

Методы для изучения переходных состояний применительно к кристаллической решётке алюминия

К. С. Фиданян

Московский физико-технический институт (государственный университет)

Объединенный институт высоких температур РАН

Перемещение дефектов в кристаллической решетке представляет интерес с точки зрения материаловедения, поскольку деградация кристаллов часто связана с накоплением дефектов на линиях соединения зёрен с разной ориентацией, что приводит к образованию полостей. Молекулярно-динамическое моделирование позволяет рассматривать системы больших размеров (на данный момент до 10^9 атомов), не теряя индивидуального рассмотрения каждой частицы. В работе проведён обзор статьи [2], посвящённой методу метадинамики для изучения поверхностей свободной энергии. Суть метода в последовательной модификации исходного потенциала межатомного взаимодействия $U_0(\mathbf{x})$ небольшими добавками, которые будут препятствовать долгому пребыванию частицы в одном месте:

$$U(x, t) = U_0(x, t) + w * \sum_{t'=\tau_G, 2\tau_G} \exp\left(-\frac{(x(t) - x(t'))^2}{2\delta s^2}\right)$$

В качестве добавок к потенциалу выбраны гауссовы пики высотой w и шириной δs , добавляемые через время τ_G .

Также проведён обзор статей [3], [4] по методу упругой ленты (NEB) для исследования путей наименьшей энергии между заданными состояниями системы. Идея метода заключается в том, что, зная начальное и конечное положение, можно заморозить систему и ввести в неё дополнительные силы, которые направят частицы от начального состояния к конечному. Если выполнить некоторые условия, то система пойдёт по пути наименьшей энергии.

Показаны сильные и слабые стороны обоих методов, оценены необходимые значения параметров и вычислительное время.

Измерена энергия перескока вакансии из одного узла решётки в соседний методом упругой ленты (NEB). Рассмотрены перспективы её измерения методом метадинамики, который не требует знания заранее конечного состояния системы и позволяет изучать разветвлённые реакции.

Литература:

1. *Норман Г.Э., Стегайлов В.В.* Стохастическая теория метода классической молекулярной динамики, 2012.
2. *Laio A., Gervasio F.L.* Metadynamics: a method to simulate rare events and reconstruct the free energy in biophysics, chemistry and material science, 2008.
3. *Sheppard D., Terrell R., Henkelman G.* Optimization methods for finding minimum energy paths, The Journal of Chemical Physics 128, 134106, 2008.
4. *Jonsson H., Mills G., Jacobsen K.W.* Nudged elastic band method for finding minimum energy paths of transitions. 2006.