

УДК 536.75; 538.9

doi 10.26089/NumMet.v18r437

**СТАТИСТИКА КОЛЬЦЕВЫХ СТРУКТУР В НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ ВЕЩЕСТВАХ:
ПАРАЛЛЕЛЬНЫЙ АЛГОРИТМ ДЛЯ КЛАСТЕРОВ ИЗ СОТЕН ТЫСЯЧ АТОМОВ****Ф. В. Григорьев¹, В. Б. Сулимов², А. В. Тихонравов³**

Кольца, состоящие из различного числа атомов, являются основным структурным элементом во многих неупорядоченных веществах. В настоящей статье представлен параллельный алгоритм получения приближенной функции распределения колец по числу атомов, основанный на методе Монте-Карло. Алгоритм применен к кластерам диоксида кремния, содержащим до миллиона атомов. Исследована эффективность алгоритма, как функция числа используемых вычислительных ядер, вплоть до 1024.

Ключевые слова: структура стекол и пленок, молекулярная динамика, стеклообразный диоксид кремния, статистика колец.

1. Введение. Кольца, состоящие из n атомов, формируются в различных аморфных и стеклообразных веществах, имеющих неупорядоченную структуру: SiO_2 , TiO_2 , B_2O_3 , GeO_2 , As_2S_3 , As_2Se_3 и др. Относительная концентрация колец различного размера описывается функцией распределения колец (ФРК) по числу атомов. ФРК используется для описания структуры неупорядоченных веществ, для анализа способности веществ к стеклообразованию [1] и для описания изменения структуры под действием внешнего давления [2]. Высокая концентрация колец с малыми n может означать существование напряжений в атомной структуре [3]. Кроме того, значительная концентрация колец с большими числами атомов может приводить к образованию пор. Основные структурные параметры (длина связи и валентный и торсионный углы), как правило, меняются слабо с изменением n , особенно для колец с большим n . По этой причине довольно сложно использовать структурные характеристики, полученные из эксперимента (например, радиальную функцию распределения) для вычисления ФРК. С другой стороны, ФРК может быть рассчитана по результатам атомистического моделирования, так как информации о координатах атома и его принадлежности к определенному химическому элементу для этого достаточно. К настоящему времени ФРК, рассчитанная по результатам атомистического моделирования, широко используется для анализа структуры неупорядоченных твердых тел (см. [4] и ссылки там). Однако существующие алгоритмы ориентированы на расчет ФРК для кластеров, содержащих несколько тысяч атомов. Их применение для кластеров существенно большего размера, содержащих до нескольких сотен тысяч и миллионов атомов [5], проблематично из-за быстрого роста времени расчета с увеличением числа атомов.

В настоящей работе представлен параллельный алгоритм расчета ФРК для кластеров, полученных по результатам атомистического моделирования в рамках метода классической молекулярной динамики (МД) и содержащих порядка миллиона атомов. Алгоритм применен для вычисления ФРК некристаллического диоксида кремния. Эффективность алгоритма рассчитана для числа ядер вплоть до 1024.

Работа выполнена с использованием оборудования Центра коллективного пользования сверхвысокопроизводительными вычислительными ресурсами МГУ имени М.В. Ломоносова.

2. Алгоритм расчета статистики колец.

2.1. Метод Монте-Карло вычисления функции распределения колец по числу атомов. ФРК определяется следующим образом:

$$f_n = N_n/N_{\text{tot}}, \quad (1)$$

где f_n — относительная концентрация колец, содержащих n атомов, N_n — число таких колец, N_{tot} — число всех колец в структуре. В (1) учитываются только кольца, называемые примитивными. Следуя [4], мы определим примитивное кольцо как “кольцо, которое не может быть разделено на два меньших по числу атомов колец”. В соответствии с этим определением кольцо 1-3-6-2-1 (рис. 2а) — примитивное, а кольцо 1-3-6-2-8-9-5-1 не является таковым.

¹ Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Научно-исследовательский вычислительный центр, Ленинские горы, 119992, Москва; вед. науч. сотр., e-mail: fedor.grigoriev@gmail.com

² Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Научно-исследовательский вычислительный центр, Ленинские горы, 119992, Москва; зав. лабораторией, e-mail: v.sulimov@srcc.msu.ru

³ Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Научно-исследовательский вычислительный центр, Ленинские горы, 119992, Москва; директор, e-mail: tikh@srcc.msu.ru

Алгоритм поиска колец основан на анализе химических связей всех атомов в их некоторой последовательности. Число таких связей можно оценить как $N_S^{N_L}$, где N_L — среднее количество связей, приходящихся на один атом, а N_S — число атомов в последовательности. В случае кластеров, содержащих сотни тысяч атомов, такой анализ требует больших вычислительных ресурсов. Проблема может быть решена заменой точной ФРК эмпирической, рассчитанной методом Монте-Карло по следующему алгоритму:

- 1) формирование набора K пробных атомов, номера которых выбираются случайно из полного списка, содержащего K_{tot} атомов, $K \ll K_{\text{tot}}$;
- 2) для каждого атома поиск всех примитивных колец, в которых он содержится;
- 3) вычисление функции

$$f_n(K) = \sum_{i=1}^K \frac{N_i^n}{N_{\text{tot}}(K)}, \quad (2)$$

где N_i^n — число n -членных примитивных колец, содержащих i -й атом, $N_{\text{tot}}(K)$ — общее число колец, содержащих хотя бы один атом из набора;

- 4) повтор шагов 1)–3) для различных наборов атомов с различными величинами K .

Метод работает в том случае, если с увеличением числа K появляется сходимость $f_n(K)$ к их предельным величинам, соответствующим точной ФРК. Сходимость ФРК достигается быстрее в случае, если структура кластера однородна, иначе могут наблюдаться флуктуации ФРК с ростом числа K .

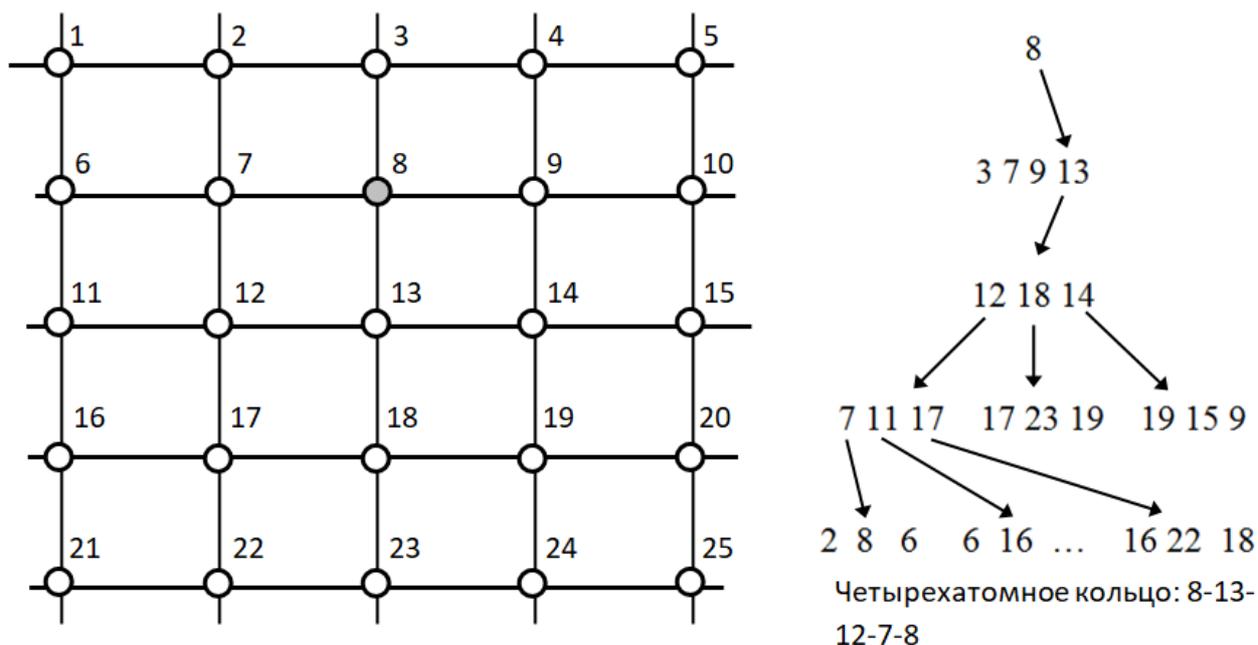


Рис. 1. Иллюстрация алгоритма SPA

2.2. Алгоритм поиска примитивных колец, содержащих выбранный атом. Метод поиска кратчайшего пути (Shortest-Path Analysis, SPA) [6, 4] — один из наиболее широко используемых подходов для поиска примитивных колец. SPA использует матрицу связности, которая представляет собой двумерный массив $L(K_{\text{tot}}, N_{bm} + 1)$, где N_{bm} — максимальное число связей на атом, $L(i, 1)$ — общее число связей, относящихся к i -у атому, $L(i, 2, \dots)$ — номера атомов, формирующих связи с i -м атомом. Поиск примитивных колец с использованием SPA иллюстрируется на примере плоской сетки четырехкоординированных атомов (рис. 1). Последовательность атомов формирует кольцо, если номера первого и последнего атомов совпадают. Кроме того, в последовательности не должно быть одинаковых номеров атомов, за исключением первого и последнего.

Дерево последовательностей, формируемое движением вдоль связей, показано в правой части рис. 1. Последовательность 8-13-12-7-8 образует кольцо, так как первый и последний атом совпадают. Только одна из эквивалентных последовательностей, например 8-13-12-7-8 и 8-7-12-13-8, учитывается в ФРК.

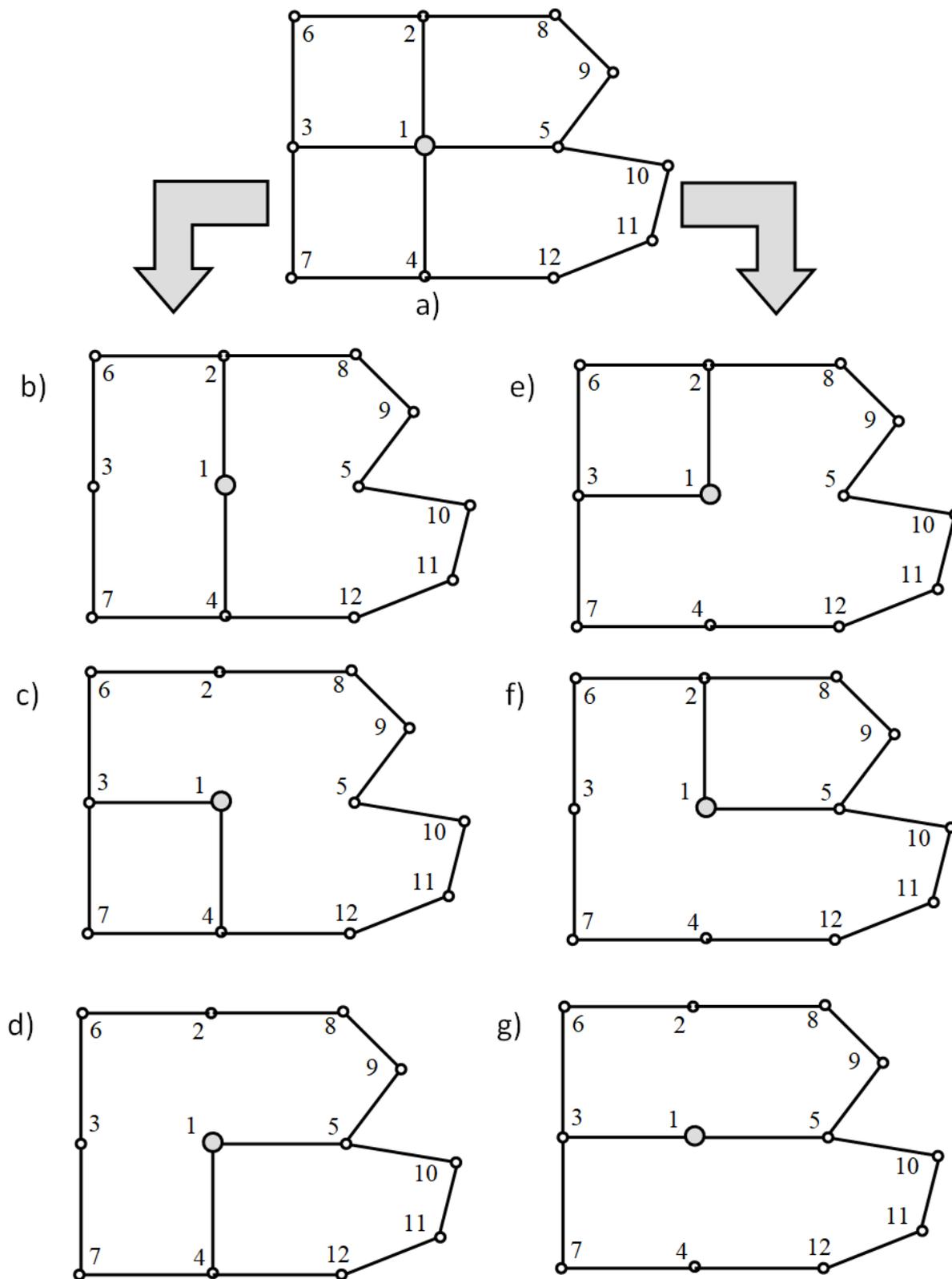


Рис. 2. Представление четырехкоординированного атома 1 набором двухкоординированных атомов

Поиск неэквивалентных колец строится следующим образом:

- 1) все связи n -координированного пробного атома группируются в $n(n-1)/2$ пар. Например, четырехкоординированный пробный атом 1 на рис. 2 образует шесть пар связей, т.е. он представляется как шесть двухкоординированных атомов;
- 2) поиск примитивных колец для всех двухкоординированных атомов. Начиная с первой связи пары и заканчивая на второй, мы находим только неэквивалентные кольца;
- 3) тестирование всех найденных колец на их “примитивность” с учетом всех связей пробного атома. Например, кольцо 1-2-6-3-7-4-1 (рис. 2b) и 1-3-7-4-12-11-10-5-1 (рис. 2g) не являются примитивными, так как могут быть разделены на кольца с меньшим числом атомов.

В целом алгоритм SPA применительно к вычислению эмпирической ФРК состоит из шагов:

- 1) случайный выбор атома с номером i ;
- 2) поиск всех атомов, связанных с атомом i . Номера атомов запоминаются в ячейках $LP(1; 1, \dots, N_i)$ двумерного массива, где N_i — число атомов, с которыми связан атом i ;
- 3) разбиение всех связей атома i на $N_i(N_i-1)/2$ пар;
- 4) номера атомов в первой паре связей запоминаются в ячейках $LP(1; 1)$ и $LP(1; 2)$. Номера атомов, связанные с атомом $LP(1; 1)$, за исключением атома i , запоминаются в ячейках массива $LP(2; 1, \dots, N_{i1})$, где N_{i1} — число атомов, с которыми связан атом в ячейке $LP(1; 1)$. Связи атома i с атомами, чьи номера записаны в ячейках $LP(1; 3, \dots, N_i)$, не принимаются во внимание при рассмотрении первой пары связей;
- 5) атомы, связанные хотя бы с одним из атомов, чьи номера записаны в ячейках $LP(2; 1, \dots, N_{i1})$, запоминаются в ячейках $LP(3; 1, \dots, N_{tot2})$, где N_{tot2} — число связей всех атомов $LP(2; 1, \dots, N_{i1})$. Атом $LP(1; 1)$ не запоминается в элементах $LP(3; 1, \dots, N_{tot2})$, чтобы избежать обратного движения по связям (например, последовательность 1-2-6-2-1 на рис. 2f);
- 6) если номер любого из атомов в ячейках $LP(3; 1, \dots, N_{tot2})$ совпадает с номером пробного атома, то последовательность, формирующая кольцо, найдена. Если нет, то шаг 5 повторяется до тех пор, пока номер одного из атомов в позициях $LP(4; \dots)$, $LP(5; \dots)$, ... не совпадет с номером пробного атома;
- 7) шаги 4–6 повторяются для всех пар связей, определенных на шаге 3;
- 8) все найденные кольца проверяются на “примитивность”;
- 9) шаги 1–8 повторяются для различных чисел пробных атомов K ;
- 10) ФРК вычисляется в соответствии с выражением (2).

3. Результаты.

3.1. Однопроцессорный расчет. ФРК вычислялись для кластеров диоксида кремния. В кристаллической модификации (α -кварц) были найдены только шести- и восьмичленные кольца, что соответствует литературным данным [7]. Пространственная структура колец показана на рис. 3.

Вычисление ФРК для некристаллической фазы были проведены в атомистических кластерах с максимальными размерами $13.1 \times 15.7 \times 85$ нм и максимальным числом атомов 1153395. Кластеры были получены с использованием программы KUVALDA [5], моделирующей процесс напыления тонких оптических покрытий. Время одного цикла напыления 6 пс, 50 SiO_2 групп напылялись за один цикл. Шаг МД-моделирования составил 0.5 фс, использовался NVT ансамбль [8] (постоянные число частиц, объем и температура) с периодическими граничными условиями, энергия межатомных взаимодействий вычислялась в рамках силового поля DESIL [9]. ФРК рассчитывалась для кластеров, напыленных при различных значениях энергии атомов кремния: 10, 1 и 0.1 эВ, остальные параметры были одинаковыми.

Результаты представлены в таблице. Чтобы уменьшить время расчета, ФРК определялась только для слоя, а не для всего кластера. Обычно концентрация колец с различным числом атомов нормируется на концентрацию шестичленных колец, поэтому выражение (2) было изменено следующим образом [10]:

$$f_{n6}(K) = \sum_{i=1}^K N_i^n / \left(\sum_{i=1}^K N_i^6 \right)^{-1}.$$

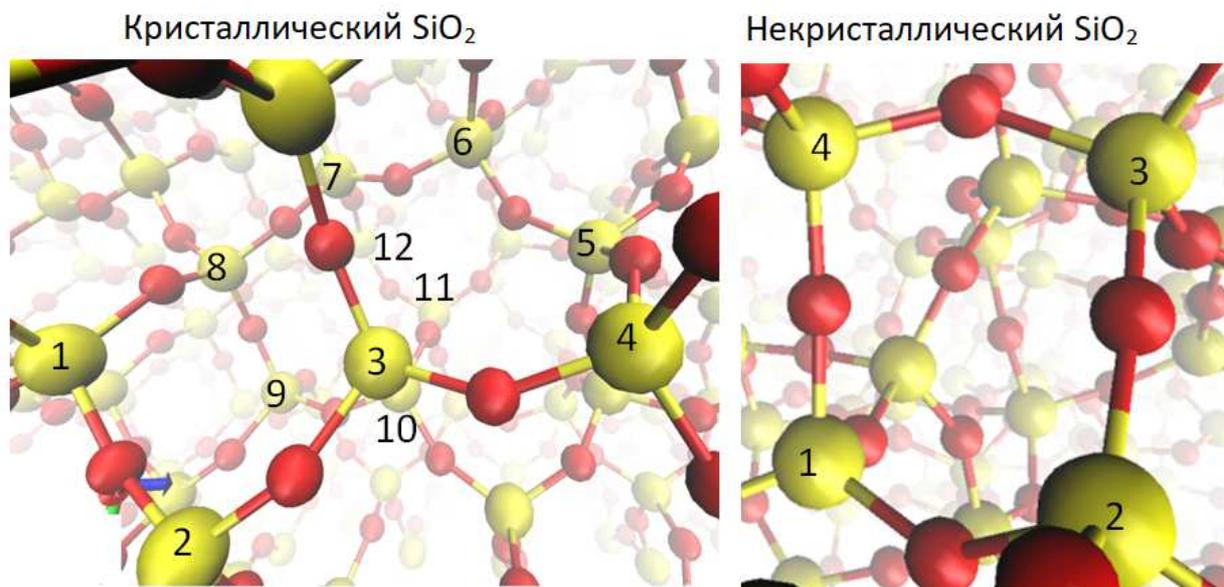


Рис. 3. Кольца в структуре SiO₂. Атомы кремния и кислорода показаны желтым и красным цветом соответственно. Последовательности 1-2-3-4-5-6-7-8-1 и 7-8-9-10-11-12-7 формируют восьми- и шестичленные кольца в α-кварце (левая сторона). Последовательность 1-2-3-4-1 формирует четырехчленное кольцо в некристаллической фазе (правая сторона)

Полученное распределение колец по числу атомов близко к известным ранее распределениям для кластеров SiO₂, полученных МД-моделированием с различными силовыми полями [1, 3, 10, 11]. Максимум распределения приходится на $n = 6$ во всех случаях. ФРК, полученная в [3, 10], почти симметрична относительно центрального пика; $f_{n6} = 0$ при $n > 9$ и $n < 3$. ФРК, рассчитанная в [1], сохраняет симметрию относительно центрального пика ($n = 6$) только для $n = 4, 5$. Незначительные отличия ФРК, полученной в настоящей работе, от известных ранее могут объясняться различиями в структуре стеклообразного диоксида кремния и напыленных пленок.

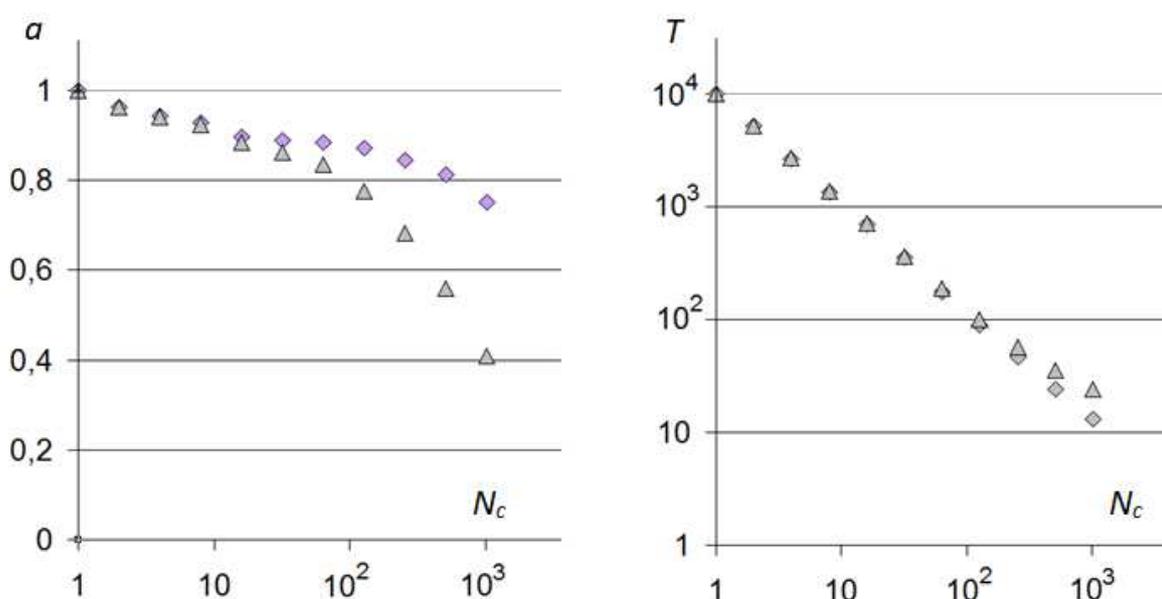


Рис. 4. Зависимость эффективности a и времени расчета T (с) от числа ядер N_c для параллельной части алгоритма (ромбы) и для алгоритма в целом (треугольники)

ФРК $f_{n6}(K)$ для слоя толщиной 6 нм, содержащего 1.1×10^5 атомов,
 K — число пробных атомов. ФРК для α -кварца приведена в нижней строчке,
 $E(\text{Si})$ — энергия напыляемых атомов кремния, эВ

$E(\text{Si})$	K	N								
		2	3	4	5	6	7	8	9	10
10	250	0	0.0587	0.3208	0.8461	1	0.5618	0.1363	0.0084	0
	500	0	0.0598	0.3193	0.8088	1	0.5861	0.1208	0.0073	0
	1×10^3	0.0006	0.0508	0.3790	0.8033	1	0.6073	0.1458	0.0093	0.0011
	2×10^3	0.0003	0.0495	0.3516	0.8200	1	0.5884	0.1372	0.0086	0.0003
	4×10^3	0.0003	0.0544	0.3480	0.8192	1	0.5889	0.1347	0.0099	0.0003
	8×10^3	0.0003	0.0525	0.3469	0.8155	1	0.5888	0.1393	0.0084	0.0014
	16×10^3	0.0001	0.0520	0.3445	0.8129	1	0.5910	0.1383	0.0084	0.0001
	32×10^3	0.0001	0.0510	0.3506	0.8094	1	0.5853	0.1333	0.0089	0.0002
1	500	0.0013	0.1237	0.4807	0.8170	1	0.6302	0.2294	0.0284	0.0013
	2×10^3	0.0010	0.1168	0.5237	0.8391	1	0.6630	0.1995	0.0274	0.0019
	8×10^3	0.0056	0.1201	0.5038	0.8358	1	0.6323	0.1916	0.0276	0.0015
	32×10^3	0.0037	0.1223	0.5156	0.8385	1	0.6359	0.1978	0.0270	0.0014
0.1	500	0	0.1881	0.5925	1.0270	1	0.7060	0.2313	0.0507	0.0015
	2×10^3	0.0021	0.1701	0.6063	0.9216	1	0.5607	0.1708	0.0274	0.0024
	8×10^3	0.0022	0.1716	0.6034	0.9128	1	0.5839	0.1862	0.0263	0.0032
	32×10^3	0.0015	0.1778	0.6096	0.9107	1	0.5722	0.1810	0.0270	0.0036
$\alpha - q$	32×10^3	0.0	0.0	0.0	0.0	1	0.0	0.5	0.0	0.0

ФРК для $n = 2-5$ в случае энергии напыляемых атомов кремния 1 эВ и 0.1 эВ отличается от ФРК в случае $E(\text{Si}) = 10$ эВ. Этот результат согласуется с различиями в структуре пленок, напыленных с использованием высокоэнергетических ($E(\text{Si}) = 10$ эВ) и низкоэнергетических ($E(\text{Si}) = 0.1$ и 1 эВ) методов [12].

Для всех энергий напыленных атомов ФРК при $n = 3-9$ отличается слабо, если K превышает 2×10^3 . Таким образом, примерно 2% от общего числа атомов достаточно для хорошей аппроксимации точной ФРК вблизи максимума. В то же время хвосты ФРК, соответствующие кольцам с малыми и большими n , более чувствительны к величине K , что следует учитывать при расчете статистики колец методом, описанным в настоящей статье.

3.2. Эффективность параллельного алгоритма расчета ФРК. Представленный алгоритм может быть легко распараллелен, так как для каждого пробного атома поиск примитивных колец может проводиться независимо. Параллельная версия алгоритма имеет следующую структуру:

- 1) выбирается число пробных атомов K . На каждое ядро приходится до $K_N = \lceil K/N_c \rceil + 1$ атомов;
- 2) на каждом ядре проводится поиск примитивных колец для всех атомов, чьи номера переданы на ядро;
- 3) центральный процесс собирает результаты расчетов на каждом ядре и вычисляет ФРК.

Эффективность многопроцессорных вычислений с использованием параллельной версии рассчитывалась следующим образом:

$$a = \frac{T(1)}{T(N_c) N_c}, \quad (3)$$

где $T(1)$ и $T(N_c)$ — времена расчета на одном ядре и на N_c ядрах. Зависимости a от числа ядер показаны на рис. 4. Параллельный алгоритм разработан с использованием интерфейса MPI. Максимальное число ядер достигало 1024. Число пробных атомов K было выбрано равным 61440 (60 пробных атомов на ядро при числе ядер 1024). Уменьшение a с ростом числа ядер обусловлено ростом вкладов непараллельной части алгоритма.

Ранее параллельный алгоритм расчета ФРК был разработан в [11], его эффективность, вычисленная по (3) для числа ядер до нескольких десятков, менялась от 1 до 0.85.

Как можно видеть из зависимостей на рис. 4, вычисление ФРК при числах ядер 512 и 1024 требует не более нескольких секунд. Это значение меньше, чем время, требуемое для одного цикла напыления в рамках программы KUVALDA [5]. Таким образом, разработанный алгоритм может использоваться для анализа статистики колец непосредственно при атомистическом напылении роста пленок, а не только по его окончании. Это позволяет исследовать влияние основных технологических параметров (энергия осаждаемых атомов, угловое распределение их скоростей, давление в вакуумной камере, температура подложки и др.) на структуру напыленных слоев толщиной до нескольких десятков нанометров.

4. Заключение. В настоящей статье представлен оригинальный параллельный алгоритм расчета распределения колец в структуре неупорядоченных твердых тел по числу атомов в кольцах. Алгоритм основан на приближении точной функции распределения эмпирической, рассчитываемой методом Монте-Карло. Для поиска примитивных колец используется метод поиска кратчайшего пути (shortest-path analysis).

Получено, что параллельная версия алгоритма сохраняет высокую эффективность при числе ядер вплоть до 1024. Сходимость функции распределения колец с ростом числа пробных атомов, используемых при расчете методом Монте-Карло, была исследована для кластеров SiO_2 , содержащих более чем миллион атомов. Было найдено, что использование 2% от общего числа атомов достаточно для хорошего приближения точной функции распределения эмпирической, за исключением хвостов функции.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант 14-11-00409).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Kohara S., Akola J., Morita H., Suzuya K., Weber J.K.R., Wilding M.C., Benmore C.J. Relationship between topological order and glass forming ability in densely packed enstatite and forsterite composition glasses // Proc. Natl. Acad. Sci. USA. 2011. **108**, N 36. 14780–14785.
2. Zeidler A., Wezka K., Rowlands R.F., et al. High-pressure transformation of SiO_2 glass from a tetrahedral to an octahedral network: a joint approach using neutron diffraction and molecular dynamics // Phys. Rev. Lett. 2014. **113**. 135501-1–135501-5.
3. Rino J.P., Ebbesjö I., Kalia R.K., Nakano A., Vashishta P. Structure of rings in vitreous SiO_2 // Phys. Rev. B 1993. **47**, N 6. 3053–3062.
4. Yuan X., Cormack A.N. Efficient algorithm for primitive ring statistics in topological networks // Comp. Mater. Sci. 2002. **24**, N 3. 343–360.
5. Grigoriev F.V., Sulimov A.V., Kochikov I., Kondakova O.A., Sulimov V.B., Tikhonravov A.V. High-performance atomistic modeling of optical thin films deposited by energetic processes // Int. J. High Perf. Comp. Appl. 2015. **29**, N 2. 184–192.
6. King S.V. Ring configurations in a random network model of vitreous silica // Nature. 1967. **213**. 1112–1113.
7. Jin W., Kalia R.K., Vashishta P., Rino J.P. Structural transformation in densified silica glass: a molecular-dynamics study // Phys. Rev. B. 1994. **50**, N 1. 118–131.
8. Nosé S. A unified formulation of the constant temperature molecular dynamics methods // J. Chem. Phys. 1984. **81**, N 1. 511–519.
9. Grigoriev F.V., Sulimov A.V., Katkova E.V., Kochikov I.V., Kondakova O.A., Sulimov V.B., Tikhonravov A.V. Full-atomistic nanoscale modeling of the ion beam sputtering deposition of SiO_2 thin films // J. Non-Cr. Sol. 2016. **448**. 1–5.
10. Munetoh S., Motooka T., Moriguchi K., Shintani A. Interatomic potential for Si–O systems using Tersoff parameterization // Comp. Mater. Sci. 2007. **39**, N 2. 334–339.
11. Le Roux S., Jund P. Ring statistics analysis of topological networks: New approach and application to amorphous GeS_2 and SiO_2 systems // Comp. Mater. Sci. 2010. **49**, N 1. 70–83.
12. Pulker H.K. Film deposition methods // Optical Interference Coatings. Berlin: Springer, 2003. 131–153.

Поступила в редакцию
29.10.2017

Ring Statistics in Disordered Solids: A Parallel Algorithm for Clusters with Hundred Thousands of Atoms

F. V. Grigoriev¹, V. B. Sulimov², and A. V. Tikhonravov³

¹ *Research Computing Center, Lomonosov Moscow State University; Leninskie Gory, Moscow, 119992, Russia; Ph.D., Leading Scientist, e-mail: fedor.grigoriev@gmail.com*

² *Research Computing Center, Lomonosov Moscow State University; Leninskie Gory, Moscow, 119992, Russia; Dr. Sci., Head of Laboratory, e-mail: v.sulimov@srcc.msu.ru*

³ *Research Computing Center, Lomonosov Moscow State University; Leninskie Gory, Moscow, 119992, Russia; Dr. Sci., Professor, Director, e-mail: tikh@srcc.msu.ru*

Received October 29, 2017

Abstract: The rings consisting of various number of atoms are basic structural elements in many disordered solids. In this paper, a parallel algorithm for calculating an approximate ring distribution function by the number of atoms is proposed. The algorithm is based on the Monte Carlo method and is applied to SiO₂ clusters consisting of up to 10⁶ atoms. The efficiency of the algorithm is studied using up to 1024 computational cores.

Keywords: structures of glasses and films, molecular dynamics, glassy silicon dioxide, ring statistic.

References

1. S. Kohara, J. Akola, H. Morita, et al., "Relationship between Topological Order and Glass Forming Ability in Densely Packed Enstatite and Forsterite Composition Glasses," *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **108** (36), 14780–14785 (2011).
2. A. Zeidler, K. Wezka, R. F. Rowlands, et al., "High-Pressure Transformation of SiO₂ Glass from a Tetrahedral to an Octahedral Network: A Joint Approach Using Neutron Diffraction and Molecular Dynamics," *Phys. Rev. Lett.* **113**, 135501-1–135501-5 (2014).
3. J. P. Rino, I. Ebbsjö, R. K. Kalia, et al., "Structure of Rings in Vitreous SiO₂," *Phys. Rev. B* **47** (6), 3053–3062 (1993).
4. X. Yuan and A. N. Cormack, "Efficient Algorithm for Primitive Ring Statistics in Topological Networks," *Comp. Mater. Sci.* **24** (3), 343–360 (2002).
5. F. V. Grigoriev, A. V. Sulimov, I. Kochikov, et al., "High-Performance Atomistic Modeling of Optical Thin Films Deposited by Energetic Processes," *Int. J. High Perf. Comp. Appl.* **29** (2), 184–192 (2015).
6. S. V. King, "Ring Configurations in a Random Network Model of Vitreous Silica," *Nature* **213**, 1112–1113 (1967).
7. W. Jin, R. K. Kalia, P. Vashishta, and J. P. Rino, "Structural Transformation in Densified Silica Glass: A Molecular-Dynamics Study," *Phys. Rev. B* **50** (1), 118–131 (1994).
8. S. Nosé, "A Unified Formulation of the Constant Temperature Molecular Dynamics Methods," *J. Chem. Phys.* **81** (1), 511–519 (1984).
9. F. V. Grigoriev, A. V. Sulimov, E. V. Katkova, et al., "Full-Atomistic Nanoscale Modeling of the Ion Beam Sputtering Deposition of SiO₂ Thin Films," *J. Non-Cr. Sol.* **448**, 1–5 (2016).
10. S. Munetoh, T. Motooka, K. Moriguchi, and A. Shintani, "Interatomic Potential for Si–O Systems Using Tersoff Parameterization," *Comp. Mater. Sci.* **39** (2), 334–339 (2007).
11. S. Le Roux and P. Jund, "Ring Statistics Analysis of Topological Networks: New Approach and Application to Amorphous GeS₂ and SiO₂ Systems," *Comp. Mater. Sci.* **49** (1), 70–83 (2010).
12. H. K. Pulker, "Film Deposition Methods," in *Optical Interference Coatings* (Springer, Berlin, 2003), pp. 131–153.