MEAM 势与 Tersoff 势比较研究 —— 碳化硅熔化与凝固行为*

周耐根 洪涛 周浪†

(南昌大学材料科学与工程学院, 南昌 330031)

(2011 年 4 月 12 日收到; 2011 年 5 月 7 日收到修改稿)

运用分子动力学方法对比模拟研究了碳化硅的体熔化、表面熔化和晶体生长过程. 分别采用 MEAM 势和 Tersoff 势两种势函数描述碳化硅. 结果表明: 体熔化时, 两种势函数描述的 SiC 的原子平均能量、Lindemann 指数和结构有序参数与温度的变化关系相似, 但 MEAM 势对应的体熔点 (4250 K) 比 Tersoff 势 (4750 K) 的要高. 表面熔化时, 两种势函数描述的 SiC 在相同的过热度下熔化速度相近; 而在相同的温度条件下,MEAM 作用的 SiC 表面熔化速度更快. 这是由于 MEAM 势 SiC 的热力学熔点 (3338 K) 低于 Tersoff 势 SiC 的热力学熔点 (3430 K) 的缘故. 两种势函数作用的 SiC 在晶体生长方面差异很大.MEAM 势 SiC 的晶体生长速度与过冷度有关, 过冷度约为 400 K 时晶体生长速度最快. 但 Tersoff 势 SiC 晶体却在过冷度为 0—1000 K 的范围内均不能生长. 综合考虑,MEAM 势比 Tersoff 势能更好地描述碳化硅的熔化和凝固行为.

关键词: 碳化硅, 势函数, 熔化, 晶体生长

PACS: 81.10.Fq, 34.20.Cf, 02.70.Ns

1 引 言

碳化硅是一种理想的宽带隙半导体材料, 具有广阔的应用前景 [1]. 目前制备 SiC 单晶的主要方法为高温升华法 [2] 和化学气相沉积法 [3], 这两类方法中 SiC 晶体生长速度缓慢, 效率低, 难以满足实际应用需要. 液相法可以克服晶体生长速度慢的缺点, 研究者也一直在进行液相法制备 SiC 晶体的探索研究 [4], 然而由于 SiC 的熔点高, 难以选择合适的坩埚材料, 以及常压下 C 在 Si 中的溶解度低等原因, 致使实验上对液相法制备 SiC 单晶的研究进展缓慢.

分子动力学的计算机模拟方法可求出所模拟体系中每个时刻原子的位置和速度, 进而得到粒子系统在相空间中随时间演化的轨迹, 对晶体生长模拟有独特的优势而被广泛应用 [5,6]. 方法中关键的一步是通过势函数来计算原子的受力, 从而更新原子的位置来完成对材料行为的模拟, 因而原子间的相互作用势函数的合理选择对模拟结果的准确性具有决定作用. 当前对于 SiC 的分子动力学模拟研究中主要运用了两种势函数: 一种是由 Baskes 在 1992 年发展的修正嵌入原子法 (modified embedded atom method,MEAM)[7]; 另一种是由 Tersoff 在 1988 年发展的 Tersoff 势 [8,9]. 这两种势函数在 SiC 的力学性能 [10,11], 高能粒子轰击行为 [12], 晶体缺陷 [13], 纳米杆 [14], 纳米多晶 [15] 等方面得到了许多成功应用. 从本质上说,MEAM 势与 Tersoff 势非常相似 [13].Huang 等 [13] 运用这两种势函数对比研究了 SiC 的点缺陷形成能和迁移能, 两者结果均很好地符合了第一性原理计算结果, 只是在精度上存在细微的差异: 点缺陷形成能的 Tersoff 势结果更精确, 而迁移能的 MEAM 势结果更好.SiC 熔化与结晶是更为复杂的物理过程, 采用那种势函数来对之进行分子动力学模拟较为理想? 很难从已

* 国家自然科学基金 (批准号:10502024) 资助的课题.

† E-mail: lzhou@ncu.edu.cn

© 2012 中国物理学会 Chinese Physical Society

有间接研究结果推断, 有必要分别以这两种势函数来进行分子动力学模拟研究. 目前尚未见有此类研究报道. 本文运用分子动力学方法, 对比模拟研究了 MEAM 势和 Tersoff 势描述的碳化硅的体熔化、表面熔化和晶体生长行为, 以期为 SiC 液相凝固生长的分子动力学模拟研究提供参考, 从而为 SiC 单晶液相法制备技术研究开发提供辅助.

2 模型与方法

2.1 模型构造

图 1(a) 系碳化硅熔化过程模拟的初始构型.X, Y, Z 坐标轴分别对应 SiC 晶核的 [100],[010] 和 [001] 晶向, 体系大小为 $10a\times7a\times7a$(a 为晶格常数), 共有 3920 个原子. 当模拟 SiC 体熔化时, 在三维方向施加周期边界条件, 体系采用等温等压系综 (NPT); 当模拟 SiC 表面熔化时, 仅在 X 和 Y 方向上施加周期边界条件, 在 Z 方向施加自由表面边界条件, 体系采用正则系综 (NVT). 图 1(b) 系碳化硅晶体生长模拟的初始构型. 体系两端为 SiC 晶体, 以提供晶体生长过程中的晶核, 中间无序排列的原子是从高温预熔处理的体系中截取的一部分, 两者间界面即晶体生长面 (100), 体系共有 11648 个原子. 模拟中在三维方向施加周期边界条件, 体系采用等温等压系综 (NPT). 时间步长为 10^{-3}ps.

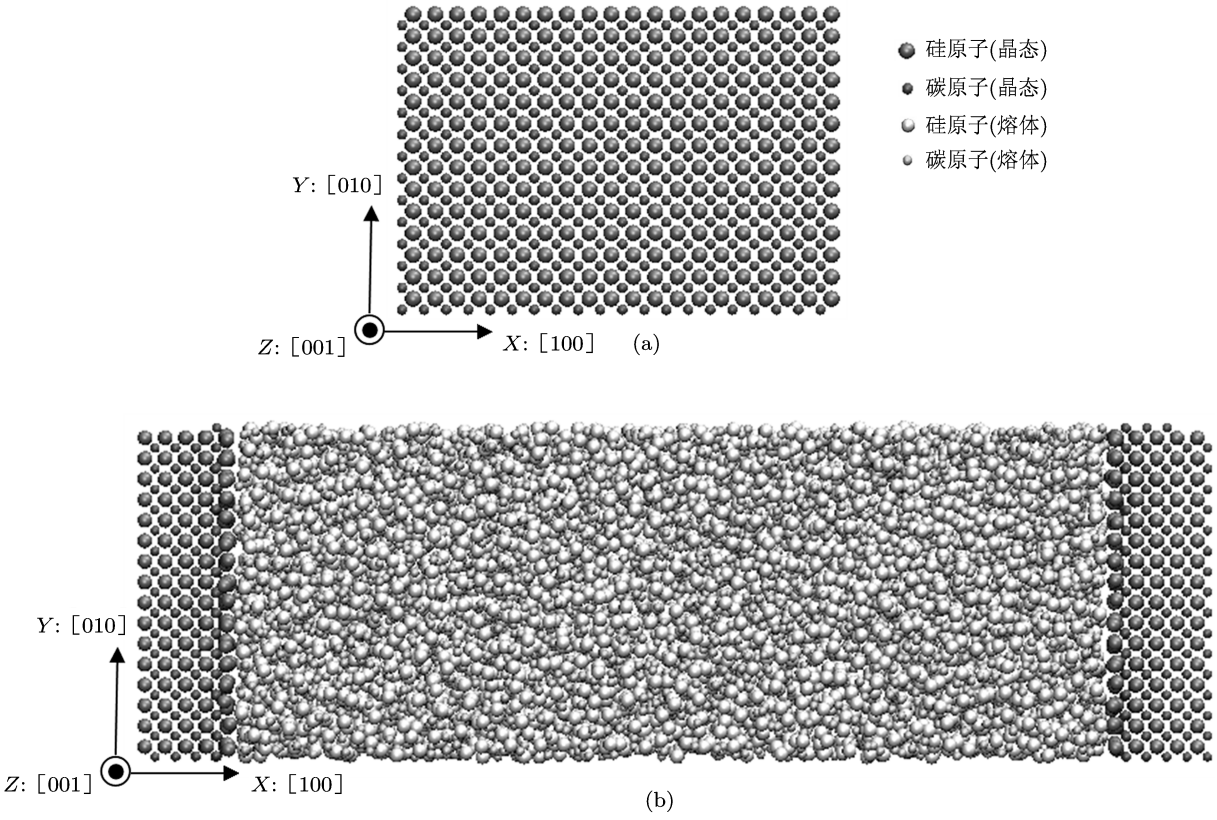

图 1 碳化硅熔化和晶体生长时的初始构型 (a) 熔化; (b) 晶体生长

2.2 势函数

本文分别采用了 MEAM 势与 Tersoff 势计算 SiC 的原子间相互作用. 其中 MEAM 势 [7,16,17] 是在 EAM 势的理论基础上考虑了角度效应的多体势函数, 适合模拟由共价键结合的半导体材料, 其体系总能量的计算公式为

$$E=\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1\neq i}^{N}\Phi_{ij}(r_{ij})+\sum_{i=1}^{N}F_i(\rho_i), \qquad (1)$$

式中,$\Phi_{ij}(r_{ij})$ 是原子间的两体作用对势,$F_i(\rho_i)$ 是电子密度 ρ_i 的嵌入能,r_{ij} 是为原子 i, j 之间的距

离.MEAM 势的角度因子是通过电子密度函数引进的. 电子密度函数的具体形式和参数值详见文献 [7].

Tersoff 势是根据赝势理论提出的一种描述共价键结合的键级势. 自 1988 年提出以后为了适应不同的模拟内容或环境, 经历了多次的修正和发展 [8,9,18]. 本文运用的是最近由 Erhart 和 Albel 修改完善的 Tersoff 势. 其体系总能量的计算公式为

$$E = \sum_{i>j} f_{\mathrm{C}}(r_{ij}) \left[V_{\mathrm{R}}(r_{ij}) - b_{ij} V_{\mathrm{A}}(r_{ij}) \right], \quad (2)$$

式中,$V_{\mathrm{R}}(r_{ij})$,$V_{\mathrm{A}}(r_{ij})$ 分别为原子间的排斥势和吸引势,b_{ij} 表示键合强度, 是表现多体效应的因子, 而 $f_{\mathrm{C}}(r_{ij})$ 是一个光滑截断函数, 它使两原子间的相互作用在距离较远时光滑地趋向于零. $V_{\mathrm{R}}(r_{ij})$,$V_{\mathrm{A}}(r_{ij})$ 和 $f_{\mathrm{C}}(r_{ij})$ 的具体形式和参数值详见文献 [8].

2.3 Lindemann 指数

Lindemann 指数是一个表征材料热致失稳的参数 [19,20]. 它对体系的失稳很敏感, 常用来确定体系的体熔点. 单个原子的 Lindemann 指数计算表达式为

$$q_i = \frac{1}{N-1} \sum_{j \neq i} \frac{\sqrt{\langle r_{ij}^2 \rangle - \langle r_{ij} \rangle^2}}{\langle r_{ij} \rangle}, \quad (3)$$

式中 $\langle r_{ij} \rangle$ 为原子 i, j 距离对时间的期望值. 体系整体 Lindemann 指数为 $\sum_{i=1}^{N} q_i/N$.

描述体系有序无序相变的另一个重要参数是结构有序参数 (structure order parameter) [21]. 理想晶体结构的有序参数为 1, 温度升高结构有序参数逐渐减少, 发生相变后液态的有序参数接近 0, 其计算表达式详见文献 [21].

2.4 缺陷原子数

缺陷原子数 $\mathrm{N_{def}}$ 是一个度量体系结构有序的参数 [22]. 判断一个原子是否属于缺陷原子是通过计算该原子的 “第一近邻” 来实现的. 这里的 “第一近邻” 是以该原子为中心, 用对应温度下晶体第一近邻和第二近邻的距离平均值为半径画球, 球内原子数就是该原子的 “第一近邻” 数. 若该原子的 “第一近邻” 数不等于理想晶体的第一近邻数, 则该原子为缺陷原子. 完整晶体内部原子不是缺陷原子, 熔体内的原子均可看成是缺陷原子, 所以缺陷原子数目的变化可以表征熔化的进程 [23]. 而熔化速度可通过缺陷原子数 N_{def} 随时间变化曲线的斜率来计算, 即

$$v(T) = \frac{d_0}{N_0} \frac{\partial N_{\mathrm{def}}(t,T)}{\partial t}, \quad (4)$$

式中,d_0 为原子层间距离,N_0 为每层原子数.

另外, 层密度函数 (layer density function) [24] 可以直观地描述沿熔化或结晶方向的体系结构. 晶态的原子层密度曲线为连续的尖峰, 熔融态的原子层密度曲线尖峰消失或接近平坦, 其计算表达式详见文献 [24].

3 结果与讨论

3.1 体熔化

碳化硅的体熔化模拟是在 3000—5000 K 的温度范围进行, 在特定温度下对施加三维周期边界的 SiC 体系进行长时间的恒温弛豫, 让体系的结构和能量达到平衡, 然后统计出对应温度下体系的原子平均能量、Lindemann 指数和结构有序参数, 结果示于图 2. 由图可知:MEAM 势和 Tersoff 势两种势函数下的原子平均能量、Lindemann 指数和结构有序参数与温度的关系曲线形状基本相同. 在相对低温下, 原子平均能量和 Lindemann 指数都随温度升高呈线性增大, 而结构有序参数随温度升高呈线性下降. 当温度升到某临界值时, 三者与温度的关系均发生了骤然变化: 原子平均能量约从 –5.1 eV 迅速升高到 -4.3 eV, 升高了 0.8 eV;Lindemann 指数约从 0.05 突然升高到 0.30, 升高了 0.25; 结构有序参数约从 0.56 直线下降到 0.05, 下降了 0.51. 当温度继续升高时, 原子平均能量、结构有序参数和 Lindemann 指数与温度的关系又呈现出初始阶段的线性升高和下降的关系.

两种势函数下的原子平均能量、Lindemann 指数和结构有序参数与温度的关系均反应了体熔化的基本物理规律. 温度的升高主要引起原子动能和原子间距的增大, 后者在势函数约束下将引起原子势能的升高. 在温度低于熔点时, 碳、硅原子仍被约束在晶格点阵附近振动, 原子平均能量由于动能和势能的双重增大而线性升高;Lindemann 指数和结构有序参数也由于体现原子动能的热振动速度

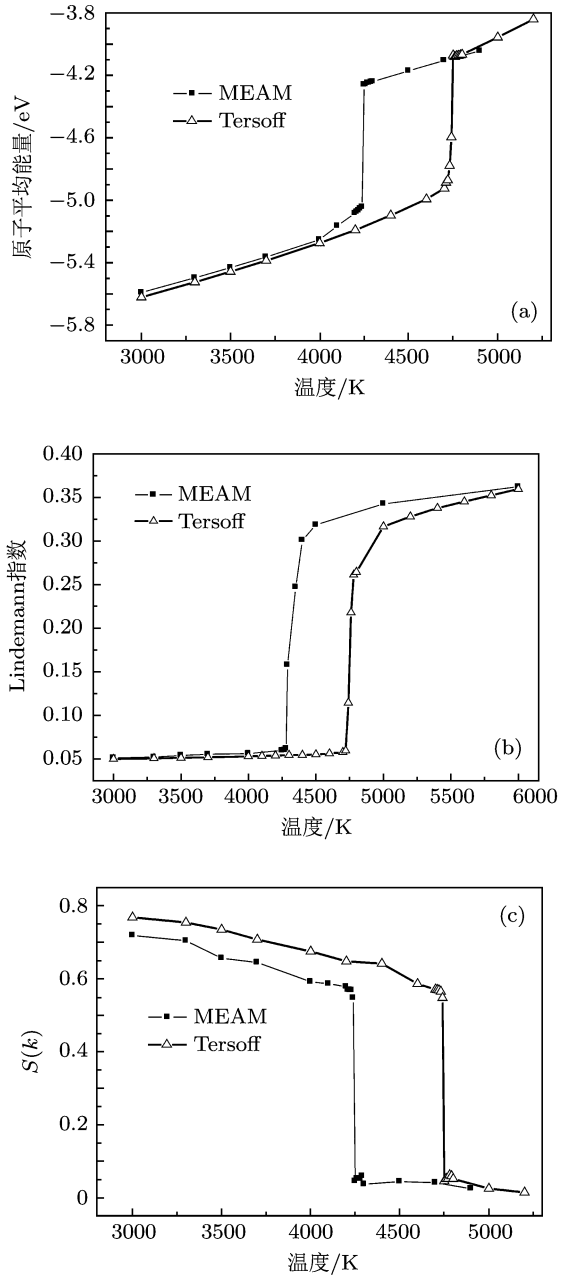

图 2 碳化硅体熔化达到平衡后体系的原子平均能量 (a)Lindemann 指数 (b) 和结构有序参数 (c) 与温度的关系

增大和原子间距的增大而线性增大和下降. 而三者与温度关系中的骤然变化, 实质上是碳化硅的晶体结构被打破,SiC 由晶态转变成熔融态, 即发生了体熔化. 熔体原子相对于晶体原子的振动速度和原子间距都有了显著的变化, 因而平均原子能量和 Lindemann 指数都突然升高, 而结构有序参数也由于熔融态的原子有序度的下降而突然下降, 因此, 骤然变化对应的温度就是体熔点 [21]. 温度高于体熔点时三者变化规律与前段基本相同. 由此可见, 两种势函数反应的体熔化与温度的关系基本相同. 而两种势函数下的不同之处在于突变发生的临界温度不同, 也即是体熔点不同:MEAM 势作用下为 4250 K,Tersoff 势下为 4750 K.

3.2 表面熔化

体熔化是晶格弹性失稳的过程, 即体系的结构会在体熔点发生突变 [19]. 而实际熔化是优先发生在表面上的 [25], 系固液界面在高于热力学熔点的温度下不断向晶体内部推进的过程. 表面熔化的进程可以通过体系内的缺陷原子数与时间的变化关系来反映. 图 3 示出了 MEAM 势和 Tersoff 势下

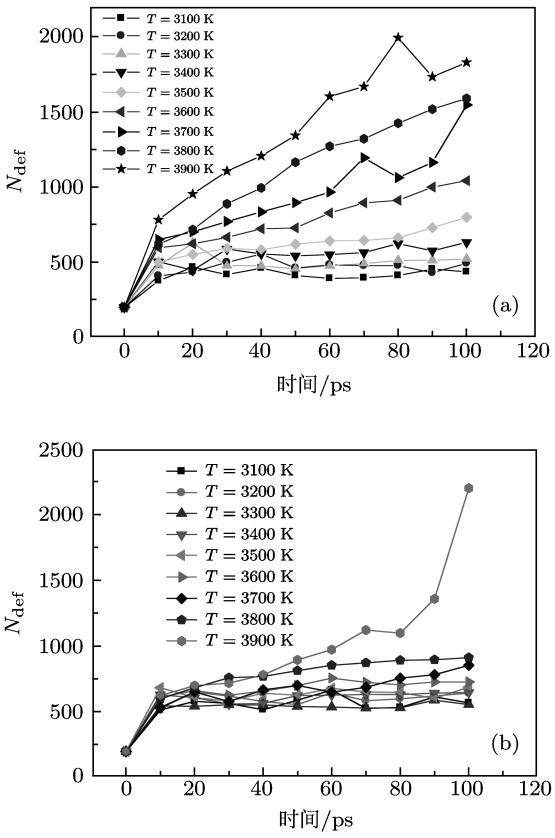

图 3 碳化硅表面熔化时体系在不同温度下缺陷原子数随时间的演变 (a)MEAM 势; (b)Tersoff 势

的碳化硅表面熔化模拟缺陷原子数 $N_{\rm def}$ 随时间的演变. 由图 3 可知, 缺陷原子数经 10 ps 的熔化时间迅速由 200 增长到 500 上下, 然后的演变出现两种情况: 一种是在相对低的温度下,SiC 的缺陷原子数在水平线附近上下波动; 另外一种是在相对高的温度下,SiC 的缺陷原子数随时间增长而增多, 且这种增长趋势随温度升高而越明显. 第一种情况

说明在相对低温下 SiC 缺陷原子数没有明显增多, 即 SiC 并没有发生明显的表面熔化. 第二种情况说明了在相对高温下 SiC 晶体开始发生明显熔化, 而且温度越高熔化越快. 而图中曲线起始段缺陷原子数的迅速增加, 应该是由于部分表层原子在高温下发生重构, 而被统计为缺陷原子所致. 对比图 3(a) 和 (b) 可知, 两种势函数下不同之处在于缺陷原子数最初开始明显增多所对应的温度不同: MEAM 势对应于 3400 K,Tersoff 势对应于 3600 K; 以及同温度下缺陷原子数的增速不一样,MEAM 势的增速比 Tersoff 势的更快.

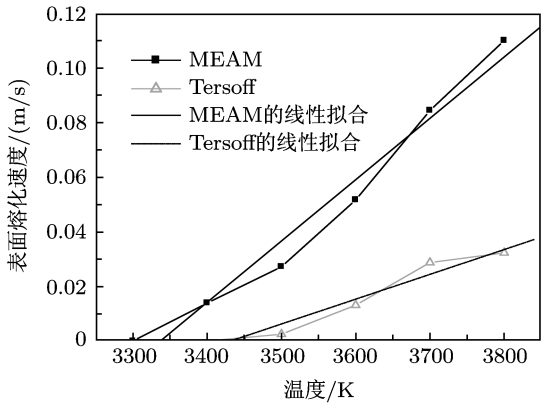

图 4 碳化硅的表面熔化速度与温度 T 的关系

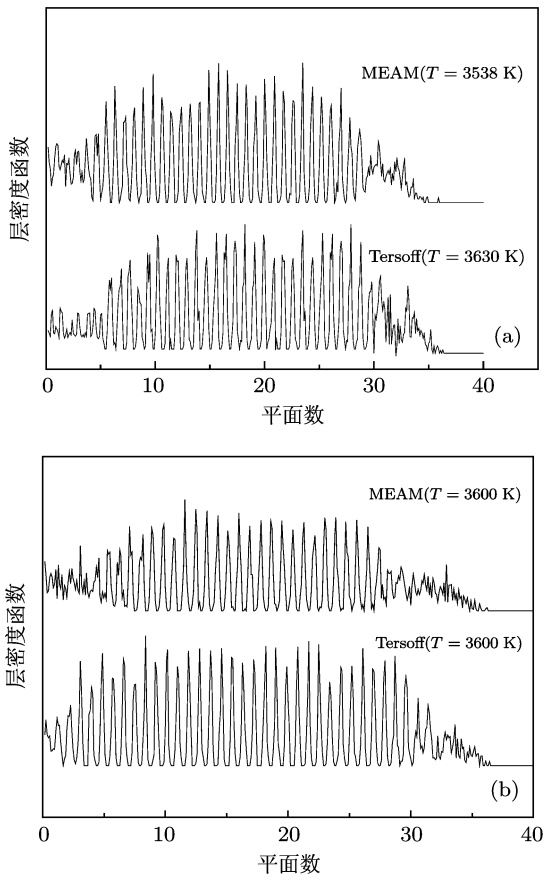

图 5 碳化硅表面熔化模拟至 100 ps 时体系沿 X 方向的原子层密度 (a) 体系的过热度为 200K; (b) 体系的温度为 3600K

表面熔化速度可以由 (4) 式根据缺陷原子数随时间的演变得到. 图 4 示出了 3100 K 到 3800 K 温度范围内, MEAM 势和 Tersoff 势下碳化硅表面熔化速度不为零的数据. 由图可看出, 同温度下,MEAM 势作用的 SiC 体系比 Tersoff 势的表面熔化速度更快. 将表面熔化速度与温度的关系曲线进行线性拟合, 并外推至表面熔化速度为零时的温度, 即可得到固液共存温度, 分子动力学模拟将这个温度近似认为是热力学熔点 [21]. 由图 4 可看出,MEAM 势下 SiC 的热力学熔点为 3338 K,Tersoff 势下为 3430 K. 两者均比物理实验中测定的热力学熔点 (3100 K[26]) 要高, 但 MEAM 势比 Tersoff 势更接近于物理实验的值.

为了进一步对比研究两种势函数下碳化硅的表面熔化特性, 我们分别选择了比各自热力学熔点高 200 K 的温度, 即过热度为 200 K, 和固定于 3600 K 的温度下做了两组对比熔化模拟实验, 并用垂直于熔化表面的原子层密度函数来表征熔化进程, 结果示于图 5. 由图 5(a) 可看出, 经 100 ps 表面熔化模拟实验后, 在 200 K 的过热度条件下, 两种势函数作用的 SiC 晶体的两端层密度函数值均很小, 表明两端均已熔化. 中间段的层密度函数值规律变化, 反应了中间段为没有熔化的晶体原子层. 对比两势函数作用下的中间晶体层长度可以估算出两者的熔化速度大致相当. 由图 5(b) 可看出, 在同样的温度下, MEAM 势作用下的碳化硅熔化掉的原子层比 Tersoff 势下更多, 说明同样温度下 MEAM 势作用的 SiC 更容易被熔化, 这与前面测算的 MEAM 势作用下的 SiC 热力学熔点更低是一致的.

3.3 晶体生长

我们将碳化硅晶体生长体系处于一定温度下恒温弛豫, 观察晶体生长过程. 图 6 示出了 MEAM 和 Tersoff 势下的 SiC 晶体的生长速率与温度的关系. 这里的生长速率统计方法仍采用的是缺陷原子数随时间演变曲线的斜率来计算的. 由图可知, 在 1700—3400 K 的温度范围内,MEAM 势作用下

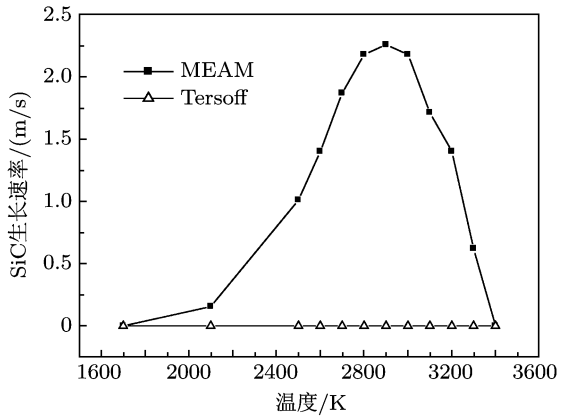

图 6 碳化硅晶体生长速率与温度的关系

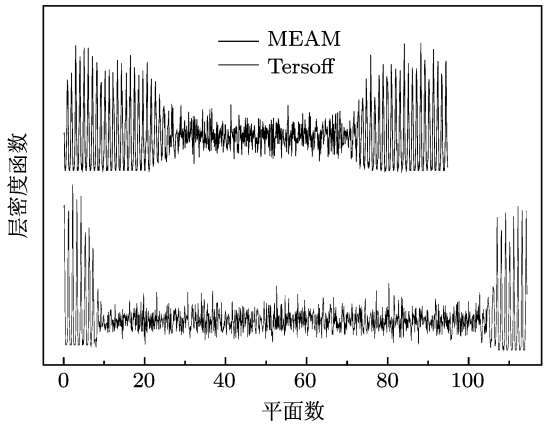

图 7 碳化硅在 400 K 过冷度下晶体生长模拟至 700 ps 时体系的沿 X 方向的原子层密度

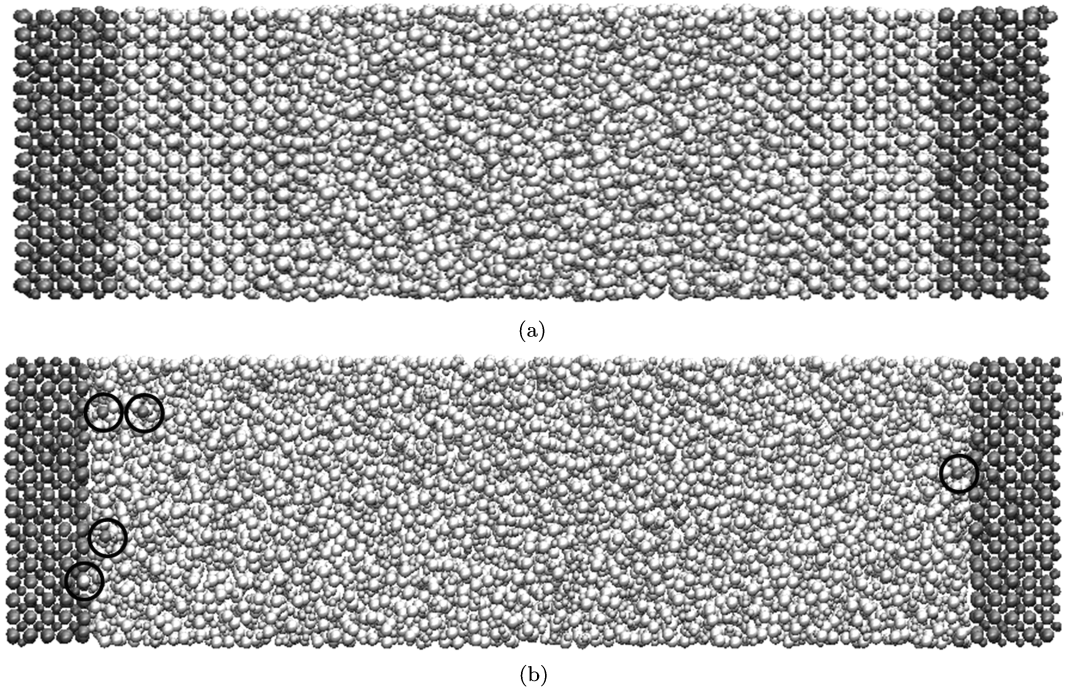

图 8 碳化硅在 400 K 过冷度下晶体生长模拟至 700 ps 时体系的 [001] 方向投影 (图中小圆圈中心的原子为发生了互扩散的原子) (a)MEAM 势; (b)Tersoff 势

的 SiC 晶体先随着温度升高而增大, 到 2900 K 温度时生长速率增大到最大值 (约 2.25m/s). 然后随温度升高而快速降低, 到 3400 K 左右时, 生长速率降为零. 有意思的是, 在 1700—3400 K 的温度范围内,Tersoff 势作用下的 SiC 晶体的生长速率一直为零, 晶体不能长大.

进一步我们对比分析了两种势函数下的体系层密度函数和原子结构图, 分别示于图 7 和图 8. 由图 7 可知,MEAM 势作用下, 整个层密度函数曲线比 Tersoff 势作用下的更短, 而两端对应于晶体部分的尖峰段却更长. 这说明 MEAM 势作用下的两端的 SiC 晶体向中间熔体部分进行了生长, 并由此引起整个体系的长度收缩, 这才致使曲线变短.Tersoff 势下两端的 SiC 晶体对应的尖峰段长度与初始设定值基本不变, 进一步确定在 400 K 的过冷度下 Tersoff 势作用的 SiC 晶体未能生长. 从图 8 中可以直观地观察到 MEAM 势下和 Tersoff 势下晶体生长情况. 经 700 ps 模拟,MEAM 势作用下的 SiC 晶体生长了约 28 个原子层, 而 Tersoff 势下 SiC 晶体除了有少量原子与熔体部分发生了扩

散之外, 基本保持初始设定的晶核部分, 并没有向熔体部分生长. 我们重复了不同大小的体系分别进行过 NPT 和 NVT 系综下的模拟, 结果都类似. 由此可知,MEAM 势与 Tersoff 势对 SiC 晶体生长描述有明显的不同:MEAM 势可以反映 SiC 晶体生长的规律, 而 Tersoff 势作用下,SiC 晶体不能长大.Tersoff 势不能很好地描述 SiC 晶体生长的一种可能原因是:Tersoff 势是一种键级势, 原子的键级 (即键的强度) 依赖于原子的周围环境. 当原子的近邻数越多时, 每一近邻的键就越弱. 晶体生长过程是一个原子由无序向有序转变的过程, 这一转变必须克服一定的能垒. 而熔融状态 SiC 原子的近邻数比晶态时增多, 每一近邻的键级也被削弱, 以致于难以克服结晶转变的能垒而不能完成无序有序转变, 因而不能很好地描述晶体生长过程.

4 结 论

本文通过分子动力学方法模拟研究了 MEAM 势作用下和 Tersoff 势作用下的碳化硅体熔化、表面熔化和晶体生长过程, 得到:

1. 两种势函数作用的 SiC 在体熔化时统计出的原子平均能量、Lindemann 指数和结构有序参数与温度的变化关系基本相同, 但体熔点不一样:MEAM 势下为 4250 K,Tersoff 势下为 4750 K.

2. 两种势函数作用的 SiC 在表面熔化时, 当处于同样过热度下, 两者的表面熔化速度基本一致. 当处于同样温度下,MEAM 作用的 SiC 表面熔化速度更快. 由表面熔化速度与温度的曲线关系发现: 熔化速度的差异是由热力学熔点不同引起,MEAM 势对应的热力学熔点为 3338 K, 低于 Tersoff 势对应的 3430 K.

3. 两种势函数作用的 SiC 在晶体生长方面差异很大.MEAM 作用的 SiC 的晶体生长速度与过冷度有关, 过冷度约为 400 K 时晶体生长速度最快; 但 Tersoff 势作用下的 SiC 却在过冷度为 0—1000 K 的范围内均不能生长. 因此, 虽然 Tersoff 势被广泛应用于熔化过程的分子动力学模拟, 但却不适用于 SiC 晶体生长的模拟.

[1] Morkoc S S, Gao G B, Lin M E, Sverdlov B, Burns M 1994 *J. Appl. Phys.* **76** 1363

[2] Lely J A 1955 *Ber.Deut.Keram.Ges* **32** 229

[3] Straughan V E, Mayer E F 1960 (Pergamon Press) pp84—93

[4] Muller S G, Glass R C, Hobgood H M, Tsvetkov V F, Brady M, Henshall D, Malta D, Singh R, Palmour J, Carter C H 2001 *Materials Science and Engineering B-Solid State Materials for Advanced Technology* **80** 327

[5] Lei Y, Chen Z N 1997 *Acta Phys. Sin.* **46** 0511(in Chinese) [雷雨, 程兆年 1997 物理学报 **46** 0511]

[6] Kluge M D, Ray J R 1988 *Phys. Rev.* B **39** 1738

[7] Baskes M I 1992 *Phys. Rev.* B **46** 2727

[8] Erhart P, Albe K 2005 *Phys. Rev.* B **71** 035211

[9] Tersoff J 1989 *Phys. Rev.* B **39** 5566

[10] Tang M J, Yip S 1995 *Phys. Rev.* B **52** 15150

[11] Tang M J, Yip S 2009 *J. Appl. Phys.* **76** 2719

[12] Prskalo A P, Schmauder S, Ziebert C, Ye J, Ulrich S 2010 *Surface and Coatings Technology* **204** 2081

[13] Huang H C, Ghoniem N M, Wong J K, Baskes M 1995 *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* **3** 615

[14] Shen H J 2007 *J. Mater. Sci.* **42** 6382

[15] Chatterjee A,Kalia R K, Nakano A, Omeltchenko A, Tsuruta K, Vashishta P, Loong C K, Winterer M, Klein S 2000 *Appl.Phys.Lett.* **77** 1132

[16] Baskes M I 1987 *Phys. Rev.* L **59** 2666

[17] Baskes M I, Nelson J S, Wright A F 1989 *Phys. Rev.* B **40** 6085

[18] Brenner D W 1990 *Phys. Rev.* B **42** 9458

[19] Lindemann F 1910 *J. Physik. Z.* **11** 609

[20] Zhou Y Q, Karplus M, Ball K D, Stephen Berry R 2002 *J. Chem. Phys.* **116** 2323

[21] Wang H L, Wang X X, Liang H Y 2005 *Acta Metall. Sin.* **41** 568 (in Chinese) [王海龙, 王秀喜, 梁海弋 2005 金属学报 **41** 568]

[22] Ding F, Bolton K, Rosen A 2005 *European Physical Journal* D **34** 275

[23] Mishin Y, Mehl M J, Papaconstantopoulos D A, Voter A F, Kress J D 2001 *Phys. Rev.* B **63** 224106

[24] Sorkin V, Polturak E, Adler J 2003 *Phys. Rev.* B **68** 174103

[25] Lutsko J F, Wolf D, Phillpot S R, Yip S 1989 *Phys. Rev.* B **40** 2841

[26] Massalski T B, Okamoto H, Subramanian P R, Kacprzak L 1990 *Binary Alloy Phase Diagrams* (Volume 1) (USA:ASM International) p1485

A comparative study between MEAM and Tersoff potentials on the characteristics of melting and solidification of carborundum*

Zhou Nai-Gen Hong Tao Zhou Lang†

(*School of Materials Science and Engineering, Nanchang University, Nanchang* 330031, *China*)

(Received 12 April 2011; revised manuscript received 7 May 2011)

Abstract

Molecular dynamic simulations of bulk melting, surface melting and crystal growth of SiC are carried out. The atomic interactions in SiC are calculated by MEAM and Tersoff potentials separately. The results show that the bulk melting of SiC with MEAM potential exhibits its relations to temperature similar to that with Tersoff potential, while can be indicated by the mean atomic energy, Lindemann index and structure order parameter. The difference between them is the bulk melt point: MEAM is 4250 K, while Tersoff is 4750 K. At the same superheat degree, the velocities of surface melting of SiC separately, with MEAM and Tersoff potentials are in substantial agreement. But at the same absolute temperature, the surface melting of SiC with MEAM potential is faster than that which the Tersoff potential, which is due to the difference in thermodynamic melting point. The Measured value of the thermodynamic melting point of MEAM is 3338 K compared with 3430 K of Tersoff. On the crystal growth side, the crystal growth velocity of SiC with MEAM potential is related to the undercooling. The fastest velocity corresponds to the undercooling of 400 K. However, the crystal of SiC with Tersoff potential cannot grow in the undercooling of 0 K—1000 K. Overall, the MEAM potential is better than Tersoff potential in the sense of describing the melting and solidification of carborundum.

Keywords: carborundum, molecular dynamics, melting, crystal growth

PACS: 81.10.Fq, 34.20.Cf, 02.70.Ns

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10502024).

† E-mail: lzhou@ncu.edu.cn