

10.08.07

Молекулярная динамика плавления тонких кремниевых пленок с двумя потенциалами машинного обучения

© Ю.Д. Фомин¹, Е.Н. Циок¹, С.А. Бобков², В.Н. Рыжов¹

¹ Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина Российской академии наук, Москва, Россия

² Национальный исследовательский центр „Курчатовский институт“,
Федеральный центр коллективного пользования научным оборудованием
„Комплекс моделирования и обработки данных исследовательских установок мега-класса“,
Москва, Россия

E-mail: fomin314@mail.ru

Поступила в Редакцию 16 июня 2026 г.

В окончательной редакции 18 августа 2026 г.

Принята к публикации 19 августа 2026 г.

Термическая стабильность силицена и тонких кремниевых пленок изучена методом молекулярной динамики с использованием двух потенциалов машинного обучения — SNAP и GAP. Для потенциала SNAP рассмотрены системы от одного слоя силицена до пленок толщиной в 36 слоев. Показано, что структура силицена разрушается при 500 К. Температура перехода в жидкое состояние возрастает с увеличением толщины пленки и достигает насыщения примерно при 28 слоях, что соответствует температуре плавления объемного материала для модели SNAP (1380 К). Тонкие пленки толщиной до 8 слоев при разрушении кристаллической решетки демонстрируют сосуществование двух фаз, в то время как более толстые пленки подвергаются поверхностному плавлению с последующим полным переходом в жидкое состояние. Потенциал GAP, хотя и более точный для объемного кремния, не способен правильно описать газовую фазу: силицен, моделируемый с помощью GAP, распадается на множество мелких кластеров. Полученные результаты сравниваются с более ранними данными для потенциала Стиллинджера–Вебера.

Ключевые слова: силицен, пленки, плавление, молекулярное моделирование, потенциалы машинного обучения.

DOI: 10.61011/FTT.2026.09.63920.10224

1. Введение

Кремний является основой современной электроники. Это придает данному материалу большое технологическое значение. В частности, в качестве перспективных двумерных материалов интерес представляют структуры кремния с низкой размерностью, такие как силицен.

Силицен был предсказан в теоретической работе [1] в 1994 году и синтезирован в 2012 году [2]. В отличие от графена, силицен является не идеально плоским материалом, а гофрированным слоем: некоторые атомы находятся выше плоскости симметрии, а другие — ниже. Ожидается, что силицен может быть использован в различных технологических приложениях, включая электронику — традиционную область применения кремния [3], а также в перспективных технологиях „зеленой“ энергетики, таких как хранение водорода [4], литий-ионные аккумуляторы [5] и т.д.

Хотя свойства силицена были широко изучены как экспериментально (см. обзорные статьи [6,7] и ссылки в них), так и с помощью моделирования (см., например, [8–13] об исследованиях силицена методами теории функционала плотности (ТФП)), остается еще много открытых вопросов. Особый интерес представляет изучение термической стабильности силицена. В то же

время — это сложная задача как для экспериментов, так и для моделирования. Плавление силицена и тонкой кремниевой пленки затруднительно для расчетов в рамках ТФП, так как требует достаточно больших образцов (тысячи атомов) при довольно высокой температуре. По этой причине целесообразно использовать методы молекулярного моделирования с эффективными потенциалами, которые позволяют рассчитывать системы даже из миллионов атомов. Однако эти эффективные потенциалы могут быть недостаточно точными для воспроизведения поведения реальной системы. Это приводит к большому разбросу данных по термической стабильности силицена, доступных в литературе. Например, плавление силицена, моделируемое с помощью потенциала Терсоффа [14], было описано в работе [15]. Использовались два набора параметров потенциала: исходный [14] и разработанный для плавления кремния, инициируемого образованием вакансий [16]. Температура плавления была оценена как $T_m = 3600$ К в первом случае и $T_m = 1750$ К — во втором. Этот пример наглядно показывает, что температура плавления силицена чрезвычайно чувствительна к используемой модели.

В наших недавних работах [17,18] мы использовали широко признанную модель Стиллинджера–Вебера (СВ) [19] для моделирования термической стабильно-

сти силицена и тонких кремниевых пленок различной толщины. Было обнаружено, что температура термического разрушения кремниевой пленки повышается с увеличением ее толщины. Однако, когда количество слоев превышает 12, температура разрушения достигает значения насыщения, соответствующего температуре плавления объемного кремния: $T = 1725$ K (экспериментальное значение составляет $T_m^{\text{exp}} = 1683$ K [20]).

Как уже обсуждалось выше, оценка термической стабильности силицена, выполненная в рамках эмпирических силовых полей, сильно зависит от используемой модели. В данной работе мы продолжаем исследование плавления силицена и тонких кремниевых пленок, применяя два потенциала, основанных на методах машинного обучения: модели SNAP [21] и GAP [22]. Ожидается, что модели машинного обучения должны лучше воспроизводить взаимодействие между атомами, что должно привести к получению более точных данных.

В нашем недавнем исследовании [23] было приведено сравнение линий плавления моделей SNAP и GAP (линия плавления модели GAP была взята из работы [22]). Обе модели качественно правильно описывают поведение линии плавления алмазной фазы кремния (линия плавления кремния представляет собой прямую с отрицательным наклоном), однако обе линии систематически лежат ниже экспериментальной. Температура плавления кремния при атмосферном давлении, полученная с использованием модели SNAP, составляет $T_m = 1380$ K, что существенно ниже экспериментального значения. Так как эти модели обеспечивают качественно корректное поведение, мы проводим моделирование плавления силицена и тонких пленок кремния и сравниваем результаты с нашими предыдущими расчетами, выполненными с использованием эмпирической модели СВ.

Цель настоящей работы — исследование термической стабильности силицена и тонких пленок кремния с помощью потенциалов машинного обучения SNAP и GAP. Под термической нестабильностью здесь понимается утрата кристаллической структуры при повышении температуры, фиксируемая по скачку потенциальной энергии и исчезновению дальнего порядка. Температура, при которой это происходит, определяется как температура разрушения и служит количественной мерой стабильности.

2. Система и методы

В данной работе не ставится задача оптимизации структуры или построения фазовой диаграммы. Моделирование проводится методом молекулярной динамики путем численного интегрирования уравнений движения Ньютона для системы частиц с заданным потенциалом межчастичного взаимодействия. Фазы идентифицируются по эволюции системы во времени: исходная кристаллическая структура и конечное разупорядоченное

состояние различаются по характеру изменения потенциальной энергии и визуальной картине расположения атомов. Таким образом, мы определяем температуру разрушения кристаллической структуры как кинетический параметр, а не решаем задачу оптимизации по поиску равновесных состояний. Методом молекулярной динамики исследуется коллапс кристаллической структуры кремниевого образца различной толщины для двух потенциалов машинного обучения: SNAP и GAP, которые не являются центральными парными потенциалами. SNAP линейный потенциал, в нем энергия атома определяется как линейная комбинация биспектральных компонент локального окружения, которые полностью описывают угловое распределение соседей [24]. GAP основан на гауссовской регрессии и описывает атомные энергии как нелинейную функцию от дескрипторов SOAP (Smooth Overlap of Atomic Positions), представляющих собой разложение локальной атомной плотности по радиальным и угловым базисным функциям (сферическим гармоникам) [25]. Таким образом, оба потенциала явно учитывают многочастичные угловые корреляции, что критически важно для корректного описания структуры и плавления кремния и его низкоразмерных форм. Оба потенциала обучены на данных ТФП для кремния. Используемые потенциалы SNAP и GAP являются локальными по своей природе: они описывают межатомные взаимодействия в пределах фиксированного радиуса обрезания ($5 \text{ \AA}$) и не включают явно дальнедействующие упругие вклады, что характерно для большинства потенциалов машинного обучения. Постоянная решетки кристаллического кремния составляет $5.431 \text{ \AA}$. Таким образом, радиус обрезания $5 \text{ \AA}$ позволяет учесть взаимодействие в радиусе трех координационных сфер кристаллического кремния. Граничные условия выбраны стандартным для свободно стоящих пленок образом: периодические в плоскости пленки (x, y) и свободные (вакуумный зазор) в перпендикулярном направлении (z). Такой подход широко применяется в молекулярно-динамическом моделировании тонких пленок. Пленка заданной толщины окружена вакуумом. Применяются периодические граничные условия по всем направлениям. Размер системы в направлении z , в котором добавлен вакуум, составляет $543 \text{ \AA}$, что примерно в сто раз превышает постоянную решетки кремния. Такой вакуумный промежуток достаточен для того, чтобы исключить взаимодействие пленки с ее периодическими отображениями. Параметры элементарной ячейки силицена: $a = b = 3.861 \text{ \AA}$, $\alpha = \beta = 90^\circ$, $\gamma = 120^\circ$; таким образом, форма вычислительной коробки является триклинной. Для тонких пленок с алмазной структурой использовалась прямоугольная коробка с одинаковыми размерами по направлениям x и y . Количество частиц в системах с потенциалом SNAP и различным числом слоев кремния приведено в таблице.

Модель GAP была использована только для силицена с 1800 частицами. Причины этого будут описаны ниже.

Число атомов в системах с разным количеством слоев кремния

Система	Число частиц
силицен	3200
4 слоя	2048
8 слоев	4096
12 слоев	6144
16 слоев	8192
20 слоев	10240
24 слоя	12288
28 слоев	14336
32 слоя	18432
36 слоев	20480

Во всех случаях моделирование начинается с идеальной кристаллической структуры с постоянной решетки 5.431 Å, что соответствует значению алмазной фазы кремния при $T = 300$ К. Моделирование проводилось в каноническом ансамбле (постоянное число частиц N , объем V и температура T), что обусловлено следующими соображениями. Во-первых, основная задача работы сравнительный анализ термической стабильности силицена и тонких пленок для двух потенциалов машинного обучения и сопоставление с ранее полученными данными для потенциала СВ, где также использовался ансамбль NVT . Во-вторых, наличие вакуумного промежутка значительной толщины (543 Å) позволяет системе эффективно релаксировать в перпендикулярном направлении за счет свободных поверхностей, так что фиксация объема всей ячейки не эквивалентна жесткому закреплению пленки. В-третьих, для систем с короткодействующими потенциалами качественное поведение при плавлении в NVT согласуется с таковым в NPT , как показано в работе [26]. Таким образом, выбор NVT является методически обоснованным для поставленных задач и не влияет на основные качественные выводы работы. Набор температур зависит от конкретной системы. Цель данной работы — определить температуру, при которой происходит коллапс кристаллической структуры. Расчеты проводились с временным шагом 1 fs; полное время моделирования превышало 20000 ps.

Все расчеты проводились с использованием пакета молекулярной динамики LAMMPS (Largescale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator) [27].

3. Результаты и обсуждение

Для определения температуры разрушения кристаллической структуры использовалась комбинация критериев: (i) резкое изменение потенциальной энергии на вре-

менной зависимости, характерное для фазового перехода первого рода; (ii) визуальный анализ мгновенных конфигураций, позволяющий определить характер перехода. Скачок энергии регистрировался в тех случаях, когда на временной зависимости потенциальной энергии наблюдалось резкое изменение, превышающее по амплитуде типичные тепловые флуктуации в стабильной фазе при той же температуре. Отметим, что в нашей предыдущей работе по данной тематике [18] мы использовали параметры ориентационного порядка связи для детального анализа механизма плавления пленок алмазной структуры. Однако для гофрированной структуры силицена интерпретация параметров Штейнхарда является менее однозначной и требует дополнительной калибровки. Так как основная цель настоящей работы сравнительный анализ двух потенциалов машинного обучения, используемые критерии являются достаточными для получения надежных результатов [15,28].

Модель SNAP. В первую очередь рассмотрим случай силицена. На рис. 1 представлены снимки системы при двух температурах: $T = 475$ и 500 К. Видно, что при $T = 475$ К слой силицена сохраняется, хотя из-за теплового движения возникает его значительная гофрировка. При $T = 500$ К слой разрушается. В то же время в системе по-прежнему наблюдаются некоторые кристаллические области. Можно заключить, что данная точка соответствует двухфазной области кристалл–газ.

На рис. 2 показана временная зависимость потенциальной энергии, приходящейся на одну частицу, при тех же самых температурах $T = 475$ К и $T = 500$ К. Хотя эти температуры очень близки, видно, что поведение потенциальной энергии различается. В первом случае потенциальная энергия плавно выходит на некоторое предельное значение, тогда как во втором наблюдается ее резкое падение. Это падение энергии, по-видимому, связано с фазовым переходом в системе. Таким образом, пленка силицена остается устойчивой при $T < 500$ К.

Рассмотрим образец, состоящий из четырех слоев кремния. На рис. 3 (панель слева) показано несколько мгновенных снимков этой системы. При моделировании при конечной температуре образец перекристаллизуется в структуры, напоминающие графеновые слои. Данные слои устойчивы вплоть до $T = 1050$ К. При $T = 1075$ К в образце наблюдаются области, похожие на поры (некие подобию пустот), что означает наличие сосуществования твердой и газовой фаз. Наконец, при $T = 1100$ К система схлопывается в шар, что соответствует двухфазной области жидкость–газ. Из этих снимков можно сделать вывод, что в твердом состоянии данная система стабильна вплоть до $T = 1050$ К.

Поведение системы из восьми слоев является аналогичным. При низкой температуре структура системы сохраняется. При $T = 1050$ К структура сначала плавится, но затем частично кристаллизуется в слои, напоминающие графеновые. Когда температура достигает 1200 К, структура полностью разрушается. Это видно

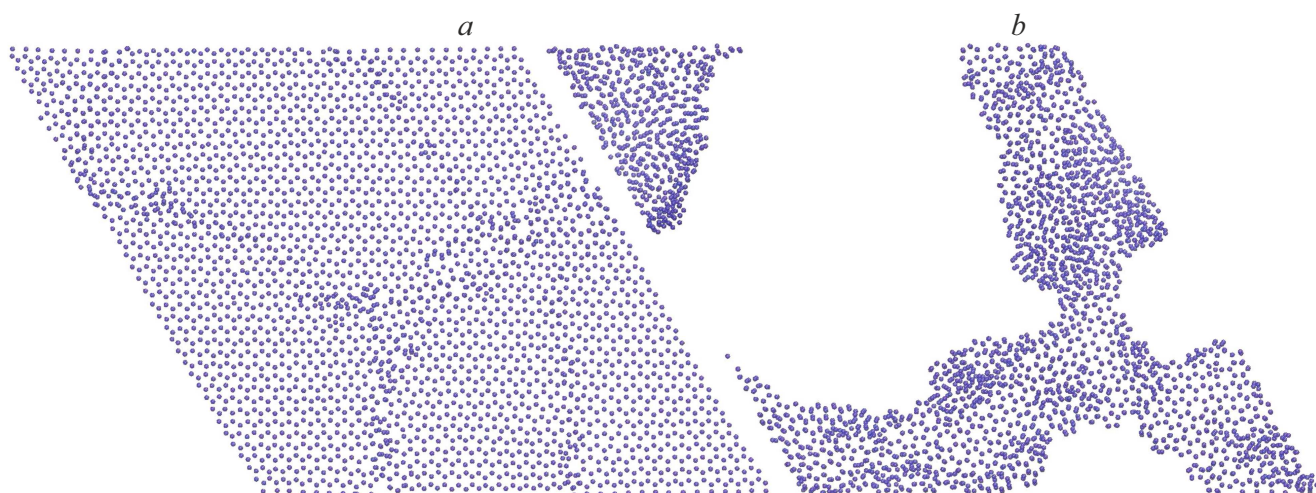


Рис. 1. Снимки силицена при $T = 475$ К (a) и $T = 500$ К (b).

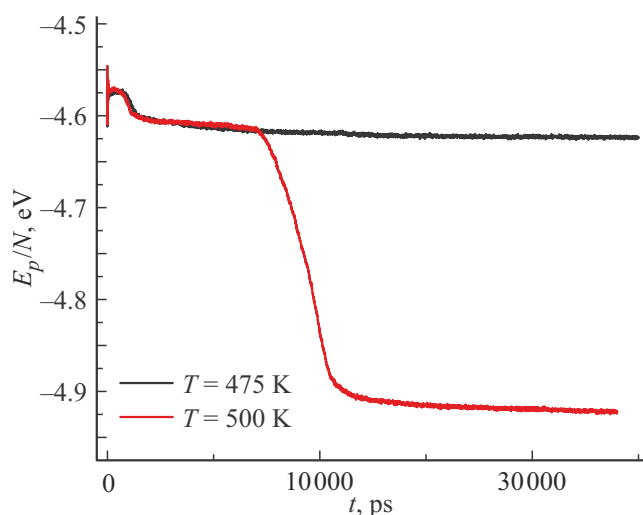


Рис. 2. Временная зависимость потенциальной энергии на частицу силицена при $T = 475$ К и $T = 500$ К.

на снимках системы на рис. 3 панель справа). В случае $T = 1200$ К все частицы системы коллапсируют в цилиндр. Такая структура характерна для двухфазной области жидкость–газ в конечных системах с периодическими граничными условиями [28].

Эволюция энергии системы из четырех слоев приведена на рис. 4 (верхняя панель). При $T = 1000$ К энергия плавно выходит на постоянное значение (стабильная кристаллическая фаза), а при более высоких температурах на временной зависимости наблюдаются резкие падения энергии (ступеньки или перегибы), что характерно для фазовых переходов. На зависимости энергии от времени для системы из восьми слоев (рис. 4 (нижняя панель)) при повышении температуры снова регистрируются падения потенциальной энергии, соответствующие фазовым переходам.

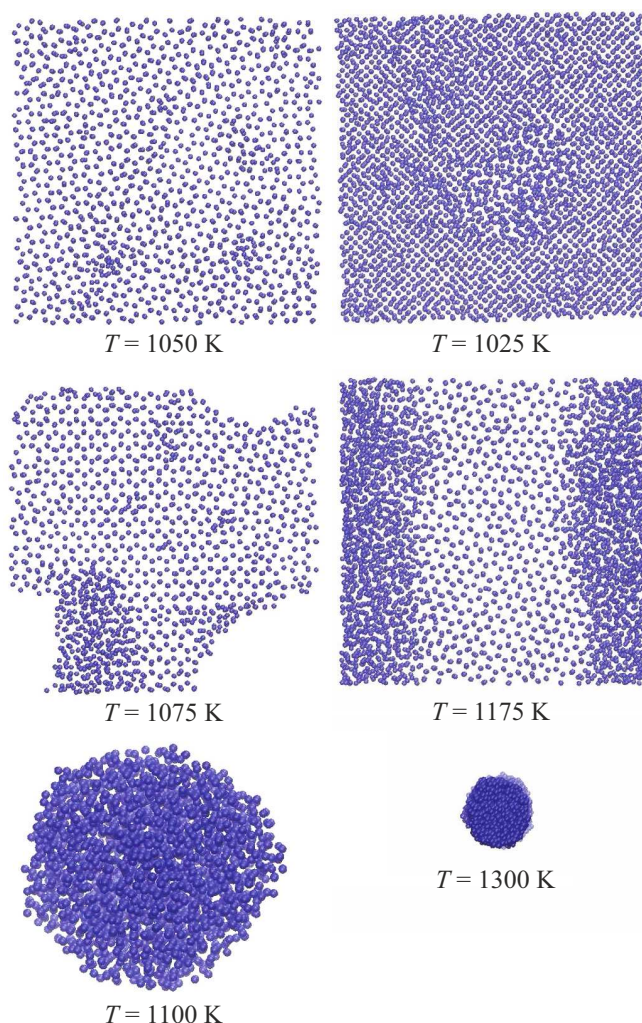


Рис. 3. Снимки системы при трех разных температурах: панель слева — система из четырех слоев, панель справа — из восьми слоев.

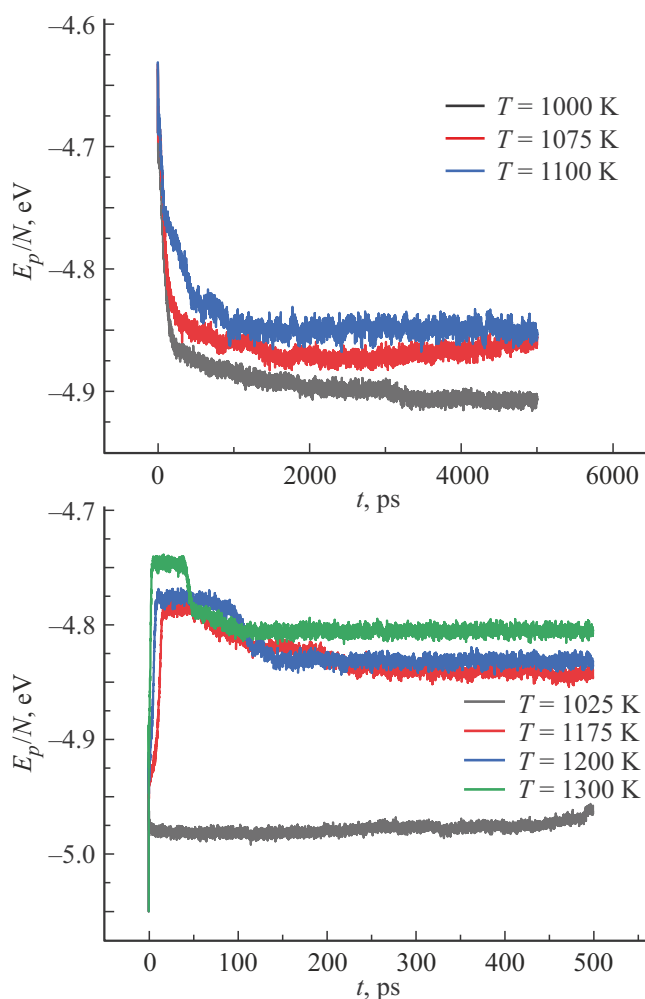


Рис. 4. Временная зависимость потенциальной энергии на частицу системы: из четырех слоев при трех температурах (верхняя панель) и из восьми слоев при четырех температурах (нижняя панель).

Системы с 16 и более слоями кремния не проявляют сосуществования твердой фазы с газом или жидкости с газом. В этих системах имеет место поверхностное плавление кристалла. С повышением температуры поверхностное плавление проникает все глубже в кристалл. В конечном итоге, когда ширина кристаллической области становится слишком малой, кристалл быстро плавится. При этом система остается конденсированной, то есть после коллапса кристаллической структуры все частицы системы находятся в жидкой фазе.

В качестве иллюстрации такого поведения приведем снимки системы с 36 слоями кремния. На рис. 5 показаны мгновенные конфигурации системы при трех различных температурах. Видно, что поверхности кристалла становятся разупорядоченными. Также видно, что глубина неупорядоченного поверхностного слоя при $T = 1350$ K больше, чем при $T = 1300$ K. Однако этот эффект выражен довольно слабо. В то же время при $T = 1400$ K плавление начинается на поверхности

кристалла и распространяется до тех пор, пока фронты плавления от обеих поверхностей не смыкаются.

Временная зависимость потенциальной энергии, приходящейся на одну частицу, приведена на рис. 6. В данном случае резкого изменения потенциальной энергии не наблюдается. При $T = 1350$ K энергия монотонно возрастает со временем. При $T = 1400$ K она увеличивается вплоть до $t \sim 80$ ps, а затем выходит на плато.

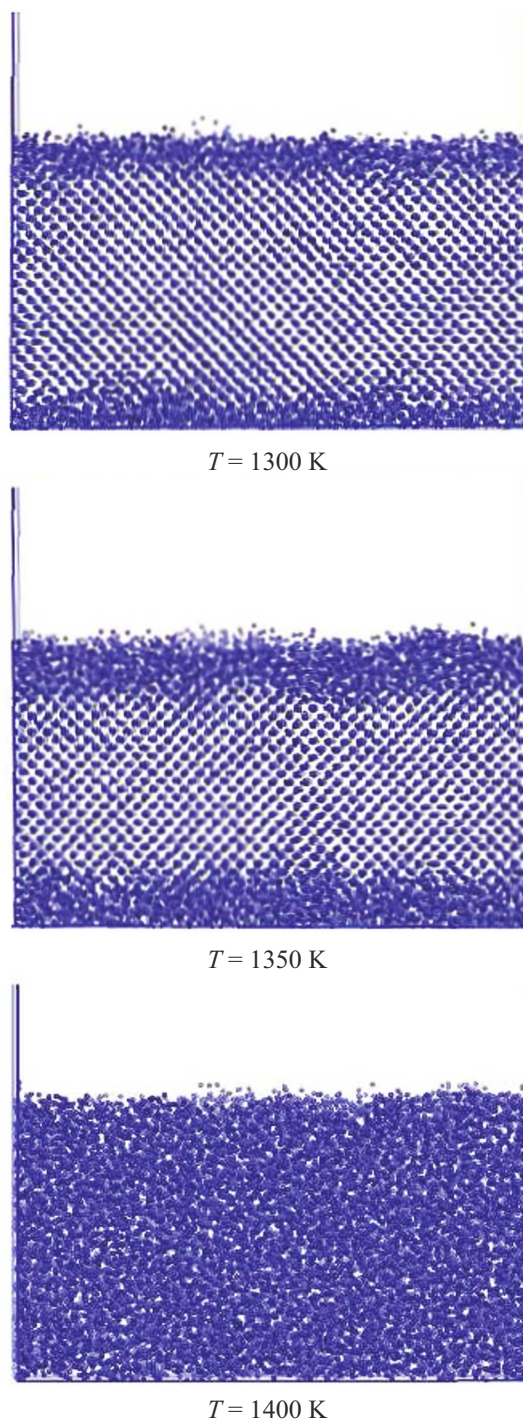


Рис. 5. Снимки системы из 36 слоев при трех разных температурах.

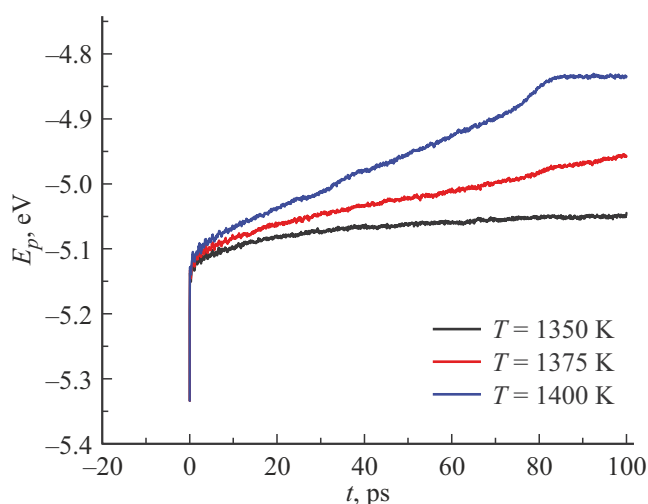


Рис. 6. Временная зависимость потенциальной энергии на частицу системы из 36 слоев при трех температурах.

Это соответствует плавному фазовому переходу: поверхностное плавление распространяется слой за слоем, что приводит к быстрым, но не скачкообразным изменениям энергии.

Рост потенциальной энергии на рис. 6, в отличие от падения, наблюдаемого на рис. 4, объясняется тем, что толстая пленка остается в конденсированном (жидком) состоянии после плавления, тогда как тонкие пленки распадаются на разреженный газ с пренебрежимо слабыми межатомными взаимодействиями.

Температуры разрушения кристаллической структуры в зависимости от количества слоев показаны на рис. 7. Видно, что термическая стабильность пленок возрастает с увеличением числа слоев. При толщине пленки в 28 слоев она достигает предела, характерного для объемного кристалла. Дальнейшее повышение температуры коллапса, скорее всего, связано с эффектами перегрева при моделировании.

Модель GAP. Моделирование силицена также проводилось с применением потенциала GAP. На рис. 8 представлен мгновенный снимок системы после расчета при $T = 2000$ К. Видно, что после коллапса кристаллической структуры силицена атомы образуют множество малых кластеров, переходя в состояние „кластерного газа“, которое выглядит нефизичным. Данное состояние не является расплавом в обычном смысле, так как атомы не образуют компактную жидкую фазу с ближним порядком, а разлетаются на изолированные кластеры, движущиеся в вакууме. Оно также не является осаждением на подложку, так как моделирование проводится для свободно стоящей пленки без внешнего субстрата. Данное поведение указывает на то, что потенциал не способен корректно описать эволюцию системы в область низких плотностей. Отметим, что при 1800 атомах система недостаточно велика для моделирования объемного поведения, однако даже для этого размера потенци-

ал GAP демонстрирует нефизичную кластеризацию, что делает бессмысленным расширение системы до больших размеров.

Важно подчеркнуть, что наблюдаемая проблема не является принципиальным ограничением методологии GAP как таковой, а обусловлена недостаточным охватом конфигурационного пространства в использованной реа-

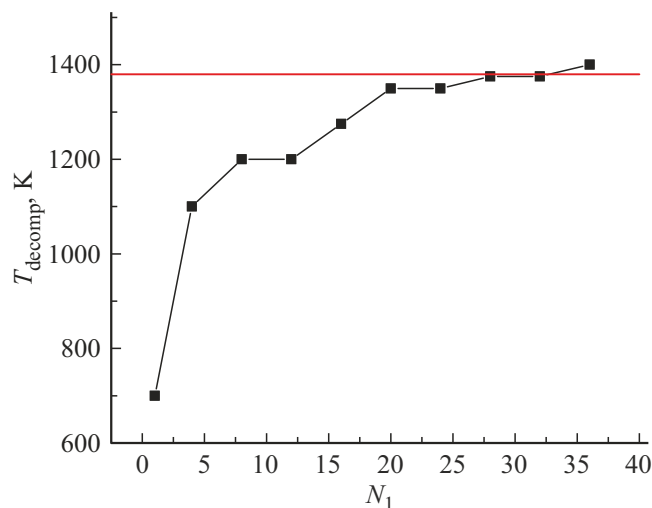


Рис. 7. Зависимость температуры разрушения кристаллической структуры от количества слоев кремния N_l . Силицен соответствует одному слою. Горизонтальная линия – температура плавления объемного кристалла, рассчитанная в рамках модели SNAP [23].

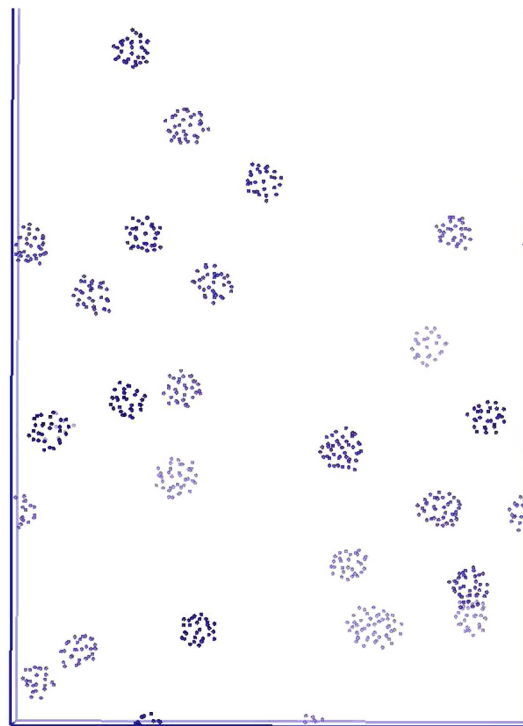


Рис. 8. Снимок системы после коллапса кристаллической структуры силицена с применением потенциала GAP при $T = 2000$ К.

лизации. Исходный тренировочный набор, представленный в работе [22], был ориентирован преимущественно на конденсированные фазы кремния кристаллические, жидкие, аморфные структуры, а также поверхности и дефекты. Конфигурации с малой плотностью, такие как отдельные слои силицена, его фрагменты, цепочки или изолированные атомы, в тренировочный набор не включались. Как следствие, при моделировании процессов, сопровождающихся переходом в газовую фазу, потенциал оказывается в области экстраполяции, где его предсказания становятся ненадежными.

В литературе имеются примеры успешного применения GAP для описания разреженных состояний при условии целенаправленного расширения тренировочной выборки. В частности, в работе [29] разработанный потенциал GAP для системы Si–O с использованием активного обучения, включает в тренировочный набор конфигурации малых кластеров, поверхностей, аэрогелей и наноструктурированных форм SiO. Это позволило корректно описывать как конденсированные, так и разреженные состояния. Данный пример подтверждает, что методология GAP в принципе способна описывать газовую фазу при условии включения соответствующих конфигураций в тренировочный набор.

Таким образом, вывод о непригодности модели GAP для моделирования силицена следует относить к использованной реализации потенциала, а не ко всей методологии GAP. Дообучение на дополнительных данных ТФП, включающих конфигурации силицена и его фрагментов, вероятно, позволило бы устранить наблюдаемый недостаток. Однако такое исследование выходит за рамки настоящей работы, и поэтому мы ограничились анализом модели SNAP, которая демонстрирует физически разумное поведение во всем исследованном диапазоне температур.

4. Выводы

В настоящей работе проведено моделирование термической стабильности силицена и тонких пленок кремния с помощью двух потенциалов, основанных на методах машинного обучения: SNAP и GAP. Установлено, что, хотя модель GAP демонстрирует лучшие результаты для конденсированных фаз кремния, она оказывается несостоятельной при низких плотностях и высоких температурах. В то же время результаты модели SNAP находятся в хорошем согласии с недавно полученными нами данными для эмпирической модели СВ: очень тонкие пленки разрушаются при более низких температурах. Данное снижение стабильности можно приписать усилению роли тепловых флуктуаций в низкоразмерных системах, которые легче разрушают упорядоченную кристаллическую решетку. Температура разрушения увеличивается с ростом толщины пленки. При некотором значении толщины температура разрушения достигает температуры плавления объемного кремния. В случае

модели СВ это происходит для пленки, содержащей 12 слоев кремния, тогда как для модели SNAP требуется 28 слоев. На основании результатов этих двух моделей можно заключить, что механизмы термического коллапса тонких пленок кремния корректно воспроизводятся обеими моделями — СВ и SNAP.

Анализ эволюции потенциальной энергии выявляет два различных режима: для тонких пленок (≤ 8 слоев) коллапс дает резкий скачок (падение) потенциальной энергии, соответствующий фазовому переходу первого рода в газоподобное состояние, тогда как для более толстых пленок (≥ 16 слоев) поверхностное плавление сохраняет конденсированное жидкое состояние, что приводит к монотонному росту потенциальной энергии без резкого скачка.

Полученные результаты могут быть использованы для направленного синтеза термостабильных покрытий. Так как четырехслойная система при нагреве рекристаллизуется с образованием графеноподобных слоев, это открывает возможность получения новых углеродоподобных кремниевых структур посредством термической обработки. Такие структуры способны сочетать термостойкость с уникальными электронными свойствами.

Знание температур разрушения, в частности того факта, что 500 К является пределом для однослойного силицена, критически важно при проектировании аккумуляторов и систем хранения водорода, которые могут нагреваться в процессе эксплуатации. Кроме того, установлено, что для инженерного моделирования термических процессов применим потенциал SNAP, тогда как использование потенциала GAP невозможно из-за ошибок, возникающих в газовой фазе.

В дальнейшем требуется разработка нового потенциала машинного обучения, адекватно описывающего как газовую, так и конденсированную фазы кремния. Перспективными направлениями являются учет влияния подложки, краевых эффектов, легирования и давления, прямое сравнение с экспериментом и внедрение количественных структурных параметров для автоматического распознавания механизмов разрушения без привлечения визуального анализа.

Благодарности

Работа выполнена с использованием оборудования Межведомственного суперкомпьютерного центра и центра коллективного пользования „Комплекс моделирования и обработки данных исследовательских установок мега-класса“, входящих в состав НИЦ „Курчатовский институт“.

Финансирование работы

Данная работа финансировалась за счет средств бюджета Института физики высоких давлений РАН. Никаких дополнительных грантов на проведение или руководство данным конкретным исследованием получено не было.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] K. Takeda, K. Shiraishi. Phys. Rev. B **50**, 14916 (1994).
- [2] P. Vogt, P. De Padova, C. Quaresima, J. Avila, E. Frantzeskakis, M.C. Asensio, A. Resta, B. Ealet, G. Le Lay. Phys. Rev. Lett. **108**, 155501 (2012).
- [3] A. Kara, H. Enriquez, A.P. Seitsonen, L.C. Lew Yan Voon, S. Vizzini, B. Aufray, H. Oughaddou. Surf. Sci. Rep. **67**, 1 (2012).
- [4] D. Jose, A. Datta. Phys. Chem. Chem. Phys. **13**, 7304 (2011).
- [5] H. Oughaddou, H. Enriquez, M.R. Tchalala, H. Yildirim, A.J. Mayne, A. Bendounan, G. Dujardin, M.A. Ali, A. Kara. Surf. Sci. Rep. **90**, 46 (2015).
- [6] J. Zhao, H. Liu, Z. Yu, R. Quhe, S. Zhou, Y. Wang, C.C. Liu, H. Zhong, N. Han, J. Lu, Y. Yao, K. Wu. Prog. Mater. Sci. **83**, 24 (2016).
- [7] M.E. Davila, G. Le Lay. Mater. Today Adv. **16**, 100312 (2022).
- [8] G.G. Guzman-Verri, L.C. Lew Yan Voon. Phys. Rev. B **76**, 075131 (2007).
- [9] S. Cahangirov, M. Topsakal, E. Akturk, H. Sahin, S. Ciraci. Phys. Rev. Lett. **102**, 236804 (2009).
- [10] Yi. Ding, J. Ni. Appl. Phys. Lett. **95**, 083115 (2009).
- [11] H. Zhang, R. Wang. Phys. B: Condens. Matter **406**, 4080 (2011).
- [12] N.T.T. Tran, G. Gumbs, D.K. Nguyen, M.-F. Lin. ACS Omega **5**, 23, 13760 (2020).
- [13] V.V.O.N.Th. Hung, D.T.K. Huyen, L.Th. Trinh, L.V. Phuong Thuan. Mater. Today **49**, 2414 (2022).
- [14] J. Tersoff. Phys. Rev. B **39**, 5566 (1989).
- [15] V. Bocchetti, H.T. Diep, H. Enriquez, H. Oughaddou, A. Kara. J. Phys.: Conf. Ser. **491**, 012008 (2014).
- [16] P. Agrawal, L. Raff, R. Komanduri. Phys. Rev. B **72**, 125206 (2005).
- [17] Yu.D. Fomin, E.N. Tsiok, V.N. Ryzhov. Phys. Complex Syst. **5**, 172 (2024).
- [18] Yu.D. Fomin, E.N. Tsiok, V.N. Ryzhov. Phys. Part. Nucl. Lett. **22**, 509 (2025).
- [19] F.H. Stillinger, Th.A. Weber. Phys. Rev. B **31**, 5262 (1985).
- [20] W.M. Haynes. CRC handbook of chemistry and physics. CRC Press, Boca Raton, FL (2014). P. 4.
- [21] Yu. Zuo, Ch. Chen, X. Li, Zh. Deng, Y. Chen, J. Behler, G. Csanyi, A.V. Shapeev, A.P. Thompson, M.A. Wood, S.P. Ong. J. Phys. Chem. A. **124**, 731 (2020).
- [22] A.P. Bartk, J. Kermode, N. Bernstein, G. Csanyi. Phys. Rev. X **8**, 041048 (2018).
- [23] Yu.D. Fomin. Phys. Chem. Liq. **64**, 2, 370 (2026).
- [24] A.P. Thompson, L.P. Swiler, C.R. Trott, S.M. Foiles, G.J. Tucker. J. Comp. Phys. **285**, 316 (2015).
- [25] A.P. Bartok, R. Kondor, G. Csanyi. Phys. Rev. B **87**, 184115 (2013).
- [26] S.I. Lee, S.J. Lee. J. Korean Phys. Soci. **65**, 7, 1040 (2014).
- [27] S. Plimpton. J. Comp. Phys. **117**, 1 (1995).
- [28] M.C. Abramo, C. Caccamo, D. Costa, P.V. Giaquinta, G. Malescio, G. Munao, S. Prestipino. J. Chem. Phys. **142**, 214502 (2015).
- [29] L.C. Erhard, J. Rohrer, K. Albe, V.L. Deringer. Nat. Commun. **15**, 1927 (2024).

Редактор А.Н. Смирнов