

УДК 539-022.532 : 519.245

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ФОРМИРОВАНИЯ НАНОКЛАСТЕРОВ КРЕМНИЯ ПРИ ОТЖИГЕ SiO_x -СЛОЁВ*

Е. А. Михантьев^{1,2}, И. Г. Неизвестный², С. В. Усенков², Н. Л. Шварц²

¹ Государственное образовательное учреждение высшего профессионального образования
«Новосибирский государственный технический университет»,

630092, г. Новосибирск, просп. К. Маркса, 20

² Учреждение Российской академии наук

Институт физики полупроводников им. А. В. Ржанова Сибирского отделения РАН,
630090, г. Новосибирск, просп. Академика Лаврентьева, 13

E-mail: simsonic@isp.nsc.ru

Рассмотрен механизм формирования нанокластеров кремния в слоях нестехиометрического состава с помощью моделирования методом Монте-Карло. Интерес к кремниевым нанокластерам (Si-нк), покрытым окисной оболочкой, обусловлен их применением в современной опто- и нанoeлектронике. Предложена решётчатая модель Монте-Карло для изучения атомарных процессов в системе Si—SiO₂. Исследован процесс формирования нанокластеров кремния при отжиге одиночных SiO-слоёв и слоистых структур SiO₂—SiO—SiO₂. В модели наряду с диффузионными перемещениями частиц учитываются процессы образования и распада подвижных молекул монооксида кремния. Показано, что учёт переноса кремния при высокотемпературных отжигах за счёт перемещения SiO ускоряет процесс формирования Si-нк. Получены зависимости размеров нанокластеров от температуры, длительности отжига и состава SiO_x-слоя. Выявлено, что при отжиге плёнок диоксида кремния, содержащих слои нестехиометрического состава, может происходить либо формирование нанокластеров кремния, либо образование полостей.

Ключевые слова: нанокластеры кремния, моделирование, метод Монте-Карло.

Введение. Интерес к кремниевым нанокластерам (Si-нк), встроенным в матрицу диоксида кремния, возник после того, как экспериментально было показано, что такие нанокластеры являются источниками фотолюминесценции (ФЛ) в видимой и инфракрасной областях спектра (700–900 нм) [1–4]. Это означает, что на основе Si-нк могут быть созданы светоизлучающие приборы для кремниевой фотоники [5–7]. Для получения таких структур используются различные технологии: ионная имплантация кремния в SiO₂ [8–11], распыление кремниевой мишени лазером или электронным лучом в присутствии аргонокислородной плазмы [12], стимулированное плазмой химическое осаждение из газовой фазы [13], совместное плазменное распыление кремния и диоксида кремния из разных источников с последующим высокотемпературным отжигом [14, 15]. С одной стороны, высокотемпературный отжиг — необходимый этап, устраняющий структурные дефекты, которые неизбежно возникают при низкотемпературном осаждении или ионной имплантации и являются центрами безызлучательной рекомбинации. С другой стороны, он способствует разделению фаз в смеси SiO_x, при этом размер кремниевых кластеров определяется температурой и длительностью отжига, а также степенью нестехиометрии (значением x) [10, 14, 16]. При высокотемпературном отжиге слоёв нестехиометрического состава наряду с процессом диффузии атомов кислорода и кремния происходит образование монооксида

*Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 11-02-00045) и Программы Президиума РАН «Основы фундаментальных исследований нанотехнологий и наноматериалов» (проект № 21.30 «Механизмы роста и характеристики Si и Si/Ge нановискеров»).

кремния [11, 17]. Процессы образования, распада и диффузии SiO могут играть важную роль и при формировании нанокластеров кремния в процессе разделения фаз при высоких температурах [18]. Известно, что диффузионный перенос кремния — не единственный механизм переноса в Si—SiO₂. Тонкие слои диоксида на кремнии при высоких температурах (1000–1200 °C) испаряются за счёт возникновения на границе Si—SiO₂ молекул монооксида кремния и их диффузии через тонкий слой диоксида к поверхности [19, 20]. Изучение процесса испарения монооксида кремния при отжигах плёнок диоксида кремния после ионной имплантации кремния позволило обнаружить чувствительность этого процесса к температуре отжига. Изменение температуры всего на 100 °C кардинальным образом меняло результат отжига: при более низких температурах формировались нанокластеры кремния, а при более высоких — полости [11].

Для практического использования, как правило, требуются кластеры заданного размера с малым разбросом по диаметру Si-нк. При высокотемпературном отжиге исходно аморфной плёнки SiO_x происходит разделение фаз на кремниевые кластеры и матрицу SiO₂. Эксперименты показали, что образование нанокластеров происходит только при определённой доле избыточного кремния в смеси SiO_x. Легче всего нанокластеры формируются в смеси с $x = 1$ [21]. Однако, как и для всех самоорганизованных структур, такие кластеры имеют существенный разброс по размерам. Идея ограничения максимального размера кластера вначале была опробована на слоистых структурах SiO₂—Si—SiO₂ [22]. Предложен способ построения массива нанокластеров кремния в матрице SiO₂, позволяющий получать кластеры нужного размера с малым разбросом и, как следствие, высокую интенсивность люминесценции в видимой и ИК-области спектра [23–25]. Нанокластеры кремния формировались в результате отжига структур, представляющих собой последовательность чередующихся слоёв SiO и SiO₂. В [25] показано, что максимальная ФЛ может быть достигнута в многослойных структурах такого типа. В многослойных структурах SiO—SiO₂ наблюдалась и электролюминесценция [24].

Моделирование может оказать помощь при анализе атомарных процессов, приводящих к образованию нанокластеров, а также в выборе параметров технологических процессов, необходимых для получения кластеров заданных размеров. Решёточные модели Монте-Карло позволяют рассматривать размеры моделируемых объектов и времён процессов, сопоставимых с экспериментальными. Учитывая, что основной элемент любой формы диоксида кремния — тетраэдр SiO₄ — вписывается в алмазоподобную решётку, предложено использовать решёточную модель Монте-Карло для изучения отжига тонких слоёв диоксида кремния [26], в которой рассматривались только диффузионные перемещения атомов кремния и кислорода в слое состава SiO₂.

Цель предлагаемой работы — исследование процесса формирования нанокластеров кремния при отжиге SiO_x-слоёв методом Монте-Карло с учётом дополнительного механизма переноса кремния в слоях диоксида кремния за счёт диффузии частиц SiO, существующих в слоях нестехиометрического состава при высоких температурах.

Модель Монте-Карло. Моделирование осуществлялось с помощью вычислительного комплекса "SilSim3D" [27, 28], разработанного для исследования атомарных процессов, происходящих в трёхмерном поверхностном слое на кристаллической подложке с алмазоподобной структурой различного химического состава. В модели пространство твёрдого тела представляется в виде набора решёточных мест, каждое из которых может быть свободно либо занято только одной частицей. Взаимодействие между частицами ограничивается тремя координационными сферами. Характер такого взаимодействия зависит от конкретного окружения в данном месте решётки. В модели использован модернизированный алгоритм с планированием событий [28], позволяющий за приемлемые времена расчётов проводить моделирование многокомпонентной системы, содержащей более 10⁷ частиц.

В модельной системе задаются: тип кристаллической структуры и ориентация подложки, состав и морфология исходного слоя, а также возможные элементарные события. Роли элементарных событий могут выступать: адсорбции, десорбции, диффузии, химические реакции. Вероятность любого события задаётся выражением $p_i = k \exp(-(E_i/k_B T))$, где k_B — постоянная Больцмана; T — абсолютная температура; E_i — энергия активации процесса; k — численный коэффициент (для диффузий брался равным частоте Дебая). Выбор энергетических параметров определяет физико-химическую природу моделируемой системы. При моделировании отжига SiO_x -слоёв использовалась 3-компонентная система: 1 — Si, 2 — O, 3 — SiO. Были заданы энергии связей между различными атомами $E_{i,j}$ (i, j — индексы типа атома), энергии сублимации каждого материала $E_{\text{sub},i}$ и энергии активации химических реакций. Каждая химическая реакция в модели характеризуется константой скорости реакции $k_i = k_{0i} \exp(-(E_{r,i}/kT))$, которая, в свою очередь, определяется энергией активации реакции $E_{r,i}$, k_{0i} — предэкспоненциальный множитель.

Наиболее частым событием в модели является диффузионный скачок атома на соседнее свободное место в решётке в пределах трёх ближайших координационных сфер. Предусмотрена возможность учёта неаддитивного взаимодействия, т. е. энергия связи атома с окружением не описывается простой суммой элементарных взаимодействий данного атома с каждым атомом из своего окружения. Вероятность диффузионного скачка определяется энергией активации диффузии E_{dif} , которая вычисляется в зависимости от окружения атома как на исходном месте, так и на месте прибытия. Отрыв частицы от поверхности и её 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 — параметр $E_{\text{sub},i}$. Энергия десорбции частицы i -го типа $E_{\text{des},i} = E_{\text{sub},i} + \sum E_{ik}$.

От выбора энергий элементарных событий зависит не только поведение системы и составляющих её частиц, но также и время расчётов, и скорость преобразований, происходящих в модельном слое. В модельной системе энергия связей $E_{i,j}$ в ряду Si—O, Si—Si и O—O уменьшалась в сравнении с данными [29, 30]. При моделировании были выбраны следующие значения энергии одиночных связей: $E_{\text{Si-Si}} = 1,1$ эВ, $E_{\text{Si-O}} = 2,5$ эВ, $E_{\text{O-O}} = 0,6$ эВ. В соответствии с представлениями об образовании подвижной и летучей молекулы монооксида кремния во время высокотемпературных отжигов энергия связи SiO составляла 1,4 эВ для любого числа соседей. При этом предполагалось, что частицы SiO не взаимодействуют друг с другом. Энергии сублимации $E_{\text{sub},3} = 0,2$ эВ, что соответствует энергии десорбции SiO, равной 1,6 эВ. Двухвалентность атомов кислорода обеспечивалась ослаблением эффективных энергий связи кислорода в конфигурациях с неправильной координацией. Разницы между трёх- и четырёхкоординированными конфигурациями кислорода не делалось: их эффективные энергии связей равнялись 1,5 эВ. Кроме того, выражение для вычисления энергии активации диффузионного скачка $E_{\text{dif}}(a \rightarrow b)$ для атома k , переходящего с места a на место b , помимо обычной суммы энергий связей E_{ik} атома типа k на месте a и ближайших соседей различных типов содержало энергетические добавки ΔE_{ik} , составляющие доли электронвольта. Эти добавки как повышали, так и понижали энергию перехода $a \rightarrow b$ в зависимости от окружения атомов на местах a и b . Понижение энергии активации события соответствовало повышению его вероятности, и наоборот. Энергетические параметры ΔE_{ik} подбирались так, что атом стремился находиться на решёточном месте с «правильным» окружением, а при блуждании либо не стремился попадать в «неправильные» места, либо быстро их покидал. Добавки также способствовали ускорению процесса разделения фаз при отжиге SiO_x -слоёв на матрицу диоксида кремния и кластеры кремния.

При моделировании системы Si—SiO₂ мы исходили из того, что в диоксиде кремния каждый атом кремния находится в центре тетраэдра SiO₄, т. е. окружён четырьмя ато-

мами кислорода. Соседние тетраэдры имеют общий угловой атом кислорода, ближайшие соседи которого — два атома кремния, т. е. кремний является 4-валентным, а кислород — 2-валентным. В алмазной решётке любой атом может иметь четырёх соседей, однако в модели благодаря специальному выбору энергетических параметров кислороду не выгодно иметь более двух ближайших соседей. Это обеспечивает двухвалентность атомов кислорода.

В модели введены реакции образования ($\text{Si} + \text{O} \rightarrow \text{SiO}$) и распада ($\text{SiO} \rightarrow \text{Si} + \text{O}$) монооксида кремния. Предусмотрена возможность задавать различные энергии активации в зависимости от окружения атомов, вступающих в реакцию. Вероятность реакции образования SiO повышается при неправильной координации атомов-реагентов. Представленные в данной работе результаты моделирования соответствовали значениям энергий активации химических реакций: $E_{r1} = 3,7 - 8,2$ эВ (реакция образования SiO) и $E_{r2} = 2,0 - 3,2$ эВ (реакция распада SiO) — в зависимости от окружения атомов, вступающих в реакцию.

С помощью предлагаемой модели проводился отжиг SiO_x -слоёв в температурном диапазоне 1173–1573 К для $1 \leq x \leq 2$ с учётом экспериментальных работ [11, 23–25].

Результаты моделирования. *Отжиг SiO_x -слоёв.* Моделируемая система представляла собой смесь атомов кремния и кислорода в соотношении $1 : x$ ($1 \leq x \leq 2$), случайным образом расположенных в узлах алмазоподобной кристаллической решётки, при этом 30 % атомных мест оставались свободными. В латеральных направлениях ставились циклические граничные условия, что делало систему бесконечной в горизонтальных направлениях. В вертикальном направлении система ограничивалась отражающими стенками, т. е. рассматривалась замкнутая система, что позволяло получать равновесные значения давления газообразной монооксида кремния при разных температурах.

Сечения модельной системы после отжига при установлении в ней равновесного давления SiO показаны на рис. 1. За счёт диффузионных перемещений атомов происходит разделение фаз: формируются тетраэдры SiO_4 диоксида кремния, а избыточный кремний собирается в кластеры. Кластеры кремния оказались частично покрытыми окисной оболочкой и имели заметный разброс по размерам. Получена зависимость среднего размера кластера от длительности отжига при различных значениях x (рис. 2). Видно, что размер кластера растёт с увеличением времени отжига и величины x . Формирование Si -нк

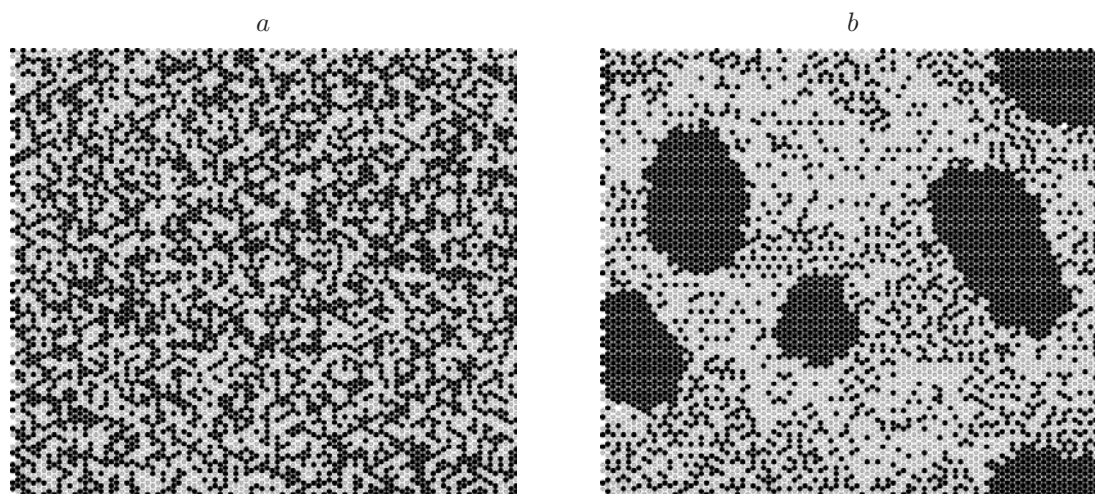


Рис. 1. Фрагменты сечения модельной системы состава SiO_x ($x = 1$) (вид сверху): до (а) и после 12 с отжига при $T = 1373$ К (б). Чёрным цветом отмечены атомы кремния, серым — кислорода

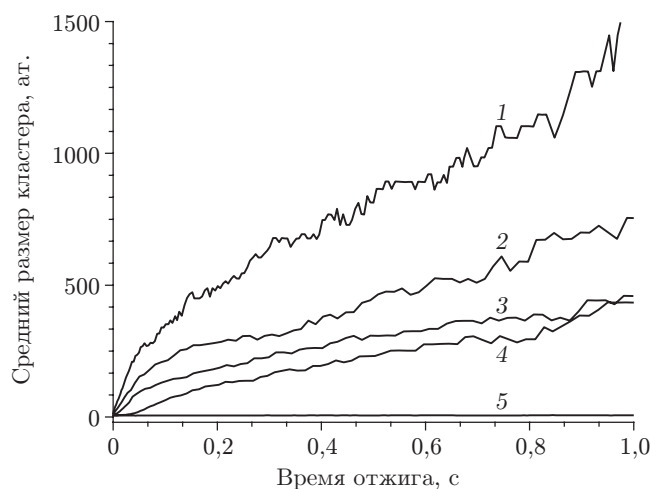


Рис. 2. Зависимость среднего размера кластера кремния от времени отжига SiO_x -слоёв при $T = 1373$ К для различных значений x : кривая 1 — $x = 1,0$; 2 — 1,2; 3 — 1,4; 4 — 1,6; 5 — 1,8

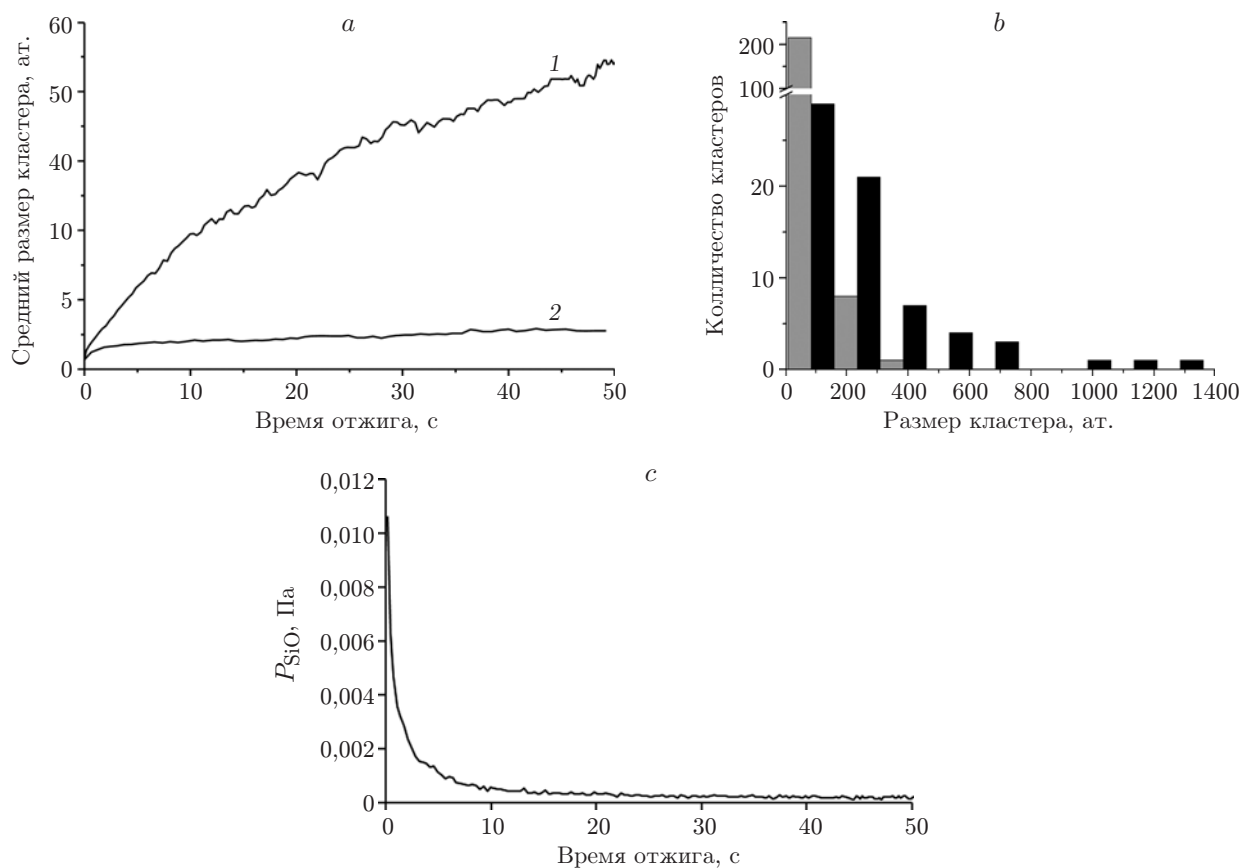


Рис. 3. Влияние SiO на собирание кремния в кластеры в системе SiO_x ($x = 1$) во время отжига при $T = 1173$ К: *a* — зависимость среднего размера кластеров от времени отжига (кривая 1 — с учётом образования SiO , 2 — без учёта образования SiO); *b* — распределение кластеров по размерам после 50 с отжига (чёрные столбцы — с учётом SiO , серые — без учёта SiO); *c* — изменение давления SiO со временем отжига

происходит начиная с некоторого значения избыточного кремния в слоях диоксида кремния. Кремний образует кластеры только при $x < 1,75$. Нами анализировалось влияние монооксида кремния на процесс формирования Si-нк. На рис. 3 представлены результаты моделирования для двух случаев: когда в модельной системе отсутствовали химические реакции, т. е. объединение кремния в кластеры происходило только за счёт диффузионного переноса атомов кремния, и когда присутствовали реакции образования и распада монооксида кремния, т. е. дополнительный перенос кремния к кластерам происходил вследствие диффузии SiO. Во втором случае средний размер кластеров оказывается больше, а сам процесс собирания кремния в кластеры ускоряется (рис. 3, а). Гистограмма распределения кластеров по размерам показывает, что в присутствии SiO небольших кластеров значительно меньше. Следует отметить, что в отсутствие SiO не удавалось получить компактные кластеры больших размеров, покрытые окисной оболочкой. Этот факт отмечался и в [26], когда в модели отжига SiO_x не наблюдались реакции образования и распада SiO. Размеры кластеров определялись только после установления стационарного давления монооксида кремния, т. е. после разделения фаз в SiO_x -слоях. Разделение фаз контролировалось по доле кремния, находящегося в составе тетраэдров SiO_4 (γ_{Si}) или Si-нк (β_{Si}), и доле кислорода, имеющего двух соседей кремния (γ_{O}). Типичные значения этих параметров после разделения фаз: $\gamma_{\text{Si}} = 0,40$, $\beta_{\text{Si}} = 0,40$, $\gamma_{\text{O}} = 0,85$. На начальном этапе отжига в системе образуется много частиц SiO, так как из-за хаотичного расположения атомов Si и O многие атомы кислорода имеют неправильную координацию, что повышает вероятность реакции образования монооксида кремния. Со временем избыточная моноокись кремния распадается на устойчивые конфигурации и её концентрация снижается. Процесс собирания избыточного кремния в кластеры продолжается и после установления равновесной концентрации SiO. После разделения фаз реакции образования монооксида кремния идут в основном на границе раздела матрицы диоксида кремния с кластерами кремния, а образовавшиеся частицы SiO могут за счёт диффузионных перемещений переносить избыточный кремний по матрице диоксида кремния, приводя к увеличению среднего размера нанокластеров.

Следует отметить, что степень нестехиометрии слоёв диоксида кремния и температура отжига во всех вычислительных экспериментах выбирались на основании существующих экспериментальных работ по отжигу SiO_x -слоёв, при этом модельные времена отжига были на несколько порядков меньше реальных. Такое масштабирование времени обусловлено тем, что время расчёта для реальных длительностей отжига не позволяет достигнуть равновесного состояния системы.

Отжиг структур SiO_2 —SiO— SiO_2 . Исследовался отжиг структур, представляющих собой чередующиеся слои составов SiO_2 и SiO. Моделируемая структура включала два слоя плотного кристаллического диоксида кремния, между которыми находился слой состава SiO. В процессе отжига, как и в случае с одиночными слоями SiO, происходило образование кремниевых нанокластеров (рис. 4). Механизм формирования нанокластеров тот же, что и в случае одиночных SiO_x -слоёв, а именно диффузионное собирание избыточного кремния при разделении фаз на SiO_2 и Si-нк. Максимальные размеры кластеров в данном случае определялись уже не только температурой и временем отжига, но и толщиной L слоёв SiO. Образовавшиеся кластеры находились в области, соответствующей SiO-слою до отжига, так как слои диоксида кремния не содержат избыточного кремния. На начальных этапах отжига, когда Si-нк малы, их распределение по размерам имеет тот же вид, что и при отжиге толстых одиночных слоёв. При увеличении времени отжига происходит укрупнение кластеров, но максимальный диаметр кластера обычно не превосходит толщину этого слоя, которая ограничивает и средний размер кластера. С увеличением времени отжига распределение кластеров смещается в область больших размеров. Следует отметить, что при низких температурах и больших L размер кластера ограничивался главным

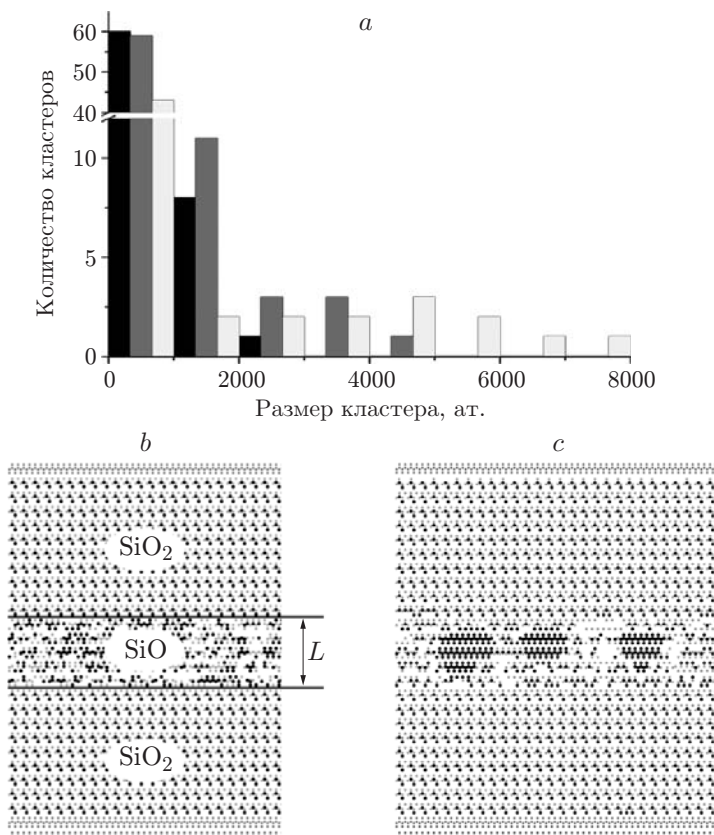


Рис. 4. Отжиг слоистых структур: гистограмма распределения кластеров по размерам после отжига при $T = 1373$ К в течение 4 с для разных значений толщины SiO-слоя (чёрные столбцы — $L = 1,6$ нм, серые — 2,4 нм, светлые — 4,6 нм) (a); сечения модельной системы SiO₂—SiO—SiO₂ (вид сбоку) до (b) и после отжига при $T = 1173$ К (c), $L = 4,6$ нм. Чёрным цветом отмечены атомы кремния, серым — кислорода

образом температурой отжига, а при высоких температурах и малых L — толщиной SiO слоя. На рис. 4, a приведена гистограмма распределения кластеров по размерам для трёх значений толщины SiO-слоя. Видно, что на один и тот же момент времени в структурах с $L = 1,6$ нм отсутствуют кластеры размером более 3000 ат., для $L = 2,4$ нм максимальный размер кластера не превышает 5000 ат., а при $L = 4,6$ нм составляет 8000 ат. Это свидетельствует о том, что в структурах с $L = 1,6$ и 2,4 нм максимальный размер кластеров уже достиг своего предельного значения, ограничиваемого толщиной слоя SiO.

Отжиг плёнок SiO₂ со слоями нестехиометрического состава. Рассмотрим результаты моделирования, имитирующие отжиг плёнки SiO₂ после проведения ионной имплантации кремния в слой диоксида кремния. Исходная система представляла собой плёнку SiO₂ на кремниевой подложке, в которую был введён слой состава SiO_x, содержащий избыточный кремний ($x = 1,5$). В этом вычислительном эксперименте система не ограничивалась в вертикальном направлении отражающими стенками, т. е. не была замкнута, и летучие частицы монооксида кремния имели возможность сублимировать с поверхности. Вид системы после отжига одинаковой длительности при двух различных температурах показан на рис. 5. Видно, что в области SiO_x-слоя после отжига при температуре $T = 1323$ К формировались кластеры кремния, а при температуре $T = 1423$ К — полость. Наблюдение за составом и морфологией слоя в процессе отжига показало, что в области SiO_x-слоя возникала высокая концентрация молекул SiO. Образовавшиеся молекулы

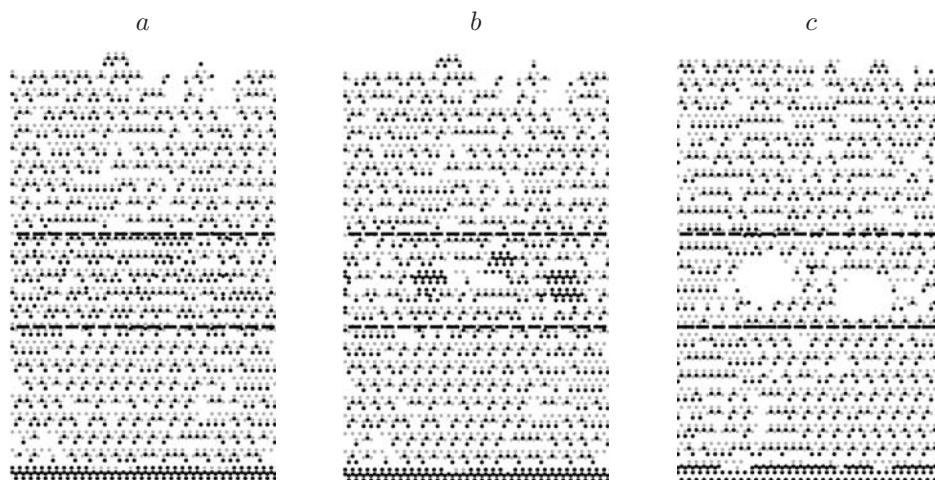


Рис. 5. Фрагменты сечения плёнки SiO_2 на подложке Si со слоем избыточного кремния: до отжига (*a*) и после 0,02 с отжига при температуре 1323 К (*b*) и 1423 К (*c*). Чёрным цветом отмечены атомы кремния, серым — кислорода, пунктирными линиями ограничен слой нестехиометрического состава

монооксида кремния в дальнейшем могли либо диссоциировать, либо удалиться из системы за счёт диффузии по вакансионным местам в слое диоксида и последующей десорбции. Правильное соотношение энергий активации элементарных процессов позволило получить согласие между результатами моделирования и экспериментальными данными по отжигу SiO_2 -слоёв после проведения в них ионной имплантации кремния [11]. На границе раздела Si— SiO_2 также происходили химические реакции с образованием SiO, что способствовало образованию небольших полостей, хорошо видных на рис. 5, *c*.

Заключение. В данной работе предложена кинетическая модель Монте-Карло формирования кремниевых нанокластеров при высокотемпературном отжиге SiO_x -слоёв нестехиометрического состава, учитывающая наряду с диффузионными перемещениями процессы образования и распада монооксида кремния. Показано, что возникновение SiO при высоких температурах приводит к ускорению собирания избыточного кремния в нанокластеры при отжиге SiO_x -слоёв. В зависимости от температуры отжига в плёнках SiO_2 , содержащих слои нестехиометрического состава, может происходить либо собирание избыточного кремния в кластеры при более низких температурах, либо формирование полостей за счёт образования подвижной и летучей монооксида кремния при высоких температурах. Такая модель может быть использована и при изучении формирования германиевых кластеров при отжиге GeO_x -слоёв.

Авторы выражают благодарность З. Ш. Яновицкой за выбор направления работы и полезные дискуссии при постановке вычислительных экспериментов и А. Н. Карпову за техническую помощь.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Photopoulos P., Nassiopoulou A. G., Kouvatsos D. N., Travlos A. Photoluminescence from nanocrystalline silicon in Si/SiO₂ superlattices // Appl. Phys. Lett. 2000. **76**, N 24. 3588.
2. Torchynska T. V., Vivas Hernandez A., Matsumoto Ya. et al. Photoluminescence and structure investigations of Si nano-crystals in amorphous silicon matrix // Journ. Non-Cryst. Solids. 2006. **352**, Is. 9–20. P. 1188–1191.

3. **Nesheva D., Raptis C., Perakis A. et al.** Raman scattering and photoluminescence from Si nanoparticles in annealed SiO_x thin films // Journ. Appl. Phys. 2002. **92**, N 8. 4678.
4. **Mutti P., Ghislotti G., Bertoni S. et al.** Room-temperature visible luminescence from silicon nanocrystals in silicon implanted SiO₂ layers // Appl. Phys. Lett. 1995. **66**, N 7. P. 851–853.
5. **Khriachtchev L., Rasanen M., Novikov S., Sinkkonen J.** Optical gain in Si/SiO₂ lattice: Experimental evidence with nanosecond pulses // Appl. Phys. Lett. 2001. **79**, N 9. P. 1249–1251.
6. **Pavesi L., Dal Negro L., Mazzoleni C. et al.** Optical gain in silicon nanocrystals // Nature. 2000. **408**. P. 440–444.
7. **Wu X. L., Xue F. S.** Optical transition in discrete levels of Si quantum dots // Appl. Phys. Lett. 2004. **84**, N 15. P. 2808–2810.
8. **Качурин Г. А., Яновская С. Г., Ruault М.-О. и др.** Действие облучения и последующего отжига на нанокристаллы Si, сформированные в слоях SiO₂ // Физика и техника полупроводников. 2000. **34**, № 8. С. 1004–1009.
9. **Carrada M., Wellner A., Paillard V. et al.** Photoluminescence of Si nanocrystal memory devices obtained by ion beam synthesis // Appl. Phys. Lett. 2005. **87**, N 25. 251911.
10. **Garrido B., Lopez M., Gonzalez O. et al.** Correlation between structural and optical properties of Si nanocrystals embedded in SiO₂: The mechanism of visible light emission // Appl. Phys. Lett. 2000. **77**, N 20. P. 3143–3145.
11. **Beyer V., von Borany J., Heinig K.-H.** Dissociation of Si⁺ ion implanted and as-grown thin SiO₂ layers during annealing in ultra-pure neutral ambient by emanation of SiO // Journ. Appl. Phys. 2007. **101**, N 5. 053516.
12. **Cheylan S., Elliman R. G., Gaff K., Durandet A.** Luminescence from Si nanocrystals in silica deposited by helicon activated reactive evaporation // Appl. Phys. Lett. 2001. **78**, N 12. 1670.
13. **Daldosso N., Das G., Larcheri S. et al.** Silicon nanocrystal formation in annealed silicon-rich silicon oxide films prepared by plasma enhanced chemical vapor deposition // Journ. Appl. Phys. 2007. **101**, N 11. 113510.
14. **Dovrat M., Goshen Y., Jedrzejewski J. et al.** Radiative versus nonradiative decay processes in silicon nanocrystals probed by time-resolved photoluminescence spectroscopy // Phys. Rev. B. 2004. **69**, N 15. 155311.
15. **Карпов А. Н., Марин Д. В., Володин В. А. и др.** Формирование SiO_x-слоев при плазменном распылении Si- и SiO₂-мишеней // Физика и техника полупроводников. 2008. **42**, № 6. С. 753–758.
16. **Comedi D., Zalloum O. H. Y., Irving E. A. et al.** X-ray-diffraction study of crystalline Si nanocluster formation in annealed silicon-rich silicon oxides // Journ. Appl. Phys. 2006. **99**, N 2. 023518.
17. **Tsoukalas D., Tsamis C., Normand P.** Diffusivity measurements of silicon in silicon dioxide layers using isotopically pure material // Journ. Appl. Phys. 2001. **89**, N 12. P. 7809–7813.
18. **Furukawa K., Liu Y., Nakashima H. et al.** Observation of Si cluster formation in SiO₂ films through annealing process using X-ray photoelectron spectroscopy and infrared techniques // Appl. Phys. Lett. 1998. **72**, N 6. P. 725–727.
19. **Walkup R. E., Raider S. I.** *In situ* measurements of SiO_(g) production during dry oxidation of crystalline silicon // Appl. Phys. Lett. 1988. **53**, N 10. P. 888–890.
20. **Tromp R., Rubloff G. W., Balk P., LeGoues F. K.** High-temperature SiO₂ decomposition at the SiO₂/Si interface // Phys. Rev. Lett. 1985. **55**, N 21. P. 2332–2335.
21. **Kapaklis V., Politis C., Pouloupoulos P., Schweiss P.** Photoluminescence from silicon nanoparticles prepared from bulk amorphous silicon monoxide by the disproportionation reaction // Appl. Phys. Lett. 2005. **87**, N 12. 123114.

22. Tsybeskov L., Hirschman K. D., Dutttagupta S. P. et al. Nanocrystalline-silicon superlattice produced by controlled recrystallization // Appl. Phys. Lett. 1998. **72**, N 1. P. 43–45.
23. Zacharias M., Heitmann J., Scholz R. et al. Size-controlled highly luminescent silicon nanocrystals: A SiO—SiO₂ superlattice approach // Appl. Phys. Lett. 2002. **80**, N 4. 661.
24. Jambois O., Rinnert H., Devaux X., Vergnat M. Photoluminescence and electroluminescence of size-controlled silicon nanocrystallites embedded in SiO₂ thin film // Journ. Appl. Phys. 2005. **98**, N 4. 046105.
25. Jambois O., Rinnert H., Devaux X., Vergnat M. Influence of the annealing treatments on the luminescence properties of SiO/SiO₂ multilayers // Journ. Appl. Phys. 2006. **100**, N 12. 123504.
26. Зверев А. В., Неизвестный И. Г., Шварц Н. Л., Яновицкая З. Ш. Решеточная Монте-Карло модель SiO_x-слоев // Российские нанотехнологии. 2008. **3**, № 5–6. С. 175–185.
27. Neizvestny I. G., Shwartz N. L., Yanovitskaya Z. Sh., Zverev A. V. 3D-model of epitaxial growth on porous {111} and {100} Si surfaces // Comput. Phys. Commun. 2002. **147**, N 1–2. P. 272–275.
28. Зверев А. В., Зинченко К. Ю., Шварц Н. Л., Яновицкая З. Ш. Монте-Карло моделирование процессов роста наноструктур с алгоритмом планирования событий на шкале времени // Российские нанотехнологии. 2009. **4**, № 3–4. С. 85–93.
29. Бабич В. М., Блецкан Н. И., Венгер Е. Ф. Кислород в монокристаллах кремния. Київ: «Интерпрес ЛТД», 1997. 240 с.
30. Красников Г. Я., Зайцев Н. А., Матюшкин И. В. Математическое моделирование кинетики высокотемпературного окисления кремния и структуры пограничного слоя в системе Si—SiO₂ // Физика и техника полупроводников. 2003. **37**, № 1. С. 44–49.

Поступила в редакцию 15 июля 2011 г.
