

# ВЫБОР ОПТИМАЛЬНЫХ ПАРАМЕТРОВ ДЛЯ ПОСТРОЕНИЯ МАКСИМАЛЬНО ТОЧНОЙ МОДЕЛИ ОЦК-ЖЕЛЕЗА

*А.В. Урсаева, Г.Е. Рузанова, А.А. Мирзоев*

С помощью программного пакета WIEN2k проведено первопринципное моделирование равновесной структуры и свойств ОЦК-железа. Получены оптимальные параметры, позволяющие построить наиболее точную модель.

*Ключевые слова: первопринципное моделирование,  $\alpha$ -железо.*

## Введение

Железо является одним из самых распространенных и используемых металлов в современном мире. Оно лежит в основе важнейших конструкционных материалов, таких как стали и чугуны. Благодаря уникальным ферромагнитным свойствам, сплавы железа имеют широкое применение в электротехнике. Поэтому повышение достоверности и точности прогнозирования структуры и свойств как чистого железа, так и сплавов на его основе является насущной задачей. Первопринципное моделирование ОЦК-железа проводилось неоднократно, существует множество работ по этой теме. В большинстве работ отсутствует объяснение причины выбора тех или иных значений параметров моделирования. Задача выбора оптимальных параметров системы для моделирования электронных и магнитных свойств является чрезвычайно важной, поскольку от них зависит точность полученных результатов. В связи с этим настоящая работа посвящена выбору оптимальных параметров для построения модели ОЦК-железа в программном пакете WIEN2k, обеспечивающей точность расчета полной энергии не хуже 1 мЯу.

## Метод

Расчет электронной структуры проведен методом линейных присоединенных плоских волн (LAPW) с учетом обобщенного градиентного приближения (GGA). Это один из наиболее мощных методов в рамках теории функционала плотности (DFT), используемых в настоящее время. Он позволяет достигать приемлемого совпадения экспериментальных и теоретических данных при определении не только собственных значений энергии, но и параметров кристаллической решетки. Этот метод реализован в виде комплекса программ WIEN2k, с помощью которого проводились все необходимые вычисления.

В методе LAPW [1] волновые функции, зарядовая плотность и потенциал разлагаются по сферическим гармоникам в неперекрывающихся атомных сферах радиуса  $R_{mt}$  и по плоским волнам в остальной области элементарной ячейки. Состояние системы рассчитывается в приближении сферического потенциала; предполагается, что оно имеет сферически-симметричную зарядовую плотность, почти полностью заключенную внутри *muffin-tin* сферы радиуса  $R_{mt}$ . Волновые функции в междоузлии раскладываются по плоским волнам с вектором обрезания  $K_{max}$ . Эта величина является одним из основных параметров, влияющих на точность, так как она определяет число базисных функций (размер матриц). Данный параметр определяется из задаваемого произведения  $R_{mt}K_{max}$  при фиксированном  $R_{mt}$ . Еще одним немаловажным параметром является количество  $k$ -точек,  $N_k$  - величина, характеризующая дискретную сетку, используемую для численного интегрирования по зоне Бриллюэна. Чем больше это значение, тем больше точек учитывается при интегрировании, тем выше точность. Однако это значение нельзя бесконечно увеличивать, нужно остановиться, когда значения энергии стабилизируются.

В данной работе проведены вычисления, с помощью которых определены оптимальные параметры, позволяющие обеспечить высокую точность расчетов с приемлемыми затратами компьютерных ресурсов. В первую очередь была выполнена оптимизация количества  $k$ -точек, так как этот параметр не зависит от других. Были взяты значения, задаваемые по умолчанию:  $a = 5,41$  а.у.,  $R_{mt} = 1,9$  а.у.,  $E_{cut} = -6$  Ry,  $R_{mt}K_{max} = 7,0$ . На рис. 1 представлен график зависимости энергии системы от количества  $k$ -точек.

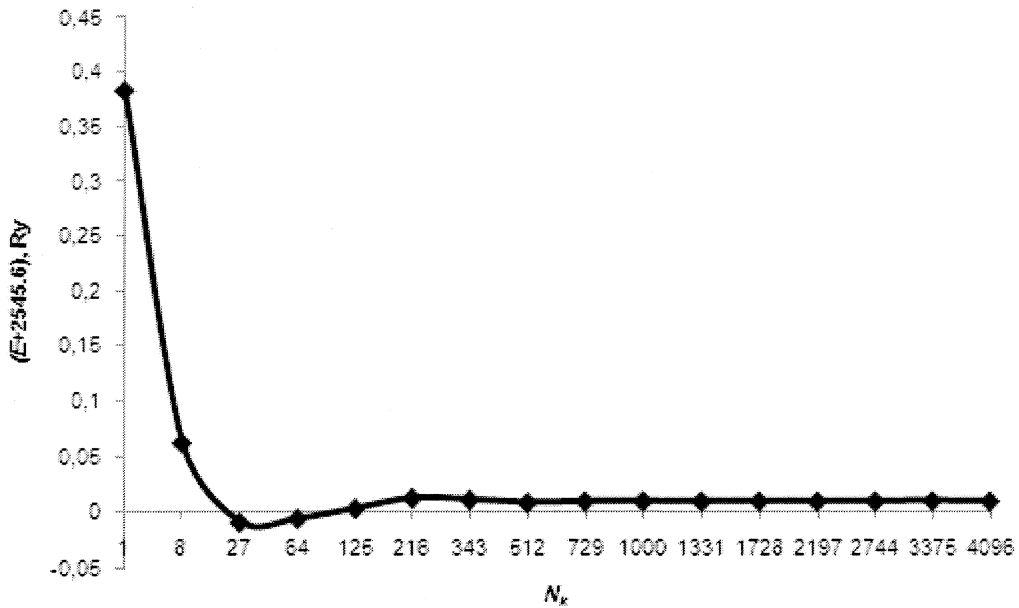


Рис. 1. Зависимость энергии системы от количества  $k$ -точек

Как видно из рис. 1, увеличение  $N_k$  выше 512 не приводит к изменению величины полной энергии, следовательно, оптимальным значением количества  $k$ -точек является  $N_k = 512$ .

После выбора количества  $k$ -точек был оптимизирован параметр  $R_{mt}K_{max}$ , значение которого контролирует сходимость. Для этого были введены следующие параметры:  $a = 5,41$  а.е.,  $R_{mt} = 1,9$  а.е.,  $E_{cut} = -6 Ry$ ,  $N_k = 512$ . Из графика зависимости энергии системы от значения  $R_{mt}K_{max}$  (рис. 2) видно, что при значении  $R_{mt}K_{max} > 9,5$  энергия системы практически не изменяется, поэтому оптимальным значением данного параметра является  $R_{mt}K_{max} = 9,5$ .

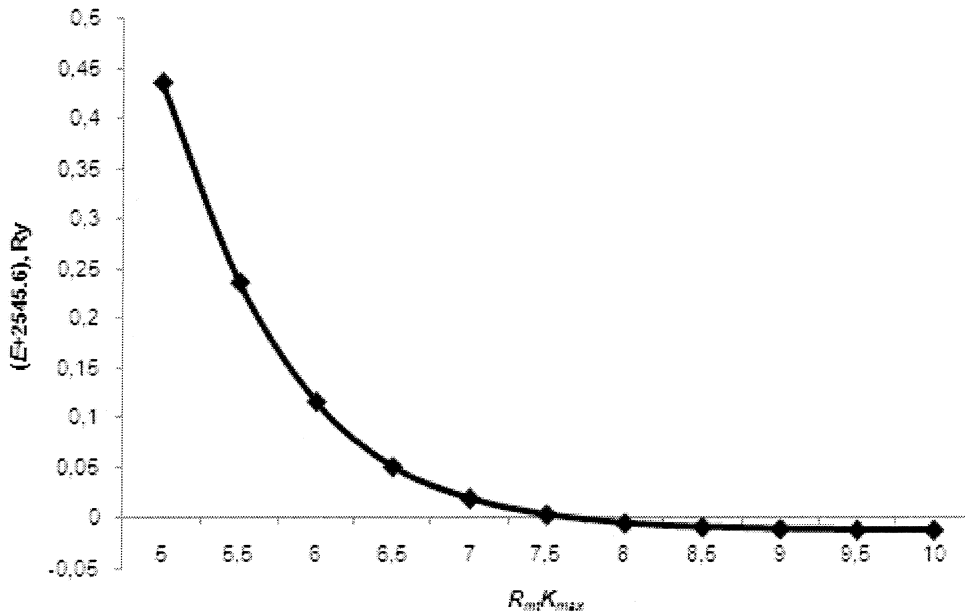


Рис. 2. Зависимость энергии системы от  $R_{mt}K_{max}$

В большинстве работ отсутствует объяснение причины выбора того или иного значения параметра  $R_{mt}$ . Считается, что наиболее важной характеристикой является параметр  $R_{mt}K_{max}$ . Необходимо было понять, из каких же предположений нужно брать тот или иной  $R_{mt}$ . Для этого были получены зависимости полной энергии системы и магнитного момента от  $R_{mt}$ . Для расчетов введены следующие параметры:  $a = 5,41$  а.е.,  $R_{mt}K_{max} = 9,5$ ,  $E_{cut} = -7$  Ry,  $N_k = 512$ . Результаты представлены в виде графиков (рис. 3 и 4).

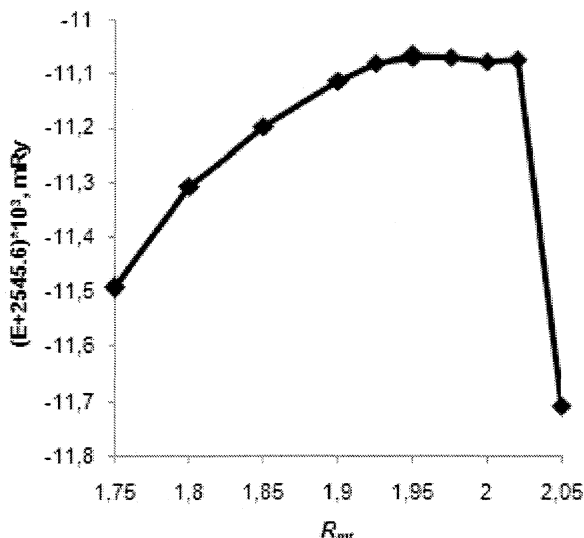


Рис. 3. Зависимость энергии системы от  $R_{mt}$  при фиксированном  $R_{mt}K_{max} = 9,5$

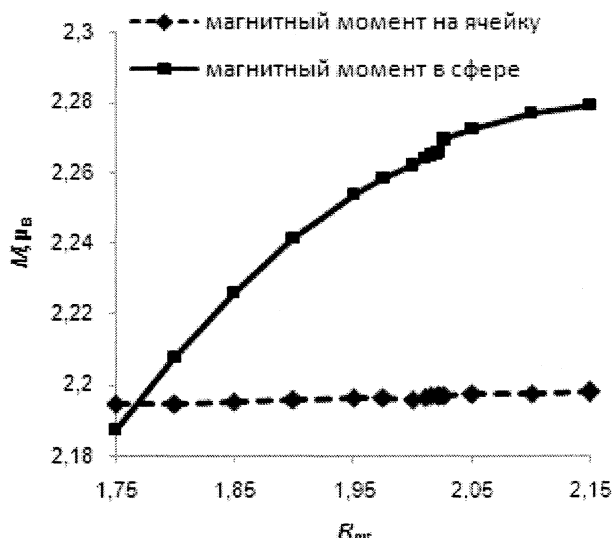


Рис. 4. Зависимость магнитного момента системы от  $R_{mt}$  при фиксированном  $R_{mt}K_{max} = 9,5$

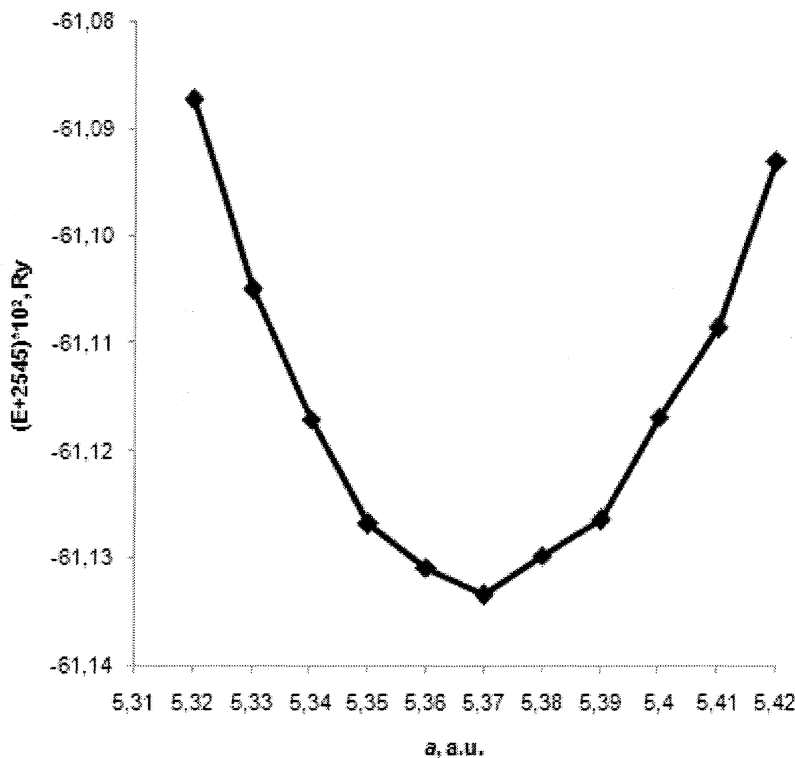


Рис. 5. Зависимость энергии системы от параметра решетки

Из рис. 3 видно, что на интервале  $R_{mt} = 1,85...2,02$  энергия системы изменяется плавно, а в точке 2,02 происходит резкий скачок в пределах 1 мРy. В этой же точке происходит скачок магнитного момента (рис. 4). Таким образом, наиболее оптимальным является значение параметра  $R_{mt} = 1,85...2,02$ .

При полученных значениях параметров проведена серия расчетов, позволяющая определить параметр решетки равновесной структуры ОЦК-железа (рис. 5). Как видно из рис. 5, значение параметра  $a = 5,37$  а.у. является равновесным. Данной равновесной структуре соответствует магнитный момент  $M = 2,17 \mu_B$ .

В таблице приведено сравнение полученных результатов с экспериментальными и с результатами, представленными в других работах.

Таблица

Сравнение полученных результатов

	$R_{mt}$ , а.у.	$R_{mt}K_{max}$	$E_{cut}$ , Ry	$N_k$	$a$ , а.у.	$M$ , $\mu_B$
[2]	2.2	9.0	—	8000	5.365	2.17
[3]	2.1	9.0	-7	165	5.33	2.2
Данная работа	2	9.5	-7	512	5.37	2.17
Эксперимент	—	—	—	—	5.4169	2.22

### Заключение

Таким образом, в ходе данной работы показано, что оптимальным параметрам для получения максимально точных результатов соответствуют следующие значения:

- количество k-точек  $N_k = 512$ ,
- параметр, контролирующий сходимость,  $R_{mt}K_{max} = 9,5$ ,
- радиус атомной сферы  $R_{mt} = 1,85...2,02$ .

При данном выборе параметров обеспечивается наилучшая согласованность с экспериментом по равновесному параметру решетки при высокой точности определения магнитного момента.

### Литература

1. Cottenier, S. Density Functional Theory and the family of (L)APW-methods: a step-by-step introduction/ S. Cottenier, 2004.
2. Herper, H.C. *Ab initio* full-potential study of the structural and magnetic phase stability of iron/ H.C. Herper, E. Hoffmann, P. Entel // Phys. Rev. B. - 1999. - V. 60. - P. 3839.
3. Iglesias, R. *Ab initio* studies on the magnetic phase stability of iron/ R. Iglesias, S.L. Palacios// Acta Materialia. - 2007. - V. 55. - P. 5123.

Поступила в редакцию 3 февраля 2010 г.

## SELECTION OF OPTIMAL PARAMETERS FOR FORMATION THE MOST ACCURATE MODEL OF BCC IRON

First-principles modeling of the equilibrium structure and properties of bcc iron are carried out by WIEN2k code. Optimal parameters that allow forming the most accurate model are obtained.

*Keywords: first-principles modeling, bcc iron.*

**Ursaeva Anastasia Vladimirovna** - student of South Ural State University.

**Урсаева Анастасия Владимировна** - студентка, Южно-Уральский государственный университет.

e-mail: [ursaeva@physics.susu.ac.ru](mailto:ursaeva@physics.susu.ac.ru)

**Ruzanova Galina Evgenyevna** - student of South Ural State University.

**Рузанова Галина Евгеньевна** - студентка, Южно-Уральский государственный университет.

e-mail: [ruzanova@physics.susu.ac.ru](mailto:ruzanova@physics.susu.ac.ru)

**Mirzoev Aleksandr Aminulaevich** - Dr.Sc. (Physics and Mathematics), Professor, General and Theoretical Physics Department, South Ural State University.

**Мирзоев Александр Аминулаевич** - профессор, доктор физико-математических наук, кафедры общей и теоретической физики, Южно-Уральский государственный университет.

e-mail: [mirzoev@physics.susu.ac.ru](mailto:mirzoev@physics.susu.ac.ru)