

УДК 544.022.341:621.315.592

## МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ФОРМИРОВАНИЯ КЛАСТЕРОВ ТОЧЕЧНЫХ ДЕФЕКТОВ В КРЕМНИИ НА БАЗЕ МОЛЕКУЛЯРНО–ДИНАМИЧЕСКОГО ПОДХОДА

© 2015 г. К. К. Абгарян, О. В. Володина, С. И. Уваров  
Федеральное государственное бюджетное учреждение науки  
«Вычислительный центр РАН им. А. А. Дородницына»,  
ул. Вавилова, д. 40, Москва, 119333, Россия

Проведение теоретических исследований процессов формирования кластеров точечных дефектов — это важная задача на пути совершенствования технологий получения высокоэффективных светодиодов на основе кремния. Одним из способов получения кремния с фотолуминесцентными свойствами является радиационное воздействие, вызывающее образование различных дефектов в его структуре, в том числе точечных, протяженных их кластеров и комплексов. Для описания процесса формирования точечных дефектов и изучения их трансформации во времени и при изменении температуры разработана математическая модель на основе молекулярно–динамического подхода, позволяющего определять координаты и скорости всех частиц системы. Для описания взаимодействия между частицами использован многопараметрический потенциал Терсоффа со значениями параметров, подобранными в ходе решения задачи параметрической идентификации для кремния. При разработке модели использованы значения когезионной энергии системы, полученные из первопринципных расчетов на базе теории функционала плотности (DFT). Показано, что созданная компьютерная модель позволяет проводить молекулярно–динамическое моделирование кристаллической структуры кремния с точечными дефектами и их кластерами, а также визуализировать и выполнять анимацию результатов моделирования

**Ключевые слова:** многоуровневое моделирование, молекулярно–динамический подход, первопринципные расчеты, потенциал межатомного взаимодействия, кластеры точечных дефектов, III–V полупроводники, дефекты в кристаллах.

### Введение

Механизм изменения и роста кластеров точечных дефектов в расширенные  $\{113\}$  дефекты является одним из важных и недостаточно изученных вопросов, возникающих в процессе ионной имплантации тяжелых элементов в кристаллический кремний. На сегодняшний день получены экспериментальные данные о возможных типах кластеров точечных дефектов в кремнии [1–3]. Кроме того, проведено множество теоретических исследований их стабильности, трансформации во времени, в том числе при изменении температуры. При этом применяют различные подходы. Так, в работах [4, 5] теоретическое исследование точечных дефектов в кремнии, в том числе расчеты энергии формирования, проводили с применением первопринципных расчетов на базе теории функционала плотности [6, 7]. В работе [8] процесс миграции точечных дефектов в кремнии рассмотрен с применением методов молекулярной динамики в приближении сильной связи (*tight-binding molecular dynamics (TBMD) simulation method*). В работах [9, 10] представлены резуль-

таты экспериментального исследования методом просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) высокого разрешения сложных самоорганизованных дефектных структур, образовавшихся в кристаллическом кремнии в процессе ионной имплантации атомов Er с энергией 2 МэВ при температуре 600 °С. На основании данных ПЭМ и расчетов с использованием программного пакета HyperChem показано [9, 10], что данные дефектные структуры представляют собой объединение двух расщепленных межузельных атомов и дивакансии, выстроенных в цепочку в плоскости  $\{113\}$ . Еще в 1964 г. Г. Д. Уоткинс предсказал возможность существования таких дефектов [11]. Однако первое прямое наблюдение подобной упорядоченной структуры дефектных комплексов описано только в работах [9, 10]. Теоретическое исследование причин образования сложных дефектных структур — кластеров точечных дефектов в кремнии — и их трансформации во времени является сложной и актуальной задачей. Ниже предложен один из возможных подходов к ее решению и представлены результаты математического моделирования

Абгарян Каринэ Карленовна<sup>1</sup> — кандидат физ.–мат. наук, зав. сектором, e-mail: kristal83@mail.ru; Володина Ольга Владимировна<sup>1</sup> — младший научный сотрудник, e-mail: olga25v@gmail.com; Уваров Сергей Игоревич<sup>1</sup> — младший научный сотрудник, e-mail: seruv25@gmail.com.

кластеров точечных дефектов в кремнии. Молекулярно–динамическое моделирование (МД–моделирование) кластеров точечных дефектов в кремнии выполняли с применением многопараметрического потенциала Терсоффа. Было проведено моделирование идеальной структуры кремния, а также структур кремния с различными точечными дефектами.

### Моделирование кластеров точечных дефектов в кремнии

Для расчетов упорядоченных кластерных конфигураций вакансий и межузельных атомов применяли методы многомасштабного компьютерного моделирования, в которых расчеты на каждом уровне масштаба проводили с использованием соответствующих вычислительных моделей, методов и приближений. Атомно–кристаллическую и электронную структуру кремния с дефектом моделировали с помощью первопринципных расчетов в рамках теории функционала электронной плотности с использованием базиса плоских волн и PAW–потенциалов (программным комплексом VASP) [12]. При первопринципном моделировании структуры идеального кремния (без дефектов) использовали периодическую ячейку, состоящую из 64 атомов, размерностью  $(2 \times 2 \times 2)$ . Первопринципные расчеты проводили на супер–ЭВМ (вычислительных кластерах) Учреждения РАН Межведомственного суперкомпьютерного центра РАН и на базе компьютерных ресурсов МГУ им. М. В. Ломоносова.

Моделирование изменения структуры с дефектом и с дефектными кластерами во времени осуществляли с применением гибридных алгоритмов, включающих в себя методы молекулярной динамики и оптимизационные методы [13], с помощью которых подбирали оптимальные значения параметров потенциалов межатомного взаимодействия. Причем результаты первопринципных расчетов рассматривали как эталонные. Для кремния в качестве потенциала межатомного взаимодействия использовали многочастичный потенциал Терсоффа [14], хорошо зарекомендовавший себя при решении задач моделирования соединений с ковалентными связями. В рамках метода Терсоффа когезионная энергия ( $E$ ) системы атомов описывается следующим образом:

$$E = \sum_i E_i = \frac{1}{2} \sum_i V_{ij}; \quad (1)$$

$$V_{ij} = f_C(r_{ij}) [f_R(r_{ij}) + b_{ij} f_A(r_{ij})]; \quad (2)$$

$$f_R(r_{ij}) = A_{ij} \exp[-\kappa_{ij} (r_{ij} - R_e)]; \quad (3)$$

$$f_A(r_{ij}) = B_{ij} \exp[-\mu_{ij} (r_{ij} - R_e)]; \quad (4)$$

$$f_C(r_{ij}) = \begin{cases} 1, & r_{ij} < R - R_{\text{cut}}; \\ \frac{1}{2} \left[ 1 + \cos \left( \frac{\pi(r_{ij} - R)}{2R_{\text{cut}}} \right) \right], & R - R_{\text{cut}} < r_{ij} < R + R_{\text{cut}}; \\ 0, & r_{ij} > R + R_{\text{cut}}. \end{cases} \quad (5)$$

Здесь  $r_{ij}$  — расстояния между атомами с номерами  $i$  и  $j$  соответственно;  $A_{ij}, k_{ij}$  — коэффициенты функции отталкивания;  $b_{ij}, B_{ij}, \mu_{ij}$  — коэффициенты функции притяжения. Для однокомпонентного кремния потенциал Терсоффа включает 12 параметров, специфичных для моделируемого вещества:  $D_e, R_e, \beta, S, n, \gamma, \lambda, c, d, h, R, R_{\text{cut}}$ . При этом параметры  $R$  и  $R_{\text{cut}}$  определяются, исходя из полученных экспериментально геометрических характеристик вещества и не нуждаются в подборе.

Для идентификации параметров потенциала Терсоффа для кремния рассмотрим целевую функцию

$$F(\xi) = \omega_1 (E_{\text{coh}}(\xi) - E_{\text{coh}}^{\text{fpc}})^2 + \omega_2 (a(\xi) - a^{\text{fpc}})^2 + \omega_3 (B(\xi) - B^{\text{fpc}})^2 + \omega_4 (C'(\xi) - C'^{\text{fpc}})^2 + \omega_5 (C_{44}(\xi) - C_{44}^{\text{fpc}})^2 + \omega_6 (\zeta(\xi) - \zeta^{\text{fpc}})^2 \rightarrow \min, \quad (6)$$

$$\xi = (\xi_1, \dots, \xi_m),$$

где  $E_{\text{coh}}$  — когезионная энергия, зависящая от параметров потенциала Терсоффа;  $a(\xi)$  — постоянная решетки, также зависящая от параметров потенциала;  $B(\xi)$  — объемный модуль упругости;  $C'(\xi)$  — модуль сдвига;  $C_{44}(\xi)$  — постоянная эластичности;  $\zeta(\xi)$  — постоянная Клейнмана;  $\omega_1, \dots, \omega_6$  — весовые коэффициенты. Расчет всех этих значений проводили по формулам, приведенным в работах [13, 15], значение когезионной энергии рассчитывали по формулам (1)–(5). Вклад каждого квадрата разности в значение целевой функции определяли с помощью весовых коэффициентов. В качестве эталонных значений использовали значения когезионной энергии, полученные с помощью первопринципных расчетов. Суть процесса идентификации параметров потенциала состоит в нахождении такого набора параметров, при котором рассчитанные значения физических величин оказываются близкими к эталонным значениям, что выражается в достижении целевой функцией (6) минимального значения. Таким образом, решение задачи минимизации целевой функции обеспечивает нахождение оптимального набора параметров потенциала для описания структуры кремния.

Для поиска минимума целевой функции (6) использовали два алгоритма: метод Хука–Дживса [16] и метод Granular Radial Search [17]. Для обеспечения глобальности поиска и в том и в другом методе начальное приближение выбиралось случайным образом в пределах допустимого параллелепипеда.

К особенностям метода Granular Radial Search можно отнести введение значения гранулы, влияющей на вычисление шага, и отслеживание успешных шагов. Если 5 % шагов являются успешными, т. е. значение целевой функции уменьшается, то значение гранулы уменьшается. Алгоритм завершается, когда гранулярность становится меньше заданного значения или когда превышена верхняя граница по количеству итераций. Выполняется несколько таких итераций и из найденных значений выбирается минимальное.

Особенность метода Хука—Дживса заключается в комбинировании двух этапов поиска: исследующего поиска и поиска по образцу. Цель этапа исследующего поиска — выбор направления спуска путем исследования поведения целевой функции в окрестности точки, найденной на предыдущем шаге. В результате выбирается базисная точка. Поиск по образцу заключается в реализации шага по направлению из полученной базовой точки вдоль прямой, соединяющей полученную базисную точку с предыдущей базисной точкой.

Рассмотрим методы молекулярной динамики [18—21], позволяющие определять координаты и скорости всех атомов кристаллической структуры кремния. Каждый атом системы может быть описан уравнениями классической механики. Например, в случае уравнений движения, записанных в форме уравнений движения Ньютона, перемещение  $n$ -го атома описывается уравнением

$$m \frac{dv}{dt} = - \frac{dU}{dx}; \quad (7)$$

$$\mathbf{r}_n(t) = (x_n(t), y_n(t), z_n(t)), n = 1, \dots, N.$$

Набор скоростей  $N$  взаимодействующих частиц имеет вид

$$\mathbf{v}_n(t) = (u_n(t), q_n(t), w_n(t)), n = 1, \dots, N,$$

где  $m$  — масса атома;  $v$  — скорость атома;  $U$  — потенциал;  $\mathbf{r}_n(t)$  — вектор координат атома  $n$  в момент времени  $t$ ;  $x_n(t)$  — координаты атома  $n$  по оси  $Ox$  в момент времени  $t$ ;  $y_n(t)$  — координаты атома  $n$  по оси  $Oy$  в момент времени  $t$ ;  $z_n(t)$  — координаты атома  $n$  по оси  $Oz$  в момент времени  $t$ ;  $\mathbf{v}_n(t)$  — вектор скорости атома  $n$  в момент времени  $t$ ;  $u_n(t)$  — скорость атома  $n$  по оси  $Ox$  в момент времени  $t$ ;  $q_n(t)$  — скорость атома  $n$  по оси  $Oy$  в момент времени  $t$ ;  $w_n(t)$  — скорость атома  $n$  по оси  $Oz$  в момент времени  $t$ .

Для  $N$  взаимодействующих атомов можно записать нормальную систему Коши:

$$\begin{cases} m_n \frac{du_n}{dt} = - \frac{\partial U_n^{(x)}}{\partial x_n}; \\ m_n \frac{dq_n}{dt} = - \frac{\partial U_n^{(y)}}{\partial y_n}; \end{cases} \quad (8)$$

$$\begin{cases} m_n \frac{dw_n}{dt} = - \frac{\partial U_n^{(z)}}{\partial z_n}; \\ \frac{dx_n}{dt} = u_n, \frac{dy_n}{dt} = v_n, \frac{dz_n}{dt} = w_n. \end{cases}$$

где  $n$  — количество атомов,  $n = 1, \dots, N$ .

Для интегрирования поставленной задачи Коши был выбран метод скоростей Верле. Метод является стабильным и точным, а также самостартующим за счет того, что для получения следующего местоположения частицы учитывается еще и ее скорость. Этот метод является компромиссом между точностью и скоростью реализации.

Применив метод скоростей Верле, получим

$$\begin{aligned} r_n^{k+1} &= r_n^k + \tau_k v_n^k - \frac{\tau_k^2}{2} \frac{\partial U_n^k}{\partial r_n^k}; \\ v_n^{k+1} &= v_n^k + \frac{\tau_k}{2} \left( \frac{\partial U_n^{k+1}}{\partial r_n^{k+1}} + \frac{\partial U_n^k}{\partial r_n^k} \right), \end{aligned} \quad (9)$$

где  $n$  — количество атомов,  $n = 1, \dots, N$ ;  $r$  — вектор координат атома;  $v$  — вектор скоростей атома;  $\tau$  — шаг во времени.

Если сравнивать метод скоростей Верле с методом Рунге—Кутта, то вычисление ускорения на каждом временном шаге в методе Рунге—Кутта выполняется 4 раза, в то время как в методе скоростей Верле — только 1 раз. Таким образом, когда основное время затрачивается на вычисление ускорения, метод скоростей Верле оказывается в 4 раза быстрее. Также в методе Рунге—Кутта погрешность вычисления координаты накапливается, а в алгоритме скоростей Верле ошибка приводит к изменению частоты колебания, но при этом амплитуда и энергия остаются практически неизменными.

### Результаты и их обсуждение

Была рассмотрена задача параметрической идентификации потенциала Терсоффа для кремния с кристаллической решеткой алмаза.

Область допустимых значений идентифицируемых параметров задавали параллелепипедом

$$X = [\underline{\xi}, \bar{\xi}] = \{ \xi \in R^n : \underline{\xi}_i \leq x_i \leq \bar{\xi}_i \},$$

где

$$\underline{\xi} = (0,5, 0,5, 0,5, 5 \cdot 10^{-8}, 0,1, 5 \cdot 10^{-8}, 1 \cdot 10^{-2}, 10000, 0,1, -10);$$

$$\bar{\xi} = (5, 5, 10, 5, 5, 1, 10, 20000, 50, 10).$$

Начальные приближения выбирали из данной области случайным образом с применением метода Монте-Карло.

В качестве эталонных значений параметров потенциала Терсоффа для идеальной структуры кремния были выбраны значения параметров из работы [16]:

$$R = (2,36, 2,34, 1,46, 1,48, 0,94, 1,25 \cdot 10^{-6}, 1,46, 113031, 14,25, -0,42)$$

В результате работы двух алгоритмов были получены 200 наборов параметров методом Хука—Дживса и 200 наборов параметров методом Granular Radial Search, для которых значения целевой функции не превосходили 0,00001.

Необходимо отметить, что структурные свойства материала в рассмотренных выше процедурах вычисляются при неизменных относительных координатах атомов (относительные положения атомов в элементарной ячейке зафиксированы). Это не гарантирует того, что при полученном потенциале эти положения атомов будут соответствовать минимальной энергии [21]. Поэтому следующим шагом является МД–релаксация структуры. Для этого вычисляются силы, действующие на каждый из атомов элементарной ячейки (базисных атомов), после чего атомы смещаются в направлении действия сил до достижения ими положений, соответствующих минимуму энергии. Направления сил вычисляют с учетом градиента потенциальной энергии. В том случае, если для найденных параметров потенциала атомы значительно смещены от требуемых положений равновесия или свойства материала сильно отклонились от требуемых, необходимо провести повторное моделирование (подгонку), корректирующее некоторые из полученных параметров, с включением в число переменных координат тех атомов, отклонение которых выходит за заданные допустимые пределы. В таблице приведены лучшие наборы 10 параметров.

На рис. 1 и 2 представлены отклонения наборов параметров потенциала Терсоффа от эталонного значения (в %) для метода Хука—Дживса и для метода Granular Radial Search. Для большинства наборов параметров, полученных методом Granular Radial Search, отклонения значений рассчитанных параметров от эталонных значений оказались меньше,

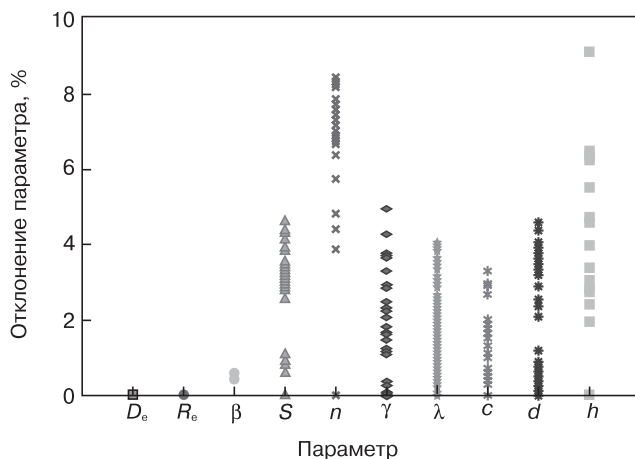


Рис. 1. Метод Хука—Дживса  
Fig. 1. The Hook-Jives Method

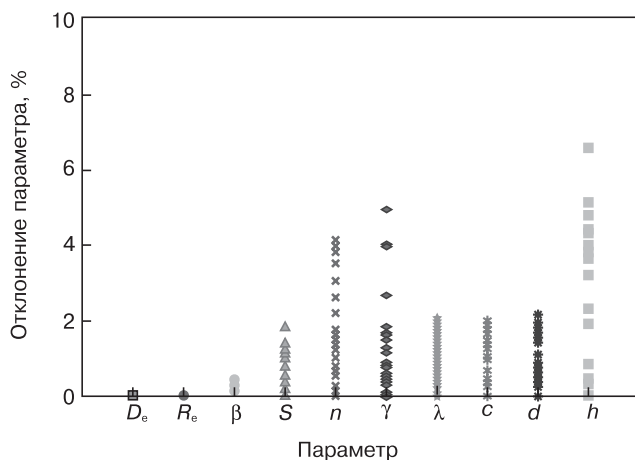


Рис. 2. Метод Granular Radial  
Fig. 2. Granular Radial Search Method

чем для параметров, полученных методом Хука—Дживса (см. рис. 1 и 2).

Необходимо отметить, что использованные алгоритмы характеризуются большой вычислительной сложностью. Так, например, для решения задачи параметрической идентификации потенциала Терсоффа для однокомпонентного кремния с проверкой на оптимальность полученных 400 наборов параметров потребовалось более 6 ч. Вычислительная сложность при расчете одного набора параметров потенциала межатомного взаимодействия составляет  $O(n^3)$ , где  $n$  — количество атомов в системе. Сам алгоритм

### Наборы параметров потенциала Терсоффа для Si Sets parameters for building Tersoff Si

№ <sub>П/П</sub>	$D_e$	$R_e$	$\beta$	$S$	$n$	$\gamma$	$\lambda$	$c$	$d$	$h$
1	2,363	2,3038	1,2539	0,0928	2,6644	$2,30 \cdot 10^{-7}$	0,295	112973	14,438	-1,0313
2	2,367	2,3283	1,2629	0,0124	2,6353	$5,85 \cdot 10^{-6}$	1,202	112974	14,281	-0,7220
3	2,363	2,3284	1,2628	0,9384	3,9504	$9,29 \cdot 10^{-7}$	3,394	112974	14,020	-1,3234
4	2,364	2,3284	1,2529	1,3943	2,7399	$2,01 \cdot 10^{-7}$	1,333	112974	14,940	-0,2340
5	2,364	2,3123	1,2303	1,9378	1,4929	$1,44 \cdot 10^{-6}$	0,125	112975	15,606	-0,3010
6	2,363	2,3274	1,2038	1,0192	2,3941	$1,97 \cdot 10^{-6}$	2,304	112972	14,284	-1,3829
7	2,363	2,3027	1,2123	2,0297	2,3950	$1,39 \cdot 10^{-6}$	0,323	112973	13,893	-0,3933

МД-моделирования, без учета затрат на параметрическую идентификацию потенциальной функции, имеет сложность вычисления  $O(2n)$ . Таким образом, сложность гибридных алгоритмов, включающих в себя методы молекулярной динамики и оптимизационные методы, применяемые для решения задачи параметрической идентификации, составляет порядка  $O(2n^4)$ . Поэтому в данной работе применяли распараллеливание по входным данным.

Набор параметров потенциала Терсоффа, обеспечивающий минимальное значение целевой функции, был использован для проведения МД-моделирования идеального кремния в структуре алмаза. Результаты МД-моделирования были близки к результатам первопринципных расчетов. Далее проводили МД-моделирование структуры кремния с различными дефектами (вакансией, примесным атомом замещения, внедрения, дивакансией и т. д.). Использовали периодические ячейки, содержащие 8 атомов, размерностью  $(1 \times 1 \times 1)$ , и 64 атома, размерностью  $(2 \times 2 \times 2)$ .

На рис. 3—6 (см. четвертую стр. обложки) показаны результаты МД-моделирования кремния с дефектами, визуализированные с помощью оригинального программного модуля, позволяющего выполнять анимацию и рассматривать изменение различных дефектов и дефектных кластеров во времени и в процессе изменения температуры соответственно.

Поскольку исследованные системы с дефектами оказались устойчивыми в процессе проведения расчета, был сделан вывод, что данные дефектные структуры являются метастабильными, что, в свою очередь, подтверждено первопринципными расчетами [21].

### Заключение

Проведена идентификация оптимального набора коэффициентов потенциала Терсоффа для описания структуры и свойств монокристаллического кремния. Полученный потенциал позволил также провести молекулярно-динамическое моделирование точечных дефектов и малых кластеров точечных дефектов в структуре кремния. Результаты моделирования оказались близки к результатам первопринципных расчетов.

В дальнейшем запланировано проведение молекулярно-динамического моделирования структуры кремния с более сложными дефектными комплексами, а также исследование и визуализация трансформации протяженных дефектов во времени и при различных температурных режимах. В связи с вычислительной сложностью используемых алгоритмов в дальнейшем для решения поставленных задач планируется реализовать схему распределенных вычислений на супер-ЭВМ.

### Библиографический список

1. Fedina, L. I. Electron microscopy data for threshold energy of point defect creation in silicon. / L. I. Fedina, A. L. Aseev, S. G. Denisenko, L. S. Smirnov // Materials Science Forum: Defects in Semiconductors. Edit. by H. J. Bardeleben. 1986. V. 10–12. – P. 1123–1128.
2. Aseev, A. L. Clusters of interstitial atoms in silicon and germanium / A. L. Aseev, L. I. Fedina, D. Hoehl, H. Barsch. – Berlin : Acad. Verlag, 1994. – 152 p.
3. Fedina, L. The intrinsic point defect clustering in Si: A study by HVEM and HREM in situ electron irradiation / L. Fedina, A. Gutakovskii, A. Aseev, J. Van Landuyt, J. Vanhellefont. – Novosibirsk : Kluwer Intern. Publish, 1997. – P. 63–92.
4. Al-Mushadani, O. K. Free-energy calculations of intrinsic point defects in silicon / O. K. Al-Mushadani, R. J. Needs // Phys. Rev. B. – 2003. – V. 68, iss. 23. – P. 235205.
5. Goedecker, S. A fourfold coordinated point defect in silicon / S. Goedecker, T. Deutsch, L. Billard // Phys. Rev. Lett. – 2002. – V. 88. – P. 235501.
6. Hohenberg, P. Inhomogeneous electron gas / P. Hohenberg, W. Kohn // Phys. Rev. B. – 1964. – V. 136, iss. 3. – P. B864.
7. Kohn, W. Self-consistent equations including exchange and correlation effects / W. Kohn, L. J. Sham // Phys. Rev. – 1965. – V. 140. – P. A1133–A1138.
8. Tang, M. Intrinsic point defects in crystalline silicon: Tight-binding molecular dynamics studies of self-diffusion, interstitial-vacancy recombination and formation volumes / M. Tang, L. Colombo, J. Zhu, T. Diaz de la Rubia // Phys. Rev. B. – 1997. – V. 55, iss. 21. – P. 14279–14289.
9. Fedina, L. I. Extended defects formation in Si crystals by clustering of intrinsic point defects studied by in-situ electron irradiation in an HREM / L. I. Fedina, A. K. Gutakovskii, L. A. Aseev, J. van Landuyt, J. Vanhellefont // Phys. status solidi (a). – 1999. – V. 171, iss. 1. – P. 147–157.
10. Fedina, L. I. Precision measurements of nanostructure parameters / L. I. Fedina, D. V. Sheglov, A. K. Gutakovskii, S. S. Kosolobov, A. V. Latyshev // Optoelectronics, Instrumentation and Data Processing. – 2010. – V. 46, N 4. – P. 301–311.
11. Watkins, G. D. In radiation effects in semiconductors / G. D. Watkins. – N. Y. : Plenum Press Inc., 1968. – P. 67
12. VASP — <http://cms.mpi.univie.ac.at/vasp/>
13. Abgaryan, K. K. Optimization methods as applied to parametric identification of interatomic potentials / K. K. Abgaryan, M. A. Posypkin // Computational Mathematics and Mathematical Physics. – 2014. – V. 54, N 12. – P. 1994–2001.
14. Tersoff, J. Empirical interatomic potential for silicon with improved elastic properties / J. Tersoff // Phys. Rev. B. – 1988. – V. 38. – P. 9902–9905.
15. Абгарян, К. К. Программный комплекс для решения задач параметрической идентификации потенциалов межатомного взаимодействия / К. К. Абгарян, М. А. Посыпкин // Internat. J. Open Information Technologies. – 2014. – № 10. – С. 14–20.
16. Хук, Р. Прямой поиск решения для числовых и статических проблем / Р. Хук, Т. А. Дживс. – М. : Мир, 1961. – С. 212–219.
17. Powell, D. Elasticity, lattice dynamics and parameterisation techniques for the Tersoff potential applied to elemental and type III–V semiconductors : dis. – University of Sheffield, 2006.
18. Абгарян, К. К. Применение параллельных вычислений и метода молекулярной динамики для моделирования роста многослойных полупроводниковых наноструктур / К. К. Абгарян, Н. В. Быков, И. В. Мутигуллин // Материалы IX Междунар. конф. по неравновесным процессам в соплах и струях (NPNJ 2012). – М. : Изд-во МАИ, 2012. – С. 457–459.
19. Haile, J. M. Molecular dynamics simulation. elementary methods / J. M. Haile. – N. Y. ; Chichester ; Brisbane ; Toronto ; Singapore : J. Wiley and Sons Inc., 1992. – 505 p.
20. Rapaport, D. C. The art of molecular dynamics simulation / D. C. Rapaport. – Cambridge : Cambridge University Press, 1995. – 565 p.
21. Супрядкина, И. А. Теоретическое исследование ионно-индуцированных точечных дефектов и их комплексов в кремнии / И. А. Супрядкина, К. К. Абгарян, Д. И. Бажанов, И. В. Мутигуллин, Л. И. Федина // Материалы междунар. конф. ВИП. – Ярославль, 2013. – Т. 1. – С. 204–206.

Статья написана по материалам междисциплинарного научно-практического семинара «Математическое моделирование в материаловедении электронных наноструктур», проведенного в ВЦ РАН имени А. А. Дородницына.

Статья поступила в редакцию 21 января 2015 г.

ISSN 1609–3577 Izvestiya vuzov. Materialy elektronnoy tekhniki = Materials of Electronics Engineering. 2015, vol. 18, no. 1, pp. 37–42.

### Mathematical Modeling of Point Defect Cluster Formation in Silicon Based on Molecular Dynamic Approach

**Karine Karlenovna Abgarian**<sup>1</sup> — Cand. Sci. (Phys.– Math.), Head of the Section (kristal83@mail.ru); **Olga Vladimirovna Volodina**<sup>1</sup> — Junior Research (olga25v@gmail.com); **Sergey Igorevich Uvarov**<sup>1</sup> — Junior Research (seruv25@gmail.com).

<sup>1</sup>*Institution of Russian Academy of Sciences  
Dorodnicyn Computing Centre of RAS,  
40 Vavilov Str., Moscow 119333, Russia*

**Abstract.** A very important task on the way of improving the technologies of synthesizing highly effective light-emitting diodes on the basis of silicon is theoretical research into the formation of point defect clusters. One method of obtaining silicon with photoluminescent properties is radiation impact. It causes the formation of various defects in its structure, including point and linear defects, their clusters and complexes. In this paper a mathematical model was used to determine the coordinates and velocities of all particles in the system. The model was used for describing of point defect formation processes and studying their evolution with time and temperature. The multi-parametrical Tersoff potential was used for the description of interactions between particles. The values of the Tersoff potential were selected by solving the parametrical identification problem for silicon. For developing the models we used the system cohesive energy values obtained by an ad initio calculation based on the density functional theory (DFT). The resultant computer model allows MD simulation of silicon crystal structure with point defects and their cluster with possible visualization and animation of simulation results.

**Keywords:** multi-scale modeling, molecular dynamic, first principles calculations, clusters of point defects, III–V semiconductors, defects in crystals.

#### References

1. Fedina L. I., Aseev A. L., Denisenko S. G., Smirnov L. S. Electron microscopy data for threshold energy of point defect creation in silicon. *Materials Science Forum: Defects in Semiconductors* / Edit. by H. J. Bardeleben. 1986, vol. 10–12, pp. 1123–1128. DOI: 10.4028/www.scientific.net/MSF.10–12.1123
2. Aseev A. L., Fedina L. I., Hoehl D., Barsch H. *Clusters of interstitial atoms in silicon and germanium*. Berlin: Academy Verlag, 1994. 152 p.
3. Fedina L., Gutakovskii A., Aseev A., Van Landuyt J., Vanhellefont J. *The intrinsic point defect clustering in Si: A study by HVEM and HREM in situ electron irradiation*. Novosibirsk: Kluwer Intern. Publish, 1997. pp. 63–92.
4. Al-Mushadani O. K., Needs R. J. Free-energy calculations of intrinsic point defects in silicon. *Phys. Rev. B*. 2003, vol. 68, iss. 23, pp. 235205. DOI: 10.1103/PhysRevB.68.235205
5. Goedecker S., Deutsch T., Billard L., A Fourfold coordinated point defect in silicon. *Phys. Rev. Lett.* 2002, vol. 88, p. 235501. DOI: 10.1103/PhysRevLett.88.235501
6. Hohenberg P., Kohn W. Inhomogeneous electron gas. *Phys. Rev. B*. 1964, vol. 136, iss. 3, p. B864. DOI: 10.1103/PhysRev.136.B864
7. Kohn W., Sham L. J. Self-consistent equations including exchange and correlation effects. *Phys. Rev.* 1965, vol. 140, pp. A1133–A1138. DOI: 10.1103/PhysRev.140.A1133
8. Tang M., Colombo L., Zhu J., Diaz T. de la Rubia, Intrinsic point defects in crystalline silicon: Tight-binding molecular dynamics studies of self-diffusion, interstitial–vacancy recombination, and formation volumes. *Phys. Rev. B*. 1997, vol. 55, iss. 21, pp. 14279–14289.

DOI: 10.1103/PhysRevB.55.14279

9. Fedina L. I., Gutakovskii A. K., Aseev L. A., van Landuyt J., Vanhellefont J. Extended defects formation in Si crystals by clustering of intrinsic point defects studied by in-situ electron irradiation in an HREM. *Phys. status solidi (a)*. 1999, vol. 171, iss. 1, pp. 147–157. DOI: 10.1002/(SICI)1521-396X(199901)171:1<147::AID-PSSA147>3.0.CO;2-U

10. Fedina L. I., Sheglov D. V., Gutakovskii A. K., Kosolobov S. S., Latyshev A. V. Precision measurements of nanostructure parameters. *Optoelectronics, Instrumentation and Data Processing*. 2010, vol. 46, no. 4, pp. 301–311.

11. Watkins G. D. *In radiation effects in semiconductors*. Ed. by Vook F. L. New York: Plenum Press Inc., 1968. p. 67

12. VASP — <http://cms.mpi.univie.ac.at/vasp/>

13. Abgaryan K. K., Posypkin M. A. Optimization methods as applied to parametric identification of interatomic potentials. *Computational Mathematics and Mathematical Physics*. 2014, vol. 54, no. 12, pp.1994–2001.

14. Tersoff J. Empirical interatomic potential for silicon with improved elastic properties. *Phys. Rev. B*. 1988, vol. 38, pp. 9902–9905. DOI: 10.1103/PhysRevB.38.9902

15. Abgaryan K. K., Posypkin M. A. Software for solving problems of parametric identification of the interatomic interaction potential. *International Journal of Open Information Technologies*. 2014, no. 10, pp. 14–20. (In Russ.)

16. Huk P., Dzhivis T. A. *Prjamoj poisk reshenija dlja chislovyh i staticheskikh problem* [Direct search solution for numeric and static problems]. Moscow: Mir, 1961. pp. 212–219. (In Russ.)

17. Powell D. *Elasticity, lattice dynamics and parameterisation techniques for the Tersoff potential applied to elemental and type III–V semiconductors*: dis. University of Sheffield, 2006.

18. Abgarjan K. K., Bykov N. V., Mutigullin I. V. *Primenenie paralel'nyh vychislenij i metodov molekulyarnoj dinamiki dlja modelirovaniya rosta mnogoslojnyh poluprovodnikovyyh nanostruktur* [The use of parallel computing and molecular dynamics method to simulate the growth of multilayer semiconductor nanostructures]. *Materialy IX mezhdunarodnoi konferentsii po neravnovesnym protsessam v soplakh i struyakh (NPNJ 2012)*. Moscow: MAI, 2012. pp. 457–459. (In Russ.)

19. Haile J. M. *Molecular dynamics simulation. Elementary methods*. N. Y.; Chichester; Brisbane; Toronto; Singapore: J. Wiley and Sons Inc., 1992. 505 p.

20. Rapaport D. C. *The art of molecular dynamics simulation*. Cambridge: Cambridge University Press, 1995. 565 p.

21. Suprjadkina I. A., Abgarjan K. K., Bazhanov D. I., Mutigullin I. V., Fedina L. I. Teoreticheskoe issledovanie ionno-inducirovannyh tochechnyyh defektov i ih kompleksov v kremnii [A theoretical study of ion-induced point defects and their complexes in silicon]. *Materialy mezhdunarodnoj konferentsii VIP-2013*. Jaroslavl, 2013, vol. 1, pp. 204–206. (In Russ.)

**Acknowledgements.** This work was performed with financial support of RFFI (project No. 13–08–01335 A, No. 13–01–12110 OFI–M).

The article was written based on an interdisciplinary scientific and practical seminar «Mathematical Modeling in Materials electronic nanostructures», held in the Institution of Russian Academy of Sciences Dorodnicyn Computing Centre of RAS.

Received January 21, 2015