

NEWS

OF THE NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES OF THE REPUBLIC OF KAZAKHSTAN

PHYSICO-MATHEMATICAL SERIES

ISSN 1991-346X

Volume 5, Number 297 (2014), 16 – 24

CALCULATION METHODS OF VACANCY MIGRATION ENERGY IN FCC METALS

K. Baigisova

Kazakh national technical university named after K. I. Satpayev, Almaty, Kazakhstan.

E-mail: kymbat_b@mail.ru, baigisova.k@gmail.com

Key words: vacancy migration energy, calculation methods, comparative analysis of calculation methods.

Abstract. In this paper several modern calculation methods of vacancy migration energy in metals using density functional theory and semi-empirical methods are considered. The comparative analysis was performed on such items as comparability of the calculated values of vacancy migration energy with experimental results, taking into account the relaxation of atoms around vacancies, and simplicity of calculations. Al, Cu и Ni were taken for comparative analysis.

УДК 538.9

МЕТОДЫ РАСЧЕТА ЭНЕРГИИ МИГРАЦИИ ВАКАНСИЙ В ГЦК МЕТАЛЛАХ

К. Б. Байгисова

Казахский национальный технический университет им. К. И. Сатпаева, Алматы, Казахстан

Ключевые слова: энергия миграции вакансий, методы расчета, сравнительный анализ методов расчета.

Аннотация. Рассмотрены методы расчета энергии миграции вакансий в металлах с использованием теории функционала плотности и полуэмпирических методов. Сравнительный анализ проводился по таким показателям, как сопоставимость рассчитанных значений энергии миграции вакансий с экспериментальными результатами, учет релаксации атомов вокруг вакансий, и простота вычислений. Для сравнительного анализа были выбраны Al, Cu и Ni.

В результате экстремальных воздействий таких, как пластическая деформация, быстрое охлаждение, и радиационное повреждение образуются неравновесная концентрация точечных дефектов в металлах. Изменение структуры проявляется и в изменении функциональных характеристик и свойств металла. Одним из основных параметров, определяющих поведение точечных дефектов в металлах, является энергия миграции вакансий. Зная значение энергии миграции вакансий, можно понять и предсказать поведение дефектов и свойств материалов [1].

Расчетные данные энергии миграции вакансий в металлах, полученные различными методами, как правило, не совпадают с экспериментальными значениями. Поэтому совершенствование методов расчета энергии миграции вакансий в твердых телах остается актуальной задачей.

Исходным пунктом при решении таких задач является определение потенциала взаимодействия атомов [2, 3]. Наряду с определением потенциала взаимодействия атомов для расчета энергии миграции вакансий также важен и учет релаксации атомов вокруг вакансии.

В данной работе для сравнительного анализа были выбраны три показателя: сопоставимость рассчитанных значений энергии миграции вакансий с экспериментальными результатами, поскольку применимость рассчитанных значений с помощью любого метода определяется в сравнении с

экспериментальными данными; учет процесса релаксации атомов вокруг вакансий: это дает более реалистичное описание поведения дефектов; простота вычислений: во избежание использования множества подгоночных параметров необходимо упростить метод вычислений.

Парный потенциал Морзе является одним из наиболее простых видов межатомных потенциалов для описания межатомных взаимодействий в молекулярной динамике. Он не имеет квантовомеханического обоснования и относится к полуэмпирическим потенциалам. Для определения энергии миграции вакансии с помощью потенциала Морзе используют несколько подходов.

В работе [4] реализован один из таких подходов. Суть метода заключается в том, что модельный кристалл с ГЦК структурой, состоящий из N атомов, разбивается на семейство конфигурационных сфер. Для этого выбирается один атом в качестве центрального. Атомы, ближайшие к центральному атому, образуют первую конфигурационную сферу.

Следующие атомы, расположенные на одинаковом расстоянии от центрального атома, образуют вторую конфигурационную сферу (в расчете был выбран ГЦК кристалл, состоящий из центрального атома и 1060 атомов, расположенных в 30-ти конфигурационных сферах вокруг центрального атома). Эта процедура продолжается до полного размещения всех атомов модельного кристалла по конфигурационным сферам. В таком случае i -ая конфигурационная сфера будет иметь радиус

$$R_i = a\sqrt{m_i^2 + n_i^2 + l_i^2},$$

где m_i, n_i, l_i – кристаллографические индексы атомов, расположенных на i -ой конфигурационной сфере; a – параметр кристаллической решетки.

Далее с помощью потенциала Морзе вычисляется энергия взаимодействия между собой всех атомов кристалла при наличии вакансии в первой конфигурационной сфере, затем во второй конфигурационной сфере и т.д.

Потенциал Морзе выражается следующей формулой:

$$U_i = U(r_i) = D \left\{ \exp[-2\alpha(r_i - r_0)] - 2 \exp[-\alpha(r_i - r_0)] \right\}. \quad (1)$$

где D – параметр, показывающий величину минимума потенциала, r_0 – расстояние между атомами, соответствующее минимуму потенциала, α – параметр, определяющий кривизну потенциала. Если ввести постоянную $\zeta = \exp(\alpha r_0)$, а расстояние между атомами выразить, используя кристаллографические индексы m_i, n_i, l_i положения i -го атома относительно начального атома в решетке кубического кристалла и параметр решетки a (при температуре $T=0$ К параметр решетки будет a_0), то потенциал Морзе можно представить удобной для расчетов формулой

$$U_i(a) = D\zeta^2 \exp(-2\alpha a M_i) - 2D\zeta \exp(-\alpha a M_i).$$

где

$$r_i = a M_i, \quad M_i = \sqrt{m_i^2 + n_i^2 + l_i^2}.$$

Энергия взаимодействия N атомов находится по формуле

$$E_s = \frac{1}{2} N D \zeta^2 \sum_i^N \exp(-2\alpha a_0 M_i) - N D \zeta \sum_i^N \exp(-\alpha a_0 M_i). \quad (2)$$

Коэффициент $1/2$ появляется из-за того, что в качестве начального может быть любой атом решетки и $U_{ii} = U_i$.

Для определения α, D и r_0 используются три уравнения [5]:

$$\begin{aligned} \varepsilon_s &= \frac{1}{2} D \zeta^2 \sum_i^N \exp(-2\alpha a_0 M_i) - D \zeta \sum_i^N \exp(-\alpha a_0 M_i), \\ 0 &= -\zeta \sum_i^N M_i \exp(-2\alpha a_0 M_i) + \sum_i^N M_i \exp(-\alpha a_0 M_i), \\ -\frac{9K a_0}{c} &= 2\alpha^2 D \zeta^2 \sum_i^N M_i^2 \exp(-2\alpha a_0 M_i) - \alpha^2 D \zeta \sum_i^N M_i^2 \exp(-\alpha a_0 M_i), \end{aligned} \quad (3)$$

где ε_s – энергия сублимации, приходящаяся на один атом, K – модуль объемной упругости. Промежуточная величина M_i , используемая для вычисления параметров потенциала Морзе, и зависящая от суммы квадратов кристаллографических индексов, меняется скачками (дискретна).

В таблице 1 дано сравнение значений параметров потенциала Морзе, взятых из литературных источников и полученных нами по предложенной методике, для Al, Cu и Ni.

Таблица 1 – Сравнительные данные о параметрах потенциала Морзе ГЦК металлов

Металл	Параметры, вычисленные в настоящей работе			Параметры, полученные в других работах			Источник
	$\alpha, \times 10^{-1} \text{ нм}^{-1}$	D, эВ	$r_0, \times 10^{-1}, \text{ нм}^{-1}$	$\alpha, \times 10^{-1} \text{ нм}^{-1}$	D, эВ	$r_0, \times 10^{-1}, \text{ нм}^{-1}$	
Al	1.084	-0.270	3.552	1.165	-0.270	3.253	[6]
Cu	1.363	-0.332	2.987	1.359	-0.343	2.866	[6]
Ni	1.283	-0.375	3.039	1.420	-0.420	2.780	[6]

Обозначим через E_{i1} энергию взаимодействия атомов при наличии вакансии в i -ой конфигурационной сфере. Миграция вакансии внутри этой сферы начинается с того, что ближайший к вакансии атом «поднимается» на соседнюю седловину потенциального рельефа в точку, находящуюся посередине между двумя соседними узлами кристаллической решетки, т.е. оказывается между i -ой и $(i-1)$ конфигурационными сферами (в случае $i=1$ – между первой конфигурационной сферой и центральным атомом). Для этого состояния кристалла характерно наличие двух вакансий: одной в i -ой конфигурационной сфере и второй на месте атома, находящегося в седловой точке между i -ой и $(i-1)$ конфигурационными сферами. Энергия, соответствующая этому состоянию будет E_{i2} . Тогда энергия миграции вакансий в кубическом кристалле определяется простой формулой

$$E_m^v = E_{i2} - E_{i1} \quad (4)$$

В таблице 2 приведены значения энергии миграции вакансий в ГЦК металлах, вычисленные по предлагаемому методу, в сравнении с экспериментальными результатами и данными расчетов, известными из литературы.

Таблица 2 – Значения энергии миграции вакансий в ГЦК металлах

Металл	$\varepsilon_s, \text{ эВ}$	$E_m^v, \text{ эВ}$				
		Метод 1	Метод 2	Метод 3	Литературные данные	Экспериментальные данные [8]
Al	3,04 [16]	1,17	0,69	0,59	0,66 [7] 0,775; 0,96 [8]	0,58-0,66
Cu	3,52 [15]	1,19	0,80	0,68	0,77-1,00 [8]	0,60-1,08
Ni	4,39 [15]	1,07	1,0	0,86	1,04-1,25 [8]	1,20-1,27

В последнее время для расчета E_m^v чаще всего используется метод погруженного атома (МПА) [9-14]. Суть МПА состоит в том, что каждый атом системы рассматривается как примесь, погруженная в ансамбль, состоящий из всех оставшихся атомов. Формула определения потенциальной энергии системы атомов в кристалле, которая впервые была предложена в работах M.S. Dow и M.I. Baskes имеет следующий вид:

$$U = \sum_i \left[\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \varphi(r_{ij}) + \Phi(\rho_i) \right], \quad (5)$$

где r_{ij} – расстояние между исходным i -ым атомом и другим атомом j , $\varphi(r_{ij})$ – парный потенциал, $\Phi(\rho_i)$ – энергия погружения атома, которая зависит от локальной величины электронной плотности ρ_i в точке расположения i -го атома.

$$\rho_i = \sum_{j=1}^N f_j(r). \quad (6)$$

Здесь $f_j(r)$ – вклад j -го атома в локальную электронную плотность атома i .

В МПА электронная плотность в точке представляется как суперпозиция электронных плотностей каждого атома и их взаимодействие предполагается сферически симметричным, что для переходных металлов является серьезным допущением.

Преимуществом МПА по сравнению с парными потенциалами, в том числе потенциалом Морзе, является эффективный учет ион-электронного взаимодействия, который осуществляется функцией погружения $\Phi(\rho_i)$.

Поиск вида функций $\varphi(r_{ij})$, $f_i(r)$, $\Phi(\rho_i)$ является сложной задачей. В большинстве случаев происходит выбор различных аппроксимирующих формул с заданными параметрами, значения которых подгоняются под экспериментальные значения известных величин.

В работе [13] МПА был модифицирован путем использования представления о бимодальном распределении электронной плотности в кристалле, которая имеет максимумы в центрах октаэдрических и тетраэдрических пустот кристаллической решетки металла, т.е. допускается, что в этих пустотах могут находиться электроны проводимости с вероятностью, превышающей среднюю или фоновую вероятность по всему кристаллу. Тогда расстояние между вершинными узлами и центрами граней ГЦК решетки, с одной стороны, и центрами октаэдрических и тетраэдрических пустот – с другой стороны, можно считать расстоянием между атомными остовами и электронами проводимости. Зная расстояние между всеми атомными остовами и электронами проводимости, можно определить их потенциал взаимодействия.

Отличие предложенного метода от других МПА, в данном методе используется только один подгоночный параметр и значения энергии миграции вакансий гораздо лучше совпадают с экспериментальными значениями. Расчет E_m^v в этом методе был проведен следующим образом. В континууме ГЦК кристалла выделяется кубик, состоящий из n^3 элементарных ячеек. Начало координат помещается в центр такого кубика. Затем находятся координаты всех узлов и центров граней элементарных ячеек, а также центров октаэдрических и тетраэдрических пустот решетки. Тетраэдрические пустоты используются все, а из октаэдрических пустот используются только те, которые расположены в центрах элементарных ячеек. Из кубика, выделенного из континуума, удаляется атом, расположенный в начале координат или на расстоянии $a/2$ от начала координат, и вычисляется U_1 – потенциал взаимодействия атомных остовов и электронов проводимости при наличии одной вакансии. Здесь a – параметр кристаллической решетки металла. Затем вычисляется потенциал U_2 для кубика, имеющего две вакансии, первая из которых находится или в начале координат, или на расстоянии $a/2$ от начала координат, а вторая – на расстоянии $\frac{a\sqrt{2}}{2}$ от первой вакансии и одного атома между двумя вакансиями (атом находится в седловой точке).

Тогда

$$E_m^v = u_2 - u_1, \quad (7)$$

где $u_1 = U_1/N_1$ и $u_2 = U_2/N_2$. Здесь $N_1 = N - 1$, а N – число атомов в решетке без вакансий. Кубик в континууме ГЦК кристалла выделяется произвольным образом, поэтому значение E_m^v , вычисленное по формуле (7), можно отнести ко всему кристаллу.

Энергия взаимодействия атомных остовов и электронов проводимости в металле U , будучи кулоновским потенциалом, определяется эффективным зарядом q_{ef} и расстоянием r между узлами и центрами граней, октаэдрических и тетраэдрических пустот решетки:

$$U = k \frac{q_{ef}^2}{r}, \quad (8)$$

где k – коэффициент пропорциональности.

Согласно принципу суперпозиции, потенциал взаимодействия ионов (атомных остовов) и электронов в решетке металла может быть представлен следующей формулой:

$$U = U^I + U^{II} + U^{III} + U^{IV} + U^V + U^{VI}. \quad (9)$$

Здесь U^I – потенциал взаимодействия ионов, U^{II} – потенциал взаимодействия ионов с электронами, находящимися в октаэдрических пустотах, U^{III} – потенциал взаимодействия ионов с электронами, находящимися в тетраэдрических пустотах, U^{IV} – потенциал взаимодействия электронов, находящихся в октаэдрических пустотах, U^V – потенциал взаимодействия электронов, находящихся в тетраэдрических пустотах, U^{VI} – потенциал взаимодействия электронов, находящихся в октаэдрических пустотах, с электронами, находящимися в тетраэдрических пустотах.

После преобразований получим:

$$U = \frac{q_{ef}^2}{8\pi\epsilon_0 a} \sum_1^N \sum_1^N r_{ij}^{-1} - \frac{q_{ef}^2}{4\pi\epsilon_0 a} \sum_1^N \sum_1^{N^o} r_{ij}^{-1} - \frac{q_{ef}^2}{4\pi\epsilon_0 a} \sum_1^N \sum_1^{N^t} r_{ij}^{-1} + \frac{q_{ef}^2}{8\pi\epsilon_0 a} \sum_1^{N^o} \sum_1^{N^o} r_{ij}^2 + \\ + \frac{q_{ef}^2}{8\pi\epsilon_0 a} \sum_1^{N^t} \sum_1^{N^t} r_{ij}^{-1} + \frac{q_{ef}^2}{4\pi\epsilon_0 a} \sum_1^{N^o} \sum_1^{N^t} r_{ij}^{-1} = \frac{q_{ef}^2}{8\pi\epsilon_0 a} (S_1 - 2S_2 - 2S_3 + S_4 + S_5 + 2S_6),$$

где S_1, S_2, S_3, S_4, S_5 и S_6 – суммы обратных расстояний, выраженные через кристаллографические индексы. Знак «-» указывает на потенциал притяжения.

Приравнивая к U энергию сублимации металла ϵ_s и, вычисляя суммы обратных расстояний, можно найти эффективный заряд электрона в квадрате

$$q_{ef}^2 = \frac{N\epsilon_s}{bS}. \quad (10)$$

Здесь $b = \frac{1}{8\pi\epsilon_0 a\sigma}$, σ – коэффициент перевода Дж в эВ; $S = S_1 - 2S_2 - 2S_3 + S_4 + S_5 + 2S_6$.

Потенциал взаимодействия атомов и электронов кристаллика с одной вакансией, приходящийся на один атом, будет определяться выражением

$$u_1 = \frac{bq_{ef}^2 S_{1v}}{N_1} = \epsilon_s \frac{NS_{1v}}{N_1 S}, \quad (11)$$

а потенциал взаимодействия атомов и электронов кристаллика с двумя вакансиями и одним атомом между ними, приходящийся на один атом, будет определяться формулой

$$u_2 = \frac{bq_{ef}^2 S_{2v}}{N_1} = \epsilon_s \frac{NS_{2v}}{N_1 S}. \quad (12)$$

Тогда энергия миграции вакансий в металле, в соответствии с формулой (7), будет

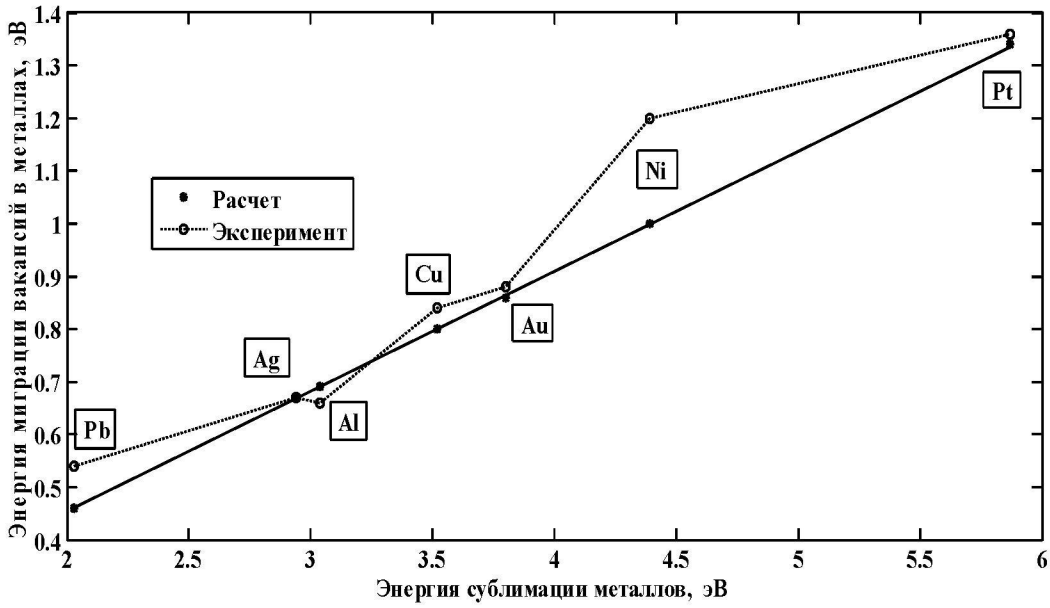
$$E_m^v = u_2 - u_1 = \epsilon_s \frac{N}{N_1} (S_{2v} - S_{1v}) / S \quad (13)$$

В формулах (11)-(13) S_{1v} и S_{2v} – это S для кристалликов с одной и двумя вакансиями. Вычисленные значения E_m^v по формуле (13) представлены в таблице 2.

В формуле (13) соотношение $\frac{N}{N_1} (S_{2v} - S_{1v}) / S$ одинаково для всех ГЦК металлов. Поэтому из

этой формулы следует, что E_m^v прямо пропорциональна ϵ_s , однако зависимость между экспериментальными значениями E_m^v и ϵ_s не является линейной (рисунок).

В работе [14] предлагается некоторое усовершенствование метода, изложенного в [13], путем учета релаксации атомов, окружающих вакансии, при вычислении U_1 и U_2 . Когда из кубика, выделенного из континуума, удаляется атом, расположенный в начале координат, или на расстоянии $a/2$ от начала координат, т.е. образуется вакансия, то остальные атомы, окружавшие удаленный атом, смещаются со своих мест в кристаллической решетке, и это смещение должно учитываться. К примеру, в Си расстояние между атомами, окружающими вакансию, в первой координационной сфере уменьшается примерно на 2 %. Расстояние между атомами, окружающими вакансию, во второй координационной сфере увеличивается примерно на 0,2 % и т.д. [17].



Зависимость энергии миграции вакансий от энергии сублимации для ряда ГЦК металлов

Поэтому вполне допустимо, что в результате релаксации атомов вокруг вакансии кубик, выделенный из континуума, сохраняет тип кристаллической решетки, но при этом параметр решетки несколько изменяется. Как в работе [13] допускается, что значение эффективного заряда электрона проводимости сохраняется при образовании вакансии. Измененный параметр кристаллической решетки можно определить, используя модули упругости кристалла C_{11} или C_{44} .

При деформации кристалла изменится не только расстояние между рассматриваемыми атомами, но величина ортов и углы между ними. Связь измененных ортов с первоначальными устанавливается следующими соотношениями [18]:

$$\begin{aligned} i' &= (1 + e_{xx})\mathbf{i} + e_{xy}\mathbf{j} + e_{xz}\mathbf{k} \\ j' &= e_{yx}\mathbf{i} + (1 + e_{yy})\mathbf{j} + e_{yz}\mathbf{k} \\ k' &= e_{zx}\mathbf{i} + e_{zy}\mathbf{j} + (1 + e_{zz})\mathbf{k} \end{aligned} \tag{14}$$

где $e_{xx}, e_{xy}, e_{xz}, e_{yx}, e_{yy}, e_{yz}, e_{zx}, e_{zy}, e_{zz}$ – компоненты тензора деформации, которые с точностью до первого порядка равняются относительным изменениям ортов при деформации кристалла.

При малых деформациях кристалла смещение атома \mathbf{r} будет

$$\mathbf{r} = R_x(\mathbf{i}' - \mathbf{i}) + R_y(\mathbf{j}' - \mathbf{j}) + R_z(\mathbf{k}' - \mathbf{k}).$$

Или с учетом (14)

$$\begin{aligned} \mathbf{r} &= (R_x \cdot e_{xx} + R_y \cdot e_{yx} + R_z \cdot e_{zx})\mathbf{i} + (R_x \cdot e_{xy} + R_y \cdot e_{yy} + R_z \cdot e_{zy})\mathbf{j} + \\ &+ (R_x \cdot e_{xz} + R_y \cdot e_{yz} + R_z \cdot e_{zz})\mathbf{k} \end{aligned} \tag{15}$$

Плотность упругой энергии деформированного кристалла можно записать в виде [18]:

$$u = \frac{1}{2}C_{11}(e_{xx}^2 + e_{yy}^2 + e_{zz}^2) + \frac{1}{2}C_{44}(e_{yx}^2 + e_{zx}^2 + e_{zy}^2) + \frac{1}{2}C_{12}(e_{yy}e_{xx} + e_{zz}e_{xx} + e_{xx}e_{yy}), \tag{16}$$

где C_{12} – также модуль упругости кристалла. Из (16) можно получить следующие соотношения:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial e_{xx}^2} = C_{11}, \quad \frac{\partial^2 u}{\partial e_{zx}^2} = C_{44} \tag{17}$$

Формула (17) применима в рамках представления кристалла однородной и непрерывной средой, т.е. в рамках континуального приближения. В случае кристалла, состоящего из атомов, расположенных на определенных расстояниях друг от друга, соотношения (17) должны быть записаны в следующем виде:

$$C_{11} = \sum_i^N \sum_j^N \left(\frac{\partial r_{ij}}{\partial e_{xx}} \right)^2 \frac{\partial^2 u(r_{ij})}{\partial r_{ij}^2}, \quad C_{44} = \sum_i^N \sum_j^N \left(\frac{\partial r_{ij}}{\partial e_{zx}} \right)^2 \frac{\partial^2 u(r_{ij})}{\partial r_{ij}^2}. \quad (18)$$

Модули упругости в виде (18) позволяют суммировать вклад всех атомов в плотность энергии деформации. С учетом, что смещение j -го атома относительно i -го атома при деформации dr_{ij} можно выразить через изменение параметра решетки da . При этом модуль упругости имеет вид:

$$C_{11} = \sum_i^N \sum_j^N \left(\frac{\partial r_{ij}}{\partial e_{xx}} \right)^2 \left(\frac{\partial a}{\partial r_{ij}} \right)^2 \frac{\partial^2 u_{ij}(a)}{\partial a^2}, \quad C_{44} = \sum_i^N \sum_j^N \left(\frac{\partial r_{ij}}{\partial e_{zx}} \right)^2 \left(\frac{\partial a}{\partial r_{ij}} \right)^2 \frac{\partial^2 u_{ij}(a)}{\partial a^2}. \quad (19)$$

Используя (15) легко показать, что

$$\left(\frac{\partial r_{ij}}{\partial e_{xx}} \right)^2 = \frac{R_{xij}^2 r_{xij}^2}{\partial r_{ij}^2} = \frac{a^2 (m_i - m_j)^4}{(m_i - m_j)^2 + (n_i - n_j)^2 + (l_i - l_j)^2},$$

где $m_i, m_j, n_i, n_j, l_i, l_j$ – кристаллографические индексы, указывающие координаты узлов, центров граней, октаэдрических и тетраэдрических пустот решетки.

Плотность энергии – это общая энергия кристалла U , отнесенная к его объему V . Поэтому уравнение для определения измененного параметра решетки будет иметь следующий вид:

$$C_{11} = \frac{5a^2 q_{ef}^2 S_v}{2\pi \varepsilon_0 n a_1^6}, \quad (20)$$

где $S_v = S_1 - 2S_2 - 2S_3 + S_4 + S_5 + 2S_6$, ε_0 – электрическая постоянная, n – число элементарных ячеек в выбранном кубике, a_1 – параметр решетки кристаллика, содержащего вакансию (измененный параметр решетки), N, N^o, N^t – число атомов, октаэдрических и тетраэдрических пустот решетки.

Эффективный заряд электрона определяется из соотношения

$$U = \frac{q_{ef}^2}{8\pi \varepsilon_0 a} \sum_1^N \sum_1^N r_{ij}^{-1} - \frac{q_{ef}^2}{4\pi \varepsilon_0 a} \sum_1^N \sum_1^{N^o} r_{ij}^{-1} - \frac{q_{ef}^2}{4\pi \varepsilon_0 a} \sum_1^N \sum_1^{N^t} r_{ij}^{-1} + \frac{q_{ef}^2}{8\pi \varepsilon_0 a} \sum_1^{N^o} \sum_1^{N^o} r_{ij}^2 + \frac{q_{ef}^2}{8\pi \varepsilon_0 a} \sum_1^{N^t} \sum_1^{N^t} r_{ij}^{-1} + \frac{q_{ef}^2}{4\pi \varepsilon_0 a} \sum_1^{N^o} \sum_1^{N^t} r_{ij}^{-1}, \quad (21)$$

Конечная формула для расчета E_m^v выражается следующим образом:

$$E_m^v = \frac{N \varepsilon_s a}{S(N-1)} \left(\frac{S_{vv}}{a_2} - \frac{S_v}{a_1} \right) \quad (22)$$

где ε_s – энергия сублимации металла, a_2 – параметр решетки кристалла, содержащего атом в седловой точке, S_{vv} – сумма обратных расстояний для кристалла с атомом в седловой точке, S – сумма обратных расстояний в формуле (21).

В таблице 2 в пятом столбце показаны значения E_m^v для ГЦК металлов, рассчитанные по формуле (22).

Обсуждение результатов и выводы. Из таблицы 2 видно, что значения E_m^v для Al, Cu и Ni, полученные с помощью метода Морзе, находятся в удовлетворительном согласии с экспериментальными результатами (кроме Al, что, возможно, связано с переменной валентностью алюминия). Данный метод достаточно прост в использовании для расчета E_m^v , но не учитывает релаксацию атомов вокруг вакансий в кристалле.

Значения энергии миграции вакансий, вычисленные модифицированным МПА с одним подгонным параметром, гораздо лучше совпадают с экспериментальными значениями. Этот метод очень удобен для расчета E_m^v , но зависимость E_m^v от ε_s металлов является линейной, что не соответствует зависимости экспериментальных значений E_m^v от ε_s . Такое несоответствие вызвано, скорее

всего, тем, что в данном методе также игнорируется релаксация атомов вокруг вакансий в кристалле металла.

Результаты вычисления E_m^v модифицированным МПА с учетом релаксации атомов вокруг вакансий показывают хорошее согласие расчетных значений с экспериментальными данными. Помимо этого зависимость E_m^v от ε_s металлов является нелинейной, что в большей степени соответствует зависимости между экспериментальными значениями E_m^v и ε_s .

Таким образом, наиболее приемлемым методом вычисления значений E_m^v для металлов является модифицированный МПА при учете релаксации атомов вокруг вакансий.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Калинин Б.А. Физическое материаловедение. – Т. 4: Физические основы прочности. Радиационная физика твердого тела. Компьютерное моделирование. Учебник для вузов. – М.: МИФИ, 2008. – 696 с.
- [2] Marian J., Wirth B. D., Caro A., Sadigh B., Odette G. R., Perlado J. M., T. Diaz de la Rubia. Dynamics of Self-Interstitial Cluster Migration in Pure α -Fe and Fe-Cu alloys // Physical Review B. – 2002. – Vol. 65, 144102.
- [3] Chaitanya Deo. Multiscale Materials Modeling of Structural Materials for Next Generation Nuclear Reactors. Edited by Amir Zacarias Mesquita, ISBN 978-953-51-0018-8, 2012. Available from: <http://www.intechopen.com/books/nuclear-reactors/multiscale-materials-modeling-of-structural-materials-for-next-generation-nuclear-reactors>.
- [4] 4. Исаков Б.М., Байгисова К.Б., Бондаренко Г.Г. Межатомное взаимодействие и подвижность вакансий в металлах с гранецентрированной кубической решеткой // Металлы. – 2013. – № 4. – С. 55-61.
- [5] 5. Исаков Б.М., Сулейменова Ж.К., Шамбулов Н.Б. Определение параметров потенциала Морзе для ГЦК металлов // Труды XIX Междунар. совещания «Радиационная физика твердого тела» (Севастополь, 31 августа – 05 сентября 2009 г.) / Под ред. Г. Г. Бондаренко. – М.: ГНУ НИИ ПМТ, 2009. – С. 290-297.
- [6] 6. Girifalco L.A., Weizer V.G. Application of Morse potential function to cubic metals // Phys. Review. – 1959. – Vol. 114. – P. 687-690.
- [7] 7. Sato K., Yoshiie T., Xu Q., Kiritani M. Simulation of Vacancy Migration Energy in Cu under High Strain // Materials Science and Engineering: A. – 2003. – Vol. 350. – Issue 1-2. – P. 220-222.
- [8] 8. Орлов А.Н., Трушин Ю.В. Энергии точечных дефектов в металлах. – М.: Энергоатомиздат, 1983. – 80 с.
- [9] 9. Suzuki A., Mishin Y. Atomistic Modeling of Point Defects and Diffusion in Copper Grain Boundaries // Interface Science. – 2003. – N 11. – P. 131-148.
- [10] Iyad A. Hijazi, Young Ho Park. Consistent Analytic Embedded Atom Potential for Face-Centered Cubic Metals and Alloys // Journal of Materials Science and Technology. – 2009. – Vol. 25, N. 6. – P. 835-846.
- [11] Grabowski S., Kadav K., Entely P. Atomistic Modeling of Diffusion in Aluminum // Phase Transitions: A Multinational Journal. – 2002. – Vol. 75. – Issue 1-2. – P. 265-272.
- [12] Mishin Y. Structural Stability and Lattice Defects in Copper: *Ab initio*, Tight-Binding, and Embedded-Atom Calculations // Physical Review B. – 2001. – Vol. 63, 224106.
- [13] Исаков Б.М., Байгисова К.Б., Бондаренко Г.Г. Определение энергии миграции вакансий в ГЦК металлах с использованием модифицированного метода погруженного атома // Металлы. – 2014. – № 2. – С. 87-92.
- [14] Исаков Б.М., Байгисова К.Б., Бондаренко Г.Г. Определение энергии миграции вакансий в ГЦК металлах с учетом релаксации соседних атомов // Труды XXIV Междунар. совещания «Радиационная физика твердого тела» (Севастополь, 7–12 июля 2014 г.) / Под ред. Г. Г. Бондаренко. – М.: ФГБНУ НИИ ПМТ, 2014. – С. 304-310.
- [15] Термодинамические свойства неорганических веществ. Справочник / Под ред. А. П. Зефирова). – М.: Атомиздат, 1965. – 460 с.
- [16] Физические величины. Справочник / Под ред. И. С. Григорьевой, Е. З. Мейлихова. – М.: Энергоатомиздат, 1991. – 1232 с.
- [17] 17. Дамаск А., Динс Дж. Точечные дефекты в металлах. – М.: Мир, 1966. – 292 с.
- [18] 18. Киттель Ч. Введение в физику твердого тела. – М.: Наука, 1978. – 792 с.

REFERENCES

- [1] Kalin B.A. Fizicheskoe materialovedenie. Tom 4. Fizicheskie osnovy prochnosti. Radiatsionnaya fizika tverdogo tela. Kompyuternoe modelirovanie. Vtorichnaya: Uchebnik dlya vuzov. M.: MIFI, 2008. 696 s.
- [2] Marian J., Wirth B. D., Caro A., Sadigh B., Odette G. R., Perlado J. M., T. Diaz de la Rubia. Dynamics of Self-Interstitial Cluster Migration in Pure α -Fe and Fe-Cu alloys. Physical Review B. 2002. Vol. 65, 144102.
- [3] Chaitanya Deo. Multiscale Materials Modeling of Structural Materials for Next Generation Nuclear Reactors. Edited by Amir Zacarias Mesquita, ISBN 978-953-51-0018-8, 2012. Available from: <http://www.intechopen.com/books/nuclear-reactors/multiscale-materials-modeling-of-structural-materials-for-next-generation-nuclear-reactors>.
- [4] Isakov B.M., Baigisova K.B., Bondarenko G.G. Interatomic Interaction and Vacancy Mobility in FCC Metals. Russian Metallurgy (Metally). 2013. N 7. P. 522-527.

- [5] Iskakov B.M., Suleimenova Zh. K., Shambulov N.B. Opredelenie parametrov potentsiala Morze dlya GTSK metallov. Trudy XIX Mezhdunar. soveshchaniya "Radiatsionnaya fizika tverdogo tela" (Sevastopol, 31 avgusta – 05 sentyabrya 2009 g.). Pod red. G.G. Bondarenko. M.: GNU NII PMT, 2009. S. 290-297.
- [6] Girifalco L.A., Weizer V.G. Application of Morse potential function to cubic metals. Phys. Review. 1959. Vol. 114. P. 687-690.
- [7] Sato K., Yoshiie T., Xu Q., Kiritani M. Simulation of Vacancy Migration Energy in Cu under High Strain. Materials Science and Engineering: A. 2003. Vol. 350. Issue 1-2. P. 220-222.
- [8] Orlov A.N., Trushin Yu.V. Energiya tochechnykh defektov v metallakh. M.: Energoatomizdat, 1983. 80 s.
- [9] Suzuki A., Mishin Y. Atomistic Modeling of Point Defects and Diffusion in Copper Grain Boundaries. Interface Science. 2003. N 11. P. 131-148.
- [10] Iyad A. Hijazi. Young Ho Park. Consistent Analytic Embedded Atom Potential for Face-Centered Cubic Metals and Alloys. Journal of Materials Science and Technology. 2009. Vol. 25, N 6. P. 835-846.
- [11] Grabowski S., Kadav K., Entely P. Atomistic Modeling of Diffusion in Aluminum. Phase Transitions: A Multinational Journal. 2002. Vol. 75. Issue 1-2. P. 265-272.
- [12] Mishin Y. Structural Stability and Lattice Defects in Copper: *Ab initio*, Tight-Binding, and Embedded-Atom Calculations. Physical Review B. 2001. Vol. 63, 224106.
- [13] Iskakov B.M., Baigisova K.B., Bondarenko G.G. Determination of the Vacancy Migration Energy in FCC Metals Using a Modified Embedded-Atom Method. Russian Metallurgy (Metally). 2014. N 3. P. 246-250.
- [14] Iskakov B.M., Baigisova K.B., Bondarenko G.G. Determination of Vacancy Migration Energy in FCC Metals Taking into account the Relaxation of Neighboring Atoms. Trudy XXIV Mezhdunar. soveshchaniya "Radiatsionnaya fizika tverdogo tela" (Sevastopol, 7–12 iyulya 2014 g.). Pod red. G. G. Bondarenko. M.: FGBNU NII PMT, 2014. S. 304-310.
- [15] Termodinamicheskie svoystva neorganicheskikh veshchestv. Spravochnik. Pod red. A. P. Zefirova. M.: Atomizdat, 1965. 460 s.
- [16] Fizicheskie velichiny. Spravochnik. Pod red. I. S. Grigoreva, E. Z. Meilikhova. – M.: Energoatomizdat, 1991. 1232 s.
- [17] Damask A., Dins J. Tochechnye defekty v metallakh. M.: Mir, 1966. 292 s.
- [18] Kittel Ch. Vvedenie v fiziku tverdogo tela. M.: Nauka, 1978. 792 s.

ҚЦҚ МЕТАЛДАРДАҒЫ ВАКАНСИЯЛАРДЫҢ МИГРАЦИЯ ЭНЕРГИЯСЫН ЕСЕПТЕУ ӘДІСТЕРІ

Қ. Б. Байгісова

Қ. И. Сәтбаев атындағы қазақ ұлттық техникалық университеті, Алматы, Қазақстан

Тірек сөздер: вакансиялардың миграция энергиясы, есептеу әдістері, есептеу әдістерінің салыстыру сараптамасы.

Аннотация. Жұмыста тығыздық функционал теориясы мен жартылай эмпирикалық әдісін қолдана отырып металдардағы вакансиялардың миграция энергиясын есептеудің заманауи әдістері қарастырылды. Салыстыру сараптамасы келесі көрсеткіштер бойынша жасалды: вакансиялардың миграция энергиясының есептелген мәндері мен тәжірибеде алынған нәтижелерін салыстыру, вакансиялар айналасындағы атомдардың релаксациясын ескеру және есептеу қарапайымдылығы. Салыстыру сараптамасын жасауға Al, Cu и Ni металдары алынды.

Поступила 01.10.2014 г.