

МОДЕЛИРОВАНИЕ НА ЭВМ
ДЕФЕКТОВ В КРИСТАЛЛАХ

ЛЕНИНГРАД
1980

АКАДЕМИЯ НАУК СССР
ОРДЕНА ЛЕНИНА
ФИЗИКО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ им. А. Ф. ИОФФЕ

МОДЕЛИРОВАНИЕ НА ЭВМ
ДЕФЕКТОВ В КРИСТАЛЛАХ

Ленинград
1980

А Н Н О Т А Ц И Я

В сборнике содержатся доклады, обзоры и оригинальные сообщения, представленные на УИ, IX, XI и XII заседания Всесоюзного постоянного семинара по моделированию радиационных и других дефектов на ЭИМ. Материалы отражают актуальные вопросы физики реального кристалла и радиационных явлений в кристаллических телах.

ПРЕДИСЛОВИЕ

В настоящем сборнике продолжается публикация материалов Всесоюзного постоянного семинара по моделированию на ЭВМ радиационных и других дефектов в кристаллах. Доклады 6-го и 7-го семинаров опубликованы в 1979 году в аналогичном сборнике.

В 1979 г. проведено два семинара. Восьмой семинар в Алма-Ате /12 — 14 июня 1979 г., ИЯФ АН Каз.ССР/ был посвящен моделированию радиационных дефектов и процессов в металлах и сплавах. В 20 сообщениях содержались результаты расчетов элементарных актов перестройки атомной структуры радиационных дефектов, закономерностей прохождения частиц через вещество. Проведена дискуссия по структуре и эволюции радиационных каскадов, в ходе которой намечены новые задачи для машинного моделирования. Обсуждались также вопросы выбора межатомных потенциалов при машинном моделировании дефектов, создана рабочая группа для разработки рекомендаций по данной проблеме.

16 — 18 октября в Ленинграде /ФТИ им. А. Ф. Иоффе АН СССР/ работал девятый семинар. Обсуждались результаты моделирования дефектов нерадиационного происхождения. Получило дальнейшее развитие моделирование элементарных процессов, определяющих подвижность дислокаций в кристаллах со сложной дефектной структурой и скорость пластической деформации. Проведены расчеты энергий точечных дефектов с применением новых методов электронной теории металлов. Заслушано первое сообщение о машинных расчетах структуры границ зерен. Проведено моделирование процессов пластической деформации в поликристаллах. На этом семинаре было решено создать фонд оттисков опубликованных работ участников семинара, хранящийся в головном институте секции № 5 по математическому моделированию радиационных дефектов в кристаллах

на ЭВМ Научного совета АН СССР по проблеме "Радиационная физика твердого тела" - Физико-техническом институте им. А. Ф. Иоффе АН СССР. Список поступивших оттисков публикуется в настоящем сборнике.

Десятый семинар работал 15 - 17 января 1980 г. в Доме Науки АН Латв. ССР /Лиелупе/ по теме "Моделирование дефектов в щелочно-галогидных и полупроводниковых кристаллах". Основным интересом здесь представляют работы по квантово-химическому моделированию электронных и атомных структур дефектов с вычислением межатомного взаимодействия на каждом временном шаге интегрирования уравнений движения. Ряд сообщений был посвящен уточнению условий квантовохимических расчетов и моделированию кинетики атомных перестроек и комплексообразования. Была отмечена необходимость дальнейшего расширения работ по квантовохимическому моделированию и по совершенствованию кластерных квантовохимических расчетов. Тезисы докладов этого семинара изданы отдельным сборником /см. библиографию по семинару в настоящем сборнике/.

Учитывая положительный опыт Первой Всесоюзной Школы по моделированию дефектов в металлах на ЭВМ, проведенной в 1978 г. в Черногоровке /ИФТТ АН СССР/, и в связи с возрастанием количества работ, а также числа молодых физиков, занимающихся квантовохимическими методами моделирования дефектов в щелочно-галогидных и полупроводниковых материалах, десятый семинар решил провести Вторую Всесоюзную Школу по моделированию дефектов в кристаллах на ЭВМ по теме квантовохимического моделирования весной 1982 года в Одесском государственном университете.

Проблемам моделирования диффузионных и радиационных явлений в кристаллах был посвящен одиннадцатый семинар, проведенный в Свердловске /ИФМ УНЦ АН СССР, 4 - 6 марта 1980 г./ . Как отмечалось в дискуссии на семинаре, при моделировании диффузии наметились две методики: 1/ моделирование методом Монте-Карло и 2/ с использованием уравнений химической кинетики. Можно считать наиболее перспективным направление исследования с помощью ЭВМ самих механизмов диффузии.

На семинаре отмечено, что за период, истекший с восьмого семинара, рабочей группой по разработке рекомендаций по выбору

межатомного потенциала при машинном моделировании дефектов проведена поисковая работа, оформленная в виде следующих рекомендаций.

1. Подгонку параметров межатомных потенциалов осуществлять по постоянной решетки и модулю сдвига C_{44} .
2. Проверку межатомного потенциала осуществлять с помощью:
 - а/ модуля всестороннего сжатия и других модулей;
 - б/ структурного фактора /в точке плавления/;
 - в/ фононного спектра.
3. Употребление парного потенциала межатомного взаимодействия можно считать обоснованным.
4. При машинном моделировании необходимо знание потенциала в максимально широком диапазоне расстояний. Однако, в методических целях необходимо обрезание потенциала при больших межатомных расстояниях - за вторым экстремумом. Спад со второго экстремума делать гладким и обращающимся в нуль вместе с первой производной.
5. Необходимо при конструировании потенциала учитывать бесструктурную часть межатомного взаимодействия.
6. Организовать фонд межатомных потенциалов с описанием способа получения и результатов расчетов с этим потенциалом.

Двенадцатый семинар состоялся 29 - 30 октября 1980 г. в Ленинграде /ФТИ им. А.Ф.Иоффе АН СССР/ по теме "Радиационные эффекты в кристаллах и их моделирование на ЭИМ". Обсуждались вопросы упрощения расчетов структуры каскадов и их отжига с целью охвата всего диапазона энергий, представляющих практический интерес, при сохранении приемлемого времени счета. Рассматривалась актуальная задача о вычислении межатомных потенциалов для примесных атомов.

В данном сборнике публикуются доклады, представленные на 8, 9, 11 и 12 семинарах. Кроме того, публикуется перечень отговсков, поступивших в Фонд семинара, и продолжается публикация аннотированной картотеки программы и библиография по семинару.

Научный руководитель семинара А.Н.Орлов.

Ученый секретарь семинара Ю.В.Трушин.

Соловьев В.Н., Тимошенко Т.Г.

МАШИННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
ГЕНЕРАЦИИ ДЕФЕКТОВ ПРИМЕСНЫМИ КОМПЛЕКСАМИ

Квантовохимическое машинное моделирование динамики дефектов описано в [1], где показано, что кластерная методика ПАКХО (парно-аддитивное квантовохимическое описание) позволяет решать электрон-решеточные задачи в алмазных решетках.

В квазимолекулярном приближении полная энергия квантовоклассического кластера представляется в виде

$$E = \sum \langle \Psi_{ij} | \hat{H} | \Psi_{ij} \rangle + \sum U_{ij}, \quad (1)$$

где Ψ_{ij} - молекулярная орбиталь электронов связи, \hat{H} - двухцентровый гамильтониан, U_{ij} - потенциал Морзе.

Атомные слэтеровские функции уточнялись вариацией орбитальной экспоненты $\alpha(R)$. Угловая часть sp^3 - гибридных атомных орбиталей записывалась в виде

$$Y_i = \sum a_{ij} Y_j. \quad (2)$$

Здесь Y_j - угловые части s - и p - функций,

a_{ij} - гибридные коэффициенты, которые для искаженных структур определялись из условий ортонормировки и максимума перекрытия соседних гибридов.

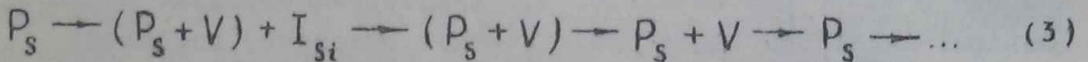
Обсуждается способ разбиения кластера на квантовую и классическую части. Показано, что критерием, позволяющим отнести атомы в область классической периферии могут служить условия малости смещений ΔR атомов ($\Delta R \leq 0,1 R_0$, R_0 - равновесное расстояние в кристалле) и отсутствие существенной деформации углов между связями θ_{ij} ($\Delta \theta_{ij} \leq 2 \div 3^\circ$).

Указанным методом рассчитаны равновесные конфигурации дефектной области в кремнии в окрестности комплексов, содержащих фосфор и алюминий.

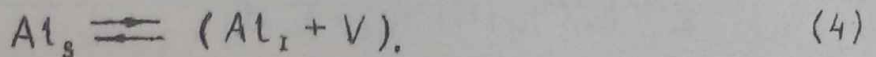
Эффективные адиабатические потенциалы для гетеромолекул $P-Si$, $Al-Si$ строятся [2], исходя из энергии связи,

с учетом возмущения, обусловленного дополнительным зарядом на остове примеси.

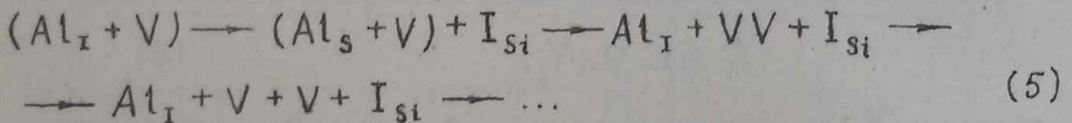
Анализ потенциального рельефа для выхода решеточного кремния в междоузлие (I_{Si}) вблизи узлового фосфора (P_S) приведен в [2]. Нами установлено, что отжиг E-центра высвобождает вакансии и, следовательно, может быть генератором точечных дефектов. Механизм генерации представляется в виде:



Температурный интервал 800-1000К. Для алюминия (Al_s) облегчен выход в междоузлие (Al_I) с образованием метастабильной конфигурации ($Al_I + V$):



Исследование динамики окружения вблизи ($Al_I + V$) показало, что реакция (2) приводит к выбиванию ближайшего собственного атома в междоузлие и трансформации центра ($Al_I + V$) в ($Al_s + V$). Выход Al_s в междоузлие конфигурации ($Al_s + V$) происходит еще эффективнее. Схема переходов имеет вид:



В результате захвата Al_I вакансиями восстанавливается конфигурация Al_s и процессы (4) - (5) повторяются.

Как и в случае фосфора, найдена возможность генерации комплексом ($Al_I + V$) точечных дефектов. Эти механизмы чувствительны к конфигурациям с повернутыми связями [3,4].

Полученные результаты использованы для уточнения механизмов миграции примесей III и V групп в Si, а также расшифровки процессов естественного старения полупроводников и полупроводниковых приборов.

Л и т е р а т у р а

1. А.Е.Кив, В.Н.Соловьев. В сб. "Методические материалы по машинному моделированию дефектов в кристаллах", 59, Кривой Рог, 1978.
2. З.А.Искандерова, А.Е.Кив, В.Н.Соловьев, ФТП, 11, 199 (1977).
3. В.Л.Инденбом. Письма в ЖТФ, 5, 489 (1979).
4. А.Е.Кив, V.N.Soloviev, Phys. Stat. Sol.(b), 94, K91(1979).

В.В.КИРСАНОВ. Вторичные энергетические максимумы динамических краудрионов.....	141
В.Н.СОЛОВЬЕВ, Т.Г.ТИМОШЕНКО. Машинное моделирование генерации дефектов примесными комплексами.....	143
Ю.А.ЗАЙКИН, А.И.КУПЧИШИН. О влиянии градиента температуры на внутреннее трение, обусловленное диффузией вакансий.....	145
А.М.ВАЙСФЕЛЬД, В.А.ЯМНИЦКИЙ. Использование библиотеки каскадных областей, полученной динамическим методом, в расчетах по методу парных соударений.....	147
В.В.ГАНН, О.В.КУДИН. Квазидинамический метод моделирования каскадов атомных столкновений.....	149
В.В.ГАНН, А.М.ВАЙСФЕЛЬД, В.А.ЯМНИЦКИЙ. Применение динамического метода для расчетов подпороговых эффектов в металлах под облучением.....	151
Г.Л.ФАЛЬКО, А.М.ФЕДОРЧЕНКО. Образование дефектов при нейтронном легировании кремния.....	153
Т.Д.ЧЕСНОКОВА, Н.Н.ПУЧЕРОВ, А.Е.БОРЗАКОВСКИЙ. К вопросу об энергетическом страгглинге в твердых и газообразных средах.....	155
Г.Р.ЛУГСТ. Собственные междоузлия в нормальных металлах.....	157
А.И.КУПЧИШИН. Каскадно-вероятностная функция и ее свойства.....	159
А.Е.КИВ, В.Н.СОЛОВЬЕВ. Размножение дефектов при ударном смещении атомов в алмазных решетках.....	161
М.С.ЕЛАНТЕР. Моделирование взаимодействия атомов внедрения и замещения в ОЦК-металлах методом "решеточной статистики".....	163
АННОТИРОВАННАЯ КАРТОТЕКА ПРОГРАММ.....	165
БИБЛИОГРАФИЯ ПО СЕМИНАРУ.....	170
ПЕРЕЧЕНЬ ОПУБЛИКОВАННЫХ РАБОТ УЧАСТНИКОВ СЕМИНАРА, ПОСТУПИВШИХ В ФОНД ОТТИСКОВ.....	171

МОДЕЛИРОВАНИЕ НА ЭВМ ДЕФЕКТОВ В КРИСТАЛЛАХ

Материалы Всесоюзного постоянного семинара
по моделированию радиационных и других дефектов на ЭВМ
подготовлены к печати Ю.В.ТРУШИНЫМ

Лит.редакторы: Н.С.Морозова, И.А.Слободян

РГП ЛИЯФ, зак.69, тир.500, уч.-изд.л.8; 24/ХП-1980, М-11266
формат 60x84 I/16
Цена 80 коп.