_0)^2 \quad (10)$$

2 模拟结果和讨论

2.1 热容

首先,我们计算了当 $\alpha = 0, 0.2, 0.3, 0.4, 0.6, 0.8, 0.9$ 和 1.3 时热容 $\partial^2 F_N(\alpha, \beta) / \partial \beta^2$ 随 β 的变化,并作图 2.从图 2 可以看出,当 $\alpha \leq 0.8$ 时,随着 β 的增大, $\partial^2 F_N(\alpha, \beta) / \partial \beta^2$ 也逐渐增大,达到一最大值,然后再逐渐减小,这个峰值的位置在 0.4 附近.当 $\alpha = 1.3$ 时,随着 β 的增大, $\partial^2 F_N(\alpha, \beta) / \partial \beta^2$ 出现两个峰值.热容峰的出现往往代表着相变的发生,其位置正是相变点.那么,当 α 较小时,吸附作用较弱,热容峰应是塌缩相变的结果,即 DE-DC 相变;随着 α 的增大,当 $\alpha \geq 0.5$ 时,热

容峰的出现可能是塌缩和吸附共同作用的结果,此时发生 AE-DC 相变;当 $\alpha = 1.3$ 时出现双峰,预示 $\partial^2 F_N(\alpha, \beta)/\partial \beta^2 - \beta$ 线跨越了三个相,即 AE-DC-AC 相变.

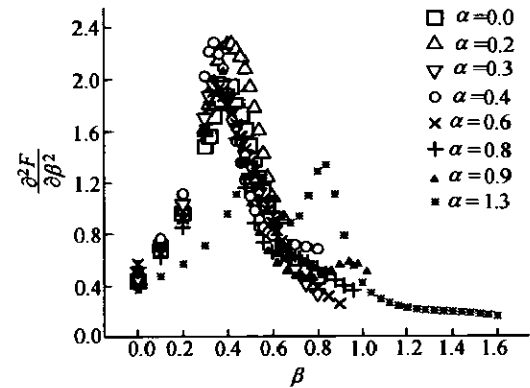


Fig. 2 Relationship between the heat capacity $\partial^2 F / \partial \beta^2$ and the vertex-vertex interaction parameter β at different vertex-plane interaction parameters α ($N = 100$)

然后,我们又计算了当 $\beta = 0, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.6, 0.99$ 和 1.3 时,热容 $\partial^2 F_N(\alpha, \beta)/\partial \alpha^2$ 随 α 的变化,并作图 3.从图 3 可以看出,当 $\beta \leq 0.4$ 时, $\partial^2 F_N(\alpha, \beta)/\partial \alpha^2 - \alpha$ 图有一个热容峰,峰值位置在 $\alpha = 0.4$ 左右.这时高分子链内的最近邻相互作用较弱,热容峰预示着吸附相变,即 DE-AE 相变.当 $\beta \geq 0.5$ 时,在 $\partial^2 F_N(\alpha, \beta)/\partial \alpha^2 - \alpha$ 图上出现双峰, α 值较小的峰当链长 N 增大时将消失,因此在讨论 $N \rightarrow \infty$ 渐近行为时可以不考虑此峰;而对第二个峰值的 α 位置迅速增大,这也是吸附和塌缩共同作用的结果,此时发生 DC-AC 相变.

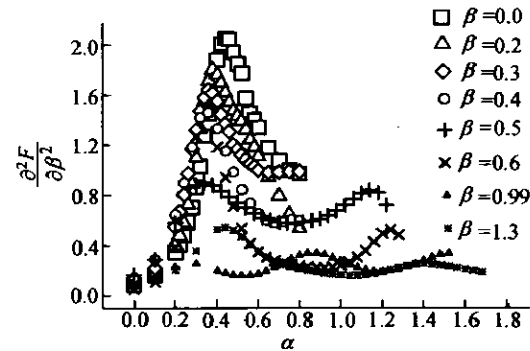


Fig. 3 Relationship between the heat capacity $\partial^2 F / \partial \alpha^2$ and the vertex-plane interaction parameter α at different vertex-vertex interaction parameters β ($N = 100$)

2.2 吸附点和最近邻点的平均值

为了进一步判断相变点的性质,我们统计了

在峰值附近吸附点数和最近邻点数的统计平均值随链长的变化.图 4 表示 $\alpha = 0, 0.2, 0.3, 0.4, 0.6, 0.8, 0.9$ 和 1.3 时 $\langle n \rangle / N - \beta$ 关系.从图 4 可以看出,当 $\alpha \leq 0.3$ 时,随着 β 的增大, $\langle n \rangle / N$ 也逐渐增大, $\langle n \rangle / N - \beta$ 线较平滑,当 $\alpha \geq 0.4$ 时,随着 β 的增大, $\langle n \rangle / N - \beta$ 线的有一段转折区域越来越明显, $\langle n \rangle / N$ 突然急速增大,最近邻数目的突变,预示着在这个区域可能有一塌缩相转变.

为进一步确定相变点的位置,将 $\langle n \rangle / N - \beta$ 曲线微分,求出其极大值(图 5).可以认为,出现 $\langle n \rangle$ 速率增加的极大值这一点,就是相变点.

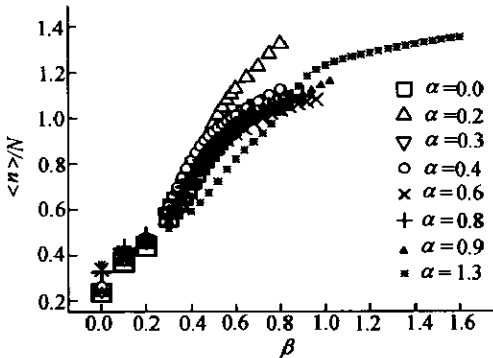


Fig. 4 Relationship between the mean number of contacts per edge $\langle n \rangle / N$ and the vertex-vertex interaction parameter β at different vertex-plane interaction parameters α ($N = 100$)

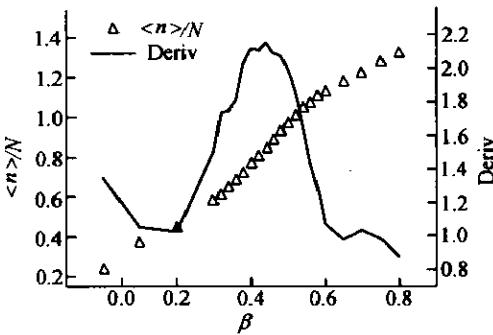


Fig. 5 The mean number of contacts per edge $\langle n \rangle / N$ as a function of the vertex-vertex interaction parameter β and its derivative ($\alpha = 0.2$)

图 6 表示当 $\beta = 0, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.6, 0.99$ 和 1.3 时, $\langle m \rangle / N - \alpha$ 关系.从图 6 可以看出,在 β 所取值的整个范围内,随着 α 的增大, $\langle m \rangle / N$ 也增大,并且出现一急速增大区域, $\langle m \rangle / N - \alpha$ 线有明显拐点,吸附点数目突变,说明在这个区域内很可能存在吸附-解吸相变.

同样,为进一步确定相变点的位置,将 $\langle m \rangle /$

N - α 曲线微分, 求出其值为极大的相变点, 例如图 7.

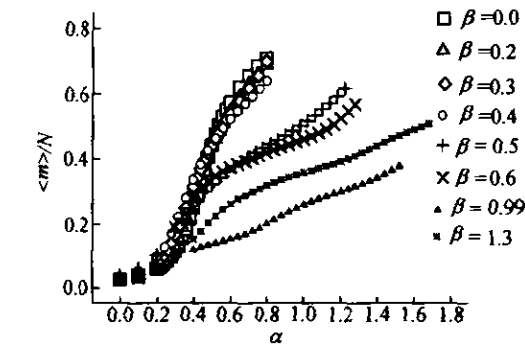


Fig. 6 Relationship between the mean number of visits per edge $\langle m \rangle/N$ and the vertex-plane interaction parameter α at different vertex-vertex interaction parameters β ($N = 100$)

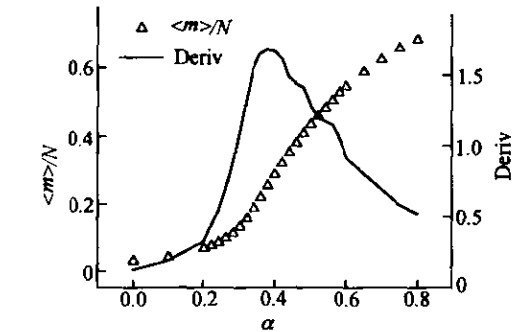


Fig. 7 The mean number of visits per edge $\langle m \rangle/N$ as a function of the vertex-plane interaction parameter α and its derivative ($\beta = 0.2$)

2.3 均方末端距垂直分量

均方末端距垂直分量也能说明相变点的位置和特征. 图 8 表示当 $\alpha = 0, 0.2, 0.3, 0.4, 0.6$ 和 0.8 时 R_z^2 与 β 的关系. 从图 8 看出, 在当 $\alpha \leq 0.4$ 时, 吸附作用还不强, 高分子链应该处于解吸状态, R_z^2 随 β 增大而减小, R_z^2 - β 线有明显拐点, 说明在这个区域内存在塌缩相变. 而当 $\alpha \geq 0.6$ 时, R_z^2 在较小范围内变动, 不易观察到它的变化趋势. 可以肯定的是, 在 α 整个取值范围内, 随着 α 的增大, R_z^2 逐渐减小.

图 9 表示当 $\beta = 0, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.6$ 和 0.99 时, R_z^2 与 α 的关系. 从图 9 可以看出, 当 $\beta \leq 0.6$ 时, R_z^2 变化较大, R_z^2 - α 线有明显拐点, 而这时高分子链内部的自相互作用不大, 因此这个区域存在吸附相变. 当 β 增大时, R_z^2 变化区域减小, 但 R_z^2 - α 线还是有明显拐点, 这时可能是塌缩

和吸附共同作用的结果. 同样, 也可以对 R_z^2 - β 和 R_z^2 - α 求微分, 由其极小值来确定相变点, 例如图 10.

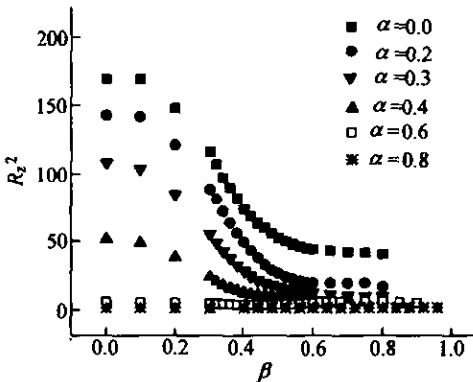


Fig. 8 Relationship between the z -component R_z^2 of mean square end-to-end distance and the vertex-vertex interaction parameter β at different vertex-plane interaction parameters α ($N = 100$)

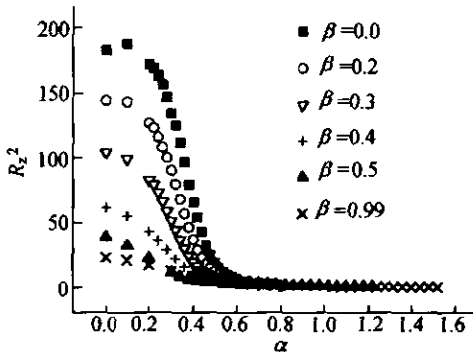


Fig. 9 Relationship between the z -component R_z^2 of mean square end-to-end distance and the vertex-plane interaction parameter α at different vertex-vertex interaction parameters β ($N = 100$)

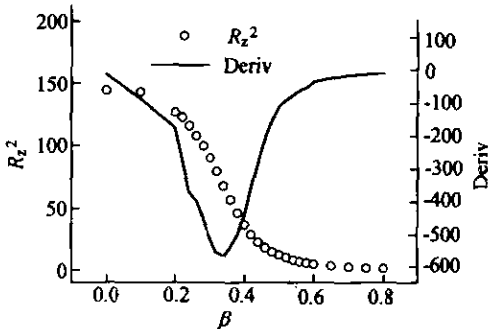


Fig. 10 The z -component R_z^2 of mean square end-to-end distance as a function of the vertex-plane interaction parameter α and its derivative ($\beta = 0.2$)

2.4 相图

2.4.1 由热容峰位置确定的相图 根据在 α 固定时 $\partial^2 F/\partial\beta^2-\beta$ 热容峰以及在 β 固定时 $\partial^2 F/\partial\alpha^2-\alpha$ 热容峰的位置,作出了 $\alpha-\beta$ 相图,见图 11. 从图 11 可以看出,在分子内最近邻相互作用较弱的伸展区和最近邻相互作用较强的塌缩区,都有吸附相转变.同样,在吸附作用弱的解吸区和吸附作用强的吸附区,都有塌缩相转变.

在相图上,有 5 种相边界,其中 AE-DE 相边界和 AE-DC 相边界比较清楚, AC-DC 相边界也可以看出.但是,DE-DC 边界基本上是一条竖直线, AE-AC 相边界不能确定,原因是 AE-AC 相边界位于 α 和 β 值都较大的地方,即使是复合 Markov 链法也需非常大的样本数,计算量太大,需要更强大的计算机和更有效的计算方法.但是,从趋势看,AE-AC 边界大致在图上的虚线处.

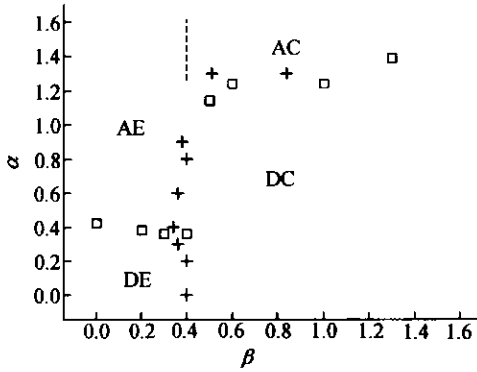


Fig. 11 The locations of the heat capacity peaks (open squares correspond to peaks in $\partial^2 F/\partial\alpha^2-\alpha$ at fixed β , crosses correspond to peaks in $\partial^2 F/\partial\beta^2-\beta$ at fixed α)

2.4.2 由结构参数 $\langle m \rangle / N, \langle n \rangle / N$ 和 R_z^2 确定的相图 根据 α 固定时, $\langle n \rangle / N - \beta$ 的微分曲线以及 β 固定时 $\langle m \rangle / N - \alpha$ 的微分曲线,也可以作出 $\alpha-\beta$ 相图,见图 12. 图 12 上同时标出了由 $R_z^2-\alpha$ 和 $R_z^2-\beta$ 的微分曲线所作出的 $\alpha-\beta$ 相边界.十分有趣, R_z^2 的变化可以十分直观地代表链的形态.

当 α 值很大时,表示吸附作用很大,模型链紧贴在吸附壁上,使均方末端距垂直分量非常小,不易找出其变化,因此相图上只作了 $\alpha \leq 0.6$ 时 $R_z^2-\beta$ 曲线的拐点.同理,当 β 值很大时,最近邻相互作用强,高分子链处于紧密相,均方末端距各个分量都很小,也不易找出其变化, $R_z^2-\alpha$ 曲线的拐点也只作到 $\beta \leq 0.4$.从图 11 和 12 可以看出,由结果参数所作出的相图与热容峰作出的相图基本

一致.很有趣的是,图 11 和 12 都反应出了两个三相点,即 AE-AC-DC 三相点和 AE-DE-DC 三相点.

图 13 示意四个相中高分子链的形态,其中 I 代表 DE 相, II 代表 AE 相, III 代表 DC 相, IV 代表 AC 相.根据图 13,直观上看来,链尺寸与壁的平行分量对于相变也会十分敏感,可能会得出 AE-AC 更详尽的信息,我们正对此作进一步研究.

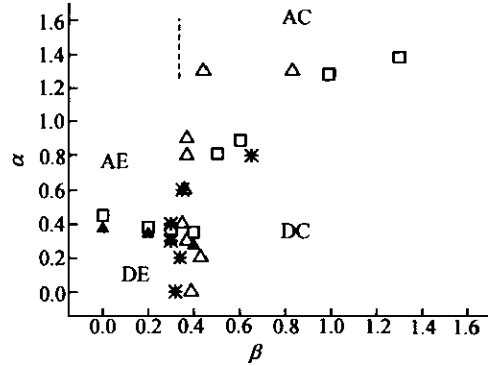


Fig. 12 The locations of peaks in derivative lines (open squares correspond to peaks in derivative of $\langle m \rangle / N - \alpha$ at fixed β , open triangles correspond to peaks in derivative of $\langle n \rangle / N - \beta$ at fixed α , solid triangles correspond to peaks in derivative of $R_z^2 - \alpha$ at fixed β , stars correspond to peaks in derivative of $R_z^2 - \beta$ at fixed α)

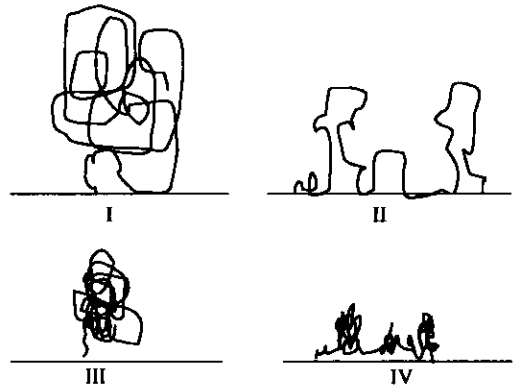


Fig. 13 Schematic representation of molecular conformation in desorbed-expanded (I), adsorbed-expanded (II), desorbed-collapsed (III) and adsorbed-compact (IV) phases

为了模拟高分子链的吸附和塌缩,可以采用三维简立方格点上同时具有壁作用和最近邻相互作用的自避行走模型,利用复合 Markov 链法能够有效处理.采用这一模型,由计算机模拟可以得到链的自由能 $F_N(\alpha, \beta)$, 热容 $\partial^2 F_N(\alpha, \beta) / \partial^2 \alpha$ 和 $\partial^2 F_N(\alpha, \beta) / \partial^2 \beta$, 吸附点平均数 $\langle m \rangle / N$, 最近邻相互作用对平均数 $\langle n \rangle / N$ 和均方末端距对壁的

垂直分量 R_z^2 。

除了采用热容峰值可以得到相图外,利用结构参数 $\langle m \rangle / N$, $\langle n \rangle / N$ 和 R_z^2 也可以作出相图,两种方法所得相图是一致的。计算机模拟结果表明有四个相存在,它们分别是解吸-膨胀相、吸附-膨

胀相、解吸-紧密相和吸附-紧密相。

相图表明,在伸展区和塌缩区,都存在吸附相转变;在解吸区和吸附区,也都存在塌缩相转变,并且相图还出现了两个三相点,即 AE-AC-DC 三相点和 AE-DE-DC 三相点。

REFERENCES

- 1 de Gennes P G. Scaling Concepts in Polymer Physics. Ithaca: Cornell University Press, 1979. 39 ~ 42
- 2 Wu Dacheng(吴大诚), Hsu S L. Scaling and Reptation Theory for Polymers(高分子的标度和蛇行理论). Chengdu(成都): Sichuan Edu Press (四川教育出版社), 1989. 60 ~ 67
- 3 Lai P Y. Phys Rev, 1994, 49: 5420 ~ 5430
- 4 Hegger R, Grassberger P. J Phys A: Math Gen, 1994, 27: 4069 ~ 4081
- 5 Lai P Y. J Chem Phys, 1995, 103(13): 5742 ~ 5755
- 6 Whittington S G. J Phys A: Math Gen, 1998, 31: 3769 ~ 3775
- 7 Seno F, Stella A L. J Phys France, 1988, 49: 739 ~ 748
- 8 Meirovitch H, Lim H A. J Chem Phys, 1989, 91(4): 2544 ~ 2554
- 9 Binder P M, Owczarek A L, Veal A R, Yeomans J M. J Phys A: Math Gen, 1990, 23: L975 ~ L979
- 10 Brak R, Guttmann A J, Whittington S G. J Phys A: Math Gen, 1992, 25: 2437 ~ 2446
- 11 Grassberger P, Hegger R. J Phys A: Math Gen, 1996, 29: 279 ~ 288
- 12 Bennett-Wood D, Enting I G, Gaunt D S, Guttmann A J, Leask J L, Owczarek A L, Whittington S G. J Phys A: Math Gen, 1998, 31: 4725 ~ 4741
- 13 Wenbing H. J Chem Phys, 1998, 109(9): 3686 ~ 3690
- 14 Kolinski A, Skolnick J, Yaris R. J Chem Phys, 1986, 85(6): 3585 ~ 3597
- 15 Vrbová T, Whittington S G. J Phys A: Math Gen, 1996, 29: 6253 ~ 6264
- 16 Vrbová T, Whittington S G. J Phys A: Math Gen, 1998, 27: 3989 ~ 3998
- 17 Vrbová T, Procházka K. J Phys A: Math Gen, 1999, 32: 5469 ~ 5475
- 18 Singh Y, Kumar S, Giri D. J Phys A: Math Gen, 1999, 32: L407 ~ L411
- 19 Madras N, Sokal A D. J Stat Phys, 1988, 50: 109 ~ 186
- 20 Geyer C J. Computer Science and Statistics. New York: North-Holland, 1991. 156
- 21 Tesi M C, Janse van Rensburg E J, Orlandini E, Whittington S G. J Stat Phys, 1996, 82: 155 ~ 181

ADSORPTION AND COLLAPSE OF A POLYMER CHAIN MODELED BY A SELF-AVOIDING WALK ON THE CUBIC LATTICE

LI Xiaoyi, LI Xin, WU Dacheng

(Textile College, Sichuan University, Chengdu 610065)

ZHAO Delu

(State Key Laboratory of Polymer Physics and Chemistry, Institute of Chemistry,
Chinese Academy of Sciences, Beijing 100080)

Abstract The thermodynamic properties of a polymer chain with a length of $N = 100$ near an adsorbed surface, modeled by a self-avoiding walk on the simple cubic lattice in addition to both the vertex-plane interaction energy ϵ_1 and the vertex-vertex interaction energy ϵ_2 , were calculated by means of the multiple Markov chains method. These two interaction energy terms ϵ_1 and ϵ_2 were related to the vertex-plane interaction parameter α and the vertex-vertex interaction parameter β . The statistical physical quantities obtained by Monte Carlo simulations include the free energy $F_N(\alpha, \beta)$, the heat capacities $\partial^2 F_N(\alpha, \beta)/\partial^2 \alpha$ and $\partial^2 F_N(\alpha, \beta)/\partial^2 \beta$, the mean number of visits per edge $\langle m \rangle/N$, the mean number of contacts per edge $\langle n \rangle/N$ and the mean square z -component R_z^2 of the end-to-end distance. It suggests a new method to construct the α - β phase diagram by structure parameters $\langle m \rangle/N$, $\langle n \rangle/N$ and R_z^2 , which is very similar to that obtained by the traditional method using peaks of the heat capacity. The α - β phase diagrams indicated that there are four regions of phases, which are desorbed-expanded (DE), adsorbed-expanded (AE), desorbed-compact (DC) and adsorbed-compact (AC). In both expanded phase and compact phase, there were adsorption transitions as the surface interaction increased. In both desorbed and adsorbed phases, there were collapse transitions as the nearest-neighbor interaction increased. It is also found that there are two triple points in the α - β phase diagram, which represent the coexistence of the three phases AE-AC-DC and AE-DE-DC, respectively. and AE-DE-DC, respectively.

Key words Self-avoiding, Adsorption, Collapse, Nearest-neighbor interacting, Phases diagram