

Система уравнений (2) и (3) не решается аналитически, поэтому для ее решения применяется численный самосогласованный расчет [3]. С этой целью нами был разработан алгоритм такого самосогласованного решения этих уравнений. Это позволило нам определить значения энергий и волновые функции для трех нижайших энергетических подзон (рис.1) в предположении бесконечно большого потенциального барьера на границе раздела AlGaAs/GaAs и заселенности электронами только Г-долины в GaAs. В качестве начальных приближений для самосогласованного расчета использовались результаты (энергии и волновые функции), полученные аналитически для приближения треугольной потенциальной ямы. Потенциал, соответствующий изгибу дна зоны проводимости GaAs у границы гетероперехода, представлен на рис. 2. Все вычисления были проведены для $N_s = 1,4 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$ и $T = 300 \text{ К}$.

Литература

1. Андо Т., Фаулер А., Стерн Ф. Электронные свойства двумерных систем / М.: Мир, 1985. 415 с.
2. Шур М. Современные приборы на основе арсенида галлия / М.: Мир, 1991. 632 с.
3. Jovanovic D., Leburton J.-P. Self-consistent analysis of single-electron charging effects in quantum-dot nanostructures // Phys.Rev.B. Vol. 49. 1994. № 11. P. 7474–7483.

ИССЛЕДОВАНИЯ ЗАВИСИМОСТИ КОЭФФИЦИЕНТА ДИФФУЗИИ В ПЛОТНЫХ УПАКОВКАХ СФЕРИЧЕСКИХ ЧАСТИЦ ОТ СВОЙСТВ УПАКОВОК МЕТОДАМИ МОНТЕ-КАРЛО

М. М. Даутов

Введение

Открытие хроматографии в начале прошлого века повлекло за собой значительное развитие новых технологий в промышленности. Свойства хроматографии начали использоваться в медицине, биологии, химии и других науках, изучающих свойства растворов жидкостей и газов. Свойства хроматографии изучаются очень интенсивно с момента открытия. Исследования многих хроматографических эффектов в настоящее время невозможны без компьютерного моделирования изучаемых процессов, протекающих в глубинных областях исследуемых структур.

Цель данной работы – изучение влияния свойств адсорбирующей среды на коэффициент диффузии вещества, находящегося в ней. Плотность упаковки – величина, обратная пористости и равная соотношению объема, занятого частицами пористой среды, ко всему объему. Плотность упаковки в наших исследованиях изменяется в пределах от 0,5 до 0,6.

Эта работа является составной частью большого проекта, одной из прикладных целей которого – создание чипа-лаборатории для био- и химического анализа. Для его успешного завершения необходимо разработать модели процесса переноса вещества в пористых средах (диффузия, электроосмотический поток, гидравлический поток и перенос тепловой энергии), где необходимо иметь значения коэффициента диффузии для упаковок, различающихся структурой (периодические и случайные) и пористостью, и сравнение этих коэффициентов для упаковок с одинаковой пористостью, но разными структурами и т.д.

На начальном этапе мое внимание было привлечено к проблеме генерации плотных упаковок и обусловлено лишь тем, что эти структуры будут использоваться в качестве моделей реальных пористых сред, представляющих собой адсорбент.

Само диффузионное движение частиц исследуемого вещества я моделировал методами Монте-Карло.

1. Генерирование плотных случайных упаковок

Разработано достаточно много алгоритмов получения плотных упаковок. Все их можно условно разделить на две большие группы: алгоритмы последовательного добавления частиц и алгоритмы последовательных итераций.

Алгоритмы последовательного добавления позволяют достаточно просто получить случайные упаковки любых размеров для частиц произвольных размеров и форм для невысоких плотностей. В случае сферических частиц одинакового размера этот порог для так называемого метода «упал-покатился» составляет около 58 %. Суть его состоит в том, что к уже существующей промежуточной структуре последовательно добавляются шарики согласно определенному правилу. Для того чтобы преодолеть рубеж плотности в 58 % и достичь экспериментально регистрируемых в случайных упаковках значений порядка 63 %, необходимо использовать иные методы генерации. Разница в 5 % требует кардинального изменения в алгоритме генерации. Одним из алгоритмов, с помощью которого можно относительно быстро получить упаковки с плотностью более 60 %, является JT-алгоритм, относящийся к категории алгоритмов «последовательного

набухания» [1, с. 35]. Он позволяет генерировать достаточно большие упаковки с достаточно высокой плотностью (больше 60 % в случае одинаковых сферических частиц) за достаточно малое время (3 600 частиц за несколько часов). Суть его заключается в последовательном рассмотрении пар частиц. Обнаруживаем пару пересекающихся частиц и «расталкиваем» их на сумму радиусов.

Существует проблема создания больших (свыше 6 000 частиц) упаковок. Временные затраты на генерацию упаковки с использованием JT-алгоритма растут пропорционально $\sim 3N$. Одним из методов решения данной проблемы является создание регулярной упаковки. Сперва генерируется микроупаковка с проницаемыми границами, т. е. часть сферы, вышедшей за пределы упаковки, отображается на противоположной грани. Далее микроупаковка мультиплицируется на весь объем моделируемой пористой среды. Очевидно, что при уменьшении размеров микроупаковки уменьшаются общие временные затраты создания итоговой упаковки. Однако если характеристическая длина процессов, протекающих в макроупаковке, превышает размеры микроупаковки, модель изучаемого процесса будет неадекватной, и в самом лучшем случае будет необходим дополнительный анализ и пересчет выходных данных.

При выборе закона распределения размеров частиц необходимо знать свойства реальных пористых сред. Набор частиц с их диаметрами, являясь входной информацией, на работу для алгоритма создания упаковки не влияет. На этапе разработки разумнее всего использовать частицы с нормальным распределением.

Рассмотрим анализ модели упаковки частиц с неодинаковым диаметром с помощью паракорреляционной функции. В упаковке одинаковых частиц значение паракорреляционной функции пропорционально вероятности обнаружения другой частицы на данном расстоянии. Для частиц с разным диаметром паракорреляционная функция может служить для оценки уровня упорядоченности.

Результаты компьютерного моделирования показали, что в случае присутствия непроницаемых стенок окружение частицы определяется не только собственными свойствами упаковки, но и «эффектами стенки». Например, при прочих равных условиях вероятность обнаружения шести других частиц на расстоянии одного диаметра будет выше для частицы, расположенной в центре упаковки, чем для частицы, касающейся стенки.

Экспериментальные данные подтверждают, что уровень упорядоченности плотных упаковок изменяется с расстоянием от стенок. Вблизи их структура очень хорошо упорядочена и напоминает кристалл. Однако с удалением от стенок структура становится все более случайной. Следует отметить, что наличие непроницаемых стенок сильно затрудняет генерацию плотных упаковок с плотностью выше 0,5 для трехмерного случая.

Для своей работы я, используя JT-алгоритм, генерировал регулярные упаковки, имитируя бесконечные пористые среды с требуемой пористостью.

2. Моделирование броуновского движения

Целью моделирования броуновского движения являлось получение коэффициентов диффузии в плотных случайных упаковках, т. е. аналитические выражения существуют лишь для коэффициентов диффузии в периодических или кристаллических упаковках. Для случайных – есть лишь эмпирические формулы, и есть подозрение, что они справедливы не для всех случаев. Так что, получив соответствующие коэффициенты диффузии методами Монте-Карло, можно их проверить.

Используя методы Монте-Карло, была использована следующая схема моделирования броуновского движения частиц в пористой среде. В упаковку вводится большое количество пробных частиц со случайными начальными координатами. Они должны находиться только снаружи по отношению к сферам. Сферы, составляющие упаковку, считаются абсолютно твердыми и непроницаемыми. Время моделирования дискретизируется, и для каждого элементарного шага по времени для каждой пробной частицы моделируется диффузионное смещение $r(t + 1) = r(t) + x$, где r – координаты частицы на соответствующем шаге по времени, x – диффузионное смещение частицы за элементарный шаг по времени. Все эти величины – векторы. Величина диффузионного смещения связана с коэффициентом диффузии [2, с. 119] $\langle x * x \rangle = 6Dt$, где $\langle x * x \rangle$ – среднеквадратичное смещение частицы, которое произошло за время t , D – коэффициент диффузии. Таким образом, модуль смещения частицы за элементарный шаг по времени t можно определить как $x = \sqrt{6Dt}$, а его направление в пространстве равномерно распределено по всему телесному углу.

При моделировании был использован алгоритм, имеющий наибольшую точность. Суть его заключается в следующем. Для одного элементарного шага броуновской частицы моделируется вектор сме-

щения. Причем модуль смещения x равен $\sqrt{6D_{\text{своб}}t}$, а его направление равномерно распределено по всему телесному углу. Затем ищется наименьшее расстояние l до ближайшего пересечения полученного вектора со сферой. Если пересечений не обнаружено, то продолжаем моделирование из новой точки. Если же пересечение имело место, то из точки пересечения генерируется шаг по модулю $S = \sqrt{x^2 - l^2}$. Данная процедура рекурсивно вызывается до прекращения пересечений.

Разработанный алгоритм вносит наименьшую погрешность в модель и не требует присвоения шагу по времени значения, при котором элементарный шаг в пространстве броуновской частицы в 1 000–10 000 раз меньше среднего диаметра частиц упаковки. При присвоении шагу по времени такого значения зависимость коэффициента диффузии от времени имеет экспоненциальный вид даже при очевидной стационарности процесса. Это связано с противоречиями в методологии наблюдения и анализа полученных статистических данных. В этом случае следует задать время моделирования, за которое броуновская частица сместится в среднем на два диаметра частицы упаковки.

3. Анализ зависимости коэффициента диффузии от плотности упаковки

Адекватность модели была доказана моделированием броуновского движения в свободном пространстве и в «кубической» упаковке [3, с. 360]. Эти модели – тестовые, коэффициенты диффузии для данных экспериментов рассчитаны.

Для свободного пространства коэффициент диффузии является постоянной во времени величиной (коэффициент свободной диффузии, или $D_{\text{своб}}$), конечно, без учета статистической погрешности, связанной с конечной размерностью ансамбля частиц. При наличии различного рода пространственных препятствий его величина постепенно изменяется от $D_{\text{своб}}$ к некоторому асимптотическому значению и определяется свойствами и характеристиками данных препятствий. Для «кубической» упаковки коэффициент диффузии равен 0,722 от $D_{\text{своб}}$. Кубическая упаковка представляет собой плотную структуру из соприкасающихся сфер, причем центры соседних сфер образуют куб.

При моделировании броуновского движения в реальных пористых средах «кубическая» упаковка заменяется случайной.

Полученные модели пористой среды и броуновского движения в ней позволили провести ряд экспериментов по определению коэффициента диффузии в бесконечных пористых упаковках. Полученная за-

висимость имеет вид, схожий с опытными данными. В диапазоне плотности от 0,5 до 0,6 диффузия исследуемого вещества практически не зависит от пористости упаковки и определяется наличием в той или иной степени свободных прямых путей для диффузии. Минимальному значению коэффициента диффузии соответствует случай контакта всех сфер между собой и равен 0,7 от $D_{\text{своб}}$.

Используя полученную модель, можно с точностью порядка 0,1% определять коэффициент диффузии в различных упаковках.

Литература

1. *Jullien Remi, Jund Philippe and Caprion Didier* Computer investigation of long-range correlations and local order in random packings of spheres // *Physical review*. 1996. V. 54. № 6. P. 35–41.
2. *Blees M. H., Leyte J. C.* The Effective Translational Self-Diffusion Coefficient of Small Molecules in Colloidal Crystals of Spherical Particles // *Jurnal of Colloid and Interface science* 166. 1994. P. 118–127.
3. *Venema P., Struis R. P. W. J., Leyte J. C. and Bedeaux D.* The effective Self-Diffusion Coefficient of Solvent Molecules in Colloidal Crystals // *Journal of Colloid and Interface Science*. V. 141. № 2. 1991. P. 360–373.

ПРИБЛИЖЕНИЕ ГРАНИЧНЫХ УСЛОВИЙ ДЛЯ РАСЧЕТА ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ПОЛЕЙ В УЛЬТРАКОРОТКОКАНАЛЬНЫХ МОП-ТРАНЗИСТОРАХ

А. В. Зезюля

Существующие сегодня подходы к решению уравнения Пуассона в короткоканальных МОП-транзисторах (см., например, [1; 2]) основаны на стандартной методике определения граничных условий (их постоянства на всех этапах решения) и потому требуют с целью адекватного задания таких условий выбирать в качестве области решения данного уравнения всю структуру МОП-транзистора. Это приводит, в свою очередь, к необходимости преодоления проблемы сочетания и подгонки различных методов и моделей, приемлемых для одних участков прибора и неадекватных для других (в частности, дрейфово-диффузионных, гидродинамических, кинетических). В рамках существующих подходов необходимо разрабатывать специфические модели отдельно для областей истока, стока, их обедненных участков, а также канала, подложки, а при решении некоторых задач – и подзатворного окисла. Предложенная в настоящей работе модель граничных условий позволяет избежать этих проблем и ограничиться моделированием только области канала. В ее основе лежит самосогласо-