

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПОРОГОВЫХ ЭНЕРГИЙ СМЕЩЕНИЯ АТОМОВ В c-SiC МЕТОДОМ КЛАССИЧЕСКОЙ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Одной из важнейших величин, характеризующих образование точечных дефектов в твердом теле при радиационном воздействии, является пороговая энергия смещения E_d . В связи с изучением радиационной стойкости радиоэлектронных приборов, целый ряд работ был посвящен как экспериментальному, так и теоретическому изучению данной величины [1, 2]. Однако в большинстве таких работ рассматривались простые однокомпонентные материалы (например, Si и Ge), поэтому данные о величинах E_d для многокомпонентных материалов практически отсутствуют.

Цель настоящей работы — вычисление пороговых энергий смещения атомов Si и C в материале c-SiC с помощью компьютерного моделирования в рамках метода классической молекулярной динамики (МД).

Для проведения вычислений пакет программ, ранее разработанный авторами [3], был модифицирован с целью применения метода МД для моделирования полупроводниковых материалов. При расчетах использовался многочастичный потенциал Терсова [4, 5], специально разработанный для описания свойств c-SiC. В области малых межатомных расстояний было проведено гладкое сопряжение данного потенциала с потенциалом ZBL [6] с целью корректного учёта высокоэнергетических соударений атомов (при этом использовалась методика, предложенная в [7, 8]). В расчетах использовался модельный кристалл SiC, состоящий из 1728 атомов. Использовались периодические граничные условия. Начальная температура выбиралась $T=0$ К. В процессе моделирования смещения первично выбитого атома (ПВА) температура модельного кристалла повышалась незначительно, не более чем на 50 К.

Для определения величины E_d выбирался атом (из числа атомов, образующих базис элементарной ячейки, находящейся в центре модельного кристалла), которому сообщался некоторый импульс в пределах конуса с углом 10° вокруг выбранного кристаллографического направления. Далее прослеживалась эволюция как ПВА, так и всей системы в течение 4 пс, после чего проводился анализ конечной конфигурации атомов с целью выявления точечных дефектов (пар Френкеля). При этом использовалась процедура “метода связанных ячеек”, обеспечивающего наиболее эффективный поиск ближайших соседей каждого атома [9]. По результатам “розыгрыша” нескольких событий смещения ПВА с фиксированной начальной энергией определялась вероятность образования “устойчивой” пары Френкеля P_f . Был рассмотрен ряд начальных энергий E ПВА, при этом величина P_f варьировалась от 0 до 1. Таким образом, была построена зависимость $P_f(E)$, из которой вычислялась средняя величина пороговой энергии смещения E_d для заданного кристаллографического направления. В данной работе были рассмотрены два направления — {111} и {100}. Для сравнения, аналогичным образом были вычислены пороговые энергии смещения в чистом кремнии. Результаты расчёта приведены в табл. 1.

Таблица 1. Пороговые энергии смещения E_d в кремнии и карбиде кремния.

Вещество	Атом	Направление	E_d
c-SiC	Si	{100}	31.1
		{111}	25.7
	C	{100}	24.6
		{111}	35.5

Si	Si	{100}	11.3
		{111}	13.9

Из табл. 1 видно, что в случае чистого кремния расчётная величина E_d находится в пределах 11–14 эВ, что хорошо согласуется с усреднённой по всем кристаллографическим направлениям оценкой (13 эВ), полученной в [10] путем обобщения известных экспериментальных данных. Величина E_d для атомов кремния в составе карбида кремния оказывается существенно выше, чем в чистом Si (для обоих рассмотренных направлений), что качественно согласуется с результатами недавно опубликованных экспериментов [11]. С учетом достаточно высокого значения E_d для атомов C можно сделать вывод о том, что SiC обладает повышенной радиационной стойкостью.

ЛИТЕРАТУРА:

1. L.A.Miller, D.K.Brice, A.K.Prinja, S.T.Picraux // Phys. Rev. B **49** (1994) 16953.
2. R.S.Averback, M.Ghaly // Nuclear Instruments and Meth. In Phys. Res. B **127-128** (1997) 1.
3. E.E.Zhurkin, A.S.Kolesnikov. //Nucl.Instrum. and Meth. in Phys. Res. B **202** (2003) 269.
4. J.Tersoff // Phys. Rev. B **39** (1989) 5566.
5. J.Tersoff // Phys. Rev. B **41** (1990) 3248.
6. J.F.Ziegler, J.P.Biersack, and U.Littmark. The Stopping and Range of Ions in Solid. - Pergamonn Press, New York, 1985. - 321 p.
7. J.Tarus, K.Nordlund, A.Kuronen, J.Keinonen // Phys. Rev. B **58** (1998) 9907.
8. K.Albe, K.Nordlund, R.S.Averback // Phys. Rev. B **65** (2002) 195124.
9. Allen M.P., Tildesley D.J. Computer simulation of liquids.-Clarendon Press, Oxford, 1987. - 387 p.
10. В.Экштайн. Компьютерное моделирование взаимодействия частиц с поверхностью твердого тела. – М.: Мир, 1995. - 320 с.
11. X.Kerbiriou, M.-F.Barthe, S.Esnouf, P.Desgardin, G.Blondiaux and G.Petite // Journal of Nuclear Materials **362**, Issues 2-3(2007) 202.