

СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ПОТЕНЦИАЛОВ МЕЖАТОМНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ДЛЯ КРИСТАЛЛИЧЕСКОГО КРЕМНИЯ

В.И. МАЖУКИН^{*}, А.В. ШАПРАНОВ^{*}, А.В. РУДЕНКО[†]

^{*} Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН.
Москва, Россия
e-mail: vim@modhef.ru

[†] Московский физико-технический институт, Государственный университет (МФТИ)
Москва, Россия

Ключевые слова: Кремний, потенциалы взаимодействия, молекулярная динамика, математическое моделирование.

Аннотация. На основе молекулярно-динамического моделирования с помощью полуэмпирических потенциалов Стиллинджера-Вебера (SW), его модификации (SWM), Терсова (T(C), T(D)) EDIP, Эрхарта-Альбе ((EA-1), (EA-2)), KIHS и MIX изучены теплофизические и механические свойства монокристаллического кремния. Сравнение этих потенциалов проведено по следующим характеристикам: температурной зависимости коэффициента линейного расширения и теплоёмкости, зависимости изотермической сжимаемости, температуры и теплоты плавления от давления. Показано, что в широком диапазоне температур и давлений не все потенциалы обеспечивают удовлетворительное поведение исследуемых макроскопических характеристик. Наиболее приемлемыми с этой точки зрения оказались KIHS, SW, MIX и EA-2. Предлагается конструкция нового потенциала MIX в виде линейной комбинации двух потенциалов SWM и KIHS, в итоге дающих потенциал, обладающий свойствами, более приемлемыми для моделирования твёрдого кремния в широком диапазоне давлений и температур.

COMPARATIVE ANALYSIS OF POTENTIALS OF INTERATOMIC INTERACTION FOR CRYSTALLINE SILICON

VLADIMIR I. MAZHUKIN^{*}, ALEXANDR V. SHAPRANOV^{*}
AND ANTON V. RUDENKO[†]

^{*} Keldysh Institute of Applied Mathematics, RAS, Moscow, Russia
e-mail: vim@modhef.ru

[†] Moscow Institute of Physics and Technology, State University (MIPT)
Moscow, Russia

Summary. Thermal and mechanical properties of single crystal silicon are studied by molecular dynamics simulation using semi-empirical potentials Stillinger-Weber (SW), its modification (SWM), Tersoff (T (C), T (D)) EDIP, Erhart-Albe ((EA-1), (EA- 2)), KIHS and

2010 Mathematics Subject Classification: 82D37, 00A71, 93A30,.

Key words and Phrases: Silicon, Interaction potentials, Molecular dynamics, Mathematical modeling.

MIX. Comparison of these potentials is performed by the following characteristics: the temperature dependence of the coefficient of linear expansion and the heat capacity, the pressure dependence of the isothermal compressibility, the melting point and the heat of fusion. It is shown that in a wide range of temperatures and pressures, not all potentials provide satisfactory behavior of studied macroscopic characteristics. From this viewpoint KIHS, SW, MIX and EA-2 are the most acceptable. A new potential MIX is proposed as a linear combination of two potentials SWM and KIHS, eventually giving potential that has properties more suitable for the simulation of solid silicon in a wide range of pressures and temperatures.

1 ВВЕДЕНИЕ

Кремний является одним из наиболее технологически важных материалов. Известно широкое применение монокристаллического кремния в твердотельной электронике в качестве основы интегральных схем и аморфного кремния в качестве одного из компонентов в солнечной энергетике и в ряде других приложений. Несмотря на то, что кремний на сегодняшний день является одним из наиболее хорошо изученных элементов, прогресс в области нанотехнологий поставил перед исследователями новые задачи в исследовании механических и физических свойств полупроводников.

Механика сплошных сред позволяет описывать и решать широкий класс задач из области поверхностной обработки материалов. Однако применительно к задачам моделирования процессов в нанокристаллах размером порядка нескольких нанометров, континуальная механика сталкивается с рядом проблем. Известно, что каждое вещество обладает своей внутренней структурой, которая сказывается на его свойствах. Разрушение, как и неупругое деформирование, сопровождаются изменением внутренней структуры вещества, которое затрудняет описание этих процессов в рамках континуального представления. С появлением нанотехнологий континуальная механика столкнулась с еще одной проблемой, состоящей в стремительном уменьшении размеров объектов¹, требующих для своего описания атомистического подхода.

Молекулярно-динамический подход является надежным инструментом для атомистического описания процессов в материалах. Он может использоваться для определения макропараметров системы – температуры, давления, внутренней энергии, плотности, а также равновесных и неравновесных уравнений состояния и др. С учетом возможностей современной высокопроизводительной вычислительной техники молекулярно - динамическое моделирование, позволяет рассматривать объёмы вещества размером до кубического микрометра, что соответствует примерно миллиарду частиц. При этом вычислительная погрешность может составлять $\approx 1 \div 3\%$. Общая погрешность расчета макропараметров системы зависит от используемого молекулярного потенциала взаимодействия и может достигать 20 - 100%. Качество потенциалов определяется на основе сравнительного анализа рассчитанных механических (изотермический коэффициент объёмного сжатия) и теплофизических (теплоемкость, коэффициент линейного расширения) свойств того или иного вещества с экспериментальными или справочными данными. В связи с чем возрастает актуальность задач по исследованию механических и физических свойств

полупроводников. Несмотря на то, что исследованию свойств кремния посредством молекулярно - динамического моделирования было посвящено множество работ²⁻⁴² сравнение в них, как правило, проводилось в достаточно узком диапазоне температур и давлений

Целью данной работы является исследование качества основных потенциалов взаимодействия, описывающих свойства кристаллического кремния в широком диапазоне внешнего давления и температуры.

2 ПОТЕНЦИАЛЫ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

Межатомное взаимодействие в кремнии более сложное, чем в металлах. Кремний относится к материалам с ковалентным типом связи и имеет ряд структурных особенностей. Так при нормальных условиях кремний обладает структурой алмаза, характеризующейся малой компактностью с координатным числом равным 4, что намного меньше, чем у металлов (8-12). С ростом давления в кремнии формируются новые структуры - простая кубическая, гранецентрированная кубическая с возрастающим координационным числом, но мало отличающимися по энергии. После плавления, жидкий кремний становится металлом с координационным числом около 6 и плотностью превышающей плотность твердой фазы. Наличие этих особенностей делает задачу построения межатомного потенциала взаимодействия для кремния не простой задачей. В настоящее время существует много подходов к построению межатомных потенциалов для материалов с ковалентными связями.

Потенциал Стиллинжера - Вебера (Stillinger-Weber, SW). Одним из первых и успешно используемых потенциалов для моделирования свойств и процессов в кристаллических полупроводниках является потенциал Stillinger-Weber¹¹. Аналитическое выражение потенциала SW состоит из 2-х слагаемых, учитывающих двухчастичное и трехчастичное взаимодействие:

$$E = \frac{1}{2} \sum_{i,j} \phi(r_{ij}) + \sum_{i,j,k} \left[\left(h(r_{ij}, r_{ik}) + h(r_{ji}, r_{jk}) + h(r_{ki}, r_{kj}) \right) \left(\cos \theta_{ijk} + \frac{1}{3} \right)^2 \right] \quad (1)$$

$$\phi(r) = \begin{cases} A(Br^{-p} - 1) \exp[(r-a)^{-1}], & r < a \\ 0, & r \geq a \end{cases}, \quad (2)$$

$$h(r_{ij}, r_{ik}) = \begin{cases} \lambda \exp[\gamma(r_{ij} - a)^{-1} + \gamma(r_{ik} - a)^{-1}] & r_{ij} < a, \quad r_{ik} < a \\ 0, & r_{ij} \geq a \\ 0, & r_{ik} \geq a \end{cases} \quad (3)$$

где E - полная энергия системы, приходящаяся на атом, $\phi(r_{ij})$ - функция двухчастичного взаимодействия, θ_{ijk} - угол между гранями ij и ik , r_{ij} - единичный вектор, направленный от атома i к атому j , a - конечный заранее определённый радиус обрезания, $h(r_{ij}, r_{ik})$ - затухающая функция, критический радиус которой находится между первым и вторым ближайшим соседом.

Потенциал SW обеспечивает наиболее устойчивую конфигурацию при $\cos \theta_{ijk} = -1/3$, когда углы максимально близки к углам в алмазоподобной тетраэдрической структуре. Потенциал содержит 6 положительных подгоночных коэффициентов: $A=7.0496$, $B=0.60222$, $p=4$, $a=1.80$, $\lambda=21.0$, $\gamma=1.20$. Их подбор был осуществлен из требования удовлетворительного воспроизведения энергии когезии, параметра решетки для кристаллического кремния и температуры плавления при нормальных условиях $T_m = 1695^\circ K$. Для сравнения экспериментальное значение равновесной температуры равняется $T_m = 1685^\circ K$.

Потенциал SW позволяет получать довольно реалистичное описание свойств кристаллического кремния. Однако жесткая привязка к тетраэдрической структуре приводит к возникновению проблем с переносимостью потенциала. Он не может правильно определять энергию не тетрагональных структур, возникающих в полупроводниках с ростом давления. Более того, данный потенциал, моделируя жидкий кремний, продолжает сохранять свойства, присущие кристаллической решётке твёрдого кремния, что приводит к неадекватному описанию жидкой и газообразной фаз. Таким образом, потенциал SW сложно использовать при условиях отличных от тех, для которых он был создан.

Модифицированный потенциал Стиллинджера-Вебера (SWM). Недавно была предложена альтернативная параметризация потенциала Стиллинджера-Вебера⁴³, позволяющая улучшить эластические характеристики данного потенциала, сместив при этом точку плавления. Коэффициенты, предложенные при таком моделировании: $A=19.0$, $B=0.65$, $p=3.5$, $a=1.80$, $\lambda=31.0$, $\gamma=1.10$.

Потенциалы Терсова (Tersoff, (T)). Вторым, более сложным классом потенциалов являются потенциалы Tersoff (T)¹⁶⁻¹⁸, в основу которых положена гипотеза порядка связей, согласно которой сила связей между двумя атомами не постоянна, а зависит от локального окружения. В отличие от потенциала SW, потенциалы (T) не имеют абсолютного минимума для тетраэдрических углов и включают в себя трёхчастичное взаимодействие неявно. Внешне потенциал T имеет вид парного потенциала, состоящего из двух слагаемых:

$$E = \frac{1}{2} \sum_i \left[\sum_{j \neq i} [f_C(r_{ij}) [a_{ij}(r_{ij}) f_R(r_{ij}) + b_{ij}(r_{ij}) f_A(r_{ij})]] \right] \quad (4)$$

$$f_R(r) = A e^{-\lambda_1 r} \quad (5)$$

$$f_A(r) = -B e^{-\lambda_2 r} \quad (6)$$

$$f_C(r) = \left\{ \begin{array}{l} 1, \quad r \leq R - D \\ \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \sin\left(\frac{\pi(r-R)}{2D}\right), \quad R - D < r < R + D \\ 0, \quad r \geq R + D \end{array} \right\} \quad (7)$$

где E - полная энергия системы, приходящаяся на атом, $f_R(r)$, $f_A(r)$, $f_C(r)$ - функции отталкивания, притяжения и обрезания соответственно, коэффициенты $a_{ij}(r_{ij})$ и $b_{ij}(r_{ij})$ задают трёхчастичное взаимодействие следующим образом:

$$a_{ij} = (1 + \alpha^n \eta_{ij}^n)^{-1/2n}, \quad \eta_{ij} = \sum_{k \neq i, j} f_C(r_{ik}) \exp[\lambda_3^m (r_{ij} - r_{ik})^m], \quad (8)$$

$$b_{ij} = (1 + \beta^n \zeta_{ij}^n)^{-1/2n}, \quad \zeta_{ij} = \sum_{k \neq i, j} f_C(r_{ik}) g(\theta_{ijk}) \exp[\lambda_3^m (r_{ij} - r_{ik})^m],$$

$$g(\theta) = \gamma \left(1 + \frac{c^2}{d^2} - \frac{c^2}{d^2 + (h - \cos \theta)^2} \right) \quad (9),$$

где r_{ij} - единичный вектор, направленный от атома i к атому j , θ_{ijk} - угол между гранями ij и ik , $g(\theta_{ijk})$ - угловая функция, ζ_{ij} - эффективное координационное число.

Идея создания такого потенциала принадлежит Абелю¹⁵ и называется формализмом Терсова-Абеля. Некоторые параметризации были предложены самим Терсовым, наиболее успешными из которых оказались Tersoff (T(C), T(D))^{17,18}. Потенциалы Терсова использовались многими исследователями^{2, 12-14, 22, 44-45}. Одним из серьёзных выявленных недостатков этих потенциалов является сильно завышенное значение температуры плавления.

Модифицированные потенциалы Терсова (T(ZBL), T(C), T(D)). Известна модификация потенциала Терсова, T(ZBL), учитывающая кулоновское взаимодействие заряженных частиц¹⁹. В ней потенциал представляется в следующем виде:

$$E^{ZBL} = \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} \left\{ (1 - f_F(r_{ij})) U_{ij}^{ZBL} + f_F(r_{ij}) [f_C(r_{ij}) (a_{ij}(r_{ij}) f_R(r_{ij}) + b_{ij}(r_{ij}) f_A(r_{ij}))] \right\}, \quad (10)$$

$$f_F(r_{ij}) = \frac{1}{1 + \exp[-A_F(r_{ij} - r_C)]}, \quad U_{ij}^{ZBL} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r_{ij}} \varphi\left(\frac{r_{ij}}{a_U}\right),$$

$$a_U = \frac{0.8854 a_0}{Z_1^{0.23} + Z_2^{0.23}}$$

$$\varphi(x) = 0.1818e^{-3.2x} + 0.5099e^{-0.9423x} + 0.2802e^{-0.4029x} + 0.02817e^{-0.2016x} \quad (11)$$

где U_{ij}^{ZBL} - кулоновский потенциал экранирования, Z_1 и Z_2 - количество протонов взаимодействующих атомов, a_U - радиус экранирования, ϵ_0 - электростатическая постоянная, e - заряд электрона и a_0 - боровский радиус, $r_C = 0.95$ - радиус обрезания и $A_F = 14$ - параметр.

Модификация T(ZBL) применена к описанию потенциалов T(C), T(D)¹⁸.

Модифицированные потенциалы Терсова: Erhart-Albe (EA-1, EA-2), KINS. На основе формализма Терсова-Абеля были разработаны и другие потенциалы: потенциал Erhart-Albe (EA-1, EA-2)²⁴ и потенциал KINS³⁷ позволившие понизить температуру

плавления и приблизить результаты к экспериментальным. Параметризация потенциалов представлена в таблице 1.

В потенциале KIHS дополнительно были произведены следующие модификации исходного потенциала Терсова. Функция обрезания $f_c(r)$, угловая функция $g(\theta)$ и коэффициенты b_{ij} представляются в виде:

$$f_c(r) = \begin{cases} 1, & r \leq R - D \\ \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \sin\left(\frac{\pi}{2} \frac{(r-R)}{D}\right) - \frac{1}{8} \sin\left(\frac{\pi(r-R)}{D}\right) \cos\left(\frac{\pi(r-R)}{2D}\right), & R - D < r < R + D \\ 0, & r \geq R + D \end{cases} \quad (12)$$

$$g(\theta) = \gamma \left[1 + \left(\frac{c^2}{d^2} - \frac{c^2}{d^2 + (h - \cos \theta)^2} \right) (1 + u * \exp(-v(h - \cos \theta)^2)) \right]$$

$$b_{ij} = (1 + \beta^n \zeta_{ij}^n)^{-1/2n}$$

Данные параметризации потенциалов, основанных на формализме Терсова-Абея, представлены в таблице 1:

	T(C) ¹⁷	T(D) ¹⁸	EA-1 ²⁴	EA-2 ²⁴	KIHS ³⁷
m	3	3	1	1	1
λ_3	1,7322	0	0	0	1,33682338
c	100390	100390	2,00494	1,13681	1902810,68
d	16,218	16,217	0,81472	0,63397	1000
$-h$	0,59826	0,59825	0,259	0,335	0,365
n	0,78743	0,78743	1	1	1
β	$1,099 \cdot 10^{-7}$	$1,1 \cdot 10^{-7}$	1	1	0,20173476
λ_2	1,7322	1,73222	1,53810493	1,66590998	1,3457970
B	471,18	471,18	219,521624	361,55705	121,00047
R	2,85	2,85	2,82	2,90	3,0
D	0,15	0,15	0,14	0,15	0,3
γ	1	1	0,114354	0,09253	1
λ_1	2,4799	2,4799	2,83318929	2,61547866	3,2300135
A	1830,8	1830,8	2145,7128	1899,38576	3281,5905
η	0,78743	0,78743	1	1	0,938105506
u	0	0	0	0	1,0
v	-	-	-	-	26,0

Таблица 1: Коэффициенты параметризации потенциалов, основанных на формализме Терсова-Абея

Потенциалы EDIP. Потенциалы EDIP (Environment-Dependent Interatomic Potential)²⁵⁻²⁷, объединяют подходы, предложенные Stillinger-Weber, и Tersoff, включают двухчастичные и трёхчастичные взаимодействия, зависящие от окружения:

$$E = \frac{1}{2} \sum_i \left[\sum_{j \neq i} V_2(r_{ij}, Z_i) + \sum_{j \neq i} \sum_{k \neq i, k > j} V_3(r_{ij}, r_{ik}, Z_i) \right] \quad (13)$$

где E - полная энергия системы, приходящаяся на атом, θ_{ijk} - угол между гранями ij и ik , r_{ij} - единичный вектор, направленный от атома i к атому j , a - радиус обрезания, где Z_i - координационное число, $V_2(r, Z)$ - функция двухчастичного взаимодействия, $V_3(r_{ij}, r_{ik}, Z_i)$ - функция трёхчастичного взаимодействия

$$V_2(r, Z) = A \left[\left(\frac{B}{r} \right)^\rho - e^{-\beta Z^2} \right] \exp\left(\frac{\sigma}{r-a} \right), \quad V_3(r_{ij}, r_{ik}, Z_i) = g(r_{ij})g(r_{ik})h(l_{ijk}, Z_i),$$

$$Z_i = \sum_{m \neq i} f(r_{im})$$

$$f(r) = \begin{cases} 1, & r < c \\ \exp\left(\frac{\alpha}{1 - \left(\frac{r-c}{a-c} \right)^{-3}} \right), & c < r < a \\ 0, & r > a \end{cases},$$

$$g(r) = \exp\left(\frac{\gamma}{r-a} \right), \quad h(l, Z) = \lambda \left[1 - e^{-Q(Z)(l+\tau(Z))^2} \right] + \eta Q(Z)(l + \tau(Z))^2.$$

$$\tau(Z) = u_1 + u_2(u_3 e^{-u_4 Z} - e^{-2u_4 Z}), \quad Q(Z) = Q_0 e^{-\mu Z}$$

где $f(r)$, $g(r)$, $h(l, Z)$ - функция обрезания, радиальная и угловая функции соответственно.

Несмотря на свою чрезвычайно сложную параметризацию ($A=7.9821730$, $a=3.1213820$, $\lambda=1.4533108$, $Q_0=312.1341346$, $\alpha=3.1083847$, $B=1.5075463$, 2.5609104 , $\gamma=1.1247945$, $\mu=0.6966326$, $\rho=1.2085196$, $\sigma=0.5774108$, $\eta=0.2523244$, $\beta=0.0070975$, $u_1=-0.165799$, $u_2=32.557$, $u_3=0.286198$, $u_4=0.66$), состоящую из 17 коэффициентов, потенциал превосходно описывает многие свойства кремния, в частности обладает хорошей переносимостью структур кремниевых дефектов (как точечных, так и сдвигов), лучше чем SW описывает аморфный кремний²⁸.

Одно из главных преимуществ потенциала EDIP состоит в неплохом воспроизведении эластических характеристик кремния и предсказании температуры плавления, близкой к экспериментальному значению.

3 ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ И ЧИСЛЕННЫЙ МЕТОД РЕШЕНИЯ

3.1 Система уравнений

В основе метода молекулярной динамики (МД) лежит модельное представление о многоатомной молекулярной системе, в которой все атомы представлены материальными точками, движение которых описывается в классическом случае уравнениями Ньютона. Таким образом, имеется N точечных частиц, каждая из которых имеет массу, радиус-вектор и скорость соответственно $m_i, \vec{r}_i, \vec{v}_i$, где $i = 1 \dots N$ и взаимодействует с остальными посредством сил $\vec{F}_i = -\frac{\partial U(\vec{r}_1 \dots \vec{r}_N)}{\partial \vec{r}_i}$. Взаимодействие между атомами является потенциальным, и поэтому сила \vec{F}_i записана как градиент потенциальной энергии системы $U(\vec{r}_1 \dots \vec{r}_N)$. Взаимодействие с внешними полями осуществляется посредством силы \vec{F}_i^{ext} .

Эволюция данной модели будет описываться системой $2N$ обыкновенных дифференциальных уравнений движения:

$$\begin{cases} m_i \frac{d\vec{v}_i}{dt} = \vec{F}_i + \vec{F}_i^{ext} \\ \frac{d\vec{r}_i}{dt} = \vec{v}_i \end{cases} \quad (14)$$

$i = 1 \dots N$

В качестве функции $U(r_1, \dots, r_n)$ могут рассматриваться эмпирические и полуэмпирические потенциалы. Имея некоторое количество параметров модели, можно воспроизвести с некоторой точностью различные теплофизические и механические характеристики, проанализировать процессы фазовых переходов и критические явления. Однако вопрос о пределах применимости в конкретных условиях для эмпирических и полуэмпирических потенциалов всегда остаётся открытым.

Для интегрирования системы уравнений (14) требуется знание координат и скоростей $(\vec{r}_i, \vec{v}_i)|_{t=0}$ в начальный момент времени $t = 0$ всех N частиц.

3.2 Разностная аппроксимация и вычислительный алгоритм

Существенной особенностью молекулярно-динамического моделирования является необходимость рассчитывать траектории огромного количества частиц. Как оптимальный компромисс между вычислительной эффективностью и требованиями точности, устойчивости широкое распространение в молекулярно-динамическом моделировании получил алгоритм Верле⁴⁶ в его наиболее удобной, так называемой, скоростной форме, обеспечивающая 4-й порядок точности по координате и 2-й по скорости.

Молекулярно-динамическое моделирование механических и теплофизических свойств монокристаллического кремния в широком диапазоне значений температуры и давления осуществлялось с использованием прикладного пакета LAMMPS (Large-scale

Atomic/ Molecular Massively Parallel Simulator)⁴⁷, получивший в последние годы широкое распространение. В нем реализована поддержка многих парных и многочастичных короткодействующих потенциалов, есть возможность записи атомных конфигураций в текстовый файл, а также встроены термостаты и баростаты.

В процессе моделирования использовались различные статистические ансамбли: микроканонический (NVE), где остаются фиксированными число частиц N , объем V и полная энергия E , канонический (NVT), где вместо полной энергии фиксированы только кинетическая энергия молекул (температура), и изотермически-изобарический (NPT), обеспечивающий постоянное давление. Корректировка скорости (для NVT) и давления (для NPT) осуществлялась в них с помощью термостата и баростата Берендсена. Соответственно, для определения температурных зависимостей коэффициента линейного расширения $\alpha_l(T)$, коэффициента теплоемкости $C_p(T)$ в течение всего процесса вычислений использовался баростат, поддерживающий постоянное давление $P=0$. Для определения зависимости сжимаемости от давления (изотермическая сжимаемость) использовался термостат, поддерживающий температуру $T=300$ K. В расчетах для определения теплоты плавления для фиксированных значений температуры плавления и давления они использовались совместно.

4 РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ

Вычисления всех величин производились для кремния с алмазоподобной решёткой и постоянной решётки $A = 5^\circ.43$ с периодическими граничными условиями на границе (трёхмерная задача). Шаг интегрирования был взят равным 2 фемтосекундам. Количество атомов моделируемого монокристалла кремния в однофазных системах – 8000, в двухфазных (в расчетах по определению температуры плавления) - 16000. Для определения механических и теплофизических характеристик и параметров использовались следующие потенциалы: Stillinger-Weber SW¹¹, его модификация SWM⁴³, Tersoff (T(C), T(D))^{17,19}, EDIP²⁶, Erhart-Albe (EA-1, EA-2)²⁴, KINS³⁷ и, предложенный авторами потенциал MIX, являющийся линейной комбинацией потенциалов KINS и SWM: $MIX=(31KINS+SWM)/32$.

Сравнение результатов моделирования между собой и экспериментальными данными^{48,49} позволяют оценить наиболее приемлемый потенциал взаимодействия, пригодный для описания процессов в твердокристаллическом кремнии.

4.1 Теплофизические характеристики

В качестве теплофизических характеристик рассматривались температурные зависимости коэффициента линейного расширения $\alpha_l(T)$ и молярной изобарной теплоемкости $C_p(T)$.

Теплоемкость кремния $C_p(T)$ и коэффициент линейного расширения $\alpha_l(T)$ рассчитывались в одном вычислительном эксперименте. Использовалась кубическая расчетная область, содержащая монокристалл модельного кремния с алмазоподобной решеткой из 8000 атомов и периодическими граничными условиями по всем трем направлениям. Поддерживая баростатом нулевое среднее давление, система нагревалась с $T=300$ K до $T=1600$ K с постоянной скоростью 0.375 K/нс. Такая скорость

нагрева была достаточной для того, чтобы система оставалась термодинамически равновесной. Выбор диапазона нагрева $300 \div 1600\text{K}$ был обусловлен используемыми справочными данными^{42,48}, принятыми в качестве эталонных для сравнения. Снимались две температурные зависимости: энтальпии $H(T) = E + PV$ и линейного размера $l(T)$. В данном вычислительном эксперименте энтальпия совпадала с внутренней энергией $H(T) = E(T)$, поскольку он проводился при постоянном нулевом давлении $P = 0$. Далее полученные температурные зависимости аппроксимировались полиномами $\tilde{H}(T)$ и $\tilde{l}(T)$. Полиномов четвёртой степени оказалось достаточно для достижения требуемой точности.

Температурная зависимость теплоёмкости $C_p(T)$ определялась дифференцированием аппроксимационной функции для энтальпии:

$$C_p(T) = \left(\frac{\partial \tilde{H}(T)}{\partial T} \right)_p.$$

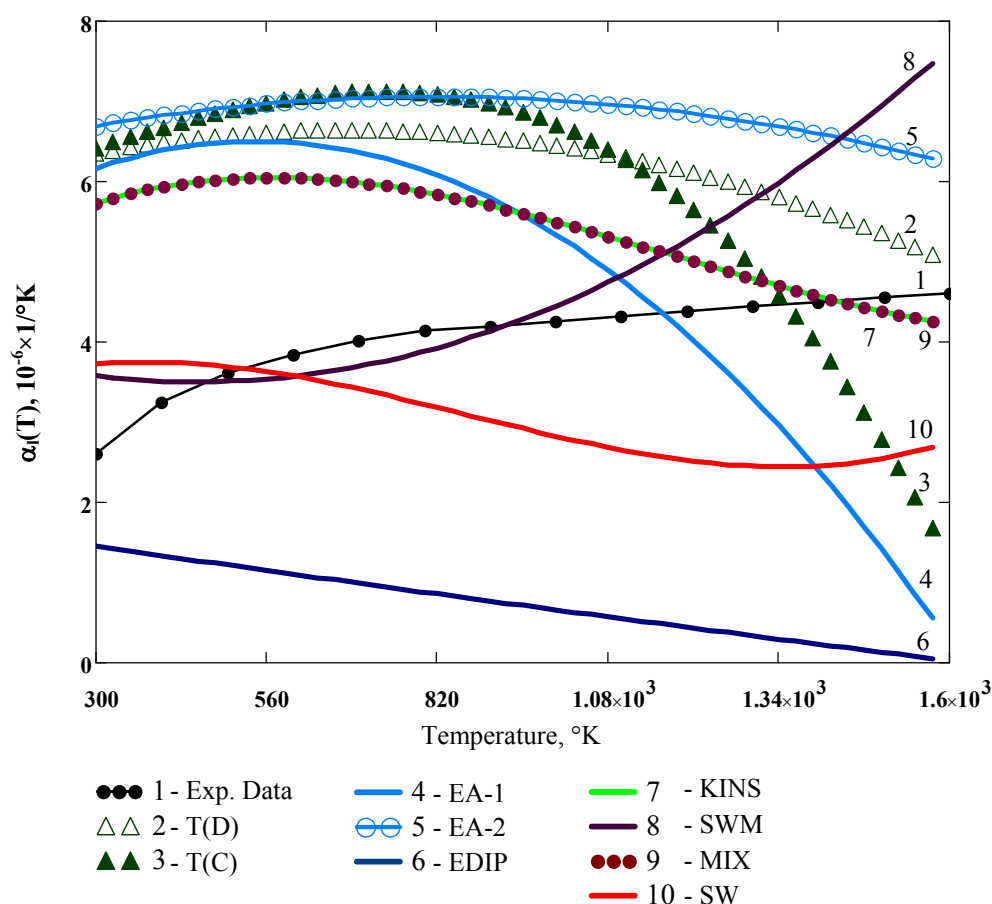


Рис. 1. Температурная зависимость коэффициента линейного расширения $\alpha_l(T)$ в диапазоне 300 - 1600 К при давлении $P=0$

Линейное расширение определялось соответственно по формуле $\alpha_l(T) = \frac{1}{\tilde{l}(T)} \left(\frac{\partial \tilde{l}(T)}{\partial T} \right)_P$. $\alpha_l(T)$ – это величина, характеризующая относительную величину изменения линейных размеров тела с увеличением температуры на 1 К при постоянном давлении.

Графическое представление результатов моделирования коэффициента линейного расширения кремния для различных потенциалов взаимодействия в температурном диапазоне 300 - 1600 К приведено на рис. 1. Особенности рассматриваемой характеристики состоят в следующем. Экспериментальная зависимость $\alpha_l(T)$ ⁴⁸ носит возрастающий характер. Как следует из расчетных кривых минимальное отклонение от экспериментальной кривой не превышающей 40% обеспечивает только потенциал *WS*, а возрастающий характер $\alpha_l(T)$ передает только потенциал *WSM*. В области высоких температур хорошее совпадение с экспериментальными данными обеспечивает потенциал *KINS* и, полностью с ним совпадающий, *MIX*.

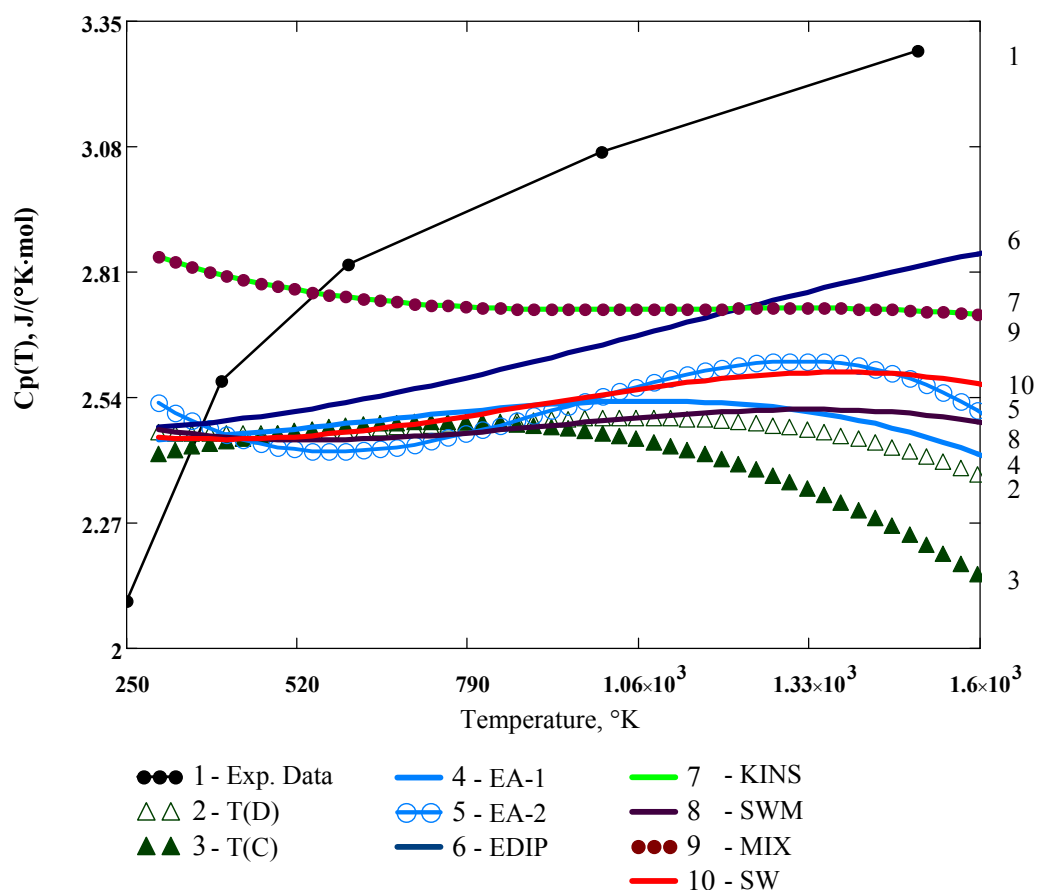


Рис. 2. Температурная зависимость теплоёмкости $C_p(T)$ в диапазоне 300 К - 1600 К при давлении $P=0$

4.2 Механические характеристики

В качестве механической характеристики кристаллического кремния рассматривалась сжимаемость или объемная упругость $k(P)$, характеризующая свойство вещества изменять свой объём при изменении внешнего давления (или другими словами, при изменении напряжений в веществе). Количественно сжимаемость характеризуется величиной $k(P)$, Па^{-1} .

Величина обратная сжимаемости называется модулем объемной упругости $K(P) = 1/k(P)$, $[\text{Па}]$. В зависимости от типа деформации различают изотермическую $k_T(P) = -\frac{1}{V} \left(\frac{dV}{dP} \right)_T$ и адиабатическую сжимаемости $k_S(P) = -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial P} \right)_S$. В данном исследовании под сжимаемостью $k(P)$ подразумевается изотермическая сжимаемость $k_T(P)$:

$$k(P) = - \left(\frac{d \ln V}{dP} \right)_T = - \frac{1}{V} \left(\frac{dV}{dP} \right)_T = \frac{1}{K(P)}$$

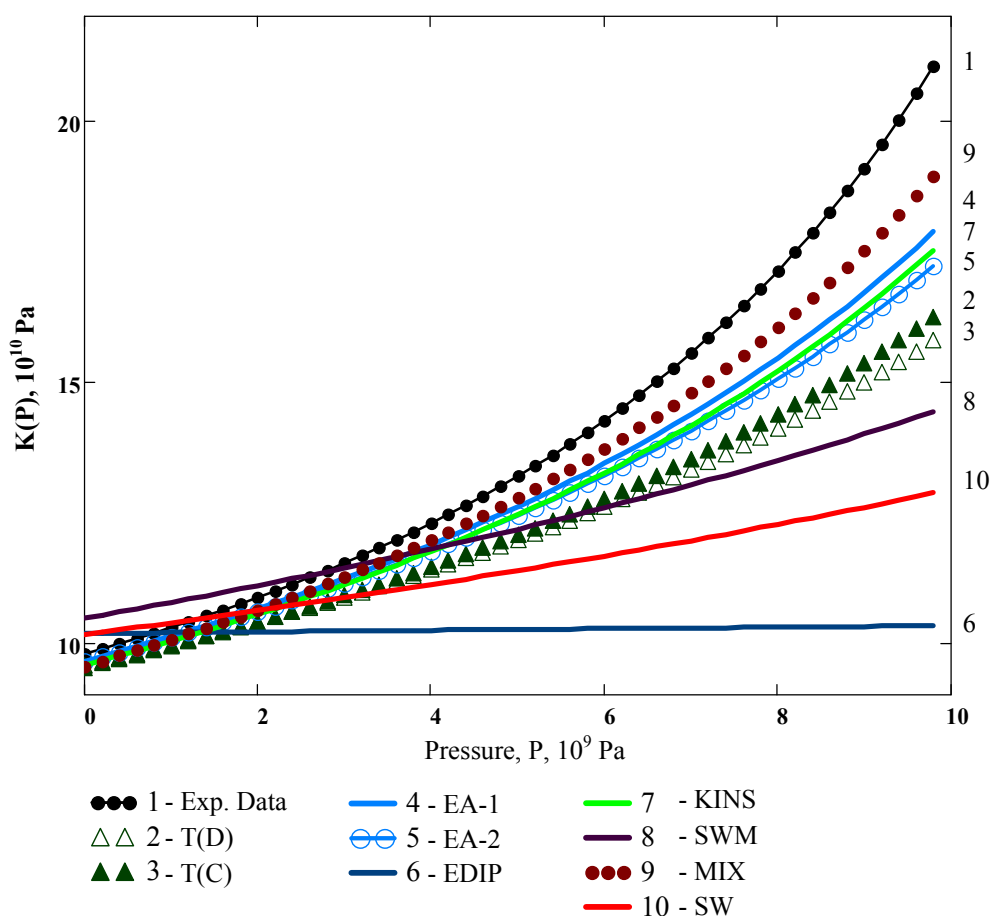


Рис. 3. Зависимость изотермической сжимаемости от давления при $T = 300\text{K}$

Для сравнения с вычислительным экспериментом были использованы справочные данные для изотермической сжимаемости при температуре $T = 300 \text{ K}$ ^[48]. Кубическая расчетная область, аналогичная описанной в предыдущем пункте, с помощью термостата удерживалась при постоянной температуре $T = 300 \text{ K}$.

При этом с помощью баростата выставлялись желаемые значения давления в диапазоне от 0 до 10^{10} Па (в данном эксперименте были выбраны пять значений). Для выбранной величины внешнего давления система подвергалась релаксации до выхода всех величин на стационарные значения. После этого снималось значение объема кубика, установившееся при заданном давлении. Таким образом была получена зависимость объема от давления при постоянной температуре в диапазоне давлений $0 \div 10^{10} \text{ Па}$. Далее эта зависимость аппроксимировалась полиномом четвертой степени и после его дифференцирования получали $k(P)$.

Графическое представление результатов моделирования модуля объемной упругости $K(P)$ для различных потенциалов взаимодействия в диапазоне давлений $0 - 110^{10}, \text{ Па}$ приведено на рис. 3. Наилучшее совпадение с экспериментальными данными для всех значений давления показала предложенная комбинация потенциалов *MIX*. Несколько меньшую точность показали потенциалы *EA-1* и *KHS*. Наибольшая погрешность отмечается у потенциалов *EDIP*, *SW* и *SWM*.

4.3 Характеристики фазового перехода плавление - кристаллизация

Температура плавления $T_m(P)$. Одной из важнейших теплофизических характеристик вещества является равновесная температура плавления – температура фазового равновесия, при которой бесконечно долго могут сосуществовать кристаллическая и жидкая фазы, находящиеся в контакте. Для определения температуры плавления кремния с использованием различных потенциалов взаимодействия, был проведен следующий вычислительный эксперимент. Расчетная область в форме параллелепипеда разбивалась на две равных части (по 8000 частиц в каждой части), в одной из которых находился твердый кремний, в другой – жидкий при одинаковых температуре и давлении. Отключив термостат, но оставив включенным баростат, велись наблюдения постепенного смещения межфазной границы области.

Если первоначальная температура была ниже равновесной температуры плавления, то на фазовом фронте начинается процесс кристаллизации, за счет которого в системе происходит выделение теплоты фазового перехода, в результате чего образец нагревается. По достижении фазового равновесия процесс останавливается, и температура образца флуктуирует вокруг равновесной температуры плавления. При этом понятно, что первоначальная температура в эксперименте должна быть достаточно близка к температуре плавления. Иначе, произойдет плавление или кристаллизация всего образца, и цель не будет достигнута. При проведении данного эксперимента отбраковывались также конечные стационарные состояния, в которых количество одной фазы превышало 75%. Это делалось для того, чтобы исключить влияние поверхностных эффектов на равновесную температуру плавления.

Полученные результаты моделирования, Рис.4, показали, что они хорошо коррелируют с результатами, полученные другими авторами⁴¹ в области малых давлений, и могут быть обобщены на более широкий диапазон давлений $1 \div 10^{10} \text{ Па}$.

Экспериментально установлено ⁴⁸, что температура плавления кремния с ростом давления падает, а не растет как у металлов. Все потенциалы взаимодействия показали ниспадающий характер зависимости $T_m(P)$. Наилучшее совпадение с экспериментальными данными показали потенциалы SW, MIX и EDIP. Наибольшее отличие от экспериментальных данных были получены для SWM, T(C), T(D), KINS и EA-1.

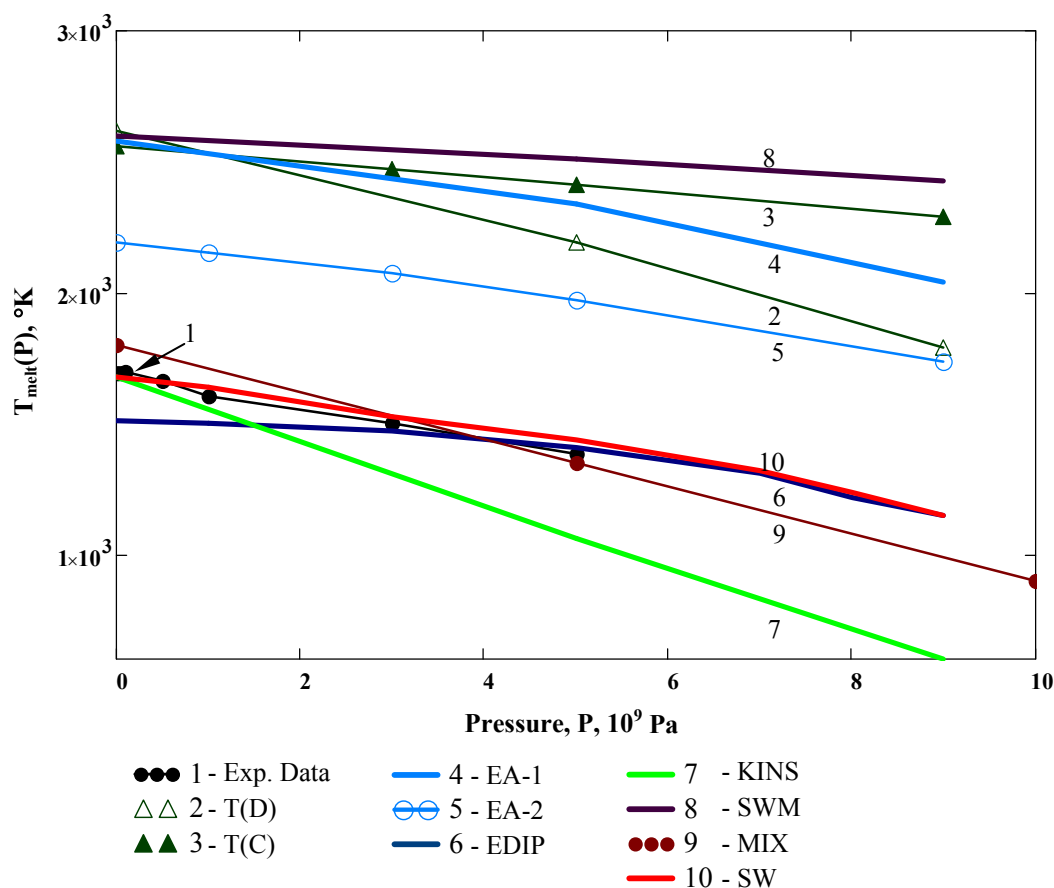


Рис. 4. Зависимость температуры плавления от давления в диапазоне до 100 кБар

Теплота плавления $L_m(P)$.

Теплотой плавления называется количество теплоты, которое необходимо сообщить одной единице массы кристаллического вещества в равновесном изобарно-изотермическом процессе, чтобы перевести его из твёрдого (кристаллического) состояния в жидкое (то же количество теплоты выделяется при кристаллизации вещества). Она определяется следующей формулой:

$$L_m(P) = H_\ell(T_m(P)) - H_s(T_m(P)),$$

где $T_m(P)$ - температуре плавления для данного давления, H_ℓ , H_s - энтальпии жидкости и твёрдого тела соответственно. Соответственно, для определения теплоты

плавления при заданном давлении необходимо провести два эксперимента: с жидким кремнием и с твёрдым кремнием при температуре плавления (она была определена в предыдущем эксперименте).

Для вычисления энтальпии, предварительно производилось усреднение значений давления, объёма и энергии, входящих в выражение для энтальпии. Так как у энергии наблюдалась относительно небольшая флуктуация, а у V и P значительная, то погрешность итоговой энтальпии в основном определялась погрешностью $V \cdot P$. В проведённом вычислительном эксперименте погрешность энтальпии составила порядка 7%.

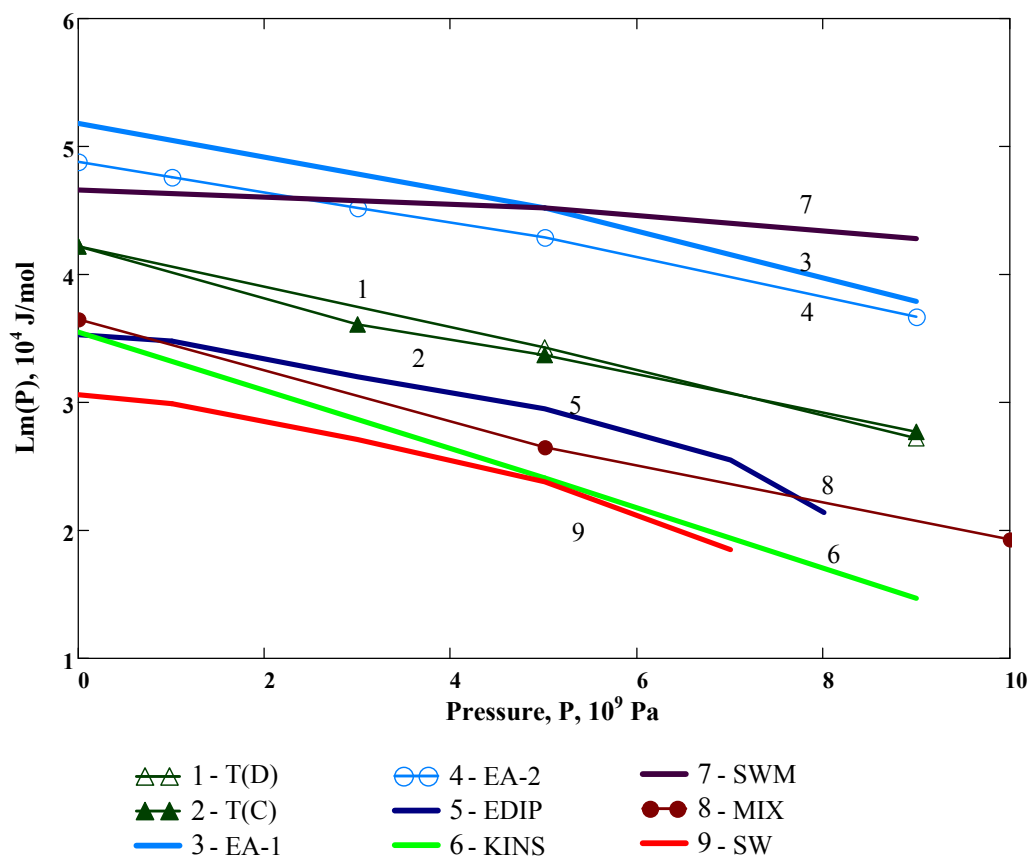


Рис. 5. Зависимость теплоты плавления от давления в диапазоне $1 \div 10^{10}$, Па

Графическое представление результатов моделирования теплоты плавления $L_m(P)$ для различных потенциалов взаимодействия в диапазоне давлений $1 - 10^{10}$, Па приведено на рис. 5. Моделирование показало ниспадающий характер зависимости $L_m(P)$ с ростом давления для всех потенциалов взаимодействия. К сожалению в литературе отсутствуют экспериментальные данные о зависимости теплоты плавления от давления. Известно лишь значение L_m при нормальных условиях равно $49,8$ кДж/моль. Наибольшее совпадении с экспериментальным значением показали расчеты с потенциалами EA-1, EA-2 и SWM, наименьшее - SW, KINS и EDIP. Предложенный

потенциал MIX значительно уступает SWM, но показывает несколько лучшие результаты, чем KINS.

Exp.D ⁴⁸	SW ¹¹	T(C) ¹⁷	T(D) ¹⁸	EDIP ²⁶	EA-1 ²⁴	EA-2 ²⁴	SWM ⁴³	KIHS ³⁷	MIX
$\alpha_l, 10^{-6}1/^\circ K, \quad T = 300^\circ K$									
2,54	3,723	6,422	6,352	1,452	6,167	6,694	3,578	6,428	5,743
$\alpha_l, 10^{-6}1/^\circ K, \quad T = 800^\circ K$									
4,15	3,224	7,104	6,62	0,88	6,138	7,058	3,882	5,842	5,87
$\alpha_l, 10^{-6}1/^\circ K, \quad T = 1200^\circ K$									
4,38	2,524	5,719	6,125	-0,33	4,093	6,589	5,266	5,112	5,029
$\alpha_l, 10^{-6}1/^\circ K, \quad T = 1600^\circ K$									
4,61	2,761	1,266	5,001	0,023	0,251	6,226	7,665	3,191	4,224
$C_p, J/(^\circ K \cdot mol), \quad T = 400^\circ K$									
2,577	2,456	2,42	2,465	2,477	2,449	2,469	2,472	2,822	2,805
$C_p, J/(^\circ K \cdot mol), \quad T = 1000^\circ K$									
3,07	2,546	2,357	2,496	2,653	2,53	2,576	2,49	2,475	2,729
$C_p, J/(^\circ K \cdot mol), \quad T = 1500^\circ K$									
3,287	2,587	2,156	2,419	2,823	2,461	2,592	2,504	2,72	2,727
$K, 10^{10} Pa, \quad P = 0$									
97,9	10,16	9,56	9,52	10,18	9,64	9,64	10,47	9,57	9,55
$K, 10^{10} Pa, \quad P = 5 \cdot 10^9 Pa$									
13,19	11,38	11,97	12,07	10,25	12,60	12,44	12,15	12,45	12,78
$K, 10^{10} Pa, \quad P = 1 \cdot 10^{10} Pa$									
21,61	12,94	16,00	16,47	10,32	18,19	17,50	14,54	17,82	19,31
$T_{melt}, ^\circ K, \quad P = 0$									
1685	1680	2620	2560	1510	2580	2190	2600	1680	1800
$T_m, ^\circ K, \quad P = 3 \cdot 10^9 Pa$									
1503	1525	2275	2470	1470	2435	2075	2540	1315	1530
$T_m, ^\circ K, \quad P = 5 \cdot 10^9 Pa$									
1383	1440	2190	2410	1410	2340	1970	2510	1060	1350
$T_m, ^\circ K, \quad P = 9 \cdot 10^9 Pa$									
-	1150	1790	2290	1150	2040	1735	2425	600	990
$L_m, kJ/mol, \quad P = 0$									
50,2	30,6	42,15	42,2	35,3	51,8	48,8	46,6	35,5	36,5

Табл. 2. Сравнение с экспериментальными данными характеристик твердотельного кремния рассчитанных с использованием исследуемых потенциалов.

SW ¹¹	T(C) ¹⁷	T(D) ¹⁸	EDIP ²⁶	EA-1 ²⁴	EA-2 ²⁴	SWM ⁴³	KIHS ³⁷	MIX
$\alpha_i, 10^{-6}1/^\circ K, \quad T = 300^\circ K$								
+47%	+153%	+150%	+42%	+143%	+164%	+41%	+153%	+126%
$\alpha_i, 10^{-6}1/^\circ K, \quad T = 800^\circ K$								
-22%	+71%	+60%	-79%	+48%	+70%	-6%	+41%	+41%
$\alpha_i, 10^{-6}1/^\circ K, \quad T = 1200^\circ K$								
-42%	+30%	+40%	108%	-7%	+50%	+20%	+17%	+15%
$\alpha_i, 10^{-6}1/^\circ K, \quad T = 1600^\circ K$								
-40%	-73%	+8%	100%	-95%	+35%	+66%	-31%	-8%
$C_p, J/(^\circ K \cdot mol), \quad T = 400^\circ K$								
-5%	-6%	-4%	-4%	-5%	-4%	-4%	+9%	+9%
$C_p, J/(^\circ K \cdot mol), \quad T = 1000^\circ K$								
-17%	-23%	-19%	16%	-18%	-16%	-19%	-19%	-11%
$C_p, J/(^\circ K \cdot mol), \quad T = 1500^\circ K$								
-21%	-34%	-26%	14%	-25%	-21%	-24%	-17%	-17%
$K, 10^{10} Pa, \quad P = 0$								
+4%	-2%	-3%	+4%	-2%	-2%	+7%	-2%	-2%
$K, 10^{10} Pa, \quad P = 5 \cdot 10^9 Pa$								
-14%	-9%	-8%	-22%	-4%	-6%	-7%	-6%	-3%
$K, 10^{10} Pa, \quad P = 10^{10} Pa$								
-40%	-26%	-24%	-52%	-16%	-19%	-32%	-18%	-10%
$T_m, ^\circ K, \quad P = 0$								
0,2%	+55%	+52%	-10%	+53%	+30%	+54%	-0,2%	+7%
$T_m, ^\circ K, \quad P = 3 \cdot 10^9 Pa$								
+1%	+51%	+64%	-2%	+62%	+38%	+69%	-13%	+2%
$T_m, ^\circ K, \quad P = 5 \cdot 10^9 Pa$								
+4%	+58%	+74%	+2%	+69%	+42%	+81%	-23%	-2%
$L_m, kJ/mol, \quad P = 0$								
-39%	-16%	-16%	-30%	+3%	-3%	-7%	-29%	-27%

Табл. 3. Сравнение с экспериментальными данными характеристик твердотельного кремния рассчитанных с использованием исследуемых потенциалов. Отклонение расчетных данных от экспериментальных приведено в процентах.

В таблицах 2, 3 приведен детализированный количественный анализ результатов моделирования в широком диапазоне температур и давления для всех потенциалов В таблице 2 сравнение производится в размерном виде, в таблице 3 - в процентном отношении. Жирным шрифтом выделены значения наиболее близкие к экспериментальным данным. Согласно этим данным к наиболее удачным потенциалам взаимодействия для чистого монокристаллического кремния можно отнести 4 потенциала: SW, MIX, KINS, EA-2.

5 ЗАКЛЮЧЕНИЕ

С помощью молекулярно-динамического (МД) моделирования были определены теплофизические и механические характеристики чистого монокристаллического кремния (Si) с помощью полуэмпирических потенциалов Стиллинджера-Вебера (SW) и его модификации SWM, 2-х потенциалов Терсова (T(C), T(D)), потенциала EDIP, 2-х потенциалов Эрхарта-Альбе ((EA-1), (EA-2)), потенциала KINS и сконструированного потенциала MIX (линейная комбинация двух потенциалов: SWM и KINS).

Проведено сравнение результатов моделирования, полученных с использованием указанных потенциалов взаимодействия с экспериментальными (справочными данными) для следующих характеристик кремния: температурные зависимости коэффициента линейного расширения $\alpha_l(T)$ и теплоёмкости $C_p(T)$ в широком диапазоне температуры $300 \div 1600^\circ\text{K}$, зависимости модуля изотермической сжимаемости $K(P)$, температуры и теплоты плавления $T_m(P), L_m(P)$ от давления P в диапазоне $1 \div 10^{10} \text{ Па}$.

Показано, что в широком диапазоне температур и давлений потенциалы KINS, SW, EA-2 и MIX описывают свойства монокристаллического кремния в целом лучше, чем остальные потенциалы. По совокупности характеристик наиболее точные результаты дает моделирование с потенциалом MIX.

Работа выполнена при поддержке РФФИ, проекты № 12-07- 00436, №13-07-00597.

REFERENCES

- [1] A.Mene´ndez-Manjo´n, S.Barcikowski, G.A. Shafееv, V.I. Mazhukin, B.N. Chichkov. "Influence of beam intensity profile on the aerodynamic particle size distributions generated by femtosecond laser ablation". *Laser and Particle Beams*. **28**, 45–52. (2010).
- [2] H.Balamane, T. Halicioglu, W.A.Tiller. "Comparing study of silicon empirical interatomic potentials", *Phys. Rev.* **B 46**, 2250 (1992).
- [3] R. Biswas, D. R. Hamann, "Interatomic Potentials for Silicon Structural Energies" *Phys. Rev. Lett.* **55**, 2001 (1985).
- [4] E. M. Pearson, T. Takai, T. Halicioglu, and W. A. Tiller, "Computer modeling of Si and SiC surfaces and surface processes relevant to crystal growth from the vapor", *J. Cryst. Growth* **70**, 33 (1984).
- [5] B. W. Dodson, "Development of many-body Tersoff-type potential for silicon", *Phys. Rev.* **B 35**, 2795 (1987).
- [6] R.L.C. Vink, G.T. Barkema, W.F. van der Weg, and N. Mousseau, "Fitting the Stillinger-Weber potential to amorphous silicon", *J. Non-Cryst. Solids* **282**, 248 (2001).

- [7] Michael J. Demkowicz, *Mechanisms of plastic deformation in amorphous silicon by atomistic simulation using the Stillinger-Weber potential*, Submitted to the Department of Mechanical Engineering on March 31, 2005 in partial fulfillment of the requirements for the degree of Doctor of Philosophy in Mechanical Engineering at the Massachusetts Institute of Technology, (2005).
- [8] Koblinski, P., Phillpot, S. R., Wolf, D., Gleiter, H., "Thermodynamic criterion for the stability of amorphous intergranular films in covalent materials", *Phys. Rev. Lett.* **77**, 2965 (1996).
- [9] Koblinski, P., Phillpot, S. R., Wolf, D., Gleiter, H., "Amorphous Structure of Grain Boundaries and Grain Junctions in Nanocrystalline Silicon by Molecular-Dynamics Simulation", *Acta. Mater.* **45**, 987 (1997).
- [10] Koblinski, P., Bazant, M. Z., Dash, R. K., Treacy M. M., "Thermodynamic behavior of a model covalent material described by the environment-dependent interatomic potential" *Phys. Rev. B*, **66**, 064-104 (2002).
- [11] F. H. Stillinger and T. A. Weber, "Computer simulation of local order in condensed phases of silicon", *Phys. Rev. B*, **31**, 5262-5271 (1985).
- [12] S. J. Cook and P. Clancy, "Comparison of semi-empirical potential functions for silicon and germanium", *Phys. Rev. B*, **47**, 7686-7699 (1993).
- [13] M. D. Kluge, and J. R. Ray, "Velocity versus temperature relation for solidification and melting of silicon: A molecular-dynamic study", *Phys. Rev.* **B 39**, 1738 (1989).
- [14] J. Q. Broughton, and X. P. Li, "Phase diagram of silicon by molecular dynamics", *Phys. Rev. B*, **35**, 9120 (1987).
- [15] G.C. Abell, "Empirical chemical pseudopotential theory of molecular and metallic bonding", *Phys. Rev. B*, **31** 6184-6196 (1985).
- [16] J. Tersoff, "New empirical model for the structural properties of silicon", *Phys. Rev. Lett.* **56**, 632-635 (1986).
- [17] J. Tersoff, "New empirical approach for the structure and energy of covalent systems", *Phys. Rev. B*, **37**, 6991 (1988); J. Tersoff, "Modeling solid-state chemistry: Interatomic potentials for multicomponent systems", *PRB*, **38**, 9902 (1988).
- [18] J. Tersoff, "Modeling solid-state chemistry: Interatomic potentials for multicomponent systems", *Phys. Rev. B*, **39**, 5566-5568 (1989).
- [19] J. F. Ziegler, J. P. Biersack, and U. Littmark, "Stopping and Ranges of Ions in Matter", *Phys. Research B*, **1**. (1985)
- [20] F. Gao, W.J. Weber, "Empirical potential approach for defect properties in 3C-SiC", *Nucl. Instr. and Meth. B*, **191** 504 (2002).
- [21] V. Belko, M. Posselt E. Chagarov, "Improvement of the repulsive part of the classical interatomic potential for SiC", *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*, **202** 18-23, (2003)
- [22] L. Nurminen, F. Tavazza, D. P. Landau, A. Kuronen, and K. Kaski, «Comparative study of Si (001) surface structure and interatomic potentials in finite-temperature simulations», *Phys. Rev. B*, **67**, 035-405 (2003).
- [23] P. Erhart and K. Albe, "The role of thermostats in modeling vapor phase condensation of silicon nanoparticles", *Appl. Surf. Sci.* **226**, 12 (2004).
- [24] P. Erhart and K. Albe, "Analytical potential for atomistic simulations of silicon, carbon, and silicon carbide", *Phys. Rev. B*, **71**, 035-211 (2005).
- [25] M. Z. Bazant, E. Kaxiras, "Modeling of covalent bonding in solids by inversion of cohesive energy curves", *Phys. Rev. Lett.* **77**, 4370 (1996).
- [26] M. Z. Bazant, E. Kaxiras, J. F. Justo, "Environment-dependent interatomic potential for bulk silicon", *Phys. Rev. B*, **56**, 8542 (1997).
- [27] J. F. Justo, M. Z. Bazant, E. Kaxiras, V. V. Bulatov, and S. Yip, "Interatomic potential for silicon defects and disordered phases", *Phys. Rev. B*, **58**, 2539 (1998).

- [28] Clark L. Allred, Xianglong Yuan, Martin Z. Bazant, and Linn W. Hobbs, “Elastic constants of defected and amorphous silicon with the environment-dependent interatomic potential”, *Ph. Rev. B*, **70**, 134-113 (2004).
- [29] Thomas J Lenosky, Babak Sadigh, Eduardo Alonso, Vasily V Bulatov, Tomas Diaz de la Rubia, Jeongnim Kim, Arthur F Voter and Joel D Kress, “Highly optimized empirical potential model of silicon”, **8**, 825–841 (2000).
- [30] M. I. Baskes, “Modified embedded-atom potentials for cubic materials and impurities” *Phys. Rev. B*, **46**, 2727 (1992).
- [31] M. I. Baskes, “Atomistic potentials for the molybdenum-silicon system”, *Mater. Sci. Eng. A*, **261**, 165 (1999).
- [32] Byeong-Joo Lee and M. I. Baskes, “Second nearest-neighbour modified embedded-atom-method potential”, *Ph. Rev. B*, 62-13 (2000).
- [33] Seunghwa Ryu, Christofer R. Weinberger, Michael I. Baskes and Wei Cai, “Improved modified embedded-atom potentials fo silicon and gold”, *Modelling Simul. Mater. Sci.* **17** 075008 (2009).
- [34] M. Timonova, B-J. Lee, B. J. Thijsse, “Thermodynamical properties and phase transitions of silicon using a new MEAM potential”, *Nucl. Instr. Meth. B*, **255**, 195 (2007).
- [35] T. Kumagai, S. Hara, J. Choi, S. Izumi, and T. Kato, *J. Appl. Phys.* **105**, 64310 (2009).
- [36] Michael Coates, *Semiempirical Modified Embedded Atom Potentials for silicon, silver and gold systems*, Memorial University of Newfoundland (2009).
- [37] T. Kumagai, S. Izumi, S. Hara, and S. Sakai, “Development of bond-order potentials that can reproduce the elastic constants and melting point of silicon for classical molecular dynamics simulation”, *Comp. Mater. Sci.* **39**, 457, (2007).
- [38] P. K. Schelling, “Phase behavior and kinetics of a new bond-order potential for silicon”, *Comput. Mater. Sci.* **44**, 274 (2008).
- [39] Carolina Abs Da Cruz, *Prediction de la conductance thermique d’interface silicium metal; utilisation de la dynamique moleculaire*, Le grade de docteur, Lion, (2011).
- [40] Zhang Shi-Liang, Zhang Xin-Yu, Wang Lin-Min, Qi Li, Zhang Su-Hong, Zhu Yan, Liu Ri-Ping, “Voronoi Structural Evolution of Bulk Silicon upon Melting” *Chin. Phys. Lett.* **28**, 067104 (2011).
- [41] V. S. Dozhdikov, A. Yu. Basharin, and P. R. Levashov, “Two-phase simulation of the crystalline silicon melting line at pressures from –1 to 3 Gpa” *J. Chem Phys.* **137**, 054502 (2012).
- [42] L. Pastewka, S. Moser, M. Moseler, B. Blug, S. Meier, T. Hollstein, and P. Gumbsch, *Int. J. Mat. Res.* **99**, 1136 (2008).
- [43] L. Pizzagalli, J. Godet, J. Guenole, S. Brochard, E. Holmstrom, K. Nordlung, T. Albaret, “A new parametrization of the Stillinger-Weber potential for an improved description of defects and plasticity of silicon”, *J. Phys, Condens. Matter* **25**, 055801, (2013).
- [44] N. Honda, Y. Nagasaka, “Vapour-liquid equilibria of Silicon by Gibbs Ensemble Simulation” *Int. J. Thermophys.* **20**, 837, (1999).
- [45] D. V. Makhov, Laurent J. Lewis, “Isotherms for the liquid-gas phase transition in silicon from NPT Monte Carlo simulations”, *Ph. Rev. B*, **67**, 153202, (2003).
- [46] Verlet L. “Computer “Experiments” on Classical Fluids. I. Thermodynamical Properties of Lennard-Jones Molecules.” *Phys. Rev.*, **159**, 98-103, (1967).
- [47] Sai`t proekta Lammps <http://lammps.sandia.gov/> po sostoianiiu na 17.10.2012.
- [48] *Fizicheskie velichiny`*. Spravochnik pod red. I.S.Grigor`eva, E.Z. Mei`lihova. Moskva, E`nergoatomizdat, (1991).
- [49] R. Hull, “Properties of Crystalline Silicon”, INSPEC (1999).

Received May 10, 2014.