

ХАРЬКОВСКИЙ ОРДЕНА ЛЕНИНА
И ОРДЕНА ОКТЯБРЬСКОЙ РЕВОЛЮЦИИ
ФИЗИКО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ АН УССР
SU&207061-7081

ISSN 0134-5400

**ВОПРОСЫ
АТОМНОЙ
НАУКИ
И
ТЕХНИКИ**

inis-su-142

**СЕРИЯ:
Физика
радиационных повреждений
и радиационное
материаловедение**

ВЫПУСК

2 /16/

1981

ХАРЬКОВСКИЙ ОРДЕНА ЛЕНИНА
И ОРДЕНА ОКТЯБРЬСКОЙ РЕВОЛЮЦИИ
ФИЗИКО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ АН УССР

ISSN 0134-5400

ВОПРОСЫ АТОМНОЙ НАУКИ И ТЕХНИКИ

НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЙ СБОРНИК

СЕРИЯ:

Физика

**радиационных повреждений
и радиационное
материаловедение**

ВЫПУСК

2 / 16 /

ХАРЬКОВ

1981

УДК 539.1:539.2:548.0:620.0:621.0

В настоящем выпуске продолжается публикация материалов Второго всеобъемного совещания по радиационной физике твердого тела, состоявшегося в феврале 1981г. в г. Звенигороде. В выпуске представлены доклады по всем проблемам, которые были затронуты на совещании. Однако основное внимание уделено вопросу о роли ориентационных явлений в радиационной физике твердого тела: в сборнике помещены обзорный доклад Н.П.Балашикова и все остальные доклады (кроме одного), посвященные этому вопросу.

В выпуск также включено несколько работ, которые не докладывались на совещании, но которые, по мнению редколлегии, требуют срочного опубликования.

Переводы некоторых рефератов выполнены авторами.

Главный редактор **В.Ф.ЗЕЛЕНСКИЙ**

Редакционная коллегия:

**И.В.АЛЬТОВСКИЙ, Ю.П.АНТУФЬЕВ, П.А.БЕРЕЗНЯК, Ю.В.КОНОБЕЕВ,
Б.В.МАТВИЕНКО, И.М.НЕКЛУДОВ** (зам. главного редактора),
Л.С.ОЖИГОВ (ответственный секретарь), **Э.А.РЕЗНИЧЕНКО, А.П.РЕКОВА,
В.В.РОЖКОВ, В.Ф.РЫБАЛКО, Ю.Н.СОКУРСКИЙ**

Квантовохимическое моделирование аморфного кремния

А.Е.Кив, В.Н.Соловьев (Кировоградский госпединститут)

Известные модели аморфного Si отличаются выбором условий искажений связей [1]. Основные из рассматриваемых моделей - микрокристаллитная (МК) и беспорядочно перемешанная сетчатая структура (БПС).

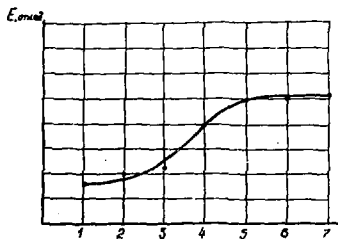
Экспериментальные данные по обработке водородом аморфного Si приводит к выводу о важной роли свободных валентностей, которые не присутствуют в модели БПС. Этот факт, ввиду о другом, указывает на целесообразность более детального исследования МК-модели.

До последнего времени оставался открытым вопрос об энергетической устойчивости различных атомных конфигураций аморфного Si. Предполагается, что возможно однозначное определение аморфной структуры через плотность электронных состояний путем сопоставления расчетных и экспериментальных данных [2]. Однако плотности электронных состояний в различных моделях описываются иначе [3].

Для определения энергетически устойчивых конфигураций атомов аморфного Si применял метод квантовохимического моделирования [4].

Координаты атомов определялись при помощи квантовохимического расчета 17-атомного кластера. Использовались пробные Slaterовские функции, угловая часть которых видоизменялась самосопряженным способом с изменением атомной конфигурации, а вариационная процедура осуществлялась при помощи метода работ [5].

Начальные координаты атомов кластера задавались такими, как и в кристалле кремния. Затем случайным образом выбирались соседние атомы кластера и выбирались положения фиксировались.



Типичная зависимость полной энергии микрокристаллита от величины параметра центрального атома

При критическом сдвиге центрального атома ($\frac{\Delta Q}{Q} > 0,2$, где Q_0 - межатомное расстояние в идеальной решетке Si) потенциальные кривые не обнаруживают минимума. Очевидно, последние конфигурации оказываются неустойчивыми. Они не отвечают никаким реально существующим структурам. Легко видеть, что эта ситуация в нашей модели означает, что разупорядочение "достигает" каждого отдельного тетраэдра. На этом основании сделано предположение, согласно которому рекристаллизация, наступающая после аморфизации имплантированных слоев при длительной бомбардировке [6], обусловлена достижением локального разупорядочения с искажением каждого тетраэдра, что приводит систему из неустойчивого состояния в кристаллическую фазу.

Угловые искажения для устойчивой аморфной фазы Si составляют 7° , а верхний предел $12-15^\circ$, что существенно меньше, чем допускается в ряде моделей [1].

ПРИСТАВЛЕНИЕ БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Захаров В.П., Герасименко В.Г. Структурные особенности полупроводников в аморфном состоянии. - Киев: Наукова думка, 1976.
2. Вычислительные методы в теории твердого тела. /Перевод под ред. А.А.Овчинникова. - М.: Мир, 1975.
3. Kelley M.J., Bullett D.W. Topological and electronic structure in group IV amorphous semiconductors. - J. Non-Cryst. Sol., 1976, vol.21, p.155-170.
4. Кив А.Е., Соколов В.Н. Искаженные структуры в алмазных решетках. - В кн.: Методические материалы по машинному моделированию дефектов в кристаллах. - Кривой Рог, ВИТИ, 1976, с. 59-88.
5. Кив А.Е., Стас Л.Е. Дефектный метод уточнения орбитальной экспоненты волновой функции. - В кн.: Пятое заседание Постоянного семинара по моделированию радиационных и других дефектов в кристаллах. Тезисы докладов, Кривой Рог, ВИТИ, 1977, с. 36-37.
6. Связанные процессы в облученных полупроводниках. / Под ред. Л.С.Смирнова. - Новосибирск: Наука, Сибирское отделение, 1977.

Статья поступила в редакцию 27 февраля 1981 года.

Содержание

<i>Раздел первый</i>	ЭЛЕМЕНТАРНЫЕ ДЕФЕКТЫ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКИ	<i>Стр</i>
Ратчиния И.Г. Аннигиляция френкелевских пар на первой стадии отжига облученных ОЦ-металлов.		3
Голубев Н.А., Коптелов Э.А. Особенности образования дислокационных петель в пульсарном сверхмощном пучке.		6
Гусская В.И., Кучинский П.В., Ломако В.М., Петрушич А.П. Особенности радиационного дефектообразования в кремнии при альфа-облучении.		8
Бутыко В.Г., Толпыго К.Б. К вопросу об автоквантизации глубоких экситонов в валентных кристаллах.		9
Гресыков И.М., Ефимович О.Н., Соловьев С.П., Харченко В.А. Отжиг дефектов в кремнии, облученном реакторными нейтронами.		12
<i>Раздел второй</i>	ОБРАЗОВАНИЕ И СТРУКТУРА ПЕРВИЧНОГО ПОВРЕЖДЕНИЯ	
Гана В.В., Емец Н.И., Кузьменко В.А., Раник Ю.И., Слабоошицкий Р.П., Шиялов Б.А., Лина О.В., Яминский В.А. Расчет профилей пространственного распределения дефектов и продуктов ядерных реакций при облучении материалов высокоэнергетическими электронами и гамма-квантами.		14
Афанасьев В.Д. Дефектообразование в вольфрам при облучении нейтронами реакторного спектра. Пешлаков Т.В., Надрывский Л.И. Радиационные дефекты в высокодисперсной двуокиси кремния, облученной в реакторе при низких температурах.		19
Боровак А.С., Шкатунов Э.Т. Нахождение профилей радиационных дефектов в кристаллах, подвергнутых конусному облучению, с помощью метода обратного рассеяния и канализирования новых с учетом местоположения собственных межузельных атомов и атомов внедренных примесей в кристаллической решетке.		22
Ибрагимов Ш.Ш., Реутов В.Ф., Абрамштов И.П., Валин С.П. Энергетическая зависимость радиационной повреждаемости молибдена, облученного альфа-частицами.		24
		26
<i>Раздел третий</i>	ОРИЕНТАЦИОННЫЕ ЭФФЕКТЫ ПРИ ВЗАИМОДЕЙСТВИИ ИЗЛУЧЕНИЙ С КРИСТАЛЛАМИ	
Каламшиков Н.П. Ориентационные эффекты при взаимодействии заряженных частиц с монокристаллами.		28
Гана В.В., Рожков В.В. Разрушающее канализрование.		37
Муратов В.А., Телогин Г. Влияние деканализирования для реактивных аксиально-канализованных в		39
Рожков В.В., Руткевич В.В. Влияние теплового деканализирования на аксиальных каналах.		42
Гана В.В., Луков А.И., Рожков В.В. Излучение гиперзвуковых волн канализрующими частицами.		50
Маларов А.А., Демьяков В.В., Мельников Б.Г. Влияние температуры на длину цепочек атом-атомных столкновений в металлах.		53
<i>Раздел четвертый</i>	РАЗМЕРНЫЕ И СТРУКТУРНО-ФАЗОВЫЕ ИЗМЕНЕНИЯ В ТВЕРДЫХ ТЕЛАХ ПОД ОБЛУЧЕНИЕМ	
Зеленовский В.Ф., Паршич А.М., Неллидов И.М., Курсынич И.П., Матвеев Б.В., Васильев И.К., Возводина В.Н., Козыренко С.А., Брык В.В., Одищев Н.Б. Исследование радиационной повреждаемости оксидов на основе α -титана после облучения титановыми ионами.		57
Анничин В.М., Гудынский Г.А., Углов В.В. Структурные изменения в никеле, облученном ионами углерода.		62

Кис А.В., Соловьев В.И. Квантовохимическое моделирование аморфной Si	64
Корнеев А.В., Колопонова Е.В., Иванов С.А., Ибрагимов А.Н., Дуденко В.П. Изменение кристаллической структуры $CsNO_3$ под действием концентрирующего излучения	66

Раздел пятый **ВЛИЯНИЕ ОБЛУЧЕНИЯ НА МЕХАНИЧЕСКИЕ,
ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ И ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА
ТВЕРДЫХ ТЕЛ**

Наскадзинский И.А., Малик-Шахваров В.А., Сердюковичев В.И., Савин В.И. Влияние нейтронного облучения на затухание звука в β -фазе гидрида ниобия	68
Сутаков В.И. Проникание решетчатых пор в оптических свойствах металлов	71
Евсеев В.А., Ковшова Р.Ф., Скал А.С. Исследование эффекта Холла и электропроводности полупроводников с разупорядоченными областями методами теории протекания	73
Александров А.С., Дегтяренко В.Н., Евсюк В.Ф., Явезко М.П., Скалкин А.И. Влияние радиационных дефектов на критическую температуру, остаточное сопротивление, магнитную восприимчивость и теплоемкость соединений со структурой A-15	75

Раздел шестой **РАДИАЦИОННО-СТИМУЛИРОВАННЫЕ ПРОЦЕССЫ
ДИФфуЗИИ, ОКИСЛЕНИЯ И КОРРОЗИИ**

Александров О.В., Газриков Г.А., Матханова И.П., Прохоров В.И. Влияние элоргичных дефектов на диффузию фосфора в кремнии	78
Мателов В.М. К теории деградации полупроводниковых приборов	82
Торин В.А., Врофайчев В.Г., Яко Г.В. Диффузия примесей и образование дефектов структуры в узловых полупроводниках при ватонном световом облучении	85

Раздел седьмой **ГАЗЫ В МЕТАЛЛАХ**

Ибрагимов Ш.И., Реутов В.Ф., Кван Г.Т. Влияние гелия на формирование дефектной структуры в молибдене в процессе облучения альфа-частицами	87
---	----

Раздел восьмой **МЕТОДЫ И ПРИБОРЫ
РАДИАЦИОННО-ФИЗИЧЕСКОГО ЭКСПЕРИМЕНТА**

Брус А.С., Великов А.И., Кузьмичев М.А., Матвеевко Б.В., Сидков Л.С., Стукалов А.И. Полуавтоматическая координатная планиметрия в приложениях к задачам радиационного материаловедения	90
Кашченко С.И. Устройства для исследования размерных изменений реакторных материалов в условиях облучения на ускорителе	95
Гончаренко В.Д., Грабова Р.Б., Кашельова Л., Косыков В.М., Роговинов А.И. Рентгеновские исследования облученных материалов при наличии диффузного рассеяния	96

Раздел девятый **КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ**

Гала А.В., Радик В.Н. Дефектность ядер докритических элементов	100
Горшков О.Н., Васильев В.К., Тетельбаум Д.И., Павлов П.В. Наблюдение кластеров накопления дефектов в $ZrSi_2$	103

ВОПРОСЫ АТОМНОЙ НАУКИ И ТЕХНИКИ.

Серия: ФИЗИКА РАДИАЦИОННЫХ ПОВРЕЖДЕНИЙ И РАДИАЦИОННОГО МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЯ

Выпуск 2(16)

Ответственные за выпуск В.В.Рожков, А.М.Рахманинко

Редактор, корректор В.И.Титова

Получено в печать 24.12.81. Ш 10603. Формат 60x84/8. Бум. офсет. л. 1. Офсетн. лив. 16,0 усл.п.л. 10,0 уч.-изд.л. 33 статьи. Тираж 700. Заказ 782. Цена 1р.50к. Издано 3651

Ларьков-108, реперный лист АН УССР

УДК 620.187:621.039.531

Земельский В.Ф., Баршев А.М., Неклюдов И.М., Курсеняч И.П., Матвеевко Б.В., Васина Н.Н., Боеволова В.Н., Коваленко С.А., Бржж В.В., Овдинов Н.Б. ИССЛЕДОВАНИЕ РАДИАЦИОННЫХ ПОВРЕЖДЕНИЙ СПЛАВОВ НА ОСНОВЕ α -ТИТАНА ПОСЛЕ ОБЛУЧЕНИЯ ТИТАНОВЫМИ ИОНАМИ. - Вопросы атомной науки и техники. Серия: Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение. Вып. 2(16), Харьков, ХУТИ АН УССР, 1981, с. 67-61.

Проведено электронно-микроскопическое исследование вакансионного распухания некоторых α -сплавов титана после облучения дозами аргона и хрома дозой 60 мевр./вт. (эквивалентно $\sim 1,5 \cdot 10^{23}$ нейтр./см²) в интервале температур 300-700°C. Установлено, что исследование α -сплавов титана обладает высокой устойчивостью против вакансионного распухания - максимальное увеличение объема при указанных условиях облучения составляет $\sim 0,6\%$ и находится в температурном интервале 450-500°C.

Повышенная устойчивость к распуханию α -сплавов титана связывается с протекаем в них процессов старения, при которых в результате формирования сегрегатов,沉淀物 и т.п. образованы образуются упорядочивание (растворы и сегрегаты) области, связываемые участками усиленной рекомбинации точечных радиационных дефектов. (3 ил., список лит. - 12 назв.).

УДК 539.26:537.534

Аншнев В.М., Пучкович Г.А., Углов В.В. СТРУКТУРНЫЕ ИЗМЕНЕНИЯ В НИКЕЛЕ, ОБЛУЧЕННОМ ИОНАМИ УГЛЕРОДА. - Вопросы атомной науки и техники. Серия: Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение. Вып. 2(16), Харьков, ХУТИ АН УССР, 1981, с. 62-63.

Исследовано влияние облучения ионами углерода с энергией 60 кэВ на структуру повортонных слоев никеля. Исследование проводилось с помощью модифицированного метода предельно асимметричной брэгговской дифракции, в котором использовалось сканирование первичного пучка под малым углом. В качестве второго коллиматора Соллера на дифрактометре использованы держатели с тонкостенными панцильями.

Облучение никеля ионами углерода приводит к существенному изменению межплоскостных расстояний, знак которого зависит от глубины. Значительное влияние на изменение интенсивности рефлексов оказывает текстура. (2 ил., 2 табл., список лит. - 3 назв.).

УДК 537.311:321.31.5

Кива А.Е., Соловьев В.Н. КВАНТОВОХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ АМОРФНОГО Si. - Вопросы атомной науки и техники. Серия: Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение. Вып. 2(16), Харьков, ХУТИ АН УССР, 1981, с. 64-65.

Методом квантовохимического моделирования исследованы равновесные конфигурации и диффузионные процессы в аморфном кремнии. В основе расчета - микрокристаллитная модель аморфной среды. В результате расчета потенциального рельефа для миграции узельных и межузельных примесей сделан вывод о том, что в равнорядоченных средах имеются облегченные условия для перемещения атомов. Это, в частности, обусловлено широким набором неэквивалентных экстремумов различной релаксации. Установлена неуточность узельных положений примесей замещения, что объясняет отсутствие их электрохимической активности. Объяснен эффект рекристаллизации аморфизированных при ионной имплантации слоев. Он связан с неуточностью "глубокой" равнорядоченных структур (когда нарушения "достигают" каждого отдельного тетраэдра), которые фаворизируются переходят в кристаллическую фазу. (1 ил., список лит. - 6 назв.).

УДК 539.16.04

Корнеев А.Е., Колотонова Е.В., Израйленко А.Н., Иваков С.А., Лупченко В.П. ИЗМЕНЕНИЯ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ $C_2N_2O_4$ ПОД ДЕЙСТВИЕМ ИОНИЗИРУЮЩЕГО ОБЛУЧЕНИЯ. - Вопросы атомной науки и техники. Серия: Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение. Вып. 2(16), Харьков, ХУТИ АН УССР, 1981, с. 66-67.

Рентгенодифракционными методами на поли- и монокристаллах исследована возмозможность γ и рентгеновских лучей на структуру нитратов и водородосодержащих соединений. В данном виде радиационно-индуцированные перестройки структуры по высокотемпературному типу наблюдаются в $C_2N_2O_4$. Исследование дозовой зависимости изменения структуры (дозы $(1-3) \cdot 10^{19}$ рад) проводилось на образцах, выращенных из раствора на затравку с добавлением $AgNO_3$ при $T \sim 50^\circ C$, а также на кристаллах, полученных спонтанной кристаллизацией из раствора, содержащего нитрат серебра и без него при $T \sim 50$ и $20^\circ C$ соответственно.

Основным результатом проведенных исследований является вывод о существенном влиянии условий роста (главным образом, скорости роста) на радиационную стойкость кристаллической структуры. (2 ил., 1 табл., список лит. - 2 назв.).

UDC 537.311:621.315

Kiv A.E., Solov'yov V.N. QUANTUM-CHEMICAL SIMULATION OF AMORPHOUS SILICON. Ser. Radiation damage physics and radiation technology. Issue 2(16), Kharkov, KPTI, 1981, p.64-65.

The equilibrium configurations and diffusion processes in amorphous silicon have been investigated by means of the quantum-chemical simulation method. The calculation was carried out with the microcrystalline model of amorphous medium as a basis. The calculation of the potential pattern for the site and interstitial impurity migration suggests the existence of relieved conditions for the atom motion in disordered media. This, in particular, is due to a wide set of interstitials characterized by different relaxations. Instability of the position of substitutional impurities has been found, which fact accounts for the absence of impurity electric activity. The effect of the amorphized layer recrystallization during ion implantation has been explained. It is connected with the instability of "deeply" disordered structures (when the violation approaches each tetrahedron) which transform spontaneously into the crystalline phase. (1 fig., 6 refs.).

UDC 539.16.04

Korneev A.E., Kolontsova E.V., Ivanov S.A., Izraelenko A.N., Iutsenko V.P. CRYSTAL STRUCTURE CHANGES IN CaSO_3 UNDER IONIZING RADIATION. - Voprosy atomnoj nauki i tekhniki. Ser. Radiation damage physics and radiation technology. Issue 2(16), Kharkov, KPTI, 1981, p. 66-67.

The influence of γ - and X-rays on crystal structure of nitrates and hydrogen-containing compounds has been investigated by X-ray diffraction methods. The radiation-induced crystal structure changes of high-temperature type have been discovered with certainty only in CaSO_3 . The dose dependence of crystal structure alteration ($D \sim 1 \cdot 10^{19}$ R) has been investigated for different crystals. The samples have been grown from solutions, some with definite quantity of AgNO_3 , others without it, using inoculating crystals and spontaneous crystallization. The main result of this is the conclusion that the conditions of crystal growth have an important influence on crystal radiation resistance. (2 figs., 1 table, 2 refs.).

UDC 620.187:621.039.531

Zelenakij V.P., Parashin A.M., Beklyudov I.M., Kursevich I.P., Matvienko E.V., Vesina N.K., Voevodin V.N., Kochevnikov O.A., Bryk V.V., Odintsov N.B. A STUDY OF RADIATION DAMAGING OF α -TITANIUM ALLOYS AFTER HEAVY ION IRRADIATION. - Voprosy atomnoj nauki i tekhniki. Ser. Radiation damage physics and radiation technology. Issue 2(16), Kharkov, KPTI, 1981, p. 57-61.

An electron-microscope study has been made of the void swelling of several α -titanium alloys after irradiating them with argon and chromium ions with a dose of 80 dpa (which is equivalent to $\approx 1.5 \cdot 10^{23}$ neutrons/cm²) in the temperature range from 300 to 700°C. It is found that the α -titanium alloys under study have a high resistance to the void swelling: the maximum volume increase under the irradiation conditions specified is $\sim 0.6\%$ and it is observed within the temperature range 450 - 500°C. The enhanced swelling resistance of α -titanium alloys is associated with aging processes at which elastically deformed (stretched and contracted) regions are produced due to the formation of segregates, precipitates, etc. It is just these stressed regions that are the areas of enhanced point defect recombination. (3 figs., 12 refs.).

UDC 539.26:537.534

Anishchik V.M., Gumanukij G.A., Uglov V.V. STRUCTURE MODIFICATIONS IN CARBON-IMPLANTED NICKEL. - Voprosy atomnoj nauki i tekhniki. Ser. Radiation damage physics and radiation technology. Issue 2(16), Kharkov, KPTI, 1981, p. 62-63.

The influence of 60 keV C^+ -ion irradiation on the surface layer structure of nickel is investigated. A modified method of extreme asymmetric Bragg diffraction, in which the incident beam of X-rays strikes the surface at a small angle, is used. In the diffractometer, instead of a second Soller collimator the stand with fine capillars was employed. Implantation of carbon ions into nickel leads to sensible modifications of the interplanar distance of nickel and the sign of that variation depends upon the depth. It is shown that texture strongly influences the diffraction intensity of the lines. (2 figs., 2 tables, 3 refs.).