

С. М. Захаров, В. В. Морозович, Ю. О. Ляшенко

МОДЕЛЮВАННЯ ДИФУЗІЇ АТОМІВ ЗА НАЯВНОСТІ РУХОМИХ ТА НЕРУХОМИХ ПАСТОК ПІД ДІЄЮ ЗОВНІШНЬОЇ СТОХАСТИЧНОЇ СИЛИ

Методом Монте-Карло досліджено вплив зовнішньої стохастичної сили на перерозподіл атомів дифузанта в кубічному зразку при наявності рухомих та нерухомих пасток. Розглядався випадок випадково розподілених нерухомих та рухомих пасток. Показано, що середнє значення стохастичної складової не впливає на отримані розподіли атомів дифузанта. Наявність пасток в основному змінює тип концентраційних профілів, з розподілу Гауса при концентрації пасток $C < 10^{-3}$ в експоненційну залежність при концентрації $C > 10^{-3}$. Вплив рухливості пасток зводиться до розмиття концентраційних розподілів та виникнення додаткових локальних максимумів в концентраційних розподілах мігруючих атомів в результаті дії стохастичної зовнішньої сили.

Ключові слова: зовнішня сила, стохастичний дрейф, дифузія, пастки, кореляційні ефекти.

Вступ

Описання та моделювання дифузії в кристалах під дією зовнішніх сил, приводилось в роботах [1–5]. В них спостерігалися ефекти кореляції, розраховувався асимптотичний час середньо-квадратичного зміщення. Типовим випадком є дослідження дифузії домішок під дією електричного поля. Кореляційні ефекти були розглянуті також в огляді [5].

Специфічною проблемою є наявність «шумів» під час впливу зовнішньої сили, що призводить до виникнення зовнішнього стохастичного ефекту. Присутність стохастичної складової може бути пов'язана з існуванням часової залежності коефіцієнта дифузії $D(t)$ [6, 7]. Вплив стохастичних шумів на дифузію атомів домішок при наявності пасток є ще не до кінця вивченим питанням [7, 8]. Експериментальні результати, наприклад [9, 10], показують, що наявність зовнішньої сили призводить до трансформації дифузійних профілів і їх значного відхилення від стандартних розподілів Гауса. Є велика кількість причин, що можуть вплинути на експериментальні профілі концентрації, серед них – присутність рухомих та нерухомих пасток, як правило, гетерогенно розподілених по зразку, наявність зовнішнього впливу, вплив спектру зовнішньої сили, тощо.

У роботі [8] проведено моделювання концентраційних профілів дифузанта в залежності від глибини проникнення після фіксованого часу дифузії. За відсутності зовнішньої сили і пасток для дифундуючих атомів, концентраційний профіль повинен бути подібним до розподілу Гауса. Нахил такої кривої в координатах "логарифм концентрації - квадрат глибини", дозволяє визначити коефіцієнт дифузії. У роботі [8] визначено як змінюються концентраційні розподіли за наявності стохастичного зовнішнього впливу та за присутності нерухомих пасток. В даному дослідженні проведено та визначено зміни концентраційних профілів в залежності від рухливості пасток при дії зовнішньої стохастичної сили.

Модель масоперенесення

У цій роботі перерозподіл атомів дифузанта під дією зовнішньої сили, як і у випадку моделі нерухомих пасток [8], змодельовано за методом Монте-Карло в тривимірній кубічній ґратці. Розрахунковою областю є паралелепіпед розмірами

$1000 \times 300 \times 300$ атомів, де найбільший розмір відповідає напрямку дії зовнішньої сили (рис. 1). По напрямках y і z використані періодичні граничні умови. В моделі початок руху атомів дифузанта відбувається з зовнішньої грані ($x=0$) і їх міграція по зразку триває до певного фіксованого моменту часу t . За відсутності зовнішньої сили ймовірність стрибка атома в якомусь напрямку i дорівнює

$$P_i = \frac{v_i}{z}, \quad (1)$$

де z - координаційне число решітки ($z = 6$ в випадку кубічної ґратки), а v - частота стрибків атома в напрямку i . Вплив зовнішньої сили в моделі був досягнутий введенням параметра B , який описує ймовірність стрибка атома дифузанта в напрямку x :

$$P_x = \frac{1+B}{6}, \quad (2)$$

якщо стрибок відбувається в напрямку вісі x та

$$P_{-x} = \frac{1-B}{6}, \quad (3)$$

якщо стрибок проходить в протилежному напрямку. Ймовірності стрибків в інших напрямках (вздовж осей y та z) залишилися незмінними. Пастки введено в модельний зразок рівномірно розміщеними. У роботі були розглянуто випадок лише точкових пасток. При цьому враховується, що пастки і дифундуючі атоми не взаємодіють самі з собою на відстані. Крім того, існує можливість того, що атоми дифузанта можуть залишити пастку з деякою ймовірністю P , яка залежить від координати x .

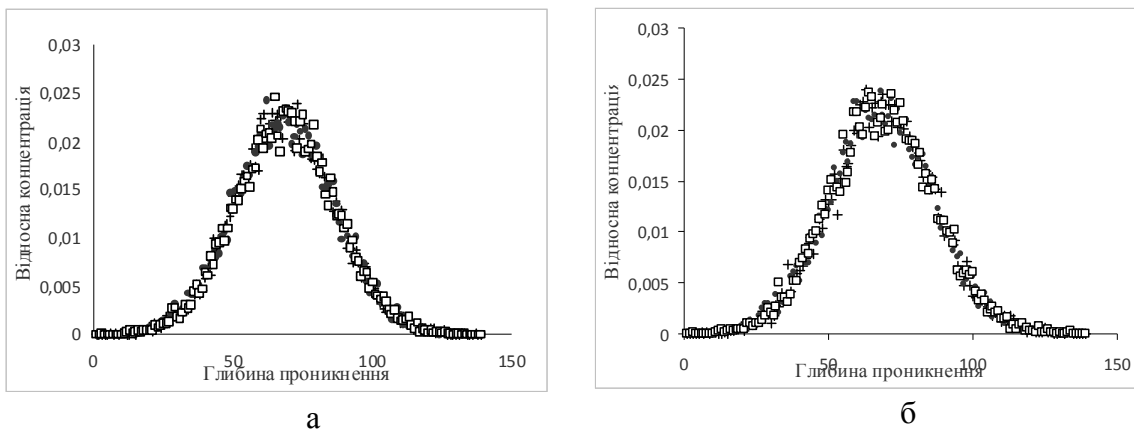


Рис. 1. Розподіл атомів дифузанта по зразку в залежності від стохастичної компоненти ΔB та при наявності а – нерухомих та б – рухомих пасток:

$$B = 0.2; \Delta B = 0 (\bullet), 0.1 (+), 0.2(\square); C = 10^{-5}.$$

Для поліпшення ефективності комп'ютерних розрахунків був використаний “residence time algorithm” [2, 7, 11, 12], що дозволяє адекватно до фізичної моделі врахувати час перебування атома в пастці. У типовій схемі Монте-Карло дифузійний стрибок атома моделюється наступним чином: генерується випадкове число $R \in [0; 1]$ що порівнюється із заданою ймовірністю (1) стрибка в певному напрямку i . Стрибок відбувається, якщо $R < P_i$, в іншому випадку значення лічильника часу збільшується і процес генерації стрибка повторюється заново. Як правило, за дуже маленької ймовірності стрибків P_i основна частина спроб не може бути реалізованою. За використання “residence time algorithm” необхідно визначати загальний час

перебування τ у фіксованій пастці ($\tau = \frac{1}{P}$) і лічильник часу збільшувати на τ . Після залишення пастки атом дифузанта вважається вільними і процес його зміщення під впливом зовнішньої сили повторюється. Після досягнення максимального часу процес дифузії для даного атома дифузанта закінчується і починається генерація руху нового атома з зовнішньої грані кристала.

Типова кількість атомів в одному експерименті складає 10^6 . Розподіл атомів, усереднюється за 10^3 реалізаціями різних конфігурацій пасток.

Зовнішня сила B описується виразом:

$$B = B_0 + \delta B, \quad (4)$$

де B_0 – середнє значення зовнішньої сили; δB - стохастична компонента. Значення δB вибиралось довільно. Крім того, його модуль обмежено деяким значенням: $|\delta B| \leq \Delta B$. Відомо, що будь-яке ненульове значення B приводить до порушення розподілу Гауса для концентрацій, що утворюється при $B = 0$, на відстані

$$X = B * t / 3, \quad (5)$$

де t - час експерименту.

В нашій моделі зміщення рухомих пасток відповідає розподілу Гауса, що було змодельовано наступним чином: генеруються два випадкові ненульові числа p_1 та p_2 , обраховується зміщення по осях за формулою [12]

$$dx = \text{round}(\sqrt{4 * D * t} * \sqrt{\ln \frac{1}{p_1}} * \sin(2 * \pi * p_2)). \quad (6)$$

Аналогічно розраховуються компоненти зміщення dy та dz вздовж осей y та z . Масив з трьома координатами пасток постійно оновлюється з врахуванням правил їх взаємодії та можливої анігіляції.

Результати моделювання

Пастки вводимо в модель як точкові дефекти, що пружно не взаємодіють з мігруючими атомами дифузанта. В розрахунках використаємо наступні типові концентрації дефектів: 10^{-3} , 10^{-5} та 10^{-2} . Результати були усереднені за різними розподілами дефектів. Типові результати експериментів Монте-Карло для даного випадку показано на рис. 2-4.

Спочатку розглянемо вплив стохастичної компоненти δB і зовнішньої сили на концентраційні профілі. Розраховані результати за значень $B = 0.2$, $\Delta B = 0, 0.1, 0.2$ та в випадку концентрації рухомих та нерухомих пасток $C = 10^{-3}$ показані на рис.2.

Основним результатом є відсутність зв'язку між розподілом атомів дифузанта і значення стохастичної компоненти, незважаючи на різні концентрації пасток. Формування концентраційного розподілу пов'язано тільки з тим, наскільки велике середнє значення зовнішньої сили B_0 .

За умови великої концентрації пасток $C = 10^{-2}$ концентраційні профілі змінюють свою форму в залежності від рухливості пасток. Коли пастки нерухомі, то концентраційний профіль є спадною функцією без максимумів. У випадку рухливості пасток спостерігається незначний максимум (рис. 4.а.). За концентрації пасток 10^{-3} форма концентраційного профілю у випадку рухливості пасток не змінюється, але розміщення атомів дифузанта стає більш хаотичним ніж у випадку нерухомих пасток (рис 4.б).

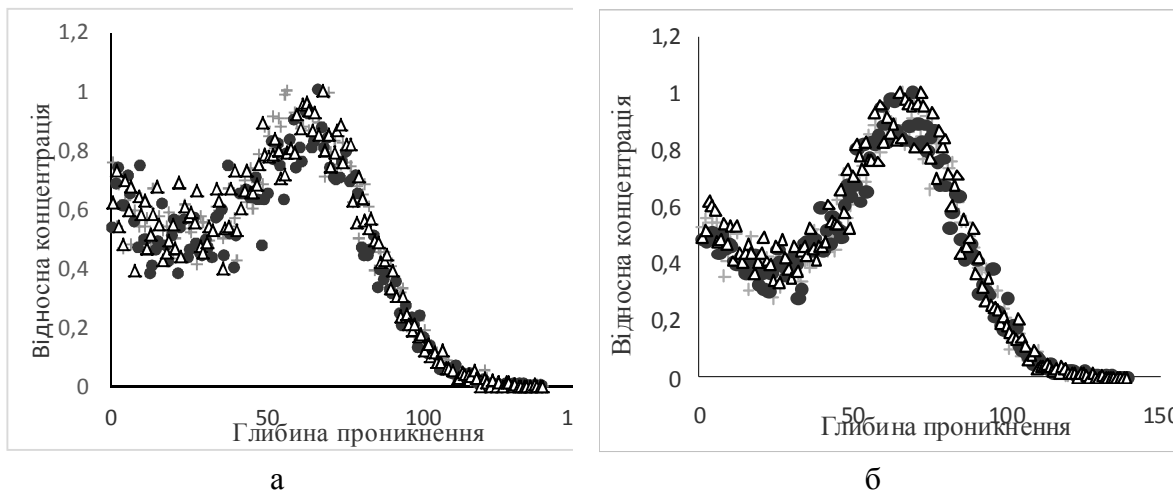


Рис. 2. Розподіл атомів дифузанта по зразку в залежності від стохастичної компоненти ΔB , та при наявності а – нерухомих та б – рухомих пасток:
 $V = 0.2$; $\Delta B = 0$ (\bullet), 0.1 ($+$), 0.2 (\square); $C = 10^{-3}$.

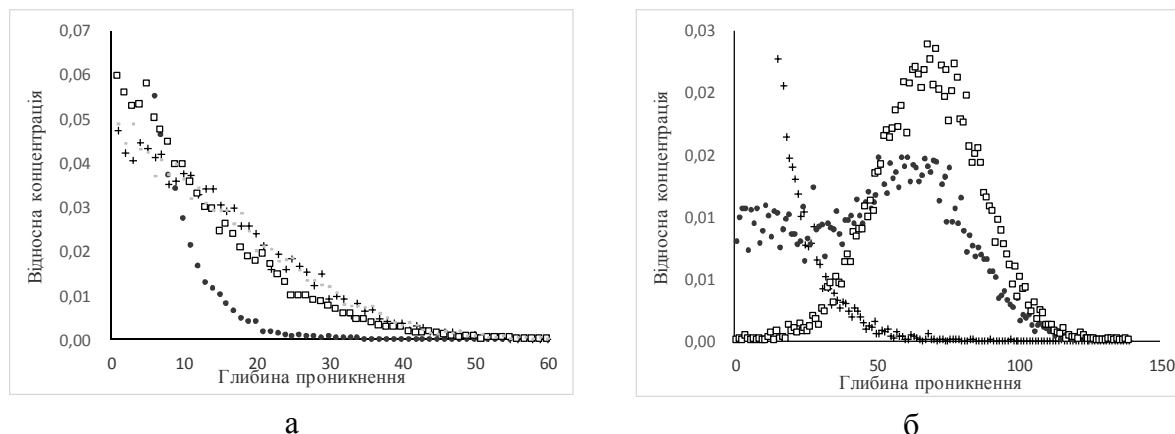


Рис. 3. Розподіл атомів дифузанта по зразку в залежності від концентрації нерухомих пасток: а – $V = 0$; $\Delta B = 0$; $C = 0$ ($-$); 10^{-5} ($+$); 10^{-3} (\square); 10^{-2} (\bullet);
 б – $V = 0.2$; $\Delta B = 0$; $C = 10^{-5}$ (\square); 10^{-3} (\bullet); 10^{-2} ($+$).

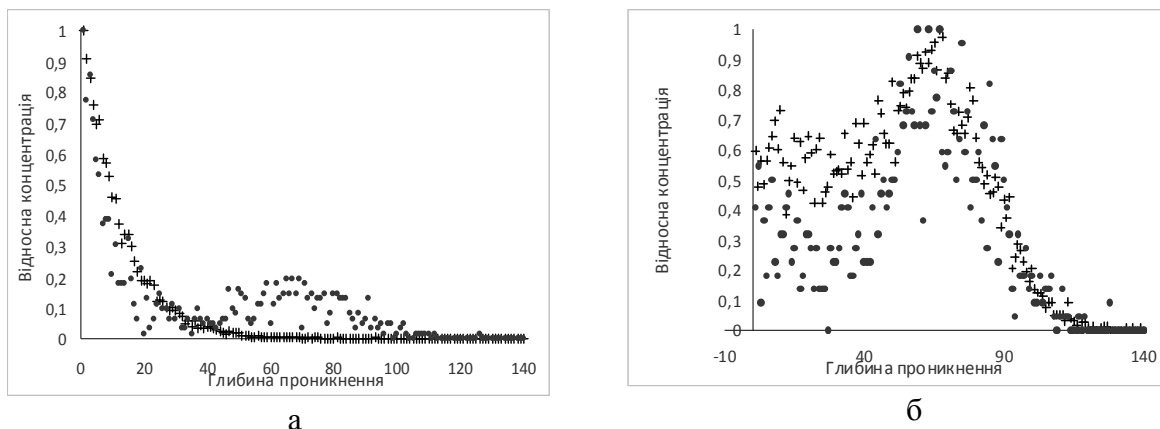


Рис. 4. Розподіл атомів дифузанта по зразку в залежності від рухливості пасток:
 а – $V = 0.2$, $\Delta B = 0.1$, $C = 10^{-2}$; рухомі (\bullet), нерухомі($+$);
 б – $V = 0.2$, $\Delta B = 0.1$, $C = 10^{-3}$; рухомі (\bullet); нерухомі($+$).

Висновки

Наявність симетрично розподіленої (близько середнього значення) стохастичної компоненти в зовнішній силі не призводить до відмінностей у концентраційних розподілах стосовно Гаусівського виду, незважаючи на існуючу концентрацію пасток у системі. Концентраційні профілі формуються під дією середнього значення зовнішньої сили.

У випадку рухомих пасток концентраційні профілі стають менш чіткими, ніж у випадках з нерухомими пастками за тих же часів блукань дифундуючих атомів. При значній концентрації пасток та в результаті їх руху на хвості експоненційно спадного концентраційного розподілу формується максимум у функції розподілу атомів дифузанта, що залежить від інтенсивності руху пасток.

Подяки

Робота підтримана Міністерством освіти і науки України.

Література

1. Philibert J. M. Atoms Movements: Diffusion and Mass Transport in Solids / J. M. Philibert // EDP Sciences, – 2012. – P. 577.
2. Murch G. E. Calculation of the diffusion correlation factor by Monte Carlo methods / G. E. Murch, R. J. Thorn // Phil. Mag. A. – 1979. – Vol. 39. – P. 259–265.
3. Pandey R. B. Classical diffusion, drift, and trapping in random percolating systems / R. B. Pandey // Phys. Rev. B. – 1984. – Vol. 30. – P. 486–493.
4. Young W. M. Monte Carlo studies of vacancy migration in binary ordered alloys : I / W. M. Young, E. Elcock // Proc. Phys. Soc. – 1966. – Vol. 89. – P. 735–741.
5. Le Claire A. D. Solute effects in diffusion / A. D. Le Claire // An Advanced Treatise. – 1970. – Vol. 10. – P. 261.
6. Hatlee M. D. Random walks on finite lattices with traps. II. The case of a partially absorbing trap / M. D. Hatlee, J. J. Kozak // Proc. Phys. Soc. – 1981. – Rev. B. – 23. – P. 1713–1722.
7. Allnatt A. R. Diffusion kinetics in dilute binary alloys with the h.c.p. crystal structure / A. R. Allnatt, I. V. Belova, G. E. Murch // Phil. Mag. A. – 2014. – Vol. 94, № 22. – P. 2487–2504.
8. Divinskiy S. V. Diffusion of atoms at presence of traps under influence of stochastic external force / S. V. Divinskiy, S. M. Zakharov // Proceedings of DIFTRAN'S ; Bulletin of Cherkasy State Universiti. Physics. – 2001. – Vol. 37–38. – P. 213–217.
9. Gertsricken D. S. Mass-transfer in metals at low temperatures under external forces / D. S. Gertsricken, V. F. Mazanko, V. M. Tyshkevich, V. M. Falchenko // Kiev, JMP Publ., – 1989. – P. 89.
10. Захаров С. М. Исследование массопере-носа ^{63}Ni при ударном сжатии никеля и циркония / С. М. Захаров, В. Ф. Мазанко, Р. Л. Межвинский // Металлофизика. – 1993. – Vol. 15, №6. – С. 18–24.
11. Athenes M. Identification of novel diffusion cycles in B2 ordered phases by Monte Carlo simulation / M. Athenes, P. Bellon, G. Martin // Phil. Mag. A. – 1997. – Vol. 76. – P. 565–570.
12. Хеерман Д. В. Методы компьютерного эксперимента в теоретической физике / Д. В. Хеерман // Компьютеры в физике. – М. : Наука, 1990. – 175 с.

Аннотация. *С. М. Захаров, В. В. Морозович, Ю. О. Ляшенко. Моделирование диффузии атомов при наличии подвижных и неподвижных ловушек под действием внешней стохастической силы. Методом Монте-Карло исследовано влияние внешней стохастической силы на перераспределение атомов диффузанта в кубическом образце при наличии подвижных и неподвижных ловушек. Рассматривался случай случайно распределенных неподвижных и подвижных ловушек. Показано, что среднее значение стохастической составляющей не влияет на полученные распределения атомов диффузанта. Наличие ловушек в основном меняет тип концентрационных профилей: из распределения Гаусса при концентрации ловушек $C < 10^{-3}$ в экспоненциальную зависимость при концентрации $C > 10^{-3}$. Влияние подвижности ловушек сводится к размыванию концентрационных распределений и возникновению дополнительных локальных максимумов в концентрационных распределениях мигрирующих атомов в результате действия стохастической внешней силы.*

Ключевые слова: внешняя сила, стохастический дрейф, диффузия, ловушки, корреляционные эффекты.

Summary. *S. M. Zakharov, V. V. Morozovych, Yu. O. Liashenko. Modelling of the diffusion of atoms in the presence of the mobile and immobile traps and under the influence of the external stochastic force. The influence of the external stochastic effect on the re-distribution of the diffusing atoms in the cubic lattice at presence of flows had been studied with the use of the Monte – Carlo method. We considered the case in which the mobile and immobile traps are distributed randomly. It was shown that, the mean value of the stochastic component has no influence on the distribution of the diffusing atoms. The existence of traps alters the type of the concentration profiles: we found that the Gauss distribution at the trap concentration $C < 10^{-3}$ switches to the exponential dependence at $C > 10^{-3}$. The mobility of traps exerts an influence on the shape of the concentration distributions. The additional local maximums in the concentration distributions of the diffusing atoms emerge due to the action of the external stochastic force. In the case when the traps are mobile the concentration profiles become less distinct than in the case when the traps are immobile at the same duration of random walks of the migrating atoms. The additional maximum of the distribution function of the migrating atoms emerges with the setting up the high values of the mobile trap concentration. The position of this maximum depends on the intensity of the trap displacement.*

Keywords: external force, stochastic drift, diffusion, traps, correlation effects.

Одержано редакцією 10/10/2014

Прийнято до друку 10/11/2014