

КАБИНЕТ МИНИСТРОВ РЕСПУБЛИКИ ТАТАРСТАН
АКАДЕМИЯ НАУК РЕСПУБЛИКИ ТАТАРСТАН
КАЗАНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ
им. А.Н. ТУПОЛЕВА
КАЗАНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
им. В.И. УЛЬЯНОВА-ЛЕНИНА
НИЖЕГОРОДСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
им. Н.И. ЛОБАЧЕВСКОГО
ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЙ ЦЕНТР РАН
ИНСТИТУТ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ РАН

8-я МЕЖДУНАРОДНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ

ВЫСОКОПРОИЗВОДИТЕЛЬНЫЕ ПАРАЛЛЕЛЬНЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ НА КЛАСТЕРНЫХ СИСТЕМАХ

НРС-2008

ТРУДЫ КОНФЕРЕНЦИИ

Казань, 17 – 19 ноября, 2008, Российская Федерация

УДК 082:061.3

ББК 32

8-я Международная Конференция. Высокопроизводительные параллельные вычисления на кластерных системах (НПС-2008). Казань, ноябрь 17 – 19, 2008. Труды конференции – Казань: Изд. КГТУ, 2008. 356 с.

ISBN 978-5-7579-1188-5

Труды конференции НПС-2008 включают материалы докладов ученых и специалистов из различных городов России, стран ближнего и дальнего зарубежья. Доклады были распределены по четырем секциям. Тематика секций отражает современные направления работ в области параллельных вычислений.

Редакционная коллегия:

Четверушкин Б.Н., профессор, чл.-корр. РАН (председатель),

Гергель В.П., профессор (зам. председателя),

Райхлин В.А., профессор (зам. председателя),

Елизаров А.М., профессор,

Захаров В.М., профессор,

Столов Е.Л., профессор.

ISBN 978-5-7579-1188-5

© Изд-во Казан. гос. техн. ун-та, 2008

© Авторы, указанные в содержании, 2008

МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ СПЛАВА Ni₃Al-X (X = Co, Nb) ИЗ ПЕРВЫХ ПРИНЦИПОВ

Ю.С.Митрохин¹, В.П.Белаш², Н.Н.Степанова³, В.Е.Шудегов⁴

¹Удмуртский госуниверситет, Ижевск

²Физико Технический Институт УРО РАН, Ижевск

³Институт Физики Металлов УРО РАН, Екатеринбург

⁴Институт Металлургии им. Байкова РАН, Москва

Введение

Расчеты физических свойств твердых тел из первых принципов (*ab initio*) стали в настоящее время доступными широкому кругу исследователей. Это связано с бурным развитием вычислительной техники и с появлением мощных, хорошо отлаженных и хорошо документированных программных комплексов (пакетов программ), многие из которых доступны в Интернете. Такие расчеты дают очень ценную информацию как с теоретической, так и с практической точек зрения. Уровень теории и ее реализация в указанных выше пакетах позволяет получать результаты многие из которых очень хорошо совпадают с экспериментом, в пределах 5 -10 %. В основе этих расчетов лежит теория функционала электронной плотности (DFT) [1] совместно с приближением локальной электронной плотности (LDA) [2].

Для вычисления постоянной решетки и упругих констант твердого тела из первых принципов *ab initio* можно использовать несколько методов. Наиболее точный и теоретически хорошо обоснованным является метод функции линейного отклика [3] на внешнее воздействие. Он реализован в программном комплексе ABINIT [4]. Однако, он требует очень больших вычислительных затрат, как по оперативной памяти, так и по времени счета. По этой причине он не может быть использован для больших суперячеек, содержащих несколько десятков атомов. Другой метод называется методом конечных разностей (или «ручной» метод). Он состоит в том, что вторые производные энергии по объему и деформациям:

$$\left. \frac{\partial^2 E}{\partial V^2} \right|_{V=V_0}, \quad \left. \frac{\partial^2 E}{\partial \epsilon^2} \right|_{V=V_0}, \quad (1)$$

вычисляются численно методом конечных разностей, по ранее вычисленным полным значениям энергии всех атомов в элементарной ячейке. Этот метод проще и экономнее первого. Другое очень важное его достоинство заключается в том, что его можно использовать с любым пакетом расчета электронной зонной структуры кристалла. Он обычно бывает реализован как вспомогательная постпроцессорная утилита, которая использует полученные

ранее значения полной энергии элементарной ячейки при различных значениях объема или напряжений. Такой пакет программ был разработан автором и применен для расчета упругих констант сплава Ni₃Al с двумя известными программными комплексами PWSCF [5] и ABINIT [4].

Оба этих пакета основаны на методе первопринципного псевдопотенциалв (*ab initio* PP) [6]. В пакете PWSCF использовался сепарабельный (нормосохраняющий) ультрамягкий псевдопотенциал Вандербильта USPP [6]. Для учета обменно-корреляционных эффектов использовалось приближение GGA [7] (PBE). В последних версиях пакета ABINIT реализован самый современный метод расчета электронной зонной структуры - PAW метод (Projector Augmented Wave) [8]. Этот метод совместно с приближение GGA [7] (PBE) дает наиболее точные результаты, но требует больших вычислительных затрат по сравнению с LDA [2] приближением для обменно-корреляционного функционала. Оба этих варианта были использованы автором для расчета постоянной решетки и упругих констант сплава Ni₃Al: пакет PWSCF с USPP и пакет ABINIT с PAW. В обоих случаях использовалось приближение GGA для обменно-корреляционного функционала.

Детали расчета

Таблица 1

Координаты атомов в элементарной ячейке сплава Ni₃Al в единицах постоянной решетки

атом	x	y	z
Al	0.0	0.0	0.0
Ni	0.0	0.5	0.5
Ni	0.5	0.0	0.5
Ni	0.5	0.5	0.0

Элементарная ячейка кристалла Ni₃Al имела форму куба и содержала 4 атома. Атом Al располагался в вершине куба, а три атома Ni располагались в центрах трех граней куба, примыкающих к вершине с атомом Al (Табл. 1). Для расчета тройного сплава Ni₃Al-X пришлось увеличить размер ячейки в 2 раза для того чтобы обеспечить нужный процент концентрации примеси X (6 %). Увеличенная суперячейка содержала 32 атома. Близкая к 6 % концентрация примесных атомов получалась если 2 атома примеси замещали какие либо из 32 атомов матрицы.

Таблица 2

Постоянная решетки *a* (Ангстрем) и модули упругости *c*₁₁, *c*₁₂, *c*₄₄ (GPa) для сплава Ni₃Al

<i>a</i>	<i>B</i>	<i>c</i> ₁₁	<i>c</i> ₁₂	<i>c</i> ₄₄	Пакет
3.357	171	251	132	146	PWSCF
3.562	164	202	145	140	ABINIT
3.557	179	233	152	107	Exper.

Таблица 3

Постоянная решетки *a* (Ангстрем) и модули упругости *c*₁₁, *c*₁₂, *c*₄₄ (GPa) для сплава Ni₃Al-Co

<i>a</i>	<i>B</i>	<i>c</i> ₁₁	<i>c</i> ₁₂	<i>c</i> ₄₄	Co -> Al/Ni
3.3577	184	260	146	88	Co -> Al
3.5746	169	239	132	81	Co -> Ni
3.5705	179	214	177	103	Exper.

Таблица 4

Постоянная решетки *a* (Ангстрем) и модули упругости *c*₁₁, *c*₁₂, *c*₄₄ (GPa) для сплава Ni₃Al-Nb

<i>a</i>	<i>B</i>	<i>c</i> ₁₁	<i>c</i> ₁₂	<i>c</i> ₄₄	Nb -> Al/Ni
3.6032	183	271	148	97	Nb -> Al
3.6452	189	242	136	80	Nb -> Ni
3.5956	172	247	151	136	Exper.

В литературе ведется дискуссия о преимущественном расположении атомов примеси на подрешетке алюминия и никеля. При этом в теоретических работах предлагаются различные модели этого расположения. Часто эти модели содержат предположения и параметры, которые трудно проконтролировать. Наиболее прямой и точный способ решения этой проблемы является методы моделирования атомной и электронной структуры такого сплава из первых принципов (*ab initio MD*). Этому методу будет посвящена наша следующая работа. В данной работе эта проблема решается косвенно, путем сравнения теоретического и экспериментального значения постоянной решетки для двух возможных вариантов расположения примеси (на Al или на Ni) в каждом из сплавов. Эту задачу пришлось решать также из методических соображений. Дело в том, что упругие константы нужно вычислять в точке минимума энергетической кривой (рис. 1), иначе можно получить неправильные значения упругих констант [9]. Эта точка минимума соответствует теоретическому значению постоянной решетки, которая, как правило, слегка отличается от экспериментального значения этой величины.

Для расчета постоянной решетки a и объемного модуля упругости B , полная энергия всех атомов в элементарной ячейке рассчитывалась на равномерной сетке при различных значениях a и V . Затем полученные данные аппроксимировались с помощью сплайнов, и вычислялась вторая производная от энергии по объему в точке минимума (рис. 1). Постоянная решетки соответствовала точке минимума. Модуль B вычислялся по формуле:

$$B = V \left. \frac{\partial^2 E}{\partial V^2} \right|_{V=V_0} . \quad (2)$$

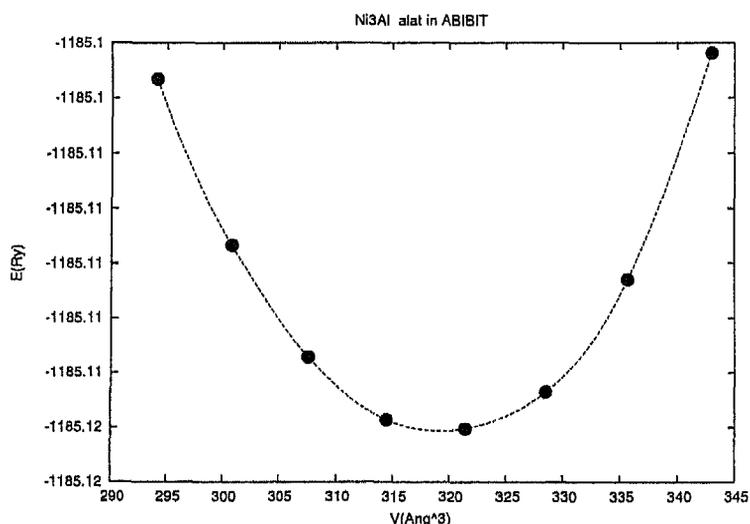


Рис. 1. График зависимости полной энергии E от постоянной решетки a и объема V для сплава Ni_3Al

Для расчета упругих констант c_{11} и c_{12} вычислялась полная энергия атомов в ячейке при различных значениях тетрагональной деформации \square (001) в направлении вектора (001). Затем аналогичным образом вычислялась вторая производная полной энергии по деформации:

$$E'' = \left. \frac{\partial^2 E}{\partial \epsilon^2} \right|_{V=V_0} . \quad (3)$$

Модуль сдвига g вычислялся по формуле:

$$g = \frac{1}{3} \frac{E''}{V_0} . \quad (4)$$

Упругие константы и вычислялись по формулам:

$$c_{11} = B + \frac{4}{3}g, \quad c_{12} = B - \frac{2}{3}g. \quad (5)$$

Для расчета упругих констант c_{44} вычислялась полная энергия атомов в ячейке при различных значениях ромбической деформации \square (111) в направлении вектора (111). Затем аналогичным образом вычислялась вторая производная полной энергии по деформации:

$$E'' = \left. \frac{\partial^2 E}{\partial \epsilon^2} \right|_{V=V_0}. \quad (6)$$

Упругие константы c_{44} вычислялись по формуле:

$$c_{44} = \frac{1}{3} \frac{E''}{V_0}. \quad (7)$$

Результаты этих расчетов приведены в табл. 2, 3, 4 и на рис. 1. Из сравнения теоретического значения постоянной решетки с ее экспериментальным значением (табл. 2 – 4, можно сделать вывод, что атомы Со преимущественно располагаются на подрешетке Al, а атомы Nb на подрешетке Ni. Этот результат согласуется с работами других авторов и с экспериментом.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Hohenberg P., Kohn W.*, Phys. Rev. 136 864 (1964)
2. *Kohn W., Sham L.*, Phys. Rev. 140 1133 (1965)
3. *Baroni S., Giannozzi P., Testa A.*, Phys. Rev. Lett. B 58 1861 (1987)
4. *Gonze X., Bueken J-M., Caracas R., Detraux F., Fuch M., Rignanese G-M., Sindic L., Verstraete M., Zerah G., Jollet F., Torrent M., Roy A., Mikami M., Ghoses P., Raty j-Y., Allan D.*, Comput. Mater. Sci. 25 478 (2002)
5. *Baroni S., de Gironcoli S., Dal Corso A., Giannozzi P.*, Rev. Mod. Phys. 72 515-562 (2001)
6. *Vanderbilt D.*, Phys. Rev. B 41 7892 (1990)
7. *Perdew J.P., Burke S., Ernzerhof M.*, Phys. Rev. Lett. B 77 3865 (1996),
Perdew J.P., Burke S., Ernzerhof M., Phys. Rev. B 59 7413 (1999)
8. *Bloch P.E.*, Phys. Rev. B 24 17953 (1994),
9. *Wu X., Vandferbilt D., Hamman D.R.*, Phys. Rev. B 72 035105 (2005)