

К. ф.-м. н. В. В. КОВАЛЬЧУК

Украина, г. Одесса, Южно-украинский гос. педагогический
ун-т им. К. Д. Ушинского
E-mail: wladik@tekom.odessa.ua

Дата поступления в редакцию
18.12.2001 г.

Оппонент д. т. н. В. А. МАЗУР
(ОГАХ, г. Одесса)

УЛЬТРАДИСПЕРСНЫЕ СУБФАЗЫ В МОЛЕКУЛЯРНОЙ ЭЛЕКТРОНИКЕ

Обзор посвящен систематизации результатов исследований механизмов возникновения, формирования и существования ультрадисперсных субфаз в твердотельной матрице.

Микроэлектроника постепенно превращается в субмикронную электронику — наноэлектронику или, как ее определяют авторы [1], *молекулярную электронику* (МОЭ). Сегодня уже очевидно, что МОЭ способна завоевать ключевые позиции в технологии электронного приборостроения XXI столетия.

Успех развития МОЭ основывается на продвижении инженерной технологии в область субмикронных пространственных масштабов и фемтосекундных отрезков времени, что открывает широкие перспективы развития совершенно иных — нанометровых технологий: нанооптики, нанолитографии, нанолокальной спектроскопии [2, 3]. С другой стороны, практика использования МОЭ позволит создать т. н. квантоворазмерные структуры: нульмерные — квантовые точки (КТ), одномерные — квантовые нити, квантовые проволоки, двумерные — легированные поверхностные структуры с квантовыми ямами, и другие системы, геометрические размеры которых определяются нанометрами (наноиглы, наноотверстия, нанотрубки и др.), т. е. *наноструктуры* (НС).

Пока существующие методы промышленного производства не позволяют создавать интегральные схемы нанометрового диапазона (ИС на основе НС — *ИНСы*), тем не менее интенсивно развивающаяся нанопизика поднимает на поверхность целый ряд качественно новых проблем электронного приборостроения, решение которых основывается на выяснении поведения и свойств отдельных НС, молекул, и даже атомов. В этой связи интенсивно исследуются, как теоретически, так и экспериментально, квантово-размерные структуры [4—6], и особое внимание здесь уделяется определению физико-химических свойств атомарных кластерных соединений (АКС) [7—9].

Например, для изготовления СБИС нового поколения (т. е. ИНСов) потребуются достаточно миниатюрные составляющие, а именно, такие элементы, которые созданы из полупроводниковых слоев (*p*-, *n*-типа) и диэлектрика размером в несколько нм [6]. Ре-

ализация такого высокого уровня миниатюризации приборов МОЭ разительно изменит возможности ЭВМ.

Многие вопросы современного электронного приборостроения определяются возможностью разрешения проблем транспорта и туннелирования носителей тока через квантово-размерные структуры, гранулированные НС и др. [10, 11]. Квантово-размерные структуры, проявляя эффекты квантовых ограничений, в свою очередь, определяют квантовые эффекты кластеризованных материалов (КМ) [12—14]. Другим и, на наш взгляд, очень важным аспектом МОЭ является то, что управление функциональными возможностями электронных приборов такого класса будут осуществлять носители тока, атомы, молекулы и АКС.

Особый интерес вызывает тот факт, что одно из передовых “электронных” государств мира — Япония в 1992 году предложила (сроком на 10 лет) и реализует специальный международный проект “Атомная технология” с общим объемом финансирования в 250 млн. долларов США [4]. Ключевыми определенными следующие вопросы: 1) селективное исследование атомных поверхностных слоев Si(111) 7×7 с помощью сканирующей электронной микроскопии; 2) разработка специальной технологической методики “селекции” по геометрическим размерам Si-АКС; 3) селективное эпитаксиальное наращивание нанометровых Si-АКС с использованием тонких оксидных окон размером в 0,3 нм и др.

Важно отметить, что ежегодно публикуется свыше 5000 технических и научных статей, затрагивающих вопросы “кремниевой” проблематики (см. библиогр. [6, 7]). И тем не менее получаемой информации недостаточно. Это связано, во-первых, с тем, что большинство исследований подчинено определению свойств объемного материала, т. е. таких объектов, которые имеют относительно большие геометрические размеры (микрон и более). При переходе от макро- к микрометровой шкале свойства материала изменяются несущественно. Поэтому физика электронного приборостроения в микронном диапазоне почти аналогична макроскопической физике (т. е. физике непосредственного наблюдения за объектом).

Таким образом, результаты поиска новейшей информации относительно свойств Si-НС становятся актуальными в определении новых сфер их применения в электронном приборостроении. При этом следует добавить, что выявление функциональных оптических возможностей кремниевого ЧИПа (ИНСа) — это дополнительный и весьма немаловажный стимул

Автор благодарит проф. В. А. Дроздова за ряд ценных замечаний, высказанных в процессе подготовки рукописи к печати.

к решению проблем электронного материаловедения. Технологическая интеграция оптически функционирующих элементов на основе Si-АКС в значительной степени может быть достигнута с помощью т. н. прямозонных полупроводниковых компонент.

Поскольку и *c*-Si, и *a*-Si имеют малую эффективность лучеиспускательной рекомбинации, считалось, что для создания излучателей света сами по себе эти материалы являются непригодными. Фундаментальные причины этого кроются не только в прямом характере структуры зон, но также в пространственном разделении и локализации заряда.

В 1990-е годы, в связи с продвижением в развитии нанометровых технологий, ситуация коренным образом изменилась. Группа японских физиков выявила в *por*-Si интенсивную люминесценцию в видимой области спектра при комнатной температуре [15]. Эффективная люминесценция также была определена в пленках кремния, которые могут быть представлены как некая "смесь" нанокристаллической и аморфной фаз [16, 17]. Люминесценция имплантированного кремния, нелинейное стимулированное излучение, направленное голубое свечение и ряд других фактов — это те примеры, которые свидетельствуют в пользу проявления "оптических свойств" кремния [18—20].

В настоящее время для объяснения эффективной люминесценции кремния (в *por*-Si, в наноразмерном кристалле) в видимой области спектра используют две различные модели [21, 22]. Одна из них основывается на эффектах размерного квантования электронов в АКС, что объясняет возможность излучения световых волн кластерным кремнием в видимой области спектра. (Экспериментальная зависимость длины волны излучения от геометрии и размеров АКС доказывает позитивный момент этого подхода.) Вторая модель объясняет люминесценцию Si-АКС, основываясь на том факте, что система кластеров имеет довольно большую поверхность, где поверхностные атомы кремния формируют химические связи типа Si—H (H — атомы водорода), или Si—O—H. Предполагается, что люминесценция обусловлена электронными переходами в приграничных фрагментарных кластерных группах. Эта модель объясняет чрезвычайную чувствительность параметров люминесценции к термообработке и другим физико-химическим влияниям, в т. ч. и к структурному составу поверхности НС, т. е. зависит от концентрации т. н. "оборванных" химических связей в АКС. Естественно, что обе эти модели ограничены и определяют лишь некоторые свойства *por*-Si.

Технологические проблемы обусловлены трудностями в проведении эффективной токовой накачки Si-АКС, "погруженных" в изолирующую твердотельную матрицу. Причем идея поиска эффективной среды в системе Si—SiO₂ сейчас особенно популярна [23].

В [23] приведены результаты экспериментальных исследований структурных характеристик сферически-подобных нанометровых частиц кремния (Si-НЧ), полученных с помощью импульсного CO₂ лазерного отжига. Геометрическая структура НЧ была выявлена с помощью дифрактограмм цифрового электронного микроскопа. Выяснено, что Si-НЧ образована из кристаллически-подобного ядра, "закрытого" аморфной (окисной) оболочкой.

Толщина этой оболочки линейно уменьшается (приблизительно от 2,9 до 0,8 нм) при уменьшении размеров Si-НЧ. Как видим, электронно-микроскопический цифровой анализ позволяет определить диаметр НЧ, а также толщину окисного слоя. Полученные Si-НЧ имели довольно широкое распределение по геометрическим размерам: радиус НЧ изменялся в пределах от 2 до 25 нм.

Качественные экспериментальные исследования характеристик эмиссии позволили получить величину оптического усиления для образца с АКС в кварце на ~15% меньше, чем для АКС, локализованных в SiO₂-слое на поверхности *c*-Si. Тем не менее для электролюминесценции SiO₂-среда не является оптимальной, чтобы реализовать эффективную инжекцию зарядов в Si-АКС — слишком велика запрещенная зона. Аналогичные эффекты обнаружены в оксидированном *por*-Si [24]. Поэтому большинство практических разработок были направлены на усовершенствование технологии получения твердотельной матрицы SiO₂ с высокой плотностью квантовых точек в форме Si-АКС [18]. Варьируя концентрацию кислорода и силана, из которого проводится осаждение кремния, удается получать слои SiO₂, в которых содержатся Si-АКС [25]. Эта технология позволяет "строить" тонкослойную структуру, где среднее токовое возбуждение электролюминесценции АКС составляет 10—50 мА/см². Сверхрешетки чередующихся слоев Si / SiO₂ — это наборы упорядоченных спаренных слоев.

Уменьшения ширины запрещенной зоны (ΔE_g) по сравнению с системой SiO₂—Si-АКС можно добиться путем нанесения кремния из силана в атмосфере азота [20, 26]. Образуется слоеный "пирог" типа Si₃N₄—Si, причем нанометровые частицы кремния характеризуются аморфной структурой.

Заметим, что *a*-Si имеет $\Delta E_g \approx 1,6$ эВ ($\Delta E_g = 1,1$ эВ для *c*-Si, что отвечает ИК-области спектра). "Расширение" ΔE_g облегчает инжекцию зарядов вовнутрь Si-АКС. Варьируя степень аморфности Si-НЧ, реализуя переход от "упорядоченной субфазы" (в смысле симметрии, близкой к симметрии кристаллической решетки) к разупорядоченной ее структуре, можно добиться свечения в области видимого спектра. Квантовая эффективность электролюминесценции составляет в этом случае ~0,2% при сопротивлении слоев в десятки Ом [18].

Экспериментально выявленные еще в 1980-е годы кластерные пучки кремния, вылетающие (сублимирующие) с поверхности полупроводника в условиях ультравысокого вакуума, характеризуются высокой концентрацией оборванных химических связей (ОХС) [27, 28]. Поэтому в большинстве моделей тех лет [29 и др.] основное внимание отводилось решению проблемы пассивирования ОХС в АКС — и путем моделирования, и экспериментально.

Как ни парадоксально, но "массированное" квантово-механическое моделирование различных по размерам и симметрии Si-АКС оказало медвежью услугу в исследовании оптических свойств квантово-размерных структур, которые требовали точных оценок энергетических характеристик. Большинство модельных результатов определялись выбором методики расчета. В теории применялись подходы, предложенные

ранее для определения электронной структуры молекул [30], т. н. неэмпирические, полуэмпирические схемы [31]. Корректно полученные оценки вероятных пространственных конфигураций продемонстрировали зависимость многих характеристик АКС от их размеров (количества атомов). Нарастание АКС приводило к переходу к упрощенным расчетным методам анализа, а следовательно, и к неточным оценкам.

Несмотря на то, что история развития исследований НС-материалов, а также практические разработки в этом направлении не привели к появлению новых эффективных излучателей на основе кремния, тем не менее стало очевидным, что сформированные НС-субфазы типа Si-АКС способны все же вызвать люминесценцию. В пользу вывода о том, что именно квантово-размерные структуры Si ответственны за возникновение необычного свечения, свидетельствуют результаты достаточно большого количества работ, например [32 и др.].

Автор работы [33], проводя классификацию электрических свойств *por*-Si, отмечает, что одну из групп составляет структура с высокой степенью пористости (более 40—50%). Такой *por*-Si представляет собой совокупность Si-нанокристаллитов (размером 1—10 нм, т. е. Si-АКС, Si-НС) с различной фрактальной размерностью [34], находящихся в пористой матрице сложного химического состава. Отмечается, что для таких НС (АКС), размер которых <4 нм, характерным является проявление квантово-размерных эффектов, которые приводят не только к квантованию энергетического спектра носителей, но и к увеличению ΔE_g (до 1,8—2,9 эВ), а также к росту диэлектрической проницаемости. Локализация носителей заряда в такой структуре становится причиной аномально высокого удельного сопротивления ($\sim 10^{11}$ Ом·см). По мере возрастания пористости структуры (40—80%) растет энергия активации температурных зависимостей темновой проводимости: от 0,3 до 1,01 эВ.

Определяя *por*-Si как *кластеризованный материал* (КМ), подчеркнем, что в такой структуре ΔE_g может изменяться соответствующим образом с изменением геометрических размеров пор. Поэтому начиная с момента открытия при комнатной температуре видимой фотолюминесценции в *por*-Si и Si-НЧ [15 и др.] основная цель теоретических исследований состояла в определении зависимости ΔE_g от размеров (количества атомов — n) и геометрии (симметрии) АКС [35]. Как предполагалось в [36, 37], квантовый размерный эффект, проявляющийся в сдвиге ΔE_g в область ультрафиолета при уменьшении n , становится причиной проявления новых оптических свойств материала.

Результаты многолетнего изучения КМ стали мощным мотивирующим фактором интенсификации исследований Si-АКС. Накопленный опыт свидетельствовал, что именно пространственная симметрия АКС определяет специфику свойств НЧ, КМ и др. Поэтому использование корректного компьютерного моделирования [38] позволит не только определить атомную, электронную и фононную структуру, но и выявить механизмы зарождения, роста и формирования АКС как определенных ультрадисперсных субфаз. Новые наработки в этой области служат толчком к дальнейшему развитию фундаментальной теории химической связи [39].

Увеличение числа теоретических работ, посвященных изучению т. н. “первородных”, фрагментарно-подобных АКС (т. е. таких АКС, которые словно “отщипнули” из кристаллической решетки Si; обозначим далее такие АКС аббревиатурой ПАКС), было связано с предположением, что АКС образуют *por*-Si и являются его составными частями [35]. *por*-Si “построен” из Si-АКС с высокой концентрацией ОХС как из “блоков” (как правило, это зачастую энергетически невыгодные пространственные конфигурации [8]).

Авторы [40] классифицировали Si_n -АКС по двум категориям. Кроме сетки атомов, имеющих тетраэдрическую симметрию (Т-АКС) (tetrahedral-bond-network: TBN) предложена модель полиэдрической структуры (П-АКС) (polyhedral-bond-network: PBN).

Рис. 1 наглядно иллюстрирует различие в геометрии Т-АКС и П-АКС [38] на примере малых Si-АКС.

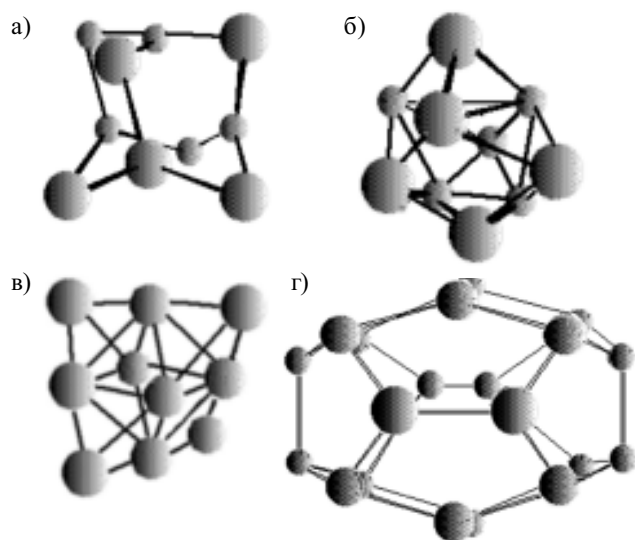


Рис 1. Схематическое изображение возможного пространственного расположения атомов в кластерных структурах с 10 (а, б, в) и 20 (z) атомами кремния: а — Т-АКС; б, в, z — П-АКС

Следует обратить внимание на то, что малые по размеру АКС имеют большой процент поверхностных атомов [41]. Если поверхность малого АКС реконструируется, неизменного кластерного ядра в нем не существует, т. к. процесс реконструкции сводится к образованию самой оптимальной из всех возможных пространственных конфигураций атомов (с некоторым количеством ОХС).

Исследования Si_n -АКС с помощью масс-спектрометрической техники (для $n \leq 7$), оценки энергии когезии (для соответствующих катионных кластерных соединений кремния [9]), а также калориметрические замеры с $150 \leq n \leq 890$ (т. е. НС) [42, 43] позволяют установить связь геометрических и энергетических (энергия связи АКС — E_{cb}) характеристик для АКС и НС (рис. 2). Просматриваются три характерных области пространственно-энергетической корреляции. Малые АКС (первая область) построены компактно, образуя Т-АКС и П-АКС с возрастающим значением E_{cb} по мере их геометрического увеличения. Далее идут АКС среднего размера (10—25 ато-

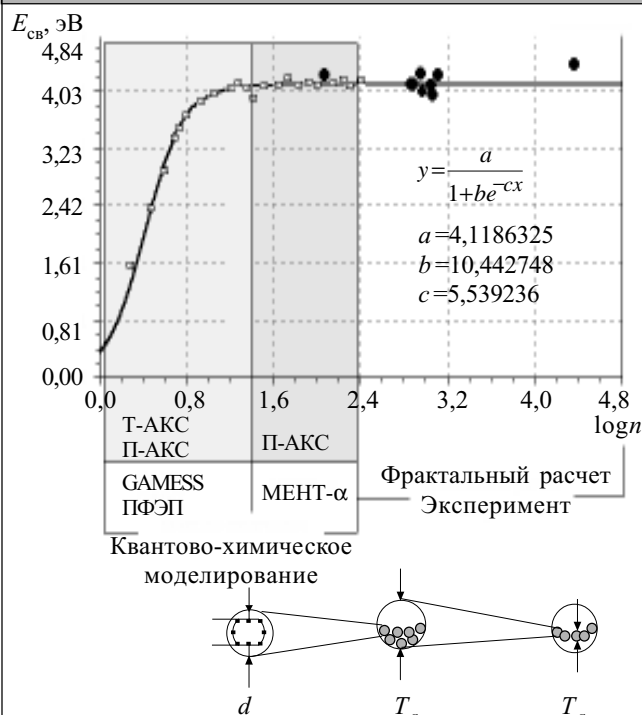


Рис. 2. Размерная зависимость (n — количество атомов) энергии связи АКС и НС кремния, рассчитанных в рамках неэмпирических и параметризованных схем [41, 68, 76], а также исходя из результатов фрактального анализа [34] и данных эксперимента [43]:

y — E_{sv} ; x — $\log n$; d — "диаметр" П-АКС; T_a — "радиус" НС (мов), которые возникают из мелких, достаточно стабильных АКС (например из 6,10 атомов Si), приобретая форму эллипсоидальных (вытянутых) или сферически-подобных "клетчатых" структур с почти одинаковыми значениями E_{sv} . Пример такого Si_{20} -АКС приведен на рис. 1, з.

В работе [44] было сделано предположение, что плотно упакованные структуры Si-АКС проявляют свойства более металлические, нежели ковалентные. Такой вывод стал причиной широкой дискуссии и движущим фактором в разработках новых и усовершенствовании известных экспериментальных методов и расчетных квантово-химических схем. Наиболее полно результаты подобных обсуждений представлены в [45]. Тем не менее на сегодня данная тема не является вполне выясненной и закрытой. В этой связи заметим, что c -Si — это типичный полупроводник, основные изменения электронных свойств которого можно связать с уменьшением его геометрических размеров, переходя в нм-диапазон, т. е. к таким объектам, как квантово-размерные структуры: НС, АКС. Критический размер АКС (n^*) в процессе перехода от металлической "субфазы" к ковалентной существенно разнится: $n^* = 100—1000$ [53], $n^* = 50$ [44].

Авторы [7,8] отметили важные структурные перестройки Si-АКС и связывают их с изменением количества атомов: кластеры, содержащие приблизительно 27 атомов, имеют вытянутую (эллипсоидально-подобную) форму. Структуры, содержащие большее количество атомов, — напоминают сферу. Характерно резкие изменения свойств средних по размерам АКС были выявлены с помощью фотоионизацион-

ных измерений для $n^* = 20—30$ [8] и в расчетах размерных зависимостей частоты сдвига в спектрах Рамана ($n^* = 500$) [42].

Зависимость от размеров АКС (его симметрии) выявлена для электрической поляризации. Это подтверждают и результаты работы [46]. На основе метода функционала электронной плотности были рассчитаны дипольные моменты некоторых геометрических конфигураций Si_n -АКС, где $10 \leq n \leq 20$. Степень поляризации (α) АКС немонотонно изменялась в зависимости от n . Расчеты показали, что значение α является лимитированной величиной (т. е. существенно не изменяется в зависимости от n) и находится в пределах погрешности соответствующих значений для c -Si. По оценкам [46], $n^* > 20$.

Отметим, что поверхность c -Si и Si-ПАКС имеет высокую плотность ОХС [27, 28 и др.]. Минимизация поверхностной энергии осуществима путем реконструкции, например, типа 7×7 поверхности Si(111) (это наиболее известный пример), что вызывает уменьшение концентрации поверхностных ОХС без их полного уничтожения. Следовательно, перестройка Si-поверхности влечет за собой изменение ее химической активности. Пассивирование ОХС кислородом становится причиной того, что реактивность Si-поверхности заметно убывает (по сравнению с c -Si — довольно существенно), что проявляется также в случае пассивирования ОХС в Si-ПАКС [41, 47].

Пассивация ОХС в ПАКС приводит к его структурной релаксации. Возникающее при этом перераспределение электронной плотности в ПАКС вызывает изменение механических характеристик как АКС в целом, так и отдельных ХС в ПАКС [48].

Величина ΔE_g нейтральных и Si-ПАКС была определена экспериментально в работе [49]. Используя селекцию ПАКС по размерам, Si_{10} -ПАКС осаждали на поверхность Au(001)(5×20) в условиях ультравысокого вакуума. Сканирование с помощью туннельной микроскопии позволило исследовать структуру поверхности кремния. После анализа ВАХ оценивалась ширина запрещенной зоны ($\Delta E_g \approx 1 \text{эВ}$). Некоторые рефлексы туннельной микроскопии демонстрировали темные окружности вокруг ПАКС за счет передачи заряда из окружающей кластер металлической подложки. Разброс в геометрических размерах ПАКС наблюдался в тех случаях, когда проводилось осаждение кластеров (определенных размеров) на поверхность подложки. Это свидетельствовало о том, что осажденные Si_{10} -ПАКС взаимодействовали не только между собой, но и с подложкой. Полученное значение $\Delta E_g \approx 1 \text{эВ}$ свидетельствует о том, что это ширина запрещенной зоны не отдельного ПАКС, а взаимодействующей системы "ПАКС—подложка". Подобные эксперименты получили дальнейшее развитие в [50].

Увеличение числа атомов в АКС приводит к возрастанию возможных его геометрических "образов". Учет таких геометрических "перестроек" (в рамках данного АКС) модельными методами с применением хорошо зарекомендовавших себя квантово-химических схем — это непростая задача, но в условиях постоянно наращиваемой мощи современных ЭВМ (создания компьютерных массивов) вполне реализуема. Например, АКС, содержащее 29 атомов Si и 24 ОХС, которые пассивированы 24 атомами водорода (АКС- $Si_{29}H_{24}$), имеет достаточное многообразие возможных пространственных конфигураций [19]. Энергетически же именно сферически-подобная его (АКС) форма с одновремен-

ной симметрией тетраэдра является наиболее выгодной. Это проявляется в рефлексах АКС-Si₂₉H₂₄, соответствующим тетраэдрической симметрии. Пассивация ОХС изменяет ΔE_g : полностью насыщенное водородом Si-АКС имеет запрещенную зону на ~1 эВ меньше, чем АКС-Si₂₉H₂₄, а для АКС-Si₂₉H₁₂ ΔE_g на 2 эВ больше, чем для АКС-Si₂₉H₂₄.

Таким образом, можно считать, что сегодня сформировалось перспективное направление в развитии нанофизики: разработка принципиально новых сред — ультрадисперсных, в состав которых входят ультрадисперсные субфазы (УДС) в форме квантовых точек, квантовых нитей, систем квантовых точек и других квантово-размерных структур. Конкретным примером УДС могут служить разные Si-АКС: по симметрии (Т-АКС, П-АКС), природе своего возникновения (ПАКС), проявляющие как металлические свойства, так и свойства полупроводников благодаря изменению “плотности упаковки”. Причем механизмы формирования, перестройки отмеченных УДС могут быть синергетическими, а вопрос об “увязывании” вероятной геометрии УДС (с одновременным учетом симметрии) с проявлением рефлексов в дифракционной картине во многих экспериментах остается зачастую открытым.

Предложенные впервые теоретически, как модельные структуры, небольшие Si-АКС определялись как фрагменты квантово-размерного кремния (с-Si) [31]. Допускалось, что Si-АКС имеют алмазную структуру с нерелаксированными поверхностными атомами. Такое Т-АКС имеет довольно большую концентрацию ОХС и достаточно низкое значение координационного числа [39]. Расчеты с-Si-подобных фрагментов [51] обнаруживали или их высокую нестабильность, или довольно высокие значения энергий в локальном минимуме структуры. Тем не менее модельные исследования электронной структуры Si-АКС (с количеством атомов от 2 до 14) в рамках неэмпирических схем [42–44] позволяют корректно определить основное энергетическое состояние подобных ультрадисперсных субфаз.

Чтобы провести оптимизацию пространственного расположения атомов в Si-АКС, в [52] использовали некоррелированные волновые функции Хартри—Фока (HF). Для оптимизации геометрии Si-АКС в [53] воспользовались методом функционала электронной плотности (ФЭП) в локальном приближении (LDA). Для выяснения оптимальной симметрии Si-АКС в [54] усовершенствовали метод конфигурационного взаимодействия, ранее использовавшегося для исследования характеристик молекул [30]. Предложенная в свое время техника модельного отжига [55] получила дальнейшее развитие [56]. Вышеупомянутые теоретические схемы позволили в достаточной степени точно определить равновесные пространственные конфигурации малых (до 10 атомов) Si-АКС. Si_n-АКС, где $n < 10$, имеют компактно расположенные пространственные конфигурации с кубической (октаэдрической) или икосаэдрической симметрией.

Параллельно с теоретическим моделированием структурных, электронных и фононных свойств Si-АКС использовались и различные экспериментальные методики: фотофрагментации [57], возгонки с поверхности [27] и ионной имплантации [28], масс-спектрометрии [58], фотоэмиссионной спектроскопии [59, 60].

Возросший интерес к технике лазерного распыления поверхности вещества [61] также мотивировал выяснение механизмов образования АКС-Si. Кроме того, эффективными оказались исследования с участием фотохимических реакций [62], а также применение спектроскопии Рамана [63]. Все большую популярность приобретает метод ультравысоковакуумной туннельной микроскопии (УВВ ТМ) [1].

Величиной, которая эквивалентна ΔE_g , является теоретически определяемая разность энергий между самым верхним занятым ($E_{НОМО}$) и самым нижним свободным ($E_{ЛОМО}$) уровнями энергий АКС ($\Delta E = E_{НОМО} - E_{ЛОМО}$). Теоретические работы [53, 64, 65] демонстрируют, что ΔE для малых АКС сильно изменяется с изменением размеров и геометрической симметрии. В [66] проведен неэмпирический расчет с учетом всех электронов АКС, рассчитаны зависимости $\Delta E(n)$, где количество атомов кремния изменялось в пределах $n = 9-14$. Продемонстрировано, что $\Delta E(n)$ имеет осциллирующий характер и что осцилляции можно “загладить” путем “подбора” определенной симметрии АКС. Проведен исчерпывающий анализ всевозможных геометрических структур АКС с $n = 9-14$. Для АКС типа Si₉ и Si₁₄ найдены равновесные пространственные конфигурации, для остальных АКС (с $n = 10-13$) энергетические характеристики близки к хорошо известным данным других исследователей.

Проанализируем детальнее следствия модельного насыщения (пассивации) ОХС. Непассивированные Si-АКС должны иметь существенно меньшую энергетическую зону ΔE_g , чем об этом свидетельствуют оценки с учетом квантовых эффектов [35]. Для малых Si-АКС ΔE_g меньше, чем соответствующая величина для с-Si [53], и даже, согласно расчетам [67], равняется нулю. Оценки плотности состояний для Si-ПАКС показывают, что разность энергий имеет нулевое значение. Для полностью “насыщенного” Si-АКС ширина зоны увеличивается и достигает значения $\Delta E_g = 3,4$ эВ [53].

Автором настоящей статьи накоплен определенный опыт в проведении исследований разных по размерам Si-АКС (Т-АКС, П-АКС, ПАКС) с использованием молекулярно-динамической схемы, которая основывается на методе ФЭП (алгоритм GAMESS) и в его параметризованном варианте [68]. Главный вывод сводится к тому, что Т-АКС и П-АКС существенно отличаются друг от друга по отношению к экспериментальному процессу гидрогенизации (галогенизации), т. е. к модельной процедуре насыщения ОХС [47, 54–56]. Иллюстрацией подобного вывода может быть также анализ Si₆-АКС, предложенный в [69]. Внимание к таким АКС обусловлено тем, что уплотнение пространственной конфигурации именно малых Si-АКС ($n \leq 10$) приводит к уменьшению концентрации ОХС по сравнению с ПАКС. Кроме этого, выполнены исследования, позволившие экспериментально идентифицировать именно Si₆-АКС [70].

Свойства средних (по размеру) Si-АКС с количеством до сотни атомов являются наименее определенными. Именно для таких структур имеет место существенная зависимость ΔE от рассматриваемой пространственной и геометрической конфигурации АКС. Расчеты [67] указывают на коррелированное возрастание ΔE_g (в пределах от 1,3 до 2,5 эВ) с уменьшением n для Si-НС (геометрические размеры изменялись от 5 до 1 нм). Согласно полученным экспериментальным значениям (методом эффективных масс), для Si-НЧ величина ΔE_g подчинялась обратной степенной зависимости от геометрических размеров наноструктуры (т. е. от n в АКС). В [37] предлагались разнообразные степенные законы.

Следует подчеркнуть, что результаты теоретических исследований пассивированных Si-АКС доминируют,

в отличие от данных о свойствах Si-ПАКС. Относительно концепции ПАКС заметим следующее. На наш взгляд, ПАКС – это категория, аналогичная определению “реальная” АКС, предложенному в конце 1980-х годов [71]. Была выдвинута идея изучения Si-АКС не как удобных (для проведения теоретических исследований) расчетных твердотельных моделей [72], а именно как реальных структур. Этот подход получил свое дальнейшее развитие при проведении компьютерного квантово-химического моделирования поверхностных слоев кремния и HС [41, 47].

Подводя итог, подчеркнем, что дальнейшее развитие нанометровых технологий (НТ) изготовления МДП(МОП)-структур с необходимостью связывают с переходом к квантово-размерным структурам (КРС). В этом геометрическом диапазоне в игру вступают туннельные эффекты, которые и будут определять физику транзисторов недалекого будущего. Новые специфические функциональные возможности электронного приборостроения, определяемые наноразмерностью объектов, становятся уже ожидаемыми и даже реальными в текущем развитии индустриального производства [4].

Для КРС, благодаря ограничениям, накладываемым на волновую функцию электрона потенциальным барьером, в ΔE_g образуются локальные уровни (по аналогии с донорными или акцепторными примесями в процессе легирования полупроводника). Возникающую проблему формирования множества локальных уровней в зоне ΔE_g , т. е. довольно тонкого управления всем ансамблем структурных дефектов и примесей, необходимо обязательно связывать с возможностью заранее заданного распределения HС, АКС в твердотельной матрице. Это отличает кластерную НТ управления свойствами полупроводника от другой технологической процедуры, например, легирования. Ограничения, которые накладываются в таком случае, сводятся к подавлению естественных примесей, ответственных за создание локальных уровней в запрещенной зоне полупроводника (это актуально, когда растворимость примесей слишком мала).

Интересные возможности открывает процедура капсулирования легких атомов (H, F, Li, Na и др.) вовнутрь полый П-АКС. В этом случае механизмы влияния на свойства материала отличаются от обычного легирования. Подобная процедура “управления” свойствами КРС основывается на создании т. н. клатратных (clathrate) атомных структур (КАС), которые успешно изучаются химиками. С нашей точки зрения, полупроводниковые КАС, например кремния [73], можно рассматривать как перспективные компоненты (в виде ультрадисперсных субфаз) современного и будущего электронного приборостроения.

При контакте металла с полупроводником возникает барьер Шоттки, а уровень Ферми (E_F) полупроводника, как правило, закрепляется на гетерограницы в ΔE_g . Для контакта металлов с таким полупроводником, как GaAs, уровень E_F закрепляется вблизи середины ΔE_g [7].

У полупроводников *n*- и *p*-типа возникают области обеднения (ΔE_0). Ширина $\Delta E_0 = f(\sigma)$, где σ — проводимость полупроводника. Поскольку мышьяк

есть полуметалл, система As-АКС мышьяка в GaAs представляет собой совокупность пассивированных барьеров Шоттки, каждый из которых окружен областями ΔE_0 . Увеличение концентрации As-АКС приводит к перекрытию локальных областей ΔE_0 с возможной реализацией фрактального протекания по всему объему, после чего твердотельная матрица (ТМ) GaAs должна приобрести полуизолирующие свойства, которые и наблюдаются в эксперименте. Высокая концентрация АКС и наличие закапсулированных электрических полей приводят к быстрому нарастанию и рекомбинации неравновесных носителей заряда. Характерное время жизни носителей заряда ($\tau_{ж}$), экспериментально полученное в ТМ GaAs, содержащих АКС As, составляет менее 1 пс. Таким образом, удельное сопротивление с рекордно малыми $\tau_{ж}$ для носителей заряда и высокое структурное совершенство ТМ-GaAs/As-АКС доказывают их чрезвычайную привлекательность для различных инженерных задач в молекулярной электронике. Тут и фотоприемники (активной областью которых является ТМ-GaAs/As-АКС) с временем отклика менее чем в 1 пс, и полевые транзисторы и СБИС, где такой материал используется в качестве буфера для увеличения пробивного напряжения на затворе и для устранения ряда паразитных эффектов в канале [7].

Если АКС составляют основную часть кластеризованных материалов, то изменение их размеров и концентрации приводит к изменению фундаментальных свойств полупроводника: величины проводимости, энергии фундаментальных оптических переходов и др., т. е. возникает абсолютно новая инженерия для создания оригинальных полупроводниковых структур со свойствами, которые отличаются от свойств аналогичного монокристалла или аморфного полупроводника.

Сегодня лазеры на квантовых точках (Л-КТ) по своим основным параметрам не уступают лучшим полупроводниковым лазерам с квантовыми ямами в активной области (а по стабильности порогового тока даже значительно превышают их). Поэтому в ближайшем будущем можно ожидать дальнейший прогресс Л-КТ за счет оптимизации приборов, а также использования новых материалов как в качестве ТМ, так и КРС. В частности, в Si-оптоэлектронике одним из ключевых устройств может стать Л-КТ, где в качестве активной оптической среды усиления выступают КРС. Использование кремния в форме квантовых точек (например Si-АКС), рассеянных с заданным характером функции распределения в кремниевой матрице диоксида, позволяет предложить алгоритмическую модель построения кремниевого лазера.

Эффективной является инженерия, основанная на т. н. “увлечении” одного электрона, расположенного в АКС, к запирацию узкого канала за счет эффекта кулоновской блокады электронного транспорта. В этой связи возможно создание нового класса электронных приборов: 1) одноэлектронных элементов памяти; 2) полевых транзисторов, управляемых одиночным электроном на затворе; 3) одноэлектронных аналогов биполярного транзистора; 4) одноэлектронных “насосов” и др. Практическая реализация таких структур, как правило, основана на использовании прецизионной литографии тонких металлических пленок или полупроводниковых слоев с двухмерным газом

[74–76]. Например, в [76] приведены данные о том, что создана одноэлектронная память, которая работает при комнатной температуре на основе полевого транзистора с очень узким каналом и плавающим затвором нанометрового размера. Поэтому нет сомнений в том, что разработка современных методов получения КРС, исследование их атомной, электронной и фононной структуры позволят провести управляемую процедуру формирования реальных конфигураций КРС с геометрическими размерами в единицы нм.

Следует отметить, что процессы самоорганизации, разупорядочения и упорядочения ультрадисперсных субфаз связаны с существенным массопереносом [77]. Вследствие этого их реализация в пределах кристаллической фазы становится сложной и, зачастую, даже невозможной. Более благоприятные условия формирования АКС связаны с процессами распада и упорядочения при эпитаксиальном наращивании новой фазы непосредственно на поверхности полупроводника или НС. Именно с помощью такого технологического приема возможно создание композиций КРС — квантовых точек, нитей, проволок и др. При подобной технологии необходимо обеспечить формирование на поверхности нанометровых островков, которые могут представлять собой АКС.

Основой современной технологии формирования АКС типа КРС является кристаллизация по механизму Странского—Красанова [4, 5]. В процессе нанесения тонкой эпитаксиальной пленки на твердотельную подложку с другими структурными параметрами кристаллической решетки ее свободная энергия зависит от толщины пленки и геометрии поверхности. Если при нарастании пленки ее поверхность остается планарной, то полная энергия поверхности не меняется, а энергия упругой деформации ($E_{\text{деф}}$) линейно возрастает [7].

Тем не менее при достижении определенной критической толщины пленки такая ситуация становится энергетически невыгодной. Минимуму свободной энергии системы отвечает формирование на поверхности трехмерных островков. Основание таких островков, стыкуемых с подложкой, сильно деформировано. Оценки показали [77], что в процессе отделения пленки от границы

раздела с подложкой $E_{\text{деф}}$ уменьшается. Более того, $E_{\text{деф}}$ выступает здесь как основная “движущая сила” процесса образования кластерной структуры. Одна из главных особенностей такого метода формирования ультрадисперсных субфаз состоит в том, что КРС возникают на “наращиваемой” поверхности непосредственно, т. е. в условиях существенно большей “свободы”, чем внутри ТМ. Процедура такого формирования КРС (квантовые точки, квантовые нити) зависит от экспериментальных средств тонкого управления потенциальным рельефом “наращиваемой” поверхности [78].

Манипулирование атомной структурой поверхности можно осуществить используя нетермические методы локального влияния на эту поверхность с дополнительной нетермической локальной стимуляцией процессов эпитаксиального роста (с применением облучения, ионной имплантации и др.). Прецизионное управление структурным составом и процессом пресыщения газовой фазы непосредственно на границах фронта кристаллизации, а также механизмами и кинетикой процессов кристаллизации сыграет здесь не последнюю роль.

Таким образом, на наш взгляд, перспективным является технологический подход, основанный на формировании твердотельных матриц, где образуется система самоорганизующихся ультрадисперсных субфаз в виде квантово-размерных структур (а именно, атомарных кластерных соединений). Конечно, геометрия подобных наноструктур требует получения хорошего пространственного разрешения, а это ограничивает рабочую температуру приборов такого класса. Поэтому процесс формирования КРС в ТМ сходен с процессом образования твердого раствора, для которого большинство физических процессов может быть рассмотрено с позиций статистического распределения атомов, формирующих наноструктуру, по узлам кристаллической решетки.

В заключение, оценивая перспективы развития современной технологической базы общества, а также экспериментальной и теоретической физики, следует отметить, что окончательно молекулярная электроника может полностью сформироваться в середине текущего столетия; **рис. 3**, полученный на основе анализа данных [4, 6, 74], иллюстрирует вероятный ход развития молекулярной электроники и нанотехнологии.

ИСПОЛЬЗОВАННЫЕ ИСТОЧНИКИ

1. Seabaugh A.C., Mazumder P. Scanning the issue // Proc. IEEE.— 1999.— Vol. 87.— P. 535—545.
2. Летохов В. С. Проблемы нанооптики // УФН.— 1999.— Т. 169.— С. 345—348.
3. Лозовик Ю. Е., Меркулов С. П. Перспективы нанолокальной фемтосекундной спектроскопии и нанолитографии // УФН.— 1999.— Т. 169.— С. 348 — 352.
4. Tanaka K. Nanotechnology towards the 21st Century // Thin Sol. Films.— 1999.— Vol. 341.— P. 120 — 125.
5. Хайрутдинов Р. Ф. Химия полупроводниковых наночастиц // Успехи химии.— 1998.— Т. 67 (2).— С. 125 — 139.
6. Hersam M. C., Guisinger N. P., Lydrng J. W. Silicon-based molecular nanotechnology // Nanotechnology.— 2000.— Vol. 11.— P. 70—76.
7. Мильвидский М. Г., Чалдышев В. В. Наноразмерные атомные кластеры в полупроводниках — новый подход к формированию свойств материалов // ФТП.— 1998.— Т. 32, № 5.— С. 513—522.
8. Jarrold M. F. Nanosurface chemistry on size-selected silicon clusters // Science.— 1991.— Vol. 252.— P. 1085 — 1092.
9. Jarrold M. F., Constant V.A. Silicon cluster ions: evidence for a structural transition // Phys. Rev. Lett.— Vol. 67.— 1991.— P. 2994—2997.

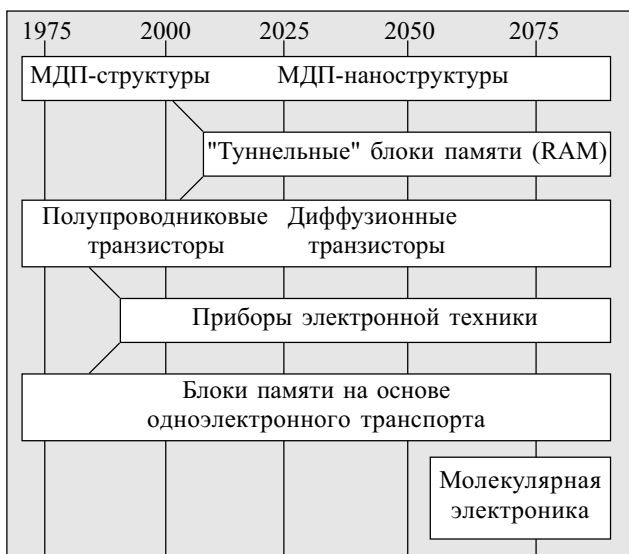


Рис. 3. Вероятное развитие электронных технологий

10. Li B., Yu D., Zhang S.-L. Raman spectral study of silicon nanowires // *Phys. Rev. B.*— Vol. 59.— 1999.— P. 1645—1654.
11. Chen X., Zhao X., Wang G., Shen X. The effect of size distributions of Si nanoclusters on photoluminescence from ensembles of Si nanoclusters // *Phys. Lett. A.*— 1996.— Vol. 212.— P. 285—289.
12. Chen G., Klimeck G., Datta S., Goddard W.A. Resonant tunnelling through quantum-dot arrays // *Phys. Rev. B.*— 1994.— Vol. 50.— P. 8035 — 8042.
13. Burr T. A., Seraphin A. A., Werwa E., Kolenbrander K. D. Carrier transport in thin films of silicon nanoparticles // *Ibid.*— 1997.— Vol. 56.— P. 4818 — 4824.
14. Zaidi S. H., Chu An.-S., Brueck S.R.J. Optical properties of nanoscale, one-dimensional silicon grating structures // *J. Appl. Phys.*— 1996.— Vol. 80, N 12.— P. 6997 — 7008.
15. Takagi H., Ogawa H., Yamazaki Y. et al. Quantum size effects on photoluminescence in ultra fine Si particles // *Appl. Phys. Lett.*— 1990.— Vol. 56.— P. 2379—2380.
16. Kanzawa Y., Kageyama, Takeoka S. et al. Size-dependent near-infrared photoluminescence spectra of Si nanocrystal embedded in SiO₂ matrices // *Sol. St. Com.*— 1997.— Vol. 102.— P. 533—537.
17. Голубев В. Г., Медведев А. В., Певцов А. Б. и др. Фотолуминесценция тонких пленок аморфно-нанокристаллического кремния // *ФТТ.*— 1999.— Т. 41, № 1.— С. 153—158.
18. Nayfeh M., Akcakir O., Belomoin G. et al. Second harmonic generation in microcrystallite films of ultrasmall Si nanoparticles // *Appl. Phys. Lett.*— 2000.— Vol. 77.— P. 4086—4088.
19. Mitas L., Therrien J., Twesten R. et al. Effect of surface reconstruction on the structural prototypes of ultrasmall ultrabright Si₂₉ nanoparticles // *Ibid.*— 2001.— Vol. 78.— P. 1918.
20. Park N. M., Kim T. S., Park S. J. Band gap engineering of amorphous silicon quantum dots for light-emitting diodes // *Ibid.*— 2001.— Vol. 78.— P. 2575—2777.
21. Delerue C., Allan G., Lannoo M. Optical band gap of Si nanoclusters // *J. Luminesc.*— 1999.— Vol. 80.— P. 65—73.
22. Baierle R. J., Caldas M. J., Molinari E., Ossicini S. Optical emission from small Si particles // *Sol. St. Comm.*— 1997.— Vol. 102, N 7.— P. 545—549.
23. Hofmeister H., Huysken F., Kohn B. Lattice contraction in nanosized silicon particles produced by laser pyrolysis of silane // *Book of abstracts 9th International Symp. on Small Particles and Inorganic Clusters.*— Lausanne (Switzerland). — 1998.— P. 1.13.
24. Porjo N., Kuustla T., Heikkilä L. Characterization of photonic dots in Si—SiO₂ thin-film structures // *Appl. Phys.* — 2001.— Vol. 89.— P. 4902—4904.
25. Chelan S., Elliman R. G., Gaff K., Durandet A. Luminescence from Si nanocrystals in silica deposited by helicon activated reactive evaporation // *Appl. Phys. Lett.*— 2001.— Vol. 78.— P. 1670—1672.
26. Pavesi L., Dal Negro L., Mazzoleni C. et al. Optical gain in silicon nanocrystals // *Nature.*— 2000.— Vol. 408.— P. 440—444.
27. Кожухов А. В., Кантер Б. З., Стенин С. И., Яновицкий З. Ш. Образование кластеров на поверхностях (111) и (100) при сублимации кремния // *Поверхность. Физика, химия, механика.*— 1988.— № 7.— С. 54—60.
28. Бугай А. А., Зарицкий И. М., Кончиц А. А., Лысенко В. С. ЭПР в кремнии, аморфизированном ионной имплантацией // *ФТП.*— 1985.— Т. 19, № 2.— С. 257—262.
29. Nishida M. Cluster model approach for electronic structure of Si and Ge(111) and GaAs(110) surfaces // *Surface Science.*— 1978.— Vol. 72.— P. 589—616.
30. Местечкин М. М., Вайман Г. Е., Климо В., Тиньо Й. Расширенный метод Хартри—Фока и его применение к молекулам.— К.: Наукова думка, 1983.
31. Messmer R., Watkins G. D. Molecular-orbital treatment for deep levels in semiconductors: substitutional nitrogen and the lattice vacancy in diamond // *Phys. Rev. B.*— 1973.— Vol. 7, N 6.— P. 2568—2590.
32. Bisi O., Ossicini S., Pavesi L. Porous silicon: a quantum sponge structure for silicon based optoelectronics // *Surf. Sci. Rep.* — 2000.— Vol. 38.— P. 1—126.
33. Зимин С. П. Классификация электрических свойств пористого кремния // *ФТП.*— 2000.— Т. 34, № 3.— С. 359—363.
34. Новиков В. У., Козлов Г. В. Фрактальный анализ макромолекул // *Успехи химии.*— 2000.— Т. 69.— С. 379—399.
35. Kux A., Chorin M. B. Band gap of porous silicon // *Phys. Rev.*— 1995.— В 51.— P. 17535—17544.
36. Buuren T., Dinh L. N., Chase L. L. et al. Changes in the electronic properties of Si nanocrystals as a function of particle size // *Phys. Rev. Lett.*— 1998.— Vol. 80.— P. 3803—3806.
37. Delley B., Steigmeier E. F. Quantum confinement in Si nanocrystals // *Phys. Rev.*— 1993.— В 56.— P. 1397—1400.
38. Nagase S. Polyhedral compounds of the heavier group-14 elements — silicon, germanium, tin, and lead // *Account of Chem. Research.*— 1995.— Vol. 28 (11).— P. 469—476.
39. Roby K. R. Quantum theory of chemical valence concepts // *Mol. Phys.*— 1974.— Vol. 27.— P. 81—104.
40. Paterson C. H., Messmer R. P. Bonding and structures in silicon clusters: a valence-bond interpretation // *Phys. Rev. B.*— 1990.— Vol. 42.— P. 7530—7537.
41. Ковальчук В. В. Модельный анализ деяких кластерних сполук // *Вісник ЧДУ ім. Ю. Федьковича.*— 1999.— Т. 32.— С. 8—12.
42. Zi J., Zhang K., Xie X. Comparison of models for Raman spectra of Si nanocrystals // *Phys. Rev. B.*— 1997.— Vol. 55.— P. 9263—9267.
43. Bachelis T., Schaefer R. Binding energies of neutral silicon clusters // *Chem. Phys. Lett.*— 2000.— Vol. 324.— P. 365—372.
44. Chelikowsky J. R. Transition from metallic to covalent structures in silicon clusters // *Phys. Rev. Lett.*— 1988.— Vol. 60.— P. 2669—2673.
45. Shvartsburg A. A., Jarrold M. F. Transition from covalent to metallic behaviour in group-14 clusters // *Chem. Phys. Lett.*— 2000.— Vol. 317.— P. 615—618.
46. Jackson K., Pederson M., Wang C.-Z., Ho K.-M. Calculated polarizabilities of intermediate-size Si clusters // *Physical Review A.*— 1999.— Vol. 59, N 5.— P. 3685—3689.
47. Kovalchuk V. V., Chislov V. V., Yanchuk V. A. Cluster model of the real silicon surface // *Phys. Stat. Sol.(b).*— 1995.— Vol. 187, N 7.— P. K47—K50.
48. Ковальчук В. В. Квантово-химическое моделирование реальных кремниевых кластеров // *Дисс. ... канд. физ.-мат. наук: Одесса, 1988.*
49. Kuk Y., Jarrold M. F., Bower J. E., Brown W. L. Preparation and observation of Si₁₀ clusters on a Au(001)-(5×20) surface // *Phys. Rev.*— 1989.— В 39.— P. 11168—11176.
50. Marsen B., Lonfat M., Scheier P., Sattler K. The energy gap of pristine silicon clusters // *J. Electron. Spectr. Related Phen.*— 2000.— Vol. 109.— P. 157—168.
51. Phillips J. C. Stability, kinetics and magic numbers of Si_N⁺ (N=7—45) clusters // *J. Chem. Phys.*— 1985.— Vol. 83 (7).— P. 3330—3333 .
52. Raghavachari K., Logovinsky V. Structure and bonding in small silicon clusters // *Phys. Rev. Lett.*— 1985.— Vol. 55, N 26.— P. 2853 — 2856.
53. Tomanek D., Schluter M. A. Structure and bonding of small semiconductor clusters // *Phys. Rev.*— 1987.— В 36, N 2.— P. 1208—1217.
54. Pachioni G., Koutecky J. Silicon and germanium clusters — a theoretical-study of their electronic-structures and properties // *J. Chem. Phys.*— 1986.— Vol. 84 (6).— P. 3301—3310 .
55. Ballone P., Andreoni W., Car R., Parrinello M. Equilibrium structures and finite temperature properties of silicon microclusters from ab initio molecular-dynamics calculations // *Phys. Rev. Lett.*— 1988.— Vol. 60.— P. 271—274.
56. Zacharias C. R., Lemes M. R., Dal Pino A. Combining genetic algorithm and simulated annealing: a molecular geometry optimization study // *J. Mol. Struct.*— 1998.— Vol. 430.— P. 29—39.
57. Bloomfield L. A., Freeman R. R., Brown W. L. Photofragmentation of mass-resolved Si₂₋₁₂⁺ clusters // *Phys. Rev. Lett.*— 1985.— Vol. 54, N 20.— P. 2246—2249.

58. Begemann W., Meiwes-Broer K. H., Lutz H. O. Unimolecular decomposition of sputtered Aln^+ , Cun^+ and Sin^+ clusters // *Ibid.*— 1986.— Vol. 56, N 21.— P. 2248—2251.
59. Vardeny Z., Zhou T. X., Stoddart H. A., Taue J. Photomodulation spectroscopy of dangling bonds in doped and undoped a-Si:H // *Sol. State. Commun.*— 1988.— Vol. 65, N 9.— P. 1049—1053.
60. Smith N. V. Inverse photoemission // *Rep. Progr. Phys.*— 1988.— Vol. 51.— P. 883—921.
61. Лазнева Э. Ф., Федоров И. Н. Испарение с поверхности кремния при лазерном возбуждении // *Письма в ЖТФ.*— 1988.— Т. 14, № 6.— С. 537—540.
62. Stafast H. Initial steps in the photochemical vapour deposition of amorphous silicon // *Appl. Phys. A.*— 1988.— Vol. 45.— P. 93—102.
63. Honea E. C., Ogura A., Murray C. A. et al. Raman spectra of size-selected silicon clusters and comparison with calculated structures // *Nature.*— 1993.— Vol. 366.— P. 42—44.
64. Hagelberg F., Scheier P., Marsen B. et al. Coulomb blockade effects in charged Si_7 clusters on a graphite substrate // *J. Mol. Struct.*— 2000.— Vol. 529.— P. 149—160.
65. Bao-xing Li, Pei-lin Cao. Water adsorption on Si_{20} cluster: a full-potential linear-muffin-tin-orbital molecular-dynamics study // *Phys. Lett. A.*— 2000.— Vol. 275.— P. 274—280.
66. Siek A., Porezag D., Frauenheim Th. et al. Structure and vibrational spectra of low-energy silicon clusters // *Phys. Rev. A.*— 1997.— Vol. 56, N 6.— P. 4890—4898.
67. Gong X.G. Stability and electronic properties of nanoscale silicon clusters // *Phys. Rev.*— 1995.— B 52.— P. 14677—14682.
68. Kovalchuk V. V. Real nanodimensional silicon particles: cluster approximation // *Photoelectronics.*— 2001.— Vol. 10.— P. 12—17.
69. Miyazaki T., Uda T., Stich I., Terakura K. Theoretical study of the structural evolution of small hydrogenated silicon clusters // *Chem. Phys. Lett.*— 1996.— Vol. 261.— P. 346—352.
70. Watanabe M.O., Kanayama T. Growth and transport of structure-controlled hydrogenated Si clusters for deposition on solid surface // *Appl. Phys. A.*— 1998.— Vol. 66.— P. S1039—S1042.
71. Kiv A. E., Kovalchuk V. V., Yanchuk V. A. H adsorption by disordered Si clusters // *Phys. Stat. Sol.(b).*— 1988.— Vol. 156, N 2.— P. K101—K103.
72. Грехов А. М., Клапченко Г. М., Цященко Ю. П. Теоретические модели дефектов в аморфном кремнии // *ФТП.*— 1984.— Т. 18, № 8.— С. 1392—1396.
73. Menon M., Richter E., Subbaswamy K. R. Structural and vibration properties of Si clathrates in a generalised tight-binding molecular-dynamics scheme // *Phys. Rev. B.*— 1997.— Vol. 56 (19).— P. 12290—12295 .
74. Hirschman K. D., Tsybeskov L., Duttgupta S. P., Fauchet P. M. Silicon-based light emitting devices integrated into microelectronic circuits // *Nature.*— 1996.— Vol. 384.— P. 338—340.
75. Devoret M. H., Esteve B., Urbina C. Single-electron transfer in metallic nanostructures // *Ibid.*— 1992.— Vol. 360.— P. 547—550.
76. Zhuang L., Guo L., Chou S. Y. Silicon single-electron quantum-dot transistor switch operating at room temperature // *Appl. Phys. Lett.*— 1998.— Vol. 72.— P. 1205—1210.
77. Kovalchuk V. V. The cluster modelling of the reaction on the Si surface // *Book of Abstracts 9th International Symp. on Small Particles and Inorganic Clusters.*— Lausanne (Switzerland), 1998.— P. 10—32.
78. Ковальчук В. В. ІЕНТ- α дослідження поверхні кремнію // *УФЖ.*— 1995.— N 7.— С. 716—719.

Украина, Одесса
10—14 сентября 2002 г.

ВЫСТАВКИ. КОНФЕРЕНЦИИ. СИМПОЗИУМЫ

Научный совет по проблеме
«Физика полупроводников» НАНУ
Министерство образования и науки Украины
Украинское физическое общество
Институт физики полупроводников НАНУ
Одесский национальный университет им. И. И. Мечникова

УНКФП-1

1-я УКРАИНСКАЯ НАУЧНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ
ПО ФИЗИКЕ ПОЛУПРОВОДНИКОВ
(с международным участием)

Научные направления конференции

1. Теория зонной структуры, оптические, экситонные и фононные явления.
2. Фото-, акусто-, оптоэлектронные и электронные явления в объеме и на поверхности полупроводников.
3. Квантовые, оптические, электрические и магнитные свойства.
4. Физика современных полупроводниковых приборов и сенсоров.
5. Полупроводниковые материалы и технологии.

Статьи по докладам конференции планируется публиковать в журналах:

- "Фотозлектроника" (Одесский национальный университет им. И. И. Мечникова),
"Semicond. Phys. Quant. Electron. Optoelectron." (ИФПП НАНУ, г. Киев),
"Украинский физический журнал" (НАНУ),
"Журнал физических исследований" (Украинское физическое общество),
"Functional Materials" (Институт монокристаллов НАНУ, г. Харьков).

Объявлен конкурс на лучшие доклады,
сделанные на конференции аспирантами
и молодыми учеными.

Адрес Оргкомитета:

Украина, 65026, г. Одесса, ул. Дворянская, 2.
Одесский национальный университет им. И. И. Мечникова. НИЛ-3.
Тел./факс: 380(482) 23-34-61
E-mail: <oguint@paco.net>, <ndl_lepikh@gmail.com.ua>