

PACS numbers: 71.15.Dx, 71.15.Mb, 71.15.Pd, 71.18.+y, 71.20.Nr, 71.55.Gs, 81.65.Rv

Пасивація епітаксійних структур CdHgTe: розрахунки із перших принципів

Р. М. Балабай

*Криворізький педагогічний інститут
ДВНЗ «Криворізький національний університет»,
кафедра фізики та методики її навчання,
просп. Гагаріна 54,
50086 Кривий Ріг, Україна*

За допомогою метод функціоналу електронної густини та псевдопотенціалу із перших принципів одержано розподіли густини валентних електронів і електронні спектри епітаксійних гетероструктур Si/CdTe/Cd_xHg_{1-x}Te ($x=0,2$)/CdTe та Si/CdTe/Cd_xHg_{1-x}Te ($x=0,2$)/ZnS. Визначено зменшення густини електронного заряду в шарах CdTe та ZnS, що покривають плівку Cd_xHg_{1-x}Te (ізолювальний ефект). Визначено наявність потенціальних бар'єрів на роздільчій межі шарів CdTe та Cd_xHg_{1-x}Te ($x=0,2$), а також ZnS та Cd_xHg_{1-x}Te ($x=0,2$).

The valence-electrons' density distributions and the electronic energy spectra for the epitaxial Si/CdTe/Cd_xHg_{1-x}Te ($x=0.2$)/CdTe and Si/CdTe/Cd_xHg_{1-x}Te ($x=0.2$)/ZnS heterostructures are calculated by the methods of the density functional theory and the pseudopotential construction from the first principles. Reduction of the electron-charge density within the CdTe (or ZnS) layers covering the Cd_xHg_{1-x}Te film (an insulating effect) is observed. The presence of the potential barriers on the interface of the CdTe/Cd_xHg_{1-x}Te ($x=0.2$) or ZnS/Cd_xHg_{1-x}Te ($x=0.2$) layers is revealed.

При помощи методов функционала электронной плотности и псевдопотенциала из первых принципов рассчитаны распределения плотности валентных электронов и электронные спектры эпитаксиальных гетероструктур Si/CdTe/Cd_xHg_{1-x}Te ($x=0,2$)/CdTe и Si/CdTe/Cd_xHg_{1-x}Te ($x=0,2$)/ZnS. Определено уменьшение плотности электронного заряда в слоях CdTe и ZnS, которые покрывают плёнку Cd_xHg_{1-x}Te (изолирующий эффект). Обнаружено наличие потенциальных барьеров на границе раздела слоёв CdTe та Cd_xHg_{1-x}Te ($x=0,2$), а также ZnS и Cd_xHg_{1-x}Te ($x=0,2$).

Ключові слова: розрахунки із перших принципів, епітаксійні напівпровідникові гетероструктури, напівпровідники $A^{II}B^{VI}$, ізолювальний ефект.

(Отримано 16 грудня 2011 р.; після доопрацювання — 1 травня 2012 р.)

1. ВСТУП

Епітаксійні шари CdHgTe (КРТ) являються зараз основним матеріалом для одержання багатоелементних фотоприймальних пристроїв інфрачервоної області спектру [1]. З одного боку, техніка молекулярно-променевої епітаксії (МПЕ) уможливорює легко виростити шари CdHgTe зі змінним за товщиною складом, з іншого, при гетероепітаксії КРТ методом МПЕ на альтернативних підложжях виникає необхідність розв'язання складних фізичних і технічних проблем. Гетероепітаксійне вирощення CdHgTe на підложжі кремнію є ключовим елементом технології виготовлення монолітних інфрачервоних детекторів. Для цього першим на підложжі кремнію вирощується буферний шар CdTe, а потім, в єдиному процесі епітаксійного осадження, шар CdHgTe. Відомо, що кристалічна структура кремнію є діамантоподібною, а кристалічна структура CdTe-типу цинкової світні. Ці два типи ґратниць достатньо подібні, тобто, якщо атоми двох сортів ґратниці типу цинкової світні замінити атомами кремнію, то кристал набуде діамантоподібної структури. Для епітаксійного вирощування шарів CdTe на підложжі Si відомі результати [2–8], коли вирощені шари CdTe мали орієнтацію подібну до орієнтації кремнійового підложжя. Якщо підложжя завершувалося площиною (100), то на ньому виростав епітаксійний шар CdTe теж типу (100); коли використовувалося підложжя (111), то на ньому ріс шар CdTe типу (111). Але подібне вирощування має основну проблему, що пов'язана з розбіжністю параметрів ґратниць CdTe та кремнію в 19%, яку не можна уникнути. GaAs має структуру типу цинкової світні, що і CdTe, і може бути використаний як підложжя або як буферний шар на кремнійовому підложжі. Однак, розбіжність параметрів ґратниць GaAs та CdTe скорочується тільки до 14,6%. Для росту CdTe на поверхні GaAs можна починати епітаксію зі сполуки, близької за фізико-хімічними властивостями до CdTe, але яка має меншу неузгодженість параметрів ґратниць. Такою сполукою є ZnTe, для якого неузгодженість параметрів ґратниць з GaAs становить 7%.

Значна розбіжність параметрів ґратниць підложжя та зростаючої плівки викликає появу в плівці кристалічних дефектів. Однак, такі гетероструктури можуть бути вирощені й без дефектів, але бути значно напруженими, як це доповідалося авторами [9].

Для пасивації поверхні плівок КРТ зазвичай використовують діелектричні шари [10], що осаджуються на поверхні інфрачервоних фотоприймальних пристроїв в окремому технологічному процесі. Спростити технологію пасивації можна при вирощуванні широко-

зонного шару на поверхні в єдиному процесі виготовлення матеріялу [11]. Наприклад, вирощування зверху робочого складу CdHgTe шару CdTe практикується з метою пасивації поверхні КРТ; при цьому широкозонний CdTe замінює собою пасивувальний діелектрик. Однак, не ясно чим визначаються діелектричні властивості CdTe.

Автори роботи [12], провівши порівняльну аналізу пасивувальних властивостей різних діелектричних плівок для матеріялу CdHgTe, вказують, що плівка ZnS формує якісну роздільчу межу на щойнощавленому CdHgTe з низькою густиною поверхневих станів N_{ss} .

Багатолітня практика дослідників [13] показала, що плівку ZnS можна успішно використовувати не тільки в технологічному процесі виготовлення (як маску при йонному легуванні) n^+p -переходів на p -Hg $_{1-x}$ Cd $_x$ Te з x 0,2, але і для остаточної пасивації фотодіодних структур.

Дану роботу присвячено теоретичному дослідженню електронних властивостей гетероструктур, що містять шар однорідного Cd $_x$ Hg $_{1-x}$ Te (x = 0,2), епітаксійно нанесеного напружено на підложжя Si, з буферним шаром CdTe, і завершеного пасивувальним шаром CdTe (або ZnS).

2. МОДЕЛІ ТА МЕТОДИ ОБЧИСЛЕННЯ

Результати були одержані за допомогою авторського програмного коду [14], що реалізує квантово-механічну динаміку Кар–Паррінелло з використанням локального наближення функціоналу електронної густини та нормозберігального псевдопотенціалу із перших принципів Бечелета, Хеменна, Шльотера або Хартвігсена, Гоедекера, Хьюттера. Основні стани електронно-ядрових систем визначалися за алгоритмом квантової динаміки, якщо одночасно оптимізувалися змінні електронної та ядрових підсистем, або шляхом діагоналізації матриці Кона–Шема, якщо визначалися тільки електронні змінні при фіксованих атомових кістяках. Услід Кону і Шему, електронна густина записувалася в термінах зайнятих ортонормованих одночастинкових хвильових функцій:

$$n(\mathbf{r}) = \sum_i |\psi_i(\mathbf{r})|^2. \tag{1}$$

Точка на поверхні потенціальної енергії в наближенні Борна–Оппенгаймера визначалася мінімумом відносно хвильових функцій енергетичного функціоналу:

$$E[\{\psi_i\}, \{R_j\}, \{\alpha_v\}] = \sum_i \int_{\Omega} d^3r \psi_i^*(\mathbf{r}) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \right] \psi_i(\mathbf{r}) + U[\{n(\mathbf{r})\}, \{R_j\}, \{\alpha_v\}], \tag{2}$$

де $\{R_j\}$ — координати атомових кістяків; $\{\alpha_\nu\}$ — всі можливі зовнішні впливи на систему.

У загальноприйнятому формулюванні мінімізація енергетичного функціоналу (2) по відношенню до одночастинкових орбіталей при накладених на них додаткових умовах ортонормування призводить до одночастинкових рівнянь Кона–Шема:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \frac{\partial U}{\partial n(\mathbf{r})} \right\} \psi_i(\mathbf{r}) = \varepsilon_i \psi_i(\mathbf{r}). \quad (3)$$

У даних розрахунках одночастинкова хвильова функція $\psi_i(\mathbf{r})$ розкладалася в ряд за пласкими хвилями; довжина ряду вибиралася такою, щоб на один атом базису припадало близько 20 пласких хвиль. У разі пошуку тільки електронних змінних при фіксованих атомових кістяках, обчислювалася матриця Кона–Шема для рівняння (3) при певному значенні хвильового вектора \mathbf{k} із Бріллюєнової зони штучної надґратниці з тетрагональною елементарною коміркою, атомовий базис якої визначав атомову систему, що досліджувалася.

Для дослідження електронних властивостей епітаксійних гетероструктур Si/CdTe/Cd_xHg_{1-x}Te ($x=0,2$)/CdTe, Si/CdTe/Cd_xHg_{1-x}Te ($x=0,2$)/ZnS були створені атомові базиси примітивної комірки штучної надґратниці для відтворення нескінченних у двох напрямках (X, Y) композицій плівок з поверхнями типу (001) (напрямок Z) у структурі цинкової світні. Розташування атомів у базисі враховувало неоднорідне механічне напруження в гетероструктурі, а саме, у площині XY розташування атомів сполук $A^{II}B^{VI}$ було стиснуте до параметрів ґратниці кремнію, у напрямку Z віддалі між атомовими площинами були такими, що відповідають власним параметрам ґратниці. Враховуючи ймовірність початку росту сполук типу $A^{II}B^{VI}$ на підложжі Si(001) або полярною поверхнею Te(001) або Cd(001), розглядався варіант гетероструктур із завершувальною поверхнею Te(001) або Cd(001). Система плівок набиралася наступною комбінацією моноатомових площин у елементарній комірці, що транслюється: 4 площини атомів Si (по 2 атоми в площині), 4 площини атомів Te або Cd, що чергуються, потім шар Cd_xHg_{1-x}Te, котрий для відтворення $x=0,2$ моделювався 10 площинами, щоб на 10 атомів неметалу Te припадали 8 атомів Hg та 2 атоми Cd (по 2 атоми в площинах елементарної комірки), і завершалася система 6 площинами атомів Te та Cd, що чергуються (рис. 1). Усього в базисі було 88 атомів. Для можливості порівнянь при аналізі результатів обчислювалися також такі атомові системи:

CdTe/Cd_xHg_{1-x}Te ($x=0,2$)/CdTe та CdTe/Cd_xHg_{1-x}Te ($x=0,2$)/ZnS (загалом 20 моноатомових шарів), що мали параметри ґратниці (6,48 Å) і розташування атомів, як у CdTe;

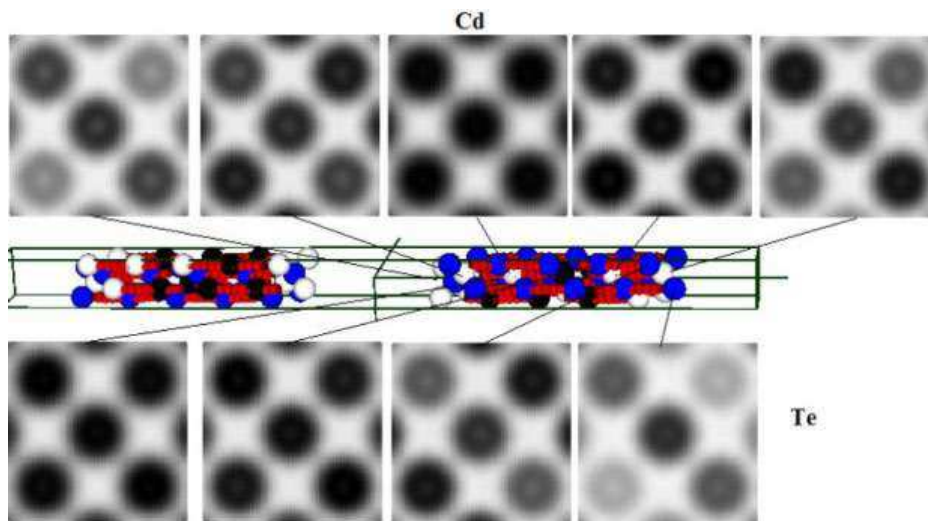


Рис. 1. Просторовий розподіл густини валентних електронів гетероструктури CdTe/Cd_xHg_{1-x}Te ($x = 0,2$)/CdTe для ізозначення 0,9–1,0 від максимального (вид на елементарну комірку) та перетини просторового розподілу в площинах, проведених через різні атомові шари гетероструктури паралельно роздільчій межі плівок.

вільні від напруг шари CdTe (20 моноатомових шарів), ZnS (20 моноатомових шарів) і Cd_xHg_{1-x}Te ($x = 0,2$) (20 моноатомових шарів); неоднорідно напружені шари CdTe (в площині XY шари стиснуті до параметрів ґратниці кремнію, в напрямку Z віддаль між атомовими площинами відповідає власним параметрам) і ZnS (у площині XY шари розтягнені до параметрів ґратниці CdTe, в напрямку Z віддаль між атомовими площинами відповідає власним параметрам).

При цьому параметри елементарної комірки штучної надґратниці були такими, щоб у напрямках X та Y змоделювати нескінченну площину плівок, а в напрямку Z — вільні поверхні типу (001). Кількість валентних електронів для Cd, Hg або Zn покладалася рівною 12 (з урахуванням 10 *d*-електронів попередньої оболонки). Із використанням авторського програмного забезпечення були одержані електронний спектр для Г-точки Бріллюєнової зони надґратниці, просторові розподіли густини валентних електронів та їх перетини. Атомовий базис не оптимізувався, розподіл електронів самоузгоджувався за певну кількість ітерацій.

3. РЕЗУЛЬТАТИ ОБЧИСЛЕННЯ ТА ЇХ ОБГОВОРЕННЯ

Перерізи просторового розподілу густини валентних електронів у різних площинах досліджуваних гетеропереходів наведено на рис. 1–5.

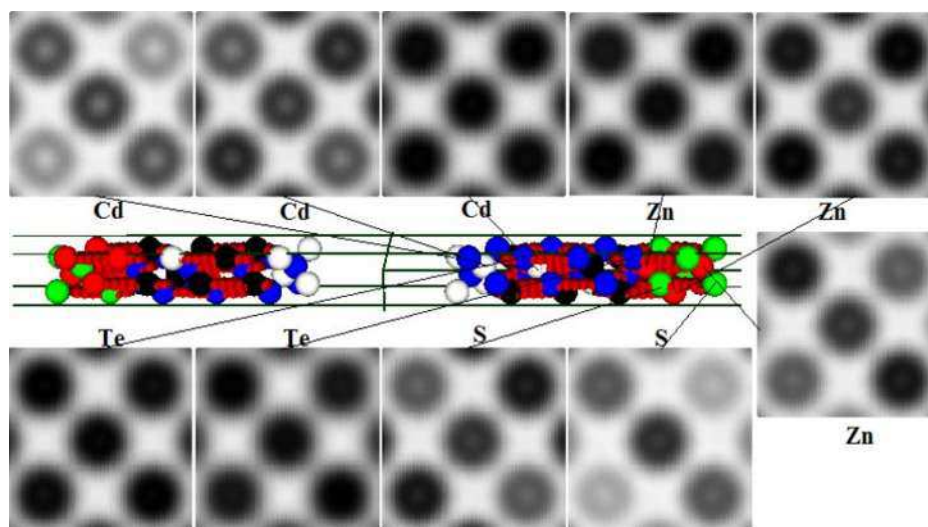


Рис. 2. Просторовий розподіл густини валентних електронів гетероструктури CdTe/Cd_xHg_{1-x}Te ($x=0,2$)/ZnS для ізозначення 0,9–1,0 від максимального (вид на елементарну комірку) та перетини просторового розподілу в площинах, проведених через різні атомові шари гетероструктури паралельно роздільчій межі плівок.

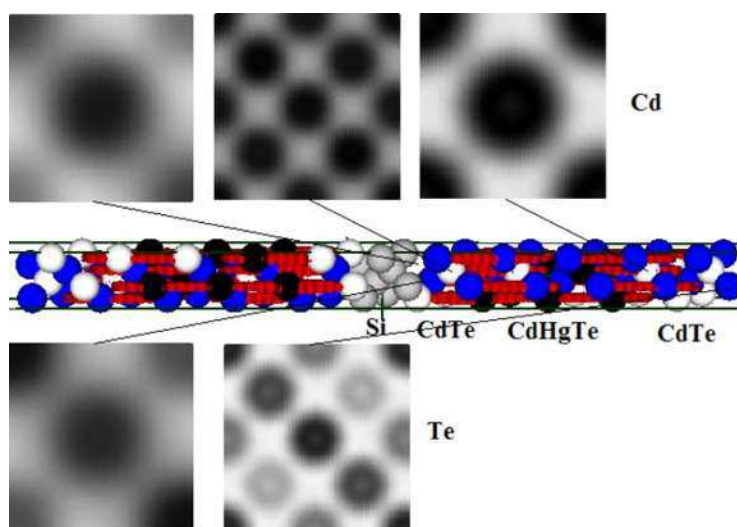


Рис. 3. Просторовий розподіл густини валентних електронів гетероструктури Si/CdTe/Cd_xHg_{1-x}Te ($x=0,2$)/CdTe для ізозначення 0,9–1,0 від максимального (вид на елементарну комірку) та перетини просторового розподілу в площинах, проведених через різні атомові шари гетероструктури паралельно роздільчій межі плівок.

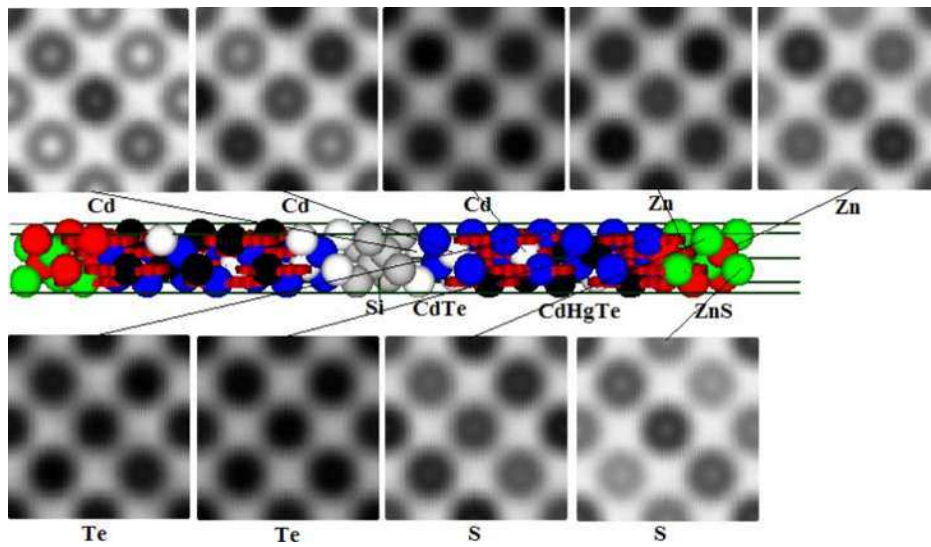


Рис. 4. Просторовий розподіл густини валентних електронів гетероструктури Si/CdTe/Cd_xHg_{1-x}Te ($x=0,2$)/ZnS для ізозначення 0,9–1,0 від максимального (вид на елементарну комірку, шар атомів S поверхневий) та перетини просторового розподілу в площинах, проведених через різні атомові шари гетероструктури паралельно роздільчій межі плівок.

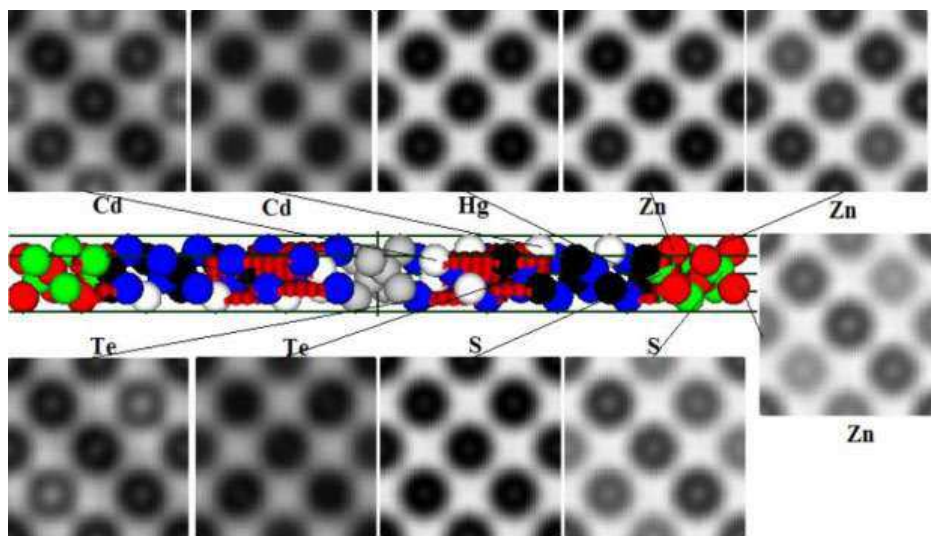


Рис. 5. Просторовий розподіл густини валентних електронів гетероструктури Si/CdTe/Cd_xHg_{1-x}Te ($x=0,2$)/ZnS для ізозначення 0,9–1,0 від максимального (вид на елементарну комірку, шар атомів Zn поверхневий) та перетини просторового розподілу в площинах, проведених через різні атомові шари гетероструктури паралельно роздільчій межі плівок.

Інформацію на цих рисунках організовано наступним чином: зображується примітивна комірка з атомовим базисом (наявність подвоєних атомових структур вимагається внесенням в атомовий базис операції інверсії, для уникнення комплексних чисел у математичних виразах) і перерізи розподілу електронної густини в ній на різних рівнях паралельно роздільчій межі плівок.

На рисунках 6, 7 наведено просторові розподіли густини валентних електронів з різними ізозначеннями для гетероструктур $\text{Si}/\text{CdTe}/\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ ($x=0,2$)/ CdTe та $\text{CdTe}/\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ ($x=0,2$)/ ZnS (відносні до максимального значення величини електронної густини зменшуються зліва направо).

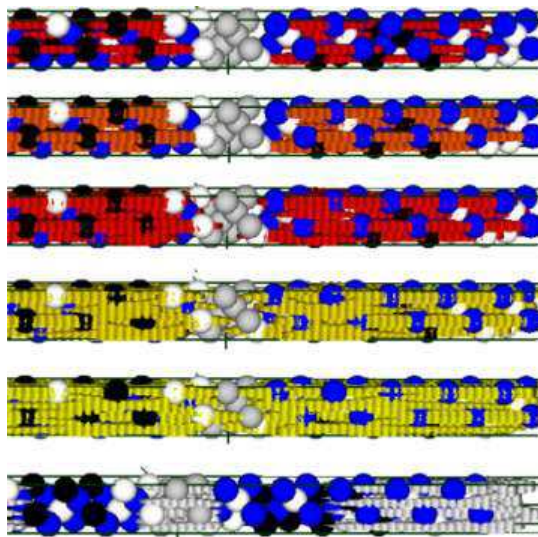


Рис. 6. Просторовий розподіл густини валентних електронів у гетероструктурі $\text{Si}/\text{CdTe}/\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ ($x=0,2$)/ CdTe для (згори вниз) ізозначення 0,9–1,0 від максимального, ізозначення 0,8–0,9, ізозначення 0,7–0,8, ізозначення 0,6–0,7, ізозначення 0,5–0,6, ізозначення 0,1–0,2 від максимального.

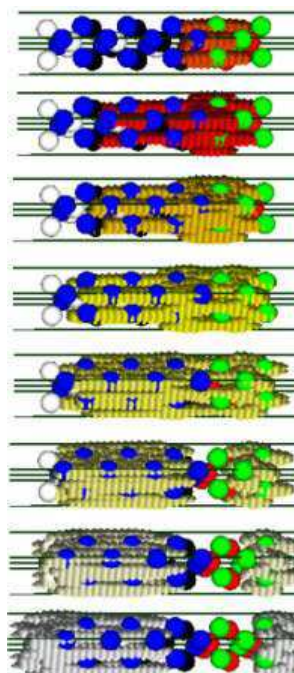


Рис. 7. Просторовий розподіл густини валентних електронів у гетероструктурі $\text{CdTe}/\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ ($x=0,2$)/ ZnS для (згори вниз) ізозначення 0,8–0,9 від максимального, ізозначення 0,7–0,8, ізозначення 0,6–0,7, ізозначення 0,5–0,6, ізозначення 0,4–0,5, ізозначення 0,3–0,4, ізозначення 0,2–0,3, ізозначення 0,1–0,2 від максимального.

Видно, як спадає інтенсивність чорного кольору, котра пропорційна значенню електронної густини, в перерізах для атомових шарів CdTe та ZnS з буферних та ізолювальних прошарків (ізолювальний ефект).

У цій закономірності є відмінність для зразка гетеропереходу CdTe/Cd_xHg_{1-x}Te ($x = 0,2$)/ZnS, в якому шари CdTe та Cd_xHg_{1-x}Te ($x = 0,2$) механічно ненапружені, а шар ZnS розтягнений до параметрів ґратниці CdTe ($a_{\text{CdTe}} = 6,48 \text{ \AA}$, $a_{\text{ZnS}} = 5,41 \text{ \AA}$). Для цього гетеропереходу характерний максимум густини валентних електронів на межі шарів Cd_xHg_{1-x}Te ($x = 0,2$) та ZnS (див. рис. 2, 7). Коли ж шар ZnS майже ненапружений, а ця ситуація буває для гетеропереходу Si/CdTe/Cd_xHg_{1-x}Te ($x = 0,2$)/ZnS, в якому плівки CdTe та Cd_xHg_{1-x}Te ($x = 0,2$) стиснені до параметра ґратниці Si ($a_{\text{Si}} = 5,43 \text{ \AA}$), а шар ZnS — ні, тоді на ньому зменшується величина електронної густини, що характерно для ізолювальних шарів CdTe (див. рис. 1 та рис. 3–6).

На рисунках 8–11 показано, як відбувається розподіл електронів за енергетичними зонами для Γ -стану досліджених гетероструктур. Цей розподіл одержано шляхом числового обчислення похідної

$\lim_{\Delta E \rightarrow 0} \frac{\Delta N}{\Delta E}$, де ΔN — кількість дозволених станів, що припадають на проміжок енергії ΔE , з одержаного під час діагоналізації матриці Кона–Шема одночастинкового енергетичного спектру, кількість значень в якому контролюється розміром розкладу хвильової функції.

Відповідно до ідеології функціоналу електронної густини виявлялися зайняті стани при $T = 0 \text{ K}$ (стани валентних зон), що уможливило визначити положення рівня Фермі, прив'язуючись до останнього зайнятого стану, кількість яких визначали половиною кількістю електронів (у зв'язку з неврахуванням спіну електрона).

Визначення наявності потенціального бар'єру на роздільчій межі шарів гетеропереходів CdTe та Cd_xHg_{1-x}Te ($x = 0,2$), ZnS та Cd_xHg_{1-x}Te ($x = 0,2$) можна виконати аналізуючи електронні спектри на рис. 10, 11, а саме значення енергій, що відповідають останньому зайнятому рівню, тобто стелі валентної зони. Видно, що для плівок CdTe та ZnS ці енергії вищі ніж для плівки Cd_xHg_{1-x}Te ($x = 0,2$) — наявна різниця енергій і створює бар'єри для переносу електронів із плівки КРТ у шари CdTe та ZnS, створюючи тим ізолювальний ефект.

Аналіза розподілів валентних електронів для гетероструктур Si/CdTe/Cd_xHg_{1-x}Te($x = 0,2$)/ZnS із завершальними поверхнями, що викладені або атомами металу Zn або неметалу S (рис. 9), дозволяють сказати, що гетероструктури, завершені атомами металу, мають меншу енергію.

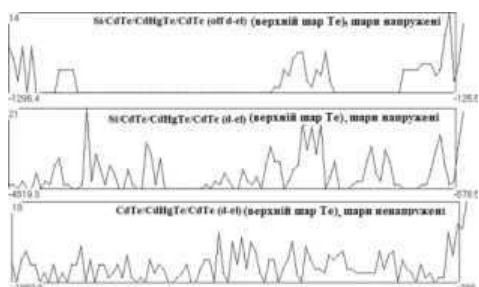


Рис. 8. Розподіл валентних електронів за енергетичними зонами для Γ -точки Бріллюєнної зони надгратниці з атомовим базисом, що відтворює гетероструктури Si/CdTe/Cd_xHg_{1-x}Te ($x=0,2$)/CdTe та CdTe/Cd_xHg_{1-x}Te ($x=0,2$)/CdTe (зверху вниз). По вертикальній вісі відкладено кількість станів, по горизонтальній — енергетичний діапазон в атомових одиницях. (Розрахунки виконано для $T=0$ К; права межа відповідає положенню останнього зайнятого рівня, тобто енергії Фермі.)

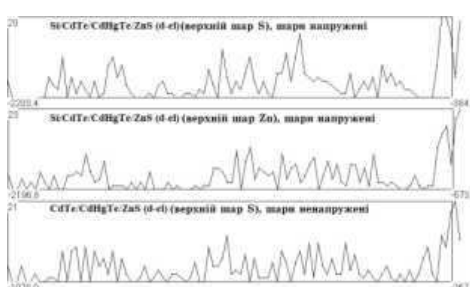


Рис. 9. Розподіл валентних електронів за енергетичними зонами для Γ -точки Бріллюєнної зони надгратниці з атомовим базисом, що відтворює гетероструктури Si/CdTe/Cd_xHg_{1-x}Te ($x=0,2$)/ZnS та CdTe/Cd_xHg_{1-x}Te ($x=0,2$)/ZnS (зверху вниз). По вертикальній вісі відкладено кількість станів, по горизонтальній — енергетичний діапазон в атомових одиницях. (Розрахунки виконано для $T=0$ К; права межа відповідає положенню останнього зайнятого рівня, тобто енергії Фермі.)

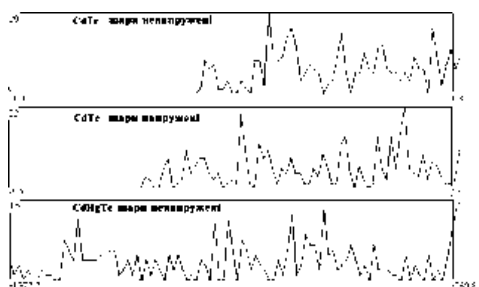


Рис. 10. Розподіл валентних електронів за енергетичними зонами для Γ -точки Бріллюєнної зони надгратниці з атомовим базисом, що відтворює плівкові структури (20 атомових площин) CdTe та Cd_xHg_{1-x}Te ($x=0,2$) (зверху вниз). По вертикальній вісі відкладено кількість станів, по горизонтальній — енергетичний діапазон в атомових одиницях. (Розрахунки виконано для $T=0$ К; права межа відповідає положенню останнього зайнятого рівня, тобто енергії Фермі.)

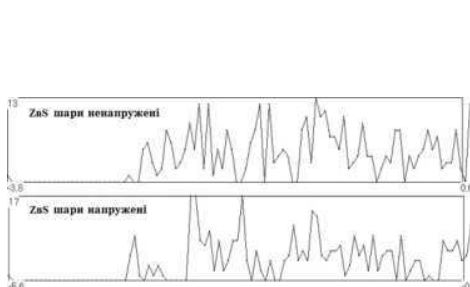


Рис. 11. Розподіл валентних електронів за енергетичними зонами для Γ -точки Бріллюєнної зони надгратниці з атомовим базисом, що відтворює плівкові структури (20 атомових площин) ZnS. По вертикальній вісі відкладено кількість станів, по горизонтальній — енергетичний діапазон в атомових одиницях. (Розрахунки виконано для $T=0$ К; права межа відповідає положенню останнього зайнятого рівня, тобто енергії Фермі.)

4. ВИСНОВКИ

Методами функціоналу електронної густини та псевдопотенціалу із перших принципів одержано розподіли густини валентних електронів і електронні енергетичні спектри для гетероструктур, що містять шар однорідного $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ ($x=0,2$), епітаксію нанесеного напружено на підложжя Si з буферним шаром CdTe і завершеного пасивувальним шаром CdTe (або ZnS). Спостерігається зменшення густини валентних електронів у шарах CdTe (ізолювальний ефект), що покривають $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$, коли вони механічно напружені чи вільні від напружень; що стосується покривних шарів ZnS, то такий ефект більш виражений для вільних від напружень плівок. Визначено наявність потенціальних бар'єрів на роздільчій межі шарів гетеропереходів CdTe і $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ ($x=0,2$), ZnS і $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ ($x=0,2$), що обмежують переноси електронів з плівки КРТ в ізолювальні шари CdTe і ZnS. Гетероструктури, завершені атомами металу, мають меншу енергію.

ЦИТОВАНА ЛІТЕРАТУРА

1. Ф. Ф. Сизов, *Фотозлектроніка для систем видення в «невидимих» частках спектра* (Київ: Академперіодика: 2008).
2. A. Nouhi, G. Radhakrishnan, J. Katz, and K. Koliwad, *Applied Physics Lett.*, **52**, No. 24: 2028 (1988).
3. M. P. Halsall, J. J. Davies, J. E. Nicholls, B. Cockayne, P. J. Wright, and G. J. Russell, *J. Cryst. Growth*, **91**, Iss. 1–2: 135 (1988).
4. G. S. Tompa, C. R. Nelson, M. A. Saracino, P. C. Colter, P. L. Anderson, W. H. Wright, and J. L. Schmit, *Applied Physics Lett.*, **55**, No. 1: 62 (1989).
5. Ing-Ruey Liaw, Kan-Sen Chou, and Shih-Lin Chang, *J. Cryst. Growth*, **100**, Iss. 3: 508 (1990).
6. L. M. Smith, C. F. Byrne, D. Patel, P. Knowles, J. Thompson, G. T. Jenkin, T. Nguyen Duy, A. Durand, and M. Bourdillot, *J. Vac. Sci. & Technol. A*, **8**, Iss. 2: 1078 (1990).
7. H. Ebe and H. Takigawa, *Materials Science and Engineering: B*, **16**, No. 1/3: 57 (1993).
8. Y. Lo, R. N. Bicknell, T. H. Myers, J. F. Schetzina, and H. H. Stadelmaier, *J. Appl. Phys.*, **54**, No. 7: 4238 (1983).
9. N. Matsumura, T. Ohshima, J. Saraie, and Y. Yodogawa, *J. Cryst. Growth*, **71**, Iss. 2: 361 (1985).
10. R. Pal, R. K. Bhan, K. C. Chhabra, and O. P. Agnihotri, *Semicond. Sci. Technol.*, **11**: 231 (1996).
11. C. A. Musca, J. F. Siliquini, K. A. Fynn, B. D. Nener, L. Faraone, and S. J. C. Irvine, *J. Cryst. Growth*, **71**, Iss. 2: 1912 (1985).
12. Y. Nemirovsky and G. Bahir, *J. Vac. Sci. & Technol. A*, **7**, Iss. 2: 450 (1989).
13. В. П. Бирюлин, С. А. Дудко, С. А. Коновалов, Ю. А. Пелевин, В. И. Туринов, *Фізика і техніка напівпровідників*, **37**, вып. 12: 1431 (2003).
14. Р. М. Балабай, *Обчислювальні методи із перших принципів у фізиці твердого тіла: квантово-механічна молекулярна динаміка* (Кривий Ріг: Видавничий дім: 2009).