



ИПМ им.М.В.Келдыша РАН • Электронная библиотека

Препринты ИПМ • Препринт № 74 за 2018 г.



ISSN 2071-2898 (Print)  
ISSN 2071-2901 (Online)

Королева О.Н., Мажукин А.В.

Атомистическое  
моделирование  
теплофизических  
характеристик кремния в  
области фазового перехода  
полупроводник-металл

**Рекомендуемая форма библиографической ссылки:** Королева О.Н., Мажукин А.В. Атомистическое моделирование теплофизических характеристик кремния в области фазового перехода полупроводник-металл // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2018. № 74. 24 с. doi:[10.20948/prepr-2018-74](https://doi.org/10.20948/prepr-2018-74)  
URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2018-74>

**Ордена Ленина  
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ  
имени М.В.Келдыша  
Российской академии наук**

**О.Н. Королева, А.В. Мажукин**

**Атомистическое моделирование  
теплофизических характеристик кремния  
в области фазового перехода  
полупроводник — металл**

**Москва — 2018**

*Королева О.Н., Мажукин А.В.*

**Атомистическое моделирование теплофизических характеристик кремния в области фазового перехода полупроводник — металл**

В температурной области фазового перехода полупроводник—металл с помощью молекулярно-динамического моделирования (МДМ) определяются равновесные свойства кристаллического и расплавленного кремния. Определены барические зависимости удельной теплоты плавления и равновесной температуры плавления, температурные зависимости плотности, линейного размера образца, коэффициента линейного расширения, энтальпии, теплоемкости. Полученные зависимости свойств кремния аппроксимированы полиномами невысоких степеней. Результаты сравнения полученных характеристик кремния с экспериментальными данными показывают приемлемое качественное и количественное совпадение. Представлена численная и графическая информация о полученных свойствах и результатах сравнения с данными экспериментов.

**Ключевые слова:** атомистическое моделирование, фазовые превращения, кремний, равновесные теплофизические свойства.

*Olga Nikolaevna Koroleva, Alexander Vladimirovich Mazhukin.*

**Atomistic modeling of the thermophysical characteristics of silicon in the region of the semiconductor—metal phase transition**

In the temperature range of the semiconductor—metal phase transition by means of molecular dynamics modeling (MDM), the equilibrium properties of crystalline and molten silicon are determined. The pressure dependences of the specific heat of melting and the equilibrium melting temperature, the temperature dependences of the density, the linear size of the sample, the coefficient of linear expansion, enthalpy, and heat capacity are determined. The obtained dependences of the properties of silicon are approximated by polynomials of low degrees. The results of the comparison of the obtained characteristics of silicon with experimental data show an acceptable qualitative and quantitative agreement. Numerical and graphical information on the obtained properties and results of comparison with experimental data are presented.

**Key words:** Atomistic Modeling, Phase Transition, Silicon, Equilibrium Thermophysical Properties

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, проект № 16-07-00263.

## 1. Введение

Кристаллический кремний (с-Si) относится к одному из наиболее распространённых конструкционных и технологических материалов. Исследованию термодинамических, теплофизических, кинетических и оптических свойств посвящено огромное количество работ [1-5], и эти исследования не прекращаются и в настоящее время [6-8].

Большинство свойств твердых тел зависят от химического состава (микроструктуры), атомной структуры (расположения атомов) и размеров тела в 1-d, 2-d или 3-d измерениях. Изменение одного или нескольких из этих параметров влечет за собой изменение свойств твердого тела. Примером может служить синтез материалов кристаллической фазы с новыми свойствами путем контролируемого манипулирования их микроструктурой на атомарном уровне [9].

Важным направлением использования кристаллического кремния (с-Si) является применение в качестве конструкционного материала в источниках возобновляемой энергии, в частности солнечной [10]. Модули солнечных батарей в большинстве своем собираются из кристаллических кремниевых (с-Si) элементов (пластин). Солнечная энергия в них преобразуется непосредственно в энергию электрического тока в результате фотоэлектрического эффекта [11]. Изготовление солнечных кремниевых пластин связано с прямым контактом между твердой, жидкой и газовой фазами в условиях, близких к равновесному состоянию плавления – кристаллизации [12, 13].

Кристаллический кремний является непрямозонным полупроводником, и его электрические свойства в значительной степени зависят от наличия дефектов и примесей (которые захватывают носители заряда). Желаемый уровень концентрации примеси, от которой зависят структурные изменения кремния [14], обычно достигается выбором температуры обработки, влияющей на диффузию атомов примеси. Высокий коэффициент диффузии в расплаве способствует созданию больших объемных Si-подложек с равномерным распределением легирующей примеси.

Хорошо известны примеры технологических применений кристаллического кремния в nano-, микроэлектронных приборах, свойства которого определяются процедурами изменения химического состава и атомной структуры в нанометровом масштабе с помощью ионной имплантации [15-17], термической [7, 18] и лазерной обработки [19].

Даже при медленном термическом воздействии в условиях, близких к термодинамическому равновесию, в кристаллическом кремнии отмечается ряд структурных превращений, сопровождающихся последовательным переходом (при температурах вдали от температуры плавления  $T < T_m$ ) от ковалентных к ковалентно-металлическим и к плотноупакованным металлическим структурам при  $T \sim T_m$ . Так при скорости нагрева  $\approx 5$  град/мин [19, 20] бездислокационного

кремния наблюдается следующая последовательность структурных превращений: от ГЦК при  $523 \text{ K} < T < 593 \text{ K}$  к ромбической при  $593 \text{ K} < T < 803 \text{ K}$  и гексагональной II при  $803 \text{ K} < T < 943 \text{ K}$ . Вблизи температуры плавления  $T_m$  возникают структуры ОЦТ при  $1473 \text{ K} < T < 1673 \text{ K}$  и ОЦК при  $T > 1673 \text{ K}$ . Полиморфные превращения в кремнии, возникающие при переходе вещества из одного кристаллического состояния в другое, сказываются не только на изменении параметра решетки, но и на его теплофизических, оптических, механических, электрических и кинетических свойствах [18, 21]. В окрестности точки фазового перехода все свойства кристаллического кремния претерпевают качественные изменения и существенно отличаются от аналогичных характеристик металлов.

В силу этого актуальным становится использование теоретического подхода для получения свойств исследуемого материала, основным инструментом которого является математическое моделирование на основе атомистических моделей, которое за последние два десятилетия стало мощным инструментом фундаментальных исследований свойств [22-24] и процессов [25-27] в материалах.

Целью данной работы является определение с помощью молекулярно-динамического моделирования (МДМ) равновесных теплофизических свойств кристаллического и расплавленного кремния в температурной области, связанной с плавлением и кристаллизацией микроструктур.

## **2. Моделирование свойств фононной подсистемы кремния**

Определение теплофизических свойств фононной подсистемы кремния в настоящей работе основано на атомистическом подходе.

Атомистические модели представляют собой систему дифференциальных уравнений, описывающую совокупность взаимодействующих частиц (атомов, ионов, молекул). При использовании атомистических моделей для исследования различных свойств веществ важнейшую роль играет выбор потенциалов взаимодействия между частицами, поскольку от него непосредственно зависит достоверность получаемых результатов. Построение межатомного потенциала взаимодействия для кремния имеет ряд особенностей. Межатомное взаимодействие в кремнии более сложное, чем в металлах.

Поэтому, с целью определения применимости выбранных потенциалов взаимодействия в тех или иных конкретных условиях, использование атомистических моделей требует проведения тщательных тестовых расчетов. Особенно остро данная проблема стоит в материалах с ковалентными связями, к которым относится и кремний.

Молекулярно-динамическое моделирование (МДМ) использовалось для определения макропараметров кремния – барических зависимостей температуры плавления и теплоты перехода плавления и температурных

зависимостей теплоты испарения, теплоемкости, линейного расширения. Эти параметры могут быть определены с точностью  $\approx 1 \div 3\%$ . В остальном точность расчетов свойств определяется молекулярным потенциалом взаимодействия. На основе анализа потенциалов взаимодействия, сделанного в работе [23], в данном исследовании используются потенциалы Стиллинжера—Вебера (SW) и KINS [28-30].

## 2.1. Математическая модель

В основе метода молекулярной динамики (МД) лежит модельное представление о многоатомной молекулярной системе, в которой  $N$  частиц представлены материальными точками, каждая из которых имеет массу, радиус-вектор и скорость соответственно  $m_i, \vec{r}_i, \vec{v}_i$ , где  $i=1 \dots N$ . Взаимодействие между частицами осуществляется посредством сил  $\vec{F}_i = -\frac{\partial U(\vec{r}_1 \dots \vec{r}_N)}{\partial \vec{r}_i}$ , где  $U(\vec{r}_1 \dots \vec{r}_N)$  – потенциальная энергия взаимодействия системы из  $N$  частиц; взаимодействие с внешними полями происходит посредством силы  $\vec{F}_i^{ext}$ . Движение ансамбля частиц в классическом случае описывается уравнениями Ньютона.

В итоге, математическая формулировка задачи состоит из системы обыкновенных дифференциальных уравнений, их разностного аналога (разностной схемы), потенциала межатомного взаимодействия и специфически определяемых начальных и граничных условий. Эволюция ансамбля частиц описывается системой  $2N$  обыкновенных дифференциальных уравнений движения:

$$\begin{cases} m_i \frac{d\vec{v}_i}{dt} = \vec{F}_i + \vec{F}_i^{ext}, \\ \frac{d\vec{r}_i}{dt} = \vec{v}_i, \quad i = 1 \dots N. \end{cases} \quad (1)$$

Для интегрирования системы уравнений (1) требуется знание координат и скоростей  $(\vec{r}_i, \vec{v}_i)|_{t=0}$  в начальный момент времени  $t = 0$  всех  $N$  частиц.

## 2.2. Начальные условия

В начальный момент времени моделируемая среда представляет собой кристалл, поликристалл либо жидкость. Для более точного задания начальных значений макроскопических параметров, а также для обеспечения устойчивого состояния системы после установки координат и скоростей проводится релаксация моделируемого ансамбля.

Совместное применение термостата и баростата, возвращающего энергию в хаотическую составляющую движения частиц для удержания заданной температуры  $T$  и давления, позволяет достаточно быстро вывести систему в

состояние термодинамического равновесия. После приведения системы в состояние покоя, несколько измененные значения постоянной решетки, учитывающие влияние границ объекта, будут получены автоматически. Подробнее процедура формирования начальных условий приведена в работе [22].

### 2.3. Граничные условия

В случае использования области рассмотрения, бесконечной по одному, двум или трем пространственным направлениям  $X$ ,  $Y$ ,  $Z$ , моделирование процессов выполняется в конечной расчетной области с размерами  $L_x \times L_y \times L_z$ , по осям  $X$ ,  $Y$ ,  $Z$  соответственно. Для имитации взаимодействия в той части, которая не входит в расчетную область, по осям  $X$ ,  $Y$  или  $Z$  используются периодические граничные условия с периодами  $L_x, L_y, L_z$  соответственно.

Периодические граничные условия, например, по  $X$  подразумевают, что частицы с координатой  $x$  в пределах  $0 \leq x < L_x$  точно воспроизводят частицы  $kL_x \leq x < (k+1)L_x$  для любых целых  $k \neq 0$ . То есть частица, покидающая расчетную область через верхнюю границу  $x = L_x$ , заменяется на частицу с таким же значением скорости, но вошедшую в расчетную область через нижнюю границу  $x = 0$ . Если штрихами пометить величины, относящиеся к новой частице, то

$$\begin{cases} \vec{v}' = \vec{v}, \\ x' = (x - L_x) \in [0, L_x), L_x \leq x < 2L_x, \\ y' = y, \\ z' = z. \end{cases} \quad (2)$$

Аналогично для частицы, покидающей расчетную область через нижнюю границу  $x = 0$ :

$$\begin{cases} \vec{v}' = \vec{v}, \\ x' = (x + L_x) \in [0, L_x), -L_x \leq x < 0, \\ y' = y, \\ z' = z. \end{cases} \quad (3)$$

Второй важный аспект периодических граничных условий – сила и потенциальная энергия взаимодействия для частиц из приграничных областей:  $0 \leq x < r_{cr}$  и  $(L_x - r_{cr}) \leq x < L_x$ , где  $r_{cr}$  – радиус обрезания потенциала (предполагается, что силами взаимодействия на расстояниях  $r > r_{cr}$  можно пренебречь).

Взаимодействие частицы  $i$ , координата  $x_i$  которой находится в интервале  $(L_x - r_{cr}) \leq x_i < L_x$ , с частицами, находящимися за пределами расчетной области

$L_x \leq x'_j < (L_x + r_{cr})$ , моделируется с использованием частиц  $0 \leq x_j < r_{cr}$  из расчетной области, радиус-векторы которых корректируются следующим образом при расчете силы взаимодействия  $\vec{F}_{ij} = \vec{F}_{(\dots\vec{r}'_j\dots)}(\vec{r}_i)$ :

$$\vec{r}'_j = \vec{r}_j + \vec{e}_x L_x,$$

где  $\vec{e}_x$  – единичный орт оси  $X$ .

Очевидно, все вышесказанное в равной степени относится и к периодическим граничным условиям вдоль координатных осей  $Y$  и  $Z$ .

#### 2.4. Потенциалы взаимодействия частиц

Сравнение ряда полуэмпирических потенциалов в работе [23] показало, что наиболее приемлемыми для моделирования твёрдого кремния в широком диапазоне давлений и температур являются потенциалы Стиллинджера—Вебера (SW) [28, 29] и KINS [30, 31]. Поэтому в данной работе эти потенциалы использовались при МДМ свойств фононного газа кремния.

#### 2.5. Вычислительный алгоритм

МДМ механических и теплофизических свойств монокристаллического кремния в широком диапазоне значений температуры и давления осуществлялось с использованием распространенного прикладного пакета LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator) [32]. В нем реализована поддержка многих парных и многочастичных короткодействующих потенциалов, есть возможность записи атомных конфигураций в текстовый файл, а также встроены термостаты и баростаты. Вычислительный алгоритм основывается на конечно-разностной схеме Верле [33].

Корректировка скорости и давления для ансамбля частиц осуществлялась с помощью термостата и баростата Берендсена [34].

Более подробное описание математической постановки задачи и её численной реализации можно найти в [22].

### 3. Результаты моделирования

Результаты МДМ для удобства дальнейшего использования аппроксимированы многочленами степени  $m$

$$P_m(x) = \sum_{k=0}^m a_k x^k, \quad (4)$$

где  $a_k$  – коэффициенты многочлена.

Погрешность аппроксимации вычислялась по критерию наименьших квадратов

$$\Delta(P_m(t_j), y_j) = \sqrt{\frac{1}{n+1} \sum_{j=0}^n (P_m(t_j) - y_j)^2} \rightarrow \min, \quad (5)$$

где  $y_j$  – значения показателя по результатам МДМ для аргументов  $t_j$  ( $j=0, \dots, n$ ).

### 3.1. Равновесные температура и удельная теплота плавления

Для изучения свойств вещества в области фазового перехода плавление–кристаллизация очень важно знать соотношение параметров температура плавления ( $T_m$ )–давление ( $P$ ), так как одно и то же вещество в зависимости от значения параметров ( $P, T_m$ ) может находиться в любой из трех групп – металл, полупроводник, диэлектрик – независимо от преобладания типа химической связи. Интервалы значений давления и температуры, в пределах которых данное вещество остается в одном и том же состоянии, достаточно широки. Известно [18, 35], что при высоком давлении (~12 ГПа) для кремния зафиксирован переход от чисто ковалентной структуры алмаза ( $K=4$ ) в ковалентно-металлическую ОЦТ-структуру типа  $\beta$ -Sn, а далее (~16 ГПа) в типично ОЦК-металлическую структуру ( $K=6$ ). При сжатии в области температур 400–700 °С зафиксирован гексагональный кремний [36], являющийся, по-видимому, метастабильной фазой. В настоящее время фазовые диаграммы большинства материалов остаются относительно неизвестными за пределами области нормальных условий из-за технических проблем, связанных с проведением точных исследований поведения фазы в условиях экстремальных температур и/или давлений. МДМ позволяет определить барическую зависимость температуры плавления при помощи серии экспериментов. Моделирование проводилось с потенциалами взаимодействия SW и KINS.

Для численных экспериментов определялась расчетная область в форме параллелепипеда, заполненная 16000 частиц, взаимодействующих посредством потенциалов SW или KINS. На начальном этапе все частицы расположены в узлах ГЦК-кристаллической решетки. Размеры области  $20 \times 10 \times 10$  элементарных ячеек решетки. Во всех трех пространственных направлениях на границы расчетной области налагаются периодические граничные условия (2), (3), т.е. моделируемый объект – бесконечный монокристалл кремния. Перед проведением серии молекулярно-динамических расчетов проводится процедура установления начального термодинамического равновесия в ансамбле частиц образца.

Процедура установления термодинамического равновесия в системе включает следующие действия:

- задаются начальные скорости частиц при температуре 600 К;
- устанавливается термодинамическое равновесие в системе, для чего запускается релаксационный расчет с включенным баростатом (с целевым давлением 0 бар) на время 20 пс с шагом интегрирования 1 фс. Температура кристалла за 5-10 пс уменьшается примерно до 300 К;

- включается термостат, с помощью которого вся расчетная область вначале нагревается до 900 К (при нулевом давлении), а затем расплавляется половина кристалла в расчетной области, и в этой половине температура вначале плавно поднимается до 1600 К, а затем вновь опускается до 900 К.

Подготовленный образец содержит жидкую и кристаллическую фазы в контакте при температуре 900 К и нулевом давлении.

**Равновесная температура плавления.** В результате вычислительных экспериментов, выполненных с потенциалами SW и KIHS, были получены барические зависимости равновесной температуры плавления, показанные на рисунке 1 (обозначены полыми кружками). Барическая зависимость равновесной температуры плавления  $T_m(P)$  является границей равновесия двух фаз кремния — твердой и жидкой.

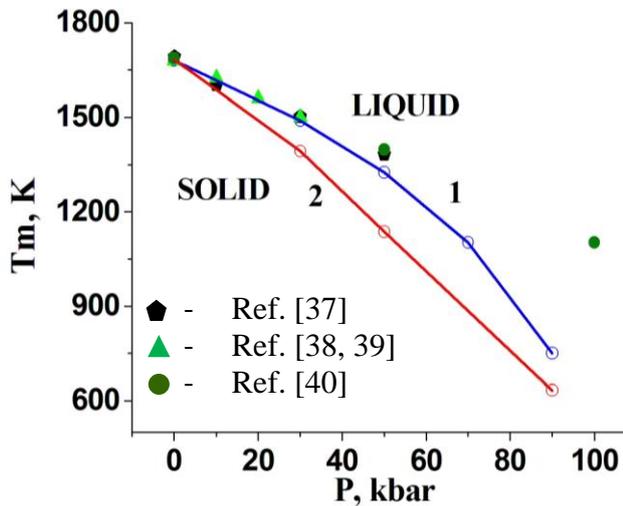


Рис. 1. Барические зависимости равновесной температуры плавления, по данным МДМ с потенциалами: (1) – SW, (2) – KIHS. Маркерами обозначены справочные и экспериментальные данные.

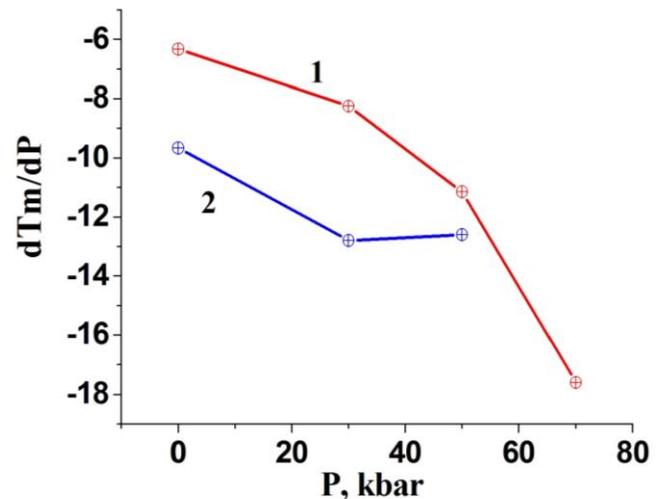


Рис. 2. Барические коэффициенты температуры плавления, рассчитанные с потенциалами (1) – SW, (2) – KIHS.

Цветными маркерами на рисунке 1 обозначены справочные [37] и экспериментальные данные [38-40]. Результаты МДМ равновесной температуры плавления  $T_m(P)$  аппроксимировались степенными полиномами (4). Для потенциала SW

$$T_{m,SW}(P) = a_0 + a_1P + a_2P^2 + a_3P^3 + a_4P^4,$$

для потенциала KIHS

$$T_{m,KIHS}(P) = a_0 + a_1P + a_2P^2 + a_3P^3.$$

Значения коэффициентов  $a_k$  и погрешностей аппроксимации по критерию наименьших квадратов (5) представлены в таблице 1.

Таблица 1

**Значения коэффициентов функции, аппроксимирующей  $T_m(P)$  по результатам МДМ, и величина погрешности аппроксимации**

$k$	SW $a_k$	KIHS $a_k$
0	1679.99999	1683.000
1	-4.759226	-6.686666
2	-0.077470	-0.121333
3	0.00116369	0.000733
4	-0.000011	
$\Delta(P_m(P_j), y_j) \%$	$8.036 \times 10^{-7}$	$1.295 \times 10^{-8}$

Результаты моделирования с потенциалом SW дают лучшее совпадение с экспериментальными и справочными данными, чем результаты МДМ с KIHS. Однако с ростом давления степень совпадения со справочными данными меняется от практически полной в области низких давлений (до 40 кбар) до расхождения в  $\approx 4.5 \%$  при 50 кбар и  $\approx 47\%$  при 90 кбар.

Кремний относится к веществам, у которых температура плавления понижается с повышением давления. По полученным с разными потенциалами значениям  $T_m(P)$  были вычислены барические коэффициенты температуры плавления как отношения разностей

$$dT_m/dP \approx \Delta T_m/\Delta P.$$

Полученные для обоих потенциалов значения барических коэффициентов (рис. 2) приведены в таблице 2. В таблице также приведены значения коэффициентов, полученные из экспериментальных значений.

Таблица 2

**Значения барических коэффициентов равновесной температуры плавления**

Данные вычислительного эксперимента. Потенциал SW		Данные вычислительного эксперимента. Потенциал KIHS		Данные работы [37]		Данные работы [38]	
P (kbar)	$\Delta T_m/\Delta P$	P(kbar)	$\Delta T_m/\Delta P$	P(kbar)	$\Delta T_m/\Delta P$	P(kbar)	$\Delta T_m/\Delta P$
0	-6.333	0	-9.667	0.1	-8.99	0	-5.5
30	-8.25	30	-12.8	10	-5	10	-6.5
50	-11.15	50	-12.6	30	-6	20	-6
70	-17.6	90		50		30	

Как видно (рис. 2), вычисленные по данным МДМ коэффициенты отрицательны и с ростом давления уменьшаются, т.е. результаты моделирования с обоими потенциалами показывают качественно верное поведение.

Данные, приведенные на рисунках 1, 2 и в таблице 2, свидетельствуют о том, что в пределах 50 кбар экспериментально найденные значения температур плавления кремния близки к полученным в ходе вычислительных экспериментов.

**Удельная теплота плавления.** Удельная теплота плавления Si рассчитывалась из данных МДМ как разность энтальпий твердой и жидкой фаз при одних и тех же температуре и давлении. Из справочных данных известны значения теплоты только при нулевом давлении 49,9 кДж/моль [38] и 45,3 кДж/моль [42]. Несмотря на заметное отличие при нулевом давлении расчетных данных от справочных  $\sim (30 - 50)\%$  оба потенциала показывают качественно правильную барическую зависимость  $L_m(P)$ , рисунок 3, когда более высокой температуре плавления  $T_m(P)$  соответствуют более высокие значения удельной теплоты плавления  $L_m(P)$ .

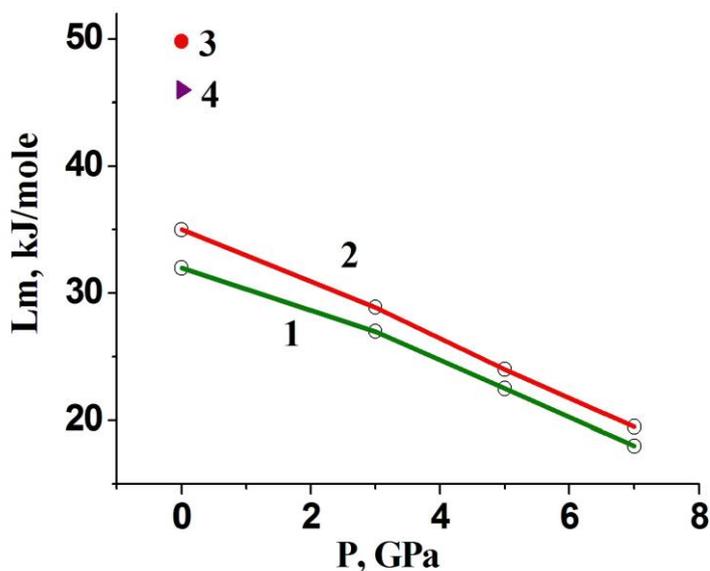


Рис. 3. Теплота плавления кремния по результатам МДМ, для потенциалов взаимодействия (1) SW и (2) KIH5. Цветными маркерами обозначены справочные данные (3) – [37]; (4) – [41].

Результаты МДМ удельной теплоты плавления  $L_m(P)$  аппроксимировались степенными полиномами (4).

$$L_m(P) = (a_0 + a_1P + a_2P^2 + a_3P^3)_{SW, KIH5}.$$

Значения коэффициентов  $a_k$  и погрешностей аппроксимации по критерию наименьших квадратов (5) представлены в таблице 3.

Таблица 3

**Значения коэффициентов функции, аппроксимирующей  $L_m(P)$  по результатам МДМ, и величина погрешности аппроксимации**

$k$	SW $a_k$	KIHS $a_k$
0	32000.00	35000.00
1	-1066.66666	-1497.61905
2	-249.99999	-235.71428
3	16.66666	19.047619
$\Delta(P_m(P_j), y_j) \%$	$3.821 \times 10^{-7}$	$2.981 \times 10^{-7}$

### 3.2. Плотность, коэффициент линейного расширения и удельная теплоемкость

Для понимания природы процессов, происходящих при нагреве кремния и переходе из твердого в жидкое состояние, особый интерес представляют исследования теплофизических характеристик. Из серии молекулярно-динамических расчетов в рамках одного вычислительного эксперимента определялись температурные зависимости коэффициента линейного расширения  $\alpha(T)$ , плотности  $\rho(T)$  и удельной теплоемкости  $C_p(T)$  кремния. Использовалась кубическая расчетная область, содержащая ГЦК-кристалл из 8000 частиц. Диапазон нагрева 300÷4000 К. Моделирование проводилось с потенциалами взаимодействия SW и KIHS. Снимались температурные зависимости: плотности  $\rho(T)$ , энтальпии  $H(T)$  и линейного размера  $L(T)$ . Эксперимент проводился при постоянном нулевом давлении  $P = 0$ .

**Плотность.** Исследованиям плотности расплава кремния посвящено множество работ как отечественных, так и зарубежных авторов, тем не менее интерес к этой проблеме не ослабевает, о чем свидетельствуют многочисленные публикации [42-45].

В данной работе получена температурная зависимость плотности кремния в температурном диапазоне  $300 \text{ К} \leq T \leq 4000 \text{ К}$  из МДМ. Результаты моделирования после необходимой статистической обработки представлены на рисунке 4. Плотность расплава кремния при равновесной температуре плавления ( $T_m = 1685 \text{ К}$ ) для обоих потенциалов оказывается больше, чем плотность кристаллов при этой же температуре, т.е. кремний плавится с уплотнением, подобно тому, как это наблюдалось в экспериментах [18, 21, 41-48].

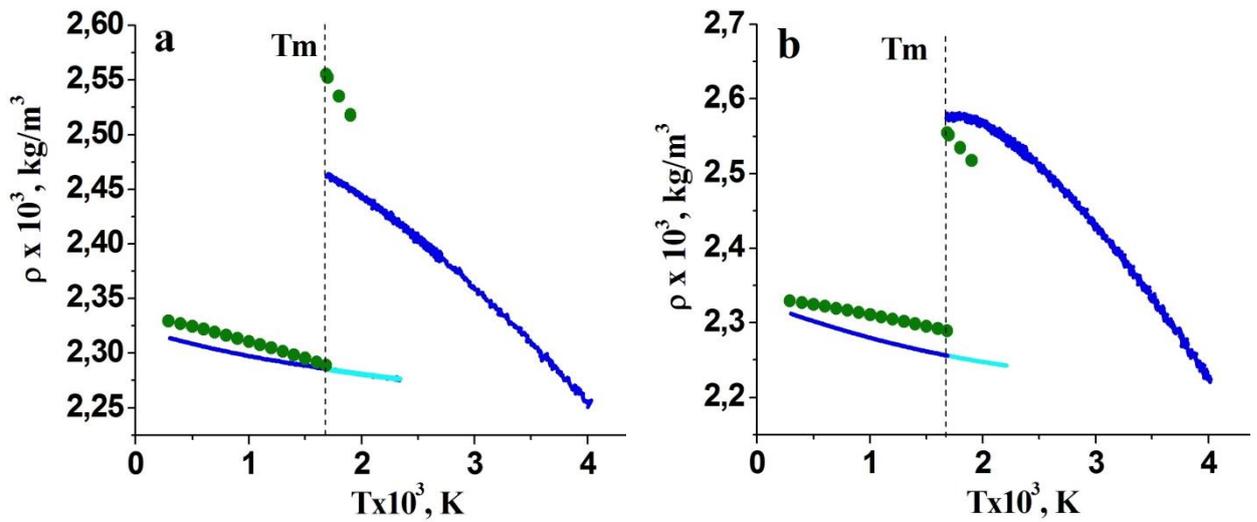


Рис. 4. Температурные зависимости плотности кремния по результатам МДМ (синие линии), перегрев твердой фазы (голубые линии) для потенциалов (а) – SW, (б) – KHS, зеленые маркеры – данные эксперимента [45].

На рисунке 4 хорошо заметно уменьшение плотности при перегреве твердой фазы ( $T > T_m$ ). При равновесной температуре плавления  $T_m$  происходит скачок плотности. Величина скачка отличается в расчетах с разными потенциалами. Для потенциала SW различие значений плотности в твердой и жидкой фазах при температуре  $T = T_m$  составляет 7,75%, а для потенциала KHS – 14,15%. Оценка скачка плотности в соответствии с экспериментальными данными в различных работах различается и составляет от  $\sim 9$  [48] до 11,62% [45]. Сравнение результатов моделирования с данными эксперимента показывает, что результаты моделирования с потенциалом KHS для расплавленного кремния ближе к данным эксперимента (рис. 4б). Для плотности твердой фазы лучшее соответствие с экспериментом показывают результаты моделирования с потенциалом SW (рис. 4а). Результаты МДМ показывают, что процесс плавления приводит к существенному увеличению плотности кремния. Полученные результаты в расчетах удобнее использовать в виде аналитической зависимости вида (4). Для твердой фазы зависимость для обоих потенциалов:

$$\rho_{sol}(T) = (a_0 + a_1(T - T_0))_{SW, KHS}.$$

Для жидкой фазы 
$$\rho_{liq}(T) = (a_0 + a_1(T - T_m) + a_2(T - T_m)^2 + a_3(T - T_m)^3)_{SW},$$

$$\rho_{liq}(T) = (a_0 + a_1(T - T_m) + a_2(T - T_m)^2 + a_3(T - T_m)^3 + a_4(T - T_m)^4)_{KHS}.$$

Значения коэффициентов  $a_k$  и погрешностей аппроксимации по критерию наименьших квадратов (5) представлены в таблице 4.

**Значения коэффициентов функций, аппроксимирующих плотность кремния по результатам МДМ, и величина погрешности аппроксимации**

<i>k</i>	<b>SW, <i>a<sub>k</sub></i></b>	
	<b>Solid, T<sub>0</sub> = 300K</b>	<b>Liquid, T<sub>m</sub> = 1685K</b>
<b>0</b>	2.313159	2.46305924
<b>1</b>	$-1.80261528 \times 10^{-5}$	$-8.19973366 \times 10^{-5}$
<b>2</b>		$7.364843 \times 10^{-9}$
<b>3</b>		$-3.990398848 \times 10^{-12}$
$\Delta(P_m(T_j), y_j) \%$	0.106	0.885
<i>k</i>	<b>KIHS, <i>a<sub>k</sub></i></b>	
	<b>Solid, T<sub>0</sub> = 300K</b>	<b>Liquid, T<sub>m</sub> = 1685K</b>
<b>0</b>	2.3065089	2.5743114
<b>1</b>	$-3.5766095 \times 10^{-5}$	$4.2675839 \times 10^{-5}$
<b>2</b>		$-2.54372617 \times 10^{-7}$
<b>3</b>		$1.813214833 \times 10^{-10}$
<b>4</b>		$-7.182882532 \times 10^{-14}$
$\Delta(P_m(T_j), y_j) \%$	0.233	0.291

**Коэффициент линейного расширения.** Изменение линейного размера образца  $L(T)$  тесно связано с изменением плотности. Согласно результатам МДМ при температуре плавления  $T_m$  линейный размер расплавленного образца оказался меньше линейного размера твердотельного образца  $L_{liq}(T) < L_{sol}(T)$  (рис. 5), в то время как соотношение плотности расплава и твердой фазы кремния  $\rho_{liq}(T) > \rho_{sol}(T)$  оказалось обратным (рис. 4), что является показателем уплотнения кремния во время плавления и соответствует экспериментальным данным [18, 21, 41-47].

На рисунке 5 видно, что  $L_{sol}(T)$  продолжает увеличиваться при перегреве твердой фазы. Полученные перегревы составили  $\Delta T_{SW} = 715$  К и  $\Delta T_{KIHS} = 565$  К. Скачок линейного размера при  $T = T_m$  составляет для потенциала SW – 2,5%, а для потенциала KIHS – 4,5%

Температурные зависимости  $L(T)$ , полученные из вычислительных экспериментов, были аппроксимированы полиномами  $\tilde{L}(T)$  вида (4) для твердой и жидкой фаз. Коэффициенты линейного расширения  $\alpha(T)$  при давлении  $P$  вычислялись согласно соотношению

$$\alpha(T) = \frac{1}{\tilde{L}(T)} \left( \frac{\partial \tilde{L}(T)}{\partial T} \right)_P. \quad (6)$$

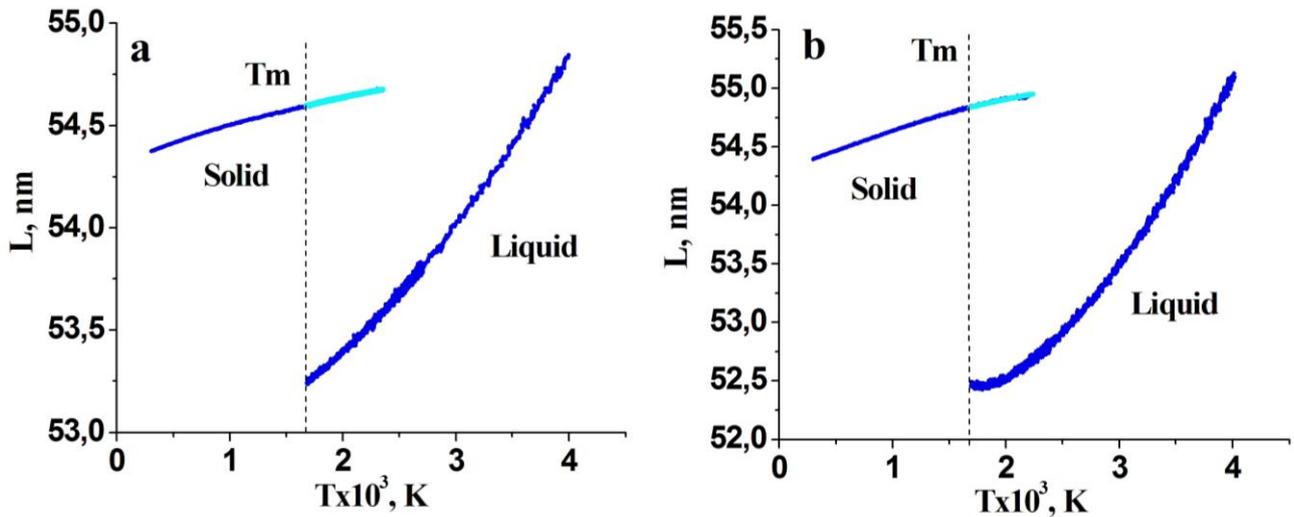


Рис. 5. Температурные зависимости линейного размера образца кремния по результатам МДМ (синие линии) и перегрев твердой фазы (голубые линии) для потенциалов а – SW, б – KIHS.

Температурные зависимости аппроксимировались степенными полиномами (4). Для твердой и жидкой фаз получены зависимости второй степени для обоих потенциалов:

$$\alpha_{sol,liq}(T) = \left( a_0 + a_1(T - T_0) + a_2(T - T_0)^2 \right)_{SW, KIHS}.$$

Значения коэффициентов  $a_k$  и погрешностей аппроксимации по критерию наименьших квадратов (5) представлены в таблице 5.

Таблица 5

**Значения коэффициентов функций, аппроксимирующих коэффициент линейного расширения кремния по результатам МДМ, и величина погрешности аппроксимации**

$k$	SW, $a_k$	
	Solid, $T_0 = 300K$	Liquid, $T_m = 1685K$
0	$2.258853 \times 10^{-4}$	$4.396243 \times 10^{-4}$
1	$-1.3080981 \times 10^{-7}$	$2.36116978 \times 10^{-7}$
2	$4.10776503 \times 10^{-11}$	$-1.30695502 \times 10^{-11}$
$\Delta(P_m(T_j), y_j) \%$	0.138	1.157
$k$	KIHS, $a_k$	
	Solid, $T_0 = 300K$	Liquid, $T_m = 1685K$
0	$1.599456005 \times 10^{-6}$	$5.829544175 \times 10^{-6}$
1	$1.262783137 \times 10^{-10}$	$-1 \times 10^{-9}$
2	$-3.487407698 \times 10^{-13}$	$1.93112229992 \times 10^{-12}$
$\Delta(P_m(T_j), y_j) \%$	$1.129 \times 10^{-3}$	0.644

Графическое представление результатов моделирования коэффициента линейного расширения кремния в температурном диапазоне 300-4000 К и данные экспериментов [45, 46, 47] приведены на рисунке 6.

Полученные результаты показывают качественное соответствие данным экспериментов. Однако лучшее соответствие данным эксперимента в твердой фазе обеспечивает потенциал SW, а в жидкой – потенциал KINS.

С ростом температуры коэффициент линейного расширения кремния (рис. 6а) возрастает в твердой и жидкой фазах, что соответствует данным эксперимента. По результатам моделирования наиболее интенсивный рост коэффициента линейного расширения наблюдается при температуре  $T > T_m$ , что свидетельствует об уменьшении прочности межатомных связей в жидкой фазе кремния.

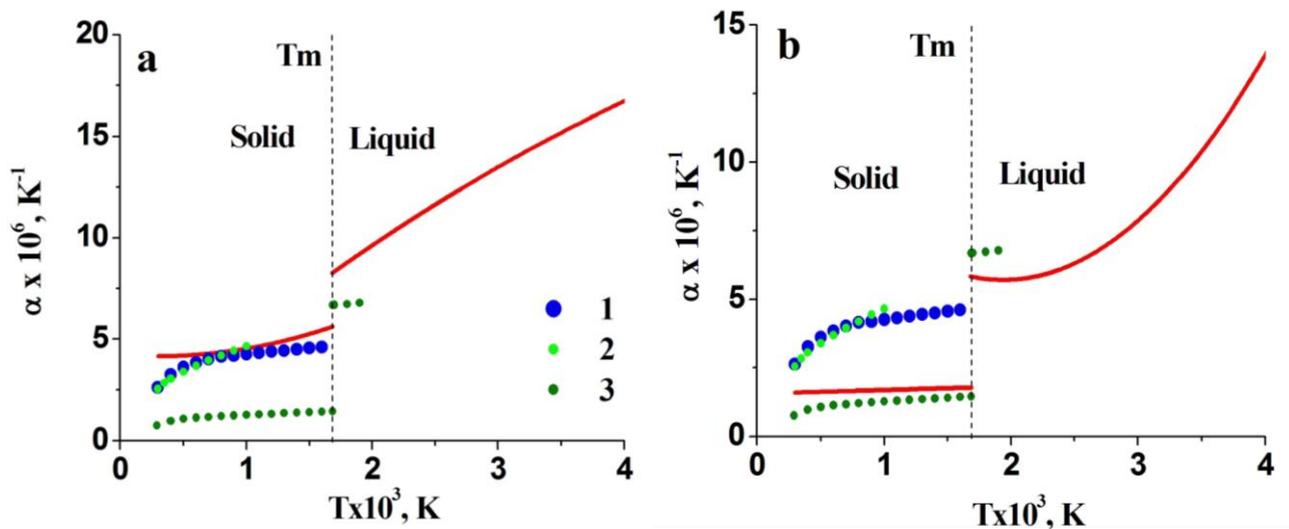


Рис. 6. Температурные зависимости коэффициента линейного расширения кремния. Красные линии – аппроксимации для потенциалов а – SW, б – KINS. Данные экспериментов: маркеры 1 – [47], 2 – [46], 3 – [45].

**Удельная теплоемкость.** Как известно, удельная теплоемкость является мерой поглощения энергии веществом при его нагревании. Полная теплоемкость  $C(T, N)$  определяется теплоемкостью решетки  $C_{lat}(T)$  и теплоемкостью свободных носителей  $C_e(T, N)$  (электронов и дырок), поскольку перенос тепловой энергии в твердом теле осуществляется свободными носителями заряда и фононами

$$C(T, N) = C_{lat}(T) + C_e(T, N), \quad (7)$$

где  $N$  – концентрация носителей заряда.

В отличие от теплоемкости металлов, для которых при низких температурах доминирующую роль играет электронная составляющая, а с повышением температуры основной вклад дает величина решеточной теплоемкости, в кремнии вклад электронной составляющей в полную

теплоемкость мал, но с ростом температуры увеличивается и при температуре равновесного плавления  $T_m = 1685$  К составляет 1,4%, а при  $T=2000$  К – 1,72% [50]. Таким образом, теплоемкость решетки дает основной вклад в полную теплоемкость, и определение ее температурной зависимости является важной проблемой, особенно в области фазового перехода и в диапазоне более высоких температур.

Температурная зависимость теплоемкости решетки  $C_{lat}(T)$  при постоянном давлении  $P$  в данной работе определялась по значениям энтальпии  $H(T)$ , полученным в ходе рассмотренного выше вычислительного МДМ эксперимента. Значения  $H(T)$  аппроксимировались для потенциалов SW и KHS отдельно для жидкой и твердой фаз полиномами  $\tilde{H}(T)$  (4) степени  $m=3\div 5$  (рис. 7). Температурная зависимость теплоёмкости  $C_{lat}(T)$  определялась дифференцированием  $\tilde{H}(T)$ :

$$C_{lat}(T) = \left( \frac{\partial \tilde{H}(T)}{\partial T} \right)_P. \quad (8)$$

В области фазового перехода в кремнии при равновесной температуре плавления  $T_m$  происходит положительный скачок энтальпии (рис. 7), составляющий 9,1% и 9,5% для потенциалов SW и KHS соответственно. При перегревах твердой фазы  $\Delta T_{SW} = 715$  К и  $\Delta T_{KHS} = 565$  К, полученных с различными потенциалами, энтальпия продолжает увеличиваться (рис. 7). Эта энергия расходуется в основном на тепловые колебания решетки. Увеличение амплитуды колебаний связано с уменьшением прочности химической связи кристаллической решетки и переходом к решетке ковалентно-металлического и полностью металлического типа.

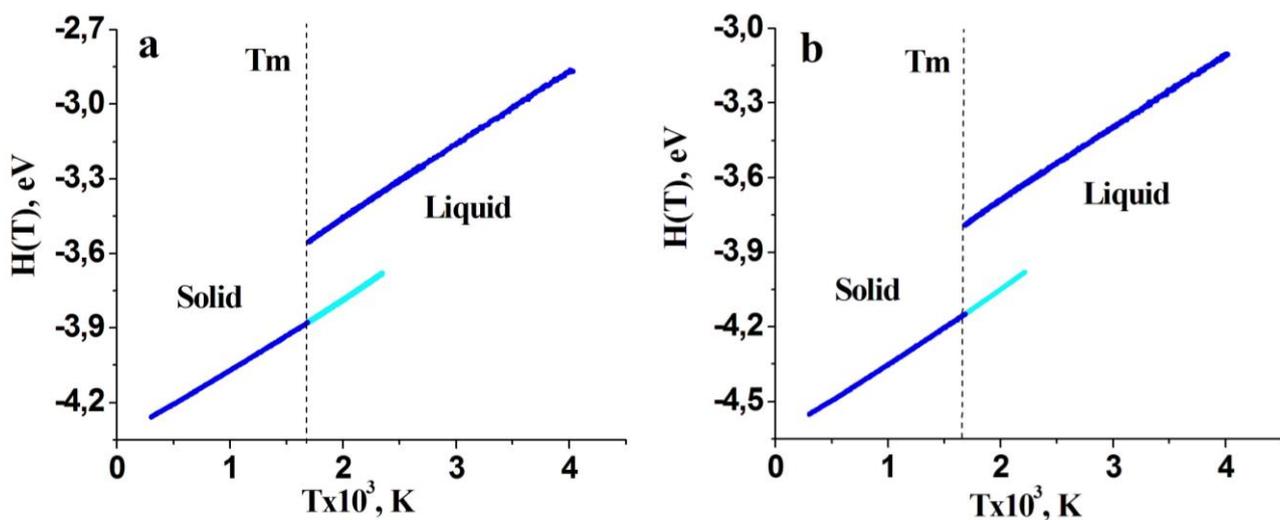


Рис. 7. Температурные зависимости энтальпии кремния по результатам МДМ (синие линии) и перегрев твердой фазы (голубые линии) для потенциалов а – SW, б – KHS.

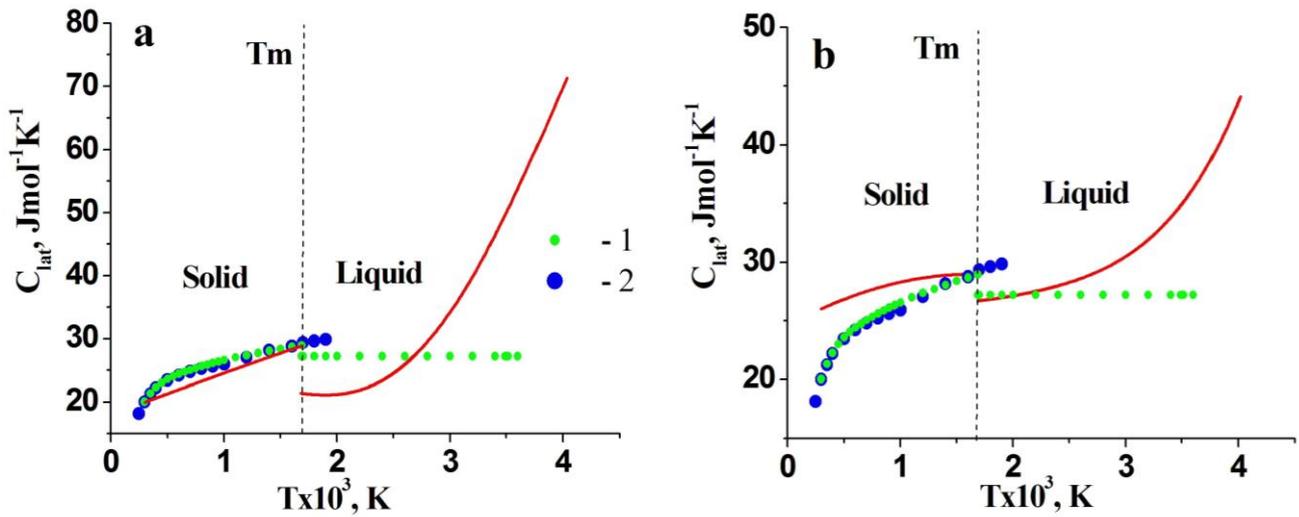


Рис. 8. Температурные зависимости теплоемкости кремния. Красные линии – аппроксимирующие функции для потенциалов а – SW, б – KIHS. Данные экспериментов: маркеры 1 – [46], 2 – [49].

При таких структурных изменениях решетки теплоемкость скачком уменьшается. Согласно результатам МДМ, величина скачка для потенциала SW составляет 35%, а для KIHS – 11%. Скачок теплоемкости при фазовом переходе в соответствии с данными эксперимента [49] составляет 6,4%. Различие значений теплоемкости при температуре  $T=T_m$  для потенциалов SW и KIHS в твердой фазе составляет всего ~3%, а в жидкой фазе ~25%. Таким образом, сравнение оценок величины скачка теплоемкости при фазовом переходе по расчетным и экспериментальным данным [49, 46], показывает, что для жидкой фазы лучшие результаты получаются при использовании потенциала KIHS. Для твердой фазы большее соответствие с данными эксперимента обеспечивается потенциалом SW (рис. 8).

Температурные зависимости теплоемкости для потенциалов SW и KIHS аппроксимировались следующими многочленами:

$$\text{для твердой фазы} \quad C_{lat,sol}(T) = \left( a_0 + a_1(T - T_0) + a_2(T - T_0)^2 \right)_{SW, KIHS},$$

$$\text{для жидкой фазы} \quad C_{lat,liq}(T) = \left( a_0 + a_1(T - T_0) + a_2(T - T_0)^2 + a_3(T - T_0)^3 \right)_{SW, KIHS}.$$

Значения коэффициентов  $a_k$  и погрешностей аппроксимации (5) представлены в таблице 6.

**Значения коэффициентов функций, аппроксимирующих теплоемкость кремния по результатам МДМ, и величина погрешности аппроксимации**

<i>k</i>	<b>SW, <math>a_k</math></b>	
	<b>Solid, <math>T_0 = 300\text{K}</math></b>	<b>Liquid, <math>T_m = 1685\text{K}</math></b>
<b>0</b>	$2.066477761 \times 10^{-4}$	$2.2144171 \times 10^{-4}$
<b>1</b>	$7.030246194 \times 10^{-8}$	$-2.25388975 \times 10^{-8}$
<b>2</b>	$-2.710486115 \times 10^{-12}$	$3.078427811 \times 10^{-11}$
<b>3</b>		$6.83656818 \times 10^{-14}$
$\Delta(P_m(T_j), y_j) \%$	2.283	6.691
<i>k</i>	<b>KHS, <math>a_k</math></b>	
	<b>Solid, <math>T_0 = 300\text{K}</math></b>	<b>Liquid, <math>T_m = 1685\text{K}</math></b>
	2.696688598	$2.76559151883 \times 10^{-4}$
<b>0</b>	4.564413181	$1.15115880659 \times 10^{-8}$
<b>1</b>	-16.94440201	$1.03491212167 \times 10^{-11}$
<b>2</b>		$-3.80421384573 \times 10^{-15}$
$\Delta(P_m(T_j), y_j) \%$	0.089	1.848

#### 4. Заключение

В статье с помощью молекулярно-динамического моделирования (МДМ) в температурной области, связанной с плавлением и кристаллизацией микроструктур (300 К ÷ 4000 К) получены равновесные свойства кристаллического и расплавленного кремния. Определены барические зависимости удельной теплоты плавления  $L_m(P)$  и равновесной температуры плавления  $T_m(P)$ , являющейся границей равновесия двух фаз кремния – твердой и жидкой. Определены также температурные зависимости плотности  $\rho(T)$ , линейного размера образца  $L(T)$ , коэффициента линейного расширения  $\alpha(T)$ , энтальпии  $H(T)$ , теплоемкости решетки  $C_{lat}(T)$ . МДМ проводилось с потенциалами Стиллинджера–Вебера и KHS. Результаты моделирования показали, что при температуре плавления  $T=T_m$  на фазовом переходе плавление–кристаллизация свойства кремния изменяются скачком. В окрестности точки фазового перехода все свойства кристаллического кремния претерпевают качественные изменения и существенно отличаются от аналогичных характеристик металлов. Процесс плавления приводит к существенному увеличению плотности  $\rho(T)$ , коэффициента линейного расширения  $\alpha(T)$ , уменьшению линейного размера  $L(T)$ . Такие изменения свойств являются показателями уплотнения кремния во время плавления, в отличие от металлов. С увеличением температуры в твердой и жидкой фазах происходит рост энтальпии  $H(T)$ . При  $T=T_m$  увеличение энтальпии происходит

скачком более чем на 9%. Теплоемкость решетки  $C_{lat}(T)$  в твердой фазе с ростом температуры увеличивается, при  $T=T_m$ , на фазовом переходе, в отличие от металлов, скачком уменьшается, после чего в жидкой фазе снова увеличивается. Сравнение рассчитанных характеристик кремния с данными экспериментов показало, что для твердой фазы потенциал SW обеспечивает большее соответствие с данными эксперимента, а для жидкой фазы более приемлем потенциал KHS. Полученные с обоими потенциалами свойства кремния в области плавления обеспечивают приемлемое качественное и количественное совпадение с данными экспериментов. Представлена численная и графическая информация о полученных свойствах и результатах сравнения с данными экспериментов. Полученные зависимости свойств кремния аппроксимированы полиномами невысоких степеней.

### Библиографический список

1. Glassbrenner C.J., Slack GlenA. Thermal Conductivity of Silicon and Germanium from 3K to the Melting Point // *Physical Review*, **134** (4a), A1058-A1069 (1964).
2. Nakamura S., Hibiya T. Thermophysical properties data on molten semiconductors // *International Journal of Thermophysics*, **13** (6), 1061–1084 (1992).
3. Sokolowski-Tinten K., Von der Linde D. Generation of dense electron–hole plasmas in silicon // *Phys. Rev. B*, **61**, 2643–2650 (2000).
4. Okada T., Ohno S. Electrical Properties of Liquid Si and Liquid Au–Si Alloys // *J.Phys. Soc. Jpn.*, **72**, 352-356 (2003).
5. Kobatake Hidekazu, Fukuyama Hiroyuki, Minato Izuru, Tsukada Takao, Awaji Satoshi. Noncontact measurement of thermal conductivity of liquid silicon in a static magnetic field // *Appl. Phys. Let.*, **90**, 094102(1-3) (2007).
6. Pearl Shaul, Rotenberg Nir, Van Driel Henry M. Three photon absorption in Silicon for 2300 – 3300 nm // *App. Phys. Let.*, **93**, 131102(1-3) (2008).
7. Магомедов Я.Б., Гаджиев Г.Г. Высокотемпературная теплопроводность кремния в твердом и жидком состояниях // *Теплофизика высоких температур*, **46** (3) (2008).
8. Liberal Inigo, Mahmoud Ahmed M., Li Yue, Edwards Brian, Engheta Nader. Photonic doping of epsilon-near-zero media // *Science*, **355**, 1058-1062 (2017).
9. Buta D., Asta M., Hoyt J.J. Kinetic coefficient of steps at the Si(111) crystal-melt interface from molecular dynamics simulations // *Journal of Chemical Physics*, **127**, no. 7, Article ID 074703(1-10) (2007).
10. Mostafa A., Medraj M. Review. Binary Phase Diagrams and Thermodynamic Properties of Silicon and Essential Doping Elements (Al, As, B, Bi, Ga, In, N, P, Sb and Tl) // *Materials*, **10**, 676(1-49) (2017).

11. Becquerel A.E. Mémoire Sur Les Effets Électriques Produits Sous L'influence Des Rayons Solaires // *Ann. Phys. Chem.* **1841**(54), 35–42 (1839).
12. Fujiwara Kozo. Review Article. Crystal Growth Behaviors of Silicon during Melt Growth Processes // *International Journal of Photoenergy*, **2012**, Article ID 169829(1-16) (2012).
13. Safarian Jafar, Xakalashé Buhle, Tangstad Merete. Vacuum removal of the impurities from different silicon melts // 26th European Photovoltaic Solar energy conference and exhibition, 1810-1813 (2011).
14. Coletti G. Impurities in Silicon and Their Impact on Solar Cell Performance // Utrecht University: Utrecht, the Netherlands (2011).
15. Möller Wolfhard, Mukherjee Subroto. Plasma-based ion implantation // *Current Science*, **83** (3), 1-16 (2002).
16. Sun H.L., Lee Woojin, Xu Knight, Tsun H.Y., Peng K.T., Juang L.S., Tseng H.P. Backing up Medium Current Implanters using Single Wafer High Energy Implanter for Manufacturing Efficiency // CP866, Ion Implantation Technology, ed. by K. J. Kirkby, R. Gwilliam, A. Smith, and D. Chivers, American Institute of Physics, 385-388 (2006).
17. Valenta J., Linnros J., Juhasz R., Rehspringer J.-L., Huber F., Hirlimann C., Cheylan S., Elliman R.G. Photonic band-gap effects on photoluminescence of silicon nanocrystals embedded in artificial opals // *JAP*, **93** (8), 4471-4474 (2003).
18. Таран Ю.Н., Куцова В.З., Носко О.А. Фазовые переходы полупроводник–металл // *Успехи физ. мет.*, **5**, 87–166 (2004).
19. Zywietz Urs, Evlyukhin Andrey B., Reinhardt Carsten, Chichkov Boris N. Laser printing of silicon nanoparticles with resonant optical electric and magnetic responses // *Nature Communications*, 1-7 (2014).
20. Мажукин В.И., Носов В.В., Земмлер У. Исследование тепловых и термоупругих полей в полупроводниках при импульсной обработке // *Математическое моделирование*, **12**(2), 75-83 (2000).
21. Глазов В.М., Кольцов В.Б., Куцова В.З. и др. Структурные превращения при нагреве монокристаллов кремния // *Физика и техника полупроводников*, **25** (4), 558-595 (1991).
22. Мажукин В.И., Шапранов А.В., Пережигин В.Е. Математическое моделирование теплофизических свойств, процессов нагрева и плавления металлов методом молекулярной динамики // *Mathematica Montisnigri*, **24**, 47 – 66 (2012).
23. Мажукин В.И., Шапранов А.В., Руденко А.Е. Сравнительный анализ потенциалов межатомного взаимодействия для кристаллического кремния // *Mathematica Montisnigri*, **30**, 56-75 (2014).
24. Kaczmariski M., Bedoya-Martinez O.N., Hernandez E.R. Phase diagram of silicon from atomistic simulations // *Phys. Rev. Lett.*, **94**, 095701(1-4) (2005).

25. Lipp V.P., Rethfeld B., Garcia M.E., Ivanov D.S. Atomistic-continuum modeling of short laser pulse melting of Si targets // *Phys. Rev. B*, **90**, 245306(1-17) (2014).
26. Mazhukin V.I., Shapranov A.V., Samokhin A.A., Ivochkin A.Yu. Mathematical modeling of non-equilibrium phase transition in rapidly heated thin liquid film // *Mathematica Montisnigri*, **27**, 65 - 90 (2013).
27. Mazhukin V.I., Samokhin A.A., Shapranov A.V., Demin M.M., Pivovarov P.A. Modeling and visualization of nanosecond laser vaporization of metals in near critical region // *Scientific Visualization*, **8** (1), 1-22 (2016).
28. Stillinger F.H., Weber T.A. Computer simulation of local order in condensed phases of silicon // *Phys. Rev. B*, **31**, 5262-5271 (1985).
29. Pizzagalli L., Godet J., Guenole J., Brochard S., Holmstrom E., Nordlung K., Albaret T. A new parametrization of the Stillinger-Weber potential for an improved description of defects and plasticity of silicon // *J. Phys., Condens. Matter*, **25**, 055801(1-12) (2013).
30. Kumagai T., Izumi S., Hara S., Sakai S. Development of bond-order potentials that can reproduce the elastic constants and melting point of silicon for classical molecular dynamics simulation // *Comp. Mater. Sci.*, **39** (2), 457-464 (2007).
31. Schelling P.K. Phase behavior and kinetics of a new bond-order potential for silicon // *Comput. Mater. Sci.* **44** (2), 274-279 (2008).
32. Сайт проекта Lammgs <http://lammgs.sandia.gov/> по состоянию на 14.02.2018.
33. Verlet L. Computer "Experiments" on Classical Fluids. I. Thermodynamically Properties of Lennard-Jones Molecules // *Phys. Rev.*, **159**, 98-103 (1967).
34. Berendsen H.J.C., Postma J.P.M., Van Gunsteren W.F., DiNola A., Haak J.R. Molecular dynamics with coupling to an external bath // *J. Chem. Phys.*, **81**, 3684-3690 (1984).
35. Тонков Е.Ю. Фазовые превращения соединений при высоком давлении: Справочник в 2-х книгах, Москва: Металлургия, (1988).
36. Eremenko V.G., Nikitenko V.I. Electron microscope investigation of the microplastic deformation mechanisms of silicon by indentation // *Phys. Stat. Sol. A*, **14** (1), 317-330 (1972).
37. Физические величины, Справочник под ред. И.С. Григорьева, Е.З. Мейлихова, М.: Энергоатомиздат (1991).
38. Kubo A., Wang Y., Runge C.E., Uchida T., Kiefer B., Nishiyama N., Duffy T.S. Melting curve of silicon to 15 GPa determined by two-dimensional angle-dispersive diffraction using a Kawai-type apparatus with X-ray transparent sintered diamond anvils // *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, **69**, 2255– 2260 (2008).
39. Voronin G.A., Pantea C., Zerda T.W., Wang L., Zhao Y. In situ x-ray diffraction study of silicon at pressures up to 15.5 GPa and temperatures up to 1073 K // *Phys. Rev. B*, **68**, 020102(R) (2003).

40. Bundy F.P. Phase Diagrams of Silicon and Germanium to 200 kbar, 1000°C // *J. Chem. Phys.*, **41**, 3809-3814 (1964).
41. Бережной А.С. Кремний и его бинарные системы, Киев, изд-во АН УССР, (1958).
42. Glazov V.M., Shchelikov O.D. Volume Changes during Melting and Heating of Silicon and Germanium Melts // *High Temperature*, **38** (3), 405-41 (2000).
43. Rhim Won-Kyu, Ohsaka Kenichi. Thermophysical properties measurement of molten silicon by high-temperature electrostatic levitator: density, volume expansion, specific heat capacity, emissivity, surface tension and viscosity // *Journal of Crystal Growth*, **208**, 313-321 (2000).
44. Rhim W.K., Chung S.K., Rulison A.J., Spjut R.E. Measurements of Thermophysical of Molten Silicon by a High-Temperature Electrostatic Levitator // *Internat. J. Thermophys*, **18** (2), 459-469 (1997).
45. Станкус С.В., Хайрулин Р.А., Тягельский П.В. Термические свойства германия и кремния в конденсированном состоянии // *ТВТ*, **37** (4), 559-564 (1999).
46. Шелудяк Ю.Е., Кашпоров Л.Я., Малинин Л.А., Цалков В.Н. Теплофизические свойства компонентов горючих систем, Справочник. М. (1992).
47. Hull R. Properties of Crystalline Silicon // London : INSPEC, the Institution of Electrical Engineers, 1042, (1999).
48. Logan R.A., Bond W.L. Density change in silicon upon melting // *JAP*, **30** (3), 322 (1959).
49. Desai P.D. Thermodynamic properties of Iron and Silicon // *J. Phys. Chrm. Ref. Data*, **15**(3), 967-983 (1986).
50. Koroleva O.N., Mazhukin A.V. Determination of thermal conductivity and heat capacity of silicon electron gas // *Mathematica Montisnigri*, **40**, 99-109 (2017).

## Оглавление

1. Введение.....	3
2. Моделирование свойств фононной подсистемы кремния.....	4
2.1. Математическая модель.....	5
2.2. Начальные условия. ....	5
2.3. Граничные условия. ....	6
2.4. Потенциалы взаимодействия частиц.....	7
2.5. Вычислительный алгоритм. ....	7
3. Результаты моделирования .....	7
3.1. Равновесные температура и удельная теплота плавления.....	8
3.2. Плотность, коэффициент линейного расширения и удельная теплоемкость .....	12
4. Заключение. ....	19
Библиографический список.....	20