

**DEVELOPMENT OF A PROGRAM FOR SELECTING THE INTERACTION
POTENTIAL OF PARTICLES IN THE CRYSTAL LATTICE OF METALS**

*Mariya Nikolaevna Semenova ^a, Yuriy Vladimirovich Bebikhov,
Ilya Anatolievich Yakushev, Alexander Sergeevich Semenov*

Ammosov North-Eastern Federal University, Mirny Polytechnic Institute, 5/12 Tikhonov st., 678170, Mirny, Russia
^a mariya_semyonova86@mail.ru

ABSTRACT

This work is devoted to the development of software for modeling and selecting the interaction potential between particles in the crystal structure of metals. The relevance of the work is due to the importance of an adequate description of the interatomic interaction in computer modeling of the structure, properties and behavior of metallic materials. There are many different models of interaction potentials, the choice of which for a specific metal system is a difficult task. The purpose of this work is to create a software package that allows you to automate the calculation, modeling and selection of the interaction potential between particles in metal crystal lattices. As a result, the following tasks were solved in the work: a theoretical description of the basics of interatomic interaction in metal crystal structures was made; an analysis of the existing paired potentials of particle interaction and their applicability for modeling the properties of metal crystals was performed; an algorithm and software were developed for calculating and visualizing the interaction potentials between particles in the crystal lattice of metals. It should be noted that the developed program implements the possibility of selecting and configuring parameters of various interaction potentials.

KEYWORDS

Interaction potential; crystal lattice; metal; equations of motion; atom; distance; energy.

**РАЗРАБОТКА ПРОГРАММЫ ДЛЯ ВЫБОРА ПОТЕНЦИАЛА
ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ЧАСТИЦ В КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКЕ МЕТАЛЛОВ**

*Мария Николаевна Семёнова ^a, Юрий Владимирович Бебихов,
Илья Анатольевич Якушев, Александр Сергеевич Семёнов*

Северо-Восточный федеральный университет им. М.К. Аммосова, Политехнический институт (филиал)
в г. Мирном, ул. Тихонова, 5/1, 678170, Мирный, Россия
^a mariya_semyonova86@mail.ru

АННОТАЦИЯ

Настоящая работа посвящена разработке программного обеспечения для моделирования и выбора потенциала взаимодействия между частицами в кристаллической структуре металлов. Актуальность работы обусловлена важностью адекватного описания межатомного взаимо-

действия при компьютерном моделировании структуры, свойств и поведения металлических материалов. Существует множество различных моделей потенциалов взаимодействия, выбор которых для конкретной металлической системы представляет собой сложную задачу. Целью данной работы является создание программного комплекса, позволяющего автоматизировать расчет, моделирование и выбор потенциала взаимодействия между частицами в кристаллических решетках металлов. В результате в работе были решены следующие задачи: произведено теоретическое описание основ межатомного взаимодействия в кристаллических структурах металлов; выполнен анализ существующих парных потенциалов взаимодействия частиц и их применимости для моделирования свойств металлических кристаллов; разработан алгоритм и программное обеспечение для вычисления и визуализации потенциалов взаимодействия между частицами в кристаллической решетке металлов. Отметим, что в разработанной программе реализована возможность выбора и настройки параметров различных потенциалов взаимодействия.

КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА

Потенциал взаимодействия; кристаллическая решетка; металл; уравнения движения; атом; расстояние; энергия.

Введение

Современные исследования в области физики твердого тела, материаловедения и молекулярной динамики во многом основываются на точном описании межатомного взаимодействия в кристаллических решетках [1–3].

Кристаллические тела (все металлы и металлические сплавы) характеризуются упорядоченным расположением атомов [4]. В металлах и металлических сплавах атомы находятся в узлах пространственных

кристаллических решеток [5]. В процессе кристаллизации металлов и сплавов могут образовываться кристаллические решетки разного типа [6]. Большинству металлов свойственно образование высокосимметричных решеток с плотной упаковкой атомов [7]. К основным типам кристаллических решеток металлов относятся: объемно-центрированная кубическая (ОЦК), гранецентрированная кубическая (ГЦК), гексагональная плотноупакованная (ГПУ). Их структура показана на рис. 1.

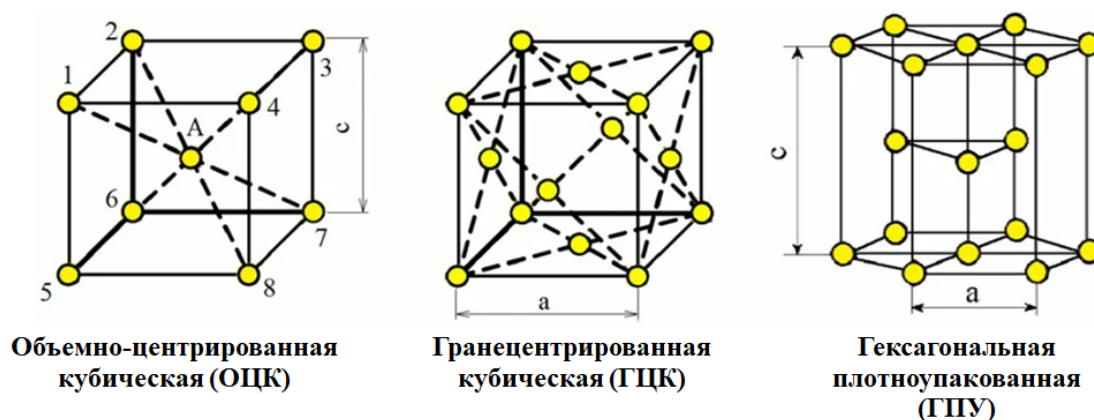


Рис. 1. Типы кристаллических решеток металлов

Fig. 1. Types of crystal lattices of metals

Адекватное моделирование потенциалов взаимодействия между частицами является ключевым фактором, определяющим достоверность результатов компьютерного моделирования структуры, свойств и поведения металлических материалов [8].

На сегодняшний день разработано множество различных моделей межатомного взаимодействия, таких как потенциал Леннарда-Джонса [9], потенциал Морзе [10], многочастичные EAM-потенциалы и другие. Выбор наиболее подходящего потенциала для конкретной металлической системы представляет собой нетривиальную задачу, требующую глубокого понимания физических процессов и тщательного анализа потенциальных функций.

Ручной подбор параметров потенциалов взаимодействия, а также их визуализация и сравнение являются трудоемкими и сложными процедурами. В связи с этим актуальной задачей является разработка специализированного программного обеспечения, которое позволит автоматизировать расчет, моделирование и выбор потенциалов взаимодействия между частицами в кристаллических решетках металлов.

Целью настоящей работы является разработать программное обеспечение для моделирования потенциала взаимодействия между частицами в кристаллической решетке металлов с возможностью выбора наиболее подходящего потенциала. В рамках достижения данной цели можно сформулировать следующие задачи: изучение основ теоретического описания межатомного взаимодействия в кристаллических структурах металлов; проведение анализа существующих потенциалов взаимодействия частиц и их применимости для моделирования свойств металлических кристаллов; разработка алгоритма и программного обеспечения для вычисления и визуализации потенциалов взаимодействия между частицами в кристаллической решетке металлов.

1. Краткая теоретическая часть

Математическая модель состоит из системы дифференциальных уравнений, их разностного аналога, потенциала межатомного взаимодействия, специфически определяемых начальных и граничных условий [11].

В основу метода молекулярной динамики положено модельное представление о молекулярной системе, являющейся многоатомной. В ней все атомы представлены материальными точками. В классическом случае их движение будет описываться уравнениями Ньютона [12], имеющими вид:

$$\begin{cases} m_i \frac{d\vec{v}_i}{dt} = \vec{F}_i + \vec{F}_i^{ext} \\ \frac{d\vec{r}_i}{dt} = \vec{v}_i \end{cases},$$

где m_i , \vec{v}_i , \vec{r}_i – масса, скорость и радиус-вектор соответственно; \vec{F}_i – сила взаимодействия с остальными частицами; \vec{F}_i^{ext} – сила взаимодействия с внешними полями, $i = 1 \dots N$; N – количество точечных частиц.

При моделировании необходимо рассчитать траектории огромного количества частиц, обеспечив как вычислительную эффективность, так и требования точности. Для этого применим алгоритм Верле в скоростной форме [13]:

$$\begin{cases} \vec{v}_*^{k+\frac{1}{2}} = \vec{v}^k \left(1 - \frac{\Delta t}{2}\right) + \frac{\vec{a}^k \Delta t}{2} \\ \vec{r}^{k+1} = \vec{r}^k + \vec{v}_*^{k+\frac{1}{2}} \Delta t \\ \vec{a}^{k+1} = -\frac{\text{grad}(U^{k+1})}{m} \\ \vec{v}_*^{k+\frac{1}{2}} = \frac{\vec{v}_*^{k+\frac{1}{2}} + \frac{\vec{a}^k \Delta t}{2}}{1 + \frac{\Delta t}{2}} \end{cases},$$

где верхний индекс k – номер шага по времени; U – потенциальная энергия взаимодействия системы.

Должны выполняться условия известности всех величин на момент времени t_k с переходом к следующему моменту времени $t_{k+1} = t_k + \Delta t$.

Наиболее часто взаимодействия частиц описываются парными потенциалами [14–16], когда взаимодействие двух частиц зависит только от их взаимного расположения и не зависит от положения каких-либо других частиц. Этот тип потенциалов позволяет на качественном уровне правильно описывать многие физические явления и свойства веществ.

2. Результаты исследования

Выбор потенциалов взаимодействия.

Для разработки программы для выбора потенциала взаимодействия частиц в кристаллической решетке металлов из вышеприведенных выберем два потенциала, а именно потенциал Морзе и потенциал Леннарда-Джонса [17]. Такой выбор связан с хорошей апробированностью данных потенциалов на кристаллических решетках реальных металлов и упорядоченных сплавов [18–21]. Коротко опишем наши выбранные потенциалы.

Потенциал Леннарда-Джонса – это полуэмпирический потенциал, который описывает межмолекулярное взаимодействие между двумя нейтральными атомами или молекулами. Он состоит из двух частей: отталкива-

ющая часть, которая описывает короткодействующее отталкивание из-за перекрытия электронных облаков; притягивающая часть, которая описывает длиннодействующее ван-дер-ваальсовое притяжение. Математическое выражение для потенциала Леннарда-Джонса имеет вид:

$$U(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right],$$

где r – расстояние между атомами; ϵ – глубина потенциальной ямы, характеризует силу притяжения; σ – расстояние, на котором потенциал равен нулю, характеризует размер атома.

Примерный вид потенциала Леннарда-Джонса показан на рис. 2.

Из потенциала Леннарда-Джонса можно получить дифференциальные уравнения, описывающие силы, действующие между частицами.

Сила взаимодействия будет равна:

$$F(r) = -\frac{dU(r)}{dr} = 24\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{13} - 2 \left(\frac{\sigma}{r} \right)^7 \right].$$

Ускорение частицы будут определяться:

$$a = \frac{F(r)}{m},$$

где m – масса частицы.

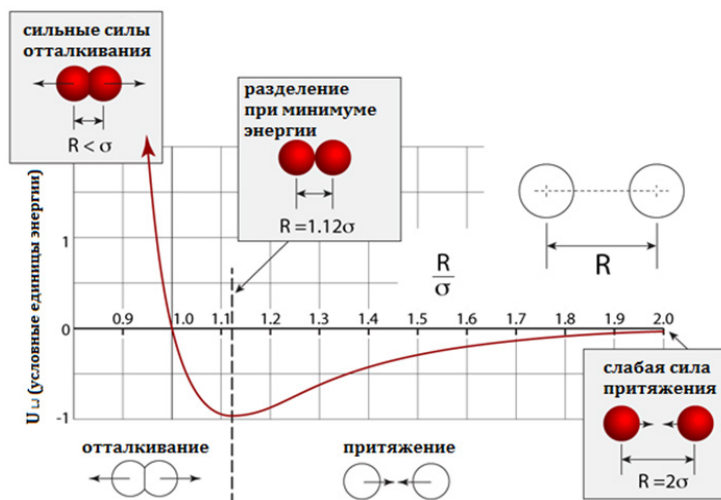


Рис. 2. Характерная зависимость для потенциала Леннарда-Джонса [22]

Fig. 2. A characteristic dependence for the Lennard-Jones potential

Основные преимущества этого потенциала заключаются в простоте функциональной формы, что упрощает вычисления в молекулярной динамике; наглядной физической интерпретации параметров ϵ и σ ; хорошем описании термодинамических свойств и фазовых переходов в простых металлах и инертных газах; возможности масштабирования параметров для моделирования различных атомных пар. Ограничения потенциала Леннарда-Джонса связаны с отсутствием учета многочастичных эффектов и электронной структуры; неточным описанием анизотропии и ангармоничности реальных межатомных связей; необходимости дополнительного учета экранирования и поляризации для более сложных систем.

Потенциал Морзе – это также полуэмпирический потенциал, используемый для описания межатомных или межмолекулярных взаимодействий. Он был предложен американским физиком Филипом Морзе в 1929 году. Математическое выражение для потенциала Морзе имеет вид:

$$U(r) = D_e [1 - e^{-\alpha(r-r_e)}]^2,$$

где r – расстояние между атомами; D_e – глубина потенциальной ямы; α – параметр, характеризующий крутизну потенциала; r_e – равновесное расстояние между атомами.

Примерный вид потенциала Морзе показан на рис. 3.

В отличие от потенциала Леннарда-Джонса потенциал Морзе лучше описывает химические связи, так как он учитывает асимметричный характер межатомных взаимодействий. Также важно отметить, что потенциал Морзе имеет ограниченную глубину потенциальной ямы. Это позволяет более точно моделировать процессы разрыва и образования химических связей.

Аналогично потенциалу Леннарда-Джонса, из потенциала Морзе можно получить дифференциальные уравнения, описывающие силы и ускорения частиц.

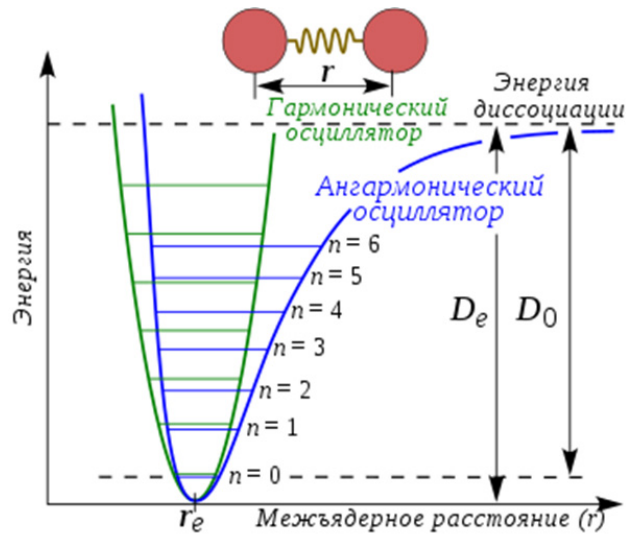


Рис. 3. Характерная зависимость для потенциала Морзе [23]

Fig. 3. A characteristic dependence for the Morse potential [23]

Сила взаимодействия будет равна:

$$F(r) = -\frac{dU(r)}{dr} = 2\alpha D_e (r-r_e) e^{-\alpha(r-r_e)} [1 - e^{-\alpha(r-r_e)}].$$

Ускорение частицы будут определяться:

$$a = \frac{F(r)}{m},$$

где m – масса частицы.

Основные особенности и преимущества потенциала Морзе заключаются в экспоненциальной форме, позволяющей более точно описывать ангармоничность реальных связей, особенно при больших деформациях; наличии трех свободных параметров (D , α , r_0), что дает большую гибкость в подгонке под конкретные материалы и системы; хорошей применимости для описания ковалентных и металлических связей, в дополнение к ван-дер-ваальсовым взаимодействиям; возможности моделирования процессов диссоциации и рекомбинации атомов/молекул. Ограничения потенциала Морзе характеризуются более сложной функциональной формой, что требует больших вычислительных затрат по сравнению с потенциалом

Леннарда-Джонса; необходимостью определения трех параметров для каждой пары атомов, что усложняет применение; ограниченностью применимости для систем с сильными многочастичными эффектами.

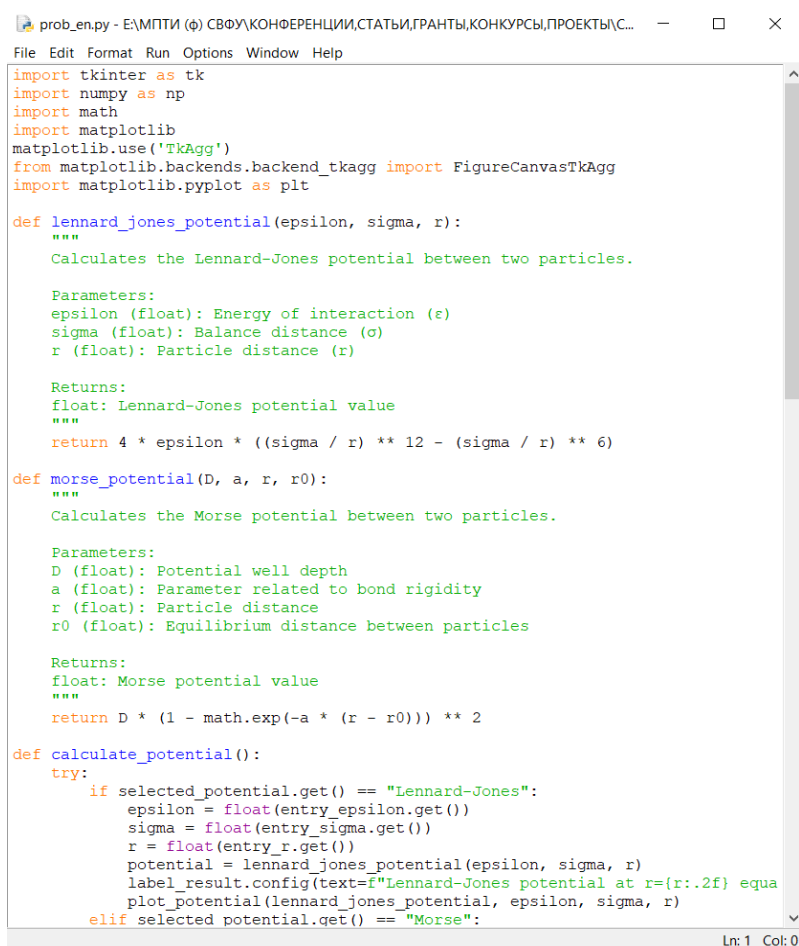
Разработка программы.

Для разработки программы моделирования и выбора потенциала взаимодействия между частицами в кристаллической структуре металлов был выбран язык программирования Python [24]. Для создания виджетов и визуализации использовались приложения Tkinter, Numpy, Matplotlib и др.

Вводятся уравнения для потенциалов и задаются их основные параметры. Создается рабочее окно для выбора потенциалов и введения требуемых характеристик. Создаются расчетные графики в зависимости от выбранного потенциала. Создаются и размещаются в окне программы виджеты.

Фрагмент листинга разработанной программы представлен на рис. 4.

На рис. 5 приведен внешний вид рабочего окна, открывающегося при инициализации приложения.



```

prob_en.py - Е:\МПТИ (Ф) СВФУ\КОНФЕРЕНЦИИ,СТАТЬИ,ГРАНТЫ,КОНКУРСЫ,ПРОЕКТЫ\С...
File Edit Format Run Options Window Help

import tkinter as tk
import numpy as np
import math
import matplotlib
matplotlib.use('TkAgg')
from matplotlib.backends.backend_tkagg import FigureCanvasTkAgg
import matplotlib.pyplot as plt

def lennard_jones_potential(epsilon, sigma, r):
    """
    Calculates the Lennard-Jones potential between two particles.

    Parameters:
    epsilon (float): Energy of interaction (ε)
    sigma (float): Balance distance (σ)
    r (float): Particle distance (r)

    Returns:
    float: Lennard-Jones potential value
    """
    return 4 * epsilon * ((sigma / r) ** 12 - (sigma / r) ** 6)

def morse_potential(D, a, r, r0):
    """
    Calculates the Morse potential between two particles.

    Parameters:
    D (float): Potential well depth
    a (float): Parameter related to bond rigidity
    r (float): Particle distance
    r0 (float): Equilibrium distance between particles

    Returns:
    float: Morse potential value
    """
    return D * (1 - math.exp(-a * (r - r0))) ** 2

def calculate_potential():
    try:
        if selected_potential.get() == "Lennard-Jones":
            epsilon = float(entry_epsilon.get())
            sigma = float(entry_sigma.get())
            r = float(entry_r.get())
            potential = lennard_jones_potential(epsilon, sigma, r)
            label_result.config(text=f"Lennard-Jones potential at r={r:.2f} equa
            plot_potential(lennard_jones_potential, epsilon, sigma, r)
        elif selected_potential.get() == "Morse":

```

Рис. 4. Фрагмент листинга программы моделирования и выбора потенциала взаимодействия

Fig. 4. A fragment of the listing of the program for the modeling and selection of the interaction potential

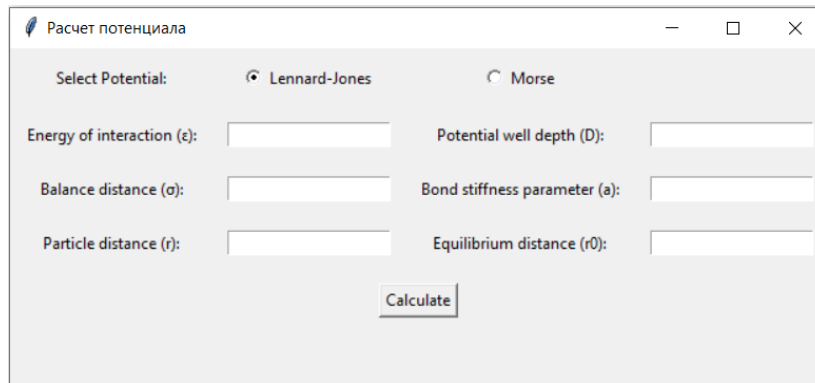


Рис. 5. Рабочее окно программы моделирования и выбора потенциала взаимодействия

Fig. 5. The working window of program for the modeling and selection of the interaction potential

В зависимости от выбранного потенциала в окно вводятся следующие исходные данные: для потенциала Леннарда-Джонса – энергия взаимодействия (ϵ), расстояние равновесия (σ), расстояние между частицами (r); для потенциала Морзе – глубина потенциальной ямы (D), параметр жесткости связи (a), равновесное расстояние между частицами (r_0).

Результаты моделирования.

При выборе потенциала и вводе параметров высчитывается и моделируется выбранный потенциал и отображается график. На рис. 6 показаны результаты моделирования потенциалов Леннарда-Джонса (a) и

Морзе (b) с абстрактными параметрами.

Графики в точности имитируют потенциалы взаимодействия частиц, что позволяет легко строить их для известных хорошо апробированных ГЦК металлов, таких как алюминий, серебро, золото, медь, ниобий, свинец, платина и др. На примере работы [25], где автор применил собственноручно разработанную методику для определения параметров потенциала Морзе ГЦК металлов, смоделируем графики потенциалов для меди (Cu) и алюминия (Al). Результаты показаны на рис. 7.

В окне параметров задаем значения для потенциала Морзе, указанные в табл. 1.

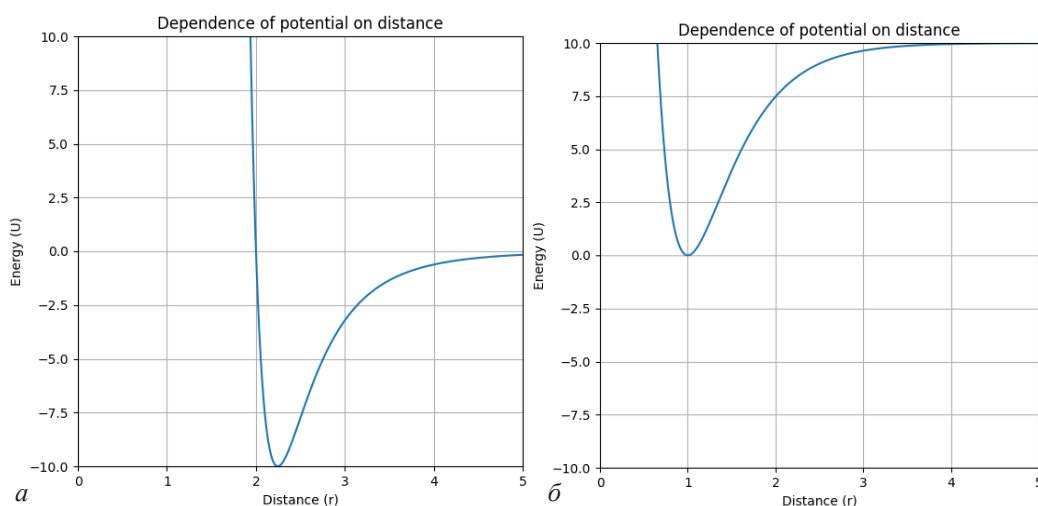


Рис. 6. Результаты моделирования: a – потенциал Леннарда-Джонса; b – потенциал Морзе

Fig. 6. Simulation results: a – Lennard-Jones potential; b – Morse potential

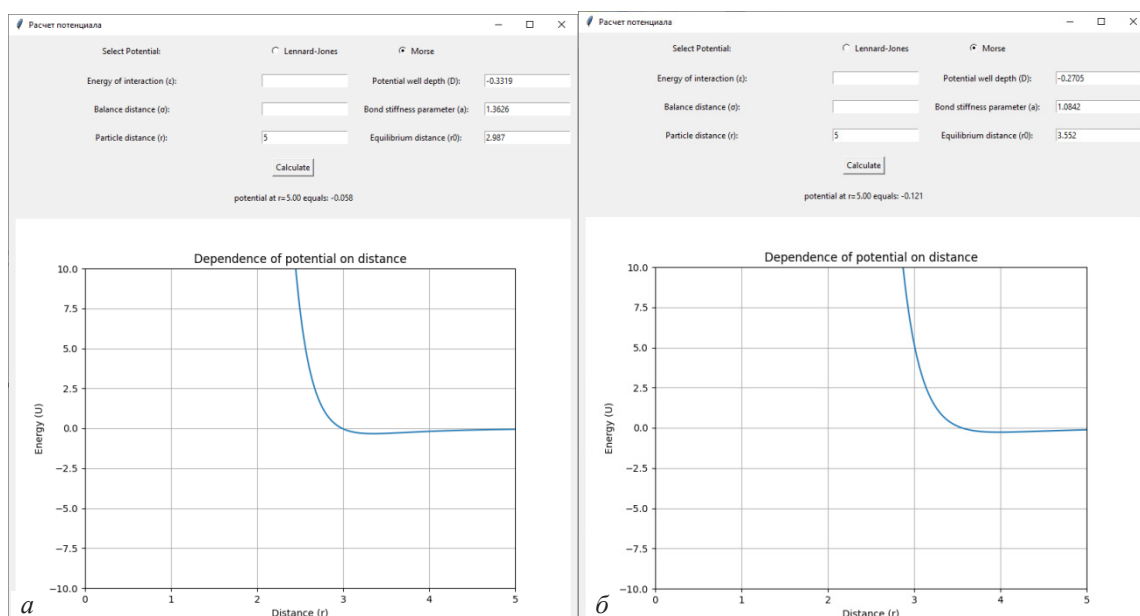


Рис. 7. Результаты моделирования потенциала Морзе для ГЦК металлов:
a – Cu; б – Al

Fig. 7. The results of modeling the Morse potential for FCC metals:
a – Cu; б – Al

Таблица 1. Параметры потенциала Морзе для меди и алюминия

Table 1. Morse potential parameters for Cu and Al

Металл / Metal	Параметры потенциала / Parameters of potential		
	$\alpha, \text{\AA}^{-1}$	D, эВ	$r_0, \text{\AA}$
Медь / Cu	1,3626	-0,3319	2,987
Алюминий / Al	1,0842	-0,2705	3,552

Для моделирования и вычисления величины потенциала используем одинаковое расстояние между частицами (дальнействие системы), равное $r = 5 \text{ \AA}$. В результате моделирования с указанными параметрами получаем величину потенциала для меди $U_{Cu} = -0,058 \text{ эВ}$, для алюминия $U_{Al} = -0,121 \text{ эВ}$.

Выводы

В заключение стоит отметить, что была разработана и апробирована программа моделирования и выбора потенциала взаимодействия между частицами в кристаллической структуре металлов. Актуальность работы

была обусловлена важностью адекватного описания межатомного взаимодействия при компьютерном моделировании структуры, свойств и поведения металлических материалов. В связи с тем, что существует множество различных моделей потенциалов взаимодействия в кристаллической структуре металлов, имеет смысл индивидуально осуществлять их выбор для конкретных систем. В результате в работе были решены следующие задачи: произведено теоретическое описание основ межатомного взаимодействия в кристаллических структурах металлов; выполнен анализ существующих

парных потенциалов взаимодействия частиц и их применимость для моделирования свойств металлических кристаллов; разработан алгоритм и программное обеспечение для вычисления и визуализации потенциалов взаимодействия между частицами в кристаллической решетке металлов. Отметим, что в разработанной программе реализована возможность выбора и настройки параметров различных потенциалов взаимодействия. Была проведена апробация на ГЦК металлах – меди (Cu) и алюминии (Al). Результаты моделирования по сравнению с работами других авторов показали погрешность, не превышающую 3%.

Благодарности / Acknowledgments

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда, грант 24-22-00092.

The research was carried out with the financial support of the Russian Science Foundation, project 24-22-00092.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Soshko O.I., Soshko V.O., Siminchenko I.P. Influence of lubricating-cooling technological media on metal destruction during cutting // *Journal of Mechanical Engineering*, 22(3), 57–62 (2019).
- Ghaffari M.A., Zhang Y., Xiao S. Molecular dynamics modeling and simulation of lubricant between sliding solids // *Journal of Micromechanics and Molecular Physics*, 2(2), 17500096 (2017).
- Kim B.W., Liu Ch., Yin H. Thermoelastic modeling of cubic lattices from granular materials to atomic crystals // *Journal of Applied Physics*, 135, 7 (2024).
- Sui Sh. Application prospect and preparation method of nanomaterials // *Journal of Physics: Conference Series*, 2608(1), 012034 (2023).
- Borisov S.V., Pervukhina N.V., Magarill S.A. The concentration of crystal structures in high-symmetry structural types (stencils) as a consequence of crystal dynamics // *Crystallography Reports*, 67(2), 150–155 (2022).
- Vitebsky I.M., Lavrinenko N.M. Symmetry and macroscopic manifestations of a long-range spin order of non-orientational type in crystals // *Ferroelectrics*, 161(1), 311–319 (1994).
- Burt M. A combined research platform of structural morphology, dealing with the ordered 3d space // *Symmetry: Art and Science*, 154–160 (2022).
- Bulyarskiy S.V., Dudin A.A., L'vov P.E., Grishin T.S., Rudakov G.A., Gusarov G.G. Interaction of a metallic catalyst with the barrier layer material during high-temperature formation of nickel nanoparticles // *Inorganic Materials*, 59(3), 235–241 (2023).
- Jones J.E. On the Determination of Molecular Fields // *Proceedings of the Royal Society of London*, 106(738), 463–477 (1924).
- Morse P.M. Diatomic molecules according to the wave mechanics. II. Vibrational levels // *Phys. Rev.*, 34(1), 57–64 (1929).
- Semenov, A.S., Semenova, M.N., Bebikhov, Y.V., Khazimullin, M.V. Simulation of Molecular-Dynamics Processes in 2D and 3D Crystalline Structures // *Technical Physics*, 67(6), 538–542 (2022).
- Shishkina E.L., Sitnik S.M. Fractional differential equations with applications to mathematical physics. London: Academic Press. 2020. P. 592.
- Verlet L. Computer “Experiments” on Classical Fluids. I. Thermodynamical Properties of Lennard-Jones Molecules // *Phys. Rev.*, 159, 98–103 (1967).
- Behjatian A., Walker-Gibbons R., Krishnan M., Schekochihin A.A. Nonmonotonic pair potentials in the interaction of like-charged objects in solution // *Langmuir*, 38(2), 786–800 (2022).
- Wang W., Wu Zh., Dietschreit J.C.B., Gómez-Bombarelli R. Learning pair potentials using differentiable simulations // *Journal of Chemical Physics*, 158, 4 (2023).
- Sikorska C., Gaston N. Modified Lennard-Jones potentials for nanoscale atoms // *Journal of Computational Chemistry*, 41(22), 1985–2000 (2020).
- Semenov A., Bebikhov Yu., Semenova M., Yakushev I. Development of a program for mathematical modeling of molecular dynamics processes // *E3S Web of Conferences*, 371, 03077 (2023).
- Cherednichenko A.I., Bebikhov Y.V., Semenov A.S., Starostenkov M.D., Korznikova E.A., Rakhmatullina Z.G., Zakharov P.V. Localized modes in platinum aluminides // *Journal of Physics: Conference Series*, 2697(1), 012050 (2024).
- Poletaev G., Bebikhov Yu., Semenov A. Molecular dynamics study of the formation of the nanocrystalline structure in nickel nanoparticles during rapid cooling from the melt // *Materials Chemistry and Physics*, 309, 128358 (2023).
- Poletaev G.M., Bebikhov Yu.V., Semenov A.S., Sitnikov A.A. Molecular dynamics investigation of the effect of the interface orientation on the intensity of titanium dissolution in crystalline and amorphous

aluminum // Journal of Experimental and Theoretical Physics, 136(4), 477–483 (2023).

21. Poletaev G.M., Bebikhov Y.V., Semenov A.S., Sitnikov A.A., Yakovlev V.I. Molecular dynamics study of the dissolution of titanium nanoparticles in aluminum // Materials Physics and Mechanics, 51(5), 9–15 (2023).

22. LaminArts.ru Lennard Jones [Electronic resource]. Available at: <https://laminarts.ru/lennard/djones/> (date of access: 29.06.2024).

23. Presentation on theme: Vibrational Spectroscopy I [Electronic resource]. Available at: <https://slideplayer.com/slide/4917297/> (date of access: 29.06.2024).

24. The Lennard-Jones Interaction Potential [Electronic resource]. Available at: <https://scipython.com/book2/chapter-3-simple-plotting/problems/p33/the-lennard-jones-interaction-potential/> (date of access: 29.06.2024).

25. Iskakov B.M. A method for calculating migration energy of vacancies in fcc metals // Inorganic Materials: Applied Research, 3(2), 173–178 (2012).