

ПОТЕНЦИАЛ EDIP ДЛЯ ГЕРМАНИЯ: ПАРАМЕТРИЗАЦИЯ И МОДЕЛИРОВАНИЕ ТОЧЕЧНЫХ ДЕФЕКТОВ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

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

¹Белорусский государственный университет, belko@bsu.by

²ГНПО Научно-практический центр НАН Беларуси по материаловедению

ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время все в большей степени для прогнозирования свойств новых материалов (и их атомного конструирования) 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 более 10^6 атомов. Межатомный потенциал для данного типа 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 подхода при параметризации потенциала: параметризация с использованием экспериментальных данных; использование данных, получаемых *из первых принципов*. На наш взгляд, второй метод является более последовательным, поскольку, как правило, экспериментальные данные для исследуемого материала обычно очень ограничены.

В настоящей работе представлены результаты по параметризации потенциала EDIP для исследования германия и кремний-германиевых сплавов.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

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 и кремний-германиевых систем был выбран потенциал EDIP [2].

Для кремний-германиевых сплавов использование экспериментальных данных для нахождения параметров потенциала практически невозможно, поэтому оптимизация параметров потенциала EDIP проводилась с использованием структурных параметров малых молекулярных кластеров, рассчитанных *из первых принципов*. Расчет проводился с использованием функционала плотности, приближение B88-LYP GGA. Была создана база данных структурных параметров малых кластеров Si, Ge с числом атомов в кластере от 4 до 20. Далее полученные структурные параметры кластеров использовались для параметризации потенциала. Структурные параметры (матрица расстояний) рассчитанных кластеров использовались для построения целевой функции следующей формы:

$$S = \sum_{i=1}^N f_i, \quad (1)$$

где N – число малых кластеров, включенных в рассмотрение; f_i – функция ошибок

для кластера i , определяемая следующим образом:

$$f_i = \sum_{n < m} (R_{nm}^{abinitio} - R_{nm}^{EDIP})^2, \quad (2)$$

где $R_{nm}^{abinitio}$, R_{nm}^{EDIP} – матрицы расстояний, рассчитанные для равновесной конфигурации данного малого кластера в рамках метода функционала плотности и потенциала EDIP, соответственно. Находя минимум целевой функции S по параметрам потенциала, мы получаем оптимальные параметры потенциала EDIP, описывающие структурные параметры малых кластеров. Минимизация целевой функции проводилась методом Пауэлла. Полученные в результате оптимизации параметры представлены в таблице 1. Обозначения параметров соответствуют обозначениям, принятым в работе [2]. В качестве исходных значений параметров использованы их значения для кремния.

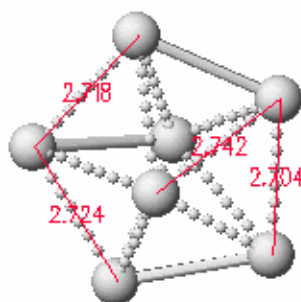
Таблица 1

Рассчитанные параметры потенциала EDIP для германия

Параметр	Значение исходное	Поправочный множитель	Ед.измерения
A	7,9821730	1,0091459	эВ
B	0,15075463	1,0723808	нм
ρ	1,2085196	0,88108705	–
a	0,31213820	1,1360294	нм
c	0,25609104	1,0097651	нм
σ	0,05774108	0,91225925	нм
λ	1,4533108	0,92892508	эВ
γ	0,11247945	1,3333335	нм
η	0,2523244	0,62740714	–
Q_0	312,1341346	1,1172676	–
μ	0,6966326	1,0226048	–
β	0,0070975	1,0010000	–
α	3,1083847	1,0000000	–

В качестве примера на рисунке 1 представлена структура 7-атомного кластера германия, рассчитанная в рамках функционала плотности и с использованием полученного потенциала EDIP, соответственно. Можно видеть, что полученные параметры потенциала приводят к правильной топологии и структурным параметрам атомного кластера.

Расчет методом функционала плотности, приближение B88-LYP GGA



Расчет с использованием оптимизированных параметров EDIP-потенциала

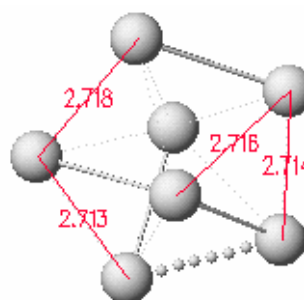


Рис. 1. Рассчитанная структура кластера из 7 атомов германия

Далее, основываясь на представленных в таблице 1 параметрах потенциала, были рассчитаны энергия образования точечных дефектов и другие параметры для кристалла германия методом молекулярной динамики. Результаты моделирования представлены в таблице 2.

Таблица 2

Рассчитанные параметры кристалла германия

Параметр	Метод получения параметра			
	Расчет с использованием потенциала TERSOFF	Расчет с использованием параметризованного потенциала EDIP	Расчет из первых принципов	Эксперимент
Постоянная решетки (нм)	0,5657	0,5636	0,56569	0,5657
Когезионная энергия (эВ)	3,8506	3,67996	4,02	3,85
Энергия образования вакансии (эВ)	3,6	1,768	2,123–2,57	2,33 [3]
Энергия самодиффузии	—	—		3,05–3,14

Анализ результатов, представленных в таблице 2, показывает, что полученные на основании параметризации по структурным данным малых кластеров параметры EDIP- потенциала качественно правильно описывают параметры кристалла германия. Однако следует отметить, что полученная параметризация EDIP-потенциала приводит к потенциалу, занижающему величину постоянной решетки на ~0,02 нм. Как следствие, мы получаем более низкое значение когезионной энергии и энергии формирования вакансии. Полученный результат может быть обусловлен следующими причинами. При формировании базы данных малых кластеров были рассмотрены кластеры с числом атомов не более ~20. Для данных кластеров характерно наличие большого числа оборванных связей и, как следствие, их структура определяется поверхностными атомами кластера. Следовательно, для дальнейшего уточнения оптимальных параметров потенциала EDIP в базу данных для целевой функции (1) необходимо дополнительно включить кластеры, содержащие большее число атомов в тетраэдрической конфигурации. Кроме того, необходимо проверить правильность описания оборванных связей в функциональной форме EDIP потенциала.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Lenosky, T. J.* Highly optimized empirical potential model of silicon / T. J. Lenosky [et al.] // Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. 2000. V. 8. P. 825.
2. *Justo, J.* Interatomic potential for silicon defects and disordered phases / J. Justo [et al.] // Phys. Rev. B. 1998. V. 58. P. 2539.
3. *Vanhellemont, J.* On the solubility and diffusivity of the intrinsic point defects in germanium / J. Vanhellefont, P. Śpiewak, K. Sueoka // J. Appl. Phys. 2007. V.101. P. 36103.