

МОДЕЛИРОВАНИЕ РАЗВИТИЯ КАСКАДОВ АТОМНЫХ СТОЛКНОВЕНИЙ В ПОЛУПРОВОДНИКАХ С ПОМОЩЬЮ СУПЕРКОМПЬЮТЕРНЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ

И. Ю. Забавичев, С. В. Оболенский, А. А. Потехин, А. С. Пузанов

Филиал РФЯЦ-ВНИИЭФ «НИИИС им. Ю. Е. Седякова», г. Нижний Новгород

Введение

Уменьшение топологических норм изделий микроэлектроники увеличивает их чувствительность к сбоям и отказам, вызванных воздействием отдельных ядерных частиц [1], что обуславливает актуальность моделирования процессов ионизации и дефектообразования в субмикронных полупроводниковых структурах при воздействии ионизирующих излучений. Это связано с тем, что размеры разупорядоченной области – кластера радиационных дефектов (КРД), образовавшегося в результате воздействия высокоэнергетичной тяжелой частицы, становятся сопоставимы с размерами активной области современных полупроводниковых приборов [2]. Каскады атомных смещений выступают в качестве ловушек для носителей заряда, в следствии чего вокруг скопления дефектов образуется область пространственного заряда. В результате из-за рассеяния носителей заряда на скоплении заряженных дефектов уменьшается подвижность в активной области полупроводникового прибора, что приводит к деградации его характеристик.

В зависимости от энергии первичной частицы каскады атомных смещений подразделяют на разреженные, в которых длина пробега движущихся частиц больше, чем расстояние между покоящимися атомами кристаллической решетки и плотные, которые характеризуются малой длиной пробега частиц. Реальные кластеры радиационных дефектов могут сочетать в себе признаки как разреженных, так и плотных каскадов, поэтому разные стадии развития разупорядоченной области требуют численной оценки её размеров с различными временными и пространственными масштабами.

В настоящее время существует широкий спектр методов моделирования развития каскадов атомных столкновений в веществе [3], которые можно разделить на 4 класса: квантово-механические методы «из первых принципов», методы классической молекулярной динамики, методы парных взаимодействий (алгоритмы Монте-Карло) и континуальные методы, основанные на законах теплопереноса в сплошной среде. Данные методы различаются пространственным и временным разрешением, что позволяет применять их как независимо друг от друга, так и комбинировать для получения необходимой инфор-

мации о динамике развития каскадов атомных смещений в полупроводниковых материалах. Представленные алгоритмы имеют также различную вычислительную сложность, которая определяется индивидуальным набором параметров для каждого метода. Для достижения желаемого пространственного или временного разрешения зачастую необходимо задействовать большое число вычислительных ресурсов для получения результата за требуемое время, используя при этом суперкомпьютерные технологии и параллельные вычисления. Целью данной работы является моделирование образования кластеров радиационных дефектов с помощью суперкомпьютерных вычислений.

Математическая модель

Процесс формирования каскада атомных смещений в результате воздействия потока нейтронов быстрого спектра деления протекает следующим образом: в результате упругого взаимодействия частиц с ядрами атомов вещества последние смещаются из положения равновесия в узлах кристаллической решетки, увлекая за собой электронную оболочку атома, то есть происходит образование первичных дефектов – пары вакансия–межузельный атом (пара Френкеля). В случае, когда скорость смещения ядра будет больше скорости орбитальных электронов, может произойти ионизация. После того, как атом вещества получил от нейтрона кинетическую энергию, он будет двигаться в кристаллической решетке подобно иону, внедренному в материал извне. При этом, если полученной энергии достаточно для дальнейшего движения, сопровождающегося столкновениями с покоящимися атомами, процесс будет развиваться лавинообразно. Таким образом, в результате каскадов смещений атомов в полупроводнике помимо отдельных точечных дефектов будут формироваться кластеры радиационных дефектов.

В основе квантово-механических методов «из первых принципов» лежит определение траекторий движения ядер кристаллической решетки и электронов из решения уравнения Шредингера. Для упрощения задачи перемещение электронов рассматривается как движение независимых частиц в потенциале, создаваемом другими электронами и атомными ядрами. Однако, в силу вычислительной сложности

метод ограничен системами, состоящими из нескольких сотен атомов, чья динамика моделируется в течение нескольких фемтосекунд. Поэтому в настоящее время квантово-механический метод на практике для моделирования развития каскадов атомных столкновений в веществе не применяется.

Следуя по пути упрощения задачи, можно рассматривать электронную и атомную подсистему отдельно друг от друга. В этом случае возможно отказаться от квантово-механического описания развития каскада атомных столкновений, заменив уравнение Шредингера законами классической механики. Метод молекулярной динамики основан на использовании II закона Ньютона для каждого атома системы:

$$m_i \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} = -\nabla_{\mathbf{r}_i} U(\mathbf{r}) + F_{\text{внеш}} \quad (1)$$

где $U(\mathbf{r})$ – межатомный потенциал взаимодействия, m_i – масса i -го атома, \mathbf{r}_i – положение в пространстве i -го атома, $F_{\text{внеш}}$ – внешняя сила.

Двумя основными аспектами, характеризующими практическую реализацию метода молекулярной динамики, являются выбор способа интегрирования уравнения (1) в зависимости от граничных условий рассматриваемой системы и выбор межатомного потенциала. Для системы из N атомов уравнение (1) представляет систему из $3N$ дифференциальных уравнений второго порядка. Эту систему можно выразить как $6N$ дифференциальных уравнений первого порядка, представив скорость в качестве отдельной переменной. Получившуюся систему уравнений можно решить с помощью метода конечных разностей для нахождения траекторий движения атомов. Параллельные вычисления вместе с пространственной декомпозицией задачи позволяют применять методы молекулярной динамики для исследования поведения систем, состоящих из 10^6 – 10^9 атомов [3].

Межатомный потенциал $U(\mathbf{r})$, входящий в уравнение (1) в общем виде можно представить следующим выражением:

$$U(\mathbf{r}) = \sum_i \sum_{j>i} U_2(\mathbf{r}_{ij}) + \sum_i \sum_{j \neq i} \sum_{k \neq j \neq i} U_3(\mathbf{r}_{ij}, \mathbf{r}_{jk}, \mathbf{r}_{ik}) + \dots \quad (2)$$

где $U_2(\mathbf{r}_{ij})$ описывает зависимость потенциальной энергии только от расстояния между каждой парой атомов системы \mathbf{r}_{ij} , а потенциалы n -порядка описывают взаимодействие атомов системы в зависимости от их пространственного расположения и угловой ориентации. Для большинства практических задач, в том числе моделирования развития областей разупорядочивания при радиационном воздействии, разумно ограничиться слагаемыми второго и третьего

порядка в выражении (2), так как влияние потенциалов более высоких порядков быстро спадает с ростом n .

Выбор конкретного потенциала для моделирования методом молекулярной динамики процесса развития каскада атомных столкновений определяется типом исследуемого материала, желаемой точностью и доступными вычислительными ресурсами. Потенциалы можно разделить на потенциалы парного взаимодействия, многочастичные эмпирические потенциалы и квантово-механические. Потенциалы парного взаимодействия, такие как потенциалы Леннарда – Джонса и Морзе [4], используются для моделирования многомасштабных систем, когда вычислительная эффективность является наиболее приоритетной. Для полупроводниковых материалов, в которых важным является многочастичное взаимодействие [5], при расчетах используются потенциалы Стиллера – Вибера [6], Терсоффа [7] и Бриннера [8]. Данные потенциалы были получены эмпирическим путем на основе параметрической аппроксимации экспериментальных результатов или квантово-механических расчетов соответствующих атомных конфигураций. В качестве таких параметров аппроксимации могут выступать постоянная решетки, энергия связи, константы упругой деформации и энергия образования вакансий. Однако погрешность параметрической аппроксимации межатомного потенциала может привести к нефизичным результатам моделирования процесса формирования каскада атомных смещений [9]. Поэтому выбор потенциала, описывающего взаимодействие атомов вещества, для расчетов динамических параметров кластера радиационных дефектов должен быть обоснован исходя из информации, полученной из дополнительных оценок.

Пространственные и временные ограничения метода молекулярной динамики обусловлены теми же причинами, что и у квантово-механических методов, и позволяют моделировать образования кластеров радиационных дефектов в объеме до сотен нанометров в течении нескольких сотен пикосекунд. Шаг временного интегрирования должен соответствовать динамике протекающих процессов и может изменяться в течении процедуры моделирования для увеличения эффективности вычислений.

Для дальнейшего увеличения пространственных и временных масштабов моделирования процесса формирования разупорядоченной области радиационных дефектов необходимо перейти от детерминированного подхода для описания протекающих явлений к стохастическому. Метод Монте-Карло основан на модели дефектообразования в аморфном твердом теле, в которой процессы взаимодействия атомов вещества описываются моделью упругих шаров. Считается, что при столкновении атом смещается из своего равновесного положения, если приобретенная им в результате удара энергия больше некоторой пороговой энергии. Для полупроводниковых материалов эта энергия лежит в диапазоне нескольких

десятков электронвольт. Кинетическая энергия T_A , передаваемая частице при столкновении с другой, определяется выражением [10]

$$T_A = \frac{4M_A M_B}{(M_A + M_B)^2} T_B \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \quad (3)$$

где M_A, M_B – масса покоящейся и налетающей частиц, T_B – кинетическая энергия налетающей частицы, θ – угол отдачи между направлениями движения налетающей частицы до и после столкновения в системе отсчета, связанной с центром масс. При изотропном рассеянии значения углов отдачи равновероятны в диапазоне от 0 до 2π , в реальных условиях рассеяние как правило не изотропно, а предпочтительно в направлении распространения.

При моделировании методом Монте-Карло траектория каждого атома начинается с введения его положения, направления движения и энергии. Затем прослеживается последовательность столкновений с атомами вещества, а между столкновениями свободный пробег атома предполагается прямолинейным. На пути каждого свободного пробега энергия частицы уменьшается на величину электронных потерь энергии, а затем, после столкновения, – на ядерные или упругие, потери энергии, т. е. на величину энергии, переданной атому мишени при столкновении. Если атом вещества получает энергию, которая превышает предварительно заданное значение, то его называют вторичным атомом отдачи и его поведение прослеживается таким же образом, как и поведение налетающего. Это же остается справедливым для любых последующих атомов отдачи. Траектория атома отдачи обрывается, если его энергия уменьшается до предварительно заданного значения.

Расчет методом Монте-Карло основан на модели парных столкновений, в которой поведение налетающего атома определяется рядом последовательных столкновений с атомами мишени. Это допущение может не соблюдаться при очень низких энергиях, когда заметное рассеяние атомов происходит даже на большом удалении от ядер атомов вещества. В этом случае атом может взаимодействовать одновременно более чем с одним атомом мишени и раздельное рассмотрение таких столкновений с очень малым свободным пробегом между ними может привести к существенной ошибке. Другими словами, модель парного взаимодействия применима для описания высокоэнергетической части реальных каскадов в большинстве твердых тел, однако низкоэнергетическая часть на самом деле ведет себя как плотный каскад.

Ограничение метода Монте-Карло связано не с пространственными масштабами решаемой задачи, а с числом реализаций каскадов атомных смещений для получения усредненных характеристик – размеров разупорядоченной области и числа пар Френкеля. Так как метод Монте-Карло является статистиче-

ским, то точность результатов моделирования пропорциональна \sqrt{N} , где N – число реализаций. К недостаткам метода относится то, что с его помощью нельзя оценить ни временную динамику образования кластера радиационных дефектов, ни изменение его структуры на стадии отжига.

Для моделирования процессов отжига радиационных дефектов на больших пространственных и временных масштабах часто применяются континуальные методы. Большее пространственное и временное разрешение в этом случае достигается за счет перехода от рассмотрения отдельных атомов (как движущихся, так и связанных в кристаллическую решетку) исследуемого материала к непрерывной (сплошной) среде, бесконечно малому объему которой можно приписать определенные значения термодинамических переменных.

Рассматриваемая среда описывается плотностью $\rho(\mathbf{r}, t)$, гидродинамической скоростью $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$, давлением $p(\mathbf{r}, t)$ и температурой $T(\mathbf{r}, t)$, которые изменяются как во времени, так и в пространстве. Записав законы сохранения для разупорядоченной области радиационных дефектов, можно получить систему дифференциальных уравнений, определяющих эволюцию введенных гидродинамических параметров.

Закон сохранения массы, который гласит, что полная масса вещества, содержащаяся в некотором произвольном объеме V может измениться только из-за «втекания» или «вытекания» вещества через окружающую объем замкнутую поверхность S , можно записать в следующем виде:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla(\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (4)$$

где $\rho \mathbf{u}$ – импульс единицы масс.

Закон сохранения импульса и энергии описывается выражением (5) и (6) соответственно:

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \nabla) \mathbf{u} = -\frac{\nabla p}{\rho} \quad (5)$$

$$\frac{\partial e}{\partial t} + \mathbf{u} \nabla e = -\frac{p}{\rho} \nabla \cdot \mathbf{u} \quad (6)$$

где e – внутренняя энергия на единицу массы вещества.

Для получения однозначного решения системы уравнений (4)–(6) её необходимо дополнить уравнением состояния. Для решения получившейся системы дифференциальных уравнений в частных производных применяется конечно-разностный, конечно-элементный или конечно-объемный [11] метод аппроксимация задачи.

Континуальное представление основано на двух допущениях: во-первых, в каждом бесконечно малом объеме должно установиться локальное термодинамическое равновесие, а во-вторых, движущиеся атомы не должны иметь возможность покинуть задан-

ный объем, предварительно не обменявшись импульсом и энергией с соседними атомами. Первое условие устанавливает нижнюю границу рассматриваемого времени значениями больше чем порядка 10^{-13} секунд, второе требует длины свободного пробега меньшей чем характерный размер бесконечно малого объема.

Анализ представленных методов показывает, что в настоящее время квантово-механические методы практически неприменимы для моделирования развития каскадов атомных столкновений в веществе, ввиду экстремально высокой вычислительной сложности. Таким образом, наиболее предпочтительным представляется комбинация методов классической молекулярной динамики (для плотных кластеров радиационных дефектов) и Монте-Карло (для разреженных кластеров радиационных дефектов) на стадии формирования каскада смещений ($T < 10^{-12}$ с) с методами тепломассопереноса на стадии быстрого отжига радиационных дефектов ($T < 10^{-9}$ с). В дальнейшей работе подробно рассматривается применение метода классической молекулярной динамики для моделирования процесса формирования каскада атомных смещений под действием потока мгновенных нейтронов спектра деления.

Результаты моделирования и их обсуждение

Для моделирования процесса формирования кластера радиационных дефектов в кремнии под действием потока быстрых нейтронов мгновенного спектра деления использовался пакет прикладных программ LAMMPS [12]. Размер расчетной области составил $400 \times 400 \times 400$ Å (4096000 атомов), в которой моделировалась эволюция разупорядоченной области атомных смещений в течении 100 пикосекунд, образованной первичным атомом отдачи кремния с кинетической энергией 3 кэВ. Данное значение энергии было выбрано из расчета, что кластер радиационных дефектов не будет распадаться на отдельные субкаскады. Вдоль трех ортогональных направлений использовались периодические граничные условия, тем самым, моделируя поведение атомов в объемном материале. Взаимодействие атомов вещества описывалось потенциалом [13], а для определения местоположения дефектов в моделируемой системе использовался метод, основанный на построении ячеек Вигнера – Зейтца. На рис. 1 представлена динамика изменения общего числа пар Френкеля и объема кластера радиационных дефектов в течение всего времени моделирования. Разупорядоченная область аппроксимировалась эллипсоидом вращения с помощью алгоритма, представленного в работе [14].

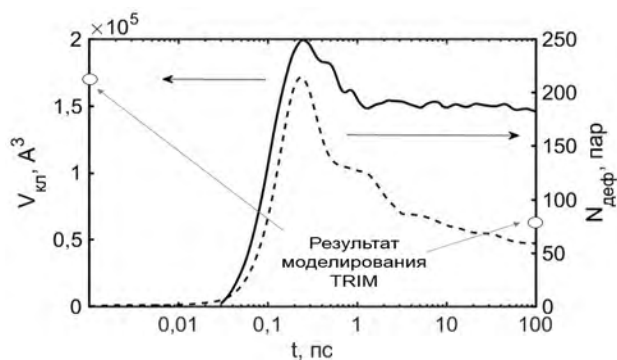


Рис. 1. Временная динамика процесса формирования кластера радиационных дефектов в кремнии

Как видно из рис. 1, в процессе формирования кластера радиационных дефектов можно выделить 4 характерные стадии: баллистический участок (до 0,04 пс), в течение которого первичный атом отдачи движется практически без столкновений; участок термического расширения (от 0,04 до 0,2 пс), на протяжении которого число дефектов в кластере стремительно нарастает; стадия первичной стабилизации (от 0,2 до 0,5 пс), которая характеризуется резким уменьшением числа дефектов за счет рекомбинации близких пар Френкеля, и стадия быстрого отжига (от 0,5 пс), которая может длиться несколько наносекунд, сопровождаясь при этом плавным по сравнению со стадией первичной стабилизации уменьшением числа дефектов за счет отжига. Медленный темп рекомбинации дефектов на последней стадии объясняется термостимулированной диффузией дефектов в остывающем объемном полупроводнике, поэтому для адекватного описания последующего отжига необходим больший промежуток времени физического моделирования (от единиц секунд до нескольких часов). Стоит отметить, что объем кластера радиационных дефектов на стадии быстрого отжига практически не меняется, в то время, как число дефектов в нем медленно уменьшается, что связано с рекомбинацией пар дефектов, расположенных в центре, а не на периферии разупорядоченной области.

На рис. 1 также приводятся для сравнения результаты моделирования образования кластера радиационных дефектов с помощью программы TRIM [15], в которой реализован метод Монте-Карло для парного взаимодействия, для тех же начальных условий. В конце моделируемого промежутка времени число пар радиационных дефектов и объем кластера, полученных с помощью метода молекулярной динамики меньше, чем результаты расчетов с помощью программы TRIM, что можно объяснить учетом явления отжига радиационных дефектов. Также результаты сравнения говорят о правильности выбора межатомного потенциала взаимодействия для проведения расчетов методом молекулярной динамики.

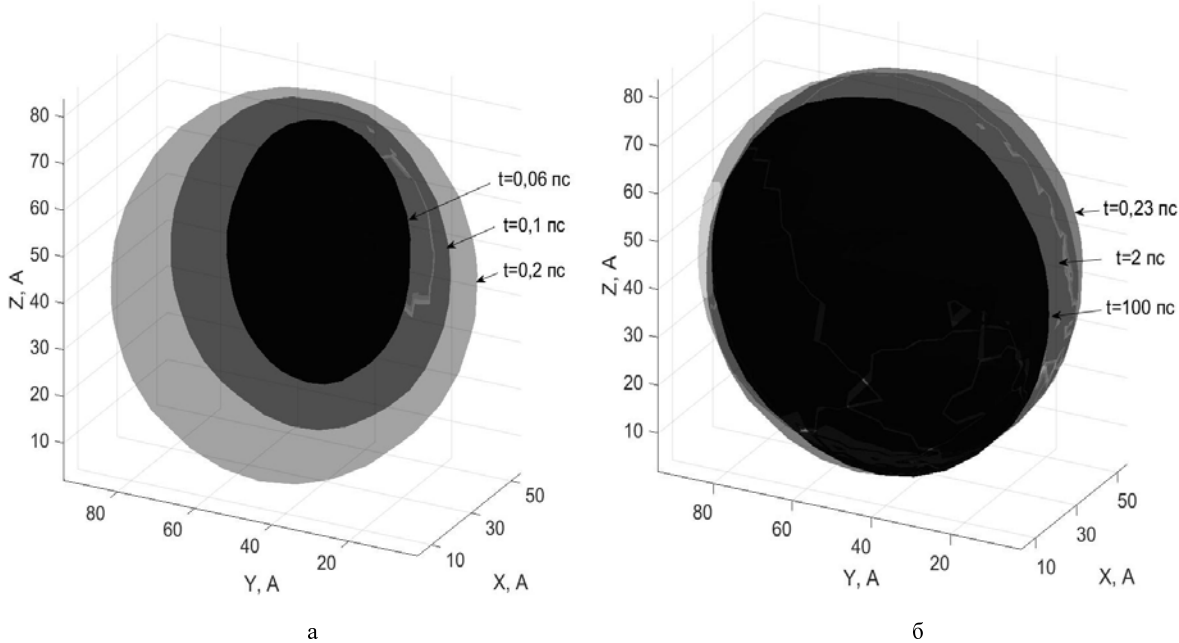


Рис. 2. Размеры кластера радиационных дефектов в различные моменты времени: а – стадии ударного расширения, б – стадии стабилизации и быстрого отжига

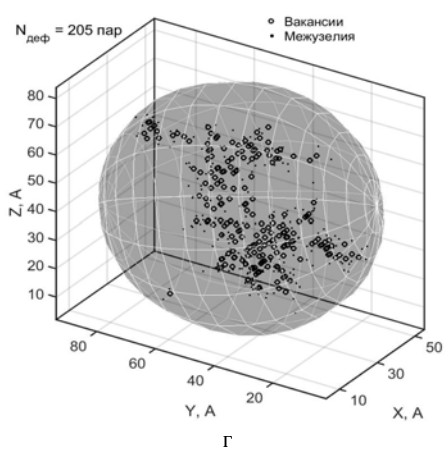
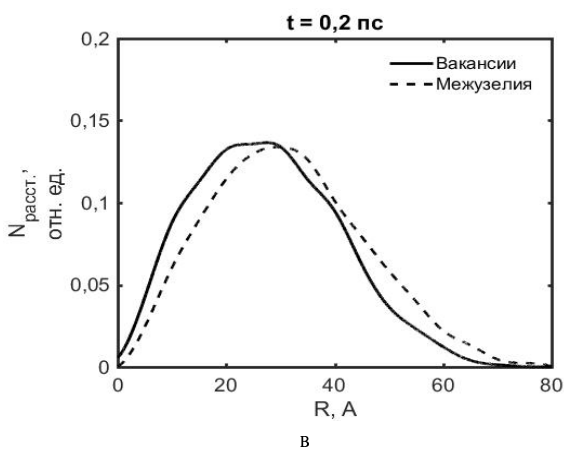
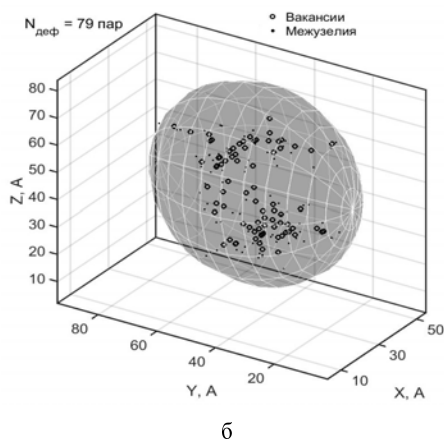
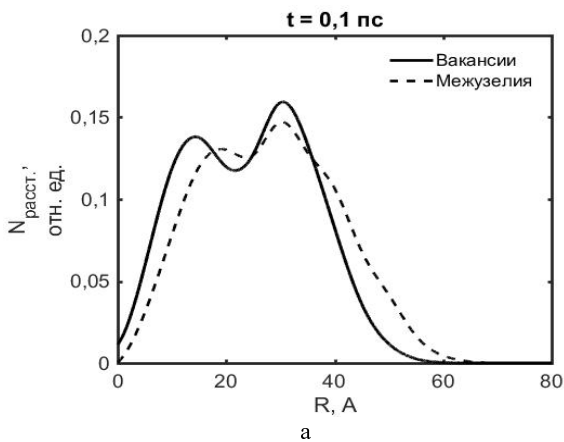
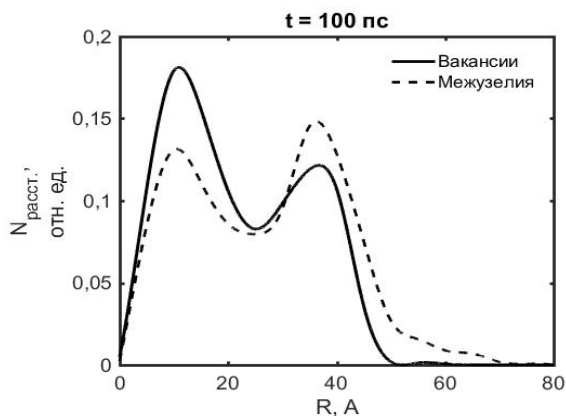
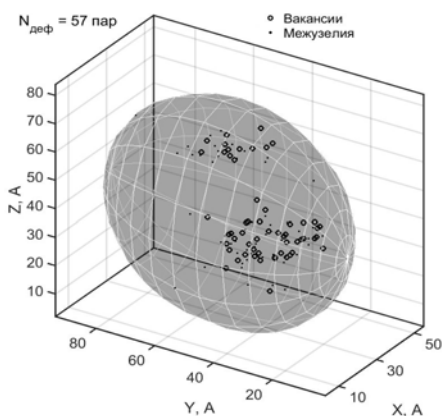


Рис. 3. Распределение попарных расстояний между дефектами (а, в, д) и пространственная топология кластера (б, г, е) в различные моменты времени: а – $t = 0,1$ пс; б – $t = 0,1$ пс; в – $t = 0,2$ пс; г – $t = 0,2$ пс (оконч. см. с. 68)



д



е

Рис. 3. (Окончание). Распределение попарных расстояний между дефектами (а, в, д) и пространственная топология кластера (б, г, е) д – $t = 100$ пс; е – $t = 100$ пс

Изменение геометрических размеров кластера радиационных дефектов с течением времени представлено на рис. 2а и 2б. Существенное увеличение размеров разупорядоченной области происходит в течение стадии ударного расширения, достигая своего максимума в конце (рис. 2а). Затем в процессе стабилизации быстрого отжига происходит сжатие за счет рекомбинации пар дефектов, расположенных на периферии кластера (рис. 2б). В связи с разной скоростью протекания процессов ударного расширения и отжига радиационных дефектов, сжатие разупорядоченной области происходит намного медленнее, чем увеличение.

Для анализа топологии кластера использовалось распределение попарных расстояний между точечными дефектами. Оно представляет собой функцию $N(r)$, где N – отношение числа дефектов, расстояние между которыми находится в интервале $(r, r + \Delta r)$, к общему числу дефектов в кластере. Такое распределение имеет характерные максимумы, положение которых определяет области скопления точечных дефектов. На рис. 3 представлены функции распределения попарных расстояний между точечными дефектами в различные моменты времени, построенные отдельно для вакансий и межузельных атомов, а также трехмерные топологии разупорядоченных областей.

Из представленных выше графиков следует, что до середины участка термического расширения (рис. 3а и 3б) формирование точечных дефектов происходит в основном вследствие взаимодействия первичного атома отдачи с атомами вещества, что приводит к появлению близкорасположенных максимумов в распределении попарных расстояний. Из-за того, что исходная энергия первичного атома отдачи невелика, отдельные субкластеры расположены близко друг к другу. В конце стадии термического расширения (рис. 3в и 3г) распределения попарных

расстояний как вакансий, так и межузельных атомов внутри кластера близки к нормальным, что свидетельствует об однородной структуре каскада атомных смещений. После стадий стабилизации и быстрого отжига (рис. 3д и 3е) происходит перераспределение дефектов: вакансии собираются в центре кластера, в то время как межузельные атомы расположены в основном на его периферии.

Отдельно необходимо рассмотреть вопрос о нижнем временном пределе применимости метода тепломассопереноса для анализа процесса формирования каскада атомных смещений. Само понятие «температуры» не имеет смысла использовать для слишком малых временных масштабов, когда распределение по энергии в исследуемой системе отличается от максвелловского. На рис. 4 представлены распределения точечных дефектов по энергии ϵ в различные моменты времени.

В начальный момент времени (рис. 4а) кластер радиационных дефектов состоит из нескольких частиц, чья энергия варьируется в широком диапазоне и получившееся распределение сильно отличается от распределения Максвелла. С течением времени число дефектов растет, а распределение приобретает вид максвелловского, что свидетельствует о достижения термодинамического равновесия в системе. Последующее остывание каскада атомных смещений приводит к тому, что распределение смещается в область низких энергий (рис. 4в). Из выше сказанного следует, что нижним пределом применимости континуального метода является начало фазы стабилизации.

Заключение

Подводя итоги необходимо отметить, что в настоящее время получение детальной информации об этапах формирования каскадов атомных смещений вплоть до стадии быстрого отжига радиационных

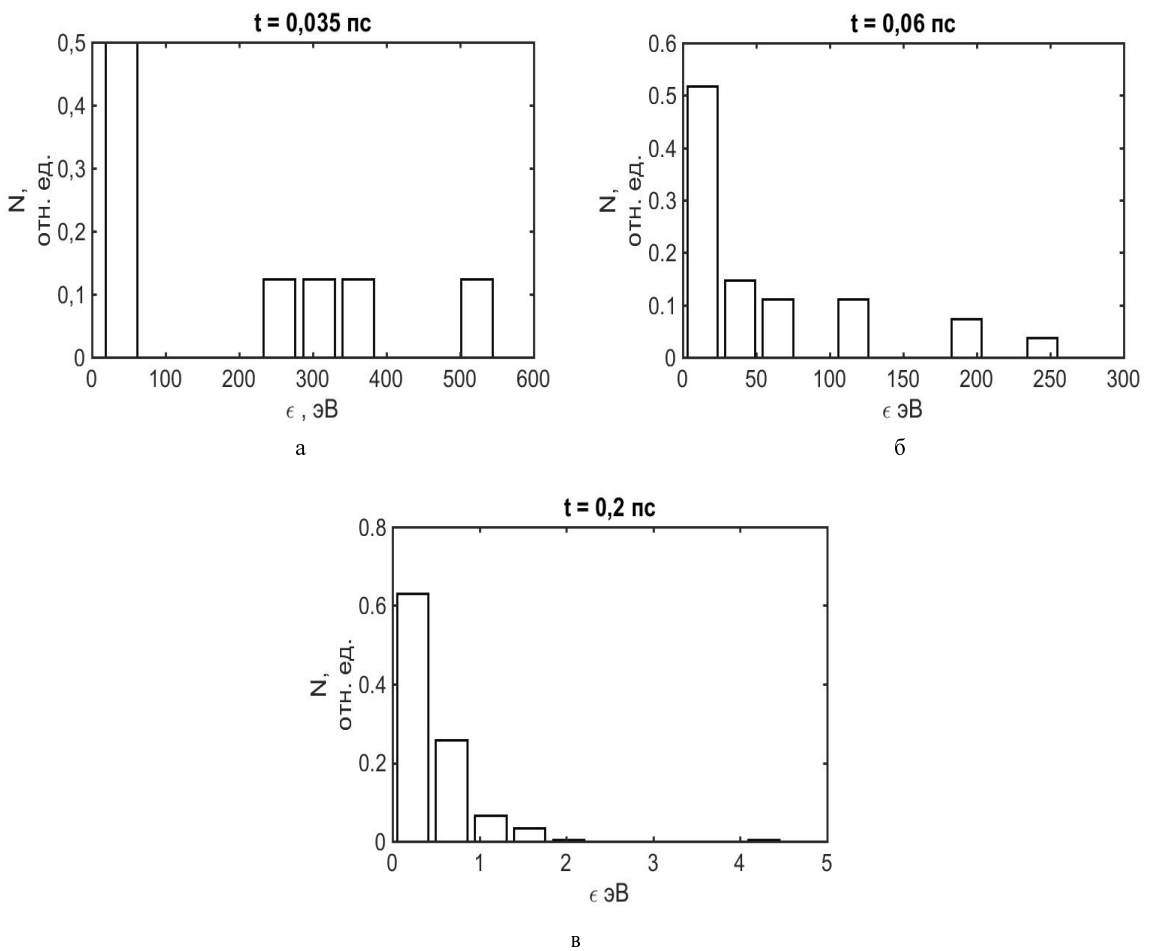


Рис. 4. Распределение межузельных атомов внутри кластера радиационных дефектов по энергии ϵ в различные моменты времени: а – $t = 0,035$ пс, б – $t = 0,06$ пс, в – $t = 0,2$ пс

дефектов за приемлемое время возможно только при помощи метода классической молекулярной динамики. Метод Монте-Карло в этом случае используется в качестве проверочного для оценки адекватности применения различных моделей межатомного потенциала взаимодействия. Для моделирования отжига радиационных дефектов на больших временных масштабах целесообразнее применять континуальные методы тепломассопереноса.

Литература

1. Чумаков А. И. Действие космической радиации на ИС. М.: Радио и связь, 2004.
2. Забавичев И. Ю., Потехин А. А., Пузанов А. С., Оболенский С. В., Козлов В. А. Дegradация характеристик биполярных транзисторов на основе GaAs с тонкой базой при возникновении в них нанометровых кластеров радиационных дефектов под действием нейтронного облучения // Физика и техника полупроводников, 2017. Т. 51, № 11. С. 1520–1524.
3. Калинин Б. А. и др. Физическое материаловедение. Том 4. Физические основы прочности. Радиаци-

онная физика твердого тела. Компьютерное моделирование. М.: МИФИ, 2008.

4. Vashishta P., Bachlechner M., Nakano A., Campbell T.J., Kalia R.K., Kodiyalam S., Ogata S., Shimojo F., Walsh P. Multimillion atom simulation of materials on parallel computers—nanopixel, interfacial fracture, nanoindentation, and oxidation // *Appl. Surf. Sci.*, 2001, № 182, pp. 258–264.
5. Vvedensky D. D. Multiscale modelling of nanostructures // *J. Phys.: Condens. Matter*, 2004, № 16, pp. 1537–1576.
6. Carlsson A.E. Beyond pair potentials for transition-metals and semiconductors // *Solid State Physics: Advances in Research and Applications*, 1990, № 43, pp 1–91.
7. Stillinger F. H., Weber T. A. Computer simulation of local order in condensed phases of silicon // *Phys.Rev. B*, 1985, № 31 pp. 5262–5271.
8. Tersoff J. New empirical approach for the structure and energy of covalent systems // *Phys. Rev. B*, 1988, № 37, pp. 6991–7000.
9. D.W. Empirical potential for hydrocarbons for use in simulating the chemical vapor deposition of

diamond films // Phys. Rev. B, 1990, № 42, pp. 9458–9471.

10. Samolyuk Y. N., Osetskiy Y. N., Stoller R. E. Molecular dynamics modeling of atomic displacement cascades in 3C-SiC: comparison of interatomic potentials // Journal of Nuclear Materials, 2015. Vol. 465, pp. 83–88.

11. Вавилов В. С. Действие излучений на полупроводники. - М.: Физматгиз, 1963. С. 264.

12. Самарский А. А., Михайлов А. П. Математическое моделирование: Идеи. Методы. Примеры. – М.: Наука, Физматлит, 1997. С. 320.

13. Plimton S., Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics // J.Comput. Phys., 1995, vol. 117, pp. 1–19.

14. Stillinger F. H., Weber T. A. Computer simulation of local order in condensed phases of silicon, Phys. Rev. B, 1985, vol. 31, pp. 5262–5271.

15. L.G. Rounding of Polytopes in the Real Number Model of Computation // Mathematics of Operations Research, 1996, vol. 21, №. 2, pp. 307–320.

16. Ziegler J. F., Biersak J. P., Littmark U. The stopping and range of ions in solids. Pergamon, N.Y., 1996. – 192 p.