

Научный совет по проблеме
"Радиационная физика твёрдого тела"
АН СССР

Институт физики АН ЛатССР
Криворожский государственный педагогический институт

ДЕСЯТОЕ ЗАСЕДАНИЕ

ПОСТОЯННОГО СЕМИНАРА
ПО МОДЕЛИРОВАНИЮ РАДИАЦИОННЫХ
И ДРУГИХ ДЕФЕКТОВ В КРИСТАЛЛАХ

ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

Лисичанск, 15-17 января 1980 г.

ДЕСЯТОЕ ЗАСЕДАНИЕ

**ПОСТОЯННОГО СЕМИНАРА ПО МОДЕЛИРОВАНИЮ
РАДИАЦИОННЫХ И ДРУГИХ ДЕФЕКТОВ В КРИСТАЛЛАХ**

Тезисы докладов

Издаётся - 1980 г.

ЛЕКЦИИ

АГРАНОВИЧ В.М.

Кристаллооптика и спектроскопия
поверхности.

БОНЧ-БРУЕВИЧ В.Л.

Некоторые вопросы теории
неупорядоченных систем.

ШЕЙНКМАН М.К.

Механизмы фото-химических реакций
в полупроводниках.

ШВАРЦ К.К.

Высокотемпературный радиолиз
ионных кристаллов.

СОДЕРЖАНИЕ

стр.

КИВ А.Е. Развитие метода квантовохимического моделирования	7
ТОЛЫГО К.Б., ТРОИЦКАЯ Е.И. Одно- и двухцентровые аутолокализованные экситоны в кристаллическом ионе	8
РАЗАРЕНОВА Л.К., ТЕЛЕЖКИН В.А., ТОЛЫГО К.Б. Энергия деформации щелочно-галоидных кристаллов электрическим полем	10
ТЕЛЕЖКИН В.А., ТОЛЫГО К.Б., ШАТАЛОВ В.М. О возможности образования дефектов в полупроводниках при собственном поглощении света	12
ТЕЛЕЖКИН В.А. Адиабатические потенциалы радиационных дефектов в полупроводниках с учетом конфигурационного взаимодействия	14
РЕЗНИК И.М. Кулоновский потенциальный рельеф ковалентных полупроводников	15
КИВ А.Е., СОЛОВЬЕВ В.Н. Динамика комплексов в кремнии .	16
СОЛОВЬЕВ В.Н., ТИМОШЕНКО Т.Г. Потенциальный рельеф в бинарных кристаллах	17
АРТАМОНОВ Л.В., ГРЕХОВ А.М., РОЙЦН А.Б. Модельный расчет электронной энергетической структуры кластера	18
БУГАЙ А.А., ВИХНИН В.С., КУСТОВ В.Е. Построение моделей Ян-Теллеровских центров в кремнии по данным спин-решеточной релаксации и ЭПР	20
РУЗАНКИН С.Ф. Моделирование граничных условий в методе Х ₄ -РВ для ионных и ковалентных кристаллов . .	23
ГАДИНК Г.В., РУЗАНКИН С.Ф., САФРОНОВ Л.Н. Идентификация уровней в системе кремний - междуузельный атом благородного газа	25
ЗОТОМИН Е.А., ШЛГЕР А.Л. Электронная структура и тунNELьная рекомбинация дырочных дефектов в ЩГК .	26

КОТОМИН Е.А., КУЗОВКОВ В.Н. Модель радиационно-стимулированного создания кластеров дефектов в кристаллах	27
КАЛНИН Д.Х., ПИРОГОВ Ф.В. Моделирование диффузионно-контролируемого накопления точечных дефектов в двумерном случае	28
ШУНИН В.Н. Методика расчета плотности электронных состояний неупорядоченных твердых тел	30
АБОЛТИНЬШ Э.Э. Электронно-фононное взаимодействие в полупроводниковых монокристаллах во внешних электрических полях	33
ДОЖНЕР Р.Д. Взаимодействие анизотропных дефектов с дислокациями в ионных кристаллах	35
ПАНТЕЛЕЕВ В.А., ОКУЛИЧ В.И., АКИННИНА Е.И. Расчет энергии связи комплексов "вакансия-примесь Ш и У группы" в кремнии	36
ОКУЛИЧ В.И., АКИННИНА Е.И., ПАНТЕЛЕЕВ В.А. Расчет взаимодействия примеси с краевой дислокацией в кремнии методом молекулярных орбиталей	37
АСКАРОВ Б., ОКСЕНГЕНДЕР Б.Л., ЮНУСОВ Н.С. О квантово-химическом изучении роли электронных корреляций в протекании атомных процессов в полупроводниках	38
МАХМУДОВ А.Ш. О выборе специальных точек зоны Бриллюэна для исследования локализованных состояний методом функций Грина	41
ЖЕВНО А.Н., СИДОРЧИК В.В. Электронная структура комплекса ($V_2 + O_2$) в кремнии	43
ЖЕВНО А.Н., СИДОРЧИК В.В. Стабильная конфигурация собственных междуузельных атомов в кремнии	44
НУРМАГАМБЕТОВ С.Б., ВОРОБЬЕВ С.А. Определение электронной структуры вакансационных центров в валентных кристаллах	46

КУПЧИНИН А.И. О квантово-механических моделях существования позитронов в дефектах	49
ГУРВИЧ Л.Г. Моделирование потенциального рельефа в кристаллах с ковалентной связью и металлической связью	51
ГАГАРИН С.Г., КОЛЬБАНОВСКИЙ О.А. Квантовохимическое моделирование точечных дефектов поверхности кристаллов	53
ВИЗГИН Ю.И., ТРУФАНОВ А.И., ИВАНОВ Н.А. Метод определения зависимости изменений свойств облученных кристаллов от энергии ПВА	56
БОРОВИК А.С., ШИПАТОВ Э.Т., УЛЬЯНОВ А.В. Анализ радиационных нарушений в кристаллах с помощью моделирования рассеяния канализированных ионов за дефектах	57
КОВАЛЕВА Е.А., ШИПАТОВ Э.Т. Моделирование на ЭВМ процессов упругого рассеяния ионов гелия и водорода на бинарных атомных цепочках в ионных и ионно-ковалентных кристаллах	60
БОЕВ О.В., АРЕФЬЕВ К.П. Катионная вакансия в ЩГК как центр захвата позитронов.	63
ВНДАШЕНКО В.Н., ЛАНДАУ А.И. Кинетика движения дислокаций при малых нагрузках в кристаллах, содержащих два типа точечных дефектов	66
ЛИСИЦИН В.И., СИГИМОВ В.Ч. Температурная зависимость пространственного разделения коррелированных пар точечных дефектов в кристаллах	69
МАТВЕЕВ Ю.А. Моделирование профиля дифракционного отражения для различных распределений деформации при радиационных повреждениях поверхности полупроводников	71
РАДЧЕНКО И.С., САФОНЕНКО П.П. Структура коллоидных центров окраски	72

ЦЫТЕНКО В.Б. Применение ЭВМ для моделирования физических процессов в ИМС	76
УСКОВ В.А., ПОПОВ В.Д., УСПЕНСКАЯ Г.И. Применение рентгеновского метода измерения кривизны к моделированию процессов, протекающих на границе полупроводник-диэлектрик под воздействием ионизирующих излучений	78
ПАНОВ В.П., СИЗОВА Г.Д., ПОТАПОВ В.Н., ТОПАЛИДИ В.К., ДУМАНСКИЙ Л.П. Исследование модели дефектов, обуславливающих эффект остаточной проводимости в пленках сульфида кадмия	80

ДИНАМИКА КОМПЛЕКСОВ В КРЕМНИИ

А.Е.Кив, В.Н.Соловьев

Метод квантовохимического моделирования в приближении ПАХО [1] дает возможность проследить динамику атомов в различных дефектных конфигурациях алмазной решетки. Ранее была показана возможность облегченного образования вакансии в окрестности примеси У группы в кремнии и выхода в междоузлие узловых примесей Ш группы [2]. Был исследован так называемый эффект кузнецика в алмазной решетке [3]. В данной работе установлено, что особенности релаксации дефектных конфигураций в алмазной решетке определяют кинетику взаимных превращений и трансформации комплексов. Так, генерация дефектов Френкеля комплексами V-атом У группы в области температур 600-900 К обуславливает медленное безрадиационное накопление А-центров. Такие процессы влияют на время жизни носителей в транзисторах и могут быть определяющими фактором их естественной деградации.

Л и т е р а т у р а

1. Кив А.Е., Соловьев В.Н. Искаженные структуры в алмазных решетках. Методические материалы по машинному моделированию дефектов в кристаллах, Кривой Рог, 1978 г.
2. Кив А.Е., Соловьев В.Н. Примесные комплексы - генераторы дефектов. ФТТ (в печати)
3. Кив А.Е., Исакандерова З.А., Соловьев В.Н. О механизме образования Е-центра в кремнии, ФТП, II, 199, 1977
3. Kiv A.E., Soloviev. The grasshopper Effect in the Diamond Lattice. Phys.Stat.Sol.(b), 94, K91 (1979).

Включенные в препринт работы печатаются методом прямого репродуцирования текстов, присланных авторами, которые и несут ответственность за их форму и содержание.

БТ 83483 Ротапринт ин-та Механообчермет. Заказ I Тираж 1000 экз.
Объем 3 печ.листа. Подписано к печати 29.XII.79 г. Цена 45 коп.

Цена 45 коп.