

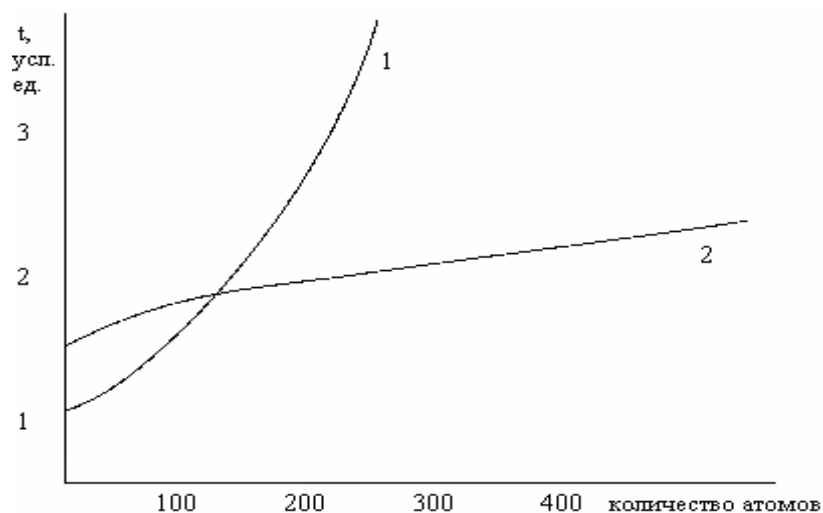
МОДЕЛИРОВАНИЕ ПОВЕРХНОСТНОЙ СЕГРЕГАЦИИ И ДЕСОРБЦИИ ПРИ ПОМОЩИ МЕТОДА МОНТЕ-КАРЛО: ПРОБЛЕМЫ И ПОДХОДЫ К РЕШЕНИЮ

А.В. Гусев, Т.П. Привалова, А.Е. Чудаков

Предложена оптимизация метода погруженного атома, используемого в сочетании с методом Монте-Карло, позволяющая применять его для моделирования поверхностной сегрегации и десорбции.

После создания метода погруженного атома (МПА) [1] этот метод активно использовался в сочетании с методом Монте-Карло для моделирования равновесной сегрегации в разбавленных растворах [2]. Однако известно, что поверхностная сегрегация, особенно вблизи линии ликвидуса, сопровождается интенсивной десорбцией. При этом десорбируются, преимущественно, атомы элементов с высокой капиллярной активностью [3]. Поэтому проблема моделирования совместно протекающих процессов сегрегации и десорбции весьма актуальна. Естественно, что десорбция сопровождается уменьшением числа атомов. По этой причине усреднение по ансамблю вызывает проблему такого рода: для наблюдения длительной по времени десорбции нужно очень большое число атомов, что при конечном времени вычислительного эксперимента означает малое число шагов на атом. Решение этой проблемы можно осуществить в двух направлениях. Во-первых, уменьшить время выполнения одного шага алгоритма Монте-Карло. Во-вторых, восполнение удаленных в ходе десорбции атомов новыми. Оба этих направления были реализованы при модификации существующего алгоритма, использовавшегося для моделирования традиционной для метода МПА равновесной сегрегации в системах Cu–Ag, Cu–Sn и Fe–S [4].

Для увеличения скорости выполнения Монте-Карло алгоритма был использован тот факт, что применяемые в методе МПА значения электронной плотности сравнительно быстро убывают до нуля с ростом расстояния от атома, и перебор всех атомов ансамбля при вычислении общей его энергии сильно замедляет процесс моделирования, особенно на больших ансамблях. Это выражается в том, что вычислительные затраты оказываются пропорциональными квадрату числа атомов в ансамбле. В ходе совершенствования программных компонентов комплекса была поставлена задача добиться линейной зависимости роста затрат от увеличения общего числа атомов, что и было достигнуто (см. рисунок).



**Рост затрат времени при увеличении числа атомов в ячейке:
алгоритм 1 – перебор всех атомов в ячейке; алгоритм 2 – перебор ближайших соседних атомов**

Следующая проблема, возникающая, если принять вышеизложенный алгоритм десорбции, заключается в способе введения нового монослоя взамен десорбированного. В существующей на данный момент программе моделирования он вводится между двумя нижними слоями вычислительной ячейки. Все атомы выше самого нижнего монослоя поднимаются на одинаковую высоту, и образованное пространство заполняется в соответствии со значением объемной концентрации. Здесь параллельно приходится решать задачу по согласованию межатомных расстояний для нового слоя. Все моделирование сплавов на основе меди, которое производилось в последнее время, выполнялось для поверхности (111)Cu, если речь шла о кристаллическом состоянии, и даже поверхность жидкой меди, согласно предыдущим исследованиям, более всего походила на эту плотную упаковку с максимальным числом соседних атомов и минимальной поверхностной энергией. Для поверхности же (111)ГЦК в направлении [111] период составляет три монослоя, а в одном из перпендикулярных направлений – два монослоя. Произвольное размещение атомов нового монослоя без учета этих кристаллографических особенностей приводило сразу к скачку энергии и потому требовало длительной релаксации. Учет этих особенностей позволяет сильно ускорить алгоритм, реализующий десорбцию.

Учет всех вышеизложенных особенностей позволил создать достаточно эффективную программу для моделирования десорбции. Она показывает для поверхности (111) чистой меди неплохое совпадение с экспериментом, выполненным методом температурно-программируемой десорбции (ТПД), то есть экспоненциальный рост потока десорбции атомов меди с увеличением температуры. В настоящее время проводится работа по моделированию десорбции с поверхности двух- и трехкомпонентных сплавов.

Литература

1. Daw M.S., Baskes M.I. Embedded-atom method: Derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals // *Phys. Rev. B.* – 1984. – V.29. – №12. – P. 6443–6453.
2. Liu Y., Wynblatt P. Computer simulation of phase transitions associated with surface miscibility gaps // *Surf. Sci.* – 1990. – V.240. – P. 245–252.
3. Привалова Т.П. Поверхностная сегрегация и десорбция компонентов металлических сплавов при фазовых и структурных превращениях. – Дисс. докт. хим. наук. – Челябинск, ЧГТУ, 1995. – 325 с.
4. Чудаков А.Е. Статистические модели поверхностного слоя сплавов Cu–Ag, Cu–Sn и Fe–Sn. – Дисс. к.ф.-м.н.. – Челябинск, ЮУрГУ, 1998. – 102 с.
5. Гусев А.В., Морозов С.И., Привалова Т.П., Чудаков А.Е. Особенности поверхностной сегрегации атомов Ag и Sn в поверхности (111) сплавов Cu–Ag–Sn // *Изв. ЧНЦ УрО РАН.* – 2003. – № 2 (19).
6. Алексеева Т.О., Гусев А.В., Морозов С.И., Привалова Т.П. Поверхностные фазы в поликристаллическом и жидком состояниях сплавов Cu–Ag–Sn // *Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика, физика, химия».* – 2003. – Вып. 4.– №8(24). – С.30–33.

Поступила в редакцию 27 апреля 2005 г.