

УДК 531.19

В. С. Вихренко, Я. Г. Грода

КИНЕТИЧЕСКИЙ КОЭФФИЦИЕНТ ДИФФУЗИИ РЕШЕТОЧНОГО ФЛЮИДА НА ПРОСТОЙ КУБИЧЕСКОЙ РЕШЕТКЕ С БЛОКИРОВАННЫМИ УЗЛАМИ

Учреждение образования «Белорусский государственный технологический университет», ул. Свердлова, 13а, 220006 Минск, Беларусь

vvikhre@gmail.com

groda@belstu.by

Рассматриваемая в работе модель представляет собой простую кубическую решетку, каждый узел которой может находиться в одном из трех возможных состояний: быть занятым примесной частицей, быть вакантным либо заблокированным. При этом примесные частицы, занимающие ближайшие решеточные узлы, могут взаимодействовать друг с другом с энергией J .

С практической точки зрения построенная модель пригодна для описания свойств ансамбля примесных частиц, абсорбированных кристаллом. В этом случае заблокированные решеточные узлы могут рассматриваться как дефекты его кристаллической структуры.

Для определения равновесных характеристик рассматриваемой модели в работе [1] было предложено квазихимическое приближение, которое позволило получить простые аналитические выражения для нахождения ее термодинамических и структурных характеристик в случае систем любых размерностей. В настоящем докладе представлены результаты исследования методами компьютерного моделирования диффузионных характеристик описанной выше системы.

Моделирование по методу Монте-Карло диффузионных процессов было выполнено в большом каноническом ансамбле в рамках стандартного алгоритма Метрополиса. При моделировании использовалась решетка, содержащая 1728 решеточных узлов, в сочетании с периодическими граничными условиями. Полная длина процедуры моделирования состояла из 50 000 шагов алгоритма Монте-Карло (МКШ). При этом первые 10 000 МКШ отводились на процесс эквализации и не учитывались при дальнейших усреднениях. Необходимо также отметить, что выполнение 40 000 существенных МКШ формировало одну траекторию движения центра масс системы примесных частиц, а окончательные результаты получались путем усреднения по 1 000 таких траекторий.

В результате моделирования определялась зависимость среднего квадрата смещения центра масс системы от времени, измеренного в шагах алгоритма Монте-Карло. Моделирование показало, что данная зависимость является линейной, что позволяет определить кинетический коэффициент диффузии системы.

Наряду с определением кинетического коэффициента диффузии решеточного флюида в ходе прямого компьютерного моделирования диффузионного процесса была предпринята попытка его оценки на основе соотношения Жданова [2], позволяющего определить коэффициент диффузии через коэффициент диффузии ленгмюровского газа D_0 и равновесные характеристики системы:

$$D_j = D_0 \frac{\exp[\beta\mu]}{c} F(0; 0), \quad \beta = \frac{1}{k_B T}, \quad (1)$$

где k_B – постоянная Больцмана; T – температура. Входящие с соотношением (1) равновесные значения химического потенциала μ , концентрации c и вероятность двум ближайшим решеточным узлам быть вакантными $F(0; 0)$ могут быть найдены как в рамках развитого квазихимического приближения, так и непосредственно при моделировании равновесных параметров по методу Монте-Карло.

На рис. 1 представлены зависимости кинетического коэффициента диффузии от концентрации примесных частиц, определенные как путем прямого моделирования диффузионного процесса, так и при использовании соотношения (1) в случае системы, содержащей 10 % заблокированных узлов.

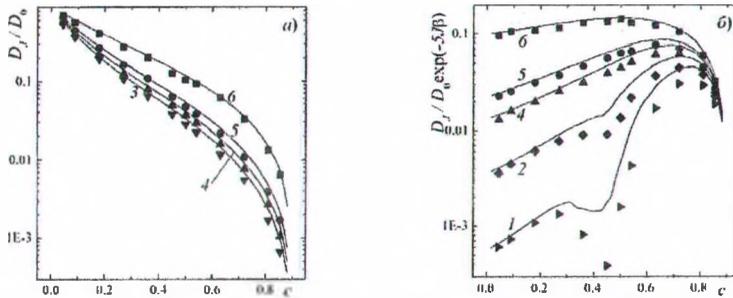


Рис. 1. Зависимость от концентрации примесных частиц коэффициента кинетической диффузии решеточного флюида с притяжением (а) и отталкиванием (б) ближайших соседей на простой кубической решетке, содержащей 10 % заблокированных узлов. Точками представлены результаты прямого моделирования диффузионного процесса в решеточном флюиде, линиями – результаты применения соотношения (1). $\beta|\mu| = 1.478$ (кривая 1); 1.108 (2); 0.933 (3); 0.845 (4); 0.739 (5) и 0.443 (6).

Анализ данных результатов позволяет сделать вывод, что соотношение (1) верно отражает качественные особенности рассматриваемых зависимостей и позволяет приблизительно оценить диффузионных характеристик модели. В целом получаемые с его помощью результаты оказываются несколько завышенными по сравнению с данными моделирования. Это может быть объяснено тем, что в соотношении (1) не учитывается снижения числа доступных для миграции решеточных узлов, вызванное эффектами блокировки части из них.

Исследования были выполнены при грантовой поддержке Министерства образования Беларуси, научной программы Евросоюза HORIZON-2020 (проект AMD-734276-CONIN), а также Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований (грант №Ф16К-614).

- [1] Influence of Obstacles on Equilibrium Properties of the Lattice Fluid on a Surface / P. Argyrakis [et al.] // In: Proceedings of the International Conference Nanomaterials: Applications and Properties – Zatoka, Ukraine, 2017 – Article 01PCSI15 (5 p.).
- [2] Zhdanov, V. P. General Equation for Description of Surface Diffusion in the Framework of the Lattice Gas Model / V. P. Zhdanov // Surf. Sci. – 1985. – vol. 149. – L13–L17.