

References

1. Tuguzbaeva A.R. Teaching the Solution of Olympiad Problems to Students of Grades 5–6. – Sterlitamak: Sterlitamak Branch of Bashkir State University, 2018. – 19 p.
2. Abilkassymova A.E. Theory and Methodology of Teaching Mathematics: Didactic and Methodological Foundations. – Almaty: Mektep Publishing House, 2014. – 224 p.
3. Saparkhodzhaev N.P., Niyazova G.Zh., Rakhmet U.R. Information and Communication Technologies in Education. – Almaty: Teaching Aid, 2019. – 196 p.
4. Le H.T.T., Cha S.. Different forms of ICT use and student learning outcomes: Evidence from PISA 2018 // Journal of Educational Technology Research. – 2022. – Vol. 15(3). – pp. 45–62.
5. Beisenov Zh., Meldebekova Z.S. Preparing 5th Grade Students for Mathematical Olympiads: An Elective Course for Grade 5 of General Secondary Schools. – Shymkent, 2014.

DOI 10.70286/ISU-22.04.2026.015

ПОРІВНЯЛЬНЕ ОБЧИСЛЕННЯ ПРУЖНИХ СТАЛИХ ТА МОДУЛЯ ЮНГА МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЇ ДИНАМІКИ З ВИКОРИСТАННЯМ РІЗНИХ ПОТЕНЦІАЛІВ МІЖАТОМНОЇ ВЗАЄМОДІЇ

Варава Модест Юрійович
аспірант

Кафедра загальної та прикладної фізики
Запорізький Національний університет, Україна

Молекулярно-динамічне моделювання є потужним інструментом дослідження механічних властивостей матеріалів на атомному рівні. Одним із ключових факторів, що визначає точність таких розрахунків, є вибір потенціалу міжатомної взаємодії. У роботі розглянуто методику визначення пружних сталей та модуля Юнга кристалічної міді методом молекулярної динаміки та проведемо порівняння результатів, отриманих із використанням різних потенціалів міжатомної взаємодії.

Пружні сталі і модуль Юнга описують, як матеріал деформується під дією сили. Це відбувається за законом Гука:

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl} \epsilon_{kl} \quad (1)$$

Де:

σ_{ij} - тензор напружень

ϵ_{kl} - тензор деформацій

C_{ijkl} - тензор пружних сталей

Для зручності запису закон Гука часто подають у вигляді матриці Фойгта, що дозволяє звести тензор четвертого рангу до матриці 6×6 [1]:

$$\begin{bmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \\ \sigma_4 \\ \sigma_5 \\ \sigma_6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14} & C_{15} & C_{16} \\ C_{21} & C_{22} & C_{23} & C_{24} & C_{25} & C_{26} \\ C_{31} & C_{32} & C_{33} & C_{34} & C_{35} & C_{36} \\ C_{41} & C_{42} & C_{43} & C_{44} & C_{45} & C_{46} \\ C_{51} & C_{52} & C_{53} & C_{54} & C_{55} & C_{56} \\ C_{61} & C_{62} & C_{63} & C_{64} & C_{65} & C_{66} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \varepsilon_3 \\ \varepsilon_4 \\ \varepsilon_5 \\ \varepsilon_6 \end{bmatrix} \quad (2)$$

У кубічних кристалів, зокрема у міді, лише 3 незалежні сталі: C_{11} , C_{12} , C_{44} :

$$\begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{bmatrix} \quad (3)$$

Обчислимо ефективний ізотропний модуль Юнга для полікристалічного матеріалу методом Фойгта–Рейсса–Гілла (VRH)[2] - це стандартний метод визначення цих "ефективних" модулів.

Фойгт припустив, що деформація (ε) однакова в усіх зернах полікристала. Це завжди дає дещо завищені значення жорсткості.

Для кубічної решітки обчислюємо модуль зсуву за Фойгтом (G_V) як:

$$G_V = \frac{C_{11} - C_{12} + 3C_{44}}{5} \quad (4)$$

Рейсс припустив, що напруження (σ) однакове в усіх зернах. Це дає мінімально можливе значення модулів. Модуль зсуву за Рейссом (G_R):

$$G_R = \frac{5C_{44}(C_{11} - C_{12})}{4C_{44} + 3(C_{11} - C_{12})} \quad (5)$$

Річард Гілл довів, що реальне значення модулів полікристала завжди лежить між межами Фойгта та Рейсса[2]. Він запропонував використовувати просте арифметичне середнє:

$$G_{Hill} = \frac{G_V + G_R}{2} \quad (6)$$

Модуль об'ємного стиску для кубічного кристалу:

$$B = \frac{C_{11} + 2C_{12}}{3} \quad (7)$$

Для кубічних кристалів:

$$B_V = B_R = B \quad (8)$$

Тому модуль об'ємного стиснення усереднювати не потрібно.

Коефіцієнт Пуассона обчислюється так:

$$\nu = \frac{3B - 2G_{Hill}}{2(3B + G_{Hill})} \quad (9)$$

Маючи усереднені значення G та B , ми можемо отримати модуль Юнга для ізотропного полікристала за стандартною формулою теорії пружності

$$E = \frac{9BG_{Hill}}{3B + G_{Hill}} \quad (10)$$

Маючи значення пружних сталих ми можемо отримати модуль Юнга, вздовж різних напрямків, наприклад $E_{[100]}$:

$$E_{[100]} = \frac{(C_{11} - C_{12})(C_{11} + 2C_{12})}{C_{11} + C_{12}} \quad (11)$$

В молекулярній динаміці одне з найзручніших та поширеніших ПЗ для молекулярної динаміки є LAMMPS[3], а алгоритм для обчислення пружних сталих в ньому виглядає так:

- 1) створити кристалічну структуру;
- 2) мінімізувати енергію системи;
- 3) задати малу деформацію;
- 4) обчислити компоненти тензора напружень і пружні сталі :

$$C_{11} = \frac{\Delta\sigma_{xx}}{\Delta\varepsilon_{xx}} \quad (12)$$

$$C_{12} = \frac{\Delta\sigma_{yy}}{\Delta\varepsilon_{yy}} \quad (13)$$

$$C_{44} = \frac{\Delta\sigma_{xy}}{\Delta\varepsilon_{xy}} \quad (14)$$

Деформація задається геометрично через зміну розмірів або форми розрахункової комірки. Напруження обчислюється програмно в LAMMPS на основі міжатомних сил після деформації, через внутрішні змінні LAMMPS r_{xx} , r_{yy} та r_{xy} .

Міжатомні сили реалізуються за допомогою потенціалів міжатомної взаємодії:

Потенціал Леннарда-Джонса(LJ) є одним із найпростіших емпіричних парних потенціалів, що описує взаємодію атомів через суму короткодіючого відштовхування та довгодіючого притягання[4]. Потенціал широко використовується у модельних системах і для тестування алгоритмів молекулярної динаміки, однак не здатний коректно описувати метали, оскільки не враховує багаточастинковий характер металевого зв'язку.

Потенціал Морзе(Morse) є більш фізично обґрунтованою моделлю парної взаємодії, яка краще описує енергетичний профіль хімічного зв'язку та ангармонійність коливань атомів[5]. На відміну від потенціалу Леннарда-Джонса, він точніше відтворює поведінку потенціальної енергії при великих міжатомних відстанях. Проте, як і інші парні потенціали, він не враховує багаточастинкову природу металевого зв'язку, що обмежує його застосування для моделювання металів.

Для всіх центральних парних потенціалів характерна класична ознака відношення Коші[6]:

$$C_{12} = C_{44} \quad (15)$$

Потенціал зануреного атома (embedded atom model - EAM) є багаточастинковим потенціалом, спеціально розробленим для опису металів. У цій моделі енергія атома залежить не лише від парної взаємодії, але й від густини електронного середовища, створеного сусідніми атомами[7]. Такий підхід

дозволяє коректніше відтворювати пружні властивості, дефекти кристалічної ґратки та поверхневі ефекти. Недоліком ЕАМ є те, що параметри потенціалу підганяються під експериментальні або квантово-механічні дані для конкретних матеріалів. Є кілька реалізацій потенціалів ЕАМ в LAMMPS:

1) Cu_u3.eam - класичний потенціал методу вкладеного атома (ЕАМ), що базується на ранніх роботах Доу М. С. та Баскес М. [7].

2) Cu_smf7.eam цей потенціал є табульованою реалізацією методу вкладеного атома (ЕАМ), що входить до стандартних бібліотек потенціалів LAMMPS. Даний потенціал отримано шляхом напівемпіричного параметризування, тому його доцільно розглядати як узагальнену ЕАМ-параметризацію, придатну для тестових і порівняльних розрахунків.

3) Cu_mishin1.eam.alloy - ЕАМ-потенціал, розроблений Мішин Ю. [8], є одним із найбільш точних для міді. Параметризований із використанням експериментальних даних і результатів *ab initio* розрахунків він забезпечує високоточне відтворення енергій дефектів та поверхневих властивостей.

4) Cu_zhou.eam ЕАМ-потенціал, запропонований Чжоу С. [9], орієнтований на моделювання багатокомпонентних систем. Забезпечує універсальність і застосовність до широкого класу металевих матеріалів, хоча для чистих елементів може поступатися спеціалізованим потенціалам за точністю.

Потенціал методу зануреного атома з модифікацією (МЕАМ), запропонований Мішелем Баскесом, на відміну від класичного ЕАМ, враховує кутову залежність міжатомної взаємодії, що дозволяє більш точно описувати анізотропію та складні дефекти кристалічної структури [10].

Потенціали машинного навчання (Machine Learning Interatomic Potentials - MLIP) базуються на апроксимації потенціальної поверхні енергії, отриманої з квантово-механічних розрахунків, за допомогою методів машинного навчання. Такі потенціали здатні досягати точності, близької до *ab initio* методів, зберігаючи при цьому ефективність класичної молекулярної динаміки. Вони добре описують складні атомні конфігурації, дефекти та фазові переходи. Для прикладу розглянемо два потенціали машинного навчання:

SNAP (Spectral Neighbor Analysis Potential) - це один із перших успішних лінійних потенціалів машинного навчання. Основа: Використовує біспектральні компоненти для опису локального оточення атома [11]. Локальна густина сусідніх атомів розкладається в ряд за 4D-гіперсферичними гармоніками. Коефіцієнти цього розкладу перетворюються на інваріанти (біспектр), які не залежать від повороту чи перестановки атомів. 3. Загальна енергія системи розраховується як лінійна комбінація цих біспектральних компонентів.

PACE (Performant Atomic Cluster Expansion) це сучасна та надзвичайно ефективна реалізація методу Atomic Cluster Expansion (ACE) використовує розклад локальної енергії в повний набір багатотільних базисних функцій. Описує взаємодію не лише між парами атомів, а й між кластерами (3-тільні, 4-тільні взаємодії тощо) [12]. Об'єднує переваги лінійних моделей (як SNAP) та глибоких нейронних мереж.

Таблиця. 1 Пружні характеристики міді, отримані з використанням різних потенціалів міжатомної взаємодії та експериментальні значення[13].

Потенціал	C11 (ГПа)	C12 (ГПа)	C44 (ГПа)	B (ГПа)	E (VRH) (ГПа)	ν	E[100] (ГПа)
Lennard-Jones	223,283	127,491	127,576	159,421	219,008	0,271	130,6
Morse	173,915	122,588	122,635	139,697	171,818	0,295	72,548
EAM	167,228	124,112	76,447	138,484	124,687	0,3499	61,5
EAM (smf7)	168,604	123,427	76,591	138,486	126,841	0,3473	64,271
EAM (Mishin)	169,853	122,551	76,209	138,319	128,505	0,3452	67,126
EAM (Zhou)	180,411	117,068	70,657	138,182	136,724	0,335	88,271
MEAM	170,204	122,624	75,943	138,484	128,536	0,3453	67,504
SNAP	178,236	125,664	86,051	143,188	142,974	0,3336	74,3
PACE	173,72	120,43	77,781	138,193	135,441	0,3367	75,1
Експери- ментальні значення	176,2	124,9	81,8	142,0	137,79	0,33- 0,35	72,58

На основі обчислених пружних сталих C_{11} , C_{12} , C_{44} для кубічного кристалу визначено компоненти, що дозволяє коректно описати анізотропію пружного відгуку монокристалічної міді. Отримані результати наведені в таблиці 1 та порівняно з експериментальними значеннями[13].

Аналіз отриманих результатів в таблиці 1 показує, що для парних потенціалів (LJ, Morse) виконується відношення Коші, що не відповідає реальним металам. Вони значно завищують C_{44} та модуль Юнга, тому їх застосування для металів є обмеженим. Потенціали типу EAM значно краще узгоджуються з експериментальними даними, проте результати суттєво залежать від конкретної параметризації. Найкращу відповідність демонструють потенціали Mishin та MEAM, тоді як універсальні потенціали (Zhou) і спрощені реалізації EAM (Cu_u3, smf7) дають помітні відхилення, особливо для зсувної сталої C_{44} . Потенціали машинного навчання (PACE, SNAP) демонструють найвищу точність і можуть розглядатися як перспективна альтернатива класичним підходам.

Список використаних джерел

1. Nye J. F. Physical properties of crystals: their representation by tensors and matrices. Oxford:Clarendon Press, 2012. 329 p. ISBN 978-0-19-851165-6.
2. Hill R. The Elastic Behaviour of a Crystalline Aggregate. Proceedings of the Physical Society. Section A. 1952. Vol. 65, № 5. P. 349–354 <https://doi.org/10.1088/0370-1298/65/5/307>.
3. Thompson A. P., Aktulga H. M., Berger R., Bolintineanu D. S., Brown W. M., Crozier P. S., In 'T Veld P. J., Kohlmeyer A., Moore S. G., Nguyen T. D., Shan R., Stevens M. J., Tranchida J., Trott C., Plimpton S. J. LAMMPS - a flexible simulation tool for particle-based materials modeling at the atomic, meso, and continuum scales.

- Computer Physics Communications. 2022. Vol. 271. P. 108117 <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2021.108171>.
4. Jones J. E. On the determination of molecular fields.—I. From the variation of the viscosity of a gas with temperature. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character*. 1924. Vol. 106, № 738. P. 441–462 <https://doi.org/10.1098/rspa.1924.0081>.
5. Morse P. M. Diatomic Molecules According to the Wave Mechanics. II. Vibrational Levels. *Physical Review*. 1929. Vol. 34, № 1. P. 57–64 <https://doi.org/10.1103/PhysRev.34.57>.
6. Kittel C. *Introduction to solid state physics*. Hoboken, NJ:Wiley, 2005. 680 p. ISBN 978-0-471-41526-8.
7. Daw M. S., Baskes M. I. Embedded-atom method: Derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals. *Physical Review B*. 1984. Vol. 29, № 12. P. 6443–6453 <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.29.6443>.
8. 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 calculations. *Physical Review B*. 2001. Vol. 63, № 22. P. 224106 <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.63.224106>.
9. 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, № 14. P. 144113 <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.69.144113>.
10. Baskes M. I. Modified embedded-atom potentials for cubic materials and impurities. *Physical Review B*. 1992. Vol. 46, № 5. P. 2727–2742 <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.46.2727>.
11. Thompson A. P., Swiler L. P., Trott C. R., Foiles S. M., Tucker G. J. Spectral neighbor analysis method for automated generation of quantum-accurate interatomic potentials. *Journal of Computational Physics*. 2015. Vol. 285. P. 316–330 <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2014.12.018>.
12. Drautz R. Atomic cluster expansion for accurate and transferable interatomic potentials. *Physical Review B*. 2019. Vol. 99, № 1. P. 014104 <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.99.014104>.
13. Ledbetter H. M., Naimon E. R. Elastic Properties of Metals and Alloys. II. Copper. *Journal of Physical and Chemical Reference Data*. 1974. Vol. 3, № 4. P. 897–935 <https://doi.org/10.1063/1.3253150>.