

УЗЕЛЬНАЯ МИГРАЦИЯ В ДВУМЕРНОЙ ГЕКСАГОНАЛЬНОЙ НАНОСТРУКТУРЕ С ПРОТЯЖЕННЫМИ ИСКАЖЕНИЯМИ

А. С. Долгов, Ю. Л. Жабчик

*Национальный Аэрокосмический Университет им. Н. Е. Жуковского «ХАИ»,
Харьков, Украина*

Поступила в редакцию 02. 06. 2014

Изучается миграция примесных атомов в двумерной гексагональной сетке, моделирующей графен или родственные наноструктуры. Рассматриваются различные варианты позиционирования субъектов миграции, совместимые с гексагональной симметрией матрицы. Определяется изменение во времени главных моментов функций распределения в процессе эволюции исходного состояния. Установлено, что зависимость от времени среднего квадрата смещения частиц может существенно отклоняться от чисто диффузионных закономерностей, что сближает рассматриваемый процесс со свойствами аномальной диффузии. Показывается, что искажения деформационной природы ведут к более значительным качественным изменениям переноса, нежели сопоставимые температурные. При этом обе названные формы воздействия могут служить средством перераспределения частиц и соответствующего изменения характеристик структуры.

Ключевые слова: графен, примесь, узельное размещение, миграция, протяженные искажения.

ВУЗЛОВА МІГРАЦІЯ В ДВОВИМІРНІЙ ГЕКСАГОНАЛЬНІЙ НАНОСТРУКТУРІ З ПРОТЯЖНИМИ СПОТВОРЮВАННЯМИ

А. С. Долгов, Ю. Л. Жабчик

Вивчається міграція домішкових атомів в двовимірній гексагональній сітці, що моделює графен або споріднені наноструктури. Розглядаються різні варіанти позиціонування суб'єктів міграції, сумісні з гексагональною симетрією матриці. Визначається зміна в часі головних моментів функцій розподілу в процесі еволюції початкового стану. Встановлено, що залежність від часу середнього квадрата зміщення часток може істотно відхилятися від чисто дифузійних закономірностей, що зближує розглянутий процес з властивостями аномальної дифузії. Показується, що спотворення деформаційної природи ведуть до більш значних якісних змін переносу, ніж порівнювані температурні. При цьому обидві названі форми впливу можуть служити засобом перерозподілу часток і відповідної зміни характеристик структури.

Ключові слова: графен, домішка, вузлове розміщення, міграція, протяжні спотворення.

TOP-MIGRATION IN THE TWO-DIMENSIONAL HEXAGONAL NANOSTRUCTURE WITH EXTENSIVE DISTORTIONS

A. S. Dolgov, Yu. L. Zhabchyk

Migration of impurity atoms in the two-dimensional hexagonal grid, which models the graphene or related nanostructures, is studied. Various variants of positioning of the migration's subjects, which are compatible to hexagonal symmetry of a matrix, are considered. Change in time of the main moments of distribution functions in the course of evolution of an initial state is defined. It is determined that dependence on time of an average square of shift of particles can significantly deviate from purely diffusive regularities that brings together the considered process with properties of abnormal diffusion. It is shown that distortions of the deformation nature conduct to more considerable qualitative changes of transfer, than the comparable temperature ones. Thus both called forms of influence can serve as means of redistribution of particles and corresponding change of structure's characteristics.

Keywords: graphene, impurity, top-location, migration, extensive distortions.

ВВЕДЕНИЕ

Миграция примесных атомов и иных точечных дефектов в твердых телах — один из важных процессов, определяющих наблюдаемые характеристики соответствующих структур. Эти процессы являлись объектом теоретического и экспериментального изучения ряда исследователей (например [1, 2]).

В применении к наноструктурам поверхностные процессы приобретают особую роль, в частности, также и поверхностная миграция. Тенденция особенно актуализировалась после открытия графена [3, 4], где двухмерность процесса — неотъемлемая особенность объекта, а совершенство структуры предполагает отыскание адекватных приемов анализа.

Имеются работы, указывающие на существенное изменение наблюдаемых характеристик графена даже при весьма невысоком числе поверхностных дефектов [5—8]. Эти обстоятельства указывают на потребность тщательного изучения наряду с другими эффектами также и закономерностей перераспределения примесных атомов по поверхности. Данная работа содержит построения, ориентированные на выяснение картины миграции в структуре, содержащей искажения, не принадлежащие к точечным. Постановка задачи имеет элементы сходства с разработками [9, 10], где, однако, специфические особенности гексагональной геометрии не фигурируют.

СОДЕРЖАНИЕ АНАЛИЗА

Изучаются закономерности перемещения инородных атомов в пределах гексагональной сетки. Названное образование тождественно однослойному графену, но может также рассматриваться как поверхностный слой относительно массивной гексагональной структуры при «правильной» ориентации поверхности. Квалифицируя инородные атомы как «примесь», можно ограничиться допущением о невысокой концентрации примесной компоненты, что позволяет исключить из рассмотрения взаимодействие между субъектами миграции (это обстоятельство изучалось, в частности, в работах [11, 12]) и считать движение отдельных атомов независимым.

Принципиальное значение имеет вопрос о характере позиционирования инородных атомов относительно узлов гексагональной матрицы. Имеется три варианта таких размещений, не входящих в противоречие с особенностями симметрии обсуждаемой структуры: ячеечное (Hollow), узельное (Top) и междузельное (Bridge). Нет оснований для априорного предпочтения какой-либо из форм по сравнению с двумя другими, равно как и неизвестны обстоятельства, делающие какой-либо из этих вариантов принципиально несостоятельным. Имеющиеся экспериментальные данные и теоретические представления отдают, пожалуй, некоторый приоритет первому из названных вариантов, отчасти, может быть, вследствие его относительной простоты. Этот вариант рассмотрен ранее [13]. Здесь основное внимание сосредоточено на двух других версиях процессов.

Обсуждаемая структура считается неоднородной, причем характер искажения является одноосным и достаточно слабым — допускающим пространственную линейризацию главной характеристики диффузионного процесса — вероятности скачка в расчете на единицу времени.

Неоднородность названных характеристик возникает как результат также неоднородных внешних воздействий, теплового или деформационного. Качественное различие этих двух вариантов в следующем. Неоднородность температуры влечет за собой соответствующее изменение вероятностей перескоков, которое в пренебрежении тепловым расширением не создает выраженных ориентационных приоритетов. В противовес этому неоднородная деформация вместе с изменением рельефа продуцирует изменение удалений между примыкающими позициями, что дополнительно создает неравноправие перескоков в противоположных направлениях. Это обстоятельство, в качестве сопутствующего, может присутствовать и в случае температурного воздействия как следствие неоднородного теплового расширения.

Названные разновидности медленно изменяющихся искажений требуют самостоятельного рассмотрения. Основные методические

приемы распространяются на всю совокупность вариантов.

Исходной является бесконечная линейная совокупность уравнений первого порядка, представляющая собой балансные соотношения для вероятностей заполнения разрешенных позиций. Идентичность структуры всех исходных уравнений позволяет записать математический эквивалент этой системы, имеющий вид небольшого числа линейных уравнений первого порядка для формально сконструированных Фурье-сумм. В случае наличия линейной неоднородности оговоренных выше разновидностей эти соотношения имеют вид дифференциальных уравнений первого порядка в частных производных. Выясняется, что для точного определения средних характеристик миграционного процесса достаточно воспользоваться упрощенной формой названных уравнений.

ЛИНЕЙНАЯ УЗЕЛЬНАЯ НЕОДНОРОДНОСТЬ В ТОР-МОДЕЛИ

Принимая во внимание, что совокупность возможных позиций атомов миграционной компоненты тождественна размещению узлов гексагональной сетки, следует записать

$$\left. \begin{aligned} \frac{d\varphi_{2m+1,2n}}{dt} &= \omega_{2m}\varphi_{2m,2n} + \omega_{2m+2}\varphi_{2m+2,2n} + \\ &+ \omega_{2m+1}\varphi_{2m+1,2n-1} - 3\omega_{2m+1}\varphi_{2m+1,2n}, \\ \frac{d\varphi_{2m,2n+1}}{dt} &= \omega_{2m-1}\varphi_{2m-1,2n+1} + \\ &+ \omega_{2m+1}\varphi_{2m+1,2n+1} + \omega_{2m}\varphi_{2m,2n} - 3\omega_{2m}\varphi_{2m,2n+1}, \\ \frac{d\varphi_{2m,2n}}{dt} &= \omega_{2m-1}\varphi_{2m-1,2n} + \\ &+ \omega_{2m+1}\varphi_{2m+1,2n} + \omega_{2m}\varphi_{2m,2n+1} - 3\omega_{2m}\varphi_{2m,2n}, \\ \frac{d\varphi_{2m+1,2n+1}}{dt} &= \omega_{2m}\varphi_{2m,2n+1} + \omega_{2m+2}\varphi_{2m+2,2n+1} + \\ &+ \omega_{2m+1}\varphi_{2m+1,2n+2} - 3\omega_{2m+1}\varphi_{2m+1,2n+1}. \end{aligned} \right\} (1)$$

Здесь φ — вероятность заполнения позиции, обозначенной соответствующим индексом, причем направление изменения « m » нормально сторонам гексагонов, а ориентация « n » ортогональна к « m ». При этом ω_m — вероятности перескоков в одном из трех возможных направлений, изменяющиеся в направлении, обозначаемом индексом « m ».

Предполагаем, что величины ω_m следуют правилу $\omega_m = \omega_0 + \alpha m$.

Умножая каждое из уравнений записанных в первой строке (1) на

$$\exp\{i[(2m+1)s_1 + 2ns_2]\},$$

из второй строки на

$$\exp\{i[2ms_1 + (2n+1)s_2]\},$$

где s_1, s_2 — искусственно вводимые параметры, и т. д., сводим бесконечную систему (1) к форме четырех уравнений для величин G_{ij}

$$\left. \begin{aligned} G_{10} &= \sum_{m,n} \varphi_{2m+1,2n} \exp\{i[(2m+1)s_1 + 2ns_2]\}, \\ G_{01} &= \sum_{m,n} \varphi_{2m,2n+1} \exp\{i[2ms_1 + (2n+1)s_2]\}, \\ G_{00} &= \sum_{m,n} \varphi_{2m,2n} \exp\{i(2ms_1 + 2ns_2)\}, \\ G_{11} &= \sum_{m,n} \varphi_{2m+1,2n+1} \times \\ &\times \exp\{i[(2m+1)s_1 + (2n+1)s_2]\}. \end{aligned} \right\} (2)$$

Объединяя величины G_{ij} (2) в пары по признаку структурного единства соответствующих уравнений

$$\begin{aligned} G_0 &= G_{00} + G_{11} \\ G_1 &= G_{10} + G_{01} \end{aligned}$$

получаем равенства

$$\frac{\partial G_0}{\partial t} = \omega_0 \left[(2 \cos s_1 + e^{-is_2}) G_1 - 3G_0 \right] - i\alpha \times \left[(2 \cos s_1 + e^{-is_2}) \frac{\partial G_1}{\partial s_1} - 3 \frac{\partial G_0}{\partial s_1} \right], \quad (3)$$

$$\frac{\partial G_1}{\partial t} = \omega_0 \left[(2 \cos s_1 + e^{is_2}) G_0 - 3G_1 \right] - i\alpha \times \left[(2 \cos s_1 + e^{is_2}) \frac{\partial G_0}{\partial s_1} - 3 \frac{\partial G_1}{\partial s_1} \right]. \quad (4)$$

Конкретная форма G_0, G_1 позволяет по общему правилу найти индивидуальные функции $\varphi_{mn}(t)$, однако, более показательны средние характеристики изменяющегося во времени распределения вероятностей, для отыскания которых форма функций G наиболее удобна. Преимущественный интерес в рамках поставленной здесь задачи представляют величины

$$\overline{m} \equiv -i \frac{\partial G}{\partial s_1}(0, 0, t), \quad (5)$$

$$\overline{m^2} \equiv -\frac{\partial^2 G}{\partial s_1^2}(0, 0, t), \quad (6)$$

т. е. связанные с направлением, вдоль которого характеристики структуры претерпевают изменения. Легко видеть, что осуществление операций (5, 6) требует знания зависимости G от s_1 в области малых s_1 и не содержит каких-то операторов, связанных с величиной s_2 , кроме обращения ее в ноль. Таким образом, имея в виду несколько суженный объем информации о свойствах распределения, нет необходимости отличать величину s_2 от нуля уже и в уравнениях (3, 4). При этом выражения для m , m^2 остаются точными.

Для функции

$$G \equiv G_0 + G_1,$$

охватывающей все узлы структуры, возникает соотношение

$$\frac{\partial G}{\partial t} = 2\omega_0(\cos s - 1)G - 2i\alpha(2\cos s - 2)\frac{\partial G}{\partial s}. \quad (7)$$

(Индекс при s опущен как утративший характер отличительного признака).

Решение уравнения (7), удовлетворяющее начальному позиционированию в узле (0, 0) и справедливое в области малых s , таково

$$G = e^{-\frac{s^2}{1-i\alpha s t}\omega_0 t}. \quad (8)$$

Применяя к выражению (8) операции (4, 5) находим

$$\overline{m} = 0 \quad (9)$$

$$\overline{m^2} = 2\omega_0 t. \quad (10)$$

Записанные величины не отличаются от соответствующих значений в неискаженной структуре [14]. Это значит, что слабая линейная неоднородность указанного вида не создает тенденции к дрейфу в каком-либо направлении и не влияет на общий масштаб хаотического расползания частиц из области первоначальной локализации. Однако, значение m^3 , определяемое третьей производной выражения (8), прямо следует масштабу искажения

$$\overline{m^3} = 6\omega_0\alpha t^2,$$

что будет наблюдаться как прогрессирующее нарастание асимметрии распределения при сохранении интегрального баланса распределения с двух сторон от исходной позиции.

МЕЖУЗЕЛЬНАЯ НЕОДНОРОДНОСТЬ В ТОР-МОДЕЛИ

Исходная система уравнений сходна с формой (1), отличаясь от нее тем, что значения ω связываются не с индексами индивидуальных позиций, а зависят от координат двух соседних положений равновесия, между которыми происходит переброс. Тем самым каждое из значений ω объединяет две группы физически идентичных позиций. Получается (одноосная деформация в ориентации « m »)

$$\left. \begin{aligned} & \frac{d\varphi_{2m+1,2n}}{dt} = \\ & = \left(\omega_0 + \alpha \left(2m + \frac{1}{2} \right) \right) (\varphi_{2m,2n} - \varphi_{2m+1,2n}) + \\ & + \left(\omega_0 + \alpha \left(2m + \frac{3}{2} \right) \right) (\varphi_{2m+2,2n} - \varphi_{2m+1,2n}) + \\ & + \omega_0 (\varphi_{2m+1,2n-1} - \varphi_{2m+1,2n}), \\ & \frac{d\varphi_{2m,2n+1}}{dt} = \\ & = \left(\omega_0 + \alpha \left(2m - \frac{1}{2} \right) \right) (\varphi_{2m-1,2n+1} - \varphi_{2m,2n+1}) + \\ & + \left(\omega_0 + \alpha \left(2m + \frac{1}{2} \right) \right) (\varphi_{2m+1,2n+1} - \varphi_{2m,2n+1}) + \\ & + \omega_0 (\varphi_{2m,2n} - \varphi_{2m,2n+1}), \\ & \frac{d\varphi_{2m,2n}}{dt} = \\ & = \left(\omega_0 + \alpha \left(2m - \frac{1}{2} \right) \right) (\varphi_{2m-1,2n} - \varphi_{2m,2n}) + \\ & + \left(\omega_0 + \alpha \left(2m + \frac{1}{2} \right) \right) (\varphi_{2m+1,2n} - \varphi_{2m,2n}) + \\ & + \omega_0 (\varphi_{2m,2n+1} - \varphi_{2m,2n}), \\ & \frac{d\varphi_{2m+1,2n+1}}{dt} = \\ & = \left(\omega_0 + \alpha \left(2m + \frac{1}{2} \right) \right) (\varphi_{2m,2n+1} - \varphi_{2m+1,2n+1}) + \\ & + \left(\omega_0 + \alpha \left(2m + \frac{3}{2} \right) \right) (\varphi_{2m+2,2n+1} - \varphi_{2m+1,2n+1}) + \\ & + \omega_0 (\varphi_{2m+1,2n+2} - \varphi_{2m+1,2n+1}). \end{aligned} \right\} \quad (11)$$

Вновь вводя в рассмотрение выражения (2) и комбинируя их так же, как в предшествующем пункте, для обобщающей функции G в редуцированной форме получаем уравнение

$$\frac{\partial G}{\partial t} = -2\omega_0(1 - \cos s)G + 2i\alpha(1 - \cos s)\frac{\partial G}{\partial s} + i\alpha \sin sG. \quad (12)$$

Уравнение (12) отличается от равенства (7) только наличием последнего слагаемого, что, в свою очередь, предопределяет сходство искомой функции с результатом (8). Получается

$$G = \frac{e^{-\frac{s^2}{1-i\alpha st}\omega_0 t}}{1-i\alpha st}. \quad (13)$$

Главные моменты распределения частиц в обсуждаемой ситуации таковы

$$\overline{m} = \alpha t, \quad (14)$$

$$\overline{m^2} = 2\omega_0 t + 2\alpha^2 t^2. \quad (15)$$

Видим, что величины \overline{m} , $\overline{m^2}$ количественно иные, нежели (9, 10). Согласно (14) в данной ситуации наблюдается смещение «центра тяжести» распределения в сторону повышенных вероятностей перескоков со скоростью, соответствующей масштабу искажения α . Средний квадрат (15) включает слагаемое идентичное (10) и дополнительный член, обусловленный дрейфовым смещением.

ОДНООСНОЕ ДЕФОРМАЦИОННОЕ ИСКАЖЕНИЕ ПРИ BRIDGE-ПОЗИЦИОНИРОВАНИИ

Приняв способ индексации возможных позиций субъектов миграции, представленный на рисунке 1, следует записать

$$\frac{d\varphi_{4m,4n}}{dt} = \omega_0 \times (\varphi_{4m-1,4n-1} + \varphi_{4m+1,4n-1} + \varphi_{4m-1,4n+1} + \varphi_{4m+1,4n+1} - 4\varphi_{4m,4n}) +$$

$$+ \alpha \left(4m - \frac{1}{2}\right) (\varphi_{4m-1,4n-1} + \varphi_{4m-1,4n+1} - 2\varphi_{4m,4n}) + \alpha \left(4m + \frac{1}{2}\right) (\varphi_{4m+1,4n-1} + \varphi_{4m+1,4n+1} - 2\varphi_{4m,4n}), \quad (16)$$

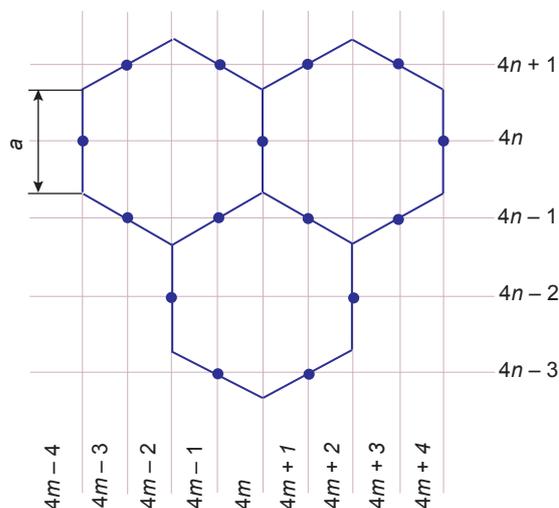


Рис. 1. Bridge-позиционирование субъектов миграции в гексагональной структуре

(Сходным образом формируются уравнения для всех функций $\varphi_{4m+p, 4n+q}$ (где p, q — целые числа, как положительные, так и отрицательные). Дополнительно предполагается, что поправки к ω_0 пропорциональны проекции середины прямолинейной траектории перескока на ось искажения « m »: отсюда добавки $\frac{1}{2}$. Названное допущение исключает неопределенные параметры и способствует прозрачности исходных и последующих соотношений, хотя и является некоторой аппроксимацией.)

Вводя производящие функции (Фурье-суммы) по правилу

$$G_{pq} = \sum_{m,n} \varphi_{4m+p, 4n+q} e^{i[(4m+p)s_1 + (4n+q)s_2]},$$

сводим уравнения (16) к соотношениям для производящих функций

$$\frac{\partial G_{00}}{\partial t} = \omega_0 (e^{i(s_1+s_2)} G_{-1,-1} + e^{-i(s_1-s_2)} G_{1,-1} + e^{i(s_1-s_2)} G_{-1,1} + e^{-i(s_1+s_2)} G_{1,1} - 4G_{00}) -$$

$$\begin{aligned}
 & -i\alpha \left\{ e^{i\left(\frac{s_1}{2}+s_2\right)} \frac{\partial}{\partial s_1} \left(e^{i\frac{s_1}{2}} G_{-1,-1} \right) + \right. \\
 & + e^{i\left(\frac{s_1}{2}-s_2\right)} \frac{\partial}{\partial s_1} \left(e^{i\frac{s_1}{2}} G_{-1,1} \right) - \\
 & - 2e^{i\frac{s_1}{2}} \frac{\partial}{\partial s_1} \left(e^{-i\frac{s_1}{2}} G_{00} \right) + \\
 & + e^{-i\left(\frac{s_1}{2}-s_2\right)} \frac{\partial}{\partial s_1} \left(e^{-i\frac{s_1}{2}} G_{1,-1} \right) + \\
 & + e^{-i\left(\frac{s_1}{2}+s_2\right)} \frac{\partial}{\partial s_1} \left(e^{-i\frac{s_1}{2}} G_{1,1} \right) - \\
 & \left. - 2e^{-i\frac{s_1}{2}} \frac{\partial}{\partial s_1} \left(e^{i\frac{s_1}{2}} G_{00} \right) \right\}, \quad (17)
 \end{aligned}$$

невывисанные уравнения для других функций G_{pq} не содержат составляющих, принципиально отличных от слагаемых (17).

Введение комбинаций

$$\begin{aligned}
 G_a & \equiv G_{00} + G_{22}, \\
 G_b & \equiv G_{11} + G_{-1,-1}, \\
 G_c & \equiv G_{1,-1} + G_{-1,1}
 \end{aligned}$$

дает замкнутую систему уравнений для обозначенных величин. Редукция уравнений в оговоренном выше смысле сокращает количество уравнений до двух. В обозначениях

$$\begin{aligned}
 G_0 & \equiv G_a \\
 2G_1 & \equiv G_b + G_c
 \end{aligned}$$

получается

$$\begin{aligned}
 & \frac{\partial G_0}{\partial t} = 4\omega_0 (\cos s G_1 - G_0) - \\
 & - 2i\alpha \left(2 \cos s \frac{\partial G_1}{\partial s} - 2 \frac{\partial G_0}{\partial s} - \sin s G_1 \right), \quad (18)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & \frac{\partial G}{\partial t} = \\
 & = 2\omega_0 (\cos(2s) G_1 + \cos s G_0 - 2G_1) - \\
 & - i\alpha \left\{ (2 \cos(2s) - 4) \frac{\partial G_1}{\partial s} + \right. \\
 & \left. + 2 \cos \frac{\partial G_0}{\partial s} - 2 \sin(2s) G_1 - \sin s G_0 \right\}, \quad (19)
 \end{aligned}$$

Нулевое приближение для уравнений (18, 19) ($\alpha \rightarrow 0$) соответствует двум уравнениям первого порядка. Традиционная форма решений таких уравнений

$$\sim \exp(\omega t)$$

определяет два значения ω (точные выражения)

$$\omega_1 = -4 \omega_0 \sin^2 s \quad (20)$$

$$\omega_2 = -6 \omega_0. \quad (21)$$

Составляющая распределения, отвечающая значению ω_2 (21), быстро (за срок не выше времени между очередными скачками) затухает, так что в последующий период (практически во всем диапазоне t) картина распределения задается первым из значений ω , т. е. (20). При этом

$$G_1 = \cos s G_0 \quad (22)$$

что фактически означает тождественность уровней заполнения в примыкающих позициях, формально отнесенных к разным совокупностям, отвечающих выражениям для G .

Нет оснований предполагать, что слабое протяженное искажение ($\alpha \neq 0$) может уничтожить микроскопические корреляции в заполнении ближайших узлов. Поэтому соответствие (22) следует распространить и на объект основного внимания данной работы.

Уравнение (18) переписывается так

$$\begin{aligned}
 & \frac{\partial G_0}{\partial t} = -4\omega_0^2 \sin^2 s + \\
 & + 2i\alpha \left(2 \sin^2 s \frac{\partial G_0}{\partial s} + 3 \sin s \cos s G_0 \right). \quad (23)
 \end{aligned}$$

Функция, удовлетворяющая (23) и требованию начальной локализации в узле (0, 0), при малых значениях s такова

$$G_0 = \frac{e^{-\frac{4\omega_0 s^2 t}{1-4i\alpha t}}}{(1-4i\alpha t)^{\frac{3}{2}}},$$

что позволяет записать

$$\overline{m} = 6\alpha t, \quad (24)$$

$$\overline{m^2} = 8\omega_0 t + 60\alpha^2 t^2. \quad (25)$$

Структура выражений (24, 25) та же, что и для соответствующих формул (14, 15).

Различие численных коэффициентов не является достаточно убедительным основанием для количественного сопоставления двух разных механизмов миграции и, вероятно, различающихся видов частиц. Тем не менее, можно обратить внимание, что «правильный» перескок в обоих случаях соответствует одному и тому же сдвигу в направлении « m », а именно значению $\sqrt{3}/2 a$. В силу этого, вариант сопоставимости значений ω_0 для двух обсуждаемых механизмов может расцениваться как ожидаемый в этих условиях. С учетом того, что увеличение « m » на единицу в Тор-модели соответствует пространственному сдвигу, вдвое превышающему аналогичную величину для Bridge-model, выражения (24, 25) задают более интенсивный дрейф, нежели версия (14, 15). На это уже указывает усиление вклада составляющей, связанной с искажением в формуле (25) в сравнении с выражением (15). При этом в отсутствие искажения ($\alpha = 0$) параметры диффузионного расползания (m^2) в абсолютных значениях тождественны.

Исследования ряда авторов ([15, 16] и др.) показали, что усложнение механизма диффузионных переходов или детализация этих механизмов сравнительно с классическими схемами может приводить к качественному изменению характера диффузионных процессов, что получило названия «субдиффузия», «аномальная диффузия», «квазидиффузия». Одним из признаков такого процесса является нелинейная зависимость среднего квадрата координаты (или аналога этой величины) от времени.

Как видим, в нашем случае эта зависимость также нарушается (15, 25). Это является следствием искажения структуры (усложнения механизма переноса), причем только для специальных форм неоднородностей.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Наличие протяженной неоднородности однослойной гексагональной структуры — одна из составляющих реальных структур, отличающая их от простейших схем. Это качественно обособленный класс дефектов структуры, требующий специальных средств

анализа и предполагающий специфические последствия в отношении различных свойств объекта, в частности, модифицирующий общую картину диффузионного перемещения сосредоточенных дефектов (примесных атомов).

При сохранении тенденции к ненаправленному расползанию, отвечающей принципу возрастания энтропии, с количественными характеристиками, присущими соответствующей неискаженной структуре, возникает асимметрия диффузионного процесса в направлении оси искажения. Выясняется, что основные факторы внешнего воздействия, создающие протяженные, в том числе макроскопические неоднородности условий миграции (нагрев и деформация) продуцируют при этом качественно различные перестройки диффузионного процесса.

Температурная неоднородность создает асимметрию в размещении атомов относительно первоначальной локализации при сохранении общего баланса в отношении направлений перескоков. Это будет наблюдаться как снижение общей плотности в области повышенной температуры вместе с расширением эффективных размеров этой области. Деформационное искажение является фактором макроскопического переноса миграционной компоненты. Это значит, что неоднородная деформация является инструментом перераспределения примесной составляющей по структуре, определяя технологические возможности формирования зон уплотнения и разрежения.

Вероятности перескоков и, следовательно, также темп перераспределений мигрирующих частиц зависят от температуры, причем в реальных диапазонах варьирования нагрева указанные величины могут изменяться на много порядков. Это дает возможности как реализации желательных перестроек за приемлемые сроки, так и «замораживания» неравновесных распределений, включая искусственно формируемые средствами нанотехнологий. Сочетание неоднородной деформации с неоднородным же распределением температуры создает дополнительные ресурсы управления диффузионными перераспределениями и может служить

инструментом формирования новых особенностей общей картины, не имеющих места при обособленных воздействиях.

Принятое в работе предположение о линейном пространственном изменении вероятностей перескоков следует понимать как прием аппроксимации для всего образца или отдельных участков, что определяет приближенную или хотя бы оценочную достоверность выполненных построений для широкого круга реальных объектов, не исключая, однако, целесообразности изучения роли субмикроскопических или мезоскопических пространственных искажений специальных видов.

Формальная техника работы при, возможно, некотором ее развитии допускает применение к ряду структур, имеющих элементы сходства с рассмотренными выше.

ЛИТЕРАТУРА

1. Старк Дж. Диффузия в твердых телах / Пер. с англ. — М.: «Энергия», 1980. — 239 с.
2. Бокштейн Б. С. Диффузия в металлах. — М.: «Металлургия», 1978. — 248 с.
3. Geim A. K., Novoselov K. S. The rise of graphene // *Nat. Mater.* — 2007. — Vol. 6, No. 3. — P. 183—191.
4. Елецкий А. В., Искандарова И. М., Книжник А. А., Красиков Д. Н. Графен: методы получения и теплофизические свойства // *УФН.* — 2011. — Т. 181, вып. 3. — С. 233 — 268.
5. Huang B., Li Z. Y., Liu Z. R., Zhou G., Hao S. G., Wu J., Gu B. L., Duan W. H. Adsorption of gas molecules on graphene nanoribbons and its implication for nanoscale molecule sensor // *J. Phys. Chem. C.* — 2008. — Vol. 112. — P. 13442—13446.
6. Chen J. H., Jang C., Adam S., Williams E. D., Fuhrer M. S., Ishigami M. Charged-impurity scattering in graphene // *Nat. Phys.* — 2008. — Vol. 4, No. 5. — P. 377—381.
7. Haberer D., Vyalikh D. V., Taioli S., etc. Tunable Band Gap in Hydrogenated Quasi-Free-Standing Graphene // *Nano Lett.* — 2010. — Vol. 10, No. 9. — P. 3360—3366.
8. Lherbier A., Blase X., Niquet Y.-M., etc. Charge Transport in Chemically Doped 2D Graphene // *Phys. Rev. Lett.* — 2008. — No. 101. — P. 036808.
9. Израилева Л. К., Руманов Э. Н. Кинетика процессов в системе «внедренные атомы—

кристалл» с учетом протяженных дефектов // *Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтрон. исслед.* — 2010. — Вып. 2. — С. 83—84.

10. Магомедов М. Н. О самодиффузии и поверхностной энергии при сжатии или растяжении кристалла железа // *ЖТФ.* — 2013. — Т. 83, вып. 3. — С. 71—78.
11. Долгов А. С., Стеценко Н. В. Кинетика осаждения поверхностного моноатомного слоя // *Поверхность.* — 2012. — Вып. 1. — С. 108—112.
12. Долгов А. С., Валуйская А. В. Миграция взаимодействующих атомов в поверхностном монослое // *ФИП.* — 2013. — Т. 11, вып. 2. — С. 144—153.
13. Долгов А. С., Жабчик Ю. Л. Миграция примесей в двумерной гексагональной структуре при наличии протяженных неоднородностей // *ФИП.* — 2014. — Т. 12, вып. 1. — С. 57—64.
14. Долгов А. С., Жабчик Ю. Л. Миграция примесных атомов в структуре графена // *Наносистемы, наноматериалы, нанотехнологии.* — 2013. — Т. 11, вып. 2. — С. 0281—0293.
15. Шкилев В. П. Модель супердиффузии // *ЖТЭФ.* — 2008. — Т. 134, вып. 11. — С. 1040.
16. Дворецкая О. А., Кондратенко П. С., Матвеев Л. В. Аномальная диффузия в обобщенной модели Дыхне // *ЖЭТФ.* — 2010. — Т. 137, вып. 1. — С. 67—76.

LITERATURA

1. Stark Dzh. Diffuziya v tverdyh telah / Per. s angl. — М.: «Energiya», 1980. — 239 p.
2. Bokshitejn B. S. Diffuziya v metallah. — М.: «Metallurgiya», 1978. — 248 p.
3. Geim A. K., Novoselov K. S. The rise of graphene // *Nat. Mater.* — 2007. — Vol. 6, No. 3. — P. 183—191.
4. Eleckij A. V., Iskandarova I. M., Knizhnik A. A., Krasikov D. N. Grafen: metody polucheniya i teplofizicheskie svojstva // *UFN.* — 2011. — Vol. 181, vyp. 3. — P. 233 — 268.
5. Huang B., Li Z. Y., Liu Z. R., Zhou G., Hao S. G., Wu J., Gu B. L., Duan W. H. Adsorption of gas molecules on graphene nanoribbons and its implication for nanoscale molecule sensor // *J. Phys. Chem. S.* — 2008. — Vol. 112. — P. 13442—13446.
6. Chen J. H., Jang C., Adam S., Williams E. D., Fuhrer M. S., Ishigami M. Charged-impurity scattering in graphene // *Nat. Phys.* — 2008. — Vol. 4, No. 5. — P. 377—381.

7. Haberer D., Vyalikh D. V., Taioli S., etc. Tunable Band Gap in Hydrogenated Quasi-Free-Standing Graphene // *Nano Lett.* — 2010. — Vol. 10, No. 9. — P. 3360—3366.
8. Lherbier A., Blase X., Niquet Y.-M., etc. Charge Transport in Chemically Doped 2D Graphene // *Phys. Rev. Lett.* — 2008. — No. 101. — P. 036808.
9. Izraileva L. K., Rumanov E. N. Kinetika processov v sisteme «vnedrennye atomy-kristall» s uchetom protyazhennyh defektov // *Poverhnost'. Rentgen., sinhrotr. i nejtron. issled.* — 2010. — Vyp. 2. — P. 83—84.
10. Magomedov M. N. O samodiffuzii i poverhnostnoj energii pri szhatii ili rastyazhenii kristalla zheleza // *ZhTF.* — 2013. — Vol. 83, vyp. 3. — P. 71—78.
11. Dolgov A. S., Stecenko N. V. Kinetika osazhdeniya poverhnostnogo monoatomnogo sloya // *Poverhnost'.* — 2012. — Vyp. 1. — P. 108—112.
12. Dolgov A. S., Valujskaya A. V. Migraciya vzaimodejstvuyuschih atomov v poverhnostnom monosloe // *FIP.* — 2013. — Vol. 11, vyp. 2. — P. 144—153.
13. Dolgov A. S., Zhabchik Yu. L. Migraciya primesej v dvumernoj geksagonal'noj strukture pri nalichii protyazhennyh neodnorodnostej // *FIP.* — 2014. — Vol. 12, vyp. 1. — P. 57—64.
14. Dolgov A. S., Zhabchik Yu. L. Migraciya primesyh atomov v strukture grafena // *Nanosistemy, nanomaterialy, nanotehnologii.* — 2013. — Vol. 11, vyp. 2. — P. 0281—0293.
15. Shkilev V. P. Model' superdiffuzii // *ZhTEF.* — 2008. — Vol. 134, vyp. 11. — P. 1040.
16. Dvoreckaya O. A., Kondratenko P. S., Matveev L. V. Anomal'naya diffuziya v obobschennoj modeli Dyhne // *ZhETF.* — 2010. — Vol. 137, vyp. 1. — P. 67—76.