

PACS numbers: 61.46.Bc, 61.46.Nk, 73.22.Dj, 73.61.Cw, 81.07.Bc

Моделирование электронной структуры кремниевых напряженных наночастиц

В. В. Филиппов

*Липецкий государственный педагогический университет,
ул. Ленина, 42,
398020 Россия, Липецк*

Представлены результаты оптимизации атомной структуры и расчета электронных характеристик напряженных кремниевых кластеров Si_{51} на германиевой подложке. Изучены взаимодействие граничных атомов нанокластеров с подложкой и механизм переноса заряда в кремниевых наноструктурах. Анализируется влияние деформации и примеси на распределение электронных состояний.

Наведено результати оптимізації атомової структури та розрахунку електронних характеристик напружених кремнієвих кластерів Si_{51} на германійовій підложці. Вивчено взаємодію межових атомів нанокластерів з підложкою та механізм перенесення заряду в кремнієвих наноструктурах. Аналізується вплив деформації й домішок на розподіл електронних станів.

Results of optimization of atomic structure and calculation of electronic properties of strained silicon clusters Si_{51} on a germanium substrate are presented. Interaction of boundary atoms of nanoclusters with the substrate and mechanism of charge transfer in silicon nanostructures are studied. Influence of strain and impurities on distribution of electronic states is analyzed.

Ключевые слова: кремний, нанокристалл, кластер, деформация, подложка.

(Получено 22 ноября 2007 г.)

1. ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время в производстве полупроводниковых приборов происходит переход на уровень нанотехнологий, вследствие чего кластеры различных полупроводников, как потенциальные заменители микрослоев и объемных кристаллических материалов, являются объектом интенсивных экспериментальных и теоретических ис-

следований [1–4]. Эти исследования необходимы для прогнозирования свойств полупроводниковых изделий, т.к. для одного и того же числа атомов наноструктур при относительно незначительном изменении геометрии изменяется их энергия связи, распределение электронной плотности, энергетический спектр и другие важные параметры [1–7], не говоря уже о том, что эти характеристики принципиально отличаются для нанообъектов и объемных структур. Естественно, особое внимание уделяется наноформам кремния как потенциальным аналогам основного материала полупроводниковой электроники — монокристаллического кремния [8, 9].

Большой интерес на сегодняшний день вызывают исследования свойств кремниевых наноструктур, получаемых на подложках с параметрами решетки, отличными от кристаллического кремния, и находящихся по этой причине в напряженном состоянии. Одной из наиболее распространенных таких подложек для получения нанокремния является монокристаллический германий [10–12]. Согласно литературным данным, при теоретическом анализе кремниевых наноструктур на подложках обычно учитывают только обрыв кристаллической решетки в одном или двух направлениях [13, 14], но не конечное число атомов и наличие подложки. Использование некоторых общих модельных представлений о квантовых объектах также не всегда позволяет объяснять возникающие эффекты и особенности тех или иных структур. Поэтому необходимо более детальное рассмотрение свойств кремниевых наноструктур на подложках в плане учета ограниченности числа атомов в кластере и взаимодействия граничных атомов кластера с подложкой.

Интерес к кремниевым кластерам связан также с их ролью в технологическом процессе осаждения аморфного кремния. Отдельные работы посвящены изучению простейших примеров таких структур. Например, в [15] методом функционала плотности рассчитаны структуры нескольких гидрированных фрагментов алмазной решетки с количеством атомов кремния от 6 до 14.

В данной работе выполнен расчет некоторых электронных свойств напряженных кремниевых наночастиц на германиевой подложке, учитывающий эффекты взаимодействия граничных атомов кластера с подложкой.

2. МЕТОД РАСЧЕТА

На практике для расчета оптимальной геометрии макромолекул и нанообъектов используют, как правило, методы силовой механики и молекулярной динамики. В настоящее время одним из наиболее проверенных экспериментально является метод ММ+, являющийся модификацией силового поля ММ2 [16]. Основными усовершенствованиями ММ+ по отношению ММ2 являются то, что расчет

энергии деформации растяжения учитывается с точностью до членов третьего порядка, а энергия деформации валентных углов вычисляется с включением членов шестого порядка. Для двухатомной молекулы Si_2 метод ММ+ дает значение длины связи 0,222 нм при экспериментальном значении 0,225 нм [17] (отклонение 1,3%), тогда как расчет полуэмпирическим методом РМЗ дает длину связи 0,229 нм (отклонение от экспериментального 1,8%). Данный пример наглядно показывает, что применение метода ММ+ для определения геометрии кремниевых структур дает ошибку, сопоставимую с довольно точным квантово-химическим методом.

Для исследования электронных свойств кремниевых кластеров нами был использован полуэмпирический квантово-химический метод частичного пренебрежения двухатомным дифференциальным перекрытием NDDO РМЗ [3, 18]. Выбор метода расчета обусловлен тем, что на данный момент РМЗ является одним из наиболее точных, оптимизирован на большом числе экспериментальных данных (657 молекул, 18 параметров для каждого элемента). Результаты применения метода РМЗ к расчетам электронных характеристик кремниевых кластеров, как показано в работах [1, 3], согласуются с экспериментальными данными значительно лучше, чем результаты расчета *ab initio* на базисе 6-31G. Заряд на атомах определялся по методу Малликена [3, 11].

Предварительно расчеты нами были также выполнены в рамках расширенного метода Хюккеля и различными полуэмпирическими методами модификаций пренебрежения дифференциальным перекрытием (CNDO, INDO, ZINDO/1, MINDO3, MNDO). Однако эти методы, являющиеся более грубыми, не всегда выдавали даже качественно верные результаты, не всегда достигалась сходимость метода. В частности, расчет расширенным методом Хюккеля давал значение НОМО–ЛУМО-щели 0,15 эВ, что намного меньше, чем ширина запрещенной зоны объемного кремния, а заряд на поверхности, так же как при расчетах методами CNDO, INDO, ZINDO/1, MINDO3, получался отрицательным, что противоречит эксперименту, сходимость метода MNDO отсутствовала. Метод NDDO AM1 показал результаты, близкие к результатам метода РМЗ, но для кремниевых нанокластеров сходимость метода AM1 существенно хуже сходимости метода РМЗ.

Вышесказанное можно объяснить тем, что большинство квантово-химических полуэмпирических методов оптимизировано для расчетов органических углеродных соединений [19, 20]. Кроме того, известны работы по включению в базис метода РМЗ *d*-орбиталей (метод РМЗ(tm)) [21]. Однако на данный момент в литературе нет достаточного количества расчетов, позволяющих судить о преимуществах метода РМЗ(tm) по отношению к методу РМЗ. Применение неэмпирического метода Хартри–Фока, а также методов функционала плотности связано не только с огромными затратами машин-

ного времени расчета, но с проблемами выбора базиса, обменного и корреляционного потенциала, оценка электронной корреляции и т.д.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Для учета влияния деформации и взаимодействия с подложкой на свойства структуры были рассмотрены четыре вида кремниевых нанокристаллов.

Структура 1. Кремниевый нанокристалл как кластер идеальной решетки недеформированного кремния (с постоянной решетки 5,431 Å). В качестве объекта исследования была выбрана структура из 8 элементарных кристаллических ячеек ($2 \times 2 \times 2$), при этом атомы, имеющие только одну связь, удалялись. В итоге получили структуру из 51 атома (Si_{51}), приведенную на рис. 1. На данном рисунке поверхностные атомы с двумя незаполненными связями имеют порядковые номера 1–24, промежуточные (имеющие три связи) — 25–34, внутренние (имеющие четыре связи) — 35–51.

Структура 2. Кремниевый нанокристалл Si_{51} как кластер монокристаллического кремния, растянутый вдоль плоскости (001) и сжатый в направлении [001]. Величина растяжения в направлениях [100] и [010] выбиралась 4% (разница постоянных решеток кремния и германия), величина сжатия в направлении [001], согласно [12, 22], определена как 3,1%.

Структура 3. Исходная кремниевая структура вида 2 оптимизировалась методом ММ+, при этом координаты нижних атомов (1–4 на рис. 1) фиксировались для моделирования сцепления с подложкой.

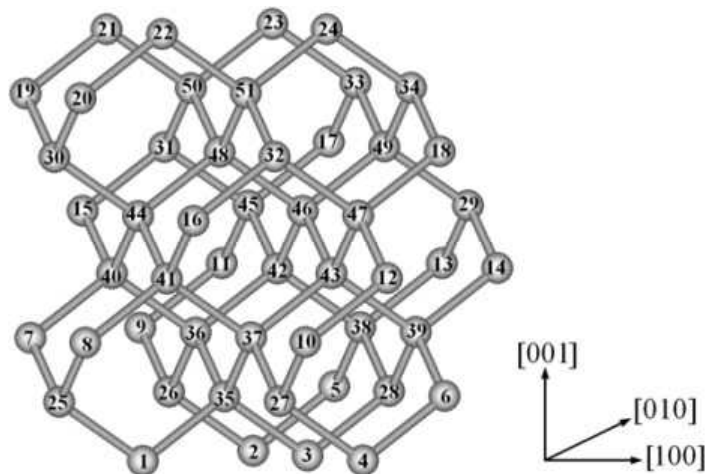


Рис. 1. Геометрическое строение недеформированной наноструктуры Si_{51} .

Структура 4. В исходной структуре вида 2 эффекты взаимодействия граничных атомов кремниевого кластера (атомы 1–4 на рис. 1) с германиевой подложкой учитывалось путем насыщения водородом ненасыщенных связей этих атомов. Затем геометрия структуры оптимизировалась методом ММ+, при этом положения граничных атомов кремния, насыщенных водородом, оставались фиксированными. В данном случае насыщение незаполненных связей атомов кремния, граничащих с подложкой, именно водородом объясняется близкими значениями электроотрицательностей водорода и германия [17]. Отметим, что визуальные отличия структур 2–4 от структуры 1 в масштабах рис. 1 почти не заметны.

Для указанных выше структур 1–4 были определены координаты и эффективные заряды атомов наноструктур, позволяющие судить о степени заселенности орбиталей и распределении электростатического потенциала внутри нанокристалла и вблизи его поверхности.

Как показал анализ оптимизированной методом ММ+ структуры 3, длины связей близлежащих атомов кремния в этой структуре, не учитывающей взаимодействия атомов кластера с атомами подложки, лежат в интервале от 2,329 Å до 2,376 Å (среднее значение 2,349 Å), с учетом взаимодействия с подложкой (структура 4) длины связей составляют от 2,309 Å до 2,384 Å, при этом среднее значение незначительно уменьшилось до 2,348 Å. Для обеих структур наибольшие значения длин связей характерны для внутренних областей нанокластеров. Для структур 1 и 2, которые не оптимизировались, средние длины связей были определены согласно [12, 22] по значениям постоянных решеток монокристаллического кремния с учетом деформаций решетки и составили 2,352 Å и 2,391 Å, соответственно. Таким образом, при переходе от структуры 1 к структуре 2 средняя длина связи за счет деформации растяжения, естественно, возрастает, однако последующая оптимизация структуры возвращает среднюю длину связи к значению близкому, но несколько меньшему, чем для кристаллического кремния (структура 3), а заключительный учет взаимодействия граничных атомов кластера с подложкой приводит к ее дальнейшему уменьшению (структура 4).

В таблице 1 приведены рассчитанные эффективные заряды всех атомов для наноструктур 1–4, а в табл. 2 — средние заряды атомов в этих структурах в зависимости от числа насыщенных связей. Как следует из этих таблиц, распределение заряда и электронная заселенность атомов в значительной степени зависит от геометрии структуры, что согласуется с результатами работ [1–7]. Причем, наиболее существенно меняется величина среднего заряда при переходе к структуре 4, тогда как для структур 1–3 средние значения зарядов изменяются менее значительно. Для всех рассматриваемых структур средний заряд атомов на поверхности положителен ($\sim +0,2e$), а внутренних — отрицателен ($\sim -0,2e$).

ТАБЛИЦА 1. Эффективные заряды атомов нанокластеров (в единицах элементарного заряда e).

№ атома	Номер кремниевой структуры				№ атома	Номер кремниевой структуры			
	1	2	3	4		1	2	3	4
1	0,315	0,249	0,258	0,173	27	-0,053	-0,091	-0,086	-0,015
2	0,118	0,111	0,127	0,076	28	-0,171	-0,228	-0,236	-0,139
3	0,293	0,299	0,333	0,067	29	-0,143	-0,164	-0,159	-0,01
4	0,115	0,112	0,127	0,064	30	-0,090	-0,104	-0,055	-0,041
5	0,191	0,198	0,191	0,377	31	-0,232	-0,170	-0,163	-0,171
6	0,184	0,198	0,191	0,373	32	-0,169	-0,171	-0,163	-0,171
7	0,252	0,329	0,312	0,303	33	-0,165	-0,119	-0,151	-0,143
8	0,314	0,329	0,312	0,298	34	-0,143	-0,118	-0,151	-0,140
9	0,127	0,138	0,108	0,154	35	-0,270	-0,263	-0,251	-0,118
10	0,114	0,138	0,108	0,157	36	-0,201	-0,192	-0,201	-0,188
11	0,195	0,215	0,19	0,215	37	-0,297	-0,192	-0,201	-0,185
12	0,184	0,215	0,19	0,215	38	-0,239	-0,215	-0,221	-0,248
13	0,278	0,286	0,297	0,236	39	-0,259	-0,214	-0,221	-0,248
14	0,255	0,286	0,297	0,233	40	-0,266	-0,271	-0,270	-0,248
15	0,333	0,267	0,287	0,284	41	-0,270	-0,271	-0,270	-0,244
16	0,293	0,268	0,287	0,288	42	-0,227	-0,207	-0,216	-0,195
17	0,300	0,295	0,271	0,268	43	-0,224	-0,207	-0,216	-0,193
18	0,253	0,294	0,271	0,264	44	-0,205	-0,28	-0,299	-0,297
19	0,127	0,122	0,105	0,101	45	-0,222	-0,257	-0,239	-0,224
20	0,117	0,122	0,105	0,102	46	-0,255	-0,231	-0,251	-0,271
21	0,194	0,172	0,189	0,18	47	-0,261	-0,256	-0,239	-0,22
22	0,189	0,172	0,189	0,179	48	-0,224	-0,225	-0,219	-0,204
23	0,295	0,221	0,252	0,237	49	-0,082	-0,110	-0,070	-0,138
24	0,275	0,222	0,252	0,238	50	-0,218	-0,257	-0,264	-0,251
25	-0,094	-0,095	-0,092	-0,07	51	-0,238	-0,257	-0,264	-0,252
26	-0,092	-0,091	-0,086	-0,016					

Следовательно, и потенциал на поверхности положителен по отношению к внутренней части структуры, а концентрация свободных носителей заряда на поверхности выше, чем в объеме, что подтверждается экспериментальными данными по исследованиям свойств поверхности объемных кристаллов Si [22]. При этом заряд положителен лишь для атомов, имеющих по две незаполненные связи. Отметим, что в структурах 1–3, в которых не учитывается взаимодействие с подложкой и которые фактически представляют изолированный кластер в вакууме, граничные атомы Si (1–4) по величине заряда не отличаются от прочих поверхностных атомов. Средние эффективные

ТАБЛИЦА 2. Средние значения эффективных зарядов атомов наноструктур (в единицах элементарного заряда e).

Положение атома	Число атомов	Номер кремниевой структуры			
		1	2	3	4*
Поверхностные (2 связи)	24 (№№ 1–24)	0,221	0,219	0,219	0,235
Промежуточные (3 связи)	10 (№№ 25–34)	-0,135	-0,135	-0,134	-0,092
Внутренние (4 связи)	17 (№№ 35–51)	-0,233	-0,230	-0,230	-0,219

*Граничные атомы (1–4) при расчете средних зарядов в структуре 4 не учитывались.

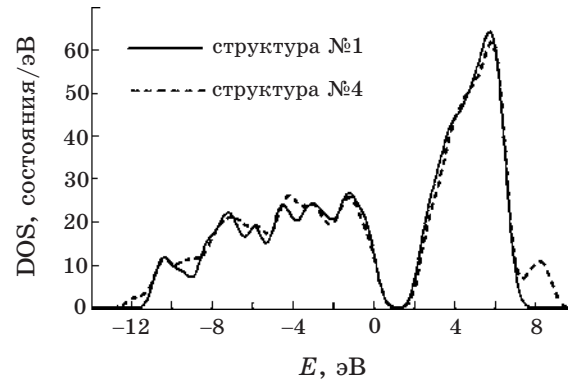


Рис. 2. Плотность электронных состояний в рассматриваемых кремниевых структурах 1, 4.

заряды на этих атомах для структур 1, 2 и 3 составляют соответственно $+0,210e$, $+0,193e$ и $+0,211e$. Однако учет взаимодействия граничных атомов с подложкой Ge (насыщенные водородом) в структуре 4 приводит к значительному уменьшению среднего заряда на этих атомах — до величины $+0,095e$. Тем не менее, эти атомы сохраняют знак заряда (положительный) и, соответственно, положительный потенциал, что качественно верно — электроотрицательность Ge (2,0) несколько выше, чем Si (1,9) [17]. Кроме того, как следует из эксперимента, на границе раздела объемных кристаллов Ge и Si в кремнии возникает положительный заряд [22]. Значительное изменение зарядов на атомах структур в приконтактной области свидетельствует о необходимости учета наличия граничных условий при расчете электронных свойств кремниевых наноструктур на подложках.

На основе рассчитанных нами методом РМЗ энергетических параметров, представленных в табл. 1, и плотности состояний на рис. 2 можно сделать вывод, что при деформации растяжения нанокластера кремния (структура 2) поднимается положение нижнего незаполненного и верхнего заполненного состояния, причем положение

ТАБЛИЦА 3. Некоторые энергетические характеристики исследуемых наноструктур (эВ).

Характеристика	Номер кремниевой структуры			
	1	2	3	4
Энергия связи	-193,54	-192,37	-193,44	-218,7
Верхнее заполненное состояние	-7,16	-7,15	-7,18	-7,05
Нижнее незаполненное состояние	-4,86	-4,75	-4,91	-4,73
НОМО–LUMO-щель	2,30	2,40	2,27	2,32
Точечная группа симметрии	C_{3v}	C_s	C_s	C_1

верхнего заполненного состояния изменяется более существенно. Заметим, что при переходе от структуры 1 к 4 плотность электронных состояний существенно не изменилась, появление небольшого дополнительного пика при 8 эВ можно объяснить насыщением граничных атомов кремния водородом (для структур 2, 3 данного пика нет и отличия плотности состояний от структуры 1 еще менее заметны). Величина энергетической щели между верхним заполненным состоянием и нижним незаполненным состоянием (НОМО–LUMO-щель) для любого из рассматриваемых нанокластеров больше ширины запрещенной зоны объемного кристалла, что качественно верно [1–7, 17]. Полученное в расчетах смещение нижнего незаполненного состояния соответствует изменению положения дна зоны проводимости в объемном кристалле [22].

Таким образом, резюмируя вышеуказанное, можно сделать следующие выводы.

1. Расчет оптимальной атомной структуры напряженных кремниевых наноструктур методом силовой динамики ММ+ показывает существенный разброс длин связей в этих структурах. При оптимизации атомной структуры необходимо учитывать влияние подложки.

2. Перенос электронного заряда в кремниевых наноструктурах осуществляется от поверхностных атомов к внутренним, т.е. атомы поверхности являются донорами. Взаимодействие граничных атомов с подложкой германия приводит к значительному уменьшению среднего заряда на этих атомах при сохранении его знака, т.е. на границе раздела нанокластер кремния–подложка германия в области нанокластера имеется эффективный положительный заряд.

3. Энергетическая щель между верхним заполненным состоянием и нижним незаполненным состоянием напряженной структуры изменяется при деформации не очень существенно. Для напряженного нанокристалла кремния верхний заполненный и нижний незаполненный уровни расположены выше, чем в ненапряженном нанокристалле.

4. Значительное изменение рассчитанных электронных свойств

напряженных кремниевых структур при учете взаимодействия с подложкой свидетельствует о том, что в расчетах электронных свойств полупроводниковых наноструктур на подложке следует не только оптимизировать геометрию, но и необходимо учитывать условия на границе раздела.

4. ВЛИЯНИЕ ПРИМЕСНЫХ АТОМОВ НА ЭЛЕКТРОННУЮ СТРУКТУРУ

Для изучения влияния примеси на свойства кремниевых наночастиц на поверхности германия нами исследовалась электронная структура наночастиц типа $XSi_{50}H_8$ (X — примесь). В данных структурах один из внутренних атомов кремния (атом 48 на рис. 1) замещался примесным. После этого геометрия структуры оптимизировалась методом ММ+ (положение нижних атомов кремния оставалось фиксированным) и определялась электронная структура методом NDDO PM3. Основные результаты расчетов представлены в табл. 4. В данной таб-

ТАБЛИЦА 4. Характеристики электронной структуры напряженных наночастиц $XSi_{50}H_8$.

Наночастица	Энергия связи, эВ	Верхнее заполненное состояние, эВ	Нижнее свободное состояние, эВ	НОМО–LUMO-щель, эВ	Заряд на примеси, e
$Si_{51}H_8$	-218,08	-7,05	-4,73	2,32	-0,27
$CSi_{50}H_8$	-221,05	-7,18	-4,80	2,38	-0,13
$GeSi_{50}H_8$	-218,45	-7,13	-4,74	2,39	-0,57
$SnSi_{50}H_8$	-216,10	-7,01	-4,63	2,38	-1,69
$BSi_{50}H_8$	-217,10	-6,02	-4,79	1,24	0,32
$AlSi_{50}H_8$	-214,48	-5,88	-4,51	1,37	-0,95
$GaSi_{50}H_8$	-219,28	-5,64	-4,50	1,14	-3,14
$InSi_{50}H_8$	-214,15	-5,73	-4,56	1,17	-1,47
$NSi_{50}H_8$	-219,28	-6,05	-4,86	1,19	-0,04
$PSi_{50}H_8$	-218,08	-5,92	-4,67	1,25	0,04
$AsSi_{50}H_8$	-216,94	-5,87	-4,68	1,19	0,32
$SbSi_{50}H_8$	-215,58	-5,86	-4,62	1,25	-0,12
$OSi_{50}H_8$	-216,72	-7,11	-4,64	2,47	-0,38
$SSi_{50}H_8$	-206,09	-7,08	-4,68	2,40	-0,14
$SeSi_{50}H_8$	-214,15	-7,17	-4,70	2,47	-0,05
$TeSi_{50}H_8$	-214,48	-7,03	-4,63	2,40	0,13
$ZnSi_{50}H_8$	-212,15	-7,01	-4,77	2,24	-0,05
$CuSi_{50}H_8$	-220,37	-5,89	-4,65	1,25	0,16
$NiSi_{50}H_8$	-217,58	-7,06	-4,74	2,32	-0,30
$FeSi_{50}H_8$	-220,93	-7,11	-4,66	2,44	-0,04

лице рассмотрены основные примеси, используемые в кремниевых материалах. Выбор атомов примеси обусловлен также наличием параметров данного элемента в параметризации РМЗ и характером сходимости при расчетах, т.к. при вычислениях электронных свойств отдельных структур сходимости метода РМЗ не наблюдается.

На основе представленных в табл. 4 результатов можно сделать следующие выводы.

1. Изменение величины эффективного заряда на атоме № 48 (рис. 1) говорит о том, что элементы примеси могут быть как донорами, так и акцепторами. Ширина щели между верхним заполненным уровнем и нижним свободным также может изменяться весьма значительно в зависимости от примеси. Особо можно отметить примесь никеля — при переходе от структуры Si_{51}H_8 к $\text{NiSi}_{50}\text{H}_8$ электронные свойства практически не изменились.

2. Примесь с нечетным числом валентных электронов уменьшает значение НОМО–LUMO-щели по отношению к структуре без примеси примерно в два раза. Положение энергетического уровня, образованного за счет примесного атома расположено примерно посередине НОМО–LUMO-щели кремниевой наночастицы без примеси.

3. Атом примеси, содержащий четное число электронов на валентном энергетическом уровне, изменяет ширину НОМО–LUMO-щели не значительно. Следовательно, заметное изменение НОМО–LUMO-щели происходит лишь в том случае, когда один из электронов атомов примеси не участвует в парных ковалентных связях.

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. С. И. Курганский, Н. А. Борщ, *Физ. техн. полупр.*, **38**: 580 (2004).
2. В. В. Ивановская, А. Л. Ивановский, *Теор. и эксп. химия*, **42**: 199 (2006).
3. Н. А. Борщ, Н. С. Переславцева, С. И. Курганский, *Физ. техн. полупр.*, **40**: 1457 (2006).
4. Г. С. Плотников, В. Б. Зайцев, *Физические основы молекулярной электроники* (Москва: МГУ: 2000).
5. S. M. Nakhmanson, A. Calzolari, V. Meunier, J. Bernhole, and M. B. Nardelli, *Phys. Rev. B*, **67**: 235406 (2003).
6. N. Sai and E. J. Mele, *Phys. Rev. B*, **68**: 241405 (2003).
7. P. J. Michalski, N. Sai, and E. J. Mele, *Phys. Rev. Lett.*, **95**: 116803 (2005).
8. А. А. Орликовский, *Известия вузов. Электроника*, № 5: 35 (2006).
9. В. Майская, *Электроника: НТБ*, № 7: 5 (2006).
10. S. V. Filimonov and B. Voigtlander, *Surface Science*, **512**: L335 (2002).
11. М. Я. Валах, В. Н. Джаган, Л. А. Матвеева, *ФТП*, **37**: 460 (2003).
12. В. П. Драгунов, *Науч. вестн. НГТУ*, №2: 71 (2003).
13. T. B. Boykin, G. Klimeck, M. A. Eriksson, M. Friesen, S. N. Coppersmith, P. Allmen, F. Oyafuso, and S. Lee, *Appl. Phys. Lett.*, **84**: 115 (2004).
14. D. E. Segall, I.-B. Sohrum, and T. A. Arias, *Phys. Rev. B*, **65**: 214109 (2002).
15. G. Onida and W. Andreoni, *Chem. Phys. Lett.*, **243**: 183 (1995).
16. М. Е. Соловьев, М. М. Соловьев, *Компьютерная химия* (Москва: Солон-

- Пресс: 2005).
17. С. С. Бацанов, *Структурная химия. Факты и зависимости* (Москва: Диалог-МГУ: 2000).
 18. J. J. P. Stewart, *J. Comput. Chem.*, **12**: 320 (1991).
 19. В. И. Минкин, Б. Я. Симкин, Р. М. Миняев, *Теория строения молекул* (Ростов-на-Дону: Феникс: 1997).
 20. Т. Кларк, *Компьютерная химия* (Москва: Мир: 1990).
 21. S. K. Ignatov, A. G. Razuvaev, V. N. Kokorev, and Yu. A. Alexandrov, *J. Phys. Chem.*, **100**: 6354 (1996).
 22. П. И. Баранский, В. П. Клочков, И. В. Потыкевич, *Полупроводниковая электроника. Свойства материалов* (Киев: Наукова думка: 1975).