

## 引入间隙的原因：

W-Re合金中Re析出的机制，自间隙原子（SIA）和Re溶质之间有特殊关联，造成非常高的溶质运输效率

### 1. Energy Model

$$\mathcal{H} = \sum_i \sum_{\alpha, \beta} n_{\alpha-\beta}^{(i)} \epsilon_{\alpha-\beta}^{(i)}$$

其中i代表最近邻相互作用的类型， $\alpha$ 和 $\beta$ 指一对晶格位置， $n_{\alpha-\beta}$ 表示每个 $\alpha$ - $\beta$ 对的出现次数(键数)， $\epsilon_{\alpha-\beta}$ 是键能

### 2. ABVI systems

间隙迁移模型，只考虑W-W dumbbell和W-Re dumbbell，跃迁概率计算如下

$$r_{ij} = v \exp \left( -\frac{\Delta E_{ij}}{k_B T} \right)$$
$$\Delta E_{ij} = \begin{cases} E_m + \Delta \mathcal{H}_{ij}, & \text{if } \Delta \mathcal{H}_{ij} > 0 \\ E_m, & \text{if } \Delta \mathcal{H}_{ij} < 0 \end{cases}$$

### 3.重组

当自间隙原子SIA遇到溶质原子则转变成W-Re dumbbell, 即AA+B转变为AB+A,

### 4.间隙参数

间隙包括 $\epsilon_{AA-A}$ ,  $\epsilon_{AB-A}$ ,  $\epsilon_{AA-B}$ ,  $\epsilon_{AB-B}$ ,  $\epsilon_{AA-AA}$ ,  $\epsilon_{AA-AB}$ ,  $\epsilon_{AB-AB}$

其中 $\epsilon_{AA-A}$ ,  $\epsilon_{AB-A}$ 能量计算

$$E_f^{AA} = -4\epsilon_{A-A}^{(1)} - 3\epsilon_{A-A}^{(2)} + 8\epsilon_{AA-A}^{(1)} + 6\epsilon_{AA-A}^{(2)}$$

$$E_f^{AB} = -4\epsilon_{A-A}^{(1)} - 3\epsilon_{A-A}^{(2)} + 8\epsilon_{AB-A}^{(1)} + 6\epsilon_{AB-A}^{(2)}$$

其他能量计算为

$$E_{b,1nn}^{AA-B} = \epsilon_{AA-B}^{(1)} + \epsilon_{A-A}^{(1)} - \epsilon_{AA-A}^{(1)} - \epsilon_{A-B}^{(1)}$$

$$E_{b,1nn}^{AB-B} = \epsilon_{AB-B}^{(1)} + \epsilon_{A-A}^{(1)} - \epsilon_{AB-A}^{(1)} - \epsilon_{A-B}^{(1)}$$

$$E_{b,1nn}^{AA-AA} = \epsilon_{AA-AA}^{(1)} + \epsilon_{A-A}^{(1)} - 2\epsilon_{AA-A}^{(1)}$$

$$E_{b,1nn}^{AA-AB} = \epsilon_{AA-AB}^{(1)} + \epsilon_{A-A}^{(1)} - \epsilon_{AA-A}^{(1)} - \epsilon_{AB-A}^{(1)}$$

$$E_{b,1nn}^{AB-AB} = \epsilon_{AB-AB}^{(1)} + \epsilon_{A-A}^{(1)} - 2\epsilon_{AB-A}^{(1)}$$

1. 利用第一性原理方法研究空位计算量巨大，模拟尺度有限，在实际研究中，人们更多使用经验势函数方法，传统经验势函数在精确描述原子间相互作用方面的困难导致其对空位性能研究存在一定缺陷，无法保证计算的精确性以及准确性。（三种典型结构金属的空位形成与迁移机制，空位的第一性原理及经验势函数的对比研究）（DFT>机器势函数>传统经验势函数）
2. tensorkmc与openkmc相比 使用了机器学习神经网络生成了势函数，openkmc则使用的传统经验势，机器学习势函数与传统经验势函数相比，其准确度更高，但其计算开销较大，所以需要进行各种优化。且tensorkmc与openkmc相比可模拟的空间规模可以更大，但时间不是。
3. 将机器学习跟kmc结合的优点：NNPs神经网络势应用在akmc上可以使转移到更大的规模上，且ML势更容易设计与优化