серія: фізична «Ядра, частинки, поля», вип. 4 /48/

УДК 539.216:519.876.5

# МОЛЕКУЛЯРНАЯ ДИНАМИКА С КВАНТОВОЙ СТАТИСТИКОЙ ДЛЯ ИССЛЕДО-ВАНИЯ ДИНАМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ МЕТАЛЛОВ

## И.Г. Марченко, И.И. Марченко\*

Национальный научный центр «Харьковский физико-технический институт» ул. Академическая 1г. Харьков 61108, Украина E-mail: <u>march@kipt.kharkov.ua</u> \*HTV «Харьковский политехнический институт» Фрунзе 21, г. Харьков 61145, Украина Поступила в редакцию 2 ноября 2010 г.

В работе описаны физические основы предложенной компьютерной модели для изучения свойств материалов, подчиняющихся квантовой статистике. Исследована теплоемкость слоев меди в объеме материала и на поверхности. Показано, что в отличие от классической молекулярной динамики, предложенный метод правильно описывает поведение теплоемкости при низких температурах. Рассчитана температурная зависимость среднеквадратичных отклонений атомов на поверхности (100). Полученные результаты находятся в хорошем соответствии с имеющимися экспериментальными данными. **КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА:** компьютерное моделирование, квантовая статистика, молекулярная динамика, теплоемкость, фононы.

# MOLECULAR DYNAMIC WITH QUANTUM STATICTICS FOR INVESTIGATION OF DYNAMIC PROPERTIES OF METALS

#### I.G. Marchenko, I.I. Marchenko\*

National Science Center "Kharkov Institute of Physics and Technology"

1, Akademicheskaya St., 61108 Kharkov, Ukraine

\*NTU KharkovPolitechnical Institute

21, Frunze St., 61145 Kharkov, Ukraine

The paper presents the description of a physical basis for investigations into properties of materials submitting to the quantum statistics. The heat capacity of copper layers in the material volume and on its surface is studied. It is shown that, unlike the classical molecular dynamics, the proposed method describes correctly a heat capacity behavior at low temperatures. The temperature dependence of an average squared deviation of atoms on the (100) surface is calculated. The results obtained are in a good agreement with available experimental data.

KEY WORDS: computer simulation, quantum statistics, molecular dynamic, heat capacity, phonons.

#### МОЛЕКУЛЯРНА ДИНАМІКА З КВАНТОВОЮ СТТИСТИКОЮ ДЛЯ ДОСЛІДЖЕННЯ ДИНАМІЧНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ МЕТАЛІВ

#### І.Г Марченко, І.І. Марченко\*

Національний науковй центр «Харківський фізико-технічний інститут»

вул. Академична 1, м. Харків 61108, Україна

\*НТУ «Харківський політехнічний інститут

вул. Фрунзе 21, мг. Харків 61145, Україна

У роботі викладені фізичні основи запропонованої комп'ютерної моделі для вивчення властивостей матеріалів, які підкорюються квантовій статистиці. Досліджена теплоємність шарів міді у об'єму та на поверхні. Показано, що на відміну від класичної молекулярної динаміки, запропонований метод правильно відтворює поведінку теплоємності при низьких температурах. Розрахована температурна залежність амплітуди середнього відхилення атомів на поверхні (100). Отриманні результати гарно співвідносяться з існуючими експериментальними даними.

КЛЮЧОВІ СЛОВА: комп'ютерне моделювання, квантова статистика, молекулярна динаміка, теплоємність, фонони.

Начиная с работы Ферми, Паста и Улама [1] метод молекулярной динамики (МД) получил широкое распространение в физике твердого тела. МД широко использовали для исследования структурных, теплофизических, динамических свойств материалов, как с идеальной структурой, так и с различными дефектами [2-3]. Однако существенным недостатком этого метода является то, что он может описывать только поведение классических систем. Кар и Паринелло [4] в 1985 г. сформулировали ab initio молекулярную динамику, для которой межатомные силы вычислялись исходя из квантовомеханических расчетов. В то же время движение ядер попрежнему описывалось классическими уравнениями движения.

В последние годы ряд исследовательских групп пытается распространить метод МД на системы, подчиняющиеся квантовой статистике [5-7].

Исследование динамических свойств металлов имеет большое фундаментальное и прикладное значение. Знание об изменении свойств акустических колебаний в материалах с дефектами важно для развития целого ряда нанотехнологий, связанных с диффузией и упорядочением кластеров [8,9].

За последние 30 лет фононные спектры в дефектных кристаллах интенсивно исследовались как экспери-

ментально, так и теоретически [10]. Необходимость учета многоатомного взаимодействия, изменения межатомных расстояний и упругих модулей в дефектных областях, привела к широкому применению МД в исследовании динамических свойств металлов. В то же время для большинства металлов значения температуры Дебая находится вблизи комнатных температур, что делает невозможным адекватное описание поведение металлов в области температур ниже 300К с помощью МД, так как при этих температурах важную роль начинает играть квантовая статистика. Для исследования свойств металлов в этой температурной области необходима квантовая молекулярная динамика.

Целью работы было создание программы молекулярной динамики для систем подчиняющихся квантовой статистике (МДКС) и исследование с его помощью динамических свойств меди, как в объеме, так и в приповерхностных слоях.

### ФОРМУЛИРОВКА ОСНОВНЫХ УРАВНЕНИЙ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ С КВАНТО-ВОЙ СТАТИСТИКОЙ

Для описания поведения квантовых частиц находящихся в контакте с тепловым резервуаром используется квантовое уравнение Ланжевена [11-12]. Для квантовой частицы массой M, связанной с тепловым резервуаром с температурой T и движущейся в одномерном потенциале U(x) уравнение имеет следующий вид:

$$M\ddot{\hat{x}} + \int_{-\infty}^{t} \Gamma\left(t - t'\right)\dot{\hat{x}}\left(t'\right)dt' + U'(\hat{x}) = \theta(t), \qquad (1)$$

где *t* - время,  $\hat{x}$ - оператор координаты. Точка сверху обозначает производную по времени. Контакт с тепловым резервуаром описывается двумя членами: оператором случайной силы  $\theta(t)$ , имеющим нулевое среднее значение, и членом описывающим диссипацию  $\Gamma(t)$ . Автокорреляционная (симметричная) функция  $\theta(t)$  удовлетворяет следующему уравнению:

$$\frac{1}{2} \langle \theta(t)\theta(t') + \theta(t)\theta(t') \rangle =$$

$$= \frac{1}{\pi} \int_{0}^{\infty} d\omega \operatorname{Re} \left[ \Gamma(\omega + i0^{+}) \right] \hbar \omega \times \operatorname{coth} \left( \hbar \omega / 2kT \right) \cos \left[ \omega(t - t') \right], \qquad (2)$$

где  $\omega$  - угловая частота,  $\hbar$  - постоянная Планка.

Осуществим переход к квазиклассическому уравнению Ланжевена путем замены операторов на значение величин:

$$M\ddot{x} + \int_{-\infty}^{t} \Gamma\left(t - t'\right) \dot{x}\left(t'\right) dt' + U'(x) = \theta\left(t\right),$$
(3)

где *x* - координата частицы. Полагая  $\Gamma$  не зависящей от частоты, получаем следующее уравнение для автокорреляционной функции  $\theta(t)$ :

$$\left\langle \theta(t)\theta(t')\right\rangle = \frac{1}{\pi} \int_{0}^{\infty} d\omega \left(\frac{1}{2}\hbar\omega + \hbar\omega \left[\exp(\hbar\omega/kT) - 1\right]^{-1}\right) \cos[\omega(t-t')].$$
(4)

Уравнения (3)-(4), являясь классическим по своей форме, описывает квантовое поведение ансамбля частиц, находящегося в контакте с тепловым резервуаром. Член  $\frac{1}{2}\hbar\omega$  описывает нулевые колебания решетки,

которые возникают из-за принципа неопределенности Гейзенберга, вследствие которого энергия системы при 0°К больше минимальной энергии системы.

# МЕТОДЫ ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЙ МДКС И ТЕСТОВЫЕ РАСЧЕТЫ

Для численного решения системы уравнений (3)-(4) необходимо иметь способы генерации цветного шума, удовлетворяющего уравнению (4). В принципе возможно 2 пути: прямая генерация шума по заданной спектральной плотности [13] или аппроксимация цветного шума с помощью других случайных процессов, для которых известны надежные методы их получения.

Если известна спектральная плотность случайного процесса

$$C(\omega) = \int \exp(-i\omega t)c(t)dt, \qquad (5)$$

где  $c(t-t') = \langle f(t)f(t') \rangle$ , то случайную величину в момент времени *t* можно получить путем следующего дискретного Фурье преобразования [14]: Дискретная спектральная плотность  $C(\omega_n)$  получается путем разбиения заданного диапазона частот на  $N = 2^n$  интервалов. Дискретные частоты равны

$$\omega_n = \frac{2\pi n}{N\Delta t},\tag{7}$$

Молекулярная динамика...

а  $\phi_n$  - равномерно распределенные случайные числа. Для воспроизведения спектра необходимо достаточно

большое количество точек N. Разбиение интервала на  $N = 2^n$  интервалов позволяет использовать алгоритм быстрого Фурье преобразования. Несмотря на то, что использование этого алгоритма позволяет существенно уменьшить время, при большом числе частиц в системе такой алгоритм является неэкономичным с точки зрения вычислительных затрат. Альтернативным методом является представление функции спектральной плотности в виде суммы случайных процессов с известным значением  $\langle f(t)f(t') \rangle = c(t-t')$ . В частности в виде суммы процессов Орнштейна-Уленбека, для которого существуют простые и эффективные методы генерации f(t). Спектральная плотность процесса Орнштейна-Уленбека

$$f(t) = \frac{1}{2}\lambda \exp(-\lambda t)$$
(8)

представляет собой Лоренциан:

$$f(\omega) = \frac{\lambda^2}{\lambda^2 + \omega^2}.$$
(9)

Основным достоинством представления случайного процесса с цветным шумом в виде суперпозиции процессов Орнштейна-Уленбека является существование эффективных методов генерации такого шума. Как известно [15], случайная величина Ξ, описываемая процессом Орнштейна-Уленбека, удовлетворяет следующему стохастическому дифференциальным уравнению:

$$\dot{\Xi} = (\theta - \Xi) / t_c \,, \tag{10}$$

где точка сверху обозначает производную по времени,  $t_c$  - время корреляции,  $\theta$  - случайный процесс, описываемый белым шумом. Существуют хорошо разработанные и апробированные алгоритмы решения этого уравнения [16] с вычислительными затратами существенно меньшими чем в спектральном методе.

В работе [7] была предложена простая аппроксимация спектральной функции  $f(\omega)$  одним процессом Орнштейна-Уленбека со временем  $t_c$ , имеющим следующую зависимость от температуры:

$$t_c = \hbar \sqrt{e - 2} / kT \,. \tag{11}$$

Как будет показано ниже, данный выбор хорошо аппроксимирует функцию распределения Бозе-Эйнштейна:

$$E(\omega,T) = \frac{\hbar\omega}{\exp(\hbar\omega/kT) - 1}.$$
(12)

Однако такой выбор не воспроизводит нулевые колебания (первое слагаемое в уравнении (4)). Тем не мене для исследования процессов, не зависящих от энергии основного состояния, в частности изменения теплоемкости, данный выбор является достаточным.

Для проверки адекватности предложенной модели проведем расчеты термализации гармонического осциллятора.

В гармоническом приближении частица находится в потенциальном поле  $U = qX^2$ , и соответственно на нее действует сила F:

$$F = -\frac{dU}{dx} = -2qX = -\Omega^2 MX , \qquad (13)$$

где  $\Omega$  - собственная частота колебаний осциллятора, M - масса частицы.

В соответствии с вышеизложенной методикой, термализация системы в МДКС достигается путем решения следующей системы уравнений:

$$\begin{cases} M\ddot{x} = F - \Gamma \dot{x} + \Xi \\ \dot{\Xi} = (\theta_1 - \Xi)/t_c \end{cases},$$
(14)

где  $\theta_1$  - случайный процесс, описываемый белым шумом, и соответственно, удовлетворяющий следующему уравнению:

$$\langle \theta_1(t)\theta_1(t')\rangle = 2M\Gamma kT\delta(t-t').$$
 (15)

Для численного решения системы стохастических дифференциальных уравнений используется алгоритм, основанный на методе Верле решения уравнений движения. В начальный момент задается начальное значение случайной силы

$$\theta_0 = (2M\Gamma kT\lambda)^{1/2} \times RndG_1, \qquad (16)$$

где *RndG*<sub>1</sub> - случайное Гауссово число. В дальнейшем проводят следующий цикл по времени:

$$F_{n} = -\Omega^{2} X(t_{n})$$

$$\theta_{n} = \theta_{n-1} (1 - \lambda \Delta t) + \lambda (2M\Gamma kT \Delta t)^{1/2} \times RndG_{2}$$

$$V_{n+1/2} = (V_{n-1/2} + (F_{n} + \theta_{n})\Delta t/M) \times (1 - G)$$

$$X_{n+1} = X_{n} + V_{n+1}\Delta t$$
(17)

где  $RndG_2$  - другой набор Гауссовых псевдослучайных чисел. Индекс внизу обозначает значение величины в дискретный момент времени  $n\Delta t$ . Для генерирования белого Гауссова шума использовали алгоритма Бокса-Мюллера [17]. Производилось усреднение по ансамблю с различными начальными условиями, определяемыми уравнением (16).

На рис. 1 маркерами приведен результат численных расчетов системы уравнений (17) для температуры 100К. Сплошной линией приведена аналитическая зависимость средней энергии осциллятора от частоты. Пунктирной линией нанесены значения <E> полученные классическим методом МД. Как видно из рисунка использование метода МДКС позволяет не только качественно воспроизводить поведение гармонического осциллятора, но и получать количественные результаты близкие к теоретическим расчетам. Таким образом, данный метод может использоваться для получения численных результатов для более сложных систем с хорошей точностью.



Рис. 1. Изменение плотности распределения энергии гармонического осциллятора по частотам в зависимости от частоты. Сплошная линия – распределение Бозе-Эйнштейна, штриховая – аппроксимация распределение Бозе-Эйнштейна Лоренцианом соответствующим значением  $t_c$ , маркеры – МДКС расчеты. Температура - 100К. Пунктирной линией нанесены значения <E> полученные классическим методом МД.

# КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ АКУСТИЧЕСКИХ КОЛЕБАНИЙ И ТЕПЛОЕМКОСТИ В ПРИПОВЕРХНОСТНЫХ СЛОЯХ МЕДИ

В качестве примера использования МДКС для решения задач физики твердого тела проведем исследования изменения теплоемкости поверхности меди. Модельным объектом исследования была выбрана медь, так как существует большое количество экспериментальных данных и теоретических расчетов по данному материалу [18-20].

Взаимодействие атомов меди описывалось моделью погруженного атома [21]. В работе использовались функции, описывающие парное межатомное взаимодействие, атомную электронную плотность и функцию внедрения в электронный газ для атомов меди [22]. Мишин и др. показал, что этот потенциал хорошо воспроизводит поверхностную энергию меди для различных плоскостей. Авторы работы [23] с успехом использовали этот потенциал для исследования других физических свойств поверхности, которые оказались очень близки к экспериментально наблюдаемым.

Расчетная ячейка представляла собой прямоугольный параллелепипед, содержавший плоскости нужной

ориентации. В случае поверхности (111) кристаллит содержал 42 плотно упакованных плоскостей типа {111}. Каждая плоскость содержала 2016 атомов. В трех первых плоскостях атомы были фиксированы в положениях соответствующих узлам идеальной решетки. Ось z направлена перпендикулярно поверхности.

Решалось обобщенное уравнение Ланжевена со случайной силой, описываемой цветным коррелированным шумом  $\Xi_n^{\alpha}$ . Соответствующая система обобщенных уравнений движения Ланжевена для атомов с цветным коррелированным шумом  $\Xi_n^{\alpha}$  имела вид:

$$\begin{cases} M \dot{x}_{n}^{\alpha} = F_{n}^{\alpha} - \Gamma M \dot{x}_{n}^{\alpha} + \Xi_{n}^{\alpha} \\ \dot{\Xi}_{n}^{\alpha} = \left(\theta_{n}^{\alpha} - \Xi_{n}^{\alpha}\right)/t_{c} \end{cases},$$
(18)

где  $\theta_n^{\alpha}$  удовлетворяет уравнению (15), вектор  $x_n^{\alpha}$ , определяет  $\alpha$  компоненту координаты x атома n в системе,  $\Gamma = 1/t_r$  - коэффициент диссипации, M - масса атома,  $F_n^{\alpha} = \frac{\partial H}{\partial x_n^{\alpha}}$  - сила, действующая на атом, H - Гамиль-

тониан системы,  $t_r$  - время релаксации системы. Численное интегрирование уравнений движения осуществлялось методом Верле [24]. Шаг по времени составлял =1фс, что позволяло хорошо воспроизводить колебания с максимальной частотой в кристалле меди. Известно, что явные одношаговые методы решения стохастических уравнений в большинстве случаев обладают хорошей сходимостью [25]. Как показали расчеты, численное решение является устойчивым при данном выборе шага, как для традиционной МД Ланжевена с белым шумом, так и для МДКС. Уменьшение временного шага в 2 раза не изменяло результатов тестовых расчетов.

Для генерирования цветного шума использовался алгоритм, предложенный в работе [16].

В классической механике средняя кинетическая энергия каждого атома равна  $\langle E_K \rangle = \frac{3}{2}kT$ . При малых смещениях атомов в решетке колебания можно считать гармоническими и соответственно средняя потенциальная энергия  $\langle E_P \rangle = \langle E_K \rangle$ . Соответственно теплоемкость *C* является константой, не зависящей от температуры, (закон Дюлонга-Пти): C = 3k. Однако, как хорошо известно, закон Дюлонга-Пти справедлив лишь при высоких температурах, а при  $T \to 0$  теплоемкость  $C \to 0$  [26].

На рис. 2 приведены результаты расчета безразмерной теплоемкости  $c = \frac{1}{3Nk} \frac{d < E >}{dT}$ атомных слоев, на-

ходящихся в объеме кристаллита, на плотноупакованной поверхности (111) и слабо упакованной поверхности (110). Величина  $\langle E \rangle$  в вышеприведенной формуле представляет собой усредненную по времени полную энергию слоя состоящего из N атомов.

Данные МДКС расчетов демонстрируют качественно правильное поведение теплоемкости с температурой. Любопытным эффектом является различие в теплоемкости поверхностных и объемных слоев. Из рисунка видно, что теплоемкость поверхностных слоев выше, чем в объеме. При этом плотноупакованная поверхность (111) имеет более низкую величину c, чем поверхность (110). При приближении температуры пленки к температуре Дебая, разница в величине теплоемкости уменьшается и теплоемкость C = 3k как для внутренних, так и для поверхностных атомов.



Рис. 2. Изменение безразмерной теплоемкости слоя атомов меди с температурой. Полые круглые маркеры – объем, квадратные маркеры - поверхность (111), круглые заполненные маркеры – поверхность (110).

Известно, что наночастицы могут изменять свою теплоемкость с температурой [27]. Это обычно связывают с нелинейностью во взаимодействии атомов. Увеличение температуры усиливает данный эффект. Однако, при низких температурах хорошо работает гармоническое приближение. Обнаруженный эффект изменения

теплоемкости поверхностных слоев при низких температурах является следствием различия в плотности фононных состояний в объеме и на поверхности. С понижением температуры, "вымораживание" фононных состояний будет происходить по разному для различных поверхностей. Этот эффект может оказаться особенно важным для наносистем и нанокластеров в которых спектр фононных частот может существенно отличаться от спектра объемного материала.

Рассмотрим, как изменяется плотность фононных состояний  $D(\omega)$  для различных поверхностных слоев.

В классической МД плотность фононных состояний можно найти из автокорреляционной функции скоростей

$$A^{p}(t) = \frac{\left\langle v_{k}^{p}(0)v_{k}^{p}(t)\right\rangle}{\sum_{p}\left\langle v_{k}^{p}(0)v_{k}^{p}(0)\right\rangle}$$
(19)

путем Фурье преобразования [28]. В (19)  $v_k^{\alpha}(t)$  - компоненты скорости атома k в момент времени t. Корреляционная функция вычисляется для каждого вектора поляризации (p = x, y, z). В МДКС можно получить лишь величину  $D(\omega)n(\omega)$ :

$$D(\omega,t)n(\omega)/kT = \lim_{t \to \infty} \int_0^t A^p(t)e^{i\omega t}dt .$$
<sup>(20)</sup>

В случае классической МД в термическом равновесии происходит равнораспределение энергии по степеням свободы, и последняя формула непосредственно дает плотность фононных состояний:

$$D(\omega,t) = \lim_{t \to \infty} \int_0^t A^p(t) e^{i\omega t} dt \,.$$
<sup>(21)</sup>

где  $\omega$  - угловая частота, а  $D(\omega)$  - плотность фононных состояний.

На рис. 3 приведены, рассчитанные методом МД, плотности фононных состояний для приповерхностных слоев меди (100).



Рис. 3. Плотность фононных состояний в приповерхностных слоях меди (100).

Заполненные кружки – поверхностный слой, треугольники – первый приповерхностный слой, полые маркеры – второй приповерхностный слой.

Как видно из рисунка в поверхностном слое возникает низкочастотный пик в плотности фононных состояний в области ~ 3,5 ГГц. Таким образом фононный спектр в области поверхности отличается от объемного. Это "смягчение" фононного спектра вызывает изменение в поведении теплоемкости поверхностных слоев при понижении температуры ниже Дебаевской.

При исследовании температурной зависимости амплитуды колебаний атомов решетки, в отличие от теплоемкости, необходимо учитывать вклад нулевых колебаний. В гармоническом приближении среднеквадратичные смещения колебаний можно найти, если известна плотность фононных состояний  $D(\omega)$  [29]:

$$\left\langle u^{2}\right\rangle = \frac{\hbar}{m} \int_{0}^{\omega_{mx}} \frac{D(\omega)}{\omega} \left(\frac{1}{2}\hbar\omega + \hbar\omega \left[\exp(\hbar\omega/kT) - 1\right]^{-1}\right) d\omega.$$
<sup>(22)</sup>

Используя полученные данные можно в гармоническом приближении непосредственно найти квадрат среднего отклонения поверхностных атомов  $\langle u_z^2 \rangle$ . Температурная зависимость полученной величины приведе-

на на рис. 4 сплошной линией.

Эту же зависимость можно получить непосредственно путем МДКС вычислений. Среднеквадратичное отклонение находят суммированием по атомным слоям расчетной ячейки:

$$\left\langle u_{z}^{2} \right\rangle = \frac{1}{N_{s}} \sum_{N_{s}} \left\langle \left[ r_{z}^{i}(t) - \left\langle r_{z}^{i}(t) \right\rangle \right]^{2} \right\rangle, \tag{23}$$

где  $N_s$  - количество атомов в слое, а скобки  $\langle ... \rangle$  означают усреднение по времени. Суммирование проводится по атомной плоскости Z. Рассчитанные МДКС методом значения  $\langle u_z^2 \rangle$  приведены на рисунке полыми маркерами. Поскольку в МДКС расчетах не учитывается амплитуда нулевых колебаний, то она была добавлена к полученным значениям и вычислена по формуле (19), используя функцию чисел заполнения по частотам для нулевых колебаний  $\frac{1}{2}\hbar\omega$ .



Рис. 4. Изменение среднеквадратичных смещений на поверхности (100) меди.

Полые маркеры – МДКС расчеты, заполненные – экспериментальные данные [30]. Сплошная линия – расчеты в гармоническом приближении по рассчитанной плотности фононных состояний.

На рис. 4 заполненными маркерами нанесены экспериментально измеренные значения  $\langle u_z^2 \rangle$ . Как видно из

рисунка наблюдается хорошее согласие между экспериментальными данными и результатами расчетов.

#### выводы

В работе предложена компьютерная модель для исследования свойств материалов подчиняющихся квантовой статистике. Описаны основные алгоритмы программы молекулярной динамики с цветным шумом. Проведены тестовые расчеты для гармонического осциллятора и найдено хорошее совпадение полученных результатов с аналитическим решением.

Исследована теплоемкость слоев меди в объеме материала и на поверхности. Показано, что в отличие от классической молекулярной динамики, предложенный метод правильно описывает поведение теплоемкости при низких температурах. Результаты вычислений свидетельствуют о том, что теплоемкость поверхностных слоев выше, чем в объеме и зависит от структуры поверхностного слоя.

Рассчитана температурная зависимость квадрата среднего отклонения атомов на поверхности (100) меди. Полученные результаты находятся в хорошем соответствии с экспериментальными данными. Это позволяет использовать предложенную программу для исследования более сложных процессов в твердых телах при температурах ниже Дебаевской. Особенно актуальным является использование МДКС в наносистемах и дефектных кристаллах, где фононные спектры сильно изменяются по сравнению с объемным материалом, а аналитические подходы малоэффективны.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- E. Fermi, J. R. Pasta, and S. M. Ulam, Los Alamos Report No. LA-1940 1955; Collected Works of E. Fermi II (University of Chicago Press, Chicago, IL, 1965), 978.
- 2. Beller J. Radiation effects computer experiments. Nort-Holland Publ., 1981. 881 p.
- 3. Покропивный В.В., Роговой Ю.И., Огородников В.В., Лисенко А.А. Атомистическое моделирование материалов,- К.: Институт проблем материаловедения НАНУ, 2008.- 464 с.
- Car R., Parrinello M. Unified Approach for Molecular Dynamics and Density-Functional Theory // Phys. Rev. Lett.- 1985.- Vol. 55.-P. 2471-2474.

- Dammak H., Chalopin Y., Laroche M., Hayoun M., Greffet J.J. Quantum Thermal Bath for Molecular Dynamics Simulation // Phys. Rev. Lett.- 2009.- Vol. 103. - P. 190601.
- 6. Wang J.-S. Quantum Thermal Transport from Classical Molecular Dynamics // Phys. Rev. Lett.- 2007.- Vol. 99. P. 160601.
- Buyukdagli S., Savin A.V., Hu B. Computation of the temperature dependence of the heat capacity of complex molecular systems using random color noise // Phys. Rev.- 2008.- Vol. E78.- P. 066702.
- 8. Bittner A.M. Clusters on soft matter surfaces // Surface Science Reports. 2006.- Vol. 61.- P. 383-428.
- Kara A., Rahman T. S. Vibrational dynamics and thermodynamics of surfaces and nanostructures //Surface Science Reports.-2005.- Vol. 56.- P. 159–187.
- Bruch L.W., Diehl R.D., Venables J.A. Progress in the measurement and modeling of physisorbed layers // Rev. Mod. Phys.-2007.- Vol. 79. - P. 1381-1454.
- 11. Ford G.W., Lewis J.T., O'Connell R. F. Quantum Langevin equation // Phys. Rev.- 1988.- Vol. A37.- P. 4419-4428.
- Banerjee D., Bag B.C., Banik S.K., Ray D.S. Solution of quantum Langevin equation: Approximations, theoretical and numerical aspects // J. Chem. Phys.- 2004.- Vol. 120.- P. 8960-8972.
- 13. Romero A.H., Sancho J.M. Generation of short and long range temporal correlated noises // Journal of Computational Physics.-1999.- Vol. 156.- P. 1-11.
- 14. Bartosch L. Generation of Colored Noise // International Journal of Modern Physics.- 2001.- Vol. C12, No. 6.- P. 851-855.
- 15. Гардинер К.В. Стохастические методы в естественных науках. М.: Мир, 1995.- 528 с.
- Fox R.F., Gatland I.R., Roy R., Vemuri G. Fast, accurate algorithm for numerical simulation of exponentially correlated colored noise // Phys. Rev.- 1988.- Vol. A38.- P. 5938 – 5940.
- 17. Knuth D.E. The Art of computer programming,- Addison-Wesley, Reading, MA, 1969, Vol. 2.- 654 p.
- Stensgaard I, Feidenhans R., Sørensen J.E. Surface relaxation of Cu(110): An ion scattering investigation // Surf. Sci.- 1983.-Vol. 128, Issues 2-3.-P. 281-293.
- Juarez L. F. Da Silva, Kurt Schroeder, and Stefan Blügel First-principles investigation of the multilayer relaxation of stepped Cu surfaces //Phys. Rev.- 2004.- Vol. B 69.- P. 245411.
- Schneider R., Dürr H., Fauster Th., Dose V. Temperature dependence of the inverse photoemission from copper surfaces // Phys. Rev.- 1990.- Vol. B 42.- P. 1638–1651.
- Daw M.S., Baskes M.J. Embedded-atom method: Derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals//Phys. Rev.- 1984.- Vol. B29.- P. 6443.
- 22. Mishin Yu., Mehl M.J., Papaconstantinopolous D.A., et. al., Structural stability and lattice defects in copper: Ab initio, tightbinding, and embedded-atom calculations // Phys. Rev.- 2001.- Vol. B63.- P. 224106.
- Marinica M.C., Barreteau C., Desjonquères M.C., Spanjaard D. Influence of short-range adatom-adatom interactions on the surface diffusion of Cu on Cu(111) // Phys. Rev.- 2004.- Vol. B70.- P. 075415.
- Verlet L. Computer "Experiments" on Classical Fluids. I. Thermodynamical Properties of Lennard-Jones Molecules // Phys. Rev.- 1967.- Vol. 159.- P. 98 – 103.
- 25. Кузнецов Д.Ф. Стохастические дифференциальные уравнения: теория и практика численного решения.- Санкт-Петербург: Политехнический университет, 2007.- 769 с.
- 26. Киттель Ч. Введение в физику твердого тела.- М.: Физматгиз, 1963.- 696 с.
- 27. Neal C.M., Starace A. K., Jarrold M.F., et. al. Melting of Aluminum Cluster Cations with 31–48 Atoms: Experiment and Theory // J. Phys. Chem.- 2007.- Vol. C111.- P. 17788–17794.
- 28. Papanicolaou N.I., Lagaris I.E., Evangelakis G.A. Modification of phonon spectral densities of the (001) copper surface due to copper adatoms by molecular dynamics simulation // Surf. Sci. Let.- 1995.- Vol. 337.- P. 819-824.
- 29. Косевич А.М. Физическая механика реальных кристаллов.- К.: Наукова думка, 1981.- 328 с.
- Fowler D.E., Barth J.V. Structure and dynamics of the Cu(001) surface investigated by medium-energy ion scattering// Phys. Rev.- 1995.- Vol. B52.- P. 2117–2124.