№ 1894

Ю.В. Осипов
М.Б. Славин

Компьютерное моделирование нанотехнологий, наноматериалов и наноструктур

Диффузия

Учебное пособие

№ 1894

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РФ

**ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
ВЫСШЕГО ПРОФЕССИОНАЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ
«НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ «МИСиС»**

Кафедра полупроводниковой электроники и физики полупроводников

Ю.В. Осипов
М.Б. Славин

Компьютерное моделирование нанотехнологий, наноматериалов и наноструктур

Диффузия

Учебное пособие

Рекомендовано редакционно-издательским советом университета

МИСиС
ИЗДАТЕЛЬСКИЙ ДОМ

Москва 2011

УДК 621.315.592
О-74

Рецензент
д-р техн. наук, проф. *Г.Д. Кузнецов*

Осипов, Ю.В.
О-74 Компьютерное моделирование нанотехнологий, наноматериалов и наноструктур : диффузия : учеб. пособие / Ю.В. Осипов, М.Б. Славин. – М. : Изд. Дом МИСиС, 2011. – 73 с.
ISBN 978-5-87623-420-9

В учебном пособии представлены выводы уравнения диффузии и уравнения Пуассона. Получено уравнение диффузии, учитывающее наличие электрического поля в области контакта двух различных материалов. Рассмотрено влияние химических реакций на процессы диффузии. Приведены решения диффузионных задач, в которых учтено: отличие коэффициентов диффузии на различных границах раздела фаз, присутствие внутреннего электрического поля, наличие химических реакций в области контакта материалов. Представлены программы на языке С++, дающие возможность читателю самостоятельно решать задачи, указанные выше, и их комбинации.

Соответствует государственному образовательному стандарту дисциплины «Компьютерное моделирование нанотехнологий, наноматериалов и наноструктур».

Предназначено для магистров, обучающихся по направлениям 210100 «Электроника и наноэлектроника» и 150100 «Материаловедение и технологии материалов».

УДК 621.315.592

ISBN 978-5-87623-420-9

ОГЛАВЛЕНИЕ

Введение 4
1. Уравнение диффузии 5
2. Решение уравнения диффузии 11
3. Уравнение Пуассона 31
4. Уравнения диффузии при наличии электрического поля 41
5. Решение уравнения диффузии при наличии электрического поля 45
6. Влияние химических реакций на процессы диффузии 61
Библиографический список 72

Статистическая механика и термодинамика пригодны, когда имеется равновесие, а чтобы проанализировать то, что происходит при отклонении от равновесия, приходится ... перебирать атом за атомом.

Фейнман Р., Лейтон Р., Сэндс М.
Фейнмановские лекции по физике

Введение

В термодинамически равновесных системах, как известно, интенсивные параметры не зависят от пространственных координат, например

$$\operatorname{grad} T = 0,\ \operatorname{grad} P = 0, \qquad (1)$$

где T – температура;
P – давление.

Если условие (1) не выполняется, то в системе возникают необратимые процессы переноса. В случае появления в системе потоков тепла говорят о теплопроводности, при переносе зарядов – об электропроводности. Явление, связанное с перемещением вещества вследствие теплового движения, называют диффузией (от лат. diffusio – распространение, растекание). Необходимо обратить внимание читателя на очевидное, но иногда игнорируемое обстоятельство принадлежности понятия «диффузия» к науке, которая называется «Неравновесная термодинамика». Не считаться с этим фактом нельзя, потому что это может привести к неправомерным выводам при обсуждении результатов экспериментального исследования или теоретического изучения рассматриваемого явления, например, к появлению «равновесного» коэффициента самодиффузии [1]. Необходимо подчеркнуть, что для исследования любой проблемы, решения любой задачи, прежде всего, следует обусловить сам объект исследования, то есть определить пространство, в котором будут рассмотрены проблемы, методы и способы работы с параметрами – координатами пространства. В данном пособии диффузия будет рассматриваться в рамках линейной неравновесной термодинамики. Это означает, что, хотя в целом состояние системы неравновесно, отдельные ее малые части квазиравновесны и имеют медленно изменяющиеся во времени и от точки к точке интенсивные термодинамические параметры. Размеры этих малых равновесных частей неравновесной системы и времена изменения термодинамических параметров в них определяются экспериментально. Свойства неравновесной системы при этом определяются локальными термодинамическими параметрами, которые зависят от пространственных координат и времени только через характеристические термодинамические параметры, для которых справедливы уравнения термодинамики. Причем при малых отклонениях от равновесия связь между потоками $\mathbf{I}_i$ и термодинамическими силами $\mathbf{X}_k$ (интенсивными параметрами термодинамической системы, такими как температура, давление, напряженность электрического поля, химический потенциал и т.д.) [1] линейна:

$$\mathbf{I}_i = \sum_{k=1}^{n} L_{ik} \mathbf{X}_k \,. \tag{2}$$

Коэффициенты L_{ik} в этом линейном законе называются кинетическими коэффициентами. Для более детального знакомства с основами неравновесной термодинамики заинтересованному читателю можно рекомендовать учебник И.П. Базарова [2], снабженный большим количеством задач, интересных примеров и подробной библиографией.

1. Уравнение диффузии

Рассмотрим систему, содержащую k компонентов, при этом допустим, что i-й компонент имеет градиент химического потенциала, который, в свою очередь, обусловлен градиентом концентрации этого компонента. По определению поток[1] $\mathbf{j}_i(x,y,z)$ равен количеству частиц, которые пересекают в единицу времени поверхность единичной площади, то есть

$$\mathbf{j}_i(x,y,z,t) = c_i(x,y,z,t)\,\mathbf{v}_i(x,y,z,t)\,, \tag{3}$$

где x, y, z – пространственные координаты;
t – временная координата;
$c_i(x, y, z)$ – концентрация i-го компонента;
$\mathbf{v}_i(x, y, z)$ – средняя скорость частиц, которую выразим через подвижность $u_i(x, y, z)$ и силовую характеристику, вызвавшую поток, в системе $\mathbf{f}_i(x, y, z)$ следующим образом:

[1] Векторные величины в пособии выделены жирным шрифтом.

$$\mathbf{v}_i(x, y, z, t) = u_i(x, y, z, t)\,\mathbf{f}_i(x, y, z, t)\,. \qquad (4)$$

Прежде чем продолжить вывод уравнения диффузии, необходимо сделать небольшое отступление, связанное с физическим смыслом величины $\mathbf{f}_i(x,y,z)$.

Из курса общей физики известно, что если в пространстве определено распределение электрического потенциала $\varphi(x, y, z)$, то в этом пространстве определена и его силовая характеристика $\mathbf{E}_i(x, y, z)$ – напряженность электрического поля, причем

$$\mathbf{E}_i(x, y, z) = -\operatorname{grad}\varphi(x, y, z) \qquad (5)$$

или

$$\mathbf{E}_i(x, y, z) = -\nabla\,\varphi(x, y, z)\,, \qquad (5а)$$

где ∇ – оператор набла, который в декартовой системе координат имеет вид

$$\nabla = \frac{\partial}{\partial x}\mathbf{i} + \frac{\partial}{\partial y}\mathbf{j} + \frac{\partial}{\partial z}\mathbf{k}\,, \qquad (5б)$$

где, в свою очередь, **i**, **j**, **k** – ортогональные единичные векторы, определяющие декартову систему координат.

Справедливость равенства правых частей выражений (5) и (5а) легко показать. Действительно,

$$\nabla\,\varphi(x, y, z) = \left(\frac{\partial}{\partial x}\mathbf{i} + \frac{\partial}{\partial y}\mathbf{j} + \frac{\partial}{\partial z}\mathbf{k}\right)\varphi(x, y, z) =$$

$$= \frac{\partial\varphi(x, y, z)}{\partial x}\mathbf{i} + \frac{\partial\varphi(x, y, z)}{\partial y}\mathbf{j} + \frac{\partial\varphi(x, y, z)}{\partial z}\mathbf{k} = \operatorname{grad}\varphi(x, y, z)\,.$$

Здесь же следует напомнить, что скалярное произведение оператора набла и некоторого вектора $\mathbf{b}(x,y,z) = b_x(x,y,z)\mathbf{i} + b_y(x,y,z)\mathbf{j} + b_z(x,y,z)\mathbf{k}$ определяет скалярную величину, которую называют дивергенцией:

$$\nabla\,\mathbf{b}(x, y, z) = \left(\frac{\partial}{\partial x}\mathbf{i} + \frac{\partial}{\partial y}\mathbf{j} + \frac{\partial}{\partial z}\mathbf{k}\right)\left(b_x(x, y, z)\mathbf{i} + b_y(x, y, z)\mathbf{j} + b_z(x, y, z)\mathbf{k}\right) =$$

$$= \left(\frac{\partial b_x(x, y, z)}{\partial x} + \frac{\partial\, b_y(x, y, z)}{\partial y} + \frac{\partial\, b_z(x, y, z)}{\partial z}\right) = \operatorname{div}\mathbf{b}(x, y, z)\,.$$