



УДК 537.9 538.911

**НОВЫЕ МНОГОЧАСТИЧНЫЕ ПОТЕНЦИАЛЫ МЕЖАТОМНЫХ  
ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ ДЛЯ МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОГО  
МОДЕЛИРОВАНИЯ ВОЛЬФРАМА****NEW MULTIPARTICLE INTERATOMIC INTERACTION POTENTIALS FOR  
MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION OF TUNGSTEN****В.Н. Савельев, А.Г. Липницкий  
V.N. Saveliev, A.G. Lipnitskii***Белгородский национальный исследовательский университет,  
Россия, 308015, г.Белгород, ул. Победы, 85**Belgorod National Research University,  
85 Pobedy St, Belgorod, 308015, Russia**E-mail: firesnake21@mail.ru*

*Аннотация.* Высокая точность в описании базовых характеристик тугоплавких ОЦК металлов, таких как температура плавления и теплота плавления, с помощью атомистических методов моделирования, требует использования надежных межатомных потенциалов. В работе строятся потенциалы для наиболее тугоплавкого металла – вольфрама, который является основным металлом при разработке материала первой стенки термоядерного реактора. Для построения потенциалов мы используем новый подход, который показал воспроизведение характеристик ОЦК металлов в хорошем согласии с экспериментальными данными на примере ванадия [A.G. Lipnitskii and V.N. Saveliev, *Comp. Mat. Sci.* 121, 67-78 (2016)]. С построенными потенциалами рассчитаны энергии образования междоузельных атомов. Энергия связи, модули упругости, энергии образования и миграции вакансии, тепловое расширение, температура плавления и теплота плавления были также рассчитаны и найдено хорошее согласие с имеющимися экспериментальными данными.

*Resume.* High accuracy in the description of the basic characteristics of the bcc refractory metals such as melting point and heat of fusion, using atomistic simulation methods, requires reliable interatomic potentials. We construct potentials for the most refractory metal - tungsten, which is the base metal in the development of the first wall of a fusion reactor material. We use the new approach to construction of potentials that has shown reproduction of bcc metals characteristics in good agreement with the experimental data on the example of vanadium [A.G. Lipnitskii and V.N. Saveliev, *Comp. Mat. Sci.* 121, 67-78 (2016)]. The formation energies of interstitial atoms were calculated with the potentials. The binding energy, the elastic constants, the formation energy of vacancy and migration energy of vacancy, thermal expansion, melting point and heat of fusion were also calculated and was found good agreement with the experimental data.

*Ключевые слова:* межатомные потенциалы, трех-частичные взаимодействия, вольфрам, собственные точечные дефекты, температура плавления, теплота плавления.

*Keywords:* interatomic potentials, three-particle interactions, tungsten, point defects, melting point, heat of fusion.

**Введение**

Вольфрам является основой для разработки материала первой стенки термоядерного реактора, благодаря его рекордной температуре плавления среди металлов и высокой теплопроводности [1]. Типичными условиями работы вольфрама и его сплавов с V, Re, Ta являются температуры от 1250 К до 1600 К, и высокий поток облучения нейтронами, что приводит к значительному ухудшению рабочих характеристик. Изменение линейных размеров материалов, увеличение температуры хрупко-вязкого перехода и понижение устойчивости к высокотемпературной ползучести остаются серьезными проблемами, сдерживающими применения сплавов на основе вольфрама в качестве

рабочих материалов в термоядерных реакторах. Деградация свойств обусловлена формированием сложной дефектной структуры в условиях радиационного облучения, которое приводит к образованию точечных дефектов вакансионного и межузельного типа, комплексов точечных дефектов, дислокационных петель Франка и микропор [2]. При этом существует проблема изучения процессов формирования и эволюции дефектной структуры под действием облучения, благодаря атомному масштабу этих явлений. В этом случае, широко используются методы компьютерного моделирования на атомном уровне для получения информации о процессах в материалах на уровне детальности, недоступном в экспериментальных подходах [3,4].

Одним из распространенных в настоящее время методов компьютерного моделирования на атомном уровне являются расчеты «из первых принципов», которые основаны на квантово механической теории функционала плотности (ТФП). Однако, компьютерная эффективность первопринципных методов в настоящее время такова, что они позволяют моделировать относительно малые ансамбли атомов (порядка ста атомов). В отличие от «первых принципов», полуэмпирические потенциалы позволяют рассматривать значительно большие атомные системы (до миллиарда атомов) и изучать такие важные физические явления как пластическая деформация, диффузия атомов или радиационные повреждения. В то же время, результаты моделирования с использованием полуэмпирических потенциалов в значительной степени зависят от качества, с которым эти потенциалы описывают конфигурационную энергию - зависимость потенциальной энергии от координат атомов. В англоязычной литературе для этой энергии часто используется термин «the total energy»  $E_{tot}$ , который ввели Дау и Баскес [5]).

Начиная с 1980-х годов, эмпирические потенциалы для металлов преимущественно описываются методом погруженного атома (МПА) в рамках центрально-симметричного приближения ЦСП [5,6], и модифицированным МПА (ММПА) [7-10] основанным на модельном учете угловой зависимости в электронной плотности, предложенной Баскесом [7,11]. Преимуществами МПА являются вычислительная эффективность в расчете межатомных сил и точность в количественном описании характеристик ГЦК металлов [12-14], в которых связи между атомами имеют слабо выраженную ковалентность, поскольку электронная плотность вокруг каждого атома усредняется по 12 соседям. В случае ОЦК d-металлов, использование МПА менее обосновано из-за значительного вклада ковалентной составляющей химической связи в этих металлах [15,16]. Таким образом, учет зависимости конфигурационной энергии  $E_{tot}$  от углов между связями является принципиально необходимым для корректного описания свойств ОЦК d-металлов, что объясняет популярность в последние годы ММПА подхода при описании этих металлов, несмотря на его более высокие вычислительные требования по сравнению с МПА (см. обзор [17]).

Точность описания угловых зависимостей имеет особое значение для моделирования ОЦК-металлов с высокой температурой плавления. В этом случае, даже небольшие относительные ошибки приводят к значительным абсолютным отклонениям расчетной температуры плавления от его экспериментального значения. Так, согласно последним публикациям, в которых строились ММПА потенциалы для тугоплавких ОЦК металлов V, Nb, Mo, Ta, и W, расчетная температура плавления отличается от ее экспериментального значения от 93 К для V до 350 К для W [18]. Кроме того, ММПА потенциалы значительно недооценивают теплоту плавления этих металлов [9,18]. Указанная проблема ММПА потенциалов может быть связана с ограничениями модели химической связи



при задании угловых зависимостей в межатомных взаимодействиях. В нашей недавней работе [19] разработан новый подход к заданию межатомных потенциалов на основе известного разложения конфигурационной энергии  $E_{tot}$  в ряд многочастичных взаимодействий. В новом подходе угловые зависимости в трехчастичных взаимодействиях задаются более точно в сравнении с модельными подходами благодаря использованию метода базисных функций. Этот подход позволил описать ряд характеристик ванадия, включая температуру плавления и теплоту плавления, в хорошем согласии с экспериментальными данными, недостижимым ранее методами компьютерного моделирования на атомном уровне.

В данной работе, мы разрабатываем новые потенциалы межатомных взаимодействий для моделирования вольфрама в рамках развитого нами ранее подхода на примере ванадия [19]. Рассчитывается ряд характеристик вольфрама, включая свойства точечных дефектов и тепловые характеристики, для обоснования корректности новых потенциалов в решении задач исследования дефектной структуры и механизмов ее эволюции, связанных с проблемой разработки перспективных материалов для термоядерной энергетики на основе вольфрама.

### Метод

В общем виде разложение конфигурационной энергии  $E_{tot}$  для системы из  $N$  атомов задается выражением:

$$E_{tot} = \sum_{i<j}^N V_2(ij) + \sum_{i<j<k}^N V_3(ijk) + \sum_{i<j<k<l}^N V_4(ijkl) + \dots, \quad (1)$$

где  $E_{tot}$  - полная энергия системы  $N$  взаимодействующих атомов относительно энергии  $N$  свободных атомов, члены  $V_2(ij), V_3(ijk), V_4(ijkl), \dots$  - определяют энергии  $n$ -частичных взаимодействий как функции положения атомов [20,21]. Индексы  $i, j, k, l$  обозначают положения атомов. Выражение (1) справедливо для конечной суммы  $N$  взаимодействующих атомов. В работе [19] было показано, что в методе фазисных функций для трехчастичных взаимодействий и в рамках ЦСП для многочастичных взаимодействий более высокого порядка выражение (1) для  $E_{tot}$  сводится к виду:

$$E_{tot} = \sum_{i<j}^N \Phi(R_{ji}) + \sum_i^N \sum_{j \neq i}^N \sum_{p,q}^{n_3} g_3^{pq}(\cos(\theta_{jik})) f_3^p(R_{ji}) f_3^q(R_{ki}) + \sum_i^N F(\bar{\rho}_i) \quad (2)$$

где

$$\bar{\rho}_i = \sum_{j \neq i} \rho(R_{ji}) \quad (3)$$

В выражении (2) первое слагаемое, представленное суммой функций  $\Phi(R_{ji})$  описывает парные взаимодействия между атомами  $i$  и  $j$ , где  $R_{ji}$  - длина вектора  $\vec{R}_{ji}$ , направленного из положения атома  $i$  в положение атома  $j$ . Второе слагаемое, представленное в виде суммы произведений базисных функций  $f_3^p(R)$  и функций  $g_3^{pq}(\cos(\theta_{jik}))$ , где  $\theta_{jik}$  - угол между векторами  $\vec{R}_{ji}$  и  $\vec{R}_{ki}$ , вершина которого распо-

ложена в положении атома  $i$ , описывает трехчастичные взаимодействия. Третье слагаемое в выражении (2), представленное суммой функций  $F(\overline{\rho}_i)$ , эффективно учитывает все многочастичные взаимодействия, начиная с четвертого, в рамках ЦСП. Далее мы используем представление конфигурационной энергии (2) для построения потенциалов межатомных взаимодействий в вольфраме. Построение включает формирование базы экспериментальных и «первопринципных» данных и оптимизацию параметров потенциальных функций (функций одной переменной в выражениях (2) и (3)), задаваемых кубическими сплайнами, из условия воспроизведения этих данных.

### Оптимизация параметров потенциалов

Для построения потенциалов  $W$ , в рамках подхода изложенного в предыдущем пункте, мы использовали экспериментальные и «первопринципные» данные. Для устранения разногласий между этими двумя типами подгоняемых величин, мы ввели масштабируемый множитель для «первопринципных» геометрий  $\eta_r = a_{pot}/a_{FP}$ , где  $a_{pot}$  - равновесная постоянная решетки, рассчитанная с использованием нашего потенциала, и  $a_{FP}$  - «первопринципная» постоянная ОЦК решетки  $W$ .

Экспериментальный банк данных включал постоянную ОЦК решетки  $W$ , энергию сублимации, модули упругости  $C_{11}, C_{12}, C_{44}$ , энергию образования вакансии, и уравнение состояния  $P(V)$ .

Расчеты «из первых принципов» проводились с помощью программного пакета VASP [22], используя обобщенное градиентное приближение (PBE-GGA) для расчета обменно-корреляционной энергии электронов [23], и PAW-псевдопотенциал [24] для описания электронного остова. Расчеты проводились с использованием энергии обрезания плоских волн 600 eV, сеткой  $k$ -точек (30x30x30) для кубической ячейки ОЦК, содержащей два атома. Энергия размытия электронных уровней выбиралась равной 0.3 eV. Отмеченные параметры «первопринципных расчетов» обеспечили точность вычисления полной энергии модельных систем вольфрама не хуже 0.1 мэВ.

«Первопринципная» база данных включала равновесные энергии на этом и равновесные объемы на атом для  $A15, \beta-Ta, ГЦК, ГПУ, C32$  простой гексагональной и простой кубической модельных кристаллических решеток, а также энергии и силы действующие на атомы для двух 128-атомных конфигураций ОЦК решетки  $W$ . Первая конфигурация получена сдвигом вдоль направления  $\langle 100 \rangle$  атома из положения равновесия на 0.05 Å, вторая конфигурация получена после «первопринципной» молекулярной динамики при температуре 1100 К.

Оптимизировались параметры (значения функций в узлах сплайнов) 5 потенциальных функций  $\Phi(R), f_3^1(R), g_3^{11}(\cos(\theta)), F(\overline{\rho}), \rho(R)$  (см. выражения (2) и (3) для  $n_3 = 1$ ). Все функции задавались кубическими сплайнами, такие сплайны впервые были применены при построении ММПА потенциалов Si [8], и продемонстрировали свою гибкость и компьютерную эффективность. Мы использовали 30 эквидистантных узлов сплайна для функции  $\Phi$  на интервале  $[R_{min}, R_\Phi]$ , 25 узлов сплайна для функции  $\rho$  на интервале  $[R_{min}, R_\rho]$ , 15 узлов сплайна для функции  $f_3^1$  на интер-



вале  $[R_{\min}, R_f]$ , 10 узлов сплайна для функции  $g_3^{11}$  на интервале  $[-1, 1]$ , и 10 узлов сплайна для функции  $F$  на интервале  $[0, 25]$ , где  $R_{\min} = 1.7 \text{ \AA}$ ,  $R_p = 6.0 \text{ \AA}$ ,  $R_f = 4.3 \text{ \AA}$ .

Оптимизация параметров потенциалов осуществлялась путем минимизации целевой функции  $Z$ :

$$Z = Z_{\text{exp}} + Z_e + Z_f, \quad (4)$$

где

$$Z_{\text{exp}} = \sum_i W_i^{\text{exp}} \frac{(A_i^{\text{pot}} - A_i^{\text{exp}})^2}{(A_i^{\text{exp}})^2} \quad (5)$$

$$Z_e = \sum_i W_i^e \frac{(E_i^{\text{pot}} - E_i^{\text{DFT}})^2}{(E_i^{\text{DFT}})^2 + \delta_e^2} \quad (6)$$

$$Z_f = \sum_i W_i^f \frac{\left( \vec{f}_i^{\text{pot}} - \frac{1}{\eta_r} \vec{f}_i^{\text{DFT}} \right)^2}{\left( \frac{1}{\eta_r} \vec{f}_i^{\text{DFT}} \right)^2 + \delta_f^2} \quad (7)$$

Здесь  $Z_{\text{exp}}$  (см. выражение (5)) - взвешенная сумма квадратов относительных отклонений физических величин из экспериментальной базы данных, рассчитанных с помощью нашего потенциала и измеренных экспериментально,  $Z_e$  (см. выражение (6)) - взвешенная сумма квадратов относительных отклонений энергий, рассчитанных нашим потенциалом и вычисленных «из первых принципов»,  $Z_f$  (см. выражение (7)) - взвешенная сумма квадратов относительных отклонений компонент сил, действующих на атом, рассчитанных нашим потенциалом и вычисленных «из первых принципов»,  $\eta_r$  - геометрический подгоночный коэффициент, введенный ранее,  $\delta_e$  и  $\delta_f$  - небольшие числа, предотвращающие большой вклад малых энергий в величину  $Z_e$ , и малых компонент сил в величину  $Z_f$ , соответственно. Веса  $W_i^{\text{exp}}, W_i^e, W_i^f$  (см. выражения (4-7)) нормализуются по следующей формуле:

$$\sum_i W_i^{\text{exp}} + \sum_i W_i^e + \sum_i W_i^f = 1.$$

Для оптимизации параметров потенциала, мы использовали специальный алгоритм минимизации целевой функции  $Z$ , который включает в себя поиск оптимизируемых параметров в многомерном пространстве на основе эффективного моделирования отжига [25]. Мы построили и протестировали 30 потенциалов для W, используя различные веса в целевой функции  $Z$ . Из результатов тестирования этих потенциалов мы выбрали один, который далее в работе будем называть POT\_W. На рисунке 1 показаны его потенциальные функции.

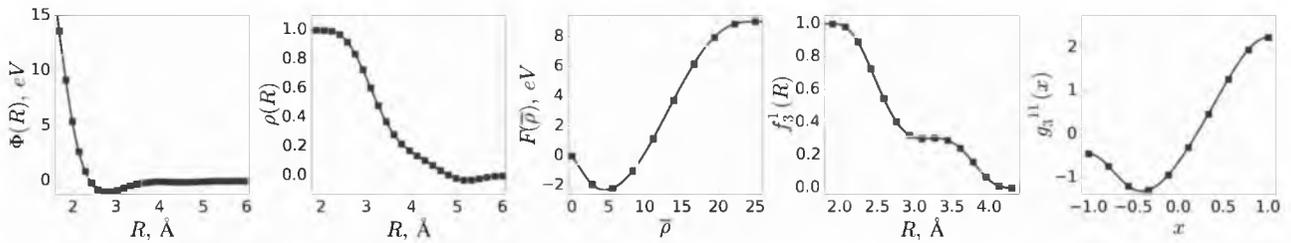


Рис. 1. Пять потенциальных функций, представленных кубическими сплайнами, для потенциала POT\_W. Линии обозначают сплайн-интерполяции между узлами сплайна, изображенными в виде квадратов  
 Fig. 1. Five potential functions represented by cubic splines for POT\_W potential. The lines indicate the spline interpolation between the nodes of the spline, illustrated in the form of squares

### Результаты и обсуждения

В таблице 1 представлены характеристики, описывающие основные свойства ОЦК решетки W, полученные с помощью потенциалов POT\_W, в сравнении с «первопринципными» и экспериментальными значениями.

Таблица 1  
 Table 1

**Энергия связи  $E_{coh}$ , параметр решетки  $a$  при температуре 298 К, модули упругости  $C_{ij}$  при 0 К для ОЦК W, рассчитанные с помощью нашего потенциала POT\_W, в сравнении с расчетами «из первых принципов» и экспериментальными данными**

**The binding energy  $E_{coh}$ , the lattice parameter  $a$  at a temperature of 298 K, the elastic constants at 0 K for a bcc W calculated using our POT\_W potential in comparison with the calculations from «first principles» and the experimental data**

	POT_W	Эксп.	ТФП [29]
$E_{coh}, eV/at$	8.65	8.66 [26]	8.31
$a, \text{Å}$	3.165	3.163 [27]	3.189
$C_{11}, GPa$	511	533 [28]	513
$C_{12}, GPa$	221	205 [28]	199
$C_{44}, GPa$	156	163 [28]	142

Из таблицы видно, что потенциал POT\_W более точно описывает экспериментальные постоянную решетки и энергию сублимации, чем «первые принципы», при этом максимальное отличие рассчитанных с POT\_W значений упругих постоянных от их экспериментальных значений составляет 7.8% для модуля  $C_{12}$ .

Из рисунка 2 видно, что уравнение состояния ОЦК решетки W потенциал POT\_W описывает в хорошем согласии с экспериментальными данными, вплоть до давлений 300 ГПа.

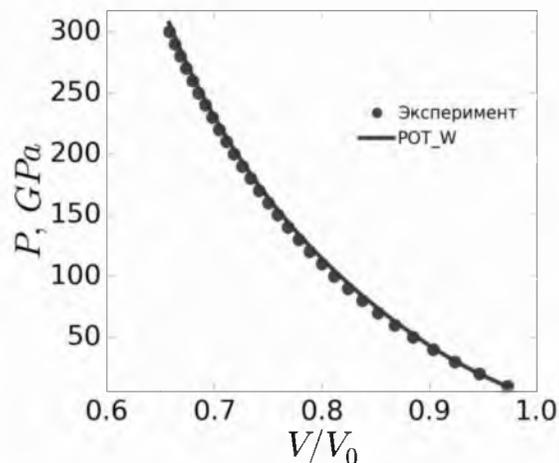


Рис. 2. Рассчитанная с помощью POT\_W и измеренная экспериментально зависимость давления  $P$  от относительного объема  $V/V_0$  при 0 К для ОЦК W. Экспериментальные данные взяты из работы [30]

Fig. 2. The dependence of the pressure vs relative volume at 0 K for BCC W calculated using POT\_W and measured experimentally. The experimental data are taken from [30]

Из таблицы 2 видно, что вычисленные с помощью POT\_W энергии модельных кристаллических решеток A15,  $\beta-Ta$ , ГЦК, ГПУ, и С32 лежат выше, чем энергия ОЦК решетки, то есть наш потенциал описывает решетку ОЦК как наиболее выгодную по энергии. Кроме того, результаты таблицы свидетельствуют, что POT\_W в сравнении с расчетами «из первых принципов» правильно определяет порядок относительных энергий модельных решеток, за исключением двух последних решеток ГПУ и С32.

Таблица 2

Table 2

Расчитанные с помощью потенциала POT\_W (верхняя строчка) и «из первых принципов» (нижняя строчка) равновесные энергии на атом относительно равновесной энергии для ОЦК решетки, равновесные объемы на атом и отношения  $c/a$  для модельных кристаллических решеток A15,  $\beta-Ta$ , ГЦК, ГПУ, С32. Значения для гексагональной и простой кубической решеток лежат больше чем на 1 eV выше энергии ОЦК решетки и в таблице не приведены

Equilibrium energy per atom with respect to the equilibrium energy for bcc lattice, the equilibrium volume of an atom and the ratio  $c/a$  for model-crystal lattices of the A15,  $\beta-Ta$ , FCC, HCP, C32 calculated using the potential POT\_W (upper line) and «from first principles» (lower line). The values for the hexagonal and simple cubic lattices are more than 1 eV above the energy of the bcc lattice and are not given in the table

	A15	$\beta-Ta$	ГЦК	ГПУ	С32
$\Delta E, meV$	98	122	264	417	344
	82	200	489	505	541
$V_0, \text{\AA}^3 / at$	17.35	17.15	16.57	17.80	15.43
	16.19	16.29	16.28	16.36	16.36
$c/a$	1.00	0.52	1.00	2.02	0.59
	1.00	0.53	1.00	1.79	0.55



Из таблицы 3 видно, что наш потенциал дает заниженное на 0.38 eV значение энергии образования вакансии, относительно нижнего экспериментального предела 3.1 eV, в то время как ММПА и ТФП согласуются с нижним экспериментальным пределом. Тем не менее, следует обратить внимание на большой разброс экспериментальных значений энергий образования вакансии, каждое из которых, как приведено в базе экспериментальных данных [31] определяется с точностью до нескольких десятых eV. Значение энергии миграции вакансии, рассчитанное с POT\_W, хорошо согласуется с экспериментальными данными. Приведенные в таблице 3 рассчитанные с POT\_W энергии образования собственных дефектов внедрения в ОЦК W показывают, что наименьшую энергию образования имеет гантель <111>, что согласуется с расчетами ММПА и с «первыми принципами».

Таблица 3  
Table 3

**Энергия образования и энергия миграции вакансии, и энергии образования атомов внедрения в ОЦК W, рассчитанные с помощью потенциала POT\_W в сравнении с расчетами ММПА [29], с результатами расчетов «из первых принципов» (ТФП) [29], и доступными экспериментальными данными [31]**

**The energy of formation and energy of migration of vacancy, and the energy of formation of interstitial atoms in bcc W, calculated with POT\_W potential in comparison with the calculations MEAM [29], the results of calculations «from first principles» (DFT) [29], and the available experimental data [31]**

	$E_v^f$	$E_v^m$	$E_{<100>}^f$	$E_{<110>}^f$	$E_{<111>}^f$	$E_{crow}^f$	$E_{oct}^f$	$E_{tet}^f$
POT_W	2.72	1.75	13.27	12.87	12.76	<111>	13.06	<110>
ММПА	3.14	1.83	10.50	10.58	10.39	<111>	11.04	<100>
ТФП	3.17	1.70	-	10.64	10.31	<111>	12.42	-
Эксп.	3.10-4.10	1.70-1.78	-	-	-	-	-	-

На рисунке 3 приводится сравнение теплового расширения рассчитанного с помощью потенциала POT\_W с экспериментальными результатами. Потенциал хорошо описывает экспериментальное тепловое расширение до температур порядка 3000 К. При температурах выше 3000 К POT\_W дает небольшое занижение в относительной постоянной решетки в сравнении с экспериментальными данными, что может быть связано со значительным влиянием примесей легких элементов на предплавильных температурах при экспериментальном определении параметров решетки.

В таблице 4 приведены характеристики плавления ОЦК W. Для расчета температуры плавления использовалась двух-фазная расчетная суперячейка, в которой расплав находился в контакте с ОЦК фазой по поверхности (100). Суперячейка состояла из 19652 атомов. Мы моделировали NPH ансамбль (постоянное число атомов N, постоянное давление P, постоянная энтальпия H) при нулевом давлении в течении 240 пс. По последним 90 пс усреднялась температура. Расчет температуры плавления с использованием NPH ансамбля ранее был описан и использован в работах [19,34], и продемонстрировал свою надежность. Точность расчета температуры плавления равна 20 К.

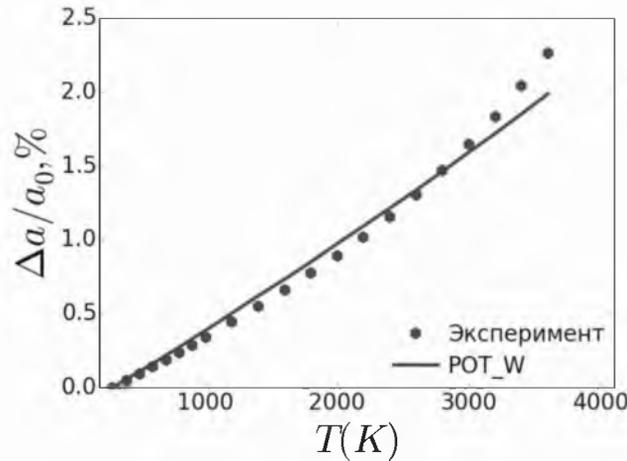


Рис. 3. Зависимость относительной постоянной решетки в процентах от температуры для ОЦК W, рассчитанная с помощью потенциала POT\_W и измеренная экспериментально. Экспериментальные данные взяты из работы [32].

Fig. 3. Relative lattice constant vs temperature in bcc W that were calculated using POT\_W potential and measured experimentally. The experimental data are taken from [32].

Таблица 4  
Table 4

**Температура плавления  $T_m$ , теплота плавления  $\Delta H_m$  и относительный объем плавления  $\Delta V_m/V_0$  ОЦК W рассчитанные с помощью POT\_W в сравнении с расчетами других авторов и экспериментальными данными**

**The melting temperature  $T_m$ , heat of fusion  $\Delta H_m$  and the relative volume of the melting  $\Delta V_m/V_0$  of bcc W that were calculated using the POT\_W potential compared with calculations of other authors and experimental data**

	POT_W	ММПА [9]	ММПА [18]	Эксп. [33]
$T_m, K$	4099	4600	4045	3695
$\Delta H_m, kJ/mol$	44.8	33.0	35.3	52.3
$\Delta V_m/V_0, \%$	9.7	3.2	4.5	-

Для вычисления энтальпии и объема плавления мы использовали две однофазные суперячейки, содержащие по 19652 атомов, первая содержащая только ОЦК фазу, вторая только расплав. Для этих двух суперячеек мы моделировали NPT ансамбль (постоянное число атомов N, постоянное давление P, постоянная температура T) при нулевом давлении и температуре, равной температуре плавления рассчитанной с POT\_W, по методу описанному выше. Моделирование проводилось в течении 100 пс, по последним 15 пс усреднялись объемы суперячеек и энтальпии, объем плавления и энтальпия плавления определялись по разнице соответствующих значений усредненных величин.

Из таблицы 4 видно, что все рассчитанные температуры плавления лежат выше экспериментального значения, при этом значение температуры плавления, полученное с помощью POT\_W лежит на 404 К выше ее экспериментального значения, что близко к значению, полученному с ММПА [18], которое лежит выше экспериментального значения на 350 К. Все рассчитанные теплоты плавления лежат ниже экспериментальной величины, при этом наш потенциал дает занижение



относительно экспериментального значения на 14%, в то время как ММПА потенциалы [9] и [18] на 37% и 33%, соответственно. Проблема значительного занижения теплот плавления тугоплавких металлов свойственна потенциалам на основе ММПА метода, и обсуждалась нами ранее в работе [19].

Таким образом, потенциал POT\_W показал сравнимую с другими расчетами температуру плавления  $W$ , и значительно ближе к экспериментальным данным описывает теплоту плавления, чем ММПА потенциалы, что свидетельствует о более аккуратном описании угловых взаимодействий в нашем подходе.

### Заключение

Разработаны потенциалы межатомных взаимодействий для вольфрама в рамках нового подхода, более точно описывающего угловые зависимости в трехчастичных взаимодействиях на основе метода базисных функций в сравнении с существующими аналогами, использующими модели химической связи. Межатомные потенциалы воспроизводят энергию связи, модули упругости, энергию образования вакансии и уравнение состояния  $P(V)$  и предсказывают энергию миграции вакансии, тепловое расширение, температуру плавления и теплоту плавления вольфрама в хорошем согласии с экспериментальными данными. Рассчитанные с использованием новых потенциалов энергии образования междоузельных атомов находятся в хорошем согласии с результатами расчетов «из первых принципов». Хорошее описание широкого ряда характеристик вольфрама обосновывает корректность использования потенциалов для моделирования процессов формирования и эволюции дефектной структуры при решении задач исследования механизмов деградации свойств вольфрама в условиях радиационных воздействий.

**Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства образования и науки РФ № 3.1282.2014/К.**

### Список литературы

1. Huang G.-Y., Juslin N., Wirth B. D. 2016. First-principles study of vacancy, interstitial, noble gas atom interstitial and vacancy clusters in bcc-w. *Computational Materials Science*, 123: 121–130.
2. Yi X., Jenkins M. L., Kirk M. A., Zhou Z., Roberts S. G. 2016. In-situ tem studies of 150 keV w+ ion irradiated w and w-alloys. *Damage production and microstructural evolution. Acta Materialia*, 112: 105–120.
3. Brinksmeier E., Aurich J. C., Govekar E., Heinzl C., Hoffmeister H.-W., Klocke F., Peters J., Rentsch R., Stephenson D. J., Uhlmann E., Weinert K., Wittmann M. 2006. *Advances in Modeling and Simulation of Grinding Processes. Annals - Manufacturing Technology*, 55: 667–696.
4. Rapaport D. C. 2004. *The art of molecular dynamics simulation. Cambridge university press.*
5. Daw M., Baskes M. 1983. Semiempirical, quantum mechanical calculation of hydrogen embrittlement in metals. *Physical Review Letters*, 50: 1285–1288.
6. Baskes M. I., Srinivasan S. G. 2014. The embedded atom method ansatz: validation and violation. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 22: 025025.
7. Baskes M. 1992. Modified embedded-atom potentials for cubic materials and impurities. *Physical review B*, 46: 2727–2742.
8. Lenosky T. J., Sadigh B., Alonso E., Bulatov V. V., de la Rubia T. D., Kim J., Voter A. F., Kress J. D. 2000. Highly optimized empirical potential model of silicon. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 8: 825.
9. Lee B.-J., Baskes M., Kim H., Koo Cho Y. 2001. Second nearest-neighbor modified embedded atom method potentials for bcc transition metals. *Physical Review B*, 64: 184102.
10. Duan X., Zhou B., Chen R., Zhou H., Wen Y., Shan B. 2014. Development of lattice inversion modified embedded atom method and its applications. *Current Applied Physics*, 14: 1794–1802.
11. Baskes M. 1987. Application of the Embedded-Atom Method to Covalent Materials: A Semiempirical Potential for Silicon. *Physical Review Letters*, 59: 2666–2669.
12. Foiles S., Baskes M., Daw M. 1986. Embedded-atom-method functions for the fcc metals Cu, Ag, Au, Ni, Pd, Pt, and their alloys. *Physical Review B*, 33: 7983–7991.



13. Chantasiriwan S., Milstein F. 1998. Embedded-atom models of 12 cubic metals incorporating second- and third-order elastic-moduli data. *Physical Review B*, 58: 5996–6005.
14. Sheng H. W., Kramer M. J., Cadien A., Fujita T., Chen M. W. 2011. Highly optimized embedded-atom-method potentials for fourteen fcc metals. *Physical Review B*, 83: 134118.
15. Finnis M., Kear K., Pettifor D. 1984. Interatomic Forces and Phonon Anomalies in bcc 3d Transition Metals. *Physical Review Letters*, 52: 291–294.
16. Moriarty J. 1994. Angular forces and melting in bcc transition metals: A case study of molybdenum. *Physical Review B*, 49: 12431.
17. Hughes J. M., Horstemeyer M. F., Carino R., Sukhija N., Lawrimore W. B., Kim S., Baskes M. I. 2015. Hierarchical Bridging Between Ab Initio and Atomistic Level Computations: Sensitivity and Uncertainty Analysis for the Modified Embedded-Atom Method (MEAM) Potential (Part B). *JOM*, 67: 148–153.
18. Duan X., Zhou B., Wen Y., Chen R., Zhou H., Shan B. 2015. Lattice inversion modified embedded atom method for bcc transition metals. *Computational Materials Science*, 98: 417–423.
19. Lipnitskii A., Saveliev V. 2016. Development of n-body expansion interatomic potentials and its application for V. *Computational Materials Science*, 121: 67–78.
20. Kaplan I., Hernandez-Cobos J., Ortega-Blake I., Novaro O. 1996. Many-body forces and electron correlation in small metal clusters. *Physical Review A*, 53: 2493–2500.
21. Murrell J. N. 1984. *Molecular potential energy functions*. J. Wiley.
22. Kresse G., Furthmüller J. 1996. Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set. *Physical Review B*, 54: 11169–11186.
23. Perdew J. P., Burke K., Ernzerhof M. 1996. Generalized gradient approximation made simple. *Physical Review Letters*, 77: 3865–3868.
24. Blochl P. E. 1994. Projector augmented-wave method. *Physical Review B*, 50: 17953–17979.
25. Kirkpatrick S., Gelatt C. D., Vecchi M. P. 1983. Optimization by simulated annealing. *Science*, 220: 671–680.
26. Smith C. 1976. *Metal reference book*. Butterworths, London, 186.
27. Shah J. S., Straumanis M. E. 1971. Thermal Expansion of Tungsten at Low Temperatures. *Journal of Applied Physics*, 42: 3288–3289.
28. Simmons G., Wang H., et al. 1971. *Single crystal elastic constants and calculated aggregate properties*. Mass., MIT Press.
29. Fellingner M. R. 2013. First principles-based interatomic potentials for modeling the body-centered cubic metals V, Nb, Ta, Mo, and W. Ph.D. thesis. The Ohio State University.
30. McQueen R., Marsh S., Taylor J., Fritz J., Carter W. 1970. The equation of state of solids from shock wave studies. *High velocity impact phenomena*, 293.
31. Schultz H. 1991. *Atomic Defects in Metals*. Landolt-Bornstein New Series, Group III, 25.
32. Touloukian Y., Kirby R., Taylor R., Desai P. 1975. *Thermophysical Properties of Matter-The TPRC Data Series*, 12. Thermal expansion metallic elements and alloys, Tech. rep., DTIC Document.
33. Dinsdale A. 1991. SGTE data for pure elements. *Calphad*, 15: 317–425.
34. Wang L., van de Walle A., Alfe D. 2011. Melting temperature of tungsten from two ab initio approaches. *Physical Review B*, 84: 1–4.