

© Галашиев А. Е. *, Полухин В. А. **, Измоденов И. А. ***, Рахманова О. Р. ***

ПОЛУЧЕНИЕ НЕКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ НАНОЧАСТИЦ КРЕМНИЯ. КОМПЬЮТЕРНЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТ

* *Институт теплофизики УО РАН, Россия, 620219, Екатеринбург, ГСП-828, Амундсена, 106*

** *Институт металлургии УО РАН, Россия, 620219, Екатеринбург, ГСП-828, Амундсена, 101*

*** *Институт промышленной экологии УО РАН, Россия, 620219, Екатеринбург, ГСП-594,
С. Ковалевской, 20 а*

Методом молекулярной динамики исследованы физические свойства застеклованных и аморфных наночастиц кремния, содержащих 300, 400 и 500 атомов. При ограниченном числе степеней свободы внутренняя энергия аморфной фазы чаще бывает ниже, чем энергия стекла. Структура центральной области наночастиц кремния детально исследована с помощью построения многогранников Вороного, позволяющих определить среднюю длину связей и их число. Распределение углов между связями Si—Si и распределение длин связей определяют структурные различия между двумя состояниями наночастиц. Локальные упаковки атомов в наноразмерных частицах Si-стекла характеризуются большим разнообразием флуктуаций характерного межатомного расстояния. Коэффициенты самодиффузии, установленные через средние квадраты смещения атомов, имеют более низкие значения для аморфных наночастиц, что обусловлено преимущественной диффузией по свободным связям Si—Si.

Введение. Структура твердых кластеров, состоящих из нескольких десятков атомов, часто не соответствует кристаллической решетке объемного твердого тела [1]. Кластеры кремния, содержащие порядка двух десятков атомов, имеют множество изомеров и отличаются большим разнообразием форм и упаковок атомов [2]. Сферическая форма кластеров кремния является равновесной, если эти кластеры содержат более 28 атомов [3]. Были предприняты попытки вычислений *ab-initio* [4], чтобы понять в области каких размеров кластеров Si происходит переход к алмазоподобной структуре. Было показано, что переход к объемной структуре может появиться для кластеров, размер которых составляет 100 и более атомов. Однако когда на поверхность кластеров Si осаждался водород, тенденция для появления объемной структуры алмаза появлялась у кластеров меньших размеров благодаря насыщению плавающих связей [5].

В дальнейшем для определенности аморфным будем называть твердое состояние, достигнутое минуя жидкое состояние, т.е. не через закалку расплава. В то время как стеклом будем считать твердое неравновесное состояние, полученное именно быстрым переохлаждением жидкости. Есть указания на присутствие фазового перехода I рода аморфное тело–жидкость ($a-l$) и жидкость–жидкость ($l-l$) в такой системе [6, 7], однако результаты молекулярно-динамического моделирования с потенциалом Стиллинжера–Вебера (SW) подтверждают лишь один переход ($l-l$), происходящий при 1060 К [8–10]. В литературе существует много работ, посвященных изучению свойств объемного кремния [11–14] и небольших кластеров этого полупроводника с числом атомов не более 50 [15–17]. Физические свойства кластеров кремния с числом атомов от 30 до 480 исследованы в работе [18]. В широкой области температур ($600 < T < 2000$ К) структура кластеров соответствовала структуре застеклованного кремния.

Цель настоящей работы – различными способами получить аморфные и стеклообразные наночастицы кремния в молекулярно-динамической модели, определить различия в энергии, структуре и кинетических свойствах между наночастицами, находящимися в застеклованном и аморфном состояниях.

Потенциал Стиллинжера–Вебера. Предложенный Стиллинжером и Вебером (SW) [19] потенциал межатомного взаимодействия Φ состоит из двух частей, так что потенциальная энергия U представляется в виде

$$U = \epsilon A \left[\sum_{(i,j)} \Phi_{ij}^{(2)}(r_{ij}) + \frac{\pi}{A} \sum_{(j,k)} \Phi_{jik}^{(3)}(r_{ij}, r_{ik}) \right], \quad (1)$$

где параметр ϵA представляет энергию, при которой в динамической системе устанавливается требуемая ковалентная связь. Эта величина обеспечивает реалистичные валентные

колебания атомов. Параметр A в (1) выполняет вспомогательную функцию: в точке минимума парный потенциал $A\Phi_{ij}^{(2)}(r_{ij}^{\min}) = -1$.

Вклад в Φ , описывающий парные взаимодействия, задается как

$$\Phi_{ij}^{(2)}(r_{ij}) = \left[B \left(\frac{r_{ij}}{y} \right)^{-p} - 1 \right] \exp \left(\frac{1}{\frac{r_{ij}}{y} - a} \right) \cdot \Theta(a - r_{ij}/y), \quad (2)$$

а вклад, определяющий трехчастичные взаимодействия, записывается в форме

$$\Phi_{jik}^{(3)}(r_{ij}, r_{ik}) = \exp \left[\frac{\Gamma}{r_{ij}/y - a} + \frac{\Gamma}{r_{ik}/y - a} \right] (\cos \alpha_{jik} - \cos \alpha^0)^2 \cdot \Theta(a - r_{ij}/y) \cdot \Theta(a - r_{ik}/y). \quad (3)$$

Здесь a , B , p , Γ – эмпирические параметры, $\Theta(x)$ – ступенчатая функцию Хевисайда, а α^0 – тетраэдрический угол, так что $\cos \alpha^0 = -1/3$. Интенсивность деформационных колебаний атомов задается величиной ϵ_l . Перемещения атомов, приводящие к изменению валентного угла, главным образом реализуются через трехчастичное взаимодействие. Значения используемых параметров приведены в таблице. Выбранное значение параметра y обеспечивает равенство $A\Phi_{ij}^{(2)}(2^{1/6}) = 0$. Представленные во втором столбце таблицы параметры были получены с использованием экспериментальных данных как для кристаллического, так и жидкого кремния. В третьей графе таблицы приведены параметры этого потенциала, предназначенные для моделирования объемной аморфной фазы кремния [20]. Эти параметры подбирались по соответствию рассчитанных данных для модуля объемного сжатия, отношения Пуассона, скорости звука и плотности с экспериментальными.

Компьютерная модель. Численное интегрирование уравнений движения выполнялось по схеме Верле [21], где непосредственно вычисляются скорости частиц. Эта схема с одной стороны является одной из самых устойчивых, а с другой – позволяет дос-

точно точно контролировать температуру в модели. Временной шаг Δt составлял 10^{-16} с. Расчеты выполнялись для систем, содержащих 300, 400 и 500 атомов Si. Для каждого размера наночастицы разупорядоченное твердое состояние достигалось двумя различными путями. В первом случае в исходном состоянии наночастица имела кристаллическую структуру с алмазоподобной решеткой, т.е. соответствовала структуре объемного кристаллического кремния. Процедура получения стеклообразного состояния заключалась в следующем: на первом этапе расчета кристаллическая наночастица удерживалась при температуре 3000 К в течение 1 млн. временных шагов. За этот период времени нанокристалл плавился и приобретал структуру жидкой наночастицы. В течение следующего 1 млн. шагов проводилось быстрое охлаждение системы. Скорость охлаждения составляла приблизительно 0.0027 град/шаг, т.е. около $2.7 \cdot 10^{13}$ град/с. В конце этого расчета температура наночастиц составляла 300 ± 50 К. Структурная релаксация быстро охлажденной неравновесной наночастицы выполнялась на протяжении еще 1 млн. шагов при температуре 300 К. Таким образом получалось стеклообразное состояние системы с ограниченным числом степеней свободы. Аморфное состояние наночастиц достигалось другим путем. Предварительно в сферической области соответствующего размера с помощью генератора случайных чисел создавалась конфигурация с рыхлой нерегулярной упаковкой, в которой каждый атом Si имел геометрических соседей на расстоянии не превышающем 0.3 нм. Релаксация полученной структуры проводилась в два этапа при температуре 300 К. Продолжительность первого этапа составляла $10000 \Delta t$. На этом этапе взаимодействие между атомами Si выполнялось на основе потенциала Стиллинжера–Вебера, но использовались параметры потенциала, предназначенные для моделирования объемной аморфной фазы кремния [19] (см. таблицу). В ходе этого расчета значительно сокращался объем наночастицы и уменьшались расстояния между атомами. Длительность этого расчета была ограничена, чтобы избежать перекрытия атомов, определяемого путем сопоставления взаимных межатомных расстояний с параметром u . Параметры потенциала SW,

предлагаемые для моделирования объемного аморфного кремния оказались непригодными для моделирования аморфных наночастиц Si. При МД расчете свойств наночастицы Si длиной в несколько десятков тысяч временных шагов с параметрами потенциала SW, приведенными в третьей графе таблицы, наблюдалось слипание атомов Si. В грубом приближении этот расчет можно интерпретировать как моделирование формирования наночастицы кремния в среде благородного газа, когда столкновения молекул газа с атомами Si приводят к образованию наночастицы. Расчет аморфного состояния наночастиц был продолжен также с потенциалом SW, но параметры потенциала были выбраны из второй графы таблицы, т.е. соответствовали параметрам работы [20]. Длительность расчета, в котором осуществлялась релаксация достигнутого аморфного состояния, составляла 1 млн. временных шагов. Конфигурации наночастицы Si₃₀₀, отражающие ее застеклованное и аморфное состояния, представлены на рис.1. Видно, что стеклу соответствует более плотная упаковка, особенно центральной области наночастицы. Атомы поверхности наночастицы стекла образуют рыхлый слой. Аморфная наночастица имеет другое строение. Она обладает более рыхлой упаковкой атомов. Центральное ядро не однородно, в нем присутствуют фрагменты плотной упаковки и пустоты, которых не наблюдается в случае стекла.

Строение частиц большего размера отражает основные черты структуры наночастиц Si₃₀₀. На рис. 2 показана плотность сферических концентрических слоев застеклованной (кривая 1) и аморфной (кривая 2) наночастицы Si₅₀₀. Средняя плотность застеклованной наночастицы (прямая 3, рис. 2) выше, чем аморфной (прямая 4), но ниже, чем плотность кристалла (прямая 5). Плотность в средней части застеклованной наночастицы Si₅₀₀ выше, чем у соответствующей аморфной частицы. Переход от упаковки с высокой плотностью к упаковке с низкой плотностью здесь происходит менее резко, чем у аморфной наночастицы. В целом аморфная наночастица обладает более равномерной плотностью и имеет более тонкий поверхностный слой с плотностью ниже средней.

Внутренняя энергия. Изменение внутренней энергии U для застеклованной и аморфной наночастиц демонстрирует рис. 3. После периода закалки ($t = 0$) наблюдается большой разброс в значениях U в зависимости от размера наночастицы. Самой низкой энергией в этот момент обладала наночастица Si_{300} , а самой высокой Si_{400} . Однако уже к моменту времени 50 пс значения энергий исследуемых наночастиц сблизилась и структурная релаксация полученного застеклованного состояния большей частью завершилась. В дальнейшем наблюдаются флуктуации величины U около квазиравновесных значений. В конце расчета самой низкой энергией в застеклованном состоянии обладает частица Si_{500} , а самой высокой – наночастица Si_{400} . Заметим, что внутренняя энергия наночастицы Si_{500} (3.75 эВ) близка к энергии частицы Si_{480} , полученной при $T = 600$ К в работе [18] при использовании потенциала взаимодействия SW. На вставке рис. 3 показано поведение внутренней энергии наночастиц в период получения аморфного состояния. Здесь за нулевой момент времени принято состояние наночастиц, полученное после короткого расчета, моделирующего конденсацию атомов кремния в среде инертного газа. Представленный на вставке рис. 3 этап расчета можно характеризовать как конденсацию атомов Si, идущую в вакууме с существенно более низкой скоростью. Энергия системы на этом этапе расчета сильно зависит от числа атомов, содержащихся в наночастице. Для наночастицы Si_{300} начальное уменьшение энергии сменяется (при $t = 30$ пс) ростом величины U (до $t = 60$ пс) и последующем ее сохранении ($U = -3.4$ эВ). Для наночастицы Si_{400} наблюдается понижение энергии с сильными флуктуациями величины U во времени. В случае частицы Si_{500} энергия U снижается более плавно. Конечное значение энергии U для аморфного состояния наночастиц, как правило, ниже, чем для застеклованного состояния. Исключение составляет наночастица Si_{300} , энергия которой в аморфном состоянии выше, чем в застеклованном.

Структура наночастиц. Структурные изменения, происходящие на различных этапах расчета, можно проследить по изменению распределения валентных углов α . Валентным считался угол с вершиной в центре одного из атомов Si, длины сторон которого (отрезки Si—Si) не превышали расстояния 0.3 нм. Это значение близко к параметру длины в «гибком» потенциале Морзе, характеризующем взаимодействие Si—Si [22]. Распределение углов α для различных этапов расчета, описывающих состояния наночастицы Si₃₀₀, показаны на рис. 4. Для первых трех этапов расчета, выполняемых с целью получения застеклованного состояния, главный максимум в α -распределении приходится на 60°. При $T = 3000$ К (первый этап) в α -распределении зарождается пик при угле $\alpha = 114^\circ$. Заметим, что тетраэдрическую координацию атомов определяет угол $\alpha = 109.5^\circ$. В период быстрого охлаждения (2-й этап) значительно вырос пик при угле 108°. За время релаксации структуры стекла (3-й этап) оформляется широкий пик в окрестности угла $\alpha = 114^\circ$ с острым всплеском при 117°. Еще один отчетливый пик сформировался при $\alpha = 102^\circ$. Для аморфного состояния наночастицы (4-й этап) характерно значительное увеличение интенсивности α -спектра в области углов, отражающих координацию решетки алмаза с острым максимумом при угле $\alpha = 108^\circ$. В этом случае интенсивности пиков при углах 60° и 108° сопоставимы.

Связи Si—Si в наночастицах находились с помощью построения многогранников Вороного (МВ). Грани МВ определяют ближайших геометрических соседей. Среднее расстояние до ближайших соседей, не выходящих за пределы сферы взаимодействия ($R \leq 0.37$ нм), принималось за длину L_6 связи Si—Si. Распределение полученных таким образом длин связей Si—Si в наночастице Si₅₀₀ для различных этапов расчета представлено на рис. 5. При $T = 3000$ К L_6 -распределение имеет бимодальную форму. В расплаве Si существует две характерные длины, характеризующие взаимное расположение соседей: первая – в плотных локальных группировках, а вторая – между атомами со-

седних группировок. В период быстрого охлаждения системы в спектре L_6 появляются пять максимумов с главным при $L_6 = 0.2$ нм. По-видимому, здесь формируется много видов плотных образований с различным характером упаковки атомов. В период релаксации замороженного состояния (рис. 4, в) число пиков в L_6 -распределении сократилось до трех. Самый высокий пик сдвинулся вправо, т.е. расстояния в плотных локальных образованиях несколько увеличились. В случае аморфного состояния в L_6 -спектре наночастиц наблюдаются два пика: первый из которых явно доминирует, а второй расщепленный пик имеет относительно низкую интенсивность. Первый пик, характеризующий плотную локальную упаковку атомов размещается на несколько большем расстоянии, чем аналогичный пик L_6 -спектра наночастицы Si_{500} , находящейся в застеклованном состоянии. Различие L_6 -спектров застеклованного и аморфного состояний наночастиц свидетельствует о заметном различии их структур.

Коэффициент самодиффузии. Автокорреляционная функция скорости (АФС) застеклованной и аморфной наночастицы Si_{400} показана на рис. 6, а. АФС частиц стекла монотонно уменьшается со временем, но за 20 пс полного затухания эта функция не была получена. В плотной упаковке координированного ковалентными связями наночастиц Si-стекла скорости атомов оказываются сильно коррелированными во времени и медленно меняют свое направление. Вследствие этого АФС медленно затухает. Наличие низкокоординационного ближнего порядка и жестких ковалентных связей в наночастицах Si-стекла способствует образованию при поступательном движении атомов характерных тангенциальных участков индивидуальных траекторий с орбитальным огибанием «центров» с наиболее сильными связями [23]. В случае аморфного состояния ситуация резко изменяется. Более рыхлая упаковка и присутствие пустот позволяет Si-связям переключаться значительно чаще. Это способствует более быстрому затуханию АФС. Однако и в этом случае АФС не пересекает оси абсцисс, т.е. не принимает отрицательных значений. Коэффициент самодиффузии с помощью такой функции определить не удастся. Поведение среднего

квадрата смещения атомов $\langle \Delta r^2 \rangle(t)$ для этой наночастицы отражает рис. 6, б. Здесь показана функция $\langle \Delta r^2 \rangle(t)$ на этапе быстрого охлаждения наночастицы и в период релаксации ее структуры к стеклу. Также приведена аналогичная функция для аморфной наночастицы Si₄₀₀. Видно, что наиболее значительные перемещения атомов происходят во времена заковки, т.е. на этапе быстрого охлаждения. Средние смещения атомов в застеклованном состоянии наночастиц всегда больше, чем для аморфного состояния. Коэффициент самодиффузии атомов определяется из соотношения

$$D = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\langle \Delta r^2 \rangle}{6t}, \quad (4)$$

где t – временной интервал, на котором происходит рассматриваемое смещение атомов. Для исследуемых наночастиц кремния коэффициенты самодиффузии застеклованного состояния при температуре 300 К составляют $(0.109 \pm 0.001) \cdot 10^{-10}$ м²/с. Для частиц Si, находящихся в аморфном состоянии, величина D находится в интервале $(0.054-0.097) \cdot 10^{-10}$ м²/с. Экспериментальное значение коэффициента диффузии в поверхности кремния при $T = 1273$ К составляет $0.04 \cdot 10^{-10}$ м²/с [18], т.е. приблизительно в 2.7 раза меньше, чем для исследуемых здесь аморфных наночастиц. Однако полученные нами значения D хорошо согласуются с коэффициентом самодиффузии ($0.203 \cdot 10^{-10}$ м²/с, $T = 600$ К) застеклованной наночастицы Si₄₈₀ также моделируемой [18] с помощью потенциала SW. Есть мнение, что потенциал SW недооценивает энергию связи в объемном кремнии, в следствие чего в компьютерном эксперименте получают завышенное значение коэффициента поверхностной диффузии [18]. Однако и молекулярная динамика жесткого связывания предсказывает значения величины D в объемном кремнии более высокие [24], чем дает эксперимент. В физическом эксперименте сложно устранить поверхностную оксидацию, которая уменьшает коэффициент самодиффузии.

Заключение. Ковалентные взаимодействия определяют специфику свойств кремния, среди которых высокое значение диэлектрической проницаемости, изменение знака

температурного коэффициента линейного расширения при $T = 120$ К и другие. Перевод материалов в ультрадисперсное состояние приводит к качественному изменению их свойств. Характерные размеры наночастиц часто соизмеримы с характерным масштабом физического явления. В большинстве случаев необычные свойства наноматериалов проявляются, когда размер наночастиц менее 100 нм. Исследуемые здесь наночастицы кремния имеют характерный размер $\sim 3\text{--}3.5$ нм. В этих наночастицах значительна доля связей, длины которых меньше, чем в случае ковалентных связей в кристалле кремния. Присутствие коротких связей, как известно, способствуют металлизации состояний кремния. С понижением подвижности атомов Si усиливается характер ковалентных связей, предопределяя переход от металла к полупроводнику. Проведенные расчеты показывают, что как в стеклообразных, так и аморфных наночастицах кремния имеет место радикальное отличие от алмазоподобной тетраэдрической сетки связей. При этом наблюдается явная тенденция к образованию между соседними атомами характерных углов φ , отличных от угла 109.5° . Объединяет эти состояния угол $\varphi = 60^\circ$, во многом как следствие нерегулярной упаковки атомов, а разъединяет локализация второго пика φ -распределения. Местоположение второго пика φ -спектра в аморфной наночастице ближе к валентному углу 109.5° , чем аналогичная величина для наночастицы Si-стекла.

Важным диагностическим средством в изучении различий физических свойств застеклованной и аморфной наночастиц кремния является расчет коэффициента самодиффузии. Коэффициент самодиффузии имеет более высокие значения для частиц Si-стекла, имеющих плотную упаковку атомов в центральной области и достаточно рыхлую на периферии. Аморфные наночастицы кремния, имеющие в радиальном направлении более однородную плотность, характеризуются меньшим значением коэффициента D . Возможно, это связано с тем, что диффузия в наночастицах идет через свободные связи Si—Si, число которых в частицах Si-стекла, как правило, больше, чем в аморфных наночастицах. Таким образом, имея более низкие значения коэффициента самодиффузии, аморфные на-

ночастицы кремния скорее приобретают свойства полупроводника, чем наночастицы Si-стекла. Повышение плотности свободных связей делает идентификацию структурных дефектов более надежной. В этом случае процесс диффузии в некристаллических частицах кремния можно рассматривать в форме образования, взаимодействия и миграции дефектов. Иногда диффузия может проходить по типу эстафетной трансляции свободных связей.

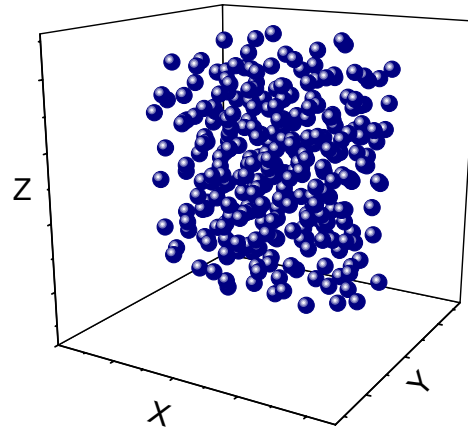
Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 04-03-32053).

С п и с о к л и т е р а т у р ы

1. *Галашев А. Е.* Устойчивость моно- и поливакансий в наночастице никеля // Поверхность. Рентген. синхротронные и нейтронные исслед. 2005. № 1. С. 77–84.
2. *Kawazoe Y., Kondow T., Ohno K.* Clusters and nanomaterials. theory and experiment. Berlin: Springer, 2002. 344 p.
3. *Kaxiras E., Jackson K.* Shape of small silicon clusters // Phys. Rev. Lett. 1993. V. 71. N 5. P. 727–730.
4. *Esfarjani K., Kawazoe Y.* Computational materials science from ab-initio to monte-Carlo methods. Berlin: Springer. 1999.
5. *Полухин В. А.* Моделирование наноструктуры и прекурсорных состояний. Екатеринбург: УрО РАН. 2004. 208 с.
6. *Ramakrishna M. V., Pan J.* Chemical reactions of silicon clusters // J. Chem. Phys. 1994. V. 101. N 9. P. 8108–8118.
7. *Donovan E. P., Spaepen F., Turnbull D.* et al. Calorimetric studies of crystallization and relaxation of amorphous Si and Ge prepared by ion implantation // J. Appl. Phys. 1985. V. 57. N 7. P. 1795–1804.
8. *Keblinski P., Bazant M. Z., Dash R. K.* et al. Thermodynamic behavior of a model covalent material described by the environment-dependent interatomic potential // Phys. Rev. B. 2002. V. 66. N 06. P. 4104–4118.
9. *Broughton J. Q., Li X. P.* Phase diagram of silicon by molecular dynamics // Phys. Rev. B. 1987. V. 35. N 17. P. 9120–9127.

10. *Luedtke W. D., Landman U.* Preparation, structure, dynamics and energetic of amorphous silicon: A molecular dynamics study // *Phys. Rev. B.* 1989. V. 40. N 2. P. 1164–1174.
11. *Sastry S., Angell C. A.* Liquid-liquid phase transition in supercooled silicon // *Nature Mater.* 2003. V. 2. P. 739–743.
12. *Biswas R., Grest G. S., Soukoulis C. M.* Generation of amorphous-silicon structures with use of molecular-dynamics simulations // *Phys. Rev. B.* 1987. V. 36. P. 7437–7441.
13. *Biswas R., Bouchard A. M., Kamitakahara W. A.* et al. Vibrational localization in amorphous silicon // *Phys. Rev. Lett.* 1988. V. 60. N 22. P. 2280–2283.
14. *Kwon I., Biswas R., Soukoulis C. M.* Molecular dynamic simulations of defect formation in hydrogenated amorphous silicon // *Phys. Rev. B.* 1992. V. 45. N 7. P. 3332–3339.
15. *Deb S. K., Wilding M., Somayazulu M.* et al. Pressure-induced amorphization and amorphous-amorphous transition in densified porous silicon // *Nature (London).* 2001. V. 414. N 6863. P. 528–530.
16. *Rothlisberger U., Andreoni W., Parrinello M.* The structure of nanoscale silicon clusters // *Phys. Rev. Lett.* 1994. V. 72. N 5. P. 665–668.
17. *Kobayashi K., Nagase S. A.* Theoretical study of stability of the fullerene-like cage structures of silicon clusters // *Bull. Chem. Soc. Japan.* 1993. V. 66. P. 3334–3338.
18. *Zachariah M. R., Carrier M. J., Blaisten-Barojas E.* Properties of silicon nanoparticles: A molecular dynamics study // *J. Phys. Chem.* 1996. V. 100. P. 14856–14864.
19. *Stillinger F. H., Weber T. A.* Computer simulation of local order in condensed phases of silicon // *Phys. Rev. B.* 1985. V. 31. N 8. P. 5262–5271.
20. *Vink R. L. C., Barkema G. T., Van der Weg W. F., Mousseau N.* Fitting the stillinger–weber potential to amorphous silicon // *J. Non-Crystalline Solids.* 2001. V. 282. P. 248–255.
21. *Verlet L.* Computer «experiments» on classical fluids. 1. Thermodynamical properties of lennard–jones molecules // *Phys. Rev.* 1967. V. 159. N 1. P. 98–103.
22. *Kubicki J. D., Lasaga A. C.* Molecular dynamics simulations of SiO₂ melt and glass: Ionic and covalent models // *Amer. Mineralogist.* 1988. V. 73. P. 941–955.
23. *Полухин В. А., Кибанова Е. А.* Молекулярно-динамическое моделирование аморфизации углерода и термического разрушения фуллерена C₆₀ // *Ж. физ. химии.* 1999. Т. 73. № 3. С. 494–499.
24. *Wang C. Z.* Tight-binding molecular-dynamics study of liquid Si // *Phys. Rev. B.* 1992. V. 45. N 21. P. 12 227–12 232.

(a)



(б)

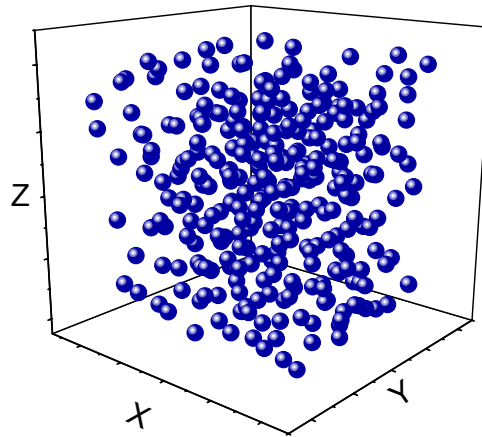


Рис. 1. Конфигурация наночастицы Si_{300} , соответствующая моменту времени 100 пс при $T = 300 \text{ К}$.

a – стекло, *б* – аморфное состояние.

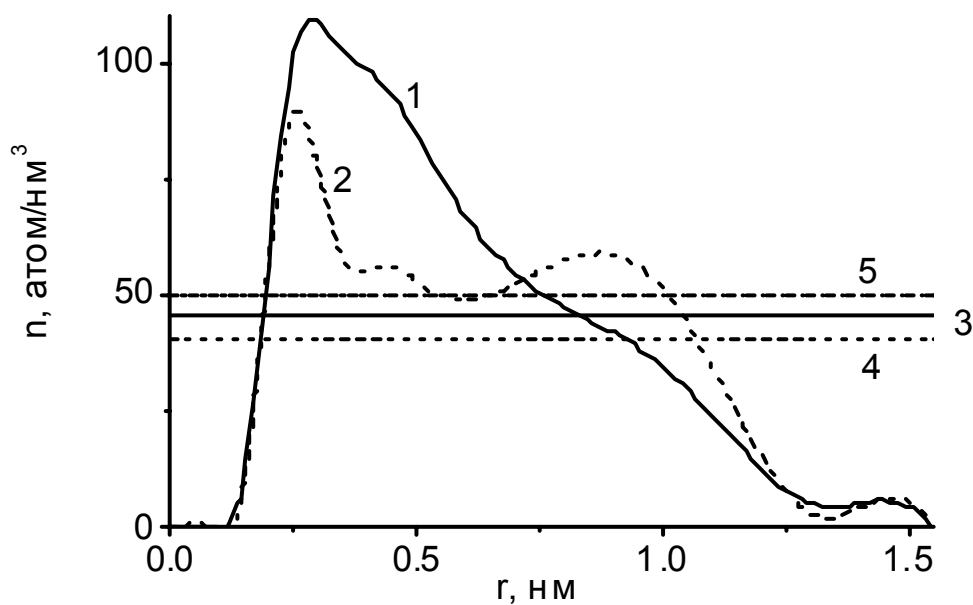


Рис. 2. Радиальное распределение плотности атомов в застеклованной (1) и аморфной (2) наночастицах Si_{500} .

Средняя плотность застеклованной (3), аморфной (4) наночастиц Si_{500} и плотность кристаллического кремния (5).

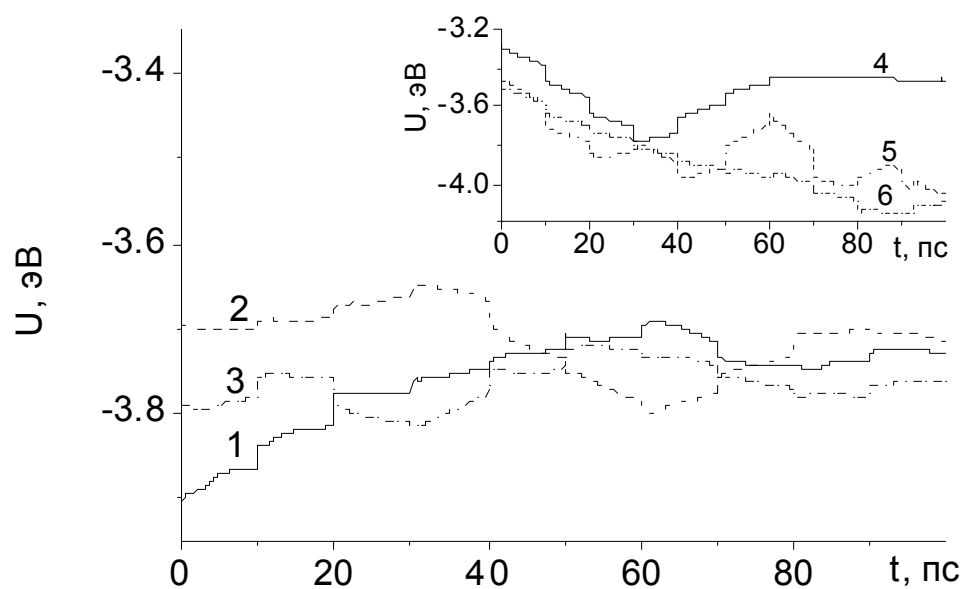


Рис. 3. Внутренняя энергия застеклованной (1–3), аморфной (4–6) наночастиц кремния: 1, 4 – Si_{300} ; 2, 5 – Si_{400} ; 3, 6 – Si_{500} .

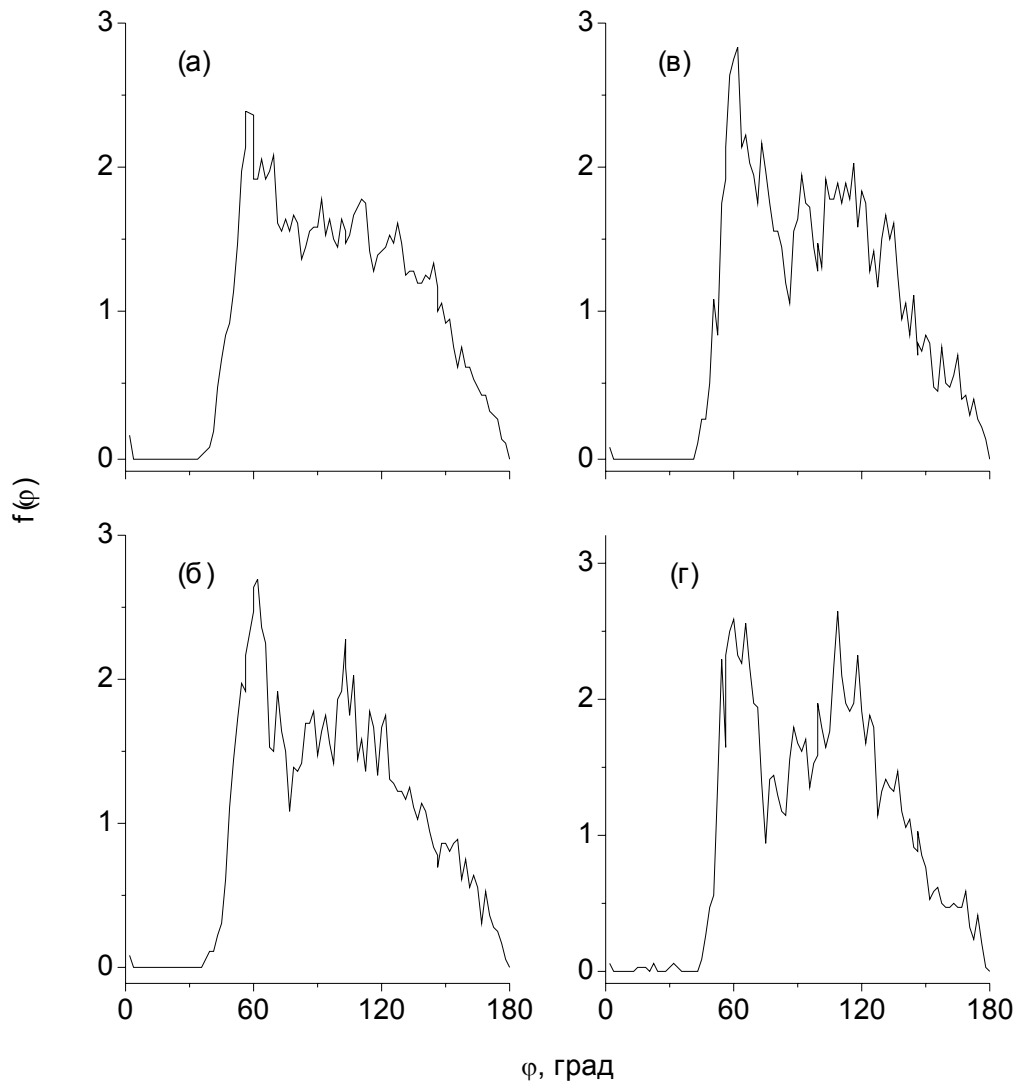


Рис. 4. Распределение углов φ между связями Si—Si на этапе расплавления кристаллической наночастицы (а), во время ее закалки (б), в застеклованном (в) и аморфном (г) состояниях наночастицы Si_{300} .

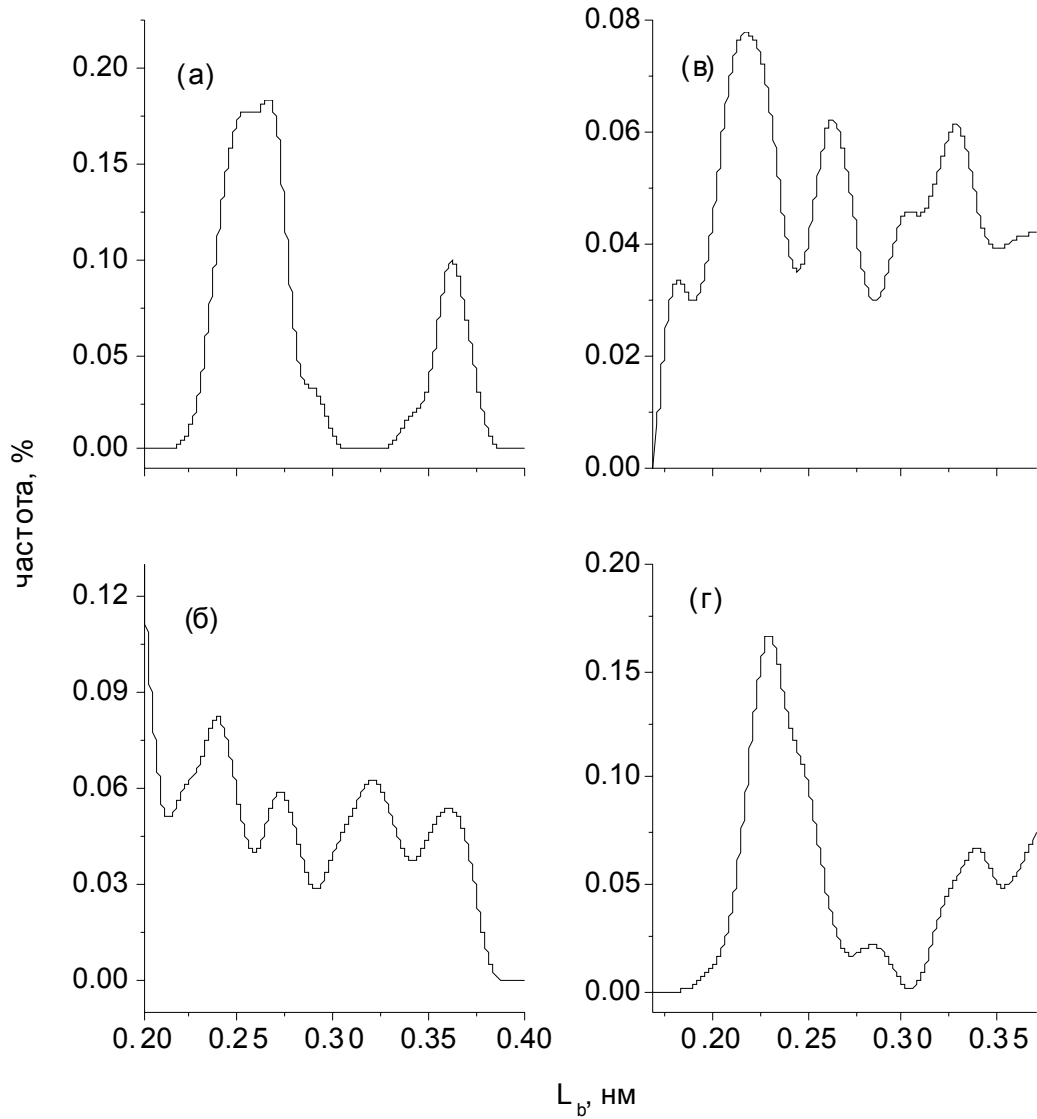


Рис. 5. Распределение расстояний между ближайшими геометрическими соседями на этапе расплавления кристаллической наночастицы (а), во время ее закалки (б), в застеклованном (в) и аморфном (г) состояниях наночастицы Si_{500} .

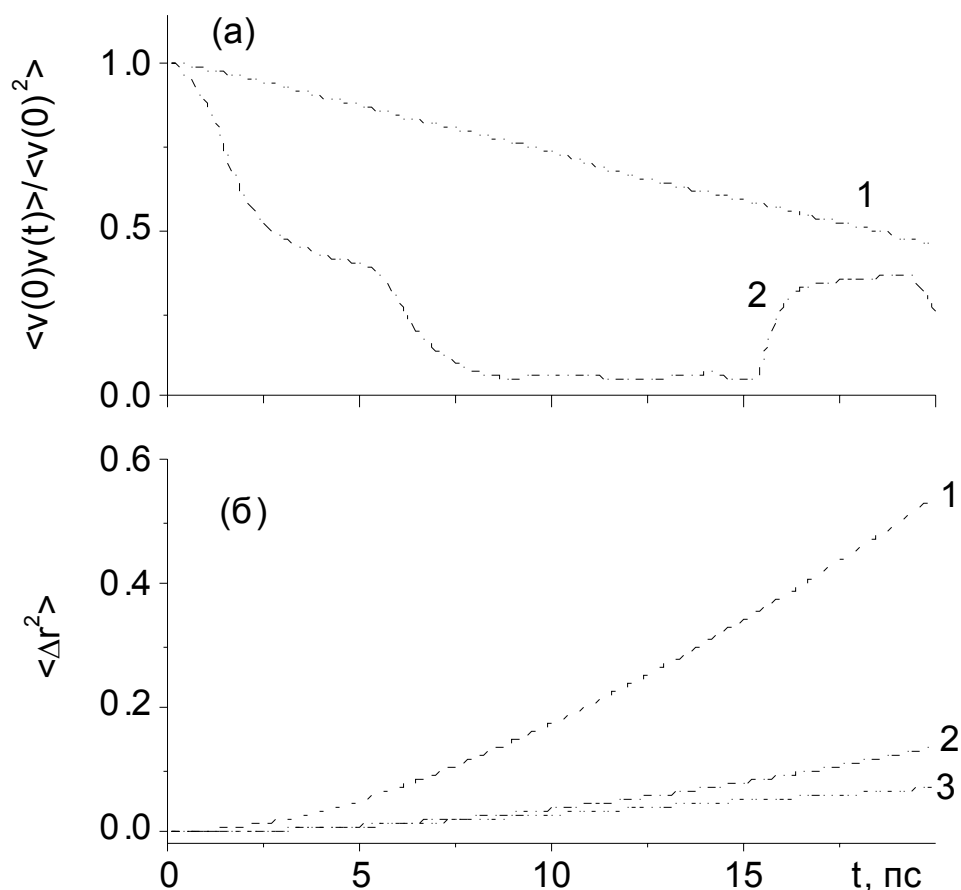


Рис. 6. Автокорреляционная функция скорости *a* застеклованного (1) и аморфного (2) состояний наночастицы Si_{400} , средний квадрат смещения атомов *b* в период закалки (1), застеклованного (2) и аморфного (3) состояний этой наночастицы.

Таблица 1.

Значения параметров потенциала Стиллинджера–Вебера

Параметр	Кристаллический или жидкий Si	Аморфное состоя- ние объемного Si
ϵ , эВ	2.16826	1.64833
A	7.049556277	7.049556277
B	0.6022245584	0.6022245584
u , нм	0.20951	0.20951
p	4	4
a	1.8	1.8
l	21.0	31.5
Γ	1.2	1.2