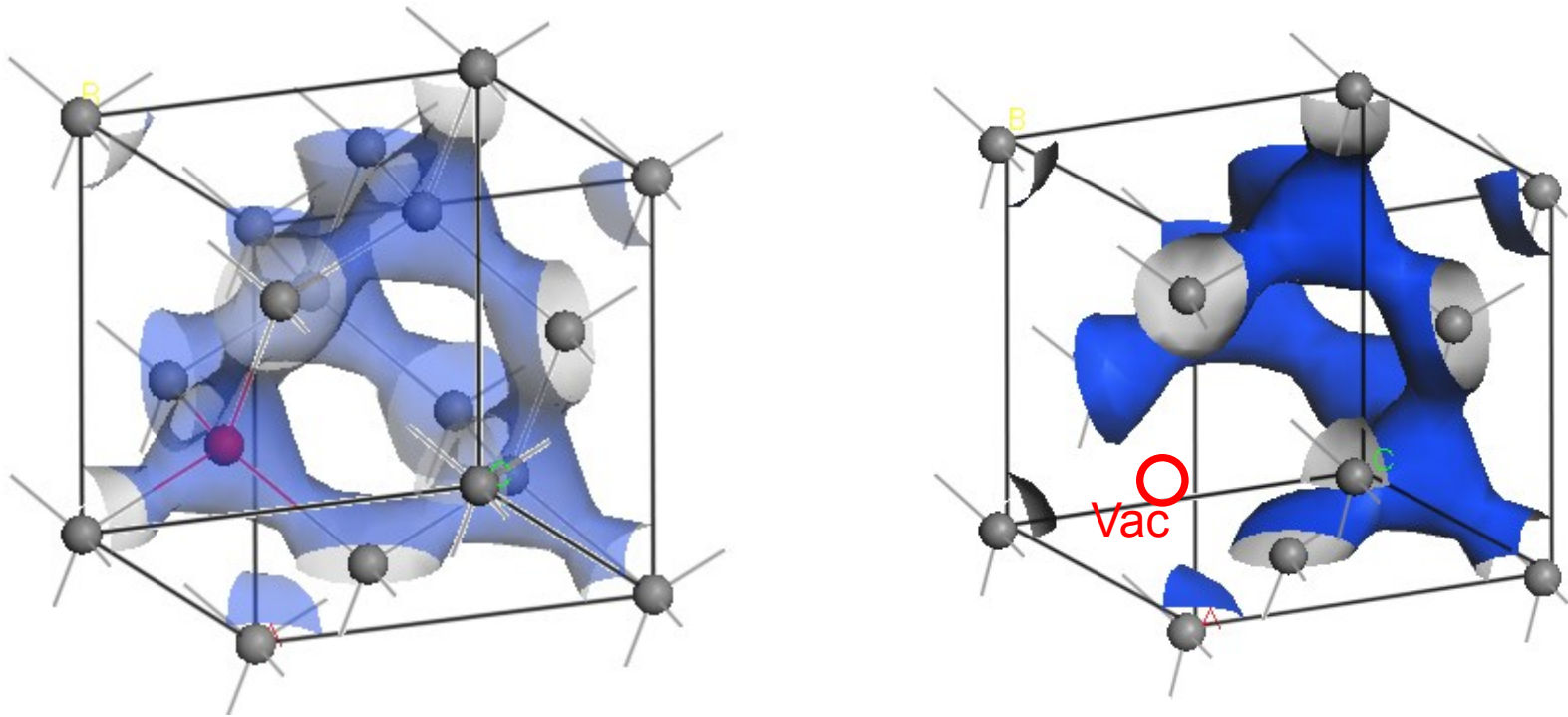


Ряд проблемных задач физики конденсированных систем имеет фундаментальный характер

- Предсказание механических свойств реальных твердых тел, в том числе в интенсивных радиационных полях;
- Электрические свойства и явления в конденсированных системах с высоким содержанием дефектов;
- Механизмы сверхпроводимости, в том числе – высокотемпературной, улучшение критических параметров сверхпроводников;
- Электронные и фотонные свойства органических полупроводников и кристаллов

Одиночная вакансия

Атома нет в соответствующем узле, что приводит к возмущению распределение электронной плотности внутри элементарной ячейки



Распределение электронной плотности в идеальной элементарной ячейке, содержащей одиночную вакансию.

Уровень изображенных изоповерхностей электронной плотности один и тот же =1.25

Вакансии и собственные междоузельные атомы - термодинамические ветви возбуждения кристалл.

Их равновесные концентрации могут быть определены из условий минимума термодинамического потенциала

Система всегда стремится к термодинамическому равновесию

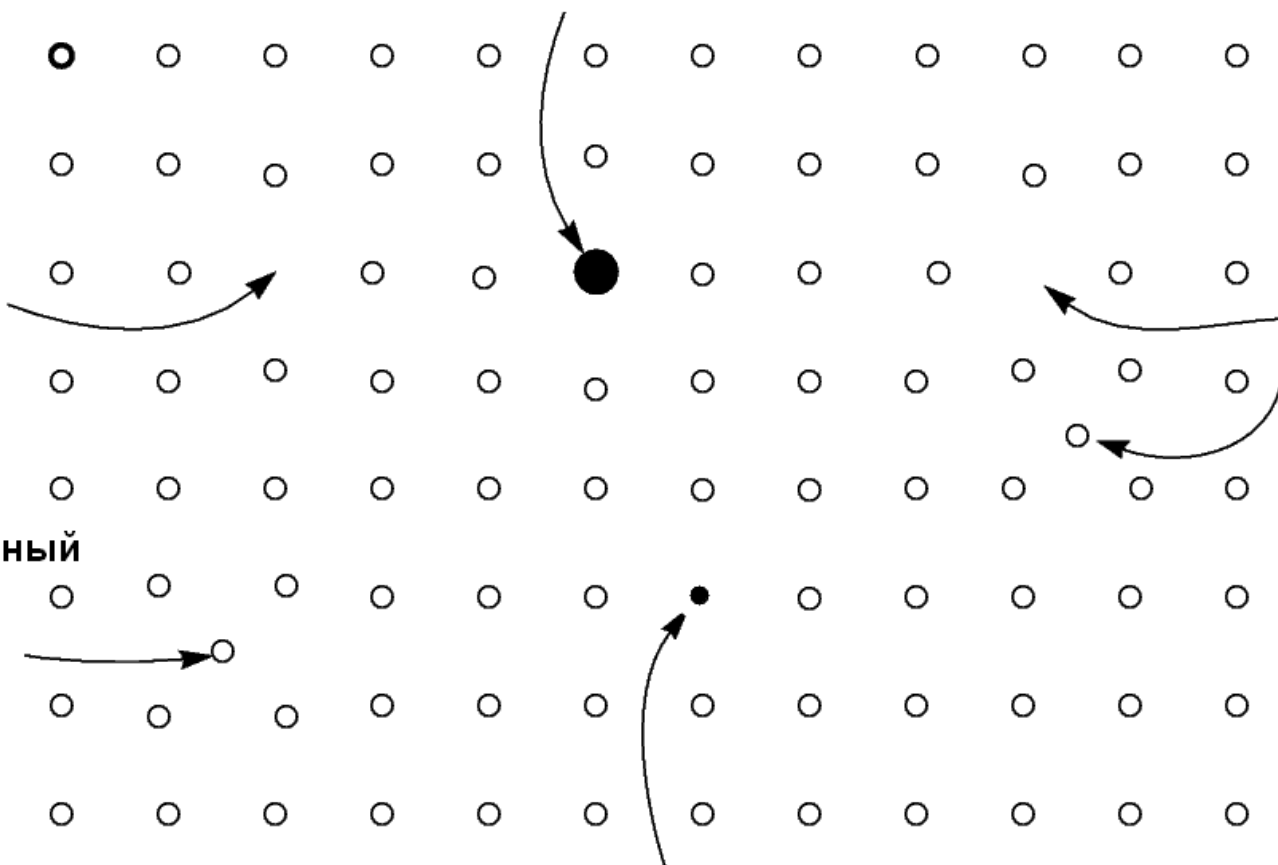
Примесный атом

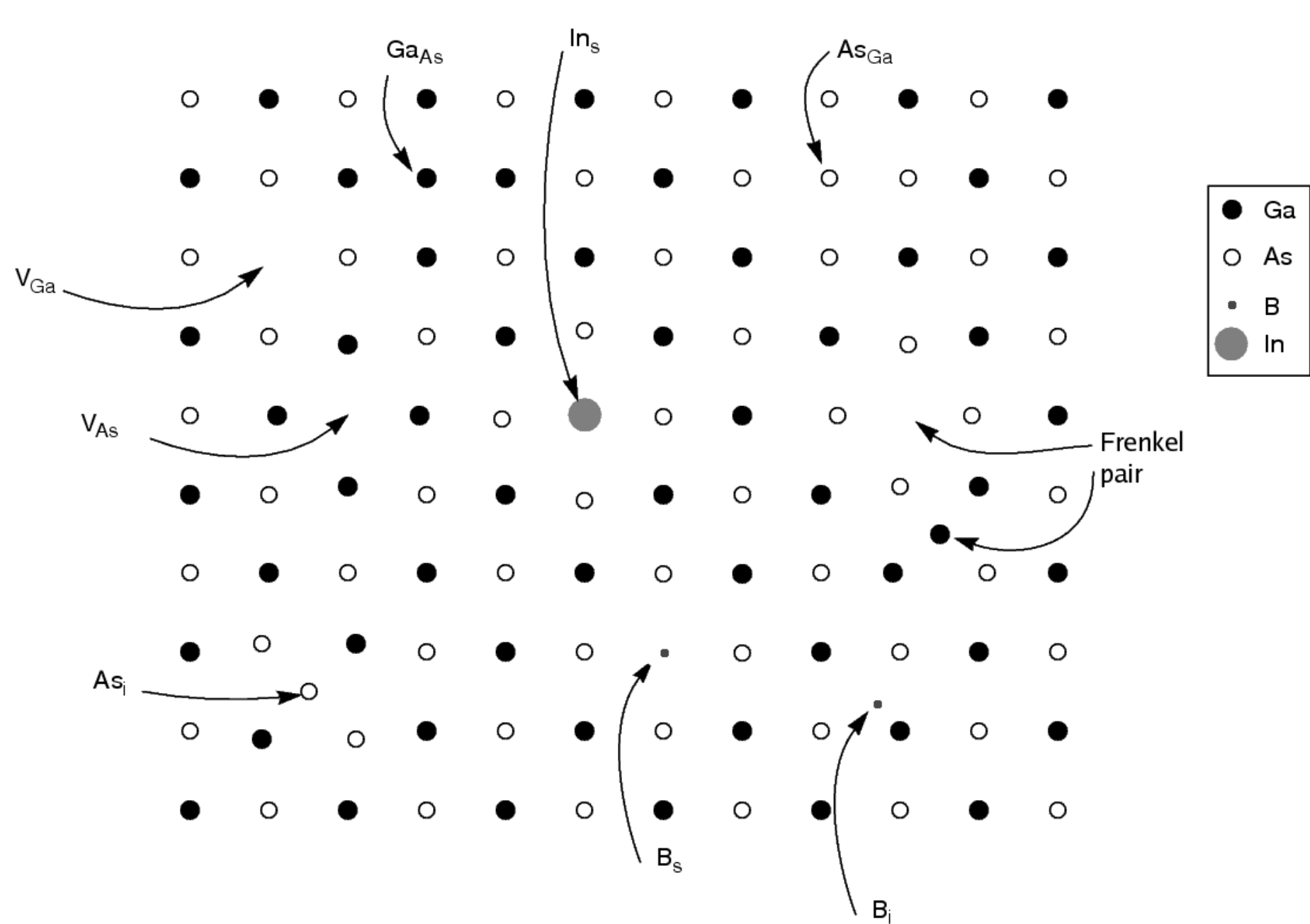
Вакансия

Пара Френкеля

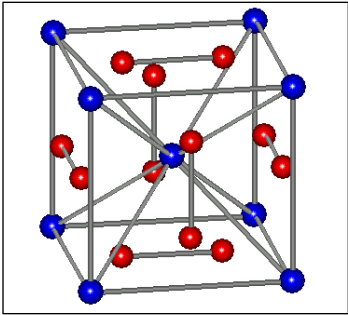
Междоузельный атом

Примесный атом

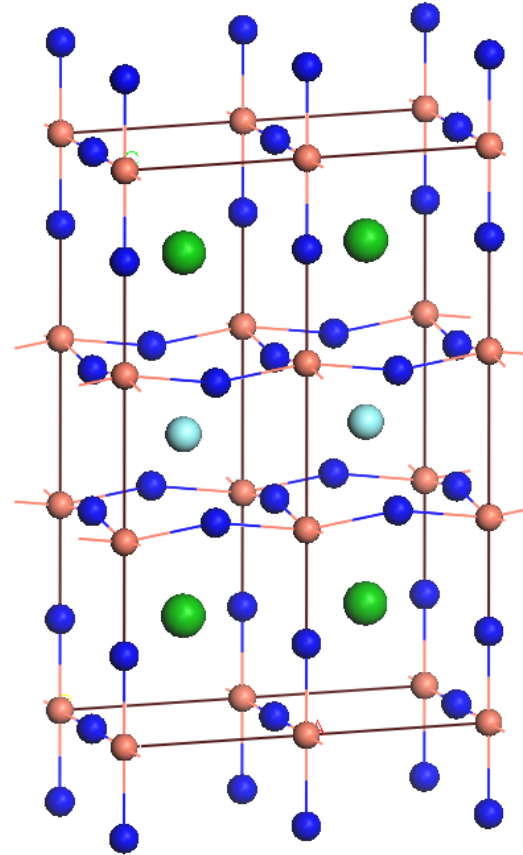
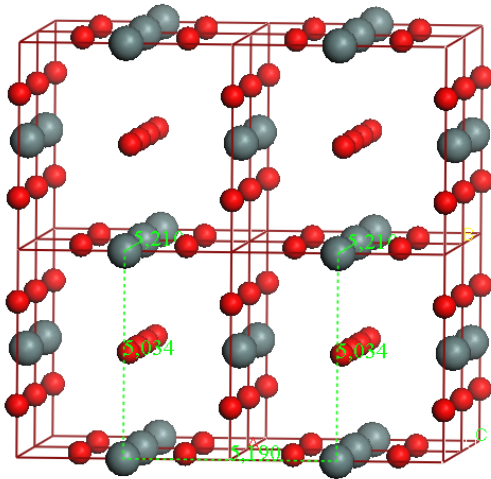




Сверхпроводящие упорядоченные интерметаллиды и ВТСП



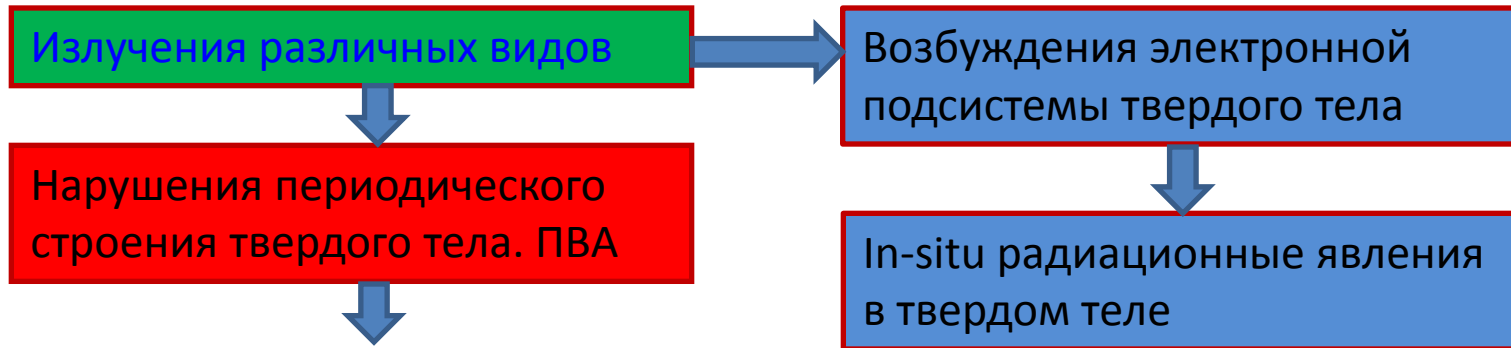
Соединения типа A15 – Nb_3Sn .



Структура ВТСП $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$

Основные представления о радиационных явлениях в металлах

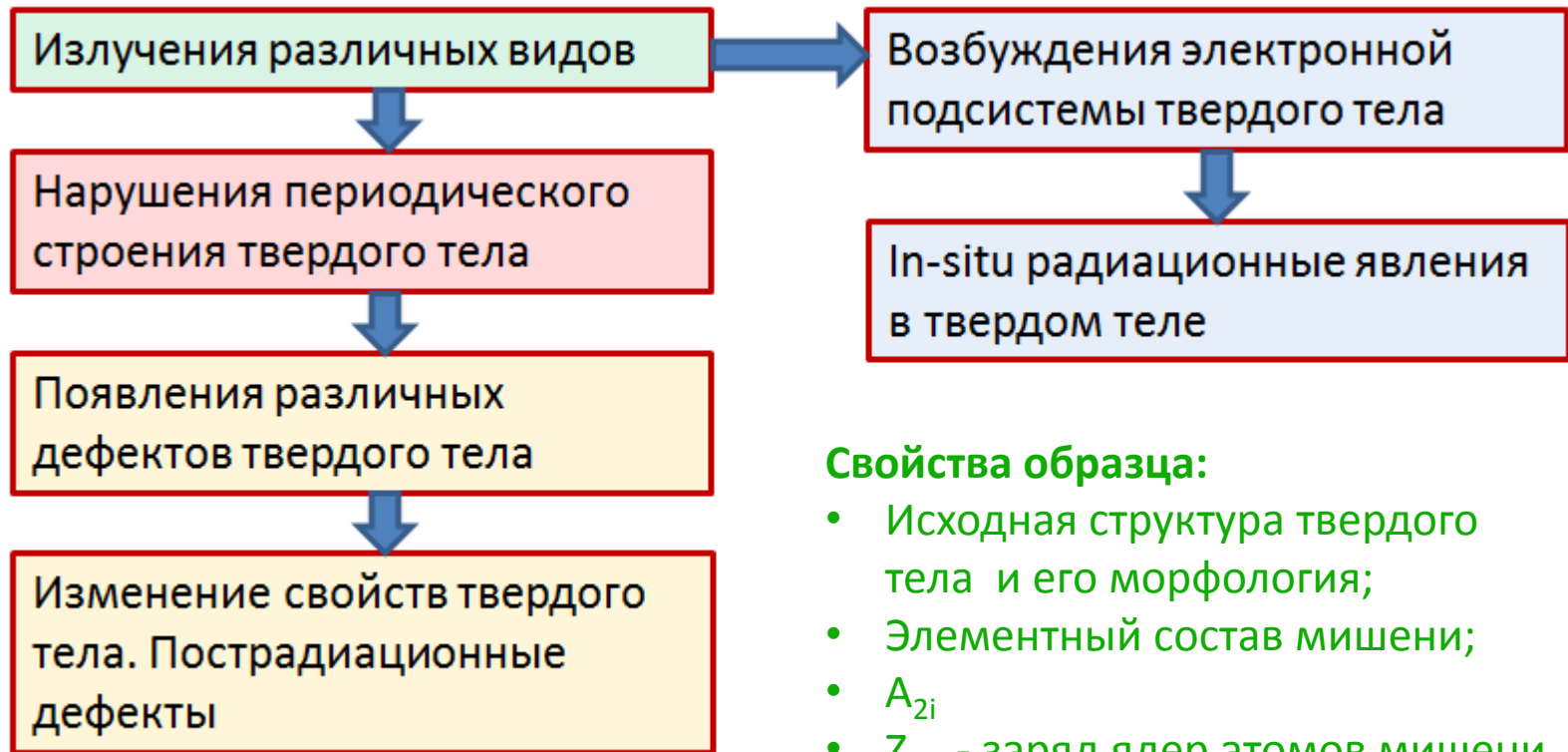
Условия облучения



Радиационные повреждения – вся совокупность физических процессов, происходящих в твердом теле с момента попадания частиц излучения до момента изменения его структуры.

Условия облучения:

- Тип частиц – A_1, Z_1
- Энергия частиц – E_1
- Монохроматичность и временные параметры потока частиц
- Внешняя температура – T_0
- Флюенс облучения частиц – [частиц/см²]
- Интенсивность облучения частиц – [частиц/с·см²]



Свойства образца:

- Исходная структура твердого тела и его морфология;
- Элементный состав мишени;
- A_{2i}
- Z_{2i} - заряд ядер атомов мишени,
- n_i – плотность компонент
- Температура образца при облучения – T_2
- Напряжения (механические).

Разные свойства существенны на разных этапах.

Начальный этап – создания ПВА, ВВА, каскадов.

Вторичный этап – низкоэнергетическая перестройка (релаксация системы) диффузионного типа.

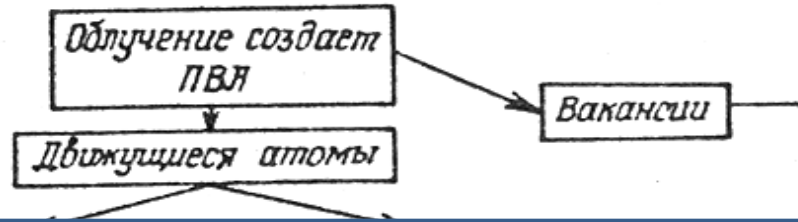
РАДИАЦИОННАЯ ПОВРЕЖДАЕМОСТЬ МАТЕРИАЛОВ

С точки зрения структурно-фазовых изменений, имеющих место в процессе облучения, можно выделить следующие процессы, которые отвечают за деградацию первоначальных физико-механических характеристик материалов:

1. - непрерывная генерация неравновесной концентрации точечных дефектов;
2. - образование каскадных и субкаскадных дефектных зон;
3. -зарождение и рост вакансионных, межузельных, вакансионно-межузельно-примесных комплексов;
4. -образование, эволюция частичных и совершенных дислокационных петель, формирование дислокационной сетки;
5. - радиационно-индуцированная сегрегация, распад твердого раствора и фазовые превращения;
6. -атомное перемешивание;
7. -зарождение пор и эволюция поровой структуры;
8. -локальное и объемное изменение химического состава материала за счет протекания ядерных реакций и эффектов трансмутации.

ПЕРВИЧНЫЕ ПРОЦЕССЫ В ТВЕРДОМ ТЕЛЕ ПРИ ОБЛУЧЕНИИ

$$T_{12} = \Lambda_{12} E_1 \sin^2 \left(\frac{\varphi}{2} \right),$$



$$T_{12} \geq E_d,$$

$$T_{12} \square$$



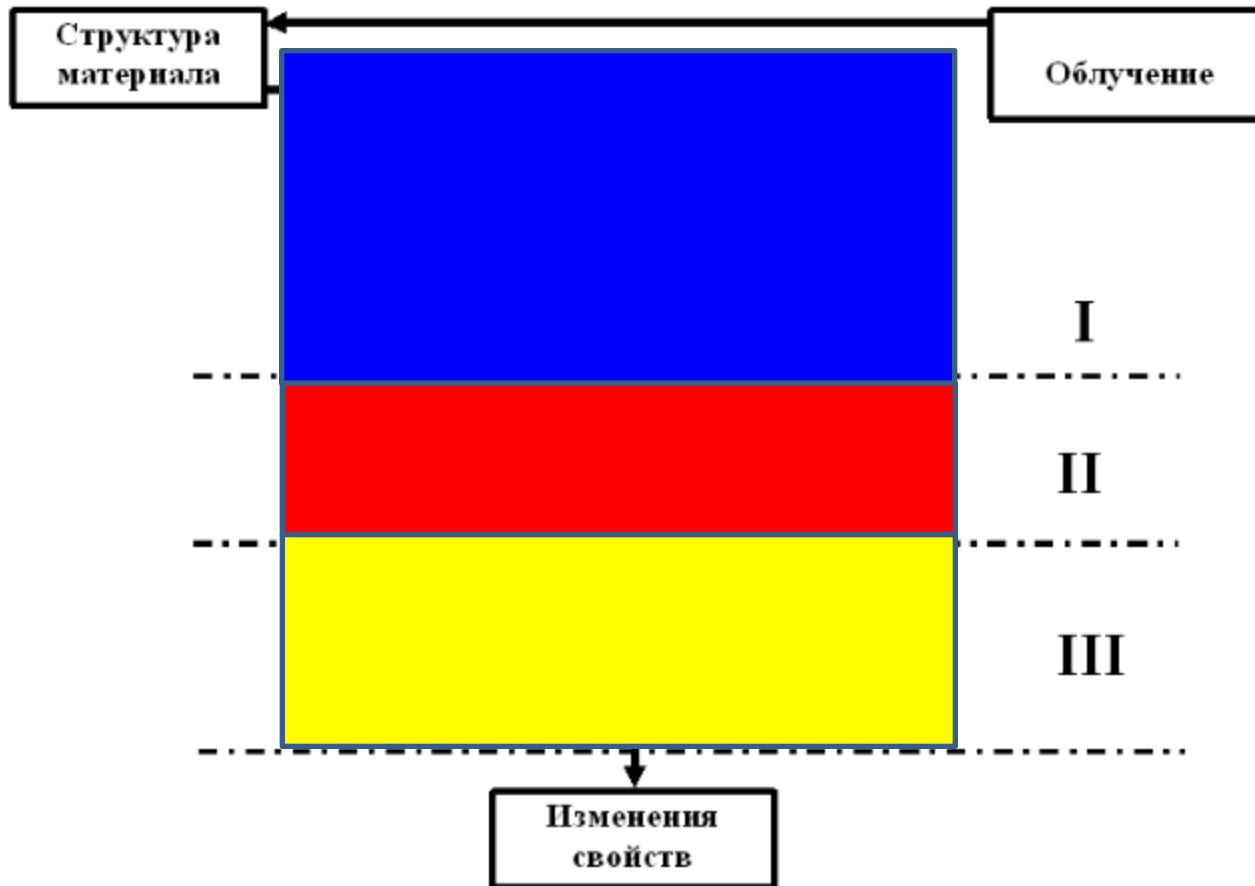


Схема основных стадий радиационной повреждаемости материалов.

I-динамическая стадия,

II-диффузионная стадия (точечные дефекты),

III- стадия эволюции стоков

ВТОРИЧНЫЕ (РЕЛАКСАЦИОННЫЕ) ПРОЦЕССЫ В ТВЕРДОМ ТЕЛЕ

Совокупность явлений, обусловленных миграцией, рекомбинацией, ассоциацией неравновесных точечных дефектов, взаимодействием со стоками в температурном поле (T) и поле напряжений (σ):

Явления:

1. Радиационно-стимулированная диффузия;
2. Радиационно-стимулированная ползучесть;
3. Распад и (или) образование новых фаз;
4. Блистеринг — вздутие, пузырение, локальное отслоение;
5. Флекинг - эффект отслаивания чешуек;
6. Радиационный рост.

В большинстве обсуждаемых процессов **движение всех частиц в твердом теле** рассматривается до тех пор, пока их энергия больше энергии E_d , необходимой для смещения атома из узла кристаллической решетки, которая составляет 10 – 50 эВ.

При энергии частицы $E \gg E_d$ считают, что она взаимодействует с атомами твердого тела как со свободными атомами в газе.

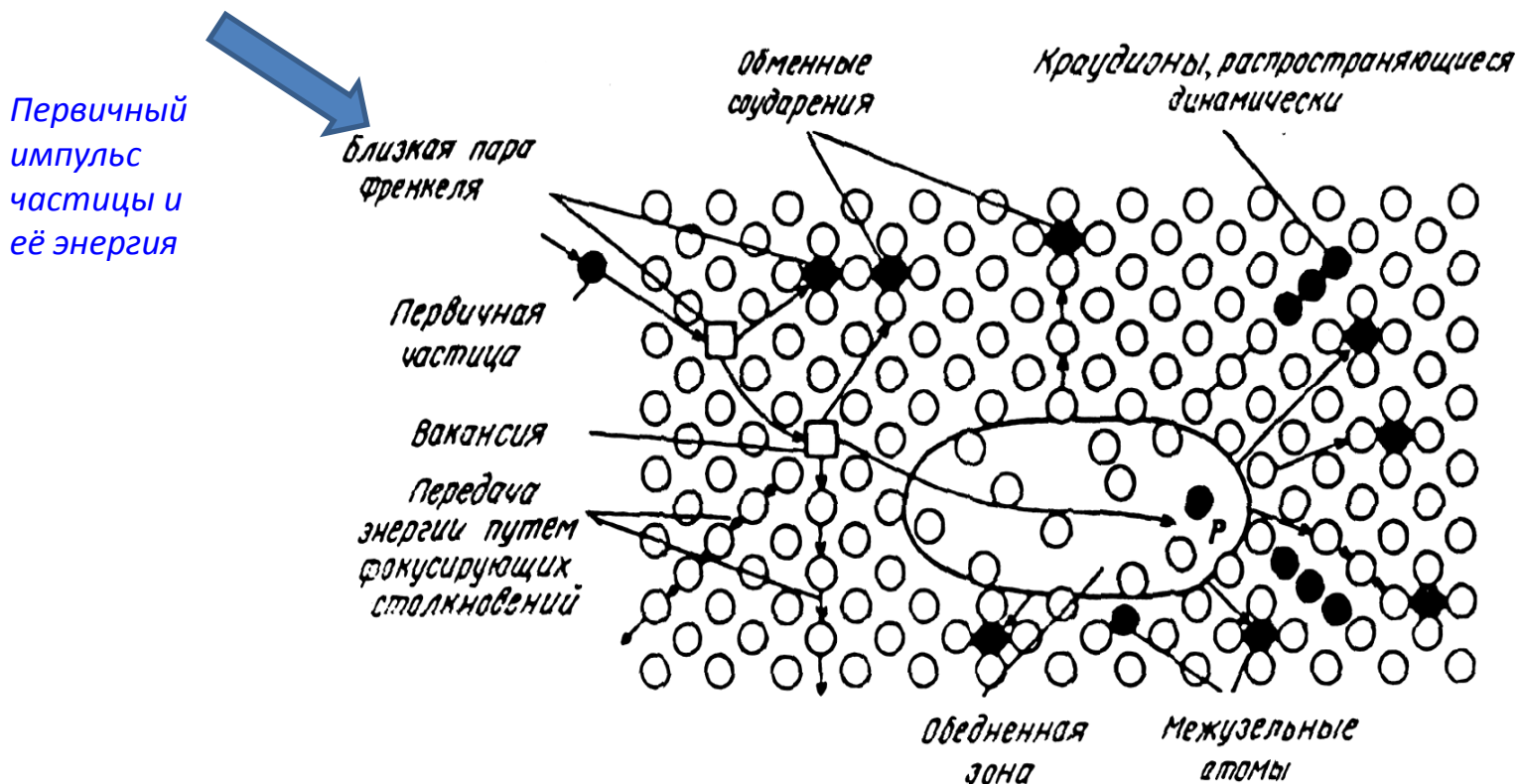
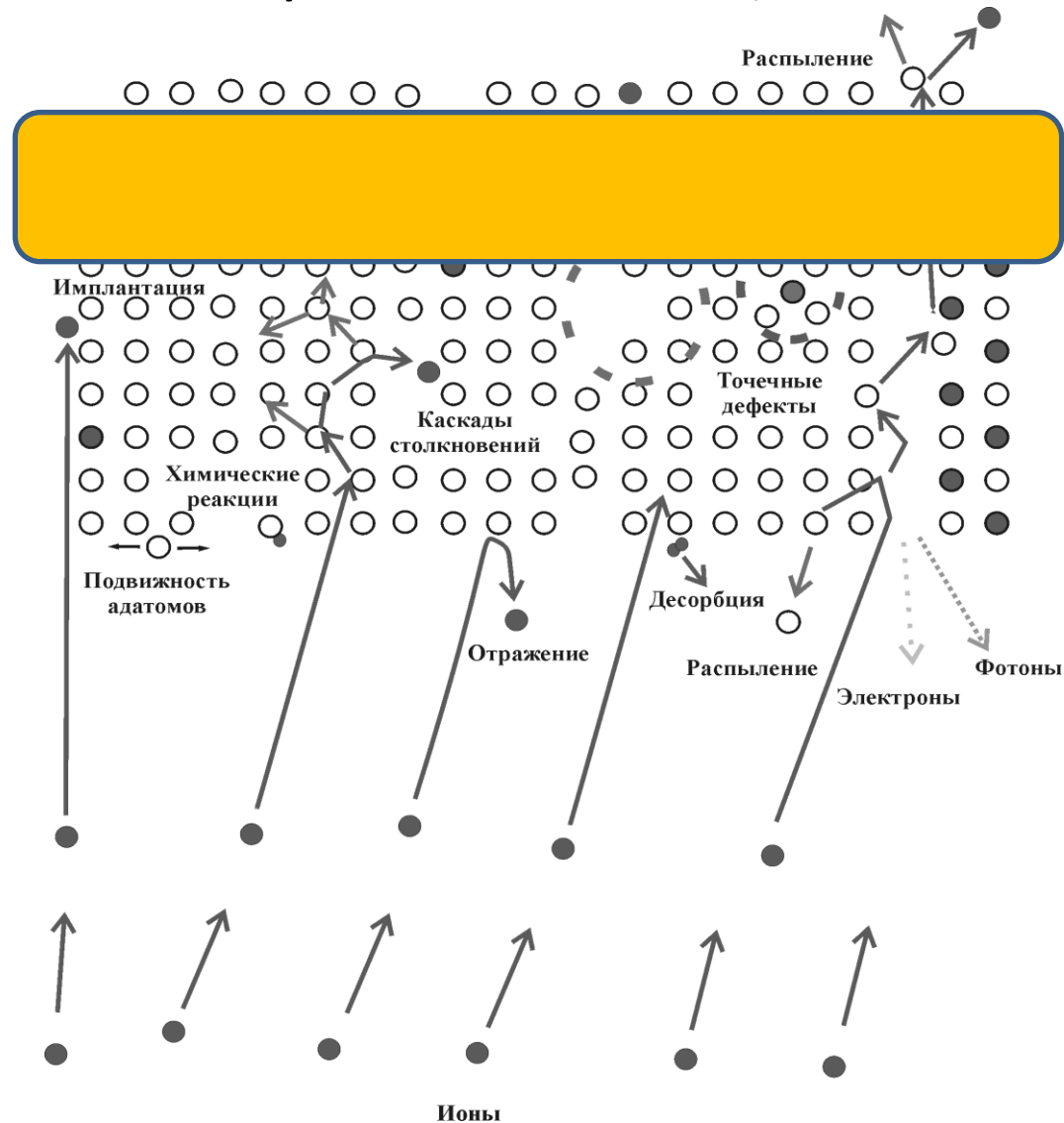
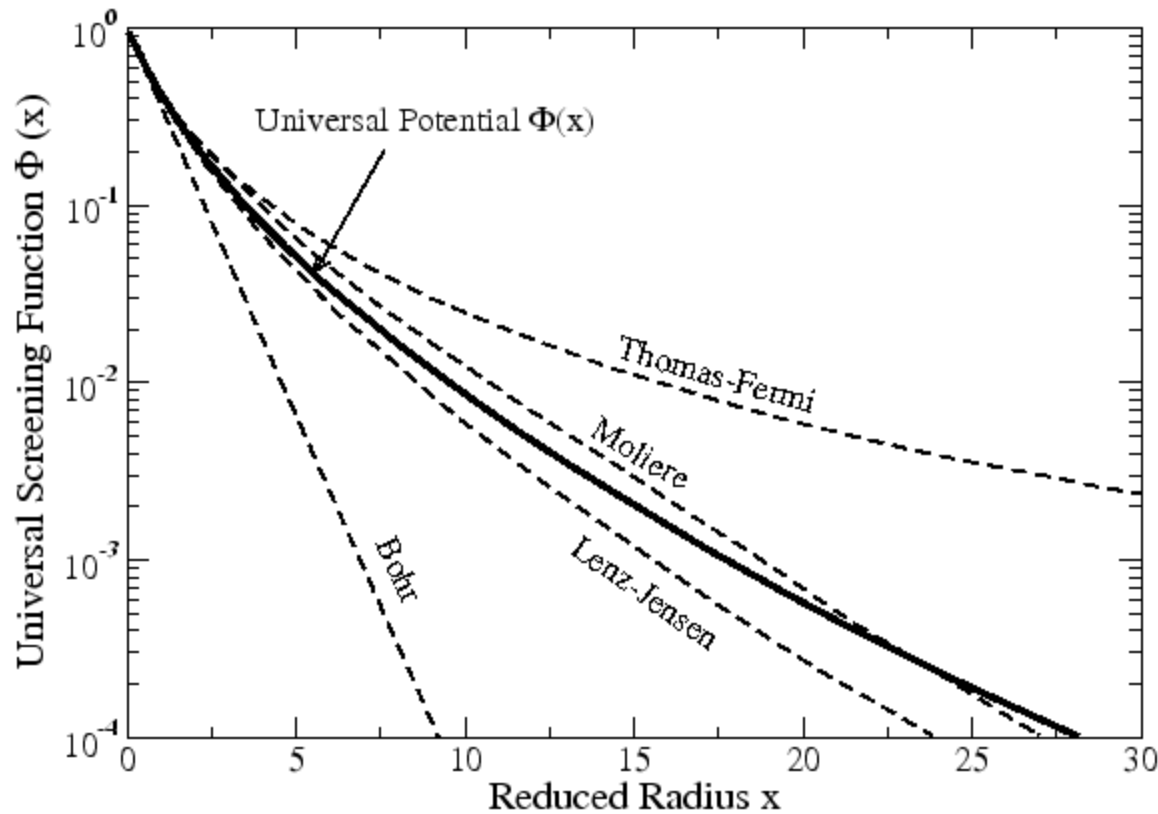


Схема модели радиационных повреждений, производимых при соударении нейтрона с атомами решетки

Схема радиационных повреждений и явлений, возникающих при соударении частицы с атомами конденсированного вещества



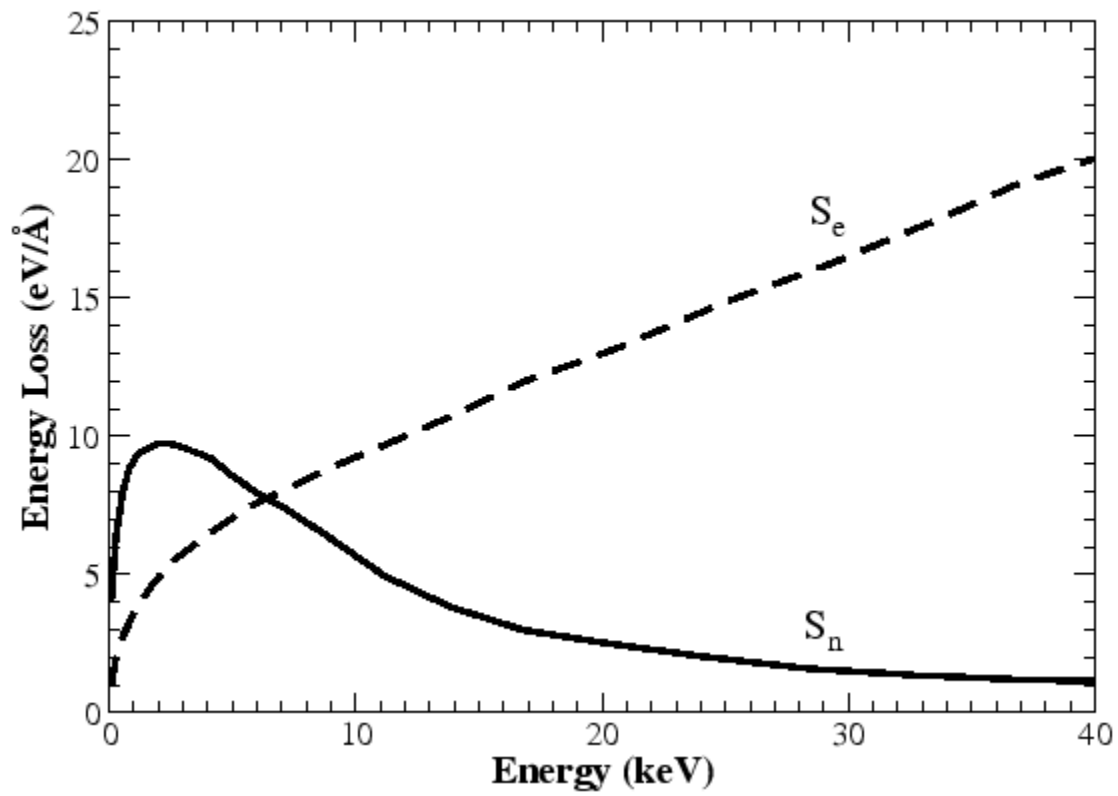


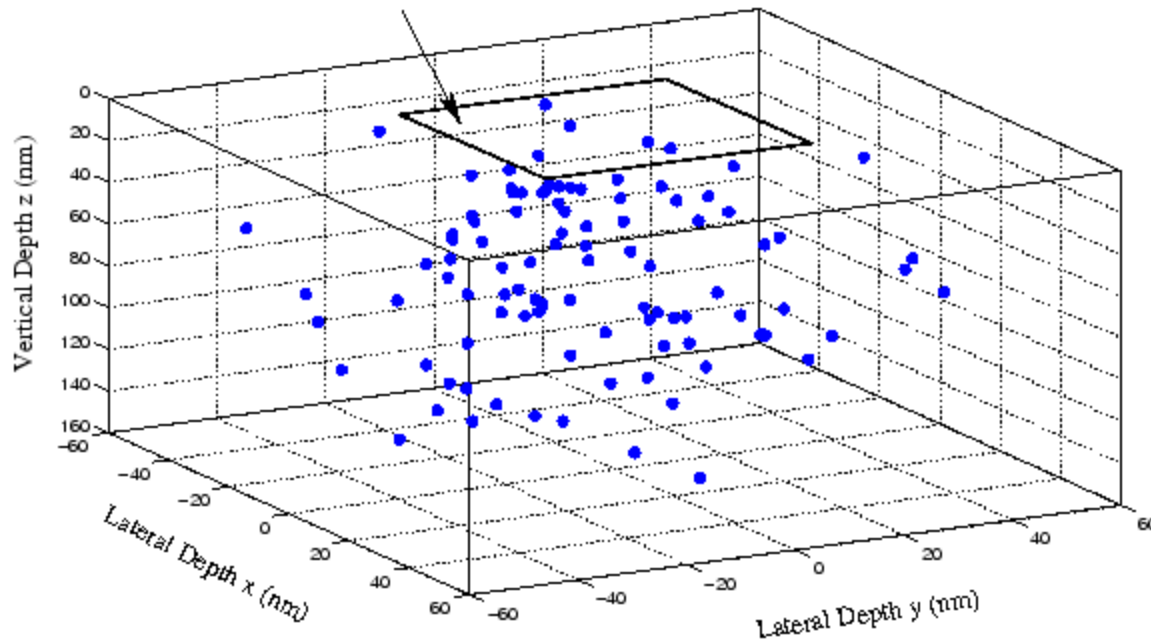
Радиационные повреждения быстрыми частицами обычно рассматривают в рамках парных потенциалов взаимодействия и классическом приближении для определения траектории

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2 q^2}{4 \pi \epsilon_0 r} \cdot \Phi(r) .$$

$$\Phi(x) = 0.1818 e^{-3.2x} + 0.5099 e^{0.9423x} + 0.2802 e^{-0.4029x} + 0.02817 e^{-0.2016x} ,$$

$$x = \frac{r}{a_U} \quad \text{with} \quad a_U = 0.8854 \frac{a_0}{Z_1^{0.23} + Z_2^{0.23}} \quad (\text{\AA}) .$$





Случайное поле повреждений !!!

Final position of 100 boron atoms implanted with 10keV into silicon.

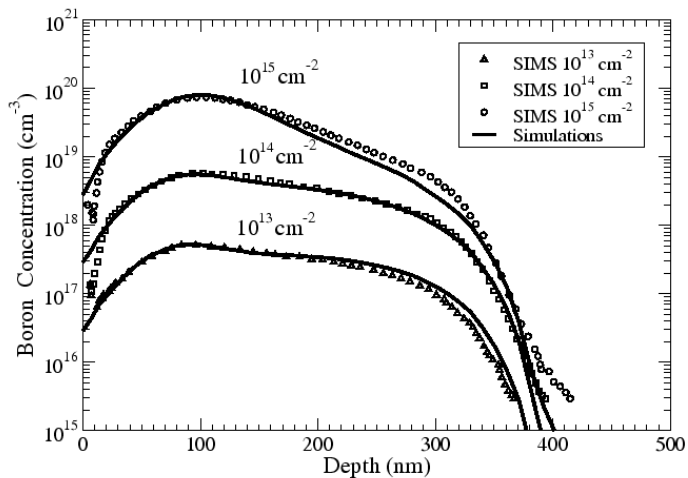
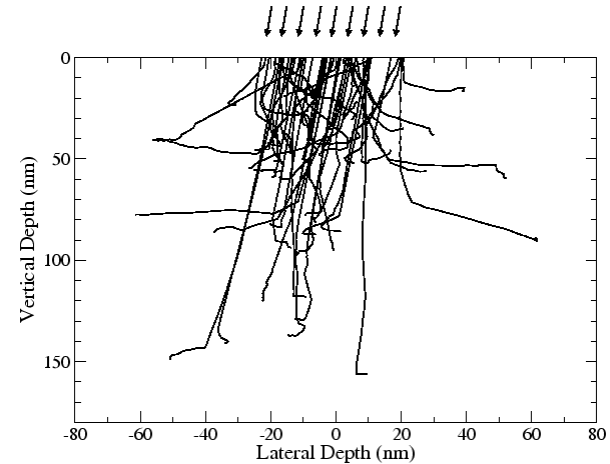


Illustration of the dose dependence for boron profiles using an energy of 20keV and a tilt of 0° , simulated with the Kinchin-Pease model.



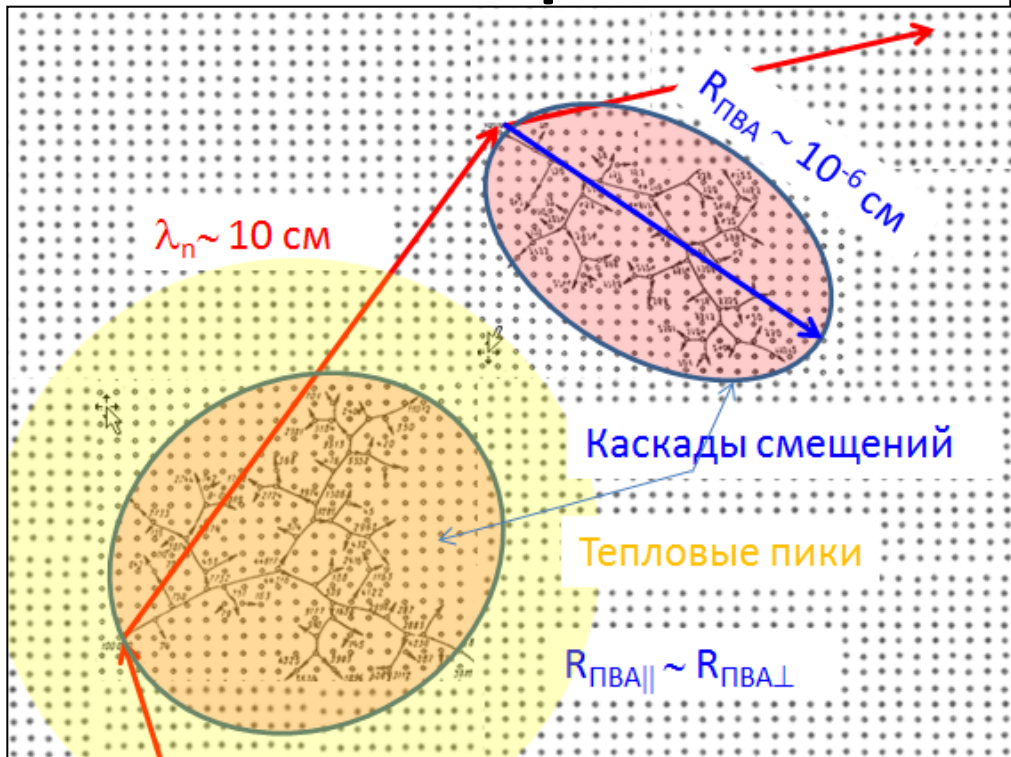
Monte Carlo simulation of 50 boron trajectories in crystalline silicon using an energy of 10keV and a tilt of 7° .

Случайное поле дефектов. Статистика повреждений

Процесс образования радиационных дефектов, как процесс рассеяния частиц пучка на атомах мишени и последующего рассеяния выбитых атомов, является случайным, поэтому в результате облучения в образце создается случайное поле повреждений.

Воспроизводимость экспериментальных результатов свидетельствует о том, что наблюдаемые величины являются функциями некоторых средних характеристик этого поля.

Поле смещений при облучении нейтронами $E_n = 1$ МэВ

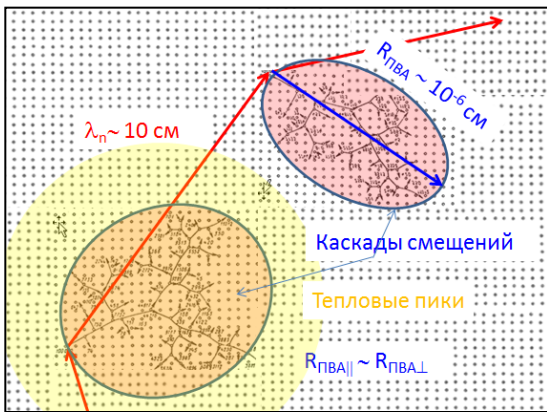
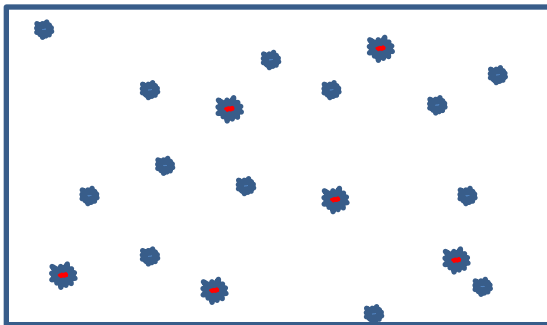
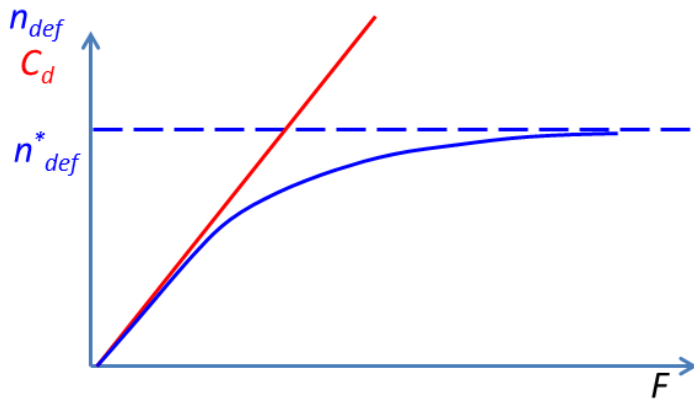


$$R(E) = \int_0^E \frac{dE}{\left(\frac{dE}{dx}\right)_n + \left(\frac{dE}{dx}\right)_e},$$

$$\lambda(E) = \frac{1}{N\sigma(E)} = \frac{1}{N \int_{T_{\min}}^{T_{\max}} \frac{d\sigma(E, T)}{dT} dT}.$$

Длина пробега ПВА зависит от переданной энергии T и меняется от $R(E_D)$ до $R(\Delta E)$. Поперечный размер каскада, т. е. длина пробега ВВА зависит уже от двух параметров: T и T' – энергий переданных при первом и втором столкновении. Следовательно, имеет смысл говорить о средних значениях геометрических размеров каскадов и, исходя из них, оценивать энергию, при которой образуется субкаскадная структура.

Модель повреждений



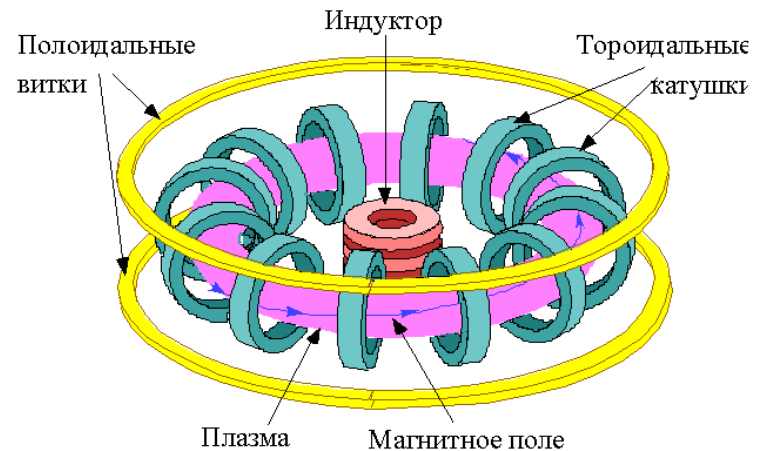
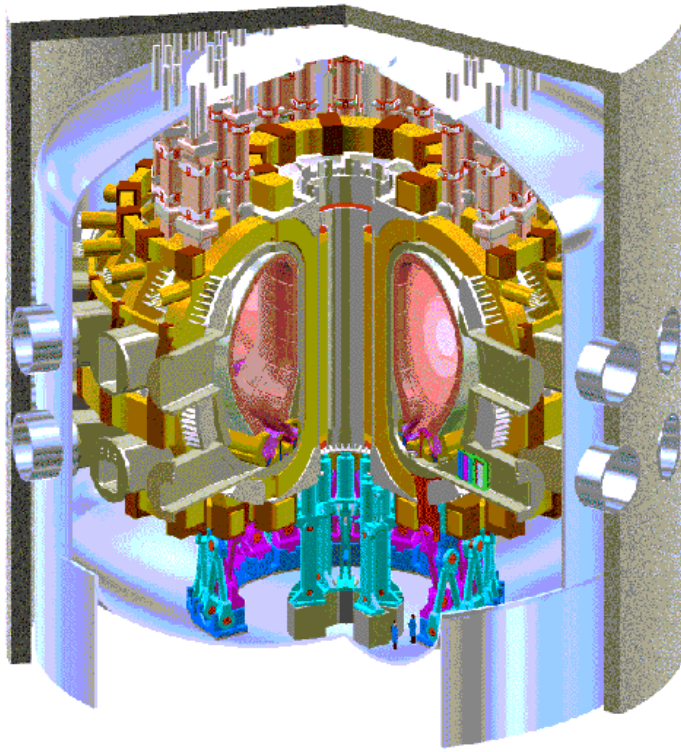
В случае облучения частицами создающими ПВА с малой энергий $\geq E_d$ концентрация дефектов однородно возрастает, но не превышает n_{def}^*

В случае облучения частицами дающими ПВА с энергий $\gg E_d$, образуется каскад с относительно высокой плотностью дефектов.

Пусть она равна предельной плотности n_{def}^*

Пример проведения согласованных экспериментальных, теоретических и работ по моделированию радиационных повреждений с целью предсказания ресурса сверхпроводящей магнитной системы (СМС) ТЯР.

Построение критерия подобия радиационных повреждений для сверхпроводников А15



Общий вид проектируемого ТОКАМАКа-реактора ИТЭР [40].

Таблица 2. Основные параметры больших экспериментальных ТОКАМАКов.
 ТОКАМАК TFTR, уже, выполнил свою программу и был остановлен в 1997 г.
 Остальные машины продолжают работать.

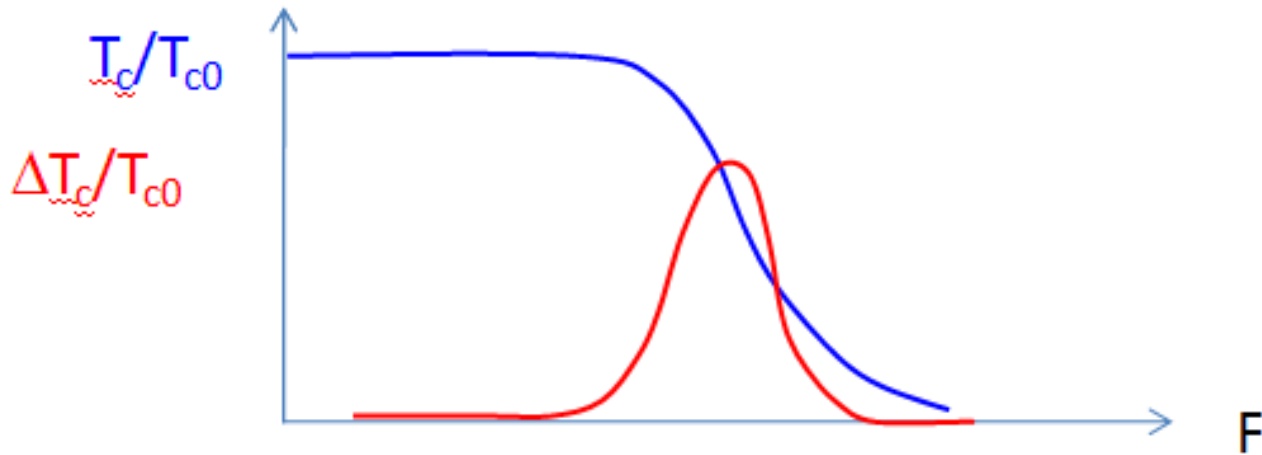
	Большой радиус, R (m)	Малый радиус, a (m)	Ток в плазме, I_p (MA)	Мощность нагрева плазмы, (МВт)	B, (Тл)	Q_{fus}	Особенности машины
JET	3	1	7	30	3.5	0.9	DT плазма, <u>дивертор</u>
JT60-U	3.3	1	3	30	4	1.06 ²⁾	<u>Дивертор</u> , пучки энергичных нейтральных атомов
TFTR	2.6	0.9	3	50	6	0.3	DT плазма
TORUS SUPRA	2.4	0.8	2	15	4	-	Сверхпроводящая магнитная система (NbTi)

Критические температуры для различных сверхпроводников разных классов A15

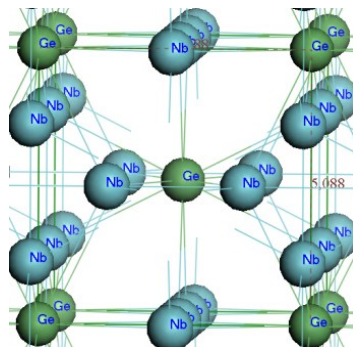
Соединения со структурой A15 (интерметаллиды) проявляют интересные свойства как сверхпроводящих, так и нормальных электронных характеристик. Например, представители этих соединений могут быть разделены на два класса по значению критической температуры: «высокотемпературные» и «низкотемпературные» (таб.).

«высокотемпературные»			«низкотемпературные»		
N	соединение	T_c , K	N	соединение	T_c , K
1	Nb ₃ Sn	18.0	1	Mo ₃ Si	1.56
2	Nb ₃ Al	18.8	2	Mo ₃ Ge	1.75
3	Nb ₃ Ge	24.0	3		
4	Nb ₃ Si	19.0	4		
5	V ₃ Si	17.0	5		

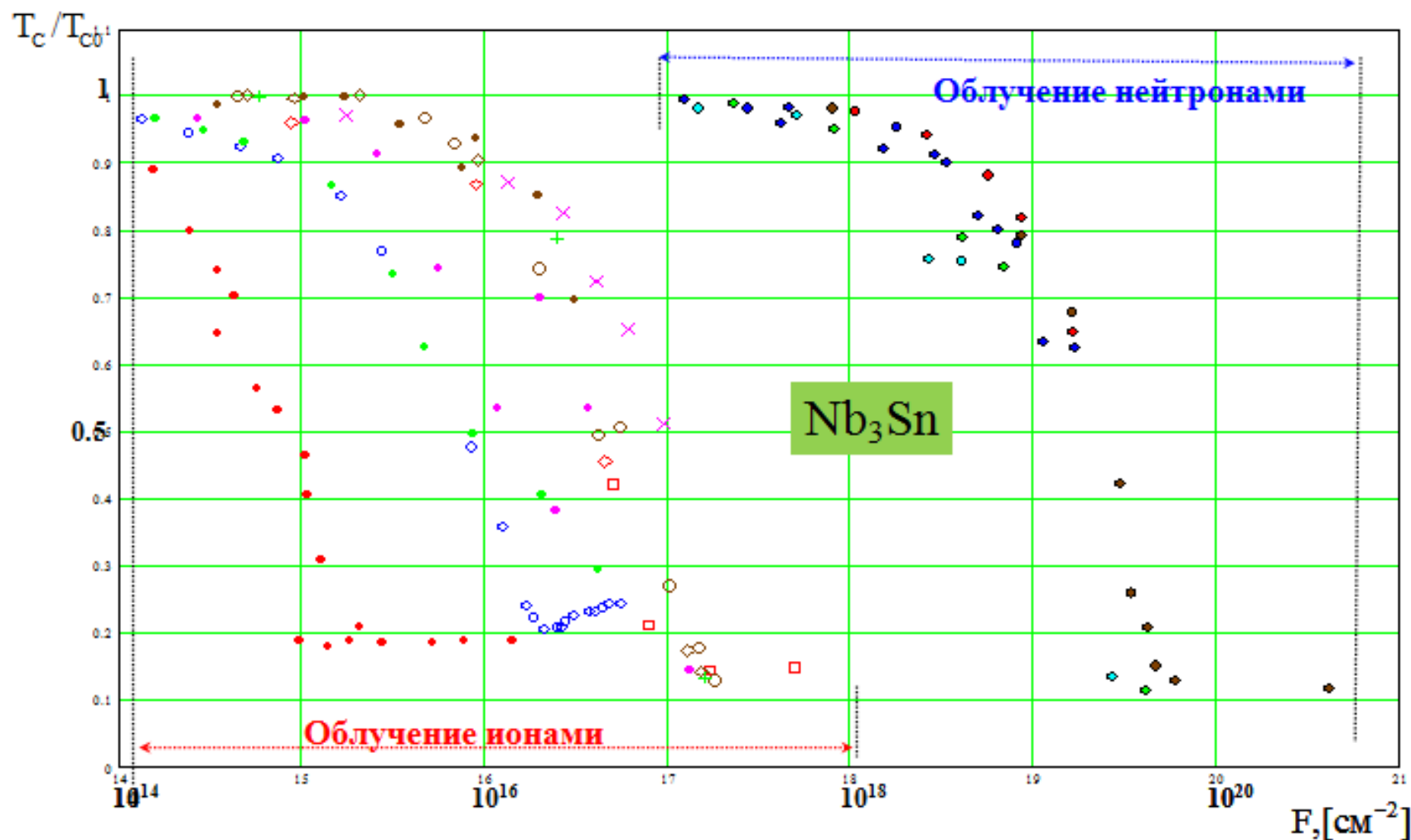
Критическая температура для соединений A15 с ростом флюенса падает.



Ширина сверхпроводящего перехода для соединений A15 с ростом флюенса ΔT_c сначала возрастает, потом падает, т.е. качественно ведет себя качественно подобно корреляционной функции поля дефектов.



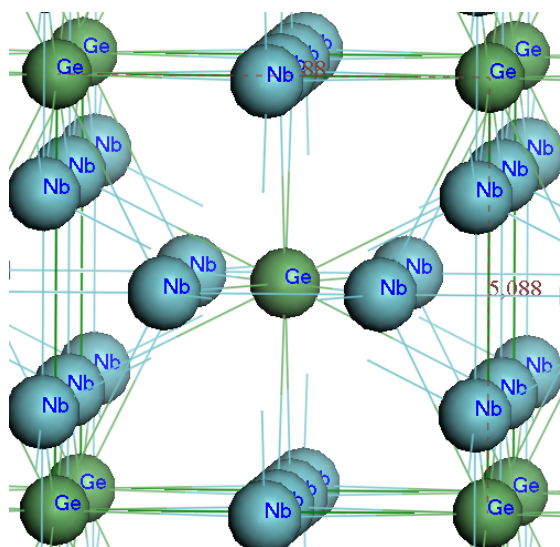
Экспериментальные данные зависимости T_C/T_{C0} от флюенса облучения ионами и нейтронами. Энергия E_i и тип ионов различны. Облучение нейтронами проводилось в реакторах деления. Характерная энергия нейтронов $E_n \approx 1$ МэВ. Температуры облучения от 4К до 700К.



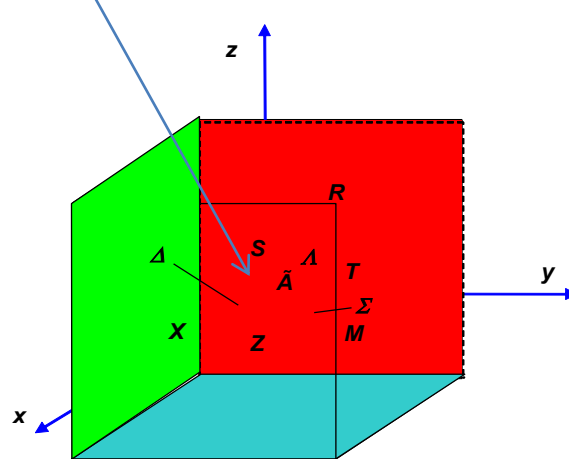
Своеобразие кристаллической структуры соединений A15 послужило толчком к созданию целого ряда теоретических моделей, основанных на представлениях о квазиодномерном характере зонного спектра d -электронов переходных металлов.

В рамках этих моделей плотность электронных состояний $N(E)$ характеризуется сингулярным поведением вблизи определенных точек зоны Бриллюэна.

Действительно, известно, что в чисто одномерном случае величина $N(\mu)$, где μ – энергия Ферми, расходится как $(E - E_0)^{-1/2}$, если уровень Ферми проходит вблизи центра E_0 зоны Бриллюэна (рис., точка Γ в центре координат)



a)



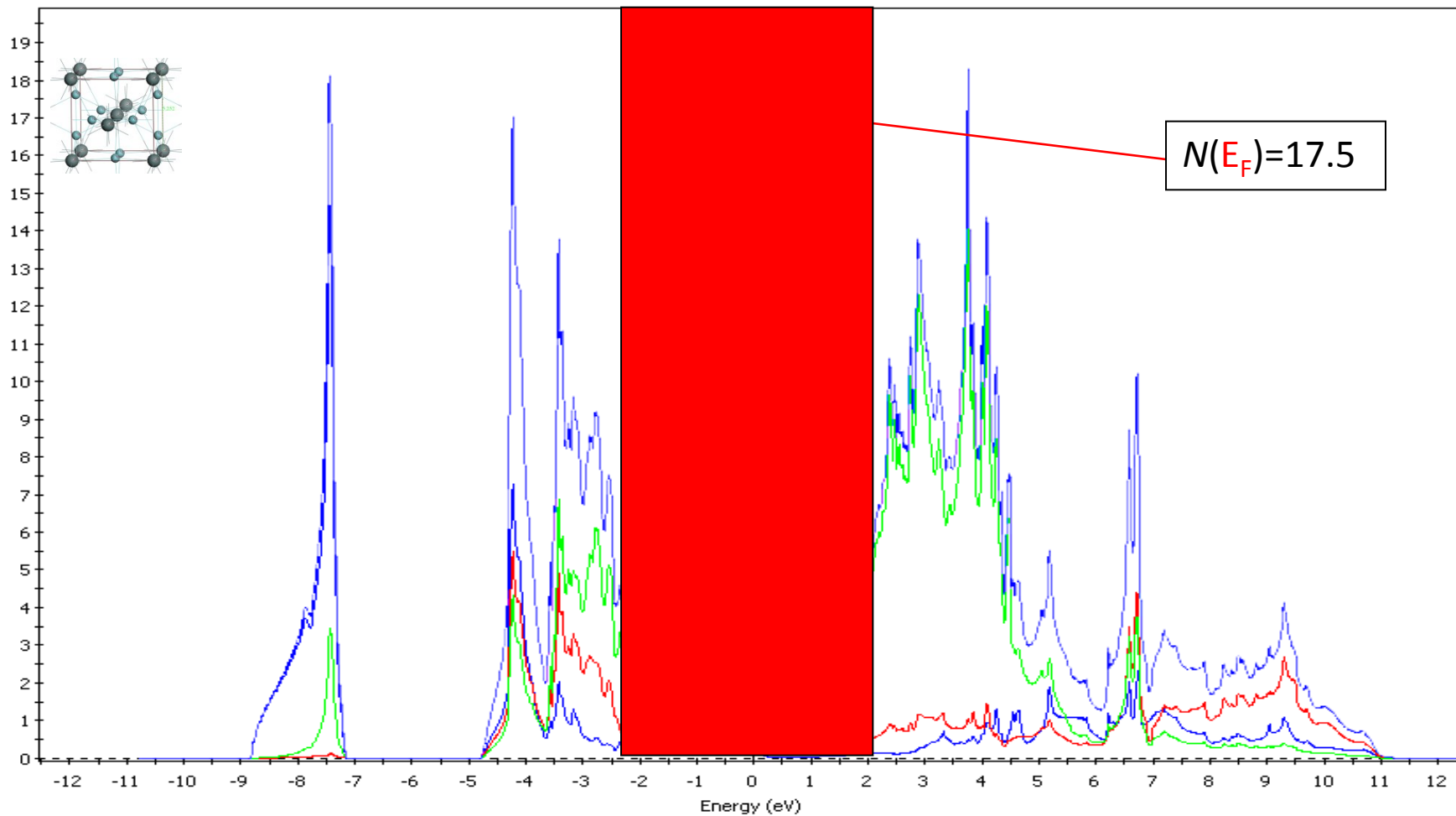
б)

Из результатов современных расчетов зонной структуры соединений A15 из первых принципов следует, что плоские участки дисперсионной зависимости $\varepsilon(k)$ на поверхности Ферми существуют не только вблизи центра зоны – точки Γ , но также вблизи точек M и R зоны Бриллюэна. Наличие плоских участков $\varepsilon(k)$ создает пики $N(E)$ в окрестности E_F в соответствии с общим выражением:

$$N(\varepsilon) = \frac{2V}{(2\pi\hbar)^3} \cdot \int \frac{dS_\varepsilon}{|\nabla_{\vec{k}} \varepsilon|}$$

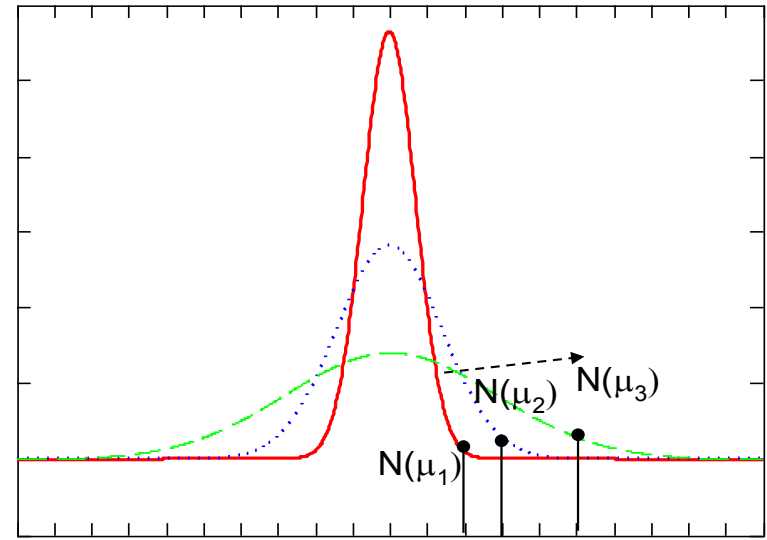
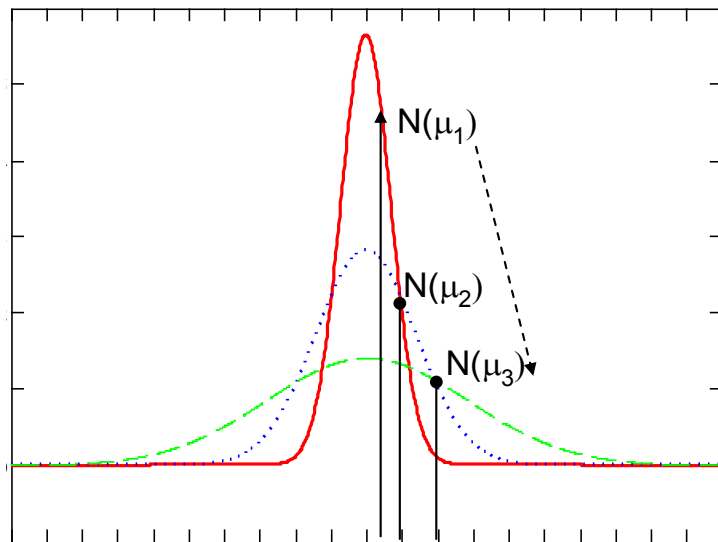
$\text{Nb}_3\text{Sn } \sigma_{zz}=0$

Density of States (electrons/eV)

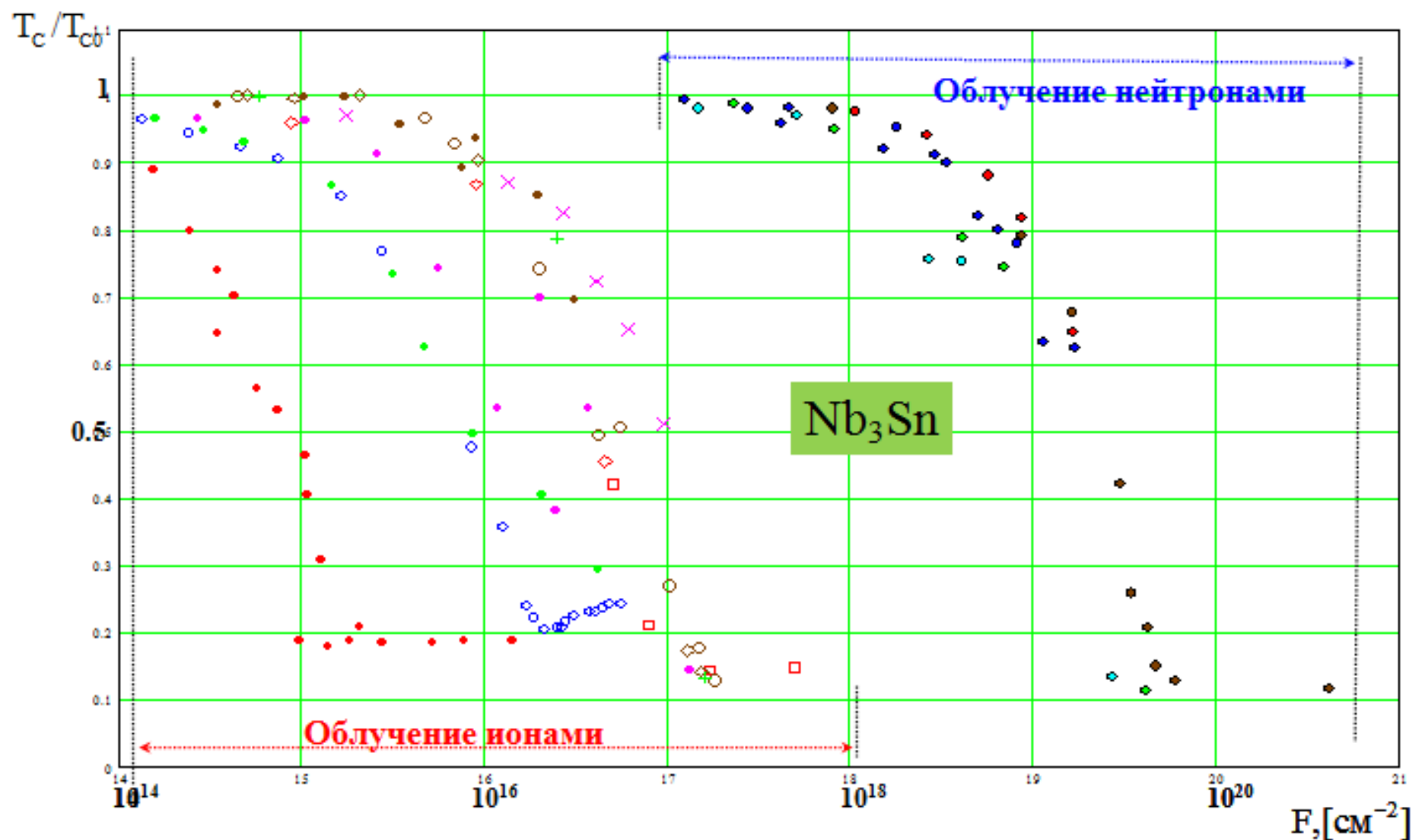


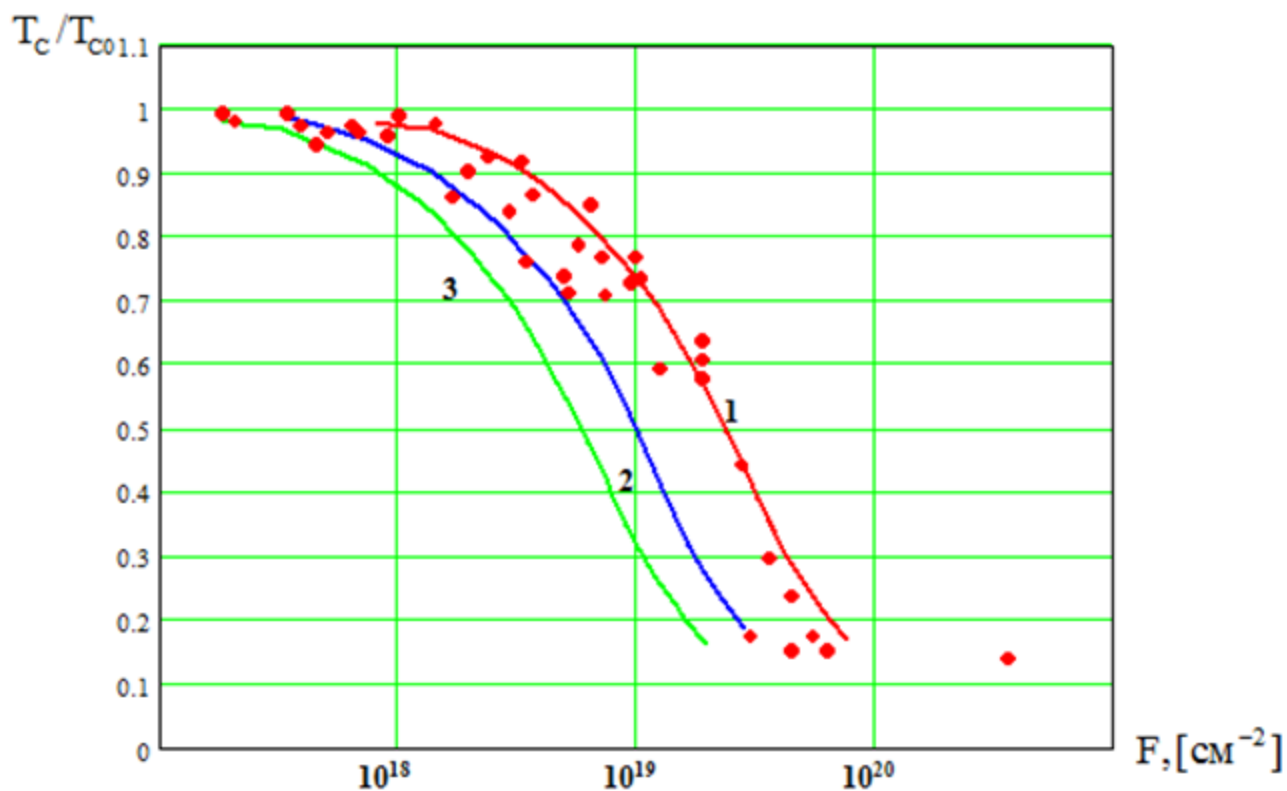
— s — p — d — Sum

Изменение модельной плотности состояний для «высокотемпературных» и «низкотемпературных» соединений A15 при увеличении числа дефектов.



Экспериментальные данные зависимости T_C/T_{C0} от флюенса облучения ионами и нейтронами. Энергия E_i и тип ионов различны. Облучение нейтронами проводилось в реакторах деления. Характерная энергия нейтронов $E_n \approx 1$ МэВ. Температуры облучения от 4К до 700К.





Зависимость приведенной критической температуры от флюенса нейтронного облучения. Расчетные данные для энергий нейтронов: 1 – $E_n=1$ МэВ; 2 – E_n =спектр за защитой ТЯР; 3– $E_n= 14$ МэВ. ● - точки соответствуют экспериментальным данным для нейтронов со спектром реакторов деления (литературные данные)

РЕСУРС СМС ТЯР

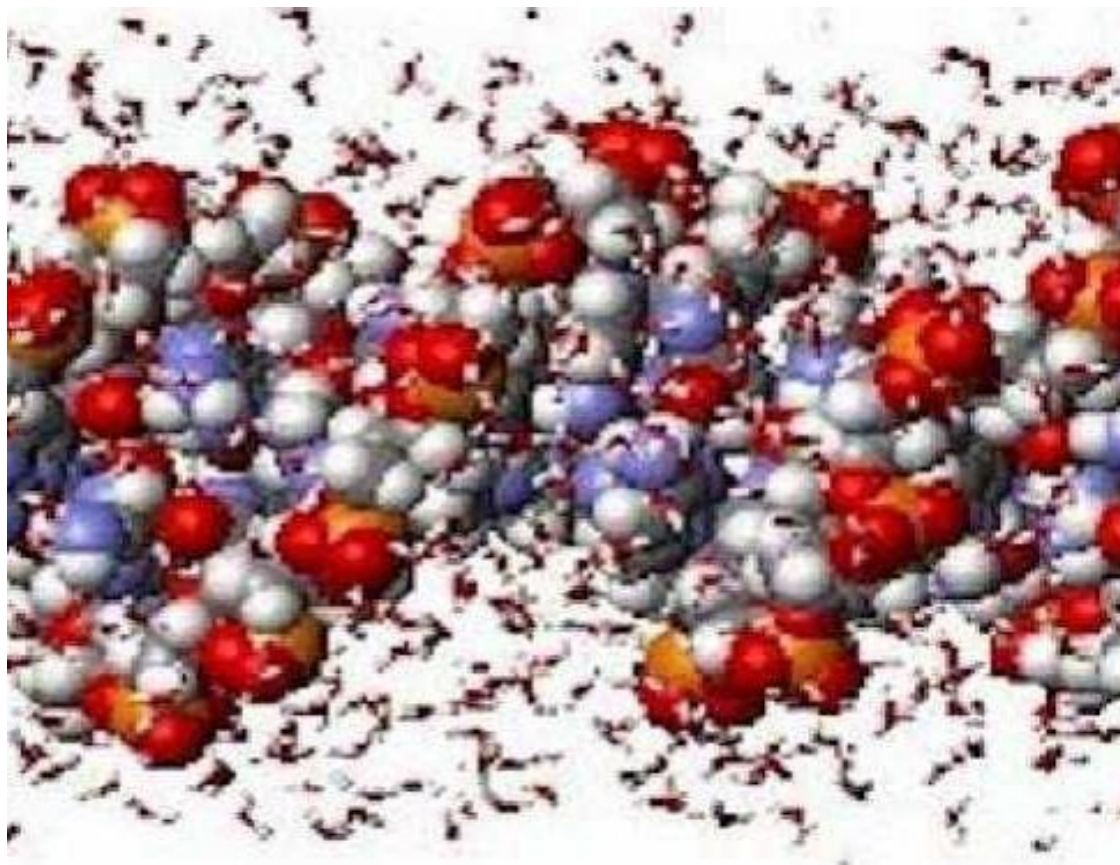
- изменение значения критических параметров А15 происходит вследствие размытия тонкой структуры плотности электронных состояний под действием радиационных дефектов;
- критическая температура является универсальной функцией числа смещений на атом для всех видов облучений;
- основным типом дефектов, ответственным за деградацию критической температуры при облучении соединений А15 являются дефекты замещения (антисайты), их концентрация возрастает линейно с флюенсом облучения на основном интервале деградации T_c .

Оценка флюенса нейтронов, при которой критическая температура сверхпроводника ниобий-олово должна деградировать в два раза:

для нейтронов с энергией 14 МэВ (окно в защите ТЯР) - $6 \cdot 10^{19}$ н/см²;

для нейтронов с энергетическим спектром за защитой на обмотках СМС - $1 \cdot 10^{19}$ н/см².

Атомистическое моделирование наноструктур и материалов



Описание курса

Курс предназначен для учащихся, заинтересованных в понимании физических и химических свойств молекул, наносистем и конденсированных сред.

Рассмотрены физические *модели межатомных сил* от *парного потенциала Леннарда-Джонса* до *последовательного многоэлектронного квантово-механического решения из первых принципов.*

Излагаются основные принципы и методы, использованные при разработке программного обеспечения:

Hyper Chem,

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.

ПОЛНАЯ ПРОГРАММА

Введение

1. Квантовая механика:

уравнение Шредингера для твердого тела, приближение Борна-Опенгеймера, вариационный принцип и проблема собственного значения матриц, электронный спин, спин-орбитали, теория молекулярных орбиталей, теория валентных связей, проблема многих тел.

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

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

ПОЛНАЯ ПРОГРАММА

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

5. Полуэмпирические приближения

6. Энергетика и структуры при эмпирических потенциалах, парных потенциалах, псевдопотенциалов, кластерные вычисления (МД и МС).

7. Молекулярная динамика, Пространственные методы укрупненных ящиков, ускоренный метод MD.

8. MD Car-Parrinello - MD ab-initio.

Статистическая термодинамика и метод Монте-Карло.

Применение метода МС, базирующегося на данных ab-initio, к адсорбции.

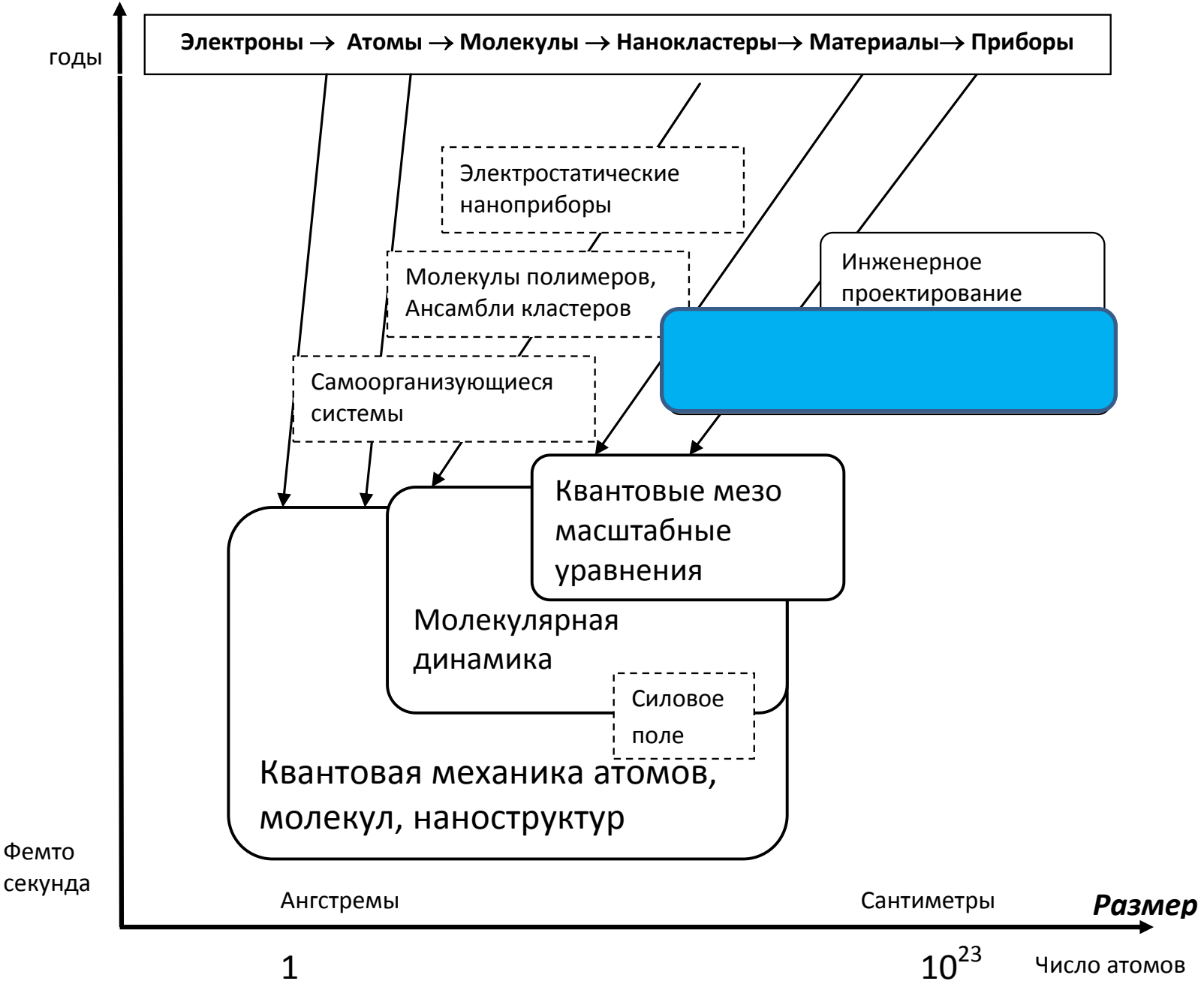
Ab-initio термодинамика и предсказание структуры.

Кинетика методом МС, мезомасштабные модели.

Введение

- Главной задачей расчетов является предсказание свойств соединений с помощью теоретических (квантово-механических) расчетов.
- Молекулярные, нано и конденсированные системы содержат большое количество взаимодействующих электронов. По этой причине в квантовой расчетах приходится строить различные приближённые, обычно численные или полуаналитические решения.
- Решение уравнения Шредингера строится на уравнении Хартри-Фока-Рутана итерационным методом (SCF-Self Consistent Field — самосогласованное поле) и состоит в нахождении вида волновой функции.





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

Ab-initio

- С латыни «от начала» или «от черты».
- Ошибочно считать, что никаких приближений не делается.
- «Точно» решается только для атома водорода.

Основные приближения, используемые в квантовых расчетах ab-initio :

1. Приближение Борна-Оппенгеймера: движение электронов и движение ядер разделено (ядра можно принять за неподвижные объекты).
2. Одноэлектронное приближение: движение электрона не зависит от движения других электронов системы. Введение самосогласованного среднего поля. В связи с этим в уравнения, используемые в квантовых расчетах, вносятся поправки на **уточнение взаимодействия электронов**.

3. Приближение МОЛКАО (молекулярная орбиталь как линейная комбинация атомных или псевдоатомных орбиталей): в данном подходе волновая функция молекулы представляется как сумма атомных орбиталей с коэффициентами:

$$\Psi(r) = c_1\phi_1 + c_2\phi_2 + \dots + c_n\phi_n, \text{ где}$$

$\Psi(r)$ — волновая функция (а точнее — её электронная часть)

c_1 — коэффициент при атомной орбитали

ϕ_1 — волновая функция атомной орбитали —

псевдоатомные функции:

Функций $\phi \sim \exp(-R)$ (Слетеровскими)

Функций $\phi \sim$ гауссовского типа $\exp(-R^2)$

4. Пренебрежение релятивистскими эффектами.

Приближение Борна-Оппенгеймера

- Предполагается, что движение электронов и ядер может рассматриваться отдельно;
- Электроны много легче и поэтому двигаются быстрее, чем ядра ($T_N = 0$, $V_{nn} = \text{const}$ для данной конфигурации молекулы, кластера);
- Пренебрежение энергетическими изменениями из-за:
 - Искажений конфигураций при колебаниях
 - Взаимодействия электронов с колебаниями ядер (Яна-Теллера эффект)

Одноэлектронное приближение

Приближение среднего самосогласованного поля электронов

- Уравнение решается при фиксированной геометрии ядер, так что переменными в данном случае являются координаты электронов. Основным вопросом, который необходимо предварительно рассмотреть, касается вида искомой электронной волновой функции, и критериям, которым она должна удовлетворять.
- Гамильтониан характеризуется тремя основными свойствами инвариантности:
 1. Инвариантность относительно преобразований, принадлежащих группе **пространственной симметрии ядерного остова рассматриваемой системы;**
 2. Инвариантность относительно изменений спиновых координат электронов;
 3. Инвариантность относительно перестановок номеров электронов.

Общее руководство

- Вариационный принцип:
 - следуя принципам квантовой механики получаем низший предел для энергии электронов;
 - найдя лучшее приближение для $\Psi \rightarrow$ получаем более низкое значение энергии
 - $\delta E / \delta c_{ik} = 0$ для всех базисных функций и всех молекулярных орбиталей (i)

Общее описание метода DFT

Простейшим приближением здесь является [приближение локальной плотности](#), основанное на точном расчёте обменной энергии для пространственно однородного электронного газа, который может быть выполнен в рамках модели Томаса — Ферми и из которого можно получить также и корреляционную энергию электронного газа, но однородного.

Метод теории функционала плотности широко применяется для расчётов в [физике твёрдого тела](#) с 1970-х годов. В ряде случаев даже использование простого приближения локальной плотности дает удовлетворительные результаты, соответствующие экспериментальным данным, причём вычислительная сложность метода невысока относительно других подходов к проблеме многих частиц в квантовой механике.

Тем не менее, долгое время метод был недостаточно точен для расчётов в области [квантовой химии](#), пока в 1990-х годах не произошёл **заметный сдвиг в описании [обменного и корреляционного взаимодействий](#)**.

Некоторые примеры
моделирования и сравнение с
экспериментом

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

Прогнозируемое развитие нанопублики, 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:

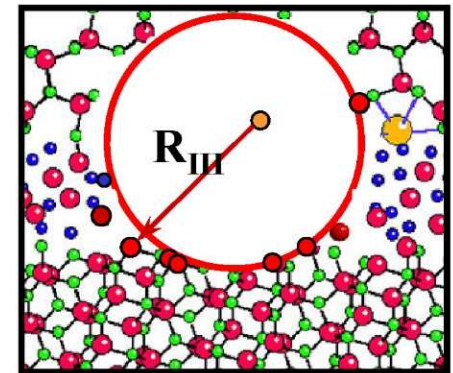
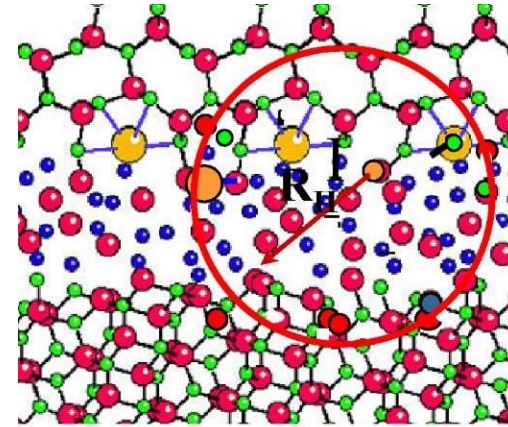
Математически строгое разделение шкалы расстояний;

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.



Атомистическое моделирование не новый предмет. Оно 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?

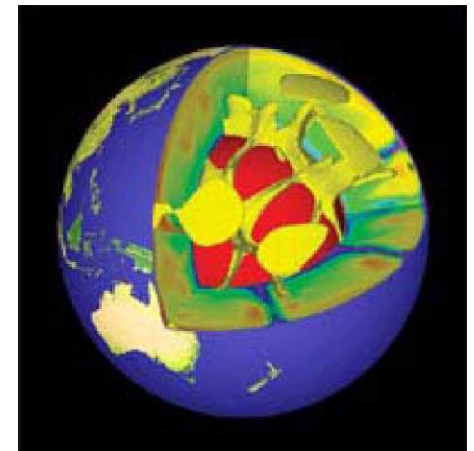
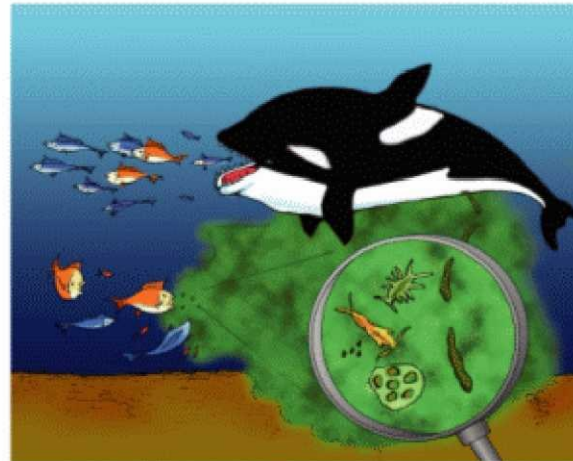
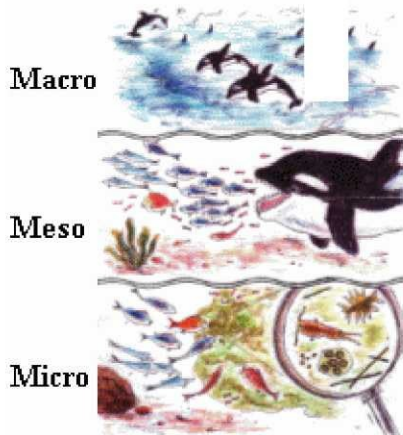
Without Nuclear Experiments



- 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



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

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

Ядро земли и других планет

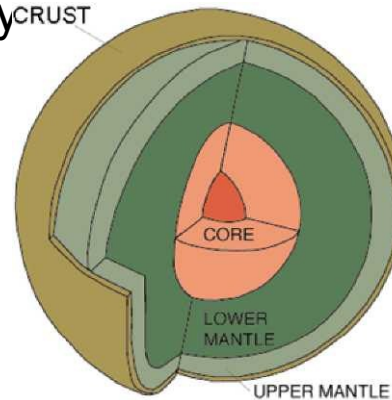
Моделирование используется , когда **эксперимент** является невозможным, трудным или дорогим, например:

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. Alfe¹, M. J. Gillan¹ & G. D. Price²

¹ *Research School of Geological and Geophysical Sciences, Birkbeck College and*

University College London, Gower Street, London WC1E 6BT, UK [†] *Physics and Astronomy Department, University College London, Gower Street, London WC1E 6BT, UK*

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

Состав, фазы и свойства вещества мантии Земли.

Эксперименты затруднительно проводить при высоком давлении (~300 ГПа) и с изменяемой температурой.

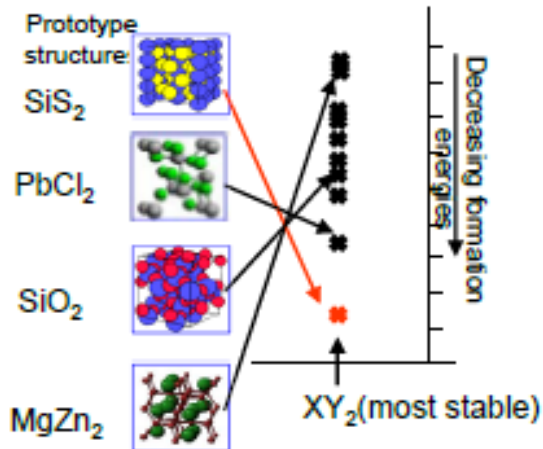
Оценка тепловых свойств (теплопроводности, теплоемкости) .

Оптимизация и исследование электрических и магнитных свойств

Сверхпроводимость при высоком давлении 203 К при 175 ГПа на SH2.

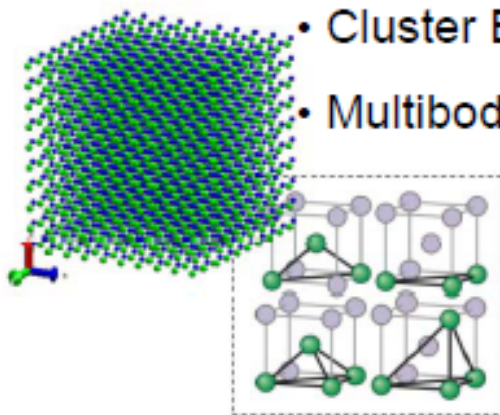
Вычисление стабильности фаз сплавов

Calculate stable phase structures of new alloys

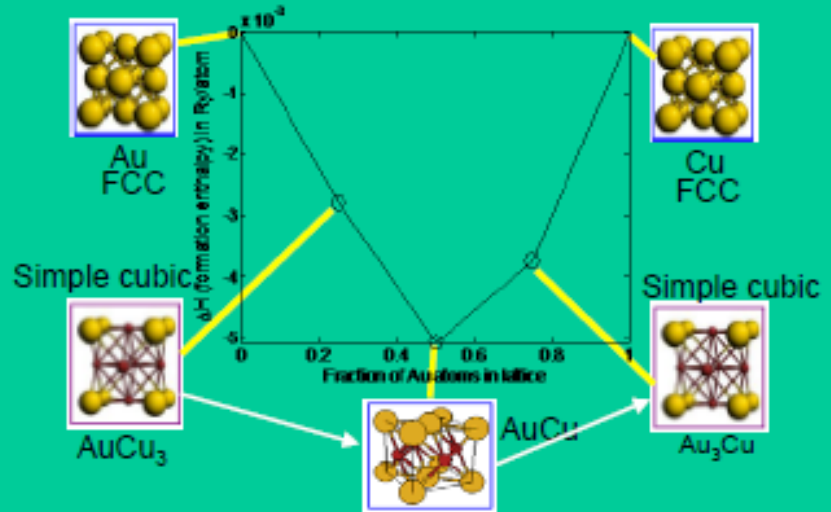


Search for lowest energy configuration using techniques such as:

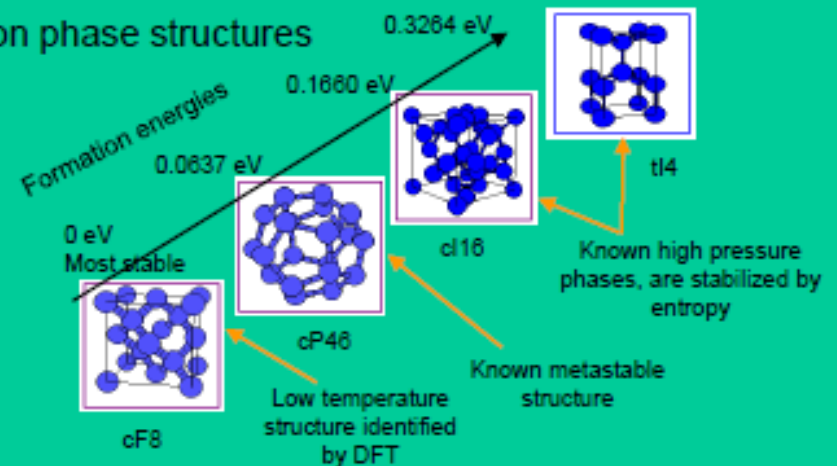
- Cluster Expansions
- Multibody Expansions



AuCu low temperature phase diagram



Silicon phase structures

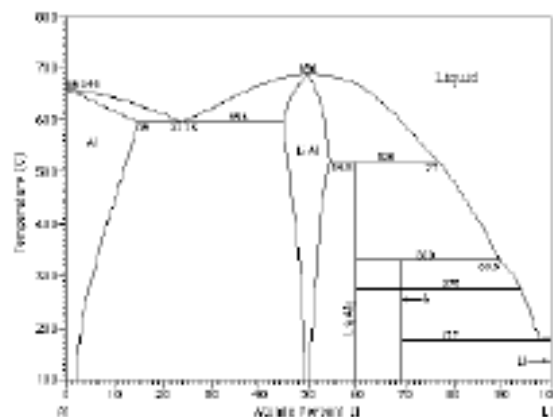


Фазовые диаграммы: Метастабильность Al-Li

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

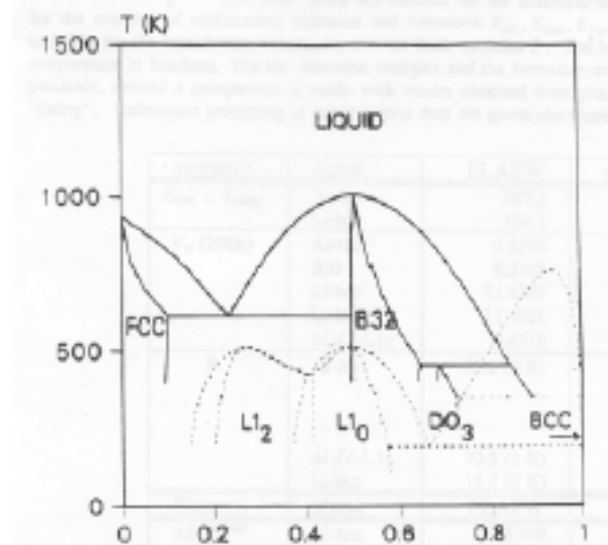
- > Al-Li является перспективным сплавом для планеров самолетов в 1980-ых (Al-Cu используется в настоящий момент),
- > Литий - самый легкий твердый элемент, замещающий медь, и использование сплавов Al-Li, как предполагалось, сделало бы возможным применение более легких сплавов, однако, сплавы Al-Li не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

Experimental



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

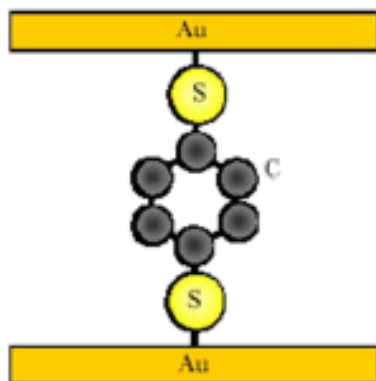
Calculated



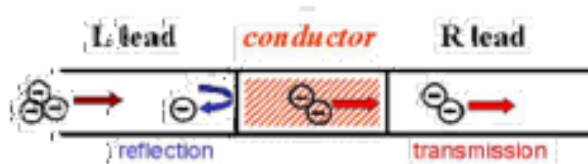
- > Из фазовой диаграммы Al-Li (устойчивые фазы), можно видеть, что fcc твердый раствор является равновесным в этом соединении;
- > Метастабильный осадок усиливает материал, но он быстро распадается для экспериментального обнаружения;
- > Используя вычисления, фаза, которая является метастабильной, может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

Интегрированный многомасштабный подход к вычислению характеристик молекулярных электронных приборов

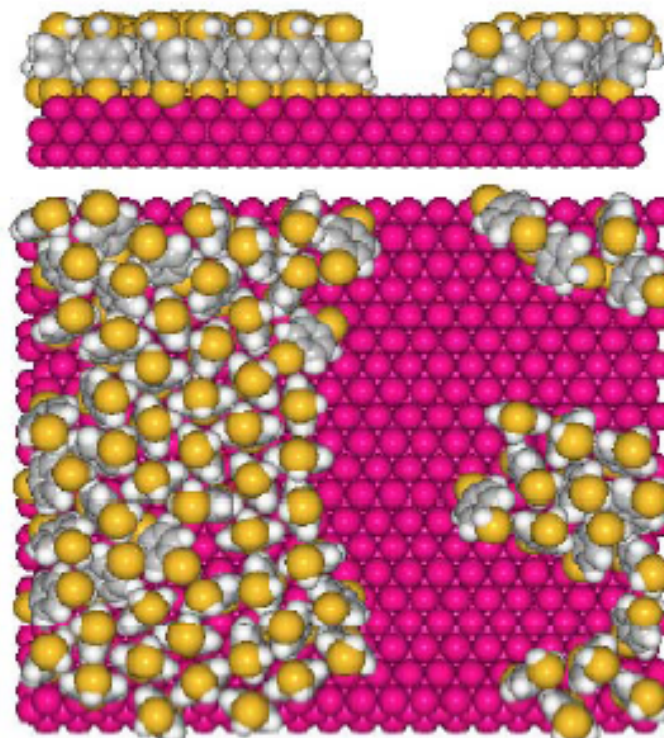
- Develop theory, algorithms & software to understand, and eventually to design, self-assembled molecular electronic devices.



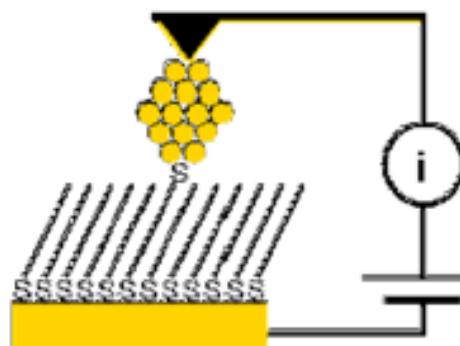
Schematic of BDT molecule attached to gold electrodes



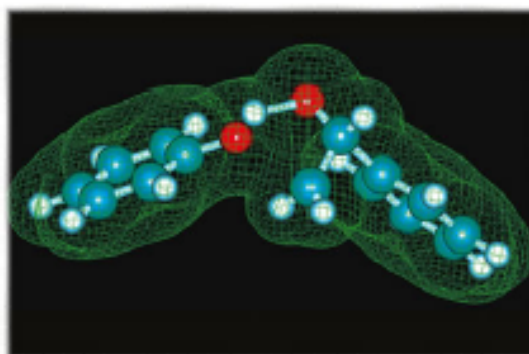
Geometry of a typical quantum conductance calculation. Electrons traveling from the left lead can be reflected or transmitted on the contact region. Similarly, the electrons can be reflected at the conductor.



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](#)

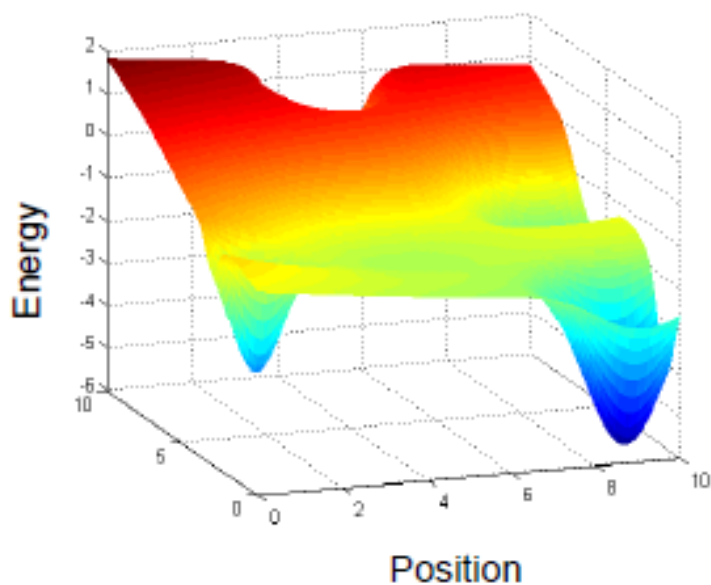
[P. T. Cummings & Y. Leng](#)

Приложения расширенного многочастичного метода: адсорбция

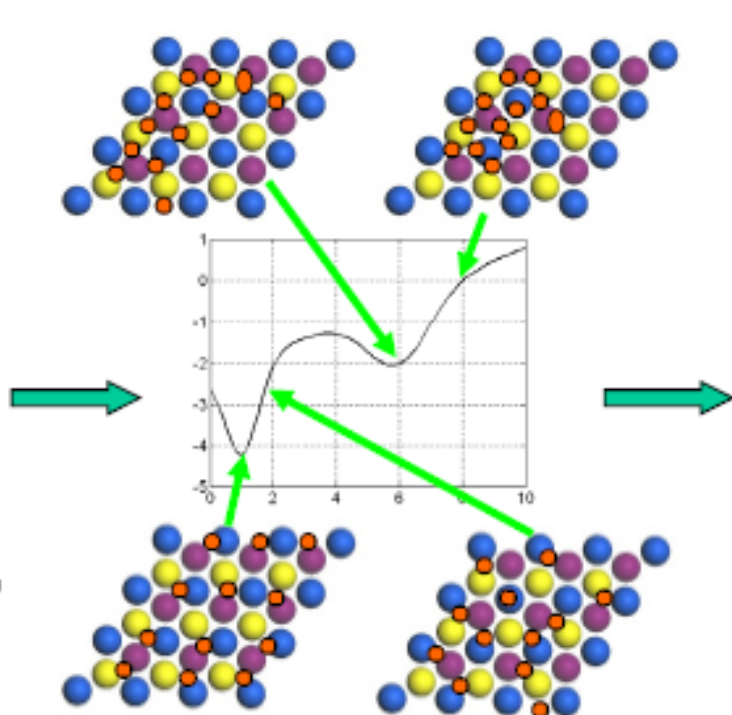
Use multibody expansions to generate ab initio accuracy **potential energy surfaces** (PES) with great computational savings

Utilize PES to understand adsorbate-surface interactions

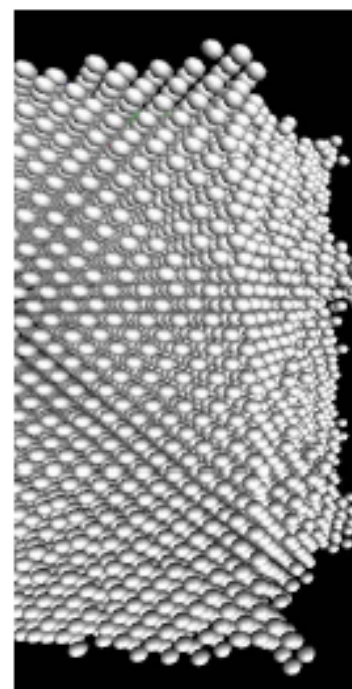
Towards designing topology and chemical structure of surfaces to enhance adsorption



Generating the n -dimensional PES



Utilizing PES to find optimal configuration

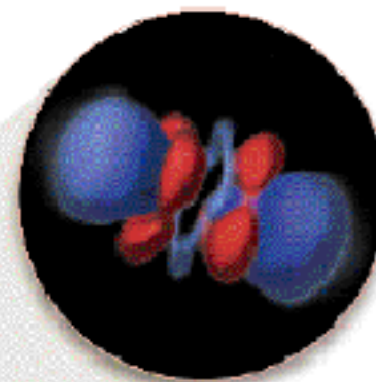
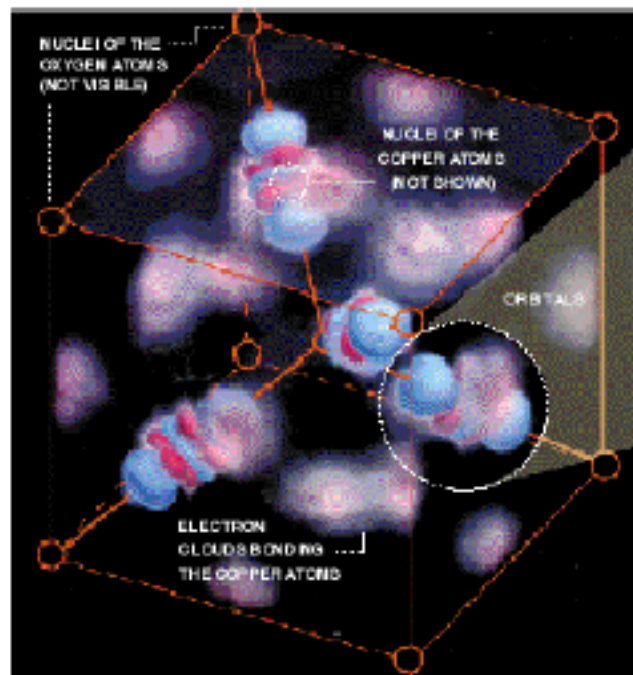


Constructing the optimal topology

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.](#)

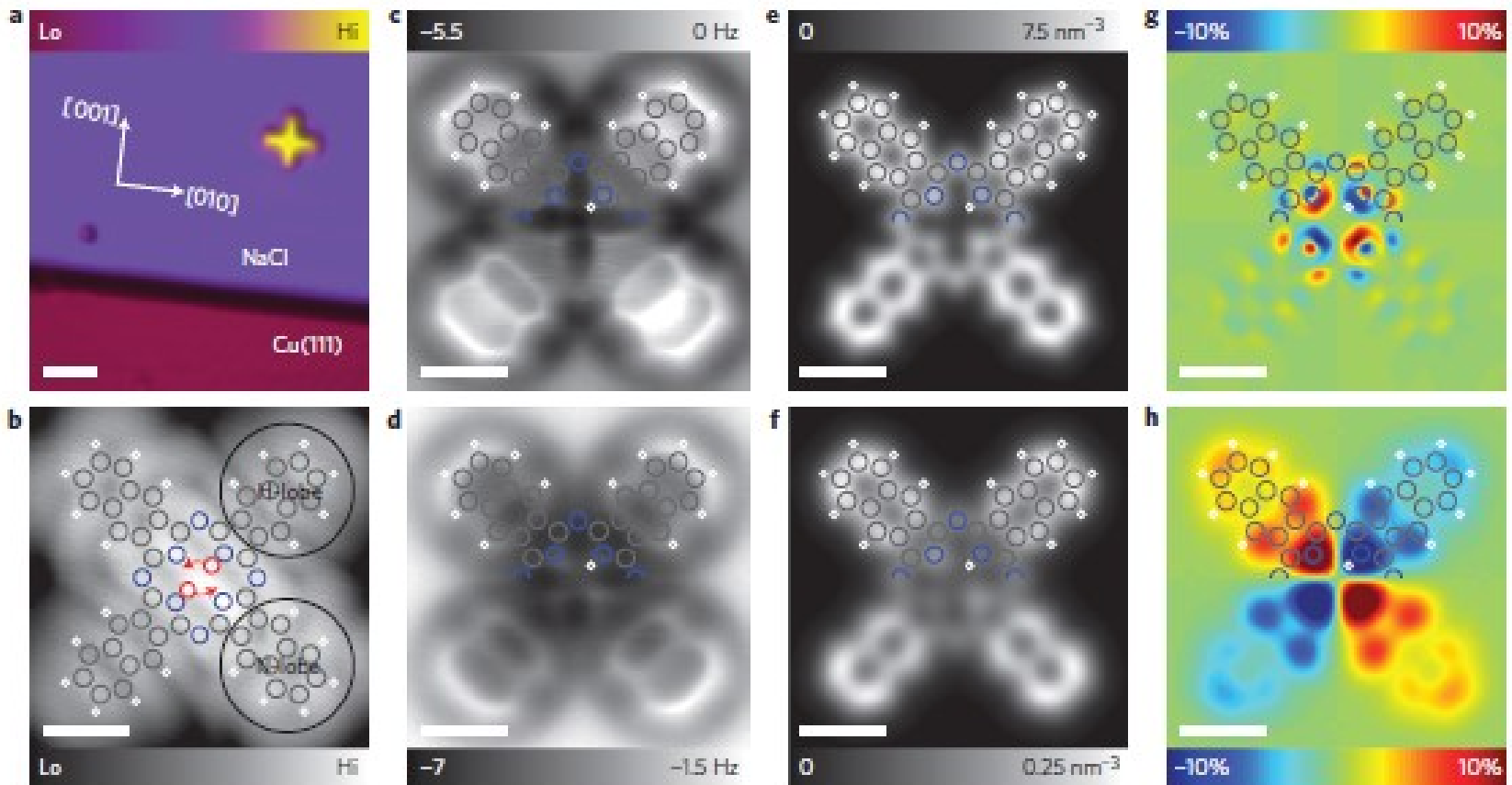


ORBITALS are the clouds of electrons shared between atoms in a molecule.

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.

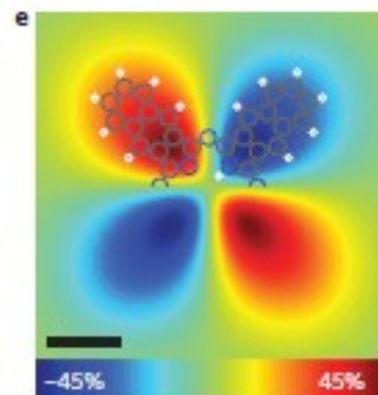
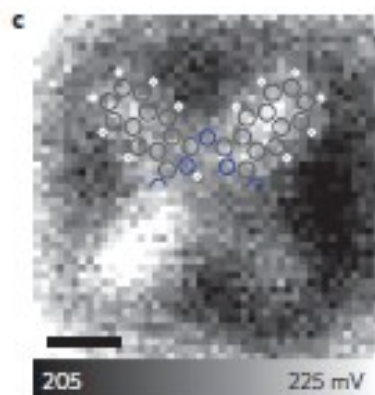
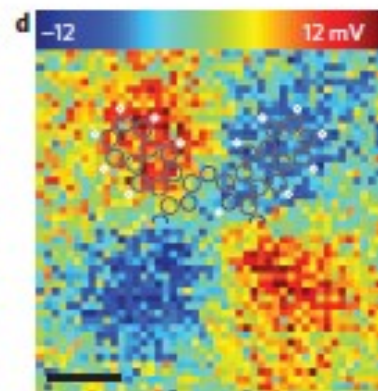
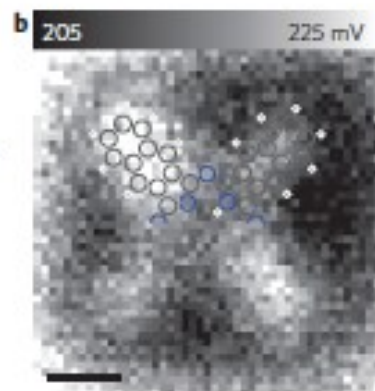
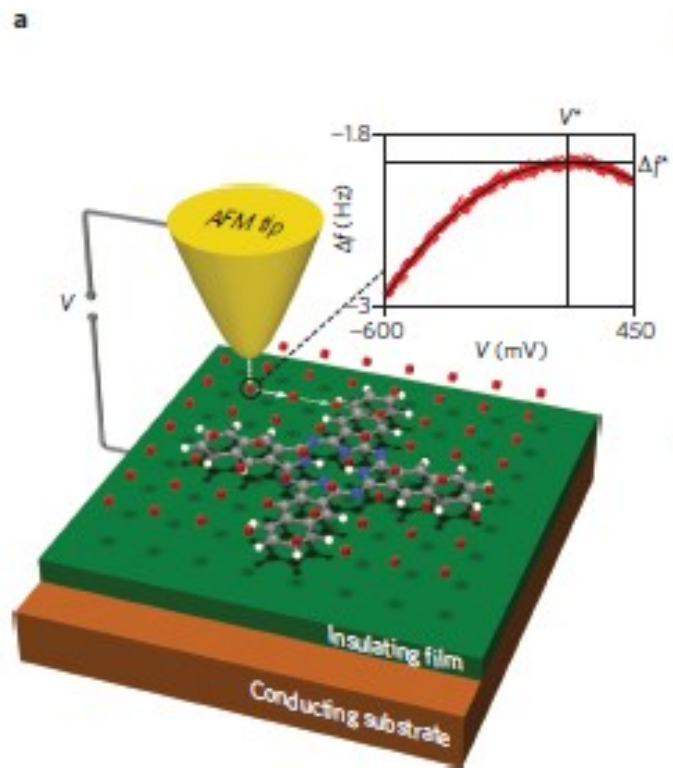
Source: Arizona State University



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

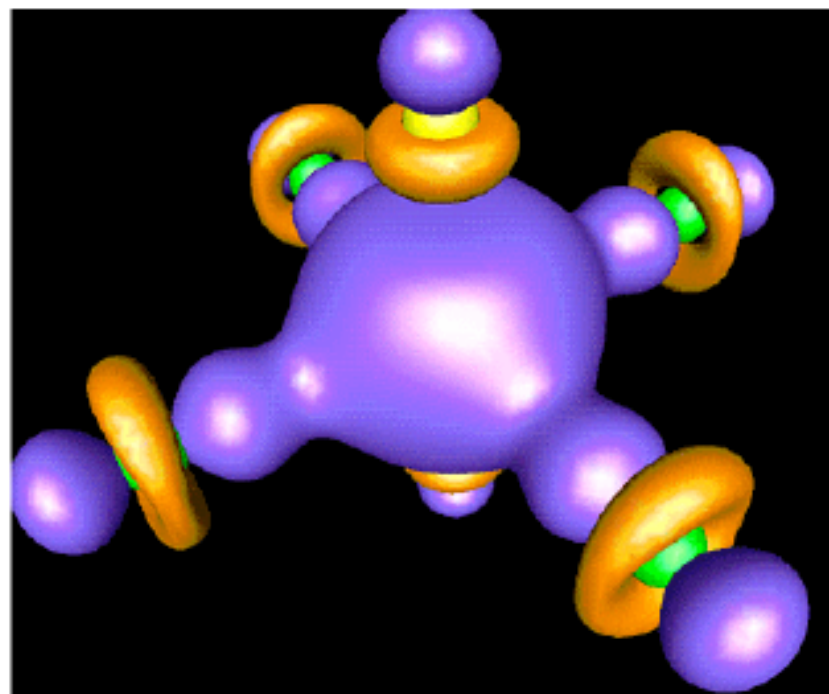
Вычисленные в приближении DFT атомарные позиции покрыты кружками в b и в верхних половинах c-h.

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.

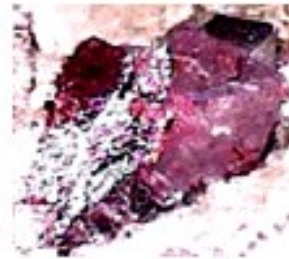
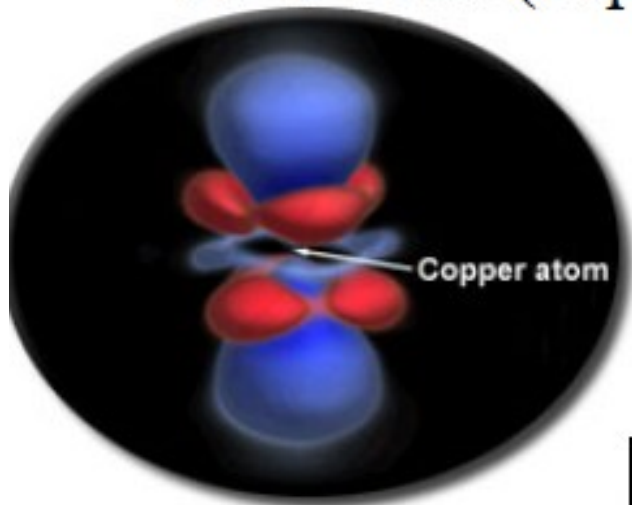


O_{2s} density

Расчет
молекулярных
орбиталей и
распределения
электронной
плотности

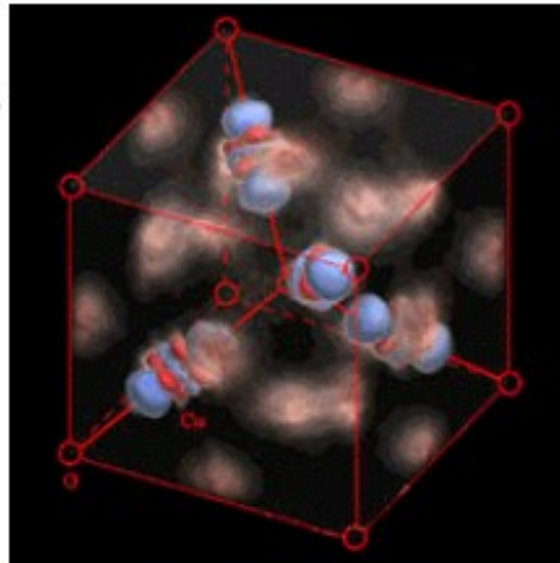
Cu-O СВЯЗИ В ОКСИД-МЕДНЫХ СВЕРХПРОВОДНИКАХ

Cu-O bond (experiments)

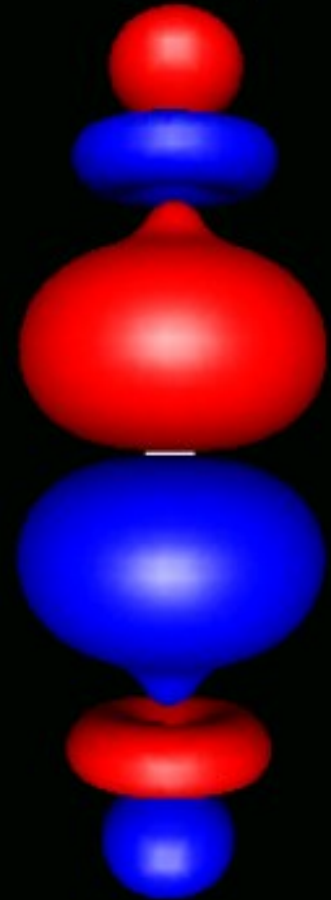


Copper-Oxygen Bond in Cuprite

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

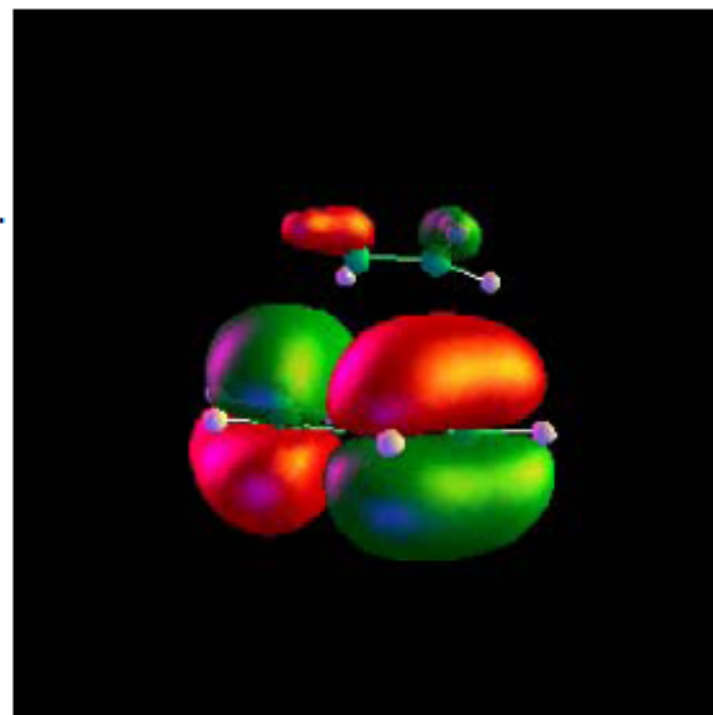
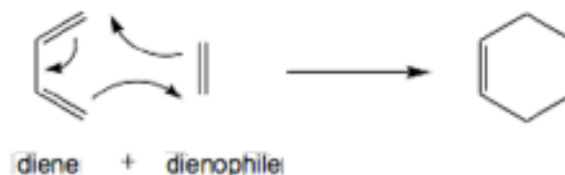


Ti-O bond (theory)



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)



Инициирование излома, повреждение и развитие трещины

Используется потенциал, модифицированный под заданный материал.

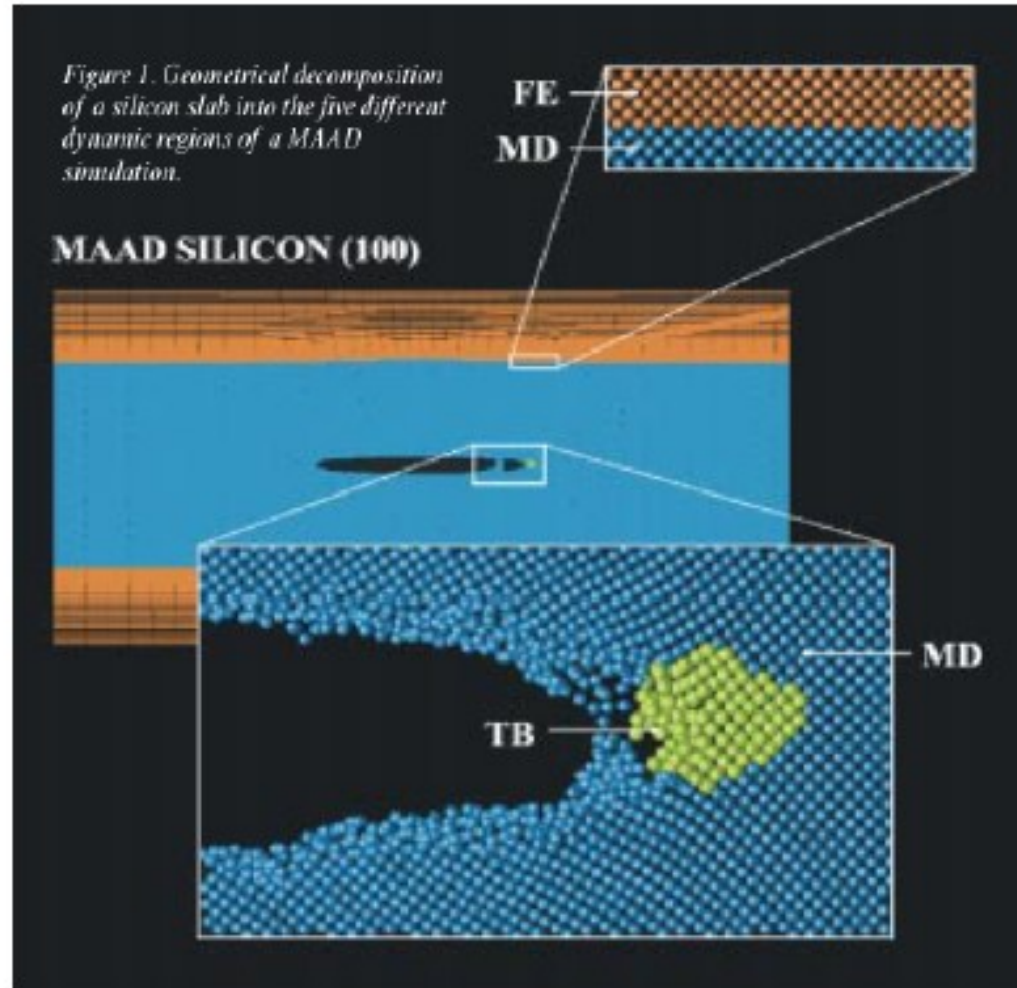
Методы: Молекулярная динамика, Нурег динамика, Квантовая МД

Исследования:

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



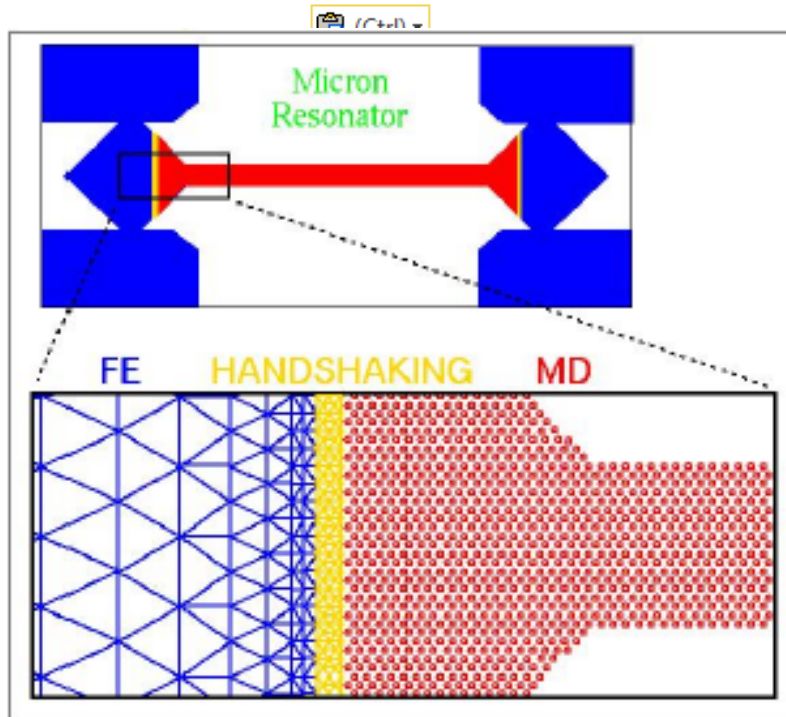
Диапазон масштабов длин при моделированиих излома



Spanning the Length Scales in Dynamic Simulation

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

Диапазон масштабов длин при моделировании трещины

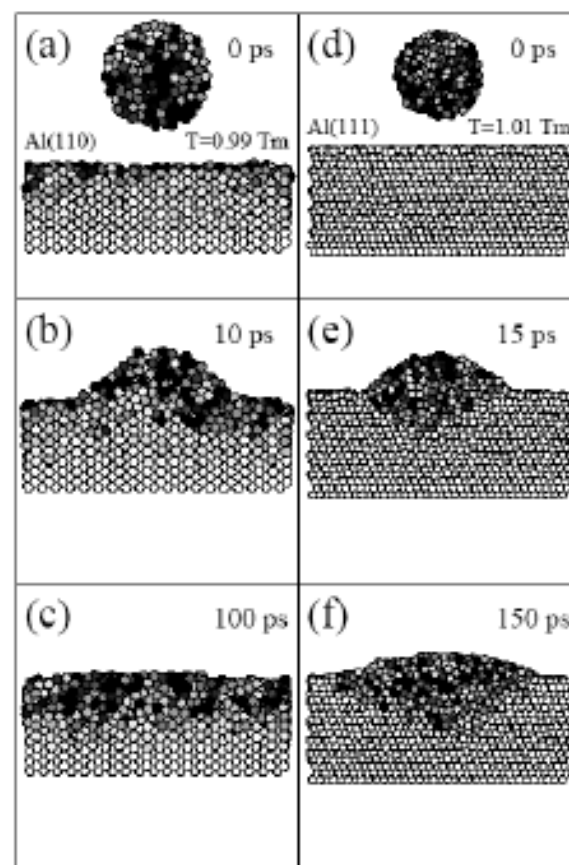


[J. Q. Broughton, F. Abraham, R. E. Rudd, N. Bernstein, E. Kaxiras](#)

- > 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

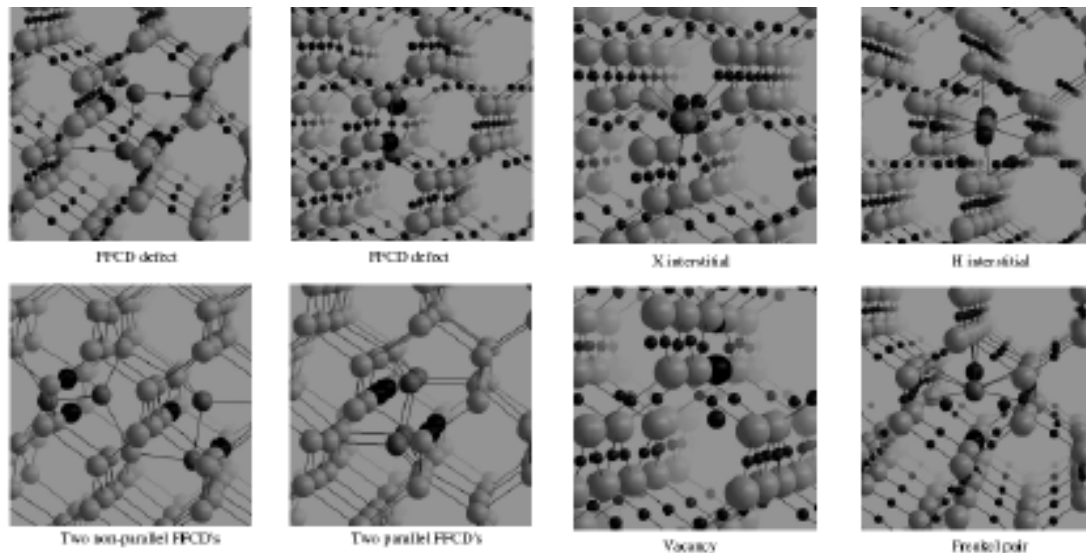
- > Эффект фасетирования
- > Плавление и смачивание на металлических поверхностях;
- > Вычисление сродства к другим материалам;
- > Влияние формы и структуры на свойства.



[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.



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

PRL 88 (23) 2002, pp. 235501