

## ТЕРМОДИФФУЗИЯ В ДВУХКОМПОНЕНТНОЙ РЕШЕТОЧНОЙ МОДЕЛИ

Computer simulations are used for investigating thermal diffusion in two-component lattice systems of interacting particles. Monte-Carlo simulation algorithm is adjusted for peculiarities of the systems considered. The equations connecting the thermal diffusion and kinetic diffusion coefficients are derived for the case of sinusoidal temperature distribution.

**Введение.** Термодиффузия принадлежит к важному классу неравновесных процессов, который используется для разделения веществ, перераспределения компонентов смеси в пространстве, создания термоэлектродвижущей силы и т. п. Решеточные системы рассматриваются как относительно простые модели реальных объектов, таких как твердые электролиты, интеркаляционные соединения, адсорбированные слои на поверхности твердых тел и др. Большое количество работ посвящено исследованию однокомпонентных систем [1–4]. Вместе с тем уже двухкомпонентные системы проявляют качественные отличия в равновесных свойствах и кинетическом поведении, присущие и произвольным многокомпонентным системам [5–7].

Целью данной работы является определение коэффициентов термодиффузии в двухкомпонентном решеточном газе с межчастичным притяжением на основе компьютерного моделирования по методу Монте-Карло. Так как диффузионные характеристики решеточных систем были подробно исследованы ранее [5–7], важным является установление связи между коэффициентами диффузии и термодиффузии.

**1. Аналитическое выражение для коэффициента термодиффузии.** Потoki вещества компонентов двух сортов предполагаются линейно зависящими от термодинамических сил (градиентов свойств), действующих в системе

$$\begin{aligned} J_1 &= -L_{11} \nabla \mu_1 - L_{12} \nabla \mu_2 - L_{1T} \nabla \beta, \\ J_2 &= -L_{21} \nabla \mu_1 - L_{22} \nabla \mu_2 - L_{2T} \nabla \beta, \end{aligned} \quad (1)$$

где  $L_{ij}$ ,  $L_{iT}$  – кинетические коэффициенты;  $\nabla \mu_i$  – градиент химического потенциала соответствующего компонента;  $\nabla \beta$  – градиент обратной температуры ( $\beta = 1/k_B T$ ,  $k_B$  – постоянная Больцмана,  $T$  – абсолютная температура).

Кинетические коэффициенты  $L_{ij}$  определяются следующим образом [8]:

$$\begin{aligned} L_{11} &= \frac{1}{2dMv k_B T} \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \left\langle \sum_{i,j=1}^{N_1} \Delta r_{1i} \cdot \Delta r_{1j} \right\rangle, \\ L_{22} &= \frac{1}{2dMv k_B T} \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \left\langle \sum_{i,j=1}^{N_2} \Delta r_{2i} \cdot \Delta r_{2j} \right\rangle, \\ L_{12} &= \frac{1}{2dMv k_B T} \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \left\langle \sum_{i=1}^{N_1} \Delta r_{1i} \cdot \sum_{j=1}^{N_2} \Delta r_{2j} \right\rangle, \end{aligned} \quad (2)$$

где  $d$ ,  $M$  – соответственно размерность и число узлов решетки;  $v$  – объем, приходящийся на один узел;  $k_B$  – постоянная Больцмана;  $N_1$ ,  $N_2$  – число частиц соответствующего сорта;  $\Delta r_{1(2),i(j)}$  – смещение частицы  $i(j)$  сорта 1(2) за время  $t$ .

Согласно соотношениям взаимности Онсагера,

$$L_{12} = L_{21}. \quad (3)$$

Кинетические коэффициенты диффузии [8]:

$$\begin{aligned} D_{11k} &= \frac{1}{2d} \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{N_1 t} \left\langle \sum_{i,j=1}^{N_1} \Delta r_{1i} \cdot \Delta r_{1j} \right\rangle, \\ D_{22k} &= \frac{1}{2d} \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{N_2 t} \left\langle \sum_{i,j=1}^{N_2} \Delta r_{2i} \cdot \Delta r_{2j} \right\rangle, \\ D_{12k} &= \frac{1}{2d} \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{N_1 t} \left\langle \sum_{i=1}^{N_1} \Delta r_{1i} \cdot \sum_{j=1}^{N_2} \Delta r_{2j} \right\rangle, \\ D_{21k} &= \frac{1}{2d} \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{N_2 t} \left\langle \sum_{i=1}^{N_1} \Delta r_{1i} \cdot \sum_{j=1}^{N_2} \Delta r_{2j} \right\rangle. \end{aligned} \quad (4)$$

Связь между кинетическими коэффициентами (2) и (4) определяется соотношениями

$$\begin{aligned} L_{11} &= \frac{c_1}{v k_B T} D_{11k}, \quad L_{22} = \frac{c_2}{v k_B T} D_{22k}, \\ L_{12} = L_{21} &= \frac{c_1}{v k_B T} D_{12k} = \frac{c_2}{v k_B T} D_{21k}, \end{aligned} \quad (5)$$

где решеточная концентрация компонентов  $c_i = N_i/M$ .

Так как химические потенциалы зависят от концентраций компонентов обоих сортов ( $\mu_1 = f_1(c_1, c_2)$ ,  $\mu_2 = f_2(c_1, c_2)$ ), то их градиенты запишем в следующем виде:

$$\begin{aligned} \nabla \mu_1 &= \left( \frac{\partial \mu_1}{\partial c_1} \right)_{c_2} \nabla c_1 + \left( \frac{\partial \mu_1}{\partial c_2} \right)_{c_1} \nabla c_2, \\ \nabla \mu_2 &= \left( \frac{\partial \mu_2}{\partial c_1} \right)_{c_2} \nabla c_1 + \left( \frac{\partial \mu_2}{\partial c_2} \right)_{c_1} \nabla c_2. \end{aligned} \quad (6)$$

С другой стороны, согласно закону Фика, потоки вещества компонентов могут быть записаны через градиенты концентрации

$$\begin{aligned} J_1 &= -\frac{1}{v} D_{11} \nabla c_1 - \frac{1}{v} D_{12} \nabla c_2 - \frac{1}{vT} D_{1T} \nabla T, \\ J_2 &= -\frac{1}{v} D_{21} \nabla c_1 - \frac{1}{v} D_{22} \nabla c_2 - \frac{1}{vT} D_{2T} \nabla T, \end{aligned} \quad (7)$$

где  $D_{11}$ ,  $D_{12}$ ,  $D_{21}$ ,  $D_{22}$  — соответствующие коэффициенты химической диффузии;  $D_{1T}$ ,  $D_{2T}$  — коэффициенты термодиффузии.

Сопоставляя выражения для потоков вещества (1) и (7) и используя соотношения (6), для определения химических коэффициентов диффузии через кинетические коэффициенты получим

$$\begin{aligned} \frac{1}{v} D_{11} &= L_{11} \left( \frac{\partial \mu_1}{\partial c_1} \right)_{c_2} + L_{12} \left( \frac{\partial \mu_2}{\partial c_1} \right)_{c_2}, \\ \frac{1}{v} D_{12} &= L_{11} \left( \frac{\partial \mu_1}{\partial c_2} \right)_{c_1} + L_{12} \left( \frac{\partial \mu_2}{\partial c_2} \right)_{c_1}, \\ \frac{1}{v} D_{21} &= L_{21} \left( \frac{\partial \mu_1}{\partial c_1} \right)_{c_2} + L_{22} \left( \frac{\partial \mu_2}{\partial c_1} \right)_{c_2}, \\ \frac{1}{v} D_{22} &= L_{21} \left( \frac{\partial \mu_1}{\partial c_2} \right)_{c_1} + L_{22} \left( \frac{\partial \mu_2}{\partial c_2} \right)_{c_1}. \end{aligned} \quad (8)$$

Записывая полные дифференциалы

$$d\mu_1 = \left( \frac{\partial \mu_1}{\partial c_1} \right)_{c_2} dc_1 + \left( \frac{\partial \mu_1}{\partial c_2} \right)_{c_1} dc_2, \quad (9)$$

$$d\mu_2 = \left( \frac{\partial \mu_2}{\partial c_1} \right)_{c_2} dc_1 + \left( \frac{\partial \mu_2}{\partial c_2} \right)_{c_1} dc_2, \quad (10)$$

$$dc_1 = \left( \frac{\partial c_1}{\partial \mu_1} \right)_{\mu_2} d\mu_1 + \left( \frac{\partial c_1}{\partial \mu_2} \right)_{\mu_1} d\mu_2, \quad (11)$$

$$dc_2 = \left( \frac{\partial c_2}{\partial \mu_1} \right)_{\mu_2} d\mu_1 + \left( \frac{\partial c_2}{\partial \mu_2} \right)_{\mu_1} d\mu_2 \quad (12)$$

и подставляя (11) и (12) в (9) и (10), получим

$$\begin{aligned} d\mu_1 &= \left( \frac{\partial \mu_1}{\partial c_1} \right)_{c_2} \left[ \left( \frac{\partial c_1}{\partial \mu_1} \right)_{\mu_2} d\mu_1 + \left( \frac{\partial c_1}{\partial \mu_2} \right)_{\mu_1} d\mu_2 \right] + \\ &+ \left( \frac{\partial \mu_1}{\partial c_2} \right)_{c_1} \left[ \left( \frac{\partial c_2}{\partial \mu_1} \right)_{\mu_2} d\mu_1 + \left( \frac{\partial c_2}{\partial \mu_2} \right)_{\mu_1} d\mu_2 \right], \quad (13) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} d\mu_2 &= \left( \frac{\partial \mu_2}{\partial c_1} \right)_{c_2} \left[ \left( \frac{\partial c_1}{\partial \mu_1} \right)_{\mu_2} d\mu_1 + \left( \frac{\partial c_1}{\partial \mu_2} \right)_{\mu_1} d\mu_2 \right] + \\ &+ \left( \frac{\partial \mu_2}{\partial c_2} \right)_{c_1} \left[ \left( \frac{\partial c_2}{\partial \mu_1} \right)_{\mu_2} d\mu_1 + \left( \frac{\partial c_2}{\partial \mu_2} \right)_{\mu_1} d\mu_2 \right]. \quad (14) \end{aligned}$$

При  $\mu_2 = \text{const}$  из (13) и (14) следует

$$\left( \frac{\partial \mu_1}{\partial c_1} \right)_{c_2} \left( \frac{\partial c_1}{\partial \mu_1} \right)_{\mu_2} + \left( \frac{\partial \mu_1}{\partial c_2} \right)_{c_1} \left( \frac{\partial c_2}{\partial \mu_1} \right)_{\mu_2} = 1, \quad (15)$$

$$\left( \frac{\partial \mu_2}{\partial c_1} \right)_{c_2} \left( \frac{\partial c_1}{\partial \mu_1} \right)_{\mu_2} + \left( \frac{\partial \mu_2}{\partial c_2} \right)_{c_1} \left( \frac{\partial c_2}{\partial \mu_1} \right)_{\mu_2} = 0. \quad (16)$$

Аналогично при  $\mu_1 = \text{const}$  получим

$$\left( \frac{\partial \mu_2}{\partial c_1} \right)_{c_2} \left( \frac{\partial c_1}{\partial \mu_2} \right)_{\mu_1} + \left( \frac{\partial \mu_2}{\partial c_2} \right)_{c_1} \left( \frac{\partial c_2}{\partial \mu_2} \right)_{\mu_1} = 1, \quad (17)$$

$$\left( \frac{\partial \mu_1}{\partial c_1} \right)_{c_2} \left( \frac{\partial c_1}{\partial \mu_2} \right)_{\mu_1} + \left( \frac{\partial \mu_1}{\partial c_2} \right)_{c_1} \left( \frac{\partial c_2}{\partial \mu_2} \right)_{\mu_1} = 0. \quad (18)$$

Для удобства дальнейших преобразований введем следующие обозначения:

$$\left( \frac{\partial c_1}{\partial \mu_1} \right)_{\mu_2} = C11, \quad \left( \frac{\partial c_1}{\partial \mu_2} \right)_{\mu_1} = C12, \quad (19)$$

$$\left( \frac{\partial c_2}{\partial \mu_1} \right)_{\mu_2} = C21, \quad \left( \frac{\partial c_2}{\partial \mu_2} \right)_{\mu_1} = C22;$$

$$\left( \frac{\partial \mu_1}{\partial c_1} \right)_{c_2} = x11, \quad \left( \frac{\partial \mu_1}{\partial c_2} \right)_{c_1} = x12, \quad (20)$$

$$\left( \frac{\partial \mu_2}{\partial c_1} \right)_{c_2} = x21, \quad \left( \frac{\partial \mu_2}{\partial c_2} \right)_{c_1} = x22.$$

Соотношения (15)–(18) позволяют записать систему четырех уравнений

$$\begin{cases} C11 \cdot x11 + C21 \cdot x12 + 0 + 0 = 1, \\ 0 + 0 + C11 \cdot x21 + C21 \cdot x22 = 0, \\ 0 + 0 + C12 \cdot x21 + C22 \cdot x22 = 1, \\ C12 \cdot x11 + C22 \cdot x12 + 0 + 0 = 0, \end{cases} \quad (21)$$

которая распадается на две независимые системы из двух уравнений каждая:

$$\begin{cases} C11 \cdot x21 + C21 \cdot x22 = 0 \\ C12 \cdot x21 + C22 \cdot x22 = 1 \end{cases}, \quad (22)$$

$$\begin{cases} C11 \cdot x11 + C21 \cdot x12 = 1 \\ C12 \cdot x11 + C22 \cdot x12 = 0 \end{cases}. \quad (23)$$

Решая эти системы уравнений по методу Крамера, получим

$$\begin{aligned} x11 &= \frac{C22}{\Delta}, & x12 &= \frac{-C12}{\Delta}, \\ x21 &= \frac{-C21}{\Delta}, & x22 &= \frac{C11}{\Delta}, \end{aligned} \quad (24)$$

где  $\Delta$  — определитель

$$\Delta = \begin{vmatrix} C11 & C21 \\ C12 & C22 \end{vmatrix} = C11 \cdot C22 - C12 \cdot C21. \quad (25)$$

Выполненные преобразования необходимы потому, что невозможно моделированием по методу Монте-Карло найти производные химических потенциалов по концентрациям, поскольку при использовании большого канонического ансамбля определяются концентрации как функции химических потенциалов [9].

В качестве примера на рис. 1 показана зависимость концентраций компонентов от химического потенциала одного из компонентов при постоянном значении другого.

Искомые частные производные аппроксимируются центрированной разностной производной (обозначения см. на рис. 1):

$$\begin{aligned}
\left(\frac{\partial c_1}{\partial \mu_1}\right)_{\mu_2} &= \frac{c_1(\mu_{1+}, \mu_2) - c_1(\mu_{1-}, \mu_2)}{2\Delta\mu_1}, \\
\left(\frac{\partial c_2}{\partial \mu_1}\right)_{\mu_2} &= \frac{c_2(\mu_{1+}, \mu_2) - c_2(\mu_{1-}, \mu_2)}{2\Delta\mu_1}, \\
\left(\frac{\partial c_1}{\partial \mu_2}\right)_{\mu_1} &= \frac{c_1(\mu_1, \mu_{2+}) - c_1(\mu_1, \mu_{2-})}{2\Delta\mu_2}, \\
\left(\frac{\partial c_2}{\partial \mu_2}\right)_{\mu_1} &= \frac{c_2(\mu_1, \mu_{2+}) - c_2(\mu_1, \mu_{2-})}{2\Delta\mu_2}.
\end{aligned} \quad (26)$$

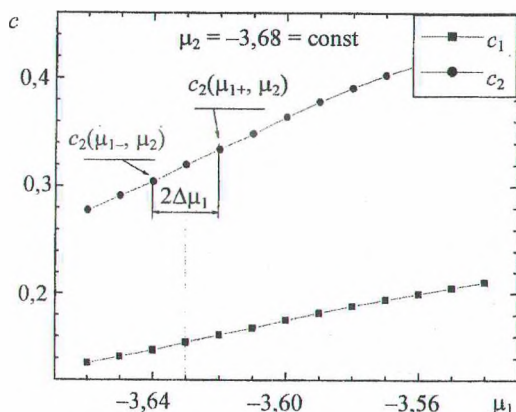


Рис. 1. Зависимость концентраций компонентов при постоянном химическом потенциале компонента сорта 2

Непосредственное моделирование коэффициентов термодиффузии затруднительно, однако при условии отсутствия суммарных потоков компонентов их можно выразить через коэффициенты химической диффузии. Это условие приводит к рассмотрению стационарного состояния системы в неоднородном температурном поле. Принимая потоки вещества в уравнениях (7) равными нулю, получим выражения для определения коэффициентов термодиффузии

$$\begin{aligned}
D_{1T} &= -D_{11}T \frac{\nabla c_1}{\nabla T} - D_{12}T \frac{\nabla c_2}{\nabla T}, \\
D_{2T} &= -D_{21}T \frac{\nabla c_1}{\nabla T} - D_{22}T \frac{\nabla c_2}{\nabla T}.
\end{aligned} \quad (27)$$

Таким образом, для нахождения коэффициентов термодиффузии необходимо определить значение коэффициентов химической диффузии (8) и отношения градиентов концентраций и обратной температуры, которые могут быть найдены в результате численного моделирования распределения частиц в системе.

**2. Моделирование и анализ полученных результатов.** Моделирование динамики частиц в системе производилось по методу Монте-Карло. Алгоритм моделирования [10, 11] модифицирован к особенностям исследования двух-

компонентных систем при наличии неоднородного поля температур следующим образом.

Рассматривается система  $N$  частиц сортов 1( $A$ ) и 2( $B$ ) на периодической двухмерной решетке размером  $L \times L$  ( $L = 32$ ) узлов при заданных обратной температуре  $\beta$ , концентрации компонентов  $c_A$  и  $c_B$  и периодических граничных условиях. Для удовлетворения требованию периодичности изменение обратной температуры задаем синусоидальной зависимостью вдоль одного из направлений

$$\beta_i = \beta \left( 1 + a_\beta \sin \left( \frac{2\pi(i-1)}{L} \right) \right), \quad (28)$$

где  $a_\beta$  – относительная амплитуда изменения обратной температуры;  $i$  – индекс слоя в направлении изменения температуры.

Потенциалы взаимодействия между частицами соответствующих сортов, являющихся ближайшими соседями, определяются величинами  $J_{AA} = -J$ ,  $J_{BB} = I_B J_{AA}$ ,  $J_{AB} = I_{AB} J_{AA}$ . Для частиц сорта  $B$ , характеризующихся более интенсивным межчастичным взаимодействием,  $I_{AB} > 1$ ,  $I_B > 1$  (энергии взаимодействия отрицательны, но здесь указаны их значения в единицах  $J > 0$ ).

Начальное состояние системы генерировалось путем случайного выбора узла решетки с координатами  $(\alpha, \beta)$  ( $1 \leq \alpha \leq L$ ,  $1 \leq \beta \leq L$ ,  $\alpha$  и  $\beta$  – целые числа), в который помещалась частица. Заполнение решетки производилось до числа частиц  $N = N_A + N_B$ , где  $N_A = [L^2 c_A]$  и  $N_B = [L^2 c_B]$  – числа частиц соответствующих сортов, квадратные скобки означают целую часть числа.

Последующая динамика перемещения частиц по решетке моделировалась в соответствии с основным кинетическим уравнением [4]. Для этого случайным образом выбирался узел  $i$  решетки с координатами  $(\alpha, \beta)$ , занятый частицей любого сорта. Затем разыгрывался переход этой частицы в один из четырех ближайших узлов, выбираемых случайным образом. Если выбранный узел не занят, вычислялась вероятность перехода частицы:

– если в узле  $i$  частица сорта  $A$ , то

$$P_1 = \exp[-\beta_i J (S_{iA} + J_{AB} S_{iB})]; \quad (29)$$

– если частица сорта  $B$ , то

$$P_1 = \exp[-\beta_i J (J_{AB} S_{iA} + J_B S_{iB})], \quad (30)$$

где  $S_{iA}$ ,  $S_{iB}$  – число соседних с узлом  $i$  частиц сортов  $A$  и  $B$  соответственно. Максимальная вероятность перехода ( $P = 1$ ) частицы в вакантный узел будет наблюдаться, если все другие соседние узлы также будут вакантными ( $S_{iA} = S_{iB} = 0$ ).

Вероятность  $P_1$  сопоставлялась с величиной  $0 \leq P \leq 1$ , разыгрываемой при помощи генерато-

ра случайных чисел. При  $P_1 \geq P$  переход частицы принимался, в противоположном случае состояния узлов оставались прежними и осуществлялся переход к анализу следующего узла.

Один шаг процедуры Монте-Карло (МКШ) состоял из числа попыток перемещений частиц, равного числу частиц в системе. Затем вычислялся квадрат перемещения частиц соответствующего сорта за шаг. Моделировался ансамбль  $10^3$  траекторий, каждая из которых имела длину  $5 \cdot 10^4$  МКШ. После этого определялось среднее по ансамблю значение концентрации частиц в горизонтальных и вертикальных слоях.

Значения концентрации компонентов  $c_A$  и  $c_B$ , при которых выполнялось моделирование, брались из результатов моделирования равновесных свойств системы в большом каноническом ансамбле, пример которого представлен на рис. 1. Например, при  $T = 1,5T_c$ ,  $\mu_1 = -3,63$  и  $\mu_2 = -3,68$  значения равновесных концентраций составляют  $c_A = 0,1543$ ,  $c_B = 0,3203$ . Значение относительной амплитуды изменения обратной температуры, входящее в (28), принято  $a_B = 0,005$ .

На рис. 2 и 3 приведены распределения концентраций соответствующих сортов по горизонтальным и вертикальным слоям. Можно отметить, что в горизонтальных слоях концентрации частиц практически постоянны, тогда как по вертикальным частицы распределены примерно по синусоидальному закону:

$$c_i = c \left( 1 + a_c \sin \left( \frac{2\pi(i-1)}{L} \right) \right), \quad (31)$$

где  $c$  – средняя концентрация частиц соответствующего сорта на решетке;  $a_c$  – относительная амплитуда изменения концентрации частиц.

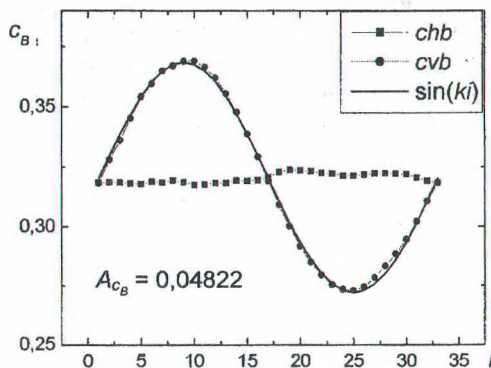


Рис. 3. Распределение концентраций частиц сорта B:  $chb$  – по горизонтальным слоям;  $cvb$  – по вертикальным слоям;  $\sin(ki)$  – синусоидальная зависимость

Вычисляя производные соотношений (28) и (31) по пространственной переменной (фактически по индексу  $i$ ), отношения градиентов концентраций к градиенту обратной температуры, входящие в выражение (27), могут быть определены через отношение соответствующих абсолютных амплитуд в уравнениях (28) и (31):

$$A_B = \beta a_B, \quad A_{c_1} = c_1 a_{c_1}, \quad A_{c_2} = c_2 a_{c_2}, \quad (32)$$

где  $A$  – абсолютная амплитуда изменения соответствующего параметра. Кроме этого, следует учесть связь между градиентами температуры и обратной температуры:

$$\nabla T = -k_B T^2 \nabla \beta. \quad (33)$$

В результате выражения (27) принимают вид

$$D_{1T} = D_{11} \frac{c_1 a_{c_1}}{a_B} + D_{12} \frac{c_2 a_{c_2}}{a_B}, \quad (34)$$

$$D_{2T} = D_{21} \frac{c_1 a_{c_1}}{a_B} + D_{22} \frac{c_2 a_{c_2}}{a_B}.$$

Методика нахождения кинетических коэффициентов диффузии, входящих в соотношения (34), изложена в работе [6].

По результатам моделирования получены значения амплитуд изменения концентраций при заданной амплитуде изменения обратной температуры для ряда значений химических потенциалов. Используя соотношения (5) и (8), найдены соответствующие коэффициенты химической диффузии, подстановка которых в выражения (34) позволяет определить значения коэффициентов термодиффузии. При  $T = 1,5T_c$ ,  $c_A = 0,1543$ ,  $c_B = 0,3203$  и  $a_B = 0,005$  получены значения  $D_{1T} = 5,718 \cdot 10^{-3}$ ,  $D_{2T} = 11,888 \cdot 10^{-3}$ .

На рис. 4 приведены результаты моделирования при постоянном химическом потенциале одного компонента ( $\mu_1 = -3,63$ ) и переменном – для другого. Отметим, что при увеличении химического потенциала второго компонента наблюдается уменьшение значений коэффициентов

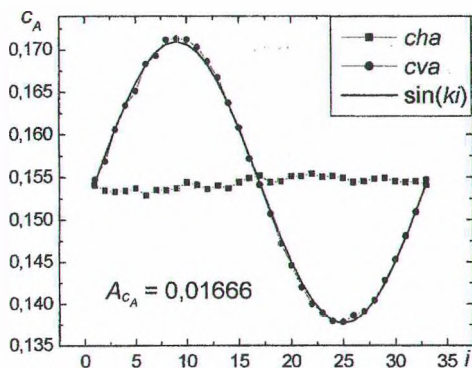


Рис. 2. Распределение концентраций частиц сорта A:  $cha$  – по горизонтальным слоям;  $cva$  – по вертикальным слоям;  $\sin(ki)$  – синусоидальная зависимость

Контролем точности моделирования служат колебания концентраций в различных горизонтальных слоях (при хорошей статистике должны наблюдать  $cha = \text{const}$ ,  $chb = \text{const}$ ).

термодиффузии при возрастании концентрации компонентов. Флуктуации на зависимостях свидетельствуют о недостаточной статистике при проведении моделирования. Для получения более надежных данных необходимо увеличить количество моделируемых траекторий.

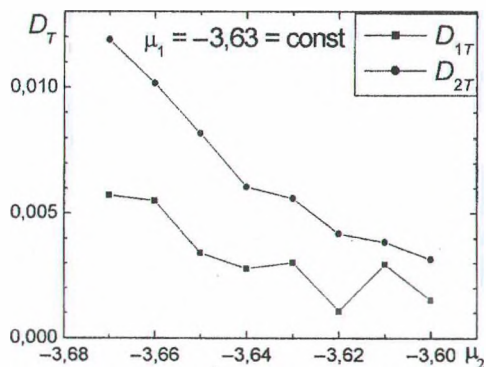


Рис. 4. Зависимость коэффициентов термодиффузии от химического потенциала второго компонента

**Заключение.** В работе предложена методика определения коэффициентов термодиффузии в двухкомпонентном решеточном газе с межчастичным притяжением на основе компьютерного моделирования по методу Монте-Карло. Разработан алгоритм моделирования и программа анализа полученных результатов. Получена связь между коэффициентами диффузии и термодиффузии. Исследовано влияние химических потенциалов и концентраций компонентов на коэффициенты термодиффузии.

### Литература

1. Surface diffusion. Atomic and Collective Processes / M. C. Tringides [et al.]. – New York: Plenum, 1997.
2. Collective Diffusion on Surfaces: Correlation Effects and Adatom Interactions // M. C. Tringides, Z. Chvoj. – Amsterdam: Kluwer, 2001.
3. Lattice-Gas Theory of Collective Diffusion in Adsorbed Layers / A. Danani [et al.] // Internat.

Journ. Modern Phys. B. – 1997. – Vol. 11. – P. 2217.

4. Statistical-mechanical description of diffusion in interacting lattice gases / G. S. Bokun [et al.] // Physica A. – 2001. – Vol. 296. – P. 83.

5. Бокун, Г. С. Статистико-механическое описание и компьютерное моделирование диффузии в двухкомпонентных решеточных системах / Г. С. Бокун, В. С. Вихренко, Д. В. Гапанюк // Труды БГТУ. Сер. VI, Физ.-мат. науки и информ. – 2003. – Вып. XI. – С. 63–68.

6. Гапанюк, Д. В. Моделирование диффузии в двухкомпонентных решеточных системах при различающихся энергиях связи с подложкой / Д. В. Гапанюк // Труды БГТУ. Сер. VI, Физ.-мат. науки и информ. – 2004. – Вып. XII. – С. 32 – 36.

7. Гапанюк, Д. В. Коэффициенты диффузии двухкомпонентного решеточного газа с межчастичным отталкиванием и отличающимися энергиями взаимодействия компонентов с подложкой / Д. В. Гапанюк // Труды БГТУ. Сер. VI, Физ.-мат. науки и информ. – 2005. – Вып. XIII. – С. 36–38.

8. Theodorou, D. N. Molecular Dynamics and Diffusion in Microporous Materials / D. N. Theodorou, R. Q. Snurr, A. T. Bell // Comprehensive Supramolecular Chemistry / edited by T. Bein. – Oxford: Pergamon Press, 1996. – Vol. 7. – P. 507–548.

9. Грода, Я. Г. Моделирование по методу Монте-Карло двухкомпонентных решеточных систем / Я. Г. Грода, Д. В. Гапанюк // Труды БГТУ. Сер. VI, Физ.-мат. науки и информ. – 2003. – Вып. XI. – С. 73–78.

10. Tringides, M. C. Monte Carlo study of oxygen diffusion on the (110) plane of tungsten / M. C. Tringides, R. Gomer // Surf. Sci. – 1984. – Vol. 145. – P. 121.

11. Uebing, C. A. Monte Carlo study of surface diffusion coefficients in the presence of adsorbate-adsorbate interactions. I. Repulsive interactions / C. Uebing, R. Gomer // J. Chem. Phys. – 1991. – Vol. 95. – P. 7626–7635.