РАСЧЕТ ПОВЕРХНОСТНОЙ ЭНЕРГИИ СВЯЗИ АТОМОВ В НИКЕЛЬ-ПАЛЛАДИЕВЫХ СПЛАВАХ С ПОМОЩЬЮ МЕТОДА МОЛЕКУЛЯНОЙ ДИНАМИКИ

М.С. Шилов1,\*), А.В. Назаров2), В.С. Черныш1,2)

1) МГУ им. М.В. Ломоносова, физический факультет Москва, Россия

2) МГУ им. М.В. Ломоносова, научно-исследовательский институт ядерной физики имени Д.В.Скобельцына, Москва, Россия

\*) e-mail: shilov.ms18@physics.msu.ru

Поверхностная энергия связи определяется как энергия, которую необходимо приложить для удаления атома с поверхности мишени на бесконечность. Знание этой величины необходима для расчёта коэффициента распыления. Зачастую в качестве приближения поверхностной энергии связи используется энергии когезии. Более того, для многокомпонентных мишеней в качестве энергии связи компонентов используются величины для соответствующих чистых материалов. Всё это приводит к значительным ошибкам при расчётах коэффициентов распыления.

В данной работе с помощью молекулярно-динамического (МД) моделирования была рассчитана поверхностная энергия связи атомов на поверхности сплавов NixPdy. Исследованы зависимости поверхностной энергии связи компонентов сплава от их концентрации. Данные зависимости рассчитаны для различных кристаллографических ориентаций поверхности.

Полученные результаты позволяют как более точно аналитически оценивать парциальные коэффициенты распыления при облучении многокомпонентных мишеней, так и могут быть использованы при моделировании распыления методом бинарных столкновений.