

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 обращаемся 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.

РАЗМНОЖЕНИЕ ДЕФЕКТОВ ПРИ УДАРНОМ СМЕЩЕНИИ АТОМОВ В АЛМАЗНЫХ РЕШЕТКАХ

Машинное моделирование ударного смещения атома в Si на основе попарно-аддитивного квантовохимического описания (ПАК-ХО) позволило уточнить схему ударного дефектообразования [1], выявить эффект демпфирования [2] и найти механизм перескока ориентационных дефектов (ОД) [3]. Этот механизм перескока рассматривался в [3] для решетки сфалерита.

На рисунке показана схема релаксации ОД в решетке вюрцита. В рассмотренной ситуации от одного атомного смещения может стартовать образование до девяти ОД, а затем обычных точечных дефектов. Этот результат дает новые основания для трактовки большого разброса энергии смещения E_d (см. например, [4]),

Образование ОД в окрестности атома А приводит к значительной деформации связей BE, СК и DL и подтягиванию атомов E, K, L к ОД. В процессе отжига происходит образование конфигураций с повернутыми связями одновременно в трех местах E', K', L' (размножение дефектов).

Можно объяснить некоторую специфику структуры подпороговых дефектов. Рассматривая этот вопрос, нужно исходить из возможных путей дефектообразования в подпороговой области энергий. В случае подпорогового удара процесс физически протекает так же, как при обычном упругом рассеянии внешних частиц в области порога. В зависимости от перераспределения заряда в результате оже-процесса, от которого стартуют механизмы подпорогового дефектообразования, получаются и разные ОД. В частности, кроме рассмотренной конфигурации вакансии с повернутыми связями, при симметричном распределении заряда между остовами возможно образование дивакансии с неразорванными связями. Как показывают исследования потенциального рельефа для трансформации ОД, они неустойчивы при комнатной температуре и выше. Относительно перехода ОД → ТД (ТД - точечный дефект) можно заметить, что он происходит вследствие предиссоциации деформи-

рованных химических связей.

Что касается влияния примесей на стабилизацию подпорогового дефекта, оно существенно зависит от того, остановится ли дефект на стадии ОД или перейдет в ТД. В первом случае, видимо, за счет миграции примесного атома может произойти захват ОД. Если же произошел переход $ОД \rightarrow ТД$, роль примеси ограничивается обычным участием во вторичных диффузионно-контролируемых реакциях.

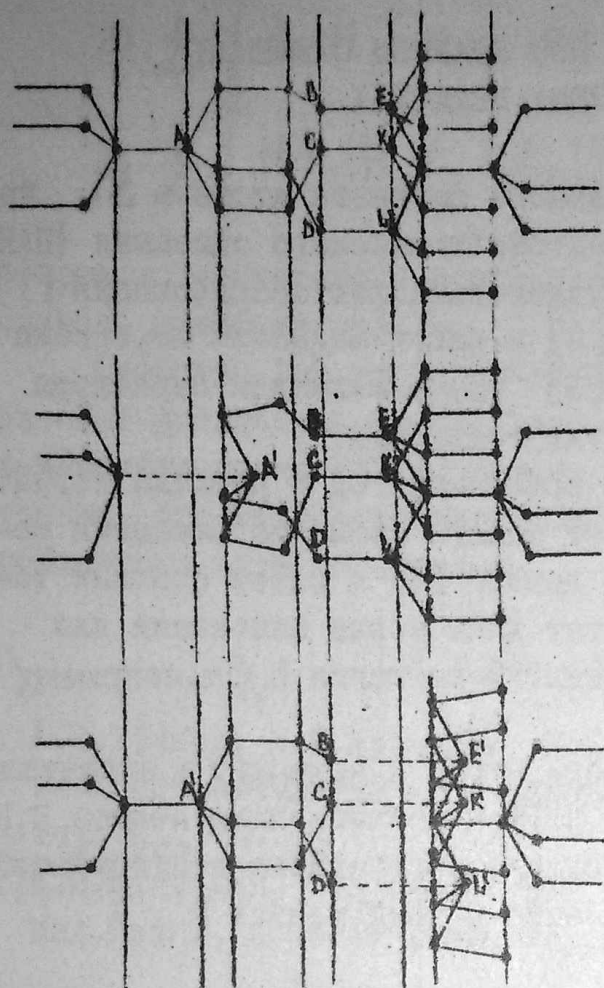


Рис.

Л и т е р а т у р а

1. Кив А.Е., Соловьев В.Н. Искаженные структуры в алмазных решетках - в сб.: Методические материалы по машинному моделированию дефектов в кристаллах, Кривой Рог, с.59, 1978.
2. Кив А.Е., Соловьев В.Н. - ФТП, т. II, с.1657, 1977.
3. Kiv A. E., Soloviev V. N. - *Phys. Stat. Sol. (b)*, 1979, v. 94, p. K91
4. Витовский Н.А., Мустафакулов Д., Чекмарева А.П. - ФТП, т. II, с.1747, 1977.

БИБЛИОГРАФИЯ ПО СЕМИНАРУ

Продолжается публикация кратких обзоров доложенных на семинарах работ в разделе "Информация" журнала "Атомная энергия" и в переводе - в разделе "Tagungen" журнала "Kernenergie" /ГДР/.

1. "Седьмой семинар по моделированию на ЭВМ радиационных и других дефектов в твердых телах", Ю.В.Трушин, "Атомная энергия", 47, 143 /1979/.
2. "Восьмой семинар по моделированию радиационных и других дефектов на ЭВМ", А.Н.Орлов, Ю.В.Трушин, "Атомная энергия", 48, 278 /1980/.
3. "Девятый семинар по моделированию радиационных и других дефектов на ЭВМ", Ю.В.Трушин, "Атомная энергия", 48, 412 /1980/.
4. V.Seminar über Computerberechnung von Strahlungserzeugten und anderen Fehlstellen, A.N.Orlov, Yu.V.Trushin, "Kernenergie", 22, 247 /1979/.
5. V1. Seminar über Computerberechnung von Strahlungserzeugten und anderen Fehlstellen, A.N.Orlov, Yu.V.Truschin, "Kernenergie", 22, 365 /1979/.
6. V11. Seminar über Computerberechnung von Strahlungserzeugten und anderen Fehlstellen, A.N.Orlov, Yu.V.Truschin, "Kernenergie", 23, 201 /1980/.

Материалы семинара опубликованы

1. "Моделирование на ЭВМ дефектов в кристаллах. I". Материалы Всесоюзного постоянного семинара по моделированию радиационных и других дефектов на ЭВМ, Ленинград, ФТИ им.А.Ф.Иоффе АН СССР, 1979.
2. "Десятое заседание Постоянного семинара по моделированию радиационных и других дефектов в кристаллах". Тезисы докладов, Лиелупе, 15-17 января 1980 г.
3. Лекции, прочитанные в Первой Всесоюзной школе по моделированию дефектов в металлах на ЭВМ /Черноголовка, 1978 г./, изданы в виде книги "Дефекты в кристаллах и их моделирование на ЭВМ", Ленинград, "Наука", 1980 г.

В.В.КИРСАНОВ. Вторичные энергетические максимумы динамических краудионов.....	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.