

ПАРАМЕТРИЗАЦИЯ ПОТЕНЦИАЛА В ФОРМЕ EDIP ДЛЯ ГЕРМАНИЯ

В.И. Белько¹⁾, В.Е. Гусаков²⁾, Н.Н. Дорожкин¹⁾

¹⁾Белорусский государственный университет,
пр. Независимости 4, 220030 Минск, Беларусь, belko@bsu.by

²⁾НПЦ НАН Беларуси по материаловедению,
ул. П. Бровки 19, 220072 Минск, Беларусь, gusakov@ifttp.bas-net.by

Выполнена оптимизация параметров потенциала в функциональной форме EDIP с использованием найденной методом функционала плотности и опубликованной в литературе зависимости энергии связи атомов в кристалле германия от объема элементарной ячейки вблизи положения равновесия. Изменению по сравнению с аналогичными параметрами кремния подвергались лишь параметры, определяющие функцию парных взаимодействий $V_2(r, Z)$, поскольку энергия кристалла с решеткой алмаза вблизи положения равновесия определяется – для потенциала EDIP – лишь указанной функцией. Затем проведено тестирование полученного потенциала с использованием ряда ключевых параметров кристалла германия, взятых из публикаций: постоянная решетки, когезионная энергия, модуль упругости, энергии формирования вакансии и расщепленного междоузлия. Значения параметров для кристалла германия, полученные в рамках найденной параметризации потенциала EDIP, находятся в разумном соответствии с тестовыми значениями, причем расщепленное <110>-междоузлие имеет самую низкую энергию формирования по сравнению с прочими междоузельными конфигурациями.

Ключевые слова: межатомный эмпирический потенциал; кристалл германия; метод молекулярной динамики.

PARAMETRIZATION OF EDIP POTENTIAL FOR GERMANIUM CRYSTAL

Viktor Belko¹⁾, Vasilii Gusakov²⁾, Nikolai Dorozhkin¹⁾

¹⁾Belarusian State University, 4 Nezavisimosti Ave., 220030 Minsk, Belarus, belko@bsu.by

²⁾Scientific-Practical Materials Research Centre of NAS of Belarus,
19 P. Brovki Str., 220072 Minsk, Belarus, gusakov@ifttp.bas-net.by

The parameters of the empirical Environment-Dependent Interatomic Potential for the germanium crystal were optimized using the ab initio results published in the literature. Only the parameters defining the function of two-body interactions $V_2(r, Z)$ were changed compared to the original parameters for silicon, since the crystal energy with a diamond lattice near the equilibrium position is determined (for the Environment-Dependent potential) by this function only. Parameters optimization of the function $V_2(r, Z)$ was carried out by the gradient descent method with adaptive step. The starting points for minimization were determined by random search within the limits of permissible values of parameters from the multidimensional parallelepiped. Then, the obtained potential was tested using a number of key parameters of a germanium crystal taken from publications: lattice constant, cohesive energy, elastic modulus as well as vacancy and split interstitial formation energies. The values of the parameters for the germanium crystal, obtained within the framework of the obtained parameterization of the Environment-Dependent Interatomic Potential, are in reasonable agreement with the test values, and the split <110> interstitial has the lowest formation energy compared to other interstitial configurations.

Keywords: Interatomic empirical potential; germanium crystal; molecular dynamics simulations; gradient descent method.

Введение

В настоящее время все в большей степени для прогнозирования свойств новых материалов и исследования их радиационной стойкости используются методы молекулярного моделирования, основанные как на методах квантовой химии, так и методах, использующих эмпирические межатомные потенциалы. Это обусловлено тем, что в рамках методов, использующих эмпирические потенциалы, возможно моделирование ансамблей, содержащих 10⁶ и более атомов. Межатомный потенциал для исследуемой атомной системы определяется набором параметров, который, в свою очередь, зависит от функциональной формы потенциала [1]. Определение параметров эмпирического потенциала является ключевым моментом при его разработке. Существуют два основных подхода при параметризации потенциала: (1) с использованием экспериментальных данных; (2) на основе данных, получаемых из первых принципов. На наш взгляд, второй метод является более последовательным, поскольку экспериментальные данные для многих

представляющих интерес материалов зачастую весьма ограничены.

Наиболее известными функциональными формами потенциала для ковалентных материалов являются Tersoff, Stillinger-Weber, EDIP, MEAM [1]. В результате анализа имеющихся публикаций и собственного опыта авторов в данной работе для молекулярно-динамического моделирования свойств германия был выбран потенциал EDIP [2]. В данной работе представлены результаты первого этапа параметризации потенциала EDIP для германия.

Основная часть

Межатомный потенциал в функциональной форме EDIP (Environment-Dependent Interatomic Potential) задается следующей формулой:

$$E = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \left(\sum_{j \neq i} V_2(R_{ij}, Z_i) + \sum_{i \neq j} \sum_{k \neq i, k > j} V_3(R_{ij}, R_{ik}, Z_i) \right),$$

где $Z_i = \sum_{m \neq i} f(R_{im})$ – координационное число, $f(r)$ – функция обрезания, равная нулю при $r > a$.

Двухчастичное взаимодействие задается формулой:

$$V_2(r, Z) = A \left[\frac{B^p}{r} - e^{-\beta Z^2} \right] \exp(\sigma/(r - a))$$

где E – полная энергия системы атомов, R_{ij} – единичный вектор, направленный от атома i к атому j , a – радиус обрезания. Подробное представление для функции $V_3(R_{ij}, R_{ik}, Z)$ не приводится, так как в данной работе она не подвергалась модификации.

Таким образом, в потенциале EDIP двух- и трех-частичные взаимодействия зависят от локального окружения атома через его эффективное координационное число Z_i .

Анализ функциональной формы потенциала показывает, что энергия атомной системы в виде идеального кристалла с решеткой типа алмаза вблизи положения равновесия определяется только функцией двухчастичных взаимодействий $V_2(r, Z)$. Поэтому параметризация потенциала может быть проведена в два этапа. Сначала выполняется оптимизация 6 параметров функции $V_2(r, Z)$ ($A, B, \sigma, \rho, a, \beta$) с использованием зависимости энергии связи атомов в кристалле германия от объема элементарной ячейки, полученной методом функционала плотности в работе [3], расчет в рамках пакета VASP. Затем проводится тестирование полученного потенциала с использованием ряда ключевых параметров. Второй этап параметризации предполагает уточнение всех 13 параметров потенциала с использованием характерных длин и углов малых кластеров германия, найденных авторами ранее [4] с использованием функционала плотности, приближение B88-LYP GGA.

Поиск параметров функции $V_2(r, Z)$ проводился методом градиентного спуска с адаптивным выбором шага. Начальная точка для минимизации определялась случайным поиском в пределах допустимых значений параметров из многомерного параллелепипеда. В таблице 1 приведены параметры функции $V_2(r, Z)$ для потенциала EDIP, описывающего кристалл кремния с решеткой типа алмаза и найденные значения параметров для германия. Параметр β не приводится в таблице, так как и его изменение при оптимизации, и влияние его изменений было несущественным.

Таблица 1. Параметры функции двухчастичного взаимодействия

Table 1. Two-body interaction function parameters

Параметр (единицы измерения)	Значение параметра потенциала для кремния	Значение параметра, оптимизированное для германия
A (эВ)	7.982173	7.73142
B (А)	1.5075463	1.57434
σ (А)	0.5774108	0.597131
ρ	1.2085196	1.05497
a (А)	3.121382	3.23189

На рисунке 1 представлена найденная зависимость энергии связи атомов в кристалле германия от расстояния между ближайшими соседями в сравнении с результатами расчета методом функционала плотности из работы [3].

В таблице 2 приводятся результаты тестирования полученного потенциала с использованием

ряда избранных параметров: когезионная энергия, модуль упругости, энергии формирования вакансий

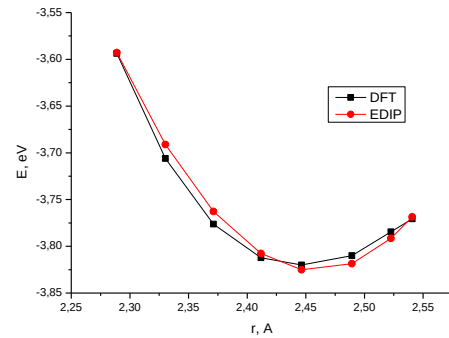


Рис. 1. Энергии связи атомов в кристалле германия в зависимости от расстояния между ближайшими соседями

Fig. 1. Binding energies of atoms in a germanium crystal depending on the distance between the nearest neighbors

Таблица 2. Найденные параметры кристалла германия

Table 2. Calculated Germanium crystal parameters

Параметр (единицы измерения)	Расчет с использованием потенциала EDIP	Эксперимент или расчет из первых принципов
Постоянная решетки (А)	5.679	5.65 [3]
Расстояние до ближайших соседей (А)	2.4591	2.4465 [3]
Когезионная энергия (эВ)	-3.82637	-3.82 [3]
Модуль упругости (ГПа)	80.33	70 - 78
Энергия формирования вакансии (эВ)	2.53	2.33 [5]
Энергия формирования расщепленного междоузлия (эВ)	4.105	-

и расщепленного междоузлия. При тестовых расчетах использовался пакет молекулярной динамики LAMMPS.

Отметим, что в рамках найденной параметризации потенциала EDIP расщепленное $\langle 110 \rangle$ -междоузлие в германии имеет самую низкую энергию формирования по сравнению с прочими междоузельными конфигурациями.

Заключение

Таким образом, значения тестовых параметров для кристалла германия, полученные в рамках найденной параметризации потенциала EDIP, находятся в разумном соответствии с тестовыми значениями, взятыми из литературы [3, 5], где они были найдены экспериментально или методом функционала плотности.

Библиографические ссылки

1. Lenosky T.J., Sadigh B., Alonso E., Bulatov V.V., T. Diaz de la Rubia, J. Kim et al. Highly optimized empirical potential model of silicon. *Modeling Simul. Mater. Sci. Eng.* 2000; 8: 825-841.
2. Justo J.F., Bazant M.Z., Kaxiras E., Bulatov V.V., Yip S. Interatomic potential for silicon defects and disordered phases. *Phys. Rev. B.* 1998; 58: 2539-2555.
3. Gillespie B.A. Bond order potentials for group IV semiconductors. A Dissertation Presented to The Faculty of the School of Engineering and Applied Science University of Virginia. 2006. 183 p.
4. Гусаков В.Е., Белько В.И., Дорожкин Н.Н. Потенциал EDIP для германия: параметризация и моделирование точечных дефектов методом молекулярной динамики. В кн.: Оджаяев В.Б., редактор. Материалы 4-й Международной конференции «Материалы и структуры современной электроники». (23-24 сентября 2010 года), г. Минск. Минск: Издательский центр БГУ; 2010. С.15-18.
5. Vanhellemon J., Śpiewak P., Sueoka K. On the solubility and diffusivity of the intrinsic point defects in germanium. *J. Appl. Phys.* 2007; 101:36103.

References

1. Lenosky T.J., Sadigh B., Alonso E., Bulatov V.V., T. Diaz de la Rubia, J. Kim et al. Highly optimized empirical potential model of silicon. *Modeling Simul. Mater. Sci. Eng.* 2000; 8: 825-841.
2. Justo J.F., Bazant M.Z., Kaxiras E., Bulatov V.V., Yip S. Interatomic potential for silicon defects and disordered phases. *Phys. Rev. B.* 1998; 58: 2539-2555.
3. Gillespie B.A. Bond order potentials for group IV semiconductors. A Dissertation Presented to The Faculty of the School of Engineering and Applied Science University of Virginia. 2006. 183 p.
4. Gusakov V.E., Bel'ko V.I., Dorozhkin N.N. Potentsial EDIP dlya germaniya: parametrizatsiya i modelirovanie tochechnykh defektov metodom molekulyarnoy dinamiki. [EDIP potential for germanium: parametrization and molecular dynamics simulations of point defects.] V kn.: Odzhaev V.B., redaktor. Materialy 4-y Mezhdunarodnoy konferentsii «Materialy i struktury sovremennoy elektroniki». (23-24 sentyabrya 2010 goda), g. Minsk. Minsk: Izdatel'skiy tsentr BGU; 2010. S.15-18. (in Russian).
5. Vanhellemon J., Śpiewak P., Sueoka K. On the solubility and diffusivity of the intrinsic point defects in germanium. *J. Appl. Phys.* 2007; 101: 36103.