

EFFECT OF TEMPERATURE ON THE STRUCTURE AND DYNAMICS OF CdSe MATERIALS: STUDIED BY MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION**Tran Thanh Dung^{1*}, Mai Van Dung¹, Nguyen Van Yen², Pham Huu Kien³, Giap Thi Thuy Trang³**¹Thu Dau Mot University, ²VNU University of Engineering and Technology, ³TNU - University of Education

ARTICLE INFO		ABSTRACT
Received:	09/01/2024	In this paper, we investigated the effect of temperature on the microstructure and dynamics of the CdSe system by molecular dynamics simulation with the Stillinger – Weber interaction potential at a pressure of 0 GPa. CdSe system consists of 9955 atoms (4631 Cd and 5324 Se) heated from 300K to 4000K under a speed of 10^{12} K/s with periodic boundary conditions. The microstructure of the CdSe system is analyzed through the pair radial distribution function, coordination number (CN) distribution, angle distribution and distance distribution at different temperatures. Calculation results show that the melting temperature of the CdSe model is 2200K. The model has a change from the wurtzite structure (CN $\approx$ 4) to the rocksalt structure (CN $\approx$ 6) and these results are consistent with results of the published work. The mobility of Cd and Se atoms is also studied through the mean square displacement and diffusion coefficient of Cd and Se atoms.
Revised:	23/02/2024	
Published:	23/02/2024	
KEYWORDS		
Molecular dynamic simulation		
Structural properties		
Dynamic		
Melting temperature		
II-VI semiconductor		

ẢNH HƯỞNG CỦA NHIỆT ĐỘ ĐẾN CẤU TRÚC VÀ ĐỘNG HỌC VẬT LIỆU CdSe: NGHIÊN CỨU BẰNG MÔ PHỎNG ĐỘNG LỰC HỌC PHÂN TỬ**Trần Thanh Dũng^{1*}, Mai Văn Dũng¹, Nguyễn Văn Yên², Phạm Hữu Kiên³, Giáp Thị Thuỳ Trang³**¹Trường Đại học Thủ Dầu Một, ²Trường Đại học Công nghệ – ĐH Quốc gia Hà Nội³Trường Đại học Sư phạm – ĐH Thái Nguyên

THÔNG TIN BÀI BÁO	TÓM TẮT
Ngày nhận bài: 09/01/2024	Trong bài báo này, chúng tôi nghiên cứu ảnh hưởng của nhiệt độ lên cấu trúc vi mô và động học của hệ CdSe bằng phương pháp mô phỏng động lực học phân tử với thế tương tác Stillinger – Weber tại áp suất 0 GPa. Hệ CdSe gồm với 9955 nguyên tử (4631 Cd và 5324 Se) được nung nóng từ nhiệt độ 300K đến 4000K dưới tốc độ 10^{12} K/s với điều kiện biên tuần hoàn. Cấu trúc vi mô của hệ CdSe được phân tích thông qua hàm phân bố xuyên tâm cặp (PBXT), phân bố số phối trí (SPT), phân bố góc và phân bố khoảng cách tại các nhiệt độ khác nhau. Kết quả tính toán cho thấy rằng nhiệt độ nóng chảy của mô hình CdSe là 2200K. Mô hình có sự thay đổi từ cấu trúc wurtzite (SPT $\approx$ 4) sang cấu trúc rocksalt (SPT $\approx$ 6) và kết quả này phù hợp với kết quả của các công trình đã công bố. Độ linh động của nguyên tử Cd và Se còn được nghiên cứu thông qua độ dịch chuyển bình phương trung bình (MSD) và hệ số khuếch tán của nguyên tử Cd và Se.
Ngày hoàn thiện: 23/02/2024	
Ngày đăng: 23/02/2024	
TỪ KHÓA	
Mô phỏng động lực học phân tử	
Các đặc tính cấu trúc	
Động học	
Nhiệt độ nóng chảy	
Bán dẫn II-VI	

DOI: <https://doi.org/10.34238/tnu-jst.9568>

* Corresponding author. Email: dungtt24@tdmu.edu.vn

1. Giới thiệu

Vật liệu bán dẫn loại II-VI như CdTe, CdS, CdSe... đã được quan tâm nghiên cứu rất sâu sắc trong hơn 60 năm qua bằng lý thuyết, thực nghiệm và mô phỏng trên máy tính. Các vật liệu này có vai trò quan trọng trong các lĩnh vực công nghệ, quang điện tử, chấm lượng tử, pin mặt trời... [1], [2].

CdSe là một trong các vật liệu bán dẫn loại II-VI tiêu biểu và có nhiều ứng dụng quan trọng trong kỹ thuật như diode laser và sensor nano. Do đó, vật liệu CdSe đã được quan tâm nghiên cứu rất lớn của các nhà khoa học trên thế giới. Các nghiên cứu này tập trung vào sự thay đổi vi cấu trúc của vật liệu dưới ảnh hưởng của nhiệt độ và áp suất. Bằng phương pháp phổ nhiễu xạ tia X, nghiên cứu [3] đã chỉ ra rằng cấu trúc của CdSe bao gồm các cấu trúc zinc-blende (ZB) và wurtzite (WZ). Sự thay đổi cấu trúc của tinh thể CdSe cũng được quan sát bằng phương pháp phổ nhiễu xạ tia X và sự hấp thụ quang phổ áp suất cao [4], [5]. Các kết quả cho thấy rằng tinh thể nano CdSe biến đổi từ cấu trúc wurtzite sang cấu trúc rock salt, kết quả này tương tự như quá trình biến đổi của các tinh thể được quan sát trong CdSe khối. Tuy nhiên áp suất chuyển pha của tinh thể nano từ 3,6 đến 4,9 GPa, khác với 2,0 GPa trong CdSe khối.

Sự nở nhiệt và nhiệt dung riêng của vật liệu CdSe cũng được tính toán bằng phương pháp mô phỏng động lực học phân tử (DLHPT) với thế tương tác Tersoff. Kết quả cho thấy giá trị của hệ số nở nhiệt và nhiệt dung riêng tương ứng là $0,33.10^{-5} \text{ K}^{-1}$ và $5,58 \text{ cal.K}^{-1}$ [6]. Các kết quả nghiên cứu DLHPT cho thấy rằng dưới ảnh hưởng của áp suất, CdSe biến đổi từ cấu trúc wurtzite có số phối vị 4 sang cấu trúc rocksalt có số phối vị 6 đối với vật liệu CdSe khối [7] – [9] và tinh thể nano CdSe [10], [11]. Phương pháp tính từ nguyên lý ban đầu (ab initio) đã được sử dụng để quan sát sự thay đổi vi cấu trúc của vật liệu CdSe [12]. Kết quả đã báo cáo rằng CdSe chuyển từ cấu trúc wurtzite sang cấu trúc rocksalt.

Tuy nhiên, các đặc tính cấu trúc vi mô của CdSe dưới ảnh hưởng của nhiệt độ cho đến nay vẫn chưa được nghiên cứu chi tiết bằng mô phỏng trên máy tính. Do đó, trong công trình này chúng tôi trình bày nghiên cứu chi tiết về mô phỏng vật liệu CdSe bằng phương pháp DLHPT trong khoảng nhiệt độ từ 300 K đến 4000 K. Động học của hệ CdSe dưới ảnh hưởng của nhiệt độ cũng được phân tích và trình bày.

2. Phương pháp nghiên cứu

Mô hình vật liệu CdSe bao gồm 9955 nguyên tử (4631 nguyên tử Cd và 5324 nguyên tử Se) có kích thước $67.283 \times 67.283 \times 67.283 \text{ Å}^3$. Để thực hiện mô phỏng chúng tôi sử dụng phần mềm Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator (LAMMPS) [13]. Đây là gói phần mềm mã nguồn mở được sử dụng trong mô phỏng DLHPT bằng việc sử dụng thuật toán Verlet để giải gần đúng phương trình của định luật Newton với bước thời gian là 1.0 fs. Tương tác giữa nguyên tử Cd và Se được thực hiện thông qua thế tương tác Stillinger – Weber (SW) với các hệ số thế được lấy từ tài liệu tham khảo [14]. Thế tương tác SW không chỉ tái hiện được các đặc tính cơ học cơ bản, các đặc trưng cấu trúc mà còn có thể mô tả tốt cấu trúc nguyên tử của vật liệu.

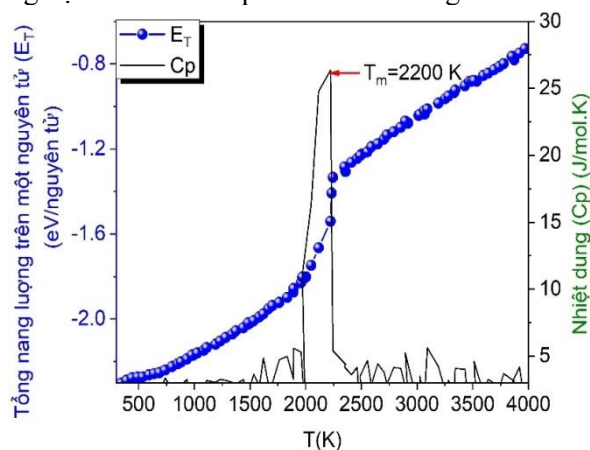
Ban đầu mô hình CdSe được tạo ra ở 300 K và hồi phục trong khoảng thời gian 10^5 bước thời gian ở chế độ NPT (N là số hạt, P là áp suất và T là nhiệt độ) cho đến khi đạt trạng thái cân bằng. Điều kiện biên tuần hoàn được áp dụng cho cả ba hướng x, y và z. Mô hình cân bằng nhận được ở 300 K được nung nóng đến nhiệt độ 4000 K với tốc độ nung nóng là 10^{12} K/s ở áp suất 0 GPa. Trong mô phỏng DLHPT nhiệt độ và áp suất của mô hình CdSe được điều chỉnh bằng phương pháp Nosé-Hoover [13], [15], [16]. Phần mềm OVITO được sử dụng để trực quan hoá mô hình [17]. Để tính phân bố số phối trí và phân bố khoảng cách, chúng tôi sử dụng bán kính cắt, là vị trí nhỏ nhất sau đỉnh đầu tiên của hàm PBXT, bằng 3,45 Å cho nhiệt độ nhỏ hơn 2200 K và 3,65 Å cho nhiệt độ lớn hơn hoặc bằng 2200 K. Cần lưu ý rằng, để phân tích các thông số cấu trúc và trực quan hoá các mô hình nhận được ở mỗi nhiệt độ sẽ được hồi phục trong khoảng thời gian 10^5 bước mô phỏng.

3. Kết quả và bàn luận

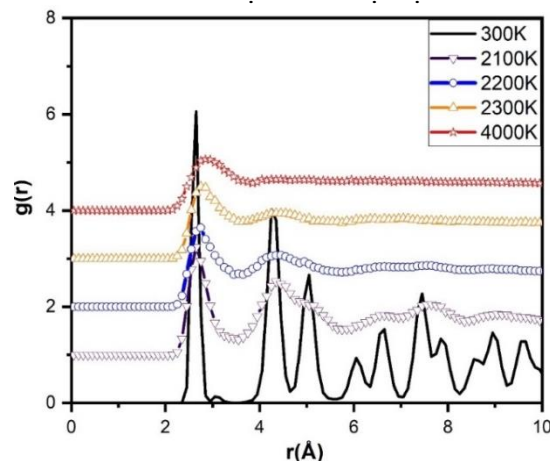
3.1. Tổng năng lượng trên mỗi nguyên tử và nhiệt dung riêng dưới ảnh hưởng của nhiệt độ

Hình 1 mô tả sự thay đổi của tổng năng lượng (E_T) và nhiệt dung riêng (C_p) khi nhiệt độ thay đổi từ 300 K đến 4000 K. Chúng ta có thể thấy rằng E_T tăng tuyến tính từ nhiệt độ 300 K đến 2000 K. Điều đó cho thấy rằng hệ đang ở trạng thái rắn, trong đó các nguyên tử chủ yếu thực hiện dao động nhiệt xung quanh vị trí cân bằng của nó. Ở nhiệt độ 2000 K, E_T thay đổi đột ngột và sau đó tăng tuyến tính trở lại từ nhiệt độ 2450 K đến 4000 K. Điều này cho thấy rằng quá trình chuyển pha từ rắn sang lỏng bắt đầu xảy ra ở nhiệt độ 2000 K và hệ nóng chảy hoàn toàn ở vùng nhiệt độ lớn hơn 2450 K.

Để đánh giá chính xác giá trị của nhiệt độ nóng chảy của hệ, chúng tôi tính toán nhiệt dung riêng (Hình 1 đường màu đen). Chúng ta biết rằng nhiệt dung riêng của hệ được xác định theo hệ thức $C_p = \frac{\Delta E}{\Delta T}$, với $\Delta T = 10$ K. Từ hình 1, chúng ta thấy rằng nhiệt dung riêng có một đỉnh cao và nhọn tại vị trí 2200 K. Do đó nhiệt độ nóng chảy của hệ được xác định là $T_m = 2200$ K. Giá trị này cao hơn so với nhiệt độ nóng chảy của hệ trong thực nghiệm [18]. Giá trị T_m cao hơn giá trị thực nghiệm có thể liên quan đến thể tương tác và kích thước mô hình chưa đạt so với hệ thực.



Hình 1. Tổng năng lượng trên nguyên tử và nhiệt dung

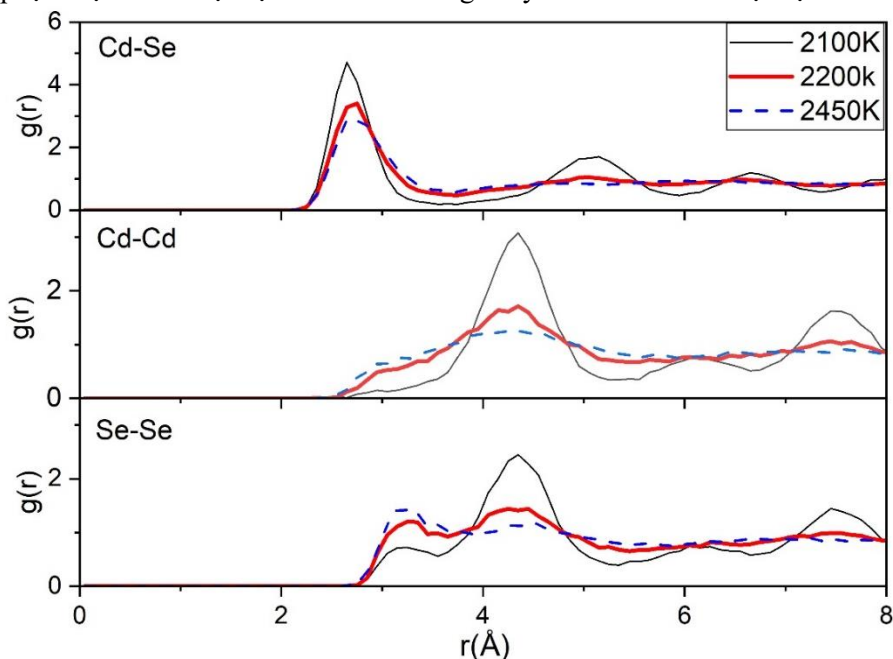


Hình 2. Hàm phân bố xuyên tâm của vật liệu CdSe tại các nhiệt độ khác nhau

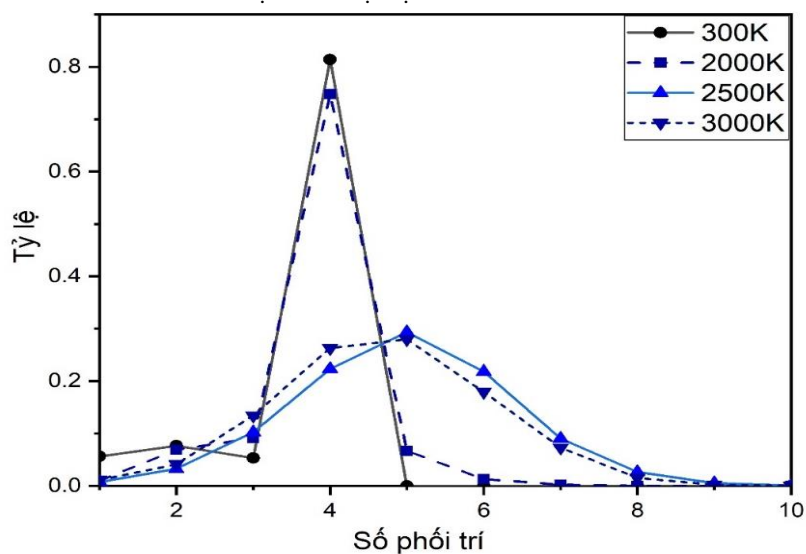
3.2. Đặc tính cấu trúc của vật liệu CdSe dưới ảnh hưởng của nhiệt độ

Sự thay đổi cấu trúc trong mô hình vật liệu CdSe cũng được nghiên cứu thông qua PBXT tại các nhiệt độ khác nhau (hình 2). Tại nhiệt độ 300 K, hàm PBXT của mô hình vật liệu có nhiều đỉnh nhọn, trong đó đỉnh thứ nhất, đỉnh thứ hai và đỉnh thứ ba có vị trí lần lượt tại 2,65Å, 4,25Å và 5,05Å và có độ cao lần lượt là 6,06, 4,03 và 2,65. Sự phân bố và hình dạng của các đỉnh trong hàm PBXT tại 300 K đã cho thấy mô hình đang tồn tại trật tự cấu trúc cao. Điều này có thể chứng tỏ rằng mô hình vật liệu CdSe đang ở trạng thái rắn kết tinh. Kết quả vị trí đỉnh thứ nhất tại nhiệt độ 300 K của chúng tôi phù hợp tốt với kết quả đã công bố của tác giả Benkabou và cộng sự [6]. Khi nhiệt độ tăng, vị trí của đỉnh thứ nhất trong các hàm PBXT tăng nhẹ, trong khi vị trí của các đỉnh còn lại gần như không đổi, nhưng độ cao của các đỉnh bị thay đổi rất đáng kể. Tại nhiệt độ 2100 K, hàm PBXT có độ cao của đỉnh thứ nhất và đỉnh thứ hai lần lượt là 3,23 và 2,52, và có các đỉnh còn lại gần như biến mất. Kết quả này đã cho thấy trong mô hình vật liệu CdSe bắt đầu diễn ra sự nóng chảy. Tại nhiệt độ 2200 K, vị trí đỉnh thứ nhất của hàm PBXT dịch chuyển nhẹ sang bên phải, tại 2,75Å, và có độ cao giảm mạnh, bằng 3,64, các đỉnh thứ hai và thứ ba gần như biến mất. Điều này chứng tỏ, mô hình đã chuyển sang trạng thái lỏng. Kết quả này cũng được xác nhận thông qua hình dạng của hàm PBXT tại nhiệt độ 2300 K, trong đó đỉnh thứ nhất của hàm PBXT tại 2,75Å, đỉnh thứ hai và thứ ba hoàn toàn biến mất.

Sự thay đổi cấu trúc của mô hình CdSe theo nhiệt độ còn được phân tích thông qua hàm PBXT giữa các cặp nguyên tử tại các nhiệt độ khác nhau. Hình 3 thể hiện hàm PBXT của các cặp $g_{Cd-Se}(r)$, $g_{Cd-Cd}(r)$ và $g_{Se-Se}(r)$ tại các nhiệt độ 2100 K, 2200 K và 2450 K. Tại nhiệt độ 2100 K, vị trí đỉnh thứ nhất của các hàm PBXT của $g_{Cd-Se}(r)$, $g_{Cd-Cd}(r)$ và $g_{Se-Se}(r)$ lần lượt là 2,65Å, 4,35Å và 4,35Å. Khi nhiệt độ tăng, đỉnh thứ nhất hàm PBXT của các cặp có vị trí tăng nhẹ, độ cao giảm và mở rộng hơn. Các đỉnh xa của hàm PBXT của các cặp biến mất dần khi nhiệt độ tăng. Từ các kết quả phân tích, chúng tôi có thể kết luận rằng cấu trúc của mô hình vật liệu CdSe phụ thuộc vào nhiệt độ và mô hình nóng chảy hoàn toàn khi nhiệt độ cao hơn 2450 K.

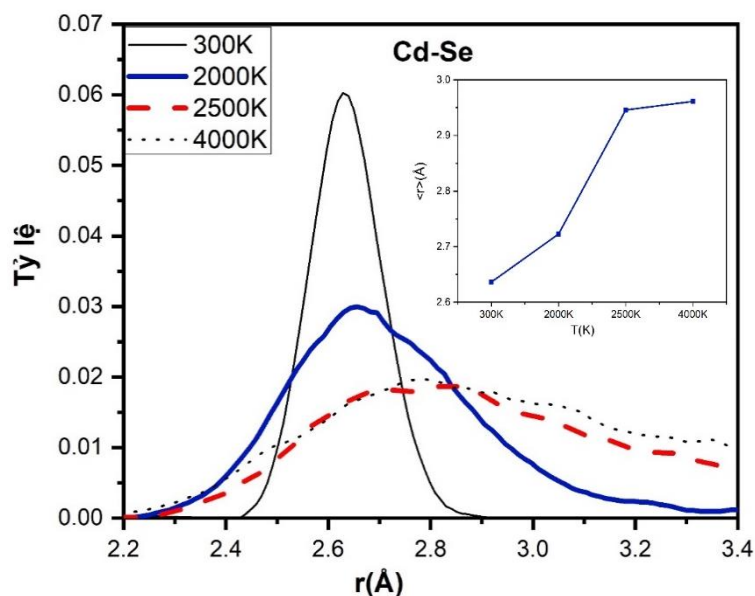


Hình 3. Hàm phân bố xuyên tâm của các cặp Cd-Se, Cd-Cd và Se-Se của vật liệu CdSe tại các nhiệt độ khác nhau



Hình 4. Phân bố số phối trí của vật liệu CdSe tại các nhiệt độ khác nhau

Sự thay đổi cấu trúc của mô hình vật liệu CdSe theo nhiệt độ còn được phân tích thông qua việc tính toán phân bố số phối trí và phân bố góc tại các nhiệt độ khác nhau. Hình 4 thể hiện phân bố góc của mô hình vật liệu CdSe tại các nhiệt độ khác nhau. Tại nhiệt độ 300 K, phân bố số phối trí có đỉnh tại 4. Kết quả này chứng tỏ, mô hình đang có cấu trúc wurtzite. Khi nhiệt độ tăng, đỉnh của phân bố số phối trí có xu hướng dịch chuyển về phía bên phải. Điều này chứng tỏ số phối trí của mô hình vật liệu CdSe tăng và gần bằng 6 khi nhiệt độ tăng. Từ kết quả này, chúng tôi có thể kết luận rằng mô hình vật liệu CdSe chuyển từ cấu trúc wurtzite ($SPT \approx 4$) sang cấu trúc rocksalt ($SPT \approx 6$). Kết quả này phù hợp với kết quả đã được công bố trong công trình [7], [9].



Hình 5. Phân bố khoảng cách của cặp Cd-Se của vật liệu CdSe tại các nhiệt độ khác nhau

Hình 5 trình bày phân bố khoảng cách của mô hình vật liệu CdSe tại các nhiệt độ 300 K, 2000 K, 2500 K và 4000 K. Từ kết quả hình 5, chúng ta thấy rằng, phân bố khoảng cách của mô hình vật liệu CdSe có đỉnh tại vị trí 2,64Å. Khi nhiệt độ tăng, đỉnh của hàm PBXT dịch chuyển nhẹ về phía phải. Kết quả này cho thấy khoảng cách giữa các nguyên tử trong mô hình CdSe tăng nhẹ khi nhiệt độ tăng.

3.3. Đặc tính động học dưới ảnh hưởng của nhiệt độ

Để làm sáng tỏ sự phụ thuộc của các đặc tính động học của mô hình CdSe vào nhiệt độ, chúng tôi đã nghiên cứu độ dịch chuyển bình phương trung bình (MSD) theo thời gian, cũng như hệ số khuếch tán của các nguyên tử trong mô hình CdSe ở các nhiệt độ khác nhau.

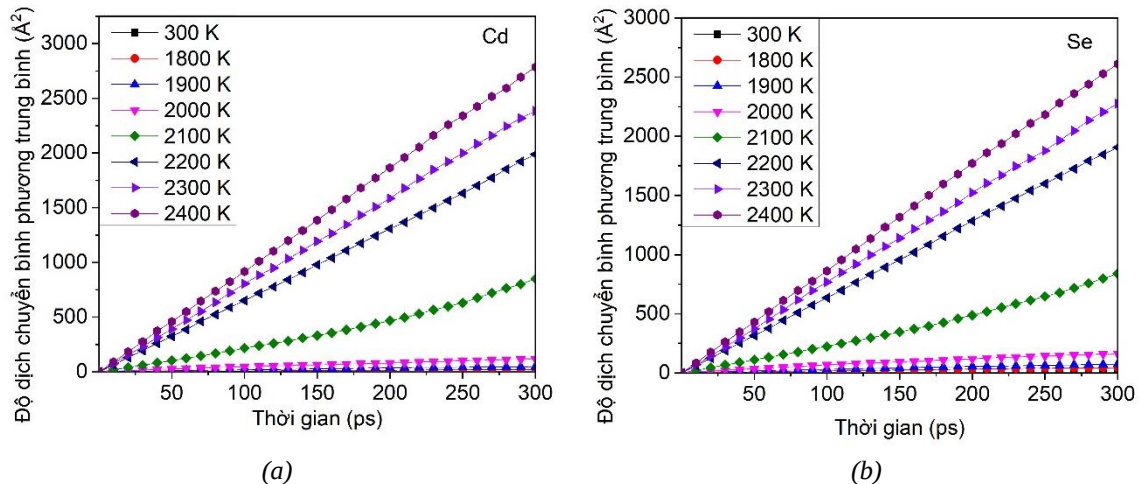
MSD của ion α được tính bởi:

$$\langle r^2(t) \rangle = \frac{1}{N_\alpha} \sum_{i=1}^{N_\alpha} \langle |\vec{r}(t) - \vec{r}(0)|^2 \rangle \quad (1)$$

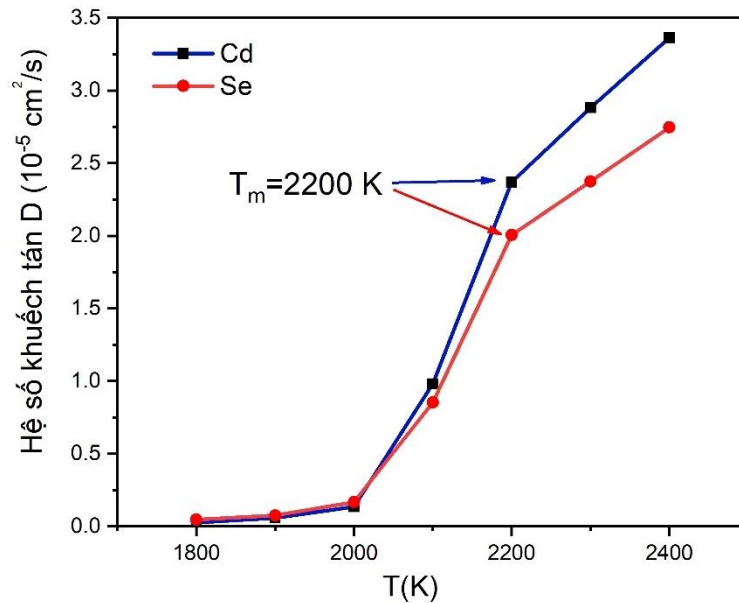
trong đó, $\vec{r}(t)$ là vector vị trí của ion α tại thời điểm t .

Hình 6 là MSD của nguyên tử Cd (a) và Se (b) tại các nhiệt độ khác nhau trong khoảng thời gian 300 ps so với thời điểm bắt đầu tính MSD. Có thể thấy rằng ở nhiệt độ thấp (nhỏ hơn 2200K) dưới điểm nóng chảy, giá trị của MSD là không đáng kể. Điều này có nghĩa là các nguyên tử liên kết chặt chẽ với nhau và chỉ dao động nhẹ xung quanh vị trí cân bằng của chúng, mô hình tồn tại ở trạng thái rắn. Giá trị MSD tăng mạnh khi nhiệt độ tăng đến 2200 K (trên điểm nóng chảy), cho thấy trong mô hình CdSe có sự phá vỡ các liên kết giữa các nguyên tử. Do đó các nguyên tử chuyển động nhanh hơn theo thời gian. Kết quả này cho thấy mô hình CdSe đã

chuyển sang trạng thái nóng chảy và nó lại một lần nữa khẳng định các kết quả được tính toán thông qua hàm năng lượng trung bình trên nguyên tử (hình 1) và hàm PBXT (hình 2) ở trên. Khi tăng nhiệt độ trên 2200 K, giá trị MSD tăng rất mạnh, cho thấy sự nóng chảy đã xảy ra hoàn toàn trong mô hình CdSe.



Hình 6. Độ dịch chuyển bình phương trung bình của Cd (a) và Se (b) tại các nhiệt độ khác nhau



Hình 7. Sự phụ thuộc hệ số khuếch tán của nguyên tử Cd và Se trong vật liệu CdSe vào nhiệt độ

Hệ số khuếch tán của nguyên tử Cd và Se trong mô hình có thể được tính thông qua MSD theo hệ thức Einstein, $D = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\langle r^2(t) \rangle}{6t}$ [19], trong đó $\langle r^2(t) \rangle$ là giá trị trung bình bình phương của độ dịch chuyển theo thời gian t . Hình 7 trình bày sự phụ thuộc của hệ số khuếch tán của mô hình CdSe vào các nhiệt độ khác nhau. Hệ số khuếch tán của Cd (D_{Cd}) có giá trị từ 0,026 đến 3,363 ($10^{-5} \text{ cm}^2/\text{s}$) và của Se (D_{Se}) có giá trị từ 0,046 đến 2,74 ($10^{-5} \text{ cm}^2/\text{s}$) khi nhiệt độ tăng từ 1800 K đến 2400 K. Từ hình 7, chúng ta thấy rằng D_{Cd} và D_{Se} có giá trị gần bằng nhau khi nhiệt độ của mô hình CdSe nhỏ hơn 2200 K. Nhưng giá trị của D_{Cd} và D_{Se} có sự chênh lệch rất đáng kể khi nhiệt độ của mô hình cao hơn 2200 K. Tỷ lệ D_{Cd}/D_{Se} có giá trị từ 0,567 đến 1,225 khi nhiệt độ

tăng từ 1800 K đến 2400 K. Như vậy, kết quả tính toán này đã một lần nữa khẳng định rằng, nhiệt độ nóng chảy của mô hình bằng $T_m=2200$ K.

4. Kết luận

Mô hình CdSe được mô phỏng bằng phương pháp MD sử dụng thế tương tác Stillinger – Weber. Các đặc tính cấu trúc của mô hình CdSe cũng được nghiên cứu thông qua hàm PBXT, phân bố số phối trí, phân bố góc liên kết và phân bố khoảng cách. Theo kết quả của chúng tôi, mô hình CdSe có điểm nóng chảy vào khoảng $T_m = 2200$ K. Ngoài ra, mô hình CdSe còn chuyển từ cấu trúc tứ diện có phối trí số 4 (cấu trúc wurtzite) sang cấu trúc bát diện có phối trí số 6 (cấu trúc rocksalt) khi nhiệt độ cao hơn nhiệt độ nóng chảy. Kết quả này phù hợp với kết quả được công bố trước đó. Ngoài ra, chúng tôi còn nghiên cứu tính linh động của nguyên tử Cd và Se thông qua MSD và hệ số khuếch tán của nguyên tử Cd và Se. Kết quả cho thấy MSD và hệ số khuếch tán của nguyên tử Cd và Se thay đổi ít khi ở nhiệt độ thấp (nhỏ hơn T_m) và tăng mạnh ở vùng nhiệt độ cao (lớn hơn T_m). Điều này chứng tỏ các nguyên tử Cd và Se trong mô hình bị phá vỡ và chuyển động rất nhanh dưới nhiệt độ cao.

Lời cảm ơn

Nghiên cứu này được tài trợ bởi Trường Đại học Thủ Dầu Một trong đề tài mã số DT.21.4-002. Các kết quả của bài báo được tính toán trên hệ thống máy tính hiệu năng cao (HPCC) của trường Đại học Thủ Dầu Một.

TÀI LIỆU THAM KHẢO/ REFERENCES

- [1] E. Colegrove, *et al.*, “High-efficiency polycrystalline CdS/CdTe solar cells on buffered commercial TCO-coated glass,” *Journal of Electronic Materials*, vol. 41, no.10, pp. 2833-2837, 2012.
- [2] R. Liang, *et al.*, “CdTe Quantum Dots/Layered Double Hydroxide Ultrathin Films with Multicolor Light Emission via Layer-by-Layer Assembly,” *Advanced Functional Materials*, vol. 22, no.23, pp. 4940-4948, 2012.
- [3] M. G. Bawendi, *et al.*, “X-ray structural characterization of larger CdSe semiconductor clusters,” *The Journal of Chemical Physics*, vol. 91, no.11, pp. 7282-7290, 1989.
- [4] S. H. Tolbert and A. P. Alivisatos, “The wurtzite to rock salt structural transformation in CdSe nanocrystals under high pressure,” *The Journal of Chemical Physics*, vol. 102, no.11, pp. 4642-4656, 1995.
- [5] J. N. Wickham, A. B. Herhold, and A. P. Alivisatos, “Shape change as an indicator of mechanism in the high-pressure structural transformations of CdSe nanocrystals,” *Physical Review Letters*, vol. 84, no.5, p. 923, 2000.
- [6] F. Benkabou, H. Aourag, and M. Certier, “Atomistic study of zinc-blende CdS, CdSe, ZnS, and ZnSe from molecular dynamics,” *Materials Chemistry and Physics*, vol. 66, no.1, pp.10-16, 2000.
- [7] C. Bealing, R. Martoňák, and C. Molteni, “Pressure-induced structural phase transitions in CdSe: A metadynamics study,” *The Journal of chemical physics*, vol. 130, no.12, p. 124712, 2009.
- [8] C. Bealing, R. Martoňák, and C. Molteni, “The wurtzite to rock salt transition in CdSe: A comparison between molecular dynamics and metadynamics simulations,” *Solid State Sciences*, vol. 12, no. 2, pp. 157-162, 2010.
- [9] D. Zahn, Y. Grin, and S. Leoni, “Mechanism of the pressure-induced wurtzite to rocksalt transition of CdSe,” *Physical Review B*, vol. 72, no.6, 2005, Art. no. 064110.
- [10] M. Grünwald, E. Rabani, and C. Dellago, “Mechanisms of the wurtzite to rocksalt transformation in CdSe nanocrystals,” *Physical Review Letters*, vol. 96, no. 25, 2006, Art. no. 255701.
- [11] X. Ye, D. Y. Sun, and X. G. Gong, “Pressure-induced structural transformation of CdSe nanocrystals studied with molecular dynamics,” *Physical Review B*, vol. 77, no. 9, 2008, Art. no. 094108.
- [12] M. Durandurdu, “Orthorhombic intermediate phases for the wurtzite-to-rocksalt phase transformation of CdSe: An ab initio constant pressure study,” *Chemical Physics*, vol. 369, no. 2-3, pp. 55-58, 2010.
- [13] S. Plimpton, “Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics,” *Journal of Computational Physics*, vol. 117, no. 1, pp. 1-19, 1995.

-
- [14] X. W. Zhou, D. K. Ward, J. E. Martin, *et al.*, “Stillinger-weber potential for the II-VI elements Zn-Cd-Hg-S-Se-Te,” *Physical Review B*, vol. 88, no. 8, 2013, Art. no. 085309.
- [15] W. G. Hoover, “Canonical dynamics: Equilibrium phase-space distributions,” *Physical Review A*, vol. 31, no. 3, 1985, Art. no. 1695.
- [16] S. Nosé, “A unified formulation of the constant temperature molecular dynamics methods,” *The Journal of Chemical Physics*, vol. 81, no. 1, pp. 511-519, 1984.
- [17] A. Stukowski, “Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO—the Open Visualization Tool,” *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, vol. 18, no. 1, 2009, Art. no. 015012.
- [18] J. W. R. Cook, “The CdS-MnS and CdSe-MnSe phase diagrams,” *Journal of the American Ceramic Society*, vol. 51, no. 9, pp. 518-520, 1968.
- [19] T. T. T. Hanh and V. V. Hoang, “Structure and diffusion in simulated liquid GaAs,” *The European Physical Journal Applied Physics*, vol. 49, no. 3, 2010, Art. no. 30301.