

Сравнение потенциалов EAM и SNAP для тантала**К.Э. Хакназаров¹, В.В. Стегайлов^{1,2,3}**¹Национальный Исследовательский Университет Высшая Школа Экономики²Объединённый институт высоких температур РАН³Московский физико-технический институт (Государственный университет)

Данная работа посвящена анализу потенциала межатомного взаимодействия Spectral Neighbor Analysis Potential (SNAP) [1], и его сравнению с более простым потенциалом Embedded Atom Model (EAM).

Все расчеты были проделаны для объемно-центрированной кубической (оцк) кристаллической решетки тантала (Ta) с характерным размером системы 1024 атомов в течении 50 ps. Молекулярное моделирование для Ta потенциалами EAM и SNAP были проделаны для NVE ансамбля на пакете LAMMPS. Все расчеты производились на кластере в МИЭМ ВШЭ. Вычисления запускались на одном узле на 16 процессорах.

Для получения равновесной системы мы использовали термостат масштабирования. Равновесное состояние системы определялось сохранением величин мгновенной температуры и давления во времени. Это занимало около 25 ps. Необходимые параметры для потенциалов EAM и SNAP для Ta были взяты из работ [1] и [2] соответственно.

Были проведены расчеты изотерм в интервалах $T = 250\text{--}350$ К, $\rho/\rho_0 = 0.9\text{--}1.2$, $P = -30\text{--}20$ GPa. Используя полученные изотермы были получены зависимости модуля объемного сжатия B .

Сравнение полученных данных с экспериментальными показали, что модели EAM и SNAP приближают экспериментальное значение $B = 200$ GPa с хорошей точностью, также как и значение постоянной решетки $l = 3.310$ Å.

Однако было обнаружено, что производная модуля объемного сжатия $(\partial B/\partial T)_V$ при $P = 0$ GPa полученный моделью SNAP является неправильным. Также было получено, что модель EAM требует в 100 раз меньше вычислительных операций чем модель SNAP. Результаты данной работы являются подготовительным этапом для вычисления свойств дефектов моделями SNAP и EAM.

Литература

1. Aidan P Thompson, Laura P Swiler, Christian R Trott, Stephen M Foiles, and Garritt J Tucker. Spectral neighbor analysis method for automated generation of quantum-accurate interatomic potentials. *Journal of Computational Physics*, 285:316–330, 2015.
2. R. Ravelo, T. C. Germann, O. Guerrero, Q. An, and B. L. Holian. Shock-induced plasticity in tantalum single crystals: Interatomic potentials and large-scale molecular-dynamics simulations. *Phys. Rev. B*, 88:134101, Oct 2013. Andreev N.E., Kuznetsov S.V. Laser Wakefield Acceleration of Finite Charge Electron Bunches // *IEEE Trans. Plasma Sci.* 2008. V. 36. P. 1765.