

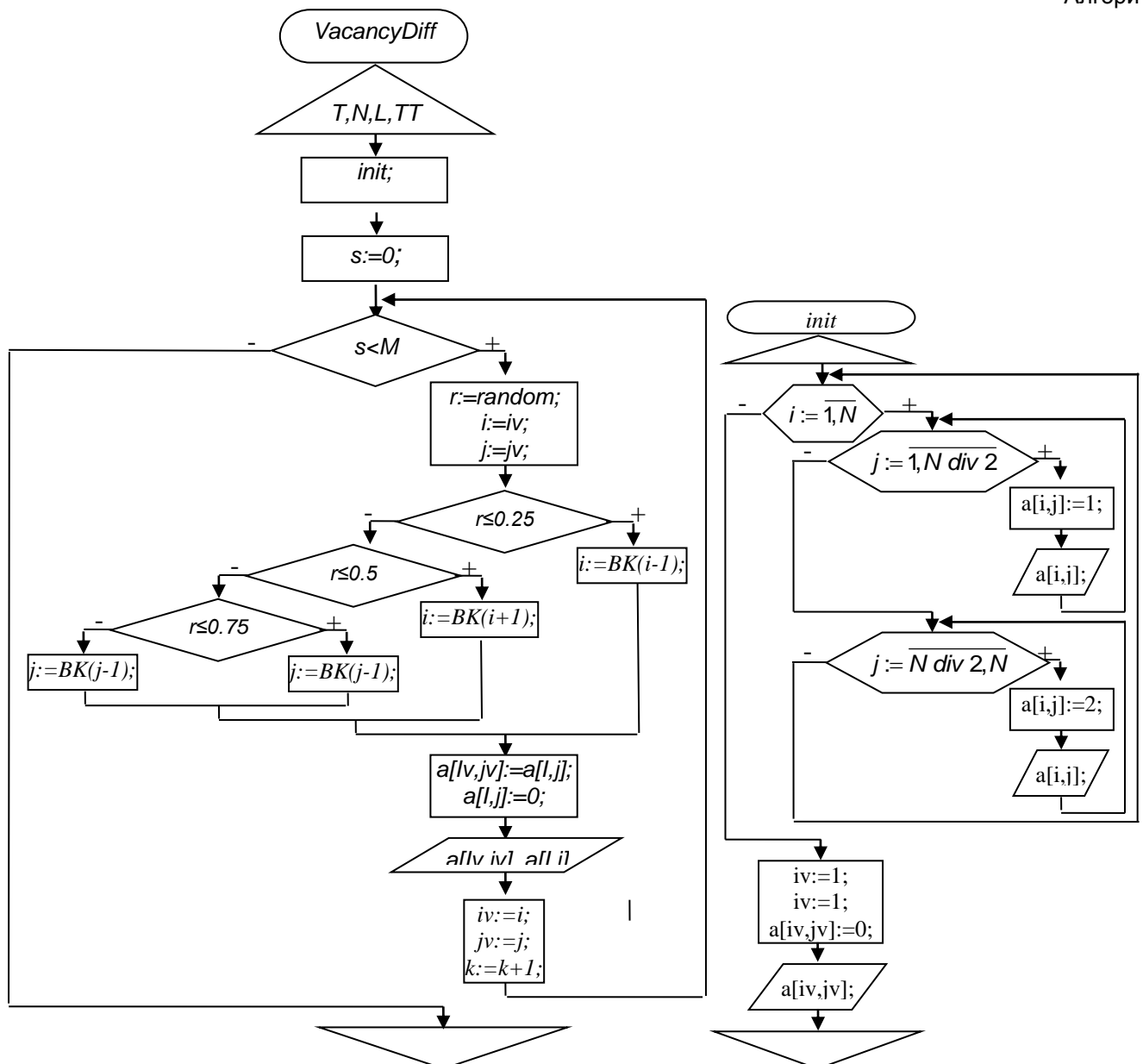
## Вакансійний механізм дифузії (через модель випадкових блукань)

Використовується модель квадратної плоскої решітки, кожному вузлу якої відповідає елемент двовимірного масиву  $a$ . Комірки масиву (вузли) містять ознаки, за якими розрізняють атоми різного сорту та вакансії (наприклад, цілі числа, які можна використати як колір для виведення комірок на екран: атоми сорту А – 1, атоми сорту В – 2, вакансія – 0). Нескінченність решітки  $n \times n$  забезпечується граничними умовами Борна-Кармана.

На кожному кроці методу МК випадковим чином вибирається напрямок стрибка вакансії довжиною  $h$  у чотирьох можливих напрямках (перша координаційна сфера) і здійснюється обмін вакансії та вибраного атома.

Нехай для означеності вакансія робить  $M$  стрибків. Початкове розміщення атомів задамо наступним чином: права половина зразка зайнята атомами сорту А, ліва – атомами сорту В, вакансія – верхній лівий елемент зразка.

Алгоритм



**Тестовий приклад.**  $n = 30$ ,  $M = 10^4$ .

**Завдання.** Визначити кореляційний множник як відношення квадрату зміщення, усередненого по ансамблю атомів, за час, рівний  $M$  кроків методу Монте-Карло (стрибків вакансії), до середнього квадрату зміщення, визначеного з параболічного закону дифузії  $\frac{M}{n^2} h^2$ ,  $\frac{M}{(n^2 - 1)}$  – кількість стрибків атомів за  $M$  кроків методу МК.

Для цього

1) на початку алгоритму кожному атому присвоїти унікальний номер – описати додатковий масив  $a_0$ , в якому перенумерувати всі вузли цілими числами, починаючи з нуля (наприклад по рядках: перший рядок міститиме числа від 0 до  $n-1$ , другий - від  $n$  до  $2n-1$  і т.д.);

2) на початку алгоритму описати допоміжні лінійні масиви  $ver$  (вертикаль) та  $hor$  (горизонталь) з індексами від 0 до  $n^2-1$  для фіксування істинної траєкторії руху частинки при використанні граничних умов Борна-Кармана;

3) модифікувати стандартну процедуру ВК

$$i < 1 \Rightarrow i = i + n; \text{ver}[a_0[i, j]] = \text{ver}[a_0[i, j]] - 1$$

$$i > n \Rightarrow i = i - n; \text{ver}[a_0[i, j]] = \text{ver}[a_0[i, j]] + 1$$

$$j < 1 \Rightarrow j = j + n; \text{hor}[a_0[i, j]] = \text{hor}[a_0[i, j]] - 1$$

$$j > n \Rightarrow j = j - n; \text{hor}[a_0[i, j]] = \text{hor}[a_0[i, j]] + 1$$

4) у процесі виконання алгоритму *VacancyDiff* міняти місцями не лише елементи масиву  $a$ , а й елементи масиву  $a_0$ ;

5) визначити результуюче зміщення кожного атома відносно початкової нумерації (початкові індекси  $i0, j0$  атома з індексами  $i, j$  визначаються через унікальний номер

$$a_0[i, j] \text{ як } \begin{cases} i0 = a_0[i, j] \text{div } n + 1 \\ j0 = a_0[i, j] \text{mod } n + 1 \end{cases}$$

зміщення за теоремою Піфагора з урахуванням повної кількості періодів, що пройшов кожен з атомів (масиви  $ver$  та  $hor$ )

$$(\Delta r_{i,j})^2 = h^2(i0 - |i - n\text{ver}[a_0[i, j]]|)^2 + h^2(j0 - |j - n\text{hor}[a_0[i, j]]|)^2;$$

6) визначити усереднений квадрат зміщення атомів

$$\overline{(\Delta r)^2} = \frac{1}{(n^2-1)} \sum_{a[i,j] \neq 8} (\Delta r_{i,j})^2;$$

7) визначити кореляційний множник

$$f = \frac{\overline{(\Delta r)^2}}{Mh^2} (n^2 - 1).$$

**Пояснення.** При використанні граничних умов положення атома визначається з точністю до періоду. Для фіксації кількості повних періодів, що пройшов атом по горизонталі (граничні умови по  $j$ ) вводиться масив  $ver$ , по вертикалі (граничні умови по  $i$ ) -  $hor$ .

