МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ

Харківський національний університет імені в. Н. Каразіна

Навчально-науковий інститут комп'ютерної фізики та енергетики

Кафедра фізики нетрадиційних енерготехнологій та екології

Пояснювальна записка

до дипломної роботи

за освітньо-кваліфікаційним рівнем магістр

на тему:

Температурно-аномальна дифузія у кристалах

Виконала студентка 2 курсу, НФ-61

Нестеренко І.В. _____

Спеціальність:

105 Прикладна фізика та наноматеріали

Освітня програма: Прикладна фізика енергетичних систем

Керівник: Марченко І.Г. _____

Рецензент: _____

Харків - 2019

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ

Харківський національний університет імені В.Н.Каразіна

Факультет фізико-енергетичний
Кафедра фізики нетрадиційних енерготехнологій та екології
Рівень вищої освіти (освітньо-кваліфікаційний рівень) магістр
Спеціальність 105–Прикладна фізика та наноматеріали

ЗАТВЕРДЖУЮ

Завідувач кафедри

_____ В.І Ткаченко
підпис ініціали, прізвище

"____" _____20___року

З А В Д А Н Н Я
НА ДИПЛОМНУ РОБОТУ (ПРОЕКТ)

Нестеренко Ірини Володимирівни
(прізвище, ім'я, по батькові студента)

1. Тема роботи Температурно-аномальна дифузія у кристалах

керівник роботи Марченко І.Г., доктор ф.-м. наук _____
(прізвище, ім'я, по батькові, науковий ступінь, вчене звання)

затверджені наказом по університету від "___"_____20__року №___

2. Строк подання студентом роботи_____

3. Перелік питань, які потрібно розробити
Побудувати комп'ютерну модель дифузійного руху частинок у кристалах. Провести розрахунки залежності коефіцієнта дифузії від величини діючої сили та коефіцієнту тертя. Провести аналіз отриманих чисельних результатів.
_____
_____
_____
_____
_____

4. План роботи

№ з/п	Назви етапів роботи
1.	Проведення літературного аналізу робіт по дифузії дефектів у кристалах
2.	Побудова комп'ютерної моделі дифузійного руху частинок у просторово-періодичних потенціалах
3.	Вивчення методів вирішення стохастичних диференціальних рівнянь
4.	Проведення розрахунків залежності коефіцієнта дифузії від величини діючої сили та коефіцієнту тертя
5.	Побудова отриманих залежностей та проведення аналізу чисельних результатів

5. Дата видачі завдання _____

Студент _____ **Нестеренко І.В.**
підпис ініціали, прізвище

Керівник роботи _____ **Марченко І.Г.**
підпис ініціали, прізвище

Перелік скорочень та абревіатур

ТАД – температурно-аномальна дифузія

ГЦК – гранецентрована кубічна решітка

ЛКМ – лінійно-конгруентний метод

РЕФЕРАТ

Нестеренко Ірина Володимирівна «Температурно-аномальна дифузія» (випускна робота магістра). - Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна, 2019. - 51 с.

Робота складається з вступу, 3 розділів, висновків; містить 19 малюнків, список використаної літератури з 14 найменувань.

Мета роботи полягає в тому, щоб мати можливість контролювати властивості полікристалів шляхом зміни дифузійної рухливості точкових, лінійних або планарних дефектів без підвищення температури матеріалу. Для цього побудована комп'ютерна модель дифузного руху частинок в кристалах. Проведено розрахунки залежності коефіцієнта дифузії від величини діючої сили і коефіцієнта тертя, побудовані графіки.

Вивчення процесів дифузії в матеріалах є важливою практичною проблемою. Розуміння цих процесів має важливе значення для формування мікроструктури матеріалів. Процес управління мікро- та наноструктур багато в чому зводиться до можливості управління процесами дифузії, але основними параметрами такого управління служила температура. З технічної точки зору важливо мати можливість керувати дифузією певних типів дефектів або атомів без підвищення температури середовища.

Ключові слова: температурно-аномальна дифузія, просторово-періодичні потенціали, стохастичні рівняння, броунівський рух, математичне моделювання.

РЕФЕРАТ

Нестеренко Ирина Владимировна «Температурно-аномальная диффузия» (выпускная работа магистра). - Харьковский национальный университет имени В. Н. Каразина, 2019. - 51 с.

Работа состоит из введения, 3 разделов, заключения; содержит 19 рисунков, список использованной литературы из 14 наименований.

Цель работы заключается в том, чтобы иметь возможность контролировать свойства поликристаллов путем изменения диффузионной подвижности точечных, линейных или планарных дефектов без повышения температуры материала. Для этого построена компьютерная модель диффузного движения частиц в кристаллах. Проведены расчеты зависимости коэффициента диффузии от величины действующей силы и коэффициента трения, построены графики.

Изучение процессов диффузии в материалах является важной практической проблемой. Понимание этих процессов имеет важное значение для формирования микроструктуры материалов. Процесс управления микро- и наноструктур во многом сводится к возможности управления процессами диффузии, но основным параметрам такого управления служила температура. С технической точки зрения важно иметь возможность управлять диффузией определенных типов дефектов или атомов без повышения температуры среды.

Ключевые слова: температурно-аномальная диффузия, пространственно-периодичные потенциалы, стохастические уравнения, броуновское движение, математическое моделирование.

ABSTRACT

Nesterenko Iryna Volodymyrivna “Temperature-anomalous diffusion” (master graduation work). V.N. Karazin Kharkiv National University, 2019.- 51 p.

The work consists of an introduction, three sections, and conclusion; contains 19 figures, a list of used literature from 14 titles.

The aim of the work is to be able to control the properties of polycrystals by changing the diffusion mobility of point, linear or planar defects without increasing the temperature of the material. For this, a computer model of the diffuse motion of particles in crystals is constructed. The dependences of the diffusion coefficient on the magnitude of the effective force and the friction coefficient are calculated, and graphs are constructed.

The study of diffusion processes in materials is an important practical problem. An understanding of these processes is important for the formation the microstructure of materials. The control process of micro- and nanostructures is largely reduced to the ability to control diffusion processes, but the main parameters of such control were temperature. From a technical point of view, it is important to be able to control the diffusion of certain types of defects or atoms without increasing the temperature of the medium.

Keywords: temperature-anomalous diffusion, spatially periodic potentials, stochastic equations, Brownian motion, mathematical modeling.

ЗМІСТ

ВСТУП 9
1. Аналіз науково-технічної літератури 11
1.1 Дифузія у кристалах 11
1.2 Дифузія кристалів з дефектами 14
1.3 Основні поняття дифузії броунівських частинок 18
1.4 Броунівський рух 21
1.5 Атомні механізми дифузії та дефекти у кристалах 23
1.6 Точкові дефекти в кристалах 28
1.7 Дифузія точкових дефектів 32
2. Теоретичне дослідження 34
2.1 Математична модель задач 34
2.2 Методи вирішення стохастичних диференціальних рівнянь 35
2.3 Чисельні рішення стохастичних рівнянь 37
2.4 Метод комп’ютерного моделювання 39
2.5 Розрахунки залежності коефіцієнта дифузії від величини діючої сили та коефіцієнту тертя 42
3. Отриманий результат 48
Висновки 50
СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ 51

ВСТУП

Дифузія у твердих тілах має велике значення у багатьох процесах матеріаловедення та тісно пов'язана з теорією фазових перевтілень. Велика кількість явищ і процесів у той чи інший мірі пов'язані з дифузією атомів та іонів у кристалах. Прикладом таких процесів є фазові перевтілення.

Вивчення дифузії і пов'язаних з нею явищ важливо з ряду причин. Найважливіше вміти вірно визначити режими термічної та хіміко-термічної обробки, подовженість і температура яких залежить від тривалості дифузних процесів. Крім того розуміння дифузних процесів дає можливість краще розуміти особливості структури фазових перетворень. Тож треба підкреслити, що механізми дифузії тісно пов'язані з дефектами кристалів

Ми знаємо, що дифузія являє собою проникнення однієї в іншу речовину при їх зіткненні. Наше уявлення о дифузії дає нам зрозуміти, що коли температура збільшується, то дифузія зростає. Але це визначення несправедливо для далеких від рівноваги систем. Останнім часом з'явилися експериментальні дані, а також теоретичні дослідження. Наприклад можна позначити систему з аномальною температурою залежністю – це рух броунівських частинок в просторово-періодичних структурах. Це рішення грає важливу роль у питаннях фізики, хімії та біології.

Актуальністю роботи можна позначити, що вивчення процесів дифузії у матеріалах є важливою практичною проблемою. Зрозуміння цих процесів має важливе значення для формування мікроструктури матеріалів. Насамперед ця структура визначає такі властивості матеріалів, як міцність, твердість, опір корозії, електропровідність, магнітні властивості та інше.

Процес управління мікро- та наноструктурою багато в чому зводиться к можливості керування процесами дифузії. Але до цього часу основними параметрами такого керування служила температура. Адже з збільшенням температури дифузія зростає. При цьому активуються інші термічні процеси.

С технічної точки зору важно мати можливість керувати дифузією певних типів дефектів або атомів без підвищення температури середовища.

1. Аналіз науково-технічної літератури

1.1 Дифузія у кристалах

Загальні кристалографічні особливості процесу дифузії цілком передбачені, якщо взяти до уваги геометрію кристала. Дифузія майже завжди здійснюється поступово, причому довжина елементарних «кроків» порядку одного міжатомної відстані. Атоми рухаються стрибаючи з одного положення в інше. У сумі ці елементарні стрибки забезпечують переміщення атомів на великі відстані. Можемо побачити , який механізм окремих атомних стрибків. Існує кілька можливих схем: рух вакансій, рух атомів впровадження або будь-якої спосіб взаємного обміну місцями між атомами (див рис.1.1) [1]

Наприклад, дифузія за рахунок переміщення вакансій відбувається в тих випадках, коли вакансії решітки обмінюються місцями з сусідніми атомами. Послідовність актів, за рахунок яких вакансія рухається по решітці, показана на (рис.1.1(а) Цей процес залежить від: утворення вакансій в решітці та їх послідовного переміщення. Дифузія атомів впровадження це теж є двоступінчастим процесом. Спочатку атом, який перебував у вузлі решітки, перескакує в межвузілля: з положення 1 в положення 2 (рис.1.1(б)) після чого відбуваються послідовні переходи цього атома в найближчі межвузілля 2-3-4-5-6. [1]

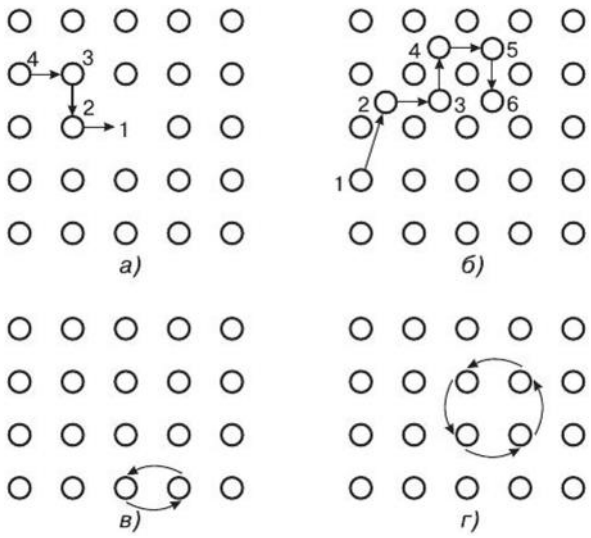


Рис.1.1 Атомні переміщення, які призводять до дифузії: а) рух вакансій; б) рух атомів впровадження; в) обмін місцями двох атомів; г) кільцевої обмін місцями чотирьох атомів[1]

Швидкість дифузії атомів невеликого розміру по міжвузіллям сплаву визначається енергією, яка необхідна для пересування атомів впровадження по кристалічній решітці. Оскільки в межвузіллях a та b атоми займають положення рівноваги, то ці положення відповідають мінімуму енергії. Крім того, з умов симетрії випливає, що максимум енергії досягається, коли атом з положення a зміщується в точку c, що знаходиться посередині між положеннями рівноваги (див. рис.1.2) [1]

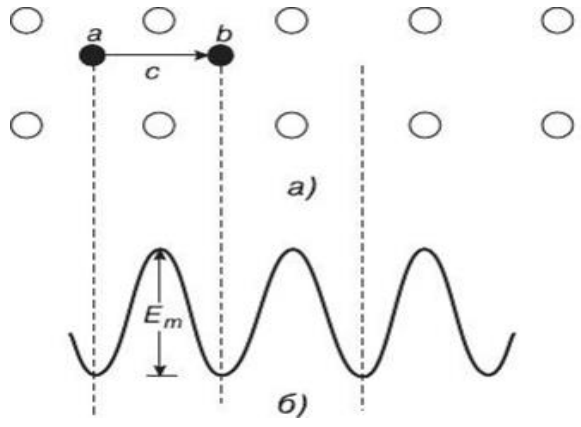


Рис.1.2 Дифузія по міжвузіллям: а) - схема дифузії; б) - потенційна енергія кристала в залежності від розташування дифундирующего атому[1].

Розглянемо дифузію за рахунок руху вакансій:

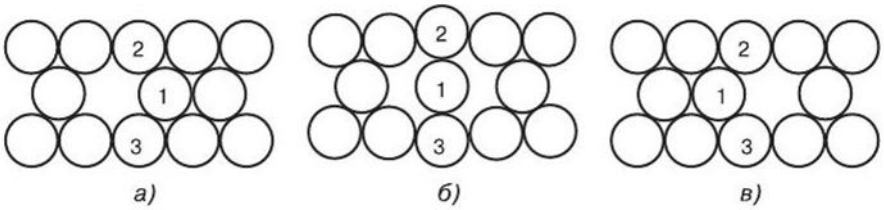


Рис.1.3 Затруджений рух вакансій в повноупакованої двовимірної структурі[1].

Перший атом в конфігурації, яка показана на рис. 1.3(*а*), у свою чергу може помінятися місцями з сусідньої вакансією в повноупакованої плоскої структурі, та перейти у положення, яке ми бачимо на рис.1.3(*в*). Ці обидва розташування атомів (рис.1.3(*а*) і (*в*)) геометрично рівноцінні, отже, еквівалентні і енергетично. При переході від конфігурації *а* до конфігурації *в* перший атом повинен «протиснутися» між атомами 2 і 3, які перебувають в цій же площині. У проміжному положенні (рис.1.3(*б*)) атоми 2 і 3 зміщуються зі своїх нормальних положень, і в цьому місці решітка буде мати значну пружною енергією. Таким чином, проміжне положення *б* відповідає більш високому рівню енергії [1].

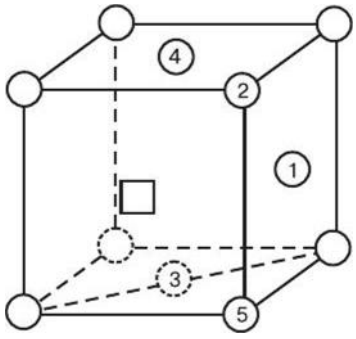


Рис.1.4 При обміні місцями між вакансією, яка знаходиться на передній грані, і атомом 1 в ГЦК-структурі чотири інших атома (2, 3, 4, 5) безпосередньо взаємодіють з дифундирующим атомом, коли цей знаходиться в середньому положенні[1].

1.2 Дифузія кристалів з дефектами

Коли розташування атомів в кристалі впорядковане, то таким чином є наслідок закону природи, а саме стійким є стан системи, коли її енергія буде мінімальною. У нашому випадку «система» - це кристал. Мінімальна енергія серед інших значень позначена іншою величиною, і цьому відповідає впорядковане розташування атомів. Серед різноманітних різних невпорядкованих станів воно і позначено тим, що відповідає певному порядку розташування атомів. Ми можемо зрозуміти, що може бути багато інших типів впорядкованого розташування атомів. У кристалі, який в свою чергу складається з атомів певного сорту, цей характер впорядкованого розташування буде визначатися особливими властивостями атомів. Для нас насамперед грає роль те, що в якому саме порядку будуть розташовані атоми в кристалі, а головне, що вони можуть бути розташовані впорядковано[2].

Ідеальний порядок який відображено в моделі, зробленої в свою чергу з дерева та дроту, може здійснитися в кристалі при температурі, яка абсолютна нулю, наближаючись до якого кристала, якби поступово завмирає. Зауваження про поступове вмирання кристала при пониженні температури не слід сприймати категорично. Інші кристали, а також ті, що складаються з легких атомів, поблизу абсолютного нуля знаходять «друге дихання»: їх атоми стають більш рухливими, ніж при підвищені температури . Цей ефект вказує на те, що він чисто квантовий. Але зараз про нього можна забути, вважаючи, що ми маємо працюємо зі звичайним «класичним» кристалом[2].

При підвищенні температури, коли в кристалі відновлюється коливання атомів навколо положення рівноваги, вони в першу чергу стають більш енергійними, та можуть відбуватися події, після яких в кристалі з'являються вузли, де немає атомів, а також атоми, як не розташовані в вузлах. Вузли, які вільні від атомів, називаються «дірками», або по іншому «вакансіями», а атоми, що знаходяться не в вузлах – це «межвузельні атоми».

Вакансії і межвузельні атоми спотворюють навколо себе грати на відстані, набагато більше, ніж відстань між сусідніми вузлами[2].

Вакансії та межвузельні атоми часто об'єднують назвою «точкові дефекти». Виникають вони через те, що відбувається випадково, в різних місцях кристала виникають згустки енергії, які мають назву «енергетичні флуктуації». Так як їх утворення викликається тепловим рухом, число вакансій і межвузельних атомів - має зростати зі збільшенням температури [2].

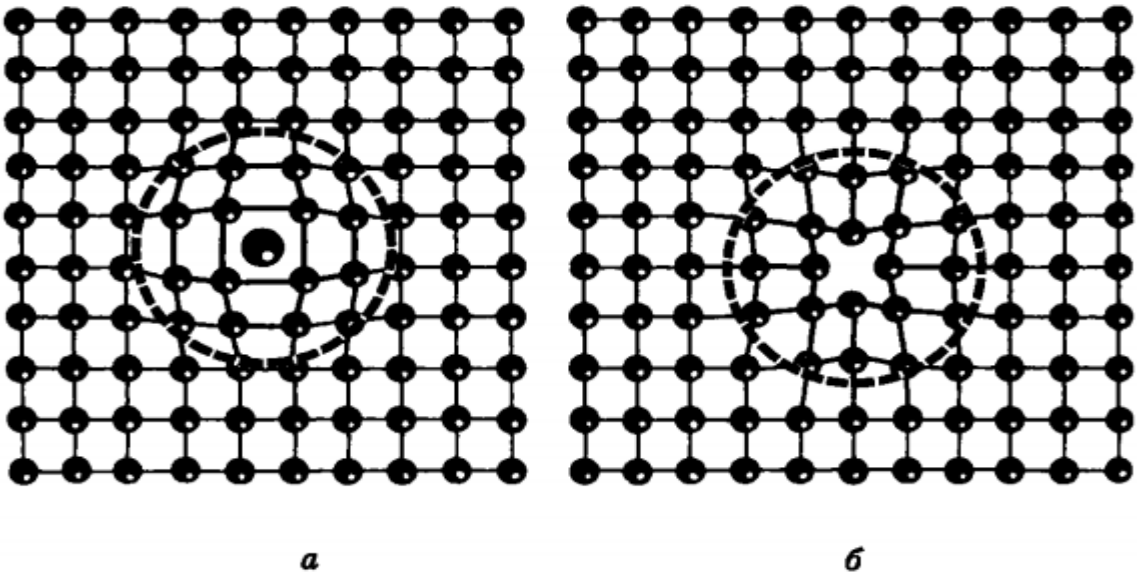


Рис. 1.5 Вакансії (а) і межвузельний атом (б) - точкові дефекти в кристалічній решітці [2].

Кристал з часткою вузлів, які вільні від атомів, можна розглядати як розчин «атомів порожнечі». Є можливість позбутися від атома, який знаходиться у вузлі: його треба перевести на незаконне становище в межвузілля. Але при цьому виникає і «атом порожнечі». Буває так, що саме це відбувається. Межвузілля завжди поруч, та для атома справа за малим - вистрибнути з вузла, опинитися в межвузілля, так би мовити, одним махом, створивши «пару Френкеля», та задовольнити потребу кристала в «атомі порожнечі». Але це може коштувати атому великих зусиль, йому треба мати енергію, яка достатня не тільки, щоб порвати зв'язки з тими атомами, які

заселяють сусідні кути решітки, але і змусити нових сусідів по межвузіллю трішки розсунутися, поступившись частиною життєвого простору атому, щоб оселитися в межвузіллі. В кристалах, які складаються з щільно упакованих атомів одного сорту, цей механізм народження «атома порожнечі» не може існувати, так як для цього потрібно занадто багато енергії [2].

Як же виникає «атом порожнечі». Атоми, яким важко перескочити в обмежений простір межвузіллі може легко перескочити на вільну поверхню кристала, що межує з порожнечею. У кристалі з'явиться поверхневий вакантний вузол, в який потім перейде атом з другого ряду атомів, а тепер вже в обсязі кристала утворюється вакансія. Це і означає, що «атом порожнечі» розчиняється в кристалі, і далі він може ланцюгом послідовних переміщень просуватися в глиб кристала[2].

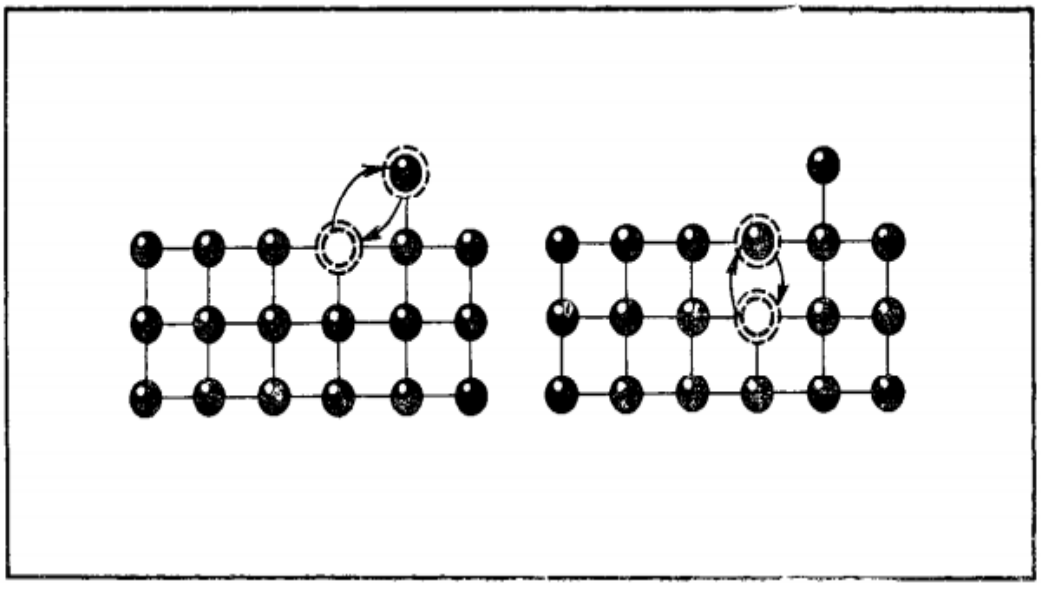


Рис.1.6 Послідовні стадії утворення і переміщення «атома порожнечі» [2].

Дислокація може з'являтися «джерелом» атомів, якщо до неї підійде вакансія і поглине нею. Вочевидь, для того щоб піднятися або опуститися на одну міжатомну відстань[2].

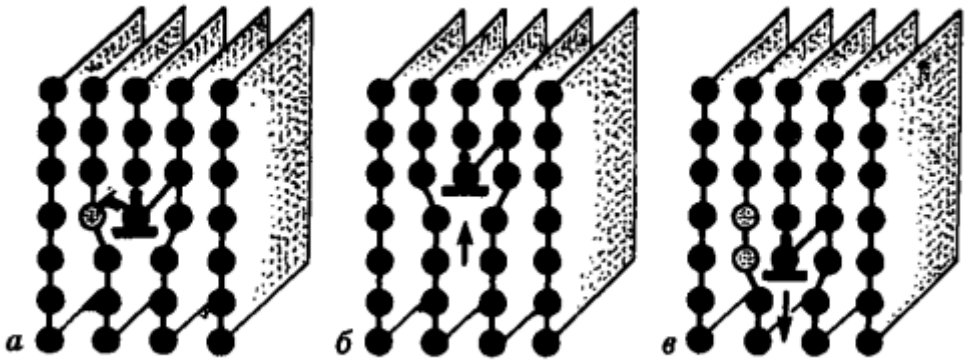


Рис.1.7 Рухома дислокація (а, б, в) - джерело атомів або вакансій[2].

З підвищенням температури кристала роль «власних» вакансій зменшується з декількох причин. По-перше, більш імовірним стає розрив комплексу, та найімовірніше необхідна для цього флуктуація енергії. По-друге, з підвищенням температури збільшується концентрація звичайних, рівноважних вакансій, в випадку з концентрацією «домішкових», які виникли в зв'язку з входженням в грати стороннього двовалентного іона, залишаються незмінною[2].

Але щоб рівноважні вакансії могли конкурувати з «домішковими», їх в свою чергу повинно бути приблизно стільки ж, скільки і «домішкових». З ростом температури концентрація «домішкових» вакансій залишається незмінною, коли ж концентрація рівноважних вакансій зростає[2].

При деякій температурі концентрації виявляться рівними, температура виявляється більш високою, чим більше концентрація «домішкових» атомів у кристалі. При наступному підвищенні температури «власні» вакансії поступово втрачають свою роль. Коли в решітці багато загальних рівноважних вакансій, потреба у власних стає меншою[2].

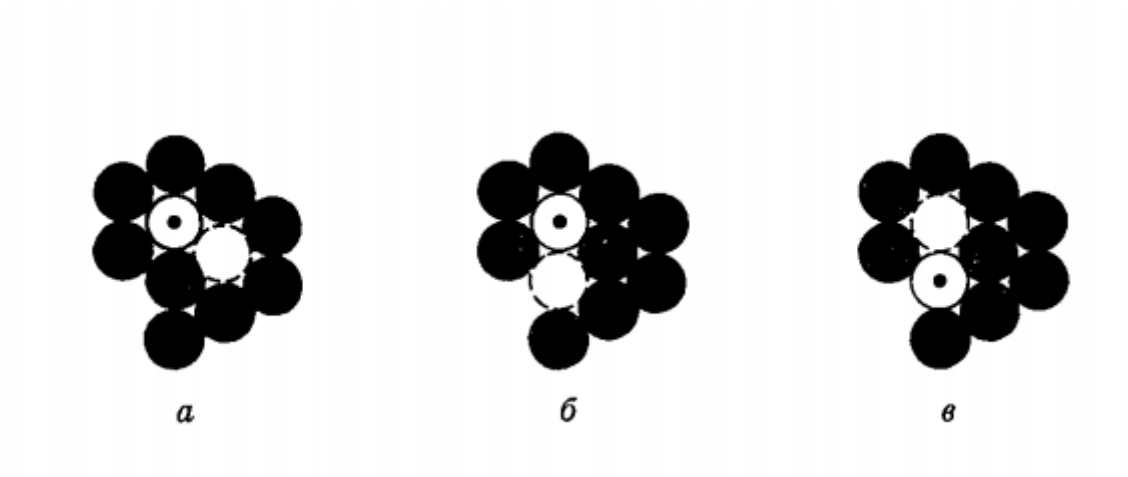


Рис.1.8 Послідовність кроків атома, дифундирующего з «власною» вакансією. [2].

1.3 Основні поняття дифузії броунівських частинок

Дифузія – це перемішування компонентів суміші, які виникають при наявності перепаду їх концентрацій. На мікроскопічному (молекулярному) рівні причиною дифузії є хаотичний рух індивідуальних частинок, які в свою чергу на макрорівні призводять до виникнення спрямованої течії компонентів суміші. Процес дифузії направлений до встановлення рівноваги, іншими словами, до вирівнювання концентрації і рівномірному перемішуванню компонентів.[3]

Підходячи до питання, якщо ми будемо відштовхуватись від спостережень явища, а не процесів, що лежать в його основі, а наприклад, виходячи з експериментальних даних, записати так званий закон Фіка, який загоджував, що щільність потоку речовини при дифузії пропорціональна градієнту концентрації дифундирующего компоненту [3].

В одномірному випадку:

$$j = -D\frac{\partial n}{\partial x}. \qquad (1.1)$$

Де n- концентрація(об'ємна щільність) компоненту, який переноситься, j- щільність потоку. Коефіцієнт пропорційності D називають коефіцієнтом дифузії [3].

$$D = \frac{\lambda^2}{2\tau}. \quad (1.2)$$

Звичайно, в реальних системах пробіг λ, як правило, не фіксований, а є випадковою величиною.[3].

Закон зміщення в часі окремої випадково блукаючої частинки виявив Ейнштейн. Він вважав, що дифузія характеризується лінійною залежністю середнього квадратичного відхилення координат частинок від часу. [3]

$$\langle x^2 \rangle = D(T) * t. \quad (1.3)$$

У в'язкому середовищі:

$$D = {kT}/{\gamma}. \quad (1.4)$$

Де kT- не є Арренієвою залежністю. Арренієва залежність- це температурна залежність константи швидкості реакції елементарної хімічної реакції.

Коефіцієнт дифузії обчислюється за дисперсіями σ^2 в розподілених ансамблях, що рухаються частинами при прагненні часу до нескінченності:

$$\sigma^2 = \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle. \quad (1.5)$$

Де < > усереднення по ансамблю.

$$D = \lim_{t \to \infty} \frac{\sigma^2}{2t}. \quad (1.6)$$

Броунівською називають частку макроскопічного розміру, яка здійснює випадкові блукання під дією хаотичних поштовхів зі стоку середовища, в яку вона поміщена. Перш, ніж розглядати випадкові блукання макроскопічної

частинки, ми зупинимося на визначенні її рухливості. Оскільки $a \gg \lambda$,сила опору середовища – це ефект макроскопічний. Рух крупної частки викликає в середовищі течію, яка повинна описуватися законами гідродинаміки (на масштабах порядку розміру броунівський частці навколишнє середовище можна вважати суцільним). Таким чином, опір руху броунівський частинки є результат її «колективної» взаємодії з частинками середовища [3].

Розглянемо тепер закон руху броунівський частинки під дією хаотичної компоненти сили взаємодії з частинками середовища F(t).

$$M\frac{dU}{dt} = -\frac{U}{b} + F(t). \qquad (1.7)$$

Це рівняння руху є рівняння Ланжевена [3].

Ми повинні розуміти, що випадкові поштовхи повинні в кінцевому підсумку приводити до хаотичного зміщенню броунівської частинки. Покажемо, що її рух справді можна описати деякою моделлю випадкових блукань [3].

Чисельні оцінки характерних часів та процесів взаємодії броунівської частинки з середовищем показує, що її рух можна представити наступним чином. Практично не зрушуючи з місця, вона під дією великої кількості ударів молекул набуває випадкову швидкість U, середньо-квадратичне значення якої відповідає її теплової рівновазі із середовищем: $u \sim \sqrt{k_Б T/M}$. Після цього за час частка $\lambda p \sim u\bar{\tau}p$. Отже, рух хмари броунівських часток підкоряється дифузійним законам [3].

1.4 Броунівський рух

Тепер розглянемо більш детально, що таке броунівський рух. Початок дослідження броунівського руху було у 1827 році, коли Роберт Броун виявив, що маленькі частинки, зважені в рідині, здійснюють безперервний безладний рух. У 1905 році Альберт Ейнштейн пояснив цей рух хаотичними зіткненнями з молекулами навколишнього середовища [4].

Якщо ми будемо спостерігати в сильний мікроскоп будь-які маленькі частинки, які знаходяться в абсолютно спокійній рідині або газі (наприклад, крапельки жиру в воді, частинки, з яких складається дим, або крапельки туману в повітрі), то виявляється, що ці частинки безперервно рухаються, причому напрямок руху змінюється випадковим чином. Рух менших частинок сильніше, ніж великих. Це явище, яке було відкрите в 1827р. англійським Робертом Броуном (1773-1858), отримало назву броунівського руху. Причина явища була дуже довго незрозумілою, поки не було доведено, що це рух частинок викликано поштовхами оточуючих молекул рідини або газу. Хоча молекули рідини (або газу) вдаряють частинки з усіх боків, але все ж їх удари не врівноважують повністю один одного. Випадково іноді дію ударів на частку з якогось одного боку виявиться кілька сильніше, ніж з інших сторін, в результаті чого частка почне рухатися в певному напрямку. Потім переважать удари з будь-якої іншої сторони, і частка почне рухатися в новому напрямку. Результатом є безладний рух частинки [6].

Найпростішою дискретною апроксимацією броунівського руху служить одновимірне випадкове блукання. У цьому випадку частка спочатку розташовується в точці на прямій. Частка робить одиничний крок вправо або вліво в залежності від випадкового вибору, наприклад, кидання монети. Випадкове блукання відбувається ітеративно. Для кожного $n = 1,2,3$ покладемо[5]

$$x_n = x_{n-1} \pm 1. \tag{1.8}$$

Більш точним наближенням до реального броунівському руху є заміна кроків ± 1 випадковими величинами g_n, що мають гауссовский, або нормальний розподіл. Після першого кроку частка знаходиться в положенні $x_n = x_0 + g_1$, а після кроків n в положенні [5]

$$x_n = x_{n-1} + g_n. \tag{1.9}$$

На рис. 1.9 ми можемо побачити реалізацію гауссовського випадкового блукання [5].

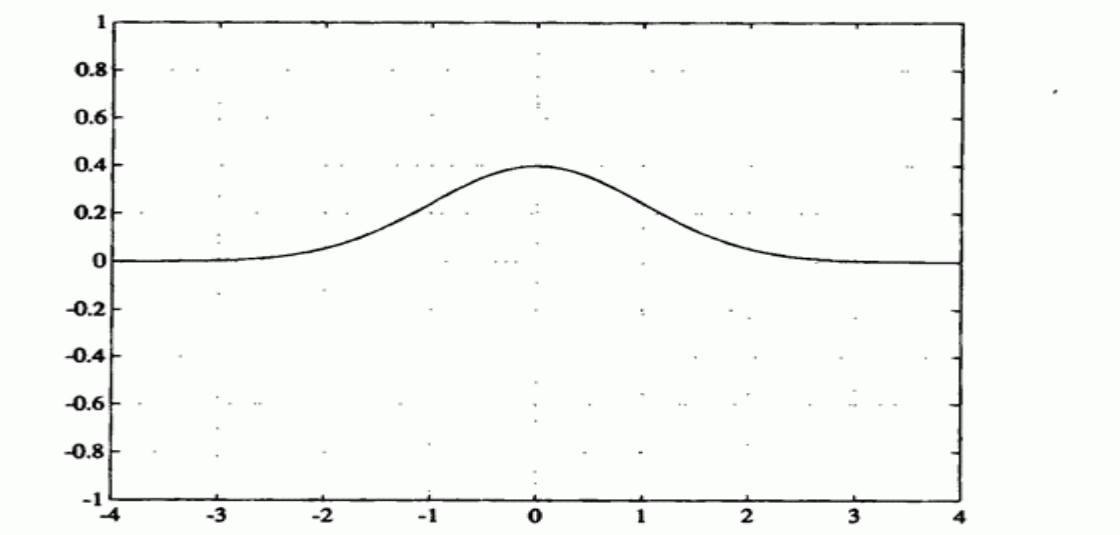


Рис 1.9 Нормована гауссовська крива $\sigma = 1, \mu = 0$ [5]

Будемо розглядати броунівського руху, який визначений на кінцевому діапазоні, наприклад, на відрізку $[a, b]$. Більшість тверджень про броунівський рух відноситься до одновимірного випадку, але має відповідні аналоги для випадку двох і більшого числа вимірів. Перш за все нам знадобиться визначення гауссовского випадкового процесу. Випадковий процес $X(t)$ називається гауссовським, якщо для кожного кінцевого набору моментів часу вектор має гауссовський розподіл [5].

Гауссовський процес $X(t)$ називається одновимірним броунівським рухом на інтервалі $[a, b]$, якщо спостерігаються наступні властивості: [5]

1. $X(0) = 0$ та функція $X(t)$ завжди неперервна;
2. Властивість гауссових перетворень: випадкова величина буде

$$\Delta X = X(t_2) - X(t_1), t_2 > t_1. \quad (1.10)$$

1.5 Атомні механізми дифузії та дефекти у кристалах

В основі дифузійних процесів лежать деякі можливі атомні переміщення, та їх ймовірність неоднакова. Ці атомні переміщення залежать від структури даного кристала, і помітно особливі від дефектів кристалічної будови. Останні в свою чергу, з'являючись в речовині, або полегшують атомні переміщення, або у іншому випадку ускладнюють їх, і працюють як пастки для мігруючих атомів [7].

Різноманітність механізмів визначено різноманітністю дефектів кристалічної будови (вакансія та межвузільних атомів, їх численні кластери, дислокації, границі зерен та інше) [7].

Дифузійні переміщення атомів на великі відстані здійснюються у випадку окремих хаотичних атомних стрибків. Ці атоми здійснюють ряд стрибків у обсязі кристала по окремому механізму. У випадку коли ці скачки хаотичні, без будь-якого переважного напрямку, тоді атом здійснює випадкові блукання по кристалічній решітці [7].

Дифузія в кристалі може служити прикладом спрощеного процесу випадкових блукань, бо правильну будову кристалічної решітки обумовлюють стрибки атомів, але тільки певної довжини та в окремих дискретних напрямках [7].

Головний випадок одновимірної дифузії описуються в термінах випадкових блукань, одному напрямку з фіксованою довжиною стрибка. На основі теорії випадкових блукань ми можемо обчислити потік атомів між двома сусідніми атомними площинками в кристалі. Цей розрахунок

безпосередньо призводить до відомого першого закона Фіка і дає нам простий вираз для коефіцієнта дифузії через атомні характеристики [7].

Потік атомів за першим законом Фіка пропорційний градієнту концентрації дифундирующих атомів: [7]

$$J = -D\frac{\partial c}{\partial x}. \quad (1.11)$$

Де J - результуюче число атомів, які дифундують речовини, що пройшла за одиницю часу через одиничну площу площині, перпендикулярній осі x , уздовж якою здійснюється дифузія, c – концентрація атомів даного компоненту [7].

Коефіцієнт дифузії в термінах теорії випадкових блукань можна записати (для простої кубічної решітки): [7]

$$D = \frac{1}{6}\lambda^2\nu. \quad (1.12)$$

Де λ - відстань між сусідніми кристалографічними площинами, а ν-частота стрибків дифундирующих атомів, цифра 6 в знаменнику з'являється як найближчі сусідні позиції, куди може зробити стрибок атом в кубічної решітці [7].

Частота стрибків атомів залежить від температури T :

$$\nu = \nu_0 e^{-Q/kT}. \quad (1.13)$$

Де Q - енергія активації дифузії, k – постійна Больцмана, ν_0- константа.

Коефіцієнт дифузії D – це макроскопічна величина, що досить легко визначається експериментально, за допомогою відомого методу мічених атомів. Коефіцієнт дифузії залежить від температури кристала за законом Арреніуса [7].

$$D = D_0 e^{-Q/kT}. \quad (1.14)$$

На даному етапі є декілька основних механізмів дифузії, такі як:

- механізм обміну атомів місцями;
- кільцевої механізм;
- механізм прямого переміщення атомів по межвузіллю;
- механізм непрямого переміщення межвузільній конфігурації;
- краудіонній механізм;
- вакансійний механізм;
- дівакансіоний механізм;
- механізми дифузії по дислокаціям;
- механізми дифузії по границях зерен в полікристалах [7].

Але з часом цей набір поповнюється цей в міру накопичення інформації о дефектних конфігураціях в кристалах і про акти переміщення дифундирующих атомів. Дуже вагомий внесок вносить комп'ютерне моделювання цих дифузійних процесів [7].

Більш детально розглянемо основні атомні механізми дифузії, які обумовлені появою різних видів дефектів кристалічної будови [7].

Поява вакансій (порожніх вузлів в кристалічній решітці) відбувається термічним шляхом, в процесі опромінення кристалів та їх приготування. Дифузійний перескок атома, сусіднього з вакансією, відбувається так, що том ν раз в секунду вдаряється об бар'єр з атомів, оточуючих вакантний вузол. Якщо його енергія в якийсь момент часу достатня для подолання бар'єру (див рис. 1.6), то атом буде займати вакантний вузол V, який в свою чергу буде переміщатись в сусідню кристалографічну комірку, але при цьому вакансія переміщається буде йому назустріч [7].

Найпростіший вакансійний кластером – це об'єднання двох вакансій, або іншими словами бівакансія (2V). Її переміщення по кристалу, але й, переміщення дифунирующих атомів з її допомогою здійснюється шляхом

переходу одного з атомів, які є сусідами з обома вакансіями, на місце іншої. Енергія, яка буде необхідна для цього переміщення, виявляється менше, ніж E_m^V однієї вакансії. Це відбувається із-зі того, що інша вакансія кластера послаблює бар'єр, який був кладений з атомів найближчого оточення [7].

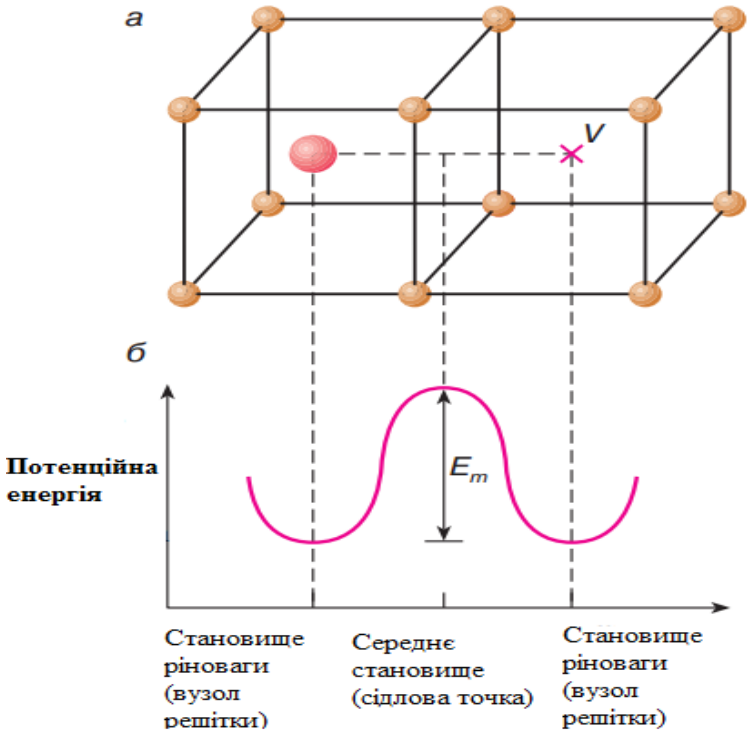


Рис. 1.10 Стрибок мігруючого атома (червоне коло) в сусідній вакантній вузол в кристалі альфа-заліза (а) та залежність потенційної енергії мігруючого атома від його розташування (б). E_m - енергія активації міграції [7]

Поява межвузлових атомів в кристалах обумовлена способом приготування або експлуатації матеріалу. Широко відомі сплави впровадження, коли атоми одного з компонентів розташовуються повністю в межвузіллях кристалічної решітки. Ці атоми можна розділити в кристалах на власні і домішкові (сторонні). Власні атоми частіше розташовуються як специфічні утворення, коли атом підходить до одного зі своїх сусідів і витісняє його з вузла кристалічної решітки (див рис.1.7) [7]

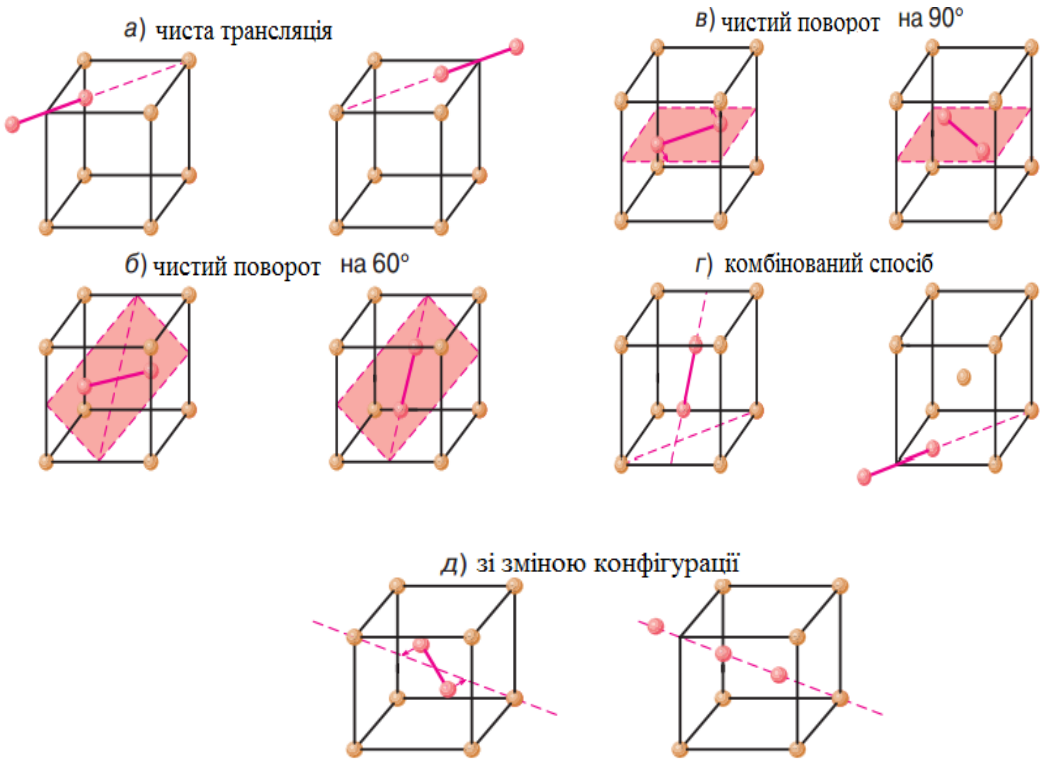


Рис.1.11 Способи дифузійного переміщення атома в кристалічній решітці альфа-заліза[7]

Головне питання, що може виникати коли ми розглядаємо атомні механізми дифузії: як відбувається акт дифузійного перескоку. Відповідь можна отримати за допомогою комп'ютерних моделей процесів дифузії. На рис. 1.8 ми бачимо траєкторію одиничного перескоку атома в кристалічній решітці альфа-заліза. Інші атоми в цей час здійснюють теплові коливання. Бачимо , що мігруючий атом здійснює складний рух перед тим, як перейти в нову еквівалентну позицію. [7]

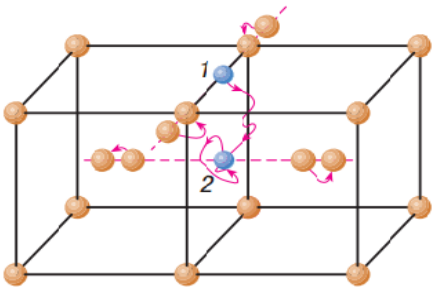


Рис.1.12 Акт міграції домішкового атому[7]

Найпростіші крайові дислокації являють собою дефект у вигляді незавершеної атомної півплощини Перші висновки, які можна зробити аналізуючи міграцію таких дефекти, як вакансія або межвузельний атом, що близько до ядра дислокації, показують рух цих точкових дефектів в ту область дислокації, де ця присутність виробляє найбільше значення напруги. Вакансія повинна притягатися в область стиснення над крайнім атомам, що поруч зайвої напівплощини, а межвузельний атом - в область розширення, яка розташована знизу півплощині [7].

Полікристали складаються з окремих ділянок, всередині ділянок збережена монокристалічна структура. Вони називаються зернами, а їх межі розділу - межами зерен, які є поверхневими дефектами. Слід очікувати прискореної дифузії, що якраз і підтверджується експериментально [7].

Механізми міграції по дефектним місцям в кристалах постійно поповнюється в міру детального вивчення дефектів кристалічної будови речовини. Включення того чи іншого механізму в процес дифузії залежить від багатьох умов: температури кристала, від рухливості даного дефекту, його концентрації та інших чинників [7].

1.6 Точкові дефекти в кристалах

Ідеальні кристалічні решітки не зустрічаються, адже у реальних кристалах обов'язково будуть присутні різні дефекти. Під дефектами (від латинського слова defectus - недолік, вада) – це будь-які відхилення від ідеального, упорядкованого розташування атомів. Воно виникає спонтанно (наприклад в процесі кристалізації), або може створюватися штучно, при опроміненні кристала електронами, нейтронами, рентгенівськими або ультрафіолетовими променями (такі дефекти називаються радіаційними). Сторонні домішки, проникаючі в кристалічну решітку, також порушують її впорядкованість. Вивчення дефектів кристалів пов'язана саме з дефектами, що визначають багато важливих властивостей твердих тіл (електричні,

механічні, оптичні властивості). Але електропровідність і люмінесценція кристалів значною мірою пов'язані з наявністю дефектів. Всі вони зазвичай поділяються на точкові і лінійні (дислокації), та ті, що утворюються на поверхні і в об'ємі кристалів [8].

Точковими дефекти – це недосконалості в кристалічній решітці, що локалізуються в областях кристала розміром близько міжатомної відстані. Такими дефектами є атомні вакансії (вузли кристалічної решітки, в яких відсутні атоми), міжвузільні атоми (власні атоми решітки, що змістилися з вузлів в міжвузля), домішкові атоми заміщення і впровадження (які знаходяться, в вузлах та межвузіллях кристалічної решітки), а також більш складні дефекти, що представляють собою об'єднання вакансії з електронами або дірками, або з'єднання декількох точкових дефектів [8].

Точкові дефекти виникають, через те, коли в кристалі є деяка кількість атомів, енергія яких можливо в певний момент досить велика. Атоми можуть вирватися зі свого становища рівноваги та коли вони подолають потенційний бар'єр, та перейдуть у нове положення рівноваги, але при цьому у вузлі кристалічної решітки, залишивши своє місце атом, утворюється вакансія. Ця вакансія без розташованого поблизу межвузельного атома дефектом по Шоткі. Наприклад, дефект може з'явитися, коли атом на поверхні або переходить в інше положення, та утворює або добудовує новий атомний шар, або може повністю залишати кристал [8].

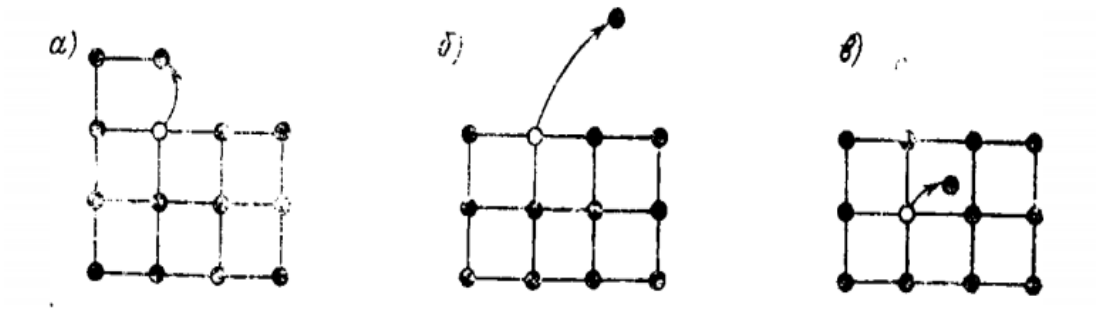


Рис.1.13 Дефекти по Шоткі (а, б) і Френкеля (в) [8]

Розрахувати дефекти по Шоткі можна наступним чином, застосовуючи формулу: [8]

$$n_{\text{ш}} = n = Nexp\left(-\frac{E_{\text{ш}}}{kT}\right). \quad (1.15)$$

Де $n_{\text{ш}}$ – кількість (концентрація) дефектів по Шоткі.

Для одночасної появи вакансій різних типів:

$$n_{\text{ш}} = Nexp\left(-\frac{E_{\text{ш}}}{2kT}\right). \quad (1.16)$$

Вираз для рівноважної концентрації $n_{\text{ф}}$ дефектів по Френкелю виходить теж, як і у вираженні для концентрації дефектів по Шоткі, тільки додатковим урахуванням концентрації междоузлій N':

$$n_{\text{ф}} = \sqrt{N\,N'}exp\left(-\frac{E_{\text{ф}}}{2kT}\right). \quad (1.17)$$

Де $E_{\text{ф}}$ - енергія переходу атома з вузла в межвузілля [8].

Також уявимо утворення інших дефектів. Наприклад, атом з поверхні впроваджується в межвузілля і йде по міжвузля в обсяг. В обсязі з'являються міжвузельні атоми та відсутні вакансії. Однак число таких дефектів дуже мале [8].

Появу дефектів називають генерацією. Це найбільш ймовірні місця генерації дефектів, коли виникають дислокації, границі розділу між мікроструктурними компонентами, порушення в поверхневій структурі. В місцях кристала з’являється деформація решітки, а також ослаблення зв'язків між атомами основної речовини. Енергія дефектоутворення поблизу цих місць зменшується. Такі місця є джерелами дефектів [8].

Міжвузельні атоми та вакансії переміщаються по кристалу. Цей процес можна уявити як перехід сусіднього з нею атома на інше вакантне місце, утворюючи на його місці вакансії, іншими словами, вакансія переміститься стрибком на одну відстань, при цьому наявність дислокацій та інших

порушень кристалічної решітки, буде впливати на швидкість цього переміщення. У випадку, коли на шляху свого руху атом може зустріти вакансію, то він займе вакантне місце та обидва дефекти зникнуть. В цьому випадку, буде рекомбінація дефектів. Вони можуть зникати, або досягати порушення в будові кристала (дислокації). Такі місця називаються місцями стоку вакансій і межвузельних атомів [8].

У цьому випадку, дефекти будуть існувати певний час, який зветься середнім часом життя дефекту. Але коли одночасно народжуються і зникають дефекти, це призводить до встановлення деякої рівноважної концентрації дефектів [8].

Домішкові атоми – це дефекти кристалічної решітки. Кристали, де розташовуються у вузлах решітки домішкові атоми, мають назву твердих розчину заміщення. Коли домішка займає міжвузельні стани, тоді кристал називається твердим розчином впровадження. Домішка може давати дефекти, що мають донорні або акцепторні властивості. Якщо кристал є твердим розчином заміщення, то тоді характер домішки (донорний або акцепторний) визначається різницею валентності примісного атома та решітки кристала. Маємо приклад, якщо атоми утворюють в кристалі решітку з ковалентним зв'язком, то з більшою валентністю - донором, а домішка з меншою валентністю - акцептором. Для твердого розчину впровадження домішкові атоми будуть донорами, вони віддають свої валентні електрони, тоді як домішкові атоми металоїдів будуть акцепторами, у цьому випадку вони будуть захоплювати валентні електрони атомів решітки [8].

Домішки, де виникає порушення в решітці кристала змінюють властивості твердого тіла, наприклад неочищений германій з домішками буде наближається по електропровідності до металів, а надчистий буде типовим напівпровідником [8].

Точкові дефекти утворюються в деяких місцях кристала, а вже потім переміщаються та поширюються по об'єму. Дослідження цих процесів переміщення, або іншими словами процесів дифузії, дефектів в тому числі і точкових, є велике значення для технології отримання металів, сплавів, напівпровідникових структур, ізоляційних матеріалів з необхідними заданими властивостями [8].

1.7 Дифузія точкових дефектів

Дифузія – це переміщення частинок речовини внаслідок теплового руху зі зменшенням їх концентрації. Причиною дифузії є існування градієнта концентрації частинок. Але виникнення дифузії в однорідному зразку можливо також при наявності градієнта температури (термодифузії), а для заряджених частинок це відбувається при наявності градієнта електричного потенціалу, іншими словами при присутності електричного поля (електродифузії). Тому умова появи дифузійного потоку – це існування градієнта хімічного або електрохімічного потенціалу [8].

У твердих тілах дифундують домішкові атоми і власні атоми речовини). Існує кілька механізмів дифузії кристалів:

- прямий обмін місцями атомів, які розташовані у вузлах решітки;
- кільцевий механізм, коли є узгоджене переміщення групи атомів, що розташовані приблизно по кільцю, та так, що все кільце повертається на одну міжатомну відстань;
- переміщення атомів по міжвузіллю;
- переміщення атомів по вакансіях [8].

Частинки в кристалі знаходяться в потенційних ямах, в результаті теплового руху вони можуть отримати енергію, що буде достатньою для подолання потенційного бар'єру , та й для переходу в вільну потенційну яму [8].

Електродифузія заряджених дефектів відбувається всередині кристалів і під час відсутності зовнішнього поля через утворення локальних внутрішніх полів [8].

Особливість дифузії – це залежність коефіцієнта дифузії від концентрації домішки. Збільшення цієї концентрації змінює коефіцієнт дифузії за рахунок зміни механізму дифузії, а також є можливість появи взаємодії між атомами, яка може привести до зменшення енергії активації дифузії. Дефекти решітки мають вплив до збільшення дифузії, тому що поблизу з'являються спотворення кристалічної решітки, які зменшують закріплення атомів в решітці [8].

Вивчення процесів дифузії важливо тому, що за допомогою дифузії вдається вводити в кристали різні домішки, які формують необхідні властивості твердотільних структур. Також коли ми знаємо закони дифузії, це дозволяє нам визначити важливі параметри речовини, а також усунути небажані явища в твердотільних структурах, які можуть бути викликані дифузією дефектів [8].

2. Теоретичне дослідження

2.1 Математична модель задач

Рух броунівських часток в похилому періодичному потенціалі описується рівнянням Ланжевена:

$$m\ddot{x} = -\partial/\partial x\, U(x) - \gamma\dot{x} + F + \sqrt{2\gamma Q\xi(t)}. \quad (2.1)$$

Де m – маса,

γ – коефіцієнт тертя,

x – координата частинки в одномірній решітки,

t – це час,

F – діюча на частинку постійна сила, яка задає нахил потенціалу.

Точка зверху означає диференціювання по часу. $\xi(t)$ описує термічні флуктуації.

Теплова енергія обчислюється за формулою:

$$Q = kT. \quad (2.2)$$

Де k – постійна Больцмана, T- температура.

Періодичний потенціал частинки буде виглядати наступним чином:

$$U(x) = -\frac{U_0}{2}\cos\left(\frac{2\pi}{a}x\right). \quad (2.3)$$

a – це період одномірної решітки,

U_0 – висота потенційного бар'єру.

На частинку діє сила, окрім постійної зовнішньої сили:

$$-\frac{dU}{dx} = F_0 \sin\left(\frac{2\pi}{a}x\right). \quad (2.4)$$

$F_0 = {\pi U_0}/{a}$, так обчислюється F_0. [9]

Параметри матеріла, який ми використовували були $U_0 = 0.08$ эВ,

$a = 2.0$Å. Маса частинок була 1 атомна одиниця маси.

2.2 Методи вирішення стохастичних диференціальних рівнянь

Стохастичне рівняння, яке ми написали раніше (2.1), вирішується чисельно. Коефіцієнт дифузії обчислюється за дисперсією σ^2 в розподілі ансамблю рухомих частинок при прагненні часу к нескінченності:

$$D = \lim_{t\to\infty} \frac{\langle (x-\langle x\rangle)^2\rangle}{2t}. \tag{2.5}$$

$$D = \lim_{t\to\infty} D_{ef}(t) = \lim_{t\to\infty} \frac{\langle (x-\langle x\rangle)^2\rangle}{2t} = \lim_{t\to\infty} \frac{\sigma^2}{2t}. \tag{2.6}$$

Ці скобки $\langle \quad \rangle$ означають усереднення по ансамблю.

Коли ми будемо аналізувати результати моделювання, нам треба перейти к безрозмірним величинам. В цих випадках застосовується безрозмірні величини, які ввів Х.Рискен [10], тоді рівняння (2.1) буде виглядати наступним чином:

$$\ddot{x}' = -sinx' - \gamma'\dot{x}' + F' + \sqrt{2\gamma' Q' \xi(t')}. \tag{2.7}$$

Безрозмірні одиниці, які пов’язані із силою, коефіцієнтом тертя та температурою наступним чином:

$$\gamma' = \gamma \frac{\tau_0}{2\pi m}. \tag{2.8}$$

$$F' = \frac{F}{F_0}. \tag{2.9}$$

$$Q' = \frac{2kT}{U_0}. \tag{2.10}$$

Де $\tau_0 = a(2m/U_0)^{1/2}$ – період власних малих коливань частинок.

Стохастичні рівняння для кожної частки вирішувалися чисельно з кроком по часу, які становлять менше 0.01 періоду власних коливань.

Статистичне усереднення проводилося по ансамблю с кількістю частинок не менше. $N = 5 * 10^4$.

Для того, щоб описати характер коливань у різних системах вводимо коефіцієнт затухання [11]:

$$\Lambda = \frac{\gamma}{2m\omega_0}. \tag{2.11}$$

ω_0 – частота власних коливань.

При $0 < \Lambda < 1$, коливання називаються недодемпфірованні, а коли $\Lambda > 1$ – передемпфірованні. У випадку, коли буває $\Lambda = 1$, тоді буває критичне депфірування.

Також ми будемо використовувати безрозмірну величину температури:

$$T^* = \frac{Tk}{U_0} = T'/2 \, . \tag{2.12}$$

Де T – це безрозмірна величина температури, яка використовувалась Х. Рискеном.

Для рівнянь (2.1) та (2.3) критичне демпфірування малих коливань частинок біля положення рівноваги буде відбуватися при $\gamma' = 2.$

Для недодемпфірованних систем існує деякий інтервал значень сил (зона ТАД), він залежить від коефіцієнту тертя, в момент коли коефіцієнт дифузії D нескінченно зростає с пониженням температури. Також для періодичного впливу було встановлено, що для періодичного впливу [12, 13], що зріст коефіцієнту дифузії D спостерігається тільки в обмеженому інтервалі температур. Тому в подальших розрахунках областю ТАД будемо називати область параметрів (T, F, γ), в яких частна похідна $\frac{\partial D(T,F,\gamma)}{\partial T}$ менше нуля.

2.3 Чисельні рішення стохастичних рівнянь

Фізичні величини, такі як швидкість і положення змінюються в період кожного наступного тимчасового кроку. Один з способів покращити свої розрахунки – це передбачити, як вони змінюються, а вже потім використовувати отриману інформацію для корекції наївної екстраполяції сучасних умов. Ця основна ідея для прогнозувально-коректорних методів інтеграції.

Є багато способів оцінити зміни протягом наступного тимчасового кроку. Ми розглянемо метод Хойна.

Метод Хойна : Основна ідея цього метода в тому, що, якби ми знали такі умови як:

- швидкість струму перемички (з якої ми можемо обчислити його поточне прискорення);
- швидкість перемички в кінці часового кроку (з якої ми могли обчислити його майбутнє прискорення).

Тоді ми можемо взяти середнє значення поточних та майбутніх прискорень і використовувати це для обчислення його руху за поточним часовим кроком.

Метод Хойна зручний з наступних причин:

- це робить кращу роботу, так як передбачає зміни швидкості та вносить хоч якусь корекцію для них;
- ефективність метода збільшується швидше, ніж метод Ейлера, оскільки часовий крок зменшується. Якщо скоротити часовий крок навпіл, метод Хойна може дати результати більш точними в коефіцієнті два квадрати = чотири. Наприклад, метод Ейлера правильний до першого порядку в часовому кроці, але метод Хойна є правильним до другого порядку.

Використовуючи рівняння (2.1), напишемо наступним чином $\xi(t)$, яке описує термічні флуктуації. Шум є білим гауссовим і відповідно для термічних флуктуацій виконується співвідношення:

$$\langle \xi(t)\xi(t') \rangle = 2\gamma kT\delta(t-t'). \tag{2.13}$$

Положення частинки, що підлягає детермінованому впливу $F(t)$ та випадковий вплив $\xi(t)$. Детермінований вплив пов’язан с потенційним наступним чином:

$$f(x) = -V'(x). \tag{2.14}$$

Амплітуда випадкового впливу, пов'язана з температурою T і демпфуванням, а коефіцієнт η відношенням коливання-дисипації:

$$\epsilon^2 = 2\eta KT. \tag{2.15}$$

Ми можемо записати (2.1) як пару рівнянь першого порядку для X_t та V_t змінних положення та швидкості:

$$dX_t = V_t dt. \tag{2.16}$$

$$dV_t = -\eta V_t dt + f(X_t)dt + \epsilon dW_t. \tag{2.17}$$

Де W_t – це процес Вінера.

По методу Хойна проміжкові значення:

$$\hat{X} = X_n + V_n \Delta t. \tag{2.18}$$

$$\hat{V} = V_n - \eta V_n \Delta t + f(X_n)\Delta t + \epsilon \Delta W\ . \tag{2.19}$$

Приймають вид:

$$X_{n+1} = X_n + \frac{1}{2}(V_n + \hat{V})\Delta t\ . \tag{2.20}$$

$$V_{n+1} = V_n - \frac{1}{2}\eta\left(V_n + \hat{V}\right)\Delta t + \frac{1}{2}\left(f(X_n) + f\left(\hat{X}\right)\right)\Delta t + \epsilon \Delta W\ . \tag{2.21}$$

Враховуючи значення Xза час t_n дискретизації, ми отримуємо наступні значення:

$$\bar{x_i}(t_{n+1}) = x_i(t_n) + f_i(x(t_n), t_n)h + g_{ij}(x(t_n), t_n)\xi(t_n). \qquad (2.22)$$

Де $t_{n+1} = t_n + h.$

Тоді ми отримуємо $X(t_{n+1})$, як:

$$\bar{x_i}(t_{n+1}) = x_i(t_n) + \frac{1}{2}[f_i(x(t_n), t_n) + f_i(\bar{x}(t_{n+1}), t_{n+1})]h + \frac{1}{2}\big[g_{ij}(x(t_n), t_n) + g_{ij}(\bar{x}(t_{n+1}), t_{n+1})\big]\xi_j(t_n). \qquad (2.23)$$

Але будемо мати на увазі, що ми використовуємо тензорну норму Ейнштейна про підсумовування повторних індексів.

2.4 Метод комп'ютерного моделювання

Часом, замість звичайного фізичного методу моделювання, використовують математичне моделювання випадковості та генерації. Дані програми називаються генераторами послідовних чисел, але вони в свою чергу генерують деякі детерміновані послідовності, які тільки здаються нам випадковими за властивостями, тому вони й називаються псевдовипадковими послідовностями.

Генератор випадкових чисел-такий алгоритм, він генерує послідовність даних чисел, елементи послідовності незалежні один від одного, та працюють по заданому розподілу.

Важлива характеристика цього методу полягає в тому, що інформаційна довжина періоду важна, після якого числа повторюються або передбачуються.

Є сенс генерувати тільки випадкові числа з рівномірним законом розподілу, тому що всі інші розподіли можна буде отримати з рівномірного шляхом перетворень, про яку йде у теорії ймовірності.

Ми розглянемо основний метод генератора псевдовипадкових чисел: лінійно-конгруентний метод, який дуже простий у реалізації.

Лінійно-конгруентний метод (ЛКМ) запропонував Лемер (Lemer, 1951). В цьому методі існує певна послідовність випадкових чисел, яка обчислюється після надання початкового значення x_0:

$(x_0, x_l, \dots, x_n, \dots)$ – початкові умови

$$x_{n+1} = (ax_n + c)(mod\ M). \tag{2.24}$$

Де a – множник,

c – приріст,

M – модуль.

Максимально можливий період послідовності не повинен бути більше модулю M.

Число M задовольняють наступні умови:

- число M повинно бути великим, тому що період не може бути більше M елементів;
- значення M повинно бути таким, щоб рівність (2.24) обчислювалося швидко.

Нижче приведемо приклад реалізації лінійно-конгруентного методу на мові програмування Pascal:

```
Const x: LongWord = 10;

Function LCM:LongWord;

Begin

x = (1664525*x+1013904223) mod exp(32*ln(2))

LCM = x

End;

Begin

Writeln (LCM)

End.
```

І приклад у середовищі ANCI-C:

```
#define RAND_MAX 32767

 unsigned long next = l;

 int rand(void)

    { next=next*11035152 45+12345;

return((unsigned int)(next/65536)%32768);

     }

void srand(unsigned int seed)

{ next=seed;
```

Лінійно-конгруентний метод має недолік, який виражається в тому, що є обмеження на максимальному періоду, який в свою чергу не може бути більше за довжину цілого числа.

Генератори, що засновані на зміщеному регістрі

Це такі генератори, які мають вихідну послідовність:

$$u_n = \sum_{i=1}^{L} x_{ns+i-1} 2^{-i}. \quad (2.25)$$

Де розмір кроку s, довжина слова L.

У послідовності:

$$x_n = (a_1 x_{n-1} + \cdots + a_k x_{n-k})(mod\ 2). \quad (2.26)$$

Характеристичним поліномом послідовності є:

$$P(z) = z^k - a_1 z^{k-1} - \cdots - a_k. \quad (2.27)$$

Лінійно-рекурентне співвідношення у полі Z^2 , яке складається з двох елементів, нуля та одиниці. Це рекурентне співвідношення- зсувний регістр, який має період довжини $p = 2^k - 1$, тоді, коли P є примітивним поліномом.

Такі генератори дуже ефективні для додатків, для яких необхідна велика кількість випадкових чисел.

Але в даній роботі ми використовували лінійно-конгруентний метод генерації випадкових чисел.

2.5 Розрахунки залежності коефіцієнта дифузії від величини діючої сили та коефіцієнту тертя

Щоб визначити область ТАД проводилися розрахунки залежностей коефіцієнта дифузії от діючої силу, но с урахуванням різноманітних коефіцієнтів тертя та температур. На рис. 2.1 ми бачимо приклад реалізації таких розрахунків.

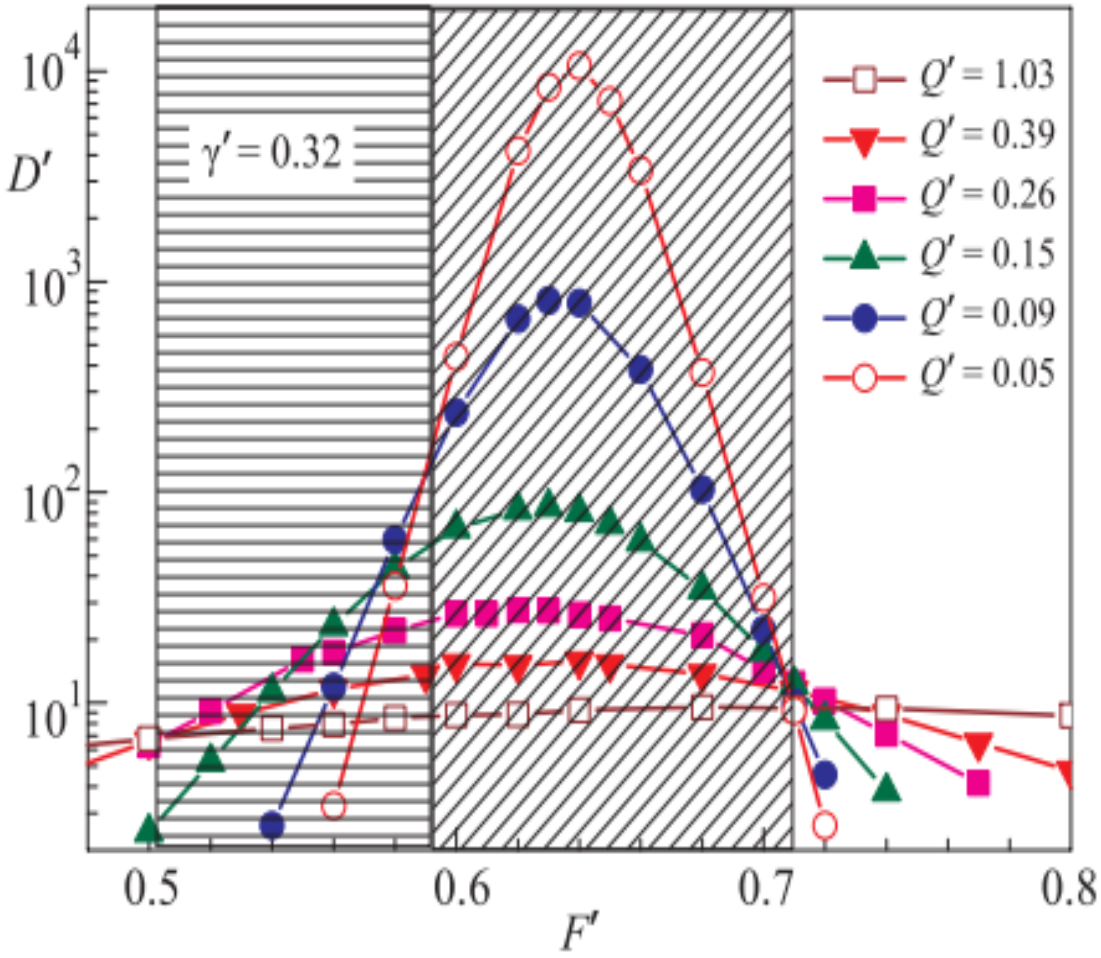


Рис. 2.1 Графік залежностей D' від сили для значень температури при значенні коефіцієнта тертя $\gamma' = 0.32$

На графіку ми можемо побачити наступне: косим штрихуванням відмітили область, де коефіцієнт дифузії зростає зі зменшенням температури, тоді як у випадку де зображена горизонтальна штриховка, коефіцієнт дифузії спочатку зростав, коли температура зменшувалася, а потім вже починав падати.

На наступному графіку ми можемо спостерігати температурну залежність коефіцієнта дифузії для різних діючих сил F'.

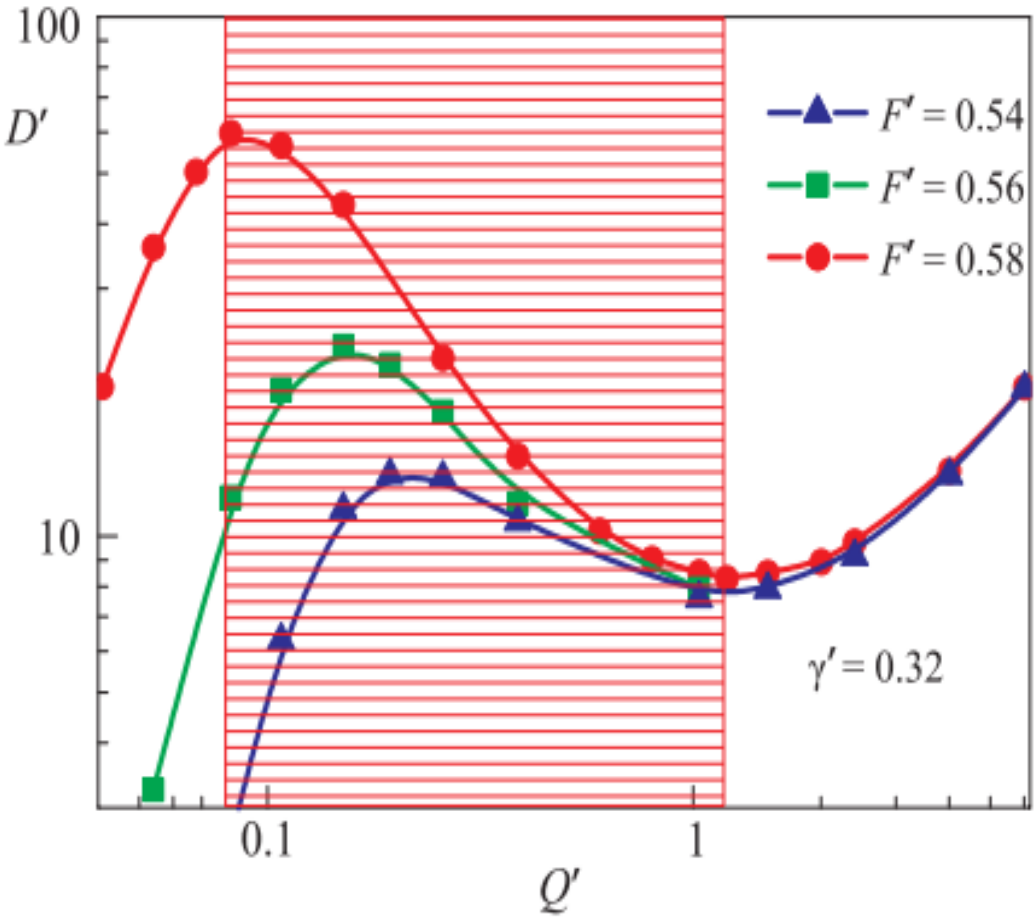


Рис. 2.2 Температурна залежність коефіцієнта дифузії для різних діючих сил F' при коефіцієнті тертя $\gamma' = 0.32$.

Горизонтальною штриховкою позначено температурне «вікно» для

$$F'_1 = 0.54,\ F'_2 = 0.56, F'_3 = 0.58.$$

Відомо, що для недодемпфірованих системах в межах ТАД коефіцієнт дифузії буде досягати максимального значення D_{max} при F_{mx} діючої сили. А у низькотемпературної межі діюча сила постійна та не залежить від температури. Тепер ми можемо розглянути як же змінюється температурна залежність коефіцієнту дифузії від коефіцієнту тертя.

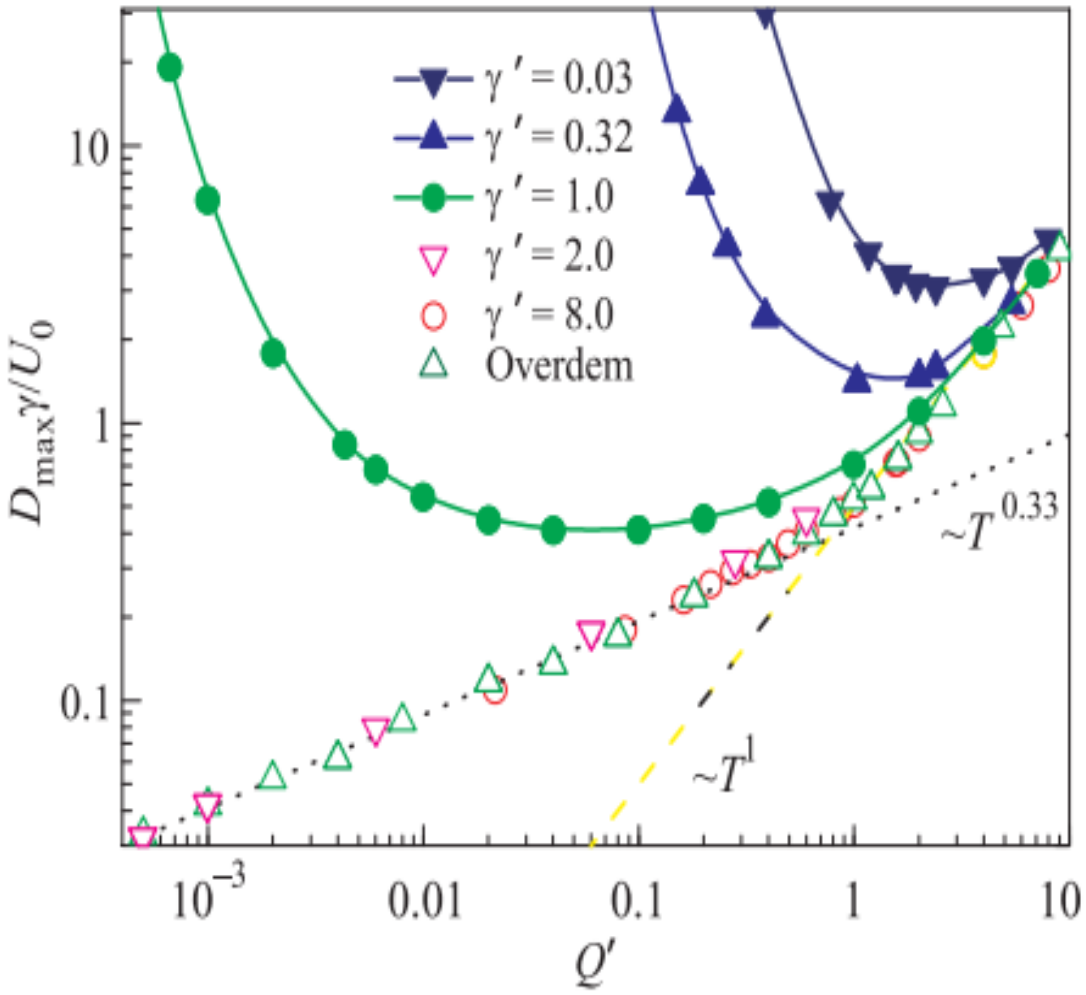


Рис. 2.3 Графік температурних залежностей $D\gamma/U_0$ від температури для різноманітних коефіцієнтів тертя γ' .

T' – штрихова лінія

$T^{0.33}$ – пунктирна лінія залежності температури

На цьому графіку ми бачимо Δ – це передемфіровані системи.

$\nabla - \gamma' = 2.0$ – це рішення рівняння Ланжевена (2.1).

При $\gamma' \geq 2$ коефіцієнт дифузії завжди буде зростати з температурою. При низьких температурах значення $D_{max} \propto T^{1/3}$, що сходиться з аналітичним результатом Реймана [14], який був для косинусоїдального потенціалу. В місці високих температур $D_{max} \propto T$, структура не оказує вплив на броунівські частинки.

Коли ми зменшуємо значення коефіцієнту тертя γ' нижче ніж 1.1 коефіцієнт дифузії поводиться аномальним чином, він починає зростати зі зменшенням температури.

На наступному графіку ми бачимо залежність $D\gamma/U_0$ від зворотної температури для коефіцієнту тертя

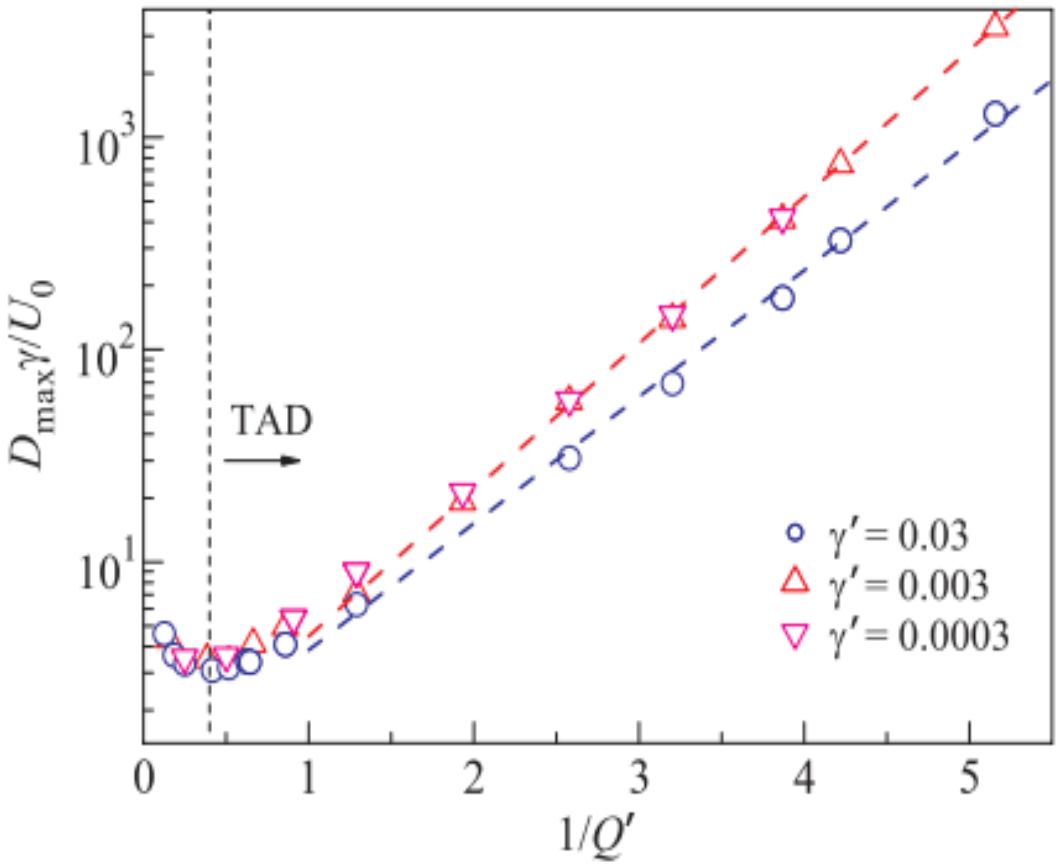


Рис. 2.4 Залежність $D\gamma/U_0$ від зворотної температури для коефіцієнту тертя

$$\gamma' = 0.03,\ \ \gamma' = 0.003,\ \ \gamma' = 0.0003$$

Активаційний бар’єр у X-просторі зі зростанням сили зменшується.

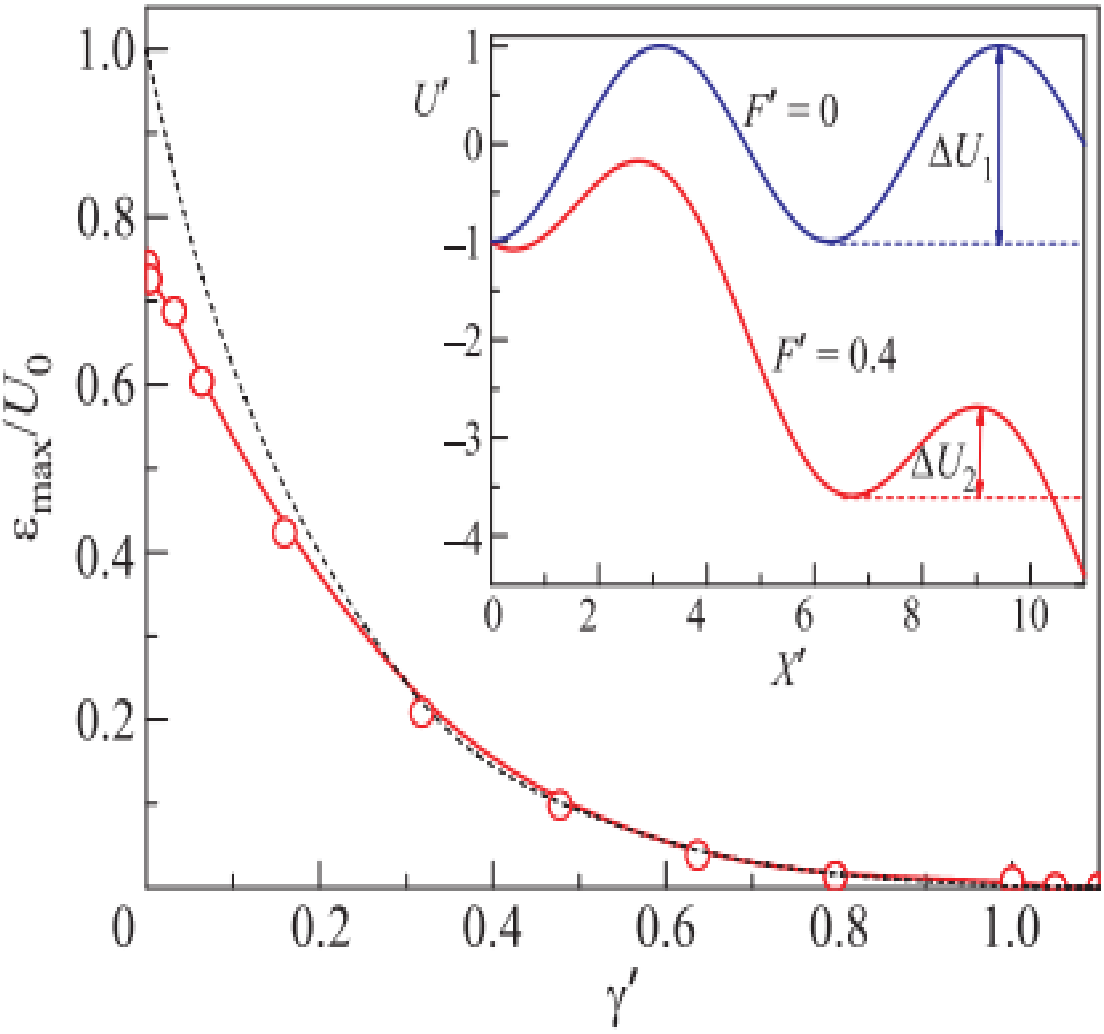


Рис. 2.5 Залежність величини бар'єра ε_{mx} от коефіцієнта тертя γ'.

$$F'_1 = 0,\ F'_2 = 0.4$$

Зменшення бар'єру у X- просторі доводить до зменшення величину бар'єру в просторі швидкостей та к зменшенню $\varepsilon_{mx}(\gamma')$. Пунктирна лінія показує зміну потенційного бар'єру ΔU. Величина бар'єра прагне до нулю при $\gamma' > 1$.

Зі збільшенням коефіцієнту тертя ТАД зникає, так як зникає так як зникає експоненціальна залежність ТАД від зворотної температури.

3. Отриманий результат

Зі збільшенням коефіцієнту тертя γ' змінюється інтервал сил, в якому здійснюється ТАД.

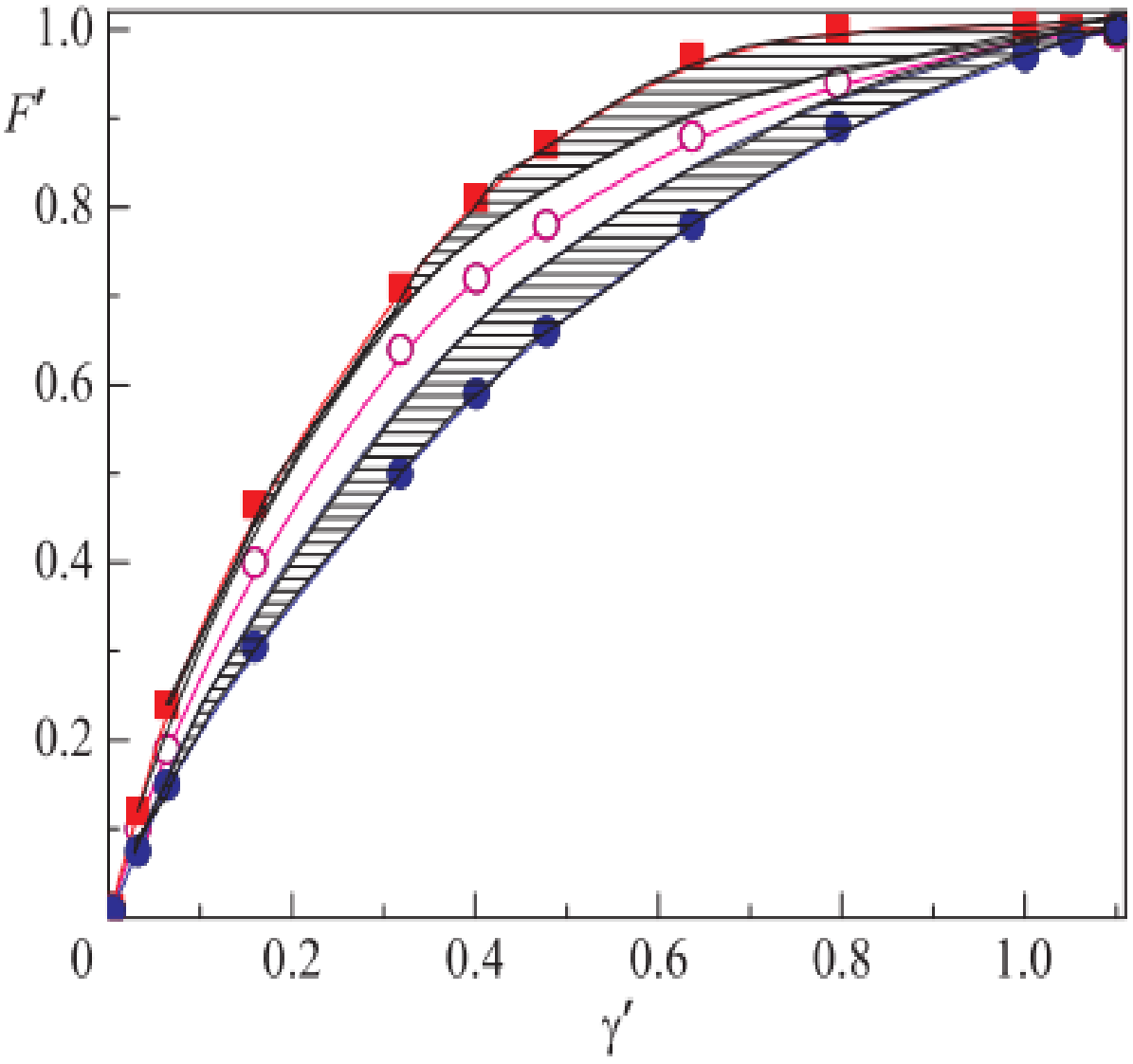


Рис. 3.1 Діаграма існування ТАД.

Де кружечки – це нижнє значення виникнення області ТАД;

Квадрати – значення, при яких ТАД зникає;

Пусті кружечки – значення з максимальною дифузією.

Заштрихована область на діаграмі – це «вікна» ТАД, в яких заповнені маркери мінімальні та максимальні значення сил, де спостерігалося ТАД.

Де область незаштрихована у центрі, то там ТАД, де дифузія зростала зі зменшенням температури. Пусті маркери в області, де показані значення сили, де коефіцієнт дифузії D максимальний для коефіцієнта тертя γ.

При $\gamma > 1.1$ енергетичний бар'єр ε прагне к нулю. А при $0.1 < \gamma' < 1.1$ з'являється температурне «вікно» ТАД.

Висновки

В даній роботі ми розглянули науково – технічну літературу з теми дифузії дефектів у кристалах. Провели дослідження процесів дифузії, і це дало нам важливе розуміння значення формування мікроструктури матеріалів. Основним параметром керування процесами дифузії служить температура, але ми опрацювали випадки, як можна керувати дифузією без підвищення температури.

Мета роботи була в тому, щоб мати можливість контролювати властивості полікристалів шляхом зміни дифузійної рухливості точкових, лінійних або планарних дефектів без підвищення температури матеріалу. Для цього ми побудували комп'ютерну модель дифузного руху частинок в кристалах. Провели розрахунки залежності коефіцієнта дифузії від величини діючої сили і коефіцієнта тертя, та побудували графіки.

У результаті виконаної роботи встановлено, яким чином буває перехід от експоненціальної залежності ТАД, от зворотної температури к звичайної статечної температурної залежності з ростом коефіцієнту тертя γ'. Зі збільшенням коефіцієнту тертя енергетичний бар’єр зменшується.

В деяких інтервалах сил коефіцієнт дифузії зростає зі зменшенням температури, а потім знову падає. Були побудовані діаграми існування температурно-аномальної дифузії.

Результати, які ми получили можуть відкрити перспективи створення нових технологій, за допомогою керування процесами дифузії. Це в свою чергу має дуже велике значення для області фізики, хімії та біології.

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1. В.А. Гуртов, Р.Н. Осауленко. Физика твердого тела для инженеров. 2-е изд., доп. - М.: Техносфера, 2012. -125-128 с.
2. Я.Е. Гегузин. Очерки диффузии в кристалах.- Издательство «Наука», 1974.- 9-33 с., 77-87 с.
3. П. В. Попов. Диффузия: учебно-методическое пособие по курсу «Общая физика» -М.: МФТИ, 2016. -20-58 с.
4. Ландсберг Г.С. Элементарный учебник физики. Т.1. Механика. Теплота. Молекулярная физика. - М.: Наука, 1985. - 417-418 с.
5. Р. М. Кроновер. Фракталы и хаос в динамических системах. Основы теории. М., 2000. – 256-259 с.
6. Ландсберг Г.С. Элементарный учебник физики. Т.1. Механика. Теплота. Молекулярная физика. - М.: Наука, 1985. – 417-418 с.
7. Кирсанов В.В. Атомные механизмы диффузии и дефекты кристаллов. Образовательный журнал, том 7, №9, 2001.
8. По редакцией проф. Верещагина И.К.. Точечные дефекты в кристаллах и их диффузия. Методические указания по дисциплине «Физика», 1987, 3-18 с.
9. K. Lindenberg, J. M. Sancho, A. M. Lacasta, and I. M. Sokolov, Phys. Rev. Lett. 98, 020602 (2007).
10. H. Risken, The Fokker-Planck Equation and Methods of Solution and Applications, Springer (1989), 485 p.
11. D. G. Alciatore and M. B. Histand, Introduction to Mechatronics and Measurement Systems, McGraw Hill, N.Y. (2007), 553 p.
12. I. G. Marchenko, I. I. Marchenko, and A. V. Zhiglo, Phys. Rev. E 97, 012121 (2018).
13. I. G. Marchenko and I. I. Marchenko, JETP Lett. 95(3), 137 (2012).
14. P. Reimann, C. Van den Broeck, H. Linke, P. Hanggi,J. M. Rubi, and A. P´erez-Madrid, Phys. Rev. E 65,031104 (2002)