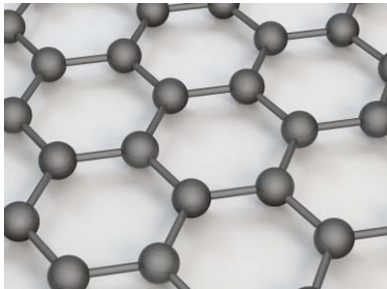


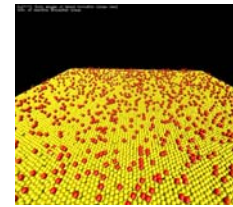
Κλασική ατομιστική προσομοίωση

Εισαγωγικές έννοιες

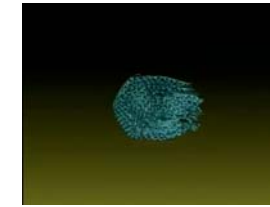


Δ.Γ. Παπαγεωργίου

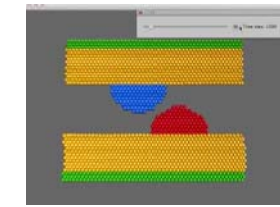
Μερικές εφαρμογές



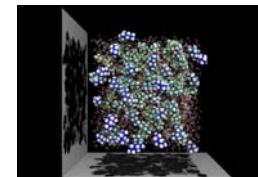
Εναπόθεση σε Cu(111)



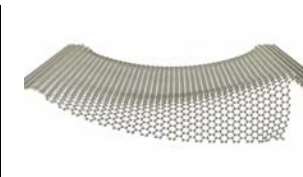
Τσαλάκωμα γραφενίου



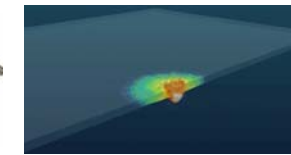
Τριβή



Ανάμιξη νερού-πεντανίου



Σκίσιμο γραφενίου

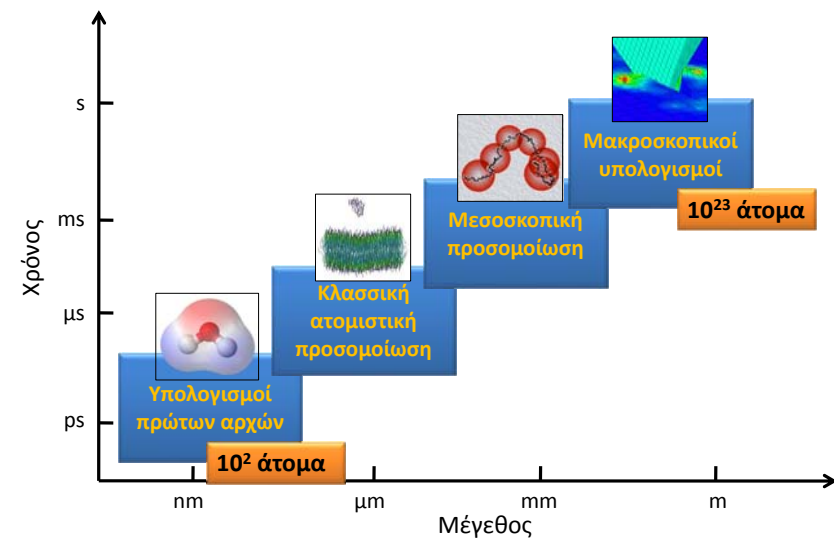


Πρόσκρουση σε φύλλο αλουμινίου

Υπολογιστικές μέθοδοι στην επιστήμη των υλικών



Χωρική και χρονική ιεράρχηση των υπολογιστικών μεθόδων



Σχέση ανάμεσα σε θεωρία-πείραμα-προσομοίωση

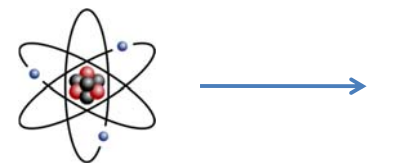


Τμήμα Μηχανικών Επιστήμης Υλικών
Πρόγραμμα Μεταπτυχιακών Σπουδών «Προηγμένα Υλικά»

Κλασική ατομική προσομοίωση 5

Βασικές παραδοχές της κλασικής ατομικής προσομοίωσης

- 1) Η δομική μονάδα όλων των φυσικών συστημάτων είναι το **άτομο**.
- 2) Η δομή των ατόμων (πυρήνες, ηλεκτρόνια) **δεν λαμβάνεται υπόψη**.
- 3) Τα άτομα θεωρούνται ως **σημειακές μάζες**.
- 4) Τα άτομα **αλληλεπιδρούν** μεταξύ τους μέσω κλασικών δυναμικών.

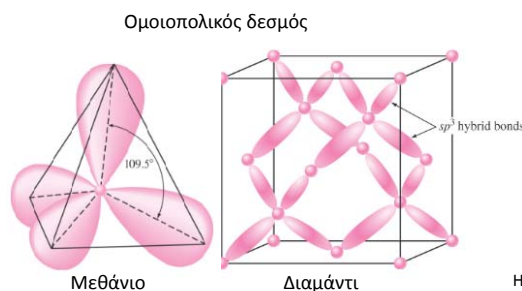


Τμήμα Μηχανικών Επιστήμης Υλικών
Πρόγραμμα Μεταπτυχιακών Σπουδών «Προηγμένα Υλικά»

Κλασική ατομική προσομοίωση 6

Είδη αλληλεπίδρασης

- Μεταλλικός δεσμός
- Ομοιοπολικός δεσμός
- Ιοντικός δεσμός
- Δεσμός υδρογόνου
- Αλληλεπίδραση Van der Waals



Τμήμα Μηχανικών Επιστήμης Υλικών
Πρόγραμμα Μεταπτυχιακών Σπουδών «Προηγμένα Υλικά»

Κλασική ατομική προσομοίωση 7

Συναρτήσεις δυναμικού

Η συνολική δυναμική ενέργεια του συστήματος προκύπτει από την άθροιση όλων των αλληλεπιδράσεων μεταξύ των ατόμων του συστήματος. Έχει τη γενική μορφή:

$$U(r_1, r_2, \dots, r_N) = \sum_i V_1(r_i) + \sum_i \sum_{j>i} V_2(r_i, r_j) + \sum_i \sum_{j>i} \sum_{k>j>i} V_3(r_i, r_j, r_k) + \dots$$

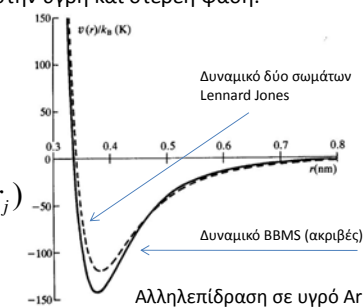
V_1 Αλληλεπίδραση με εξωτερικό πεδίο.

V_2 Δυναμικό ζευγών. Εξαρτάται από την απόσταση μεταξύ των ατόμων i και j : $V_2(r_{ij})$

V_3 Δυναμικό τριών σωμάτων. Σημαντικός όρος στην υγρή και στερεή φάση.

Στην πράξη οι όροι τριών σωμάτων και ανώτεροι ενσωματώνονται σε ισοδύναμα δυναμικά (effective potentials) δύο σωμάτων τα οποία προσεγγίζουν το ακριβές δυναμικό:

$$U(r_1, r_2, \dots, r_n) \approx \sum_i V_1(r_i) + \sum_i \sum_{j>i} V_2^{eff}(r_i, r_j)$$

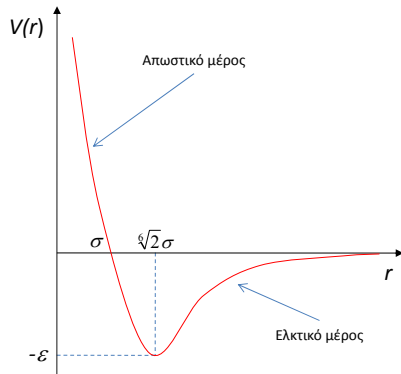


Τμήμα Μηχανικών Επιστήμης Υλικών
Πρόγραμμα Μεταπτυχιακών Σπουδών «Προηγμένα Υλικά»

Κλασική ατομική προσομοίωση 8

Δυναμικό Lennard-Jones

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



- Παρουσιάζει τις τυπικές ιδιότητες των διαμοριακών αλληλεπιδράσεων
- Ελκτικό μέρος της μορφής $-1/r^6$ σε μεγάλες αποστάσεις (εξαιτίας της διασποράς London).
- Απωστικό μέρος σε μικρές αποστάσεις λόγω επικάλυψης ηλεκτρονιακών νεφών.
- Αρνητικό πηγάδι υπεύθυνο για τη συνοχή σε συμπυκνωμένες φάσεις.
- Υπάρχουν αρκετά παρόμοια δυναμικά, πχ. δυναμικό Morse:

$$V(r) = D(1 - e^{-a(r-r_0)})^2$$

Δυναμικό Lennard-Jones

Τυπικές τιμές για τα ϵ και σ :

Atom	Source	$\epsilon/k_B(\text{K})$	$\sigma(\text{nm})$
H	[Murad and Gubbins 1978]	8.6	0.281
He	[Maitland et al. 1981]	10.2	0.228
C	[Tildesley and Madden 1981]	51.2	0.335
N	[Cheung and Powles 1975]	37.3	0.331
O	[English and Venables 1974]	61.6	0.295
F	[Singer et al. 1977]	52.8	0.283
Ne	[Maitland et al. 1981]	47.0	0.272
S	[Tildesley and Madden, 1981]	183.0	0.352
Cl	[Singer et al. 1977]	173.5	0.335
Ar	[Maitland et al. 1981]	119.8	0.341
Br	[Singer et al. 1977]	257.2	0.354
Kr	[Maitland et al. 1981]	164.0	0.383

Computer Simulation of Liquids, M.P. Allen, D.J. Tildesley

Το δυναμικό Lennard-Jones μπορεί να χρησιμοποιηθεί όπου υπάρχουν ασθενείς αλληλεπιδράσεις τύπου vdW πχ. ευγενή αέρια ή διαμοριακές αλληλεπιδράσεις σε οργανικά μόρια.

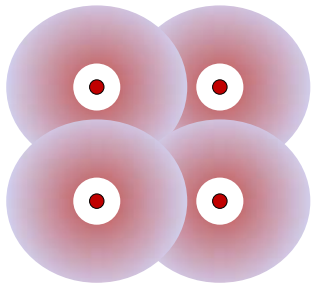


Sir John Edward Lennard-Jones 1894-1954

Σε περίπτωση ανόμοιων ατόμων χρησιμοποιούνται συνδυαστικοί κανόνες για την εκτίμηση των ϵ και σ .
Πχ. Κανόνας Lorentz-Berthelot :

$$\sigma_{\alpha\beta} = \frac{\sigma_{\alpha\alpha} + \sigma_{\beta\beta}}{2} \quad \epsilon_{\alpha\beta} = \sqrt{\epsilon_{\alpha\alpha}\epsilon_{\beta\beta}}$$

Μέθοδος ενσωματωμένου ατόμου Embedded Atom Method (EAM)



Αν είναι παρόντα παραπάνω από ένα άτομα, τότε η συνολική πυκνότητα προκύπτει από υπέρθεση των ατομικών πυκνοτήτων.

$$\rho(r) = \sum_i \rho^{at}(r - r_i)$$

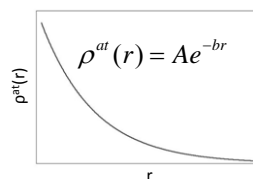
Η ενέργεια που απαιτείται για να ενσωματωθεί ένα άτομο σε ένα σημείο του χώρου δίνεται από τη συνάρτηση ενσωμάτωσης (embedding function):

$$F(\rho) = -F_0 \left[1 - \ln \left(\frac{\rho}{\rho_e} \right)^n \right] \left(\frac{\rho}{\rho_e} \right)$$

Για τις απωστικές αλληλεπιδράσεις προστίθεται ένα δυναμικό δύο σωμάτων:

$$U = \sum_i \sum_{j \neq i} \Phi(r_{ij}) + F(\rho(r_i))$$

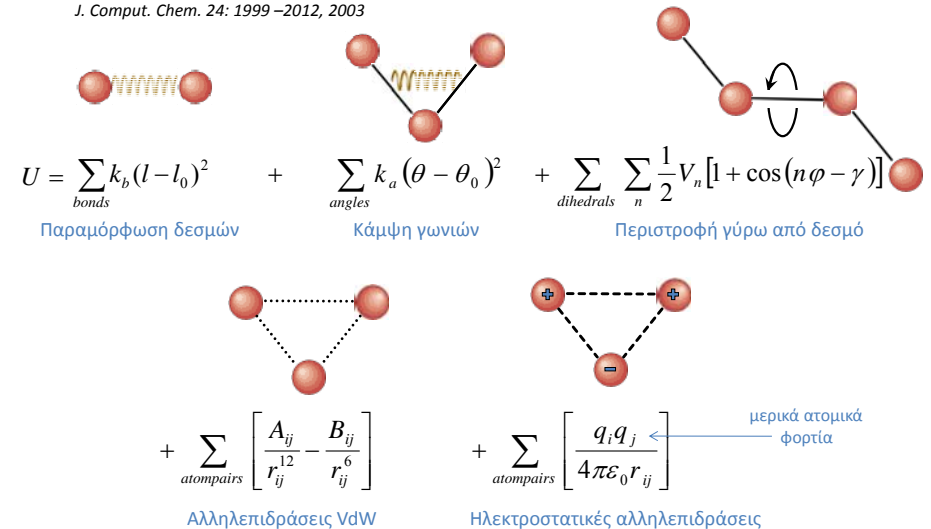
Πυκνότητα ηλεκτρονίων εξαιτίας ενός ατόμου:



Πεδία δυνάμεων για οργανικά μόρια

AMBER: Assisted Model Building with Energy Refinement

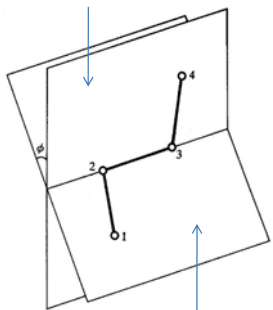
J. Comput. Chem. 24: 1999–2012, 2003



Περιστροφή γύρω από δεσμό

Ορισμός της διέδρης γωνίας

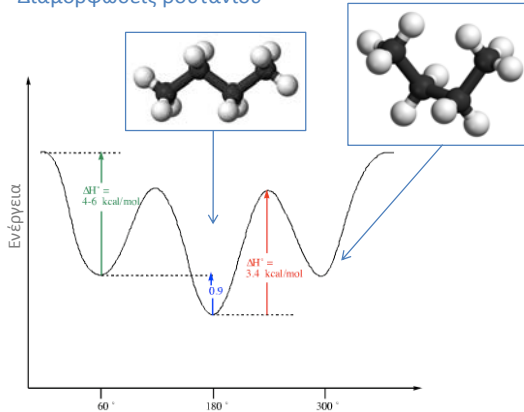
Επίπεδο ατόμων 2-3-4



Επίπεδο ατόμων 1-2-3

Η δυνατότητα περιστροφής γύρω από δεσμό είναι υπεύθυνη για την ύπαρξη πολλαπλών ενεργειακών ελαχίστων.

Διαμορφώσεις βουτανίου



Μερικά ατομικά φορτία

Ηλεκτροστατικό δυναμικό από σημειακό φορτίο q

$$\Phi(r) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q}{r}$$

Ηλεκτροστατικό δυναμικό από πολλά σημειακά φορτία q_i

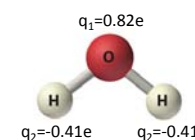
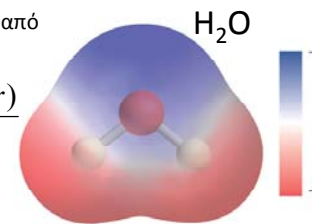
$$\Phi(r) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_j \frac{q_j}{|r - r_j|}$$

Δυναμική ενέργεια από πολλά σημειακά φορτία q_i

$$U = \frac{1}{2} \sum_i q_i \Phi(r_i)$$

Ηλεκτροστατικό δυναμικό από κατανομή φορτίου $Q(r)$

$$\Phi(r) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int \frac{dQ(r)}{r}$$



Τα μερικά ατομικά φορτία q_i τίθενται έτσι ώστε να αναπαράγουν στο χώρο το πραγματικό ηλεκτροστατικό δυναμικό

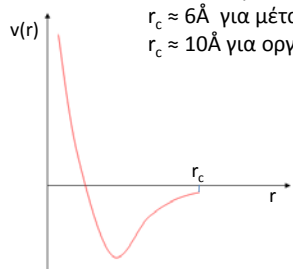
Εμβέλεια δυναμικού

Υποθέτοντας δυναμικό δύο σωμάτων, η ολική δυναμική ενέργεια είναι:

$$U(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N V(r_{ij})$$

Ενώ η εμβέλεια του δυναμικού $V(r)$ είναι άπειρη, στην πράξη μετά από μια απόσταση αποκοπής r_c θεωρείται μηδέν.

Τυπικές τιμές:
 $r_c \approx 6\text{Å}$ για μέταλλα
 $r_c \approx 10\text{Å}$ για οργανικά



Σημαντικό όφελος: Μείωση των γειτόνων του κάθε ατόμου και κατά συνέπεια των υπολογισμών της $V(r)$.

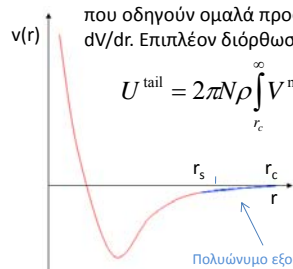
$$U(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^{n_i} V(r_{ij})$$

n_i : Πλήθος ατόμων με $r_{ij} < r_c$ (γειτονες του ατόμου i)

Πρόβλημα: Παράληψη τμήματος της ενέργειας και ασυνέχεια της V και dV/dr .

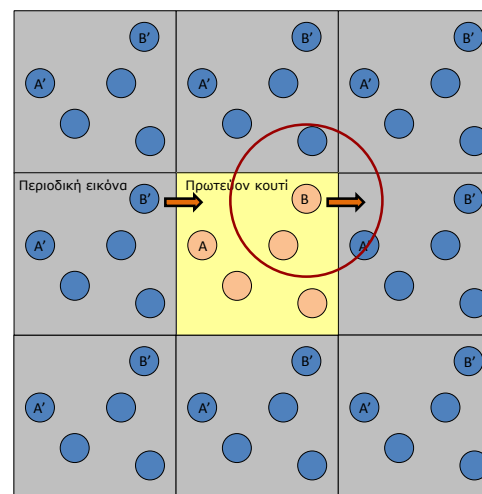
Αντιμετώπιση: Τροποποίηση της $V(r)$ με προσθήκη συναρτήσεων (πχ. πολυωνύμων) που οδηγούν ομαλά προς το 0 τις $V(r)$ και dV/dr . Επιπλέον διόρθωση για την ενέργεια:

$$U^{\text{tail}} = 2\pi N \rho \int_{r_c}^{\infty} V^{\text{modified}} r^2 dr$$



Περιοδικές οριακές συνθήκες

Οι περιοδικές οριακές συνθήκες επιτρέπουν την προσομοίωση άπειρων συστημάτων χρησιμοποιώντας μικρό αριθμό ατόμων.

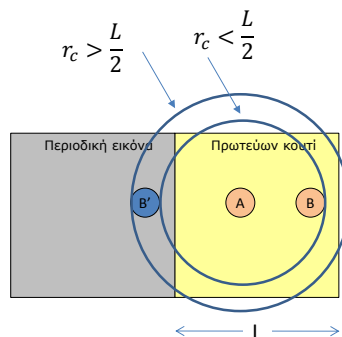


- Για να υπολογιστεί η ολική δυναμική ενέργεια λαμβάνονται υπόψη οι αλληλεπιδράσεις:
 - μεταξύ ατόμων στο πρωτεύον κουτί
 - μεταξύ ατόμων στο πρωτεύον κουτί και ατόμων στις διπλανές εικόνες.
- Όταν ένα άτομο βγει από τη μία πλευρά, εισέρχεται από την απέναντι πλευρά το είδωλό του.

Συνθήκη ελαχίστων εικόνων

Ποιο είναι το ελάχιστο μέγεθος του πρωτεύοντος κουτιού που μπορούμε να επιλέξουμε;

Η εμβέλεια r_c του δυναμικού καθορίζει το ελάχιστο μέγεθος του πρωτεύοντος κουτιού. Το άτομο A αλληλεπιδρά μόνο με ένα από τα B ή B' όταν:



$$L > 2r_c \quad \text{Συνθήκη ελαχίστων εικόνων}$$

Μη περιοδικά συστήματα (επιφάνειες κα.)

Πεπερασμένα συστήματα (πχ. επιφάνειες, νανοσωλήνες) αντιμετωπίζονται καταργώντας τις περιοδικές οριακές συνθήκες σε 1 ή 2 διαστάσεις.

Άπειρο σύστημα
Περιοδικές οριακές συνθήκες σε 3 διαστάσεις

Τα άτομα κοντά σε μια πλευρά αλληλεπιδρούν με τα άτομα κοντά στην απέναντι πλευρά

Επιφάνεια
Περιοδικές οριακές συνθήκες σε 2 διαστάσεις

Καταργώντας τις περιοδικές οριακές συνθήκες σε μια διάσταση δημιουργούμε δύο ελεύθερες επιφάνειες.

Επιφάνεια

Στην πράξη μπορεί να χρησιμοποιηθεί ένα μεγαλύτερο κουτί με επιπλέον διάσταση μεγαλύτερη από την εμβέλεια του δυναμικού

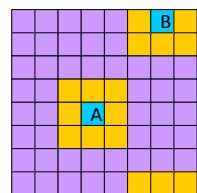
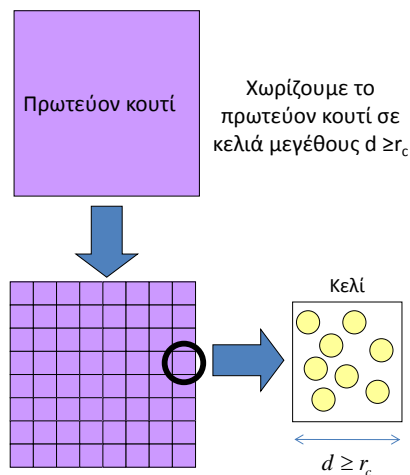
Εύρεση των γειτόνων – Μέθοδος των κελιών

Δεν μπορούμε να συγκρίνουμε όλα τα ζεύγη ατόμων ($\approx N^2$) για να προσδιορίσουμε αν είναι γείτονες (υπολογιστικά χρονοβόρο).

- Με τον τρόπο αυτό τα άτομα κάθε κελιού αλληλεπιδρούν μόνο με άτομα στο ίδιο κελί και γειτονικά κελιά.

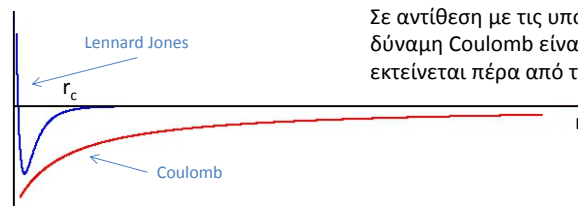
- Αν έχουμε περιοδικές οριακές συνθήκες, γειτονικά κελιά μπορεί να βρεθούν από την άλλη πλευρά του κουτιού.

- Ο χρόνος που απαιτείται για να βρούμε σε ποιο κελί βρίσκεται κάθε άτομο είναι ελάχιστος.



Άθροιση των ηλεκτροστατικών αλληλεπιδράσεων σε περιοδικό σύστημα

Σε αντίθεση με τις υπόλοιπες αλληλεπιδράσεις η δύναμη Coulomb είναι μεγάλης εμβέλειας και εκτείνεται πέρα από το πρωτεύον κουτί.



Δυναμική ενέργεια από πολλά σημειακά φορτία $U = \frac{1}{2} \sum_i q_i \Phi(r_i)$

Ηλεκτροστατικό δυναμικό χωρίς περιοδικές συνθήκες

$$\Phi(r_i) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{j \neq i} \frac{q_j}{r_{ij}}$$

Ηλεκτροστατικό δυναμικό με περιοδικές συνθήκες

$$\Phi(r_i) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{j=1}^N \sum_{\text{εικόνες } \vec{n}} \frac{q_j}{|\vec{r}_{ij} + \vec{n}|}$$

Αργή σύγκλιση

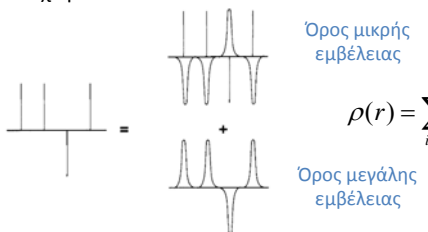
$$\vec{n} = (n_x L_x, n_y L_y, n_z L_z) \quad \text{Περιοδικές εικόνες}$$

$$n_x, n_y, n_z \quad \text{Ακέραιοι}$$

$$L_x, L_y, L_z \quad \text{Διαστάσεις κουτιού}$$

Η μέθοδος Ewald

- Σε κάθε σημειακό φορτίο προστίθεται μια κατανομή φορτίου ίσου μεγέθους και αντίθετου προσήμου. Έτσι το ηλεκτροστατικό δυναμικό μηδενίζεται σε μεγάλες αποστάσεις.
- Η κατανομή που προστέθηκε αντισταθμίζεται από μια κατανομή αντίθετου προσήμου που έχει μεγάλη εμβέλεια, αλλά συγκλίνει γρήγορα στον αντίστροφο χώρο.



$$\rho(r) = \sum_{i=1}^N q_i \left[\delta(r-r_i) - \left(\frac{\beta}{\sqrt{\pi}}\right)^3 \exp(-\beta^2(r-r_i)^2) + \left(\frac{\beta}{\sqrt{\pi}}\right)^3 \exp(-\beta^2(r-r_i)^2) \right]$$

Το ηλεκτροστατικό δυναμικό που προκύπτει από τον κάθε όρο δίνεται από τη λύση της εξίσωσης Poisson

$$\nabla^2 \Phi(r) = -\frac{\rho(r)}{\epsilon_0}$$



Paul Peter Ewald 1888-1985



Simeon Denis Poisson 1781-1840

Η μέθοδος Ewald

Το ηλεκτροστατικό δυναμικό **μικρής** εμβέλειας αθροίζεται στον καρτεσιανό χώρο. Η δυναμική ενέργεια είναι:

$$U_{short} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{q_i q_j}{4\pi\epsilon_0} \frac{\text{erfc}(\beta r_{ij})}{r_{ij}}$$

Το ηλεκτροστατικό δυναμικό **μεγάλης** εμβέλειας αθροίζεται στον αντίστροφο χώρο. Η δυναμική ενέργεια είναι:

$$U_{long} = \frac{1}{2} \sum_{k \neq 0} \sum_{i,j=1}^N \frac{q_i q_j}{4\pi\epsilon_0} \frac{4\pi}{Vk^2} \exp\left(-\frac{k^2}{4\beta^2}\right) \cos(\vec{k}\vec{r}_{ij})$$

Διόρθωση εξαιτίας αυτο-αλληλεπίδρασης:

$$U_{self} = \frac{\beta}{\sqrt{\pi}} \sum_{i=1}^N \frac{q_i^2}{4\pi\epsilon_0}$$

Διόρθωση εξαιτίας περικλειόντος μέσου:

$$U_{corr} = \frac{2\pi}{(1+2\epsilon)V} \left(\sum_{i=1}^N \frac{q_i}{4\pi\epsilon_0} \vec{r}_i \right)^2$$

Ολική ηλεκτροστατική ενέργεια:

$$U_{coulomb} = U_{short} + U_{long} - U_{self} + U_{corr}$$

Συμπληρωματική συνάρτηση σφάλματος

$$\text{erfc}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_x^\infty e^{-t^2} dt$$

Σημεία του αντίστροφου χώρου

$$\vec{k} = \left(\frac{2\pi}{L_x} l_x, \frac{2\pi}{L_y} l_y, \frac{2\pi}{L_z} l_z \right)$$

Βασικοί τρόποι μελέτης

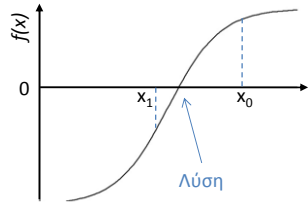
- Στατική μελέτη
Βασίζεται στην εύρεση ελαχίστου της δυναμικής ενέργειας σαν συνάρτηση των ατομικών θέσεων.
- Προσομοίωση Μοριακής Δυναμικής
Αιτιοκρατική μεθοδολογία, με την οποία βρίσκουμε την εξέλιξη του συστήματος στο χρόνο επιλύοντας τις εξισώσεις κίνησης. Ως αποτέλεσμα παίρνουμε την τροχιά, δηλαδή τις θέσεις και τις ταχύτητες των ατόμων σαν συνάρτηση του χρόνου.
- Προσομοίωση Monte Carlo
Στοχαστική μεθοδολογία με την οποία παράγονται μικροκαταστάσεις του συστήματος. Αναπτύχθηκε στο τέλος του 2^{ου} παγκόσμιου πολέμου για τη μελέτη διάχυσης νετρονίων σε σχάσιμο υλικό. Δεν υπάρχει η έννοια του χρόνου.

Στατική μελέτη

- Βασίζεται στην εύρεση ελαχίστου της ενέργειας σαν συνάρτηση των ατομικών θέσεων.
- Σε περιπτώσεις όπου χρησιμοποιούνται περιοδικές οριακές συνθήκες η ελαχιστοποίηση της ενέργειας μπορεί να γίνει και ως προς τις διαστάσεις του πρωτεύοντος κουτιού.
- Χρησιμοποιούνται αποκλειστικά αριθμητικές μέθοδοι ελαχιστοποίησης οι οποίες συνήθως βρίσκουν ένα μόνο τοπικό ελάχιστο.

Αριθμητική εύρεση ελαχίστου της ενέργειας

Μέθοδος Newton για εύρεση ριζών της εξίσωσης $f(x) = 0$



Επαναληπτική αριθμητική μέθοδος

1. Δίνεται αρχικό σημείο x_0
2. Επανάληψη για $k=0,1,2,\dots$
 - α) Έλεγχος κριτηρίου τερματισμού $|f(x)| < \varepsilon$
 - β) Υπολογισμός του βήματος Newton
 - γ) Εύρεση νέου σημείου: $x_{k+1} = x_k + h$

Ανάπτυγμα Taylor της συνάρτησης $f(x)$ γύρω από το σημείο x

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2!} f''(x) + \frac{h^3}{3!} f'''(x) + \dots$$

Θέλουμε ένα βήμα τέτοιο ώστε να φτάσουμε στη λύση

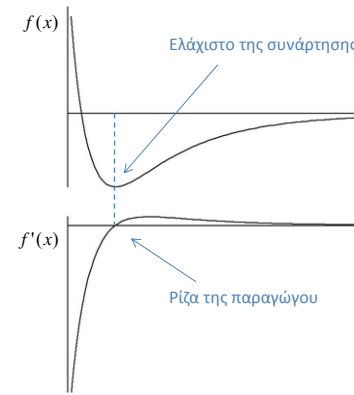
$$0 = f(x) + hf'(x) \Rightarrow h = -\frac{f(x)}{f'(x)} \quad \text{Βήμα Newton}$$



Sir Isaac Newton 1642-1726

Αριθμητική εύρεση ελαχίστου της ενέργειας

Μέθοδος Newton για εύρεση ελαχίστου



Στο ελάχιστο ισχύει $f'(x) = 0$ οπότε εφαρμόζουμε τη διαδικασία εύρεσης ριζών στην $f'(x)$

$$f'(x+h) = f'(x) + hf''(x)$$

$$0 = f'(x) + hf''(x)$$

$$h = -\frac{f'(x)}{f''(x)} \quad \text{Βήμα Newton για εύρεση ελαχίστου}$$

Η συνάρτηση δυναμικής ενέργειας $U(\vec{r})$ είναι πολυδιάστατη:

$$\vec{g}(\vec{r} + \vec{h}) = \vec{g}(\vec{r}) + G(\vec{r})\vec{h}$$

$$0 = \vec{g}(\vec{r}) + G(\vec{r})\vec{h}$$

$$\vec{h} = -G^{-1}(\vec{r})\vec{g}(\vec{r}) \quad \text{Βήμα Newton για πολυδιάστατη συνάρτηση}$$

$\vec{g}(\vec{r})$ Διάγραμμα πρώτων παραγώγων της $U(\vec{r})$
 $G(\vec{r})$ Πίνακας δεύτερων παραγώγων της $U(\vec{r})$

Παραμετροποίηση δυναμικών αλληλεπίδρασης

Το παράδειγμα βασίζεται στο άρθρο:

F. Cleri, V. Rosato, *Tight binding potentials for transition metals and alloys*, Phys. Rev. B. **48** (1993) 22.

Δυναμικό για μέταλλα fcc βασισμένο στην προσέγγιση δεύτερης ροπής της θεωρίας ισχυρής δέσμησης.

Η δυναμική ενέργεια δίνεται από:

$$U = \sum_i \left[\sum_{j \neq i} A e^{-p \left(\frac{r_{ij}}{r_0} - 1 \right)} - \sqrt{\sum_{j \neq i} \xi^2 e^{-2q \left(\frac{r_{ij}}{r_0} - 1 \right)}} \right] \quad r_0: \text{απόσταση των πρώτων γειτόνων}$$

Για να βρούμε τις άγνωστες παραμέτρους A , p , q , ξ εφαρμόζουμε προσαρμογή ελαχίστων τετραγώνων σε ποσότητες πειραματικά γνωστές. Εδώ επιλέχθηκαν η ενέργεια συνοχής E_c , η πλεγματική σταθερά α και οι ελαστικές σταθερές c_{11} , c_{12} , c_{44} .

Κατασκευάζουμε τη συνάρτηση σφάλματος (άθροισμα τετραγώνων):

$$\chi(A, p, q, \xi) = (E_c^{\text{exp}} - E_c^{\text{calc}})^2 + (\alpha^{\text{exp}} - \alpha^{\text{calc}})^2 + (c_{11}^{\text{exp}} - c_{11}^{\text{calc}})^2 + (c_{12}^{\text{exp}} - c_{12}^{\text{calc}})^2 + (c_{44}^{\text{exp}} - c_{44}^{\text{calc}})^2$$

Υπολογίζονται από τη δυναμική ενέργεια και εξαρτώνται από τα A , p , q , ξ

Παραμετροποίηση δυναμικών αλληλεπίδρασης

Ενδεικτικά, για να βρούμε τα E_c^{calc} και α^{calc} από τη δυναμική ενέργεια:

- Κατασκευάζουμε κρύσταλλο fcc με πλεγματική σταθερά α και υπολογίζουμε τη δυναμική ενέργεια $E(\alpha)$.
- Βρίσκουμε το ελάχιστο της καμπύλης $E(\alpha)$ με αριθμητικές μεθόδους.

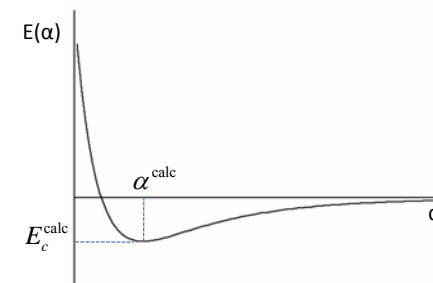


TABLE II. Values of the fitted quantities for fcc metals. First lines contain the calculated values. (a) experimental values: a_0 (Å) and E_c (eV) from Kittel (Ref. 60), elastic constants (Mbar) from Simmons and Wang (Ref. 61); (b) results of this same model, with cutoff limited to first neighbors; (c) third-neighbor EAM model (Ref. 9); (d) long-range FS model (Ref. 7).

	$-E_c$	a_0	C_{11}	C_{12}	C_{44}	$\langle B \rangle$	C'	C/C'
Ni	4.435	3.523	2.57	1.55	1.36	1.89	0.51	2.67
(a)	2.61	1.51	1.32	1.88	0.55	2.40		
(b)	2.57	1.65	0.93	1.96	0.46	2.00		
(c)	2.33	1.54	1.28	1.80	0.40	3.24		
(d)	2.31	1.78	0.80	1.95	0.27	2.96		
Cu	3.544	3.615	1.76	1.25	0.82	1.42	0.26	3.15
(a)	1.76	1.25	0.82	1.42	0.26	3.15		
(b)	1.82	1.14	0.68	1.37	0.34	2.00		
(c)	1.67	1.24	0.76	1.38	0.22	3.45		
(d)	1.70	1.30	0.58	1.43	0.20	2.90		
Rh	5.752	3.803	3.92	2.37	1.99	2.89	0.77	2.58
(a)	4.22	1.92	1.94	2.69	1.15	1.69		
(b)	3.84	2.20	1.65	2.74	0.83	2.00		
(c)	3.40	2.32	1.43	2.69	0.54	2.65		
Pd	3.936	3.887	2.32	1.78	0.73	1.96	0.26	2.81
(a)	2.34	1.76	0.71	1.95	0.29	2.45		
(b)	2.36	1.66	0.69	1.90	0.34	2.00		
(c)	2.18	1.84	0.65	1.95	0.17	3.82		
(d)	2.48	1.76	0.93	2.00	0.36	2.58		

↑
Πειραματικές τιμές

Παραμετροποίηση δυναμικών αλληλεπίδρασης

Χρησιμοποιούμε αριθμητικές μεθόδους για να βρούμε τις παραμέτρους A, p, q, ξ που ελαχιστοποιούν το άθροισμα τετραγώνων $\chi(A, p, q, \xi)$

Αποτελέσματα μετά την προσαρμογή ελαχίστων τετραγώνων

TABLE I. Parameters of TB potentials for fcc transition metals and for the two simple metals Al and Pb.

	A (eV)	ξ (eV)	p	q
Ni	0.0376	1.070	16.999	1.189
Cu	0.0855	1.224	10.960	2.278
Rh	0.0629	1.660	18.450	1.867
Pd	0.1746	1.718	10.867	3.742
Ag	0.1028	1.178	10.928	3.139
Ir	0.1156	2.289	16.980	2.691
Pt	0.2975	2.695	10.612	4.004
Au	0.2061	1.790	10.229	4.036
Al	0.1221	1.316	8.612	2.516
Pb	0.0980	0.914	9.576	3.648

TABLE II. Values of the fitted quantities for fcc metals. First lines contain the calculated values. (a) experimental values: a_0 (Å) and E_c (eV) from Kittel (Ref. 60); elastic constants (Mbar) from Simmons and Wang (Ref. 61); (b) results of this same model, with cutoff limited to first neighbors; (c) third-neighbor EAM model (Ref. 9); (d) long-range FS model (Ref. 7).

	$-E_c$	a_0	C_{11}	C_{12}	C_{44}	$\langle B \rangle$	C'	C/C'
Ni	4.435	3.523	2.57	1.55	1.36	1.89	0.51	2.67
	(a)	2.61	1.51	1.32	1.88	0.55	2.40	
	(b)	2.57	1.65	0.93	1.96	0.46	2.00	
	(c)	2.33	1.54	1.28	1.80	0.40	3.24	
	(d)	2.31	1.78	0.80	1.95	0.27	2.96	
Cu	3.544	3.615	1.76	1.25	0.82	1.42	0.26	3.15
	(a)	1.76	1.25	0.82	1.42	0.26	3.15	
	(b)	1.82	1.14	0.68	1.37	0.34	2.00	
	(c)	1.67	1.24	0.76	1.38	0.22	3.45	
	(d)	1.70	1.30	0.58	1.43	0.20	2.90	
Rh	5.752	3.803	3.92	2.37	1.99	2.89	0.77	2.58
	(a)	4.22	1.92	1.94	2.69	1.15	1.69	
	(b)	3.84	2.20	1.65	2.74	0.83	2.00	
	(d)	3.40	2.32	1.43	2.69	0.54	2.65	
Pd	3.936	3.887	2.32	1.78	0.73	1.96	0.26	2.81
	(a)	2.34	1.76	0.71	1.95	0.29	2.45	
	(b)	2.36	1.66	0.69	1.90	0.34	2.00	
	(c)	2.18	1.84	0.65	1.95	0.17	3.82	
	(d)	2.48	1.76	0.93	2.00	0.36	2.58	

Υπολογισμένες τιμές

Παραμετροποίηση δυναμικών αλληλεπίδρασης

Τελευταία σχόλια

- Σε περίπτωση που δεν υπάρχουν πειραματικές ποσότητες διαθέσιμες, χρησιμοποιούνται υπολογισμοί από πρώτες αρχές ως τιμές αναφοράς.
- Πρόβλημα μεταφερσιμότητας: Για να παραμετροποιηθεί ένα δυναμικό αλληλεπίδρασης υποθέτουμε συγκεκριμένο περιβάλλον (πχ. περιοδικός κρύσταλλος). Τα αποτελέσματα σε άλλες συνθήκες (πχ. επιφάνειες, νανοσωματίδια) πρέπει να ελέγχονται σχολαστικά.



Johannes van der Waals 1837-1923