УДК 531.19

Д.В. Гапанюк (БГТУ, г. Минск)

ИССЛЕДОВАНИЕ ДИФФУЗИОННЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ТРЕХМЕРНОГО ДВУХКОМПОНЕНТНОГО РЕШЕТОЧНОГО ГАЗА С МЕЖЧАСТИЧНЫМ ПРИТЯЖЕНИЕМ

Диффузия и термодиффузия играют ключевую роль в пространственном перераспределении компонентов в системе, что является основой многих производственных процессов. Решеточные системы рассматриваются как относительно простые модели реальных объектов, таких, как твердые электролиты, интеркаляционные соединения, адсорбированные слои на поверхности твердых тел и другие. Большое количество работ посвящено исследованию однокомпонентных систем [1–2]. Вместе с тем уже двухкомпонентные системы проявляют качественные отличия в равновесных свойствах и кинетическом поведении, присущие и произвольным многокомпонентным системам [3].

В данной работе для моделирования диффузии трехмерного двухкомпонентного решеточного газа с межчастичным притяжением при одинаковых и различающихся энергиях связи частиц с решеткой используется метод Монте-Карло. Алгоритм моделирования модифицирован применительно к особенностям таких систем.

Рассматривается система N частиц сортов A и B на периодической трехмерной решетке размером $L \times L \times L$ ($L = 8$) узлов при температуре T и концентрации компонентов c_A и c_B. Потенциалы взаимодействия между частицами соответствующих сортов, являющихся ближайшими соседями, определяются величинами $J_{AA} = J$, $J_{BB} = J_B J$, $J_{AB} = J_{AB} J$. Энергии взаимодействия частиц разных сортов с подложкой $\bar{J}_{A0}$ и $\bar{J}_{B0}$ различны (при одинаковой энергии взаимодействия частиц разных сортов с подложкой $\bar{J}_{A0} = \bar{J}_{B0}$): для частиц сорта B, характеризующихся более интенсивным межчастичным взаимодействием ($J_{BB} > J_{AA}$, $J_B > 1$), энергия взаимодействия с подложкой также большая $\bar{J}_{B0} > \bar{J}_{A0}$ (энергии взаимодействия отрицательны, но здесь указаны их абсолютные значения в единицах J).

Начальное состояние системы генерировалось путем случайного выбора узла решетки с координатами (α, β, γ) ($1 \le \alpha \le L$, $1 \le \beta \le L$, $1 \le \gamma \le L$; α, β и γ – целые числа), в который помещалась частица. Заполнение решетки производилось до числа частиц $N = N_A + N_B$, где $N_A = [L^3 c_A]$ и $N_B = [L^3 c_B]$ – числа частиц соответствующих сортов, квадратные скобки означают целую часть числа.

Последующая динамика перемещения частиц по решетке моделировалась в соответствии с основным кинетическим уравнением. Для этого случайным образом выбирался узел (α, β, γ) решетки, занятый частицей любого сорта. Затем разыгрывался переход этой частицы в один из шести ближайших узлов, выбираемых случайным образом. Если узел был не занят, то вычислялась вероятность перехода частицы:

– если в узле частица сорта A, то

$$P_1 = \exp\left[-\frac{J}{k_B T}\left(S_A + J_{AB} S_B\right)\right];$$

– если в узле частица сорта B, то

$$P_1 = \exp\left[-\frac{J}{k_B T}\left(J_{AB} S_A + J_B S_B + J_{B0}\right)\right],$$

где S_A и S_B – число соседних с узлом (α, β) частиц сортов A и B соответственно; $J_{B0} = \bar{J}_{B0} - \bar{J}_{A0}$ – перенормированный потенциал взаимодействия частиц сорта B с подложкой [4]. Максимальная вероятность перехода ($P = 1$) частицы в вакантный узел будет наблюдаться для частицы сорта A, если все соседние узлы также будут вакантны.

Вероятность P_1 сопоставлялась со случайной величиной $0 \le P \le 1$, разыгрываемой при помощи генератора случайных чисел. При $P_1 \ge P$ 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 чего определялось среднее по ансамблю значение квадрата перемещения частиц каждого сорта.

Методика нахождения коэффициентов диффузии по полученным результатам расчета изложена в работе [3]. Анализируя результаты моделирования в области изменения концентраций компонента B от 0 до 0,65 при значении приведенной температуры $T/T_c = 1{,}5$, выраженной в единицах критической температуры чистого компонента A ($k_B T_c = 0{,}8868J$), и значении концентрации компонента A $c_A = 0{,}3$, отметим, что при увеличении концентрации частиц сорта B коэффициенты диффузии компонентов сближаются, но не так сильно, как это было в двухмерных системах. Наблюдаемый ранее эффект «захватывания» менее подвижными частицами сорта A [4], который и определял динамику всей системы, в трехмерных системах наступает при бóльшей суммарной концентрации и является менее заметным.

Сравнивая полученные зависимости для систем с одинаковой и отличающейся энергиями взаимодействия частиц разных сортов с решеткой мы отметим, что коэффициенты диффузии для компонента *A*, являющегося более подвижным, не зависят от типа системы. На менее подвижный компонент (сорт *B*) влияние энергии взаимодействия с решеткой оказывает более существенное влияние и разность коэффициентов диффузии индивидуальных компонентов увеличилась.

Анализируя результаты моделирования коэффициентов диффузии в трехмерных решеточных системах при постоянной суммарной концентрации двух компонентов ($c_A + c_B = 0{,}7$) и значении приведенной температуры $T/T_c = 1{,}5$, отметим, что коэффициенты диффузии компонента *B* являются постоянными и не зависят от концентраций частиц обоих сортов в отдельности. Для компонента *A* при увеличении его концентрации наблюдается квазилинейное увеличение значений коэффициентов диффузии для соответствующего компонента.

Также были исследованы функции взаимного распределения частиц на решетке. Результаты вычислений показывают, что функции распределения пар частиц в значительной мере определяются суммарной концентрацией частиц сортов *A* и *B*.

Таким образом, предлагаемый алгоритм моделирования позволил изучить поведение кинетических коэффициентов диффузии и функций распределения в зависимости от концентрации частиц.

ЛИТЕРАТУРА

1. Surface diffusion. Atomic and Collective Processes / Ed. Tringides M.C. – New York: Plenum, 1997.

2. Collective Diffusion on Surfaces: Correlation Effects and Adatom Interactions // Eds. M.C. Tringides and Z. Chvoj. – Amsterdam: Kluwer, 2001.

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

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