

Подвижность и диффузия изотопов кислорода в $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$. Моделирование методом Монте-Карло

© М.З. Урицкий, В.И. Цидильковский

Институт высокотемпературной электрохимии Уральского отделения Российской академии наук,
620219 Екатеринбург, Россия

E-mail: umz@ihte.uran.ru

(Поступила в Редакцию 17 сентября 2002 г.)

С помощью метода Монте-Карло рассчитаны коэффициенты самодиффузии D_0 и диффузии изотопов D^* кислорода в $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$ в зависимости от температуры (600–1200 К) и содержания кислорода ($0 < x < 1$). При расчетах принималось во внимание как взаимодействие между ионами кислорода в узлах базовых плоскостей $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$, так и взаимодействие прыгающего иона, находящегося в седловой точке, с его окружением. С принятым гамильтонианом взаимодействия для ионов кислорода в узлах рассчитаны также равновесные термодинамические характеристики системы (фазовая диаграмма, теплоемкость). Коэффициенты диффузии D_0 и D^* убывают с увеличением содержания кислорода, при этом их эффективные энергии активации возрастают на 0.3–0.5 eV, а отношение Хэйвена убывает от 1 до ~ 0.5 .

Перенос кислорода в $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$ исследовался в большом количестве работ, особенно экспериментальных (см., например, [1,2] и ссылки в них). Результаты, касающиеся порядка величины коэффициента диффузии и его энергии активации, неплохо согласуются между собой [1,2]. Несколько хуже обстоит дело с концентрационными зависимостями коэффициентов переноса кислорода, некоторые прежде всего интересуют нас в контексте данного исследования. Вместе с тем если не рассматривать работы, в которых коэффициенты диффузии определялись методически некорректно (например, при нефиксированном содержании кислорода в образце, без учета, либо с некорректным учетом конечной скорости процессов обмена кислорода на границе оксид–газ и др.), то можно выделить следующие, надежно установленные, закономерности. (В этой работе ограничимся рассмотрением области температур 600–1200°C и не будем касаться анизотропии диффузии в базовой плоскости, наблюдаемой при более низких температурах [1].) С ростом содержания кислорода коэффициент диффузии изотопов D^* слабо меняется: D^* постоянен в пределах ошибки метода ВИМС [1] и несколько убывает согласно данным метода изотопного обмена с анализом газовой фазы [3]. Коэффициент химической диффузии с увеличением x растет [2]. Энергия активации подвижности в соответствии с данными метода внутреннего трения увеличивается с x , скачком возрастаая при переходе из тетра- в ортофазу [4]. Эти результаты согласуются между собой и могут быть теоретически объяснены, если учесть корреляции между мобильными ионами кислорода в базовой плоскости. Последовательный учет межионных взаимодействий в узлах и взаимодействия прыгающего иона, находящегося в седловой точке, с его окружением в рамках динамического кластерного метода позволяет интерпретировать перечисленные выше закономерности [5]. Ранее сходные результаты получены в [6] методом вероятных траекторий Кикучи. В [6] не рассматривалось взаимодействие в седловых

точках, что обусловило несколько худшее согласие с экспериментом. (Результаты [5] и [6] близки, если в рамках метода [5] также пренебречь взаимодействием в седловых точках.)

Вместе с тем известные результаты прямого численного моделирования диффузии кислорода с учетом межионных взаимодействий методом Монте-Карло [7] противоречат эксперименту. Рассчитанный в [7] коэффициент диффузии изотопов убывает на 3–5 порядков с ростом x , его энергия активации при этом резко возрастает, а коэффициент химической диффузии кислорода убывает. Отметим, что различия в использованных в [5–7] гамильтонианах взаимодействия ионов кислорода в узлах в области повышенных температур несущественны, и описание с их помощью термодинамических свойств в этой области приводит к близким результатам. Возможной причиной столь резкой зависимости коэффициентов диффузии от стехиометрии по кислороду, найденной в [7], представляется использование в этой работе в рамках метода Монте-Карло схемы Метрополиса. Алгоритм Метрополиса в присутствии сильных корреляций между подвижными частицами может приводить к некорректному описанию процессов миграции, см. далее.

В настоящей работе подвижность μ и коэффициент диффузии изотопов D^* рассчитывались в рамках схем, учитывающих наличие конечного барьера для прыжка как при наличии, так и в отсутствие взаимодействия между мобильными ионами. При расчетах учитывалось как взаимодействие между ионами кислорода в узлах базовых плоскостей $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$, так и взаимодействие прыгающего иона, находящегося в седловой точке, с его окружением. Коэффициент D^* определялся как и обычно в результате расчета среднеквадратических смещений меченых частиц, а для нахождения μ рассчитывался стационарный ток в системе, возникающий при наложении постоянного внешнего электрического поля. Независимый расчет величин D^* и μ позволяет найти

зависимость от температуры и содержания кислорода важной для коррелированного транспорта характеристики — отношения Хэйвена H . Величина $H = D^*/D_0$, где коэффициент самодиффузии D_0 определяется с помощью стандартного соотношения $D_0 = \mu kT/q$ через подвижность (T — температура, q — заряд носителя).

1. Модель

В YBaCuO, как известно, транспорт кислорода осуществляется в базовых плоскостях, содержащих позиции O_1 и O_5 кислорода и Cu_1 меди, а скорость диффузии в перпендикулярном направлении — вдоль оси c — много ниже [1,2]. Узлы O_1 и O_5 образуют решетку, близкую к квадратной. Взаимодействие между ионами кислорода в базовой плоскости сильно и обуславливает эффекты упорядочения ([6–8] и ссылки в них). В актуальной для диффузии области не слишком низких температур¹ устойчивыми, как известно, являются тетрагональная (пространственная группа $P4/mmm$) и орторомбическая (группа $Pmmm$) модификации YBaCuO [8]. Переход от тетра- к ортофазе происходит при упорядочении мобильных ионов кислорода в базовой плоскости с преимущественным заселением узлов типа O_1 (или O_5). Для взаимодействия ионов кислорода в узлах базовой плоскости, как и в [5], примем модель, подобную предложенной в [9]. В [9] в рамках приближения типа Бете–Кичуци парное взаимодействие ближайших соседей O_1 – O_5 учитывалось точно, а следующих (O_1 – O_1 и O_5 – O_5), в приближении среднего поля, без учета анизотропии взаимодействия (рис. 1).

В соответствии с [5,9] энергию взаимодействия U ионов кислорода базовой плоскости запишем в виде

$$U = V_1 \sum_{i,j}^{(1)} n_i n_j + V_2 \sum_{i,j}^{(2)} n_i n_j. \quad (1)$$

Здесь n_i — число заполнения i -го узла, $\sum_{(i,j)}^{(1)}$ и $\sum_{(i,j)}^{(2)}$ —

суммы по парам (i, j) ближайших и вторых соседних узлов соответственно. Константы взаимодействия: $V_1 = 1200$ К — энергия пары ближайших соседей, $V_2 = -580$ К — усредненная энергия взаимодействия вторых соседей, равная полусумме констант прямого взаимодействия и взаимодействия через промежуточный ион меди (рис. 1). В интересующей нас области не слишком низких температур принятое приближение является достаточным и позволяет описать не только эффекты упорядочения, но и с высокой точностью (при учете вклада электронной подсистемы) — термодинамику окисления YBaCuO [9].

¹ При температурах ниже комнатной в $YBa_2Cu_3O_{6+x}$ наблюдаются сверхструктуры, связанные с более сложными типами упорядочения в базовой плоскости.

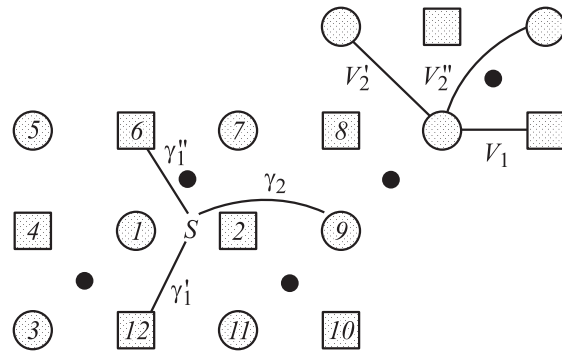


Рис. 1. Схематическое изображение базовой плоскости. Кружки — позиции O_1 кислорода, квадраты — позиции O_5 кислорода, точки — узлы меди Cu_1 . В правом верхнем углу представлено взаимодействие между ионами кислорода в узлах, учитываемое согласно [9]. Константа взаимодействия V_2 равна полусумме констант V_2' и V_2'' , описывающих прямое взаимодействие и взаимодействие через промежуточный ион Cu . В левом нижнем углу изображено взаимодействие иона кислорода, находящегося в седловой точке S (прыжок из узла 1 в 2), с окружением. Константа γ_1 , фигурирующая в (2), есть $\gamma_1 = (\gamma_1' + \gamma_1'')/2$.

Энергию взаимодействия прыгающего иона в седловой точке с его окружением, как и в [5], примем в виде

$$U^s = \gamma_1 \sum_{(i)}^{(1)} n_i + \gamma_2 \sum_{(i)}^{(2)} n_i, \quad (2)$$

где $\sum_{(i)}^{(1)} n_i$ и $\sum_{(i)}^{(2)} n_i$ — суммы по числам заполнения

узлов соответственно первой и второй координационных сфер вокруг седловой точки. Расчеты коэффициентов переноса кислорода в настоящей работе проводятся для различных наборов значений γ : для набора значений, предложенного в [5] (согласно [5], выбор γ вблизи значений $\gamma_1 = V_1/2.5$ и $\gamma_2 = V_1/1.5$ позволяет описать основные особенности диффузии), в отсутствие взаимодействия в седловой точке, а также при промежуточных значениях констант взаимодействия.

2. Методика расчетов

Монте-Карло-моделирование (МК) проводилось для квадратных ячеек узлов $N \times N$ базовой плоскости для $N = 16, 32, 64$ при периодических граничных условиях. Содержание кислорода x изменялось от 0.02 до 1 (заполнение от 1% до половины узлов ячейки) с шагом $\Delta x = 0.02$. Температура изменялась от 600 до 1200 К с шагом 25 К.

В процедуре моделирования можно выделить три этапа.

Вначале производится заполнение пустой ячейки узлов частицами до заданной концентрации. Для этого каждый раз случайным образом выбирается один из пустых узлов и в него помещается частица.

Полученное состояние при отличной от нуля температуре не является стационарным. На втором этапе для приведения системы в стационарное состояние проводится 1000–2000 начальных циклов процедуры МК. Поскольку кинетика релаксации системы к стационарному состоянию в работе не анализируется, для ускорения сходимости процедуры используется схема Метрополиса (см. Приложение). О достижении требуемого состояния можно судить по релаксации соответствующих параметров, например о достижении равновесия — по поведению параметра порядка. В равновесном состоянии рассчитывались различные термодинамические характеристики системы, в частности фазовая диаграмма и теплоемкость.

На последнем этапе после достижения системой стационарного состояния выполняется моделирование МК процессов миграции ионов кислорода. Существенным моментом является использование схемы, в которой принимается во внимание наличие конечного энергетического барьера для прыжка как при наличии, так и в отсутствие взаимодействия между мобильными ионами. Схема одного шага процедуры МК при этом стандартная (см. Приложение).

Коэффициент диффузии изотопа D^* определялся в результате расчета среднеквадратического смещения ансамбля меченых частиц. В изотропном приближении для базовой плоскости (мы рассматриваем высокотемпературную область, см. разд. 1)

$$D^* = \langle X^2 \rangle / 4N_t.$$

Здесь $\langle X^2 \rangle$ — сумма квадратов смещений всех частиц, отнесенная к их числу, а N_t — число шагов процедуры МК. Эффективная энергия активации рассчитывалась методом линейной регрессии путем аппроксимации зависимости $D(T)$ аррениусовской функцией в окрестностях выбранных значений температуры.

Подвижность μ определялась при расчете стационарного тока в системе, возникающего при наложении слабого постоянного электрического поля E . Для нахождения подвижности, определяемой как отношение суммарного смещения всех частиц в выбранном направлении к числу частиц и числу шагов процедуры, необходимо учесть изменение вероятности прыжка p_{ij} между соседними узлами i и j в электрическом поле

$$p_{ij}^E = p_{ij}(1 \pm qEa/2kT),$$

где p_{ij} — вероятность прыжка $i \rightarrow j$ в отсутствие поля, a — расстояние между узлами i и j , направление поля для определенности выбрано параллельным вектору $(\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_i)$.

Коэффициент самодиффузии рассчитывался в помощью известного соотношения $D_0 = \mu kT/q$.

Смещения частиц, из которых составляется среднеквадратическое смещение, входящее в выражения для

кинетических коэффициентов, складываются из одиночных прыжков ионов, реализуемых с различной вероятностью. Для того чтобы в результате получить стационарный вклад от всех вероятностных прыжковых мод, требуется некоторое начальное время. На этом промежутке вычисляемые величины коэффициентов диффузии зависят от числа шагов процедуры, сходясь в итоге к своим предельным значениям. Чтобы надежно исключить эту зависимость и найти не изменяющиеся со временем коэффициенты переноса, мы вычисляли их значения каждые 5000 циклов МК. Продолжительность начального периода, необходимого для сходимости вычисляемых величин, в исследуемой модели составляет 15 000–20 000 шагов процедуры.

3. Результаты и обсуждение

Рассчитанная в исследуемом диапазоне температур и содержания кислорода ($T = 600\text{--}1200\text{ К}$, $x = 0\text{--}1$) фазовая диаграмма согласуется с известными экспериментальными данными. На рис. 2 представлена расчетная кривая, отделяющая упорядоченную орторомбическую фазу от тетрагональной, вместе с экспериментальными результатами различных авторов. На врезке приведена зависимость теплоемкости от температуры при $x = 0.7$ в окрестности фазового перехода. Видно, что переход достаточно размыт по температуре, что связано с конечным размером системы. Соответственно и несколько размыта область обращения в нуль параметра порядка при переходе в упорядоченную фазу. Вследствие этого в работе принималось, что граница, отделяющая тетрагональную фазу от орторомбической, локализована в области значений параметра порядка $0\text{--}0.03$.

На рис. 3,4 представлены зависимости коэффициентов самодиффузии и диффузии изотопа от содержания

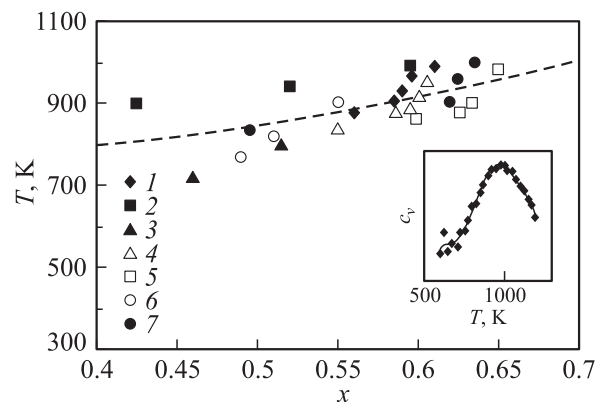


Рис. 2. Фазовая диаграмма $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$ в диапазоне температур (600–1200 К) и содержания кислорода ($0 < x < 1$) в оксиде. Экспериментальные точки: 1 — [10], 2 — [11], 3 — [12], 4 — [13], 5 — [14], 6 — [15], 7 — [16]. На вставке в правом нижнем углу приведена рассчитанная зависимость теплоемкости c_v от температуры в окрестности фазового перехода.

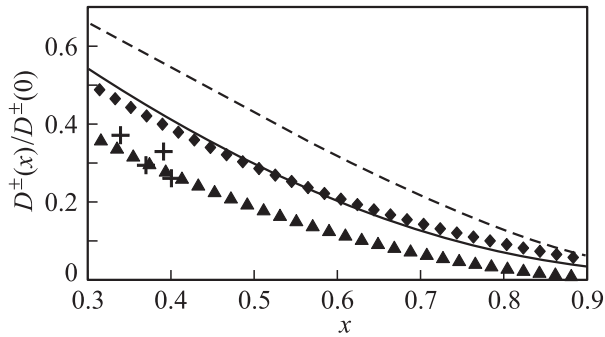


Рис. 3. Зависимость коэффициента диффузии изотопа $D^*(x)$ (отнесенного к $D^*(x \rightarrow 0)$) от содержания кислорода при фиксированных температурах. Треугольниками и ромбами отмечены точки, рассчитанные для значений параметров взаимодействия γ в седловой точке, принятых в [5]: $\gamma_1 = V_1/2.5$ и $\gamma_2 = V_1/1.5$, где V_1 — энергия взаимодействия ближайших соседей. Треугольники — значения $D^*(x)/D^*(x \rightarrow 0)$, рассчитанные при 600°C , ромбы — при 800°C . Зависимость $D^*(x)/D^*(x \rightarrow 0)$ при вдвое меньших значениях γ для $T = 600^\circ\text{C}$ представлена сплошной линией, эта же зависимость в отсутствие взаимодействия в седловой точке и $T = 600^\circ\text{C}$ — штриховой линией. Крестики соответствуют экспериментальным значениям, полученным в [3] (600°C) методом изотопного обмена с анализом газовой фазы.

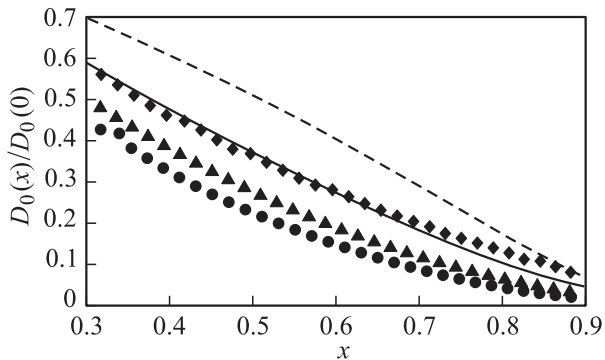


Рис. 4. Зависимость $D_0(x)/D_0(x \rightarrow 0)$ от содержания кислорода при фиксированных температурах. Точки, рассчитанные для значений параметров взаимодействия γ в седловой точке, принятых в [5], отмечены кружками ($T = 500^\circ\text{C}$), треугольниками ($T = 600^\circ\text{C}$), ромбами ($T = 800^\circ\text{C}$). Сплошная линия — зависимость $D_0(x)/D_0(x \rightarrow 0)$ для вдвое меньших значений γ , штриховая — в отсутствие взаимодействия в седловой точке ($T = 600^\circ\text{C}$).

кислорода при различных температурах. Величины D^* и D_0 убывают с увеличением x , изменяясь менее чем на порядок при высоких и в пределах двух порядков при низких температурах. Поведение рассчитанных значений коэффициентов диффузии согласуется с результатами, полученными методом изотопного обмена с анализом газовой фазы [3] (рис. 3). Несколько хуже согласие с результатами метода ВИМС (см. [1,2]) и ссылки в них). Коэффициенты D^* , определенные методом ВИМС при нескольких значениях x , не зависят от содержания

кислорода. Однако если принять во внимание не только точность самого эксперимента, но и ошибку, связанную с определением величины D^* по данным метода при конечной скорости обмена кислорода на границе оксид-газ, расхождение эксперимента и теории можно считать не очень значительным.

На рис. 5 приведена зависимость рассчитанного отношения Хэйвена $H = D^*/D_0$ от содержания кислорода при разных температурах. В пределе малых концентраций, когда корреляциями можно пренебречь, значения коэффициентов D^* и D_0 , как и должно быть в данном случае, совпадают. С ростом x вклад корреляций возрастает и величина H уменьшается. При повышении температуры, когда окружение диффундирующего иона становится более мобильным, величина H растет.

На рис. 6,7 приведены рассчитанные зависимости эффективных энергий активации U_{eff} величин D^* и D_0 от содержания кислорода в $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$. Значения U_{eff} рассчитаны для коэффициентов $D^*(x)$ и $D_0(x)$, отнесенных к величинам $D^*(0)$ и $D_0(0)$ соответственно (полученным численно для диффузии одной частицы). Таким образом, величина эффективной энергии активации U_{eff} отсчитывается от энергии активации в отсутствие корреляций — от величины барьера для одной частицы в решетке.

Как видно из приведенных диаграмм, величина энергии активации U_{eff} возрастает с увеличением x , в основном изменяясь в области орторомбической фазы. Общее изменение во всем интервале концентраций кислорода не превышает ~ 0.5 eV. Отсутствие особенностей U_{eff} в точках фазовых переходов (которые должны существовать и выявляются в рамках аналитической теории [5]) легко понять. Это связано как с обсуждавшейся выше размытостью области перехода в методе МК, так и с тем, что величина U_{eff} определяется через производную от сглаженных зависимостей коэффициентов диффузии.

Рассчитанное возрастание величины U_{eff} согласуется с экспериментальными результатами, полученными методом внутреннего трения [4,17,18]. Так, согласно [17], разность энергий активации U_{act} в орто- и тетрафазе ~ 0.24 eV, а в [18] приводится изменение

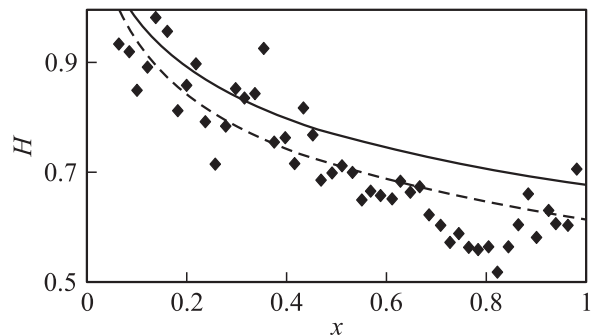


Рис. 5. Отношение Хэйвена в зависимости от содержания кислорода при различных температурах: ромбы и штриховая линия при $T = 500^\circ\text{C}$, сплошная линия — $T = 800^\circ\text{C}$.

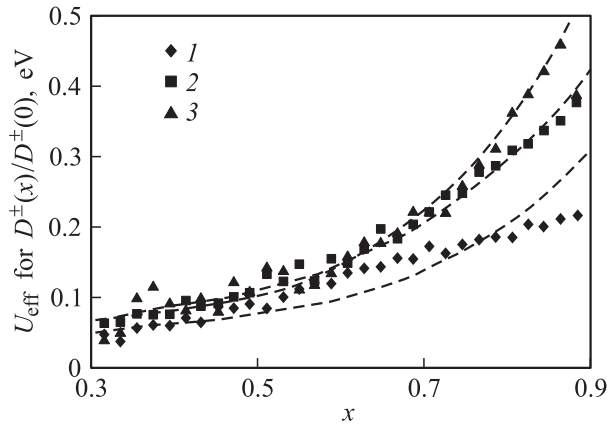


Рис. 6. Зависимость эффективной энергии активации для коэффициента диффузии изотопа D^* , отнесенного к $D^*(x \rightarrow 0)$, от x при постоянной температуре: 1 — 500, 2 — 650, 3 — 800°С. Штриховые линии — сглаженные зависимости $U_{\text{eff}}(x)$, соответствующие рассчитанным точкам.

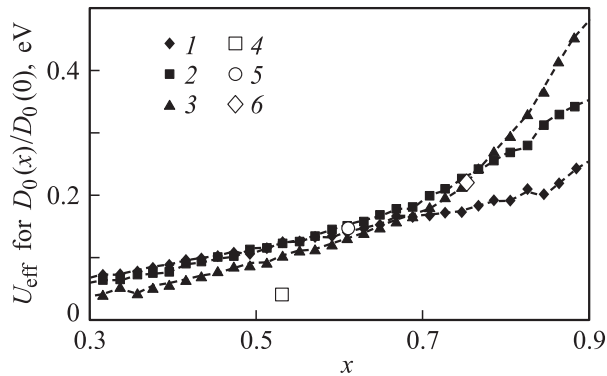


Рис. 7. Зависимость эффективной энергии активации для коэффициента самодиффузии D_0 (отнесенного к $D_0(x \rightarrow 0)$) от содержания кислорода при постоянной температуре: 1 — 500, 2 — 650, 3 — 800°С. Светлыми символами отмечены экспериментальные точки, полученные методом внутреннего трения в [4]: 4 — 650, 5 — 600, 6 — 500°С.

$U_{\text{act}} \sim 0.2 \text{ eV}$ при уменьшении x от значений, близких к 1, до $x \sim 0.5-0.6$.

Достаточно надежными представляются результаты работы [4], в которой измерения проводились на замороженных образцах (отожженных при разных температурах) с постоянной стехиометрией. Не зависящая от стехиометрии часть энергии активации релаксации, определенная в [4], составила 1.03 eV, что практически совпадает с общепринятой величиной энергии активации переноса [1,2]. На рис. 7 приведены экспериментальные значения величины U_{act} , полученные в [4], которые, как видно, хорошо согласуются с результатами наших расчетов.

В заключение остановимся на вопросе о том, чем определяется промежуток физического времени, составляющий один шаг стохастической процедуры, в различных схемах МК. Этот вопрос принципиален, поскольку

время, фигурирующее в расчетах кинетических коэффициентов, исчисляется в шагах процедуры МК. Соответствующий интервал физического времени можно связать со средней частотой повторения случайного события — прыжка частицы через барьер при заданной температуре. В схеме Метрополиса величины барьеров, определяющие вероятность прыжков, задаются искусственным образом (см. Приложение), что, вообще говоря, не должно приводить к адекватному описанию динамики в присутствии взаимодействия, в том числе и для принятой в [7] модели. Продолжительность шага процедуры в этом случае не имеет физического смысла, например все переходы с понижением энергии характеризуются одной вероятностью и соответственно одной величиной барьера. Вместе с тем (рис. 3,4) значения рассчитанных кинетических коэффициентов чувствительны к параметрам взаимодействия и, следовательно, к величине локальных междоузельных барьеров. В используемом алгоритме вероятности прыжков определяются непосредственно параметрами взаимодействия, поэтому длительности шага процедуры МК можно придать конкретный физический смысл. При заданной температуре и параметрам взаимодействия для прыгающего иона согласно принятой модели реализуется конечный набор возможных величин энергетических барьеров. Выберем шкалу времени таким образом, чтобы среднее число повторений в единицу времени события — прыжка иона через барьер минимальной величины (или вероятность этого события в выбранную единицу времени) — равнялось единице

$$p_{ij}^{\text{max}} = \omega \exp(-E_{\text{min}}/kT) = \nu \tau_{\text{МК}} \exp(-E_{\text{min}}/kT) = 1. \quad (3)$$

Здесь ν — обычная, имеющая размерность частоты предэкспонента в вероятности активационного прыжка, ω — она же в единицах измерения времени процедуры МК — $\tau_{\text{МК}}$. Для построения относительных вероятностей событий, необходимых для генерации дискретно-шаговой процедуры МК (см. Приложение), нужно вероятности прыжков через другие барьеры отнести к выбранной (3). Относительные частоты повторения событий при этом не изменяются, а длительность шага процедуры МК равна среднему и наиболее вероятному времени ожидания прыжка частицы через барьер E_{min} при температуре T : $\tau_{\text{МК}} = 1/(\nu \cdot \exp(E_{\text{min}}/kT))$.

Вероятности перехода, выбранные выше для построения случайного процесса в рамках метода МК, соответствует вероятностям перехода в точном основном управляющем уравнении, описывающем изменение распределения частиц по узлам за счет одиночных прыжков [5]. Такой выбор представляется естественным, и можно полагать, что при прочих равных обстоятельствах функция распределения смещений будет близка к решению точного управляющего уравнения.

Полученные результаты показывают, что последовательный учет корреляций между ионами кислорода в базовой плоскости позволяет в рамках метода

МК не только описать термодинамические свойства, но и достичь неплохого согласия с экспериментальными данными по диффузии кислорода в YBaCuO. Для корректного описания диффузии в этом соединении в соответствии с результатами [5] важен учет не только взаимодействия между мобильными ионами в узлах, но и взаимодействия прыгающего иона, находящегося в седловой точке, с его окружением. Существенную роль при моделировании методом МК коррелированного транспорта играет выбор расчетной схемы. С нашей точки зрения, намного лучшее, чем в [7], согласие рассчитанных свойств с результатами экспериментальных и аналитических исследований обусловлено выбором алгоритма, учитывающего наличие конечного барьера для прыжков в решетке в отсутствие взаимодействия между мобильными частицами.

Авторы признательны А.Н. Вараксину и А.Я. Фишману за интерес к работе и полезные обсуждения.

Приложение

Схема цикла процедуры МК.

1) Случайным образом выбирается частица из массива.

2) Случайным образом выбирается одно из четырех направлений возможного прыжка иона в ближайший узел.

3) Вероятность прыжка случайно выбранной частицы, находящейся в узле i , в выбранной на предыдущем шаге узел j равна

$$p_{ij} = (1 - n_j)p_{ij}^0,$$

где n_j — число заполнения узла j , а p_{ij}^0 зависит от способа описания динамики в методе МК.

В схеме Метрополиса принимается

$$p_{ij}^0 = \omega \begin{cases} \exp((U_i - U_j)/kT), & \text{если } U_i < U_j, \\ 1, & \text{если } U_i > U_j. \end{cases}$$

(ω — произвольный коэффициент, не влияющий на баланс, обычно $\omega = 1$).

В методе, учитывающем реальную величину энергетического барьера в седловой точке, вероятность p_{ij}^0 ($p_{ij}^0 \leq 1$) задается естественным для описания прыжковой динамики образом

$$p_{ij}^0 = \omega \exp(-(U_{ij}^s - U_i)/kT).$$

Здесь ω обретает конкретный физический смысл частоты, нормирующей длительность шага МК — см. разд. 3.

4) Процедура (1)–(3) повторяется N_p раз, где N_p — число частиц в ячейке; на этом цикл процедуры МК считается завершенным, и время сдвигается на 1 шаг МК.

Список литературы

- [1] J.L. Routbort, S.R. Rothman. *J. Appl. Phys.* **76**, 5615 (1994).
- [2] J. Claus, G. Borchardt, S. Weber, S. Scherrer. *Zeitschrift fur physicalische chemie* **206**, 49 (1998).
- [3] Э.Х. Курумчин, В.И. Цидильковский, А.Н. Езин, Г.К. Вдовин, И.А. Леонидов. *Сверхпроводимость: физика, химия, техника* **7**, 1065 (1994).
- [4] X.M. Xie, T.G. Chen, Z.L. Wu. *Phys. Rev. B* **40**, 4549 (1989).
- [5] V.I. Tsidilkovski. *Ionics* **4**, 316 (1998).
- [6] J.S. Choi, M. Sarikaya, I.A. Aksay, R. Kikuchi. *Phys. Rev. B* **42**, 4244 (1990).
- [7] E. Salomons, D. de Fontaine. *Phys. Rev. B* **41**, 16 (1990).
- [8] Н.М. Плакида. *Высокотемпературные сверхпроводники. Международная программа образования*. М. (1996). С. 288.
- [9] V.I. Tsidilkovskii, I.A. Leonidov, A.A. Lakhtin, V.A. Mezrin. *Phys. Stat. Sol. (b)* **163**, 231 (1991).
- [10] P. Meuffels, R. Naeven, H. Wenzl. *Physica* **C161**, 539 (1989).
- [11] J.D. Jorgensen, M.A. Beno, D.G. Hinks, L. Soderholm, K.J. Volin, R.L. Hitterman, J.D. Grace, I.K. Schuller, C.U. Segre, K. Zhang, M.S. Kleefisch. *Phys. Rev. B* **36**, 3608 (1987).
- [12] J.D. Jorgensen, H. Shared, D.G. Hinks, B. Dabrowski, B.M. Veal, A.P. Paulikas, L.J. Nowicki, G.W. Crabtree, W.K. Kwok, L.H. Nunes, H. Claus. *Physica* **C153/155**, 578 (1988).
- [13] P. Meuffels, B. Rupp, E. Porschke. *Physica* **C156**, 441 (1988).
- [14] E.D. Specht, C.J. Sparks, A.G. Dhere, J. Brynestad, O.B. Cavin, D.M. Kroeger, H.A. Oye. *Phys. Rev. B* **37**, 7426 (1988).
- [15] P.P. Freitas, T.S. Plaskett. *Phys. Rev. B* **36**, 5723 (1987).
- [16] Y. Kubo, Y. Nakabayashi, J. Tabuchi, T. Yoshitake, A. Ochi, K. Utsumi, H. Igarashi, M. Yonezawa. *Japan. J. Appl. Phys.* **26**, L1888 (1987).
- [17] E. Bonetti, E.G. Campari, S. Mantovani. *Physica* **C196**, 7 (1992).
- [18] Y. Mi, R. Schaller, S. Sathish, W. Benoit. *Phys. Rev. B* **44**, 12575 (1991).