

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ И МАТЕРИАЛОВ

УДК 621.315.592

МОНТЕ—КАРЛО—МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ФОРМИРОВАНИЯ НАНОКЛАСТЕРОВ КРЕМНИЯ В ДИОКСИДЕ КРЕМНИЯ

© 2011 г. А. Н. Карпов, Е. А. Михантьев*, С. В. Усенков, Н. Л. Шварц
Институт физики полупроводников им. А. В. Ржанова СО РАН,
*Новосибирский государственный технический университет

Изучен процесс формирования нанокластеров кремния при отжиге одиночных слоев состава SiO и слоистых структур SiO₂—SiO—SiO₂ и осаждении кремния на поверхность диоксида кремния. Предложена кинетическая Монте—Карло—модель формирования нанокластеров кремния при высокотемпературном отжиге слоев SiO_x нестехиометрического состава, учитывающая процессы образования и распада монооксида кремния. Установлено, что при отжиге слоистых структур SiO₂—SiO—SiO₂ на размеры нанокластеров, помимо температуры и длительности отжига, влияла и толщина слоя SiO. С помощью моделирования показано, что важную роль в процессе формирования нанокластеров играет газообразный монооксид кремния, образующийся в системе Si—SiO₂ при высоких температурах. Монооксид определяет и особенности формирования 3D-островков кремния при осаждении кремния на поверхность диоксида кремния.

Ключевые слова: нанокластеры кремния, Si/SiO₂, моделирование, метод Монте—Карло.

Введение

Интерес к нанокластерам кремния (Si-нк), покрытым оксидной оболочкой, обусловлен их применением в современной опто- и нанoeлектронике. К настоящему времени показано, что на их основе могут быть созданы светоизлучающие приборы для кремниевой фотоники [1] (например кремниевый лазер [2]), так как эти кластеры обладают фотолюминесценцией в видимой области спектра [3], а Si-нк, внедренные в SiO₂, могут быть использованы для замены монокристаллических затворов во флэш-памяти [4]. Обсуждалась и потенциальная возможность создания одноэлектронных и спинтронных приборов на основе Si-нк [5]. Для получения таких структур используют различные технологии: ионную имплантацию кремния в SiO₂ [6, 7], химическое осаждение из газовой фазы, стимулированное плазмой [8], совместное плазменное распыление кремния и диоксида кремния из разных источников с последующим высокотемпературным отжигом [9, 10]. Высокотемпературный отжиг способствует разделению фаз в смеси SiO_x, при этом размер Si-кластеров определяется температурой и длительностью отжига, а также степе-

нью нестехиометрии (значением x) [9, 11]. При высокотемпературном отжиге слоев нестехиометрического состава наряду с процессом диффузии атомов кислорода и кремния происходит образование монооксида кремния [7, 12, 13]. Образование заметной концентрации газообразного монооксида кремния происходит, начиная только с некоторых температур. Процессы образования, распада и диффузии SiO могут играть важную роль и при формировании Si-нк, в процессе разделения фаз при высоких температурах [14]. Известно, что диффузионный перенос кремния не является единственным механизмом переноса кремния в Si—SiO₂-структурах [12]. При высокотемпературном отжиге исходно аморфной пленки SiO_x происходит разделение фаз на Si-кластеры и матрицу SiO₂. Эксперименты показали, что формирование Si-нк происходит только при определенной доле избыточного кремния в SiO_x-смеси [11]. Легче всего Si-нк формируются в смеси с $x = 1$. Для практического применения обычно требуются кластеры определенного диаметра с малым разбросом по размерам. Был предложен способ формирования массива Si-нк в матрице SiO₂, позволяющий получать

кластеры заданного размера [15—17]. В работах [16, 17] Si-нк формировали в результате отжига структур, представляющих собой последовательность чередующихся слоев SiO и SiO₂. В таких структурах наблюдали высокую интенсивность люминесценции в видимой и ИК-областях спектра благодаря уменьшению дисперсии в распределении кластеров по размерам. Недавно был предложен новый метод получения Si-нк, обладающих заметной фотолюминесценцией, — непосредственное осаждение кремния на слой диоксида кремния [18, 19].

Для изучения электронной структуры Si-нк и атомарных процессов, приводящих к их формированию, обычно используют методы *ab initio* и молекулярной динамики [20—24]. Так, в работе [21] было показано что кластеры, состоящие из молекул SiO, могут преобразовываться, выделяя кремниевое ядро внутри оксидной оболочки. Это подтверждает возможность механизма собирания Si-нк, связанного с возникновением подвижных комплексов SiO в процессе высокотемпературных отжигов. Однако методы *ab initio* непригодны при изучении реальных технологических процессов, так как они рассматривают относительно небольшое число частиц и малое время. На этом фоне большим преимуществом обладают решеточные Монте—Карло-модели, так как размеры моделируемых объектов и рассматриваемое время процессов в решеточных моделях оказываются сопоставимы с экспериментальными. Ранее было предложено использовать решеточную модель Монте—Карло для изучения отжига тонких слоев диоксида кремния [25]. В работе [25] формирование Si-нк происходило только за счет диффузионного перемещения атомов кремния и кислорода. Однако при отжиге слоев SiO_x не удалось только за счет диффузионного переноса атомов кремния получить компактные Si-кластеры, имеющие сплошную границу с матрицей SiO₂. Экспериментально было показано, что Si-нк внутри имеют кремниевое ядро, а снаружи покрыты оболочкой субоксидов [26].

Ниже рассмотрены результаты исследования процесса формирования Si-нк при отжиге слоев SiO_x методом Монте—Карло с учетом дополнительного механизма переноса кремния в слоях диоксида кремния — за счет диффузии частиц SiO, существующих в слоях нестехиометрического состава при высоких температурах.

Монте—Карло-модель

Моделирование осуществляли с помощью вычислительного комплекса SilSim3D [27], разработанного для исследования атомарных процессов, происходящих в трехмерном поверхностном слое на кристаллической подложке с алмазоподобной структурой различного химического состава. В модели использован модернизированный алгоритм с планированием событий [27], позволяющий проводить расчеты в многокомпонентной системе, со-

держащей более 10⁷ частиц. В модельной системе задается состав, тип кристаллической структуры и ориентация подложки, морфология исходного слоя и возможные элементарные события. В роли элементарных событий могут выступать: адсорбции, десорбции, диффузии, химические реакции. Вероятность любого события определяется выражением $p = k \exp(-E_i/k_B T)$, где k_B — постоянная Больцмана; T — абсолютная температура; E_i — энергия активации процесса; k — коэффициент, для диффузии был принят равным частоте Дебая, а для химических реакций являлся подгоночным параметром.

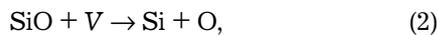
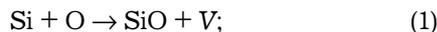
При моделировании системы Si—SiO₂ исходили из того, что основной элемент любой формы диоксида кремния — тетраэдр SiO₄ — вписывается в алмазоподобную решетку. Использование частично заполненной алмазоподобной сетки для моделирования аморфного слоя SiO₂ позволило организовать правильный ближний порядок, соответствующий матрице SiO₂. В диоксиде кремния каждый атом кремния находится в центре тетраэдра SiO₄, т. е. соседствует с четырьмя атомами кислорода. Соседние тетраэдры имеют общий угловой атом кислорода, ближайшие соседи которого — два атома кремния, т. е. кремний является четырехвалентным, а кислород — двухвалентным. На алмазной сетке любой атом может иметь четырех соседей, однако, в модели, благодаря специальному выбору энергетических параметров, кислород оказывается двухвалентным.

Наиболее частым событием в модели является диффузионный скачок атома на соседние свободные места в решетке в пределах трех координационных сфер. Вероятность диффузионного скачка определяется энергией активации диффузии E_{diff} , вычисляемой в зависимости от окружения атома как на исходном месте, так и на месте прибытия. Отрыв частицы от поверхности и ее переход в газовую фазу представляет собой частный случай диффузионного шага, когда в первой координационной сфере узла, в который встраивается атом, нет ни одного атома. Дополнительный энергетический барьер, который необходимо преодолеть атому для отрыва, E_{sub_i} , где i — индекс сорта атома. Энергия десорбции частицы i -го сорта $E_{des_i} = E_{sub_i} + \sum E_{ik}$. В модели введены реакции образования (Si + O → SiO) и распада (SiO → Si + O) монооксида кремния. Предусмотрена возможность задавать различные энергии активации в зависимости от окружения атомов, вступающих в реакцию. Были заданы энергии связи между различными сортами атомов E_{ij} , энергии сублимации каждого материала E_{sub_i} и энергии активации химических реакций. Каждая i -я химическая реакция в модели характеризуется константой скорости реакции $k_i = k_{0_i} \exp(-E_{r_i}/kT)$, которая, в свою очередь, определяется энергией активации E_{r_i} .

Энергетические параметры определяют физико-химическую природу моделируемой системы.

От выбора энергетических параметров зависит не только состав моделируемой системы, но и время расчетов и скорость преобразований, происходящих в модельном слое. При моделировании отжига слоев SiO_x использовали трехкомпонентную систему: Si, O, SiO. Опираясь на литературные данные [28, 29], были выбраны следующие значения энергии одиночных связей: $E_{Si-Si} = 1,1$ эВ, $E_{Si-O} = 2,5$ эВ, $E_{O-O} = 0,6$ эВ. Энергия связи SiO составляла 1,4 эВ при любом числе соседей, что при энергии сублимации $E_{sub,3} = 0,2$ эВ соответствовало энергии десорбции SiO, равной 1,6 эВ. Двухвалентность атомов кислорода обеспечивалась ослаблением эффективной энергии связи кислорода в конфигурации с неправильной координацией. Разницы между трех- и четырехкоординированными конфигурациями кислорода не делалось: их эффективные энергии связей составляли 1,5 эВ. Кроме того, выражение для вычисления энергии активации диффузионного скачка $E_{diff}(a \rightarrow b)$ для атома сорта k , покидающего место «а» и переходящего на место «b», помимо обычной суммы энергии связей E_{ik} атома сорта k на месте «а» с ближайшими соседями различных сортов, содержало энергетические добавки ΔE_{ik} . Значения параметров ΔE_{ik} подбирали так, что атом стремился находиться на решеточном месте с «правильным» окружением, а блуждающий атом либо не стремился попадать в «неправильные» места, либо быстро их покидал. Численные значения ΔE_{ik} составляли доли эВ.

В существующих на настоящий момент экспериментальных работах не содержится полного набора необходимых для моделирования энергетических параметров. Особенные трудности представляет выбор параметров химических реакций:



где V — пустое соседнее решеточное место (вакансия). Соотношения между энергиями активации об-

разования и распада SiO выбирали на основании результатов термодинамических расчетов температурной зависимости давлений газообразного монооксида кремния при высокотемпературных нагревах смеси твердых фаз кремния и диоксида кремния в соотношении 1 : 1 и 1 : 2 [30]. При выборе значений энергии активации химических реакций учитывали также результаты экспериментальных работ по осаждению кремния на поверхность кислородом [31].

Представленные в данной работе результаты моделирования соответствовали значениям энергий активации химических реакций: $E_{r1} = 3,7 \div 8,2$ эВ (реакции образования SiO) и $E_{r2} = 2,0 \div 3,2$ эВ (реакции распада SiO) в зависимости от окружения атомов, вступающих в реакцию.

Результаты моделирования

Отжиг слоев SiO. Моделируемая система представляла собой смесь атомов кремния и кислорода в соотношении 1 : 1, случайным образом расположенных в узлах алмазоподобной кристаллической решетки, при этом 30 % атомных мест оставались свободными. Вдоль двух латеральных направлений (x, y) ставились циклические граничные условия. По третьему «вертикальному» направлению (z) систему ограничивали с обеих сторон отражающими стенками. Такие стенки необходимы для определения равновесного давления монооксида кремния, образующегося при высокотемпературном отжиге. При каждой температуре длительность отжига соответствовала времени, необходимому для установления равновесного давления SiO в системе. Давление газообразных молекул монооксида определяли через температуру и число ударов частиц SiO о стенки в единицу времени на единицу площади. Для расчета оказываемого давления (в Па) использовали формулу $P = \alpha \frac{N\sqrt{T}}{St}$, где N — число ударов молекул SiO за

время t о поверхность крышек площадью S ; α — численный коэффициент.

На рис. 1 представлена температурная зависимость давления SiO при отжиге смеси для состава SiO. Наклон кривой $P_{SiO}(1/T)$ соответствует некоторой энергии активации E_{act} . В состоянии равновесия скорости прямой и обратной реакций равны. Отсюда следует, что при заданной температуре относительная концентрация SiO в слое определяется только разницей между энергиями активации реакций и отношением предэкспоненциальных множителей для прямой и обратной реакций. Давление же определяется лишь теми частицами, которым удалось преодолеть барьер на десорбцию, перейти из слоя SiO в газообразное состояние и достичь отражающих стенок, т. е. энергия активации на рис. 1 зависит от разности энергии активации образования и распада SiO и энергии десорбции:

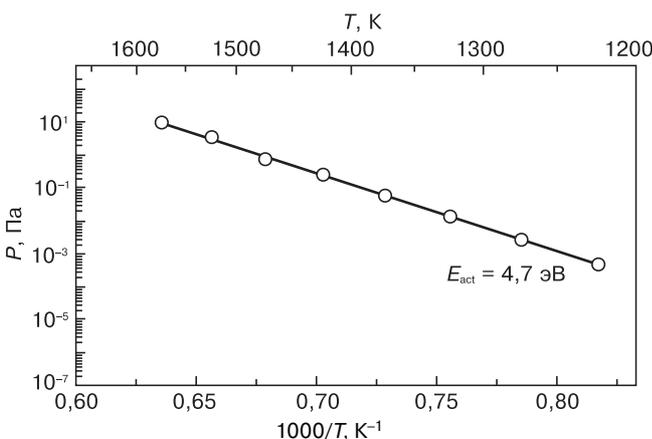


Рис. 1. Зависимость равновесного давления SiO от температуры при отжиге смеси атомов кремния и кислорода в соотношении 1 : 1

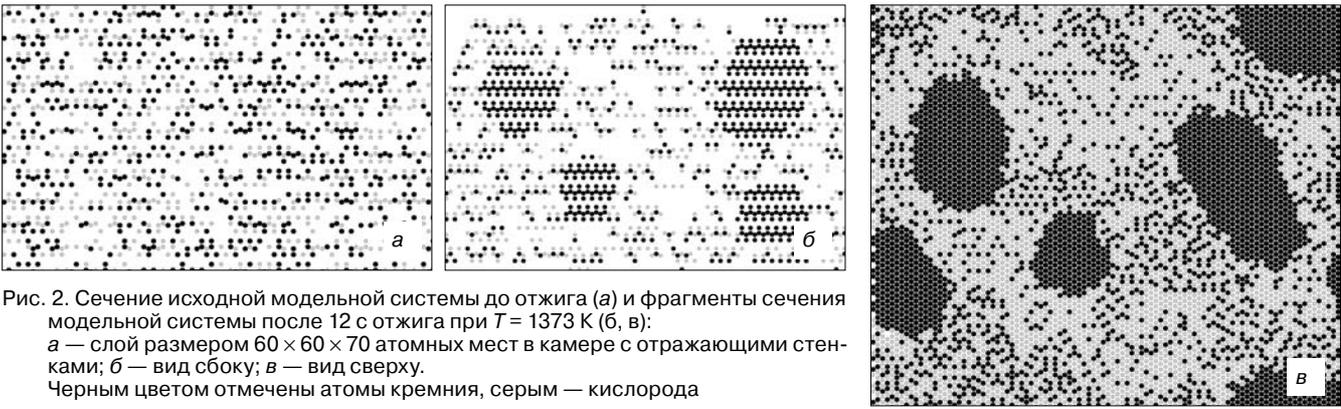


Рис. 2. Сечение исходной модельной системы до отжига (а) и фрагменты сечения модельной системы после 12 с отжига при $T = 1373$ К (б, в): а — слой размером $60 \times 60 \times 70$ атомных мест в камере с отражающими стенками; б — вид сбоку; в — вид сверху. Черным цветом отмечены атомы кремния, серым — кислорода

$$E_{\text{act}} \approx E_{r,\text{обр}}(\text{SiO}) - E_{r,\text{расп}}(\text{SiO}) + E_{\text{des}}(\text{SiO}),$$

где $E_{\text{des}}(\text{SiO}) = E_{\text{diff}}(\text{SiO}) + E_{\text{sub}}(\text{SiO})$. Наклон кривой $P_{\text{SiO}}(1/T)$ при отжиге смеси состава SiO оказался гораздо больше, чем наклон для температурной зависимости равновесного давления SiO, полученный в термодинамических расчетах (3,53 эВ [30]) и определенный в экспериментах по переходу твердой фазы SiO в газообразную (3,56 эВ [32]). Энергия активации, определенная из рис. 1, оказалась равной 4,7 эВ. Полученный результат можно объяснить тем, что к моменту, когда устанавливается равновесное давление в системе, происходит разделение фаз, и слой состава SiO представляет собой не случайную смесь частиц SiO₂ и Si, а отдельные кластеры кремния в матрице SiO₂. В этом случае наклон зависимости $P_{\text{SiO}}(1/T)$ должен быть ближе к зависимости давления SiO при отжиге смеси состава SiO₂. Термодинамические расчеты температурной зависимости давления монооксида кремния при отжиге смеси состава SiO₂ дают наклон, соответствующий 5,9 эВ [30], несколько больший, чем на кривой на рис. 1. Вычислительный эксперимент по отжигу слоев со смесью атомов Si в O в соотношении 1 : 2 (состав SiO₂) дал значение $E_{\text{act}} = 5$ эВ. При отжиге слоев SiO давление монооксида кремния в начальный момент времени заметно превышает равновесное значение, так как начальное состояние системы представляет собой случайную смесь атомов кремния и кислорода, и на начальном этапе отжига происходит активное образование молекул SiO. Со временем избыточный монооксид кремния распадается в устойчивые конфигурации, и его концентрация снижается. В процессе отжига абсолютное значение давления SiO продолжает слегка уменьшаться, даже после разделения фаз, так как концентрация SiO пропорциональна суммарной площади контакта кластеров кремния с диоксидом кремния, а кластеры продолжают укрупняться со временем отжига. Разделение фаз контролировали по доле кремния, находящегося в составе тетраэдров SiO₄ (γ_{Si}) или Si-нк (β_{Si}), и доле кислорода, имеющего двух соседей кремния (γ_{O}). Типичные значения этих параметров после разделения фаз составляют: $\gamma_{\text{Si}} = 0,4$, $\beta_{\text{Si}} = 0,4$, $\gamma_{\text{O}} = 0,8$.

На рис. 2 показаны сечения модельной системы до отжига и после установления равновесного давления SiO. Из рис. 2 видно, что кластеры кремния частично покрыты оксидной оболочкой и имеют заметный разброс по размерам. Были получены зависимости среднего размера кластеров от температуры и длительности отжига (рис. 3). Рассматривали два случая:

– отсутствие химических реакций в модельной системе, т. е. собирание кремния в кластеры происходило только за счет диффузионного переноса кремния;

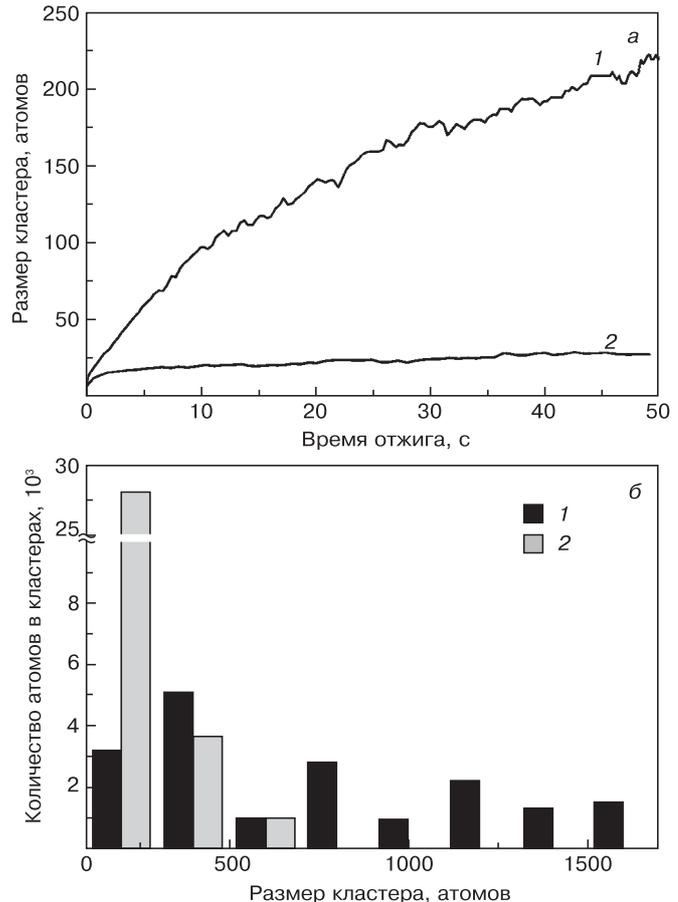


Рис. 3. Зависимость среднего размера кластера от времени отжига при $T = 1173$ К (а) и гистограмма распределения кластеров по размерам после отжига при $T = 1173$ К в течение 50 с (б): 1 — с учетом образования SiO; 2 — без учета образования SiO

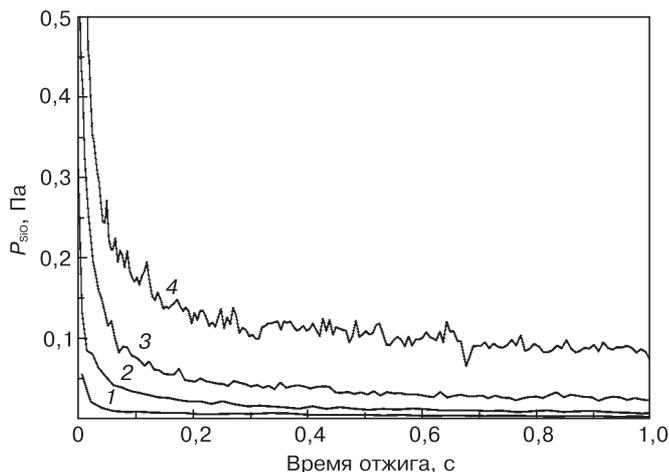


Рис. 4. Зависимость равновесного давления SiO от времени отжига при разных температурах T , К: 1 — 1223; 2 — 1273; 3 — 1323; 4 — 1373

– наличие реакций образования и распада монооксида кремния, когда дополнительный перенос кремния в кластеры происходил с помощью диффузии SiO.

Во втором случае средний размер кластеров больше (см. рис. 3), так как кластеры малых размеров почти отсутствуют, а сам процесс собирания кремния в кластеры ускоряется. Однако присутствие подвижных частиц SiO при высоких температурах заметно замедляет время счета. На рис. 4 показана зависимость давления, образуемого газообразным монооксидом кремния на стенки камеры, для четы-

рех различных температур. На одинаковый момент времени с повышением температуры давление также увеличивается (см. рис. 4).

Отжиг структур SiO₂—SiO—SiO₂. Исследовали отжиг структур, представляющих собой чередующиеся слои составов SiO₂ и SiO. Моделируемая структура — это два слоя идеального диоксида кремния, между которыми был заключен слой состава SiO. В процессе отжига происходило собирание кремния в кластеры. Однако максимальные размеры кластеров определялись уже не только температурой и временем отжига, но и толщиной слоев SiO. Образовавшиеся кластеры находились в области, соответствующей слою SiO до отжига, и имели размеры, не превосходящие толщину этого слоя (рис. 5). При низких температурах и больших толщинах слоев SiO размер кластера ограничен главным образом температурой отжига, а при высоких температурах и малых толщинах слоев нестехиометрического состава — их толщиной.

Осаждение кремния на поверхность диоксида кремния. Ниже представлены результаты моделирования осаждения кремния на поверхность диоксида кремния при разных температурах и потоках кремния. На рис. 6 показаны фрагменты сечения структуры, отвечающие травлению SiO₂ и росту кремниевой пленки в зависимости от соотношения температуры подложки T и скорости осаждения кремния V . Из рис. 6 видно, что рост пленки Si на поверхности SiO₂ идет не послойно, а за счет разрас-

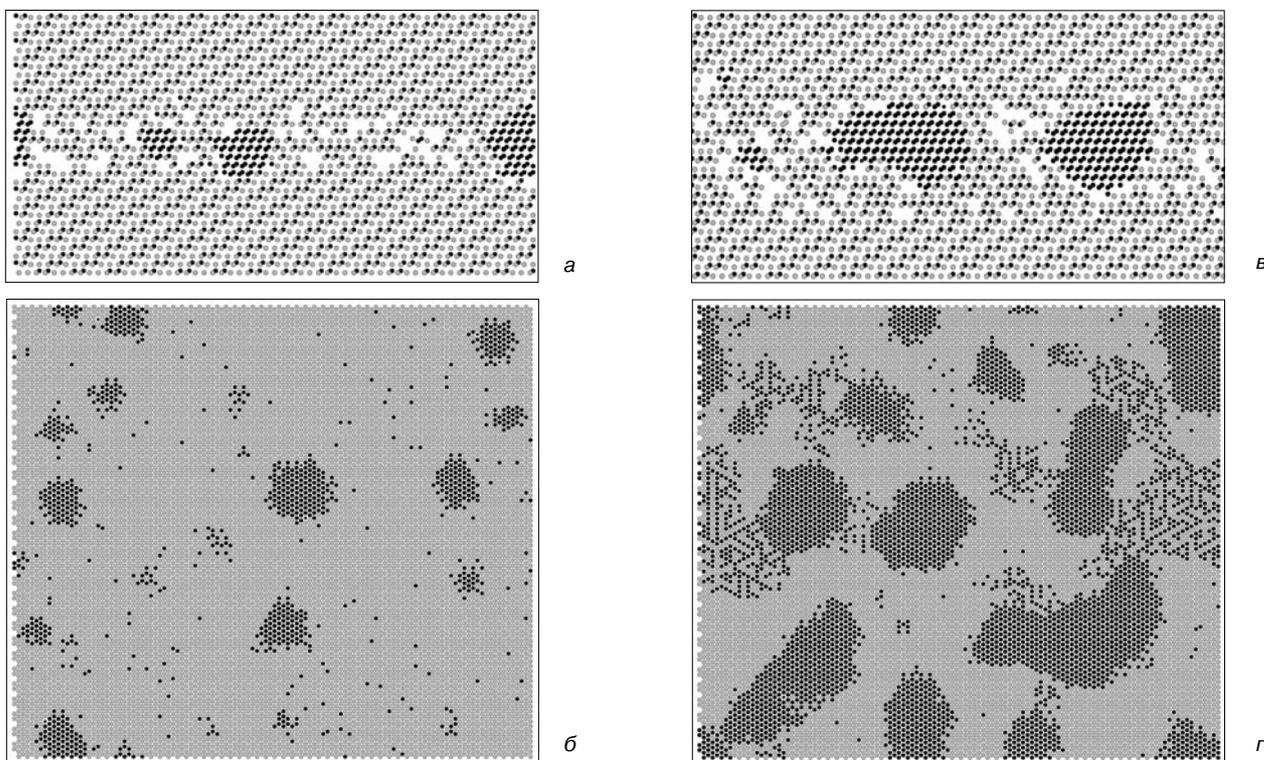


Рис. 5. Фрагменты сечений модельной системы SiO₂—SiO—SiO₂ после отжига в течение 1 с при $T = 1373$ К для слоя SiO толщиной 1,6 нм (а, б) и 4,6 нм (в, г): а, в — вид сбоку; б, г — вид сверху. Черным цветом отмечены атомы кремния, серым — кислорода

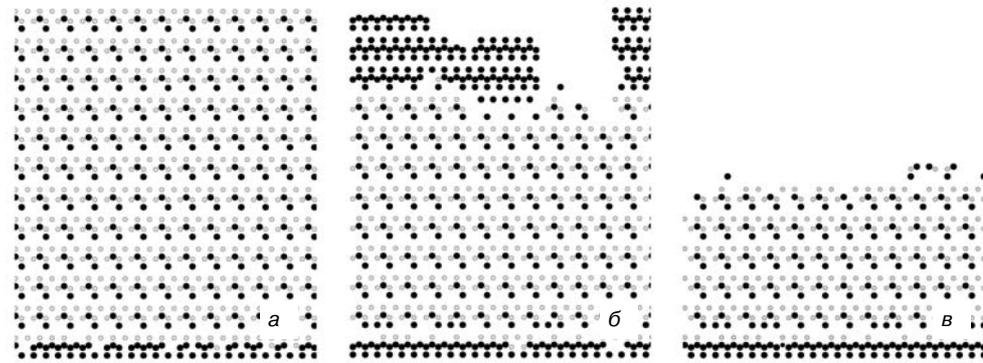


Рис. 6. Фрагменты сечений модельной структуры при $T = 1250$ К, соответствующие росту слоя Si и травлению подложки при осаждении кремния на поверхность диоксида кремния: а — исходная подложка SiO_2 ; б — после осаждения Si в течение 5 с при $V = 2$ МС/с; в — в течение 10 с при $V = 0,7$ МС/с. Черным цветом отмечены атомы кремния, серым — кислорода

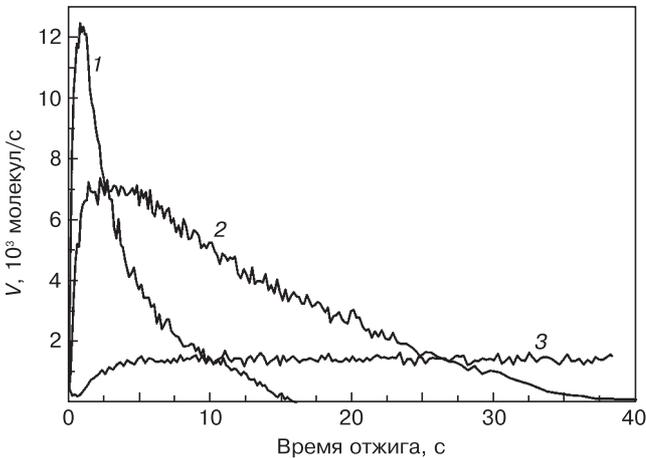


Рис. 7. Скорость десорбции SiO в зависимости от времени отжига при $T = 1250$ К и разных скоростях осаждения V , МС/с: 1 — 2; 2 — 1; 3 — 0,7

тания трехмерных островков кремния. Результаты моделирования качественно соответствуют экспериментальной $V-T$ -кривой в работе [27], отделяющей область травления подложки от области роста пленки. Следует отметить, что при зарождении островков Si происходит образование монооксида кремния, и рост пленки сопровождается десорбцией SiO (рис. 7).

Особенно интенсивная десорбция монооксида кремния характерна для параметров осаждения, отвечающих переходной области от травления подложки к росту пленки. В таких условиях формирование и разрастание островков Si сопровождается заметным уменьшением толщины подложки SiO_2 (рис. 8). Данные моделирования качественно согласуются с экспериментами по формированию 3D-Si-нк на поверхности кремния, покрытого пленкой диоксида кремния [18].

Заключение

Предложена кинетическая Монте—Карло-модель формирования Si-нк при высокотемпературном отжиге слоев SiO_x нестехиометрического состава, учитывающая наряду с диффузионными перемещениями процессы образования и распада монооксида кремния. Изучен процесс формирования Si-нк при отжиге одиночных слоев состава SiO и слоистых структур $\text{SiO}_2\text{—SiO—SiO}_2$. Получены распределения нанокластеров по размерам в зависимости от температуры и длительности отжига, толщины слоев SiO. Оценен средний размер нанокластеров в зависимости от условий отжига. Моделирование по-

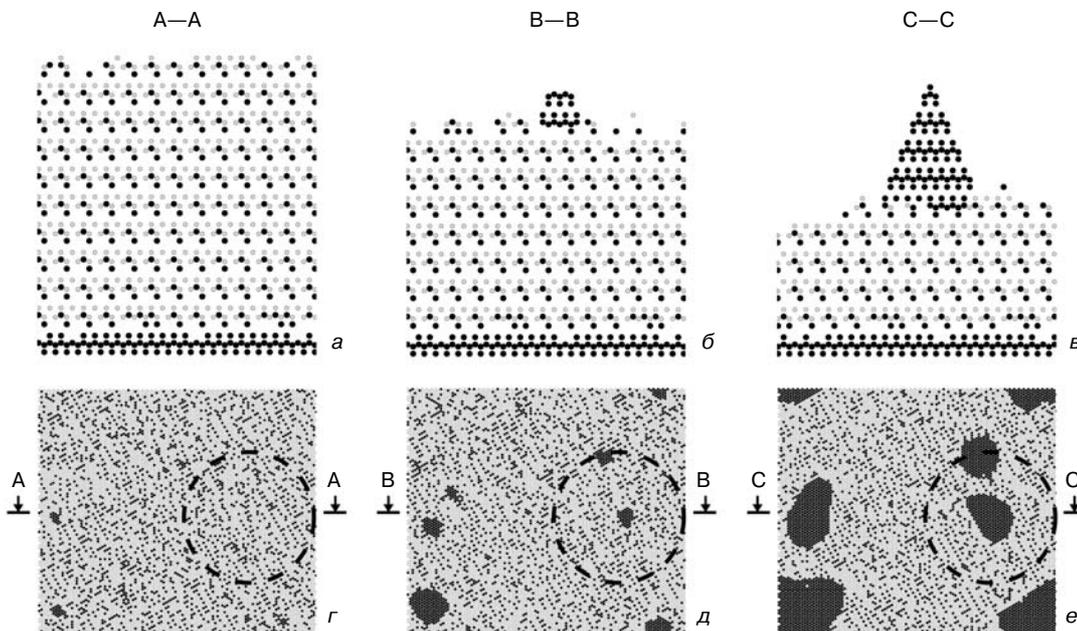


Рис. 8. Фрагменты сечений модельной структуры после осаждения Si при $T = 1250$ К и $V = 1$ МС/с в течение 3 (а, г), 7 (б, д) и 15 (в, е) с. Черным цветом отмечены атомы кремния, серым — кислорода. Штриховые окружности — области фрагментов сечений

казало, что важную роль в процессе формирования нанокластеров играет газообразный монооксид кремния, образующийся в системе SiO—SiO₂ при высоких температурах. Появление монооксида кремния при высоких температурах приводит к ускорению собирания избыточного кремния в нанокластеры при отжиге SiO_x. Монооксид определяет и особенности формирования слоев кремния при осаждении кремния на поверхность SiO₂. В зависимости от скорости осаждения кремния и температуры подложки будет происходить либо травление SiO₂ за счет испарения SiO, либо формирование 3D-островков Si или рост слоя поликристаллического кремния.

Библиографический список

1. **Khriachtchev, L.** Optical gain in Si/SiO₂ lattice: Experimental evidence with nanosecond pulses / L. Khriachtchev, M. Rasanen, S. Novikov, J. Sinkkonen // *Appl. Phys. Lett.* – 2001. – V. 79, N 9. – P. 1249–51.
2. **Pavesi, L.** Optical gain in silicon nanocrystals / L. Pavesi, L. Dal Negro, C. Mazzoleni, G. Franzo, F. Priolo // *Nature.* – 2000. – V. 408. – P. 440–444.
3. **Torchynskaa, T. V.** Photoluminescence and structure investigations of Si nanocrystals in amorphous silicon matrix / T. V. Torchynskaa, A. Vivas Hernandez, Ya. Matsumoto, L. Khomenkova, L. Shcherbina // *J. Non-Crystalline Solids.* – 2006. – V. 352. – P. 1188–1191.
4. **Ng, C. Y.** Influence of silicon–nanocrystal distribution in SiO₂ matrix on charge injection and charge decay / C. Y. Ng, T. P. Chen, M. S. Tse, V. S. W. Lim, A. K. Tseng // *Appl. Phys. Lett.* – 2005. – V. 86, N 15. – P. 152110 (1–3).
5. **Das Sarma, S.** Spin quantum computation in silicon nanostructures / S. Das Sarma, R. de Sousa, X. Hu, B. Koiller // *Solid State Commun.* – 2005. – V. 133, N 11. – P. 737–746.
6. **Kachurin, G. A.** Visible and near-infrared luminescence from silicon nanostructures formed by ion implantation and pulse annealing / G. A. Kachurin, I. E. Tysenko, K. S. Zhuravlev, N. A. Pazdnikov, V. A. Volodin, A. K. Gutakovskiy, A. F. Leier, W. Skorupa, R. A. Yankov // *Nucl. Instrum. and Meth. in Phys. Res. B.* – 1997. – V. 122, N 3. – P. 571–574.
7. **Beyer, V.** Dissociation of Si⁺ ion implanted and as-grown thin SiO₂ layers during annealing in ultra-pure neutral ambient by emanation of SiO / V. Beyer, J. von Borany, K.-H. Heinig // *J. Appl. Phys.* – 2007. – V. 101, N 5. – P. 053516 (1–6).
8. **Tong, S.** Study of photoluminescence in nanocrystalline silicon/amorphous silicon multilayers / S. Tong, X.-N. Liu, X.-M. Bao // *Appl. Phys. Lett.* – 1995. – V. 66, N 4. – P. 469 (1–3).
9. **Dovrat, M.** Radiative versus nonradiative decay processes in silicon nanocrystals probed by time-resolved photoluminescence spectroscopy / M. Dovrat, Y. Goshen, J. Jedrzejewski, I. Balberg, A. Sa'ar // *Phys. Rev. B.* – 2004. – V. 69, N 15. – P. 155311 (1–8).
10. **Карпов, А. Н.** Формирование SiO_x-слоев при плазменном распылении Si- и SiO₂-мишеней / А. Н. Карпов, Д. В. Марин, В. А. Володин, J. Jedrzejewski, Г. А. Качурин, Е. Savir, Н. Л. Шварц, З. Ш. Яновицкая, I. Balberg, Y. Goldstein // *Физика и техника полупроводников.* – 2008. – Т. 42, № 6. – С. 753–758.
11. **Comedi, D.** X-ray-diffraction study of crystalline Si nanocrystal formation in annealed silicon-rich silicon oxides / D. Comedi, O. H. Y. Zalloum, E. A. Irving, J. Wojcik, T. Roschuk, M. J. Flynn, P. Mascher // *J. Appl. Phys.* – 2006. – Т. 99, № 2. – P. 023518 (1–8).
12. **Tsoukalas, D.** Diffusivity measurements of silicon in silicon dioxide layers using isotopically pure material / D. Tsoukalas, C. Tsamis, P. Normand // *Ibid.* – 2001. – V. 89, N 12. – P. 7809–7813.
13. **Fukatsu, S.** Effect of the Si/SiO₂ interface on self-diffusion of Si in semiconductor-grade SiO₂ / S. Fukatsu, T. Takahashi, K. M. Itoh, M. Uematsu, A. Fujiwara, H. Kageshima, Y. Takahashi, K. Shiraishi, U. Gösele // *Appl. Phys. Lett.* – 2003. – V. 83, N 19. – P. 3897–3899.
14. **Furukawa, K.** Observation of Si cluster formation in SiO₂ films through annealing process using X-ray photoelectron spectroscopy and infrared techniques / K. Furukawa, Y. Liu, H. Nakashima, D. Gao, K. Uchino, K. Muraoka, H. Tsuzuki // *Ibid.* – 1998. – V. 72, N 6. – P. 725–727.
15. **Vinciguerra, V.** Quantum confinement and recombination dynamics in silicon nanocrystals embedded in Si/SiO₂ superlattices / V. Vinciguerra, G. Franzo, F. Priolo, F. Iacona, C. Spinella // *J. Appl. Phys.* – 2000. – V. 87, N 11. – P. 8165 (1–9).
16. **Zacharias, M.** Size-controlled highly luminescent silicon nanocrystals: A SiO—SiO₂ superlattice approach / M. Zacharias, J. Heitmann, R. Scholz, U. Kahler, M. Schmidt, J. Blasing // *Appl. Phys. Lett.* – 2002. – V. 80, N 4. – P. 661 (1–3).
17. **Jambois, O.** Influence of the annealing treatments on the luminescence properties of SiO/SiO₂ multilayers / O. Jambois, H. Rinnert, X. Devaux, M. Vergnat // *J. Appl. Phys.* – 2006. – V. 100, N 12. – P. 123504 (1–6).
18. **Shklyayev, A. A.** Three-dimensional Si islands on Si(001) surfaces / A. A. Shklyayev, M. Ichikawa // *Phys. Rev. B.* – 2001. – V. 65, N 4. – P. 045307 (1–6).
19. **Shklyayev, A. A.** Photoluminescence of Si layers grown on oxidized Si surfaces / A. A. Shklyayev, Y. Nakamura, M. Ichikawa // *J. Appl. Phys.* – 2007. – V. 101, N 3. – P. 033532 (1–5).
20. **Guerra, R.** Size, oxidation, and strain in small Si/SiO₂ nanocrystals / R. Guerra, E. Degoli, S. Ossicini // *Phys. Rev. B.* – 2009. – V. 80, N 15. – P. 155332 (1–5).
21. **Zhang, R. Q.** Silicon monoxide clusters: the favorable precursors for forming silicon nanostructures / R. Q. Zhang, M. W. Zhao, S. T. Lee // *Phys. Rev. Lett.* – 2004. – V. 93, N 9. – P. 095503 (1–4).
22. **Kirichenko, T. A.** Silicon interstitials at Si/SiO₂ interfaces: Density functional calculations / T. A. Kirichenko, D. Yu, S. K. Banerjee, G. S. Hwang // *Phys. Rev. B.* – 2005. – V. 72, N 3. – P. 035345 (1–6).
23. **Boero, M.** Free energy molecular dynamics simulations of pulsed laser irradiated SiO₂: Si—Si— bond formation in a matrix of SiO₂ / M. Boero, A. Oshiyama, P. L. Silvestrelli, K. Murakami // *Appl. Phys. Lett.* – 2005. – V. 86, N 20. – P. 201910 (1–3).
24. **Chu, T. S.** Geometric and electronic structures of silicon oxide clusters / T. S. Chu, R. Q. Zhang, H. F. Cheung // *J. Phys. Chem. B.* – 2001. – V. 105, N 9. – P. 1705–1709.
25. **Зверев, А. В.** Решеточная Монте—Карло—модель SiO_x-слоев / А. В. Зверев, И. Г. Неизвестный, Н. Л. Шварц, З. Ш. Яновицкая // *Российские нанотехнологии.* – 2008. – Т. 3, № 5–6. – С. 175–185.
26. **Zimina, A.** Electronic structure and chemical environment of silicon nanoclusters embedded in a silicon dioxide matrix / A. Zimina, S. Eisebitt, W. Eberhardt, J. Heitmann, M. Zacharias // *Appl. Phys. Lett.* – 2006. – V. 88, N 16. – P. 163103 (1–3).
27. **Зверев, А. В.** Монте—Карло моделирование процессов роста наноструктур с алгоритмом планирования событий на шкале времени / А. В. Зверев, К. Ю. Зинченко, Н. Л. Шварц, З. Ш. Яновицкая // *Российские нанотехнологии.* – 2009. – Т. 4, № 3–4. – С. 85–93.
28. **Бабиц, В. М.** Кислород в монокристаллах кремния / В. М. Бабиц, Н. И. Бледкан, Е. Ф. Венгер // *Київ: Інтерпрес ЛТД.* 1997. – 240 с.
29. **Красников, Г. Я.** Математическое моделирование кинетики высокотемпературного окисления кремния и структуры пограничного слоя в системе Si—SiO₂ / Г. Я. Красников, Н. А. Зайцев, И. В. Матюшкин // *Физика и техника полупроводников.* – 2003. – Т. 37, № 1. – С. 44–49.
30. **Bahloul-Hourlier, D.** Thermodynamics of the Au—Si—O system: Application to the synthesis and growth of silicon—silicon dioxide nanowires / D. Bahloul-Hourlier, P. Perrot // *J. Phase Equilibria and Diffusion.* – 2007. – V. 28, N 2. – P. 150–157.
31. **Streit, D. C.** Thermal and Si-beam assisted desorption of SiO₂ from silicon in ultrahigh vacuum / D. C. Streit, F. G. Allen // *J. Appl. Phys.* – 1987. – V. 61, N 8. – P. 2894–2897.
32. **Ferguson, F. T.** Vapor pressure of silicon monoxide / F. T. Ferguson, J. A. Nuth III // *J. Chem. and Eng. Data.* – 2008. – V. 53, N 12. – P. 2824–2832.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 11-02-00045) и в рамках проекта «Механизмы роста и характеристики Si и Si/Ge-нановискеров» по программе фундаментальных исследований Президиума РАН № 21.30.