КОМБИНИРОВАНИЕ МЕТОДОВ КЛАССИЧЕСКОЙ И УСКОРЕННОЙ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ ПРИ МОДЕЛИРОВАНИИ ОСАЖДЕНИЯ АТОМОВ НА МЕТАЛЛИЧЕСКОЙ ПОВЕРХНОСТИ С НАКОПЛЕНИЕМ ДОЗЫ

Е. В. Дуда1,2), Г. В. Корнич2)

1)ЗГМУ, Запорожье, Украина

2)НУ “Запорожская политехника”, Запорожье, Украина

Молекулярная динамика (МД) является мощным инструментом динамического моделирования на атомном уровне. Однако этот метод ограничен по времени моделируемых процессов. В частности, при осаждении частиц на подложку, промежутки времени между их падением, как правило, слишком велики для МД. Частным решением этой проблемы может быть искусственное сокращение промежутков времени между падением частиц на поверхность, однако этот подход имеет существенные недостатки. Более реалистичным является моделирование подобных процессов методами ускоренной молекулярной динамики – гипердинамики (ГД) /1/ и температурно-ускоренной динамики (ТУД) /2/.

 В данной работе проведено моделирование осаждения атомов переходных металлов на железную подложку с использованием МД и авторских версий методов ускоренной динамики. Показано, что эти методы могут использоваться совместно для моделирования атомных систем, в которых чередуются два типа процессов. Столкновительные процессы взаимодействия налетающей частицы с подложкой моделировались в работе методом МД, тогда как длительные термически активированные процессы вплоть до падения на подложку следующей частицы – методами ГД, ТУД или ТУГД /3/.

ЛИТЕРАТУРА

1. Voter A.F. // Phys. Rev. Let., 1997, 78, №20, 3908.

2. Voter A.F. // J. Chem. Phys., 1997, 106, №11, 4665.

3. Дуда Е.В, Корнич Г.В. // Поверхность. Рент., синхр. и нейтрон. иссл. 2019, № 7, 109.