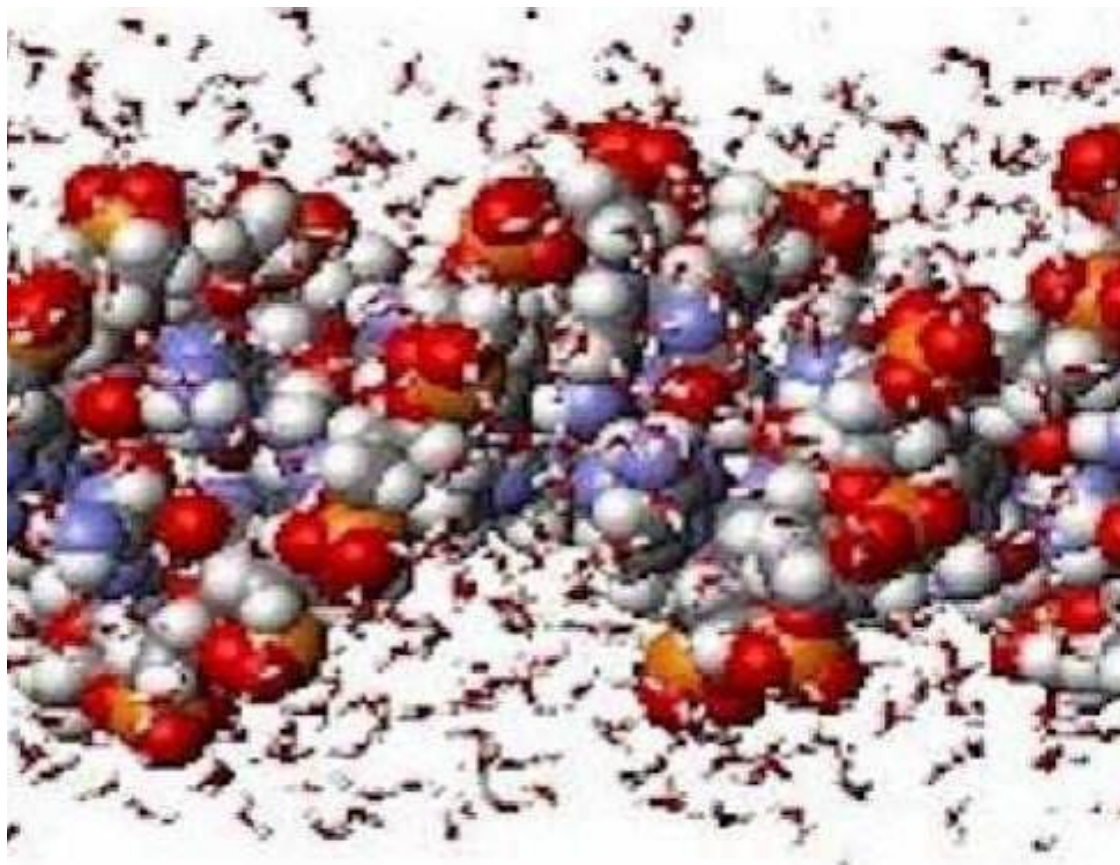


Атомистическое моделирование наноструктур и материалов



Описание курса

Курс предназначен для студентов старших курсов, заинтересованных в понимании физических и химических свойств молекул, наносистем и конденсированных сред. Излагаются основные принципы и методы, использованные при разработке программного обеспечения, (например HyperChem, Gamess, [Accelrys Materials Studio](#), [Moldy](#), [Gaussian](#), [Gulp](#), [Quantum Espresso](#), [Abinit](#)).

Основной целью этих программных комплексов является вычисление электронной структуры, на которой базируются различные свойства материалов.

Рассмотрены физические *модели межатомных сил* от парного потенциала Леннарда-Джонса до **последовательного многоэлектронного квантовомеханического решения.**

Требования курса

Материал курса является самостоятельным, но необходимо более раннее освоение [квантовой механики, статистической физики](#).

Необходимой базой являются знание основ квантовой механики и физики конденсированного вещества (на уровне 2-х томника Ашкрофт и Мерлин), например, обратное пространство решетки, теория зон, фононов, оценки электронных свойств структуры.

Чтобы понять материал из рекомендуемых ссылок, полезно некоторое знание более продвинутых понятий, таких как идеи квазичастиц и приближения случайной фазы.

Знание программирования необходимо только на элементарном уровне. Однако, важен доступ к компьютеру и к интернет сети.

Желательна наличие ряда специальных программ.

[Студентам будет необходимо установить на компьютере некоторые необходимые программы.](#)

Домашняя работа и заключительный проект

Курс будет включать вычислительные задания (ДЗ) и возможно выполнение самостоятельного проекта, связанного с НИРСом или практикой.

Темы для выполнении ДЗ:

- *использование* потенциалов для вычисления термодинамических свойств;
- *Ab-initio* моделирование и вычисление электронных свойств и зонной структуры веществ;
- *молекулярная динамика* систем (включая нанокристаллы);
- *использование* вычисленных значений энергий для Монте-Карло моделирования с целью исследования адсорбции Н на металлических поверхностях.

Отдельный проект выполняется в течение 1-2 месяцев. Содержание проекта должно быть непосредственно связано с курсом, но может быть связано с Вашим исследованием, если есть общие элементы. Можно решить задачу из литературы с известным решением.

В проекте должен содержать вычислительный компонент, отчет на 6 страниц и требуется устное представление.

Все ДЗ должно быть представлено в электронном формате с приложениями всех входных, выходных данных, которые использовались. Также необходимо сопоставление с любыми ссылками, из использованной литературы, для оценки или сравнения Ваших результатов.

Современная зарубежная литература

1. *Electronic structure of materials*, [A. P. Sutton](#)
2. *Methods of Electronic Structure Calculations*, [M. Springborg](#)
3. *Electronic structure: Basic theory & practical methods*, [R. M. Martin](#)
4. *Interatomic Forces in Condensed Matter*, [M. Finnis](#)
5. *Atomic and Electronic Structure of Solids*, [E. Kaxiras](#)
6. *Essentials of Computational Chemistry*, [C.J. Cramer](#)
7. *Computational Physics*, [J.M. Thijsen](#)

ПРОГРАММА

Введение

Квантовая механика (уравнение Шредингера, Борна-Опенгеймера приближение, вариационный принцип и проблема собственного значения матриц, электронный спин, спин-орбитали, теория молекулярных орбиталей, теория валентных связей, проблема многих тел).

Приближение Хартри-Фока, теория среднего поля, плотность заряда, псевдопотенциалы, решение уравнений Х-Ф, выбора базисных комплектов, корреляции, теории возмущений.

Теория функционала плотности, уравнения Коха-Шама, функционалы обменных корреляций, метод псевдопотенциала плоских волн, приближения LDA/GGA.

Периодичность и структура зон, применения к кристаллическим структурам и предсказание структур конденсированных систем, вычисления ширины запрещенной зоны, вычисления методом DFT при конечных температурах.

Полуэмпирические приближения

Энергетика и структуры при эмпирических потенциалах, парных потенциалах, псевдопотенциалов, кластерные вычисления.

Молекулярная динамика, MD Car-Parrinello, MD ab-initio.

Статистическая термодинамика и метод Монте-Карло, применение метода MC, базирующегося на данных ab-initio, к адсорбции.

Ab-initio термодинамика и предсказание структуры.

Пространственные методы укрупненных ящиков, ускоренный метод MD, кинетика методом MC, мезомасштабные модели.

Темы выделенные синим шрифтом предлагаются для написания рефератов.

Атомистическое строение вещества

"Если при некотором катаклизме все научные знания оказались бы разрушены, и только одно предложение можно было бы передать следующему поколению существ, какое послание содержало бы наибольшую информации в наименьшем количестве слов?"

Я полагаю, что это - атомная гипотеза, то, что все вещи состоят из атомов - небольших частиц, которые перемещаются в вечном движении, притягивая друг друга, когда они находятся обособленно на небольшом расстоянии, но отталкиваются после сжатия друг к другу. В этом одном предложении можно увидеть огромное количество информации о мире, если только у Вас есть немного воображения и Вы немного поразмышляете."

Ричард Фейнман

Введение в Атомистическое

Моделирование


Атомистическое моделирование не новый предмет. Это широко используется в промышленности и научных исследованиях.

У осуществляемой в США программы *ASCI* (Advanced Simulation Computing Initiative - *Продвинутая Инициатива Вычислительного Моделирования*), связанная с надежностью ядерного оружия, присутствует большой раздел атомистического моделирования.

Он включает все аспекты многомасштабного моделирования материалов: старение плутония, коррозии сплавов, и т.д.,


Программа «Радиационные смещения»: данные о структуре дефектов, радиационном воздействии и ресурсе материалов (MC + MD), воспламенение, начало реакций синтеза и деления, и т.д.

With Nuclear Experiments



- Will it work as designed?
- Is the simulation good enough to risk the cost of a nuclear experiment?

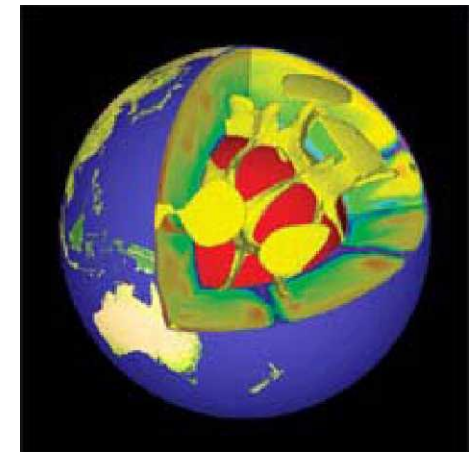
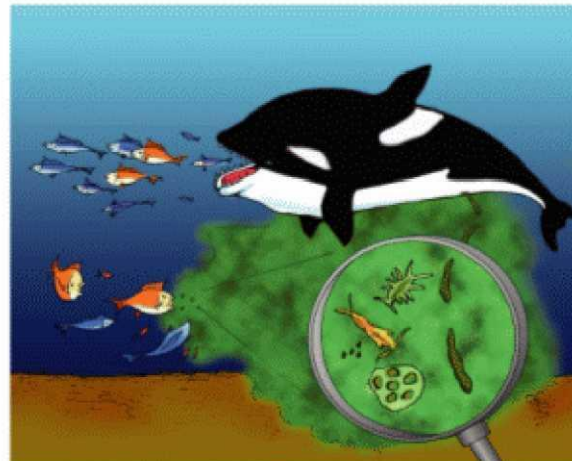
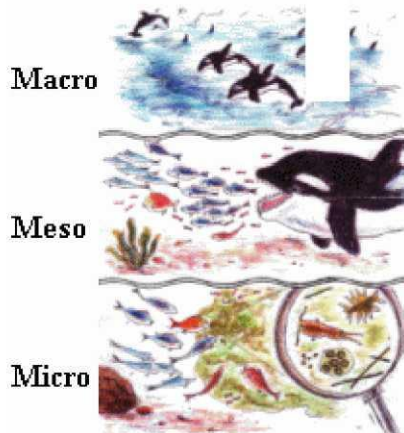
Without Nuclear Experiments



- Will it continue to work as it ages?
- Is the simulation adequate for making decisions affecting national security?

Программа «Симулятор Земли»

Моделирование экологических процессов (изменение климата, и т.д.)



Огромные ресурсы инвестируются в вычисления, связанные с проблемами охраны окружающей среды.

Ab-initio вычисления:
корка и мантия
Земли (большие
давления – сотни
ГПа)

Ядро земли

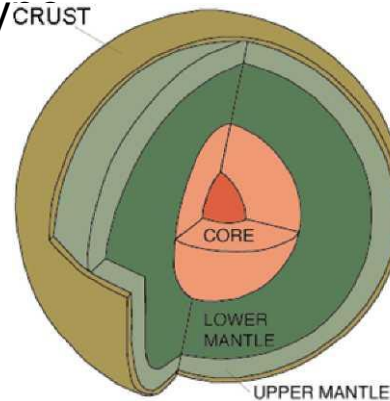
Моделирование используется , когда **эксперимент** является невозможным, трудным или дорогим, например:

Свойства ядра земли: состав, фазы и их свойства вещества ядра и мантии Земли.

Осуществление экспериментов при 300 Гпа крайне затруднительно. Кроме того, нельзя управлять температурой.

Много исследователей работает в области вычислительной квантовой механикой над проблемой предсказания свойств фаз вещества при высоком давлении и температу

[Dario Alfe](#)



Диаграммы фаз высокого давления

[letters to nature](#)

The melting curve of iron at the pressures of the Earth's core from *ab initio* calculations

O. Alfe, M. J. Gillan & G. D. Price*

* Research School of Geological and Geophysical Sciences, Liirkbeck College and

University College London, Gower Street, London WC1E 6BT, UK † Physics and Astronomy Department, University College London, Gower Street, London WC1E 3JL, UK

[Nature 401, 462-464 \(30 September 1999\)](#)

The solid inner core of the Earth and the liquid outer core consist mainly of iron, so that knowledge of the high-pressure thermodynamic properties of iron is important for understanding the Earth's deep interior. An accurate knowledge of the melting properties of iron is particularly important, as the temperature

is ...

Состав, фазы и свойства вещества мантии Земли.

Эксперименты не могут быть проведены при высоком давлении (~300 ГПа) и с изменяемой температурой.

Оценка тепловых свойств (теплопроводности, теплоемкости) .

Оптимизация и исследование электрических и магнитных свойств.

Прогнозируемое развитие нанопизики, нанохимии

Разделим систему на отдельные области:

Полное квантовое рассмотрение всех атомов в только пределах *активной группы*;

Отдаленные промежуточные атомы взаимодействуют через потенциалы, основанные на MD или других классических представлениях;

Самые удаленные атомы можно рассматривать как единую сплошную среду через согласованное нормализованное классическое взаимодействие.

Проблемы и направления для исследований:

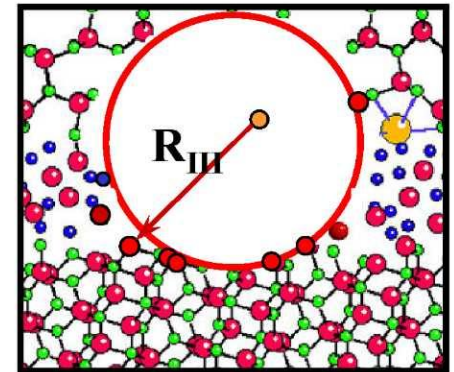
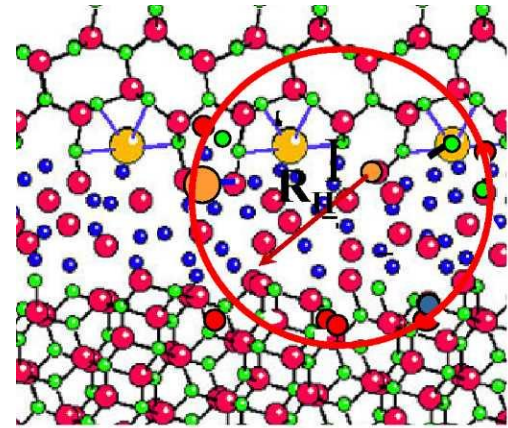
Математически строгое разделение шкалы расстояний;

Хорошо определенные меры точности моделей;

Причины ошибок;

Установление связи со строго коррелированными волновыми функциями активной группы атомов;

Физическое мотивированное математическое описание, связывающее квантовые и классические области.



Некоторые проблемы, связанные с мультимасштабным моделированием

Шкала длины и временная шкала: например, долговременное моделирование известным методом MD запрещено даже для маленьких систем, длительное моделирование подразумевает большую расчетную область или улучшенные граничные условия, чтобы избежать эффекта конечного размера.

Проблема редких событий

Сильно коррелированные явления

Высокая размерность задач

Нехватка методов для определения количественных ошибок и ускорения расчетов

Дизайн Материалов :

Вопрос о влиянии молекулярной структуры на макроскопические механические или электронные свойства

Оптимизация под заданные свойства

Алгоритмы и последовательное сцепление с моделями в более грубых шкалах расстояний

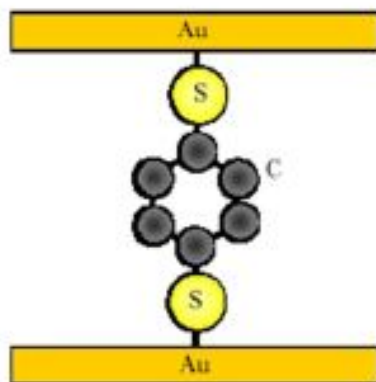
Квантовое описание ↔ классическое описание ↔ эффективная непрерывная среда

Многомасштабность ↔ Мультиуровневость/точность энергетической шкалы

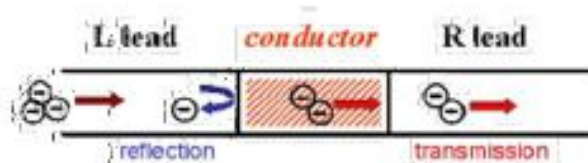
**Некоторые примеры
моделирования и сравнение с
экспериментом**

Интегрированный многомасштабный подход к вычислению характеристик молекулярных электронных приборов

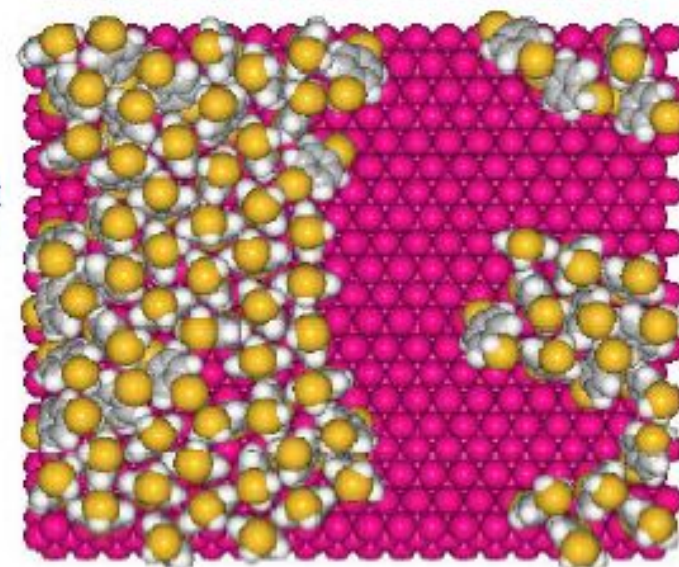
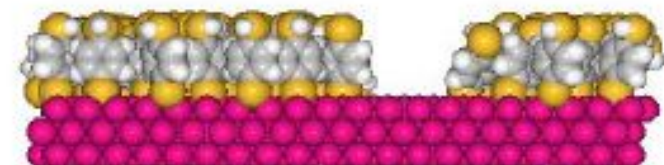
- Develop theory, algorithms & software to understand, and eventually to design, self-assembled molecular electronic devices.



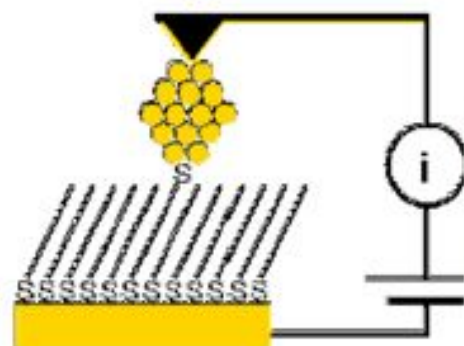
Schematic of BDT molecule attached to gold electrodes



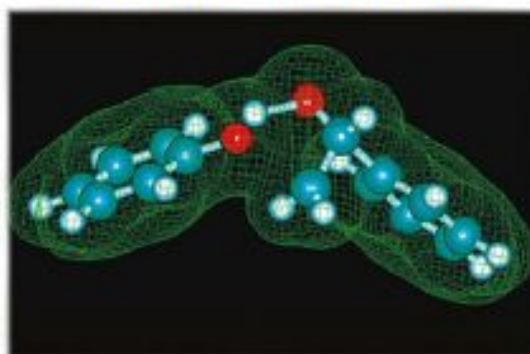
Geometry of a typical quantum conductance calculation. Electrons traveling from the left lead can be reflected or transmitted on the contact region. Similarly, the electrons can be reflected at the conductor.



BDT molecules adsorbed on the (111) surface of gold. Top: side view; bottom: view from above surface.



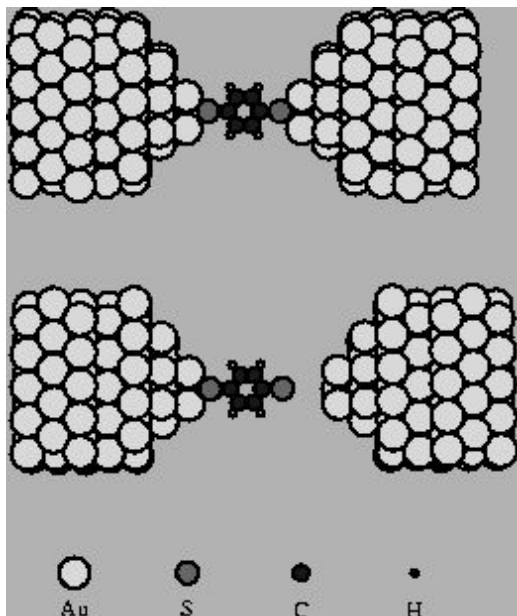
Schematic of the Cui et al. experiment



[R. Harrison](#)

[P. T. Cummings & Y. Leng](#)

Проводимость BDT

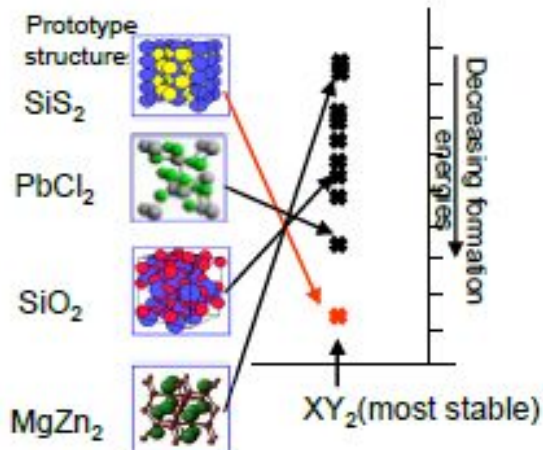


С помощью T- матричного формализма проведено исследование проводимости для с молекулами 1,4 benzene -dithionate BDT. Подобные эксперименты были недавно проведены [3]. Молекула BDT состоит из молекулы бензола с атомами серы, замещающими атомы водорода в положениях 1 и 4. Действие атомов серы, если они связаны с атомами золота, действуют подобно ножницам обрезающих связь. В рамках моделирования вычислена проводимость конфигураций BDT, показанных на рис. 2. Проводники из золота имеют ориентацию в направлении (111). Присоединяющиеся к молекуле BDT кластеры золота формируют тонкий наконечник проводника. Экспериментально было найдено, что атомы серы предпочтительно связываются с вакансионными узлами, которые сформировались на поверхности кластера золота. Соответственно, в рамках данного моделирования, молекула BDT присоединена к вакансионному узлу на каждом конце

Сила связи между молекулой и поверхностью золота играет важную роль в определении характеристик передачи MBT BDT. Изолированная молекула BDT имеет дискретный набор МО. Вычисленные значения энергии самой верхней занятой молекулярной орбитали (НОМО) приблизительно равно -10.5 eV, и самой низкой пустой молекулярной орбитали (LUMO) приблизительно -8.2 eV. При соединении молекулы с проводниками эти уровни становятся частью континуума энергетических состояний, которые существуют в пределах металлического резервуара. В состояниях с прочными связями эти МО могут стать значительно изменяться, как их химическая природа становится смешанной с поверхностными состояниями золотых атомов. Для более слабых связей МО сохраняют вид, характерный для изолированной молекулы.

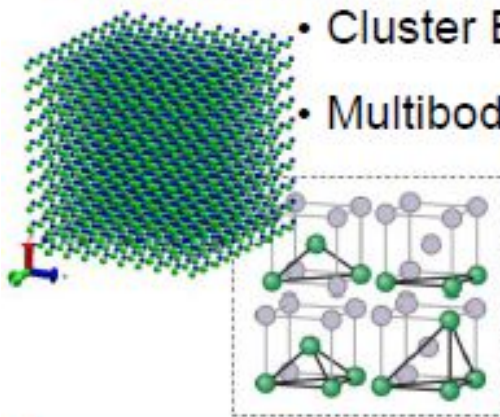
Вычисление стабильности фаз сплавов

Calculate stable phase structures of new alloys

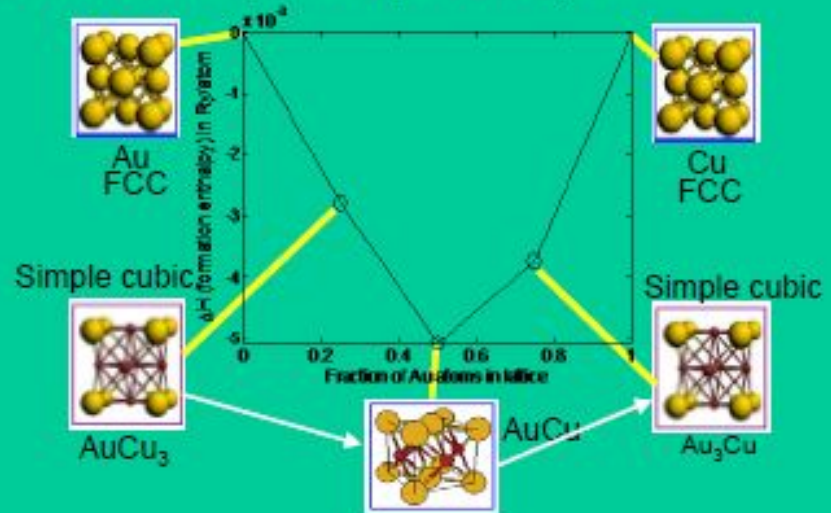


Search for lowest energy configuration using techniques such as:

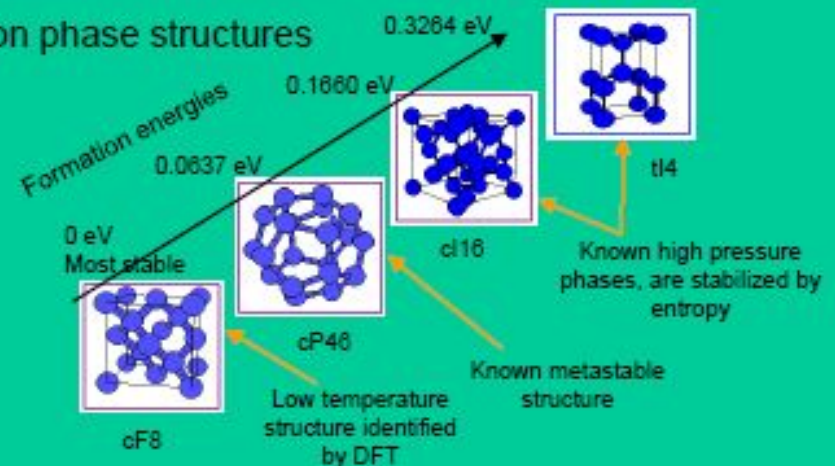
- Cluster Expansions
- Multibody Expansions



AuCu low temperature phase diagram



Silicon phase structures



Свободная энергия Гиббса (или просто **энергия Гиббса**, или **потенциал Гиббса**, или **термодинамический потенциал** в узком смысле) — это величина, показывающая изменение энергии в ходе химической реакции и дающая таким образом ответ на принципиальную возможность протекания химической реакции; это термодинамический потенциал следующего вида:

$$G = U + PV - TS,$$

Энергию Гиббса можно понимать как полную химическую энергию системы (кристалла, жидкости и т. д.)

Понятие энергии Гиббса широко используется в термодинамике и химии.

Самопроизвольное протекание изобарно-изотермического процесса определяется двумя факторами: энтальпийным, связанным с уменьшением энтальпии системы (ΔH), и энтропийным $T \Delta S$, обусловленным увеличением беспорядка в системе вследствие роста ее энтропии. Разность этих термодинамических факторов является функцией состояния системы, называемой изобарно-изотермическим потенциалом или свободной энергией Гиббса (G , кДж)

Определение

Классическим определением энергии Гиббса является выражение

$$G = U + PV - TS,$$

где U — внутренняя энергия, P — давление, V — объем, T — абсолютная температура, S — энтропия.

Дифференциал энергии Гиббса для системы с постоянным числом частиц, выраженный в собственных переменных — через давление p и температуру T :

$$dG = -S dT + V dP.$$

Для системы с переменным числом частиц этот дифференциал записывается так:

$$dG = -S dT + V dP + \mu dN.$$

Здесь μ — химический потенциал, который можно определить как энергию, которую необходимо затратить, чтобы добавить в систему ещё одну частицу.

Связь с термодинамической устойчивостью системы

Покажем, что минимум потенциала Гиббса соответствует устойчивому равновесию термодинамической системы с фиксированными температурой, давлением и числом частиц.

Запишем обобщённое уравнение первого и второго начал термодинамики:

$$T dS \geq dU + p dV.$$

При $P = \text{const}$, $T = \text{const}$,

$$d(U + pV - TS) \leq 0.$$

$$d(G) \leq 0.$$

Таким образом, в системе при постоянных температуре и давлении энергия Гиббса достигает минимального значения.

Применение в химии

Связь с химическим потенциалом

Используя свойства экстенсивности термодинамических потенциалов, математическим следствием которых является соотношение Гиббса-Дюгема, можно показать, что химический потенциал для системы с одним типом частиц есть

$$\mu = \frac{G}{N}.$$

отношение энергии Гиббса к числу частиц в системе:

Если система состоит из частиц нескольких сортов i с числом N_i частиц каждого сорта, то соотношения Гиббса-Дюгема приводят к выражению

$$G(p, T, N_1 \dots) = \mu_1 N_1 + \mu_2 N_2 + \dots$$

Химический потенциал применяется при анализе систем с переменным числом частиц, а также при изучении фазовых переходов. Так, исходя из соотношений Гиббса-Дюгема и из условий равенства химических потенциалов $\mu_1 = \mu_2$ находящихся в равновесии друг с другом фаз, можно получить уравнение Клапейрона-Клаузиуса, определяющее линию сосуществования двух фаз в координатах (p, T) через термодинамические параметры (удельные объёмы) фаз и теплоту перехода между фазами.

Энергия Гиббса и направление протекания реакции

В химических процессах одновременно действуют два противоположных фактора — энтропийный ($T\Delta S$) и энтальпийный (ΔH). Суммарный эффект этих противоположных факторов в процессах, протекающих при постоянном давлении и температуре, определяет изменение энергии Гиббса (G):

$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S.$$

Из этого выражения следует, что $\Delta H = \Delta G + T\Delta S$, то есть некоторое количество теплоты расходуется на увеличение энтропии ($T\Delta S$), эта часть энергии потеряна для совершения полезной работы, её часто называют связанной энергией.

Другая часть теплоты (ΔG) может быть использована для совершения работы, поэтому энергию Гиббса часто называют также свободной энергией.

Характер изменения энергии Гиббса позволяет судить о принципиальной возможности осуществления процесса.

При $\Delta G < 0$ процесс может протекать, при $\Delta G > 0$ процесс протекать не может (иными словами, если энергия Гиббса в исходном состоянии системы больше, чем в конечном, то процесс принципиально может протекать, если наоборот — то не может). Если же $\Delta G = 0$, то система находится в состоянии химического равновесия.

При $\Delta G < 0$ процесс может протекать, при $\Delta G > 0$ процесс протекать не может (иными словами, если энергия Гиббса в исходном состоянии системы больше, чем в конечном, то процесс принципиально может протекать, если наоборот — то не может). Если же $\Delta G = 0$, то система находится в состоянии химического равновесия.

Обратите внимание, что речь идёт исключительно о принципиальной возможности протекания реакции. В реальных же условиях реакция может не начинаться и при соблюдении неравенства $\Delta G < 0$ (по кинетическим причинам).

Существует полезное соотношение, связывающее изменение свободной энергии Гиббса ΔG в ходе химической реакции с её константой равновесия K :

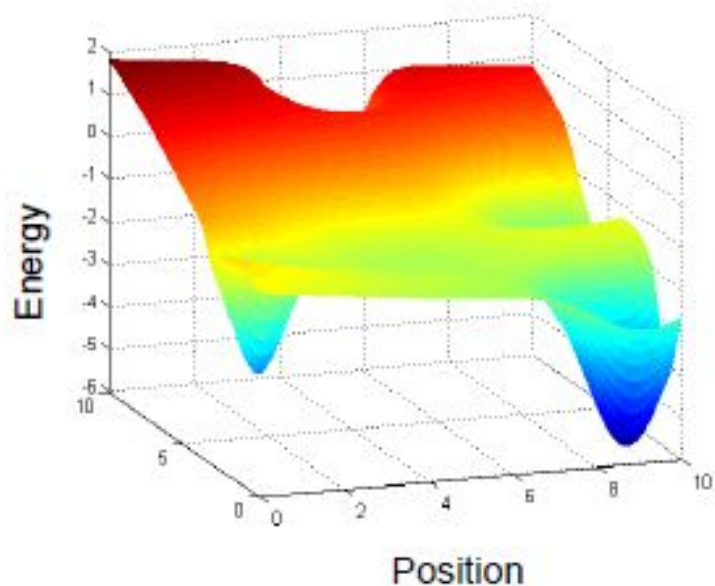
$$\Delta G = -RT \cdot \ln K.$$

Приложения расширенного многочастичного метода: адсорбция

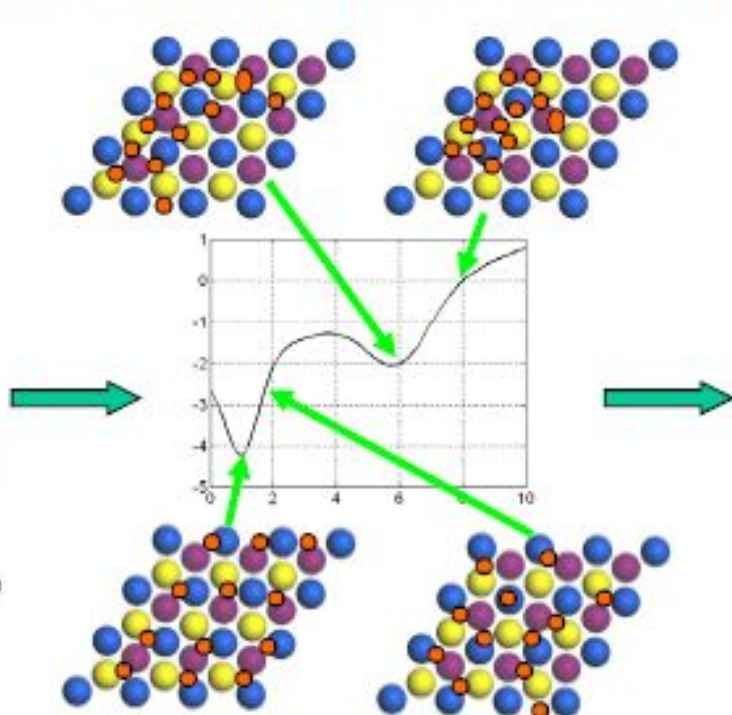
Use multibody expansions to generate ab initio accuracy **potential energy surfaces** (PES) with great computational savings

Utilize PES to understand adsorbate-surface interactions

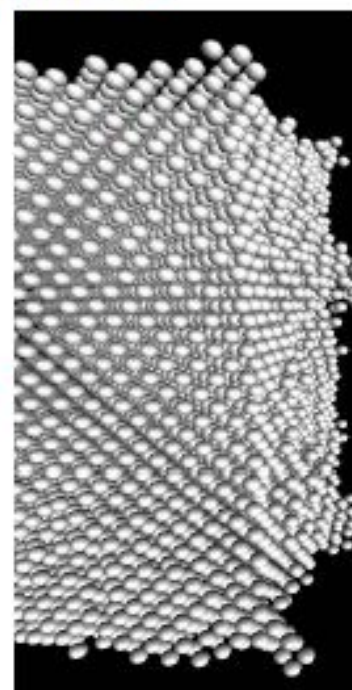
Towards designing topology and chemical structure of surfaces to enhance adsorption



Generating the n -dimensional PES



Utilizing PES to find optimal configuration



Constructing the optimal topology

Многочастичное расширение MBE

Представлен эффект структурных релаксаций в сплавах, используя формализм расширенной многочастичной энергии. N частичные потенциалы в многочастичном расширении (MBE) вычисляются из *энергий изолированных кластеров*, которые последовательно вычисляются из эмпирических потенциалов или самосогласованных квантовомеханических расчетов.

Характеристики сходимости многочастичных расширений (MBE) улучшены, методом взвешивания энергии, полученной из различных аппроксимаций много-частичных расширений. Этот новый метод называется взвешенным MBE (wMBE).

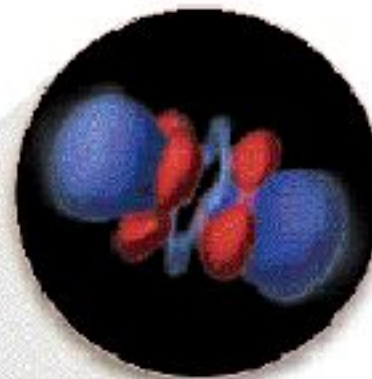
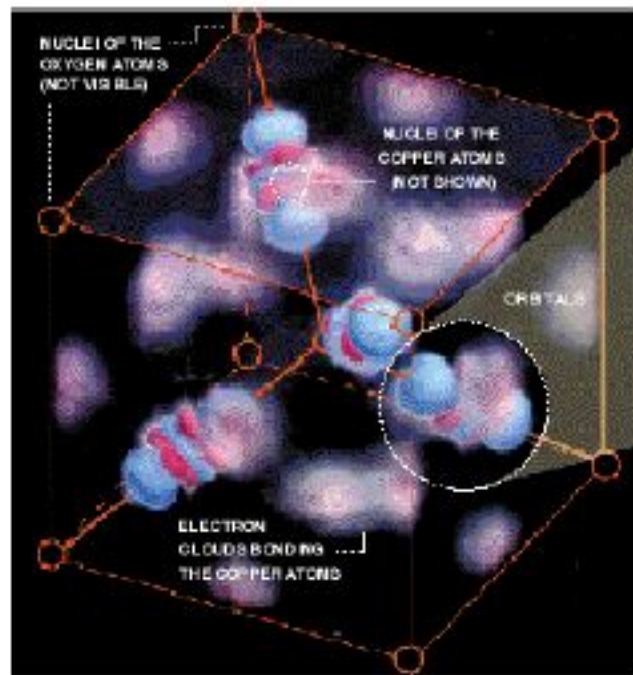
Показано, что многочастичных расширений много атомных систем могут быть эффективно вычисляться, используя интерполяцию изолированных энергий кластера из баз данных.

В отличие от кластерного метода, wMBE фокусируется на степенях свободы положений и следовательно, явно обрабатывает структурные релаксации во время вычислений устойчивых атомных кластеров, периодических или аморфных фазовых структур.

Визуализация электронной плотности

See article in the science section of the New York Times (September 7, 1999) on the visualization of electron densities and orbitals in copper oxide.

[Malcolm W. Browne, "Glue of Molecular Existence is Finally Unveiled,"
New York Times, 7 September 1999.](#)

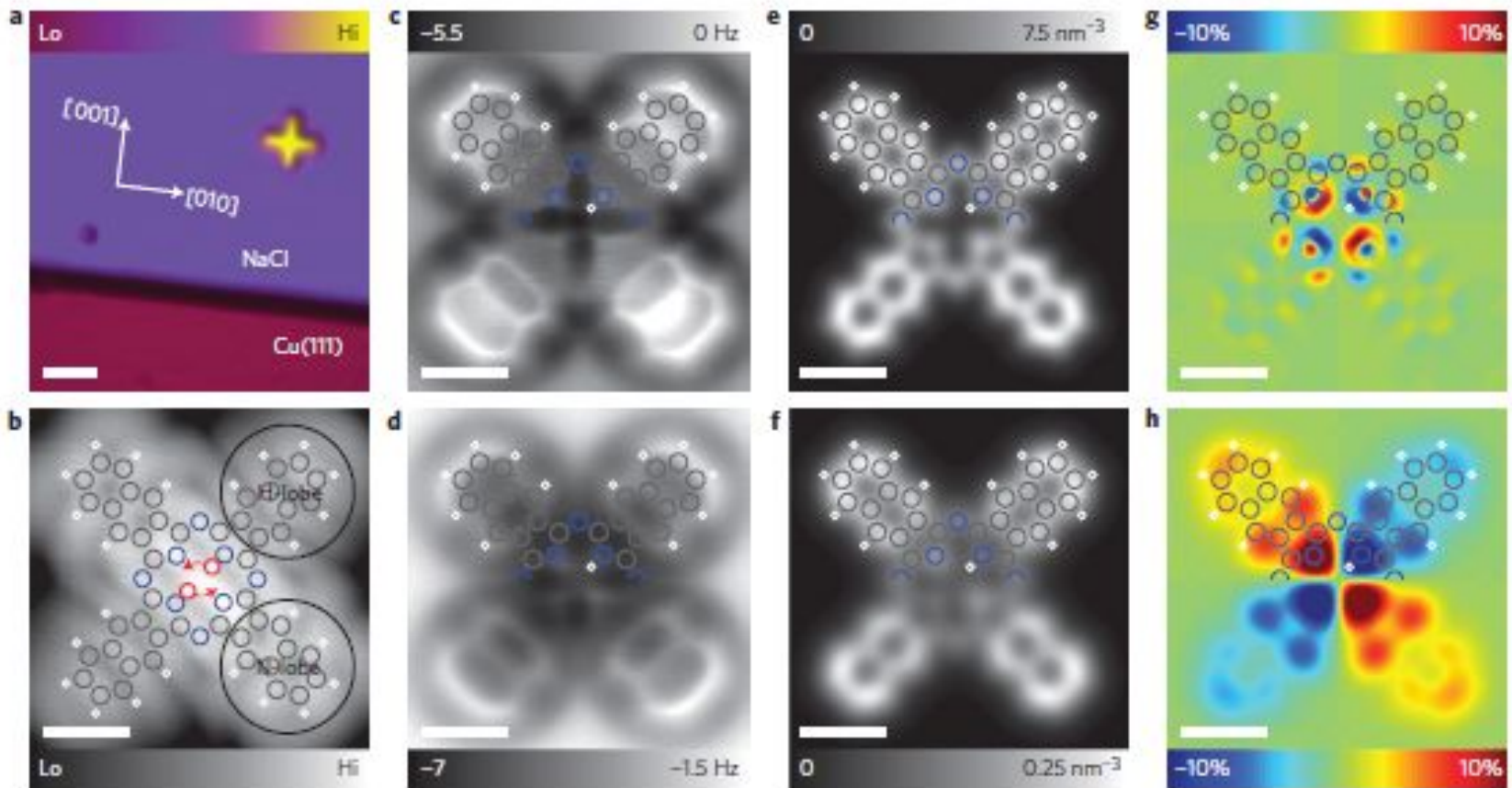


ORBITALS are the clouds of electrons shared between atoms in a molecule.

The Ties That Bind

A group of scientists at Arizona State University has used X-rays and electron diffraction techniques to capture direct images of the electronic bonds that keep together the atoms of oxygen and copper in a compound called cuprite.

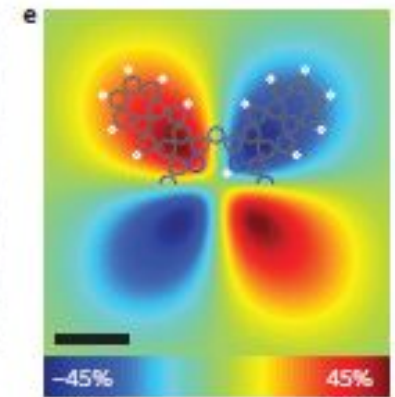
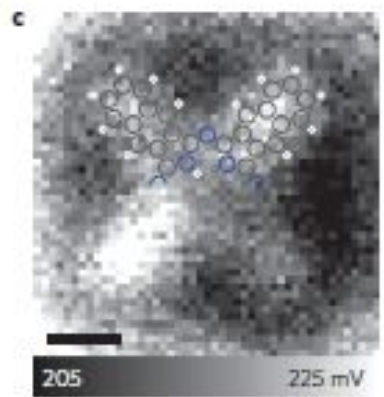
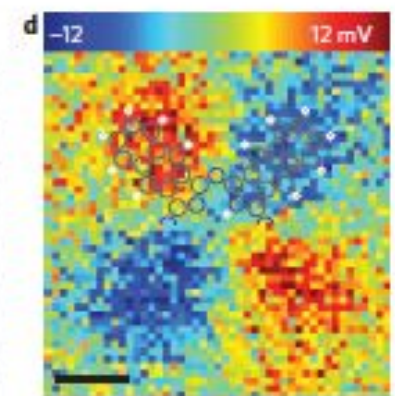
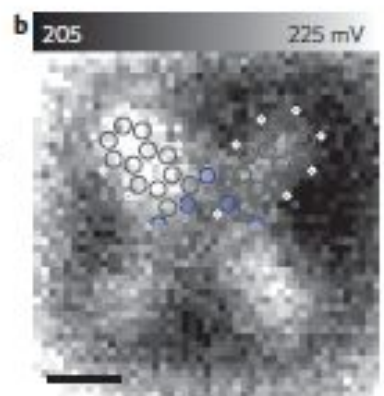
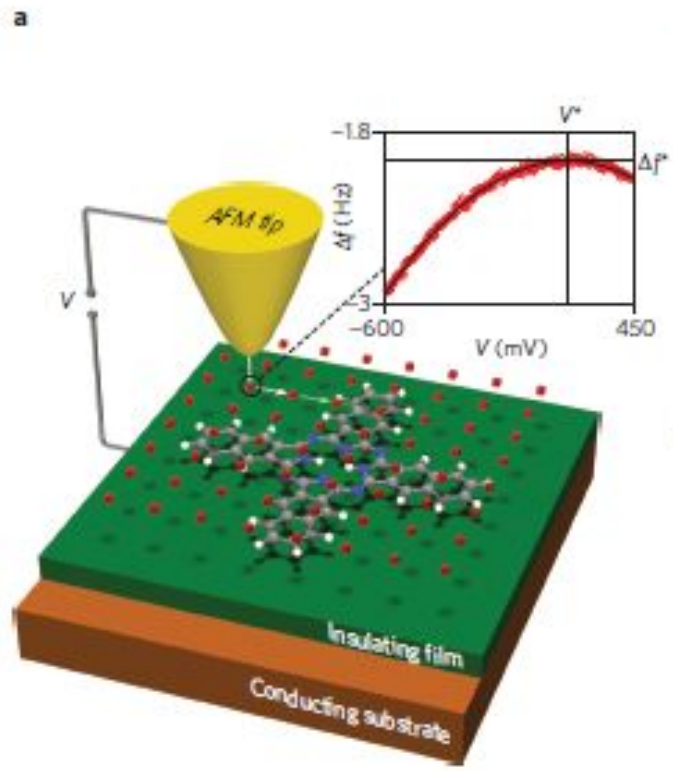
Source: Arizona State University



Обработка изображений STM и AFM нафталицианина на NaCl (2 ML) / Cu (111).

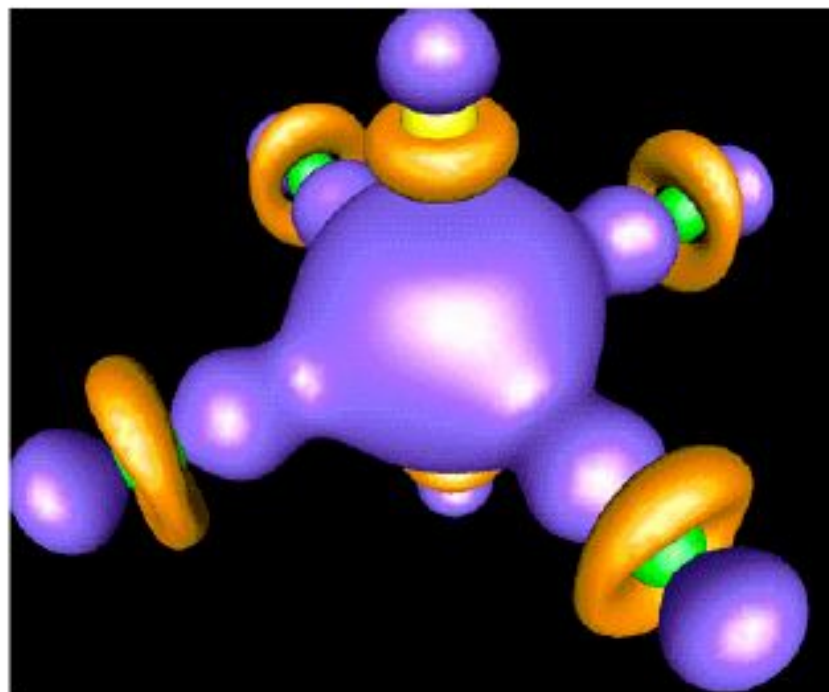
Вычисленные в приближении DFT атомарные позиции покрыты в b и в верхних половинах c-h.

Углерод, водородные и азотные атомы изображены серым, белым и синим, соответственно.



Электронная плотность в пироксиде

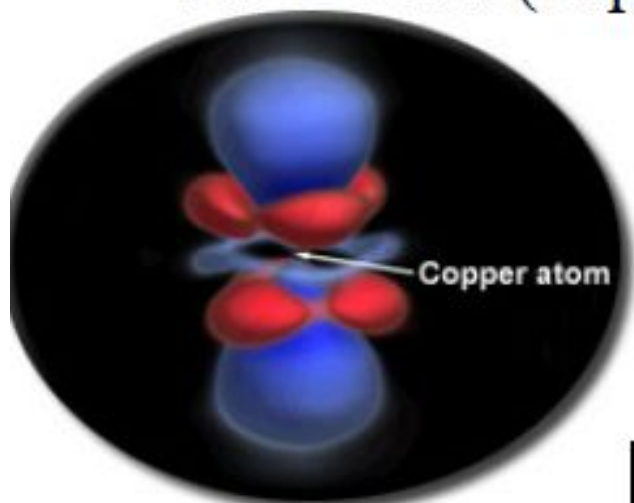
- ↓ Electron density visualization in a peroxide (Lead Titanate, PbTiO_3 , a ferroelectric) - work of [N. Marzari at MIT](#).
- ↓ One can obtain computationally orbitals with fine detail.



O_{2s} density

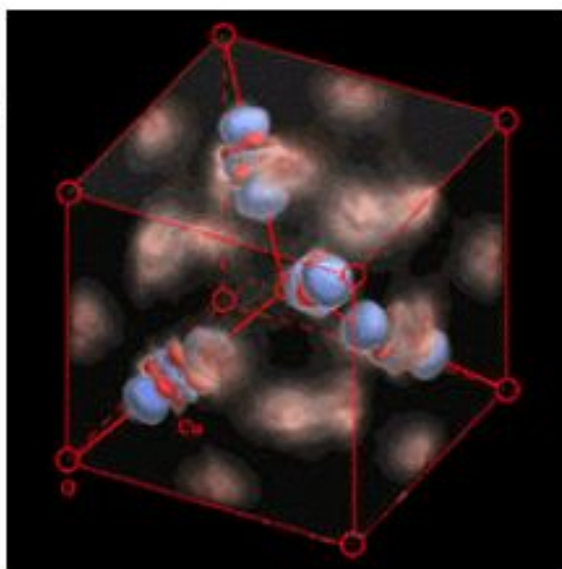
Cu-O связи в оксид-медных сверхпроводниках

Cu-O bond (experiments)

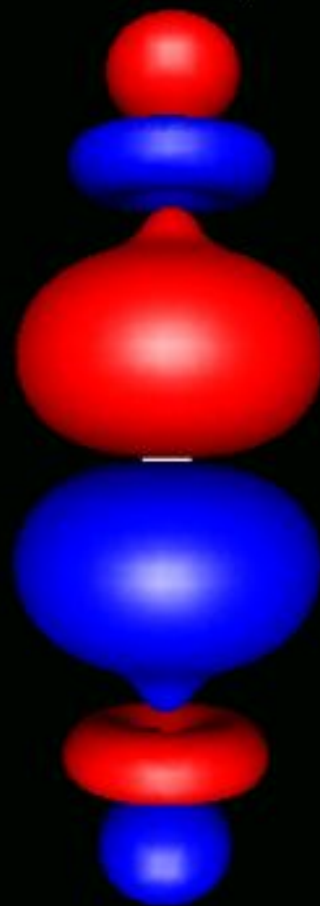


Copper-Oxygen Bond in Cuprite

Zuo, Kim, O'Keefe and Spence
Arizona State University/NSF

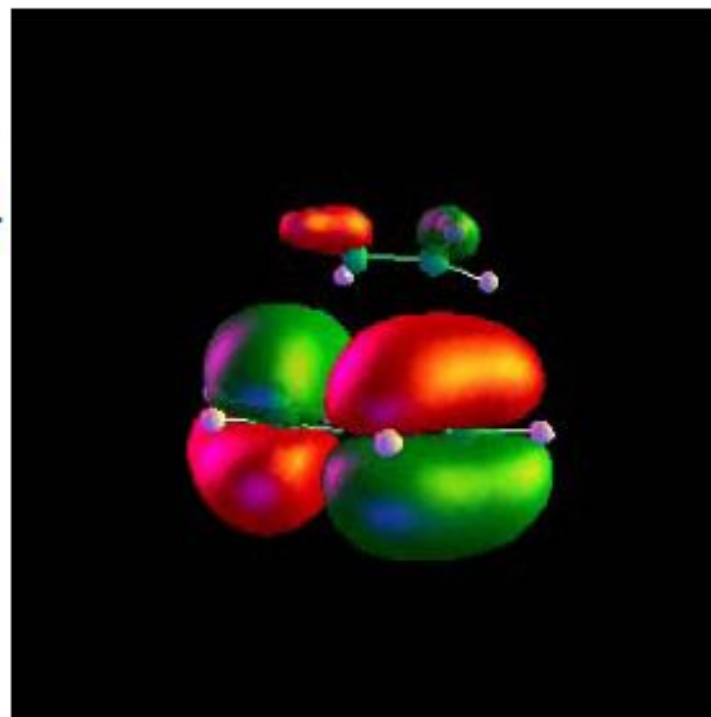


Ti-O bond (theory)



Химические Реакции

- The Diels-Alder reaction is an organic chemical reaction (a cycloaddition) between a conjugated diene and a substituted alkene (the dienophile), to form a substituted cyclohexene system.
- The reaction can proceed even if some of the atoms in the newly-formed ring are not carbon.
- Requires little energy to form the very useful cyclohexene ring
- Nobel price in Chemistry (1950)



Предсказание кристаллических структур, метод DFT

15000 DFT calculations to find the ground states structures in 80 binary metallic systems completed in about 6 months ([Prof. Ceder's work, MIT](#))

VOLUME 91, NUMBER 13

PHYSICAL REVIEW LETTERS

week ending
26 SEPTEMBER 2003

Predicting Crystal Structures with Data Mining of Quantum Calculations

Stefano Curtarolo,¹ Dane Morgan,¹ Kristin Persson,¹ John Rodgers,² and Gerbrand Ceder^{1,*}

¹*Department of Materials Science and Engineering, MIT, Cambridge, Massachusetts 02139, USA*

²*Toth Information Systems Inc., Ottawa, Canada*

(Received 30 May 2003; published 24 September 2003)

Predicting and characterizing the crystal structure of materials is a key problem in materials research and development. It is typically addressed with highly accurate quantum mechanical computations on a small set of candidate structures, or with empirical rules that have been extracted from a large amount of experimental information, but have limited predictive power. In this Letter, we transfer the concept of heuristic rule extraction to a large library of *ab initio* calculated information, and we demonstrate that this can be developed into a tool for crystal structure prediction.

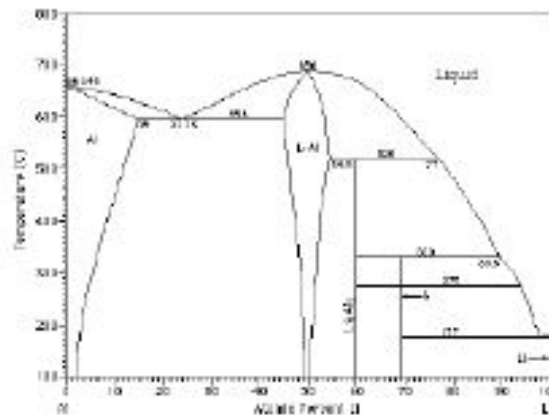
- Pattern generation and recognition using statistical techniques (machine learning)
 - Making predictions about other materials
 - Computing trends
 - Predictive discovery, micro alloying, materials-by-design
-

Фазовые диаграммы: Метастабильность Al-Li

Пример использования ab-initio вычислений для исследования метастабильность алюминий-лития сплава:

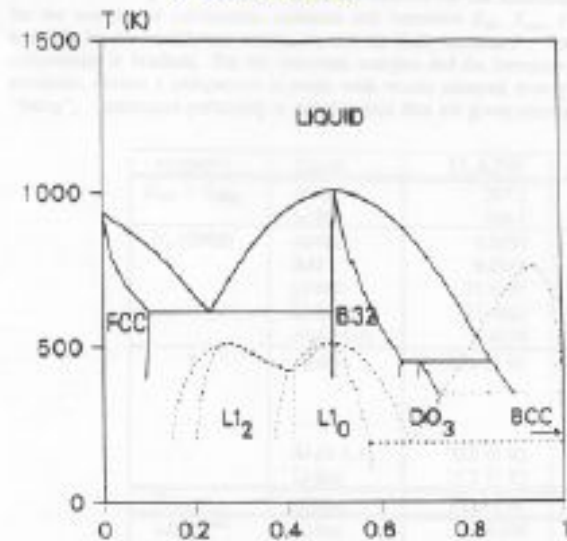
- > Al-Li является перспективным сплавом для планеров самолетов в 1980-ых (Al-Cu используется в настоящий момент),
- > Литий - самый легкий твердый элемент, замещающий медь, и использование сплавов Al-Li, как предполагалось, сделало бы возможным применение более легких сплавов, однако, сплавы Al-Li не поддаются сварке.

Experimental



[Sluiter et al. \(1990\)](#)
PRB 42 (16) 1990, pp. 10460

Calculated



- > Из фазовой диаграммы Al-Li (устойчивые фазы), можно видеть, что fcc твердый раствор является равновесным в этом соединении;
- > Метастабильный осадок усиливает материал, но он быстро распадается для экспериментального обнаружения;
- > Используя вычисления, фаза, которая является метастабильной, может быть сделана более устойчивой, т.е. не допускать перехода системы в устойчивую фазу.

Инициирование излома, повреждение и развитие трещины

Используется потенциал, модифицированный под заданный материал.

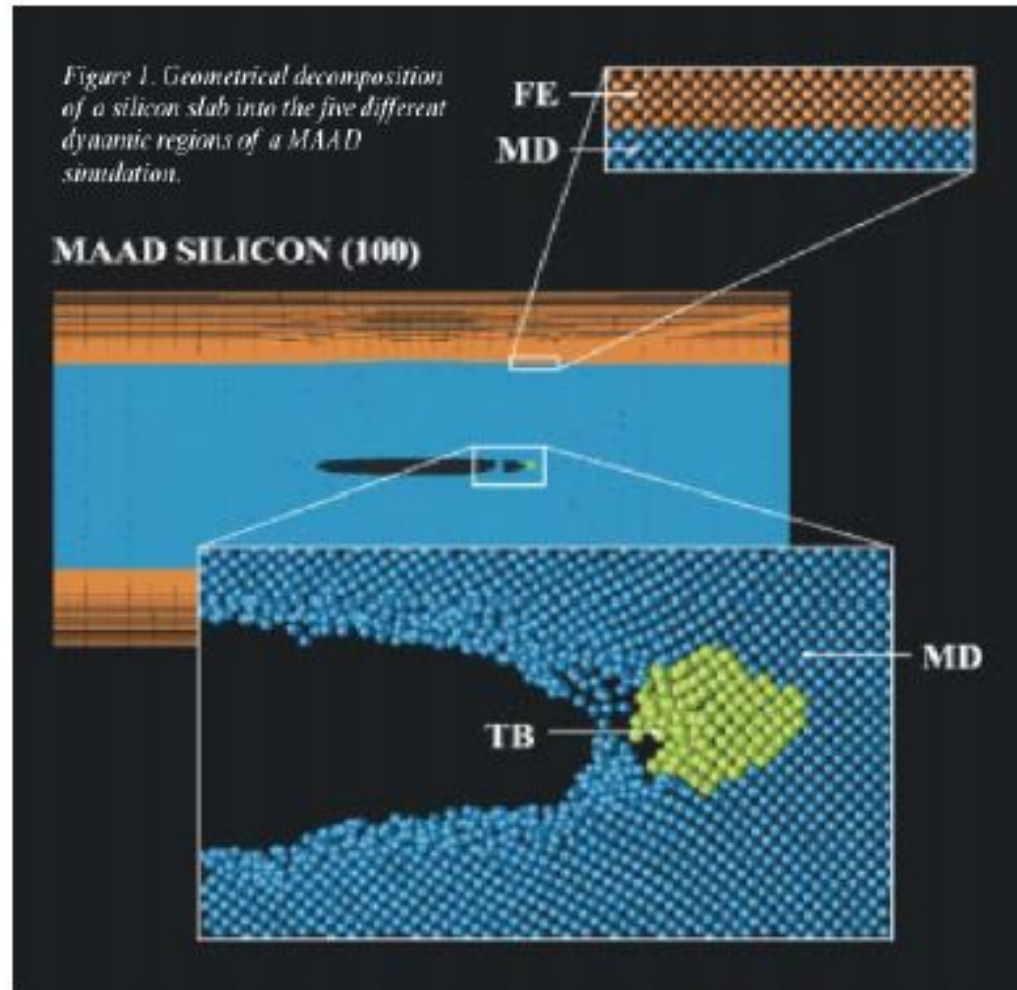
Методы: Молекулярная динамика, Нурег динамика, Квантовая МД

Исследования:

- > Хрупкость и сравнение с пластическим разрывом;
- > Разрыв в тонких пленках;
- > Дислокационная динамика;
- > Разрыв материала.



Диапазон масштабов длин при моделировании излома

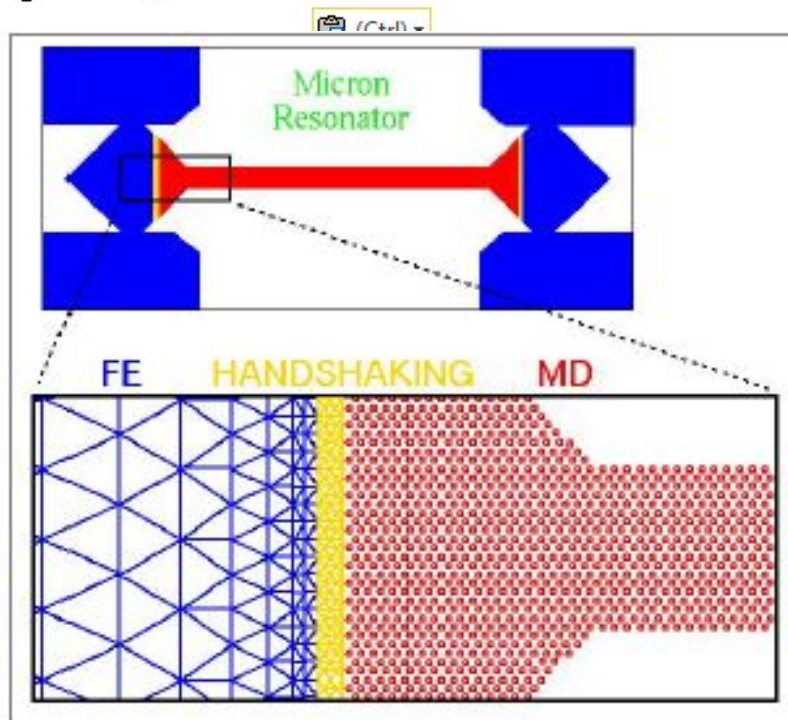


[Europhys. Lett., 44 \(6\), pp. 783-787 \(1998\)](#)

Spanning the Length Scales in Dynamic Simulation

Farid E. Abraham,
Jeremy Q. Broughton,
Noam Bernstein, and
Efthimios Kaxiras

Диапазон масштабов длин при моделировании трещины

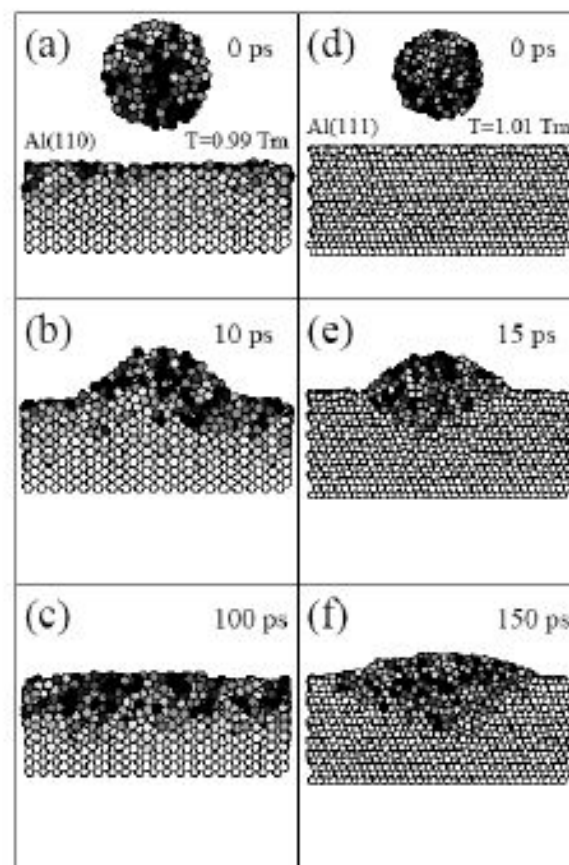


J. Q. Broughton, F. Abraham, R. E. Rudd, N. Bernstein, E. Kaxiras

- > Метод связи масштабов длины (CLS) совмещает моделирование MD с методом конечным элементом (FE). Используется метод сильной связи (TB) в пространственных прилегающих пространственных областях.
- > Гамильтонианы TB используется на самом малом значимом масштабе длины, т.е. там, где требуется квантовомеханическое описание для атомов, *например*, в наконечнике трещины.
- > В промежуточных шкалах MD описывает движение каждого атома, который взаимодействует с другими через потенциалы, специфичные для атомов материалов.
- > На самых длинных масштабах длины моделирование FE включает связь с длинноволновыми эластичными модами. 'Согласование' между этими различными описаниями выполняется равномерно.

Поверхностные вычисления: энергии, сродство, поглощение

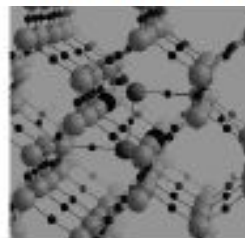
- > Эффект фасетирования
- > Плавление и смачивание на металлических поверхностях;
- > Вычисление сродства к другим материалам;
- > Влияние формы и структуры на свойства.



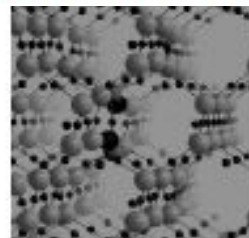
[F. Di Tolla, E. Tosatti and F. Ercolessi](#)
Phy Rev Let 74(16) 1995, pp. 3201

Дефекты в кремнии с наименьшей энергией

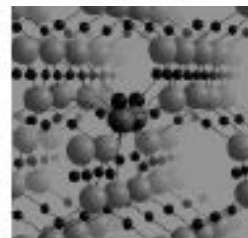
- Моделирование оказало значительное влияние в понимании дефектов в Si.
- Структура Si приводит к множеству различных конфигураций дефектов, по сравнению с плотно упакованными металлами.
- В структуре плотноупакованных металлов вакансии это узел, из которого вынимается атом, и дефект внедрения помещается в междоузельную позицию.
- В Si, когда атом вынимается из узла, возникает значительная перегруппировка других атомов.
- Если имеется теории для того, какая при этом возникает конфигурация близи вакансии или междоузельного атома, то можно протестировать их и сравнить результаты вычислений, вычислить их энергию, и т.д.



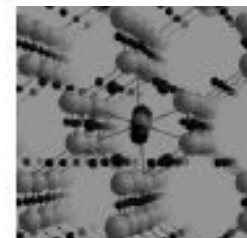
Frenkel defect



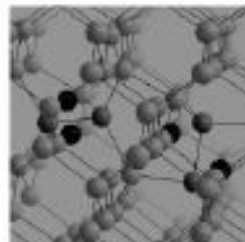
Frenkel defect



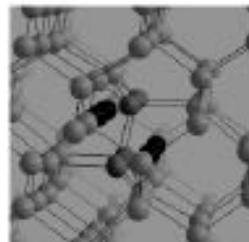
X-interstitial



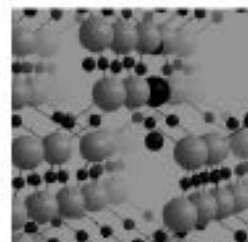
H interstitial



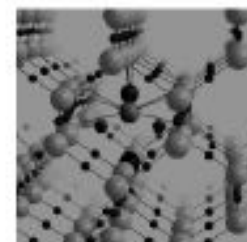
Two non-parallel Frenkel pairs



Two parallel Frenkel pairs



Vacancy



Frenkel pair

[S. Goedecker, T. Deutsch, and L. Billard \(2002\)](#)

PRL 88 (23) 2002, pp. 235501