

# 硅晶体中点缺陷结合过程的分子动力学研究<sup>\*</sup>

乔永红 王绍青<sup>†</sup>

(中国科学院金属研究所沈阳材料科学国家(联合)实验室 沈阳 110016)

(2004 年 6 月 21 日收到 2005 年 3 月 21 日收到修改稿)

采用分子动力学方法模拟研究了硅晶体中的空位和间隙原子的结合过程. 研究中采用了 Stillinger-Weber 三体经验势描述原子间的相互作用, 系统分别在低温 300K 和高温 1400K 进行弛豫. 计算中发现空位和间隙原子倾向于通过  $\langle 111 \rangle$  方向结合, 而  $\langle 110 \rangle$  方向上存在着势垒. 通过势垒值的计算, 对 Tang 和 Zawadzki 势垒计算值的差异进行了解释.

关键词: 分子动力学, 空位与间隙原子, 扩散

PACC: 6185, 6170B, 6630F

## 1. 引言

随着电子工业的迅猛发展, 电子器件的体积越来越小. 其中的一些杂质原子以及器件自身的缺陷对于导电性有非常明显的影响, 因此需要对于掺杂物及固有缺陷的扩散过程有全面细致的了解和准确定量的描述. 进行这类问题的实验研究耗费巨大, 并且目前许多实验结果彼此之间相差甚远, 无法取得定量一致的结论. 在这种形势下, 计算机模拟成为更加有效的方法, 它不仅预测半导体器件掺杂后的性质, 而且对影响半导体性能的本征缺陷, 例如自间隙原子与空位的热力学性质等也可进行详细研究. 通过第一原理计算<sup>[1-6]</sup>和基于经典的原子间相互作用势的原子尺度模拟<sup>[7-10]</sup>, 人们在对微量元素和固有缺陷扩散问题方面的认识取得了很大的进步. 由于掺杂原子只有与空位和自间隙原子发生作用才能进入硅晶体内部<sup>[11]</sup>, 因此全面地理解间隙和空位运动过程对认识掺杂原子的扩散行为是很有意义的. 空位和间隙原子的结合是缺陷运动的一个方面. 对于空位和间隙原子的结合, 实验上只能通过杂质原子浓度达到平衡的时间来估测空位与间隙原子的结合速率, 这种估测还是基于这种杂质原子完全是通过空位与间隙机制扩散的假设. 在理论计算

方面, Tang 等<sup>[12]</sup>在 1997 年第一次用紧束缚分子动力学模拟了硅晶体中空位和哑铃型自间隙原子在 300K 的结合过程. 其后, Zawadzki 等<sup>[13]</sup>于 2001 年报道了采用紧束缚分子动力学模拟了空位和四面体间隙在 1473K 的结合过程. 至今尚未见到这方面的经典分子动力学研究结果.

Tang 等<sup>[12]</sup>在对 Split 型间隙原子的研究中认为空位(V)与间隙原子(I)在结合过程中形成过渡态的空位-间隙混合型缺陷(V-I complex), 并计算得到这种缺陷的消失势垒高度为 1.13eV. Zawadzki 等<sup>[13]</sup>对高温时间隙与空位在  $\langle 110 \rangle$  方向上的结合势垒计算值为 0.5eV. 本文通过分析高温和低温 V-I 结合的经典分子动力学计算结果解释了上述势垒计算值的差异.

## 2. 模型及方法

由分子动力学研究粒子相互作用的物理过程中的一个关键问题是选取恰当的原子间相互作用势, 本文采用三体团簇势 Stillinger-Weber(SW)势<sup>[14]</sup>描述硅原子间的相互作用:

$$\Phi = \sum_{i < j} \phi_2(r_{ij}) + \sum_{i < j < k} \phi_3(r_i, r_j, r_k).$$

式中第一项为二体相互作用, 第二项为三体作用力项. 其中  $r_{ij}$  为  $i$  原子与  $j$  原子之间的距离.  $\phi_2(r_{ij})$  为

<sup>\*</sup> 国家重点基础研究发展规划项目(批准号: TG2000067104)资助的课题.

<sup>†</sup> 通讯联系人. E-mail: sqwang@imr.ac.cn

相距  $r_{ij}$  两个原子之间的二体相互作用势.  $r_i, r_j, r_k$  分别为第  $i, j, k$  个原子距坐标原点的距离.  $\phi_3(r_i, r_j, r_k)$  是  $i, j, k$  三个原子之间的三体相互作用项. 该项是针对以共价键结合的原子间相互作用力具有方向性的特点引入的. SW 势对硅的熔点给出了准确的预测, 是研究硅这种应用广泛的半导体材料普遍采用的势函数<sup>[15]</sup>.

硅晶体中的常见间隙原子类型有四面体型 (Tetrahedral) 和 split 型两种. Split 型是间隙原子在硅晶体中的最稳定形式. 在这种构型中, 两个间隙原子共享一个空位从而形成哑铃形状的间隙原子对. 尽管通过 LDA 计算得到 Split 型的间隙形成能仅比四面体型间隙低  $0.03\text{eV}$ <sup>[16]</sup>, 但是这种构型的间隙却更为常见<sup>[12]</sup>. 在分子动力学模拟中, 这两种间隙构型对扩散的贡献基本相同. 经过统计, 它们之间的最大差值也只有 5%. 因此研究中选择哪种间隙类型对于分子动力学模拟结果并不是关键.

本文采用了含有一个四面体间隙原子的  $3 \times 3 \times 3$  的立方超单胞. 超单胞的边长为  $16.29\text{\AA}$ , 共包含 216 个处于正常格点位置的硅原子和一个自间隙原子. 采用三维周期性边界条件进行低温 300K 和高温 1400K 的正则系综模拟, 初始空位的位置在  $(a + \frac{1}{4}a, a + \frac{3}{4}a, a + \frac{3}{4}a)$  处 ( $a$  为硅的晶格常数), 间隙原子分别放置在空位的第一到第六近邻位置 (见表 1). 表中  $D_{IV}$  表示  $I-V$  距离,  $D_{IV}^L$  表示以单胞长度为单位的  $I-V$  距离.

表 1 四面体间隙在超单胞中的初始位置

$D_{IV}(\text{\AA})$	$D_{IV}^L$	$X$	$Y$	$Z$
2.35 (I)	0.433	1/2	1/2	1/2
2.71 (II)	0.500	1/4	1/4	1/4
4.50 (III)	0.829	0	0	1/2
4.70 (IV)	0.866	-1/4	1/4	1/4
5.92 (V)	1.090	1	0	0
6.07 (VI)	1.118	1/4	-1/4	1/4

考虑到周期性边界条件的影响, 为了避免在三维空间中重复的超单胞中点缺陷的相互作用, 空位和间隙原子之间的最远距离的选取不超过单胞边长的二分之一, 即  $8.15\text{\AA}$ . 图 1 给出不同位置的间隙原子的初始构型. 图中较大的灰色球表示空位, 不同位置上的间隙原子分别用黑色球表示, 格点位置的原子用灰色小球表示.

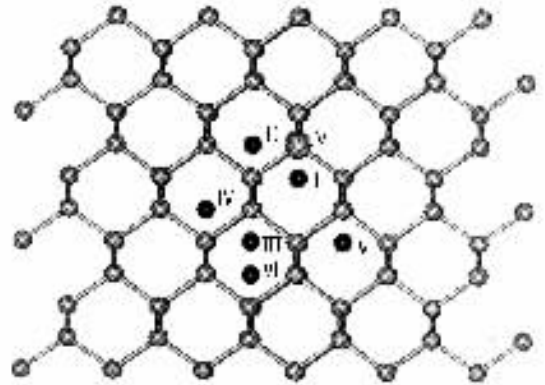


图 1 沿 101 方向四面体间隙原子在硅晶体中的初始位置

对于每个不同间距的空位和间隙原子, 模拟时间持续 60000 个时间步共  $89.28\text{ps}$ . 下面给出在 300K 和 1400K 时对不同距离的  $V-I$  结合的过程的分析.

### 3. 结果与分析

近邻序列为 I 时, 初始沿  $\langle 111 \rangle$  方向的  $I-V$  对距离为  $2.35\text{\AA}$ , 此距离与 Si-Si 键长相同. 这个间距的空位和间隙原子的结合非常迅速, 大约  $40\text{fs}$  就完成了结合. 间隙原子沿着  $\langle 111 \rangle$  方向向空位靠近. 图 2 是两者结合的过程示意图. 1400K 时  $V-I$  相距为  $2.35\text{\AA}$  时的结合方式与 300K 时的没有区别, 依然是间隙原子沿着  $\langle 111 \rangle$  轴向向空位运动.

近邻序列为 II 时,  $I-V$  相距  $2.71\text{\AA}$ . 尽管距离上仅比  $2.35\text{\AA}$  大了  $0.36\text{\AA}$ , 但是结合时间却是后者的三倍还多. 分析发现导致这种现象的原因为: 此构型下  $I-V$  的方向沿着  $\langle 110 \rangle$  而不是如上述距离  $2.35\text{\AA}$  时沿着轴向  $\langle 111 \rangle$ . 当间隙原子向空位运动时采取的是一种挤压方式, 引起了晶格大的畸变. 如在图 3 给出的结合过程中, 间隙原子将其近邻原子挤入另一个间隙位置从而形成了双  $V-I$  对. 这是在点缺陷相距  $2.35\text{\AA}$  时所没有出现的情况.

1400K 时相距为  $2.71\text{\AA}$  的间隙原子也依然是以挤压的方式向空位运动. 在第  $132\text{fs}$  时, 空位和间隙原子已经结合. 只是间隙原子  $I$  运动中的晶格畸变导致了新的间隙原子  $I'$  的产生.  $I'$  直到第 112 个时间步才回到格点位置, 如图 4 所示. 扩散极限理论<sup>[17]</sup>是对空位和间隙结合现象的一种解释. 按照该理论空位和间隙的结合和它们的距离成正比, 因此近邻序列 II 的点缺陷结合应该非常迅速. 而模拟得

到的点缺陷结合时间长度显然远大于扩散限制理论,因此可以推测在  $\langle 110 \rangle$  方向上空位和间隙原子的结合应需超越某个高度的势垒.

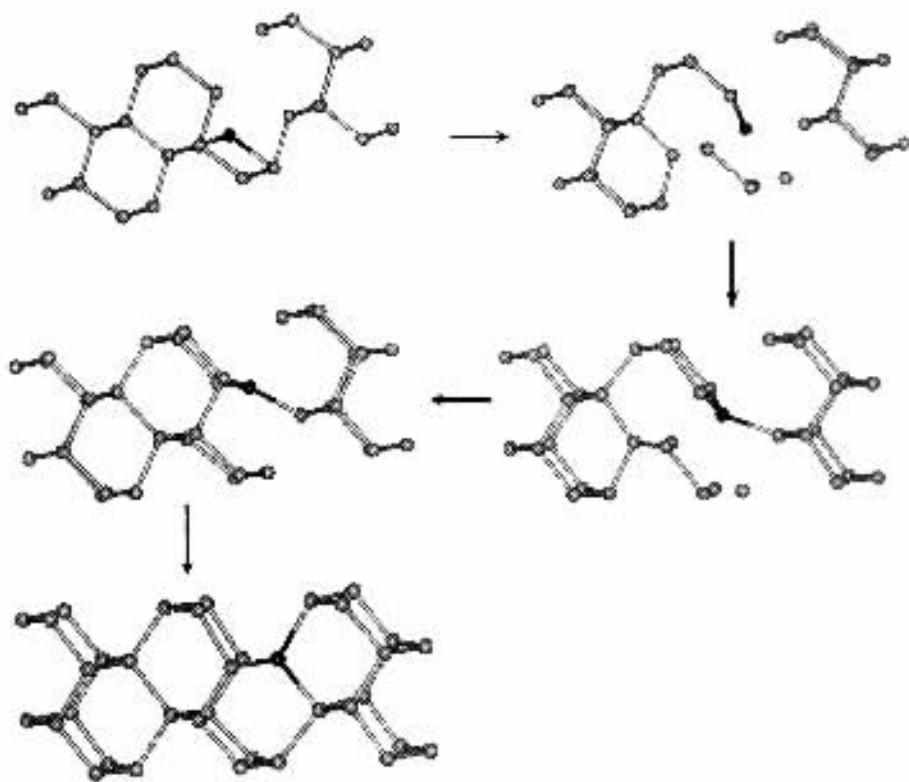


图2 沿  $\langle 110 \rangle$  方向观察到的空位和间隙原子结合过程

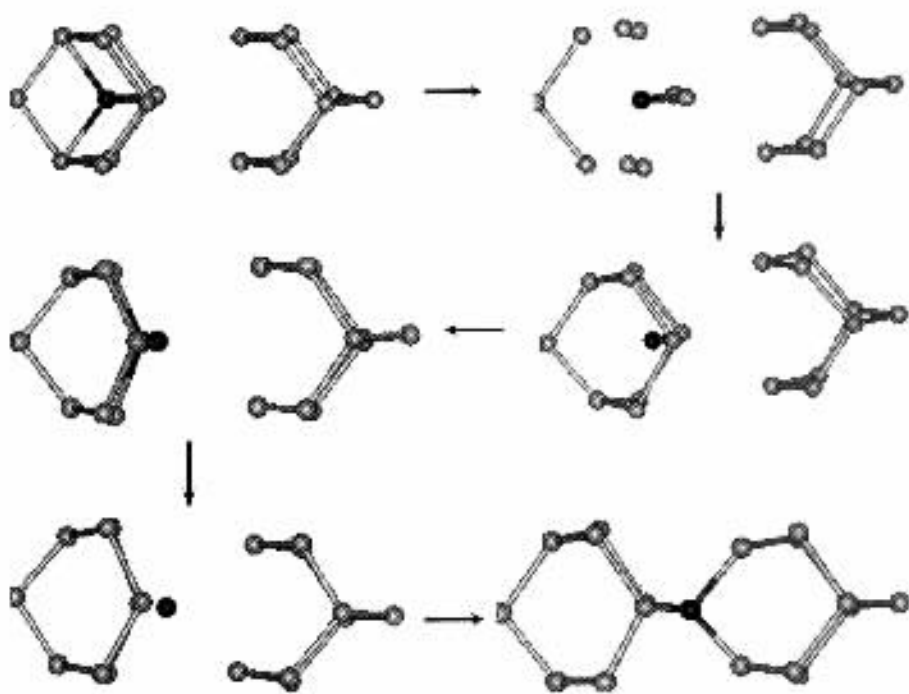


图3 沿  $\langle 1-10 \rangle$  方向观察到的空位与间隙原子结合过程

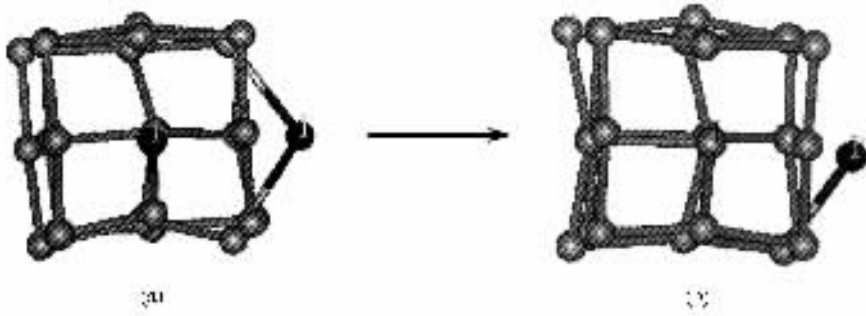


图4 沿 $[0-10]$ 方向观察 (a)间隙原子引起大的晶格畸变,致使格点位置上的原子进入间隙位 (b)初始的空位与间隙原子在132fs结合后,晶格畸变产生的原子仍然处于间隙位置,直到167fs才重新回到格点

近邻序列为Ⅲ时, $I-V$ 相距为 $4.5\text{\AA}$ .此时空位与间隙原子间距已经超出了势函数的截断半径,空位或者间隙原子必然要经过扩散才能结合在一起.四面体间隙原子有四个距离为 $0.433a$ 的最近邻,六个距离为 $0.50a$ 的次近邻.分别用 $I_i(i=1-4)$ , $I_j(j=a-f)$ 表示.同样空位也有四个最近邻、六个次近邻原子,分别用 $V_i(i=1-4)$ , $V_j(j=a-f)$ 表示.如图5所示,空位 $V$ 在第144fs的时候跳跃到了 $V_1$ 处.对比Zawadzki等人对不同的初始构型总结出这个距离下点缺陷的两种结合方式:第一种是 $I$ 跳跃到 $V_1$ 处也就是它的次近邻 $I_a$ 处,完成空位和间隙原子的结合;第二种是空位运动到它的最近邻位置 $I_1$ 处,然后间隙原子再与其结合.我们观察到的情况却不同于这两种方式.在空位运动到 $V_1$ 后,并没有继续往 $I_1$ 处跳动.取而代之的是间隙原子的频繁运动:首先 $I_1$ 处出现了新的空位,间隙原子 $I$ 运动到这个空位.如图6.图中, $I_{old}$ 表示运动到正常格点位置的间隙原子, $I_{new}$ 表示从格点位置新产生的间隙原子.之后, $I_{new}$ 又重新向 $I_1$ 位置运动,而已经结合的 $I_{old}$ 又重新成为间隙原子.这样运动的趋势使得 $I_{new}$ 又回到了原来的位置.从后面空位与间隙原子相距更远的情况分析将会看出 $I_{new}$ 的出现不过是间隙原子向空位靠近的必然方式.如果将 $I_{new}$ 的产生与消失过程加以忽略, $V-I$ 的结合过程就是:空位运动到 $V_1$ ,间隙原子 $I$ 运动到 $I_1$ 后再运动到 $V_1$ 处即 $I_a$ 处与空位结合.尽管1400K的 $V-I$ 结合方式并没有什么大的变化,但是在这个过程中,其它位置上新产生的点缺陷的结合是在原有的 $V-I$ 结合后才发生的.

近邻序列为Ⅳ时, $I-V$ 距离 $4.70\text{\AA}$ .此时间隙与空位相距大约为两倍的键长.从图7中可以看出 $V-$

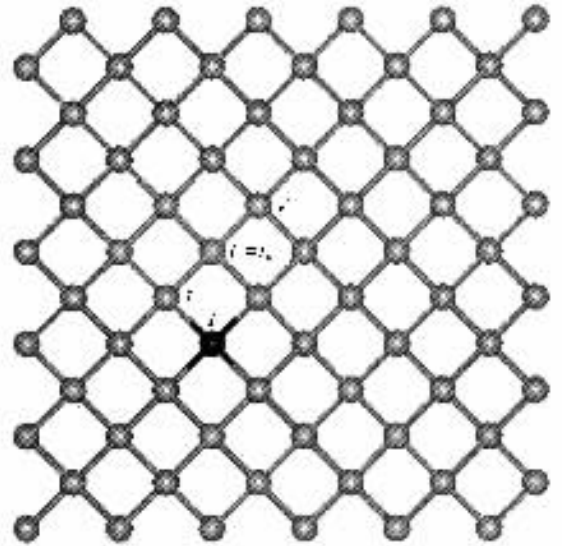


图5 沿 $[001]$ 方向观察到的300K距离 $4.5\text{\AA}$ 的 $V-I$ 结合过程

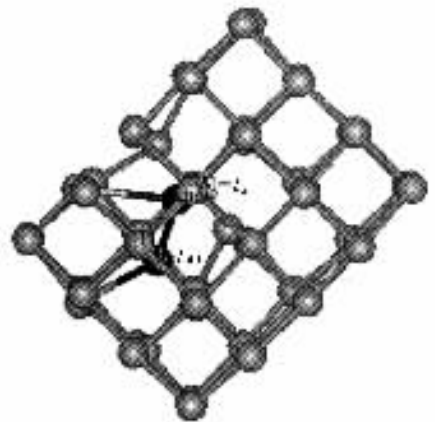


图6 沿 $[001]$ 方向观察到的238fs时的间隙原子位置

$I$ 沿着 $\langle 111 \rangle$ 轴向.尽管此时 $V-I$ 间距比 $4.50\text{\AA}$ 更大,但是空位间隙的结合时间却非常迅速,甚至于超

过了相距  $2.71\text{\AA}$  的  $V-I$  的结合速度.

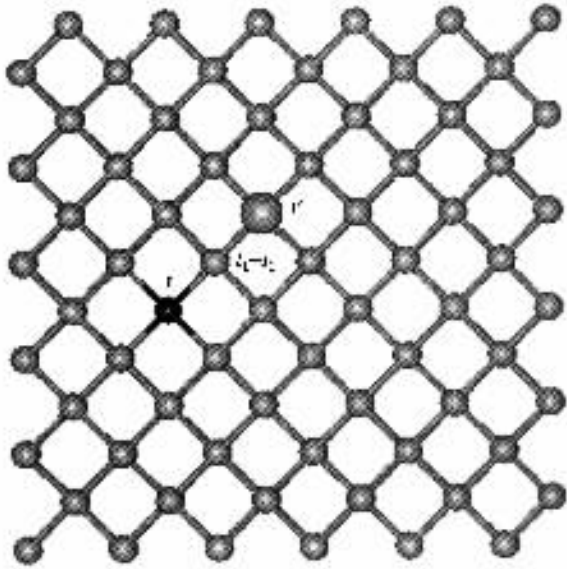


图 7 沿  $[001]$  方向观察到的 300K 时距离  $4.70\text{\AA}$  的  $V-I$  结合过程

模拟中,空位在第 53 个时间步时跳跃到  $V_1$  的位置,同时间隙原子  $I$  也在向  $I_1$  即  $V_1$  位置移动.之

后空位停留在  $V_1$  处,直到间隙原子在第 70 个时间步时运动到这里相互结合.从  $[110]$  方向上更能够清晰的观察到空位与间隙的结合过程,如图 8 所示.这个轴向相距  $4.70\text{\AA}$  的空位和间隙原子比起沿  $[110]$  方向相距  $2.71\text{\AA}$  的  $V-I$  结合速度更快,由此更可以确定  $\langle 110 \rangle$  轴向上空位间隙原子结合存在势垒. 1400K 的高温时除了点缺陷结合速度提高,其结合方式并没有发生变化,这和我们预期的一样,空位和间隙原子在高温时的结合更加迅速.

近邻序列为  $V$  时,  $V-I$  距离  $5.92\text{\AA}$ . 间隙原子历经  $558\text{fs}$  与空位结合,路径如图 9 所示. 300K 低温时间隙原子  $I$  从初始位置移动到  $I_1$  处,同时  $I_1$  处产生新的间隙原子  $I'$  继续向  $V_1$  处运动,  $I_1$  处产生的新的间隙原子在  $I'$  继续向  $V$  运动的过程中又回到了原来所在的位置. 1400K 按照预想应该要比 300K 时更迅速,但是新的  $V-I$  对的产生使得间隙原子在向空位靠近的过程中受到了很大的干扰,呈现出某种“盲目性”,从而间隙原子行走的路线不再是最近的那条,如图 10. 因此间隙向空位靠近的时间比预计的要长很多.

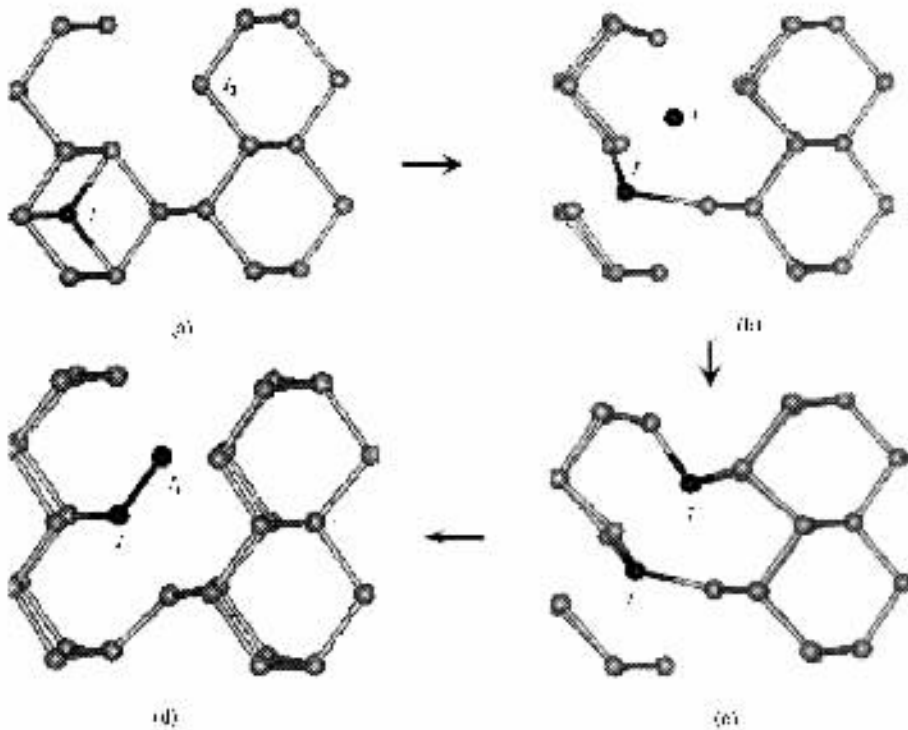


图 8 沿  $[110]$  方向上观察到空位与间隙的结合过程 (a) 初始构型 (b) 空位向间隙原子的最近邻运动 (c) 空位进一步向间隙原子运动,空位原来所在位置被原子  $I$  填补,间隙原子也开始向其最近邻位置移动 (d) 间隙原子和空位结合



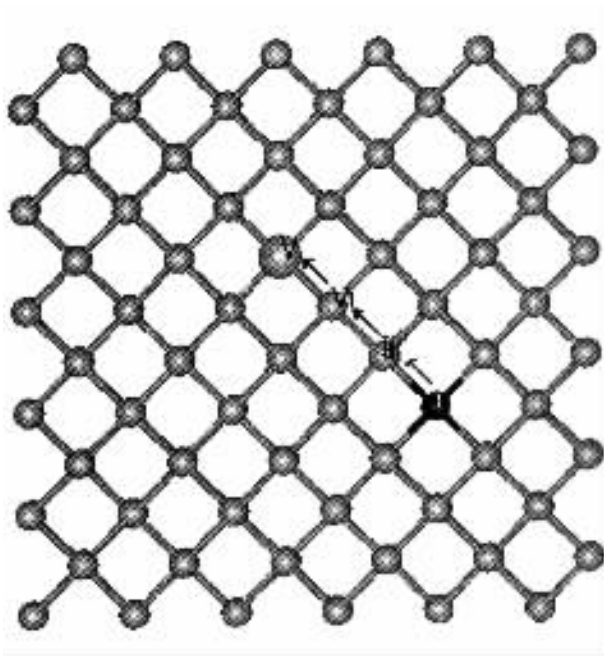


图 9 沿 [001] 方向观察到的 300K 时距离 5.92Å 的 V-I 结合过程

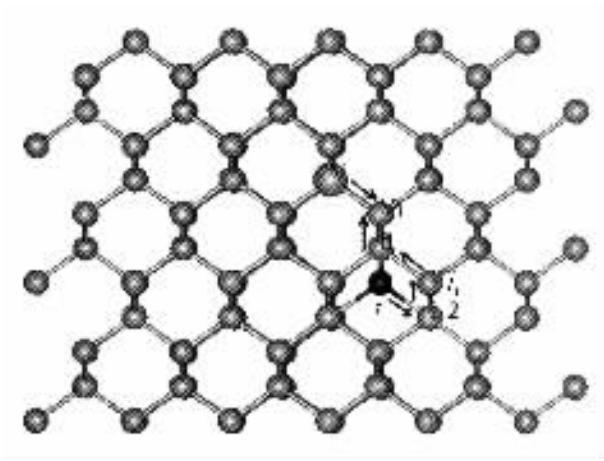


图 10 沿 [101] 方向观察到的 300K 时距离 5.92Å 的 V-I 结合过程

近邻序列为 VI 时, V-I 相距 6.07Å. 300K 时空位先运动到  $V_0$  处, 之后间隙原子再运动到  $V_0$  的最近邻  $I_1$  位置, 在 1586fs 空位和间隙原子结合. 温度

为 1400K 时,  $I_1$  的最近邻处出现新的空位间隙原子对,  $I_1$  与它们之间的相互作用使得间隙原子向  $I_1$  的运动也被延迟, 如图 11.



图 11 沿 [001] 方向观察到的 300K 时距离 6.07Å 的 V-I 结合过程

以上六种情况下模拟获得的间隙与空位的结合时间在表 2 中给出. 由这些模拟结果可以看出, 高温时空位与间隙结合的时间并没有明显比低温时的快. 这主要是由于以下几个原因: (1) 对于在势函数截断半径内的情况—即 V-I 相距 2.35Å 时, 空位和间隙原子可以相互“感应”. 沿着  $\langle 111 \rangle$  方向的结合由于没有势垒存在, 所以瞬时发生, 与温度没有必然联系. 这在 Zawadzki 等人<sup>[13]</sup>的分析中也得到了证实. (2) 高温时会在其他位置上产生点缺陷, 影响原有空位和间隙的结合或者延迟了整个晶体中缺陷的消逝速度. 但是从相距 4.5Å 的 V-I 在不同温度的结合时间相比还是可以得出: 在没有以上两种情况出现的时候, 高温时点缺陷显然更容易越过势垒得以结合.

表 2 各个位置的间隙与空位结合时间 (fs) 括号中的时间是初始设置的 V-I 结合所需时间, 括号外的是整个超单胞中 V-I 的结合时间

近邻序列	I	II	III	IV	V	VI
温度为 300K 时的结合时间	40	140	58( 540 )	104	558	1586
温度为 1400K 时的结合时间	46	16( 132 )	36( 299 )	91	1376	1591

计算的结果显示, 无论是间隙原子或空位都倾向于沿着  $\langle 111 \rangle$  方向运动, 因此推测在  $\langle 110 \rangle$  方

向上对于空位和间隙原子的结合应存在一个势垒. 下面我们将计算在  $\langle 110 \rangle$  方向上势垒的大小. 方

法如下:在  $V-I$  相距为  $2.71\text{\AA}$  的结合过程中,初始间隙原子位于  $(6.7884, 9.5037, 6.7884)$ , 此时对应时间步为零时的间隙原子位置。在前面用分子动力学模拟该情况下空位和间隙原子结合的过程中,间隙原子经历了 94 个时间步运动到了空位处。在这 94 个时间步,即  $140\text{fs}$  的时间长度里,分别取 11 个时间点对应的间隙原子位置,如表 3 所示。我们对间隙原子位于以上 11 个位置的超单胞分别进行分子动力学弛豫。弛豫的过程中间隙原子分别在表 3 所示的这些位置上固定,弛豫后经过能量最小化得到平均原子能量,如图 12 所示。

表 3 动力学弛豫中间隙原子的固定位置

位置编号	时间步	间隙原子位置 $(x, y, z)\text{\AA}$		
0	0	6.7884	9.5037	6.7884
1	1	6.8082	9.5033	6.7845
2	10	6.9669	9.4611	6.9101
3	20	7.0412	9.2946	7.1217
4	30	7.0582	9.1602	7.1825
5	40	7.0901	9.1763	7.1612
6	50	7.0997	9.1989	7.2438
7	60	7.0361	9.1716	7.5025
8	68	6.9692	9.2282	7.7412
9	80	6.9233	9.4041	8.1371
10	90	6.9619	9.5080	8.4695
11	94	6.9897	9.5460	8.5848

由图 12 可知,在整个结合过程中存在着两个势垒。第一个在间隙原子运动到第 50 个时间步对应

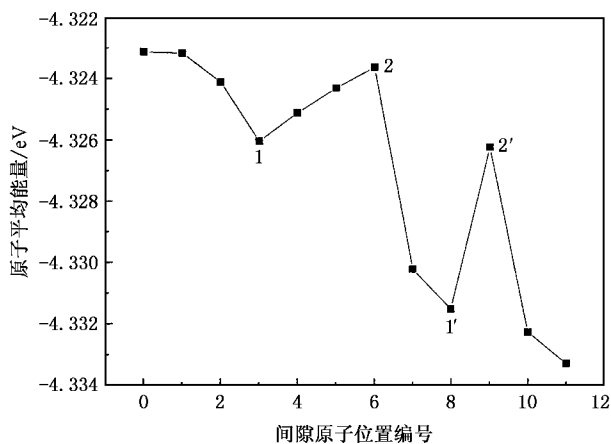


图 12 间隙原子位置与原子平均能量的关系

的位置时,势垒高度为  $0.521\text{eV}$ 。另一个势垒出现在间隙原子运动到第 80 个时间步对应的位置,势垒高度  $1.146\text{eV}$ 。Zawadzki 等人<sup>[13]</sup>采用紧束缚分子静力学和分子动力学能量最小化方法均得到  $\langle 110 \rangle$  晶向上空位与间隙原子结合势垒为  $0.5\text{eV}$ ,与我们分析所得的第一个势垒相近。第二个值在文献 13 的计算结果中并没有提及。从对图 3 和图 4 的分析可以得到:间隙原子在沿  $\langle 110 \rangle$  方向运动的过程中开始时间隙原子位于距离空位  $2.71\text{\AA}$  的位置,导致晶格畸变。间隙在向空位运动过程中畸变程度减小,原子平均能量降至 1 处对应的数值。在继续运动过程中晶格畸变重新增大,在越过 2 处的势垒后晶格畸变又减小至平均能量 1' 处。之后畸变又再次增大,导致了第一个势垒 2' 的出现。在越过这个势垒

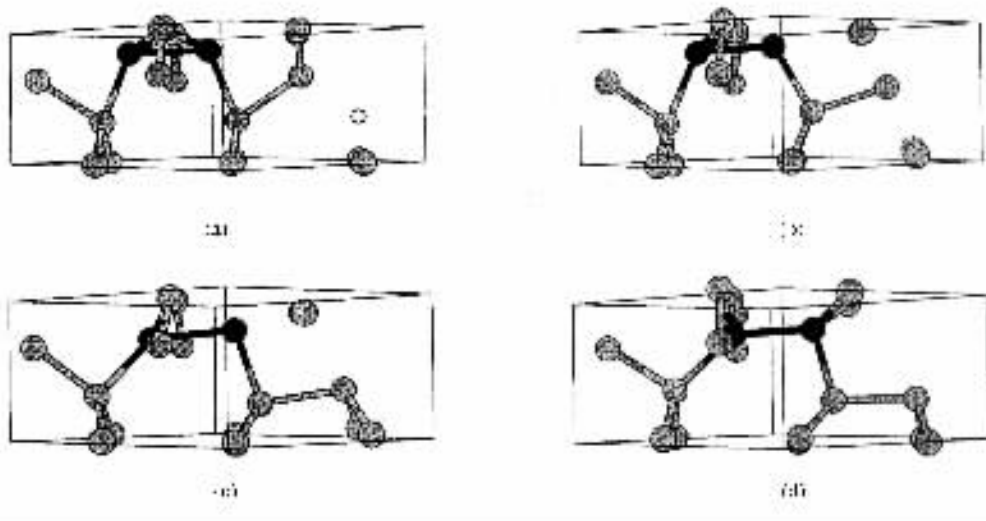


图 13 混合型缺陷形成过程 (a)哑铃型间隙原子和第三近邻的空位 (b)空位向间隙原子的其次近邻位置运动, (c)空位进一步运动到次近邻位置,哑铃型的间隙原子一起向空位运动,其中左边的间隙原子几乎被拉到了格点位置 (d)空位运动完成,间隙原子与空位的混合缺陷形成

之后,整个晶体的畸变逐渐减小,直到所有原子均位于格点位置. Tang 等人<sup>[12]</sup>在研究空位与 split 间隙原子结合的过程中认为哑铃型的间隙原子在与空位结合的过程中产生了不易消逝的空位/间隙混合型缺陷(V-I complex),如图 13 所示. 从混合型缺陷的构型可以看出这种缺陷就是我们这里的近邻序列 II 即相距为 2.71Å 的空位和四面体间隙原子对. 他们也注意到这种所谓的混合型缺陷是空位与间隙原子相互结合过程中的一种亚稳态,并且计算得到这个亚稳态缺陷结合过程中存在的势垒高度为 1.13eV. 这与我们计算得到的第二个势垒高度值相近.

Zawadzki 等人<sup>[13]</sup>只是简单地认为 Tang 等<sup>[12]</sup>计算所得的势垒要比他们计算的值高,并没有发现在 <110> 方向上两个不同高度势垒的存在. 本文的

研究结果合理地解释了 Zawadzki 计算的势垒和 Tang 的结果的差异,并进一步肯定了实验对势垒值估测范围 1.0—1.4eV<sup>[18,19]</sup>的正确性.

## 4. 结 论

(1) 首次采用经典分子动力学方法对高温和低温 Si 晶体中固有点缺陷的结合过程进行了模拟计算.

(2) 点缺陷的结合倾向于沿 <111> 方向,在 <110> 方向上存在结合势垒.

(3) 对 Zawadzki 等人计算所得的点缺陷结合势垒 0.5eV 与 Tang 等人计算的势垒 1.13eV 之间的差异进行了解释说明.

- 
- [ 1 ] Fahey P M , Griffin P B and Plummer J D 1989 *Rev. Mod. Phys.* **61** 289
- [ 2 ] Nichols C S , Van de Walle C G and Pantelides S T 1989 *Phys. Rev. Lett.* **62** 1049
- [ 3 ] Blochl P E , Smargiassi E , Car R *et al* 1993 *Phys. Rev. Lett.* **70** 2435
- [ 4 ] Chen L J , Hou Z F , Zhu X Z *et al* 2003 *Acta Phys. Sin.* **52** 2229 ( in Chinese )[ 陈丽娟、侯柱锋、朱梓忠 等 2003 物理学报 **52** 2229 ]
- [ 5 ] Zhu J , Diaz de la Rubia T , Yang L H *et al* 1996 *Phys. Rev. B* **54** 4741
- [ 6 ] Wang J and Wang S Q 2003 *Acta Phys. Sin.* **52** 2854 ( in Chinese ) [ 王 坚、王绍青 2003 物理学报 **52** 2854 ]
- [ 7 ] Zhang L , Wang S Q and Ye H Q 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 2497 ( in Chinese )[ 张 林、王绍青、叶恒强 2004 物理学报 **53** 2497 ]
- [ 8 ] Maroudas D and Brown R A 1993 *Phys. Rev. B* **47** 15562
- [ 9 ] Maroudas D and Brown R A 1993 *Appl. Phys. Lett.* **62** 172
- [ 10 ] Nastar M , Bulatov V V and Yip S 1996 *Phys. Rev. B* **53** 13521
- [ 11 ] Bracht H , Stolwijk N A and Meher H 1994 *Semiconductor Silicon* Pennington : Electrochemical Society , NJ ,1994
- [ 12 ] Tang M J , Colombo L , Zhu J *et al* 1997 *Phys. Rev. B* **55** 14297
- [ 13 ] Zawadzki M T , Luo W W and Clancy P 2001 *Phys. Rev. B* **63** 205205
- [ 14 ] Stillinger F H and Weber T A 1985 *Phys. Rev. B* **31** 5265
- [ 15 ] Qiao Y H and Wang S Q 2005 *Acta Metall. Sin.* **41** 231 ( in Chinese )[ 乔永红、王绍青 2005 金属学报 **41** 231 ]
- [ 16 ] Blochl E , Smargiassi E , Car R *et al* 1993 *Phys. Rev. Lett.* **70** 2435
- [ 17 ] Gosele U , Frank W and Seeger A 1983 *Solid State Commun* **45** 31
- [ 18 ] Antoniadis D A and Moskowitz I 1982 *J. Appl. Phys.* **53** 6788
- [ 19 ] Nichols C S , Van de Walle C G and Pantelides S T 1989 *Phys. Rev. B* **40** 5484



# Molecular dynamics studies on vacancy-interstitial annihilation in silicon<sup>\*</sup>

Qiao Yong-Hong Wang Shao-Qing<sup>†</sup>

( *Shenyang National Laboratory for Materials Science , Institute of Metal Research , Chinese Academy of Sciences , Shenyang 110016 , China* )

( Received 21 June 2004 ; revised manuscript received 21 March 2005 )

## Abstract

Molecular dynamics ( MD ) simulation is performed to study the vacancy-interstitial annihilation in crystalline silicon. We choose the Stillinger-Weber potential , which is commonly used for silicon , to describe the interaction between atoms. The system is relaxed under 300K and 1400K respectively. We have found that  $\langle 111 \rangle$  is the preferred recombination direction and propose the presence of an energy barrier in the  $\langle 110 \rangle$  direction. From the calculated value of energy barrier along  $\langle 110 \rangle$  we give a reasonable explanation for the difference between Tang 's and Zawadzki 's data.

**Keywords** : molecular dynamics , vacancy and interstitial , diffusion

**PACC** : 6185 , 6170B , 6630F

---

<sup>\*</sup> Project supported by the State Key Development Program for Basic Research of China( Grant No TG2000067104 ).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail : sqwang@imr.ac.cn