

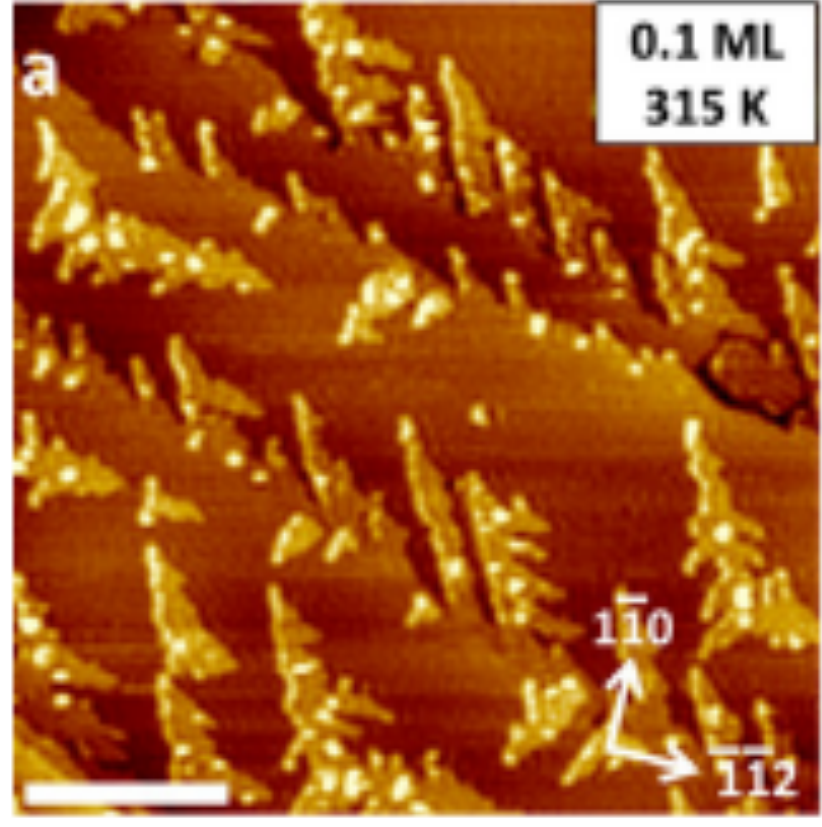
Исследование формирования поверхностного сплава Pt-Cu с помощью метода самообучающегося кинетического Монте Карло

Докукин С.А., Колесников С.В., Салецкий А.М., Клавсюк А.Л.

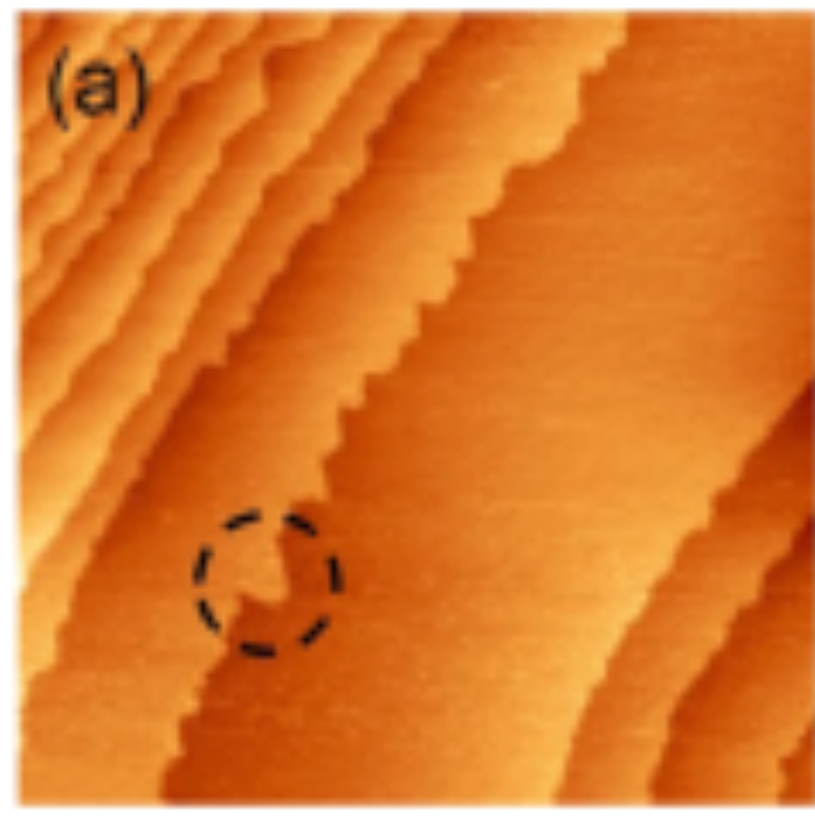
МГУ имени М.В.Ломоносова, Физический Факультет, Москва, Россия

dokukin.sergey@physics.msu.ru

Потенциалы взаимодействия атомов



[1] STM изображение островов и пальцев, основанных на атомах платины, после напыления платины при температуре 315 К. Длина масштабной шкалы 50 нм.



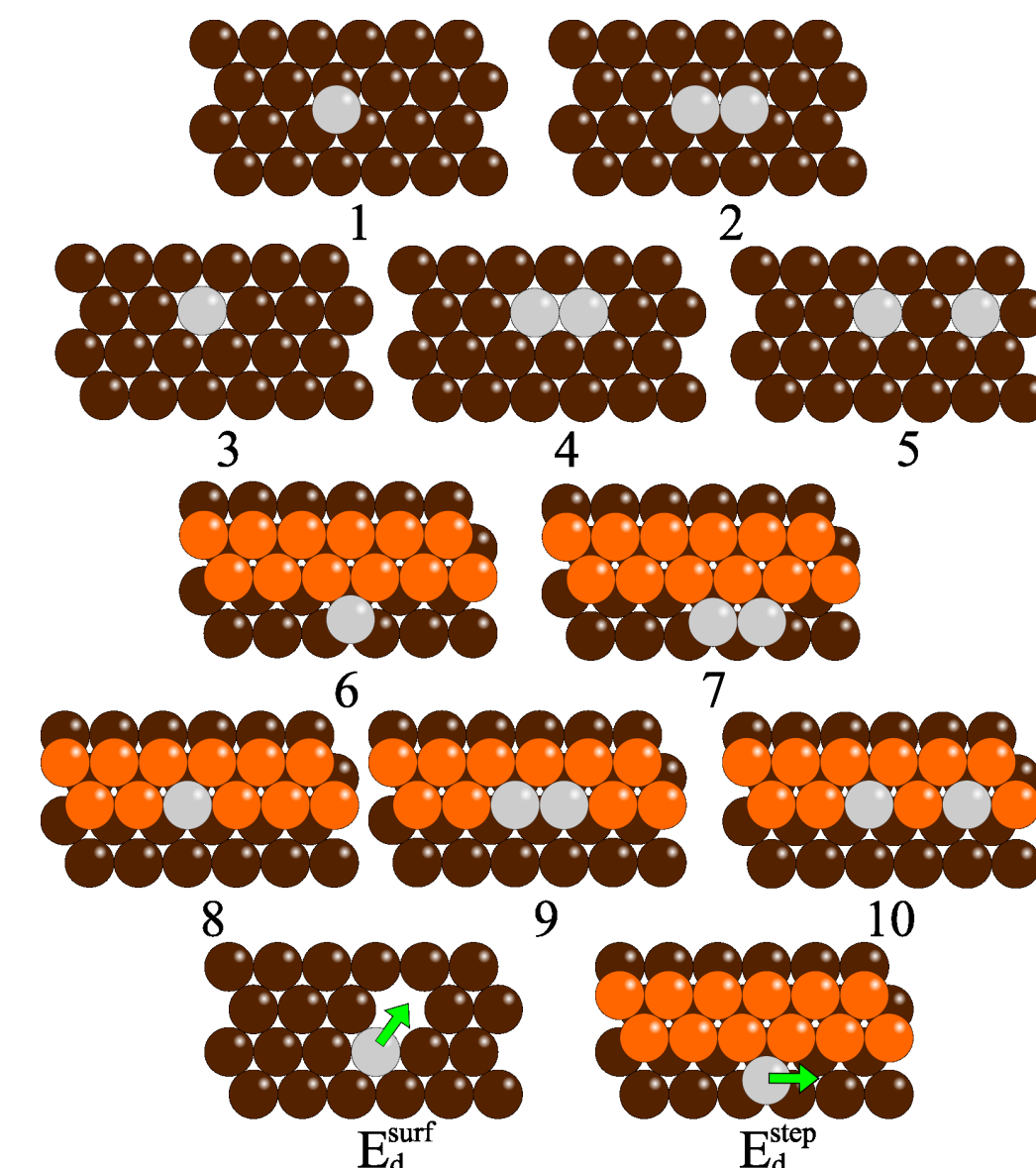
[2] STM изображение пальцев/полос (черный кружок указывает на удлиненную структуру, сформировавшуюся возле края медной ступени) после напыления 0.056 МС платины на поверхность меди (111) при температуре 300 К.

$$E_i^{pot} = \sum_j (E_i^{pot, j} + E_i^{pot, max})$$

$$E_i^{pot, j} = -\sqrt{\sum_j \xi_{\alpha\beta}^2 \exp\left[-2q_{\alpha\beta}\left(\frac{r_{ij}}{r_0^{\alpha\beta}} - 1\right)\right]} \cdot f(r_{ij})$$

$$E_i^{pot, max} = \sum_j \left[A_{\alpha\beta}^1 \left(\frac{r_{ij}}{r_0^{\alpha\beta}} - 1\right) + A_{\alpha\beta}^0 \right] \exp\left[-p_{\alpha\beta}\left(\frac{r_{ij}}{r_0^{\alpha\beta}} - 1\right)\right] \cdot f(r_{ij})$$

$$f(r_{ij}) = \begin{cases} 0 & r_{ij} \leq R_{on} \\ \frac{(R_{off}^2 - r_{ij}^2)(R_{off}^2 - 3R_{on}^2 + 2R_{ij}^2)}{(R_{off}^2 - R_{on}^2)^3} & R_{on} < r_{ij} < R_{off} \\ 1 & r_{ij} \geq R_{off} \end{cases}$$



Конфигурации атомов, для которых вычислялись энергии и диффузионные барьеры при вычислении параметров потенциалов

Параметры межатомных потенциалов

Параметр	Cu-Cu[3]	Cu-Pt	Pt-Pt
A^1 (eV)	0.000	0.049	-0.422
A^0 (eV)	0.085	0.241	0.120
ξ (eV)	1.224	2.093	1.995
p	10.939	9.958	9.560
q	2.280	3.702	4.010
r_0 (Å)	2.556	2.560	2.929

Данные, использованные для вычисления параметров потенциалов, величины, вычисленные с найденными потенциалами и величины, вычисленные с потенциалами из [4]. Постоянная решетки a , энергия связи атомов в объемной структуре E_c и модуль всестороннего сжатия B взяты из [5]. Энергии связи и энергетические барьеры вычислены с помощью программы VASP.

Величина	Конфигурация	Данные	Вычисленное значение	Значение из [4]	
Pt (fcc)	a	3.924 Å	3.925 Å	3.930 Å	
	E_c	5.853 eV	5.853 eV	5.871 eV	
	B	2.88 Mbar	2.89 Mbar	2.86 Mbar	
Cu-Pt	E_{1on}	1	-4.958 eV	-4.835 eV	-3.950 eV
	E_{2on1}	2	-0.335 eV	-0.454 eV	-0.942 eV
	E_{1in}	3	-2.963 eV	-2.939 eV	-2.054 eV
	E_{2in1}	4	0.154 eV	0.125 eV	-0.010 eV
	E_{2in3}	5	0.019 eV	0.055 eV	0.013 eV
	E_{1on}^{st}	6	-5.899 eV	-5.900 eV	-4.730 eV
	E_{2on1}^{st}	7	-0.277 eV	-0.117 eV	-0.554 eV
	E_{1in}^{st}	8	-2.666 eV	-3.024 eV	-1.770 eV
	E_{2in1}^{st}	9	0.152 eV	0.352 eV	0.001 eV
	E_{2in3}^{st}	10	0.015 eV	0.132 eV	-0.002 eV
E_d			0.470 eV	0.457 eV	0.252 eV
E_d^{surf}			1.100 eV	1.060 eV	0.630 eV

Самообучающийся кинетический метод Монте Карло (СОКММК)

Схема выбора события в КММК

$$v = v_0 \exp\left(-\frac{E_d}{kT}\right) \quad v_{tot} = \sum_i v_i$$

$$\Delta t = -\frac{\ln(r_2)}{v_{tot}}$$

r_1, r_2 — случайные числа

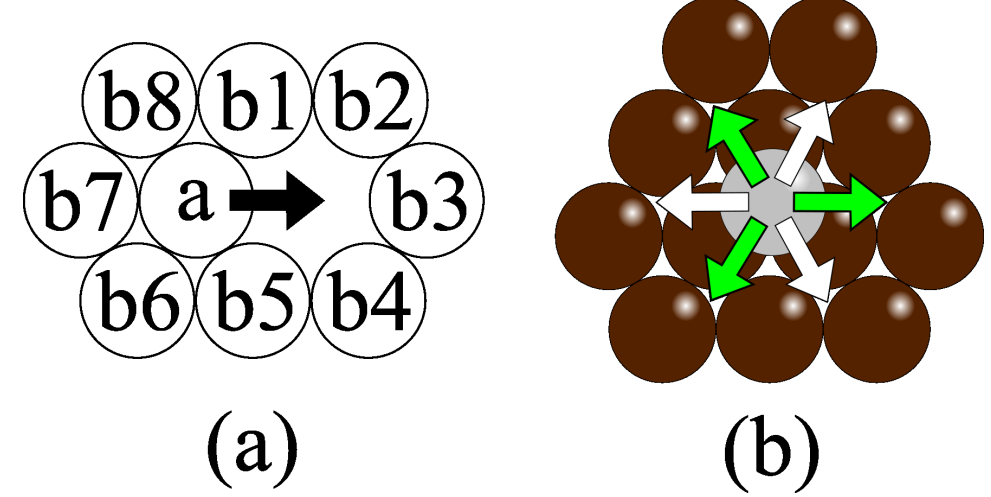
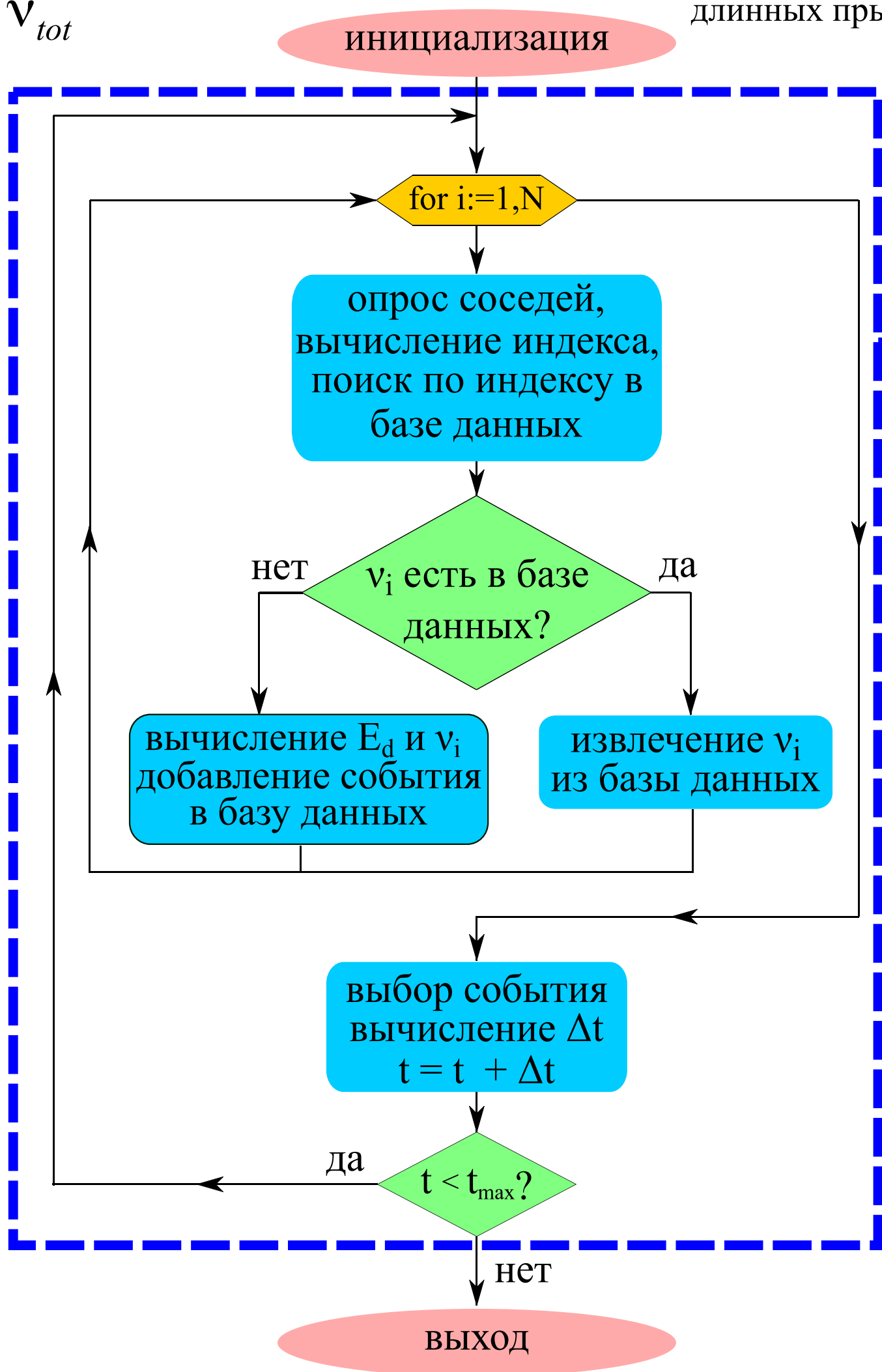
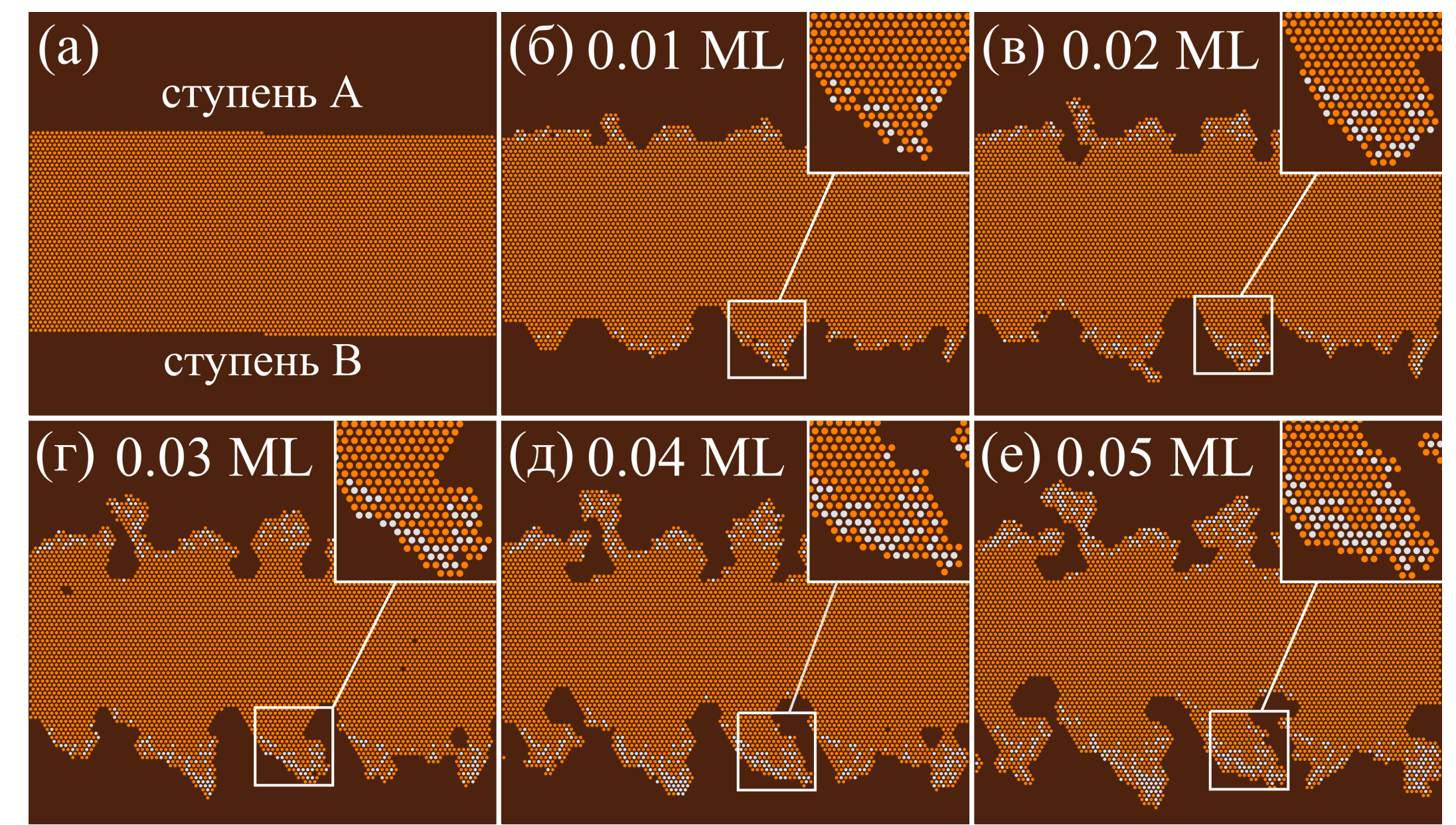
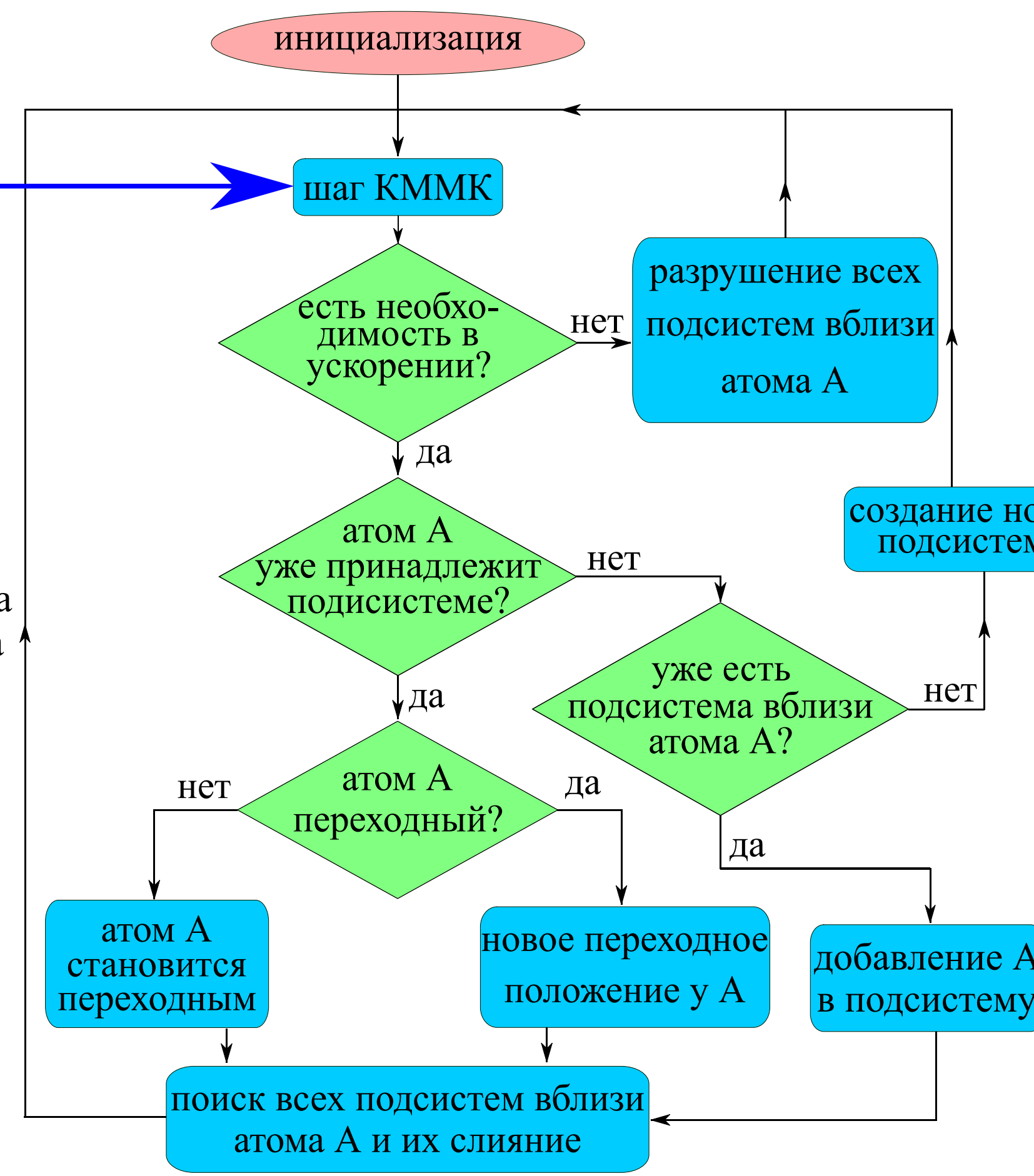


Схема нумерации событий в СОКММК и два типа длинных прыжков на поверхности (111)

Блок-схема алгоритма СОКММК. N — число всех возможных событий.



Блок-схема алгоритма ускорения



Изображения вычислительной ячейки при температуре 315 К и скорости напыления 0.0025 МС/с: (а) начальная конфигурация (б-е) конфигурация после напыления 0.01-0.05 МС платины. Оранжевые и коричневые шарики символизируют медные атомы, серые — атомы платины.

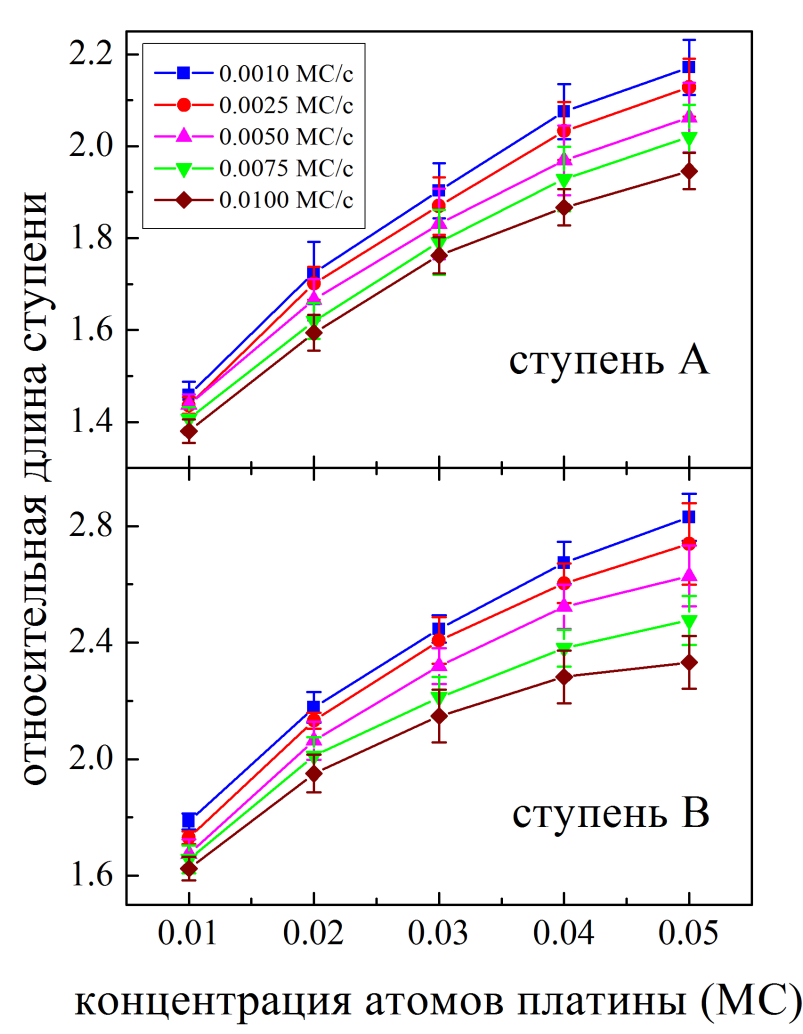


График зависимости относительной длины ступени от концентрации атомов платины при разных скоростях напыления.

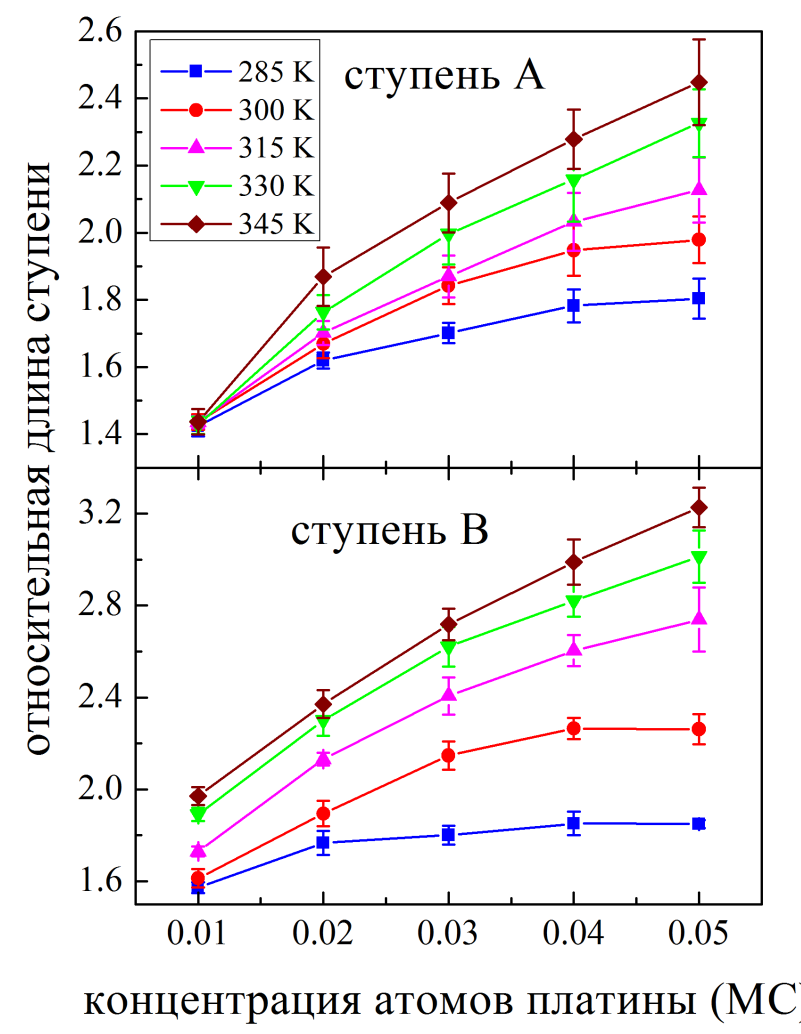


График зависимости относительной длины ступени от концентрации атомов платины при разных температурах.

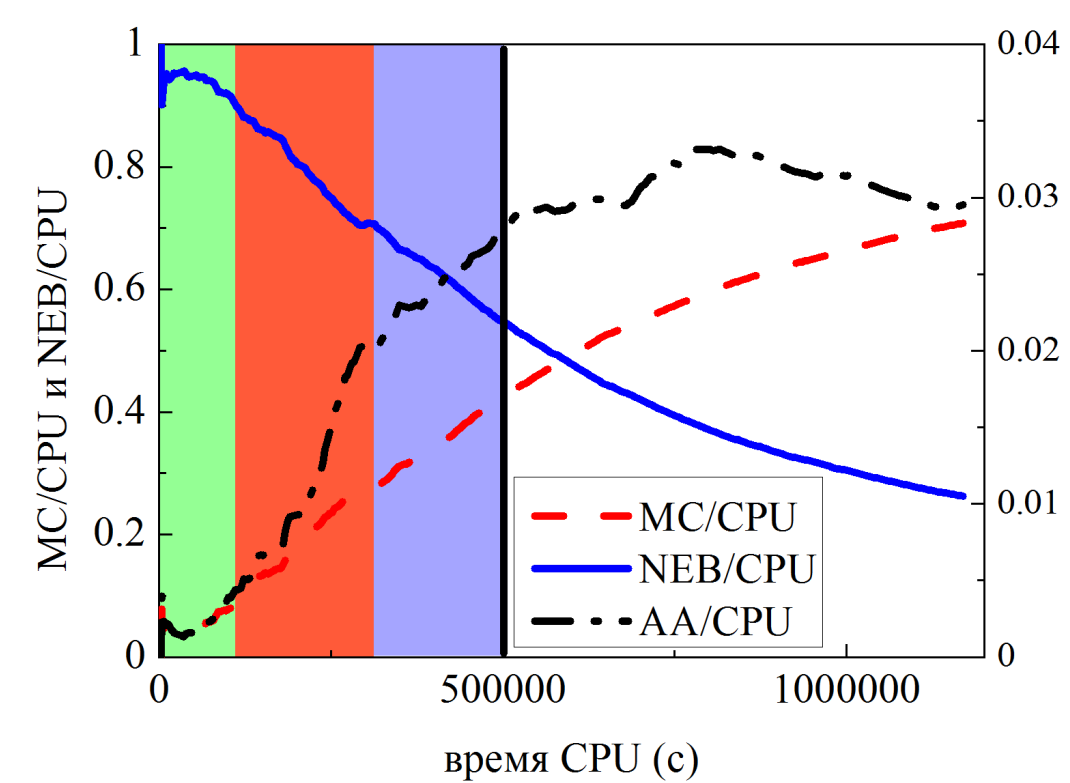


График зависимости относительного времени, затраченного программой на часть, связанную с методом Монте Карло (МС), с вычислением барьеров (NEB) и с алгоритмом ускорения (AA) от общего времени выполнения программы (CPU). Температура моделирования 315 К, скорость напыления атомов платины 0.0025 МС/с.

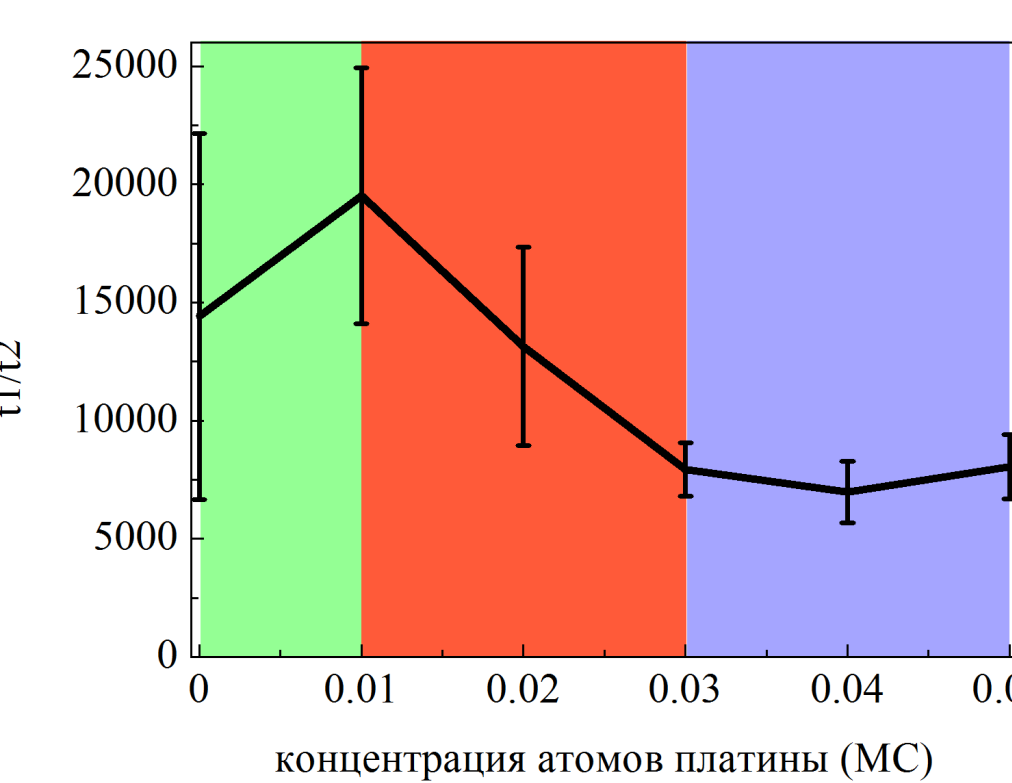


График зависимости отношения времени, затраченного программой на моделирование одного и того же отрезка экспериментального времени без использования алгоритма ускорения (t1) и при его использовании (t2) от концентрации атомов платины. Температура моделирования 315 К, скорость напыления атомов платины 0.0025 МС/с.

Результаты:

1. Вычислены параметры потенциалов для системы Pt/Cu(111)
2. Реализован алгоритм самообучающегося кинетического Монте Карло с ускорением моделирования при попадании системы в энергетические корзины
3. Произведено моделирование формирования сплава Pt/Cu(111)
4. Найдена зависимость длины ступеней от температуры и от скорости напыления атомов платины
5. Произведена оценка эффективности алгоритма ускорения

[1] Lucci F.R., Lawton T.J., Pronschinske A., Sykes E., Charles H. - J. Phys. Chem. C **118**, 2014, стр. 3015-3022
 [2] Soy E., Liang Z., Trenary M. - J. Phys. Chem. C **119**, 2015, стр. 24796-24803
 [3] Negulyaev N. N., Stepanyuk V. S., Bruno P., Diekhöner L., Wahn K., Kern K. - Phys. Rev. B **77**, 2008, стр. 125437
 [4] Garbouj M., Said M., Ramseyer C., Picard F. - Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. **18**, 2010, стр. 085009
 [5] Cleri F., Rosato V. - Phys. Rev. B **48**, 1993, стр. 22-33