

# Программа дисциплины

## Вычислительные методы исследований микроструктуры твердых тел

### Программу составили:

А.С. Антропов, к.ф.-м.н.

В.В. Стегайлов, д.ф.-м.н.

### Цель дисциплины

По результатам курса обучающиеся должны уметь самостоятельно выбирать и реализовывать наиболее эффективные методы атомистического моделирования различных свойств веществ в твердой фазе, учитывая при выборе метода особенности конкретной задачи, а также правильно интерпретировать результаты расчетов.

### Задачи дисциплины

Ознакомление обучающихся с различными методами расчета свойств идеальных кристаллических решеток, точечных и протяженных дефектов, поверхностей на основе атомистического моделирования. Выработка понимания преимуществ, недостатков и области применимости каждого метода.

### Содержание дисциплины

#### 1. Плотность фононных состояний.

Гармоническое приближение кристаллической решетки. Ангармонизм. Фононы с точки зрения классической механики и квантовой механики. Фононный спектр. Динамическая матрица системы. Фононы, как собственные вектора динамической матрицы. Влияние периодических граничных условий на фононный спектр. Ограничения метода динамической матрицы.

Автокорреляционная функция скорости (АКФС). Фононный спектр как преобразование Фурье автокорреляционной функции скорости. Влияние параметров расчета АКФС на спектр. Релаксация системы. Особенности реализации расчета АКФС в пакете LAMMPS.

#### 2. Дисперсионные кривые

Расчет частоты колебаний для определенного волнового вектора. Продольные и поперечные фононы. Оптические и акустические фононы. Дисперсионные кривые. Точки в  $k$ -пространстве. Метод Конга для нахождения динамической матрицы системы из результатов МД. Влияние параметров расчета на точность динамической матрицы. Особенности реализации расчета дисперсионных кривых в пакете LAMMPS.

#### 3. Конфигурационная и колебательная энтропия решетки

Размещение атомов по узлам решетки как микросостояние системы. Конфигурационная энтропия. Выражение конфигурационной энтропии через концентрацию дефектов.

Распределение энергии по колебательным степеням свободы как микросостояние системы. Колебательная энтропия. Формула для колебательной энтропии канонического ансамбля. Кинетический смысл колебательной энтропии. Частота колебаний как частота попыток преодолеть барьер. Сравнение изменения колебательной и конфигурационной энтропии при создании дефекта для микроскопических и макроскопических систем.

Расчет колебательной энтропии через фононный спектр. Особенности реализации расчета колебательной энтропии в МД моделировании.

#### **4. Образование точечных дефектов.**

Вакансии, междоузлия, пары Френкеля, дефекты Шотки, атомы замещения, антисайт дефекты. Свободная энергия Гиббса кристаллической решетки с дефектами. Концентрация дефектов в зависимости от свободной энергии образования дефекта. Концентрация пар Френкеля. Кинетический подход к расчету концентрации дефектов. Образование и исчезновение вакансий и междоузлий, как равновесие с поверхностью. Образование пар Френкеля как равновесие в объеме. Зависимость концентрации дефектов от расстояния до поверхности.

Энтальпия образования дефекта: зависимость упругой энергии дефекта от давления и работа по изменению объема кристалла. Зависимость энтальпии образования различных дефектов от давления при различных граничных условиях.

Статический метод расчета энергии образования дефекта. Референсное состояние, определяемое задачей, химический потенциал. МД метод расчета концентрации дефекта. Особенности реализации расчета концентрации в МД моделировании для различных задач. Моделирование с открытой поверхностью, зависимость от размера системы.

#### **5. Миграция точечных дефектов**

Путь миграции, седловая точка. Закон Аррениуса. Предэкспоненциальный фактор, закон Вайнъярда, связь с фононными спектрами. Метод упругой ленты. Влияние размеров системы на результат. Коэффициент диффузии и самодиффузии. Методы МД расчета миграции дефектов. Ускорение миграции дефекта в МД расчете путем изменения потенциальной ямы.

#### **6. Поверхность и дефекты на ней**

Энергия поверхности, разрыв связей, колебательная энтропия поверхности. Адаптомы, поверхностные вакансии и поверхностные междоузлия. Горизонтальные связи, ровные и шероховатые поверхности. Террасы и ступени. Теория роста кристалла. Равновесная форма кристалла. Особенности реализации расчета энергий образования и миграции поверхностных дефектов. Ориентация расчетной ячейки, граничные условия, размеры ячейки.

#### **7. Методы расчета химического потенциала.**

Межфазная граница. Метод термодинамического интегрирования. Метод добавления/удаления частицы. Метод Видома. Особенности реализации данных методов в МД моделировании.

#### **8. Дислокации**

Краевые и винтовые дислокации. Вектор Бюргерса. Механизм рождения дислокаций. Механизм движения дислокаций. Упругие напряжения, создаваемые протяженным дефектом. Притяжение точечных дефектов и дислокаций.

#### **9. Движение дислокаций**

Применение неравновесного МД расчета для моделирования динамики дислокаций. Граничные условия, предельные силы. Термостатирование при неравновесном расчете. Анализ дислокаций в пакете OVITO. Особенности реализации расчета динамики дислокаций в пакете LAMMPS.

#### **10. Объемные включения в кристаллической решетке.**

Движение объемных дефектов как самодиффузия в решетке, объемный и поверхностный механизмы. Фасеточные структуры, механизм нуклеации террас на фасетках. Упругие напряжения, создаваемые включениями. Образование газовых пор в облученных материалах. Механизм миграция-коалесценция и механизм «созревания по Оствальду». Модели фазового поля (phase-field models). Особенности МД расчета параметров упомянутых механизмов.