

Abstrakt

Kinetické efekty hrajú rozhodujúcu rolu v prípade mnohých štruktúrnych fázových prechodov v Si a Ge. Napriek tomu, že ide o prototypové polovodičové materiály, ktoré majú široké použitie v priemyselných aplikáciách, tieto javy stále nie sú dostatočne pochopené. Študovali sme kinetické efekty pomocou tzv. enhanced sampling metód, hlavne metadynamiky, aby sme uceleným spôsobom zmapovali mechanizmy prechodov a bariéry oddelujúce jednotlivé fázy Si a Ge. Kvôli vysokej výpočtovej náročnosti a potrebnej transferabilite sme použili a otestovali viacero typov potenciálov založených na neurónových siet'ach v súčinnosti s metadynamikou. S touto sadou nástrojov sme systematicky študovali štruktúrne fázové prechody v Si a Ge pri tlakoch nižších ako 10 GPa. Identifikovali sme viacere limity navrhnutého prístupu, hlavne v natrénovaní univerzálne presného potenciálu spolu s možnými riešeniami týchto problémov. Naším cieľom je prehĺbiť pochopenie štruktúrnych fázových prechodov vrátane kinetiky a zlepšiť zhodu medzi simuláciami a experimentálnymi pozorovaniami nad úroveň termodynamických predpovedí.