

БИСТАБИЛЬНЫЕ КОМПЛЕКСЫ ДЕФЕКТОВ С УГЛЕРОДНОЙ КОМПОНЕНТОЙ В КРЕМНИИ

Г. С. Мякенькая, Г. Л. Гуцев

Физико-технический институт Академии наук Казахстана,
480082, Алма-Ата, Казахстан
(Получена 21.04.1992. Принята к печати 22.06.1992)

Проведен расчет углеродосодержащих комплексов в кремнии методом, в рамках которого в одном цикле вычисляются как полная энергия, так и электронный спектр. Показано, что бинарные комплексы с углеродной компонентой имеют структуру расщепленного междоузлия симметрии C_{2v} в двух устойчивых компонентах.

Концентрация углерода в опытных образцах кремния, как правило, довольно высока: от $3 \cdot 10^{15}$ до $3 \cdot 10^{18}$ см^{-3} . Предполагается [1], что мода колебаний с частотой 607 см^{-1} связана с наличием углерода в узле решетки. Кроме того, как следует из результатов многочисленных экспериментов, углерод взаимодействует с рядом дефектов решетки и примесями, образуя комплексы, структура которых мало изучена. Большинство теоретических работ ограничивается нахождением электронных термов, что явно недостаточно. Необходимо также рассчитывать энергетику системы в различных состояниях. Эта задача может быть решена в кластерном приближении, поскольку равновесная конфигурация кластера определяется минимумом полной энергии, хотя и здесь возникают трудности, связанные с выбором граничных условий.

В настоящей работе для исследования электронных и структурных свойств углеродосодержащих комплексов в кремнии были выполнены расчеты самосогласованным дискретно-вариационным X_α -методом (X_α -ДВ), в рамках которого в одном цикле вычисляются как полная энергия, так и электронный спектр. Кроме расчета углерода в кремнии, поскольку по химическому строению к нему близки такие элементы, как бор, азот, кислород и фтор, они также включены в рассмотрение. Общим для всех этих атомов второго периода является то, что их валентная L -оболочка может быть заполнена четырьмя электронными парами. Эти четыре электронные пары расположены тетраэдрически и занимают все доступное пространство вокруг центрального остова, поэтому искажение такой сферы затруднено. Естественно, что и особые свойства этих элементов (C, B, N, O и F) будут проявляться как в соединениях, так и в кристаллах.

Нами рассмотрены следующие одно- и биатомные комплексы: C_s — в позиции замещения (индекс s относится к замещенной компоненте); комплексы симметрии C_{2v} — $(C_I + C_I)$, $(C_I + O_I)$, $(C_s + B_I)$, $(C_I + B_s)$, $(C_I + B_I)$, $(C_I + Si_I)$ и симметрии C_{3v} — $(C_s + B_I)$ (индекс I относится к междоузельной компоненте), а также некоторые активированные комплексы, образующиеся в процессе замещения Si на C или O. Граничные условия, как обычно, воспроизведены путем насыщения оборванных связей атомов Si атомами H. Атомы H располагались в узлах идеальной кристаллической решетки кремния, что позволило сохранить длину связи, оставить связь почти ковалентной в силу близостей электроотрицатель-

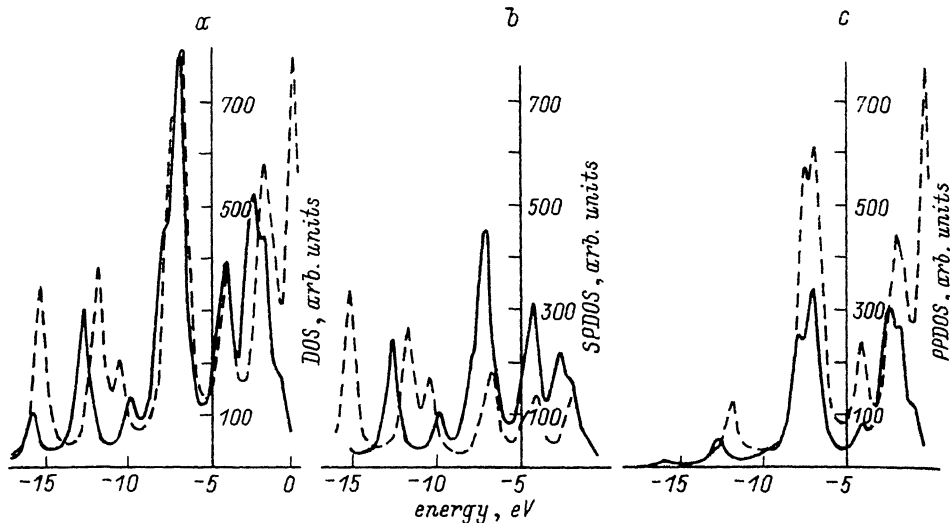


Рис. 1. Валентная плотность состояний — сплошная линия для Si_5H_{12} и штриховая линия для $\text{C}_5\text{Si}_4\text{H}_{12}$ (a), частичная плотность состояний для s - и p -функций соответственно для тех же кластеров (b, c).

ностей Si (1.8) и H (2.1) по Полингу [2], а также вынести состояния, связанные с граничными атомами, из запрещенной зоны.

Полная энергия кластера, вычисленная в рамках X_α -ДВ метода по формуле [3]

$$E_t = \sum n_i \varepsilon_i - \int \frac{\rho(1)\rho(2)}{|r_1 - r_2|} dV_1 dV_2 - \int \rho(1) V_{X_\alpha}(1) dV_1 + \sum_{A,B} \frac{Z_A Z_B}{|R_A - R_B|}; \quad (1)$$

является функцией смещений собственных и примесных атомов. В формуле (1) n_i — число заполнения i -й молекулярной орбитали (МО); ε_i — ее орбитальная энергия; $\rho = \sum a_k f_k$ — электронная плотность системы, аппроксимированная сферическими функциями f_k ; r и R — электронные и ядерные координаты; Z_A — заряд ядра атома A . Базовый кластер Si_5H_{12} имеет следующие зонные параметры, относящиеся к точке Γ -центра зоны Бриллюэна: дно валентной зоны, отвечающее связывающей комбинации s -орбиталей атомов Si, есть $6a_1$ -уровень с энергией $\varepsilon(6a_1) = -15.875$ эВ, а уровень $9a_1'$ с $\varepsilon(9a_1') = -0.972$ эВ соответствует разрывающей комбинации s -орбиталей Si, разность же этих энергий есть валентная зона шириной $E_v = 14.9$ эВ. Верхняя заполненная орбиталь определяется трехкратно вырожденным уровнем симметрии t_1 [$\varepsilon(2t_1) = -7.025$ эВ] и отделена от нижнего вакантного уровня [$\varepsilon(8a_1') = -4.775$ эВ] запрещенной зоной шириной $E_g = 2.25$ эВ. В этот идеальный кластер Si_5H_{12} симметрии тетраэдра помещался в позицию замещения (s) атом C. В системе $\text{C} + \text{Si}_4\text{H}_{12}$ характеристики запрещенной зоны не изменились (рис. 1, a). Однако расчеты показывают, что присутствие углерода будет сказываться на оптических переходах с глубоких уровней (рис. 1, b, c). Более того, так как атом углерода имеет большую электроотрицательность по сравнению с Si: C (2.5), Si (1.8), образовавшаяся связь между C и Si будет полярной (табл. 1). Как следствие этого, связывающая пара электронов не распределена равномерно между двумя атомами, а смещена ближе к тому атому, который сильнее притягивает электроны, т. е. к элементу

Таблица 1

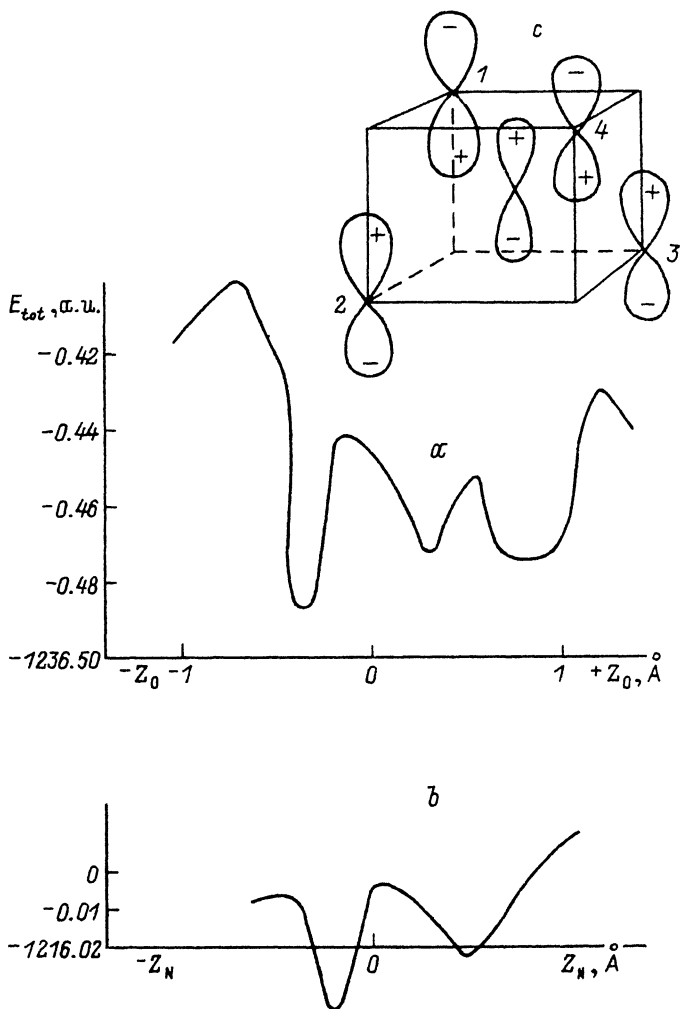
Углерод в позиции замещения в нерелаксированной решетке кремния и тетраэдрический кластер кристаллического кремния

Центр кластера, s	Верхняя заполненная орбиталь, эВ	Нижний вакантный уровень, эВ	Q_s, e	Q_{Si}, e	Тип АО	Заполнение АО центра	Тип Si АО	Состав АО границ запрещенной зоны			
								7a ₁		2t ₁	
								тип	C_{ij}	тип	C_{ij}
C	-6.811 (2t ₁)	-4.843 (7a ₁)	-0.445	0.102	2s	1.665	3s	3s(Si)	0.3041	3p _y (Si)	0.2496
					2p _x	0.926	3p _x	2s(C)	0.3678		
					2p _y	0.926	3p _y	1s(H)	-0.2791	1s(H)	0.2628
					2p _z	0.926	3p _z				
					3s	1.495	3s	3s(Si)	0.3547	3p _y (Si)	0.2603
		-7.025 (2t ₁)	-4.775 (8a ₁)	-0.197	-0.038	3p _x	0.899	3p _x	3s(Si _s)	0.3929	
Si					3p _y	0.899	3p _y	1s(H)	-0.2829	1s(H)	0.2570
					3p _z	0.899	3p _z				

Таблица 2

Электронные характеристики комплекса C_I+O_I(C₂)₂ в расчетных точках

$Z_C,$ а. е.	$Z_{O_1},$ а. е.	Основное состояние	$E_I,$ а. е.	Уровни в запрещенной зоне, эВ								Интеграл перекрытия					
				18a ₁	10b ₁	17a ₁	9b ₁	4a ₂	3a ₂	16a ₁	Q _{C-O}	Q _{Si-O}	Q _{C-Si}				
2.56	-2.56	18a ₁ ²	-1274.16	-4.9	-5.74	-5.78	-6.42	-6.49	-6.61	-6.93	-6.96	0.17	-0.38	0.223	-0.01	0.268	0.361
		4a ₂ ²												0.084			
2.26	-2.26	10b ₁ ²															
		9b ₁ ²															
1.50	-1.50	17a ₁ ²	-1273.88	-4.50	-6.59	-6.22	-6.59	-6.67	-6.90	-7.03	-6.95	-0.17	-0.72	0.351	0.023	0.198	0.427
		4a ₂ ²												(O)			
		10b ₁ ²												0.255			
		10b ₁ ²												(C)			
		17a ₁ ²	-1274.27	-4.46	-6.51	-6.49	-6.67	-6.50	-6.84	-7.11	-6.92	-0.71	-0.40	0.153	0.209	0.153	0.357
														(O)			
														0.381			
														(C)			



р. 2. Кривая полной энергии кластера $O + Si_4H_{12}$ как функция смещения атома O по оси Z вверх и вниз (—) (а), полная энергия кластера $N + Si_4H_{12}$ (b), вид кластера (с).

с большей электроотрицательностью. Это и создает отрицательный заряд на атоме C (табл. 1), тем не менее связь остается ковалентной с сохранением $-$ гибридизации. Те элементы, которые по химическим свойствам близки к C , в позиции замещения в кремнии ведут себя иным образом [4]: все они образуют уровни в запрещенной зоне и почти все или нестабильны в узле, или их положение в центре является не единственной возможной конфигурацией. Для определения устойчивых положений атомы O и N перемещались по оси Z из центра симметрии в обе стороны. Полная энергия кластера вычислена по формуле (1) как функция этого смещения. Оказалось, что кривая полной энергии не является симметричной относительно точки $Z = 0.0$ (рис. 2, а, б). В центре кластера в положении замещения для кислорода при $Z = 0.0$ нет ни минимума полной энергии, ни даже седловой точки. Для атомов O и N невыгодно также и смещение в направлении $\langle 001 \rangle$, самый глубокий минимум соответствует смещению атома кислорода в направлении $\langle 001 \rangle$ на 0.4 Å от центра. Объяснение этому факту можно дать исходя из аддитивной химической схемы. Известно

[⁵], что в органических молекулах как длины, так и энергии ординарных sp^3-sp^3 -связей почти постоянны и не зависят от строения молекул в целом. Кроме того, в насыщенных соединениях углерода, а также остальных элементов четвертой группы (Si, Ge) существенно лишь взаимодействие связанных атомов [⁶]. Кислород имеет на валентной оболочке шесть электронов, которые образуют три неподеленных пары. Для завершения валентной оболочки атом кислорода присоединяет два электрона, и в Si это ему удастся в силу большей электроотрицательности. Однако связывающие и неподеленные пары по размерам своим электронных оболочек неодинаковы, что и приводит к отклонению от тетраэдрического угла 109.5°. Радиус связывающего облака для элементов вплоть до Ag составляет величину 0.6 Å, в то время как размеры неподеленной пары кислорода ~1.17 Å [⁷]. Поэтому как O, так и N смещаются от центра, уменьшая отталкивание положительных $3p_z$ -орбиталей Si (1 и 4) и размещаясь в свободном пространстве между атомами Si (2) и Si (3) (рис. 2, c). Причем величина смещения 0.4 Å вполне укладывается в размеры электронных облаков приближении жестких шаров. Так, ковалентный радиус кремния $r_c(\text{Si}) = 1.1$ Å, а радиус связывающего облака кислорода $r(\text{O}) = 0.66$ Å, их сумма составляет $d(\text{Si}-\text{O}) = 1.83$ Å. Согласно расчетам, при смещении O на 0.4 Å $D(\text{Si}-\text{O}) = 2.16$ Å, т. е. в близком согласии с качественной оценкой. Такая же оценка справедлива и для N, что и видно на кривых (рис. 2, a, b), где минимумы расположены один под другим. Описанный точечный дефект $V+O$ симметрии C_{2v} широко известен в радиационной физике полупроводников под названием А-центр [⁸].

Таблица 1

Характеристики расщепленной междоузельной конфигурации в основном состоянии с координатами Si (0.02—2.5656) и C (0.0—1.1) ат. ед.

Симметрия уровня	Энергия ϵ_f в запрещенной зоне, эВ	Заряд атома Si, e	Заряд атома C, e	Тип перекрывания	Интеграл перекрывания	АО	Заполнение АО Si	АО	Заполнение АО C
11b ₁	-4.892	0.078	-0.537	Q_{C_f-Si}	0.415	3s	1.345	2s	1.423
11b ₂	-5.192			Q_{C_f-Si}	-0.061	3p _x	1.105	2p _x	0.975
19a ₁	-6.215			Q_{C_f-Si}	0.216	3p _y	0.952	2p _y	1.185
10b ₁	-6.761			Q_{C_f-N}	0.027	3p _z	0.784	2p _z	0.721
4a ₂	-6.775								
10b ₂	-6.818								

При облучении кремния наряду с вакансиями образуются несвязанные собственные атомы, которые могут объединяться в расщепленные междоузельные конфигурации (PMK) [⁹], которые устойчивы при достаточно высоких температурах, до 450 К. Их геометрическая структура рассчитана X_α -ДВ методом нами ранее [^{10, 11}]. Естественно предположить, что и C будет образовывать PMK к собственным атомам Si [¹²], так и с примесными атомами. При выборе примесных партнеров для углерода в кремнии можно руководствоваться следующими соображениями относительно устойчивости: во-первых, при большем различии в массах и электроотрицательностей атомов гантели возникают полярные связи, обладающие значительным дипольным моментом и неустойчивостью, и, во-вторых, внутри кристалла комплекс находится в ограниченном объеме (полости не рассматриваются). Поэтому расчеты выполнены для следующих PMK: $C_f + Si_f$, $C_f + C_f$, $C_f + O_f$, $C_f + V_f$ симметрий C_{2v} и C_{3v} . Комплекс $C_f + Si_f$, как сообщалось ранее в [¹³], обладает свойствами двойного донора, а в однократно

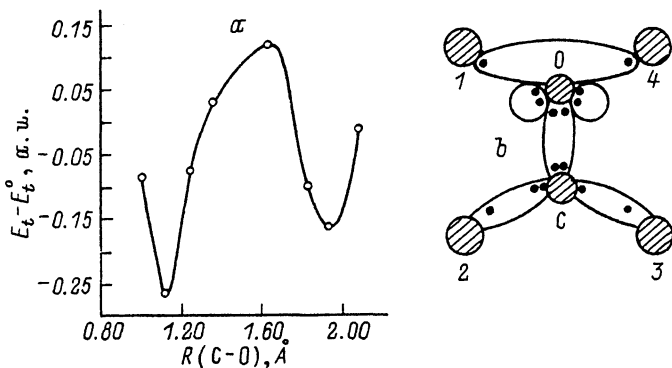


Рис. 3. Зависимость полной энергии кластера $C_1 + O_1 + Si_4H_{12}$ от расстояния между атомами $R(C-O)$ (а), структура образования двойной связи в этом же комплексе схематически (б).

ионизированном состоянии соответствует центру $Si-G12$ [12]. В запрещенной зоне появляется множество электронных уровней (табл. 3), причем основному состоянию с наименьшей полной энергией, когда $Si(0.0, 0.0, 1.357)$ и $C(0.0, 0.0, -0.582)$ Å, соответствует электронная конфигурация $19a_1^2 4a_2^2 11b_1^1 11b_2^1$. Следующая рассчитанная конфигурация имеет симметрию D_{2d} и соответствует РМК с парой эквивалентных атомов. Полученное равновесное расстояние между атомами углерода равно $R_e = 1.4$ Å, что хорошо согласуется с обычной длиной двойной связи $C=C$ в молекулах [7]. Из оценок следует, что поделенные пары электронов атомов C и Si имеют радиус $r(C-Si) = (0.77 + 1.17) = 1.94$ Å, а расстояние между атомом Si и атомом гантели в равновесной конфигурации $d(Si-C) = 2.03$ Å, поэтому первая координационная сфера дефекта не будет испытывать релаксацию. Это подтверждается результатами всех расчетов, в которых моделировались дисторсии различных типов: тригональные, равномерного расширения, синхронного смещения по оси Z и др. Оба атома гантели заряжены отрицательно ($Q_C = -0.5 e$). Однако РМК с двумя различными атомами C_1 и O_1 в вакансии обладают иными свойствами. Согласно расчетам, полная энергия кластера E_t как функция расстояния между примесными атомами C и O имеет два минимума (рис. 3). Один стабильный комплекс (конфигурация 1) можно связать с образованием гетероядерной молекулы, а другой (2) — с существованием дипольного комплекса [14]. Минимуму E_t в формуле (1) соответствует длина связи $d(C-O) = 1.1$ Å, в то время как экспериментальная величина d для молекулы CO равна 1.13 Å. По мере удаления атомов друг от друга E_t кластера $C_1 + O_1 + Si_4H_{12}$ проходит через второй минимум, соответствующий $R(C-O) = 1.9$ Å (рис. 3). Барьер перехода между минимумами E_t равен 2.5 эВ. В точках минимумов величина дипольного момента системы значительна, что указывает на несимметричное расположение электронного облака. Так, в случае (2) дипольный момент равен $\mu = 0.264D$. При этом в конфигурации 1 атомы C и O акцептируют электроны ($Q_C = -0.712e$, $Q_O = -0.405e$) с атомов первой координационной сферы, заряжая их положительно ($Q_{Si}^{(C)} = 0.33e$ и $Q_{Si}^{(O)} = 0.15e$ соответственно). В то же время в конфигурации 2 заряды на атомах C и O имеют противоположные знаки: $Q_C = 0.17e$, $Q_O = -0.38e$ (диполь), поэтому атомы Si почти нейтральны в окрестности атома C ($Q_{Si}^{(C)} = 0.083e$) и имеют незначительный положительный заряд вблизи атома O ($Q_{Si}^{(O)} = 0.22e$).

Структура энергетических уровней комплекса $C_1 + O_1$ (1) в верхней половине запрещенной зоны (табл. 2) состоит из уровня симметрии b_2 с энергией $E_c = -0.34$ эВ, заполненного двумя электронами, причем коэффициенты C_{ij} в МО $10b_2$ существенно зависят от типа атома и равны

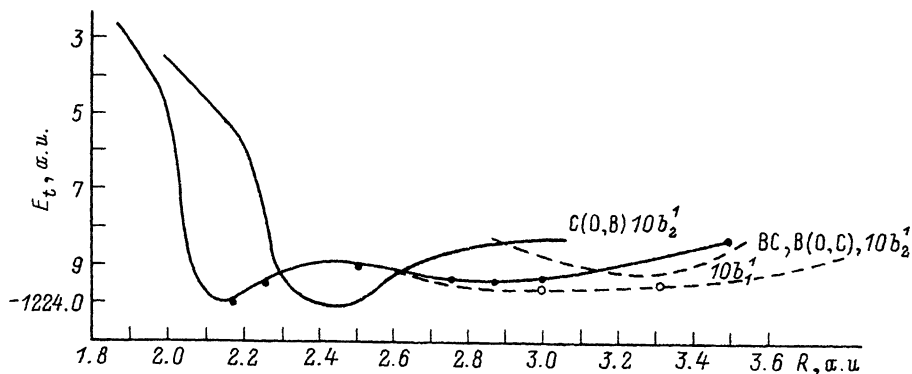


Рис. 4. Полная энергия кластера В + С + Si₄H₁₂.

$$\begin{aligned}
 MO(10b_2) = & -0.7645(2p_y(\text{C})) + 0.1734(2p_y(\text{O})) + \\
 & + 0.1142(3p_y(\text{Si})) - 0.1487(3p_y(\text{Si})). \quad (2)
 \end{aligned}$$

В конфигурации 2 система одноэлектронных уровней в запрещенной зоне иная: энергетический уровень симметрии a_1 лежит вблизи края зоны проводимости $E_c = -0.16$ эВ; состав этой МО следующий:

$$\begin{aligned}
 MO(18a_1) = & 0.3189(3s(\text{Si})) + 0.1368(3p_z(\text{Si})) + 0.2040(2s(\text{C})) - \\
 & - 0.4707(2p_z(\text{C})) + 0.0770(2s(\text{O})) - 0.4102(2p_z(\text{O})). \quad (3)
 \end{aligned}$$

Взаимодействие между атомами С и О осуществляется за счет p_z -орбиталей, расположенных вдоль оси ориентации дефекта $\langle 001 \rangle$.

Для обеих конфигураций в позиции расщепленной пары $C_I + O_I$ характерна высокая плотность состояний в запрещенной зоне (7—8 одноэлектронных уровней, заполненных 14—16 электронами соответственно). Такие междоузельные пары существенно изменяют электронные свойства материала, забывая всю запрещенную зону своими состояниями. Кислород притягивает электроны с окружающих атомов кремния для образования замкнутой оболочки и заряжается отрицательно (табл. 2), углерод же только в конфигурации 1 образует с кислородом связь, заряжаясь также отрицательно, во всех других случаях связи с кислородом у углерода нет, поэтому у него остается неподделенная пара электронов. Как видно из рис. 3, а, комплекс $C_I + O_I$ проявляет бистабильность, которая может быть связана со способностью углерода в определенных условиях образовывать двойные

Таблица 4

Характеристики расщепленной пары $B_I + C_I$ в зависимости от расстояния между компонентами В и С в спин-поляризованном варианте в основном состоянии

R (B—C), Å	Уровни в запрещенной зоне, эВ					Q_B, e	Q_C, e	$Q_{Si}^{(C)}, e$	$Q_{Si}^{(B)}, e$	Q_H, e
	$10b_1^a$	$9b_1^b$	$9b_2^b$	$10b_2^c$	$17a_1^c$					
1.33	-5.527	-6.517	-6.575	-4.945	-6.490	-0.259	-0.655	0.199	0.108	0.076
1.59	-5.730	-6.390	-6.588	-4.832	-6.411	-0.324	-0.619	0.187	0.114	0.071
1.85	-5.887	-6.348	-6.571	-4.802	-6.287	-0.374	-0.607	0.183	0.121	0.067
2.12	-5.986	-6.343	-6.557	-4.803	-6.230	-0.398	-0.590	0.176	0.117	0.067
2.38	-5.793	-6.546	-6.705	-4.054	-6.225	-0.406	-0.583	0.169	0.112	0.068
2.64	-5.805	-6.567	-6.601	-4.032	-6.224	-0.400	-0.564	0.169	0.103	0.069

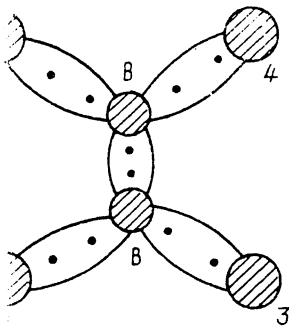


рис. 5. Гантель $V_l + V_l$ в Si.

связи и структуры типа CX_3 (рис. 3, б) (здесь $CO\text{Si}_2$), хотя кислород стремится в первую очередь присоединить электроны с ближайших атомов кремния.

Составной частью комплексов с углеродной компонентой может быть и другой ближайший к С элемент — В. У бора на валентной L -оболочке находятся три электрона, и в РМК В образует три валентные связи, а один электрон углерода остается неспаренным. Нами выполнены расчеты пары В + С X_α -ДВ методом и найдены стабильные конфигурации (рис. 4). Как и в случае с парой $C_l + O_l$, комплекс $V_l + C_l$ имеет две стабильные конфигурации, причем глубины потенциальных ям обеих почти одинаковы. Один минимум полной энергии коррелирует со структурой пары $V_l + C_s$, когда расстояние между компо-

нентами равно 1.27 \AA , и атом C_s находится в позиции замещения. Неспаренный электрон занимает $MO 10b_2$ с энергией $\epsilon(10b_2) = -5.366 \text{ эВ}$ ($E_c - 0.59 \text{ эВ}$), однако —прежнему плотность состояний в запрещенной зоне кластера достаточно велика. Атом бора имеет заряд $Q_B = -0.303e$, а углерод — $Q_C = -0.467e$. Для нахождения другого минимума полной энергии этого же кластера варьировались координаты атома С, а атом В находился в позиции замещения. При расстоянии между атомами В и С, равном $R(V_s + C_l) = 1.09 \text{ \AA}$, кривая E_l имеет минимум, высота барьера активации равна 2.7 эВ , заряды на атомах гантели — $Q_B = -0.07e$, $Q_C = -0.81e$, а энергия частично заполненного уровня есть $\epsilon(10b_2) = -5.1 \text{ эВ}$ ($E_c - 0.33 \text{ эВ}$). Промежуточный случай, когда атомы В и С синхронно смещаются от центра симметрии, не дает более глубокого минимума E_l (рис. 4) при различных заполнениях уровней $10b_2^1$ или $10b_1^1$. Все характеристики этой гантели приведены в табл. 4.

В комплексе $C_s + V_l$ (симметрия C_{3v}) атом В стабилизируется за плоскостью, образованной тремя атомами Si (1, 2, 3). В запрещенной зоне идеального кластера лежит глубокий акцепторный уровень симметрии e с энергией $E_c - 0.47 \text{ эВ}$. Наличие двух вырожденных уровней симметрий a_1 и e в середине запрещенной зоны должно приводить к понижению симметрии системы за счет эффекта Яна—Теллера, что в конечном счете повлечет вытеснение углерода из узла и образование расщепленной конфигурации более низкой симметрии.

Подчеркнем одну примечательную особенность РМК в Si, хотя и речь пойдет о гантели, не содержащей углерод. Со всех точек зрения (связанных пар, электроотрицательностей и образования связей), из всех рассчитанных нами междоузельных пар наиболее оптимально в вакансию Si вписывается гантель $V_l + V_l$ (рис. 5). Как уже упоминалось, валентная оболочка бора содержит три электрона, поэтому при удалении из решетки центрального атома кремния (моделирование образования вакансии) четыре неподеленные электрона четырех атомов Si могут образовывать четыре новые связи с двумя междоузельными атомами бора. Конфигурация является стабильной, а бор пассивирует оборванные связи вакансии кремния. Исходя из вышеизложенных соображений, можно заключить, что один атом бора, присутствующий в кристаллическом кремнии, является акцепторной примесью, которая в целях получения собственной проводимости Si обычно компенсируется Li (кремний-литиевые детекторы). Однако этот же эффект может быть достигнут образованием пары $V_2 + V$, можно ожидать его устойчивость при комнатных температурах. Также дополнительным аргументом в пользу устойчивости такого комплекса служат близкие значения электроотрицательностей В (2.0) и Si (1.8). Образовавшаяся связь будет неполярной, и, следовательно, не возникает перекаса электронной плотности.

Согласно результатам проведенных вычислений, можно сделать следующие выводы:

1. Атом углерода в кремнии может находиться в конфигурации замещен а также образовывать всевозможные комплексы с атомами второго периода.
2. Бинарные комплексы с углеродной компонентой имеют структуру расщепленного междоузлия симметрии C_{2v} в двух устойчивых положениях.
3. Углерод в кремнии образует двойные связи.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] R. G. Newman. Oxygen, Carbon, Hydrogen and Nitrogen in crystalline silicon, 2—5 Dec., 4th Proc. Boston, USA (1985).
- [2] L. Pauling. Nature of the Chemical Bond, 846. N. Y. (1960).
- [3] G. L. Gutsev, A. A. Levin. Chem. Phys., 51 (1980).
- [4] Г. С. Мякенькая, Г. Л. Гуцев, Н. Н. Герасименко. ФТП, 24, 1042 (1990).
- [5] М. Дьюар. Сверхсопряжение (под ред. М. Е. Дяткиной), 206. М. (1965).
- [6] А. А. Левин. Введение в квантовую химию твердого тела, 237. М. (1974).
- [7] Р. Гиллеспи. Геометрия молекул, 278. М. (1975).
- [8] G. Bemski. J. Appl. Phys., 30, 1195 (1959).
- [9] D. F. Daly. J. Appl. Phys., 42, 864 (1971).
- [10] N. N. Gerasimenko, G. L. Gutsev, G. S. Myakenkaya. Nucl. Inst. a Meth., B39, 372 (1989).
- [11] G. S. Myakenkaya et al. in the press.
- [12] G. D. Watkins, K. Brower. Phys. Rev. Lett., 36, 1329 (1976).
- [13] Г. Л. Гуцев, Г. С. Мякенькая. ФТП, 22, 1219 (1988).
- [14] J. C. Slater. J. Chem. Phys., 41, 3199 (1964).

Редактор В. В. Чалдышев
