

УДК 531.19

Я. Г. Грода, зав. кафедрой, доц., канд. физ.-мат. наук (БГТУ, г. Минск)

ВЛИЯНИЕ ЧИСЛА ЗАБЛОКИРОВАННЫХ УЗЛОВ НА КОЭФФИЦИЕНТ ДИФФУЗИИ РЕШЕТОЧНОГО ФЛЮИДА

В докладе рассмотрен процесс миграции частиц решеточного флюида с притяжением ближайших соседей по плоской квадратной решетке, в которой некоторая часть решеточных узлов является заблокированной, т.е. недоступной как для частиц, так и для вакансий.

Моделирование диффузного процесса в рассматриваемой системе по методу Монте-Карло выполнено с помощью стандартного алгоритма Метрополиса в сочетании с периодическими граничными условиями. При этом моделируемая система представляла собой решетку, содержащую 900 решеточных узлов, а длительность процедуры моделирования составляет 50 000 шагов алгоритма Монте-Карло. Результаты моделирования получались путем усреднения по 1 000 экземпляров описанной системы. При моделировании каждого из этих экземпляров проводилась новая расстановка заблокированных узлов на решетке в соответствии с заданной концентрацией.

Анализ результатов моделирования показал, что вдали от перколяционного предела зависимость среднего квадрата смещения центра масс системы примесных частиц является приблизительно линейной, следовательно – ее аппроксимация позволяет определить кинетический коэффициент диффузии, и изучить его зависимость, как от концентрации примесных частиц, так и от температуры.

В целом зависимость от концентрации качественно повторяет аналогичную зависимость для стандартной модели решеточного флюида на решетке, не содержащей заблокированных узлов. В то же время сопоставление результатов показывает, что в данном случае соотношение Жданова для оценки кинетического коэффициента диффузии дает существенно завышенное значение коэффициента диффузии, и для его оценки может быть предложено соотношение вида

$$D_f = D_0 \frac{\exp[\beta\mu]}{c} P(0,0)(1-\theta)(1-c),$$

где D_0 – коэффициент диффузии лэнгмюровского решеточного газа, θ – концентрация заблокированных узлов; c , μ и $P(0,0)$ – равновесные значения концентрации примесных частиц на решетке, химического потенциала и вероятности двум ближайшим узлам быть вакантными; $\beta=1/k_B T$ – обратная температура, k_B – постоянная Больцмана.

В свою очередь, зависимость кинетического коэффициента диффузии от температуры позволяет определить энергию активации системы, которая линейно возрастает с ростом концентрации заблокированных узлов.