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

Лиелупе. 15-17 января 1980 г

Д Е С Я Т О Е З А С Е Д А Н И Е

ПОСТОЯННОГО СЕМИНАРА ПО МОДЕЛИРОВАНИЮ РАДИАЦИОННЫХ И ДРУГИХ ДЕФЕКТОВ В КРИСТАЛЛАХ

Тезисы докладов

Лиепая - 1980 г.

Л Е К Ц И И

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

ТОЛПЫГО К.Б., ТРОИЦКАЯ Е.И. Одно- и двухцентровые автолокализованные экситоны в кристаллическом неоне 8

РАЗАРЕНОВА Л.К., ТЕЛЕЖКИН В.А., ТОЛПЫГО К.Б. Энергия деформации щелочно-галоидных кристаллов электрическим полем 10

ТЕЛЕЖКИН В.А., ТОЛПЫГО 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., РОЙЦЫН 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 X_α-РВ для ионных и ковалентных кристаллов . . 23

ГАДИНК Г.В., РУЗАНКИН С.Ф., САФРОНОВ Л.Н. Идентификация уровней в системе кремний - междоузельный атом благородного газа 25

ДОТОМИН Е.А., ШЛЮГЕР А.Л. Электронная структура и туннельная рекомбинация дырочных дефектов в ЩГК . 26

КОТОМИН Е.А., КУЗОВКОВ В.Н. Модель радиационно-стимулированного создания кластеров дефектов в кристаллах 27

КАЛНИНЬ Ю.Х., ПИРОГОВ Ф.В. Моделирование диффузионно-контролируемого накопления точечных дефектов в двумерном случае 28

ШУНИН Ю.Н. Методика расчета плотности электронных состояний неупорядоченных твердых тел 30

АБОЛТИНЬШ Э.Э. Электронно-фононное взаимодействие в полупроводниковых монокристаллах во внешних электрических полях 33

ДОХНЕР Р.Д. Взаимодействие анизотропных дефектов с дислокациями в ионных кристаллах 35

ПАНТЕЛЕЕВ В.А., ОКУЛИЧ В.И., АКИНКИНА Е.И. Расчет энергии связи комплексов "вакансия-примесь III и V группы" в кремнии 36

ОКУЛИЧ В.И., АКИНКИНА Е.И., ПАНТЕЛЕЕВ В.А. Расчет взаимодействия примеси с краевой дислокацией в кремнии методом молекулярных орбиталей 37

АСКАРОВ Б., ОКСЕНГЕНДЛЕР Б.Л., ЮНУСОВ М.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., СИДОРИК В.В. Электронная структура комплекса ($V_2 + O_2$) в кремнии 43

ЖЕВНО А.Н., СИДОРИК В.В. Стабильная конфигурация собственных междоузельных атомов в кремнии . . . 44

НУРМАГАМБЕТОВ С.Б., ВОРОБЬЕВ С.А. Определение электронной структуры вакансионных центров в валентных кристаллах 46

КУПЧИШИН 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., КОЛЬАНОВСКИЙ Ю.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 каналированных ионов на 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 60

БОЕВ О.В., АРЕФЬЕВ К.П. Катионная вакансия в ЩГК как центр захвата позитронов. 63

ВИДАШЕНКО В.Н., ЛАНДАУ А.И. Кинетика движения дислокаций при малых нагрузках в кристаллах, содержащих два типа точечных дефе..тов 66

ЛИСИЦЫН В.М., СИГИМОВ В.Ч. Температурная зависим сть пространственного разделения коррелированных пар точечных дефектов в кристаллах 69

МАТВЕЕВ Ю.А. Моделирование профиля дифракционного отражения для различных распределений деформации при радиационных повреждения поверхности полупроводников 71

РАДЧЕНКО И.С., САФОНЕНКО П.П. Структура коллоидных центров окраски 72

ЦИТЕНКО 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

ПОТЕНЦИАЛЬНЫЙ РЕЛЬЕФ В БИНАРНЫХ КРИСТАЛЛАХ

В.Н.Соловьев, Т.Г.Тимошенко

Рассмотрены вопросы, связанные с построением потенциального рельефа (ПР) в попарно-аддитивном приближении для гетеросоединений. Подобная задача возникает, в частности, при исследовании поведения примесей в насыщенных системах.

Проанализированы два случая: сильной и слабой ковалентности. В первом случае эффективные заряды остовов гетерокомпонентов мало отличаются между собой и возможен расчет ПР согласно методике [1]. Случай слабой ковалентности требует вариационного расчета степени ковалентности соединения.

На примере примесных комплексов в Si обсуждается модификация алгоритмов квантовохимического моделирования [2].

Литература

1. Кив А.Е., Искандерова З.А. - ФТП, 1976, т.10, с.1984
2. Кив А.Е., Соловьев В.Н. Искаженные структуры в алмазных решетках. - В сб. Методические материалы по машинному моделированию дефектов в кристаллах, Кривой Рог, 1978. с.59.

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 Механобрчермет. Заказ I Тираж I000 экз.
Объем 3 печ.листа. Подписано к печати 29.XII.79 г. Цена 45 коп.

Цена 45 коп.