

## Выбор межатомных потенциалов для моделирования экстремальных воздействий в решетке вольфрама

© 2022

*Моркина Алина Юрьевна*<sup>\*1,6</sup>, магистрант*Тувалев Ильяс Илгизович*<sup>2,7</sup>, студент*Дмитриев Сергей Владимирович*<sup>3,8</sup>, доктор физико-математических наук, профессор, ведущий научный сотрудник*Бебихов Юрий Владимирович*<sup>4,9</sup>, кандидат физико-математических наук, доцент*Семенов Александр Сергеевич*<sup>4,10</sup>, кандидат физико-математических наук, доцент*Шарапова Юлия Равильевна*<sup>5</sup>, лаборант<sup>1</sup>Уфимский государственный авиационный технический университет, Уфа (Россия)<sup>2</sup>Башкирский государственный университет, Уфа (Россия)<sup>3</sup>Институт физики молекул и кристаллов Уфимского научного центра Российской академии наук, Уфа (Россия)<sup>4</sup>Политехнический институт (филиал) Северо-Восточного федерального университета им. М.К. Аммосова в г. Мирном, Мирный (Россия)<sup>5</sup>Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, Уфа (Россия)

\*E-mail: alinamorkina@yandex.ru

<sup>6</sup>ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-3989-0376><sup>7</sup>ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-9341-4178><sup>8</sup>ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-6744-4445><sup>9</sup>ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-8366-4819><sup>10</sup>ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-9940-3915>

Поступила в редакцию 04.05.2022

Принята к публикации 18.07.2022

**Аннотация:** Моделирование кристаллических решеток в условиях, далеких от равновесных, в настоящее время является все более актуальным предметом исследований и требует уверенности в достоверности применяемых межатомных потенциалов в широком диапазоне отклонений атома от равновесного состояния. Чтобы выполнить такую оценку для моделирования вольфрама, являющегося перспективным материалом для различных применений в атомной энергетике, мы проанализировали нелинейную динамику решетки, используя несколько межатомных потенциалов. В ОЦК кристалле вольфрама изучалась динамика нескольких делокализованных нелинейных колебательных мод – точных решений уравнений движения атомов, геометрия которых определяется симметрией решетки при любых амплитудах и не зависит от типа взаимодействия между узлами. Были рассмотрены колебания атомов с двумя и тремя ненулевыми компонентами векторов перемещений для ячейки вольфрама, состоящей из 2000 атомов и размером  $31,6 \times 31,6 \times 31,6$  Å. Амплитудно-частотные характеристики этих мод были рассчитаны для нескольких межатомных потенциалов, имеющихся в библиотеке LAMMPS. Обнаружено, что несколько межатомных потенциалов, а именно eam.fs, set, Olsson, Zhou, показывают практически совпадающие результаты, что является косвенным подтверждением их справедливости и возможности их использования для моделирования экстремальных воздействий на рассматриваемую решетку. Были рассчитаны такие характеристики системы, как кинетическая энергия, теплоемкость и давление. По полученным результатам можно предположить, что мода 15 вследствие модуляционной неустойчивости приведет к локализации энергии на отдельных атомах.

**Ключевые слова:** вольфрам; метод молекулярной динамики; делокализованные нелинейные колебательные моды.

**Благодарности:** Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания ФГБОУ ВО «УГАТУ» (соглашение № 075-03-2022-318/1) «Молодежная научно-исследовательская лаборатория НОЦ "Металлы и сплавы при экстремальных воздействиях"» для А.Ю. Моркиной (проведение расчетов), гранта № НШ-4320.2022.1.2 для И.И. Тувалева (анализ и обсуждение полученных результатов), гранта РНФ № 21-12-00275 для А.С. Семенова (постановка задачи, концептуализация исследования).

**Для цитирования:** Моркина А.Ю., Тувалев И.И., Дмитриев С.В., Бебихов Ю.В., Семенов А.С., Шарапова Ю.Р. Выбор межатомных потенциалов для моделирования экстремальных воздействий в решетке вольфрама // *Frontier Materials & Technologies*. 2022. № 3. С. 16–24. DOI: 10.18323/2782-4039-2022-3-2-16-24.

### ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время материалы в процессе использования все чаще оказываются в состояниях, далеких от равновесных. В этом случае его поведение начинает сильно отличаться от такового в обычных условиях. Молекулярная динамика является одним из важнейших инструментов современного материаловедения. При

этом используемые в рамках метода межатомные потенциалы зачастую адаптируют простые аппроксимации и могут достоверно воспроизводить динамику кристаллической решетки в очень ограниченном интервале отклонений атомов от положения равновесия. В случае экстремального воздействия нелинейный характер межатомных взаимодействий начинает вносить существенный вклад в динамику решетки [1]. В качестве

примеров подобного воздействия можно отметить ударные нагрузки [2], краудсионные движения [3; 4], нелинейные делокализованные колебательные моды [5; 6]. При этом требуется дополнительный комплекс исследований по валидации реалистичности используемых потенциалов при значительном удалении атомов от положения равновесия.

Высокая концентрация точечных дефектов, ассоциированная с экстремальными воздействиями, также приводит к возникновению состояний с сильно искаженной решеткой, где не все существующие потенциалы могут правдоподобно воспроизводить происходящие в структуре процессы [6]. Можно вспомнить такие разновидности точечных дефектов, как краудсионы [7], вакансии [8; 9], войдионы [10]. Для моделирования всех перечисленных явлений, связанных со значительными атомными сдвигами, необходимы межатомные потенциалы, действующие в широком диапазоне отклонений атома от состояния равновесия.

Другой пример неравновесного состояния материала – делокализованные нелинейные колебательные моды (ДНКМ). Поскольку при выводе ДНКМ принимается во внимание только симметрия решетки, они являются симметрично обусловленными точными решениями уравнений движения узлов нелинейной решетки, существующими для любых типов взаимодействия между узлами и при любых амплитудах [11; 12]. При этом атомы могут совершать колебания с очень большой амплитудой и частотой, что позволяет протестировать межатомные потенциалы для больших отклонений атомов от решеточных положений.

Другой важной особенностью ДНКМ является их способность к локализации энергии при не слишком малых амплитудах колебаний, когда они проявляют модуляционную неустойчивость – нарушение периодического движения. В случае, если частота моды выше верхней границы частоты фононного спектра, вся энергия ДНКМ, после ее распада, может сосредоточиться на нескольких дискретных бризерах (ДБ). Напомним, что ДБ – это локализованные в пространстве и периодические по времени высокоамплитудные возбуждения в нелинейных дискретных структурах с трансляционной симметрией, способные влиять на макроскопические характеристики кристалла [13]. Ранее ДНКМ были описаны и исследованы для ГЦК кристаллов и двумерных кристаллов, где также анализировалась их модуляционная неустойчивость [14]. Было показано, что локализованные осцилляции могут влиять на структуру материалов и содержащиеся в них дефекты. При взаимодействии ДБ, движущегося в плотноупакованном ряду, с такими дефектами, как вакансии и поверхностный атом, снижается потенциальный барьер для миграции вакансий и отрыва атома от поверхности.

Анализ зависимости энергии изолированных атомов от времени показал, что взаимодействие движущегося ДБ с вакансией приводит к снижению потенциального барьера миграции атома на 0,1 эВ, что составляет примерно 20 % значения энергии миграции вакансий. Снижение потенциального барьера экспоненциально увеличивает вероятность миграции атомов по закону Аррениуса при данной температуре. При столкновении ДБ с поверхностным атомом в железе его энергия увеличивается на 0,35 эВ, что также

может значительно увеличить вероятность отрыва атома от поверхности [15].

Как показано в работе [16], с течением времени ДНКМ может проявлять модуляционную неустойчивость, после чего ее энергия локализуется на дискретных бризерах, очень медленно излучающих энергию, и впоследствии со временем вся система приходит к тепловому равновесию.

Моды и их модуляционная неустойчивость способны влиять на упругие константы кристалла и другие макроскопические свойства, в частности на теплоемкость. Однако не все потенциалы могут хорошо описывать динамику атомов при модуляционной неустойчивости и появлении ДБ. Поэтому одна из целей нашего исследования – сравнить различные потенциалы и найти те, которые будут реалистично отражать динамику атомов.

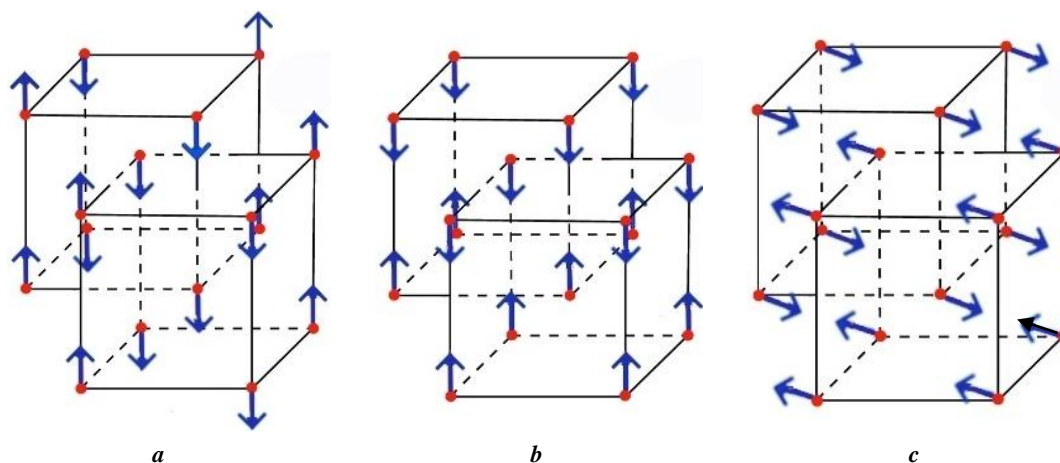
Моделирование делокализованных нелинейных мод в различных решетках с разными межатомными потенциалами позволяет оценить справедливость эмпирического описания межатомных взаимодействий в широком диапазоне отклонений атомов от положений равновесия. Между тем молекулярно-динамические исследования радиационных явлений в вольфраме и ванадии представляют особый интерес в связи с тем, что вольфрам был выбран в качестве диверторного материала в международном термоядерном экспериментальном реакторе ITER (International Thermonuclear Experimental Reactor).

Цель работы – расчет амплитудно-частотных зависимостей нескольких делокализованных мод в вольфраме для определения набора межатомных потенциалов, пригодных для моделирования далеких от равновесных состояний в материале.

## МЕТОДИКА ПРОВЕДЕНИЯ ИССЛЕДОВАНИЯ

В рамках теоретико-групповых методов [17] получено 15 возможных трехмерных делокализованных колебательных мод в ОЦК решетке вольфрама. Для данного исследования были выбраны моды 1, 13 и 15, так как они наиболее репрезентативны для решетки вольфрама и отображают три вида колебаний, а именно: сонаправленные колебания в случае моды 1; колебания, направленные друг к другу из плоскости, в случае моды 13; направленные друг к другу по диагонали колебания из плоскости в случае моды 15. Картины движения атомов в этих модах показаны на рис. 1. Остальные моды являются случаями комбинации упомянутых выше мод. Стрелки в данном случае показывают смещения атомов из положений равновесия, которые использовались для задания начальных условий, порождающих ту или иную моду колебаний. Все векторы смещения имеют одинаковую длину, равную  $A_0$ . Начальные скорости всех атомов равны нулю.

Важно отметить, что для данных мод характерно вовлечение в колебательный процесс всех атомов. Это, как правило, приводит к тому, что амплитудно-частотная характеристика моды будет иметь жесткий тип нелинейности. Помимо доли атомов, участвующих в движении, можно отметить также различный вклад мод в анизотропию кристалла. Так, некоторые моды (1, 13) характеризуются направленным движением атомов



**Рис. 1.** Начальные смещения атомов, используемые для возбуждения однокомпонентных делокализованных мод в ОЦК решетке вольфрама: **a** – мода 1; **b** – мода 13; **c** – мода 15

**Fig. 1.** Initial atomic displacements used to excite single-component delocalized modes in the BCC tungsten lattice: **a** – mode 1; **b** – mode 13; **c** – mode 15

в определенных плоскостях и могут приводить к анизотропии кристаллической решетки в течение жизни моды. Такие режимы, как правило, проявляют пониженную склонность к локализации.

Исследование проводилось с использованием метода молекулярной динамики, в котором временная эволюция системы взаимодействующих атомов или частиц отслеживается интегрированием их уравнений движения.

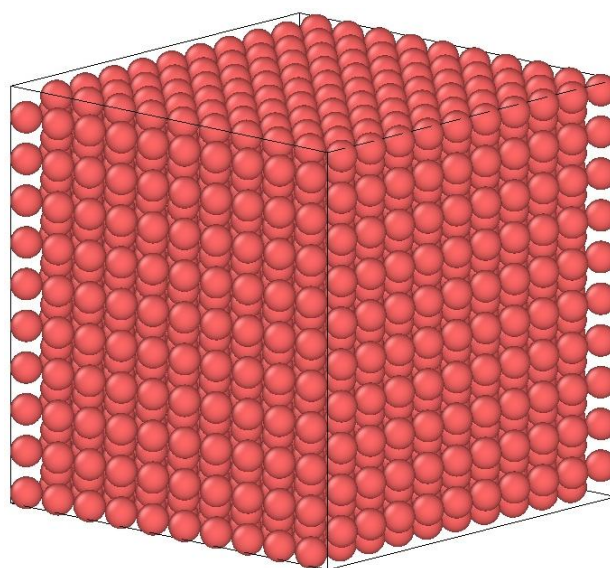
Была построена ОЦК решетка вольфрама с параметром решетки  $a=3,160 \text{ \AA}$ , межатомным расстоянием  $1,414 \text{ \AA}$ , атомной массой  $183,84 \text{ а. е. м.}$  и общим количеством атомов, равным 2000. Модель решетки представлена на рис. 2. Размер ячейки составил  $31,6 \times 31,6 \times 31,6 \text{ \AA}$ . Использовались периодические граничные условия.

Далее была проведена глубокая релаксация структуры с использованием одного из выбранных нами меж-

атомных потенциалов для полного снятия напряжений со стенок ячейки. Скорость атомов и кинетическая энергия приводились к нулю.

Моделирование проводилось с помощью пакета программ LAMMPS, анализировались следующие потенциалы: eam.fs [18], eam2.fs [19], eam3.fs [20], eam4.fs [21], meam [22], Olsson [23], Zhou [24], set [24].

В ходе исследования методом молекулярной динамики были смоделированы 3 различных делокализованных моды для ОЦК вольфрама, показанные на рис. 1, с использованием 8 межатомных потенциалов. После получения и анализа амплитудно-частотных характеристик (АЧХ) были выбраны 4 потенциала для дальнейшего изучения влияния ДНКМ на характеристики системы. Для каждого из случаев исследовались следующие характеристики в широком диапазоне



**Рис. 2.** Модель ОЦК решетки вольфрама

**Fig. 2.** The model of BCC tungsten lattice

начальных смещений атомов (от 0,01 до 0,4 Å): кинетическая энергия, теплоемкость и давление.

Теплоемкость вычислялась по следующей формуле:

$$C_v = \frac{H}{K}, \quad (1)$$

где  $H$  – полная энергия системы;  
 $K$  – кинетическая энергия.

### РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАНИЯ

На рис. 3 представлены АЧХ для мод 1, 13, 15 как наиболее репрезентативные для решетки вольфрама с использованием всех рассмотренных потенциалов (приведены в легенде графика). Можно заметить, что далеко не все из выбранных нами потенциалов подходят для моделирования структур, находящихся в сильно неравновесном состоянии.

Из всех рассмотренных потенциалов были отобраны четыре, представленные на рис. 4, для которых

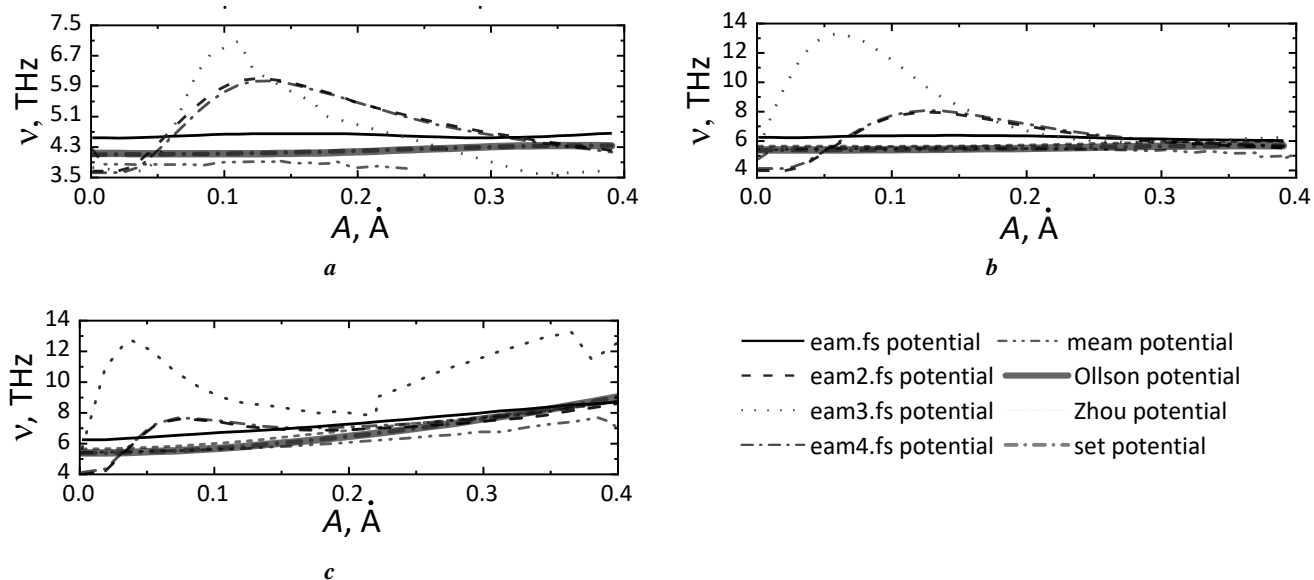


Рис. 3. Амплитудно-частотные характеристики для потенциалов eam.fs, eam2.fs, eam3.fs, eam4.fs, set, meam, Olsson и Zhou (приведены в легенде графика): **a** – мода 1; **b** – мода 13; **c** – мода 15

Fig. 3. Frequency amplitude characteristics for eam.fs, eam2.fs, eam3.fs, eam4.fs, set, meam, Olsson, and Zhou potentials (indicated in the plot legend): **a** – mode 1; **b** – mode 13; **c** – mode 15

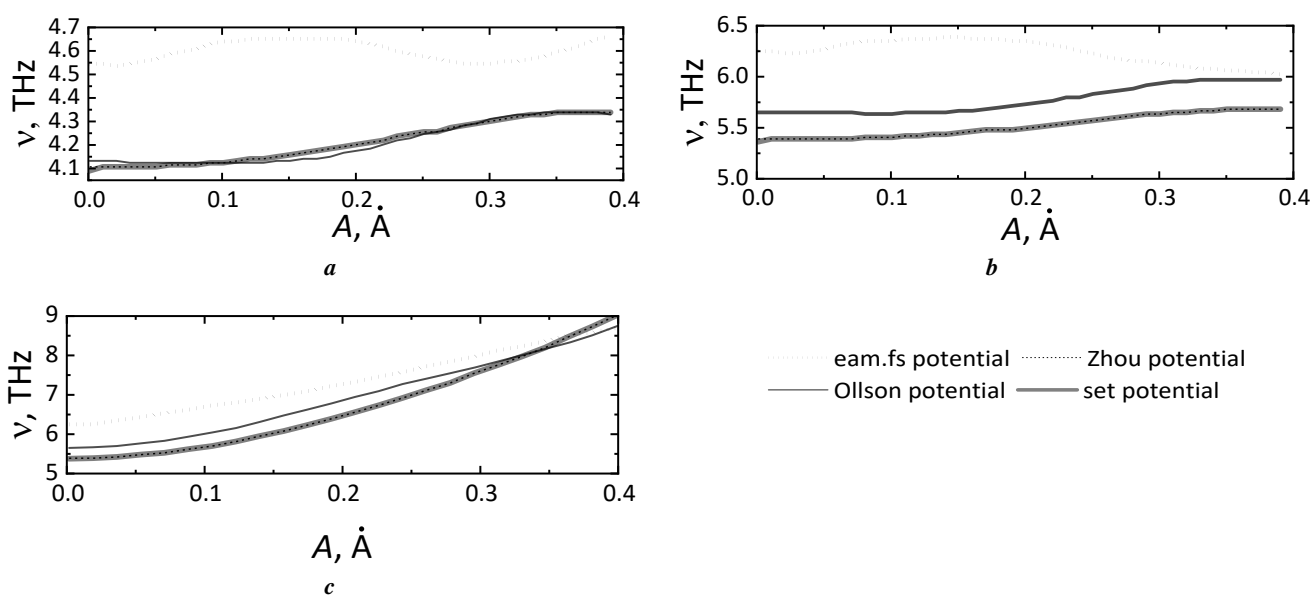


Рис. 4. Амплитудно-частотные характеристики для потенциалов eam.fs, set, Olsson и Zhou (приведены в легенде графика): **a** – мода 1; **b** – мода 13; **c** – мода 15

Fig. 4. Frequency amplitude characteristics for eam.fs, set, Olsson, and Zhou potentials (indicated in the plot legend): **a** – mode 1; **b** – mode 13; **c** – mode 15

установлена удовлетворительная степень совпадения. Именно эти потенциалы в дальнейшем использовались для анализа АЧХ мод и влияния делокализованных нелинейных колебаний на макроскопические свойства кристаллов – теплоемкость и давление (как характеристику внутренних напряжений). Мода 15 демонстрирует наиболее сильную нелинейность, выраженную в значительном росте частоты моды при увеличении амплитуды.

На рис. 5 показаны зависимости кинетической энергии от амплитуды для мод 1 (рис. 5 а), 13 (рис. 5 б), 15

(рис. 5 с) для потенциалов eam.fs, set, Olsson и Zhou. В этом случае мода 15 также показывает наиболее интенсивный рост значения кинетической энергии до 5000 эВ при увеличении амплитуды колебаний до 0,4 Å, в то время как максимальная величина кинетической энергии для мод 1 и 13 составляет 1250 и 2100 эВ соответственно. Можно отметить, что для моды 15 наблюдается наименьшее расхождение зависимостей  $E_k(A)$  для различных потенциалов.

На рис. 6 представлены зависимости теплоемкости от амплитуды для режимов 1, 13, 15. Для моды 15

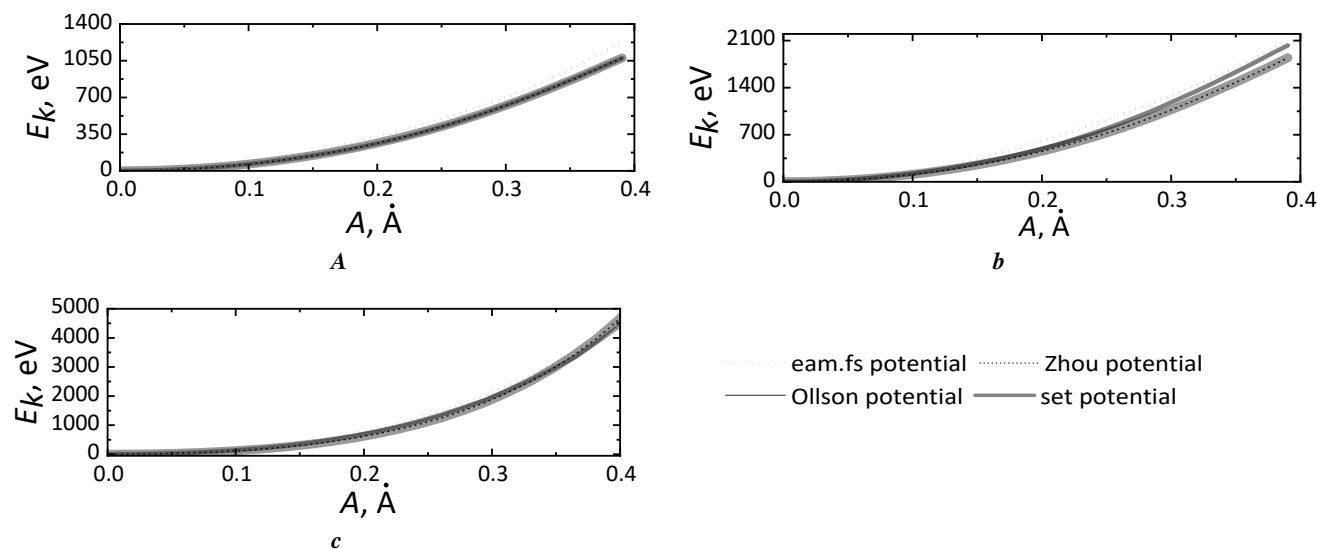


Рис. 5. Зависимости кинетической энергии от амплитуды для потенциалов eam.fs, set, Olsson и Zhou (приведены в легенде графика): а – мода 1; б – мода 13; с – мода 15

Fig. 5. The dependences of kinetic energy on the amplitude for eam.fs, set, Olsson, and Zhou potentials (indicated in the plot legend): a – mode 1; b – mode 13; c – mode 15

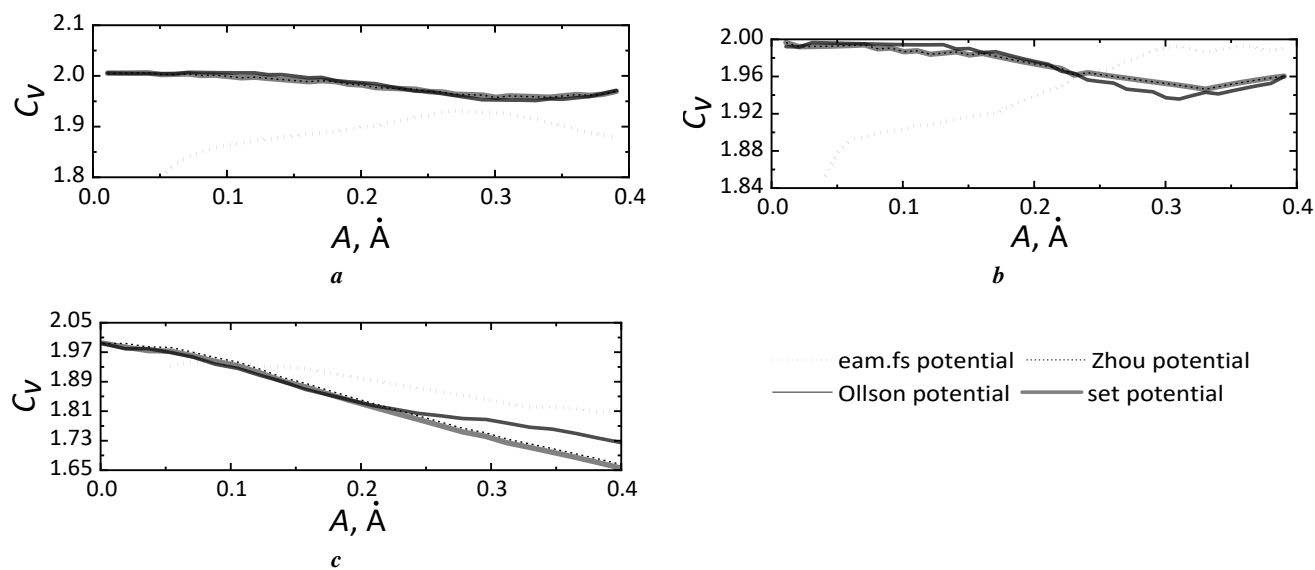
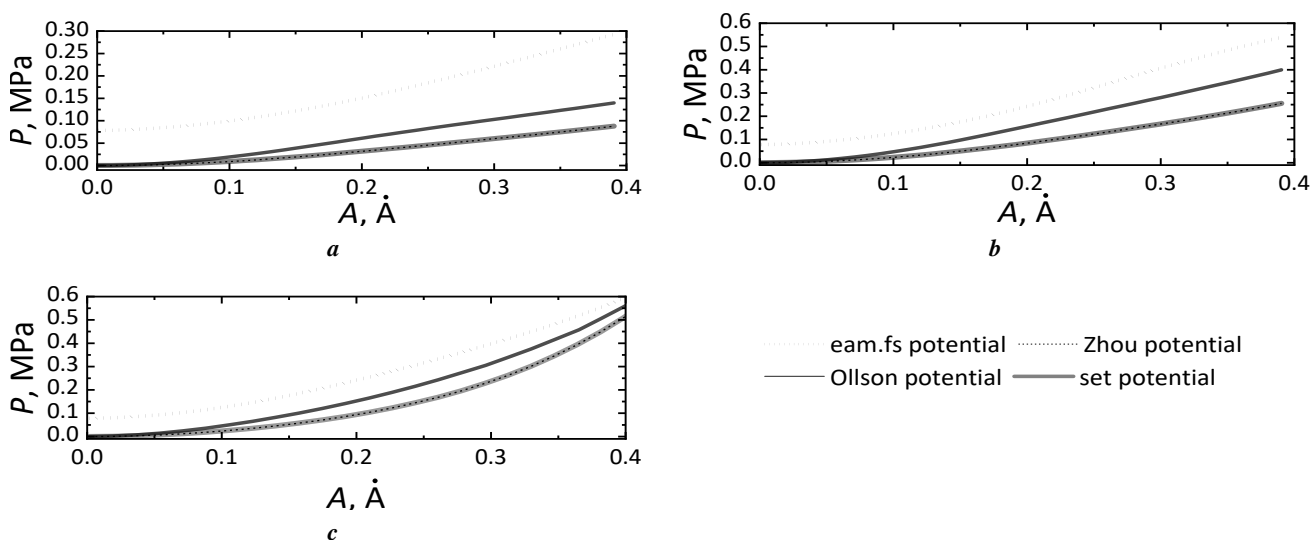


Рис. 6. Зависимости теплоемкости от амплитуды для потенциалов eam.fs, set, Olsson и Zhou (приведены в легенде графика): а – мода 1; б – мода 13; с – мода 15

Fig. 6. The dependences of heat capacity on the amplitude for eam.fs, set, Olsson, and Zhou potentials (indicated in the plot legend): a – mode 1; b – mode 13; c – mode 15



**Рис. 7.** Зависимости давления от амплитуды для потенциалов *eam.fs*, *set*, *Olsson* и *Zhou* (приведены в легенде графика): **a** – мода 1; **b** – мода 13; **c** – мода 15  
**Fig. 7.** The dependences of pressure on the amplitude for the *eam.fs*, *set*, *Olsson*, and *Zhou* potentials (indicated in the plot legend): **a** – mode 1; **b** – mode 13; **c** – mode 15

теплоемкость резко уменьшается с ростом амплитуды, что связано с жесткой нелинейностью и ростом кинетической энергии при увеличении амплитуды колебаний. Для остальных мод характер изменения теплоемкости немонотонный и коррелирует с АЧХ моды.

На рис. 7 показаны зависимости давления от амплитуды для рассматриваемых мод, где видно, что в целом все моды инициируют в системе сжимающие напряжения (что коррелирует с ростом давления в системе), которые монотонно растут по мере увеличения установленной амплитуды.

### ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Полученные в результате моделирования зависимости частоты, энергии, теплоемкости и давления в целом могут быть объяснены особенностями траекторий атомов и степенью их вовлеченности в коллективное движение, а также межатомными потенциалами, используемыми для проведения численного эксперимента. Так, ряд показанных на рис. 3 АЧХ демонстрирует качественные и количественные различия в рамках одной и той же моды. Этот факт можно объяснить тем, что подгонка межатомных потенциалов осуществлялась по таким характеристикам, как модуль Юнга, температура плавления и коэффициент теплового расширения, т. е. величинам, характеризующим кристаллическую решетку в состоянии, близком к минимальной энергии. Выбранные нами три межатомных потенциала демонстрируют наибольшую схожесть поведения в силу того, что при их дизайне были учтены возможности перехода материала в далекое от равновесия состояние [20; 22; 23]. Наиболее сильный рост частоты по мере увеличения амплитуды демонстрирует мода 15 в силу того, что в этом случае наибольшее количество атомов вовлечено в колебательный процесс. Вероятно, именно по этой причине АЧХ данной моды выходит за пределы фононного спектра кристалла. Ее возбуждение с после-

дующим наложением локализирующих функций может рассматриваться как один из перспективных способов реализации локализованных состояний в вольфраме. Пример такого исследования в двумерном приближении приведен в работе [16].

Монотонный рост кинетической энергии, показанный на рис. 5, не демонстрирует отклонения от классической квадратичной зависимости, при этом скорость роста энергии также определяется паттерном моды и степенью вовлеченности атомов.

Отклонение теплоемкости, наблюдаемое для случая потенциала *eam.fs* на рис. 6, связано с тем, что данная зависимость по сути является следствием поведения АЧХ. Теплоемкость, рассчитанная как отношение полной энергии к кинетической, что показано в формуле (1), уменьшается по мере того, как уменьшается скорость роста амплитуды колебаний атомов. Давление на стенки периодической расчетной ячейки, возникающее в результате смещения среднего положения атомов в процессе колебания моды, растет монотонно для всех трех рассмотренных паттернов, коррелирует с зависимостями  $E_k(A)$ ,  $C_v(A)$  и во многом определяется паттерном колебаний в рамках моды.

Последующие этапы текущего исследования будут включать моделирование динамики делокализованных мод из первых принципов для оценки соответствия характеристик, полученных различными методами, исследование остальных ДНКМ в вольфраме, а также изучение влияния модуляционной неустойчивости на систему.

### ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

Проведено исследование ДНКМ в вольфраме методом молекулярной динамики с использованием различных межатомных потенциалов. Выяснено, что потенциалы *eam.fs*, *set*, *Olsson*, *Zhou* наиболее реалистично отражают поведение атомов в структуре, находящейся в состоянии, далекое от равновесия.

С помощью этих потенциалов были рассчитаны АЧХ ДНКМ, изменения кинетической энергии, теплоемкости и давления. Выявлена немонотонная зависимость ряда АЧХ от амплитуды. Установлено, что мода 15 имеет частоту выше фонованого спектра, что в перспективе может приводить к возникновению локализованных энергетических состояний. Полученные результаты позволяют оценить применимость различных межатомных потенциалов для моделирования высокоэнергетического воздействия.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Marinica M.-C., Ventelon L., Gilbert M., Proville L., Dudarev S.L., Marian J., Bencteux G., Willaime F. Interatomic potentials for modelling radiation defects and dislocations in tungsten // *Journal of Physics: Condensed Matter*. 2013. Vol. 25. № 39. Article number 395502. DOI: [10.1088/0953-8984/25/39/395502](https://doi.org/10.1088/0953-8984/25/39/395502).
- Babicheva R.I., Evazzade I., Korznikova E.A., Shepelev I.A., Zhou K., Dmitriev S.V. Low-energy channel for mass transfer in Pt crystal initiated by molecule impact // *Computational Materials Science*. 2019. Vol. 163. P. 248–255. DOI: [10.1016/j.commatsci.2019.03.022](https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2019.03.022).
- Sand A.E., Nordlund K., Dudarev S.L. Radiation damage production in massive cascades initiated by fusion neutrons in tungsten // *Journal of Nuclear Materials*. 2014. Vol. 455. № 1-3. P. 207–211. DOI: [10.1016/j.jnucmat.2014.06.007](https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2014.06.007).
- Chetverikov A.P., Shepelev I.A., Korznikova E.A., Kistanov A.A., Dmitriev S.V., Velarde M. Breathing subsonic crowdion in morse lattices // *Computational Condensed Matter*. 2017. Vol. 13. P. 59–64. DOI: [10.1016/j.cocom.2017.09.004](https://doi.org/10.1016/j.cocom.2017.09.004).
- Shepelev I.A., Bayazitov A.M., Korznikova E.A. Modeling of supersonic crowdion clusters in FCC lattice: Effect of the interatomic potential // *Journal of Micromechanics and Molecular Physics*. 2021. Vol. 6. № 1. Article number 2050019. DOI: [10.1142/S2424913-020500198](https://doi.org/10.1142/S2424913-020500198).
- Shepelev I.A., Dmitriev S.V., Kudreyko A.A., Velarde M.G., Korznikova E.A. Supersonic voidions in 2D Morse lattice // *Chaos, Solitons and Fractals*. 2020. Vol. 140. Article number 110217. DOI: [10.1016/j.chaos.2020.110217](https://doi.org/10.1016/j.chaos.2020.110217).
- Shepelev I.A., Bachurin D.V., Korznikova E.A., Bayazitov A.M., Dmitriev S.V. Mechanism of remote vacancy emergence by a supersonic crowdion cluster in a 2D Morse lattice // *Chinese Journal of Physics*. 2021. Vol. 70. P. 355–362. DOI: [10.1016/j.cjph.2021.01.010](https://doi.org/10.1016/j.cjph.2021.01.010).
- Korznikova E., Schafner E., Steiner G., Zehetbauer M. Measurements of vacancy type defects in SPD deformed Ni // *Ultrafine grained materials*. PA: The Minerals, Metals & Materials Society. 2006. P. 97–102.
- Xu A., Armstrong D.E., Beck C., Moody M.P., Smith G.D., Bagot P.A.J., Roberts S.G. Ion-irradiation induced clustering in W-Re-Ta, W-Re and W-Ta alloys: An atom probe tomography and nanoindentation study // *Acta Materialia*. 2017. Vol. 124. P. 71–78. DOI: [10.1016/j.actamat.2016.10.050](https://doi.org/10.1016/j.actamat.2016.10.050).
- Янковская У.И., Захаров П.В. Устойчивость к нагреву кристалла платины, армированного углеродными нанотрубками // *Materials. Technologies. Design*. 2021. Т. 3. № 4. С. 64–67. DOI: [10.54708/26587572\\_2021\\_34664](https://doi.org/10.54708/26587572_2021_34664).
- Mazilova T.I., Sadanov E.V., Voyevodin V.N., Ksenofontov V.A., Mikhailovskij I.M. Impact-induced concerted mass transport on W surfaces by a voidion mechanism // *Surface Science*. 2018. Vol. 669. P. 10–15. DOI: [10.1016/j.susc.2017.11.002](https://doi.org/10.1016/j.susc.2017.11.002).
- Zakharov P.V., Korznikova E.A., Dmitriev S.V., Ekomasov E.G., Zhou K. Surface discrete breathers in Pt3Al intermetallic alloy // *Surface Science*. 2019. Vol. 679. P. 1–5. DOI: [10.1016/j.susc.2018.08.011](https://doi.org/10.1016/j.susc.2018.08.011).
- Ryabov D.S., Chechin G.M., Upadhyaya A., Korznikova E.A., Dubinko V.I., Dmitriev S.V. Delocalized nonlinear vibrational modes of triangular lattices // *Nonlinear Dynamics*. 2020. Vol. 102. № 4. P. 2793–2810. DOI: [10.1007/s11071-020-06015-5](https://doi.org/10.1007/s11071-020-06015-5).
- Evazzade I., Lobzenko I., Korznikova E., Ovid'Ko I., Roknabadi M., Dmitriev S.V. Energy transfer in strained graphene assisted by discrete breathers excited by external ac driving // *Physical Review B*. 2017. Vol. 95. № 3. Article number 035423. DOI: [10.1103/PhysRevB.95.035423](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.95.035423).
- Singh M., Morkina A.Y., Korznikova E.A., Dubinko V.I., Terentiev D.A., Xiong D., Naimark O.B., Gani V.A., Dmitriev S.V. Effect of discrete breathers on the specific heat of a nonlinear chain // *Journal of Nonlinear Science*. 2021. Vol. 31. № 1. Article number 12. DOI: [10.1007/s00332-020-09663-4](https://doi.org/10.1007/s00332-020-09663-4).
- Korznikova E.A., Fomin S.Yu., Soboleva E.G., Dmitriev S.V. Highly symmetric discrete breather in a two-dimensional Morse crystal // *JETP Letters*. 2016. Vol. 103. № 4. P. 277–281. DOI: [10.1134/S0021364016040081](https://doi.org/10.1134/S0021364016040081).
- Chechin G.M., Sakhnenko V.P. Interactions between normal modes in nonlinear dynamical systems with discrete symmetry. Exact results // *Physica D: Nonlinear Phenomena*. 1998. Vol. 117. № 1-5. P. 43–76. DOI: [10.1016/S0167-2789\(98\)80012-2](https://doi.org/10.1016/S0167-2789(98)80012-2).
- Han S., Zepeda-Ruiz L.A., Ackland G.J., Car R., Srolovitz D.J. Interatomic potential for vanadium suitable for radiation damage simulations // *Journal of Applied Physics*. 2003. Vol. 93. № 6. P. 3328–3335. DOI: [10.1063/1.1555275](https://doi.org/10.1063/1.1555275).
- Marinica M.-C., Ventelon L., Gilbert M.R., Proville L., Dudarev S.L., Marian J., Bencteux G., Willaime F. Interatomic potentials for modelling radiation defects and dislocations in tungsten // *Journal of Physics: Condensed Matter*. 2013. Vol. 25. № 39. Article number 395502. DOI: [10.1088/0953-8984/25/39/395502](https://doi.org/10.1088/0953-8984/25/39/395502).
- Tadmor E.B., Elliott R.S., Sethna J.P., Miller R.E., Becker C.A. The potential of atomistic simulations and the knowledgebase of interatomic models // *JOM*. 2011. Vol. 63. № 7. P. 17. DOI: [10.1007/s11837-011-0102-6](https://doi.org/10.1007/s11837-011-0102-6).
- Tadmor E. Finnis-Sinclair potential (LAMMPS cubic hermite tabulation) for W developed by Marinica et al.; Potential EAM4 v000 // *OpenKIM*. 2013. DOI: [10.25950/ce93b9c6](https://doi.org/10.25950/ce93b9c6).
- Lee B.-J. Model parameterization of 2NN MEAM model // *OpenKIM*. 2014. URL: [https://openkim.org/cite/MO\\_145522277939\\_001](https://openkim.org/cite/MO_145522277939_001).
- Olsson P.A. Semi-empirical atomistic study of point defect properties in BCC transition metals // *Computa-*

- tional Materials Science. 2009. Vol. 47. № 1. P. 135–145. DOI: [10.1016/j.commat.2009.06.025](https://doi.org/10.1016/j.commat.2009.06.025).
24. Zhou X.W., Johnson R.A., Wadley H.N.G. Misfit-energy-increasing dislocations in vapor-deposited CoFe/NiFe multilayers // *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*. 2004. Vol. 69. № 14. P. 144113-1-144113-10. DOI: [10.1103/PhysRevB.69.144113](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.69.144113).
- REFERENCES**
1. Marinica M.-C., Ventelon L., Gilbert M., Provaille L., Dudarev S.L., Marian J., Bencteux G., Willaime F. Interatomic potentials for modelling radiation defects and dislocations in tungsten. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2013, vol. 25, no. 39, article number 395502. DOI: [10.1088/0953-8984/25/39/395502](https://doi.org/10.1088/0953-8984/25/39/395502).
  2. Babicheva R.I., Evazzade I., Korznikova E.A., Shepelev I.A., Zhou K., Dmitriev S.V. Low-energy channel for mass transfer in Pt crystal initiated by molecule impact. *Computational Materials Science*, 2019, vol. 163, pp. 248–255. DOI: [10.1016/j.commat.2019.03.022](https://doi.org/10.1016/j.commat.2019.03.022).
  3. Sand A.E., Nordlund K., Dudarev S.L. Radiation damage production in massive cascades initiated by fusion neutrons in tungsten. *Journal of Nuclear Materials*, 2014, vol. 455, no. 1-3, pp. 207–211. DOI: [10.1016/j.jnucmat.2014.06.007](https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2014.06.007).
  4. Chetverikov A.P., Shepelev I.A., Korznikova E.A., Kistanov A.A., Dmitriev S.V., Velarde M. Breathing subsonic crowdion in morse lattices. *Computational Condensed Matter*, 2017, vol. 13, pp. 59–64. DOI: [10.1016/j.cocom.2017.09.004](https://doi.org/10.1016/j.cocom.2017.09.004).
  5. Shepelev I.A., Bayazitov A.M., Korznikova E.A. Modeling of supersonic crowdion clusters in FCC lattice: Effect of the interatomic potential. *Journal of Micromechanics and Molecular Physics*, 2021, vol. 6, no. 1, article number 2050019. DOI: [10.1142/S2424913020500198](https://doi.org/10.1142/S2424913020500198).
  6. Shepelev I.A., Dmitriev S.V., Kudreyko A.A., Velarde M.G., Korznikova E.A. Supersonic voidions in 2D Morse lattice. *Chaos, Solitons and Fractals*, 2020, vol. 140, article number 110217. DOI: [10.1016/j.chaos.2020.110217](https://doi.org/10.1016/j.chaos.2020.110217).
  7. Shepelev I.A., Bachurin D.V., Korznikova E.A., Bayazitov A.M., Dmitriev S.V. Mechanism of remote vacancy emergence by a supersonic crowdion cluster in a 2D Morse lattice. *Chinese Journal of Physics*, 2021, vol. 70, pp. 355–362. DOI: [10.1016/j.cjph.2021.01.010](https://doi.org/10.1016/j.cjph.2021.01.010).
  8. Korznikova E., Schafner E., Steiner G., Zehetbauer M. Measurements of vacancy type defects in SPD deformed Ni. *Ultrafine grained materials*. PA, The Minerals, Metals & Materials Society Publ., 2006, pp. 97–102.
  9. Xu A., Armstrong D.E., Beck C., Moody M.P., Smith G.D., Bagot P.A.J., Roberts S.G. Ion-irradiation induced clustering in W-Re-Ta, W-Re and W-Ta alloys: An atom probe tomography and nanoindentation study. *Acta Materialia*, 2017, vol. 124, pp. 71–78. DOI: [10.1016/j.actamat.2016.10.050](https://doi.org/10.1016/j.actamat.2016.10.050).
  10. Yankovskaya U.I., Zakharov P.V. Heat resistance of a Pt crystal reinforced with CNT's. *Materials. Technologies. Design*, 2021, vol. 3, no. 4, pp. 64–67. DOI: [10.54708/26587572\\_2021\\_34664](https://doi.org/10.54708/26587572_2021_34664).
  11. Mazilova T.I., Sadanov E.V., Voyevodin V.N., Ksenofontov V.A., Mikhailovskij I.M. Impact-induced concerted mass transport on W surfaces by a voidion mechanism. *Surface Science*, 2018, vol. 669, pp. 10–15. DOI: [10.1016/j.susc.2017.11.002](https://doi.org/10.1016/j.susc.2017.11.002).
  12. Zakharov P.V., Korznikova E.A., Dmitriev S.V., Ekomasov E.G., Zhou K. Surface discrete breathers in Pt3Al intermetallic alloy. *Surface Science*, 2019, vol. 679, pp. 1–5. DOI: [10.1016/j.susc.2018.08.011](https://doi.org/10.1016/j.susc.2018.08.011).
  13. Ryabov D.S., Chechin G.M., Upadhyaya A., Korznikova E.A., Dubinko V.I., Dmitriev S.V. Delocalized nonlinear vibrational modes of triangular lattices. *Nonlinear Dynamics*, 2020, vol. 102, no. 4, pp. 2793–2810. DOI: [10.1007/s11071-020-06015-5](https://doi.org/10.1007/s11071-020-06015-5).
  14. Evazzade I., Lobzenko I., Korznikova E., Ovid'Ko I., Roknabadi M., Dmitriev S.V. Energy transfer in strained graphene assisted by discrete breathers excited by external ac driving. *Physical Review B*, 2017, vol. 95, no. 3, article number 035423. DOI: [10.1103/PhysRevB.95.035423](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.95.035423).
  15. Singh M., Morkina A.Y., Korznikova E.A., Dubinko V.I., Terentiev D.A., Xiong D., Naimark O.B., Gani V.A., Dmitriev S.V. Effect of discrete breathers on the specific heat of a nonlinear chain. *Journal of Nonlinear Science*, 2021, vol. 31, no. 1, article number 12. DOI: [10.1007/s00332-020-09663-4](https://doi.org/10.1007/s00332-020-09663-4).
  16. Korznikova E.A., Fomin S.Yu., Soboleva E.G., Dmitriev S.V. Highly symmetric discrete breather in a two-dimensional Morse crystal. *JETP Letters*, 2016, vol. 103, no. 4, pp. 277–281. DOI: [10.1134/S0021364016040081](https://doi.org/10.1134/S0021364016040081).
  17. Chechin G.M., Sakhnenko V.P. Interactions between normal modes in nonlinear dynamical systems with discrete symmetry. Exact results. *Physica D: Nonlinear Phenomena*, 1998, vol. 117, no. 1-5, pp. 43–76. DOI: [10.1016/S0167-2789\(98\)80012-2](https://doi.org/10.1016/S0167-2789(98)80012-2).
  18. Han S., Zepeda-Ruiz L.A., Ackland G.J., Car R., Srolovitz D.J. Interatomic potential for vanadium suitable for radiation damage simulations. *Journal of Applied Physics*, 2003, vol. 93, no. 6, pp. 3328–3335. DOI: [10.1063/1.1555275](https://doi.org/10.1063/1.1555275).
  19. Marinica M.-C., Ventelon L., Gilbert M.R., Provaille L., Dudarev S.L., Marian J., Bencteux G., Willaime F. Interatomic potentials for modelling radiation defects and dislocations in tungsten. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2013, vol. 25, no. 39, article number 395502. DOI: [10.1088/0953-8984/25/39/395502](https://doi.org/10.1088/0953-8984/25/39/395502).
  20. Tadmor E.B., Elliott R.S., Sethna J.P., Miller R.E., Becker C.A. The potential of atomistic simulations and the knowledgebase of interatomic models. *JOM*, 2011, vol. 63, no. 7, pp. 17. DOI: [10.1007/s11837-011-0102-6](https://doi.org/10.1007/s11837-011-0102-6).
  21. Tadmor E. Finnis-Sinclair potential (LAMMPS cubic hermite tabulation) for W developed by Marinica et al.; Potential EAM4 v000. *OpenKIM*. 2013. DOI: [10.25950/ce93b9c6](https://doi.org/10.25950/ce93b9c6).
  22. Lee B.-J. Model parameterization of 2NN MEAM model. *OpenKIM*. 2014. URL: [https://openkim.org/cite/MO\\_145522277939\\_001](https://openkim.org/cite/MO_145522277939_001).
  23. Olsson P.A. Semi-empirical atomistic study of point defect properties in BCC transition metals. *Computational Materials Science*, 2009, vol. 47, no. 1, pp. 135–145. DOI: [10.1016/j.commat.2009.06.025](https://doi.org/10.1016/j.commat.2009.06.025).



24. Zhou X.W., Johnson R.A., Wadley H.N.G. Misfit-energy-increasing dislocations in vapor-deposited CoFe/NiFe multilayers. *Physical Review B - Condensed*

*Matter and Materials Physics*, 2004, vol. 69, no. 14, pp. 144113-1-144113-10. DOI: [10.1103/PhysRevB.69.144113](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.69.144113).

## The selection of interatomic potentials for simulation of extreme actions within the tungsten lattice

© 2022

*Alina Yu. Morkina*<sup>\*1,6</sup>, graduate student

*Ilyas I. Tuvalev*<sup>2,7</sup>, student

*Sergey V. Dmitriev*<sup>3,8</sup>, Doctor of Sciences (Physics and Mathematics), Professor, leading researcher

*Yuri V. Bebikhov*<sup>4,9</sup>, PhD (Physics and Mathematics), Associate Professor

*Aleksandr S. Semenov*<sup>4,10</sup>, PhD (Physics and Mathematics), Associate Professor

*Yuliya R. Sharapova*<sup>5</sup>, laboratory assistant

<sup>1</sup>Ufa State Aviation Technical University, Ufa (Russia)

<sup>2</sup>Bashkir State University, Ufa (Russia)

<sup>3</sup>Institute of Physics of Molecules and Crystals of Ufa Federal Research Center of the Russian Academy of Sciences, Ufa (Russia)

<sup>4</sup>Mirny Polytechnic Institute (branch) of North-Eastern Federal University, Mirny (Russia)

<sup>5</sup>Institute for Metals Superplasticity Problems of the RAS, Ufa (Russia)

\*E-mail: [alinamorkina@yandex.ru](mailto:alinamorkina@yandex.ru)

<sup>6</sup>ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-3989-0376>

<sup>7</sup>ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-9341-4178>

<sup>8</sup>ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-6744-4445>

<sup>9</sup>ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-8366-4819>

<sup>10</sup>ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-9940-3915>

Received 04.05.2022

Accepted 18.07.2022

**Abstract:** Simulation of crystal lattices under conditions far from equilibrium is an increasingly important subject of research and requires confidence in the validity of the applied interatomic potentials in a wide range of atom deviations from the balanced condition. To make such an assessment for modeling tungsten as an advanced material for various nuclear applications, the authors analyzed the nonlinear behavior of the lattice using several interatomic potentials. In a BCC tungsten crystal, oscillations were simulated according to the laws of several delocalized nonlinear vibrational modes – exact solutions to the equations of motion of atoms, the geometry of which is determined by the lattice symmetry at any amplitudes and does not depend on the type of interaction between the nodes. The authors considered two-dimensional cases of oscillations in one of the close-packed planes and three-dimensional cases when the motions of atoms have three components in space for a tungsten cell consisting of 2000 atoms and  $31.6 \times 31.6 \times 31.6$  Å in size. The amplitude-frequency characteristics of these modes were calculated for several interatomic potentials available in the LAMMPS library. The study identified that several interatomic potentials, namely *eam.fs*, *set*, *Olsson*, and *Zhou* show practically identical results, which is an indirect confirmation of their validity and the possibility of their use for modeling extreme impacts in the considered lattice. The authors calculated such characteristics of the system as kinetic energy, heat capacity, and pressure. Based on the results obtained, one can assume that mode 15, due to the modulation instability, will lead to the energy localization on individual atoms.

**Keywords:** tungsten; molecular dynamics method; delocalized nonlinear vibrational modes.

**Acknowledgments:** The study was financially supported by the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation within the state assignment of the Federal State Budgetary Educational Institution of Higher Education “USATU” (agreement No. 075-03-2022-318/1) “Youth Research Laboratory of the REC “Metals and Alloys under the Extreme Conditions” for A.Yu. Morkina (calculations), grant No. NSh-4320.2022.1.2 for I.I. Tuvalev (analysis and discussion of the results), the RSF grant No. 21-12-00275 for A.S. Semenov (problem setting, research conceptualization).

**For citation:** Morkina A.Yu., Tuvalev I.I., Dmitriev S.V., Bebikhov Yu.V., Semenov A.S., Sharapova Yu.R. The selection of interatomic potentials for simulation of extreme actions within the tungsten lattice. *Frontier Materials & Technologies*, 2022, no. 3, pp. 16–24. DOI: 10.18323/2782-4039-2022-3-2-16-24.