

ФИЗИКА ТВЕРДОГО ТЕЛА

УДК 539.213

РАЗУПОРЯДОЧЕНИЕ ПОВЕРХНОСТНЫХ СЛОЕВ АЛЮМИНИЯ

А. А. Кацнельсон, А. Э. Мороз, О. С. Трушин, В. С. Степанюк

(кафедра физики твердого тела)

Проведено молекулярно-динамическое моделирование поверхности Al, параллельной плоскостям (100), с использованием псевдопотенциала Хейне—Абаренкова—Анималу для описания межчастичных взаимодействий. В соответствии с экспериментом показано, что при температуре примерно на 150 К ниже температуры плавления Al должно происходить разупорядочение его поверхностных слоев.

Понимание природы плавления твердых тел на микроскопическом уровне является важной проблемой современной физики конденсированного состояния. Экспериментально было показано, что в процессе плавления большую роль играет поверхность. Так, в работе [1] установлено, что уже при температуре на 150 К ниже температуры плавления у алюминия начинается разупорядочение ближайших к поверхности слоев. Подобное разупорядочение поверхности было обнаружено при компьютерном моделировании поверхности криптона с использованием потенциала Леннарда—Джонса [2], который, как известно, достаточно хорошо описывает инертные газы. В то же время в работе [3] при использовании эмпирического парного потенциала для моделирования Au (111) каких-либо признаков предплавления реконструированной поверхности не было обнаружено. Однако при молекулярно-динамическом (МД) моделировании поверхностей Al (110) и (111) с использованием потенциала *ab initio* [4] было показано, что уже при температуре на 200 К ниже температуры плавления должно происходить разупорядочение поверхностных слоев алюминия.

Эти данные показывают, что для согласия с экспериментом результатов расчетов, сделанных с помощью непервопринципных потенциалов межатомного взаимодействия, потенциалы должны адекватно описывать свойства материалов. Известно, что для простых металлов к таким относятся потенциалы, рассчитанные с помощью метода псевдопотенциала.

В настоящей работе мы представляем результаты МД-моделирования поверхности Al (100) с использованием парного потенциала, рассчитанного в рамках метода псевдопотенциала [5] (псевдопотенциал Хейне—Абаренкова—Анималу).

Для МД-расчета была создана модель, состоящая из 576 атомов Al. Расчетная ячейка представляла собой куб, из которого были удалены 4 слоя, так что образовались свободные поверхности (рис. 1). Куб был залит 8 слоями по 72 атома в каждом слое. На систему накладывались периодические граничные условия. Плотность и полная энергия системы сохранялись (NVE-ансамбль). Уравнения Ньютона интегрировались по времени с использованием численной схемы с перешагиванием. Для избежания значительных вычислительных затрат мы применяли алгоритм Верле [6]. Система выдерживалась при каждой из температур 300, 600 и 800 К в течение 5000 временных шагов.

Для исследования распределения частиц в направлении, перпендикулярном поверхности (z -направление), мы рассчитывали одночастичную функцию распределения (ОФР). Из рис. 2, построенного для Al при 600 К, видно, что ОФР имеет вид, обычный для кристаллического образца. На рис. 3 представлена ОФР Al при 800 К. Видно, что в этом случае наблюдается уменьшение высот пиков ОФР и увеличение их ширины при уменьшении номера слоя. В верхнем слое ($n=1$) наблюдается значительное разупорядочение. Его частицы, сталкиваясь с частицами второго слоя, под влиянием отталкивающей ветви потенциала движутся наружу, где они не взаимодействуют с другими частицами, а удерживаются лишь притягивающей ветвью парного потенциала. Вследствие асимметрии притягивающей и отталкивающей ветвей наблюдается асимметрия ОФР.

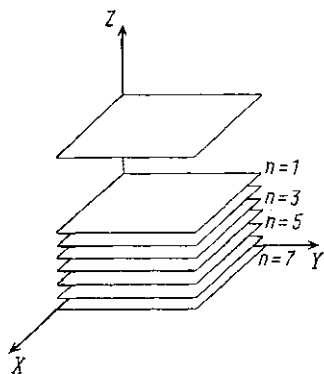


Рис. 1. Расчетная ячейка

Такое разупорядочение поверхностного слоя Al при температуре ниже температуры плавления можно рассматривать как начинающееся плавление верхнего слоя. Эти данные согласуются с результатами экспериментальной работы [1] и показы-

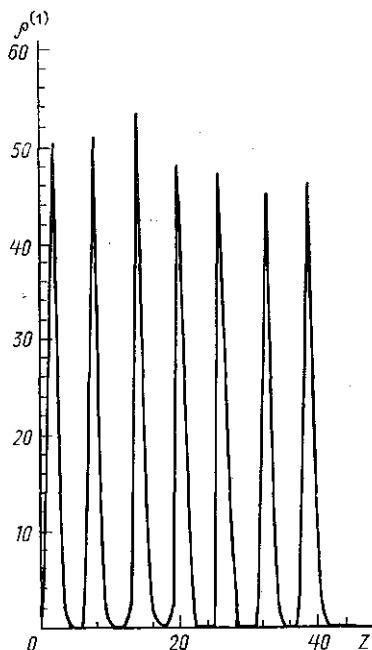


Рис. 2. ОФР (проекция на ось Z) Al (100) при 600 К. При 300 К картина почти такая же

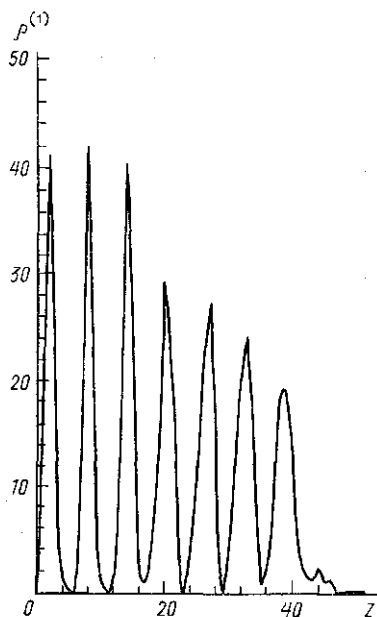


Рис. 3. ОФР (проекция на ось Z) Al (100) при 800 К

вают, что моделирование структуры поверхности Al в рамках метода молекулярной динамики вполне возможно при использовании псевдопотенциала типа Хейне—Абаренкова—Анималу.

ЛИТЕРАТУРА

[1] von Blackenhagen P., Schommers W., Voegelé V.//J. Vac. Sci. Technol. 1987. A5. P. 649. [2] Schommers W.//Int. J. Mod. Phys. 1990. B4. N 4. P. 525. [3] Carnevali P., Ercolessi F., Tasatti E.//Phys. Rev. 1987. B36. P. 6701. [4] Stoltze P., Norskov J. K., Landman U.//Phys. Rev. Lett. 1988. 61. P. 440. [5] Силов В. М. Таблицы формфакторов псевдопотенциала Анималу: Деп. ВИНТИ № 1171-76. М., 1976. [6] Хеерман Д. В. Методы компьютерного эксперимента в теоретической физике. М., 1990.

Поступила в редакцию
24.12.93

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3, ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ. 1994. Т. 35, № 5

УДК 548.74

РАВНОВЕСНАЯ ДИАГРАММА СОСТОЯНИЙ СИСТЕМЫ Pr—Fe НИЖЕ ЭВТЕКТИЧЕСКОЙ ТОЧКИ ПО ДАННЫМ ЭЛЕКТРОННОЙ ДИФРАКЦИИ

А. С. Илюшин, Н. А. Хатанова, Е. А. Рыкова

(кафедра физики твердого тела)

Методом дифракции электронов в отожженных сплавах Pr—25 ат. % Fe и Pr—77 ат. % Fe выявлены равновесные фазы соответственно $\text{Pr}_2\text{Fe}_{17}$ и $\alpha\text{-Pr}$. Достоверность образования фаз подтверждена анализом с использованием структурно-ори-