

Численное моделирование методом MINDO/3 электронной структуры нитрида кремния

© В.А. Гриценко, Ю.Н. Мороков*, Ю.Н. Новиков

Институт физики полупроводников Сибирского отделения Российской академии наук, 630090 Новосибирск, Россия

*Институт вычислительных технологий Сибирского отделения Российской академии наук, 630090 Новосибирск, Россия

(Поступила в Редакцию 14 октября 1996 г.
В окончательной редакции 11 февраля 1997 г.)

Полуэмпирическим квантово-химическим методом MINDO/3 в кластерном приближении рассчитана электронная структура нитрида кремния. Проанализировано влияние размеров кластеров и граничных условий на парциальную плотность одноэлектронных состояний. Результаты расчета сопоставлены с экспериментальными данными для аморфного нитрида кремния. Обсуждается происхождение пика в верхней части валентной зоны, наблюдаемого в $SiL_{2,3}$ -спектре, но не воспроизводимого расчетами.

Интерес к изучению аморфного нитрида кремния (α - Si_3N_4) связан с широким применением его в электронике [1]. Он обладает эффектом памяти — свойством захватывать инжектированные в него электроны и дырки с гигантским временем делокализации. В настоящее время пророда глубоких центров, ответственных за локализацию электронов и дырок в α - Si_3N_4 , остается неясной [2–10].

В большинстве предыдущих расчетов электронной структуры нитрида кремния [11–18] использовались несамоогласованные методы. В то же время учет самоогласования для систем с переносом заряда представляется существенным. В [19] применялся самоогласованный вариант метода функционала плотности. В работе [20] электронная структура дефектов в Si_3N_4 рассчитывалась в кластерном приближении неэмпирическим методом МО ЛКАО. Однако при этом рассматривался очень маленький кластер $Si(NH_2)_4$, что делает актуальным вопрос о влиянии граничных условий на результаты расчетов.

1. Метод расчета электронной структуры и структура кластеров

Мы использовали полуэмпирический квантово-химический метод MINDO/3 [21]. Метод MINDO/3 включает два двухцентровых параметра (α_{AB} и B_{AB}) для описания связей между атомами A и B. В литературе отсутствуют параметры метода MINDO/3 для описания связи Si–N. В данной работе эти параметры определены из условия воспроизведения экспериментальных значений длины связи и энергии диссоциации молекулы SiN [22]. Таким образом получены значения $\alpha_{SiN} = 1.053011$ и $B_{SiN} = 0.434749$, которые были использованы в дальнейших расчетах. Дополнительный анализ показал, что варьирование этих параметров не дает заметного улучшения описания положения краев зон нитрида кремния.

В настоящей работе на рисунках (кроме специально оговоренных случаев) приведены парциальные плотно-

сти одноэлектронных состояний (ППС) на центральном атоме Si (или N) и ближайшем к нему атоме N (или Si). Уширение дискретных уровней кластера производилось с помощью функции Гаусса с полушириной 0.5 eV. За начало отсчета энергии принята энергия электрона в вакууме. Положение экспериментальных краев зон было определено путем экстраполяции рентгеновских эмиссионных и фотоэлектронных спектров α - Si_3N_4 из работы [23].

Сравнение $SiL_{2,3}$ -спектров аморфного и кристаллического Si_3N_4 в α - и β -фазах свидетельствует о том, что плотности состояний $Si3s(3d)$ в этих фазах не отличаются [24]. Это означает, что в первом приближении ППС определяется ближним порядком в расположении ато-

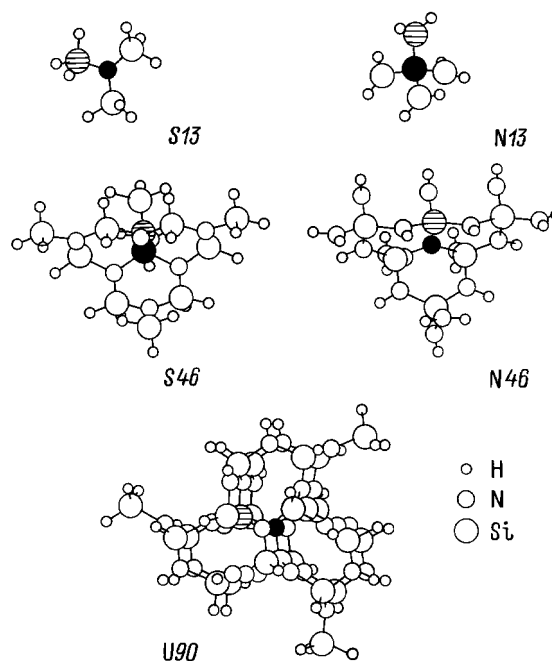


Рис. 1. Кластеры, использованные в расчетах. Вблизи центра кластеров отмечены атомы кремния и азота, для которых рассчитывались ППС.

Число связей Si-N и фрагментов SiH_n и NH_n в кластерах

Кластер	Формула	Si-N	SiH ₁	SiH ₂	SiH ₃	NH ₁	NH ₂
S13	Si ₃ NH ₁₉	3	0	0	3	0	0
N13	SiN ₄ H ₈	4	0	0	0	0	4
S46	Si ₁₂ N ₇ H ₂₇	21	0	6	5	0	0
N46	Si ₆ N ₁₆ H ₂₄	24	0	0	0	6	9
U90	Si ₂₄ N ₂₇ H ₃₉	69	18	0	3	12	0

мов. Мы проводили расчеты для кластеров, являющихся фрагментами кристаллического β-Si₃N₄ (пространственная группа P6₃/m). Геометрическая структура аморфного Si₃N₄ изучалась в [25,26].

Оборванные связи на границе рассчитываемых кластеров насыщались атомами водорода. Рассмотренные кластеры мы разбили на три группы: 1) содержащие на границе только N-H-связи (N-кластеры); 2) содержащие на границе только Si-H-связи (S-кластеры); 3) содержащие на границе как N-H-, так и Si-H-связи (U-кластеры).

Кластеры, использованные в работе, изображены на рис. 1. В таблице представлено число связей Si-N и фрагментов SiH_n и NH_n в кластерах, обсуждаемых в данной работе. Кластеры S13, N46 и U90 центрированы на атоме азота. Кластеры N13 и S46 центрированы на атоме кремния. В кластере N46 все атомы азота, кроме центрального, связаны с атомами водорода. Аналогично в кластере S46 все атомы кремния, кроме центрального, также связаны с атомами водорода. В отличие от кластеров N13, S13 в кластерах N46 и S46 имеются шестизвенные замкнутые кольца. В кластере U90 из 24 атомов кремния только три атома имеют правильную координацию SiN₄. Из 27 же атомов азота только пятнадцать имеют правильную координацию NSi₃.

2. Сравнение расчета и эксперимента

На рис. 2 представлены рассчитанные ППС для кластеров N13 и S13. Они сравниваются с экспериментальными ППС для α-Si₃N₄ [23]. На этом же рисунке внизу представлен рентгеновский фотоэлектронный спектр (РФС) валентной зоны из [23] с вычтенным фоном неупругорассеянных электронов. На рис. 2 и всех последующих рисунках экспериментальные и расчетные ППС нормированы на максимальное значение (отдельно для валентной зоны и зоны проводимости).

Уже эти малые 13-атомные кластеры предсказывают существование двух валентных зон. Нижняя валентная зона преимущественно сформирована из 2s-состояний азота. Верхняя валентная зона сформирована из связывающих состояний N2p-, Si3s-, 3p- и несвязывающих N2p_π-состояний. Волновые функции N2p_π-состояний ориентированы перпендикулярно плоскости NSi₃. В силу малости кластера расчет предсказывает завышенное значение ширины запрещенной зоны. Дно зоны проводимости сформировано из Si3s- и N2s-состояний.

Особенности ППС на кремнии лучше воспроизводятся на кластере N13, чем на S13. Это связано с тем, что в кластере N13 атом кремния имеет правильную структуру первой координационной сферы. Расчет кластера N13 правильно отражает относительное положение 3s- и 3p-ППС кремния в нижней валентной зоне. Обращает на себя внимание отсутствие в расчетной Si3s-ППС вблизи верха верхней валентной зоны пика B, наблюдаемого в эксперименте. Атом азота в кластере S13 связан с тремя атомами кремния, однако это не дает улучшения в N2s-ППС по сравнению с кластером N13.

На рис. 3 представлены экспериментальные и расчетные ППС для центральных (и ближайших к ним) атомов азота и кремния для кластеров N46 и S46. На центральном атоме азота кластера N46 N2s-уровень расщепляется на три пика. Верхний пик с энергией -25 eV близок к энергии N2s-уровня в Si₃N₄. Нижний пик при энергии около -32 eV сдвинут относительно максимума N2s РФС-пика на 8 eV. Разбиение N2s-уровня на три пика связано с малостью кластера. При увеличении размеров кластера должны появиться другие гармоники, которые в итоге будут формировать зону N2s-состояний. Большая относительная амплитуда нижнего пика при -32 eV связана с тем, что рассматривается ППС на центральном атоме. При этом пик на Si3s-спектре при -29 eV формируется волновой функцией, имеющей нуль из-за симметрии именно на центральном атоме азота.

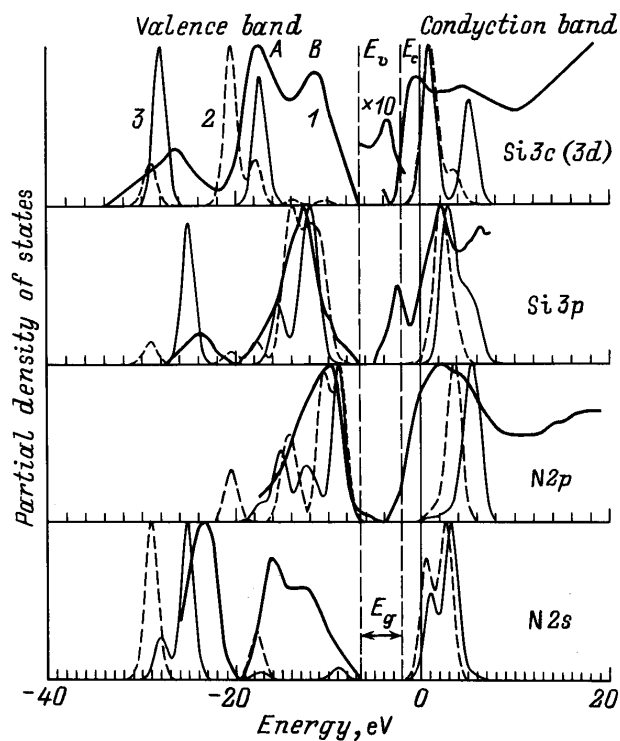


Рис. 2. Сравнение экспериментальных ППС для α-Si₃N₄ (1) и расчетных ППС для кластеров S13 (2) и N13 (3). Внизу на этом и последующих рисунках изображен рентгеновский фотоэлектронный спектр валентной зоны при энергии кванта 1486.6 eV после вычета фона неупругорассеянных электронов.

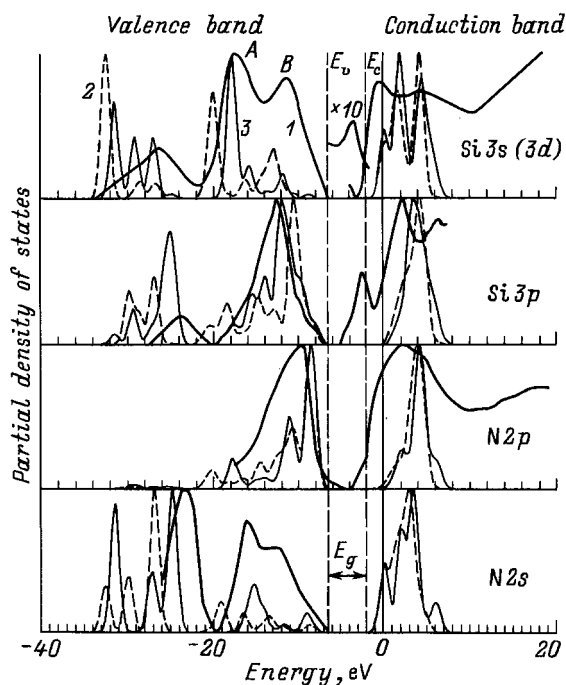


Рис. 3. Сравнение экспериментальных ППС для α -Si₃N₄ (1) и расчетных ППС для кластеров S46 (2) и N46 (3).

На N2s-ППС, просуммированной по всем атомам азота, относительная амплитуда нижнего пика при -32 eV уменьшается в несколько раз. Аналогичное происхождение имеет аномально высокий нижний пик в нижней валентной зоне Si3s-ППС для кластера S46. Атом азота в этом кластере не является центральным, и поэтому нижний пик в N2s-ППС имеет существенно меньшую относительную амплитуду.

Для кластера N46 состояния Si3s и Si3p нижней валентной зоны смещены относительно друг друга в соответствии с экспериментом. Для кластера S46 все состояния нижней валентной зоны смещены в направлении больших энергий связи, и общее согласие с экспериментом по нижней валентной зоне хуже, чем для кластера N46.

Расчет N2p-ППС для N46 и S46 отражает общую форму и ширину экспериментальной ППС. Согласие эксперимента и расчета для Si3p-ППС хуже для кластера S46, чем для N46. Расчетный пик сдвинут относительно наблюдаемого экспериментально на 1.5 eV.

Расчет Si3s-ППС для кластера N46 отражает положение пика A при -17 eV у дна верхней валентной зоны. Однако расчетная амплитуда пика B при энергии около -11 eV оказывается существенно меньше экспериментальной. Для кластера S46 нижний пик A верхней валентной зоны смещен на 2 eV по сравнению с экспериментом и расчетом для кластера N46.

На рис. 4 представлены расчетные ППС для кластеров U90. Видно, что увеличение числа атомов в кластере ведет к ожидаемым изменениям в ППС. Становят-

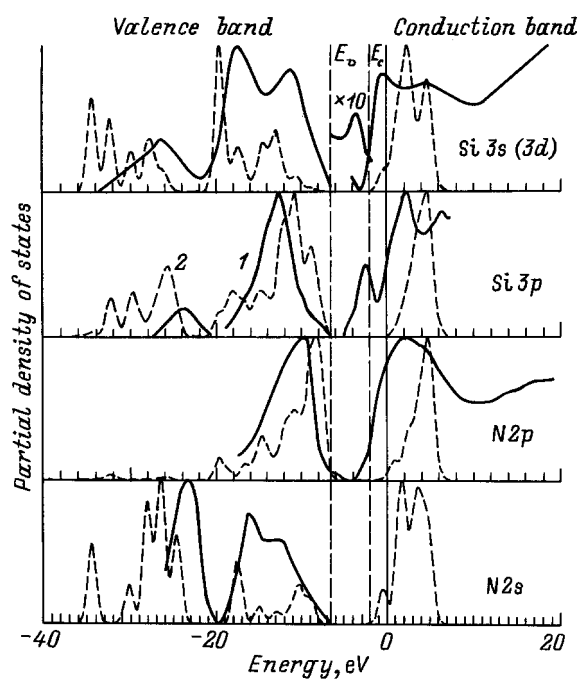


Рис. 4. Сравнение экспериментальных ППС для α -Si₃N₄ (1) и расчетных ППС для кластера U90 (2).

ся более четко выраженными зоны. В то же время не появляются какие-либо существенные особенности в спектре по сравнению с уже присутствующими для кластеров N46 и S46.

Полученная в настоящей работе величина переноса заряда на связи Si-N $\Delta q = 0.14e$ вдвое меньше экспериментального значения $\Delta q = 0.30 \pm 0.05e$ [2,23]. Расчеты SiO₂ методом MINDO/3 также дают заниженное значение переноса заряда на связи Si-O [27,28].

3. Влияние граничных атомов водорода на ППС

Атомы водорода, насыщающие оборванные связи на границе кластеров, аппроксимируют влияние отброшенной части кристалла. Для атомов Si, H и N электроотрицательности по Полингу составляют 1.8, 2.1, 3.0 соответственно. Поэтому с точки зрения правильного переноса заряда на границе кластера более приемлемым является использование N-H-связей, а не Si-H-связей. Представленные результаты расчетов в целом подтверждают, что N-кластеры лучше воспроизводят электронную структуру нитрида кремния по сравнению с S-кластерами.

Часто при анализе расчетных ППС кластера рассматривают ППС, усредненные по всем атомам соответствующего сорта в кластере. При этом возникает вопрос о влиянии граничных условий на точность такой ППС. Для анализа этого влияния на рис. 5 представлены ППС на атомах кремния и азота кластеров N46 и S46, усред-

ненные по всем атомам кремния и по всем атомам азота соответственно. Сравнение с ППС, приведенными на рис. 3, соответствующими только центральным атомам кластера, показывает ряд заметных отличий. Видно, что усредненные ППС в целом даже лучше согласуются с экспериментом, чем ППС, рассчитанные только для центральных атомов (рис. 3). Особенно это улучшение заметно для N2p-ППС кластера S46 и для N2s-ППС кластера N46. Однако более подробный анализ показывает, что в значительной степени это улучшение является фиктивным и связано с влиянием граничных атомов водорода.

На усредненной N2p-ППС кластера N46 (рис. 5) наблюдается заметный пик при -15 eV. Из сравнения с усредненной ППС на атомах водорода, также представленной на рис. 5, видно, что этот пик связан с образованием N-H-связей на границе кластера. Улучшение согласия с экспериментом верхней валентной зоны Si3s-состояний для кластера S46, очевидно, также связано с образованием Si-H-связей на границе кластера, что проявляется на H1s-ППС.

Более подробный анализ влияния атомов водорода на ППС азота можно сделать при анализе ППС периферийных атомов азота (рис. 6). Сравнение с ППС на атомах водорода (два верхних графика на рис. 6) показывает, например, что пик в усредненной N2p-ППС азота для кластера N46 при энергии -15 eV (рис. 5) связан с образованием на границе кластера фрагментов NH₂. Увеличение числа атомов водорода, связанных с атомом кремния, ведет также к смещению N2s-ППС к вершине

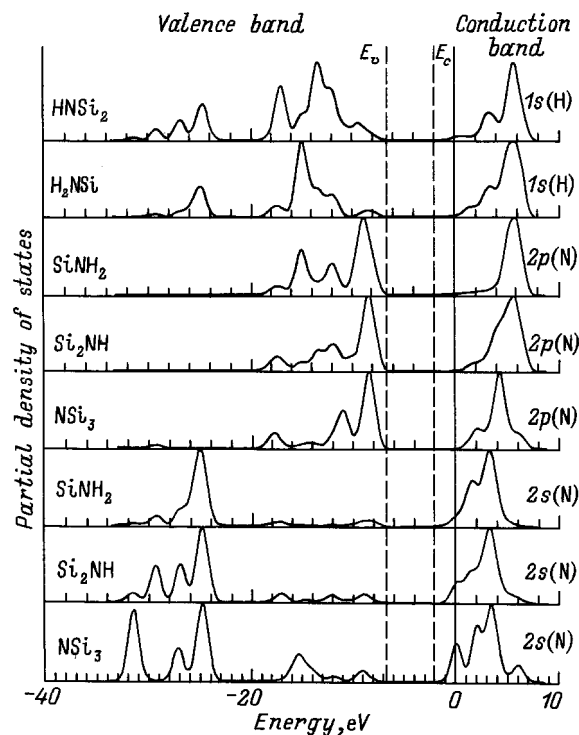


Рис. 6. ППС для атомов водорода и для атомов азота в кластере N46, связанных с разным числом атомов водорода.

нижней валентной зоны нитрида. Поэтому улучшение согласия с экспериментом по N2s-зоне, наблюдаемое для усредненной N2s-ППС, происходит из-за смещения ППС при взаимодействии атомов азота с атомами водорода.

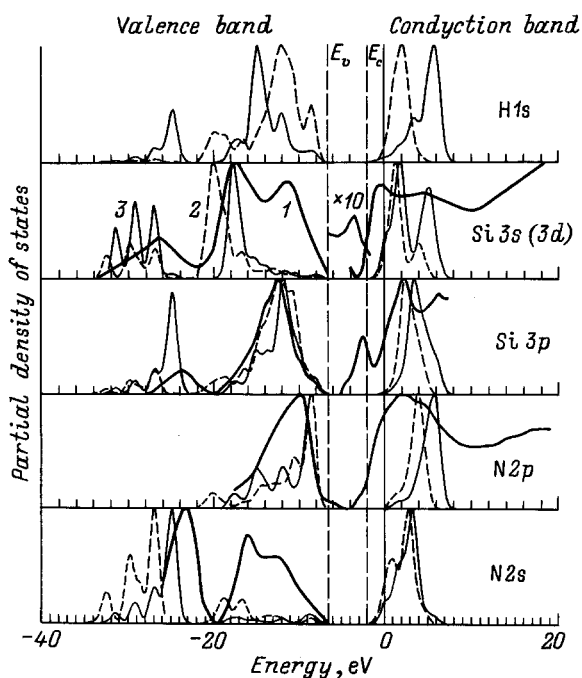


Рис. 5. ППС для кластеров S46 и N46, усредненные по всем атомам кремния и по всем атомам азота соответственно. 1 — эксперимент, 2 — S46, 3 — N46.

4. Интерпретация SiL_{2,3}-спектра и РФС валентной зоны

В дипольном приближении в SiL_{2,3}-спектрах эмиссии проявляются переходы с Si3s- и Si3d-состояний на Si2p-уровни. Таким образом, перенормированный SiL_{2,3}-спектр представляет собой суперпозицию Si3s- и Si3d-ППС. Как видно из рис. 2, на экспериментальной Si3s(3d)-ППС в верхней валентной зоне наблюдаются два пика (A и B). Амплитуда пика B приблизительно на 20% ниже амплитуды пика A.

Согласно [29], амплитуда пика B приблизительно вдвое меньше амплитуды пика A. Это расхождение авторы [29] связывают с влиянием четвертого порядка НК-спектра эмиссии. Однако против такого предположения свидетельствует тот факт, что в эксперименте максимум НК-спектра смещен на 2 eV по отношению к пику B в направлении верха валентной зоны [23,30–32]. К тому же авторы работы [20] утверждают, что SiL_{2,3}-спектры (близкие к представленным на рис. 2) получены ими в условиях, при которых интенсивность НК_α-спектра первого порядка была на два порядка меньше, чем для SiL_{2,3}-спектра. При этом вклад НК_α-спектра четвертого

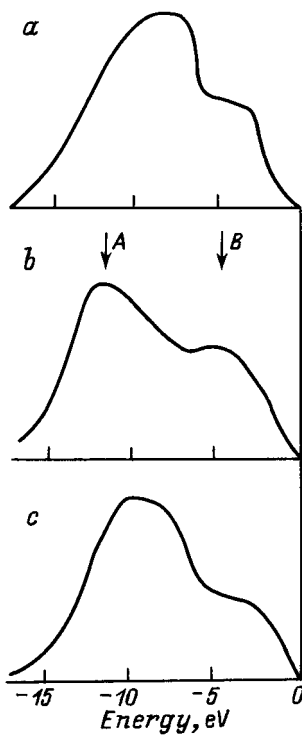


Рис. 7. $\text{SiL}_{2,3}$ -спектр аморфного кремния (*a*) и аморфного Si_3N_4 (*b*). *c* — суперпозиция спектров *a* и *b* в соотношении 2 : 1.

порядка в $\text{SiL}_{2,3}$ -спектр почти полностью отсутствует. Таким образом, вопрос о происхождении различия в относительной амплитуде пика *B* в $\text{SiL}_{2,3}$ -спектре между экспериментальными данными, представленными на рис. 2 и в работе [29], остается открытым.

Относительная амплитуда пика *B* по сравнению с пиком *A* в $\text{Si}3s$ -ППС, наблюдаемая в эксперименте, заметно превышает расчетную (рис. 2–5). Аналогичная ситуация имеет место и при расчетах для нитрида [6,15,20] и диоксида кремния [28,33–36], учитывающих только $\text{Si}3s$, $3p$ -атомные орбитали.

В качестве возможной причины большой относительной амплитуды пика *B* в $\text{SiL}_{2,3}$ -спектре SiO_2 называется возможный вклад от избыточного кремния [33,36]. Избыточный кремний может образоваться в SiO_2 в эксперименте при облучении образца электронным пучком при возбуждении $\text{SiL}_{2,3}$ -спектра. Аналогичная ситуация может иметь место при измерении $\text{SiL}_{2,3}$ -спектра в Si_3N_4 . Облучение Si_3N_4 электронным пучком сопровождается выделением избыточного кремния [37]. На рис. 7, *a, b* представлены $\text{SiL}_{2,3}$ -спектры аморфного кремния из [38] и Si_3N_4 из [23], отсчитанные относительно верха валентной зоны E_v . Сопоставление этих двух спектров показывает, что суперпозиция этих спектров не может привести к увеличению относительной амплитуды пика *B*. На рис. 7, *c* представлена для иллюстрации суперпозиция $\text{SiL}_{2,3}$ -спектров Si_3N_4 и *a*-Si. Таким образом, наличие

избыточного кремния не может объяснить большую амплитуду пика *B* в $\text{SiL}_{2,3}$ -спектре нитрида кремния.

Расчеты Si_3N_4 в [20] предсказывают заметный вклад $\text{Si}3d$ -орбиталей вблизи верха валентной зоны. Эта же идея поддержана в работе [29] на основании расчетов, представленных в [12]. Аналогичное утверждение широко обсуждалось также для интерпретации *B*-пика в $\text{SiL}_{2,3}$ -спектре SiO_2 [39]. Выполненные расчеты, учитывающие $\text{Si}3d$ -атомные состояния, дают противоречивые результаты. Например, результаты работ [33,35,40] не подтверждают заметного вклада $\text{Si}3d$ -состояний в валентную зону SiO_2 . Однако данные других работ (например, [41,42]) указывают на то, что высокоэнергетический пик в $\text{SiL}_{2,3}$ -спектрах SiO_2 обусловлен все-таки $\text{Si}3d$ -орбиталями. Представляется естественным связать противоречивость выводов о влиянии $\text{Si}3d$ -атомных функций с неоднозначностью выбора параметров используемых базисных $\text{Si}3d$ -функций.

На рис. 2–5 представлен также РФС валентной зоны Si_3N_4 (после вычитания фона неупругорассеянных электронов), который может дать дополнительную информацию о вкладе $\text{Si}3s$ - и $\text{Si}3d$ -состояний. Отношение сечений фотоионизации электронных состояний, рассчитанных для свободного атома для фотонов с энергией 1486.6 eV, составляет $\text{Si}3s : \text{Si}3p : \text{N}2s : \text{N}2p = 1 : 0.17 : 1.1 : 0.072$ [43]. Сечение фотоионизации для $\text{Si}3d$ -атомных состояний на три порядка меньше, чем для $\text{Si}3s$ -состояний [44], поэтому вклад $\text{Si}3d$ -состояний в РФС верхней валентной зоны можно не учитывать. Если в первом приближении пренебречь вкладом $\text{Si}3p$ - и $\text{N}2p$ -состояний в РФС, то РФС отражает распределение $\text{Si}3s$ - и $\text{N}2s$ -состояний в валентной зоне Si_3N_4 . Поскольку отсутствует экспериментальная информация о парциальной плотности $\text{N}2s$ -состояний, из данных РФС нельзя с уверенностью говорить о том, что пик *B* в $\text{SiL}_{2,3}$ -спектре связан $\text{Si}3s$ -орбиталями. Точность расчетных данных также недостаточна для разделения $\text{Si}3s$ - и $\text{N}2s$ -вкладов в верхнюю часть РФС.

Учитывая противоречивость расчетных данных по вкладу $\text{Si}3d$ -состояний в ППС верхней валентной зоны Si_3N_4 и SiO_2 , можно предположить более общую интерпретацию большой относительной амплитуды пика *B* в $\text{SiL}_{2,3}$ -спектре этих материалов. В этом случае $\text{SiL}_{2,3}$ -спектр обусловлен переходами в $\text{Si}2p$ -состояния электронов из объемных, делокализованных состояний, а не из число атомных состояний. Часть вклада в *B*-пик можно связать с переходами из $\text{Si}3d$ -состояний. Величина этой доли будет зависеть от параметров $\text{Si}3d$ -атомных состояний, используемых для интерпретации экспериментальных данных. Оставшуюся часть можно связать с одноцентровыми переходами из $\text{Si}3p$ -состояний, если принять, что эти состояния при взаимодействии с другими атомами пространственно деформируются, что приводит к снятию запрета на оптические переходы. В свою очередь такие переходы можно связать также и с одноцентровыми переходами в $\text{Si}2p$ -состояния электронов

из $N2p$ -связывающих атомных состояний ближайших атомов азота. В пользу подобной интерпретации свидетельствует тот факт, что пик B на $Si3s$ -ППС (рис. 2) располагается между максимумами на $Si3p$ - и $N2p$ -ППС.

Возможный вклад в эту часть $SiL_{2,3}$ -спектра нитрида кремния неортоцентрических переходов электронов из $Si3s$ -состояний соседних атомов кремния рассматривался в [29]. Авторы работы [29] оценили с использованием атомных функций Хермана–Скиллмана вероятность таких переходов и определили, что она составляет 5–10% от вероятности ортоцентрических переходов $Si3s$ – $Si2p$. Можно предположить, что вклад двухцентровых переходов $N2p$ – $Si2p$ между соседними атомами может оказаться заметно большим. Следовательно, противоречие между теорией и экспериментом по поводу пика B в $SiL_{2,3}$ -спектре Si_3N_4 и SiO_2 снимается, если принять, что этот пик определяется не только $Si3s$, $3d$ -состояниями, но и вкладом $Si3p$ - и $N2p$ -связывающих состояний.

Таким образом, проведено изучение в кластерном приближении электронной структуры нитрида кремния с использованием квантово-химического метода MINDO/3. Выполнены расчеты для кластеров разных размеров в диапазоне от 13 до 90 атомов. Показано, что основные особенности электронной структуры нитрида кремния проявляются уже на 13-атомных кластерах. Проведен детальный анализ ППС для кластеров разных размеров с использованием Si – H - и N – H -связей в качестве граничных условий. Для анализа более приемлемыми оказываются локальные ППС, рассчитанные только для атомов вблизи центра кластеров.

Противоречие между теорией и экспериментом в описании вклада $Si3s(3d)$ -состояний в верхнюю часть валентной зоны нитрида и диоксида кремния можно объяснить тем, что в формирование пика B в $SiL_{2,3}$ -спектре вносят вклад не только ортоцентрические переходы из $Si3s$, $3d$ -состояний, но также и двухцентровые переходы из $N2p$ -связывающих состояний соседних атомов азота.

Список литературы

- [1] V.I. Belyi, L.L. Vasilyeva, V.A. Gritsenko et al. In: Material Science Monograph. Silicon Nitride in Electronics / Ed. A.V. Rzhzanov. North Holland, Amsterdam (1988). V. 34. P. 555.
- [2] В.А. Гриценко. Строение и электронная структура аморфных диэлектриков в кремниевых МДП-структурах. Наука, Новосибирск (1993). 290 с.
- [3] S. Fujita, S. Sasaki. J. Electrochem. Soc. **132**, 398 (1985).
- [4] P.A. Pundur, Yu.G. Shavalgin, V.A. Gritsenko. Phys. Stat. Sol. (a) **94**, K107 (1986).
- [5] P.M. Lenahan, D.T. Krick, J. Kanicki. Appl. Surf. Sci. **39**, 392 (1989).
- [6] J. Robertson. Phil. Mag. **B63**, 47 (1991).
- [7] W.L. Warren, J. Kanicki, J. Robertson, E.H. Poindexter, P.J. McWhorter. J. Appl. Phys. **74**, 6, 4034 (1993).
- [8] В.А. Гриценко, П.А. Пундур. ФТТ **28**, 10, 3239 (1986).
- [9] В.А. Гриценко, Е.Е. Меерсон, И.В. Травков, Ю.В. Голтвянский. Микроэлектроника **16**, 1, 42 (1987).
- [10] В.А. Гриценко, Ю.П. Костиков, Л.В. Храмова. ФТТ **34**, 8, 2424 (1992).
- [11] R.J. Sokel. J. Phys. Chem. Sol. **41**, 899 (1980).
- [12] J. Robertson. Phil. Mag. **B44**, 2, 215 (1981).
- [13] S.Y. Ren, W.Y. Ching. Phys. Rev. **B23**, 10, 5454 (1981).
- [14] А.Г. Петухов. ФТТ **27**, 1, 95 (1985).
- [15] E.C. Ferreira, C.E.T. Goncalves da Silva. Phys. Rev. **B32**, 12, 8332 (1985).
- [16] L. Martin-Moreno, E. Martinez, J.A. Verges, F. Yndurain. Phys. Rev. **B35**, 18, 9683 (1987).
- [17] J. Robertson. J. Appl. Phys. **54**, 8, 4490 (1983).
- [18] J. Robertson. Phil. Mag. **B69**, 2, 307 (1994).
- [19] Y. Xu, W.Y. Ching. Physica **B150**, 32 (1988).
- [20] Е.Р. Домашевская, Ю.К. Тимосенко, В.А. Терехов et al. J. Non-Cryst. Sol. **114**, 495 (1989).
- [21] R.C. Bingham, M.J.S. Dewar, D.H. Lo. J. Am. Chem. Soc. **97**, 1285 (1975).
- [22] Молекулярные постоянные неорганических соединений. Справочник / Под ред. К.С. Краснова. Химия, Л. (1979). 446 с.
- [23] В.А. Гриценко, Ю.П. Костиков. ФТТ.
- [24] V.J. Nithianandam, S.E. Schnatterly. Phys. Rev. **B36**, 2, 1159 (1987).
- [25] E.A. Repnicova, V.A. Gurtov, Z.A. Panova. Phys. Stat. Sol. (a) **119**, 113 (1990).
- [26] E. Wakita, F. Makimura, Y. Nakayama. J. Appl. Phys. **34**, 1425 (1995).
- [27] A.H. Edwards, W.B. Fowler. J. Phys. Chem. Sol. **46**, 7, 841 (1985).
- [28] В.А. Гриценко, Р.М. Иванов, Ю.Н. Мороков. ЖЭТФ **108**, 6, 2216 (1995).
- [29] R.D. Carson, S.E. Schnatterly. Phys. Rev. **33**, 4, 2432 (1986).
- [30] И.А. Брытов, В.А. Гриценко, Ю.П. Костиков. ФТТ **26**, 6, 1685 (1984).
- [31] I.A. Brytov, E.A. Obolenskii, Yu.N. Romashenko, V.A. Gritsenko. J. de Phys. **45**, C2-888 (1984).
- [32] И.А. Брытов, В.А. Гриценко, Ю.Н. Ромашенко. ЖЭТФ **89**, 362 (1985).
- [33] J.R. Chelikowsky, M. Schluter. Phys. Rev. **B15**, 8, 4020 (1977).
- [34] R.N. Nucho, A. Madhukar. Phys. Rev. **B21**, 4, 1576 (1980).
- [35] D. Lohez, M. Lannoo. Phys. Rev. **B27**, 8, 5007 (1983).
- [36] R.P. Gupta. Phys. Rev. **B32**, 12, 8278 (1985).
- [37] R. Hezel. Rad. Eff. **65**, 101 (1982).
- [38] В.А. Терехов, Н.М. Медведев, В.М. Андреев. Поверхность, 91 (1985).
- [39] D.L. Griscom. J. Non-Cryst. Sol. **24**, 155 (1977).
- [40] A.J. Bennett, L.M. Roth. Phys. Chem. Sol. **32**, 1251 (1971).
- [41] A. Simunek, G. Weich. J. Non-Cryst. Sol. **137/138**, 903 (1991).
- [42] I. Tanaka, J. Kawai, H. Adachi. Phys. Rev. **B52**, 16, 11 733 (1995).
- [43] J.J. Yeh, I. Lindau. Atom. Data Nucl. Data Tabl. **32**, 1 (1985).
- [44] G.K. Wertheim. In: Electron and Ion Spectroscopy of Solids / Ed. L. Fiermans, J. Vennik and W. Dekeyser. Plenum Press, N. Y. (1978). P. 195.