

03,04

## Формирование фторсодержащих дефектов и нанокристаллов в SiO<sub>2</sub> при имплантации ионов фтора, кремния и германия: компьютерное моделирование и фотолюминесцентная спектроскопия

© О.П. Гуськова<sup>1,2</sup>, В.М. Воротынец<sup>1</sup>, Н.Д. Абросимова<sup>2</sup>, А.Н. Михайлов<sup>3</sup>,  
Д.И. Тетельбаум<sup>3</sup>, Е.Л. Шоболов<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Нижегородский государственный технический университет им. Р.Е. Алексева,  
Нижний Новгород, Россия

<sup>2</sup> Институт измерительных систем им. Ю.Е. Седакова,  
Нижний Новгород, Россия

<sup>3</sup> Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,  
Нижний Новгород, Россия

E-mail: vlad@vorotyn.nnov.ru, smelovaop@mail.ru

(Поступила в Редакцию 28 апреля 2015 г.)

Выполнено компьютерное моделирование процессов встраивания атомов фтора в решетку диоксида кремния при ионной имплантации F<sup>+</sup> и формирования нанокристаллов кремния (германия) в SiO<sub>2</sub> при ионной имплантации Si<sup>+</sup> (Ge<sup>+</sup>). Расчеты для F проводились методом функционала плотности DFT, а для Si и Ge — путем сочетания методов DFT (в кластерном приближении) и Монте-Карло.

Установлена энергетическая выгодность присоединения атомов фтора к одному из атомов кремния с образованием немостикового атома кислорода (НАК) и возникновением энергетического уровня в запрещенной зоне. В случае ионной имплантации моделирование при концентрации растворенных атомов Si (Ge) ~ 2 at.% демонстрирует образование нанокристаллов (НК) со средним размером ~ 1 nm.

Работа выполнена при поддержке Минобрнауки России в рамках государственного задания (№ 3.285.2014/К), в рамках проектной части государственного задания в сфере научной деятельности проект № 10.695.2014/К.

### 1. Введение

Пленки диоксида кремния SiO<sub>2</sub> являются важной составной частью многих электронных приборов. Состав, концентрация и распределение дефектов в SiO<sub>2</sub> в ряде случаев играют определяющую роль в функционировании приборов и в их поведении при внешних воздействиях. Так, чувствительность параметров интегральных схем на основе МОП-транзисторов (в том числе изготовленных на структурах типа „кремний на изоляторе“) к действию ионизирующих излучений (ИИ) связана с наличием в SiO<sub>2</sub> ловушечных центров для дырок [1,2]. Другой вид структур, для которых состояние системы дефектов и влияние на нее радиации играют ключевую роль, — это элементы резистивной памяти — нового класса электронных приборов (мемристоров) [3].

Одним из эффективных способов управления состоянием системы дефектов в диоксиде кремния является ионная имплантация. Установлено, что имплантация в слой SiO<sub>2</sub> МОП-транзисторов ионов F<sup>+</sup>, Si<sup>+</sup>, Ge<sup>+</sup>, N<sup>+</sup> позволяет вводить в диэлектрик электронные ловушки, которые компенсируют захват дырок при воздействии ИИ, и тем самым снижают чувствительность параметров к облучению [4,5].

В связи с указанным приобретает все большую актуальность знание микроскопических (атомарных) механизмов влияния ионной имплантации на характер дефектной и электронной систем в SiO<sub>2</sub>. Между тем, атом-

ная структура, энергетика их формирования и электронные свойства дефектных центров, возникающих в результате ионной имплантации, изучены недостаточно.

С целью выяснения механизмов влияния имплантации ионов F<sup>+</sup>, Si<sup>+</sup>, Ge<sup>+</sup> в слой SiO<sub>2</sub> на чувствительность к воздействию ИИ в настоящей работе путем компьютерного моделирования с применением методов квантовой химии определено наиболее выгодное энергетически положение встроеного атома фтора в SiO<sub>2</sub>, и рассчитан соответствующий энергетический спектр электронов. Сочетая методы квантовой химии (DFT) и Монте-Карло, смоделированы процессы встраивания избыточных по отношению к стехиометрическому SiO<sub>2</sub> атомов Si, Ge в кремнийкислородные тетраэдры и последующего формирования кремниевых (германиевых) нанокластеров — центров захвата электронов (ЦЗЭ). Методом спектроскопии фотолюминесценции (ФЛ) исследована дефектная структура пленок SiO<sub>2</sub>/Si, подвергнутых ионной имплантации F<sup>+</sup>, Si<sup>+</sup>, Ge<sup>+</sup>. Подтверждено возникновение в SiO<sub>2</sub> при ионной имплантации фтора дефектов типа немостиковых атомов кислорода, также служащих ЦЗЭ. (Предварительные результаты моделирования для случая имплантации фтора ранее изложены в [6,7].)

### 2. Компьютерное моделирование

Используемые нами алгоритмы компьютерного моделирования процессов в SiO<sub>2</sub> при введении дополни-

тельных примесных атомов основаны на расчете энергетической выгодности той или иной атомной конфигурации (ближнего порядка), а также (для случая имплантации F<sup>+</sup>) — расчете энергетического спектра электронов для наиболее выгодной энергетически конфигурации. Такой подход не претендует на строгость, но позволяет адекватно интерпретировать имеющиеся экспериментальные данные.

Хотя применяемые в микроэлектронике пленки SiO<sub>2</sub> обычно аморфны, при компьютерных расчетах мы исходим из решетки кристаллической модификации диоксида кремния — β-кristобалита [8]. Это оправдано тем, что энергетика диоксида кремния определяется в основном ближним порядком, который в аморфном диоксиде кремния практически идентичен с ближним порядком в β-кristобалите: в обоих случаях структура представляет собой систему тетраэдров Si–O<sub>4</sub>, соединенных между собой вершинами.

Перейдем к изложению метода и результатов расчетов для случая внедрения фтора. Расчет полных энергий бездефектной и фторсодержащей ячейки производился методом функционала плотности (DFT) [9] в пределах обобщенного градиентного приближения (GGA) с использованием ультрамягкого псевдопотенциала в параметризации Perdew–Wang [10] (энергия отсечки 20 Ry). Проводилась релаксация положений атомов в элементарной ячейке: положения всех атомов изменялись до тех пор, пока силы, действующие на каждый атом, не снизятся до 10<sup>-2</sup> eV/Å. Использовалась сетка Монхорста–Пака размерностью (2 × 2 × 2), для вычисления полной электронной плотности проводилось интегрирование по первой зоне с учетом весовых коэффициентов k-точек. Моделирование осуществлялось в программном пакете [11].

В элементарной ячейке β-кristобалита содержится 8 формульных единиц SiO<sub>2</sub>, так что формула его бездефектной ячейки — Si<sub>8</sub>O<sub>16</sub>. Возможны два случая встраивания атома фтора в решетку: он либо замещает один из атомов кислорода в ячейке (тогда формула ячейки запишется в виде Si<sub>8</sub>O<sub>15</sub>F), либо присоединяется к одному из атомов кремния с образованием дефекта типа немостикового атома кислорода (НАК) — в этом случае формула имеет вид Si<sub>8</sub>O<sub>16</sub>F. Соответствующая разность энергий (ΔE) системы SiO<sub>2</sub>:F, приходящаяся на одну ячейку

$$\Delta E = E_2 - E_1 - E_0, \quad (1)$$

где E<sub>1</sub> и E<sub>2</sub> — энергии ячеек Si<sub>8</sub>O<sub>15</sub>F и Si<sub>8</sub>O<sub>16</sub>F соответственно, E<sub>0</sub> — энергия изолированного атома кислорода.

Расчитанные значения этих величин приведены в табл. 1, из которой видно, что величина ΔE отрицательна. Отсюда следует, что второй механизм встраивания фтора энергетически более выгоден, и его реализация при ионной имплантации F<sup>+</sup> более вероятна по сравнению с первым механизмом.

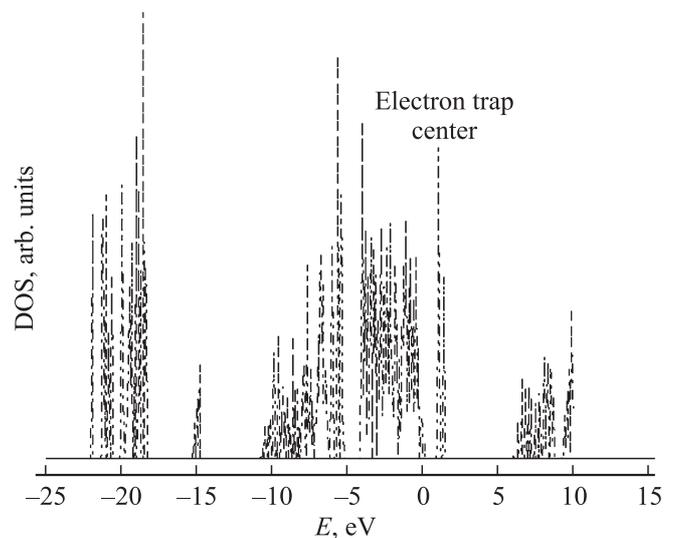
Полученный при расчете энергетический спектр внешних электронов для Si<sub>8</sub>O<sub>16</sub>F приведен на рис. 1. На нем энергия электронов отсчитывается от потолка

**Таблица 1.** Полная энергия ячеек, рассчитанная в приближении DFT

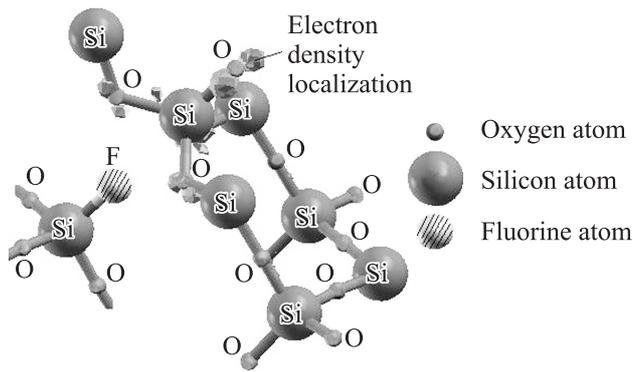
Эмпирическая формула	Энергия, eV
Si <sub>8</sub> O <sub>16</sub> F	–8451.290
Si <sub>8</sub> O <sub>15</sub> F	–8018.202
O	–427.061

валентной зоны. Наиболее важным результатом моделирования является появление внутри запрещенной зоны (вблизи потолка валентной зоны) дополнительных энергетических уровней. В случае генерации ИИ электронно-дырочных пар эти уровни служат центрами захвата (ловушками) электронов, компенсируя тем самым центры захвата дырок, связанные с исходными дефектными состояниями в SiO<sub>2</sub> и обеспечивая снижение чувствительности к ИИ имплантированных фтором структур. На рис. 2 приведена расчетная картина распределения электронной плотности на связях ячейки Si<sub>8</sub>O<sub>16</sub>F с одним захваченным электроном. Из рис. 2 следует, что в этом случае заряд электронов локализуется в основном на кремниевокислородном тетраэдре, содержащем однокоординированный атом кислорода.

Рассмотрим теперь случай ионной имплантации Si<sup>+</sup> и Ge<sup>+</sup>. Существуют публикации, например [12,13], свидетельствующие о том, что имплантация этих ионов с последующим отжигом приводит к уменьшению чувствительности МОП/КНИ структур к ИИ. В [12] делается вывод, что причиной этого в случае имплантации Si<sup>+</sup> является формирование нанокристаллов Si, служащих центрами захвата электронов. В [13] установлено, что уже при дозе Si, соответствующей средней концентрации избыточных атомов Si в переходной Si/SiO<sub>2</sub> области



**Рис. 1.** Полная плотность электронных состояний, рассчитанная для фторсодержащей ячейки β-кristобалита Si<sub>8</sub>O<sub>16</sub>F. Энергия E отсчитывается от потолка валентной зоны.



**Рис. 2.** Пространственное распределение отрицательного заряда электрона в ячейке диоксида кремния, содержащей атом фтора. Атомы Si обозначены крупными сферами, O — мелкими, атом F выделен штриховкой.

МОП-транзисторов, равной ~ 2 at.%, наблюдается значительное уменьшение чувствительности к ИИ. Однако оставалось не ясным, возможно ли формирование нанокристаллов Si при столь низких концентрациях избыточного кремния. Для выяснения этого нами выполнено моделирование, описанное ниже. В случае имплантации ионов Ge<sup>+</sup> расчеты производились аналогичным образом и дали качественно те же результаты, что и для имплантации Si<sup>+</sup>.

Предположим, что до отжига внедренные (избыточные по отношению к стехиометрическому SiO<sub>2</sub>) атомы кремния замещают атомы кислорода, образуя кислород-дефицитные тетраэдры. В процессе отжига происходит случайное блуждание (диффузия) атомов Si и/или O по „решетке“, в результате чего создаются локальные скопления избыточных атомов Si, формирующие нанокристаллы кремния внутри матрицы SiO<sub>2</sub>, т.е. происходит фазовое разделение (распад) нестехиометрического оксида SiO<sub>x</sub> на стехиометрический SiO<sub>2</sub> и элементарный кремний. При моделировании этого процесса методом Монте-Карло используем алгоритм, заключающийся в разыгрывании последовательности элементарных актов изменения концентрации избыточных атомов кремния в каждой элементарной ячейке диоксида кремния. Вероятности этих актов (в одном и другом направлениях) определяются разностью энергий ячейки до и после их совершения [14]. При этом избыточный атом Si может встраиваться в те ячейки, где уже находятся или отсутствуют другие избыточные атомы.

Для моделирования по данному способу необходимо сначала произвести расчет величин изменений энергии ячейки для соответствующих актов. Как и ранее в случае фтора, вместо случайной сетки аморфного SiO<sub>2</sub> будем рассматривать решетку кристаллической фазы — β-кворталита. В стехиометрическом SiO<sub>2</sub> центральный атом кремния в каждом тетраэдре, из которого построена решетка, имеет четыре соседних атома кислорода. В этом случае принято считать, что степень окисления n = 4. Если в тетраэдре содержится один избыточный

атом Si, то n = 3 и т.д.; для элементарного кремния n = 0.

Для расчета методом DFT знака и величины изменения энергии ячейки при изменении числа n нами был взят представительный кластер, состоящий из двух сцепленных тетраэдров. Вычисления выполнялись с помощью программного пакета [15].

Оборванные связи, образованные краевыми атомами кластера, пассивировались путем присоединения к ним групп SiH<sub>3</sub> или H [16]. Изменения энергии рассчитывались по способу, описанному в [17,18]. Определялись разности энергии системы, состоящей из кластера и отдельного атома кислорода (состояние до встраивания атома O), и энергии кластера, содержащего встроенный атом O. (В данной схеме для удобства принято, что изменение n связано с встраиванием именно атомов кислорода; однако, конечный результат не зависит от того, рассматривается ли встраивание кислорода или кремния). При расчете вероятностей переходов с изменением n важны не абсолютные, а относительные значения изменений энергии при встраивании. Нами определялись величины разностей изменений энергии кластеров при переходах (n = 0) → (n = 1) и n → (n + 1) с n > 0. Полученные значения ΔE приведены в табл. 2.

Из табл. 2 следует, что если в тетраэдре уже есть 2 или 3 избыточных атома кремния, то возрастание числа избыточных атомов Si в этом тетраэдре энергетически выгодно. Из этого обстоятельства следовало ожидать, что распад SiO<sub>x</sub> на SiO<sub>2</sub> и Si выгоден. Чтобы проверить это при малых концентрациях избыточного кремния, с применением метода Монте-Карло производился следующий этап расчетов. Брался квазидвумерный кристалл, состоящий из 60 × 60 ячеек β-кворталита. Разыгрывались адреса тех ячеек, в которых первоначально находятся избыточные атомы кремния при заданной средней концентрации этих атомов (мы брали 2 at.%) и их случайном распределении. Затем для каждой ячейки разыгрывались акты повышения и понижения степени окисления n. Вероятности этих актов P(+) и P(−) соответственно определялись из соотношений

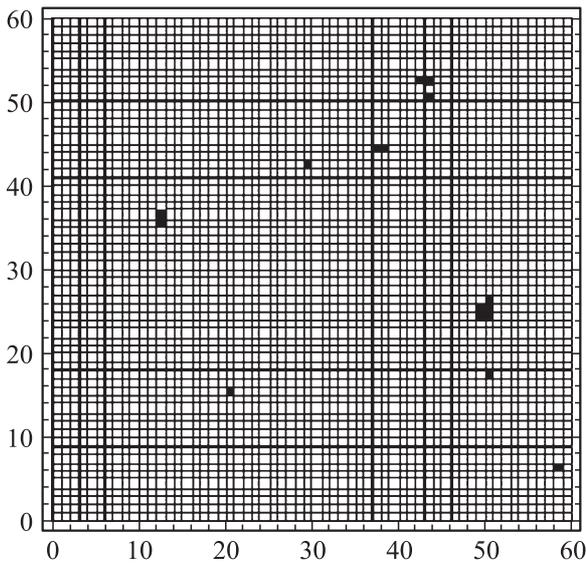
$$P(+)=1/[1+\exp(-\Delta E_{n,n+1})/kT], \tag{2}$$

$$P(-)=1/[1+\exp(\Delta E_{n,n+1})/kT]. \tag{3}$$

Здесь T — абсолютная температура, k — постоянная Больцмана. Эти соотношения выводятся из теории метода Монте-Карло в статистической физике [19].

**Таблица 2.** Значения полных энергий кремниевокислородных представительных кластеров

n	E <sub>n</sub> , eV	E <sub>n+1</sub> , eV
0	-62561.659	-64579.491
1	-66597.731	-68616.270
2	-70634.347	-72653.648
3	-74671.806	-76691.053



**Рис. 3.** Графическое представление установившегося распределения „лишних“ атомов кремния при концентрации  $\sim 2$  at.%. Почернением отмечена степень окисления атомов: белый цвет ячейки соответствует степени окисления +4, черный — 0.

Результатом розыгрыша является новое распределение избыточных атомов Si по ячейкам. Цикл расчета повторяется многократно до тех пор, пока не будет достигнуто квазистационарное пространственное распределение. Полученное распределение приведено на рис. 3. Видно наличие одиночных и сгруппированных в кластеры ячеек с  $n = 0$ . Такое распределение означает, что произошел распад  $\text{SiO}_x$  и сформированы нанокластеры элементарного кремния. Объем нанокластеров (нанокристаллов) в сферическом приближении соответствует среднему диаметру  $d \approx 1$  нм.

Заметим, что примененный нами подход отличается от подхода, в котором методом Монте-Карло прослеживаются траектории диффундирующих атомов [20,21]. Особенностью нашего подхода является то, что он не требует знания энергетических барьеров для элементарных скачков атомов и энергий границ раздела нанокристаллов Si с матрицей, т.е. введения понятия критического зародыша. Фактически моделируется не кинетика процесса, а фазовое равновесие. Используемый здесь алгоритм предсказывает лишь конечное состояние системы при достаточно длительном отжиге, но не дает ответа на вопрос, какие температуры и длительности отжига требуются для достижения такого состояния. Из литературных данных (см., например, [22]) известно, что при температуре отжига  $1100^\circ\text{C}$  для распада системы  $\text{SiO}_x$  требуется время порядка нескольких минут.

Таким образом, наш расчет подтверждает предположение о том, что уже при концентрации избыточного Si  $\sim 2$  at.% формирование нанокристаллов кремния является энергетически выгодным. Аналогичный вывод следует и для случая имплантации в  $\text{SiO}_2$  ионов германия.

### 3. Фотолюминесцентная спектроскопия слоев $\text{SiO}_2$ , подвергнутых ионной имплантации

С целью экспериментального исследования дефектной структуры слоев  $\text{SiO}_2$  до и после имплантации ионов  $\text{F}^+$ ,  $\text{Si}^+$  и  $\text{Ge}^+$  применялся метод спектроскопии ФЛ. Пленки  $\text{SiO}_2$  с толщиной 300 нм, выращенные на кремнии путем термического окисления при температуре  $1100^\circ\text{C}$ , облучались ионами  $\text{F}^+$  (60 keV) с дозами  $5 \cdot 10^{14}$  и  $10^{16} \text{ cm}^{-2}$ , ионами  $\text{Si}^+$  (60 keV) с дозами  $5 \cdot 10^{13}$  и  $10^{16} \text{ cm}^{-2}$ , и ионами  $\text{Ge}^+$  (80 keV) с дозами  $5 \cdot 10^{13}$  и  $10^{16} \text{ cm}^{-2}$ . Измерения ФЛ проводились в диапазоне длин волн 350–900 нм до отжига до и после воздействия ИИ, при возбуждении импульсным азотным лазером на длине волны 337 нм. Оптическая схема включала длиннофокусную линзу, фокусирующую лазерный пучок на образце (диаметр светового пятна  $\sim 1$  мм), конденсор, собирающий излучение ФЛ на входной щели монохроматора, и фотоумножитель с оптимальной чувствительностью в интервале длин волн 350–870 нм. Перед входной щелью монохроматора устанавливался фильтр из стекла, не пропускающий свет с длинами волн менее 360 нм, чтобы отсеять рассеянное излучение от лазера. В монохроматоре использовалась дифракционная решетка с 600 gr/mm и рабочим диапазоном длин волн 350–900 нм.

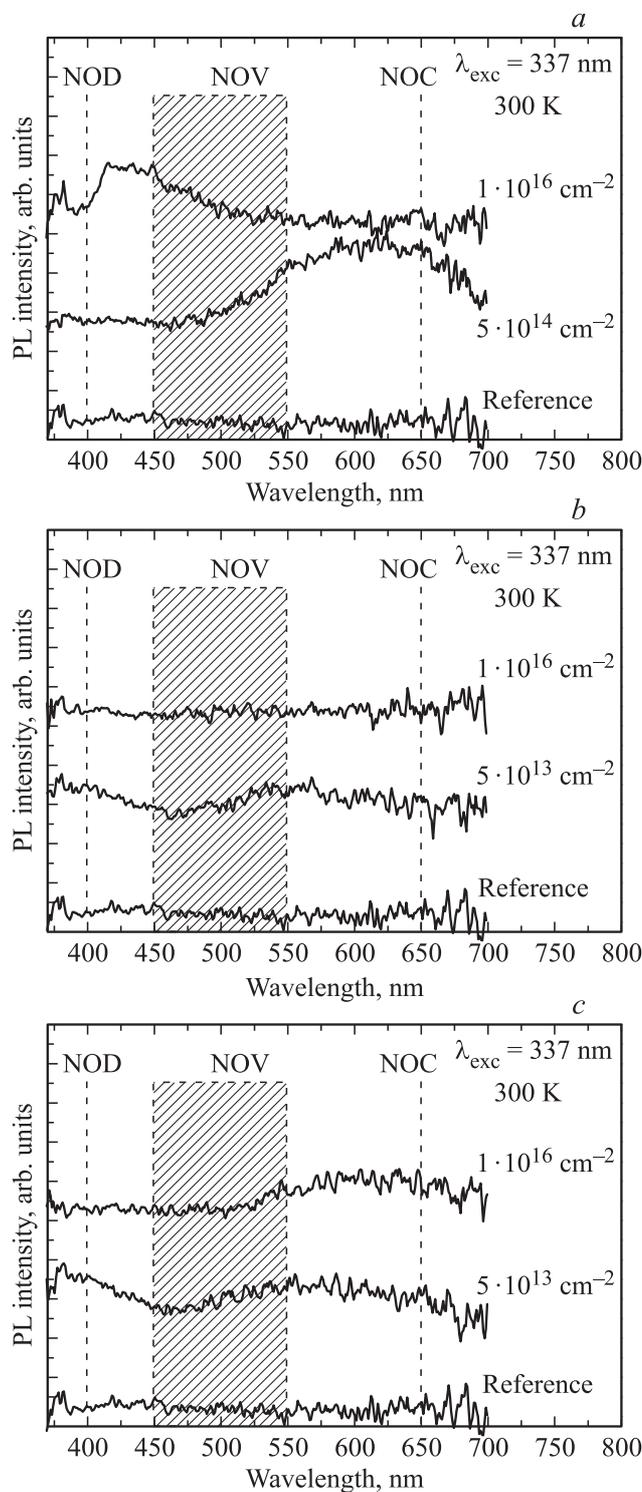
К основным дефектам, излучающим свет в исследуемой области спектра, относятся нейтральные кислородные дивакансии (НКД, NOD) — максимум интенсивности ФЛ при  $\sim 400$  нм, нейтральные кислородные моновакансии (НКМ, NOV) — максимум в диапазоне 450–550 нм, немостиковый атом кислорода (НАК, NOC) ( $\sim 650$  нм) [23].

Как видно из рис. 4, модификация диоксида кремния путем имплантации ионов фтора с дозой  $5 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-2}$  уже без отжига приводит к появлению широкого пика ФЛ в области при 550–750 нм, который по своему положению близок к пику НАК. Это согласуется с приведенными выше данными расчета, согласно которым наличие примеси фтора приводит к формированию НАК (рис. 2). Тот факт, что из трех примесей в отсутствие отжига только для фтора появляется выраженный пик, обусловленный НАК, свидетельствует в пользу „химического“ влияния имплантированного фтора на образование этого пика и служит подтверждением приведенной выше расчетной модели.

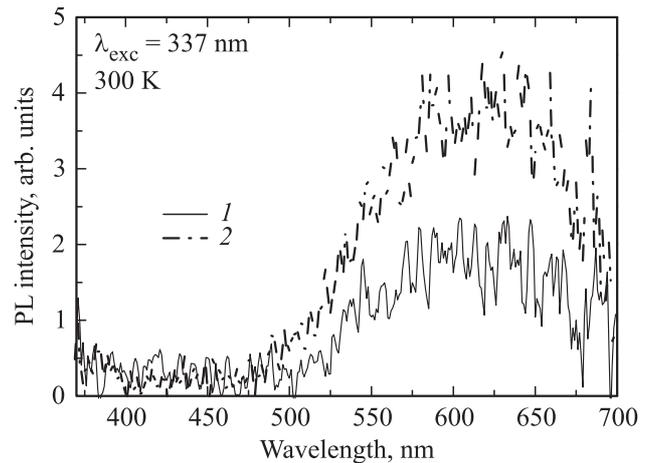
Пленки  $\text{SiO}_2$ , имплантированные ионами  $\text{Si}^+$  и  $\text{Ge}^+$  с дозой  $5 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ , обнаруживают полосы ФЛ, которые можно приписать излучению НКМ и НКД (рис. 4, b, c). Характерный для нанокристаллов Si пик в районе 800 нм [24] отсутствует. Это не удивительно, так как для формирования нанокристаллов необходим высокотемпературный отжиг. Такой отжиг не требуется для образования точечных дефектов типа НКД, НКМ, НАК. С ростом дозы имплантации пики ФЛ ослабевают или

вовсе исчезают вследствие конкурирующего влияния радиационных дефектов — центров безызлучательной рекомбинации.

Интересным результатом, полученным методом ФЛ для слоев диоксида кремния, подвергнутых ионной



**Рис. 4.** Спектры ФЛ образца исходной пленки SiO<sub>2</sub> и пленок SiO<sub>2</sub>, облученных ионами F<sup>+</sup> (a), Si<sup>+</sup> (b), Ge<sup>+</sup> (c) в различных режимах.



**Рис. 5.** Сравнение спектров ФЛ диоксида кремния, облученных ионами Si<sup>+</sup> дозой  $1 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-2}$  до (1) и после воздействия ионизирующего излучения (2).

имплантации Si<sup>+</sup>, F<sup>+</sup> после воздействия ИИ является модификация ФЛ дефектных центров (рис. 5). Образцы, модифицированные ионами Ge<sup>+</sup> оказались менее подверженными изменению спектров ФЛ.

#### 4. Заключение

Расчеты методом DFT предсказывают, что при ионной имплантации фтора в SiO<sub>2</sub> возможно формирование дефектов, способных служить центрами захвата электронов. Это подтверждается данными ФЛ. Методом квантово-химического и Монте-Карло моделирования проведен анализ возможности формирования и оценен средний размер нанокластеров Si, Ge в SiO<sub>2</sub> при концентрациях избыточных атомов, ранее определенных в ионно-имплантированных структурах методом вторично-ионной масс-спектрометрии [7]. Получено, что за счет пространственного перераспределения лишних атомов Si и Ge (с концентрацией  $\sim 2 \text{ at.}\%$ ) в слое SiO<sub>2</sub> могут образовываться нановключения, которые имеют размеры  $\sim 1 \text{ nm}$ . Последние могут служить центрами захвата электронов при воздействии ИИ. Результаты измерения фотолуминесценции показали, что при имплантации ионов фтора в пленки SiO<sub>2</sub> уже в отсутствие отжига возникает пик, полоса излучения, близкая по положению к полосе, связанной с немостиковым атомом кислорода. Этот результат подтверждает данные квантово-химического моделирования. Более высокая чувствительность к ИИ спектров ФЛ структур SiO<sub>2</sub>/Si с модифицированным имплантацией F<sup>+</sup> диэлектриком может объясняться меньшей энергией активации диффузии F в SiO<sub>2</sub> (по сравнению с Si, Ge), что приводит к радиационной перестройке дефектных центров типа НАК.

Приведенные результаты позволяют судить о механизмах повышенной устойчивости слоев SiO<sub>2</sub>, подвергнутых имплантации F<sup>+</sup>, Si<sup>+</sup>, Ge<sup>+</sup>, к воздействию ИИ.

## Список литературы

- [1] В.С. Першенков, В.Д. Попов, А.В. Шальнов. Поверхностные радиационные эффекты в ИМС. Энергоатомиздат, М. (1988). 255 с.
- [2] Д.В. Николаев, И.В. Антонова, О.В. Наумова, В.П. Попов, С.А. Смагулова. ФТП **38**, 443 (2003).
- [3] J.J. Yang, M.D. Picket, X. Li, D.R. Steward, R.S. Williams. Nat. Nanotechnol. **3**, 429 (2008).
- [4] Д.И. Тетельбаум, Н.Д. Абросимова, А.Н. Михайлов, О.П. Смелова. Тез. докл. VII Междунар. конф. „Кремний-2010“. Н.Новгород, 109 (2010).
- [5] S.M.S. Rauthan, G.S. Viridi, B.C. Pathak, A.J. Karthigeyan. Appl. Phys. **83**, 3668 (1998).
- [6] О.П. Гуськова, В.М. Воротынцева, М.А. Фаддеев, Н.Д. Абросимова. Вестн. ННГУ **1**, 43 (2013).
- [7] Е.Л. Панкратов, О.П. Гуськова, М.Н. Дроздов, Н.Д. Абросимова, В.М. Воротынцева. ФТП **48**, 631 (2014).
- [8] Е.В. Чупрунов, А.Ф. Хохлов, М.А. Фаддеев. Кристаллография. ИФМЛ, М. (2000). 494 с.
- [9] В. Кон. УФН **172**, 336 (2002).
- [10] J.P. Perdew, Y. Wang. Phys. Rev. B **45**, 13244 (1992).
- [11] Quantum ESPRESSO home page <http://www.quantum-espresso.org/>
- [12] E. Zhang, J. Sun, Z. Zhang, C. Qian, J. Jiang, X. Wang, Y. En, H. Luo, Q. Shi, X. Zhang. Semicond. Sci. Technol. **21**, 287 (2006).
- [13] Н.Д. Абросимова, М.Н. Минеев, В.К. Киселев, О.П. Гуськова. Тезисы докл. Российско-Белорусской науч.-техн. конф. „Элементная база отечественной радиоэлектроники“, Н. Новгород, Ч. 2, 71 (2013).
- [14] N. Metropolis, A. Rosenbluth, M. Roesenbluth, A. Teller, E. Teller. J. Chem. Phys. **21**, 1087 (1953).
- [15] M.J. Frisch, G.W. Trucks, H.B. Schlegel. Gaussian 03, Revision C.01, Gaussian, Inc. Wallingford CT (2004).
- [16] Ю.И. Горлов, В.А. Засц, А.А. Чуйко. Теоретическая и экспериментальная химия **5**, 533 (1986).
- [17] A. Chatterjee, T. Iwasaki, T. Ebina. Int. J. Mol. Sci. **2**, 40 (2001).
- [18] Т.В. Перевалов, А.В. Шапошников, В.А. Гриценко. Изв. РГУ им. А.И. Герцена **79**, 164 (2009).
- [19] Методы Монте-Карло в статистической физике / Под ред. К. Биндер. Мир, М. (1982). 400 с.
- [20] А.В. Зверев, И.Г. Неизвестный, Н.Л. Шварц, З.Ш. Яновицкая. Рос. нанотехнологии **3**, 175 (2008).
- [21] А.Ф. Лейер, Л.Н. Сафронов, Г.А. Качурин. ФТП **33**, 389 (1999).
- [22] A. Barranco, F. Yubero, J.P. Espinos, J.P. Holgado, A. Caballero, R. Gonzalez-Eliphe, J.A. Mejias. Vacuum **67**, 491 (2002).
- [23] K. Kajihara, L. Skuja, M. Hirano, H. Hosono. Appl. Phys. Lett. **79**, 1757 (2001).
- [24] T. Gao, S. Tong, X. Wu, X. Bao, G.G. Siu. Phys. Lett. A **253**, 234 (1999).