



دوال طاقة جهد تجريبية متعددة الاجسام استخدمت في محاكاة الكمبيوتر لخواص المواد المكثفة

Empirical many-body potential energy functions used in computer simulations of condensed matter properties

Sakir Erkoc

الخلاصة

استخدمت دوال طاقة الجهد التجريبية لأجسام عديدة (empirical many-body potential energy functions) بشكل موسع في المحاكاة الذرية، بالأخص في الديناميكا الجزيئية وطرق مونتني كارلو. هناك دوال EMBPEF متعددة في البحوث العلمية لأغراض مختلفة، من بعض هذه الدوال يكون مناسب لخواص المادة الكتلية والخواص السطحية، وبعض منها يكون مناسباً لخواص العناقيد. في هذه الورقة العلمية نستعرض استخدام EMBPEFs في تطبيقات محاكاة الكمبيوتر لخواص المواد المكثفة (المواد الصلبة والسائلة).



المقدمة Introduction

الكثير من الخواص الفيزيائية للمواد، في العديد من الاطوار مثل الصلبة والسائلة والغازية يمكن ملاحظتها عمليا و/أو تحديدها. كما انه من الممكن ان يتم حساب نظريا وتوقع الكثير من الخواص الفيزيائية للمادة مرة اخرى في العديد من أطوار المادة. بدون ادنى شك الحسابات التي اجريت بالاعتماد على المبادئ الاولية لطرق ميكانيكا الكم تعطي نتائج دقيقة. على أي حال، لأنها تتطلب الكثير من الحسابات الكبيرة لحل معادلة شرودنجر بدقة، في الوقت الحالي تعتبر هذه الطرق محدودة لدراسة الخواص الاستاتيكية للأنظمة التي تشتمل على بضعة عشرات من الذرات. على الجانب الآخر، بالرغم من انها تعاني من قلة الدقة بالمقارنة مع الطرق الاخرى، الا ان الجهود الذرية التجريبية يمكن ان تتعامل مع أنظمة اكبر بكثير ويمكن ان تستخدم ايضا لدراسة الخواص الاستاتيكية وكذلك الخواص الديناميكية لمثل هذه الأنظمة [1].

في الكثير من المجالات اليوم، اصبحت محاكاة الكمبيوتر جزء مكمل للكثير من طرق الدراسة وتساعد في فهم العديد من المشاكل على المستوى الذري. استخدمت هذه المعلومات بنجاح في تفسير الكثير من النتائج العملية. الكثير من تقنيات المحاكاة هذه والتي تعرف بالمحاكاة على المستوى الذري تعتمد على جهد نموذج تجريبي يصف التفاعلات بين الذرات في النظام.

اثبتت المحاكاة الذرية انها اداة قيمة لدراسة وفهم العمليات الميكروسكوبية في المواد المكثفة (الصلبة والسائلة). هناك العديد من الطرق المتوفرة مثل الديناميكا الجزيئية ومونتي كارلو وتخفيض القوة و/أو الطاقة. الميزة لمحاكاة الكمبيوتر هو معرفة بالتحديد ماذا نقيس والعيب فيها هو ان النتائج التي نحصل عليها هي جيدة مثل الجهد الذي نحصل عليه منها [2].

مبدأ جهد النموذج بصفة عامة يعتمد على تقريب Born-Oppenheimer. اذا افترض ان في غياب القوى الخارجية فان الطاقة الكلية للنظام من N من الجسيمات المتفاعلة من الممكن التعبير عنه على النحو التالي:

$$E_N = \phi_1 + \phi_2 + \phi_3 + \dots + \phi_n + \dots, \quad (1)$$

حيث ϕ_n تمثل مجموع طاقات تفاعل n من الاجسام. على الجانب الآخر يمكن التعبير عن الطاقة الكلية لنظام من N من الجسيمات الغير متفاعلة يعبر عنه على النحو التالي:

$$E'_N = \phi_1. \quad (2)$$



الفرق بين هذه طاقتين من الطاقات الكلية ($E_N - E'_N$) يعطي طاقة التفاعل الكلية لنظام من N من الجسيمات المتفاعلة كدالة في مواقعها:

$$\Phi = E_N - E'_N = \phi_2 + \phi_3 + \dots + \phi_n + \dots, \quad (3)$$

$$\Phi = \Phi(r_1, r_2, \dots, r_N), \quad (4)$$

$$\phi_2 = \sum_{i < j} U_2(r_i, r_j), \quad (5)$$

$$\phi_3 = \sum_{i < j < k} U_3(r_i, r_j, r_k), \quad (6)$$

⋮

$$\phi_n = \sum_{i < j < \dots < n} U_n(r_i, r_j, \dots, r_n), \quad (7)$$

حيث U_2 و U_3 و U_n تمثل تفاعلات الجسيمين والثلاثة اجسام وعدد n من الاجسام على التوالي.

الكمية ϕ قابلة للقياس، والتي تصف طاقة الشكل الترتيبي الكلي (او طاقة الجهد) للنظام. في هذا ما يعرف باسم مفكوك الاجسام العديدة لـ ϕ ، انه يعتقد ان السلسلة تمتلك تقارب سريع ولهذا يمكن اهمال العزوم العالية [3]. بطريقة اخرى، فان هذه المعادلة لا يمكن ان تستخدم للأنظمة التي تحتوي على اكثر من بضعة ذرات. بشكل عملي فانه يصعب التعامل مع مفكوك n من الاجسام حسابيا. لهذا السبب فان مفكوك الاجسام العديدة ينقطع بعد حد الجسم الثالث. مشاركة الحدود المقطوعة يمكن ان تتضمن بإدخال معاملات مختلفة (معاملات خطية و/أو غير خطية) في الحدود المتبقية.

بصفة عامة، في حسابات اولية الحدود العالية التي تشتمل على جزء الثلاثة اجسام تم حذفها، وتم تقريب الطاقة الجهد الكلية ϕ بمجموع تفاعلات الجسيمين. هذه الطريقة والتي تعتبر كتقريب من الرتبة الأولى، لا تبسط الصيغ الميكانيكية الاحصائية المستخدمة في حساب العديد من الخواص الديناميكا الحرارية فحسب ولكن بشكل اكثر اهمية تمكن العديد من الباحثين الاوائل من اجراء حسابات محاكاة باجهزة كمبيوتر اقل قوة واصغر. في معظم حسابات المحاكاة والتي اجريت بالاعتماد على تقريب الرتبة الأولى، استخدمت دوال من نوع Lennard-Jones لمحاكاة تفاعل جسيمين. بالرغم من الحقيقة ان تلك الانظمة التي تعرف باسم انظمة Lennard-Jones تمثل فقط الغازات النادرة حيث يكون دور قوى الاجسام المتعددة اقل ما يمكن [4]، انها تزود بمعلومة مهمة لفهم الكثير من الخواص والعمليات بشكل منهجي لا يمكن الحصول عليه بواسطة طرق اخرى.



الدراسات التي اجريت في العقد الاخير على أي حال اشارت بشكل خاص لحالة الانظمة المحتوية على ذرات غير تلك التي تملتك تراكييب قشرة مغلقة، وتقريب الرتبة الاولى هذا ليس مناسب ويعطي نتائج غير متفقة مع العديد من التجارب لإهمال تفاعلات الاجسام العديدة [5]. في العقد الاخير في دراسات المحاكاة تم اعتبار تفاعلات الاجسام العديدة بالإضافة الى تفاعلات الجسمين في حساب طاقات الجهد.

انه معروف جيدا ان اهمية تفاعلات الاجسام الثلاثة تزداد مع زيادة الخاصية التساهمية للرابطة بين الذرات في النظام [6]. بينما الغازات النادرة يكون الجزء الخاص بالاجسام الثلاثة صغير بشكل مهمل، للمعادن وبالأخص في اشباه الموصلات تبين ان مساهمتها ذو اهمية كبيرة.

بالإضافة إلى انها تحسن التفسير فانها تعمل على تسريع الحسابات المتعلقة بالمحاكاة لمشاكل المواد المعقدة. بعض من هذه المشاكل يشتمل على محاكاة مباشرة لديناميكا التهشم الثلاثية الابعاد لا يمكن في الوقت الحالي التعامل معها حتى مع جهد مزدوج. على أي حال الكثير من المشاكل المهمة تكون بسيطة للتعامل معها بالجهود الذرية، لكنها معقدة جدا للتعامل معها بشكل مباشر بطرق ميكانيكا الكم [7]. مدى المشاكل الممكن التعامل معها بطرق ميكانيكا الكم سوف تستمر بالنمو مع زيادة قدرات الكمبيوتر، لكن في المستقبل القريب معظم مشاكل علوم المواد سوف تتطلب استخدام جهود ذرية او مخططات مبسطة.

في هذه الدراسة قمنا بدمج دوال طاقة الجهد التجريبية لاجسام متعددة (EMBPEFs) متوفرة في النشرات العلمية، تحتوي على تفاعلات ذرية لجسمين وثلاثة اجسام.

هناك حوالي 35 دالة في النشرات العلمية: دوال مختلفة لانظمة مختلفة وخواص عناقيد للمادة المكثفة.

هذه المراجعة العملية سوف تصف بالتفصيل اشكال EMBPEFs ومخططات معاملاتها وتطبيقاتها ومجموعة المعاملات لمعظمهم.

هناك مقالات عملية منشورة حول EMBPEFs في المراجع العلمية ولكنهم ركزوا على مواد محددة ولم يتعاملوا مع كل الـ EMBPEFs الموفرة في النشرات العلمية [1, 6, 8, 9].

الهدف من هذه المراجعة العلمية هو وضع كل الـ EMBPEFs مع بعض وفتح مجال واسع من وجهات النظر امام الباحثين المهتمين.



2. دوال طاقة الجهد التجريبية متعددة الاجسام Empirical many-body potential energy functions

دوال EMBPEFs المجمعة في هذا العمل سوف تجمع وترتب بالنسبة للتشابه الرياضي للدوال. لهذا فان الترتيب الزمني قد لا يكون متحققا هنا. في الحقيقة دوال EMBPEFs يمكن ان تصنف في مجموعتين رئيسيتين، المجموعة الأولى للدوال تحتوي على تفاعلات جسمين وثلاثة اجسام مع بعض كشكل دالي، والمجموعة الثانية للدوال التي تشتمل على تفاعلات جسمين وثلاثة اجسام بشكل منفصل. لهذا، فاننا ندعي المجموعة الأولى من الدوال كدوال الجسمين والثلاثة اجسام والتي نمثلها بالرمز $\phi_1 = \phi_{2,3}$:

$$\Phi_I \equiv \Phi = \phi_{2,3} = \sum_{i < j < k} U_{ijk}. \quad (8)$$

هناك تسعة دوال PEF متجمعة في هذه المجموعة. على الجانب الاخر، سوف نسمي المجموعة الثانية من الدوال على انها دوال الجسمين والثلاثة اجسام، والتي من الممكن ان نرمز لها بـ $\phi_{II} = \phi_2 + \phi_3$:

$$\Phi_{II} \equiv \Phi = \phi_2 + \phi_3 = \sum_{i < j} U_{ij} + \sum_{i < j < k} W_{ijk}. \quad (9)$$

هناك 18 دالة PEFs مجتمعة في هذه المجموعة. هناك بعض الدوال غير هذه المجموعات الرئيسية، بعض هذه الدوال تشتمل على تفاعلات اجسام متعددة، بمعنى تفاعلات اربعة اجسام. بالإضافة إلى هذا النوع من الدوال فان قليل منها تحتوي على تفاعلات مزدوجة فقط، لكنها تحتوي على تأثير اجسام عديدة. من الممكن ان نصنف كل هذه الدوال على انها مجموعة ثالثة من الدوال، والتي من الممكن ان نرمز لها بـ ϕ_{III} :

$$\Phi_{III} \equiv \Phi = \phi_2 \quad \text{or} \quad \Phi = \phi_1 + \phi_2 + \phi_3 \quad \text{or} \quad \Phi = \phi_2 + \phi_3 + \phi_4. \quad (10)$$

هناك 11 دالة PEFs مجتمعة في هذه المجموعة.

لهذا فاننا سوف نعرض في هذه المراجعة العلمية 38 دالة EMBPEFs في ثلاثة مجموعات: المجموعة 1 دوال (ϕ_I) ، المجموعة 2 دوال (ϕ_{II}) والمجموعة 3 دوال (ϕ_{III}) . في الصفحات التالية سوف نسمي دوال PEFs بأسماء المؤلفين.



1.2 مجموعة 1 دوال EMBPEFs (Φ_I)

1.1.2 جهد Tersoff [1] (I)

هذه الدالة PEF طورت للأنظمة التساهمية [10].

$$\Phi = \phi_{2,3} = \sum_{i < j < k} U_{ij;k}, \quad U_{ij;k} = f_c(r_{ij}) A e^{-\lambda_1 r_{ij}} - B_{ij} e^{-\lambda_2 r_{ij}},$$

$$B_{ij} = B_0 e^{-z_{ij}/b}, \quad z_{ij} = \sum_{k \neq i,j} \left[\frac{w(r_{ik})}{w(r_{ij})} \right]^n \times \left[c + e^{-d \cos \theta_{ik}} \right]^{-1}, \quad w(r) = f_c(r) e^{-\lambda_2 r},$$

$$f_c(r) = \begin{cases} 1, & r < R - D, \\ \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \sin \left[\frac{1}{2} \pi (r - R)/D \right], & R - D < r < R + D, \\ 0, & r > R + D. \end{cases}$$

تم وضع معاملات للدالة PEF للسليكون والتي تصف الرابطة الشكل الهندسي لتراكيب عديدة، تشمل خصائص السطح وخصائص العيوب. تم تحديد المعاملات باستخدام طاقة التماسك، وثابت الشبكة البلورية، ومعامل ينج، وطاقة زوج Si_2 . معاملات PEF للـ Si:

$$A = 2280 \text{ eV}, B_0 = 171 \text{ eV}, \lambda_4 = 2\lambda_2, \lambda_2 = 1.465 \text{ \AA}^{-1}, b = 1.324, c = 6.5, d = 6.02, \\ n = 4, R = 3.0 \text{ \AA}, D = 0.2 \text{ \AA}.$$

هذه الدالة PEF لا تحقق استقرار البلورة للسليكون الماسي، وتعطي تركيب BCC على انه الاكثر استقرارا.



2.1.2 جهد Dodson [2]

هذه الدالة PEF عدلت من جهد Tersoff (I) [11].

$$\Phi = \phi_{2,3} = \sum_{i < j; k} U_{ij;k}, \quad U_{ij;k} = f_{ij}(Ae^{-2\lambda r_{ij}} - B_{ij}e^{-\lambda r_{ij}}),$$
$$B_{ij} = B_0 e^{-z_{ij}^\eta/b}, \quad z_{ij} = \sum_{k \neq i,j} \left[\frac{f_{ik}}{f_{ij}} \right]^4 e^{4\lambda(r_{ij}-r_{ik})} \times [c + e^{-d \cos \theta_{ijk}}]^{-1}.$$

تعرف f_{ij} كما في جهد Tersoff (I). هذا الشكل من الدالة PEF يحقق استقرار البلورة للسليكون الماسي بالإضافة إلى خصائص أخرى للسليكون الماسي تم توقعها بجهد Tersoff (I). يمكن استخدام دالة PEF هذه لحسابات التركيب العالمية للسليكون. معاملات PEF للسليكون Si:

$$A = 1614.6 \text{ eV}, B_0 = 155.08 \text{ eV}, \lambda_1 = 2.7793 \text{ \AA}^{-1}, \lambda_2 = 1.3969 \text{ \AA}^{-1}, b = 3.4785, \\ c = 0.8543, d = 3.9588, \eta = 0.6207.$$

2.1.3 جهد Tersoff (II) [3]

تم تطوير دالة PEF هذه للأنظمة التساهمية (السليكون والكربون) [12].

$$\Phi = \phi_{2,3} = \sum_{i < j; k} U_{ij;k}, \quad U_{ij;k} = f_c(r_{ij}) [f_R(r_{ij}) + b_{ij}f_A(r_{ij})],$$
$$f_R(r) = Ae^{-\lambda_1 r}, \quad f_A(r) = -Be^{-\lambda_2 r}, \quad b_{ij} = (1 + \beta^n \xi_{ij}^n)^{-1/2n},$$
$$\xi_{ij} = \sum_{k \neq i,j} f_c(r_{ik})g(\theta_{ijk}) \exp [\lambda_3^3(r_{ij} - r_{ik})^3], \quad g(\theta) = 1 + \frac{c^2}{d^2} - \frac{c^2}{d^2 + (h - \cos \theta)^2}.$$

تعرف $f_c(r)$ كما في جهد Tersoff (I). تحقق دالة PEF استقرار البلورة ومنحنى تشتت الفونون. لقد استخدمت لحسابات نقطة عيوب الطاقات، وخواص السطح، وخواص المرونة، وخواص السائل للسليكون. كما تم إيجاد معاملات دالة PEF للكربون. انها تصف الخواص التركيبية للكربون وتشتمل على خواص



المرونة، والفونونات والانواع المتعددة والعيوب. طبق الجهد لدراسة الكربون الامورفس. معاملات دالة PEF للسليكون والكربون مدرجة في الجدول 1.

2.1.4 جهد Brenner (I) [4]

طورت دالة PEF للكربون [13].

$$\Phi = \phi_{23} = \sum_{i < j < k} U_{ij;k}, \quad U_{ij;k} = f_c(r_{ij}) [V_R(r_{ij}) + b_{ij} V_A(r_{ij})],$$

الجدول 1

Parameter	Si (set 1)	Si (set 2)	C
A (eV)	3264.7	1830.8	1393.6
B (eV)	95.373	471.18	346.74
λ_1 (\AA^{-1})	3.2394	2.4799	3.4879
λ_2 (\AA^{-1})	1.3258	1.7322	2.2119
λ_3 (\AA^{-1})	1.3258	1.7322	0.0
β	0.33675	1.0999×10^{-6}	1.5724×10^{-7}
n	22.956	0.78734	0.72751
h	0.0	-0.59826	-0.57058
c	4.8381	1.0039×10^5	3.8049×10^4
d	2.0417	16.218	4.3484
R (\AA)	3.0	2.85	1.95
D (\AA)	0.2	0.15	0.15

$$V_R(r_{ij}) = \frac{D_e}{S-1} \exp[-\beta\sqrt{2S}(r_{ij}-r_e)], \quad V_A(r_{ij}) = \frac{SD_e}{S-1} \exp[-\beta\sqrt{2/S}(r_{ij}-r_e)],$$

$$b_{ij} = (1+z_{ij})^{-n}, \quad z_{ij} = \sum_{k \neq i,j} f_c(r_{ik})g(\theta_{ijk})e^{m(r_{ij}-r_{ik})}, \quad g(\theta) = \alpha \left\{ 1 + \frac{c^2}{d^2} - \frac{c^2}{d^2 + (h + \cos \theta)^2} \right\}.$$

تعرف $f_c(r)$ كما في جهد Tersoff (I). استخدمت دالة PEF في حساب الخواص المتعددة للماس والجرافيت. كما انها طبقت ايضا على عناقيد الكربون الصغيرة. معاملات دالة PEF للكربون هي:



$D_e = 6.325$ eV, $r_e = 1.28$ Å, $\beta = 1.5$ Å⁻¹, $S = 1.29$, $n = 0.8047$, $\alpha = 0.0113$, $c = 19.0$,
 $d = 2.5$, $h = 1.0$, $m = 2.25$ Å⁻¹, $R = 2.1$ Å, $D = 0.2$ Å.

[5] (II) Bernner 2.1.5

تم تطوير هذه الدالة للهيدروكربونات (hydrocarbons) [14].

$$\Phi = \phi_{2,3} = \sum_{i < j,k} U_{ij;k}, \quad U_{ij;k} = V_R(r_{ij}) - \bar{B}_{ij} V_\Lambda(r_{ij})$$

$$V_R(r_{ij}) = f_{ij}(r_{ij}) \frac{D_{ij}}{(S_{ij} - 1)} \exp[-\beta_{ij} \sqrt{2S_{ij}}(r_{ij} - r_e)],$$

$$V_\Lambda(r_{ij}) = f_{ij}(r_{ij}) \frac{S_{ij} D_{ij}}{(S_{ij} - 1)} \exp[-\beta_{ij} \sqrt{2/S_{ij}}(r_{ij} - r_e)]$$

$$f_{ij}(r) = \begin{cases} 1, & r < r_e^{(1)}, \\ \frac{1}{2}[1 + \cos(\pi(r - r_e^{(1)})/(r_e^{(2)} - r_e^{(1)}))], & r_e^{(1)} < r < r_e^{(2)}, \\ 0, & r > r_e^{(2)}, \end{cases}$$

$$\bar{B}_{ij} = \frac{1}{2}(B_{ij} + B_{ji}) + F_{ij}(N_i^{(+)}, N_j^{(+)}, N_{ij}^{\text{conj}}), \quad B_{ij} = [1 + G_{ij} + H_{ij}(N_i^{(\text{H})}, N_i^{(\text{C})})]^{-\delta_i},$$

$$G_{ij} = \sum_{k \neq i,j} f_{ik}(r_{ik}) G_i(\theta_{ijk}) \exp[\alpha_{ijk}[(r_{ij} - r_e) - (r_{ik} - r_e)]],$$

$$N_i^{(\text{H})} = \sum_{j(\text{=hydrogen})} f_{ij}(r_{ij}), \quad N_i^{(\text{C})} = \sum_{j(\text{=carbon})} f_{ij}(r_{ij}), \quad N_i^{(\text{t})} = N_i^{(\text{H})} + N_i^{(\text{C})},$$

$$N_{ij} = 1 + \sum_{k \neq i,j} f_{ik}(x_{ik}) + \sum_{\ell \neq i,j} f_{j\ell}(x_{j\ell}),$$



$$F(x_{ik}) = \begin{cases} 1, & x_{ik} \leq 2, \\ \frac{1}{2}\{1 + \cos(\pi(x_{ik} - 2))\}, & 2 < x_{ik} < 3, \\ 0, & x_{ik} \geq 3, \end{cases}$$

$$x_{ik} = N_k^{\text{tot}} - f_{ik}(r_{ik}), \quad G_c(\theta) = a_0 \left[1 + \frac{c_0^2}{d_0^2} - \frac{c_0^2}{d_0^2 + (1 + \cos \theta)^2} \right].$$

تم تحديد معاملات PEF بواسطة ملائمة الدالة للعديد من خواص جزيئات الهيدروكربون. اعطت PEF الطاقة الذرية للعديد من جزيئات الهيدروكربون. تم حساب طاقة الامتزاز والامتزاز الكيميائي للعديد من الانظمة على اسطح الماس والجرافيت. نموذج PEF للرابطة الكيميائية بين الجزيئات في العديد من جزيئات صغيرة من الهيدروكربون كذلك الشبكات البلورية للجرافيت والماس. تشكل معاملات PEF جدول طويل، وهي ليست مدرجة هنا. مجموعة واحدة من المعاملات تشتمل على 63 مدخل والمجموعة الثانية من المعاملات تشتمل على 64 مدخل.

2.1.6 جهد Chelikowsky-Phillips-Kamal-Strauss [6]

تم تطوير هذا الجهد للسليكون والكربون [15].

$$\Phi = \phi_{2,3} = \sum_{i < j < k} U_{ij;k}, \quad U_{ij;k} = \frac{A}{r_{ij}^2} \exp[-\beta_1 r_{ij}^2] - \frac{g_{ij}}{r_{ij}} \exp[-\beta_2 r_{ij}^2],$$
$$g_{ij} = g_0 + g_1 S_{ij} S_{ji}, \quad S_{ij} = 1 + \langle \cos(3\theta_{ijk}) \rangle, \quad \langle f(\theta_{ijk}) \rangle = [f]/[1],$$
$$[f(\theta_{ijk})] = \sum_{k \neq i,j} f(\theta_{ijk}) \exp[-(\lambda_1 \theta_{ijk}^4 + \lambda_2 r_{ijk}^4)], \quad r_{ijk} = \frac{1}{2}(r_{ij} + r_{ik}).$$

تم ملائمة دالة PEF لتحويلات الطور المعدني - التساهمي. انها تعطي طاقات وتراكيب عناقيد السليكون. كما تم تحديد معاملات PEF للكربون وطبقت على C60. معاملات PEF للسليكون والكربون معطاة في الجدول 2.



[7] (I) Khor-Das Sarma جهاد 2.1.7

طورت لعناصر اشباه الموصلات ذات الرابطة الرباعية (C, Si, Ge) [16].

$$\Phi = \phi_{2,3} = \sum_{i < j, k} U_{ij;k}, \quad U_{ij;k} = A f_{ij} \left[e^{-\theta r_{ij}} - g_{ij}(1 + h_{ij}) \right],$$

$$f_{ij} = e^{-\beta(r_{ij} - R_i)^{\gamma}}, \quad g_{ij} = \frac{B_0}{Z_i^2} e^{-\lambda r_{ij}}, \quad h_{ij} = \sum_{k \neq i, j} [\cos \eta (\theta_{ijk} - \theta_i) - 1].$$

تم تحديد المعاملات ملائمة PEF في معامل ينج وثوابت قوى الانحناء - الربط لتراكيب الماس. تعطي دالة PEF طاقة التماسك والمسافات الذرية عند الاتزان لتراكيب مختلفة. معاملات دالة PEF لـ C و Si و Ge معطاة في الجدول 3.

الجدول 2

Parameter	Si	C
A (eV \AA^2)	182.44	45.59
β_1 (\AA^{-2})	0.550	0.80
β_2 (\AA^{-2})	0.151	0.35
g_0 (eV \AA)	7.08	1.33
g_1 (eV \AA)	2.644	6.09
λ_1	$(2/\pi)^4$	$(2/\pi)^4$
λ_2 (\AA^{-4})	0.1773	0.961

الجدول 3

Parameter	C	Si	Ge
A (eV)	10237.546	2794.2386	1278.555
B_0	0.938766	0.08251716	0.3481879
θ (\AA^{-1})	3.20244	3.13269	2.37239
λ (\AA^{-1})	3.05075	1.34146	1.54775
α	0.08596252	0.6249096	0.381135
β	44.85709	25.44123	17.79861
γ	3.10786	3.38218	3.22877
η	0.1824903	0.90084597	0.6460521



[8] (II) Khor-Das Sarma جهد 2.1.8

تم تطوير دالة PEF هذه لدراسة الذرات على سطح Si(111) [17].

$$\Phi = \phi_{2,3} = \sum_{i < j, k} U_{ij,k}, \quad U_{ij,k} = Ae^{-\beta(r_{ij}-R_i)} \left[e^{-\theta r_{ij}} - B_0 e^{-\lambda r_{ij}} G(\theta) F(\theta) / Z_i^z \right],$$

$$Z_i = \sum_j \exp [-\beta(r_{ij} - R_i)^\gamma], \quad G(\theta) = 1 + \sum_{k \neq i, j} [\cos(\eta \Delta \theta_{jik} - 1)],$$

$$\Delta \theta_{jik} = \theta_{jik} - \theta_i, \quad F(\theta_{jik}) = \exp[-\beta_1(\Delta \theta_{jik})^{\gamma_1}] + \exp[\beta_2(\Delta \theta_{jik})^{\gamma_2}] - 1.$$

دالة PEF هذه هي تعديل على جهد Khor-Das Sarma (I). المعاملات الاضافية لـ PEF لـ H_3 على انظمة Si(111):

$$\beta_1 = 15.08725154, \quad \gamma_1 = 2.04101446, \quad \beta_2 = 0.80277415, \quad \gamma_2 = 0.90213443, \\ \eta = 0.52091562.$$

[9] (III) Khor-Das Sarma جهد 2.1.9

طورت هذه الدالة لدراسة اعادة التركيب السطحي لسطح Si(111) [18].

$$\Phi = \phi_{2,3} = \sum_{i < j, k} U_{ij,k}, \quad U_{ij,k} = Ae^{-\beta(r_{ij}-R_i)} \left[e^{-\theta r_{ij}} - B_0 e^{-\lambda r_{ij}} G(\theta) / Z_i^z \right],$$

$$Z_i = \sum_j \exp [-\beta(r_{ij} - R_i)^\gamma], \quad G(\theta) = F(\theta) \left[1 + \sum_{k \neq i, j} [\cos(\eta \Delta \theta_{jik} - 1)] \right],$$

$$\Delta \theta_{jik} = \theta_{jik} - \theta_i, \quad F(\theta) = \exp [-\beta_1(\Delta \theta_{jik})^{\gamma_1}] - c [1 - \exp [-\beta_2(\Delta \theta_{jik})^{\gamma_2}]].$$

دالة PEF هذه هي تعديل لجهد Khor-Das Sarma (II). المعاملات الاضافية والمختلفة لدالة PEF لـ Si(111):

$$\beta_1 = 1.96535918, \quad \gamma_1 = 0.74146749, \quad \beta_2 = 0.57664720, \quad \gamma_2 = 0.30135348, \quad c = 0.85.$$



2.2 مجموعة 2 دوال EMBPEFs (ϕ_{II})

1.2.2 جهد [10] Bauer-Maysenholder-Seeger

تم تطوير هذه الدالة لدراسة العيوب في معادن FCC [19].

$$\Phi = \phi_2 + \phi_3 = \sum_{i<j} U_{ij} + \sum_{i<j<k} W_{ijk},$$

$$U_{ij} = Ae^{-r_{ij}/\rho} - B/r_{ij}^n, \quad W_{ijk} = C(1 + 3 \cos \theta_i \cos \theta_j \cos \theta_k)/(r_{ij}r_{jk}r_{ki})^m.$$

تم تحديد المعاملات لمعادن FCC (Cu, Ag, Au)، والمستخدم في خواص نقطة العيب. تم ملائمة PEF لثابت الشبكة البلورية وثوابت المرونة وطاقة التماسك. لقد استخدمت في حساب خواص نقطة العيب لـ Cu و Ag و Au. مجموعة مختلفة من المعاملات استخدمت في دالة PEF لدراسة اعتماد المعاملات على بعض خواص معادن الـ Cu FCC و Ag و Au.

2.2.2 جهد [11] Pearson-Takai-Halicioglu-Tiller

تم تطوير دالة PEF للسليكون [22].

$$\Phi = \phi_2 + \phi_3 = \sum_{i<j} U_{ij} + \sum_{i<j<k} W_{ijk},$$

$$U_{ij} = \varepsilon \left[\left(\frac{r_0}{r_{ij}} \right)^{12} - 2 \left(\frac{r_0}{r_{ij}} \right)^6 \right], \quad W_{ijk} = Z \frac{(1 + 3 \cos \theta_i \cos \theta_j \cos \theta_k)}{(r_{ij}r_{jk}r_{ki})^3}.$$

تم تحديد معاملات PEF في البداية للسليكون. تم ملائمة المعاملات لأطوال الرابطة الثنائية والثلاثية ومعامل الشبكة البلورية وطاقة التماسك للتركيب الماسي. استخدمت دالة PEF هذه لدراسة تحول الطور في الحالة الكتلية وإعادة تركيب السطح وتشكل نقطة عيب السطح والانظمة الثلاثية، مثل GaAs و Si-GaAs و Al-GaAs و Au-GaAs [21]. معاملات الدالة PEF لأنظمة الذرة الاحادية (A) والثنائية (A-B) والثلاثية (A-B-C) معطاة في الجدول 4 و 5 و 6 على التوالي.



الجدول 4

Quantity	Si	Au	Al	Ga	As
ϵ_{AA} (eV)	2.817	0.976	1.216	1.004	1.164
r_{0AA} (Å)	2.295	2.6685	2.520	2.461	2.491
Z_{AAA} (eV Å ⁹)	3484.0	2009.0	2241.0	1826.4	2151.9

الجدول 5

Quantity	Ga-As	Al-Ga	Al-As	Au-Ga	Au-As	Si-Ga	Si-As
ϵ_{AB}	1.738	1.121	2.060	0.886	1.750	1.700	2.500
r_{0AB}	2.448	2.490	2.430	2.554	2.535	2.378	2.393
Z_{AAB}	1900.0	2093.3	3000.0	278.7495	6000.0	2809.0	4500.0
Z_{ABB}	4600.0	1955.3	5000.0	1237.6936	5600.0	2265.0	5000.0

الجدول 6

Quantity	Al-Ga-As	Au-Ga-As	Si-Ga-As
Z_{ABC}	2500.0	3270.0	5000.0

3.2.2 تطوير دالة PEF للسليكون [12] (I) Biswas-Hamann

تم تطوير دالة PEF للسليكون [22].

$$\Phi = \phi_2 + \phi_3 = \sum_{i<j} U_{ij} + \sum_{i<j<k} W_{ijk},$$

$$U_{ij} = A_1 e^{-\lambda_1 r_{ij}} + A_2 e^{-\lambda_2 r_{ij}}, \quad W_{ijk} = \sum_{\ell=0}^6 C_{\ell} \phi_{\ell}(r_{ij}) \phi_{\ell}(r_{ik}) P_{\ell}(\cos \theta_i), \quad \phi_{\ell}(r) = e^{-z_{\ell} r}.$$

تم ملائمة دالة PEF لطاقات المادة الكتلية والسطحية والطبقية والتراكيب interstitial الذاتية. لقد طبقت لخواص البنية التركيبية للسليكون في حالته الكتلية والعنقودية. معاملات PEF للسليكون هي:



$\lambda_1 = 3.946668 \text{ \AA}^{-1}$, $\lambda_2 = 1.191187 \text{ \AA}^{-1}$, $A_1 = 26829.36 \text{ eV}$, $A_2 = -42.59863 \text{ eV}$,
 $\alpha_0 = 1.246156 \text{ \AA}^{-1}$, $\alpha_1 = 1.901049 \text{ \AA}^{-1}$, $\alpha_2 = \alpha_3 = \alpha_4 = \alpha_5 = \alpha_6 = 1.786959 \text{ \AA}^{-1}$,
 $C_0 = 91.39775 \text{ eV}$, $C_1 = 16440.13 \text{ eV}$, $C_2 = 9580.299 \text{ eV}$, $C_3 = 6663.147 \text{ eV}$,
 $C_4 = 3987.710 \text{ eV}$, $C_5 = 2046.722 \text{ eV}$, $C_6 = 701.8867 \text{ eV}$.

[13] (II) Biswas-Hamann 4.2.2

تم تطوير دالة PEF هذه للسليكون [23].

$$\Phi = \phi_2 + \phi_3 = \sum_{i<j} U_{ij} + \sum_{i<j<k} W_{ijk},$$

$$U_{ij} = f_c(r_{ij}) \left[A_1 e^{-\lambda_1 r_{ij}^2} + A_2 e^{-\lambda_2 r_{ij}^2} \right], \quad W_{ijk} = V_3(r_{ij}, r_{ik}, \theta) f_c(r_{ij}) f_c(r_{ik}),$$

$$V_3(r_{ij}, r_{ik}, \theta) = B_1 \psi_1(r_{ij}) \psi_1(r_{ik}) (\cos \theta + \frac{1}{3})^2 + B_2 \psi_2(r_{ij}) \psi_2(r_{ik}) (\cos \theta + \frac{1}{3})^3,$$

$$f_c(r) = \left[1 + e^{(r-r_c)/\mu} \right]^{-1}, \quad \psi_i(r) = e^{-x_i r^2}.$$

تم ملائمة دالة PEF لطاقات المادة الكتلية والسطحية والطبقية والتراكيب interstitial الذاتية. لقد طبقت لخواص البنية التركيبية للسليكون في حالته الكتلية والعنقودية. انها مناسبة لخواص التراكيب رباعية الاسطح. معاملات PEF للسليكون هي:

$\lambda_1 = 0.5200836 \text{ \AA}^{-2}$, $\lambda_2 = 0.4206931 \text{ \AA}^{-2}$, $A_1 = 14229.22 \text{ eV}$, $A_2 = -107.0338 \text{ eV}$,
 $\alpha_1 = 0.3034373 \text{ \AA}^{-2}$, $\alpha_2 = 0.3191903 \text{ \AA}^{-2}$, $B_1 = 13.02990 \text{ eV}$, $B_2 = 0.6720739 \text{ eV}$,
 $r_c = 3.9527357 \text{ \AA}$, $\mu = 0.3120580 \text{ \AA}$.



[14] Stillinger-Weber جهد 5.2.2

تم تطوير دالة PEF للسليكون [24].

$$\Phi = \phi_2 + \phi_3 = \sum_{i < j} U_{ij} + \sum_{i < j < k} W_{ijk},$$

$$U_{ij} = \varepsilon f_2(r_{ij}/\sigma), \quad W_{ijk} = \varepsilon f_3(r_i/\sigma, r_j/\sigma, r_k/\sigma),$$

$$f_2(r) = \begin{cases} A(Br^{-p} - r^{-q})e^{(r-a)^{-1}}, & r < a, \\ 0, & r \geq a, \end{cases}$$

$$f_3(r_i, r_j, r_k) = h(r_{ij}, r_{ik}, \theta_{jik}) + h(r_{ji}, r_{jk}, \theta_{ijk}) + h(r_{ki}, r_{kj}, \theta_{ikj}),$$

$$h(r_{ij}, r_{ik}, \theta_{jik}) = \lambda e^{[\gamma(r_{ij}-a)^{-1} + \gamma(r_{ik}-a)^{-1}]} \times \left(\frac{1}{3} + \cos \theta_{jik}\right)^2.$$

تم تطبيق دالة PEF هذه على الاشكال الصلبة والسائلة للسليكون. انها تعطي الخواص التركيبية لـ Ga الامورفس والبلوري. لقد استخدمت لحساب الخواص الديناميكا الحرارية للطور البلوري وعلاقات تشتت الفوتون للبلورات.

معاملات PEF للسليكون هي:

$$A = 7.049556277, B = 0.6022245584, p = 4, q = 0, a = 1.80, \lambda = 21.0, \gamma = 1.20, \\ \sigma = 2.0951 \text{ \AA}, \varepsilon = 50 \text{ kcal/mol}.$$

معاملات PEF للجرمانيوم هي [25]:

$$A = 7.049556277, B = 0.6022245584, p = 4, q = 0, a = 1.80, \lambda = 31.0, \gamma = 1.20, \\ \sigma = 2.181 \text{ \AA}, \varepsilon = 1.93 \text{ eV}.$$



6.2.2 جهد Gong [15]

تم تطوير دالة PEF للسليكون [26].

$$\Phi = \phi_2 + \phi_3 = \sum_{i < j} U_{ij} + \sum_{i < j < k} W_{ijk},$$

$$U_{ij} = A(Br_{ij}^{-p} - r_{ij}^{-q})e^{(r_{ij}-a)^{-1}}, \quad W_{ijk} = h(r_{ji}, r_{ki}) + h(r_{kj}, r_{ij}) + h(r_{ik}, r_{jk}),$$

$$h(r_{ji}, r_{ki}) = \lambda \exp [\gamma(r_{ji} - a)^{-1} + \gamma(r_{ki} - a)^{-1}] \times \lambda_1 [c_1 + (c_0 + \cos \theta_{jik})^2] (\frac{1}{3} + \cos \theta_{jik})^2.$$

تم تعديل دالة PEF هذه من جهد Stillinger-Weber. تم دراسة خواص البنية التركيبية لعناقيد Si الصغيرة. معاملات PEF للسليكون هي نفسها كما في جهد Stillinger-Weber، لكن القيم العددية للمعاملات الاضافية λ_1 و c_0 و c_1 ليست معطاة في هذه المراجعة العلمية.

7.2.2 جهد Blaisten-Barojas-Khanna [16]

تم تطوير دالة PEF هذه للبيريليوم [27].

$$\Phi = \phi_2 + \phi_3 = \sum_{i < j} U_{ij} + \sum_{i < j < k} W_{ijk},$$

$$U_{ij} = Ae^{-\alpha r_{ij}} - C \frac{f_B(r_{ij})}{r_{ij}^5}, \quad f_B(r) = \begin{cases} 1, & r > r_0, \\ e^{-B(r_0/r-1)^5}, & r < r_0, \end{cases}$$

$$W_{ijk} = W'_{ijk} (1 + 3 \cos \theta_i \cos \theta_j \cos \theta_k) f_B(r_{ij}) f_B(r_{ik}) f_B(r_{jk}),$$

$$W'_{ijk} = -D(N) e^{-\beta(r_{ij}+r_{ik}+r_{jk})} + \frac{C'}{(r_{ij}r_{ik}r_{jk})^3}, \quad D(N) = \begin{cases} D - G(\frac{1}{4} - 1/N), & N \geq 4, \\ D, & N < 4. \end{cases}$$

تم ملائمة PEF للعناقيد الصغيرة وطبقت على عناقيد مختلفة من البريليوم. لقد استخدمت ايضا في محاكاة المراحل الأولى لنمو البلورة. معاملات PEF للـ Br (بوحدت au و hartrees للطاقة):



$A = 77.27716$, $\alpha = 1.71169$, $B = 0.6961$, $C = 87.39774$, $D = 9.65426$,
 $\beta = 0.495767$, $G = 35.945$, $C' = 673.4099$, $B' = 1/3$, $r_0 = 4.04$.

8.2.2 جهد Takai-Lee-Halicioglu-Tiller [17]

تم تطوير دالة PEF للكربون [28].

$$\Phi = \phi_2 + \phi_3 = \sum_{i<j} U_{ij} + \sum_{i<j<k} W_{ijk},$$

$$U_{ij} = e^{(q_1 - q_2 r_{ij})} - q_3 \left[\frac{1}{2} - (1/\pi) \arctan[q_4(r_{ij} - q_5)] \right]^{12},$$

$$W_{ijk} = Z [p + (\cos \theta_i + h)(\cos \theta_j + h)(\cos \theta_k + h)] \exp [-b^2(r_{ij}^2 + r_{ik}^2 + r_{jk}^2)].$$

تم تقدير المعاملات من الملائمة في العديد من خواص بلورة C_2 والجرافيت والماس. تم حساب طاقة وتركيب الخواص المرتبطة للجرافيت والماس في الحالة الكتلية. تم تطبيق دالة PEF ايضا على عناقيد الكربون. معاملات PEF للكربون هي:

$$q_1 = 10.149804, q_2 = 7.936986 \text{ \AA}^{-1}, q_3 = 261.527033 \text{ eV}, q_4 = 0.527263 \text{ \AA}^{-1}, \\ q_5 = 3.071221 \text{ \AA}, Z = 20.0 \text{ eV}, h = 0.205, p = 1.340, b = 0.588 \text{ \AA}^{-1}.$$



[18] Kaxiras-Pandey 9.2.2

تم تطوير دالة PEF للسليكون [29].

$$\Phi = \phi_2 + \phi_3 = \sum_{i<j} U_{ij} + \sum_{i<j<k} W_{ijk},$$

$$U_{ij} = A_1 e^{-\alpha_1 r_{ij}^2} - A_2 e^{-\alpha_2 r_{ij}^2}, \quad W_{ijk} = h_{ijk} + h_{jki} + h_{kij},$$

$$h_{ijk} = e^{-\beta(r_{ij}^2 + r_{ik}^2)} [B g^2(\theta_{ijk}) + D g^4(\theta_{ijk})], \quad g(\theta) = \frac{1}{3} + \cos \theta.$$

اعتمدت دالة PEF على قاعدة بيانات ميكانيكا الكم. ولقد استخدمت لعملية المحاكاة في شبكة الماس البلورية للسليكون، مثل التبادل الذري ونقطة العيوب والشواغر والـ interstitials. معاملات PEF للسليكون (المسافة بوحدة Å والطاقة بوحدة eV) هي:

$$A_1 = 57.316072, \quad A_2 = 6.4373054, \quad \alpha_1 = 0.82335230, \quad \alpha_2 = 0.19061589, \\ B = 10.188418, \quad D = -9.113678, \quad \beta = 0.18642554.$$

[19] Feuston-Garofalini 10.2.2

تم تطبيق دالة PEF هذه على انواع سليكا مختلفة (v-SiO₂) [30]

$$\Phi = \phi_2 + \phi_3 = \sum_{i<j} U_{ij} + \sum_{i<j<k} W_{ijk},$$

$$U_{ij} = A_{ij} e^{-r_{ij}/\rho} + \frac{e^2 Z_i Z_j}{r_{ij}} \operatorname{erfc} \left(\frac{r_{ij}}{\beta_{ij}} \right), \quad A_{ij} = \left(1 + \frac{Z_i}{n_i} + \frac{Z_j}{n_j} \right) b e^{(\sigma_i + \sigma_j)/\rho},$$



$$W_{ijk} = h(r_{ij}, r_{ik}, \theta_{jik}) + h(r_{jk}, r_{ji}, \theta_{kji}) + h(r_{ki}, r_{kj}, \theta_{ikj}),$$

$$h(r_{ij}, r_{ik}, \theta_{jik}) = \begin{cases} \lambda_i e^{\eta_i} \Delta \theta_i, & r_{ij} < r_i^c, r_{ik} < r_i^c \\ 0, & r_{ij} \geq r_i^c, r_{ik} \geq r_i^c \end{cases}$$

$$\eta_i = \gamma_i / (r_{ij} - r_i^c) + \gamma_i / (r_{ik} - r_i^c), \quad \Delta \theta_i = \cos \theta_{jik} - \cos \theta_{jik}^c.$$

استخدمت دالة PEF لدراسة الخواص التركيبية للعديد من انواع السليكا. تم حساب معامل RDF والبنية التركيبية S(q). معاملات الـ PEF لأنواع السليكا المختلفة (v-SiO₂) هي:

$$\begin{aligned} A_{\text{Si-O}} &= 3.00 \times 10^{-9} \text{ erg}, A_{\text{O-O}} = 1.10 \times 10^{-9} \text{ erg}, A_{\text{Si-Si}} = 1.88 \times 10^{-9} \text{ erg}, \beta_{\text{Si-O}} = 2.29 \text{ \AA}, \\ \beta_{\text{O-O}} &= 2.34 \text{ \AA}, \beta_{\text{Si-Si}} = 2.34 \text{ \AA}, \lambda_{\text{Si}} = 18.0 \times 10^{-11} \text{ erg}, \gamma_{\text{Si}} = 2.6 \text{ \AA}, r_{\text{Si}}^c = 3.0 \text{ \AA}, \\ \cos \theta_{\text{O-Si-O}}^c &= -1/3, \lambda_{\text{O}} = 0.3 \times 10^{-11} \text{ erg}, \gamma_{\text{O}} = 2.0 \text{ \AA}, r_{\text{O}}^c = 2.6 \text{ \AA}, \cos \theta_{\text{Si-O-Si}}^c = -1/3. \end{aligned}$$

[20] Murrel-Mottram ⇨ 11.2.2

تم تطوير دالة PEF هذه للبلورات المكعبة ولمعاملات السليكون [31].

$$\Phi = \phi_2 + \phi_3 = \sum_{i < j} U_{ij} + \sum_{i < j < k} W_{ijk},$$

$$U_{ij} = D[1 + b(r_{ij} - r_e)]e^{-b(r_{ij} - r_e)}, \quad W_{ijk} = P(Q_1, Q_2, Q_3)e^{-aQ_1},$$

$$P(Q_1, Q_2, Q_3) = C_0 + C_1 Q_1 + C_2 Q_1^2 + C_3(Q_2^2 + Q_3^2) + C_4 Q_1^3 + C_5 Q_1(Q_2^2 + Q_3^2)$$

$$+ C_6(Q_3^3 - 3Q_3 Q_2^2),$$

$$\begin{bmatrix} Q_1 \\ Q_2 \\ Q_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}} \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} & -\frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{1}{\sqrt{6}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \rho_1 \\ \rho_2 \\ \rho_3 \end{bmatrix},$$

$$\rho_1 = \rho_{ij}, \quad \rho_2 = \rho_{ik}, \quad \rho_3 = \rho_{jk}, \quad \rho_{ij} = r_{ij} - r_e.$$



تم فحص دالة PEF لأطوار بلورية مختلفة. تم تحديد المعاملات بملائمة PEF في طاقة الشبكة البلورية، وثابت الشبكة البلورية وثوابت المرونة وتردد رامان للشبكة الماسية للسليكون. معاملات PEF للسليكون هي:

$$D = 4.007 \text{ eV}, r_e = 2.155 \text{ \AA}, C_0 = 0.98, C_1 = 0.87, C_2 = 6.20, C_3 = -2.89, C_4 = 6.28, \\ C_5 = -6.14, C_6 = -10.98, a = 5.5.$$

12.2.2 جهد Al-Derzi-Johnston-Murrell-Rodriguez-Ruiz [21]

تم تطوير دالة PEF هذه للتركيب الماسي، ولمعاملات الكربون [32].

$$\Phi = \phi_2 + \phi_3 = \sum_{i<j} U_{ij} + \sum_{i<j<k} W_{ijk},$$

$$U_{ij} = -D(1 + a\rho_{ij})e^{-a\rho_{ij}}, \quad W_{ijk} = DP(Q_1, Q_2, Q_3)e^{-aQ_1}, \quad \rho_{ij} = (r_{ij} - r_e)/r_e \\ P(Q_1, Q_2, Q_3) = C_0 + C_1Q_1 + C_2Q_1^2 + C_3(Q_2^2 + Q_3^2) + C_4Q_1^3 + C_5Q_1(Q_2^2 + Q_3^2) \\ + C_6(Q_3^3 - 3Q_3Q_2^2) + C_7Q_1^4 + C_8Q_1^2(Q_2^2 + Q_3^2) + C_9(Q_2^2 + Q_3^2)^2 \\ + C_{10}Q_1(Q_3^3 - 3Q_3Q_2^2).$$

تعرف المتغيرات Q_i و ρ_i كما في جهد Murrell-Mottram. تم الحصول على معاملات PEF من خلال ملائمتها في طاقة الشبكة البلورية وفراغات الشبكة البلورية وثوابت المرونة ومنحنيات تشتت الفونون للكربون الماسي. معاملات PEF للكربون هي:

$$a = 6.70, D = 3.258 \text{ eV}, r_e = 1.762 \text{ \AA}, C_0 = 0.974, C_1 = -0.412, C_2 = 22.418, \\ C_3 = -9.624, C_4 = -20.580, C_5 = 14.075, C_6 = 9.474, C_7 = 12.226, C_8 = -42.283, C_9 \\ = -0.681, C_{10} = -13.435.$$



[22] Li-Johnston-Murrell جهد 13.2.2

تم تطوير دالة PEF هذه للسليكون [33].

$$\Phi = \phi_2 + \phi_3 = \sum_{i<j} U_{ij} + \sum_{i<j<k} W_{ijk},$$

$$U_{ij} = -D(1 + a_2\rho_{ij})e^{-a_2\rho_{ij}}, \quad W_{ijk} = DP(Q_1, Q_2, Q_3)e^{-a_3Q_1}, \quad \rho_{ij} = (r_{ij} - r_e)/r_e,$$

$$P(Q_1, Q_2, Q_3) = C_0 + C_1Q_1 + C_2Q_1^2 + C_3(Q_2^2 + Q_3^2) + C_4Q_1^3 + C_5Q_1(Q_2^2 + Q_3^2) \\ + C_6(Q_3^3 - 3Q_3Q_2^2) + C_7Q_1^4 + C_8Q_1^2(Q_2^2 + Q_3^2) + C_9(Q_2^2 + Q_3^2)^2 \\ + C_{10}Q_1(Q_3^3 - 3Q_3Q_2^2).$$

تعرف المتغيرات Q_i و ρ_i كما في جهد Murrell-Mottram. تم تحديد معاملات دالة الـ PEF من خواص السليكون الصلب واستخدمت لدراسة تراكيب وطاقات عناقيد السليكون الميكروية. معاملات PEF للكربون هي:

$$a_2 = a_3 = 6.50, \quad D = 2.918 \text{ eV}, \quad r_e = 2.389 \text{ \AA}, \quad C_0 = 3.598, \quad C_1 = -11.609, \quad C_2 = 13.486, \\ C_3 = -18.174, \quad C_4 = -5.570, \quad C_5 = 79.210, \quad C_6 = -6.458, \quad C_7 = 23.383, \quad C_8 = -111.809, \\ C_9 = -9.705, \quad C_{10} = -38.297.$$

[23] (I) Erkok جهد 15.2.2

تم تطوير دالة PEF هذه لأنظمة المكعب، وطبقت على عناقيد العناصر الميكروية [34].

$$\Phi = \phi_2 + \phi_3 = \sum_{i<j} U_{ij} + \sum_{i<j<k} W_{ijk},$$

$$U_{ij} = A \left[\left(\frac{r_0}{r_{ij}} \right)^{2n} \exp [-2\alpha(r_{ij}/r_0)^2] - \left(\frac{r_0}{r_{ij}} \right)^n \exp [-\alpha(r_{ij}/r_0)^2] \right],$$

$$W_{ijk} = B(U_{ij}f_{ijk} + U_{ik}f_{ikj} + U_{jk}f_{jki}),$$

$$A = -4\epsilon_0, \quad \alpha = \ln(2), \quad n = \sqrt{\frac{r_0^2 k}{2|\epsilon_0|}} - 2\alpha, \quad f_{ijk} = e^{-(r_{ik}^2 + r_{jk}^2)/r_0^2}.$$



تم ايجاد معاملات PEF باستخدام بيانات قليلة جدا وطاقة تماسك المادة الكتلية للعناصر. لقد طبقت لدراسة تركيب وطاقة عناقيد العناصر الميكروية. معاملات PEF للعديد من العناصر في تراكيب بلورية مختلفة ($\alpha = \ln 2$) معطاه في الجدول 7.

15.2.2 جهد Erko (II) [24]

تم تطوير دالة PEF هذه لأنظمة المكعب، وطبقت على عناقيد العناصر الميكروية [35].

$$\Phi = \phi_2 + \phi_3 = \sum_{i < j} U_{ij} + \sum_{i < j < k} W_{ijk},$$

الجدول 7

Element	Structure	r_0 (Å)	A (eV)	n	B
Ag	FCC	2.48	6.60	2.312351	-1.637860
Al	FCC	2.47	6.20	2.072844	-1.553508
Au	FCC	2.47	9.16	2.806960	-1.605480
Cu	FCC	2.22	8.04	1.801698	-1.619242
Ni	FCC	2.20	8.28	2.892470	-1.290433
Fe	BCC	2.02	3.60	3.195342	-1.061661
Li	BCC	2.67	4.28	0.907914	-1.888711
C	DIA	1.24	24.84	1.680481	-17.293200
Ge	DIA	2.45	10.60	1.417253	-3.344464
Si	DIA	2.25	12.84	1.874024	-4.266564
Cs	BCC	4.47	1.60	1.890859	-2.023773
K	BCC	3.91	2.08	1.608210	-1.979834
Na	BCC	3.08	2.92	1.250439	-2.436817
Ca	FCC	4.28	0.56	3.117158	-0.145373
Pb	FCC	2.93	3.40	3.422940	-1.586818
Pd	FCC	2.57	4.40	6.950465	-0.681378
Pt	FCC	2.34	14.84	2.854446	-1.762003
Cd	HCP	4.82	0.16	4.002629	-0.097190
Mg	HCP	3.89	0.20	2.874987	.1.112951
Sc	HCP	2.79	6.60	1.950414	-1.684201
Ti	HCP	1.97	4.92	3.421186	2.287793
Zn	HCP	2.35	0.24	4.566524	3.944883

$$U_{ij} = C_2 A \left[\left(\frac{r_0}{r_{ij}} \right)^{2n} \exp [-2\alpha(r_{ij}/r_0)^2] - \left(\frac{r_0}{r_{ij}} \right)^n \exp [-\alpha(r_{ij}/r_0)^2] \right],$$

$$W_{ijk} = C_3 (U_{ij} f_{ijk} + U_{ik} f_{ikj} + U_{jk} f_{jki}).$$



الكميات A و n و α و f_{ijk} تعرف كما في جهد Erkoç (I). تم تحديد معاملات PEF باستخدام بيانات ضئيلة جدا وطاقة تماسك المادة الكتلية للعناصر. تم الاخذ بعين الاعتبار شرط استقرار المادة الكتلية. تم ايجاد معاملات PEF وطبقت على عناقيد عناصر ميكروية بتراكيب FCC [35]، و BCC [36]، و DIA (الماس) [37]، و RHO (منشور سداسي) [38]. معاملات PEF لبعض العناصر بتراكيب FCC و DIA و BCC (قيم r_0 , A, n, α كما في جهد Erkoç (I)) وهي معطاة في الجدول 8. معاملات PEF لبعض العناصر بتراكيب BCC و RHO معطاة في الجدول 9.

16.2.2 جهد Erkoç (III) [25]

تم تطوير دالة PEF هذه لأنظمة المكعب، وطبقت على عناقيد العناصر الميكروية [39].

$$\Phi = \phi_2 + \phi_3 = \sum_{i < j} U_{ij} + \sum_{i < j < k} W_{ijk},$$

$$U_{ij} = C_2 \left(\frac{A_1}{r_{ij}^{21}} e^{-x_1 r_{ij}^2} - \frac{A_2}{r_{ij}^{22}} e^{-x_2 r_{ij}^2} \right), \quad W_{ijk} = C_{31} W_{ijk}^{(1)} + C_{32} W_{ijk}^{(2)},$$

الجدول 8

Element	Structure	C ₂	C ₃	Element	Structure	C ₂	C ₃
Ag	FCC	0.2338381	-0.1640650	C	DIA	0.4142327	-2.8628860
Al	FCC	0.2635582	-0.1766508	Si	DIA	0.2902184	-0.4736164
Au	FCC	0.2459298	-0.1768174	Ge	DIA	0.2278680	-0.2900124
Cu	FCC	0.1930176	-0.1261549	Li	BCC	0.1375465	-0.0982322
Ni	FCC	0.2860750	-0.1688664	Na	BCC	0.1752010	-0.1633922
Pb	FCC	0.4581129	-0.4052801	K	BCC	0.2106423	-0.1680882
Pd	FCC	0.6671249	-0.3330730	Cs	BCC	0.2651783	-0.2288656
Pt	FCC	0.2508586	-0.2004671	Fe	BCC	1.1177254	-1.4442571



Element	Structure	r_0 (Å)	A (eV)	n	C_2	C_3
V	BCC	1.77	9.96	2.739947	1.1128382	-6.6226567
Cr	BCC	1.68	7.12	2.552045	1.1319147	-6.9582166
Nb	BCC	2.10	20.0	2.849568	0.5294501	-1.4977811
As	RHO	2.10	15.84	2.375928	0.2602548	-1.0818833
Sb	RHO	2.34	12.40	2.409013	0.3218016	-1.4833859
Bi	RHO	2.6596	8.16	3.071074	0.3438665	-0.8657999

Parameter	Au	Ag	Cu
A_1	345.923364	220.262366	110.766008
A_2	38.9245908	26.0811795	46.1649783
α_1	0.750775965	0.673011507	0.394142248
α_2	0.229377368	0.120620395	0.207225507
λ_1	1.04289230	1.72376253	2.09045946
λ_2	1.05974062	1.81484791	1.49853083
r_0	2.470	2.480	2.220
C_2	0.169729418	0.193714755	0.150036137
C_{31}	0.530820957	0.254330241	0.140549073
C_{32}	1487.33142	784.190491	194.576839

$$W_{ijk}^{(1)} = U_{ij}f_k + U_{ik}f_j + U_{jk}f_i, \quad W_{ijk}^{(2)} = \frac{1 + 3 \cos \theta_i \cos \theta_j \cos \theta_k}{(r_{ij}r_{ik}r_{jk})^3}, \quad f_i = \exp[-(r_{ij}^2 + r_{ik}^2)/r_0^2].$$

تم تحديد معاملات الدالة PEF من خلال طاقة التماسك في الحالة الكتلية وشرط استقرار المادة الكتلية ومعامل ينح للعنصر تحت الدراسة. تحقق دالة PEF هذه استقرار البلورة وتعطي ثوابت المرونة بشكل معقول للعناصر تحت الدراسة. معاملات PEF لـ Au و Ag و Cu (الطاقة بوحدة eV والمسافة بوحدة Å) معطاة في الجدول 10.

17.2.2 جهد Erkoç [27] (IV)

تم تطوير دالة PEF هذه لأنظمة المكعب، وطبقت على عناقيد النحاس [40].



$$\Phi = \phi_2 + \phi_3 = \sum_{i<j} U_{ij} + \sum_{i<j<k} W_{ijk},$$

$$U_{ij} = D_{21}U_{ij}^{(21)} + D_{22}U_{ij}^{(22)}, \quad U_{ij}^{(2\ell)} = \frac{A_\ell}{r_{ij}^{2\ell}} \exp[-\alpha_\ell r_{ij}^2], \quad \ell = 1, 2,$$

$$W_{ijk} = D_{31}W_{ijk}^{(31)} + D_{32}W_{ijk}^{(32)}, \quad W_{ijk}^{(3\ell)} = U_{ij}^{(2\ell)} f_k + U_{ik}^{(2\ell)} f_j + U_{jk}^{(2\ell)} f_i, \quad \ell = 1, 2,$$

$$f_i = \exp[-(r_{ij}^2 + r_{ik}^2)/r_{jk}^2]$$

تم تحديد معاملات PEF من خلال طاقة الماسك في الحالة الكتلية وشرط استقرار المادة الكتلية وثوابت المرونة (C_{11} , C_{12}) للعنصر تحت الدراسة ولهذا فهي تحقق معامل ينح للعنصر تحت الدراسة. دالة PEF هذه تحقق استقرار البلورة للعنصر تحت الدراسة. معاملات PEF للـ Cu (الطاقة بوحدة eV والمسافة بوحدة Å) هي:

$$A_1 = 110.766008, \quad A_2 = -46.1649783, \quad \alpha_1 = 0.394142248, \quad \alpha_2 = 0.207225507,$$

$$\lambda_1 = 2.09045946, \quad \lambda_2 = 1.49853083, \quad D_{21} = 0.4683918280, \quad D_{22} = 0.2329719830,$$

$$D_{31} = 0.0257056474, \quad D_{32} = 0.0156041879.$$

18.2.2 Erkoç [27] (V)

تم تطوير دالة PEF هذه لأنظمة FCC [41].

$$\Phi = \phi_2 + \phi_3 = \sum_{i<j} U_{ij} + \sum_{i<j<k} W_{ijk},$$

$$U_{ij} = \varepsilon \left[\frac{n}{m-n} \left(\frac{r_0}{r_{ij}} \right)^m - \frac{m}{m-n} \left(\frac{r_0}{r_{ij}} \right)^n \right] e^{ar^*}$$

$$W_{ijk} = Z_1 G_1(r_{ij}, r_{ik}, r_{jk}) \exp(ar^* + \beta Z_1^*) + Z_2 G_2(r_{ij}, r_{ik}, r_{jk}) \exp(ar^* + \beta Z_2^*),$$

$$G_1(r_{ij}, r_{ik}, r_{jk}) = \frac{1 + 3 \cos \theta_i \cos \theta_j \cos \theta_k}{(r_{ij} r_{ik} r_{jk})^3},$$

$$G_2(r_{ij}, r_{ik}, r_{jk}) = \frac{9 \cos \theta_k - 25 \cos 3\theta_k + 6 \cos(\theta_i - \theta_j)(3 + 5 \cos 2\theta_k)}{r_{ij}^3 r_{ik}^4 r_{jk}^4},$$

$$r^* = \frac{r_0}{R_0}, \quad Z_1^* = \frac{Z_2}{\varepsilon r_0^9}, \quad Z_2^* = \frac{Z_1 R_0}{\varepsilon r_0^{12}}.$$



تمثل R_0 و r_0 مسافة اقرب جوار في البلورة، ومسافة الاتزان في الثنائي على التوالي. تم تأثير تفاعلات الاجسام العديدة على خواص المادة في الحالة الكتلية للمواد الصلبة للتركيب FCC بإجراء تحليل للمعاملات.

معاملات PEF لبعض عناصر FCC معطاة في الجدول 11.

2.3 مجموعة 3 دوال EMBPEFs (ϕ_{III})

2.3.1 جهد Bolding-Andersen [28]

تم تطوير دالة PEF هذه للسليكون [42].

$$\Phi = \phi_2,$$

الجدول II

Element	m	n	Z_1^*	Z_2^*	r^*	α	β
Kr	11	7	0.06	0.0	1.00161	0.0	0.0
Xe	12	6	0.08	0.0	1.00026	0.0	0.0
Al	11	6	0.40	0.06	0.87765	-1.0	-1.0
Cu	10	6	0.35	0.14	0.87143	-1.0	-1.0
Pb	10	6	0.25	0.05	0.92256	-1.0	-1.0
Pd	12	5	0.03	0.22	0.93932	-1.0	-1.0

$$\phi_2 = \sum_{i<j} f_c(r_{ij}) [V_R(r_{ij}) + I_{ij}^\pi V_\pi(r_{ij}) + I_{ij}^\sigma V_\sigma(r_{ij})],$$

$$f_c(r) = \begin{cases} 1, & r < R - D, \\ \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \sin[\frac{1}{2}\pi(r - R)/D], & R - D < r < R + D, \\ 0, & r > R + D, \end{cases}$$

$$V_R(r) = \frac{1}{2}(V^{\text{bond}}(r) + V^{\text{anti}}(r)), \quad V_\pi(r) = a_1 \{ \tanh[a_2(r - a_3)] - 1 \},$$

$$V_\sigma(r) = \frac{1}{2}(V^{\text{bond}}(r) - V^{\text{anti}}(r)) - V_\pi(r), \quad V^{\text{bond}}(r) = -D_e \left(1 + \sum_{i=1}^6 b_i \rho^i \right) e^{-b_1 \rho},$$



$$V^{\text{anti}}(r) = (b_8 + b_9\rho + b_{10}\rho^2)e^{-b_7\rho}, \quad \rho = r - r_e,$$

$$I_{ij}^{\sigma} = \frac{1}{I_1} \cdot \frac{1}{I_2}, \quad I_1 = 1 + Z_{ij}^{a_6} \left(\sum_{k \neq i,j} a_4 S_{ik} S_{jk} + \sum_{k < \ell \neq i,j} a_5 S_{ik} S_{i\ell} S_{jk} S_{j\ell} S_{k\ell} \right),$$

$$I_2 = 1 + Z_{ij}^{a_7} \left(\sum_{k \neq i,j} [S_{ik} P(\theta_{jik}) + S_{jk} P(\theta_{ijk})] \right), \quad Z_{ij} = \sum_{k \neq i,j} (S_{ik} + S_{jk}),$$

$$P(\theta) = \sum_{n=0}^6 d_n \cos^n(\theta); \quad S_{ik} = S(r_{ik}) = S(r) = \begin{cases} 1, & r < r_e, \\ f_c(r) \frac{V_R(r) + V_{\sigma}(r)}{V_R(r_e) + V_{\sigma}(r_e)}, & r \geq r_e, \end{cases}$$

$$I_{ij}^{\pi} = S(Z_i^j) S(Z_j^i) e^{-I_3}; \quad I_3 = \sum_{k \neq i,j} F_3 + \sum_{k,\ell \neq i,j} F_4 + \sum_{k,\ell,m \neq i,j} F_5,$$

$$S(Z) = \begin{cases} 1, & Z < 2, \\ c_1 + c_2 Z + c_3 Z^2 + c_4 Z^3, & 2 \leq Z \leq 2.5, \\ 0, & Z > 2.5, \end{cases} \quad Z_i^j = \sum_{k \neq i,j} S_{ik},$$

$$F_3 = a_8 S_{ik} S_{jk} + \frac{a_9}{1 + Z_{ij}} [S_{ik}(1 - S_{jk}^4) + S_{jk}(1 - S_{ik}^4)],$$

$$F_4 = a_{10} (S_{ik} S_{i\ell} S_{jk} S_{j\ell}) + \frac{a_{11}}{1 + Z_{ij}^5} [S_{ik} S_{j\ell} (1 - S_{i\ell})(1 - S_{jk}) + S_{i\ell} S_{jk} (1 - S_{ik})(1 - S_{j\ell})] \\ + a_{12} \frac{v_{ijk\ell}^2}{r_{ij}^2} \left(\frac{S_{ik} S_{j\ell}}{r_{ik}^2 r_{j\ell}^2} + \frac{S_{i\ell} S_{jk}}{r_{i\ell}^2 r_{jk}^2} + \frac{S_{ik} S_{i\ell}}{r_{ik}^2 r_{i\ell}^2} + \frac{S_{jk} S_{j\ell}}{r_{jk}^2 r_{j\ell}^2} \right),$$

$$F_5 = a_{13} (S_{ik} S_{jk} S_{i\ell} S_{jm} S_{k\ell} S_{km} + S_{ik} S_{jk} S_{im} S_{j\ell} S_{k\ell} S_{km} + S_{i\ell} S_{j\ell} S_{ik} S_{jm} S_{k\ell} S_{\ell m}) \\ + a_{13} (S_{i\ell} S_{j\ell} S_{im} S_{jk} S_{k\ell} S_{\ell m} S_{im} S_{jm} S_{ik} S_{j\ell} S_{km} S_{\ell m} + S_{im} S_{jm} S_{i\ell} S_{jk} S_{km} S_{\ell m}),$$

$$v_{ijk\ell} = \mathbf{r}_{ij} \cdot \mathbf{r}_{j\ell} \times \mathbf{r}_{ik}.$$

اختيرت المعاملات لتلائم العديد من البيانات على السليكون تشتمل تركيب وطاقة العناقيد الصغيرة، والتركيب البلورية وثوابت المرونة وخواص السطح. استخدمت دالة PEF لنمذجة العناقيد الصغيرة واطوار البلورة ونقطة العيوب واعادة التركيب السطحي. تحتوي مجموعة معاملات دالة PEF على 36 مدخل وهي ليست مدرجة هنا.



[29] Brenner-Garrison 2.3.2

تم تطوير دالة الجهد هذه للسليكون (المواد الصلبة التساهمية) [43]

$$\Phi = \phi_2 + \phi_3,$$

$$\phi_2 = \sum_i^4 \left[3(a_1 + a_2) \left(\lambda_{ii}^2 - \frac{D_1^2}{4a^2} \right) + Ae^{-BR_i^2} \right],$$

$$\lambda_{ii} = \begin{cases} \frac{D_1}{2a}(1 - e^{\gamma\delta_i}), & R_i < R_{\max}, \\ \frac{D_1}{2a}, & R_i \geq R_{\max}, \end{cases} \quad \gamma = \frac{R_{\max}^2 - 3a^2}{D_1}, \quad \delta_i = \frac{\gamma(R_i^2 - 3a^2)}{R_i^2 - R_{\max}^2},$$

$$\phi_3 = \sum_{i,j}^6 \left[a_2 \lambda_{ij} (\lambda_{ij} + \lambda_{ii} + \lambda_{jj}) + a_1 (\lambda_{ii} \lambda_{jj} - \frac{D_2^2}{4a^2}) \right],$$

$$\lambda_{ii} = \begin{cases} \frac{D_2}{2a}(1 - e^{\eta_i}), & Q_{ii} < Q_{\max}, \\ \frac{D_2}{2a}, & Q_{ii} \geq Q_{\max}, \end{cases} \quad Q_{ii} = R_i^2 - 3a^2 + \frac{(R_j^2 - 3a^2)^4}{Q_{\max}^3},$$

$$\gamma = \frac{Q_{\max}}{D_2}, \quad \eta_i = \frac{\gamma Q_{ii}}{Q_{ii} - Q_{\max}}, \quad \lambda_{ij} = \frac{3a}{2} \left(\frac{R_i \cdot R_j}{R_i R_j} + \frac{1}{3} \right) D(R_i) D(R_j),$$

$$D(R_i) = \begin{cases} e^{\xi_i}, & R_i < R_{\max}, \\ 0, & R_i \geq R_{\max}, \end{cases}, \quad \xi_i = \frac{(R_i^2 - 3a^2)^2}{R_i^4 - R_{\max}^4}.$$

تم تطوير دالة PEF للمواد الصلبة التساهمية، وطبقت على السليكون. تعتمد دالة PEF على مجال قوة التكافؤ. تتوقع دالة PEF علاقات تشتت الفونون وطاقة التماسك ومعامل Debye-Waller عند درجة حرارة الغرفة، واستقرار الطاقة لإعادة تركيب الثنائي المتماثلة {100}. معاملات PEF للسليكون هي:

$$a = 1.357 \text{ \AA}, D_1 = 3.0034 \text{ \AA}^2, D_2 = 1.2877 \text{ \AA}^2, R_{\max} = 3.65 \text{ \AA}, A = 97013 \text{ eV}, B = 3.33 \text{ \AA}^{-2}, Q_{\max} = 6.73 \text{ \AA}^2, a_1 = 0.399 \text{ eV/\AA}^2, a_2 = 0.157 \text{ eV/\AA}^2.$$



[30] Cieplak-Kollman 3.3.2

تم تطوير دالة PEF هذه للمحاليل المائية لأيونات Li^+ و Na^+ [44].

$$\Phi = \phi_2 + \phi_3, \quad \phi_2 = E_{w-w} + E_{w-i} + E_{\text{pol}}, \quad \phi_3 = E_{i-w-w},$$

$$E_{w-w} = \sum_{i<j} \frac{q_i q_j}{r_{ij}} + \sum_{i<j}^{O,O} A_{ij} e^{-B_{ij} r_{ij}} - \sum_{i<j}^{O-O} F \left[C_6 \left(\frac{g_6}{R_{sc}} \right)^6 \right] \\ + \sum_{i<j}^{O,H} A_{ij} e^{-B_{ij}(r_{ij}-r_{\min})} (e^{-B_{ij}(r_{ij}-r_{\min})} - 2),$$

$$g_n = 1 - \exp \left(-\frac{2.1}{n} R_{au} - \frac{0.109}{n^{1/2}} R_{au}^2 \right), \quad F = 1 - R_{au}^{2.326} e^{-R_{au}}$$

$$R_{au} = R_{sc}/0.529177, \quad R_{sc} = 0.94834673 \times R_{OO},$$

$$E_{w-i} = \sum_{i=w,j=\text{ion}} \left[\frac{q_i q_j}{r_{ij}} + \frac{\sqrt{A_i A_j}}{r_{ij}^{12}} - \frac{\sqrt{C_i C_j}}{r_{ij}^6} \right], \quad A_i = \varepsilon_i (r_i^* + r_j^*)^{12}, \quad C_i = 2\varepsilon_i (r_i^* + r_j^*)^6,$$

$$E_{\text{pol}} = -\frac{1}{2} \sum_j \alpha_j (E_j E_j^0), \quad E_{i-w-w} = D e^{-\beta(r_{ij}+r_{ik})} e^{-\gamma r_{jk}}.$$

تم تطوير دالة PEF هذه للأنظمة التي تحتوي على جزيئات H_2O وأيونات Li^+ أو Na^+ . تم حساب المحتويات الحرارية (enthalpy) لذوبان الأيون. تم حساب الطاقة الحرة النسبية لدرجة Li^+ و Na^+ . مجموعة المعاملات لدالة PEF هذه تحتوي على 30 مدخل وهي ليست مدرجة هنا.



4.3.2 جهد [31] Mistriotis-Flytzanis-Farantos

تم تطوير هذه الدالة لعناقيد السليكون [45].

$$\Phi = \phi_2 + \phi_3 + \phi_4,$$

$$\phi_2 = \sum_{i < j} A(Br_{ij}^4 - 1)e^{\alpha(r_{ij}-R)}, \quad r_{ij} < R, \quad \phi_3 = \sum_{i < j < k} (h_{jik} + h_{ijk} + h_{ikj}),$$

$$h_{jik} = \lambda_3 f_{ij} f_{ik} (1 - e^{-Q(\cos \theta_{jik} + 1/3)^2}), \quad f_{ij} = e^{\alpha/(r_{ij}-R)},$$

$$\phi_4 = \sum_{i < j < k < l} (g_{ijkl} + g_{jikl} + g_{kijl} + g_{lijk}), \quad g_{ijkl} = \lambda_4 f_{ij} f_{ik} f_{il} (1 - e^{-Q\Delta_{ijkl}}),$$

$$\Delta_{ijkl} = (\cos \theta_{jik} + \frac{1}{3})^2 + (\cos \theta_{jil} + \frac{1}{3})^2 + (\cos \theta_{kil} + \frac{1}{3})^2.$$

تم تطبيق هذه الدالة على عناقيد السليكون، Si_n و $n > 6$. تم ملائمة PEF على ثابت الشبكة البلورية وطاقة التماسك وخواص الانصهار. معاملات PEF للسليكون هي:

$$A = 16.30076 \text{ eV}, \quad B = 11.58113 \text{ \AA}^4, \quad \alpha = 2.0951 \text{ \AA}, \quad R = 3.77118 \text{ \AA}, \quad \lambda_3 = 4.0, \\ \lambda_4 = 47.0, \quad \gamma = 2.4, \quad Q = 5.0.$$

4.3.2 جهد [32] Mistriotis-Froudakis-Vendras-Flytzanis

تم تطوير هذه الدالة لعناقيد واسطح السليكون [46].

$$\Phi = \phi_2 + \phi_3 + \phi_4,$$



$$\phi_2 = \sum_{i<j} A(Br_{ij}^4 - 1)f_{ij}, \quad f_{ij} = e^{z/(r_{ij}-R)},$$

$$\phi_3 = \sum_{i<j<k} (h_{jik} + h_{ijk} + h_{ikj}), \quad h_{jik} = \lambda_3 f_{ij} f_{ik} (1 - e^{-Q(\cos \theta_{jik} + 1/3)^2}),$$

$$\phi_4 = \sum_{i<j<k<l} (g_{ijkl} + g_{jikl} + g_{kijl} + g_{lijk}), \quad g_{ijkl} = \lambda_4 f_{ij} f_{jk} f_{kl} (1 - e^{-Q\Delta_{ijkl}}),$$

$$\Delta_{ijkl} = (\cos \theta_{ijk} + \frac{1}{3})^2 + (\cos \theta_{ijkl} - \frac{1}{3})^2 (\cos \theta_{ijkl} + 1)^2 + (\cos \theta_{jkl} + \frac{1}{3})^2.$$

تحاكي دالة PEF خواص عنقود السليكون واعادة بناء الاسطح Si(100) و Si(111). دالة PEF هذه هي تعديل عن الدالة السابقة. معاملات PEF للسليكون هي:

$$A = 16.3 \text{ eV}, B = 11.581 \text{ \AA}^4, \alpha = 2.095 \text{ \AA}, R = 3.77 \text{ \AA}, \lambda_3 = 4.0, \lambda_4 = 17.0, \gamma = 2.4, Q = 5.0.$$

[33] Daw-Baskes جهد 6.3.2

تم تطوير دالة PEF هذه للمعادن [47].

$$\Phi = \sum_i F_i(\rho_{h,i}) + \sum_{i<j} \phi_{ij}(r_{ij}), \quad \rho_{h,i} = \sum_{j \neq i} \rho_j^a(r_{ij}),$$

$$\rho_j^a(r) = n_1 \rho_{j_1}(r) + n_2 \rho_{j_2}(r), \quad \phi_{ij}(r) = \frac{Z_i(r)Z_j(r)}{r}, \quad Z(r) = Z_0(1 + \beta r^v)e^{-\alpha r}.$$

تعرف دالة PEF هذه بطريقة الالكترن المغمور (EAM) embedded atom. تعتمد EAM على نظرية دالة الكثافة لحساب خواص المستوى الارضي للأنظمة المعدنية، مثل الطاقة الكلية وثابت الشبكة البلورية وثوابت المرونة وطاقة التسامي وطاقة تشكل الشواغر وطاقة السطح واسترخاء السطح للعديد من اسطح المعادن. خواص H للمعدن في حالته الكتلية وموقع الربط وطاقة الامتزاز لـ H على الاسطح المعدنية تمت دراستها ايضا. مجموعة معاملات دالة PEF هذه تحتوي على الكثير من المتغيرات وهي ليست مدرجة هنا.



7.3.2 جهه [34] Price-Parker-Leslie

تم تطوير دالة PEF هذه للسليكات (Mg₂SiO₄) [48].

$$\Phi = \phi_1 + \phi_2 + \phi_3,$$

$$\phi_1 = \frac{1}{2} \sum_i k_i r_i^2, \quad \phi_2 = \sum_{i<j} \left[A_{ij} e^{-r_{ij}/B_{ij}} - \frac{C_{ij}}{r_{ij}^6} + \frac{e^2 q_i q_j}{r_{ij}} \right], \quad \phi_3 = \sum_{i<j<k} k_{ijk} (\theta_{ijk} - \theta_0)^2.$$

اشتقت دالة PEF تجريبيا باستخدام البيانات من الاكاسيد الثنائية البسيطة. تم توقع خواص الشبكة البلورية الديناميكية والديناميكا الحرارية للاشكال المتعددة لـ Mg₂SiO₄. استخدمت PEF لنمذجة سلوك الاشعة تحت الحمراء ورمان لـ forsterite (Mg₂SiO₄). علاقات تشتت الفونون لـ Mg₂SiO₄ متعدد الاشكال التي توقعتها PEF استخدمت لحساب السعة الحرارية والانتروبي ومعامل التمدد الحراري ومعاملات Gruneisen لهذه الاطوار. تم بناء مخطط الطور لهذه الانظمة. معاملات PEF لـ Mg₂SiO₄ هي:

$$q_{Mg} = +2.0, \quad q_{Si} = +4.0, \quad q_o = +0.848, \quad A_{Mg-O} = 1428.5 \text{ eV}, \quad A_{Si-O} = 1283.9 \text{ eV}, \\ A_{O-O} = 22764.3 \text{ eV}, \quad B_{Mg-O} = 0.2945 \text{ \AA}, \quad B_{Si-O} = 0.3205 \text{ \AA}, \quad B_{O-O} = 0.1490 \text{ \AA}, \\ C_{Si-O} = 10.7 \text{ eV \AA}^6, \quad C_{O-O} = 27.88 \text{ eV \AA}^6, \quad k_{O-Si-O} = 2.09 \text{ eV/rad}^2, \\ k_{O-Shell} = 74.9 \text{ eV/\AA}^2.$$

8.3.2 جهه [35] Price-Wall-Parker

تم تطوير هذه الدالة للسليكات [49].

$$\Phi = \phi_1 + \phi_2 + \phi_3,$$

$$\phi_1 = \frac{1}{2} \sum_i k_i r_i^2, \quad \phi_2 = \sum_{i<j} \left[A_{ij} e^{-r_{ij}/B_{ij}} - \frac{C_{ij}}{r_{ij}^6} + \frac{e^2 q_i q_j}{r_{ij}} \right],$$

$$\phi_3 = \sum_{i<j<k} \left[k_{ijk} (\theta_{ijk} - \theta_0)^2 + D_{ijk} \frac{(1 + 3 \cos \theta_i \cos \theta_j \cos \theta_k)}{(r_{ij} r_{ik} r_{jk})^3} \right].$$



استخدمت PEF لدراسة خواص بلورات السليكات العالية الكثافة مع دراسة خصائص المرونة والخصائص الطيفية. تم دراسة محاكاة علاقات الطور وخواص العيب. تم دراسة طاقات التنشيط للانتشار في forsterite وperovskite. تم حساب الموصلية الايونية الفائقة عند درجة حرارة عالية لـ perovskite سيليكات الماغنسيوم. معاملات PEF لأنظمة Mg_2SiO_4 هي:

$$q_{Mg} = +2.0, q_{Si} = +4.0, q_o = +0.848, A_{Mg-O} = 875.0 \text{ eV}, A_{Si-O} = 1283.9 \text{ eV}, \\ A_{O-O} = 22764.3 \text{ eV}, B_{Mg-O} = 0.3225 \text{ \AA}, B_{Si-O} = 0.3205 \text{ \AA}, B_{O-O} = 0.1490 \text{ \AA}, \\ C_{Si-O} = 10.7 \text{ eV \AA}^6, C_{O-O} = 27.88 \text{ eV \AA}^6, k_{O-Si-O} = 2.09 \text{ eV/rad}^2, \\ k_{O-Shell} = 74.9 \text{ eV/\AA}^2, D_{O-Mg-O} = 120.0 \text{ eV \AA}^9.$$

9.3.2 جهد [36] (VI) Erkoc

تم تطوير دالة PEF هذه للأنظمة المكعبة. طبقت على عناقيد المعادن الميكروية FCC (Cu, Ag, Au) [50].

$$\Phi = D_{21}\phi_{21} + D_{22}\phi_{22}, \quad \phi_{2\ell} = \sum_{i<j} U_{ij}^{(2\ell)}, \quad U_{ij}^{(2\ell)} = \frac{A_\ell}{r_{ij}^{2\ell}} \exp[-\lambda_\ell r_{ij}^2], \quad \ell = 1, 2$$

تم تحديد معاملات PEF باعتبار طاقة تماسك المادة الكتلية وشرط استقرار المادة الكتلية. تحقق PEF استقرار البلورة وتعطي ثوابت المرونة ومعامل ينح للعناصر تحت الدراسة. كما تم دراسة الطاقة والتركييب للعناقيد الميكروية للعناصر. معاملات PEF لـ Cu و Ag و Au (الطاقة بوحدة eV والمسافة بوحدة Å) معطاة في الجدول 12.



Parameter	Cu	Ag	Au
A_1	110.766008	220.262366	345.923364
λ_1	2.09045946	1.72376253	1.04289230
α_1	0.394142248	0.673011507	0.750775965
A_2	-46.1649783	-26.0811795	-38.9245908
λ_2	1.49853083	1.81484791	1.05974062
α_2	0.2072255507	0.120620395	0.229377368
D_{21}	0.436092895	1.00610152	0.888911352
D_{22}	0.245082238	0.221234242	0.254280292

Element	d (Å)	A (eV)	β	c (Å)	c_0	c_1	c_2
V	3.692767	2.010637	0.0	3.80	-0.8816318	1.4907756	-0.3976370
Nb	3.915354	3.013789	0.0	4.20	-1.5640104	2.0055779	-0.4663764
Ta	4.076980	2.591061	0.0	4.20	1.2157373	0.0271471	-0.1217350
Cr	3.915720	1.453418	1.8	2.90	29.1429813	-23.3975027	4.7578297
Mo	4.114825	1.887117	0.0	3.25	43.4475218	-31.9332978	6.0804249
W	4.400224	1.896373	0.0	3.25	47.1346499	-33.7665655	6.2541999
Fe	3.699579	1.889846	1.8	3.40	1.2110601	-0.7510840	0.1380773

10.3.2 جهد Ackland [37]

تم تطوير دالة PEF هذه للأنظمة المرتبطة التساهمية، بالأخص للسليكون. طبقت على خواص البلورة ونقطة العيب والخواص السطحية للسليكون [51].

$$\Phi = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N A e^{-\alpha r_{ij}} - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{n=1}^4 B r_{ik_n} e^{-\beta r_{ik_n}},$$

تم تحديد معاملات PEF باعتبار طاقة التماسك ومعاملات الشبكة البلورية ومعامل ينح للسليكون الماسي. معاملات PEF للسليكون هي:

$$A = 208442.8, B = 16.63588, \alpha = 5.673585, \beta = 1.144811.$$



11.3.2 جهد Finnis-Sinclair [38]

تم تطوير دالة PEF هذه للمعادن الانتقالية وطبقت على خواص الفراغ والسطح لعناصر المعادن الانتقالية بتركيب BCC [52].

$$\Phi = U_N + U_P, \quad U_N = -Af(\rho), \quad U_P = \frac{1}{2} \sum_{i \neq 0} V(r_i)$$

$$f(\rho) = \sqrt{\rho}, \quad \rho = \sum_{i \neq 0} \phi(r_i),$$

$$\begin{aligned} \phi(r) &= (r - d)^2 + \beta(r - d)^3/d, & r \leq d, \\ &= 0, & r > d, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} V(r) &= (r - c)^2(c_0 + c_1r + c_2r^2), & r \leq c, \\ &= 0, & r > c. \end{aligned}$$

تم تحديد معاملات دالة PEF من خلال ثابت الشبكة البلورية وطاقة التماسك وثوابت المرونة ومعامل شير (معامل بينج) وضغط Cauchy للعناصر تحت الدراسة. معاملات PEF لبعض عناصر بتركيب BCC موضحة في الجدول 14.

تمت الترجمة في المركز العلمي للترجمة

31-7-2012

www.trgma.com