

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ  
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение  
высшего образования «Национальный исследовательский Нижегородский  
государственный университет им. Н.И. Лобачевского»

Физический факультет

Кафедра информационных технологий  
в физических исследованиях

Исследование двумерного распределения частиц при  
диффузии с поверхности. Метод случайных блужданий  
Отчет по вычислительной лабораторной работе

Выполнили студенты 05192м гр.  
Андреев А. Н.  
Евсиков М. С.

Проверил доц. каф. ИТФИ  
к.ф.-м.н. Васин А. С.

Нижний Новгород

2019

## Содержание

Постановка задачи.....	3
Цель работы .....	3
Физическая модель.....	3
Математическая модель .....	3
Алгоритм работы программы .....	4
Практическая часть .....	5
Выводы .....	11
Список литературы .....	12

## Постановка задачи

Применить метод Монте-Карло (ММК) для исследования блуждания частиц на двумерной решетке.

## Цель работы

1. Смоделировать процесс диффузии атомов при разных начальных случаях: из неограниченного источника, из ограниченного, через «окно».
2. Построить профили распределения концентрации примеси при нескольких временах диффузии  $C = C(x, t_i)$ .

## Физическая модель

Рассматривается диффузия атомов примеси в кристалл по междоузельному механизму. Междоузельные положения образуют квадратную решетку. Первоначально все они не заняты, а атомы примеси находятся в начальном положении. В процессе диффузии атомы проникают вглубь кристалла.

## Математическая модель

Метод Монте-Карло является недетерминистическим методом: последующее состояние системы не связано с предыдущим состоянием. ММК позволяет случайным образом перебрать множество состояний системы и сделать оценку средних значений её параметров.

Задается расчетная ячейка размером 100x200 узлов и атомы примеси в определенном для каждого случая начальном положении. При каждом Монте-Карло испытании для отдельного атома разыгрывается равномерно распределенное случайное число  $R \in [1,4]$ . В дальнейшем каждый атом может перепрыгнуть с вероятностью  $\frac{1}{4}$  в соседнее междоузельное положение (если оно не занято). Граничные атомы могут прыгать только вправо, причем их место сразу после прыжка занимают новые примесные атомы (модель неограниченного источника примеси на поверхности). За один Монте-Карло шаг принимается время, за которое будут перебраны все атомы, находящиеся в расчетной области. На верхней и нижней сторонах расчетной ячейки используются периодические граничные условия.

## Алгоритм работы программы

1. Задается желаемое число Монте-Карло шагов (время диффузии).
2. Выбирается начальное условие.
3. Запускается процесс диффузии.
4. На каждом Монте-Карло шаге для каждой частицы разыгрывается ситуация с «перескоком» в соседнее междоузельное положение
5. По завершению каждого шага рассчитывается профиль распределения концентрации примеси.

На рис. 1. представлен интерфейс программы.

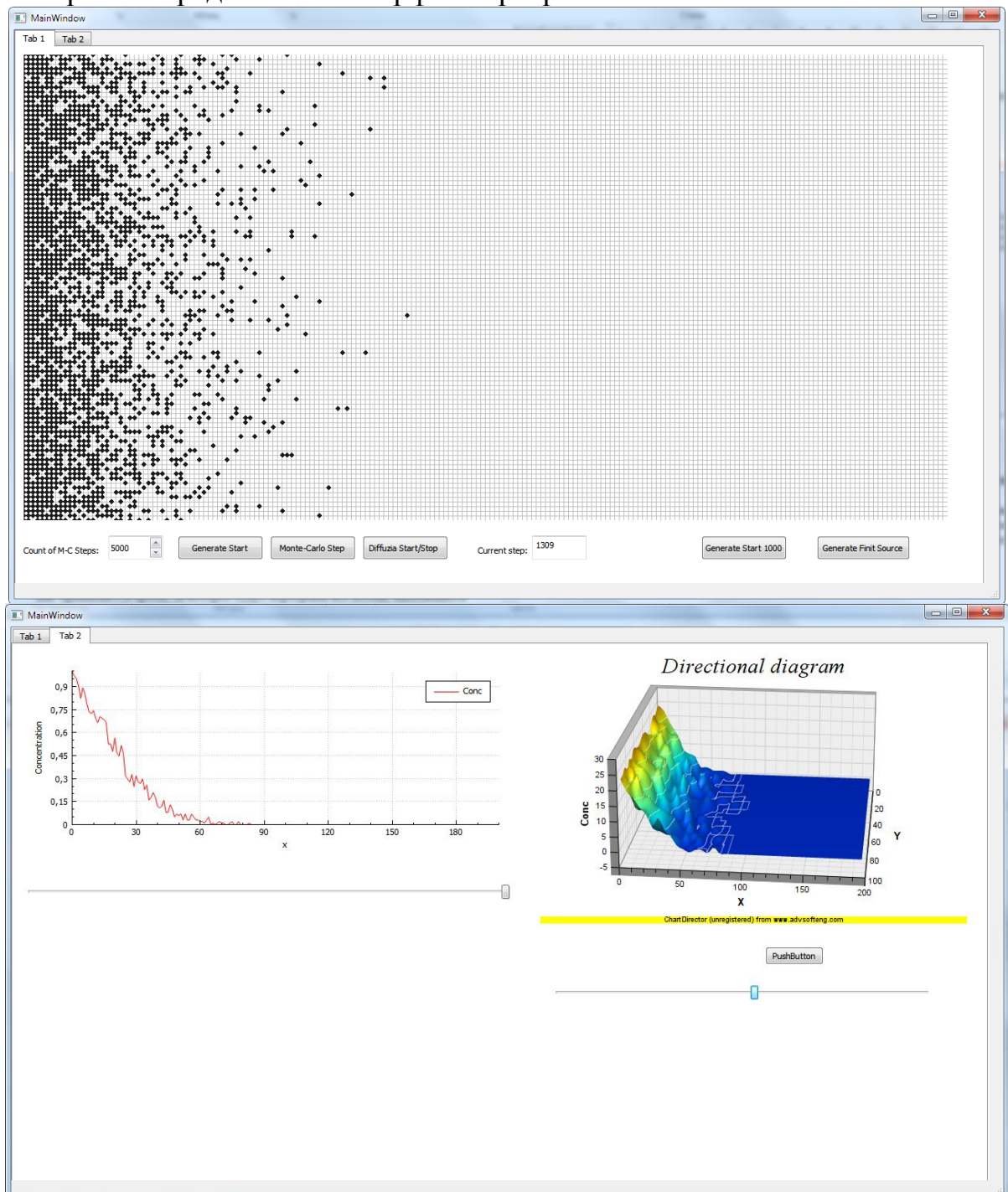


Рис.1. Интерфейс программы

## Практическая часть

Рассмотрим первый случай.

Диффузия из неограниченного источника. Атомы примеси находятся на границе. Данная конфигурация системы представлена на рис. 2.

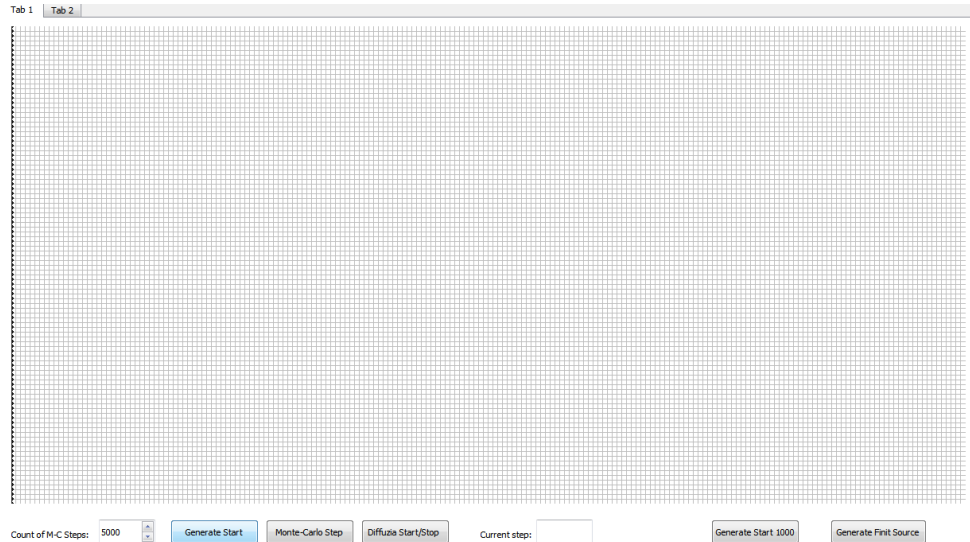


Рис. 2. Атомы примеси на границе.

В процессе диффузии атомы распространяются вглубь кристалла. На рис.3 приведен «снимок» системы на 500 Монте-Карло шаге.

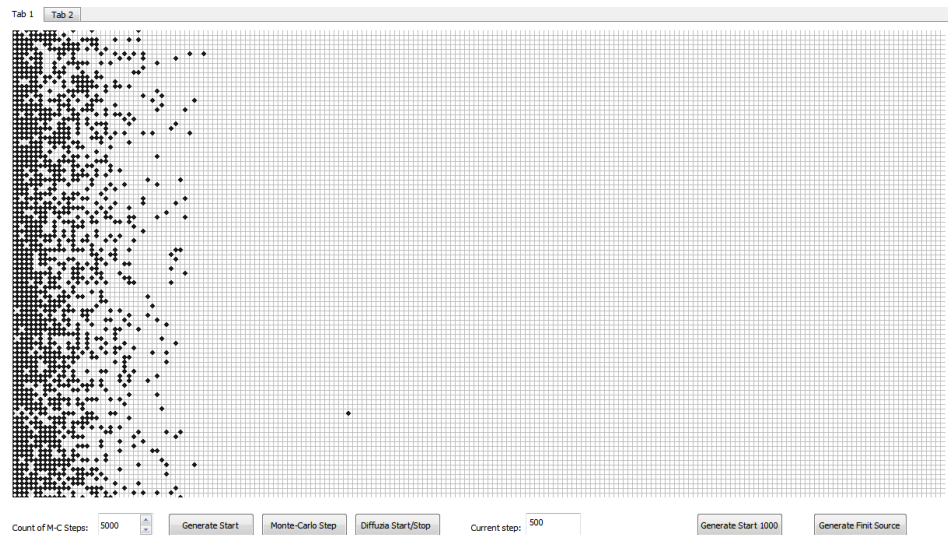


Рис 3.Снимок системы на 500 МКШ.

На рис. 4 приведен «снимок» системы на 1000 Монте-Карло шаге.

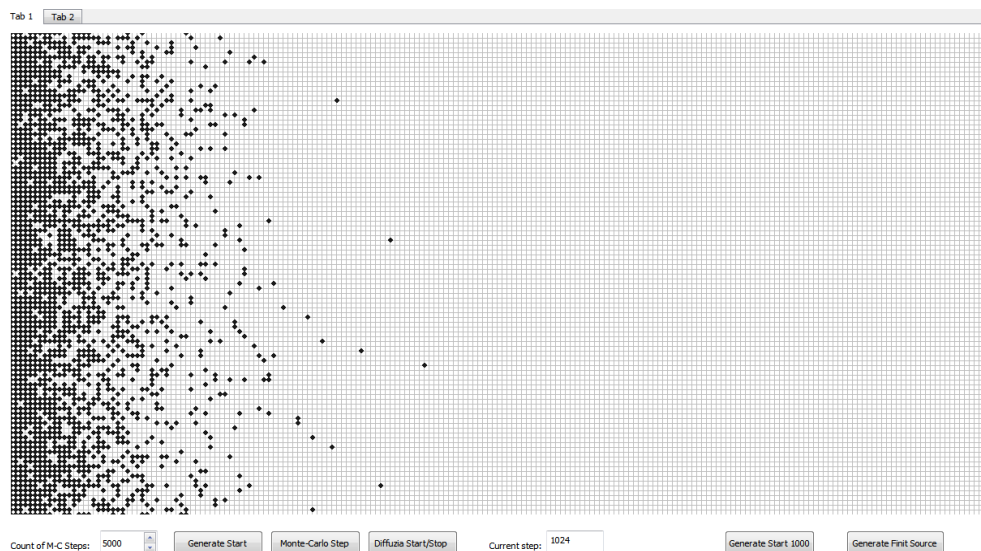


Рис. 4. Снимок системы на 1000 МКШ.

Далее на рис.5 приводятся полученные профили концентрации и их теоретические значения.

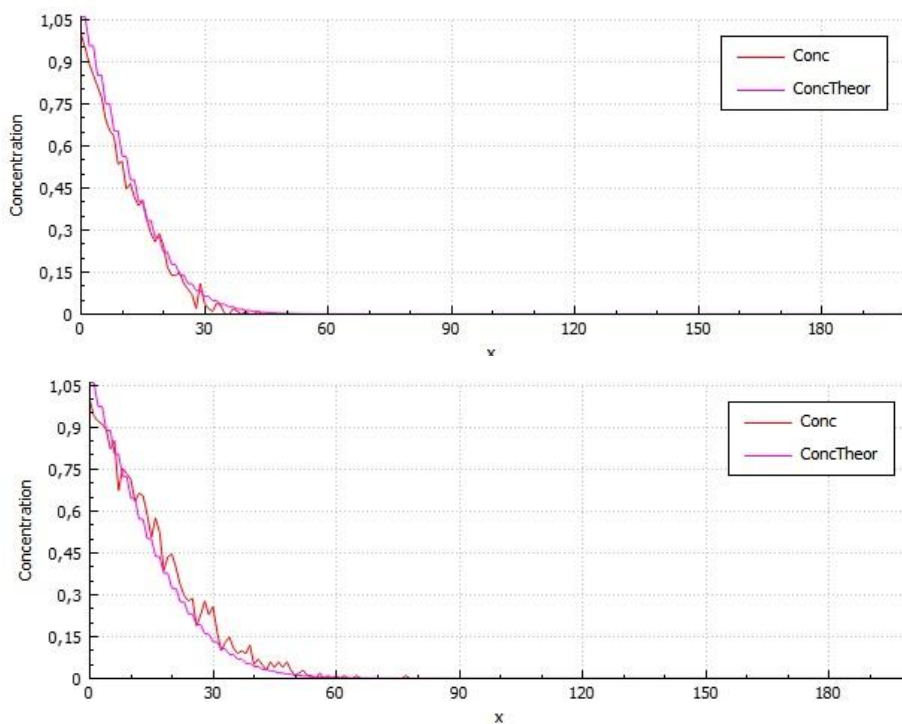


Рис. 5. Профили распределения концентрации на 500 и 1000МКШ.

Также в программа позволяет строить поверхность распределения концентрации. На рис. 5 приведены поверхности на 500 и на 1000 Монте-Карло шагах.

### Concentration distribution

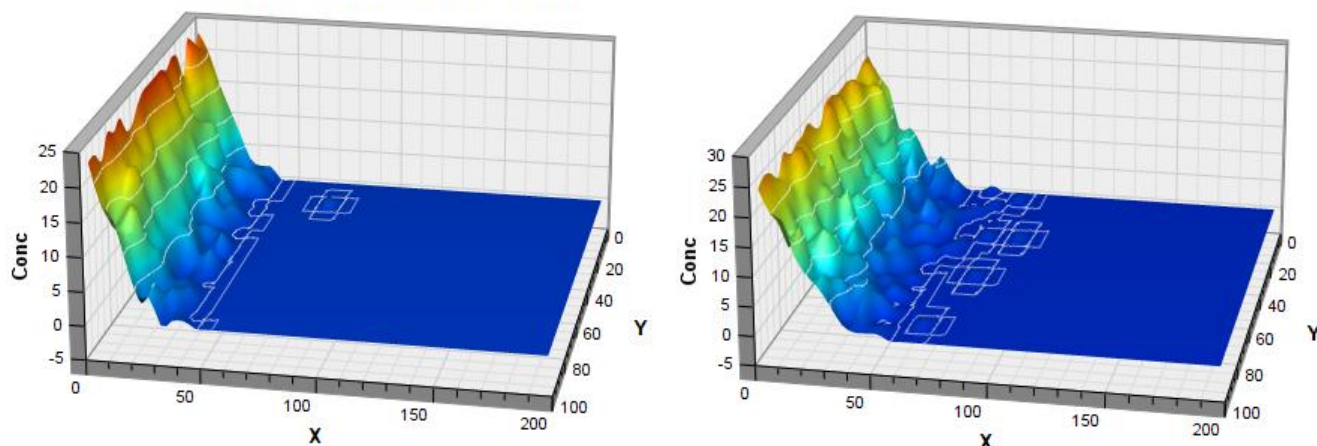


Рис. 5. Поверхности распределения концентрации на 500 и 1000 МКШ.

На приведённых изображениях наглядно прослеживается эволюция системы.

Рассмотрим второй случай.

Программа позволит вести расчеты и для большего числа примесных атомов, чем вертикальная граница расчетной ячейки. На рис. 6, 7 приведены полученные профили концентрации и их теоретические значения, поверхности распределения концентрации при высоте граничного слоя в 5000 узлов.

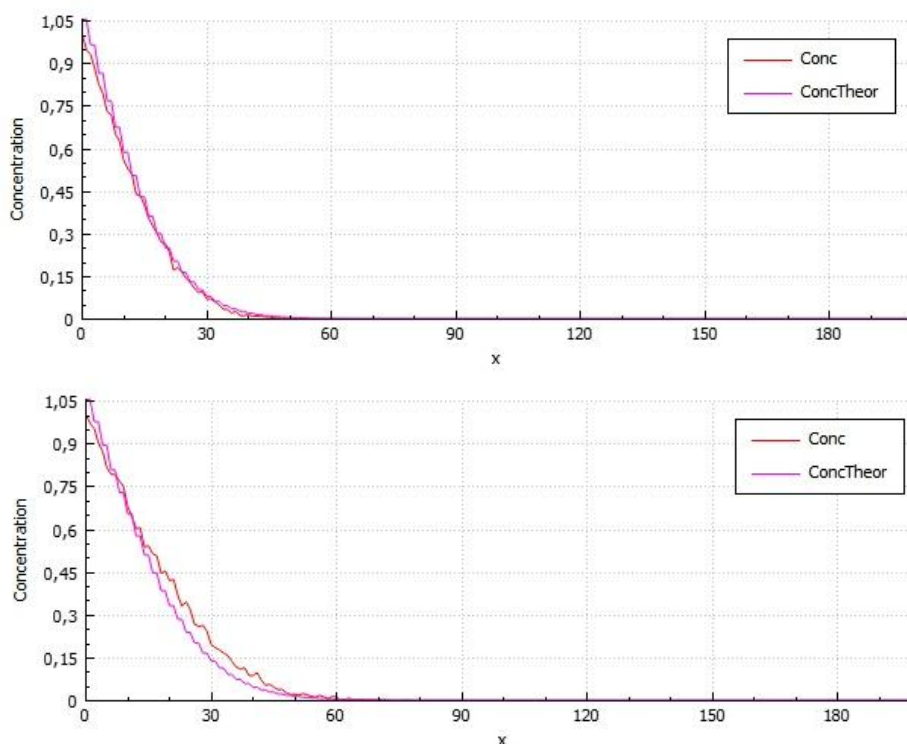


Рис. 6. Профили распределения концентрации на 500 и на 1000 МКШ.

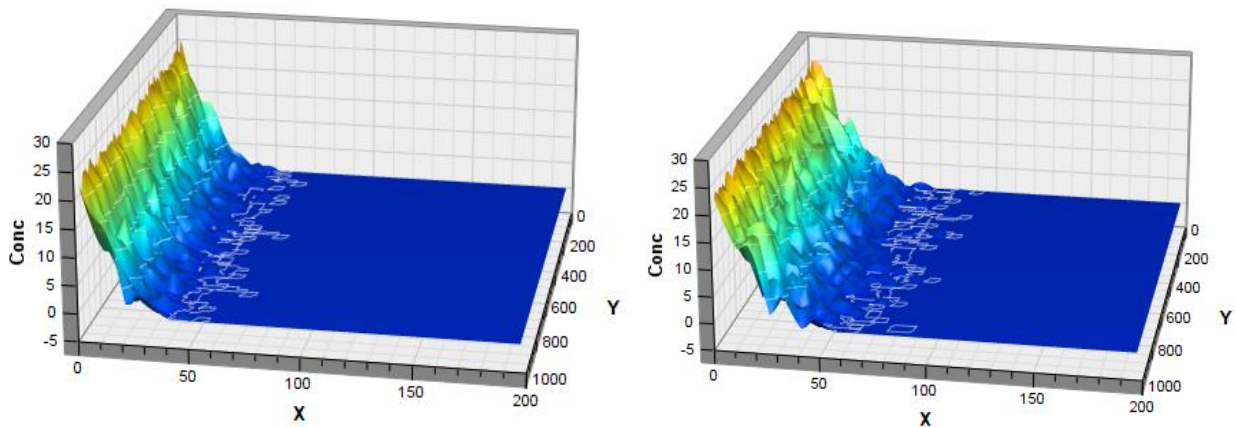


Рис. 7. Поверхности распределения концентрации на 500 и 1000 МКШ.

С увеличением высоты граничного слоя увеличивается общее число примесных атомов. Графики и поверхности распределения концентрации меняют свой вид на более плавный.

Рассмотрим третий случай.

Диффузия примесных атомов через «окно» на поверхности, занимающее её среднюю 1/3 часть. Данная ситуация представлена на рис. 8 для 15, 100, 200 и 500 Монте-Карло шагов.



Рис. 8. Снимки системы на 15, 100, 200, 500 МКШ

Далее на рис. 9 приводятся поверхности распределения концентрации при этой начальной конфигурации системы, на этих же Монте-Карло шагах.



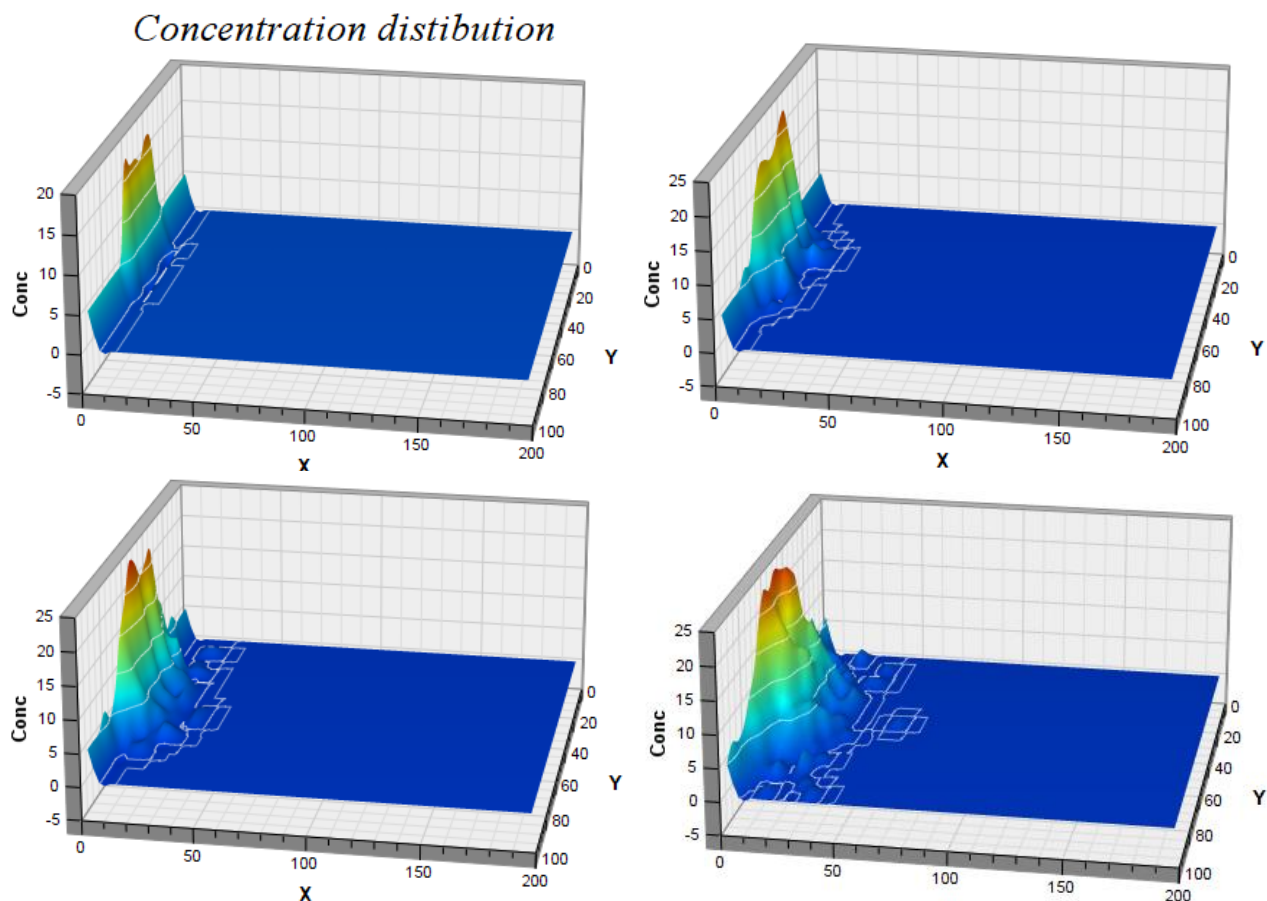


Рис. 9. Поверхности распределения концентрации на 15, 100, 200, 500 МКШ

На приведённых изображениях наглядно прослеживается эволюция системы при диффузии атомов через «окно»

Рассмотрим четвертый случай.

Диффузия из ограниченного источника: 5 слоёв атомов примеси находятся в середине расчётной ячейки. Данная ситуация представлена на рис. 10.

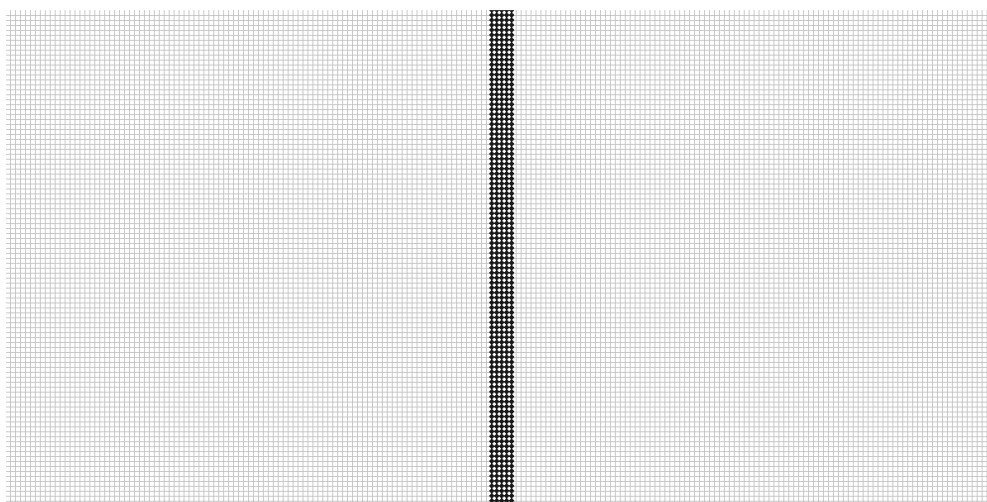


Рис. 10. Атомы примеси в середине расчетной ячейки.

Далее на рис. 11 приводятся «снимки» системы, а на рис. 12, рис. 13, рис. 14 – полученные профили и поверхности распределения концентрации при этой начальной конфигурации системы на 15, 50, 150, 500 Монте-Карло шагах.

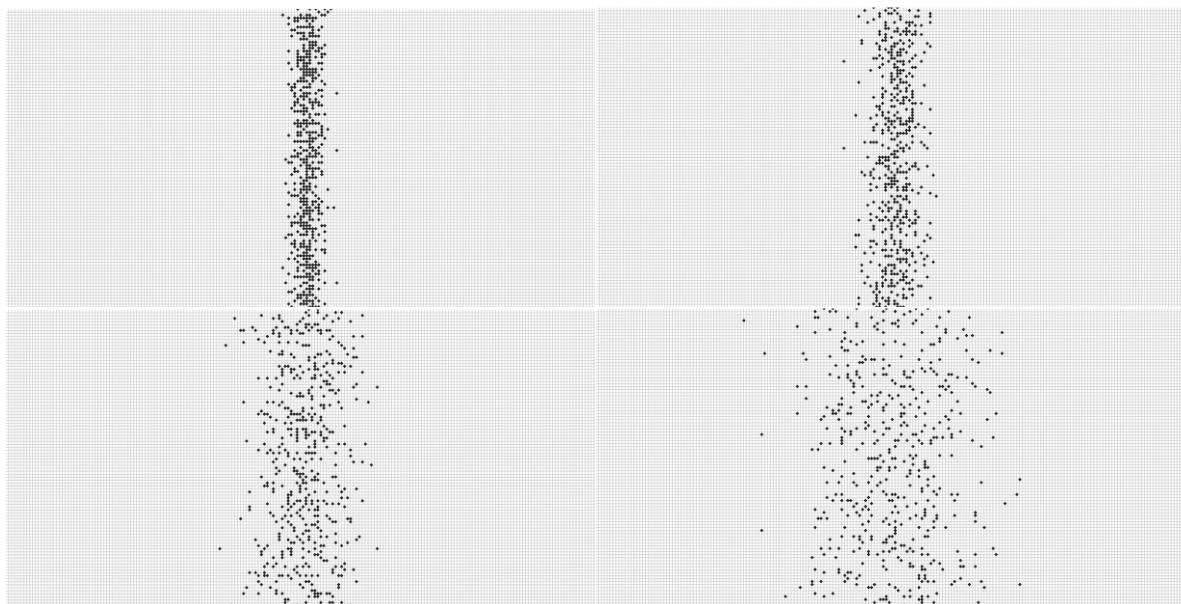


Рис. 11. Снимки системы на 15, 50, 150, 500 МКШ

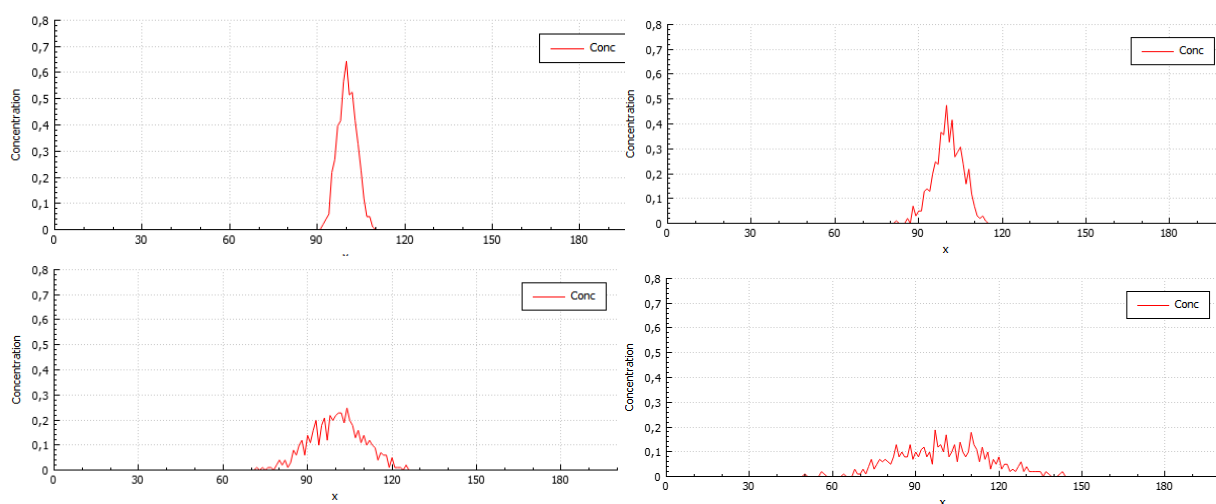


Рис. 12. Профили распределения концентрации на 15, 50, 150, 500 МКШ

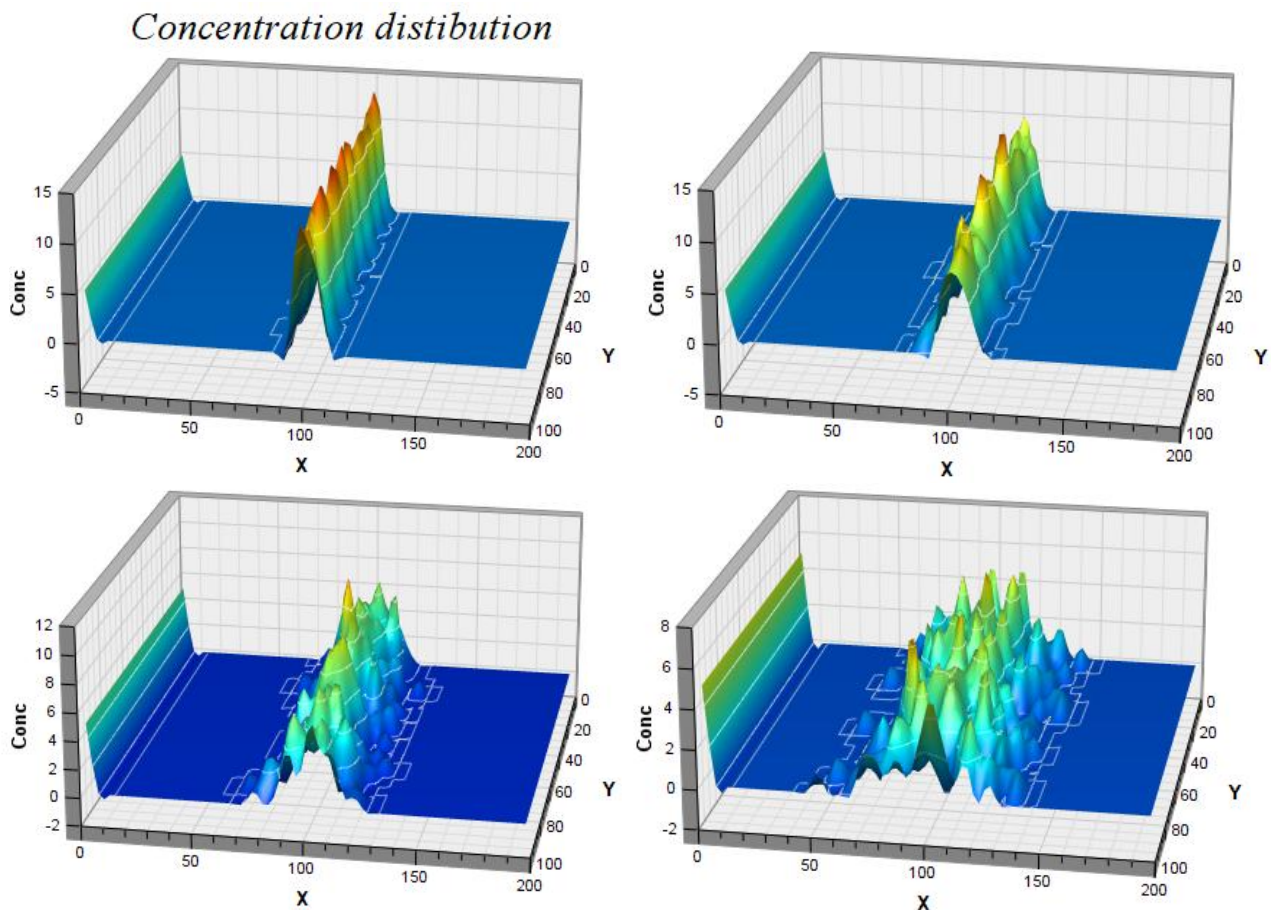


Рис. 13. Поверхности распределения концентрации на 15, 50, 150, 500 МКШ

На приведённых изображениях наглядно демонстрируется эволюция системы при диффузии с ограниченного источника, расположенного в середине расчетной ячейки.

## Выводы

1. Разработана программа, моделирующая процесс диффузии атомов примеси в кристалл методом Монте-Карло при разных начальных случаях: из неограниченного источника, из ограниченного, через «окно».
2. Получены профили и поверхности распределения концентрации примеси при разных начальных условиях на разных Монте-Карло шагах.
3. Реализованная модель сходится с теоретической как при увеличении числа частиц примеси, так и при увеличении числа Монте-Карло шагов.

## **Список литературы**

1. Х.Гулд, Я. Тобочник. Компьютерное моделирование в физике. Т.1. М.: Мир, 1990.
2. А. С. Васин. Компьютерный эксперимент в физике. Нижний Новгород, ННГУ, 2006.