

DOI: 10.17223/9785946218412/128

**МЕЖАТОМНЫЙ ПОТЕНЦИАЛ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ ДИФФУЗИОННЫХ
ПРОЦЕССОВ В ВОЛЬФРАМЕ**

Липницкий А.Г., Максименко В.Н., Неласов И.В., Картамышев А.И.

Белгородский государственный национальный исследовательский университет, Белгород

В современном материаловедении прогноз выделения вторичных фаз, сегрегации на границах зерен и результатов других диффузионных процессов в металлах и сплавах является важной составляющей разработки новых перспективных металлических материалов. Вместе с тем экспериментальные исследования этих процессов часто ограничены недостаточным пространственно-временным разрешением приборной базы. Компенсировать отмеченные ограничения во многом позволяет использование метода молекулярной динамики на основе полуэмпирических межатомных потенциалов.

К настоящему времени разработан ряд моделей для описания взаимодействий между атомами, с использованием которых построены потенциалы для многих металлических систем. Часть потенциалов воспроизводят параметры решетки, энергии связи, модули упругости и другие характеристики металлов в хорошем согласии с экспериментальными данными. Однако соответствие задачам исследования диффузионных процессов дополнительно налагает специфические требования к качеству межатомных потенциалов, которые должны прогнозировать энергии образования и миграции точечных дефектов, а также температуру плавления и тепловое расширение в хорошем согласии с экспериментальными данными. Поскольку коэффициенты диффузии существенно зависят от гомологической температуры и на них значительное влияние оказывает размерный фактор, корректный учет которого в широком диапазоне температур возможен только при точном воспроизведении теплового расширения.

В докладе представлен краткий анализ существующих методов задания межатомных взаимодействий в контексте приложения к изучению диффузионных процессов в металлах и сплавах. Обсуждаются ограничения современных методов построения потенциалов на основе расчетов в рамках теории функционала электронной плотности (ТФП), которые наследуют ошибки ТФП, связанные с модельным заданием плотности обменно-корреляционной энергии. Отмечается подход к построению межатомных потенциалов [1], позволяющий более точно прогнозировать диффузионные характеристики в сравнении с ТФП, благодаря использованию, одновременно, экспериментальных и ТФП данных для оптимизации параметров потенциалов. В этом случае экспериментальные данные обеспечивают точность прогноза характеристик материалов, а использование ТФП энергий и сил для ряда модельных решеток повышает переносимость потенциалов на атомные конфигурации, не использованные при оптимизации. Ошибки ТФП нивелируются масштабированием межатомных расстояний и энергий ТФП. Достоинством подхода [1] является использование математически точного выражения потенциальной энергии системы атомов как функции их координат в виде суммы многочастичных взаимодействий, которое приведено к практически реализуемому виду с точным заданием трехчастичных взаимодействий и учитывает бесконечный ряд взаимодействий более высокого порядка в рамках центрально-симметричного приближения [1]. Это позволяет обойти влияние моделей химической связи при задании аналитического вида межатомных взаимодействий на достоверность прогноза характеристик материалов с ковалентным и металлическим характером химической связи, к которым относятся ОЦК металлы, включая W.

В работе впервые построен межатомный потенциал для моделирования диффузионных процессов, радиационных повреждений и широкого спектра других процессов в вольфраме, удовлетворяющий всем отмеченным выше требованиям к потенциалам, в рамках подхода [1] Потенциал также может быть использован для построения межатомных потенциалов в сплавах, списки компонентов которых включают вольфрам.

Работа выполнена при поддержке РФФИ, грант № 18-02-00585.