

## ПОДБОР ПОТЕНЦИАЛА МЕЖАТОМНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ДЛЯ БЕРИЛЛИЯ

© 2013 М.В. Прокофьев, В.В. Светухин, М.Ю. Тихончев

Научно-исследовательский технологический институт им. С.П. Капицы  
Ульяновского государственного университета

Поступила в редакцию 26.11.2013

Проведено построение многотельного потенциала межатомного взаимодействия для однокомпонентного ГПУ бериллия. Потенциал базируется на методе погруженного атома. При построении использованы аналитические выражения и методика подбора параметров, взятые из литературы. Полученный потенциал хорошо воспроизводит параметры решетки, энергию сублимации, энергию формирования вакансии, и часть упругих постоянных бериллия. Расхождения наблюдаются для значений упругих постоянных  $c_{12}$ ,  $c_{13}$  и  $c_{44}$ .

Ключевые слова: межатомное взаимодействие, однокомпонентный ГПУ бериллия, упругая постоянная.

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Актуальность исследования бериллия обусловлена использованием данного материала в проекте международного экспериментального термоядерного реактора (ИТЭР). Бериллий выбран в качестве материала защитных пластин для 80% поверхностей, взаимодействующих с плазмой. В связи с этим особенно важно исследовать следующие свойства данного материала: радиационная стойкость, стойкость к термоциклическим нагрузкам, распухание при взаимодействии с радиационным облучением. Исследование физических свойств бериллия, по причине его дороговизны и потенциальной опасности для здоровья, наиболее целесообразно производить с использованием компьютерного моделирования. Такое моделирование производится на различных уровнях детализации в рамках многомасштабного подхода. Для моделирования на атомно-молекулярном уровне систем, состоящих из большого числа атомов, используются эмпирические потенциалы межатомного взаимодействия.

В настоящее время имеется небольшое количество работ по расчетным исследованиям свойств бериллия методами *ab initio* (см., например, работу [1]), а также подбору потенциала межатомного взаимодействия. Так в работах [2-4] для построения потенциала межатомного взаимодействия бериллия был выбран метод погру-

женного атома (embedded atom method, EAM). В EAM энергия системы, состоящая из набора атомов, представлена как сумма энергии парных взаимодействий и энергии, необходимой для внедрения («погружения») каждого из атомов в электронную плотность, создаваемую всеми остальными атомами.

$$E_{tot} = \sum_{n=1}^N E_n \quad E_n = \frac{1}{2} \sum_{\substack{m=1 \\ m \neq n}}^N \varphi(r_{nm}) + F(\rho_n) \quad \rho_n = \sum_{\substack{m=1 \\ m \neq n}}^N \rho(r_{nm}),$$

где  $E_{tot}$  – энергия системы из  $N$  атомов,  $c_n$  – электронная плотность в точке расположения атома  $n$ , которую создают все окружающие атомы,  $\rho(r_{nm})$  – электронная плотность, создаваемая атомом  $m$  в точке расположения атома  $n$ ,  $F(\rho_n)$  – энергия необходимая для того, чтобы поместить атом в электронную плотность  $\rho_n$ ,  $\varphi(r_{nm})$  – парный потенциал взаимодействия между атомами  $n$  и  $m$ , находящимися на расстоянии  $r_{nm}$ .

Авторами перечисленных работ было достигнуто хорошее соответствие расчетных значений упругих постоянных, энергии связи и энергии образования вакансий с их экспериментальными значениями. Но функциональные зависимости  $\varphi(r)$  и  $\rho(r)$  подобранных потенциалов взаимодействия не связаны друг с другом, что не является физически обоснованным, так как парная часть взаимодействия в металлах также обусловлена распределением электронной плотности атома. По этой причине в данной работе для подбора потенциала межатомного взаимодействия бериллия был использован потенциал взаимодействия для чистых металлов, предложенный в работах В.Е. Зализняка и О.А. Золотова [5, 6]. В этих работах предлагается специального вида аппроксимация распределения электронной плотности атомов  $\rho(r)$ , из которой следует парный потенциал взаимодействия  $\varphi(r)$  и вид функции энергии внедрения  $F(c)$ .

*Прокофьев Максим Владимирович, младший научный сотрудник.*

*Светухин Вячеслав Викторович, доктор физико-математических наук, профессор, директор.*

*E-mail: slava@sv.uwen.ru*

*Тихончев Михаил Юрьевич, кандидат физико-математических наук, начальник лаборатории моделирования поведения неорганических материалов.*

*E-mail: tikhonchev@sv.ulsu.ru*

## 2. ПОСТРОЕНИЕ ПОТЕНЦИАЛА

Для рассмотрения электростатического взаимодействия атомов используют квазиклассическую модель, где заряд электронов считается «размазанным» вокруг ядра, и подбирают параметры плотности распределения заряда из сравнения с экспериментальными данными. Самый простой вид функции распределения зарядов – сферически симметричный. Исходя из решения уравнения Шредингера для водородоподобного атома и учитывая, что при расчете энергии взаимодействия двух атомов физически интересны большие расстояния между ними, т.е. внешние оболочки, авторами работ [5, 6] была предложена следующая аппроксимация плотности заряда электронного облака с учетом нормировки

$$\rho(r) = \frac{Q\alpha^5}{8\pi(6\alpha\beta + 12\beta^2 + \alpha^2)}(1 + \beta r)^2 e^{-\alpha r},$$

где  $Q$  – заряд ядра атома,  $\alpha, \beta$  – подгонные параметры.

После интегрирования уравнения Пуассона, используя полученную зависимость плотности распределения заряда и учитывая энергии взаимодействия двух ядер друг с другом, их электронных оболочек и ядер с электронными оболочками другого атома, форма парной части взаимодействия имеет следующий вид

$$\varphi(r) = \frac{\gamma\alpha Q^2}{4\pi\epsilon_0} \exp(-\alpha r) \sum_{k=-1}^6 a_k(\alpha, \beta)(\alpha r)^k,$$

где  $\epsilon_0$  – диэлектрическая постоянная,  $\gamma$  – подгонный параметр, учитывающий квантово-механические эффекты обменного взаимодействия, возникающие при перекрытии электронных облаков оболочек атомов,  $a_k(\alpha, \beta)$  – параметры, зависимость которых от  $\alpha$  и  $\beta$  определена в работах [5, 6].

Функция внедрения  $F(c)$  задавалась в следующем виде

$$F(\rho) = \sum_{i=0}^l c_i \left( \frac{\rho}{\rho_s} - 1 \right)^i,$$

где  $\rho_s$  – равновесная электронная плотность,  $c_i$  – коэффициенты, определяющиеся в процессе параметризации потенциала взаимодействия.

Таким образом, из трех подгонных параметров необходимо подобрать только  $\alpha, \beta$ , а параметр  $\gamma$ , как и коэффициенты энергии внедрения  $c_i$  будут определены, исходя из решения системы уравнения, состоящей из следующих уравнений:

равновесная электронная плотность

$$\rho_s = \sum_m \rho(r_m),$$

уравнение равновесия кристаллической решетки

$$\frac{1}{2} \sum_m r_m \frac{d\varphi}{dr}(r_m) + \frac{\partial F}{\partial \rho}(\rho_s) \sum_m r_m \frac{d\rho}{dr}(r_m) = 0,$$

энергия связи на атом

$$-E_c^{(a)} = \frac{1}{2} \sum_m \varphi(r_m) + F(\rho_s),$$

энергия образования вакансии

$$-E_v^{(a)} = \frac{1}{2} \sum_m \varphi(r_m) + \frac{\partial F}{\partial \rho}(\rho_s) \sum_m \rho(r_m) - \frac{1}{2} \frac{\partial^2 F}{\partial \rho^2}(\rho_s) \sum_m \rho^2(r_m),$$

значение модуля всестороннего сжатия

$$B^{(a)} = \frac{1}{9V_a} \left\{ \frac{1}{2} \sum_m \left( r_m^2 \frac{\partial^2 \varphi}{\partial r^2}(r_m) - r_m \frac{d\varphi}{dr}(r_m) \right) + \frac{\partial F}{\partial \rho}(\rho_s) \sum_m \left( r_m^2 \frac{\partial^2 \rho}{\partial r^2}(r_m) - r_m \frac{d\rho}{dr}(r_m) \right) + \frac{\partial^2 F}{\partial \rho^2}(\rho_s) \left( \sum_m r_m \frac{d\rho}{dr}(r_m) \right)^2 \right\},$$

где  $V_a$  – атомный объем,  $r_m$  – расстояние от начала координат, которые связаны с одним из атомов идеального, однородного кристалла при нулевой температуре, до атома  $m$ .

Для различных пар значений ( $\beta$ ) вычисляются значения  $\rho_s, \gamma, F(c), F'(\rho_s), F''(\rho_s)$ , при которых выполняются следующие условия

$$(E_c - E_c^{(a)})^2 + (E_v - E_v^{(a)})^2 + (B - B^{(a)})^2 = 0, \quad \gamma > 0, \\ F(\rho_s) < 0, \quad \frac{\partial F}{\partial \rho}(\rho_s) < 0, \quad \frac{\partial^2 F}{\partial \rho^2}(\rho_s) > 0$$

где  $E_c, E_v, B$  – экспериментальные значения энергии сублимации, энергии образования вакансии и модуля всестороннего сжатия.

Из полученного множества выбирается пара оптимальных значений ( $\alpha, \beta$ ), при которых величина

$$\left( c_{11} - c_{11}^{(a)} \right)^2 + \left( c_{12} - c_{12}^{(a)} \right)^2 + \left( c_{13} - c_{13}^{(a)} \right)^2 + \left( c_{33} - c_{33}^{(a)} \right)^2 + \left( c_{44} - c_{44}^{(a)} \right)^2$$

принимает минимальное значение, где  $c_{11}, c_{12}, c_{13}, c_{33}, c_{44}$  – экспериментальные значения упругих постоянных,  $c_{11}^{(a)}, c_{12}^{(a)}, c_{13}^{(a)}, c_{33}^{(a)}, c_{44}^{(a)}$  – вычисленные значения упругих постоянных.

Коэффициенты  $c_i$  функции вложенной энергии определяются из вычисленных значений  $\rho_s$ ,

$F(c_e), F'(c_e), F''(c_e)$ , условия  $F(0) = 0$  и условия удовлетворения подобранного потенциала межатомного взаимодействия уравнению состояния Розе при  $0.8 < a' < 1.6$ .

$$E(a') = -E_c \left( 1 + 3 \sqrt{\frac{VB}{E_c}} \left( \frac{a'}{a} - 1 \right) \right) e^{-3 \sqrt{\frac{VB}{E_c}} \left( \frac{a'}{a} - 1 \right)},$$

где  $B$  – модуль всестороннего сжатия,  $V$  – атомный объем,  $a$  – параметр идеальной кристаллической решетки,  $E_c$  – энергия сублимации (на один атом системы).

При параметризации учитывалось влияние только ближайших соседних атомов, расположенных на расстояние не более  $2c$ , где  $c$  – параметр ГПУ решетки.

### 3. РЕЗУЛЬТАТ ПАРАМЕТРИЗАЦИИ ПОТЕНЦИАЛА ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

Значения физических величин, используемых для нахождения параметров  $\alpha$  и  $\beta$  для чистого бериллия, приведены в табл. 1.

Таблица 1. Значение физических величин бериллия

Физическая величина	Значение
$\rho$ , А	2,28 56
$c$ , А	3,58 31
$E_c$ , эВ/атом	3,32
$E_v$ , эВ	1,11
$B$ , эВ/А <sup>3</sup>	0,72 55
$c_{11}$ , эВ/А <sup>3</sup>	1,83 25
$c_{12}$ , эВ/А <sup>3</sup>	0,16 13
$c_{13}$ , эВ/А <sup>3</sup>	0,08 74
$c_{33}$ , эВ/А <sup>3</sup>	2,22 63
$c_{44}$ , эВ/А <sup>3</sup>	1,03 73
$Q$ , е	4

Вычисленные значения параметров парного потенциала взаимодействия и энергии внедрения

Таблица 2. Значение параметров потенциала бериллия

Параметр	Значение
$\alpha$ , 1/А	1,307
$\beta$ , 1/А	-0,172
$\gamma$	0,5243
$\rho_e$ , е/А <sup>3</sup>	0,23 239
$c_0$ , эВ	-5,25434
$c_1$ , эВ	-3,04278
$c_2$ , эВ	0,02463
$c_3$ , эВ	-0,38497
$c_4$ , эВ	0,21 854

для чистого бериллия приведены в табл. 2.

В табл. 3 представлено сравнение экспериментальных и вычисленных значений упругих постоянных, энергии внедрения и энергии образования вакансии бериллия.

### 4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе были подобраны параметры потенциала межатомного взаимодействия чистого бериллия. Наблюдается хорошее соответствие между вычисленными и экспериментальными значениями различных физических параметров бериллия, за исключением значений упругих постоянных  $c_{12}$ ,  $c_{13}$ ,  $c_{44}$ . Для более точного описания упругих постоянных возможно потребуются модификация аналитических выражений, описывающих потенциал. Однако, построенный потенциал межатомного взаимодействия можно использовать для моделирования процессов дефектообразования в бериллии под воздействием радиационного облучения и термических нагрузок.

*Работа выполнена при поддержке Минобрнауки в рамках государственного задания на 2012-2014 гг. и при частичной поддержке РФФИ – проекты 12-08-97076 и 13-01-00945*

Таблица 3. Экспериментальные и вычисленные значения физических величин бериллия

Физическая величина	Экспериментальные значения	Вычисленные значения
$E_c$ , эВ	3,32	3,32
$E_v$ , эВ	1,11	1,11
$B$ , эВ/А <sup>3</sup>	0,7255	0,7255
$c_{11}$ , эВ/А <sup>3</sup>	1,8325	1,8098
$c_{12}$ , эВ/А <sup>3</sup>	0,1613	0,6132
$c_{13}$ , эВ/А <sup>3</sup>	0,0874	0,5530
$c_{33}$ , эВ/А <sup>3</sup>	2,2263	2,1659
$c_{44}$ , эВ/А <sup>3</sup>	1,0373	0,5983

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Ganchenkova M.G., Vladimirov P.V., Borodin V.A.* Vacancies, interstitials and gas atoms in beryllium // *Journal of Nuclear Materials* 386-388 (2009) 79-81.
2. *Bjorkas C., Juslin N., Timko H., Vortler K., Nordlund K., Henriksson K., Erhart P.* Interatomic potentials for the Be-C-H system // *J. Phys.: Condens. Matter* 21 (2009) 445002 (16pp).
3. *Igarashi M., Khantha K. and Vitek V.* N-body interatomic potentials for hexagonal close-packed metals // *Phil. Mag.* 1991. В 62 603–27.
4. *Baskes M.I. and Johnson R. A.* Modified embedded atom potentials for hcp metals *Modelling Simul. // Mater. Sci. Eng.* 1994. 2 147.
5. *Зализняк В.Е., Золотов О.А.* Универсальный потенциал взаимодействия для чистых металлов // *Наносистемы: Физика, химия, математика*, 2012. №3(1). С. 76-86.
6. *Зализняк В.Е.* Межатомное взаимодействие в металлах имеющих объемно-центрированную кубическую решетку // *Наносистемы: Физика, химия, математика*, 2012, №3(6). С. 64-69.

## TRIAL INTERATOMIC INTERACTION POTENTIAL FOR BERYLLIUM

© 2013 M.V. Prokofiev, V.V. Svetukhin, M.Yu. Tikhonchev

Research Technological Institute named after S.P. Kapitsa of Ulyanovsk State University

The development of N-body interatomic potential for a single-component hcp beryllium had been carried out. The potential had been based on the embedded atom method. The analytical equations and fitting procedure had been taken from the literature. The developed potential well reproduces the lattice parameters, cohesive energy, the energy of formation of vacancies, and part of the elastic constants of beryllium. The discrepancies are observed for values of the  $c_{12}$ ,  $c_{13}$ , and  $c_{44}$  elastic constants.

Keywords: interatomic interaction, single-component hcp beryllium. elastic constant.

This work has been supported by Russian Ministry of Education and Science in frame of government assignment in 2012-2014, and partly supported by Russian Foundation for Basic Research: grants 12-08-97076 and 13-01-00945.

---

*Maxim Prokofiev, Associate Research Fellow.*  
*Viacheslav Soetukhin, Doctor Physics and Mathematics,*  
*Professor, Director. E-mail: slava@sv.uven.ru*  
*Mikhail Tikhonchev, Candidate of Physics and Mathematics,*  
*Head at the Non-Organic Materials Behaviour Modelling*  
*Laboratory. E-mail: tikhonchev@sv.ulsu.ru*