

УДК 538.9; 539.2

ПРИМЕНЕНИЕ МЕЖИОННЫХ ПОТЕНЦИАЛОВ, ПОЛУЧЕННЫХ ИЗ МОДЕЛЬНЫХ ПСЕВДОПОТЕНЦИАЛОВ, ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ ТОЧЕЧНЫХ ДЕФЕКТОВ И РАДИАЦИОННЫХ ЭФФЕКТОВ В Cu, Fe, Ni, Ti и Zr

В. Г. Вакс, В. Г. Капинос, Ю. Н. Осецкий, Г. Д. Самолук,
А. В. Трефилов

Обсуждаются использование для моделирования дефектов решетки в переходных металлах межатомных потенциалов $\varphi(r)$, полученных во втором порядке по псевдопотенциалу электрон-ионного взаимодействия V . Предложены соответствующие подгоночные V для α -Fe, Ti, Zr, Cu и Ni. Сравнение с опытом расчетов структурных, упругих и фононных свойств, а также характеристик вакансий указывает на возможность использования этих V и φ в моделировании, хотя для Cu и Ni предпочтительнее, видимо, использовать «первопринципные» V и φ Дажана и др. Предложены методы учета дальнего действия при моделировании с «псевдопотенциальными» $\varphi(r)$. Применение этих дальнедействующих $\varphi(r)$ к моделированию структуры и кинетики образования вакансионных кластеров позволило объяснить ряд экспериментальных фактов, не имевших объяснения в моделях с эмпирическими короткодействующими потенциалами.

Моделирование на ЭВМ является сейчас одним из основных методов теоретического изучения дефектов решетки в задачах прикладного материаловедения. При этом межатомные взаимодействия описываются парными потенциалами $\varphi(r)$, и выбор адекватных $\varphi(r)$ является одной из основных проблем в данной области. Обычно в работах по моделированию используются эмпирические короткодействующие потенциалы (ЭКП) [1, 2], что позволяет рассматривать достаточно большие системы атомов за разумные времена работы ЭВМ. Однако исследования более сложных и актуальных задач физики дефектов, например о механизмах их зарождения, взаимодействиях, о кинетике отжига и др., указали на существенную чувствительность результатов к виду $\varphi(r)$ [3-8], т. е. на важность использования более реалистических потенциалов.

При микроскопических подходах сама возможность представить энергию металла в виде суммы парных потенциалов $\varphi(r)$ показана только в теории возмущений по псевдопотенциалу электрон-ионного взаимодействия V , которая применима в основном для простых металлов, прежде всего щелочных (см. например, [9, 10]). Методы построения относительно слабых V для благородных и щелочноземельных металлов предложены в работах [11-13]. При этом применение $\varphi(r)$ из [12] к моделированию точечных дефектов в Cu и Ag дало хорошее совпадение с опытом для энергий образования и миграции вакансий и межузельных атомов $E_{1/2}^f$, $E_{1/2}^m$, E_1^f и E_1^m . Имеющиеся попытки построения парных $\varphi(r)$ для переходных металлов (представляющих наибольший интерес для приложений) также используют модельные псевдопотенциалы [4, 14, 15], хотя точность применяемого низшего приближения по V здесь не слишком ясна. При этом в форме, удобной для использования, представлены только $\varphi(r)$ для Ni [4] и моделирование с этими $\varphi(r)$ дало удовлетворительное согласие с опытом для $E_{1/2}^f$ и $E_{1/2}^m$ в Ni.

Таким образом, неэмпирические $\varphi(r)$ строятся пока на основе тех или иных модельных псевдопотенциалов. В отличие от ЭКП эти $\varphi(r)$ являются дальнедействующими. Как обсуждается в [3-8] и ниже, в ряде случаев моделирование с использованием «псевдопотенциальных» дальнедействующих потенциалов (ПДП) приводит к существенно иным результатам, чем для ЭКП, и лучше согласуется с опытом. В связи с этим возникают следующие задачи: а) построение хотя бы более или менее реалистических ПДП для практически важных металлов, таких как Fe, Ti и Zr, для которых пока в моделировании использовались только ЭКП; б) разработка методических рекомендаций по преодолению трудностей учета дальнего действия в моделировании с ПДП; в) обсуждение накопленного опыта и новых качественных результатов, полученных при моделировании с ПДП. Этим вопросам и посвящена настоящая работа.

Таблица 1

Используемые значения параметров в формуле (1)

Металлы	ϱ , а. е.	z	r_0 , а. е.	U	ξ
Fe	79.5	1.95	0.70	2.07	0.45
Ni	73.9	1.50	0.65	2.77	0.20
Cu	79.7	1.50	0.65	3.3	0.26
Ti	134.6	2	1.37	0.04	0.15
Zr	157.1	2	1.64	-0.13	0.15
Mg	154.6	2	1.667	-0.500	0.15

Первая из названных задач рассматривается в разделе 1. Для ее решения мы используем простую псевдопотенциальную модель, успешно использовавшуюся ранее для щелочных металлов (см. [9, 10] и цитированную там литературу). Она содержит несколько параметров, определяемых из условия подгонки к некоторым наблюдаемым характеристикам, а ее точность проверяется сравнением с опытом ряда вычисленных «атомных» (т. е. структурных, упругих и фононных) свойств металла. Для переходных металлов такая модель груба, но, видимо, более реалистична, чем модели с ЭКП. Для сравнения с результатами для непереходных металлов мы применяем эту модель также к Mg, а для сопоставления с более тщательными рассмотренными [4, 12] — к Cu и Ni.

В разделе 2 рассмотрены методические вопросы «б». Используя методы, развитые в работах [16, 17], мы даем рекомендации по использованию в моделировании как наших $\varphi(r)$, так и ПДП из работ [4, 12]. В разделе 3 обсуждаются основные новые результаты, полученные при моделировании с ПДП. Рассматриваются вопросы о структуре вакансионных кластеров и об эволюции обедненных зон в радиационных каскадах для Cu, Fe и Ni.

1. Модельные псевдопотенциалы и потенциалы для Fe, Ni, Cu, Ti, Zr и Mg

Фурье-компоненту псевдопотенциала $V(q)$ мы берем в том же виде, что в [9]

$$V(q) = \frac{-4\pi ze^2}{\Omega q^2} \left[\cos qr_0 + V \left(\frac{\sin qr_0}{qr_0} - \cos qr_0 \right) \right] \exp(-\xi q^4 / 16k_{F0}^4). \quad (1)$$

Здесь ze — заряд иона, Ω — атомный объем, $k_{F0} = (3\pi^2 z / \Omega)^{1/3}$ — импульс Ферми. Для переходных металлов d -электроны предполагаются включенными в ионный остов, а возможность их перехода в зону проводимости учитывается выбором эффективной валентности z , являющейся дополнительным параметром модели. Из табл. 1 видно, однако, что наши z близки

к «естественным» значениям 2 или 1.5, получающимся в «первопринципных» оценках [4, 13]. Потенциалы рассчитываются по обычным формулам

$$\varphi(r) = \frac{z^2 e^2}{r} - \frac{\Omega}{\pi^2 r} \int_0^{\infty} dq q F(q) \sin qr,$$

$$F(q) = \frac{1}{8\pi e^2} \Omega q^2 V^2(q) \left[\frac{1}{\varepsilon(q)} - 1 \right], \quad (2)$$

где $\varepsilon(q)$ — диэлектрическая функция, вычисляемая, как и в [9], в приближении Гельдарта—Тейлора. Параметры r_0 , U и ξ в (1) определяются из подгонки под наблюдаемый равновесный объем (т. е. из условия $p(\Omega) = 0$), под фононные спектры в среднем и под модуль сдвига c_{44} или модуль сжатия B . При этом мы ориентируемся на «динамическое» значение $B = B_{\text{дин}}$, которое вычисляется методом длинных волн без учета зависимости $\varphi(r)$ от плотности (и в рассматриваемом втором порядке по V отличается от «статического» $B = B_{\text{ст}}$, вычисляемого дифференцированием энергии по объему [18]), поскольку при моделировании зависимость $\varphi(r)$ от плотности не учитывается.

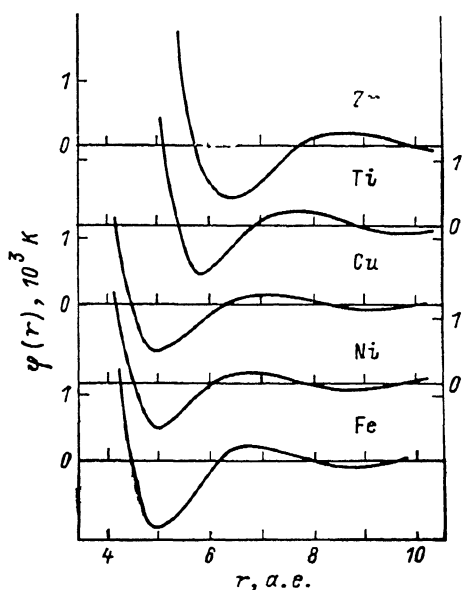


Рис. 1. Потенциалы $\varphi(r)$, вычисленные по формулам (1) и (2) при значениях параметров, указанных в табл. 1.

Используемые значения z , r_0 , U , ξ в (1) и соответствующие $\varphi(r)$ приводятся в табл. 1. и на рис. 1; вычисленные фононные спектры и упругие модули B_{ik} сравниваются с экспериментом на рис. 2 и в табл. 2. Связь между B_{ik} и обычными модулями c_{ik} указана, например, в [28]; в частно-

Таблица 2

Упругие модули B_{ik} (в ГПа) в твердой фазе и значения максимума структурного фактора S_{max} и параметра упаковки η в жидкой фазе вблизи плавления

Металл	$B_{\text{ст}}$	$B_{\text{дин}}$	B_{44}	B_{33}	B_{22}	$B_{12}^{\text{ст}}$	$B_{12}^{\text{дин}}$	S_{max}	η
Fe (ОЦК)	101	164	141	10				3.26 3—3.4 ^a	0.51
Ni (ГЦК)	61	160	120	8.2				3.18 2.6—2.8 ^b	0.49
Cu (ГЦК)	58	125	97	9.3				3.13	0.48
Ti (ГПУ)	58	129	47	39	83	3.7	-0.7	3.44	0.48
Zn (ГПУ)	44	87	32	27	59	2.1	-0.7	3.59	0.50
Mg (ГПУ)	34	49	18.4	23.8	36.9	-0.11	1.2		0.50
		31.5	18.4	19.5	35.6		-0.23		

Примечание. Верхняя цифра — расчет; нижняя — эксперимент, B_{ik} — [21], a — [22], b — [23].

сти, для кубических структур $B_{33}=c'=1/2(c_{11}-c_{12})$, $B_{44}=c_{44}$. В табл. 2 указаны также характеристики структуры жидкого металла вблизи точки плавления T_m : максимальное значение S_{\max} структурного фактора, вычисленного для $\Omega=\Omega_m=\Omega(T_m)$ в приближении Перкуса—Иевики [9], и параметр упаковки $\eta=\pi d_{BH}^3/6\Omega_m$, где d_{BH} — диаметр отталкивательного остова потенциала $\varphi(r)$, определенный по Баркеру и Хендерсону [9]. Для большинства изученных жидких металлов вблизи T_m экспериментальные $S_{\max} \sim 3$, а оцененные из них $\eta \sim 0.5$, так что размеры отталкива-

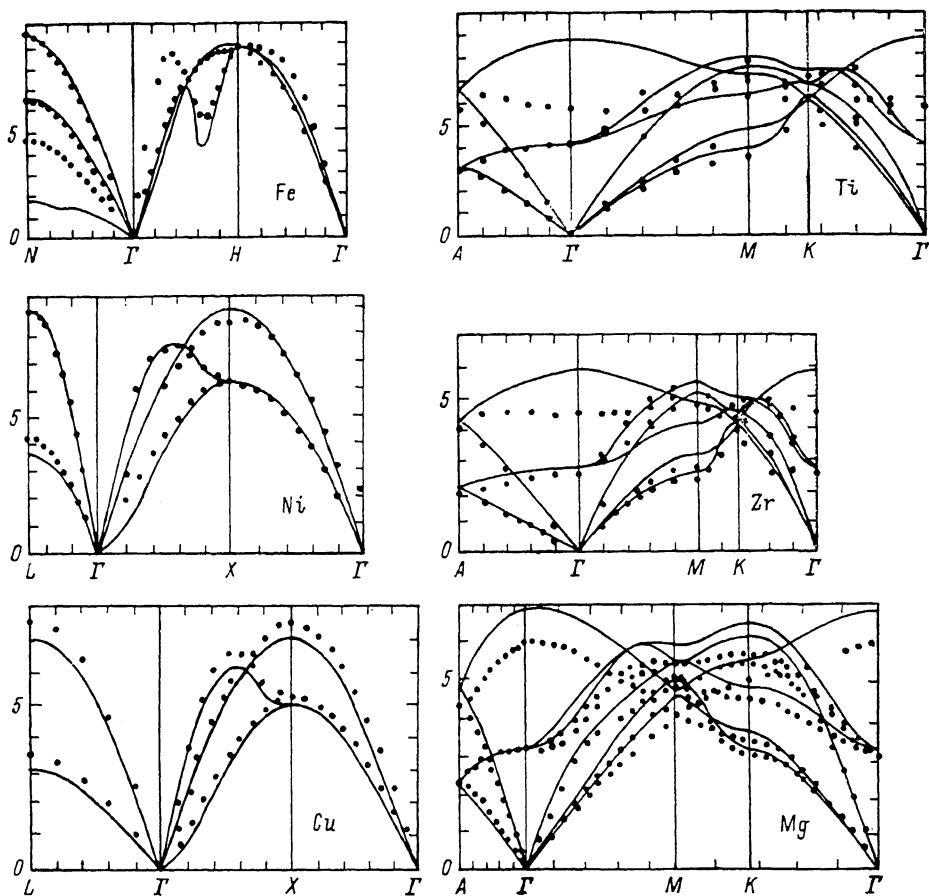


Рис. 2. Фононные спектры рассматриваемых металлов (в ГГц).

Линии — расчет с $\varphi(r)$ рис. 1; точки — эксперимент для α -Fe [2], р. 26.11; Ni [2], р. 28.1; Cu [4]; Ti [2]; Zr [2]; Mg [27].

тельных остовов $\varphi(r)$ в табл. 2 можно считать разумными. Значения энергий образования и миграции вакансий E_{1s}^f и E_{1s}^m указаны в табл. 3.

Обсудим приведенные результаты. Видно, что, во-первых, описание используемой моделью простого металла Mg является, естественно, более точным, чем для переходных металлов; во-вторых, для Fe, Ni и Cu наибольшая погрешность модели состоит в существенном занижении модуля сдвига $c'=B_{33}$. Эта погрешность характерна для всех моделей переходных металлов с локальным псевдопотенциалом, особенно в ОЦК структуре, и обусловлена неучетом зонных эффектов, связанных с d -электронами (судя по результатам работы [29], эти эффекты в ГЦК структурах иногда удается имитировать, добавляя к $\varphi(r)$ феноменологический борн-майеровский потенциал, который может описывать отталкивание d -оболочек [4, 12]). В то же время фононные спектры Ni и Cu (рис. 2) в целом описываются неплохо. Удовлетворительно описываются также фононы в Fe, если не говорить о занижении связанной с модулем B_{33} поперечной фононной

Таблица 3

Рекомендуемые значения параметров обрезания α , R_r и R_c для потенциалов $\varphi(r)$ и значения энергии образования и миграции вакансии E_{1v}^f и E_{1v}^m (в эВ)

Металл	$\varphi(r)$	α	$\frac{R_r}{a}$	$\frac{R_c}{a}$	E_{1v}^f		E_{1v}^m	
					расч.	эксп.	расч.	эксп.
α -Fe	Наст. раб.	0.3	2.41	3.70	0.91	1.1 [32] 1.4—1.5 [33]	0.52	0.6 [33]
Cu	Наст. раб. [12]	0.25 0.25	2.05 2.22	3.74 3.52	1.11 1.42	0.98—1.31 [33]	0.64 0.82	0.6—1.08 [33]
Ni	Наст. раб. [4]	0.2 0.25	2.06 2.86	3.75 2.86	1.37 1.33	1.39 [32] 1.54—1.8 [33]	0.67 0.90	1.2—1.46 [33] 1.08 [33]
Zr	Наст. раб.	0.25	1.95	4.08	1.48	0.8 [34], 1.75 [36], 1.35 [36]	0.97	1.24 [36]
Ti	То же	0.25	1.94	4.08	1.51	1.55 [35], 1.27 [36], 1.68 [37]	1.01	1.16 [36], 0.35 [37]
Mg	» »	0.2	1.92	4.08	0.66	0.58—0.89 [33]	0.53	

ветви TA_1 (110). В Ti и Zr неплохо описываются как модули, так и фононы, причем в Zr погрешности меньше, чем в Ti. Вычисленные E_{1v}^m в табл. 3 обычно лежат в пределах разброса экспериментов и подробнее обсуждаются в разделе 2.

Сравним наши $\varphi(r)$ с упомянутыми выше «первопринципными» ПДП. Наиболее надежным из них кажется потенциал Дажана и др. для Cu [11, 12], выведенный с помощью достаточно последовательного разложения по малым параметрам ($s-d$ гибридизации и отношения нерезонансного псев-

Таблица 4

Зависимость вычисленной энергии релаксации вакансии E_r^v (в эВ) для α -Fe от радиусов обрезания R_r и R_c

R_r/a	R_c/a					
	1.118	1.768	2.409	3.055	3.697	4.342
1.118	-0.380	-0.273	-0.201	-0.214	-0.216	-0.229
1.768		-0.306	-0.265	-0.273	-0.274	-0.281
2.404			-0.271	-0.277	-0.277	-0.289
3.055				-0.277	-0.277	-0.289
3.697					-0.277	-0.289
4.342						-0.289

допотенциала к энергии Ферми). Его точность проверена расчетами упругих модулей, фононных спектров и энергий точечных дефектов [12] и оказывается выше, чем для нашего $\varphi(r)$. Для аналогичного $\varphi(r)$ в Ni [4] вывод не столь последователен, а точность описания атомных свойств близка к получающейся с нашим $\varphi(r)$. Но для моделирования дефектов, особенно межузельных атомов, ПДП из [4] кажется более надежным, поскольку в нем учитывается упомянутое отталкивание d -оболочек на малых расстояниях (см. раздел 2). Для Fe, Ti и Zr сколько-нибудь проверенные и удобные для использования «первопринципные» $\varphi(r)$ нам неизвестны, и в моделировании мы использовали наши ПДП.

Сделаем замечание о «переносимости» псевдопотенциалов и потенциалов (1), (2), т. е. о возможности описания ими других кристаллических

структур или сплавов. Для тех металлов, для которых псевдопотенциальная модель второго порядка микроскопически обоснована (щелочных, Mg и т. п.), это свойство является одним из основных и позволяет количественно описывать, например, фазовые переходы между разными структурами (см. [10] и цитированную там литературу). Однако в переходных металлах неучитываемые зонные эффекты, резко зависящие от структуры, приводят к отсутствию переносимости $V(q)$. Так, свойства ОЦК фаз Ti и Zr описываются нашими $V(q)$ много хуже, чем для ГПУ фазы. Поэтому использование приводимых $V(q)$ и $\varphi(r)$ для других структур или сплавов можно рекомендовать только после дополнительной проверки точности или некоторой переподгонки параметров.

2. Методика использования дальнодействующих потенциалов в машинном моделировании

Применение в моделировании ПДП приводит к вычислительным трудностям вследствие их дальнодействующего характера. Возможности современных ЭВМ требуют ограничения радиуса действия R_c потенциала $\varphi(r)$ на расстояниях порядка 2—3 постоянных решетки a , и при моделировании $\varphi(r)$ плавно обрезают на таких R_c . При использовании ПДП R_c выбирают вблизи нулей вычисленного $\varphi(r)$, но для указанных небольших R_c обрезание может приводить к заметным ошибкам, т. е. отличиям результатов от получаемых с исходным $\varphi(r)$. В работе [16] показано, что если заменять ПДП $\varphi(r)$ на эффективное

$$\varphi_{\text{ef}}(r) = \varphi(r) \exp(-\alpha^2 r^2) \Theta(R_c - r), \quad (3)$$

где $\Theta(x)$ — функция, осуществляющая упомянутое плавное обрезание, то при должном выборе достаточно малого параметра α удается существенно уменьшить ошибки, связанные с заменой $\varphi(r)$ на $\varphi_{\text{ef}}(r)$. Следуя [16, 17], ниже мы приведем рекомендации по применению рассматриваемых ПДП в моделировании на примере расчетов энергии образования вакансий E_{1s}^f .

Величина $E_{1s}^f = E_s^f$ определяется выражением [30]

$$E_s^f - p\Omega_s^f = -\frac{1}{2} \sum_i \varphi(r_i^0) - \frac{1}{6} \sum_i \left(r \frac{\partial \varphi}{\partial r} \right)_{r=r_i^0} + E_s^r = E_b + W + E_s^r. \quad (4)$$

Здесь p — давление (ниже полагаем $p=0$); Ω_s^f — объем образования вакансии; суммирование происходит по $N-1$ узлам идеальной решетки с координатами $r_i^0 \neq 0$ относительно вакантного узла в начале координат. Первая сумма в (4) E_b есть структурная составляющая энергии связи, вторая — так называемый вириальный член W , а сумму $E_b + W = E_s^{\text{un}}$ называют нерелаксированной энергией образования вакансии. Слагаемое E_s^r есть энергия релаксации, равная разности энергий кристалла до и после релаксации

$$E_s^r = \sum_{i>j}^{N-1} [\varphi(r_i^0 + s_i - r_j^0 - s_j) - \varphi(r_i^0 - r_j^0)], \quad (5)$$

где s_i — вектор релаксационного смещения атома от узла идеальной решетки r_i^0 .

Значения параметров α и R_c в (4) будем выбирать из рассмотрения решеточных сумм E_b и W в E_s^{un} . Точные значения этих сумм для $\alpha=0$, $R_c=\infty$ можно находить аналитическими методами, выделяя в $\varphi(r)$ асимптотические вклады при больших r , связанные с фриделевскими осцилляциями, и применяя метод Эвальда [16]. Однако это оказывается достаточно громоздким, и для рассматриваемых ПДП за «точные» E_s^{un} мы принимаем значения, полученные нами при $\alpha=0.05 a^{-1}$ и $R_c=(30-35)a$, что, по нашим оценкам, соответствует погрешности $|\delta E_s^{\text{un}}/E_s^{\text{un}}| \leq 1\%$. Для наших

модельных ПДП в ОЦК Fe, ГПУ Zr и ГЦК Ni это дало соответственно $E_{v,\infty}^{un} = 1.1, 1.48$ и 1.41 эВ.

На рис. 3 мы приводим зависимости $E_v^{un}(R_c)$ для Fe, Zr и Ni при разных α . Видно, что при $\alpha=0$ E_v^{un} заметно осциллирует с R_c даже при $R_c \geq 15a$. В то же время при $\alpha \neq 0$ хорошая сходимость к $E_v^{un}(\infty)$ достигается уже при небольших R_c . Так, выбор для Fe, Zr и Ni значений $\alpha a = 0.3, 0.25$ и 0.2 уже при $R_c \approx 4a$ дает E_v^{un} , отличающиеся от указанных выше

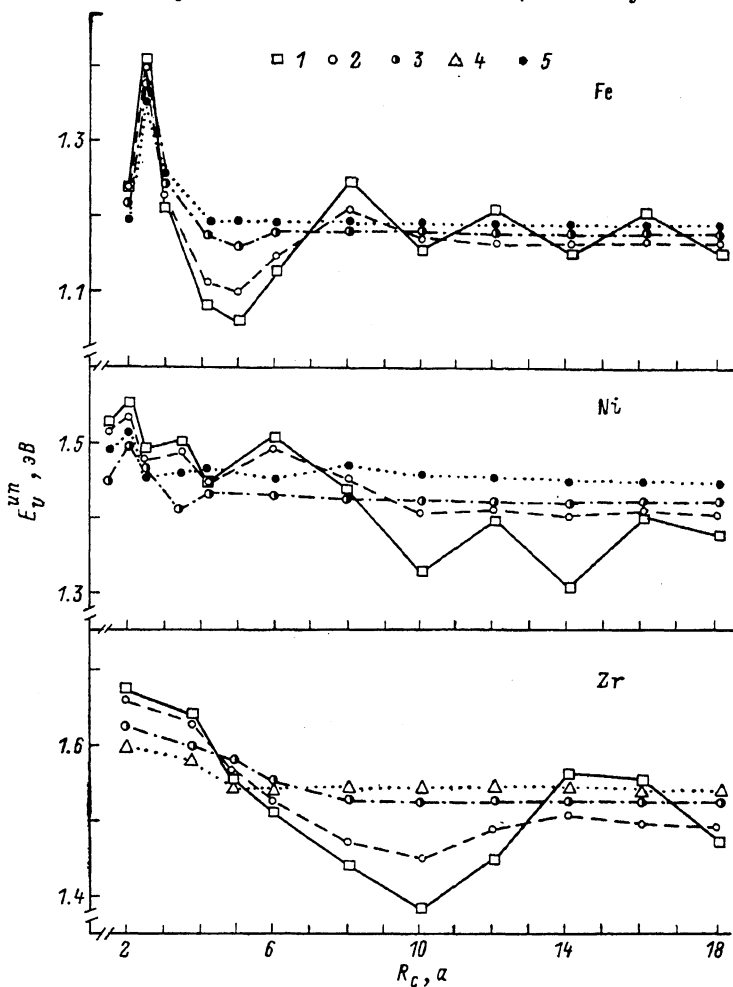


Рис. 3. Зависимость нерелаксированной энергии образования вакансии E_v^{un} от R_c в расчетах с $\varphi(r)$ рис. 1 при различных α в формуле (3).

1 — $\alpha=0$, 2 — $\alpha a=0.1$, 3 — 0.2 , 4 — 0.25 , 5 — 0.3 .

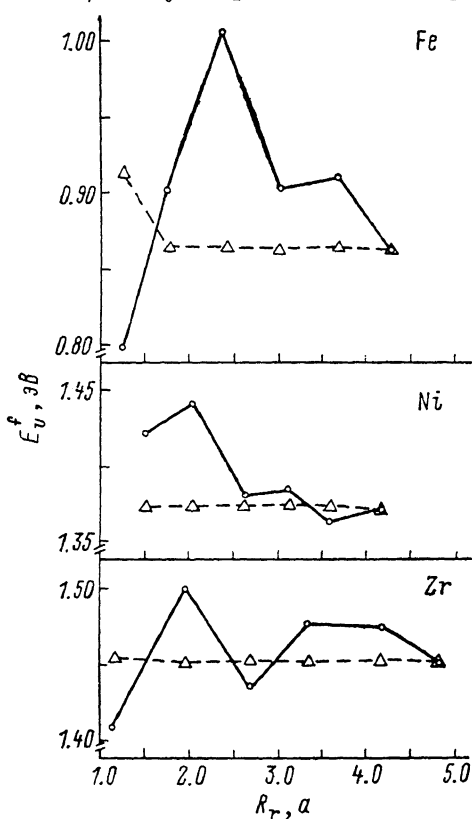
«точных» $E_{v,\infty}^{un}$ не более чем на 4–5%. Рекомендуемые по аналогичным критериям $E_{v,\infty}^{un}$ для всех рассматриваемых ПДП указаны в табл. 3.

Обсудим теперь, как при выбранном α зависит от R_c энергия релаксации E_r^v . Погрешность расчета E_r^v при введении обрезания R_c связана, во-первых, с неполной релаксацией решетки в «обрезанном» потенциале и, во-вторых, с неполным суммированием по r_i^0 в (5). Как показано в [17] и ниже, чувствительность к R_c первой из этих погрешностей много слабее, чем второй. Это позволяет резко упростить расчеты E_r^v . В отличие от традиционной методики, когда релаксация и расчеты энергии проводятся с одним и тем же потенциалом φ_{ef} , при рассмотрении релаксации мы вводим также потенциал φ_r с радиусом обрезания $R_r < R_c$. Дальнейший потенциал φ_{ef} применяется только на последнем этапе, при расчетах решеточных сумм в (4) и (5), т. е. используется минимальное число раз.

Это позволяет брать R_c достаточно большим, увеличивая точность вычислений. Выбор же R_r в многократно используемом при релаксации φ , иллюстрируется описываемыми ниже расчетами.

Моделирование проводилось в сферических кристаллах, содержащих для Fe, Zr и Ni соответственно 1152, 1281 и 1092 подвижных атомов. Использовались жесткие граничные условия с толщиной слоя неподвижных атомов, равной радиусу действия потенциала R_c . Для нахождения равновесных положений атомов после удаления центрального применялся метод сопряженных градиентов [31].

В табл. 4 мы приводим результаты расчетов E_v^r для α -Fe при различных R_r и R_c . Горизонтальные строки показывают зависимость $E_v^r(R_c)$



при данном R_r , вертикальные — $E_v^r(R_r)$ при данном R_c . Диагональные элементы этой таблицы соответствуют $E_v^r(R_c)$ для обычной методики с $R_r = R_c$. Видно, что сходимость в столбцах таблицы является очень быстрой: уже при $R_r \approx 1.8 a$ $E_v^r(R_r)$ отличается от значения с $R_r = R_c$ менее чем на 3%, а при $R_r \approx 2.4 a$ меньше чем на 0.3%. Таким образом, релаксация к равновесным конфигурациям действительно определяется короткодействующей частью $\varphi(r)$. В то же время относительно медленная сходимость вдоль диагонали табл. 4 показывает, что погрешность в E_v^r при небольших R_c связана в основном не с «недорелаксацией», а со сравнительно медленным убыванием ПДП в суммах (5).

Рис. 4. Зависимость энергии образования вакансии в расчетах с $\varphi(r)$ рис. 1 от R_r .

Параметры αa , R_c/a для α -Fe взяты равными 0.3, 4.34, для Ni — 0.2, 4.31, для Zr — 0.25, 4.79.

Результаты для Zr и Ni носят тот же характер. Это иллюстрируется на рис. 4, где для наглядности приводится не E_v^r , а полное E_v^f в (4). Сплошные линии соответствуют обычной методике с $R_r = R_c$, т. е. диагонали табл. 4, а штриховые — расчетам с $R_r < R_c$, т. е. столбцам табл. 4. Снова видно, что предлагаемый метод позволяет получать достаточную точность уже при небольших R_r .

В целом наш опыт показывает, что хорошая точность для энергий образования и миграции точечных дефектов и их комплексов при использовании ПДП достигается при $\alpha a = 0.2 \div 0.3$ и значениях R_r , соответствующих обрыву $\varphi_{ef}(r)$ после 2—3 осцилляций. Радиус же R_c включает, как правило, 4—6 осцилляций $\varphi_{ef}(r)$. Рекомендуемые значения α , R_r и R_c для рассматриваемых ПДП указаны в табл. 3. В этой таблице приводятся также результаты расчетов энергий образования и миграции вакансий E_{1v}^f и E_{1v}^m с данными ПДП. Видно, что вычисленные E_{1v}^f неплохо согласуются с имеющимся экспериментом, кроме случая α -Fe, где расчет несколько занижает E_{1v}^f . Энергия миграции E_{1v}^m для Cu и Ni в наших ПДП ниже, чем в потенциалах Дажана [4, 12], и, по-видимому, занижена. Для других металлов вычисленные E_{1v}^m лежат в пределах разброса экспериментов.

Таким образом, результаты, представленные в табл. 2, 3 и на рис. 2, показывают, что как атомные свойства, так и характеристики вакансий в Ti, Zr и Fe неплохо описываются нашими ПДП. Поэтому их с достаточным основанием можно использовать для моделирования свойств вакансионных комплексов и обедненных зон в данных металлах. В то же время для описания свойств межузельных атомов (МА) наши ПДП, по-видимому, непригодны. Так, оценки энергий миграции E_m^* с данными $\varphi(r)$ дают значения, вдвое меньшие наблюдаемых. Это может быть связано с учетом упоминавшихся эффектов сильного короткодействующего отталкивания, связанного с перекрытием d -оболочек, которые возникают при «первопринципных» подходах [4, 12]. Феноменологически их можно учесть, добавив к нашим $\varphi(r)$ короткодействующее отталкивание, например борн-майеровское, которое будет проявляться только для МА, т. е. в конфигурациях с резким сближением атомов относительно средних расстояний. Но в данной работе мы не вводим таких поправок.

В связи со сказанным в обсуждаемых ниже приложениях [5-7] наши ПДП (для Fe) применялись только к задачам, связанным с вакансиями и вакансионными комплексами. Для Cu мы использовали ПДП Дажана из [12]. При этом, поскольку в потенциалах Дажана для Cu и Ni названные эффекты отталкивания учитываются, их можно, видимо, применять также и для моделирования свойств МА [4, 12].

3. Применение псевдопотенциальных дальнедействующих потенциалов для моделирования структуры и эволюции вакансионных кластеров

В этом разделе мы опишем наиболее важные результаты, полученные при применениях ПДП к задачам о структуре вакансионных кластеров [3, 4, 6, 8] и кинетике их зарождения в обедненных зонах (ОЗ), образующихся после прохождения каскада атомных столкновений [5, 7].

Расчеты энергий образования вакансионных комплексов E_{fn}^* с использованием ЭКП показывают, что объемные комплексы (поры) энергетически выгоднее плоских конфигураций, вакансионных петель (ВП) [39-41], что, видимо, расходится с экспериментами для чистых металлов [42, 43]. В работах [3, 5] показано, что при использовании ПДП это расхождение исчезает и плоские конфигурации оказываются выгоднее объемных. Так, в Cu [5] минимальную энергию образования имеет ВП Франка в плоскости {111}, что согласуется с экспериментами по изучению микроструктуры облученной меди [42]. Аналогичный вывод следует из расчетов E_{fn}^* с использованием ПДП для Ni [3].

В результате скольжения сидячих дислокаций ВП треугольной формы в плоскости {111} в Cu превращаются в конфигурации тетраэдров из дефектов упаковки (ТДУ). Уже начиная с малых размеров ($N_v \geq 10$) энергия образования этих ТДУ оказывается меньшей, чем для исходной петли Франка [7, 8]. Этот вывод согласуется с опытом: в Cu при $t \approx 300^\circ\text{C}$, когда ВП Франка еще не растворяются и могут перестраиваться в треугольные конфигурации, наблюдаются только ТДУ [42, 44].

Использование ПДП в моделировании для α -Fe [5, 6] также показало, что ВП имеют меньшую энергию образования, чем поры, и лежат в плоскости {110}. Удалось выполнить моделирование реакций сдвига Эйра-Баллоу [45]

$$1/2 \langle 110 \rangle + 1/2 \langle 001 \rangle = 1/2 \langle 111 \rangle, \quad 1/2 \langle 110 \rangle + 1/2 \langle \bar{1}\bar{1}0 \rangle = \langle 100 \rangle, \quad (6)$$

что ранее, при использовании ЭКП, сделать не удавалось [46]. При числе вакансий в ВП {110} $N_v \geq 50$ в α -Fe моделируются также атермическое снятие дефекта упаковки и образование совершенной петли с вектором Бюргерса $\mathbf{b} = 1/2 \langle 111 \rangle$. ВП с такими \mathbf{b} обычно наблюдаются в облученных ОЦК металлах [43].

Применение ПДП к моделированию эволюции ОЗ [7] впервые позволило объяснить механизм атермического зарождения протяженных вакансионных кластеров в каскадах. При этом подтвердились основные положения модели [47] о том, что зарождение ВП или ТДУ объясняется диффузионной перестройкой ОЗ на тепловой стадии каскада. Сделан важный вывод о том, что тип зарождающегося кластера зависит не только от температуры среды, но и от средней концентрации вакансий c_v^* в ОЗ. Так, в Си на тепловой стадии каскада эволюция ОЗ при $c_v^* \sim 0.1$ приводит к зарождению ВП Франка с $b=1/3 \langle 111 \rangle$, а увеличение c_v^* до 0.15 вызывает зарождение ТДУ непосредственно в ОЗ. В α -Fe зарождение ВП в плоскости $\{110\}$ происходит лишь для ОЗ с $c_v^* \geq 0.15$ и при существенно большей длительности тепловой стадии каскада. Сравнение кинетики зарождения ВП в Си и α -Fe показывает, что при прочих равных условиях вероятность рождения ВП в α -Fe заметно ниже и они образуются только в достаточно крупных ОЗ с $N_v \geq 100$, в которых возможно возникновение больших вакансионных кластеров, диффузионная перестройка которых и приводит к рождению ВП. В случае же малых ОЗ вакансионные кластеры в α -Fe в петли не переходят и существуют в виде трехмерных «рыхлых» конфигураций. Эти результаты качественно объясняют эксперименты, показавшие малую эффективность зарождения ВП в α -Fe [43].

Отметим, что попытки моделирования эволюции ОЗ с использованием ЭКП успеха не имели [48]. По-видимому, это связано с тем, что короткодействующие потенциалы неправильно описывают энергетику протяженных вакансионных кластеров в металлах, в то время как в ПДП эффекты дальнего действия, важные для данных проблем, описываются более реалистично.

Таким образом, имеющийся пока небольшой опыт применения ПДП в моделировании радиационных дефектов показывает, что в ряде случаев результаты отличаются от получаемых с ЭКП, лучше согласуются с экспериментами и позволяют микроскопически описать эффекты, не имевшие объяснения в моделях с ЭКП.

Авторы глубоко благодарны Н. Е. Зейну за многочисленные советы и помощь в работе.

Л и т е р а т у р а

- [1] Johnson R. A. // J. Phys. F. 1973. V. 3. N 2. P. 295—321.
- [2] Stoneham A. M., Taylor R. Handbook of Interatomic Potentials—Metals. AERE-R10205, Harwell, 1981.
- [3] Vasilyev A. A., Sirotinkin V. V., Melker A. I. // Phys. St. Sol. (b). 1985, V. 131. N 2. P. 537—544.
- [4] Lam N. Q., Dagens L. // J. Phys. F. 1986. V. 16. N 10. P. 1373—1384.
- [5] Капинос В. Г., Осецкий Ю. Н., Платонов П. А. // ФТТ. 1986. Т. 28. № 12. С. 3603—3609.
- [6] Капинос В. Г., Осецкий Ю. Н., Платонов П. А. // Препринт ИАЭ-4534/11. М., 1987.
- [7] Капинос В. Г., Осецкий Ю. Н., Платонов П. А. // ФММ. 1988. Т. 66. № 2. С. 264.
- [8] Sabochick M. J., Yip S., Lam N. Q. // J. Phys. F. 1988. V. 18. N 3. P. 349—361.
- [9] Bratkovsky A. M., Vaks V. G., Kravchuk S. P., Trefilov A. V. // J. Phys. F. 1982. V. 12. N 12. P. 1293—1310.
- [10] Братковский А. М., Вакс В. Г., Трефилов А. В. // ЖЭТФ. 1984. Т. 86. № 6. С. 2112—2130.
- [11] Dagens L. // J. Phys. F. 1977. V. 7. N 7. P. 2517—2542.
- [12] Lam N. Q., Dagens L., Doan N. V. // J. Phys. F. 1983. V. 13. N 12. P. 2503—2516.
- [13] Moriarty J. A. // Phys. Rev. B. 1982. V. 26. N 4. P. 1754—1780.
- [14] Юрьев А. А., Ватолин Н. А. // Изв. АН СССР, металлы. 1984. № 5. С. 44—50.
- [15] Moriarty J. A. // Phys. Rev. Lett. 1984. N 5. P. 44—50.
- [16] Duesberg M. S., Jacucci G., Taylor R. // J. Phys. F. 1979. V. 9. N 3. P. 413—424.
- [17] Капинос В. Г., Осецкий Ю. Н. // Препринт ИАЭ-4576/11. М., 1986.
- [18] Бровман Е. Г., Каган Ю. М. // УФН. 1974. Т. 112. № 3. С. 369—426.
- [19] Gschneidner K. A. // Sol. St. Phys. 1964. V. 16. P. 275—382.
- [20] McCammon R. D., White G. K. // Philos. Mag. 1965. V. 11. N 114. P. 1125—1134.
- [21] Ducastelle F. // J. de Phys. 1970. V. 31. N 11—12. P. 1055—1062.
- [22] Клименков Е. А., Спектор Е. З., Базин Ю. А., Веселова С. И., Баум Б. А. // ФММ. 1976. Т. 42. № 6. С. 1317—1319.
- [23] Vahvaselka K. S. // Phys. Scripta. 1981. V. 24. N 1. P. 59—64.

- [24] Nicklow R. M., Jilat G., Smith H. R., Raubenheimer L. J., Wilkinson M. K. // Phys. Rev. 1967. V. 1164. N 3. P. 922—928.
- [25] Stassic C., Arch D., Harmon B. N., Wakabayashi N. // Phys. Rev. B. 1979. V. 19. N 1. P. 181—188.
- [26] Stassic C., Zaretsky T., Arch D., McMasters O. D., Harmon B. N. // Phys. Rev. B. 1978. V. 18. N 6. P. 2632—2642.
- [27] Pindor A., Pynn K. // J. Phys. C. 1969. V. 2. N 6. P. 1037—1050.
- [28] Бровман Е. Г., Каган Ю. М., Холас А. // ЖЭТФ. 1971. Т. 61. № 8. С. 737—751.
- [29] Немошкаленко В. В., Мильман В. Ю., Жалко-Титаренко А. В., Антонов В. Н. // УФЖ. 1985. Т. 30. № 9. С. 1372—1381.
- [30] Minchin P., Meyer A., Yong W. H. // J. Phys. F. 1974. V. 4. N 12. P. 2117—2125.
- [31] Fletcher R., Reeves C. M. // Computer J. 1964. V. 7. P. 149—154.
- [32] Horak J. A., Blewitt T. H., Fine M. E. // J. Appl. Phys. 1968. V. 39. P. 326—337.
- [33] Орлов А. Н., Трушин Ю. В. Энергия точечных дефектов в металлах. М.: Энергоатомиздат, 1983. С. 81.
- [34] Swanson M. S., Piercy G. B., Kidson G. V., Quenneville A. F. // J. Nucl. Mater. 1970. V. 34. P. 340—347.
- [35] Schumacher D. // Vacancies and Interstitials in Metals. North—Holland, Amsterdam, 1969. P. 889—931.
- [36] Смирнов Е. А., Оседкий Ю. Н., Михин А. Г. // Конструкционные материалы в атомной технике. М.: Энергоатомиздат, 1987. С. 25—34.
- [37] Okaraki K., Masuda I. // Proc. IV Intern. Conf. on Ti, Kyoto, Japan, 1980. P. 623—631.
- [38] Beeler J. R., Johnson R. A. // Phys. Rev. 1967. V. 156. N 3. P. 677—684.
- [39] Johnson R. A. // Philos. Mag. 1967. V. 16. P. 553—564.
- [40] Siegel R. W. // Point Defect Interactions in Metals / Ed. Tokamura J. et al. Tokyo: Univ. Press, 1982. P. 593—597.
- [41] Savino E. J., Perrin R. C. // J. Phys. F. 1974. V. 4. N 11. P. 1889—1897.
- [42] English C. A. // J. Nucl. Mater. 1987. V. 108—109. P. 104—123.
- [43] Kirk M. A., Robertson I. M., Jenkins M. L., English C. A., Black T. J. // J. Nucl. Mater. 1987. V. 149. N 1. P. 21—28.
- [44] English C. A., Eyre B. L. // Philos. Mag. 1976. V. 34. N 4. P. 603—614.
- [45] Eyre B. L., Bullough R. // Philos. Mag. 1965. V. 12. N 1. P. 31—48.
- [46] Matthai C. C., Bacon D. J. // J. Nucl. Mater. 1984. V. 125. P. 138—151.
- [47] Kapinos V. G., Platonov P. A. // Rad. Effects. 1987. V. 103. N 1. P. 45—57.
- [48] Matthai C. C., Bacon D. J. // J. Nucl. Mater. 1985. V. 135. N 2. P. 173—180.

Поступило в Редакцию
5 сентября 1988 г.