

# 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, 119991, ГСП-1, Москва,  
Ленинские горы, дом 1, строение 2

Самообучающийся кинетический метод Монте Карло (СОКММК) [1] широко используется для моделирования самоорганизации наноструктур. Он относительно прост в реализации и имеет низкую ресурсозатратность. Однако иногда на энергетической поверхности появляются области с маленькими диффузионными барьерами для прыжков внутри области и высокими для выпрыгивания наружу. Такие области называются энергетическими корзинами. При попадании в энергетическую корзину программа на протяжении огромного числа итераций моделирует перемещение системы внутри энергетической корзины. Моделируемое время при этом не растет и алгоритм становится чрезвычайно неэффективным.

Для ускорения работы СОКММК алгоритмов существуют различные методы [2]. Они различаются по своей точности, ресурсозатратности и сложности. Общей же чертой этих методов является необходимость знания структуры энергетической корзины. В данной работе мы предлагаем свой метод нахождения энергетических корзин. Мы предполагаем, что он будет наиболее полезен для моделирования сложных систем с большим числом степеней свободы.

Чтобы протестировать работу алгоритма был смоделирован процесс образования поверхностного сплава при напылении на ступенчатую поверхность меди (111) атомов платины. Диффузионный барьер для прыжка атома меди возле атома платины, погрузившегося в ступень, крайне низок и возникает необходимость в ускорении алгоритма моделирования. Наши результаты качественно хорошо совпадают с экспериментальной работой, в которой исследовался этот процесс [3].

## Литература.

1. *Trushin O., Karim A., Kara A., Rahman T.S.* Self-Learning Kinetic Monte Carlo Method: Application to Cu(111) — *Phys. Rev. B* **72**, 2005. стр. 115401.
2. *Puchala B., Falk M.L., Garikipati K.*, An energy basin finding algorithm for kinetic Monte Carlo acceleration — *J. Chem. Phys.* **132**, 2010. стр. 134104.
3. *Lucci F.R., Lawton T.J., Pronschinske A., Sykes E., Charles H.*, Atomic Scale Surface Structure of Pt/Cu(111) Surface Alloys — *J. Phys. Chem. C* **118**, 2014. стр. 3015-3022.