

Волегов П.С., Герасимов Р.М., Давлятшин Р.П. Модели молекулярной динамики: обзор ЕАМ-потенциалов. Часть 2. Потенциалы для многокомпонентных систем // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика. – 2018. – № 2. – С. 114–132. DOI: 10.15593/perm.mech/2018.2.11

Volegov P.S., Gerasimov R.M., Davlyatshin R.P. Models of molecular dynamics: a review of EAM-potentials. Part 2: Potentials for multi-component systems. *PNRPU Mechanics Bulletin*, 2018, no. 2, pp. 114-132. DOI: 10.15593/perm.mech/2018.2.11



ВЕСТНИК ПНИПУ. МЕХАНИКА

№ 2, 2018

PNRPU MECHANICS BULLETIN

<http://vestnik.pstu.ru/mechanics/about/inf/>



DOI: 10.15593/perm.mech/2018.2.11

УДК 539.3

МОДЕЛИ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ: ОБЗОР ЕАМ-ПОТЕНЦИАЛОВ. ЧАСТЬ 2. ПОТЕНЦИАЛЫ ДЛЯ МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ СИСТЕМ

П.С. Волегов, Р.М. Герасимов, Р.П. Давлятшин

Пермский национальный исследовательский политехнический университет, Пермь, Россия

О СТАТЬЕ

Получена: 18 мая 2018 г.
Принята: 25 июня 2018 г.
Опубликована: 29 июня 2018 г.

Ключевые слова:

молекулярная динамика,
потенциал взаимодействия,
метод погруженного атома,
ЕАМ, МЕАМ.

АННОТАЦИЯ

В статье представлена вторая часть обзора современных подходов и работ, посвященных построению потенциалов межатомного взаимодействия с использованием методологии погруженного атома (ЕАМ-потенциалы). Эта часть обзора посвящена одной из наиболее остро стоящих проблем в молекулярной динамике – вопросам построения потенциалов, которые были бы пригодны для описания структуры и физико-механических свойств многокомпонентных (в первую очередь – бинарных и тернарных) материалов. Отмечены первые работы, в которых предлагались подходы к построению функций перекрестного взаимодействия для сплавов никеля и меди – как с использованием методологии ЕАМ, так и несколько отличающийся по процедуре построения потенциал типа Финисса-Синклера. Рассматриваются работы, в которых производится сопоставление различных подходов к построению потенциалов, а также к процедуре идентификации их параметров на примере одних и тех же многокомпонентных систем (типа Al-Ni или Cu-Au). Кроме того, особый интерес представляют некоторые тернарные системы, например Fe-Ni-Cr, W-Ni-He или U-Mo-Xe, которые являются ключевыми для материалов атомной энергетики и которые в последние годы активно изучаются как возможные материалы для использования в термоядерных реакторах. Приведены примеры работ, в которых предлагаются и исследуются потенциалы для описания многокомпонентных систем, пригодных для использования в аэрокосмической промышленности и изготовленных прежде всего на основе никеля. Рассмотрены результаты исследований различных интерметаллических соединений, отмечены работы, в которых при помощи построенного ЕАМ потенциала удалось количественно точно описать фазовые диаграммы соединений и вычислить характеристики фазовых переходов.

© ПНИПУ

© **Волегов Павел Сергеевич** – кандидат физико-математических наук, доцент, e-mail: crocinc@mail.ru
Герасимов Роман Михайлович – студент, e-mail: romagrizly@gmail.com
Давлятшин Роман Позолович – студент, e-mail: romadavly@gmail.com

Pavel S. Volegov – CSc in Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor, e-mail: crocinc@mail.ru
Roman M. Gerasimov – Student, e-mail: romagrizly@gmail.com
Roman P. Davlyatshin – Student, e-mail: romadavly@gmail.com



Эта статья доступна в соответствии с условиями лицензии Creative Commons Attribution-NonCommercial 4.0 International License (CC BY-NC 4.0)

This work is licensed under a Creative Commons Attribution-NonCommercial 4.0 International License (CC BY-NC 4.0)

MODELS OF MOLECULAR DYNAMICS: A REVIEW OF EAM-POTENTIALS. PART 2. POTENTIALS FOR MULTI-COMPONENT SYSTEMS

P.S. Volegov, R.M. Gerasimov, R.P. Davlyatshin

Perm National Research Polytechnic University, Perm, Russian Federation

ARTICLE INFO

Received: 18 May 2018
Accepted: 25 June 2018
Published: 29 June 2018

Keywords:

molecular dynamics, interaction potential, embedded atom method, EAM, MEAM

ABSTRACT

This article is the second part of the review of modern approaches and works devoted to the construction of interatomic interaction potentials using the embedded atom methodology (the so-called EAM potentials). This part of the review is devoted to one of the most relevant problems in molecular dynamics, which is the problem of constructing potentials that would be suitable for describing the structure, physical and mechanical properties of multi-component (binary and ternary) materials. We have outlined the emerging papers, in which the approaches to the construction of cross-interaction functions for Ni and Cu alloys were proposed, both with the use of the EAM methodology, and a potential of the Finiss-Sinclair type, that differed in the construction procedure. The works, in which different approaches to the construction of potentials are compared, as well as the procedure for identifying parameters using the example of the same multicomponent systems (such as Al-Ni or Cu-Au). In addition, some ternary systems, for example, Fe-Ni-Cr, W-H-He or U-Mo-Xe are of a particular interest as key materials for nuclear energy; and recently they have been actively studied as materials that could be used in thermonuclear reactors. This is to present the examples of works, which offer and investigate the potentials for the description of multicomponent systems, suitable for the aerospace industry, which are made, first of all, on the basis of Ni. The results of the investigations of various intermetallic compounds are considered, and studies have been performed, in which it was possible to accurately describe the phase diagrams of compounds and calculate the characteristics of phase transitions.

© PNRPU

Введение

Известно, что внутренняя структура, в первую очередь взаимное расположение атомов в кристаллической решетке и особенности их взаимодействия, оказывает существенное влияние на физико-механические свойства металлов; управляя этой структурой, можно добиться получения определенных, наперед заданных, свойств. При этом важно отметить, что подавляющее большинство конструкционных материалов являются примерами многокомпонентных веществ, то есть в своей внутренней структуре содержат атомы различных химических элементов. К ярким примерам таких атомных систем относятся сплавы, причем, изменяя состав, концентрацию отдельных компонентов и внутреннюю структуру сплава, можно получить радикальные изменения его прочностных и(или) пластических свойств; так, например, добавление в алюминий 1,6 % меди, 2,5 % магния и 5,6 % цинка увеличит предел текучести алюминия с 35 до более чем 500 МПа [2]. Таким образом, создание новых и модификация уже существующих сплавов даст возможность создавать конструкционные материалы с улучшенными свойствами, что позволит удешевить производство существующих изделий, а также создать принципиально новые материалы. Именно в связи с этим фактом в последние несколько десятилетий исследователями проводятся широкие исследования применимости методов прямого моделирования структуры и свойств многокомпонентных атомных систем, в том числе – с применением молекулярной (атомарной) динамики.

Разработать общий потенциал, который будет описывать все свойства металла или сплава с высокой точностью, практически невозможно. Поэтому для получения качественных результатов прямого моделирования атомных систем с использованием метода молекулярной динамики или методов Монте-Карло необходимо использовать потенциал, который будет наиболее точно отражать именно те свойства, которые необходимо описать в контексте конкретного исследования. Реализуется это добавлением в подгоночную выборку, используемую для идентификации параметров потенциала, имеющихся экспериментальных или теоретических данных об этих свойствах. Верификацию же потенциала в этом случае проводят на других свойствах и делают вывод о качестве потенциала в зависимости от широты спектра физико-механических свойств, которые наиболее точно воспроизводит конструируемый потенциал. Именно широтой сферы применения методов моделирования на атомарном уровне и объясняется большое количество полуэмпирических потенциалов даже для чистых металлов, в то время как для бинарных и тернарных сплавов ситуация усугубляется из-за недостатка данных натуральных экспериментов.

Ниже представлена вторая часть обзора работ, посвященных построению и анализу потенциалов межатомного взаимодействия на основе метода погруженного атома, теперь – для многокомпонентных систем. Первая часть обзора опубликована в статье [1].

1. Обзор потенциалов для многокомпонентных систем

Первые статьи, посвященные построению ЕАМ-потенциалов для сплавов, появились практически сразу после первых, пионерских работ, в которых был предложен метод ЕАМ [27, 28, 33]. В ЕАМ-формализме изначально заложена возможность описания систем, состоящих из атомов различных веществ. Для полного описания n -компонентной системы требуется $n(n+1)/2$ функций перекрестного взаимодействия, n функций погружения и n функций электронной плотности; таким образом, для описания двухкомпонентных систем в общей сложности понадобится 7 функций, трехкомпонентных – 12.

В статье [26] рассмотрен также потенциал типа Финисса-Синклера (FS). В отличие от метода FS , основанного на использовании концепции «жесткой связи», ЕАМ основан на теории функционала плотности и использует концепции, предложенные Скоттом и Заремба (квазиатомарное приближение) [67] и подход «эффективной среды» Норскова и Ланга [58]. Хотя метод погруженного атома и метод FS были получены из разных физических соображений, получаемые итоговые выражения для полной энергии системы в случае применения для чистых металлов получаются идентичными. Для бинарных сплавов функция электронной плотности в методе FS зависит от типа обоих атомов, из этого следует, что в этом методе для двухкомпонентных систем в общем случае необходимо определить четыре функции электронной плотности вместо двух [33], что существенно осложняет процедуру идентификации параметров потенциала.

В работе [27] ЕАМ-потенциал впервые был применен для определения состава и структуры поверхностного слоя сплава Ni-Cu. Большое внимание в цитируемой работе уделено процедуре определения функции погружения, т.е. определению зависимости энергии системы от плотности электронов. Для построения функции погружения использовано уравнение Роуз [65], которое связывает энергию сублимации E с параметром решетки a :

$$E(a) = -E_{sub}(1+a^*) \exp[-a^*],$$

$$a^* = (a/a_0 - 1) / [E_{sub} / (9B\Omega)]^{1/2},$$

где E_{sub} – энергия сублимации при нулевой температуре и давлении; a^* – мера отклонения от постоянной a кристаллической решетки; B – объемный модуль упругости; Ω – равновесный объем элементарной ячейки. Функция электронной плотности определялась волновой функцией Хартри-Фока [19]:

$$\rho(r) = n_s \rho_s(r) + n_d \rho_d(r),$$

где n_s, n_d – число внешних электронов на s и d орбиталях, а ρ_s и ρ_d – плотности, связанные с соответствующими волновыми функциями. Общее число элект-

тронов у атома фиксировано. Функция парного взаимодействия (потенциал взаимодействия атомов типа A и типа B) выглядит следующим образом:

$$\Phi_{AB}(r) = Z_A(r)Z_B(r)/r,$$

$$Z(r) = Z_0 \exp[-\alpha r],$$

где $Z(r)$ – эффективный заряд; Z_0 – количество электронов у атома (зарядовое число), α – подгоночный параметр. Подгоночная выборка для чистых металлов состояла из равновесной электронной плотности, энергии сублимации, упругих постоянных, энергии образования вакансий для чистых металлов и удельной теплоты растворения для бинарных сплавов. Спустя год в работе [28] с использованием предложенного ранее подхода были построены потенциалы взаимодействия для шести чистых металлов Cu, Ag, Au, Ni, Pt, Pd и их сплавов. Основным отличием являлось использование более сложного вида функции эффективного заряда:

$$Z(r) = Z_0(1 + \beta r^\nu) \exp[-\alpha r],$$

где β и ν – подгоночные параметры. Для верификации построенных потенциалов были численно определены упругие постоянные и энергии образования вакансий чистых металлов. Различие полученных и экспериментальных энергий образования вакансий не превышало 0,2 эВ и в среднем составляло 0,1 эВ, а различие значений упругих модулей не превышало 20 %.

С помощью построенных потенциалов удалось рассчитать поверхностные энергии по кристаллографическим плоскостям семейств (100), (110) и (111) для чистых металлов; расчет выполнен путем сравнения энергии тонкого (в 2–3 межатомных расстояния) слоя атомов рассматриваемой поверхности с энергией того же числа атомов в объемном материале. Относительное изменение поверхностных энергий как функция от толщины слоя, полученное в работе, хорошо согласуется с экспериментальными данными. Также были рассчитаны энергии примесных атомов в первом и втором атомных слоях поверхности (100) по отношению к энергии примеси в объеме основного материала. Было выявлено, что во всех случаях происходит сегрегация примеси в первый и второй атомные слои. При этом во многих случаях знак энергии сегрегации отличается для первой и второй плоскостей поверхностных атомов, что означает чередование («осцилляцию») примесей по атомным слоям. Такое поведение было обнаружено также при изучении системы Ni-Cu [27].

Спустя еще три года появилась работа [33], в которой автор предложил ЕАМ-потенциалы для тех же шести металлов и их сплавов, но с применением иной схемы построения функции перекрестного взаимодействия:

$$\Phi_{AB}(r) = \frac{1}{2} \left(\frac{f_B(r)}{f_A(r)} \Phi_{AA}(r) + \frac{f_A(r)}{f_B(r)} \Phi_{BB}(r) \right),$$

где $f_{A/B}(r)$ – функция электронной плотности для атома типа A или B , $\Phi_{AA/BB}(r)$ – функция парного взаимодействия между атомами типа $A-A$ или $B-B$.

Здесь функция парного взаимодействия определена по форме Борна–Майера, а электронная плотность вычисляется как сферически усредненная плотность свободных атомов по теории Хартри–Пока [19] с дополнительным подгоночным параметром. Такая схема описана автором ранее в статье [32]:

$$\begin{aligned} \Phi(r) &= \Phi_e \exp[-\gamma(r/r_e - 1)], \\ f(r) &= f_e \exp[-\beta(r/r_e - 1)], \end{aligned}$$

где $f_e = E_c / \Omega$ (E_c – энергия связи, Ω – атомный объем), а $\Phi_e = E_c$.

Функция погружения имеет вид функции Ридберга:

$$F(\rho) = -E_c(1 - \ln x)x - 6\Phi_e y,$$

где $x = (\rho/\rho_e)^{\alpha/\beta}$, $y = (\rho/\rho_e)^{\gamma/\beta}$, $\alpha = 3(\Omega B/E_c)^{1/2}$, E_c – энергия связи, $\beta, \gamma, \Phi_e, f_e$ – подгоночные параметры.

Проверка построенных потенциалов для бинарных сплавов в работах [28] и [33] выполнялась путем подсчета удельной теплоты взаимных растворов металлов (то есть для каждого сплава $A-B$ было посчитано по два значения удельной теплоты растворения, когда атомы типа A являются основными, а атомы типа B примесными и наоборот). В статье [28] показано, что потенциалы правильно воспроизводили знак удельной теплоты растворения всех сплавов, для которых были известны экспериментальные данные, при этом средняя ошибка составляла 0,08 эВ или 40 %. Наибольшую погрешность по сравнению с экспериментальными данными показали сплавы с примесными атомами серебра и никеля: 110 и 47 % соответственно. В работе [33] средняя ошибка по этому же показателю составила 0,09 эВ или 45 %, при этом в расчете не учитывались данные, полученные для бинарных сплавов с Pd, так как они существенно отличались от экспериментальных данных, не воспроизводя знак удельной теплоты растворения и завышая значение удельной теплоты растворения на 0,3 – 0,6 эВ, то есть более чем на 300 %.

В 2012 году Вард в статье [74] предложил алгоритм быстрого построения многокомпонентного FS-потенциала, основанный на схеме Джонсона. Основная идея алгоритма заключается в построении многокомпонентных потенциалов, используя ранее построенные потенциалы для соответствующих однокомпонентных систем. Чтобы сохранить исходную точность однокомпонентных потенциалов, во-первых, необходимо свести функции погружения к единой области определения путем масштабирования функций электронной плотности:

$$\begin{cases} F(\rho) \rightarrow F\left(\frac{\rho}{s}\right), \\ f(r) \rightarrow s \cdot f(r), \end{cases}$$

где ρ – электронная плотность; s – масштабирующий коэффициент; r – расстояние. Во-вторых, необходимо преобразовать функции парного взаимодействия таким образом, чтобы они имели качественно схожий вид. Для этого использовались следующие преобразования, не изменяющие полную энергию системы, предложенные в работе [73]:

$$\begin{cases} F(\rho) \rightarrow F(\rho) + g \cdot \rho, \\ \Phi(r) \rightarrow \Phi(r) - 2g \cdot f(r), \end{cases}$$

где g – параметр переноса.

Построение двухкомпонентного FS-потенциала (в отличие от ЕАМ) требует определения в общем случае девяти функций: трех функций парного взаимодействия, двух функций погружения и четырех функций электронной плотности. Так как потенциалы для однокомпонентных систем уже построены, то остается доопределить две функции электронной плотности и одну функцию парного взаимодействия. Функции перекрестных электронных плотностей найдены как масштабируемые функции элементарных электронных плотностей:

$$\begin{aligned} f_{AB}(r) &= s_A \cdot f_{AA}(r), \\ f_{BA}(r) &= s_B \cdot f_{BB}(r). \end{aligned}$$

В этой форме преобразования предполагается, что изменяется лишь эффективная величина плотности электронных облаков, но не их форма. Ключевое преимущество такой схемы заключается в том, что необходимо подгонять лишь два параметра – s_A и s_B , при этом не обязательно знать функции элементарных электронных плотностей. В качестве функции перекрестного парного взаимодействия использована функция Морзе из-за ее простоты (три варьируемых параметра), сильного отталкивающего воздействия на коротких расстояниях и слабого притяжения на дальних расстояниях:

$$\Phi_{AB}(r) = E_1 \left(\exp[-2\alpha(r-r_0)] - 2\exp[-\alpha(r-r_0)] \right),$$

где r_0 – равновесное расстояние; E_1 и α – подгоночные параметры.

Чтобы гарантировать, что функция и ее первая производная стремятся к нулю на расстоянии, равном радиусу обрезания, используют следующее преобразование функции парного взаимодействия:

$$\tilde{\Phi}_{AB}(r) = \Phi_{AB}(r) - \Phi_{AB}(r_c) + \left(\frac{r_c}{m}\right) \left[1 - \left(\frac{r}{r_c}\right)^m \right] \left(\frac{d\Phi_{AB}}{dr} \right)_{r=r_c},$$

где r_c – радиус обрезания; m – подгоночный параметр.

Идентификация значений всех пяти коэффициентов (два для электронной плотности и три для парной функции) проводилась путем минимизации разности между энтальпией смешивания, объемным модулем и параметрами решетки интерметаллидов типа B2 (например, AlCo, AgZn, BeCu) и L1₂ (например, Ni₃Al, Co₃Al и Fe₂Al), которые были вычислены с помощью построенного потенциала и теории функционала плотности (ТФП). Для оптимизации целевой функции, которая представляет собой взвешенную сумму общей погрешности в энтальпии смешения и относительных погрешностей объемного модуля и параметра решетки, был выбран генетический алгоритм с использованием соотношения вида

$$\frac{1}{F} = \sum_i \left[\frac{\Delta H_{m,i}}{w_H} + \left(w_K \cdot \frac{\Delta K_i}{K_{i,ТФП}} + w_a \cdot \frac{\Delta a_i}{a_{i,ТФП}} \right) \right],$$

где w_H, w_K, w_a – фиксированные весовые коэффициенты; $H_{m,i}$ – энтальпия смешивания, K_i – объемный модуль; a_i – параметр решетки; i – номер атома; F – некоторое значение, означающее пригодность построенного потенциала, т.е. насколько построенный потенциал точно воспроизводит объемные модули, параметры решетки и энтальпию смешивания по отношению к данным, полученным из *квантово-механических* расчетов.

Для проверки предложенной схемы построения потенциала приведены примеры для двух двухкомпонентных потенциалов Al-Ni и Cu-Au; при этом использованы однокомпонентные потенциалы, построенные в работе [79]. Максимальные ошибки энтальпии смешивания, упругого модуля и параметра решетки построенных потенциалов по сравнению с экспериментальными данными составили 0,015 эВ (6,7 %), 10 ГПа (6,4 %), 0,07 Å (2,0 %) для Al-Ni и 0,009 эВ (18 %), 7 ГПа (4,7 %), 0,04 Å (1,3 %) для Cu-Au. Для сравнения, потенциал Al-Ni, предложенный в работе [63], показал максимальные ошибки, равные 0,17 эВ, 29 ГПа, 0,06 Å, а максимальные ошибки потенциала Cu-Au, предложенного в работе [79], составили 0,07 эВ, 43,6 ГПа, 0,04 Å. Однако, несмотря на хорошее соответствие полученных данных экспериментальным, предложенная схема имеет ряд ограничений. Первое ограничение связано с зависимостью построенного многокомпонентного потенциала от «исходных» однокомпонентных потенциалов. Однокомпонентные потенциалы с сильно отличающимися функциональными формами парного взаимодействия могут быть несовместны, т.е. многокомпонентные потенциалы, основанные на них, будут непригодны для описания физико-механических свойств атомных систем. Кроме того, многокомпонентные потенциалы будут ограничены любыми неточностями, присутствующими в однокомпонентных потенциалах. Третье ограничение связано с малой подгоночной выборкой, что может повлиять на точность построенных потенциалов.

В литературе можно найти довольно много работ, которые посвящены вопросам поиска оптимальных сплавов для использования в ядерной промышленности. Это связано с необходимостью обеспечить возможность создания термоядерных реакторов [15], улучшить свойства материалов существующих реакторов [12, 14, 23] и создать новые ураносодержащие топливные материалы для исследовательских реакторов и реакторов на быстрых нейтронах [69]. При этом часто появляется необходимость определения свойств не двухкомпонентных (бинарных), а трехкомпонентных (тернарных) систем.

В статье [12] был построен ЕАМ-потенциал для изучения пластических свойств аустенитной нержавеющей стали Fe-Ni-Cr. Такая сталь часто применяется для внутриреакторных компонентов. В процессе эксплуатации этот материал подвергается жестким воздействиям: интенсивному нейтронному облучению, механическим и тепловым факторам, агрессивной коррозионной среде. Для получения тернарного ЕАМ-потенциала необходимы двенадцать функций: три функции электронной плотности, три функции погружения и шесть функций парного взаимодействия. Функция электронной плотности в цитируемой работе имеет вид линейной функции экранирования Томаса-Ферми [71], дополненной функцией обрезания:

$$f(r) = S \frac{\exp(-\beta r)}{r} \frac{x^4}{1+x^4},$$

где $x = (r - r_c)/h$, а S, β, h – подгоночные параметры. Функция парного взаимодействия определяется как линейная комбинация кусочно-определенных кубических сплайнов вида

$$\Phi_{AB}(r) = \sum_{k=1}^{N_p} \left[a_k (r_k - r)^3 H(r_k - r) \right] - K f_B(r) \delta_{AB},$$

где r_k – узлы сетки; a_k – подгоночные параметры; H – функция Хэвисайда; δ – символ Кронекера. Зависимость $\Phi(r)$ от $f(r)$ и K получается из эффективного калибровочного преобразования (ЭКП). Функция погружения имеет вид

$$F(\rho) = A\sqrt{\rho} + B\rho + C\rho^2 + D\rho^4,$$

где A, C, D – подгоночные параметры, а параметр B определяется также из ЭКП. Эффективное калибровочное преобразование – это преобразование вида

$$\begin{cases} F(\rho) \rightarrow F\left(\frac{\rho}{s}\right), \\ f(r) \rightarrow s \cdot f(r), \end{cases} \quad \begin{cases} F(\rho) \rightarrow F(\rho) + g \cdot \rho, \\ \Phi(r) \rightarrow \Phi(r) - 2g \cdot f(r), \end{cases}$$

в котором константы определены особым образом для получения функций наиболее простого вида. Так, например, g выбирается равной $F(\rho_{eq})$, где ρ_{eq} – равновесная электронная плотность в идеальном кристалле,

а параметр s зачастую выбирается таким образом, чтобы $\rho_{eq} = 1$. Для определения подгоночных параметров использованы следующие свойства: энергия межатомной связи, постоянные решеток, упругие постоянные для равновесной кубической решетки, энергии миграции и образования вакансий, энергия дефекта упаковки. Данные для Ni были взяты из работы [55], а для Fe и Cr – из работ [38, 44]. При этом во избежание возможных неустойчивостей ГЦК-структура для Fe и Cr была искусственно стабилизирована. Параметризация проводилась с помощью так называемого «взвешенного метода наименьших квадратов» (ВМНК) и дисперсионного разложения энергии для случайного сплава. Последний метод позволяет записать энергию (и ее производные) в виде линейной комбинации параметров подгонки $\{a_k\}$, которые были получены из ВМНК. Полученные потенциалы для чистых металлов хорошо воспроизводят упругие константы для Ni, энергии дефекта упаковки для Ni и Fe, энергию миграции вакансий для Ni и Cr, но плохо описывают энергию дефекта упаковки для Cr и энергию миграции вакансий для Fe. Для сплавов была построена карта зависимости энергии дефекта упаковки от концентрации Cr и Ni. Итоговая ошибка в среднем составляла 3,5 мДж/м⁻² или 1 %. При этом потенциал правильно предсказывал характер изменения энергии дефекта упаковки при изменении процентного содержания Ni и Cr в системе. Полученные упругие константы также хорошо совпадали с экспериментальными значениями, ошибка составила менее 10 % (что для моделирования многокомпонентных систем до сих пор считается очень высокой точностью). С помощью предложенного потенциала были изучены движение винтовой дислокации с применением модели Осецкого и Бэкона [60], а также стабильность петли Франка, препятствующие движению дислокаций. В рамках изучения такого же типа стали (система Fe–Ni–Cr) автор предложил несколько иной потенциал [14], в котором акцент сделан на воспроизведении и исследовании эволюции микроструктуры с целью изучения процесса старения нержавеющей стали под радиационным облучением. Для этого была увеличена точность воспроизведения энергии вакансий и предотвращены самопроизвольные фазовые превращения ОЦК ↔ ГЦК при температурах ниже температуры плавления, так как для чистых Fe и Cr основным состоянием является ОЦК-решетка. Это было достигнуто путем изменения подгоночной выборки, используемой для идентификации параметров потенциала: для Fe и Cr для идентификации параметров потенциала выбраны энергия связи ГЦК-структуры (так как энергия связи по сравнению с ОЦК-решеткой увеличилась примерно на 120 мэВ); энергия образования вакансий и энергия миграции для Ni взяты из экспериментальных данных, а для Cr и Fe – из теоретических расчетов с использованием ТФП. Для верификации построенного потенциала были рассчитаны коэффициенты самодиффузии с применением атомистического ки-

нетического метода Монте-Карло (АКМС) [78]. При этом для подсчета энергии миграции использовалась искусственная нейронная сеть (ИНН) [18] взамен ранее использовавшегося метода «толстого упругого слоя» (*nudged elastic band – NEB*) [29]. Полученные результаты хорошо согласуются с экспериментальными данными. В работе [14] по сравнению с предыдущей работой [12] потенциал позволил лучше описывать свойства точечных дефектов, однако одновременно с этим возросла ошибка в определении упругих постоянных.

Другим перспективным металлом для использования в атомной промышленности является вольфрам и его сплавы [15]. Вероятнее всего, их будут применять в термоядерных реакторах как материалы, непосредственно контактирующие с плазмой. В качестве основы для моделирования сплава W–H–He в работе [15] был использован ЕАМ-потенциал вольфрама, предложенный [46] и наиболее точно описывающий все ключевые свойства W: упругие постоянные, свойства точечных дефектов, параметры краевых и винтовых дислокаций, энергию границ. Однако ранее созданные потенциалы для систем W–He [30, 35] и для W–H [34, 42], наоборот, плохо воспроизводят свойства чистого вольфрама. Поэтому потенциалы для бинарных систем W–H, W–He, H–H, H–He, He–He созданы в цитируемой работе «с нуля». Взаимодействия H–H, He–He образуют сильные связи в вакууме, но в W-системах атомы водорода и гелия проявляют отталкивание или слабое связывание [11], следовательно, описанные в цитируемой работе потенциалы не подходят для моделирования He и H в вакууме. В статье были предложены два ЕАМ-потенциала, которые отличались выборкой физических параметров, используемых для идентификации потенциала. В первом случае акцент был сделан на количественном воспроизведении свойств вакансий, полученных с помощью функционала электронной плотности, а именно связей H–H, He–He и H–He, которые были заданы парными потенциалами, причем учитывалась только центральная позиция атома H в вакансии. Во втором случае авторы сфокусировались на стабилизации нецентральной позиции атома H в вакансии. Для этого в структуру потенциала были добавлены функции погружения для H и He, а функция электронной плотности была построена только для W. Созданные потенциалы хорошо воспроизводят энергии образования междоузельных дефектов, энергии миграции для H и He, энергии связей H–H, H–He, He–He, и были применены для вычисления энергии диссоциации различных наноразмерных кластеров W–H–He и параметризации простой модели «падения капли» (*liquid-tear drop*), применяемой к моделированию систем среднего масштаба или кинетического метода Монте-Карло. На основании полученных данных авторы пришли к выводу, что взаимодействие H–He не влияет на термическую стабильность H в кластерах H–He, стабилизированных введением вакансий. Таким образом, происхождение дополнительного влияния связей H–He, которое прояв-

ляется усиленным поглощением Н, должно быть исследовано на стадии зарождения дефектов Н–Не.

В работе [23] авторы предлагают метод оптимизации ЕАМ-подхода с применением модели «двойной связи» (*two-band model extension*) [7, 28]. В этом случае электронная плотность зависит как от типа соседнего атома, так и от типа рассматриваемого атома. Это было сделано для того, чтобы потенциал мог воспроизводить смену знака энтальпии смешивания, что особенно важно при моделировании свойств сплава Fe–Cr [6, 43]. Такой сплав является основой нержавеющей сталей и многообещающим кандидатом для создания новых реакторов синтеза и деления, а также для источников вторичных нейтронов. Авторы цитируемых работ показали, что существующие потенциалы не в состоянии правильно описать метастабильную Fe–Cr систему. Так, в работе [59] граница растворимости (*miscibility gap*) на 200 К меньше, а критическая температура при использовании потенциала Бонни [13], напротив, выше на 300 К, чем известные экспериментальные значения. Потенциалы для чистых металлов Fe [8] и Cr [59] были взяты из предыдущих исследований. Для параметризации была выбрана схема, предложенная Олссоном и др. [59], с добавлением в выборку подгоночных параметров экспериментальных значений энтальпии смешивания [20, 45]. Функция парного взаимодействия Fe и Cr выглядит следующим образом:

$$\Phi_{\text{FeCr}}(r) = \sum_{i=1}^4 a_i (r - r_c)^3 H(r - r_c),$$

где a_i – коэффициенты сплайна; r_c – радиус обрезания и H – функция Хэвисайда. Функции плотности s -электронов вычисляются согласно соотношениям

$$\rho_{\text{FeCr}}^s(r) = (N_s r^3 \exp[-\zeta_s r])^2,$$

$$\bar{\rho}_i^s = \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \rho_{\text{FeCr}}^s(r_{ij}),$$

где N_s и ζ_s – подгоночные параметры. Функция погружения определена как

$$F_{t_i}^s(\bar{\rho}^s) = A_{t_i,1} \sqrt{\bar{\rho}^s} + A_{t_i,2} (\bar{\rho}^s)^2 + A_{t_i,3} (\bar{\rho}^s)^4,$$

где t_i – тип атома (Fe или Cr); $A_{t_i,j}$ – подгоночные коэффициенты. Параметризация выполнялась методом многомерной минимизации при помощи стабильного симплекс-алгоритма [57], критерий сходимости определен среднеквадратичным отклонением. Полученный потенциал показал способность описывать энтропию колебательного движения молекул при 300 и 1600 К, а также практически точно предсказывает предельную растворимость атомов хрома в железе.

Ещё одним направлением в развитии ядерной промышленности является создание новых ураносодержащих топливных материалов, необходимых для замыка-

ния ядерного топливного цикла. Один из многообещающих методов дальнейшего развития атомной энергетики связан с использованием реакторов на быстрых нейтронах [3]. Необходимым условием развития атомной промышленности является разработка топлива с высоким КПД и высокой эксплуатационной безопасностью. В работе [69] построен ЕАМ-потенциал для сплава U–Mo–Xe в целях изучения возможности структурных и фазовых переходов, особенностей формирования и распределения продуктов распада, а также образования дефектов, порожденных действием радиации: вакансий, междоузельных атомов, кластеров сегрегированных атомов и дислокаций. В процессе разработки потенциала был использован метод согласования сил, первоначально предложенный Эрколосси и Адамсом [24], идея которого состоит в том, чтобы с использованием данных, полученных из квантово-механических расчетов (часто в литературе – «первых принципов», *ab initio*), настроить параметры потенциала для точного воспроизведения сил, действующих на атом (вместе с энергиями связи и механическими напряжениями), вычисленных для некоторых эталонных структур (конфигураций), представляющих различные фазы, существующие в системе. Для U, Xe, Mo, Mo–Xe были использованы потенциалы, предложенные в работах [68, 70]. Подгоночная выборка содержала 132 эталонные атомные конфигурации с различным содержанием U, Mo, Xe, разными плотностями системы, при разной температуре. Также выборка содержала 8 эталонных конфигураций с различного рода дефектами кристаллической структуры. Силы межатомного взаимодействия, энергии и напряжения каждой конфигурации были рассчитаны с помощью пакета VASP (*Vienna Abinitio Simulation Package*) [40]. Использованы псевдопотенциалы, полученные методом проекторно присоединенных волн (*projector augmented-wave – PAW*) с обрезанием потенциала по энергии в 400 эВ. Метод PAW позволяет воспроизвести точную волновую функцию валентных электронов с правильным числом узлов в области сердцевин, сочетая в себе гибкость метода псевдопотенциала и точность методов полного потенциала [5]. Зона Бриллюэна представлялась как $3 \times 1 \times 2$ k -точечная сетка для орторомбического α -U и $2 \times 2 \times 2$ сетка для ОЦК-структуры и структуры жидкости. Для обменно-корреляционного функционала использовалась обобщенная градиентная аппроксимация Пердю и Ванга [62]. Идентификация параметров построенного потенциала выполнялась с помощью минимизации отклонений между силами, действующими на атом, энергиями связи и механическими напряжениями, рассчитанными с использованием полученного ЕАМ-потенциала и квантово-механических методов. Для минимизации использовалась целевая функция наименьших квадратов. Для сплавов U–10Mo (U–10 wt %Mo), U–2Mo и U–Mo получены значения таких физических параметров, как упругие константы, коэффициент тер-

мического расширения и температура плавления, причем эти параметры с высокой степенью точности совпадают с экспериментальными данными, а энергия точечных дефектов – с данными, полученными из квантово-механических расчетов. Предложенный потенциал пригоден для изучения эволюции дефектной структуры в U–Mo-сплавах.

В работе [25] рассматривается способ улучшения свойств лопаток авиадвигателей. В современных самолетах лопатки, как правило, сделаны из высоколегированных сплавов на основе Ni, что обусловлено их высокой прочностью и сопротивлением ползучести. Для улучшения механических и химических свойств в такие сплавы добавляют более десяти легирующих элементов [64], среди которых вольфрам, который рассматривается как важный огнеупорный элемент, используемый для улучшения сопротивления ползучести при экстремально высоких температурах. Авторы разработали потенциал для бинарного сплава Ni–Al и проверили легирующий эффект, проявляющийся в случае присутствия атомов W в сплаве. Соотношения для потенциалов Ni–Al, Ni–Ni, Al–Al были взяты из предшествующих работ [21, 22]. В цитируемой работе были построены недостающие потенциалы для взаимодействий типа W–W, Ni–W, Al–W. Формула погружения и электронной плотности для W имеет вид

$$F(\rho) = -F_0 \left[1 - \ln \left(\frac{\rho}{\rho_e} \right)^n \right] \left(\frac{\rho}{\rho_e} \right)^n,$$

$$f(r) = \tilde{s} f(r) \psi \left(\frac{r - r_c}{h} \right),$$

$$\tilde{f}(r) = f_e \exp[-\chi(r - r_e)],$$

где $\psi(x)$ – «обычная» функция обрезания; $F_0 = E_c - E_v^f$, E_c – энергия связи; E_v^f – энергия образования вакансий; ρ_e – электронная плотность в равновесной конфигурации; s, r_c, h, n – подгоночные параметры, а f_e, χ, r_e получаются путем подгонки функции радиальной плотности электронов.

Функции парного взаимодействия W–W, Ni–W, Al–W параметризованы следующим образом:

$$\phi_{AB}(r) = \left\{ \phi_{Cai-ye} - \gamma \exp[-k(r/r_0 - 1)] + d_{AB}^A s_A \tilde{f}_A(r) / \rho_e^A + d_{AB}^B s_B \tilde{f}_B(r) / \rho_e^B \right\} \psi \left(\frac{r - r_c}{h} \right),$$

$$\phi_{Cai-ye} = -\alpha [1 + \beta(r/r_0 - 1)] \exp[-\beta(r/r_0 - 1)],$$

где ϕ_{Cai-ye} – парный потенциал, предложенный в работе [17]. Коэффициенты этих функций для потенциала W–W могут быть определены с использованием свойств вольфрама с ОЦК-структурой, в то время как параметры парных потенциалов Ni–W и Al–W определяются с помощью квантово-механических методов. Парамет-

ры потенциала определяются путем минимизации взвешенного среднего квадратического отклонения между расчетными и экспериментальными данными. С помощью построенного потенциала были посчитаны эффективная энергия активации диффузии и предэкспоненциальный множитель в функции для определения коэффициента диффузии; также было выявлено, что с добавлением в сплав W увеличиваются упругие постоянные и постоянные решетки, что соответствует известным экспериментальным и квантово-механическим данным. Также было изучено взаимодействие атомов вольфрама с дислокацией несоответствия на границе между двумя фазами $\gamma(\text{Ni}) - \gamma'(\text{Ni}_3\text{Al})$. Оказалось, что дислокация несоответствия «вытягивает» W из фазы $\gamma'(\text{Ni}_3\text{Al})$, так как атом вольфрама, имея отрицательную энергию взаимодействия, уменьшает деформацию в этой решетке; одновременно при этом дислокация несоответствия «выталкивает» W из фазы $\gamma(\text{Ni})$, так как в данном случае примесные атомы вольфрама, наоборот, деформируют решетку, вследствие чего имеют положительную энергию взаимодействия. Авторы цитируемой работы также сравнили между собой энергии взаимодействия примесных атомов W, Re, Co с энергией дислокации несоответствия. Оказалось, что чем больше размеры атома (вместе с электронной оболочкой), тем больше (по модулю) энергия взаимодействия.

В работе [54] построен EAM-потенциал для сплава Ni–Al со структурным типом B2. Исследуемый сплав обладает высокой жаропрочностью, низкой плотностью и высокой коррозионной стойкостью, вследствие чего в последние годы возрос интерес к фундаментальным свойствам таких сплавов. К наиболее интересным для исследования параметрам системы относятся силы межатомного взаимодействия, дальний порядок и беспорядок, дефекты решетки и их роль в механическом поведении, диффузии и других процессах. Для параметризации потенциала были использованы как экспериментальные данные, так и большой набор структурных энергий, полученных из первых принципов. Данные, не использованные в подгонке (идентификации) параметров потенциала, применялись для тестирования (верификации) потенциала. Несмотря на то, что потенциалы для исследуемого вещества уже существовали (например, [52, 77]) и адекватно воспроизводили параметры решетки, упругие постоянные и энергии, однако те же потенциалы при этом плохо предсказывали энергию межфазной границы, которая необходима для определения предпочтительной системы скольжения при пластической деформации и разрушении. Также ранее предложенные потенциалы не могли предсказать энергию внедрения для Al. Парный потенциал, использованный в цитируемой работе, имеет вид

$$\Phi(r) = [DM(r, r_0, \alpha, q) + \delta] \psi \left(\frac{r - r_c}{h} \right),$$

где

$$M(r, r_0, \alpha, q) = \exp[-q\alpha(r - r_0)] - q \exp[-\alpha(r - r_0)]$$

– обобщённый потенциал Морзе; $\psi(x)$ – функция обрезания, определенная следующим образом:

$$\psi(x) = \begin{cases} 0, & x \geq 0, \\ \frac{x^4}{(1+x^4)}, & x < 0. \end{cases}$$

Таким образом, функция парного потенциала содержит семь подгоночных параметров. Функция электронной плотности имеет вид

$$f(r) = s[r^2 \exp(-\beta r) + \varepsilon] \psi\left(\frac{r - r_c}{h}\right)$$

с пятью подгоночными параметрами. Энергия погружения представлена в виде кубического полинома

$$F(\rho) = a_1\rho + a_2\rho^2 + a_3\rho^3$$

с тремя подгоночными коэффициентами. Для идентификации параметров потенциала использованы следующие данные: постоянная решетки, энергия связи, упругие постоянные и коэффициент термического расширения. Из квантово-механических расчетов были найдены зависимости энергии от объема для следующих структур NiAl: B2, B1 (прототип NaCl), L1₀ (прототип CuAu), L1₁ (прототип CuPt), «40» (прототип NbP), B32 (прототип NaTi), L2, D0₂₂ и D0₃. Структуры типа L1₀, L1₁ и «40» представляют собой чередующиеся слои Ni и Al, параллельные кристаллографическим плоскостям (100), (111) и (210) соответственно; тип B означает соединения типа AB (например, NaCl, CsI), тип D – соединения типа A_nB_m (например, Al₂O₃). Также в выборку были включены энергии искусственно созданных межфазных границ. Структурные энергии были посчитаны с помощью метода линеаризованных присоединённых плоских волн (*linearized augmented plane wave method – LAPW*). Метод LAPW представляет собой метод вариационного разложения, который решает уравнения теории функционала плотности путем аппроксимации решений как конечной линейной комбинации базисных функций [9]. Параметры потенциала идентифицированы путем минимизации взвешенного среднеквадратичного отклонения свойств от их целевых значений. Весовые коэффициенты, присвоенные различным свойствам, отражают их относительную важность для конкретного исследования. Предложенный потенциал применим для исследования пластической деформации, разрушения, описания нарушения упорядоченности на атомарном уровне, диффузии и высокотемпературного моделирования, так как хорошо вос-

производит точечные дефекты, энергию межфазных границ и параметры термического расширения.

Способность ЕАМ-потенциалов описывать свойства моделируемых систем, не вошедшие в подгоночную выборку, является ключевым предположением и преимуществом ЕАМ-потенциалов. В работе [76] авторы проверили это свойство потенциалов, изучив возможность ЕАМ-потенциала, построенного на данных, полученных из квантово-механических расчетов при 0 К, полностью воспроизвести фазовую диаграмму сплава Cu–Ag. Выборка подгоночных параметров для чистых металлов содержит экспериментальные и теоретические данные, в то время как выборка для сплава содержит только данные, полученные из квантово-механических расчетов; до этого все ЕАМ-потенциалы для исследуемого вещества строились только на экспериментальных данных. Webb и др. в [75] вычислили высокотемпературную часть диаграммы состояния Cu–Ag и получили приблизительную оценку эвтектической точки линейной экстраполяцией кривых плавления. Однако линии растворимости твердого раствора не были рассчитаны в [75] (это было сделано в отдельной работе [10] с использованием того же ЕАМ-потенциала, но с другой термодинамической моделью). С другой стороны, Наджафабади и др. [56] вычислили кривые растворимости твердого раствора с использованием потенциала FBD [56] в сочетании со способом минимизации свободной энергии, основанным на теории среднего поля и локальном гармоническом приближении к атомным колебаниям. В результате авторы цитируемых работ смогли построить лишь некоторые части экспериментальной фазовой диаграммы. Полученное соответствие вычисленных линий плавления экспериментальным доказывает, что предложенный потенциал обладает свойством переносимости, то есть позволяет описывать структуру и свойства материала в обоих (жидком и твердом) состояниях, так как в подгоночную выборку не были включены свойства жидкости. В работе [76] использован существующий потенциал для Cu [53], а потенциалы для Ag и для Cu–Ag построены «с нуля». Потенциал для Ag имел 30 параметров, только 15 из которых имели физический смысл, остальная часть являлись подгоночными параметрами. Потенциал был оптимизирован путем минимизации взвешенного среднеквадратичного отклонения выбранных свойств Ag от их целевых значений. Выбранные свойства включали в себя параметр решетки, энергию связи, объемный модуль, упругие постоянные, энергии образования и миграции вакансий, фононные частоты и энергию дефекта типа Шотки. Из квантово-механических расчетов были использованы данные энергии связи (в расчете на атом) в зависимости от объема элементарных ячеек $E(\Omega)$ разных кристаллических решеток (ГЦК, ОЦК, ГПУ), а также простой кубической и алмазной кубической решеток. Атомные структуры были построены в пакете VASP в рамках

аппроксимации локальной плотности (LDA). Построенный потенциал хорошо воспроизводит температуру плавления серебра (1267 К при полученной экспериментально 1235 К), коэффициент термического расширения и энергии дефектов. Поверхностные энергии занижены по сравнению с экспериментальными данными, но эта проблема присуща большинству EAM-потенциалов. При этом явное введение поверхностных энергий в процедуру подгонки только ухудшило воспроизводимость поверхностных энергий. Чтобы построить бинарный потенциал Cu–Ag, имея потенциалы для Cu и Ag, необходимо построить функцию перекрестного взаимодействия, которая в цитируемой работе имеет вид обобщенной функции Морзе. Подгоночная выборка была создана с помощью программного комплекса VASP и представляла собой зависимость энергии атома от объема элементарной ячейки интерметаллического соединения: $L1_2 - Cu_3Ag$, $DO_{22} - Cu_3Ag$, $L1_0 - CuAg$, $B1 - CuAg$, $B2 - CuAg$, $L1_2 - CuAg_3$, $DO_{22} - CuAg_3$. Для каждого интерметаллического соединения с помощью варьирования объема системы около равновесного объема системы были получены семь значений функции зависимости энергии от объема $E(\Omega)$. Идентификация параметров потенциала была реализована путем минимизации среднеквадратичного отклонения между энергиями интерметаллических соединений, рассчитанных EAM-потенциалом и квантово-механическим методом. В ходе подгонки были использованы только данные, полученные из квантово-механических расчетов. Тестирование полученного потенциала показало, что он хорошо воспроизводит энергии точечных дефектов и качественно – фазовую диаграмму. Однако построенный потенциал дает заниженную энтальпию смешивания, полученную в работе Hultgren и Desai [31]. Это может быть связано с тем, что энтальпия смешивания в данной системе довольно мала и максимальное абсолютное значение несоответствия, вероятно, сопоставимо с пределом точности потенциала. Предложенную эвтектическую систему Cu–Ag можно использовать для детального изучения атомистических механизмов фазовых превращений в наноразмерных частицах.

В работе [61] рассматриваются термодинамические и физические свойства сплавов FeAl и Fe3Al. Такие сплавы привлекли большое внимание благодаря сочетанию низкой плотности и относительно высокой прочности, низкой стоимости и хорошей стойкости к окислению и коррозии. Эти достоинства делают сплавы FeAl и Fe3Al одними из кандидатов на замещение ферритных нержавеющей сталей при умеренных и высоких температурах, однако сильная межкристаллитная хрупкость ограничивает их обработку и делает их промышленное применение в настоящее время опасным. Разработка новых и более пластичных сплавов Fe и Al зависит от

глубокого понимания их свойств, в том числе – на атомарном уровне. В цитируемой работе был применен метод EAM с увеличенным радиусом обрезания, так называемый LAEAM (*long analytical EAM*), так как в интерметаллидах дальнедействующее взаимодействие существенно влияет на порядок получающихся соединений. Параметризуемые функции выглядят следующим образом:

– функция парного взаимодействия

$$\Phi(r) = \begin{cases} -\phi_e \left[1 + \alpha \left(\frac{r}{r_1} - 1 \right) \right] \exp \left[-\delta \left(\frac{r}{r_1} - 1 \right) \right] & r \leq r_b, \\ \sum_{i=0}^6 \lambda_i \left(\frac{r}{r_b} - 1 \right)^i & r_b < r \leq r_c, \\ \sum_{i=0}^5 \kappa_i \left(\frac{r}{r_c} - 1 \right)^i & r_c < r \leq r_e, \\ 0 & r_e \leq r; \end{cases}$$

– функция погружения

$$F(\rho) = \begin{cases} \sum_{i=0}^4 F_{1i} (\rho - \rho_1)^i & \rho \leq \rho_1 = 0,85\rho_e, \\ \sum_{i=0}^4 F_{2i} (\rho - \rho_2)^i & \rho_1 < \rho \leq \rho_2 = \rho_e, \\ \sum_{i=0}^4 F_{3i} (\rho - \rho_2)^i & \rho > \rho_2; \end{cases}$$

– функции для расчета электронной плотности

$$f(r) = f_e(r)^4 \exp[-\beta(r - r_i)],$$

$$\rho_i = \sum_{j \neq i} f(r_{ij}).$$

В общей сложности функции содержат 38 подгоночных параметров.

Для идентификации параметров потенциала использовались следующие данные: параметры решетки, упругие константы, энергия связи, энергия образования вакансии, длина связи и энергия диссоциации димера. Парный потенциал определялся по схеме Джонсона [33]

$$\Phi_{AB}(r) = 0,5 \left[\left(\frac{r_{1,A}}{r_{1,B}} \right)^4 \Phi_B(r) + \left(\frac{r_{1,B}}{r_{1,A}} \right)^4 \Phi_A(r) \right].$$

При такой схеме построения перекрестного взаимодействия необходимо создать максимально точные потенциалы для чистых элементов. Для проверки потенциалов были рассчитаны энергии связи, параметры решеток, упругие постоянные, энергия образования вакансий. Проверена стабильность ГЦК- и ОЦК-структуры для Fe и ГЦК для Al, исследован процесс самодиффузии. В ходе проведенных тестовых расчетов потенциалы адекватно воспроизводили свойства металлов, за исключением энергии миграции ва-

кансий, где расхождение с экспериментальными данными для Al и Fe составило 10 и 27 % соответственно. Также были рассчитаны свойства FeAl и Fe₃Al и произведен сравнительный анализ с экспериментальными данными и результатами, полученными при использовании других потенциалов [36, 41]. Предложенный потенциал можно использовать для моделирования диффузионных, термофизических свойств системы и эволюции сложных динамических процессов, так как потенциал хорошо воспроизводит постоянные решетки, упругие константы, дисперсионное соотношение для фононов, энергии образования точечных дефектов в FeAl и Fe₃Al.

В работе [66] построен EAM-потенциал для системы Al–Pd–Mn. Такая атомная система представляет большой интерес, так как образует много сложных соединений металлического типа. Такие сплавы обладают высокой степенью сопротивления износу, имеют низкий коэффициент трения, поэтому могут быть использованы для покрытия различного рода инструментов. Также сплав Al–Pd–Mn обладает высокой каталитической активностью, что делает его пригодным для использования в качестве катализатора в химических реакциях [4]. В цитируемой работе акцент был сделан на исследовании свойств Θ фаз, которые приближенно имеют структуру декагональных квазикристаллов с постоянной решетки 160 Å. При пластической деформации эти фазы показывают новый тип дислокаций – так называемые метадислокации [39]. Метадислокации в настоящее время невозможно изучать с помощью квантово-механических методов, так как их пространственная протяженность составляет около 200 Å и они включают более 10000 атомов. Для определения параметров потенциала использовались силы, действующие на отдельный атом, энергия связи и механические напряжения на элементарных ячейках. Для параметризации потенциала был использован метод согласования сил [24], причем результаты, полученные из квантово-механических расчетов, используются в указанном методе как входные данные для идентификации параметров потенциала. Для описания парного взаимодействия и электронной плотности были выбраны по две функции: одна с осциллятором, другая без него. Функции парного взаимодействия выглядят следующим образом:

$$\Phi(r) = D_e \left(\left[1 - \exp\{-\alpha(r - r_e)\} \right]^2 - 1 \right) \psi\left(\frac{r - r_c}{h}\right),$$

$$\text{или } \Phi(r) = \left[\frac{C_1}{r^{n_1}} + \frac{C_2}{r^{n_2}} \cos(kr + \varphi) \right] \psi\left(\frac{r - r_c}{h}\right),$$

где ψ – функция обрезания; r_c – радиус обрезания; h определяет гладкость потенциала; D_e и α соот-

ветствуют глубине и ширине потенциальной ямы; r_e – равновесное расстояние в решетке; C_1 и n_1 – параметры, отвечающие за короткодействующее отталкивание; C_2 и n_2 – «гасят» колебания осциллятора с частотой k .

Функции электронной плотности имеют вид

$$f(r) = \alpha \exp(-\beta r),$$

$$\text{или } f(r) = \frac{1 + a_1 \cos(\alpha r) + a_2 \sin(\alpha r)}{r^\beta} \Psi\left(\frac{r - r_c}{h}\right),$$

где параметр α отвечает за амплитуду; a β – за декремент затухания. Во второй формуле a_1 и a_2 определяют амплитуду осцилляторов; α – волновое число; β – декремент затухания. Ключевое различие двух типов используемых соотношений заключается в том, что у функции без осциллятора меньше подгоночных параметров. Функция погружения получена из уравнения состояния Роуз [65] и выглядит следующим образом:

$$F(\rho) = F_0 [1 - q \ln(\rho)] \rho^q + F_1 \rho,$$

$$\rho_i = \sum_{j \neq i} f_j(r_{ij}),$$

где F_0, F_1, q – подгоночные параметры. При помощи этих функций были разработаны три потенциала: в основе первого потенциала лежали функция парного взаимодействия с осциллятором и простая функция электронной плотности, в основе второго – простая функция парного взаимодействия и функция электронной плотности с осциллятором, в третьем потенциале обе функции – парного взаимодействия и электронной плотности имели осциллятор. Общее число параметров составило 60, 48 и 66 соответственно. Идентификация параметров потенциала производилась путем минимизации следующего выражения:

$$Z = \sum w_E |\Delta E|^2 + \sum |\Delta F|^2 + \sum w_S |\Delta S|^2,$$

где ΔE , ΔF и ΔS – невязка энергии связи, сил, действующих на атом, и механических напряжений на элементарных ячейках. Для минимизации выражения для Z использовались два метода: метод имитации отжига (Метрополиса) [37] и метод сопряженного градиента [16]. Для получения разных локальных конфигураций квантово-механические вычисления проводились в пакете VASP при температурах 600, 1100 и 1800 К. Расчеты были выполнены в обобщенном градиентном приближении с помощью PAW-псевдопотенциалов. В результате первый потенциал, содержащий меньше подгоночных параметров, показал самые большие среднеквадратичные отклонения по силам, энергиям и напряжению, и, наоборот, потенциал с большим количеством подгоночных параметров оказался более

точен. Все три потенциала могут воспроизводить стабильные фазы чистых металлов, хорошо воспроизводят энтальпию образования различных структур, содержащих псевдоикосаэдрические кластеры Маккея с различным количеством внутренних атомов алюминия, с отклонением меньше чем 10 мэВ/атом (2 %). Потенциал с наименьшим количеством подгоночных параметров не смог правильно предсказать температуру плавления. Поскольку все три потенциала были разработаны для определения фазовой стабильности (и поэтому не использовались в выборке механических напряжений), то с их помощью не удастся точно определить значения упругих постоянных. Автор цитируемой работы предполагает использование потенциала для дальнейшего изучения образования и свойств междислокаций.

В настоящее время система Cu–Zr является объектом интенсивного изучения, поскольку при определенных условиях может превращаться в металлическое стекло. В работе [51] был построен потенциал Cu–Zr, в основу которого легли потенциалы для чистых металлов Cu [50], Zr [48] и ранее предложенный этим же автором потенциал для Cu–Zr [49], данные дифракции расплава $\text{Cu}_{64.5}\text{Zr}_{35.5}$, экспериментально полученные данные о плотности сплава при 1500 К и данные энтальпии смешивания расплавов [72]. Способ включения данных дифракции расплава в процедуру идентификации параметров многокомпонентного потенциала был впервые предложен Менделевым и Сроловицем в 2002 году [47]. Для его применения из независимых дифракционных измерений должны быть известны все три частные парные корреляционные функции – для взаимодействий типа «атом A – атом A», «атом B – атом B» и «атом A – атом B» (*partial pair correlation functions, PPCF*). При этом дифракционные эксперименты в случае двухкомпонентных сплавов позволяют получить полный структурный фактор $\mathbf{S}(Q)$ (*total structure factor – TSF*), который связан с полной парно-корреляционной функцией $\mathbf{g}(r)$ (*total pair-correlation function – TPCF*) через преобразование Фурье:

$$\mathbf{g}(r) = 1 + \frac{1}{2\pi^2 d} \int_0^\infty [\mathbf{S}(Q) - 1] \frac{\sin Qr}{Qr} Q^2 dQ,$$

где d – атомная плотность. Полный структурный фактор $\mathbf{S}(Q)$ является взвешенной суммой частичных структурных факторов $\mathbf{S}_{\text{эф}}(Q)$ (*partial structure factors – PSFs*):

$$\mathbf{S} = x_1^2 k_1^2 S_{11} + 2x_1 x_2 k_1 k_2 S_{12} + x_2^2 k_2^2 S_{22},$$

где x_i – атомная доля i -го компонента, а

$$k_i = \frac{f_i}{x_1 f_1 + x_2 f_2},$$

где f_i – атомный множитель i -го компонента (так называемый формализм Фабер-Зимана). Если пренебречь зависимостью Q от атомного фактора рассеяния, то зависимость TPCF от PPCF может быть записана следующим образом:

$$\mathbf{g} = x_1^2 k_1^2 g_{11} + 2x_1 x_2 k_1 k_2 g_{12} + x_2^2 k_2^2 g_{22}.$$

Чтобы получить частично-парные корреляционные функции для бинарных систем, необходимо провести три независимых дифракционных эксперимента. Данные для двух дифракционных экспериментов уже получены для многих металлов; более того, в последнее время рентгеновские и нейтронографические эксперименты позволяют получать общий структурный фактор $\mathbf{S}(Q)$ с высокой точностью.

Предложенный в работе [49] потенциал Cu–Zr плохо воспроизводит второй и третий пики полного структурного фактора, недооценивает плотность расплава на 1 % и, что гораздо хуже, недооценивает энтальпию смешивания раствора $\text{Cu}_{64.5}\text{Zr}_{35.5}$ примерно в два раза. В цитируемой работе основное внимание уделено разработке более совершенной функции перекрестного парного взаимодействия

$$\Phi^{AB} = \sum_{k=1}^n \alpha_k^{AB} \varphi_k^{AB},$$

где φ_k^{AB} – базовые функции определенного вида; α_k^{AB} – некоторые коэффициенты; k – число базовых функций. В цитируемой работе по сравнению с работой [49] из подгоночной выборки были исключены данные, полученные методом согласования сил [24], вместо этого добавлены экспериментально полученные данные плотности расплава, энтальпии смешивания и TPCF. Построенный потенциал лучше воспроизводит плотность расплава и энтальпию смешивания при $T = 1500$ К, а также свойства структур с высоким содержанием меди.

Подводя итоги достаточно краткого обзора современных подходов к построению ЕАМ-потенциалов для многокомпонентных систем, приведем и некоторое сопоставление упомянутых в обзоре работ (и, соответственно, подходов). В таблице приведена сравнительная характеристика потенциалов, предлагаемых в процитированных работах; авторы обзора сделали попытку выделить не только такие особенности потенциалов, которые можно отнести к их достоинствам, но и те физические параметры или особенности, которые при использовании того или иного потенциала описать не удастся.

Сравнительная характеристика применяемых ЕАМ-потенциалов
Comparative characteristics of different EAM potentials

№	Материалы (атомные системы)	Авторы, ссылка на источник	Физико-механические свойства, хорошо описываемые потенциалом	Физико-механические свойства, плохо описываемые потенциалом, другие недостатки
1	Ni-Cu	Foiles S.M. [27]	Потенциал воспроизводит упругие постоянные с погрешностью меньше 10 % и значение удельной теплоты растворения с точностью до 0,1 эВ	Сложности с верификацией параметров
2	Cu, Ag, Au, Ni, Pt, Pd и их сплавы	Foiles S.M. [28]	Потенциалы правильно воспроизводят знак удельной теплоты растворения всех сплавов, для которых были известны экспериментальные данные, при этом средняя ошибка составляла 0,08 эВ или 40 %	Сплавы с примесными атомами серебра и никеля показали ошибку в определении удельной теплоты растворения: 110 и 47 % соответственно
3	Cu, Ag, Au, Ni, Pt, Pd и их сплавы	Johnson R.A. [33]	Потенциалы правильно воспроизводят знак удельной теплоты растворения всех сплавов, для которых были известны экспериментальные данные, при этом средняя ошибка составляла 0,09 эВ или 45 %	Для бинарных сплавов с Pd потенциал не воспроизвел знак удельной теплоты растворения, более того, эти значения были завышены на 0,3 – 0,6 эВ, то есть более чем на 300 %
4	Al-Ni и Cu-Au	Ward L. [74]	Максимальные ошибки энтальпии смешивания, упругого модуля и параметра решетки построенных потенциалов по сравнению с экспериментальными данными составили 0,015 эВ (6,7 %), 10 ГПа (6,4 %), 0,07 Å (2,0 %) для Al-Ni и 0,009 эВ (18 %), 7 ГПа (4,7 %), 0,04 Å (1,3 %) для Cu-Au	Для построения многокомпонентных потенциалов по предложенной схеме требуются однокомпонентные потенциалы с похожими функциональными формами парного взаимодействия
5	Fe-Ni-Cr	Bonny G. [12]	Потенциалы для чистых металлов хорошо воспроизводят упругие константы для Ni, энергии дефекта упаковки для Ni и Fe, энергию миграции вакансий для Ni и Cr. Итоговая ошибка при построении карты зависимости энергии дефекта упаковки от концентрации Cr и Ni составила 3.5 мДж/м ² или 1 %. Полученные упругие константы также хорошо совпадали с экспериментальными значениями, ошибка составила менее 10 %	Плохо описывают энергию дефекта упаковки для Cr и энергию миграции вакансий для Fe. Имеют место самопроизвольные фазовые превращения ОЦК ↔ ГЦК при температурах ниже температуры плавления
6	Fe-Ni-Cr	Bonny G. [14]	В работе [14] по сравнению с предыдущей работой [12] потенциал позволил лучше описывать свойства точечных дефектов	Ошибка в определении упругих постоянных выше по сравнению с работой [12]
7	W-H-He	Bonny G. [15]	Потенциал хорошо воспроизводит энергии образования междоузельных дефектов, энергии миграции для H и He, энергии связей H-H, H-He, He-He	Сложности с верификацией параметров
8	Fe-Cr	Eich S.M. [23]	Потенциал способен описывать энтропию колебательного движения молекул при 300 и 1600 К, а также предсказывать предельную растворимость атомов хрома в железе	Потенциал не способен точно воспроизводить данные по упругим константам
9	U-Mo-Xe	Смирнова Д.Е. [69]	Потенциал пригоден для изучения эволюции дефектной структуры в U-Mo сплавах, так как с высокой точностью воспроизводит упругие константы, коэффициент термического расширения и температуру плавления и энергию точечных дефектов для сплавов U-10Mo (U-10 wt %Mo), U-2Mo и U-Mo	Коэффициент теплового расширения примерно в два раза ниже экспериментальных значений
10	Ni-Al-W	Fan Q.-N. [25]	Потенциал точно описывает свойства точечных и линейных дефектов	Сложности с верификацией параметров
11	Ni-Al	Мишин Ю. [54]	Применим для исследования пластической деформации, разрушения, описания нарушения упорядоченности на атомарном уровне, диффузии и высокотемпературного моделирования, так как хорошо воспроизводит точечные дефекты, энергию межфазных границ и параметры термического расширения	Не описывает идеальную структуру кристаллической решетки, о чем свидетельствуют расхождения экспериментальных и полученных в ходе расчетов данных относительных расстояний между первыми двумя межатомными слоями

№	Материалы (атомные системы)	Авторы, ссылка на источник	Физико-механические свойства, хорошо описываемые потенциалом	Физико-механические свойства, плохо описываемые потенциалом, другие недостатки
12	Cu–Ag	Williams P.L. [76]	Хорошо воспроизводит энергии точечных дефектов и качественно воспроизводит фазовую диаграмму. Потенциал можно использовать для детального изучения атомистических механизмов фазовых превращений в наноразмерных частицах	Потенциал дает заниженную энтальпию смешивания
13	Cu–Ag	Webb E.B. [75]	Позволяет точно вычислить высокотемпературную часть диаграммы состояния Cu–Ag и получить приблизительную оценку эвтектической точки линейной экстраполяцией кривых плавления	Воспроизводит лишь некоторые части экспериментальной фазовой диаграммы
14	Cu–Ag	Najafabadi R. [56]	Точно описывает кривые растворимости твердого раствора Cu–Ag	Не позволяет в полной мере воспроизвести экспериментальные данные, по которым производилось построение
15	FeAl и Fe ₃ Al	Ouyang Y. [61]	Стабильно воспроизводит ГЦК- и ОЦК-структуры для Fe и ГЦК для Al. Потенциал можно использовать для моделирования диффузионных, термофизических свойств системы и эволюции сложных динамических процессов, так как потенциал хорошо воспроизводит постоянные решетки, упругие константы, дисперсионное соотношение для фононов, энергии образования точечных дефектов в FeAl и Fe ₃ Al	Энергия миграции вакансий воспроизводится плохо, расхождение с экспериментальными данными для Al и Fe составило 10 и 27 % соответственно
16	Al–Pd–Mn	Schopf D. [66]	Воспроизводит стабильные фазы чистых металлов, а также энтальпию образования различных структур, содержащих псевдо-икосаэдрические кластеры Маккея с различным количеством внутренних атомов алюминия, с отклонением меньше чем 10 мэВ (2 %)	Не воспроизводит упругие постоянные
17	Cu–Zr	Менделев М.И. [51]	Хорошо воспроизводит плотность расплава и энтальпию смешивания при T = 1500 K, а также свойства структур с высоким содержанием меди	Занижает энтальпию смешивания раствора CuZr примерно в два раза и плотность расплава на 1 %

Заключение

В рамках обзора, разбитого на две логически связанные части, рассмотрены работы, посвященные построению, идентификации, верификации и использованию потенциалов межатомного взаимодействия для широкого класса металлических и интерметаллических материалов. Современное развитие вычислительной техники позволяет имитировать поведение систем, состоящих из миллиардов частиц. С одной стороны, этого явно недостаточно (и вряд ли когда-нибудь станет возможным) для описания поведения материалов на уровне образца или конструкции, или для описания процессов, происходящих на более высоких, чем наномасштабные, уровнях. Однако, с другой стороны, в последние 10–15 лет появилось множество работ, в которых исследователи очень точно (даже по сравнению с экспериментальными методиками) определяют значения физико-механических свойств материалов, используя методологию

молекулярной динамики, в частности ЕАМ-потенциалы. Важно отметить, что ЕАМ-потенциалы впервые позволили не только описать взаимодействия типа «атом-атом», но и свойства, поведение и процессы взаимодействия точечных и линейных дефектов; эти коллективные (с точки зрения атомной структуры) свойства могут позволить строить более точные и физически прозрачные модели материалов и процессов их деформирования.

Благодарности

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Президента РФ №МК-1298.2017.1.

Acknowledgments

This work was carried out with the financial support of the grant of the President of the Russian Federation No. МК-1298.2017.1.

Библиографический список

1. Вoleгов П.С., Герасимов Р.М., Давлятшин Р.П. Модели молекулярной динамики: обзор ЕАМ-потенциалов. Ч. 1. Потенциалы для однокомпонентных систем//Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика. – 2017. – № 4. – С. 214–237. DOI: 10.15593/perm.mech/2017.4.14
2. Лахтин Ю.М. Металловедение и термическая обработка металлов. – 3-е изд. – М.: Металлургия, 1983. – 359 с.
3. Левин В.Е. Ядерная физика и ядерные реакторы: учебник. – 4-е изд. – М.: Атомиздат, 1979. – 288 с.
4. Мильман Ю.В., Ефимов Н.А., Гончарова И.В. Квазикристаллы – новый класс твердых тел с уникальными физическими свойствами // Электронная микроскопия и прочность материалов. Сер. Физическое материаловедение, структура и свойства материалов. – 2012. – № 18. – С. 3–15.
5. Михайлушкин А.С. Теоретическое исследование электронной структуры металлов и сплавов под давлением: Al-Si, Al-Ge, In и Bi-Sb: дис. ... канд. физ.-мат. наук: 01.04.07. – М., 2003. – 116 с. РГБ ОД, 61:04-1/145-8.
6. Ackland G.J., Vitek V. Many-body potentials and atomic-scale relaxations in noble-metal alloys // Physical Review B. – 1990. – Vol. 41. – No. 15. – P. 324–333.
7. Ackland G.J., Reed S.K. Two-band second moment model and an interatomic potential for caesium // Physical Review B. – 2003. – Vol. 67. – No. 17. – P. 174108. DOI: 10.1103/PhysRevB.67.174108
8. Development of an interatomic potential for phosphorus impurities in α -iron / G.J. Ackland, M.I. Mendeleev, D.J. Srolovitz, S. Han, A.V. Barashev // J. Phys.: Condens. Matter. – 2004. – Vol. 16. – No. 27. – P. 2629–2642. DOI: 10.1088/0953-8984/16/27/003
9. Andersen O.K. Linear methods in band theory // Physical Review B. – 1975. – Vol. 12. – No. 8. – P. 3060–3083. DOI: 10.1103/PhysRevB.12.3060
10. Asta M., Foiles S.M. Embedded-atom-method effective-pair-interaction study of the structural and thermodynamic properties of Cu-Ni, Cu-Ag, and Au-Ni solid solutions// Physical Review B. – 1996. – Vol. 53. – No. 5. – P. 2389–2404. DOI: 10.1103/PhysRevB.53.2389
11. Becquart C.S., Domain C. A density functional theory assessment of the clustering behavior of He and H in tungsten // Journal of Nuclear Materials. – 2009. – Vol. 386–388. – P. 109–111. DOI: 10.1016/j.jnucmat.2008.12.085
12. Interatomic potential to study plasticity in stainless steels: the FeNiCr model alloy / G. Bonny, D. Terentyev, R.C. Pasianot, S. Ponce, A. Bakaev // Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. – 2011. – Vol. 19. – No. 8. – P. 085008. DOI: 10.1088/0965-0393/19/8/085008
13. Iron chromium potential to model high-chromium ferritic alloys / G. Bonny, R.C. Pasianot, D. Terentyev, L. Malerba // Philosophical Magazine. – 2011. – Vol. 91. – No. 12. – P. 1724–1746. DOI: 10.1080/14786435.2010.545780
14. Bonny G., Castin N., Terentyev D. Interatomic potential for studying ageing under irradiation in stainless steels: the FeNiCr model alloy// Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. – 2013. – Vol. 21. – No. 8. – P. 085004. DOI: 10.1088/0965-0393/21/8/085004
15. Bonny G., Grigorev P., Terentyev D. On the binding of nanometric hydrogen-helium clusters in tungsten // Journal of Physics: Condensed Matter. – 2014. – Vol. 26. – No. 48. – P. 485001. DOI: 10.1088/0953-8984/26/48/485001
16. Broyden C.G. A Class of Methods for Solving nonlinear Simultaneous Equations // Mathematics of Computation. – 1965. – Vol. 19. – No. 92. – P. 577–593.
17. Cai J., Ye Y.Y. Simple analytical embedded-atom-potential model including a long-range force for fcc metals and their alloys // Physical Review B. – 1996. – Vol. 54. – No. 12. – P. 8398–8410. DOI:10.1103/PhysRevB.54.8398
18. Castin N., Malerba L. Calculation of proper energy barriers for atomistic kinetic Monte Carlo simulations on rigid lattice with chemical and strain field long-range effects using artificial neural networks // The Journal of Chemical Physics. – 2010. – Vol. 132. – No. 7. – P. 074507. DOI: 10.1063/1.3298990
19. Clementi E., Roetti C. Roothaan-Hartree-Fock atomic wavefunctions: Basis functions and their coefficients for ground and certain excited states of neutral and ionized atoms, $Z \leq 54$ // Atomic Data and Nuclear Data Tables. – 1974. – Vol. 13. – No. 3-4. – P. 177–478. DOI: 10.1016/S0092-640X(74)80016-1
20. Dench W.A. Adiabatic high-temperature calorimeter for the measurement of heats of alloying // Transactions of the Faraday Society. – 1963. – Vol. 59. – P. 1279–1292. DOI: 10.1039/TF9635901279
21. Du J.P., Wang C.Y., Yu T. Construction and application of multi-element EAM potential (Ni–Al–Re) in γ/γ' Ni-based single crystal superalloys // Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. – 2012. – Vol. 21. – No. 1. – P. 015007. DOI: 10.1088/0965-0393/21/1/015007
22. Du J.-P., Wang C.-Y., Yu T. The ternary Ni–Al–Co embedded-atom-method potential for γ/γ' Ni-based single-crystal superalloys: Construction and application // Chinese Physics B. – 2014. – Vol. 23. – No. 3. – P. 033401. DOI: 10.1088/1674-1056/23/3/033401
23. Eich S.M., Beinke D., Schmitz G. Embedded-atom potential for an accurate thermodynamic description of the iron-chromium system // Computational Materials Science. – 2015. – Vol. 104. – P. 185–192. DOI: 10.1016/j.commatsci.2015.03.047
24. Ercolessi F., Adams J.B. Interatomic Potentials from First-Principles Calculations: The Force-Matching Method // Europhysics Letters. – 1994. – Vol. 26. – No. 8. – P. 583–588.
25. A ternary Ni–Al–W EAM potential for Ni-based single crystal superalloys / Q.-N. Fan, C.-Y. Wang, Y. Tao, J.-P. Du // Physica B: Condensed Matter. – 2015. – Vol. 456. – P. 283–292. DOI: 10.1016/j.physb.2014.09.012
26. Finnis M.W., Sinclair J.E. A simple empirical N-body potential for transition metals // Philosophical Magazine A. – 1984. – Vol. 50. – No. 1. – P. 44–55. DOI:10.1080/01418618408244210
27. Foiles S.M. Calculation of the surface segregation of Ni-Cu alloys with the use of the embedded-atom method // Physical Review B. – 1985. – Vol. 32. – No. 12. – P. 7685–7693. DOI: 10.1103/PhysRevB.32.7685
28. Foiles S.M., Baskes M.I., Daw M.S. Embedded-atom-method functions for the fcc metals Cu, Ag, Au, Ni, Pd, Pt, and their alloys // Physical Review B. – 1986. – Vol. 33. – No. 12. – P. 7983–7991. DOI: 10.1103/PhysRevB.33.7983
29. Henkelman G., Uberuaga B.P., Jonsson H. A climbing image nudged elastic band method for finding saddle points and minimum energy paths // The Journal of Chemical Physics. – 2000. – Vol. 113. – No. 22. – P. 9901. DOI: 10.1063/1.1329672
30. Simulations of the Initial Stages of Blistering in Helium Implanted Tungsten / K.O.E. Henriksson, K. Nordlund, J. Keinonen, D. Sundholm, M. Patzschke // Physica Scripta. – 2004. – Vol. T108. – P. 95–98. DOI: 10.1238/Physica.Topical.108a00095
31. Hultgren R.R., Desai P.D. Selected Thermodynamic Values and Phase Diagrams for Copper and Some of Its Binary Alloys. – New York: International Copper Research Association, 1971. – 204 p.

32. Johnson R.A. Analytic nearest-neighbor model for fcc metals // *Physical Review B*. – 1988. – Vol. 37. – No. 8. – P. 3924–3931. DOI: 10.1103/PhysRevB.37.3924
33. Johnson R.A. Alloy metals with the embedded-atom method // *Physical Review B*. – 1989. – Vol. 39. – No. 17. – P. 12554–12559. DOI: 10.1103/PhysRevB.39.12554
34. Analytical interatomic potential for modeling nonequilibrium processes in the W–C–H system / N. Juslin, P. Erhart, P. Träskelin, J. Nord, K.O.E. Henriksson, K. Nordlund, E. Salonen, K. Albe // *Journal of Applied Physics*. – 2005. – Vol. 98. – No. 12. – P. 123520. DOI: 10.1063/1.2149492
35. Juslin N., Wirth B.D. Interatomic potentials for simulation of He bubble formation in W // *Journal of Nuclear Materials*. – 2013. – Vol. 432. – No. 1–3. – P. 61–66. DOI: 10.1016/j.jnucmat.2012.07.023
36. Kellou A., Grosdidier T., Raulot J.M., Aourag H. Atomistic study of magnetism effect on structural stability in Fe₃Al and Fe₃AlX (X = H, B, C, N, O) alloys // *Phys. Status Solidi B*. – 2008. – Vol. 245. – No. 4. – P. 750–755. DOI: 10.1002/pssb.200743301
37. Kirkpatrick S., Gelatt C.D.Jr., Vecchi M.P. Optimization by simulated annealing // *Science*. – 1983. – Vol. 220. – No. 4598. – P. 671–680. DOI: 10.1126/science.220.4598.671
38. Klaver T.P.C., Hepburn D.J., Ackland G.J. Defect and solute properties in dilute Fe–Cr–Ni austenitic alloys from first principles // *Physical Review B*. – 2012. – Vol. 85. – No. 17. – P. 174111. DOI: 10.1103/PhysRevB.85.174111
39. Novel Type of Dislocation in an Al–Pd–Mn Quasicrystal Approximant / H. Klein, M. Feuerbacher, P. Schall, K. Urban // *Phys. Rev. Letters*. – 1999. – Vol. 82. – No. 17. – P. 3486–3471. DOI: 10.1103/PhysRevLett.82.3468
40. Kresse G., Furthmuller J. Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set // *Physical Review B*. – 1996. – Vol. 54. – No. 16. – P. 11169–11186. DOI: 10.1103/PhysRevB.54.11169
41. Lee E., Lee B.-J. Modified embedded-atom method interatomic potential for the Fe–Al system // *Journal of Physics: Condensed Matter*. – 2010. – Vol. 22. – No. 17. – P. 175702. DOI: 10.1088/0953-8984/22/17/175702
42. Modified analytical interatomic potential for a W–H system with defects / X.-C. Li, X. Shu, Y.-N. Liu, F. Gao, G.-H. Lu // *Journal of Nuclear Materials*. – 2011. – Vol. 408. – No. 1. – P. 12–17. DOI: 10.1016/j.jnucmat.2010.10.020
43. Phase diagram of an empirical potential: The case of Fe–Cu / E.M. Lopasso, M. Caro, A. Caro, P.E.A. Turchi // *Physical Review B*. – 2003. – Vol. 67. – No. 21. DOI: 10.1103/PhysRevB.68.214205
44. Ab initio calculations and interatomic potentials for iron and iron alloys: Achievements within the Perfect Project / L. Malerba, G.J. Ackland, C.S. Becquart et al. // *Journal of Nuclear Materials*. – 2010. – Vol. 406. – No. 1. – P. 7–18. DOI: 10.1016/j.jnucmat.2010.05.016
45. Malinsky I., Claisse F. A high-temperature calorimeter // *J. Chem. Thermodynamic*. – 1973. – Vol. 5. – No. 5. – P. 615–622. DOI: 10.1016/S0021-9614(73)80002-3
46. Interatomic potentials for modelling radiation defects and dislocations in tungsten / M.-C. Marinica, L. Ventelon, M.R. Gilbert, L. Proville, S.L. Dudarev, J. Marian, G. Bencteux, F. Willaime // *J. Phys.: Condens. Matter*. – 2013. – Vol. 25. – No. 39. DOI: 10.1088/0953-8984/25/39/395502
47. Mendeleev M.I., Srolovitz D.J. Determination of alloy interatomic potentials from liquid-state diffraction data // *Physical Review B*. – 2002. – Vol. 66. – No. 1. – P. 014205. DOI: 10.1103/PhysRevB.66.014205
48. Mendeleev M.I., Ackland G.J. Development of an interatomic potential for the simulation of phase transformations in zirconium // *Philosophical Magazine Letters*. – 2007. – Vol. 87. – No. 5. – P. 349–359. DOI: 10.1080/09500830701191393
49. Mendeleev M.I., Sordelet D.J., Kramer M.J. Using atomistic computer simulations to analyze x-ray diffraction data from metallic glasses // *J. Appl. Phys*. – 2007. – Vol. 102. – No. 4. – P. 043501. DOI: 10.1063/1.2769157
50. Analysis of semi-empirical interatomic potentials appropriate for simulation of crystalline and liquid Al and Cu / M.I. Mendeleev, M.J. Kramer, C.A. Becker, M. Asta // *Philosophical Magazine*. – 2008. – Vol. 88. – No. 12. – P. 1723–1750. DOI: 10.1080/14786430802206482
51. Development of suitable interatomic potentials for simulation of liquid and amorphous Cu–Zr alloys / M.I. Mendeleev, M.J. Kramer, R.T. Ott, D.J. Sordelet, D. Yagodin, P. Popel // *Philosophical Magazine*. – 2009. – Vol. 89. – No. 11. – P. 967–987. DOI: 10.1080/14786430902832773
52. Mishin Y., Farkas D. Atomistic simulation of point-defects and diffusion in B2 NiAl // *Philosophical Magazine*. – 1997. – Vol. 75. – No. 1. – P. 169–185. DOI: 10.1080/01418619708210289
53. Structural stability and lattice defects in copper: Ab initio, tight-binding and embedded atom method calculations / Y. Mishin, M.J. Mehl, D.A. Papaconstantopoulos, A.F. Voter, J.D. Kress // *Physical Review B*. – 2001. – Vol. 63. – No. 22. – P. 224106. DOI: 10.1103/PhysRevB.63.224106
54. Mishin Y., Mehl M.J., Papaconstantopoulos D.A. Embedded-atom potential for B2-NiAl // *Physical Review B*. – 2002. – Vol. 65. – No. 22. – P. 224114. DOI: 10.1103/PhysRevB.65.224114
55. Mishin Y., Mehl M.J., Papaconstantopoulos D.A. Phase stability in the Fe–Ni system: Investigation by first-principles calculations and atomistic simulations // *Acta Materialia*. – 2005. – Vol. 53. – No. 15. – P. 4029–4041. DOI: 10.1016/j.actamat.2005.05.001
56. Najafabadi R., Srolovitz D.J. Thermodynamic properties of metastable Ag–Cu alloys // *Journal of Applied Physics*. – 1993. – Vol. 74. – No. 5. – P. 3144–3149. DOI: 10.1063/1.354582
57. Nelder J.A., Mead R. A Simplex Method for Function Minimization // *The Computer Journal*. – 1965. – Vol. 7. – No. 4. – P. 308–313. DOI: 10.1093/comjnl/7.4.308
58. Norskov J.K., Lang N.D. Effective-medium theory of chemical binding: Application to chemisorption // *Physical Review Letters*. – 1980. – Vol. 21. – No. 6. – P. 2131–2136. DOI: 10.1103/PhysRevB.21.2131
59. Two-band modeling of α -prime phase formation in Fe–Cr / P. Olsson, J. Wallenius, C. Domain, K. Nordlund, L. Malerba // *Physical Review B*. – 2005. – Vol. 72. – No. 21. – P. 214119. DOI: 10.1103/PhysRevB.72.214119
60. Osetsky Y.N., Bacon D.J. An atomic-level model for studying the dynamics of edge dislocations in metals // *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng*. – 2003. – Vol. 11. – No. 4. – P. 427–446. DOI: 10.1088/0965-0393/11/4/302
61. Thermodynamic and physical properties of FeAl and Fe₃Al: an atomistic study by EAM simulation / Y. Ouyang, X. Tong, C. Li, H. Chen, X. Tao, T. Hickel, Y. Du // *Physica B: Condensed Matter*. – 2012. – Vol. 407. – No. 23. – P. 4530–4536. DOI: 10.1016/j.physb.2012.08.025
62. Perdew J.P., Burke K., Wang Y. Generalized gradient approximation for the exchange-correlation hole of a many-electron system // *Physical Review B*. – 1996. – Vol. 54. – No. 23. – P. 16533–16539. DOI: 10.1103/PhysRevB.54.16533
63. Purja Pun G.P., Mishin Y. Development of an interatomic potential for Ni–Al system // *Philosophical Magazine*. – 2009. – Vol. 89. – No. 34–36. – P. 3245–3267. DOI: 10.1080/14786430903258184
64. Reed R.C., Tao T., Warnken N. Alloys-By-Design: Application to nickel-based single crystal superalloys // *Acta*

Materialia. – 2009. – Vol. 57. – No. 19. – P. 5898–5913. DOI: 10.1016/j.actamat.2009.08.018

65. Universal features of the equation of state of metals / J.H. Rose, J.R. Smith, F. Guinea, J. Ferrante // *Physical Review B*. – 1984. – Vol. 29. – No. 6. – P. 2963–2969. DOI: 10.1103/PhysRevB.29.2963

66. Embedded atom method potentials for Al-Pd-Mn phases / D. Schopf, P. Brommer, B. Frigan, H.-R. Trebin // *Physical Review B*. – 2012. – Vol. 85. – No. 5. – P. 054201. DOI: 10.1103/PhysRevB.85.054201

67. Scott M.J., Zaremba E. Quasiatoms: An approach to atoms in nonuniform electronic systems // *Physical Review B*. – 1980. – Vol. 22. – No. 4. – P. 1564–1583. DOI: 10.1103/PhysRevB.22.1564

68. Smirnova D.E., Starikov S.V., Stegailov V.V. Corrigendum: Interatomic potential for uranium in a wide range of pressures and temperatures // *J. Phys.: Condens. Matter*. – 2012. – Vol. 42. – No. 14. – P. 015702. DOI: 10.1088/0953-8984/24/14/149501

69. A ternary EAM interatomic potential for U–Mo alloys with xenon / D.E. Smirnova, A.Y. Kuksin, S.V. Starikov, V.V. Stegailov, Z. Insepov, J. Rest, A.M. Yacout // *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* – 2013. – Vol. 21. – No. 3. – P. 035011. DOI: 10.1088/0965-0393/21/3/035011

70. Starikov S.V., Insepov Z., Rest J. Radiation-induced damage and evolution of defects in Mo // *Physical Review B*. – 2011. – Vol. 84. – No. 10. – P. 104109. DOI: 10.1103/PhysRevB.84.104109

71. Thomas L.H. The calculation of atomic fields // *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*. – 1927. – Vol. 23. – No. 5. – P. 542–548. DOI: 10.1017/S0305004100011683

72. Enthalpies of formation of liquid and amorphous Cu-Zr alloys / A.A. Turchanin, I.A. Tomilin, M.A. Turchanin,

I.V. Belokonenko, P.G. Agraval // *Journal of non-Crystalline Solids*. – 1999. – Vol. 250–252. – P. 582–585. DOI: 10.1016/S0022-3093(99)00136-2

73. Voter A.F., Chen S.P. Accurate Interatomic Potentials for Ni, Al and Ni3Al // *MRS Proceedings*. – 1986. – Vol. 82. – P. 175–180. DOI: 10.1557/PROC-82-175

74. Rapid Production of Accurate Embedded-Atom Method Potentials for Metal Alloys / L. Ward, A. Agrawal, K.M. Flores, W. Windl // *arXiv.org*. – 2012.

75. Dissolutive wetting of Ag on Cu: A molecular dynamics simulation study / E.B. Webb, G.S. Grest, D.R. Heine, J.J. Hoyt // *Acta Materialia*. – 2005. – Vol. 53. – No. 11. – P. 3163–3177. DOI: 10.1016/j.actamat.2005.03.021

76. Williams P.L., Mishin Y., Hamilton J.C. An embedded-atom potential for the Cu–Ag system // *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* – 2006. – Vol. 14. – No. 5. – P. 817–833. DOI: 10.1088/0965-0393/14/5/002

77. Yan M., Vitek V., Chen S.P. Many-body central force potentials and properties of grain boundaries in NiAl // *Acta Materialia*. – 1996. – Vol. 44. – No. 11. – P. 4351–4365. DOI: 10.1016/1359-6454(96)00117-6

78. Young W.M., Elcock E.W. Monte Carlo studies of vacancy migration in binary ordered alloys: I // *Proceedings of the Physical Society*. – 1966. – Vol. 89. – No. 3. – P. 735–746. DOI: 10.1088/0370-1328/89/3/329

79. Zhou X.W., Johnson R.A., Wadley H.N.G. Misfit-energy-increasing dislocations in vapor-deposited CoFe/NiFe multilayers // *Physical Review B*. – 2004. – Vol. 69. – No. 14. DOI: 10.1103/PhysRevB.69.144113

References

1. Volegov P.S., Gerasimov R.M., Davlyatshin R.M. Modeli molekularnoj dinamiki: obzor EAM-potencialov. Chast' 1: Potencialy dlja odnokomponentnyh sistem [Molecular dynamics models: a review of EAM-potentials. Part 1: potentials for one-component systems]. *PNRPU Mechanics Bulletin*, 2017, no. 4, pp. 214–237. DOI: 10.15593/perm.mech/2017.4.14

2. Lakhtin Iu.M. Metallovedenie i termicheskaia obrabotka metallov [Metallurgy and heat treatment of metals]. Moscow, Metallurgiya, 1983, 359 p.

3. Levin V.E. Iadernaia fizika i iadernye reaktory [Nuclear physics and nuclear reactors]. Moscow, Atomizdat, 1979, 288 p.

4. Mil'man Iu.V., Efimov N.A., Goncharova I.V. Kvazikristally – novyi klass tverdykh tel s unikal'nymi fizicheskimi svoistvami [Quasicrystals - a new class of solids with unique physical properties]. *Elektronnaia mikroskopiia i prochnost' materialov. Seriya: Fizicheskoe materialovedenie, struktura i svoistva materialov*, 2012, no. 18, pp. 3–15.

5. Mikhailushkin A.S. Teoreticheskoe issledovanie elektronnoi struktury metallov i splavov pod davleniem: Al-Si, Al-Ge, In i Bi-Sb [Theoretical study of the electronic structure of metals and alloys under pressure: Al-Si, Al-Ge, In and Bi-Sb]: *PhD Thesis*. Moscow, 2003, 116 p.

6. Ackland G.J., Vitek V. Many-body potentials and atomic-scale relaxations in noble-metal alloys. *Physical Review B*, 1990, vol. 41, no. 15, pp. 324–333.

7. Ackland G.J., Reed S.K. Two-band second moment model and an interatomic potential for caesium. *Physical Review B*, 2003, vol. 67, no. 17, 174108. DOI: 10.1103/PhysRevB.67.174108

8. Ackland G.J., Mendeleev M.I., Srolovitz D.J., Han S., Barashev A.V. Development of an interatomic potential for phos-

phorus impurities in α -iron. *J. Phys.: Condens. Matter*, 2004, vol. 16, no. 27, pp. 2629–2642. DOI: 10.1088/0953-8984/16/27/003

9. Andersen O.K. Linear methods in band theory. *Physical Review B*, 1975, vol. 12, no. 8, pp. 3060–3083. DOI: 10.1103/PhysRevB.12.3060

10. Asta M., Foiles S.M. Embedded-atom-method effective-pair-interaction study of the structural and thermodynamic properties of Cu-Ni, Cu-Ag, and Au-Ni solid solutions. *Physical Review B*, 1996, vol. 53, no. 5, pp. 2389–2404. DOI: 10.1103/PhysRevB.53.2389

11. Becquart C.S., Domain C. A density functional theory assessment of the clustering behavior of He and H in tungsten. *Journal of Nuclear Materials*, 2009, vol. 386–388, pp. 109–111. DOI: 10.1016/j.jnucmat.2008.12.085

12. Bonny G., Terentyev D., Pasianot R.C., Ponce S., Bakaev A. Interatomic potential to study plasticity in stainless steels: the FeNiCr model alloy. *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.*, 2011, vol. 19, no. 8, 085008. DOI: 10.1088/0965-0393/19/8/085008

13. Bonny G., Pasianot R.C., Terentyev D., Malerba L. Iron chromium potential to model high-chromium ferritic alloys. *Philosophical Magazine*, 2011, vol. 91, no. 12, pp. 1724–1746. DOI: 10.1080/14786435.2010.545780

14. Bonny G., Castin N., Terentyev D. Interatomic potential for studying ageing under irradiation in stainless steels: the FeNiCr model alloy. *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.*, 2013, vol. 21, no. 8, 085004. DOI: 10.1088/0965-0393/21/8/085004

15. Bonny G., Grigorev P., Terentyev D. On the binding of nanometric hydrogen–helium clusters in tungsten. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2014, vol. 26, no. 48, 485001. DOI: 10.1088/0953-8984/26/48/485001

16. Broyden C.G. A Class of Methods for Solving nonlinear Simultaneous Equations. *Mathematics of Computation*, 1965, vol. 19, no. 92, pp. 577-593.
17. Cai J., Ye. Y.Y Simple analytical embedded-atom-potential model including a long-range force for fcc metals and their alloys. *Physical Review B*, 1996, vol. 54, no. 12, pp. 8398-8410. DOI:10.1103/PhysRevB.54.8398
18. Castin N., Malerba L. Calculation of proper energy barriers for atomistic kinetic Monte Carlo simulations on rigid lattice with chemical and strain field long-range effects using artificial neural networks. *The Journal of Chemical Physics*, 2010, vol. 132, no. 7, 074507. DOI: 10.1063/1.3298990
19. Clementi E., Roetti C. Roothaan-Hartree-Fock atomic wavefunctions: Basis functions and their coefficients for ground and certain excited states of neutral and ionized atoms, $Z \leq 54$. *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, 1974, vol. 13, no. 3-4, pp. 177-478. DOI: 10.1016/S0092-640X(74)80016-1
20. Dench W.A. Adiabatic high-temperature calorimeter for the measurement of heats of alloying. *Transactions of the Faraday Society*, 1963, vol. 59, pp. 1279-1292. DOI: 10.1039/TF9635901279
21. Du J.P., Wang C.Y., Yu. T. Construction and application of multi-element EAM potential (Ni–Al–Re) in γ/γ' Ni-based single crystal superalloys. *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.*, 2012, vol. 21, no. 1, 015007. DOI: 10.1088/0965-0393/21/1/015007
22. Du J.-P., Wang C.-Y., Yu T. The ternary Ni—Al—Co embedded-atom-method potential for γ/γ' Ni-based single-crystal superalloys: Construction and application. *Chinese Physics B*, 2014, vol. 23, no. 3, 033401. DOI: 10.1088/1674-1056/23/3/033401
23. Eich S.M., Beinke D., Schmitz G. Embedded-atom-potential for an accurate thermodynamic description of the iron-chromium system. *Computational Materials Science*, 2015, vol. 104, pp. 185-192. DOI: 10.1016/j.commatsci.2015.03.047
24. Ercolessi F., Adams J.B. Interatomic Potentials from First-Principles Calculations: The Force-Matching Method. *Europhysics Letters*, 1994, vol. 26, no. 8, pp. 583-588.
25. Fan Q.-N., Wang C.-Y., Y. Tao, Du J.-P. A ternary Ni–Al–W EAM potential for Ni-based single crystal superalloys. *Physica B: Condensed Matter*, 2015, vol. 456, pp. 283-292. DOI: 10.1016/j.physb.2014.09.012
26. Finnis M.W., Sinclair J. E. A simple empirical N-body potential for transition metals. *Philosophical Magazine A*, 1984, vol. 50, no. 1, pp. 44-55. DOI:10.1080/01418618408244210
27. Foiles S.M. Calculation of the surface segregation of Ni-Cu alloys with the use of the embedded-atom method. *Physical Review B*, 1985, vol. 32, no. 12, pp. 7685-7693. DOI: 10.1103/PhysRevB.32.7685
28. Foiles S.M., Baskes M.I., Daw M.S Embedded-atom-method functions for the fcc metals Cu, Ag, Au, Ni, Pd, Pt, and their alloys. *Physical Review B*, 1986, vol. 33, no. 12, pp. 7983-7991. DOI: 10.1103/PhysRevB.33.7983
29. Henkelman G., Uberuaga B.P., Jonsson H. A climbing image nudged elastic band method for finding saddle points and minimum energy paths. *The Journal of Chemical Physics*, 2000, vol. 113, no. 22, 9901. DOI: 10.1063/1.1329672
30. Henriksson K.O.E., nordlund K., Keinonen J., Sundholm D., Patzschke M. Simulations of the Initial Stages of Blistering in Helium Implanted Tungsten. *Physica Scripta*, 2004, vol. T108, pp. 95-98. DOI: 10.1238/Physica.Topical.108a00095
31. Hultgren R.R., Desai P.D. Selected Thermodynamic Values and Phase Diagrams for Copper and Some of Its Binary Alloys, New York, International Copper Research Association, 1971, 204 p.
32. Johnson R.A. Analytic nearest-neighbor model for fcc metals. *Physical Review B*, 1988, vol. 37, no. 8, pp. 3924-3931. DOI: 10.1103/PhysRevB.37.3924
33. Johnson R.A. Alloy metals with the embedded-atom method. *Physical Review B*, 1989, vol. 39, no. 17, pp. 12554-12559. DOI: 10.1103/PhysRevB.39.12554
34. Juslin N., Erhart P., Träskelin P., nord J., Henriksson K.O.E., nordlund K., Salonen E., Albe K. Analytical interatomic potential for modeling nonequilibrium processes in the W–C–H system. *Journal of Applied Physics*, 2005, vol. 98, no. 12, 123520. DOI: 10.1063/1.2149492
35. Juslin N., Wirth B.D. Interatomic potentials for simulation of He bubble formation in W. *Journal of Nuclear Materials*, 2013, vol. 432, no. 1-3, pp. 61-66. DOI: 10.1016/j.jnucmat.2012.07.023
36. Kellou A., Grosdidier T., Raulot J.M., Aourag H. Atomistic study of magnetism effect on structural stability in Fe3AlX (X = H, B, C, N, O) alloys. *Phys. Status Solidi B*, 2008, vol. 245, no. 4, pp. 750-755. DOI: 10.1002/pssb.200743301
37. Kirkpatrick S., Gelatt C.D.Jr., Vecchi M.P. Optimization by simulated annealing. *Science*, 1983, vol. 220, no. 4598, pp. 671-680. DOI: 10.1126/science.220.4598.671
38. Klaver T.P.C., Hepburn D.J., Ackland G.J. Defect and solute properties in dilute Fe-Cr-Ni austenitic alloys from first principles. *Physical Review B*, 2012, vol. 85, no. 17, 174111. DOI: 10.1103/PhysRevB.85.174111
39. Klein H., Feuerbacher M., Schall P., Urban K. novel Type of Dislocation in an Al-Pd-Mn Quasicrystal Approximant. *Phys. Rev. Letters*, 1999, vol. 82, no. 17, pp. 3486-3471. DOI: 10.1103/PhysRevLett.82.3468
40. Kresse G., Furthmuller J. Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set. *Physical Review B*, 1996, vol. 54, no. 16, pp. 11169-11186. DOI: 10.1103/PhysRevB.54.11169
41. Lee E., Lee B.-J. Modified embedded-atom method interatomic potential for the Fe–Al system. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2010, vol. 22, no. 17, 175702. DOI: 10.1088/0953-8984/22/17/175702
42. Li X.-C., Shu X., Liu Y.-N., Gao F., Lu G.-H. Modified analytical interatomic potential for a W–H system with defects. *Journal of Nuclear Materials*, 2011, vol. 408, no. 1, pp. 12-17. DOI: 10.1016/j.jnucmat.2010.10.020
43. Lopasso E.M., Caro M., Caro A., Turchi P.E.A. Phase diagram of an empirical potential: The case of Fe-Cu. *Physical Review B*, 2003, vol. 67, no. 21. DOI: 10.1103/PhysRevB.68.214205
44. Malerba L., Ackland G.J., Becquart C.S., et al. Ab initio calculations and interatomic potentials for iron and iron alloys: Achievements within the Perfect Project. *Journal of Nuclear Materials*, 2010, vol. 406, no. 1, pp. 7-18. DOI: 10.1016/j.jnucmat.2010.05.016
45. Malinsky I., Claisse F. A high-temperature calorimeter. *J. Chem. Thermodynamic*, 1973, vol. 5, no. 5, pp. 615-622. DOI: 10.1016/S0021-9614(73)80002-3
46. Marinica M.-C., Ventelon L., Gilbert M.R., Provile L., Dudarev S.L., Marian J., Bencteux G., Willaime F. Interatomic potentials for modelling radiation defects and dislocations in tungsten. *J. Phys.: Condens. Matter*, 2013, vol. 25, no. 39. DOI: 10.1088/0953-8984/25/39/395502
47. Mendeleev M.I., Srolovitz D.J. Determination of alloy interatomic potentials from liquid-state diffraction data. *Physical Review B*, 2002, vol. 66, no. 1, 014205. DOI: 10.1103/PhysRevB.66.014205
48. Mendeleev M.I., Ackland G.J. Development of an interatomic potential for the simulation of phase transformations in zirconium. *Philosophical Magazine Letters*, 2007, vol. 87, no. 5, pp. 349-359. DOI: 10.1080/09500830701191393

49. Mendeleev M.I., Sordelet D.J., Kramer M.J. Using atomistic computer simulations to analyze x-ray diffraction data from metallic glasses. *J. Appl. Phys.*, 2007, vol. 102, no. 4, 043501. DOI: 10.1063/1.2769157
50. Mendeleev M.I., Kramer M.J., Becker C.A., Asta M. Analysis of semi-empirical interatomic potentials appropriate for simulation of crystalline and liquid Al and Cu. *Philosophical Magazine*, 2008, vol. 88, no. 12, pp. 1723-1750. DOI: 10.1080/14786430802206482
51. Mendeleev M.I., Kramer M.J., Ott R.T., Sordelet D.J., Yagodin D., Popel P. Development of suitable interatomic potentials for simulation of liquid and amorphous Cu-Zr alloys. *Philosophical Magazine*, 2009, vol. 89, no. 11, pp. 967-987. DOI: 10.1080/14786430902832773
52. Mishin Y., Farkas D. Atomistic simulation of point-defects and diffusion in B2 NiAl. *Philosophical magazine*, 1997, vol. 75, no. 1, pp. 169-185. DOI: 10.1080/01418619708210289
53. Mishin Y., Mehl M.J., Papaconstantopoulos D.A., Voter A.F., Kress J.D. Structural stability and lattice defects in copper: Ab initio, tight-binding and embedded atom method calculations. *Physical Review B*, 2001, vol. 63, no. 22, 224106. DOI: 10.1103/PhysRevB.63.224106
54. Mishin Y., Mehl M.J., Papaconstantopoulos D.A. Embedded-atom potential for B2-NiAl. *Physical Review B*, 2002, vol. 65, no. 22, 224114. DOI: 10.1103/PhysRevB.65.224114
55. Mishin Y., Mehl M.J., Papaconstantopoulos D.A. Phase stability in the Fe-Ni system: Investigation by first-principles calculations and atomistic simulations. *Acta Materialia*, 2005, vol. 53, no. 15, pp. 4029-4041. DOI: 10.1016/j.actamat.2005.05.001
56. Najafabadi R., Srolovitz D.J. Thermodynamic properties of metastable Ag-Cu alloys. *Journal of Applied Physics*, 1993, vol. 74, no. 5, pp. 3144-3149. DOI: 10.1063/1.354582
57. Nelder J.A., Mead R. A Simplex Method for Function Minimization. *The Computer Journal*, 1965, vol. 7, no. 4, pp. 308-313. DOI: 10.1093/comjnl/7.4.308
58. Norskov J.K., Lang N.D. Effective-medium theory of chemical binding: Application to chemisorption. *Physical Review Letters*, 1980, vol. 21, no. 6, pp. 2131-2136. DOI: 10.1103/PhysRevB.21.2131
59. Olsson P., Wallenius J., Domain C., nordlund K., Malerba L. Two-band modeling of α -prime phase formation in Fe-Cr. *Physical Review B*, 2005, vol. 72, no. 21, 214119. DOI: 10.1103/PhysRevB.72.214119
60. Osetsky Y.N., Bacon D.J. An atomic-level model for studying the dynamics of edge dislocations in metals. *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.*, 2003, vol. 11, no. 4, pp. 427-446. DOI: 10.1088/0965-0393/11/4/302
61. Ouyang Y., Tong X., Li C., Chen H., Tao X., Hickel T., Du Y. Thermodynamic and physical properties of FeAl and Fe3Al: an atomistic study by EAM simulation. *Physica B: Condensed Matter*, 2012, vol. 407, no. 23, pp. 4530-4536. DOI: 10.1016/j.physb.2012.08.025
62. Perdew J.P., Burke K., Wang Y. Generalized gradient approximation for the exchange-correlation hole of a many-electron system. *Physical Review B*, 1996, vol. 54, no. 23, pp. 16533-16539. DOI: 10.1103/PhysRevB.54.16533
63. Purja Pun G.P., Mishin Y. Development of an interatomic potential for Ni-Al system. *Philosophical Magazine*, 2009, vol. 89, no. 34-36, pp. 3245-3267. DOI: 10.1080/14786430903258184
64. Reed R.C., Tao T., Warnken N. Alloys-By-Design: Application to nickel-based single crystal superalloys. *Acta Materialia*, 2009, vol. 57, no. 19, pp. 5898-5913. DOI: 10.1016/j.actamat.2009.08.018
65. Rose J.H., Smith J.R., Guinea F., Ferrante J. Universal features of the equation of state of metals. *Physical Review B*, 1984, vol. 29, no. 6, pp. 2963-2969. DOI: 10.1103/PhysRevB.29.2963
66. Schopf D., Brommer P., Frigan B., Trebin H.-R. Embedded atom method potentials for Al-Pd-Mn phases. *Physical Review B*, 2012, vol. 85, no. 5, 054201. DOI: 10.1103/PhysRevB.85.054201
67. Scott M.J., Zaremba E. Quasiatoms: An approach to atoms in nonuniform electronic systems. *Physical Review B*, 1980, vol. 22, no. 4, pp. 1564-1583. DOI: 10.1103/PhysRevB.22.1564
68. Smirnova D.E., Starikov S.V., Stegailov V.V. Corrigendum: Interatomic potential for uranium in a wide range of pressures and temperatures. *J. Phys.: Condens. Matter*, 2012, vol. 24, no. 14, 015702. DOI: 10.1088/0953-8984/24/14/149501
69. Smirnova D.E., Kuksin A.Y., Starikov S.V., Stegailov V.V., Insepov Z., Rest J., Yacout A.M. A ternary EAM interatomic potential for U-Mo alloys with xenon. *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.*, 2013, vol. 21, no. 3, 035011. DOI: 10.1088/0965-0393/21/3/035011
70. Starikov S.V., Insepov Z., Rest J. Radiation-induced damage and evolution of defects in Mo. *Physical Review B*, 2011, vol. 84, no. 10, 104109. DOI: 10.1103/PhysRevB.84.104109
71. Thomas L.H. The calculation of atomic fields. *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, 1927, vol. 23, no. 5, pp. 542-548. DOI: 10.1017/S0305004100011683
72. Turchanin A.A., Tomilin I.A., Turchanin M.A., Belokonenko I.V., Agraval P.G. Enthalpies of formation of liquid and amorphous Cu-Zr alloys. *Journal of non-Crystalline Solids*, 1999, vol. 250-252, pp. 582-585. DOI: 10.1016/S0022-3093(99)00136-2
73. Voter A.F., Chen S.P. Accurate Interatomic Potentials for Ni, Al and Ni3Al. *MRS Proceedings*, 1986, vol. 82, pp. 175-180. DOI: 10.1557/PROC-82-175
74. Ward L., Agrawal A., Flores K.M., Windl W. Rapid Production of Accurate Embedded-Atom Method Potentials for Metal Alloys. *arXiv.org*, 2012.
75. Webb E.B., Grest G.S., Heine D.R., Hoyt J.J. Dissolutive wetting of Ag on Cu: A molecular dynamics simulation study. *Acta Materialia*, 2005, vol. 53, no. 11, pp. 3163-3177. DOI: 10.1016/j.actamat.2005.03.021
76. Williams P.L., Mishin Y., Hamilton J.C. An embedded-atom potential for the Cu-Ag system. *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.*, 2006, vol. 14, no. 5, pp. 817-833. DOI: 10.1088/0965-0393/14/5/002
77. Yan M., Vitek V., Chen S.P. Many-body central force potentials and properties of grain boundaries in NiAl. *Acta Materialia*, 1996, vol. 44, no. 11, pp. 4351-4365. DOI: 10.1016/1359-6454(96)00117-6
78. Young W.M., Elcock E.W. Monte Carlo studies of vacancy migration in binary ordered alloys: I. *Proceedings of the Physical Society*, 1966, vol. 89, no. 3, pp. 735-746. DOI: 10.1088/0370-1328/89/3/329
79. Zhou X. W., Johnson R. A., Wadley H. N. G. Misfit-energy-increasing dislocations in vapor-deposited CoFe/NiFe multilayers. *Physical Review B*, 2004, vol. 69, no. 14. DOI: 10.1103/PhysRevB.69.144113