

## АПРОБАЦИЯ ПОТЕНЦИАЛА ФИННИСА-СИНКЛЕРА В МОДЕЛЯХ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Г.М. Полетаев, М.Д. Старостенков, Ю.В. Пацева (г. Барнаул, Россия)

При компьютерном моделировании процессов, протекающих в металлах и сплавах на атомном уровне, одним из важнейших условий реалистичного моделирования является корректное описание межатомных взаимодействий. Межатомные взаимодействия могут быть заданы с использованием первопринципных, *ab-initio* методов с применением эмпирических и полуэмпирических функций. К сожалению, не во всех случаях в настоящее время удается использовать наиболее точные первопринципные методы, основанные на теории псевдопотенциала, так как они, прежде всего, базируются на идеальной, бездефектной структуре материала. Но при структурно-энергетических превращениях происходит нарушение идеальности, и, как следствие, изменения во взаимодействиях между атомами. Построенные на основе первопринципных методов, функции межатомного взаимодействия должны быть пересчитаны с учетом определенных структурных состояний материала, что в настоящее время является проблемой и сложной технической задачей. В противном случае точность первопринципного подхода теряется и может быть несравнимо меньшей по отношению к использованию простых полуэмпирических потенциальных функций.

Существуют комбинации первопринципного и потенциального подхода, такие как метод функционала электронной плотности, например, потенциал Финниса-Синклера [1, 2]. Достоинством потенциала Финниса-Синклера является его обоснованность с точки зрения электронной теории твердого тела. Потенциальная энергия системы атомов  $U$  представляется как сумма вклада парных взаимодействий атомов  $U_P$  и многочастичного вклада  $U_N$ , отождествляемого с энергией электронов проводимости, [1]:

$$U = U_P + U_N = \frac{1}{2} \sum_i^N \sum_{j, i \neq j}^N \left[ (r_{ij} - c)^2 (c_0 + c_1 r_{ij} + c_2 r_{ij}^2) \right] - A \sum_i^N \sqrt{\sum_{j, i \neq j}^N (r_{ij} - d)^2}, \quad (1)$$

где  $N$  – число атомов;  $r_{ij}$  – расстояние между  $i$ -ым атомом и некоторым  $j$ -ым;  $c$ ,  $c_0$ ,  $c_1$ ,  $c_2$ ,  $d$ ,  $A$  – параметры потенциала, причем  $c$  и

$d$  – радиусы “обрезания” для  $U_P$  и  $U_N$ . Форма потенциала, приведенная выше (1), является формой, предложенной самими создателями этого потенциала [1]. Существуют также другие виды функций  $U_P$  и  $U_N$  [2], при этом, однако, их физический смысл остается тем же. Потенциал Финниса-Синклера является, как считают многие исследователи, хорошим компромиссным вариантом между первопринципным и полуэмпирическим методами.

В настоящей работе потенциал Финниса-Синклера был апробирован в моделях молекулярной динамики. Метод молекулярной динамики является наиболее реалистичным, по сравнению с другими, методом моделирования. Траектории движения атомов в нем описываются дифференциальными уравнениями движения Ньютона. Данный метод позволяет моделировать атомные колебания, температуру, плавление, кристаллизацию, стеклообразование и т.д. В этой связи метод молекулярной динамики наиболее требователен к потенциалам межатомного взаимодействия, поскольку в молекулярно-динамических моделях наиболее остро стоит вопрос стабильности структуры.

Следует отметить, что потенциалы Финниса-Синклера изначально предназначались для статических и стохастических методов моделирования. В первую очередь, это следует из того, что в работах [1, 3] для различных металлов встречаются параметры  $c_0$ ,  $c_1$ ,  $c_2$ , имеющие как соотношения  $c_0 > 0$ ,  $c_1 < 0$ ,  $c_2 > 0$ , так и  $c_0 < 0$ ,  $c_1 > 0$ ,  $c_2 < 0$ . Однако, как выяснилось, в случае  $c_0 < 0$ ,  $c_1 > 0$ ,  $c_2 < 0$  зависимость парной составляющей от расстояния  $U_P(r)$  оказывается “перевернутой” относительно оси  $r$ . На рис.1(а) изображена зависимость энергии связи атомов в ГЦК кристалле Cu от радиуса первой координационной сферы, а также парного  $U_P$  и многочастичного  $U_N$  вкладов, в случае подгонки параметров потенциала с условием  $c_0 < 0$ ,  $c_1 > 0$ ,  $c_2 < 0$ . В результате подгонки были получены радиусы “обрезания”:  $c = 5,8 \text{ \AA}$  (5 координационных сфер) и  $d = 4,42 \text{ \AA}$  (2 координационные сферы). Следует подчеркнуть, что этот график следует воспринимать как зависимость энергии связи и соответствующих вкладов от величины всесторонней деформации.

Как видно из рисунка 1(а), металл, описываемый таким потенциалом, будет нестабилен в моделях молекулярной динамики, – металл будет стремиться к сжатию. Таким образом, при подгонке параметров потенциала Финниса-Синклера (1) должно выполняться условие  $c_0 > 0, c_1 < 0, c_2 > 0$  (рисунок 1, б).

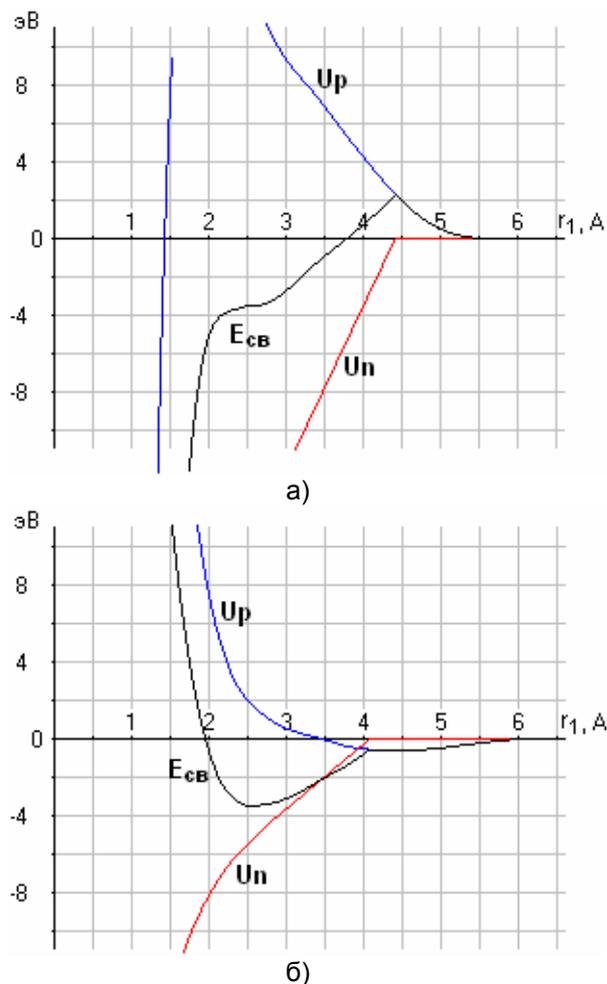


Рисунок 1 – Зависимости энергии связи  $E_{св}$ , парного  $U_p$  и многочастичного  $U_n$  вкладов от радиуса 1 к.сф. для Cu при подгонке параметров потенциала Финниса-Синклера с условием: а)  $c_0 < 0, c_1 > 0, c_2 < 0$ ; б)  $c_0 > 0, c_1 < 0, c_2 > 0$

В молекулярно-динамических моделях при абсолютном нуле температуры трехмерные ГЦК кристаллы Ni, Cu, Al оказались стабильны. Однако при незначительной термоактивации (50 K) происходила перестройка структуры с выделением энергии – температура повышалась на несколько сот градусов. Энергия связи атомов в окончательной структуре (после релаксации и охлаждения) оказывалась меньше, чем минимально возможная для ГЦК структуры. Таким образом, ГЦК струк-

тура оказывается нестабильной при описании межатомных взаимодействий потенциалами Финниса-Синклера. Чтобы разобраться в какую структуру перестраивается металл, были получены диаграммы радиального распределения атомов для Ni и Cu (рисунок 2).

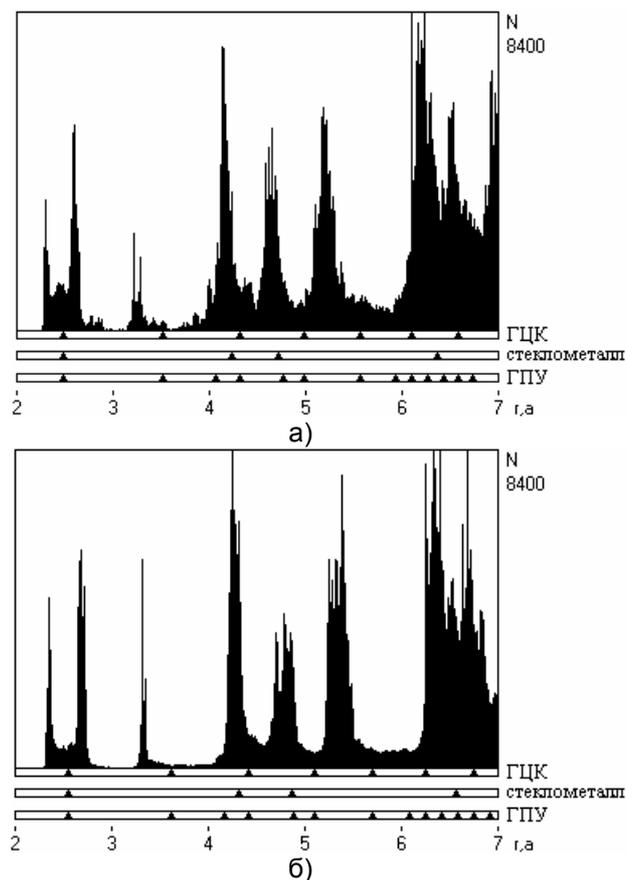


Рисунок 2 – Диаграммы радиального распределения атомов образовавшейся структуры Ni (а) и Cu (б) (треугольниками по оси  $r$  отмечены положения радиусов координационных сфер соответствующих структур)

Как видно из рисунка 2, для конечных структур пики, соответствующие ГЦК, остались, однако смещены в область меньших расстояний, что говорит о сжатом состоянии. В то же время пик, соответствующий первой координационной сфере, “расщеплен” на несколько пиков. Расщепление первого пика связано с тем, что некоторые атомы имеют больше соседей в ближайшем окружении, чем в ГЦК. Для структурно трансформированного Ni было посчитано число ближних соседей (на расстоянии менее  $3 \text{ \AA}$ ): 12 атомов – 81%, 13 – 12%, 14 – 7%. Увеличенное число ближних соседей характерно для квазикристаллов и стеклометаллов [4-6]. Таким образом, в приведенном примере структур-

## АПРОБАЦИЯ ПОТЕНЦИАЛА ФИННИСА-СИНКЛЕРА В МОДЕЛЯХ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

ной трансформации Ni 81% структуры осталось по-прежнему ГЦК, однако 19% трансформировалось в квазикристаллическое [4, 5] с большим, по сравнению с ГЦК, числом ближайших соседей.

На рисунке 3 представлена образовавшаяся структура Ni в расчетном блоке, содержащем 8400 атомов, после релаксации и охлаждения. Судя по рисунку 3, можно сказать, что в данном случае квазикристаллическая структура выступает в роли “прослойки” между деформированными ГЦК зернами. Такая трансформация структуры, по-видимому, вызвана чрезмерной чувствительностью многочастичной составляющей потенциала Финниса-Синклера  $U_N$  к ближайшему атомному соседству.

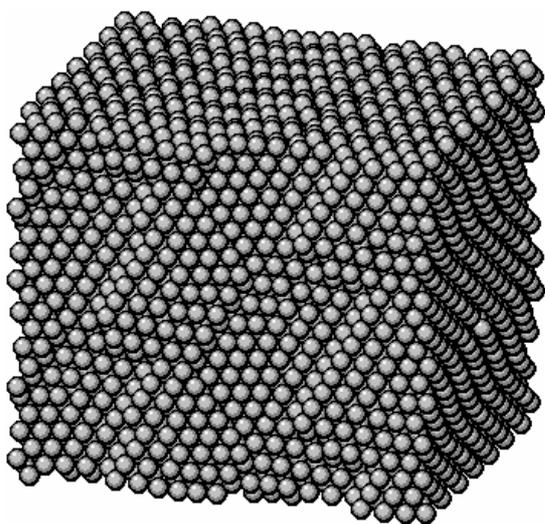


Рисунок 3 – Структура трехмерного Ni, взаимодействия атомов которого описывались потенциалом Финниса-Синклера, после релаксации и охлаждения

Помимо приведенной формы потенциала (1), была апробирована форма, предложенная в работе [2]. Проверка была проведена также при использовании различных радиусов “обрезания” для парной и многочастичной составляющих, а также при подгонке с условием равенства нулю давления Коши. Но во всех случаях результат оказался аналогичным – структура, описываемая такими потенциалами, стремится к увеличению числа ближних соседей даже в ущерб идеальности.

### Заключение

В результате апробации потенциала межатомного взаимодействия Финниса-Синклера было выяснено, что он непригоден в молекулярно-динамических моделях ГЦК

металлов. При использовании этих потенциалов ГЦК структура оказывается нестабильной. При незначительной термоактивации (50 K) происходит трансформация структуры, в результате которой у части атомов увеличивается число ближайших соседей, что характерно для квазикристаллов и стеклометаллов. Было выяснено, что в данном случае квазикристаллическая структура выступает в роли “прослойки” между деформированными ГЦК зернами. По всей видимости, нестабильность ГЦК кристаллов, описываемых потенциалом Финниса-Синклера, вызвана чрезмерной чувствительностью многочастичной составляющей потенциала к ближайшему атомному соседству.

На данный момент наиболее удобными и часто используемыми потенциалами в методе молекулярной динамики являются парные потенциалы. Среди парных потенциалов межатомного взаимодействия хорошо зарекомендовали себя потенциалы Морза, Леннарда-Джонса и т.п. Кроме того, сравнительные расчеты статическим методом [7] показали, что использование многочастичных и парных потенциалов не приводит к качественно различным результатам, особенно в том случае, когда плотность в “ядре” изучаемого дефекта не сильно отличается от таковой в идеальной решетке.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Finnis M.W., Sinclair J.E. A simple empirical N-body potential for transition metals // Philosophical Magazine A, 1984, V.50, №1, p.45-55.
2. Rafii-Tabar H., Sutton A.P. Long-range Finnis-Sinclair potentials for f.c.c. metallic alloys // Philosophical Magazine Letters, 1991, V.63, №4, p.217-224.
3. Горлов Н.В. Моделирование на ЭВМ плоских дефектов в упорядоченных сплавах типа  $A_3B$  и  $A_3B$  (C). Диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук, Томск, 1987.–214 с.
4. Ханнанов Ш.Х. Квазиполикристаллическая модель аморфных металлов // ФММ, 1991.–№3.–С.5-10.
5. Ханнанов Ш.Х. Кристаллическое, квазикристаллическое и аморфное состояния металлов // ФММ.–1993.–Т.75.–№2.–С.26-37.
6. Дорофеева Е.А. О микроструктуре металлического стекла // ФММ.–1987.–Т.63, №2.–С.407-409.
7. Демьянов Б.Ф. Состояние решетки вблизи плоских дефектов в упорядоченных сплавах со сверхструктурой  $L_{12}$ . Диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук, Томск, 1986.–162 с.