УДК 538.931 Дуда Є.В.[1], Корніч Г.В.[2]

МОДЕЛЮВАННЯ ДИФУЗІЇ ВАКАНСІЇ В КРИСТАЛІ МЕТОДАМИ ГІПЕРДИНАМІКИ ТА КЛАСИЧНОЇ МОЛЕКУЛЯРНОЇ ДИНАМІКИ

Метод молекулярної динаміки (МД) є потужним інструментом для моделювання речовини на атомно-дискретному рівні. Але він не дозволяє в загальному випадку моделювати процеси, що представляють собою послідовність так званих рідких подій – термоактивованих переходів атомів. Це пов'язано з тим, що для розгляду таких процесів необхідно моделювати атомні системи на проміжках часу в мілісекунди і більше. Для динамічного моделювання таких процесів А. Вотером (A.F. Voter) були розроблені методи прискореної молекулярної динаміки, а саме методи: гіпердинаміки (ГД) [1], температурно-прискореної динаміки [2] та метод паралельних реплік [3].

Ідея методу гіпердинаміки полягає в тому, що зі зменшенням бар'єрів, що розділяють енергетичні ями, переходи системи між ними будуть відбуватись частіше. Причому відношення частот різних переходів в такому разі будуть такими ж, як відповідні відношення для оригінальної системи, якщо змінений потенціал системи буде задовольняти деяким вимогам. Потенціал, який додається до оригінального потенціалу системи в ГД називається потенціалом зміщення.

В цій роботі для ГД моделювання використовувався потенціал зміщення, запропонований в роботі [4]. Особливість цього потенціалу полягає в тому, що при його застосуванні форма поверхні потенціальної енергії в околі мінімумів потенціальних ям системи не змінюється в порівнянні з оригінальним потенціалом. Ця умова не є обов'язковою в рамках методу ГД, але її виконання має покращити точність результатів моделювання. Для перевірки результатів ГД моделювання, вони порівнювались з відповідними результатами отриманими методом класичної МД, які вважались еталонними в цій роботі. Для того, щоб метод МД міг бути використаний для моделювання дифузії в кристалі, була розглянута проста атомна система та використані високі рівноважні температури: 550 К, 600 К та 650 К.

Система, моделювання якої відбувалося, являла собою кристал алюмінію, в якому знаходилась одинична вакансія. Модельний кристал було стиснуто в кристалографічних напрямках [110] та $[1\bar{1}0]$ на 1% та 0.5%. Така деформація кристалу була зроблена для того, щоб замість 12 рівнозначних переходів вакансії в системі були 3 типи різних, конкуруючих між собою в кожний момент часу, переходів: по 2 переходи в кожному з напрямків стиснення та 8 переходів в інших напрямках. Це було важливим, адже найголовніше, що мають робити методи прискореної молекулярної динаміки, щоб коректно описувати динаміку атомної системи, – вірно відображати відносні частоти різних переходів в системі. Тому система, на якій відбувається перевірка ГД, має відтворювати різні переходи.

[1] пров. фахівець ЦДОТ, Запорізький державний медичний університет
[2] зав. кафедри САОМ, проф., НУ «Запорізька політехніка», д. ф.-м. наук

Порівняння результатів моделювання, отриманих методами МД та ГД показує, що ці методи дають однакові оцінки середнього часу, що протікає між двома послідовними переходами вакансії, та часток переходів для кожного типу переходу. Таким чином ГД дозволяє отримувати коректні результати за значно менший час моделювання. Отримані в роботі прискорення в моделюванні були невеликі – відношення часу, що витрачається на моделювання одного переходу методом ГД до відповідного часу, отриманого методом МД, не перевищувало 102. Однак результати показують, що за температури, наприклад, 300 К це значення може перевищити 106.

З результатів роботи можна зробити наступні висновки:

- Метод гіпердинаміки дозволяє отримувати такі ж результати моделювання атомних систем, які дає метод класичної молекулярної динаміки;
- Гіпердинаміка може давати значне прискорення моделювання у порівнянні з класичною молекулярною динамікою, що дозволяє моделювати цим методом рідкі події та відповідні механізми в атомних системах.

ПЕРЕЛІК ПОСИЛАНЬ

1. Voter A. F. // Physical Review Letters. – 1997. – Vol. 78, no. 20. – P. 3908.

2. Sorensen M.R., Voter A.F. // Journal of Chemical Physics – 2000. – Vol. 112, no. 21. – P. 9599.

3. Voter A. F. // Physical Review B. – 1998. – Vol. 57, no. 22. – R13985.

4. Дуда Є. В., Корніч Г. В. // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. – 2020. – № 11. – С. 84.