

To exit full screen, press **Esc**

Crystallography and Crystal Chemistry  
IX International School-Conference of  
Young Scientists 2024

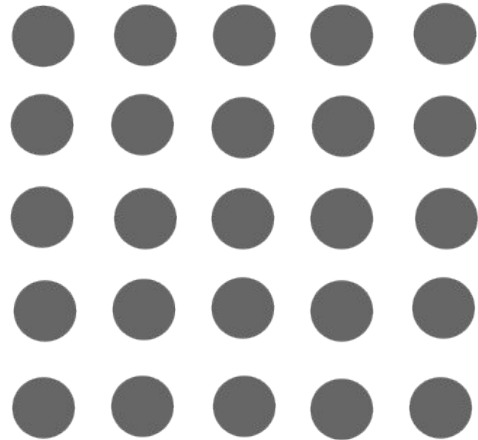
# *Тutorial: Моделирование дефектов кристаллических структур*

**Skoltech**  
Energy

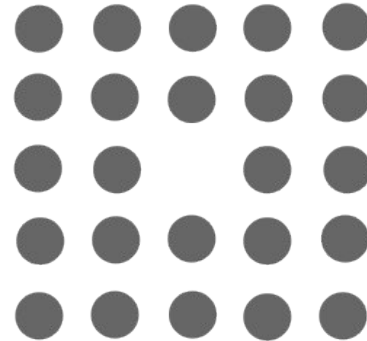
Center for  
Energy Science  
and Technology

Чернышов Даниил, Арсений Буров

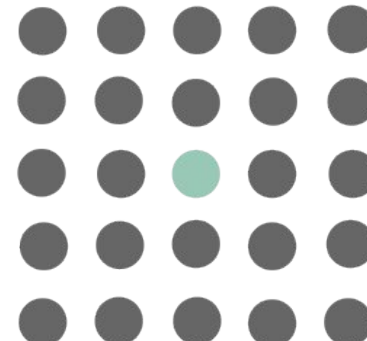
# Точечные дефекты



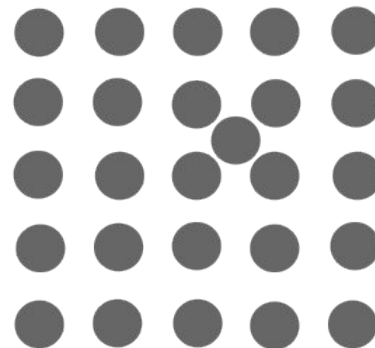
Исходная структура



Вакансия



Замещение



Межузельники

# На какие свойства влияют точечные дефекты и как?

- Механические свойства:

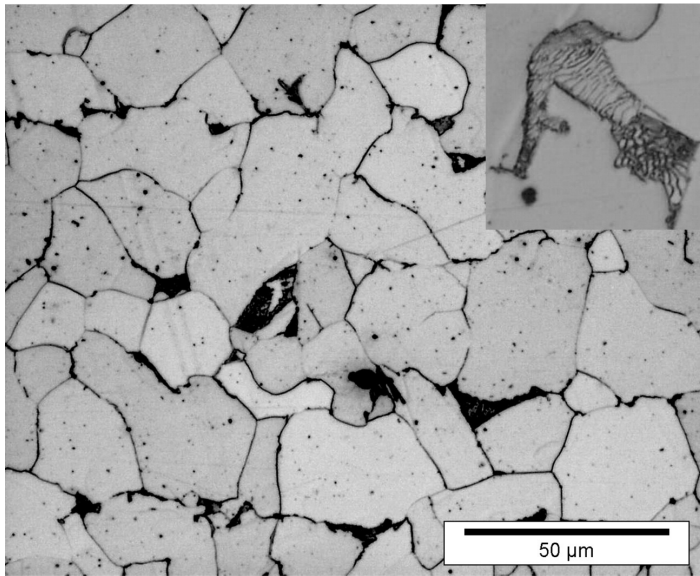
-Легирование сталей (C, V, Ni ...)

- Оптические свойства:

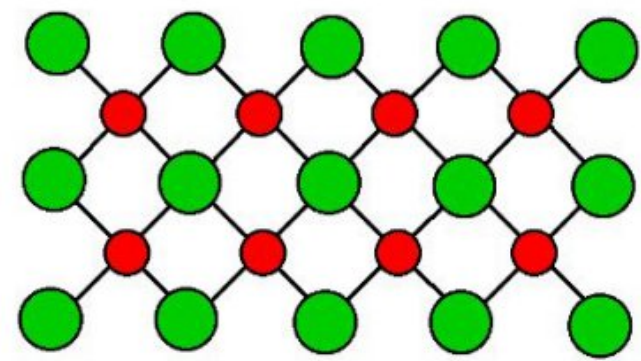
– Изменение цвета при допировании  $\text{Al}_2\text{O}_3$  (Сапфиры)

Допанты Fe, Ti  
(голубой кристалл)

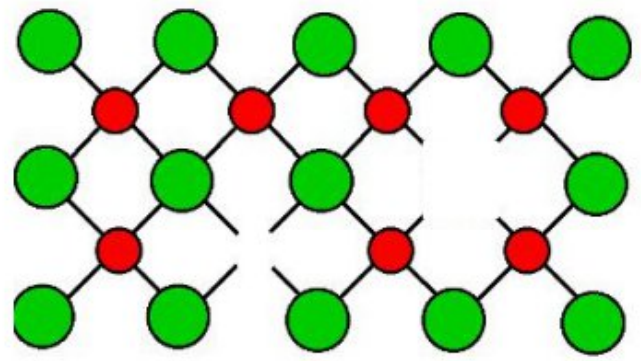
Допанты Cr (красный кристалл)



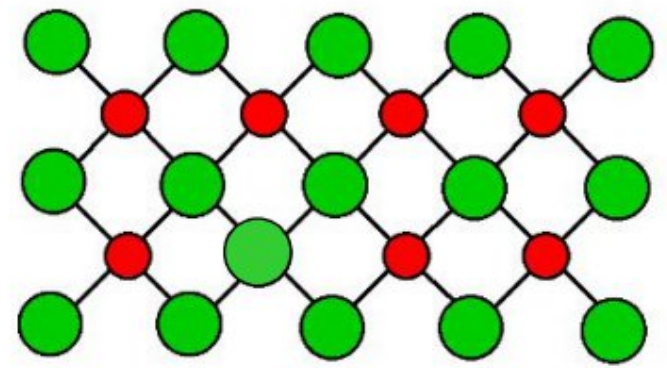
# Дефектные комплексы



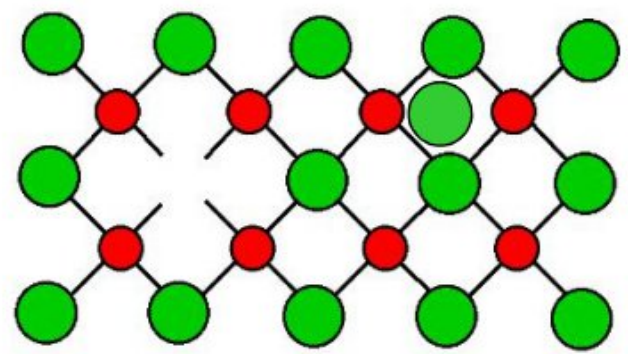
Исходная структура



Дефект по Шоттки

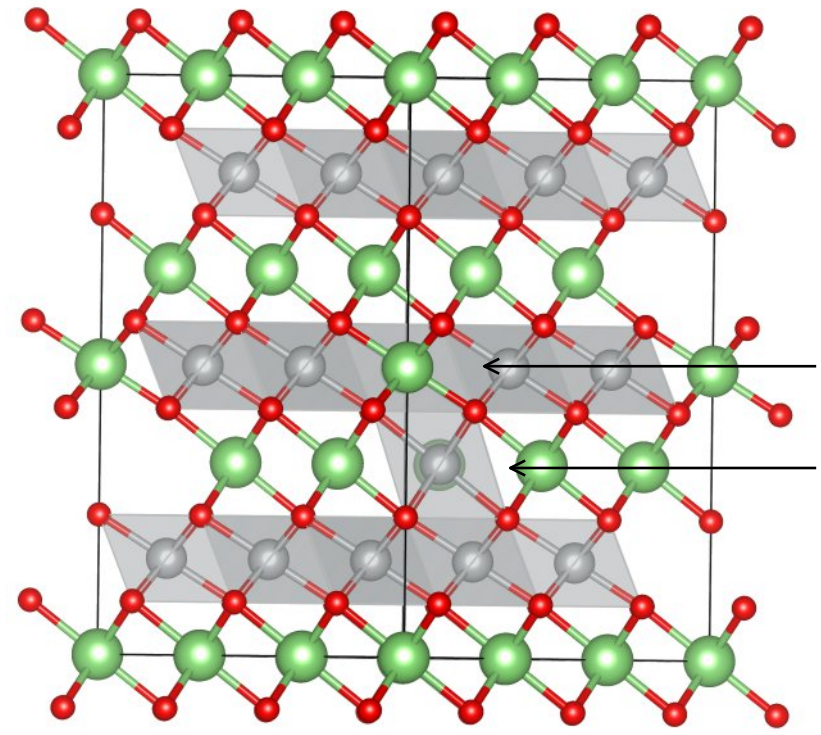
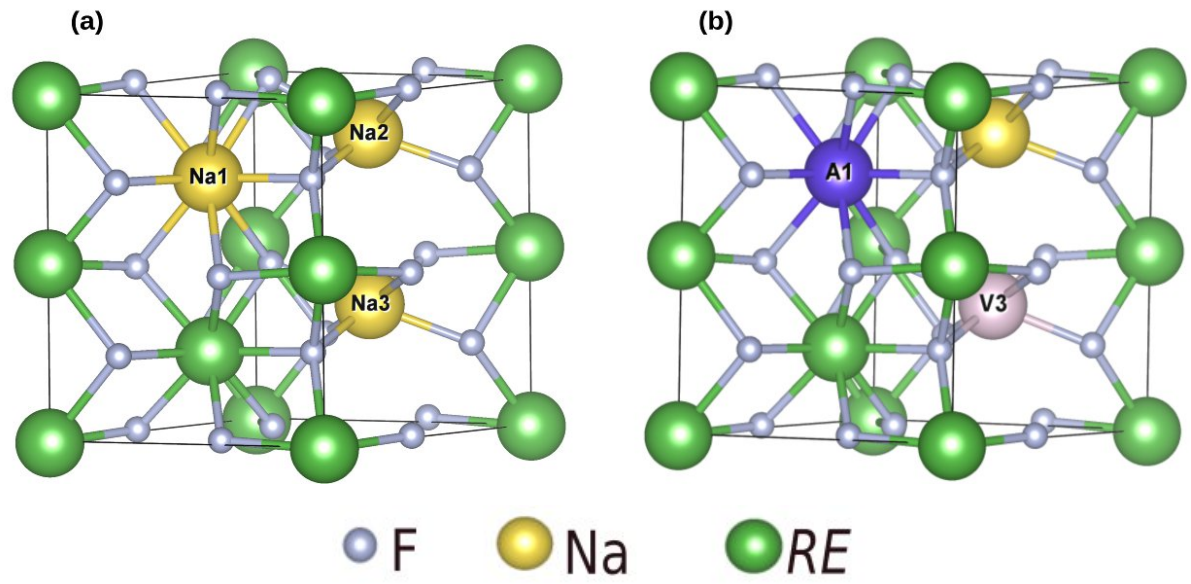


Антисайт



Дефект по Френкелю

# Дефектные комплексы в материалах катодных материалов и твердых электролитах



# Расчет энергии образования дефекта

- Общая формула для вычисления энергии точечных дефектов

$$E_{formation} = E_{defect\ sc} + \sum_i \mu_i - E_{pristine\ sc}$$

$E_{defect\ sc}$  – Энергия суперячейки с дефектом

$E_{pristine\ sc}$  – Энергия суперячейки исходной структуры

$\mu_i$  – Химические потенциалы добавленных или удаленных элементов

- Примеры использования

- Для вычисления энергии формирования вакансии в простой структуре:

$$E_{formation} = E_{vac\ sc}(N - 1) - \frac{N - 1}{N} E_{sc}(N)$$

- Для вычисления энергии антисайта:

$$E_{formation} = E_{antisite\ sc} - E_{sc}$$

# Расчет равновесной концентрации дефектов

Вклад образования вакансий  
свободную энергию

$$\Delta G = nE_0 - TS = nE_{formation} - kT \ln \Omega$$

Число микросостояний

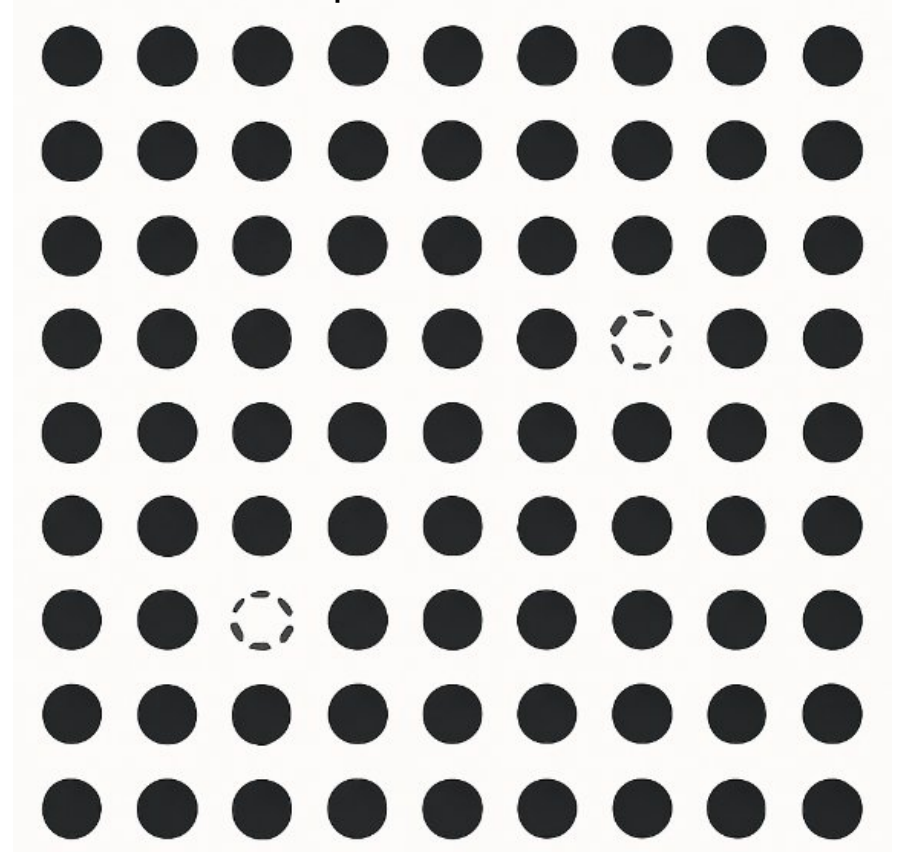
$$\Omega = \frac{N!}{n!(N-n)!}$$

$$\frac{\partial \Delta G}{\partial n} = 0 \quad E_0 + kT \ln \frac{n}{N} = 0$$

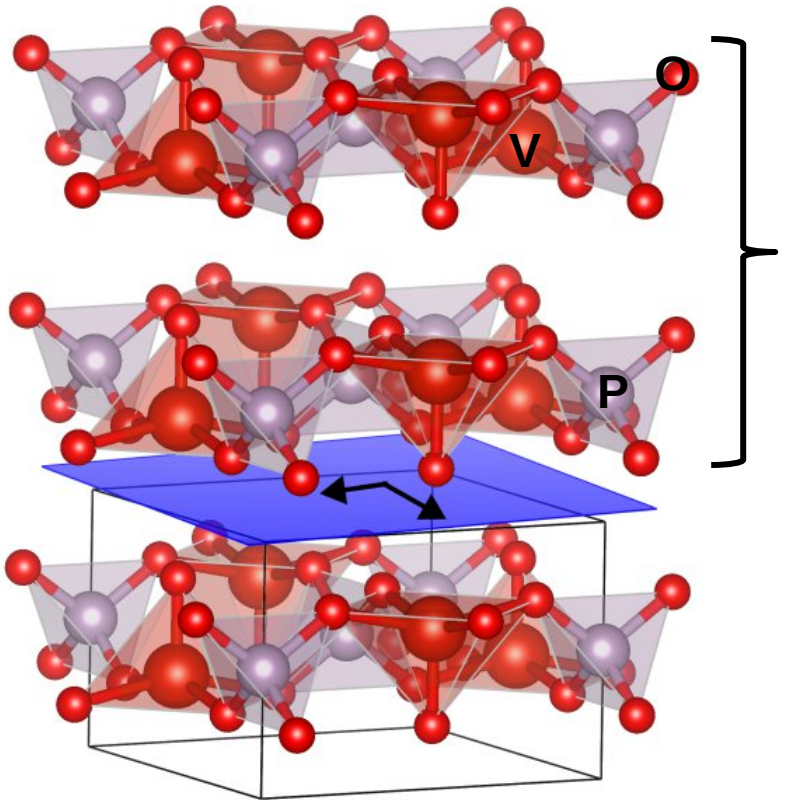
Равновесная концентрация  
вакансий

$$C = \exp\left(-\frac{E_0}{kT}\right)$$

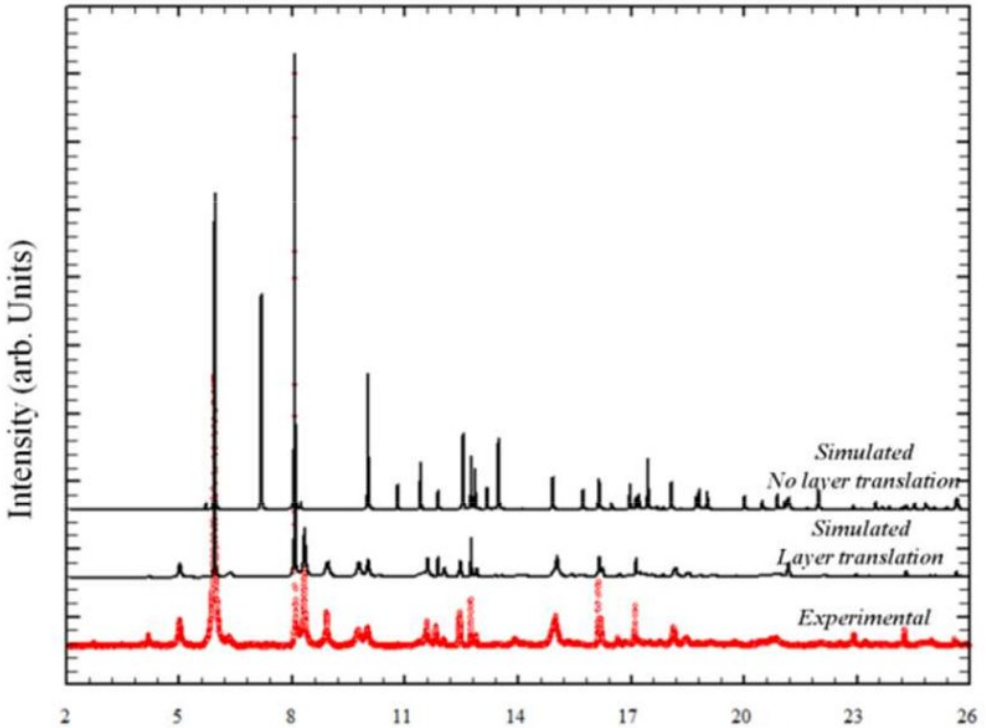
N - позиций, n - вакансий



# Дефекты упаковки в слоистых структурах

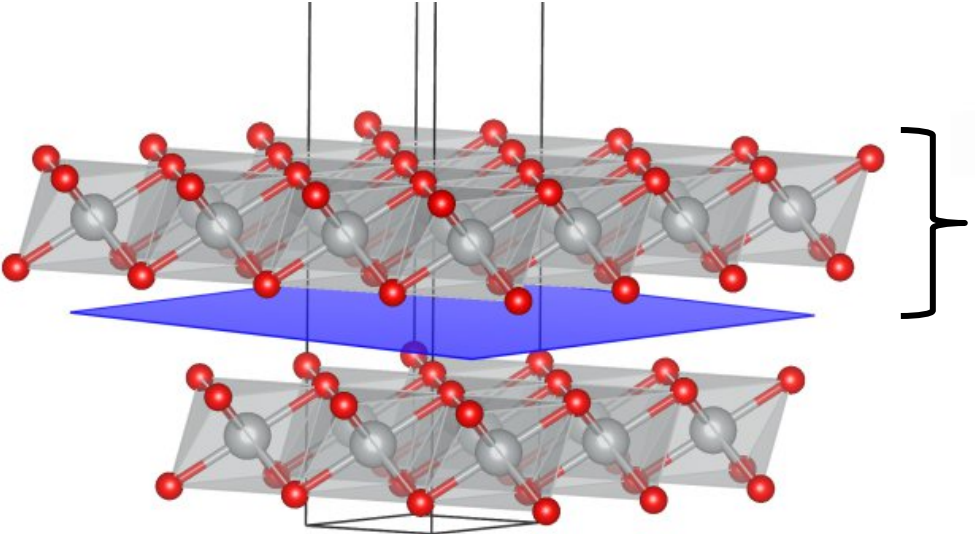


Структура  $\alpha_2\text{-VOPO}_4$

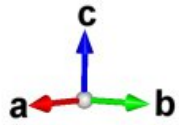


XRD экспериментальной и моделируемой структуры  $\alpha_2\text{-VOPO}_4$

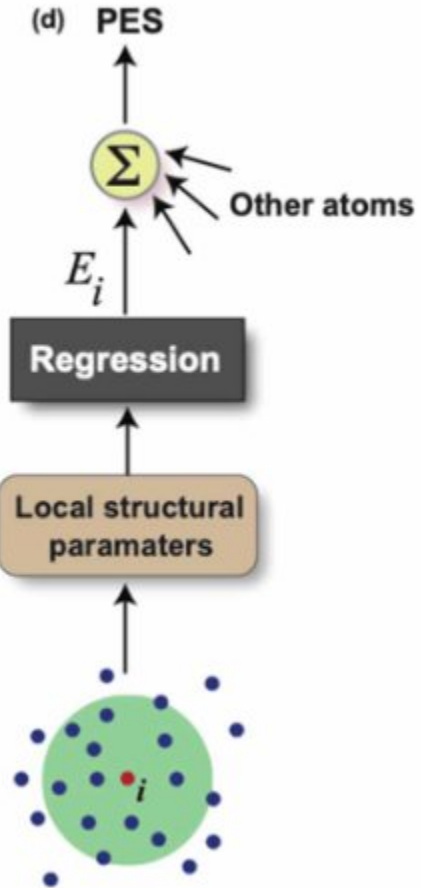
# Дефекты упаковки в слоистых $\text{LiNiO}_2$



Сдвигаемый слой



Дэинтерколированная структура  $\text{LiNiO}_2$



Для построения PES используем UMLIP

**Thankx!**