

**МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И СВОЙСТВ ОЦК И ГЦК РЕШЕТОК МЕТОДОМ
МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ**

Тхи Ми Хуэ, Цзы Вэньян

Научный руководитель: ассистент каф. ОФ ФТИ, к.ф.-м.н. Н.В. Чистякова

Томский политехнический университет,

Россия, г.Томск, пр. Ленина, 30, 634050

E-mail: chistyakovanv@tpu.ru mailto:rodeo_88@mail.ru

**MOLECULAR DYNAMIC SYMULATION STRUCTURE AND PROPERTIES OF BBC AND FCC
LATTICES**

Tran Thi My Hue, Ji Wenyang

Scientific Supervisor: assistant of General Physics Department, Dr. N.V. Chistyakova

Tomsk Polytechnic University, 634050, Russia, Tomsk, Lenin str., 30

E-mail: chistyakovanv@tpu.ru mailto:rodeo_88@mail.ru

***Abstract.** The atoms interaction mechanism are necessary to know for modeling structure and behavior of the matter. Molecular dynamic simulation is used for describing interaction between atoms in the matter. The total field energy at an arbitrary point in space is determined as the sum of pair interaction energy for describing the energy of the atomic system. The reference structures of bcc (base centered cubic) and fcc (face centered cubic) are obtained and some their properties are calculated.*

Компьютерное моделирование материалов и их свойств активно развивается вместе с информационными технологиями и в настоящее время является важным инструментом для научных исследований. Существует большое количество различных методик моделирования. Каждая из них обладает своими преимуществами и недостатками. Например, описание вещества с помощью уравнений динамики сплошной среды позволяет рассмотреть образца любого размера и провести расчет в любом временном интервале. Однако этот подход не учитывает атомарную структуру вещества. Среди методов, рассматривающих вещество на атомном уровне, можно выделить первопринципные расчеты, метод молекулярной динамики и метод Монте-Карло. В настоящей работе, для описания структуры и поведения вещества выбран метод молекулярной динамики.

Метод молекулярной динамики. В методе молекулярной динамики (ММД) взаимодействие между атомами структуры описывается с помощью второго закона Ньютона:

$$m_i \vec{a}_i = \sum_{j \neq i} \vec{F}_j$$

Сила, действующая на каждый атом, определяется как сумма сил, действующих на этот атом со стороны всех соседних. Сила, действующая на i -й атом со стороны любого соседнего атома определяется с помощью потенциала взаимодействия – специальной функции, которая определяет энергию взаимодействия двух атомов в зависимости от расстояния между ними. Кроме того, для решения уравнения (1) необходимо задать начальную структуру (тип и положение атомов) и граничные условия.

В результате получаем систему дифференциальных уравнений. В настоящее время, существует несколько известных программ, реализующих численное решение таких систем. В настоящей работе используется программа ХМД [1].

Потенциалы взаимодействия. Определение потенциала межатомного взаимодействия для молекулярно- динамических расчетов достаточно сложная задача. Существует несколько подходов к решению этой задачи.

Метод погруженного атома был предложен Доу и Баскесом в 1987 г. [2] и нашел широкое применение для моделирования вещества на атомарном уровне.

МПА основан на теории функционала плотности. Эта теория заключается в следующем. Как известно, все тела состоят из атомов, атомы из ядер и электронов. Именно распределение зарядов ядер и электронов образует электрическое поле, которое отвечает за структуру вещества и процессы происходящие в нем. Самый глубокий уровень описания электронов - волновая функция электрона. Волновая функция зависит от координат в пространстве. Квадрат волновой функции определяет вероятность нахождения электрона в данной области.

Для определения состояния всех электронов в твердом теле, необходимо определить волновую функцию, которая зависит от координат всех ядер и всех электронов твердого тела. Даже микроскопическое твердое тело содержит очень большое количество атомов (примерно) и определить для него такую волновую функцию практически невозможно. Хоэнберг и Кон, в 1964 году предложили более простой способ описания многоэлектронной системы. Они доказали теорему, утверждающую, что состояние электронов в многоэлектронной системе можно описать с помощью функции одной переменной. Эта переменная называется плотность электронного заряда и сама является функцией координат.

В методе МПА энергия одного атома в атомарной структуре определяется выражением:

$$E_i = F(\rho) + \frac{1}{2} \sum_j \varphi_j$$
$$\rho_i = \sum_j \rho_j$$

Здесь F - функция погружения, ρ_i - плотность электронов в узле i , φ - энергия парного взаимодействия.

Таким образом, энергия каждого атома системы определяется как сумма энергий парного взаимодействия данного атома с остальными атомами системы плюс функция погружения. Именно функция погружения отличает МПА от парного потенциала. Эта функция зависит от суммарной электронной плотности всех атомов, кроме одного атома для которого рассчитывается энергия. Таким образом, для нахождения полной энергии атома, необходимо определить три функции - энергию парного взаимодействия, электронную плотность и функцию погружения. Обычно, для каждой задачи эти функции определяются индивидуально. Функции можно получить на основе квантовомеханических расчетов или путем подбора различных аппроксимационных формул. Параметры таких формул подгоняются под экспериментальные данные.

Расчет. Параметры, приведенные в таблице 1, рассчитаны с помощью метода молекулярной статистики. В этом методе расчет уравнений движения в программе молекулярной динамики проводится при нулевых температуре и внешнем давлении. При таких условиях происходит релаксация решетки – образование структуры с минимальной энергией, в которой все атомы занимают равновесные положения

в узлах решетки. В этих условиях программа выдает значение энергии идеальной кристаллической решетки, параметра решетки, энергию решетки, содержащей вакансию и дивакансию. Энергию образования вакансии можно вычислить по формуле

$$E_v = N * (\varepsilon - \varepsilon_0)$$

Где: N- количество атомов в решетке, ε - энергия решетки на атом при отсутствии вакансии, ε_0 - энергия решетки на атом при существовании вакансии. Энергия образования дивакансии определяется по формуле

$$E_{2v} = N * (\varepsilon - \varepsilon_0)$$

Где: N- количество атомов в решетке, ε - энергия решетки на атом при отсутствии вакансии, ε_0 - энергия решетки на атом при существовании вакансии. Результаты расчетов близки по значения к полученным другими методами расчета и экспериментальным данным приведенным в [4].

Таблица 1

Параметры ОЦК и ГЦК структур для Pd, Ni, Cu, Fe

Металл	Энергия решетки на атом, эВ/ат.	Параметр решетки, ангстрем	Энергия образования вакансии, эВ	Энергия образования дивакансии, эВ
Pd	-3.912	3.874	-	-
Ni	-4.450	3.520	1.631	3.036
Cu	-3.534	3.616	1.308	2.468
Fe	-4.967	2.866	1.895	3.607

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Программа XMD [Электронный ресурс].- режим доступа: xmd.sourceforge.net
2. M.S. Daw and M.I. Baskes. Embedded-atom method: Derivation and application to impurities and other defects in metals. Phys Rev B29, 6443 (1984)
3. Sheng H.W, Kramer M. J., Cadien A., Fujita T. and Chen M.W. Highly optimized embedded - atom-method potentials for fourteen fcc metals. Phys. Rev. B.-2011.- 83.- P. 134118
4. Немирович-Данченко Л.Ю., Липницкий А.Г., Кулькова С.Е. Исследование вакансий и их комплексов в металлах с ГЦК-структурой // ФТТ. – 2007.– Т. 49. – Вып. 6. – С. 1026–1032