

УДК 004.942, 538.953
DOI: 10.20310/1810-0198-2017-22-1-45-55

НОВЫЕ ПОТЕНЦИАЛЫ МЕЖАТОМНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ ТУГОПЛАВКИХ ОЦК МЕТАЛЛОВ: Nb, Mo, Ta и W

© В.Н. Савельев, А.Г. Липницкий

Белгородский государственный национальный исследовательский университет
308015, Российская Федерация, г. Белгород, ул. Победы, 85
E-mail: firesnake21@mail.ru

Корректность моделирования тугоплавких ОЦК металлов требует описания их теплового расширения, температуры плавления и теплоты плавления с высокой точностью наряду с другими базовыми характеристиками этих металлов. Межатомные потенциалы, удовлетворяющие этому требованию, в настоящее время отсутствуют. Построены потенциалы взаимодействия между атомами в ниобии, молибдене, тантале и вольфраме в рамках нового метода, разработанного нами ранее. Энергия связи, постоянная решетки, модули упругости, уравнение состояния, энергии образования и миграции вакансии, дисперсионные кривые фононов, тепловое расширение, температура плавления и теплота плавления были рассчитаны для каждого металла, и найдено хорошее согласие с имеющимися экспериментальными данными. С построенными потенциалами также были рассчитаны энергии образования междоузельных атомов и энергии образования свободных поверхностей с низкими индексами Миллера.

Ключевые слова: межатомные потенциалы; тугоплавкие металлы; тепловое расширение; температура плавления; теплота плавления

1. ВВЕДЕНИЕ

Высокие температуры плавления и прочностные свойства тугоплавких ОЦК металлов делают их кандидатами для разработки перспективных сплавов на их основе для широкого круга приложений современного материаловедения, включая конструкционные материалы для ядерной энергетики [1]. Компьютерное моделирование с использованием межатомных потенциалов является ключевой составляющей разработки таких материалов благодаря возможности получения информации о механизмах процессов на уровне детальности, недоступном экспериментальным методам [2–3]. В то же время достоверность результатов атомистического моделирования определяется корректностью описания характеристик систем в рамках заданных потенциалов взаимодействия между атомами. Термином «межатомные потенциалы» обозначают зависимость потенциальной энергии системы атомов от координат атомов, для которой широко используется обозначение E_{tot} , введенное М. Баскесом, на примере метода погруженного атома (МПА) [4]. В этом обозначении подчеркивается полный вклад (отсюда индекс *tot*) в энергию взаимодействия между атомами как электронной подсистемы, так и ионных остовов атомов.

В случае ОЦК *d*-металлов описание межатомных потенциалов преимущественно реализуется в рамках модифицированного метода погруженного атома (ММПА), учитывающего зависимость E_{tot} от углов между связями в сравнении с методом МПА, который основан на центрально-симметричном приближении (ЦСП). Корректность описания угловых взаимодействий имеет особую важность 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 ряда 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 [5]. Кроме того, ММПА потенциалы значительно недооценивают теплоту плавления этих металлов [5–6]. Указанная проблема ММПА потенциалов может быть связана с ограничениями химической модели в описании угловых зависимостей в межатомных взаимодействиях, лежащей в основе ММПА подхода.

В данной работе мы используем для Nb, Mo, Ta и W разработанный нами новый подход к построению межатомных потенциалов, который основан на разложении E_{tot} в ряд *n*-частичных взаимодействий [7]. Новый подход позволил преодолеть ограничения моделей химической связи при описании угловых зависимостей в трехчастичных взаимодействиях. В рамках этого подхода нами ранее был построен потенциал для W [8]. В данной работе построен новый потенциал для W, который описывает энергию образования вакансии, тепловое расширение и температуру плавления в лучшем согласии с экспериментальными данными.

2. МЕТОД

В нашей работе [7] было показано, что в рамках ЦСП для бесконечного ряда *n*-частичных взаимодействий

вий при $n > 3$ потенциальная энергия системы атомов E_{tot} приводится к виду:

$$E_{tot} = \sum_{i < j}^N \Phi(R_{ji}) + \sum_i^N \sum_{j < k \neq i}^N \sum_{p, q}^{n_3} g_3^{pq}(\cos(\theta_{jik})) f_3^p(R_{ji}) f_3^q(R_{ki}) + \sum_i^N F(\bar{\rho}_i) \quad (1)$$

где

$$\bar{\rho}_i = \sum_{j \neq i} \rho(R_{ji}) \quad (2)$$

В выражении (1) первое слагаемое описывает сумму парных взаимодействий между атомами i и j , 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 $f_3^p(R_{ji})$ и функций $g_3^{pq}(\cos(\theta_{jik}))$, где θ_{jik} – угол между векторами \vec{R}_{ji} и \vec{R}_{ki} , вершина которого расположена в положении атома i , описывает трехчастичные взаимодействия. Третье слагаемое в выражении (1), представленное суммой функций $F(\bar{\rho}_i)$, эффективно учитывает все многочастичные взаимодействия, начиная с четырехчастичного взаимодействия, в рамках ЦСП. Функция $\rho(R_{ji})$ в выражении (2) является базисной функцией для описания зависимости от расстояний между атомами в многочастичных взаимодействиях более высокого порядка, чем трехчастичные взаимодействия. Введенные функции одной переменной в выражениях (1) и (2) будем называть далее потенциальными функциями, которые задаются кубическими сплайнами. Значения функций в узлах сплайнов являются параметрами потенциалов и оптимизируются из условия воспроизведения ряда известных экспериментальных данных и результатов расчетов из «первых принципов».

В данной работе мы используем выражения (1) и (2) для построения потенциалов межатомных взаимодействий в Nb, Mo, Ta и W. При этом мы ограничиваемся использованием только одной базисной функции $f_3^1(R)$ для описания зависимости трехчастичных взаимодействий от расстояний между атомами, т. е. полагаем $n_3 = 1$ в выражении (1). Использование одной базисной функции для трехчастичных взаимодействий обусловлено, во-первых, сокращением времени разработки потенциалов, а во-вторых, использование одной базисной функции для трехчастичных взаимодействий позволяет сравнить наш подход с широко используемым в настоящее время для моделирования

ОЦК металлов ММПА [5; 9], т. к. в этом случае число потенциальных функций в нашем подходе и ММПА совпадает и равно пяти: $\Phi(R)$, $f_3^1(R)$, $g_3^{11}(\cos(\theta))$, $F(\bar{\rho})$, $\rho(R)$.

3. ОПТИМИЗАЦИЯ ПАРАМЕТРОВ ПОТЕНЦИАЛОВ

Банк экспериментальных данных для оптимизации параметров потенциалов каждого металла включал постоянную ОЦК решетки, энергию сублимации, модули упругости C_{11}, C_{12}, C_{44} , энергию образования и энергию миграции вакансий.

Расчеты из «первых принципов» проводились с помощью программного пакета VASP [10], с использованием обобщенного градиентного приближения (PBE-GGA) для расчета обменно-корреляционной энергии электронов [11] и PAW-псевдопотенциал [12] для описания атомного электронного остова. Расчеты проводились с использованием энергии обрезания плоских волн *ecut*, равной 550, 600, 550 и 600 эВ, сеткой k -точек $28 \times 28 \times 28$, $28 \times 28 \times 28$, $36 \times 36 \times 36$ и $36 \times 36 \times 36$ для элементарной ячейки ОЦК, и энергией размытия электронных уровней σ , равной 0,15, 0,3, 0,20 и 0,3 эВ для Nb, Mo, Ta и W соответственно.

Для каждого тугоплавкого металла «первопринципная» база данных включала: равновесные энергии на атом для модельных кристаллических решеток A15, β -Та, ГЦК, ГПУ, С32, простой гексагональной и простой кубической; энергии и силы, действующие на атомы, для двух 128-атомных конфигураций ОЦК решетки, первая получена сдвигом вдоль направления $\langle 100 \rangle$ атома из положения равновесия на 0,05 Å, вторая получена после «первопринципной» молекулярной динамики; энергии образования межузельных атомов: гантелей $\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$, $\langle 111 \rangle$, краудина $\langle 111c \rangle$ и атома в октаэдрическом междоузлии ОЦК решетки.

Общее количество экспериментальных и «первопринципных» величин в базе данных, используемой для оптимизации значений потенциальных функций в узлах сплайнов, составило порядка 300 величин для каждого металла.

Мы использовали 30 эквидистантных узлов сплайна для функции $\Phi(R)$ на интервале $[R_{\min}^{\Phi}, R_{\Phi}]$, 25 узлов сплайна для функции $\rho(R)$ на интервале $[R_{\min}^f, R_{\Phi}]$, 15 узлов сплайна для функции $f_3^1(R)$ на интервале $[R_{\min}^f, R_f]$, 10 узлов сплайна для функции $g_3^{11}(\cos(\theta))$ на интервале $[-1, +1]$ и 10 узлов сплайна для функции $F(\bar{\rho})$ на интервале $[0, 25]$. Общее количество параметров оптимизации составило 96 параметров. Используемые нами значения R_{\min}^{Φ} , R_{\min}^f , R_{Φ} и R_f для Nb, соответственно, равны 1,8, 2,0, 6,2 и 4,5 Å, для Mo равны 1,7, 1,9, 5,9 и 4,3 Å, для Ta равны 1,8, 2,0, 6,2 и 4,5 Å, и для W равны 1,7, 1,9, 6,0 и 4,3 Å.

Оптимизация параметров потенциалов осуществлялась путем минимизации целевой функции Z:

$$Z = Z_{\text{exp}} + Z_e + Z_f, \quad (3)$$

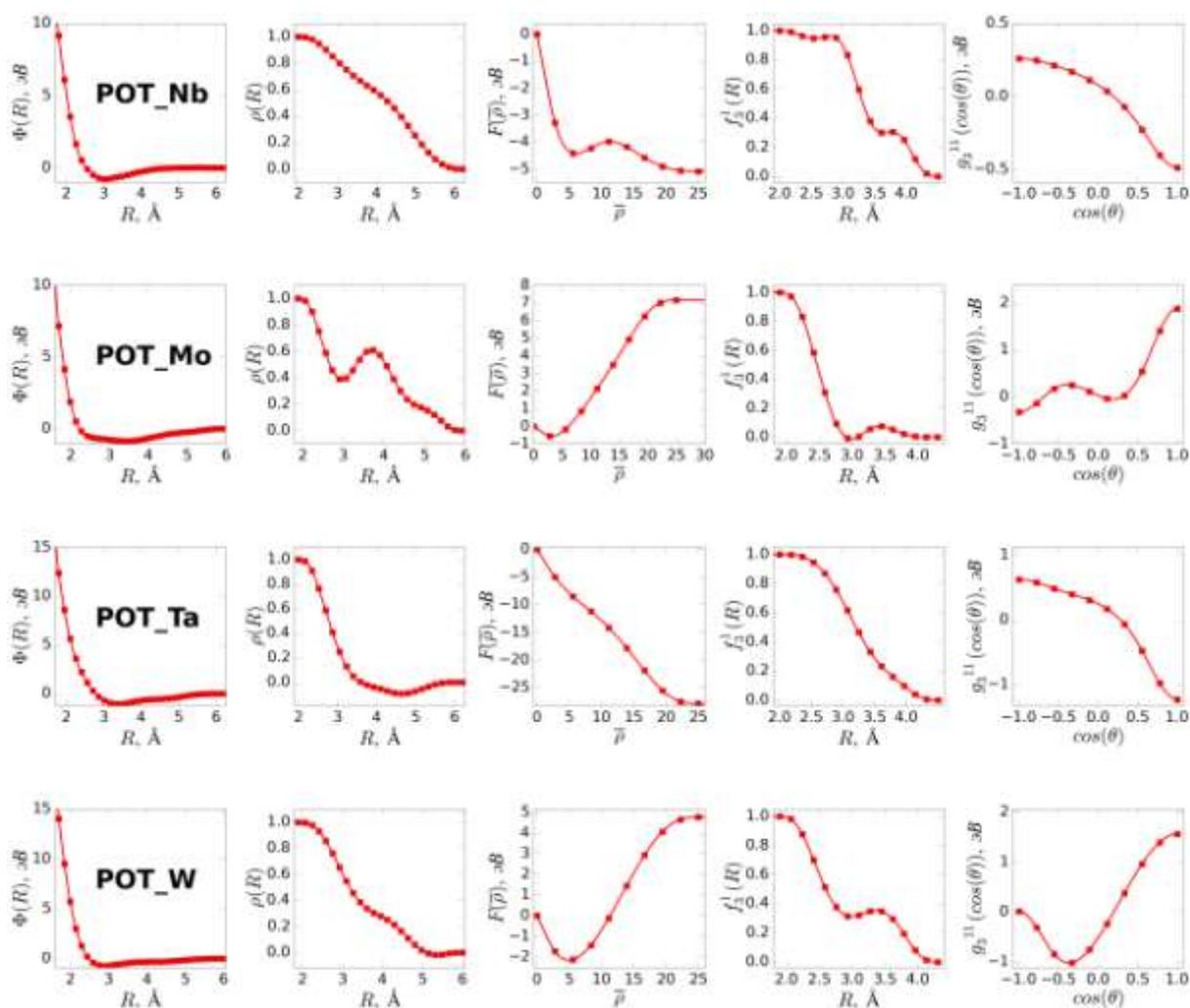


Рис. 1. Пять потенциальных функций $\Phi(R)$, $f_3^1(R)$, $g_3^{11}(\cos(\theta))$, $F(\bar{p})$, $\rho(R)$ для Nb, Mo, Ta и W. Закрашенные квадраты изображают оптимизированные значения функций в узлах сплайнов

где

$$Z_{\text{exp}} = \sum_i W_i^{\text{exp}} \frac{(A_i^{\text{pot}} - A_i^{\text{exp}})^2}{(A_i^{\text{exp}})^2}, \quad (4)$$

$$Z_e = \sum_i W_i^e \frac{(E_i^{\text{pot}} - E_i^{\text{DFT}})^2}{(E_i^{\text{DFT}})^2 + \delta_e^2}, \quad (5)$$

$$Z_f = \sum_i W_i^f \frac{\left(\vec{f}_i^{\text{pot}} - \frac{1}{\eta_r} \vec{f}_i^{\text{DFT}} \right)^2}{\left(\frac{1}{\eta_r} \vec{f}_i^{\text{DFT}} \right)^2 + \delta_f^2}. \quad (6)$$

Здесь Z_{exp} (см. выражение (4)) – взвешенная сумма квадратов относительных отклонений физических величин из экспериментальной базы данных, рассчитанных с помощью нашего потенциала и измеренных экспериментально; Z_e (см. выражение (5)) – взвешенная сумма квадратов относительных отклонений энергий, рассчитанных нашим потенциалом и вычисленных из «первых принципов»; Z_f (см. выражение (6)) – взвешенная сумма квадратов относительных отклонений компонент сил, действующих на атомы, рассчитанных нашим потенциалом и вычисленных из «первых принципов»; η_r – масштабируемый множитель для «первопринципных» геометрий, устраняющий разногласия между «первопринципными» и экспериментальными данными: $\eta_r = a_{\text{pot}} / a_{\text{FP}}$, где a_{pot} – равновесная постоянная ОЦК решетки для конкретного металла, рассчитанная с использованием нашего потенциала; a_{FP} –

равновесная «первопринципная» постоянная ОЦК решетки для этого металла; δ_e и δ_f – небольшие числа, предотвращающие большой вклад малых энергий в величину Z_e и малых компонент сил в величину Z_f соответственно. Веса W_i^{exp} , W_i^e , W_i^f (см. (4)–(6)) нормализуются по следующей формуле:

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

Минимизация целевой функции Z состояла в поиске оптимизируемых параметров в многомерном пространстве на основе моделирования эффективного отжига [13] методом Монте-Карло.

Мы построили и протестировали порядка 50-ти потенциалов для каждого из четырех металлов, используя различные веса в целевой функции Z (см. выражения (4)–(6)). Из результатов тестирования этих потенциалов мы выбрали по одному для каждого из металлов, которые далее в работе будем называть POT_X, где X – название элемента (Nb, Mo, Ta или W). Представление оптимизированных параметров в численном виде занимает слишком большой объем статьи. Поэтому далее мы приводим оптимизированные потенциальные функции в графическом представлении. На рис. 1 приведены оптимизированные потенциальные функции для Nb, Mo, Ta и W.

Как видно из рис. 1, потенциальные функции $f_3^1(R)$, $g_3^{11}(\cos(\theta))$, $F(\rho^-)$ имеют похожее поведение для металлов из одной группы периодической таблицы Д.И. Менделеева, так, например, для Nb и Ta все значения функции $F(\rho^-)$ лежат в области отрицательных значений, в то время как для Mo и W функция $F(\rho^-)$ имеет вид функции погружения атома в электронную плотность в теории эффективной среды. Похожесть в поведении потенциальных функций $f_3^1(R)$, $g_3^{11}(\cos(\theta))$, $F(\rho^-)$ для металлов одной группы можно связать с похожестью строения валентных электронных оболочек атомов этих металлов.

4. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЯ

4.1. ОБЪЕМНЫЕ СВОЙСТВА Nb, Mo, Ta И W

В табл. 1 представлены характеристики, описывающие объемные свойства ОЦК решеток Nb, Mo, Ta и W, рассчитанные с нашими потенциалами в сравнении с экспериментальными значениями.

Из табл. 1 видно хорошее согласие всех рассчитанных величин с экспериментальными данными, при этом значения рассчитанных упругих постоянных отличаются от соответствующих экспериментальных значений не более чем на 6 %. Отметим, что приведенные в табл. 1 характеристики были включены в базу данных при построении потенциалов для этих металлов.

На рис. 2 приведены графики уравнений состояния $P(V/V_0)$ для ОЦК решеток Nb, Mo, Ta и W.

Из рис. 2 видно, что уравнения состояния для всех построенных металлов наши потенциалы описывают в хорошем согласии с экспериментальными данными. Отметим, что мы не использовали экспериментальные данные $P(V/V_0)$ при построении потенциалов для этих металлов.

Следующая группа свойств, рассчитанная с нашими потенциалами для Nb, Mo, Ta и W, связана с колебаниями решетки. Мы использовали программу PHONOPY [23–24] для вычисления спектров фононов вдоль направлений с высокой симметрией в зоне Бриллюэна. Для вычисления динамической матрицы PHONOPY использует метод небольших смещений, при котором атомы смещаются на малые расстояния от их равновесных положений в решетке. Из динамической матрицы, полученной из результирующих сил, действующих на атомы, вычисляются дисперсионные кривые фононов. На рис. 3 приводится сравнение вычисленных с помощью наших потенциалов для металлов Nb, Mo, Ta и W фононных спектров вдоль высоко-симметричных направлений $[\xi 0 0]$, $[\xi \xi \xi]$ и $[\xi \xi 0]$ с рассчитанными из «первых принципов» и измеренными экспериментально данными.

Наши потенциалы для всех металлов точно воспроизводят экспериментальные дисперсионные кривые вблизи точки Γ , что отражает достаточно хорошее описание модулей упругости (табл. 1). Частоты фононов на границах зоны Бриллюэна описываются нашими потенциалами с отклонениями не более 1 ТГц от их экспериментальных значений. Таким образом, наши потенциалы для всех четырех металлов обеспечивают стабильность ОЦК решетки по отношению к однородной деформации как для длинноволновой, так и для коротковолновой волн спектра.

Таблица 1

Энергия связи E_{coh} , параметр решетки a , упругие постоянные C_{ij} при 0 К для Nb, Mo, Ta и W, рассчитанные с помощью наших потенциалов, в сравнении с экспериментальными данными

| Параметры | POT Nb | Эксп. | POT Mo | Эксп. | POT Ta | Эксп. | POT W | Эксп. |
|--------------------|--------|------------|--------|------------|--------|------------|-------|------------|
| E_{coh} , эВ/ат. | 7,55 | 7,57 [14] | 6,80 | 6,81 [14] | 8,09 | 8,10 [14] | 8,64 | 8,66 [14] |
| a , Å | 3,308 | 3,303 [15] | 3,144 | 3,145 [17] | 3,299 | 3,299 [18] | 3,169 | 3,163 [19] |
| C_{11} , ГПа | 256 | 253 [16] | 466 | 479 [16] | 264 | 266 [16] | 527 | 533 [16] |
| C_{12} , ГПа | 140 | 133 [16] | 167 | 165 [16] | 155 | 158 [16] | 199 | 205 [16] |
| C_{44} , ГПа | 32 | 31 [16] | 110 | 108 [16] | 87 | 87 [16] | 169 | 163 [16] |

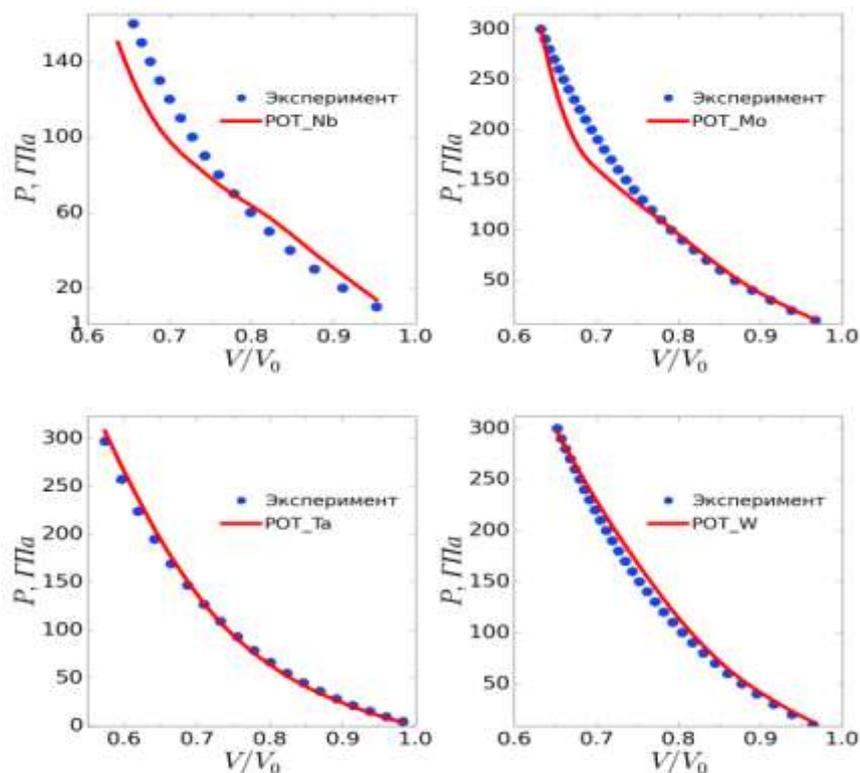


Рис. 2. Зависимости давления P от относительного объема V/V_0 , рассчитанные с помощью наших потенциалов и измеренные экспериментально, для металлов Nb, Mo, Ta и W. Экспериментальные данные взяты из [20] для Mo, из [21] для Ta и из [22] для Nb и W

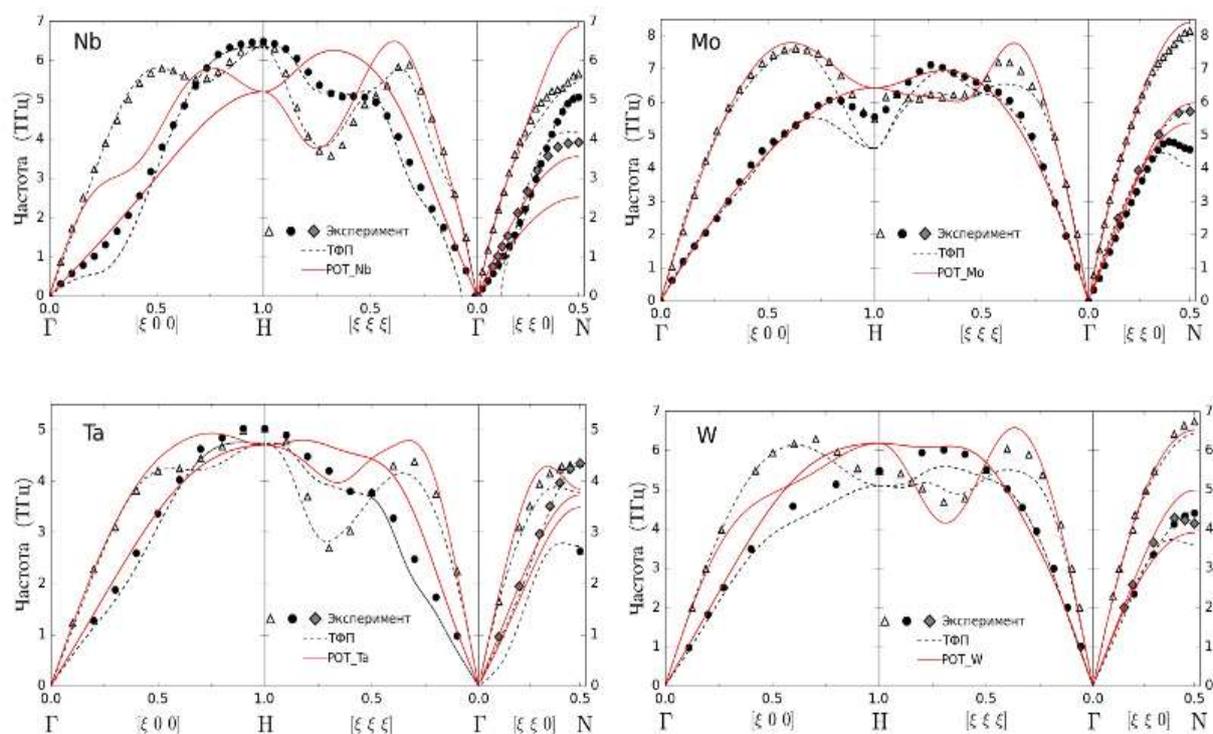


Рис. 3. Дисперсионные кривые фононов для ОЦК Nb, Mo, Ta и W вдоль высокосимметричных направлений зоны Бриллюэна, рассчитанные с нашими потенциалами (красные сплошные линии) в сравнении с нашими расчетами из «первых принципов» (черные штриховые линии), и экспериментальными данными (пустые треугольники, закрашенные круги и закрашенные алмазы). Экспериментальные данные для Nb и Ta взяты из [25], для Mo из [26] и для W из [27]

В табл. 2 приведены равновесные энергии на атом ΔE , равновесные объемы на атом V_0 и равновесные отношения постоянных решетки c/a для набора модельных кристаллических решеток.

Из табл. 2 видно, что вычисленные с помощью наших потенциалов энергии модельных кристаллических решеток $A15$, βTa , $ГЦК$, $ГПУ$ и $C32$ для всех металлов лежат выше, чем энергия ОЦК решетки для каждого из этих металлов, т. е. наши потенциалы описывают решетку ОЦК как наиболее выгодную по энергии для каждого из металлов. Кроме того, результаты табл. 2 свидетельствуют, что для каждого металла наши потенциалы согласуются с расчетами из «первых принципов» в определении порядка следования относительных энергий модельных решеток $A15$ и βTa , являющихся наиболее близкими по энергии к ОЦК решетке. Приведенные в табл. 2 равновесные объемы на атом V_0 и равновесные отношения постоянных решетки c/a для различных кристаллических структур для Nb, Mo, Ta и W близки к соответствующим «первопринципным» величинам. Следует отметить, что равновесные энергии модельных решеток мы включили в базу данных при построении потенциалов для всех металлов, в то время как равновесные объемы V_0 и равновесные отношения постоянных решетки c/a не были включены в эту базу данных и не использовались при построении потенциалов.

Таким образом, наши потенциалы для металлов Nb, Mo, Ta и W описывают объемные свойства ОЦК решеток этих металлов, включая энергию сублимации, постоянную решетки, модули упругости, уравнение состояния $P(V/V_0)$ и спектр фононов в хорошем согласии с экспериментальными данными.

4.2. ДЕФЕКТЫ В ОЦК Nb, Mo, Ta И W

В табл. 3 представлены энергии образования и энергии миграции вакансии в ОЦК Nb, Mo, Ta и W.

Из табл. 3 видно, что наши потенциалы дают энергии образования вакансии в пределах экспериментальных значений для соответствующего металла. Энергии миграции вакансии находятся в пределах экспериментального интервала значений для Nb и Ta и близки к нижнему краю экспериментальных значений для Mo и W.

В табл. 4 представлены энергии образования собственных точечных дефектов внедрения в ОЦК Nb, Mo, Ta и W.

Приведенные в табл. 4 рассчитанные с помощью наших потенциалов энергии образования собственных дефектов внедрения в ОЦК решетке Nb, Mo, Ta и W показывают, что наименьшую энергию образования имеет гантель $\langle 111 \rangle$ для Nb и Mo и краудин $\langle 111c \rangle$ для Ta и W, что согласуется с расчетами из «первых принципов».

Отметим, что энергии образования всех точечных дефектов для всех металлов, представленных в табл. 3 и табл. 4, были включены в базу данных для оптимизации потенциалов, за исключением дефекта с атомом в тетраэдрическом междоузлии.

В табл. 5 представлены характеристики свободных поверхностей с низкими индексами Миллера в ОЦК Nb, Mo, Ta и W.

Представленные в табл. 5 энергии образования поверхностей (100), (110) и (111) для металлов Nb, Mo, Ta и W показывают, что в сравнении с расчетами из «первых принципов» только для Ta наблюдается качественное согласие в порядке следования энергий поверхностей, с наименьшей энергией образования для наиболее плотно упакованной поверхности (110), и качественное согласие в отрицательном знаке релаксации первого слоя этой поверхности, в то время как для металлов Nb, Mo и W наши потенциалы описывают поверхность (100), как поверхность с наименьшей энергией образования, что не согласуется с расчетами из «первых принципов», которые для этих металлов также дают наименьшую энергию образования для поверхности (110). Также не согласуется с «первыми принципами»

Таблица 2

Рассчитанные с помощью потенциалов (верхняя строчка) в сравнении с расчетами из «первых принципов» (нижняя строчка) равновесные энергии на атом ΔE относительно равновесной энергии для ОЦК решетки, равновесные объемы на атом V_0 и отношения равновесных постоянных решетки c/a для модельных кристаллических решеток $A15$, βTa , $ГЦК$, $ГПУ$ и $C32$ для металлов Nb, Mo, Ta и W

| Параметры | Nb | | | | | Mo | | | | |
|------------------------------|-------|------------|-------|-------|-------|-------|------------|-------|-------|-------|
| | $A15$ | βTa | $ГЦК$ | $ГПУ$ | $C32$ | $A15$ | βTa | $ГЦК$ | $ГПУ$ | $C32$ |
| ΔE , мэВ | 42 | 41 | 70 | 111 | 102 | 115 | 159 | 258 | 223 | 266 |
| | 104 | 97 | 324 | 296 | 200 | 96 | 188 | 417 | 433 | 404 |
| V_0 , \AA^3 / ат. | 19,56 | 19,48 | 17,99 | 17,79 | 18,17 | 16,23 | 16,41 | 18,10 | 16,85 | 16,21 |
| | 18,57 | 18,63 | 18,76 | 18,66 | 18,47 | 16,18 | 16,25 | 16,15 | 16,24 | 16,27 |
| c/a | 1,00 | 0,52 | 1,00 | 1,62 | 0,58 | 1,00 | 0,52 | 1,00 | 1,50 | 0,58 |
| | 1,00 | 0,53 | 1,00 | 1,83 | 0,55 | 1,00 | 0,53 | 1,00 | 1,77 | 0,55 |
| Параметры | Ta | | | | | W | | | | |
| | $A15$ | βTa | $ГЦК$ | $ГПУ$ | $C32$ | $A15$ | βTa | $ГЦК$ | $ГПУ$ | $C32$ |
| ΔE , мэВ | 24 | 17 | 144 | 269 | 258 | 90 | 128 | 171 | 364 | 342 |
| | 27 | 16 | 250 | 286 | 223 | 82 | 200 | 489 | 505 | 541 |
| V_0 , \AA^3 / ат. | 18,28 | 18,42 | 17,15 | 17,53 | 17,78 | 17,74 | 17,45 | 16,93 | 17,83 | 15,60 |
| | 18,52 | 18,53 | 18,66 | 18,59 | 18,43 | 16,19 | 16,29 | 16,28 | 16,36 | 16,36 |
| c/a | 1,00 | 0,52 | 1,00 | 1,70 | 0,57 | 1,00 | 0,53 | 1,00 | 1,95 | 0,60 |
| | 1,00 | 0,52 | 1,00 | 1,78 | 0,56 | 1,00 | 0,53 | 1,00 | 1,78 | 0,55 |

Таблица 3

Энергии образования и энергии миграции вакансий, рассчитанные с нашими потенциалами и измеренные экспериментально для Nb, Mo, Ta и W. Экспериментальные данные взяты из [28].
Значения энергий приведены в эВ

| Параметры | POT Nb | Эксп. | POT Mo | Эксп. | POT Ta | Эксп. | POT W | Эксп. |
|-----------|--------|-----------|--------|-----------|--------|-----------|-------|-----------|
| E_v^f | 2,71 | 2,60–3,10 | 3,09 | 3,00–3,24 | 2,99 | 2,20–3,10 | 3,43 | 3,10–4,10 |
| E_v^m | 0,65 | 0,60–1,60 | 1,16 | 1,35–1,62 | 1,29 | 0,70–1,90 | 1,48 | 1,70–1,78 |

Таблица 4

Энергии образования шести собственных дефектов внедрения: гантель <100>, гантель <110>, гантель <111>, краудион <111c>, атом в тетраэдрическом междоузлии и атом в октаэдрическом междоузлии, рассчитанные с нашими потенциалами в сравнении с расчетами из «первых принципов» для Nb, Mo, Ta и W. Жирным шрифтом отмечен дефект с наименьшей энергией образования для каждого металла. «Первопринципные» значения взяты из [9]. Значения энергий приведены в эВ

| Параметры | POT Nb | ТФП | POT Mo | ТФП | POT Ta | ТФП | POT W | ТФП |
|----------------|-------------|-------------|-------------|-------------|-------------|-------------|--------------|--------------|
| $E_{<100>}^f$ | 3,81 | 4,76 | 9,28 | 8,90 | 6,92 | 6,04 | 15,06 | <111> |
| $E_{<110>}^f$ | 3,50 | 4,31 | 7,80 | 7,66 | 6,75 | 5,55 | 13,84 | 10,64 |
| $E_{<111>}^f$ | 3,14 | 3,95 | 7,62 | 7,52 | <111c> | 4,83 | <111c> | 10,31 |
| $E_{<111c>}^f$ | <111> | 3,99 | <111> | 7,52 | 6,03 | 4,82 | 13,82 | 10,31 |
| E_{oct}^f | 3,64 | 4,89 | <110> | 9,05 | 6,66 | 6,08 | 14,76 | 12,42 |
| E_{tet}^f | <110> | 4,56 | <111> | 8,47 | 7,26 | 5,86 | <110> | <111> |

Таблица 5

Энергии образования поверхностей с низкими индексами Миллера в мэВ/Å² и величины релаксации первого слоя поверхности (указаны в скобках в процентах) для ОЦК Nb, Mo, Ta и W, рассчитанные с помощью наших потенциалов в сравнении с результатами расчетов из «первых принципов»

| Параметры | POT Nb | ТФП [29] | POT Mo | ТФП [30] | POT Ta | ТФП [9] | POT W | ТФП [9] |
|-------------|-------------|-------------|------------|-------------|------------|-------------|------------|-------------|
| $E_{(100)}$ | 61 (+8,7) | 146 (-12,4) | 202 (+8,5) | 200 (-12,3) | 100 (-3,9) | 155 (-12,7) | 324 (+4,1) | 245 (-11,5) |
| $E_{(110)}$ | 78 (-1,9) | 131 (-3,9) | 207 (+2,4) | 174 (-4,4) | 71 (-6,7) | 146 (-4,5) | 334 (+3,8) | 200 (-3,8) |
| $E_{(111)}$ | 101 (+32,1) | 149 (-30,7) | 223 (+9,9) | 186 (-20,8) | 142 (+0,7) | 169 (-23,7) | 332 (-6,0) | 216 (-21,6) |

и знак релаксации первого поверхностного слоя для Mo и W. Ввиду этого только потенциалы для Ta могут быть использованы для моделирования процессов, происходящих в моделируемых образцах, содержащих свободные поверхности. Отметим, что мы не использовали какие-либо данные, связанные со свободными поверхностями при построении потенциалов для всех четырех металлов.

Таким образом, построенные нами потенциалы для Nb, Mo, Ta и W могут быть использованы для моделирования свойств точечных дефектов, а потенциалы для Ta также могут быть использованы для моделирования образцов, содержащих свободные поверхности.

4.3 ТЕПЛОЕ РАСШИРЕНИЕ И ХАРАКТЕРИСТИКИ ПЛАВЛЕНИЯ ОЦК Nb, Mo, Ta И W

Расчет теплового расширения для всех металлов проводился с использованием 2000-атомной ячейки (10×10×10), при этом моделировался *NPT*-ансамбль (постоянное число атомов *N*, постоянное давление *P*, постоянная температура *T*) при нулевом давлении в течение 30 пс, по последним 15 пс усреднялась постоянная решетка.

На рис. 4 приводится сравнение теплового расширения для металлов Nb, Mo, Ta и W, рассчитанного с

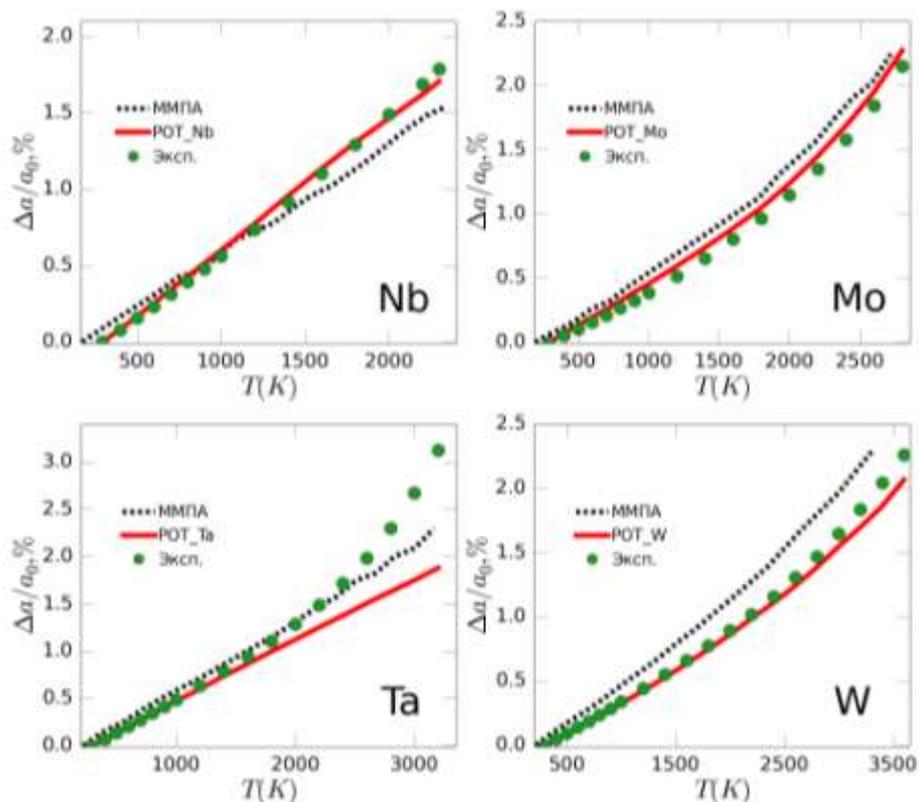


Рис. 4. Зависимости относительной постоянной решетки в процентах от температуры для ОЦК Nb, Mo, Ta и W, рассчитанные с помощью наших потенциалов, в сравнении с результатами расчетов ММПА [9] и экспериментальными данными [18]

помощью наших потенциалов, в сравнении с результатами расчетов ММПА [9] и экспериментальными данными [18].

Как видно из рис. 4, наши потенциалы описывают тепловое расширение для Nb, Mo и W в лучшем согласии с экспериментальными данными, чем ММПА потенциалы. Для Ta наши потенциалы дают хорошее согласие с экспериментом до температур порядка 1500 К.

Для расчета температуры плавления использовалась двухфазная 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 течение 400 пс, по последним 100 пс усреднялась температура. Расчет температуры плавления с использованием *NPH*-ансамбля ранее был описан и использован в работах [7; 31] и продемонстрировал свою надежность. Точность расчета температуры плавления равна 20 К.

Для вычисления энтальпии и объема плавления мы использовали две однофазные суперячейки, содержащие по 19652 атомов, первая представляла собой 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 соответствующим потенциалом для конкретного металла по методу, описанному выше. Моделирование проводилось в течение 100 пс, по последним 15 пс ус-

реднялись объемы суперячеек и энтальпии. Объем плавления и энтальпия плавления определялись по разнице соответствующих значений усредненных величин.

В табл. 6 приведены температуры, энтальпии и объемы плавления для ОЦК Nb, Mo, Ta и W, рассчитанные с помощью наших потенциалов в сравнении с расчетами других авторов и экспериментальными данными.

Из табл. 6 видно, что рассчитанные температуры плавления с нашими потенциалом для всех четырех металлов близки к соответствующим экспериментальным значениям, с минимальной разницей для Ta, равной 1 К, и максимальной для W, равной 59 К, в то время как значения температур плавления, полученные с помощью последних ММПА [5] потенциалов, в большей степени отличаются от экспериментальных данных, с минимальной разницей для Nb, равной 280 К, и максимальной разницей для W, равной 350 К.

Рассчитанные с нашими потенциалом теплоты плавления для Mo и W близки к соответствующим экспериментальным данным и занижены относительно них на 18 и 8 % соответственно. Занижение теплот плавления для Mo и W, полученные с ММПА [5], составляют 17 и 33 % соответственно. Однако рассчитанные с нашими потенциалом теплоты плавления для другой группы металлов Nb и Ta значительно отличаются от экспериментальных данных и отклоняются от экспериментальных значений на 46 и 49 % соответственно. Теплоты плавления, полученные с помощью ММПА [5] для Nb и Ta, занижены относительно соответствующих экспериментальных значений на 27 и 21 % соответственно.

Таблица 6

Температура плавления T_m , теплота плавления ΔH_m и относительный объем плавления $\Delta V_m/V_0$
 ОЦК Nb, Mo, Ta и W, рассчитанные с помощью наших потенциалов
 в сравнении с экспериментальными данными и расчетами других авторов

| Параметры | Источники расчетов | Nb | Mo | Ta | W |
|-------------------------|--------------------|------|------|------|------|
| T_m , К | Наш потенциал | 2785 | 2912 | 3291 | 3754 |
| | Эксп. [32] | 2750 | 2896 | 3290 | 3695 |
| | ММПА [6] | 1900 | 3100 | 3200 | 4600 |
| | ММПА [5] | 3030 | 3210 | 3615 | 4045 |
| ΔH_m , КДж/моль | Наш потенциал | 16,1 | 30,6 | 18,7 | 48,1 |
| | Эксп. [32] | 30,0 | 37,5 | 36,6 | 52,3 |
| | ММПА [6] | 13,5 | 20,1 | 22,3 | 33,0 |
| | ММПА [5] | 21,9 | 31,0 | 29,0 | 35,3 |
| $\Delta V_m/V_0$, % | Наш потенциал | 1,7 | 9,8 | 4,7 | 13,2 |
| | ММПА [6] | 1,0 | 3,0 | 2,1 | 3,2 |
| | ММПА [5] | 3,3 | 5,0 | 4,4 | 4,5 |

Таким образом, тестирование построенных нами потенциалов для группы металлов Mo и W по тепловым характеристикам и характеристикам плавления показало их явно выраженное преимущество в одновременном описании соответствующих экспериментальных свойств, в сравнении с существующими аналогами, построенными в рамках ММПА, что свидетельствует о более аккуратном описании трехчастичных взаимодействий в нашем подходе. Тестирование наших потенциалов по тепловым свойствам и характеристикам плавления для другой группы металлов Nb и Ta показало их сравнимость с существующими аналогами. Мы считаем, что для улучшения описания экспериментальных тепловых характеристик и свойств плавления Nb и Ta необходимо использовать две базисные функции f_3^P для трехчастичных взаимодействий (см. выражение (1)), такое предположение подтверждается тем, что при использовании нашего подхода к построению потенциалов для V [7], который относится к той же группе в периодической системе Д.И. Менделеева, что и металлы Nb и Ta, мы использовали 2 базисные функции f_3^P , одновременно описав при этом тепловое расширение и характеристики плавления в хорошем согласии с экспериментом.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе мы использовали разработанный нами ранее и апробированный на примере V [7] подход к построению потенциалов межатомных взаимодействий, который основан на разложении полной энергии системы атомов в ряд n -частичных взаимодействий в рамках приближения Борна–Оппенгеймера, для построения потенциалов межатомных взаимодействий для тугоплавких ОЦК металлов Nb, Mo, Ta и W.

Наши потенциалы для каждого из построенных металлов одновременно воспроизводят экспериментальные энергии связи, постоянную решетки, упругие постоянные, энергии образования и миграции вакансий, и «первопринципные» энергии образования междоузельных атомов и предсказывают уравнение состояния $P(V/V_0)$, дисперсионные кривые фононов, тепловое

расширение, температуру плавления и теплоту плавления в хорошем согласии с экспериментальными данными.

Тестирование наших потенциалов для каждого металла по характеристикам свободных поверхностей ОЦК решетки (100), (110) и (111) и сравнение полученных результатов с расчетами из «первых принципов» показало, что потенциалы для Ta могут быть использованы для моделирования процессов, происходящих в образцах, содержащих свободные поверхности.

В целом, за счет более точного описания трехчастичных взаимодействий в E_{tot} предлагаемый нами подход позволяет разработать надежные потенциалы для атомистического моделирования, которые позволяют одновременно описать объемные свойства, свойства точечных дефектов, тепловые характеристики и характеристики плавления тугоплавких ОЦК металлов в хорошем согласии с «первыми принципами» и экспериментальными данными. Одновременное описание этих свойств металлов не было достигнуто ранее с использованием потенциалов межатомных взаимодействий.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Zinkle S.J., Ghoniem N.M. Operating temperature windows for fusion reactor structural materials // Fusion Engineering and Design. 2000. V. 51. P. 55-71.
2. 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. Advances in modeling and simulation of grinding processes // CIRP Annals-Manufacturing Technology. 2006. V. 55 (2). P. 667-696.
3. Rapaport D.C. The Art of Molecular Dynamics Simulation. Cambridge: Cambridge University Press, 2004.
4. Daw M., Baskes M. Semiempirical, quantum mechanical calculation of hydrogen embrittlement in metals // Physical Review Letters. 1983. V. 50 (17). P. 1285.
5. Duan X., Zhou B., Wen Y., Chen R., Zhou H., Shan B. Lattice inversion modified embedded atom method for bcc transition metals // Computational Materials Science. 2015. V. 98. P. 417-423.
6. Lee B.-J., Baskes M., Kim H., Koo Cho Y. Second nearest-neighbor modified embedded atom method potentials for bcc transition metals // Physical Review B. 2001. V. 64 (18). P. 184102.
7. Lipnitskii A., Saveliev V. Development of n-body expansion interatomic potentials and its application for V // Computational Materials Science. 2016. V. 121. P. 67-78.
8. Савельев В.Н., Литвицкий А.Г. Новые многочастичные потенциалы межатомных взаимодействий для молекулярно-динамического моделирования вольфрама // Научные ведомости Белгородского

- государственного университета. Серия: Математика. Физика. 2016. Т. 44. № 20 (141). С. 138-148.
9. *Fellinger M.R.* First Principles-Based Interatomic Potentials for Modeling the Body-Centered Cubic Metals V, Nb, Ta, Mo and W. Ph. D. thesis. Ohio: The Ohio State University, 2013.
 10. *Kresse G., Furthmuller J.* Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set // *Phys. Rev. B*. 1996. V. 54. P. 11169.
 11. *Perdew J.P., Burke K., Ernzerhof M.* Generalized gradient approximation made simple // *Phys. Rev. Lett.* 1996. V. 77. P. 3865.
 12. *Bloch P.E.* Projector augmented-wave method // *Phys. Rev. B*. 1994. V. 50. P. 17953.
 13. *Kirkpatrick S., Gelatt C.D., Vecchi M.P.* Optimization by simulated annealing // *Science*. 1983. V. 220 (4598). P. 671-680.
 14. *Kittel C.* Introduction to Solid State Physics. N. Y.: Wiley, 2005.
 15. *Roberge R.* Lattice parameter of niobium between 4.2 and 300 K // *Journal of the Less Common Metals*. 1975. V. 40 (1). P. 161-164.
 16. *Simmons G., Wang H. et al.* Single Crystal Elastic Constants and Calculated Aggregate Properties. Cambridge, 1971.
 17. *Pearson W.* Handbook of Lattice Spacings and Structures of Metals and Alloys. L.: Pergamon, 1967. V. 2. P. 1192.
 18. *Touloukian Y., Kirby R., Taylor R., Desai P.* Thermophysical Properties of Matter the TPRC Data Series. V. 12. Thermal Expansion Metallic Elements and Alloys. Texas, 1975.
 19. *Shah J.S., Straumanis M.E.* Thermal expansion of tungsten at low temperatures // *Journal of Applied Physics*. 1971. V. 42 (9). P. 3288.
 20. *Hixson R., Fritz J.* Shock compression of tungsten and molybdenum // *Journal of Applied Physics*. 1992. V. 71 (4). P. 1721-1728.
 21. *Chijioko A.D., Nellis W., Silvera I.F.* High-pressure equations of state of Al, Cu, Ta and W // *Journal of Applied Physics*. 2005. V. 98 (7). P. 073526.
 22. *McQueen R., Marsh S., Taylor J., Fritz J., Carter W.* The equation of state of solids from shock wave studies. High-velocity impact phenomena. N. Y.: Acad. Press, 1970. P. 293.
 23. *Togo A., Tanaka I.* First principles phonon calculations in materials science // *Scr. Mater.* 2015. V. 108. P. 1.
 24. *Togo A., Oba F., Tanaka I.* First-principles calculations of the ferro elastic transition between rutile-type and CaCl₂-type SiO₂ at high pressures // *Physical Review B*. 2008. V. 78 (13). P. 134106.
 25. *Woods A.* Lattice dynamics of tantalum // *Physical Review*. 1964. V. 136 (3A). P. 781.
 26. *Powell B., Martel P., Woods A.* Lattice dynamics of niobium-molybdenum alloys // *Physical Review*. 1968. V. 171 (3). P. 727.
 27. *Okoye C., Pal S.* Lattice dynamics of molybdenum and tungsten // *Nuovo Cimento D*. 1990. V. 12 (7). P. 941.
 28. *Schultz H.* Atomic Defects in Metals. V. 25. Landolt-Börnstein – Group III Condensed Matter. Berlin: Springer-Verlag, 1991.
 29. *Fellinger M.R., Park H., Wilkins J.W.* Force-matched embedded-atom method potential for niobium // *Physical Review B*. 2010. V. 81 (14). P. 144119.
 30. *Park H., Fellinger M., Lenosky T., Tipton W., Trinkle D., Rudin S., Woodward C., Wilkins J., Hennig R.* Ab initio based empirical potential used to study the mechanical properties of molybdenum // *Physical Review B*. 2012. V. 85 (21). P. 1.
 31. *Wang L., van de Walle A., Alfe D.* Melting temperature of tungsten from two ab initio approaches // *Physical Review B*. 2011. V. 84 (9). P. 1.
 32. *Dinsdale A.* SGTE data for pure elements // *Calphad*. 1991. V. 15 (4). P. 317.

Поступила в редакцию 7 февраля 2017 г.

Савельев Валерий Николаевич, Белгородский государственный национальный исследовательский университет, г. Белгород, Российская Федерация, лаборант-исследователь лаборатории теоретических исследований и компьютерного моделирования Центра наноструктурных материалов и нанотехнологий, e-mail: firesnake21@mail.ru

Липницкий Алексей Геннадьевич, Белгородский государственный национальный исследовательский университет, г. Белгород, Российская Федерация, доктор физико-математических наук, зав. лабораторией теоретических исследований и компьютерного моделирования Центра наноструктурных материалов и нанотехнологий, e-mail: lipnitskii@bsu.edu.ru

UDC 004.942, 538.953

DOI: 10.20310/1810-0198-2017-22-1-45-55

NEW INTERATOMIC POTENTIALS FOR SIMULATION OF REFRACTORY BCC METALS: Nb, Mo, Ta AND W

© V.N. Saveliev, A.G. Lipnitskii

Belgorod National Research University

85 Pobedy St., Belgorod, Russian Federation, 308015

E-mail: firesnake21@mail.ru

Accuracy simulation of BCC refractory metals requires a description of their thermal expansion, melting point and heat of fusion with great accuracy in conjunction with other basic characteristics of these metals. The interatomic potentials satisfying this requirement are currently not available. The interaction potentials between atoms in niobium, molybdenum, tantalum and tungsten in the new method developed by us earlier are constructed. The cohesive energy, the lattice constant, the elastic modules, the equation of state, the energy formation and the energy migration of vacancy, the phonon dispersion curves, the thermal expansion, the melting point and the heat of fusion were calculated for each metal and found good agreement with the experimental data. The energy formation of interstitial atoms and the energy formation of free surfaces with low Miller indices were calculated with constructed potentials.

Key words: interatomic potentials; refractory metals; thermal expansion; melting point; heat of fusion

REFERENCES

1. Zinkle S.J., Ghoniem N.M. Operating temperature windows for fusion reactor structural materials. *Fusion Engineering and Design*, 2000, vol. 51, pp. 55-71.

2. 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. Advances in modeling and simulation of grinding processes. *CIRP Annals-Manufacturing Technology*, 2006, vol. 55 (2), pp. 667-696.
3. Rapaport D.C. *The Art of Molecular Dynamics Simulation*. Cambridge, Cambridge University Press, 2004.
4. Daw M., Baskes M. Semiempirical, quantum mechanical calculation of hydrogen embrittlement in metals. *Physical Review Letters*, 1983, vol. 50 (17), p. 1285.
5. Duan X., Zhou B., Wen Y., Chen R., Zhou H., Shan B. Lattice inversion modified embedded atom method for bcc transition metals. *Computational Materials Science*, 2015, vol. 98, pp. 417-423.
6. Lee B.-J., Baskes M., Kim H., Koo Cho Y. Second nearest-neighbor modified embedded atom method potentials for bcc transition metals. *Physical Review B*, 2001, vol. 64 (18), p. 184102.
7. Lipnitskii A., Saveliev V. Development of n-body expansion interatomic potentials and its application for V. *Computational Materials Science*, 2016, vol. 121, pp. 67-78.
8. Savel'ev V.N., Lipnitskiy A.G. Novye mnogochastichnye potentsialy mezhatomnykh vzaimodeystviy dlya molekulyarnodinamicheskogo modelirovaniya vol'frama [New multiparticle interatomic interaction potentials for molecular dynamics simulation of tungsten]. *Nauchnye vedomosti Belgorodskogo gosudarstvennogo universiteta. Seriya: Matematika. Fizika – Belgorod State University Scientific Bulletin. Mathematics. Physics*, 2016, vol. 44, no. 20 (141), pp. 138-148. (In Russian).
9. Fellingner M.R. *First Principles-Based Interatomic Potentials for Modeling the Body-Centered Cubic Metals V, Nb, Ta, Mo and W*. Ohio, The Ohio State University, 2013.
10. Kresse G., Furthmuller J. Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set. *Phys. Rev. B*, 1996, vol. 54, pp. 11169.
11. Perdew J.P., Burke K., Ernzerhof M. Generalized gradient approximation made simple. *Phys. Rev. Lett.*, 1996, vol. 77, p. 3865.
12. Blochl P.E. Projector augmented-wave method. *Phys. Rev. B*, 1994, vol. 50, p. 17953.
13. Kirkpatrick S., Gelatt C.D., Vecchi M.P. Optimization by simulated annealing. *Science*, 1983, vol. 220 (4598), pp. 671-680.
14. Kittel C. *Introduction to Solid State Physics*. New York, Wiley, 2005.
15. Roberge R. Lattice parameter of niobium between 4.2 and 300 K. *Journal of the Less Common Metals*, 1975, vol. 40 (1), pp. 161-164.
16. Simmons G., Wang H. et al. *Single Crystal Elastic Constants and Calculated Aggregate Properties*. Cambridge, 1971.
17. Pearson W. *Handbook of Lattice Spacings and Structures of Metals and Alloys*. London, Pergamon, 1967, vol. 2, p. 1192.
18. Touloukian Y., Kirby R., Taylor R., Desai P. *Thermophysical Properties of Matter the TPRC Data Series. Vol. 12. Thermal Expansion Metallic Elements and Alloys*. Texas, 1975.
19. Shah J.S., Straumanis M.E. Thermal expansion of tungsten at low temperatures. *Journal of Applied Physics*, 1971, vol. 42 (9), p. 3288.
20. Hixson R., Fritz J. Shock compression of tungsten and molybdenum. *Journal of Applied Physics*, 1992, vol. 71 (4), pp. 1721-1728.
21. Chijioke A.D., Nellis W., Silvera I.F. High-pressure equations of state of Al, Cu, Ta and W. *Journal of Applied Physics*, 2005, vol. 98 (7), p. 073526.
22. McQueen R., Marsh S., Taylor J., Fritz J., Carter W. *The equation of state of solids from shock wave studies. High-velocity impact phenomena*. New York, Acad. Press, 1970, p. 293.
23. Togo A., Tanaka I. First principles phonon calculations in materials science. *Scr. Mater.*, 2015, vol. 108, p. 1.
24. Togo A., Oba F., Tanaka I. First-principles calculations of the ferro elastic transition between rutile-type and CaCl₂-type SiO₂ at high pressures. *Physical Review B*, 2008, vol. 78 (13), p. 134106.
25. Woods A. Lattice dynamics of tantalum. *Physical Review*, 1964, vol. 136 (3A), p. 781.
26. Powell B., Martel P., Woods A. Lattice dynamics of niobium-molybdenum alloys. *Physical Review*, 1968, vol. 171 (3), p. 727.
27. Okoye C., Pal S. Lattice dynamics of molybdenum and tungsten. *II Nuovo Cimento D*, 1990, vol. 12 (7), p. 941.
28. Schultz H. *Atomic Defects in Metals. Vol. 25. Landolt-Börnstein – Group III Condensed Matter*. Berlin, Springer-Verlag, 1991.
29. Fellingner M.R., Park H., Wilkins J.W. Force-matched embedded-atom method potential for niobium. *Physical Review B*, 2010, vol. 81 (14), p. 144119.
30. Park H., Fellingner M., Lenosky T., Tipton W., Trinkle D., Rudin S., Woodward C., Wilkins J., Hennig R. Ab initio based empirical potential used to study the mechanical properties of molybdenum. *Physical Review B*, 2012, vol. 85 (21), p. 1.
31. Wang L., van de Walle A., Alfè D. Melting temperature of tungsten from two ab initio approaches. *Physical Review B*, 2011, vol. 84 (9), p. 1.
32. Dinsdale A. SGTE data for pure elements. *Calphad*, 1991, vol. 15 (4), p. 317.

Received 7 February 2017

Saveliev Valeriy Nicolaevich, Belgorod National Research University, Belgorod, Russian Federation, Assistant Researcher of Theoretical Studies and Computer Simulation Laboratory of Center for Nanostructured Materials and Nanotechnology, e-mail: firesnake21@mail.ru

Lipnitskii Aleksey Gennadevich, Belgorod National Research University, Belgorod, Russian Federation, Doctor of Physics and Mathematics, Head of Theoretical Studies and Computer Simulation Laboratory of Center for Nanostructured Materials and Nanotechnology, e-mail: lipnitskii@bsu.edu.ru

Информация для цитирования:

Савельев В.Н., Липницкий А.Г. Новые потенциалы межатомных взаимодействий для моделирования тугоплавких ОЦК металлов: Nb, Mo, Ta и W // Вестник Тамбовского университета. Серия Естественные и технические науки. Тамбов, 2017. Т. 22. Вып. 1. С. 45-55. DOI: 10.20310/1810-0198-2016-22-1-45-55

Saveliev V.N., Lipnitskii A.G. Novye potentsialy mezhatomnykh vzaimodeystviy dlya modelirovaniya tugoplavkikh OTsK metallov: Nb, Mo, Ta i W [New interatomic potentials for simulation of refractory BCC metals: Nb, Mo, Ta and W]. *Vestnik Tambovskogo universiteta. Seriya Estestvennye i tekhnicheskie nauki – Tambov University Reports. Series: Natural and Technical Sciences*, 2017, vol. 22, no. 1, pp. 45-55. DOI: 10.20310/1810-0198-2017-22-1-45-55 (In Russian).