

ISSN 1561-2430 (Print)

ISSN 2524-2415 (Online)

УДК 517.958:537.311.1;621.315.592

<https://doi.org/10.29235/1561-2430-2021-57-4-495-505>

Поступила в редакцию 13.10.2021

Received 13.10.2021

Н. А. Поклонский

Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ И КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ СИСТЕМ РАЗЛИЧНОЙ РАЗМЕРНОСТИ И ЭЛЕМЕНТОВ ПРИБОРНЫХ СТРУКТУР НА ИХ ОСНОВЕ

Аннотация. В статье (в форме мини-обзора) отражены результаты выполненных на физическом факультете Белорусского государственного университета за последние 25 лет теоретических (и отчасти экспериментальных) исследований электрических, оптических и магнитных явлений в трехмерных, двумерных, одномерных и нульмерных системах и элементах приборных структур из германия, кремния, углерода и других химических элементов.

Ключевые слова: моделирование разноразмерных кристаллических систем, водородоподобные (двухзарядные) атомы примесей, трехзарядные точечные дефекты в полупроводниках, ионизационное равновесие, теория прыжковой миграции электронов и дырок по дефектам, графен, одностенные углеродные нанотрубки, фуллерены, элементы приборных структур

Для цитирования. Поклонский, Н. А. Математическое и компьютерное моделирование полупроводниковых систем различной размерности и элементов приборных структур на их основе / Н. А. Поклонский // Вест. Нац. акад. наук Беларусі. Сер. фіз.-мат. навук. – 2021. – Т. 57, № 4. – С. 495–505. <https://doi.org/10.29235/1561-2430-2021-57-4-495-505>

Nikolai A. Poklonski

Belarusian State University, Minsk, Belarus

MATHEMATICAL AND COMPUTER SIMULATION OF SEMICONDUCTOR SYSTEMS OF VARIOUS DIMENSIONS AND THE ELEMENTS OF DEVICE STRUCTURES BASED ON THEM

Abstract. The article, in the form of a minireview, reflects the results of theoretical, and partly experimental investigations of the electrical, optical and magnetic phenomena in three-dimensional, two-dimensional, one-dimensional and zero-dimensional systems and elements of device structures made of germanium, silicon, carbon and other chemical elements carried out at the Faculty of Physics of Belarusian State University over the past 25 years.

Keywords: simulation of crystalline systems of various dimensions, hydrogen-like (double-charged) impurity atoms, triple-charged point defects in semiconductors, ionization equilibrium, theory of hopping transport of electrons and holes via defects, graphene, single-wall carbon nanotubes, fullerenes, elements of device structures

For citation. Poklonski N. A. Mathematical and computer simulation of semiconductor systems of various dimensions and the elements of device structures based on them. *Vestsi Natsyianal'nai akademii navuk Belarusi. Seriya fizika-matematychnykh navuk = Proceedings of the National Academy of Sciences of Belarus. Physics and Mathematics series*, 2021, vol. 57, no. 4, pp. 495–505 (in Russian). <https://doi.org/10.29235/1561-2430-2021-57-4-495-505>

Введение. В статье представлены результаты исследований трехмерных, двумерных, одномерных и нульмерных систем, а также приборных структур, выполненных на физическом факультете Белорусского государственного университета за последние 25 лет. Объектами исследований являются одиночные и консолидированные системы различной размерности с ковалентно-ионными химическими связями между атомами. Предметами исследования являются квантовые состояния и процессы в таких разноразмерных системах. Для их математического и компьютерного моделирования применяются методы статистической термодинамики, квантовой механики, теории групп симметрии, математической физики и вычислительной математики. Используются стандартные термины, принятые в квантовой теории кристаллических твердых тел, низкоразмерных систем и нанoeлектронике (см., напр., [1–4]). Из-за разнообразия проведенных исследований полученные результаты кратко излагаются вначале для трехмерных, а затем для двумерных, одномерных и нульмерных систем. В заключение обозначены некоторые пер-

спективные направления исследований таких систем с целью разработки на их основе новых функциональных элементов устройств.

Трехмерные кристаллы с ковалентно-ионными химическими связями между атомами различаются величиной энергетической щели (запрещенной зоны) между ν -зоной локализованных электронных состояний и c -зоной делокализованных электронных состояний. При переходе электрона из ν -зоны в c -зону он становится делокализованным в пределах кристалла, а в ν -зоне остается делокализованная в пределах кристалла положительно заряженная электронная вакансия (дырка). В целом ионизационное равновесие и дрейфово-диффузионная миграция электронов c -зоны и дырок ν -зоны в кристаллических полупроводниках и приборных структурах на их основе описываются зонной теорией [5], исходящей из адиабатического и одноэлектронного приближений квантовой механики. Собственные точечные дефекты кристаллической структуры, а также атомы примесей вносят в запрещенную зону локальные уровни энергии, что позволяет целенаправленно управлять свойствами полупроводников [6]. Однако нарушения и точечной, и трансляционной симметрии дефектами усложняют построение моделей, пригодных для количественного описания явлений в полупроводниковых системах на основе зонной теории. В середине XX в., исходя из анализа экспериментальных данных по полупроводниковым материалам в твердом и жидком агрегатных состояниях, А. Ф. Иоффе сделал вывод, что их свойства во многом обусловлены химическим составом и локальными (в пределах нескольких координационных сфер) межатомными взаимодействиями [7]. Отсюда следовало, что зонная теория кристаллов должна быть дополнена атомной (локальной) теорией, которая не преувеличивает роль трансляционной симметрии в формировании свойств полупроводников. Этот вывод выдержал испытание временем [8]. В приложении данного подхода к теоретическому описанию свойств полупроводниковых материалов необходимо учитывать, что изменения энергии термической ионизации водородоподобных доноров и акцепторов, электрической проводимости, диэлектрической проницаемости и других параметров материалов вследствие их легирования обусловлены взаимодействиями ближайших по расстоянию электрически нейтральных и заряженных примесей. Описание прыжковой миграции электронов и дырок посредством их термически ассистированных актов туннелирования между неподвижными точечными дефектами кристаллической структуры усложняется кулоновским взаимодействием зарядовых состояний дефектов (зарядовые состояния определяются в единицах элементарного заряда). К тому же из-за переходов электронов (или дырок) между неподвижными дефектами их зарядовые состояния как бы мигрируют по кристаллу. В кристаллических полупроводниках с большой концентрацией водородоподобных атомов примесей и/или экситонов именно кулоновское взаимодействие между электронами, дырками и ионами обуславливает при низких температурах переход полупроводника из изоляторного состояния в металлическое (концентрационный фазовый переход Мотта). Развитию математических и компьютерных моделей таких кулоновских систем посвящен подраздел «Трехмерные системы» в разделе «Основные результаты».

Низкоразмерные (т. е. двумерные, одномерные и нульмерные) системы – консолидированные многочастичные системы, размер которых вдоль хотя бы одного пространственного направления сравним с одним из характерных размеров, сопоставляемых их элементам структуры (строения) и/или области реализации квантовых состояний и процессов в них. Так, плоская квантовая яма полупроводниковой гетероструктуры является двумерной системой, поскольку величины энергии для движения электронов и дырок в плоскости ямы принимают непрерывные значения, а для движения поперек ямы – дискретные (квантованные) значения. Изменяя размер и/или форму низкоразмерных систем, можно без изменения химического состава управлять их свойствами. Для исследования, создания и применения низкоразмерных систем (при диапазоне их размеров условно от 0,1 мкм до 1 нм в одном, двух или трех направлениях) необходимо развивать их теорию (математическое и компьютерное моделирование). Дело в том, что для адекватного описания состояний и процессов в системах размером порядка 0,1 мкм не может быть использована квантовая теория уединенных (одиночных) атомов, являющаяся базой для описания небольших молекул (0,1–1 нм). Поэтому следует рассматривать состояния и процессы в отдельных молекулах и атомах при учете их агломерации в низкоразмерную систему. При этом необходи-

мо учитывать, что кулоновское взаимодействие электронов, дырок и ионов внутри уединенных (находящихся в вакууме) двумерных, одномерных и нульмерных системах сильнее, чем внутри трехмерных систем. Это обусловлено тем обстоятельством, что значительная часть силовых линий электрического поля заряженных частиц в уединенных системах пониженной размерности проходит в вакууме, а не в окружающей частицы матрице с относительной диэлектрической проницаемостью больше единицы. Развитию математических и компьютерных моделей таких систем посвящены подразделы «Двумерные системы», «Одномерные системы» и «Нульмерные системы» в разделе «Основные результаты».

Основные результаты. I. Трехмерные системы: 1) в квазиклассическом приближении квантовой теории рассеяния впервые рассчитана дрейфовая подвижность квазичастиц (электронов c -зоны и дырок v -зоны) при учете конечной длительности столкновения квазичастицы с одним ионом водородоподобной примеси в кристаллическом полупроводнике [9–11]; 2) развита теория ионизационного равновесия и экранирования электростатического поля в ковалентных полупроводниках с прыжковой миграцией электронов (или дырок) между точечными дефектами кристаллической структуры в различных зарядовых состояниях [12–14]; 3) в дрейфово-диффузионном приближении впервые получено уравнение для плотности стационарного прыжкового электрического тока по точечным неподвижным дефектам в ковалентных полупроводниках и объяснен целый ряд экспериментальных данных по их электропроводности, фотопроводимости и термоэдс, которые вообще не поддавались количественной интерпретации в течение трех десятилетий [15–23]; 4) впервые построена квазиклассическая теория увеличения низкочастотной диэлектрической проницаемости ковалентных полупроводников при увеличении в них концентрации электронейтральных водородоподобных примесей; расчеты по предложенным формулам без подгоночных параметров количественно согласуются с известными экспериментальными данными [24]; 5) предложена новая модель сильно легированных водородоподобными примесями вырожденных полупроводников при их межзонном фотовозбуждении, учитывающая флуктуации электростатического потенциала, обменное взаимодействие основных носителей заряда (электронов или дырок), экранирование неосновного носителя заряда облаком основных, а также туннелирование основных носителей заряда на уровне протекания (пороге подвижности) в c - или v -зоне; результаты расчетов по модели количественно согласуются с данными по краевой низкотемпературной фотолюминесценции прямозонных и непрямозонных полупроводников в широком диапазоне изменения в них концентрации примесей [25]; 6) развита модель зависимости термической энергии ионизации водородоподобных атомов легирующих (основных) примесей от их концентрации и концентрации неосновных (компенсирующих) водородоподобных примесей в ковалентных кристаллах, в которой показано, что уменьшение энергии ионизации происходит из-за формирования возбужденными состояниями электрически нейтральных примесей квазинепрерывной полосы разрешенных значений энергии для электронов c -зоны (или дырок v -зоны), вследствие чего дно c -зоны для полупроводника n -типа (потолок v -зоны для полупроводника p -типа) смещается в глубь запрещенной зоны; численные расчеты по модели согласуются с известными современными экспериментальными данными [26]; 7) на основании теоремы вириала впервые рассчитана температура перехода от зонной стационарной электропроводности по состояниям c - или v -зоны к прыжковой стационарной электропроводности по водородоподобным атомам примесей в кристаллических полупроводниках [27–29]; 8) методом Гайтлера – Лондона предсказан и экспериментально обнаружен переход электрически нейтральных водородоподобных доноров (атомов As) в кристаллическом германии из парамагнитного в ферромагнитное состояние в области температур жидкого гелия [30]; 9) предсказано и при комнатной температуре в отсутствие актиничного освещения зарегистрировано инвертирование сигнала электронного спинового резонанса P1-центров (уединенных атомов азота в алмазе), а также проведено квантовохимическое моделирование этих центров, открывающее путь к созданию мазеров на алмазе [31–35]; 10) теоретически предсказано и экспериментально открыто явление поглощения микроволнового электромагнитного излучения левитирующими в вакууме над поверхностью природного алмаза электронами, возникающими при межзонном фотовозбуждении алмаза после травления его в хромовой смеси, шлифовки тонким корундовым

порошком, промывки в дистиллированной воде и сушки на воздухе [36, 37]; 11) впервые предложены аналитические соотношения для описания спин-фононного резонансного поглощения радиоволн кристаллами антимонида индия n -типа во внешнем магнитном поле, обусловленного перевернутой спиной электрона c -зоны вследствие его взаимодействия с поперечным оптическим фононом; расчеты по предложенным формулам количественно согласуются с известными экспериментальными данными [38]; 12) предсказано и экспериментально зарегистрировано при низких температурах магнитное упорядочение радикалов (нескомпенсированных электронных спинов одиночных точечных радиационных дефектов и их ассоциатов) в облученных быстрыми реакторными нейтронами кристаллических зернах природного алмаза [39]; 13) развита теория размагничивающего поля на поверхности тонких дисков из Co, Fe и Ni во внешнем магнитном поле и впервые методом электронного спинового резонанса с помощью спин-меток (облученных быстрыми реакторными нейтронами кристаллических зерен природного алмаза) измерена величина этого поля [40]; 14) рассчитаны и экспериментально зарегистрированы инфранизкочастотные автоколебания тока в пленках легированного атомами бора поликристаллического кремния микронной толщины [41]; 15) выявлен импеданс индуктивного типа в кремниевых p - n -диодах, содержащих точечные и групповые радиационные дефекты в двойном электрическом слое (т. е. в области p - n -перехода) вследствие облучения их высокоэнергетическими ионами и разработан аналог катушки индуктивности [42–45]; 16) предложена, рассчитана, изготовлена и запатентована электрически управляемая ячейка памяти (биполярный транзистор с коллектором из аморфного кремния субмикронной толщины) [46–48]; 17) впервые теоретически (расчетным способом) установлена асимметрия зависимости стационарного прыжкового тока от электрического напряжения на кремниевой приборной структуре, состоящей из двух частей: в первой части ток обусловлен прыжками одиночных электронов с точечных дефектов в зарядовых состояниях (-1) на дефекты в зарядовых состояниях (0) , а во второй части приборной структуры ток обусловлен прыжками одиночных электронов между дефектами того же вида (сорта), что и в первой части структуры, но с дефектов в зарядовых состояниях (0) на дефекты в зарядовых состояниях $(+1)$ [49]; 18) рассчитана, спроектирована и изготовлена пылезащищенная схема датчика влажности на основе микро- и нанопористого диоксида кремния со следами водорастворимой соли LiCl в порах [50]; 19) разработана и запатентована технология изготовления линейки резисторов на основе алмазоподобной углеродной пленки, полученной из отрицательно заряженных паров бензола [51]; 20) теорема Рамо – Шокли обобщена на случай последовательной RCL -цепи детектора заряженных частиц и показана возможность определения отношения скорости к заряду частицы, испущенной одной металлической обкладкой электрического конденсатора и поглощенной другой обкладкой [52]; 21) сравнением аналитического и численного расчетов с экспериментом показано, что квадратичное по затухающему току электрическое поле контура «сверхпроводящая катушка – резистор» возникает вследствие электрической поляризации резистора электронами сверхпроводящего участка электрической цепи и является аналогом эффекта Стюарта – Толмена [53].

II. Двумерные системы: 1) рассчитана кинематика и энергетика излучательного распада отрицательно заряженного триона (экситон + электрон) в одиночной квантовой яме и показано, что этот распад является аналогом эффекта Оже [54]; 2) предложена схема новой светоизлучающей в ИК-диапазоне структуры, основанной на движении трионов и/или электронов c -зоны вдоль квантовой ямы, и рассчитаны ее рабочие характеристики [55]; 3) развита электростатическая модель краевой фотолюминесценции двумерных полупроводниковых систем при высокой и равной концентрации в них неравновесных электронов и дырок [56]; 4) выдвинута концепция электрического переключателя на основе подвижного дефекта упаковки в стопке размещенных между обкладками электрического конденсатора воронкообразных макромолекул и проведен расчет его параметров методами квантовой электромеханики [57, 58]; 5) теоретически предсказано несколько типов двумерных «двуликих» (т. е. Янус-подобных) кристаллических систем [59, 60]; 6) выдвинута концепция нанодинамометра на основе двухслойного графена с электрической проводимостью между монослоями и проведен расчет параметров динамометра методом туннельного гамильтониана Бардина [61]; 7) методами теории групп и топологии показано, что из

одинокного листа графена возможно образование только восьми сплошных воронок для целей неизображающей оптики [62–64]; 8) предложена и методами квантовой термодинамики рассчитана схема получения электрически нейтральных радикалов ОН и молекул водорода из потока паров воды между двумя противоположно заряженными и изогнутыми в одну сторону листами графена [65]; 9) методами электромеханики показана возможность скручивания листа графена в устойчивый рулон в виде спирали Архимеда [66–68]; 10) проведен расчет квантовой электрической емкости двух плоских листов графена, разделенных монослоем из атомов аргона [69]; 11) показано, что регулярно чередующиеся слои параллельно расположенных рулонов из графена и параллельно расположенных одностенных углеродных нанотрубок (угол между направлениями аксиальных осей симметрии рулонов и нанотрубок в соседних слоях равен $\pi/2$) образуют новый метаматериал с отрицательными диэлектрической и магнитной проницаемостями в инфракрасном диапазоне длин электромагнитных волн [70]; 12) предложена новая электромеханическая ячейка постоянной памяти на основе тонкой мембраны (из нескольких слоев графена), взаимодействующей кулоновскими силами и силами Ван-дер-Ваальса с торцевой поверхностью цилиндрического электрода, и проведен расчет ее рабочих характеристик [71]; 13) квантовохимическими расчетами из первых принципов показано, что поверхность потенциальной энергии межслоевого взаимодействия в различных двумерных графеноподобных материалах универсально описывается первыми пространственными гармониками двумерного ряда Фурье (в параллельной слоям плоскости) [72]; 14) методом молекулярных орбиталей проведены расчеты нанополосок графена типа *zigzag* (*nzGNR*) с числом *zigzag* цепочек $n = 4$ и 10 и установлено, что *4zGNR* является двумерным полупроводником (со щелью в спектре значений энергии π -электронов) как в антиферромагнитном (АФМ), так и в ферромагнитном (ФМ) состояниях; для *10zGNR* состояние АФМ является полупроводниковым, а состояние ФМ – полуметаллическим (т. е. электропроводящим только для одной ориентации спинов π -электронов нанополосок) [73].

III. Одномерные системы: 1) исходя из потенциалов Лиенара – Вихерта предсказано возникновение релятивистского электрического поля вблизи прямой квантовой проволоки со стационарным баллистическим переносом в ней электронов [74]; 2) в рамках нерелятивистской квантовой механики предсказана возможность баллистического дрейфа солитоноподобного одиночного электрона (индуктона) в одномерной проволоке, находящейся в диэлектрической среде с распределенной индуктивностью, что может использоваться для сжатия импульсов тока в квантовых участках (ветвях) электрических цепей [75]; 3) впервые предложен электромагнитный излучатель в гигагерцовом диапазоне частот на основе потока одиночных электронов внутри полой изогнутой углеродной нанотрубки и рассчитаны его параметры [76]; 4) аналитически показано, что квантовое электрическое сопротивление наполненной атомами калия одностенной углеродной нанотрубки ступенчатым образом увеличивается при увеличении ее диаметра [77], что впоследствии нашло подтверждение в эксперименте; 5) предложен и методами квантовой магнитомеханики рассчитан геркон (элемент спинтроники) на основе наполненных магнитными эндофуллеренами двух углеродных нанотрубок [78–80]; 6) предсказан фазовый переход «узкозонный полупроводник – металл» при аксиальном упругом растяжении одностенных углеродных нанотрубок разной хиральности, на основании которого могут быть разработаны новые элементы стрейнтроники [81–83]; 7) исходя из флуктуационно-диссипативной теоремы установлены границы устойчивой работы актуатора (нанозлектромеханического привода) на основе двух соосных одностенных углеродных нанотрубок [84, 85].

IV. Нульмерные системы: 1) квантовохимическими расчетами предсказана углеродная молекула C_{10} в форме плоской пятилучевой звезды – прекурсор формирования низкоразмерных систем в углеродной плазме [2, 86]; 2) методами теории конечных групп симметрии [87] выявлен и проведен квантовохимический расчет резонанса Ферми между двумя полносимметричными колебаниями фуллерена C_{60} [88]; 3) методом молекулярных орбиталей исследована электронная структура, геометрия и поверхность потенциальной энергии дикатиона карбододекаэдра C_{20}^{2+} ; обнаружен аналог динамического эффекта Яна – Теллера, обусловленный расталкиванием нескомпенсированных положительных зарядов на атомах углерода (кулоновская дисторсия) и предсказана D_3 -симметрия основного состояния C_{20}^{2+} [89]; 4) расчетным способом показано, что

эндофуллерен $\text{Fe}@C_{20}$ является магнитным, так как электронный терм 5D_4 свободного атома Fe в основном состоянии под действием возмущения с симметрией I_h карбододекаэдра C_{20} не расщепляется [79]; 5) предложен аналитический и численный алгоритмы решения загадки формирования полых макромолекул из атомов углерода [90, 91].

Заключение. Как продолжение выполненных исследований и изыскание приложений их результатов для моделирования свойств разноразмерных конденсированных систем в Белорусском государственном университете выполняются два международных проекта Европейской рамочной программы исследований и инноваций Horizon2020: «Самодостаточная теплопоглощающая инновационная система “преобразователь влажности в электричество” для зданий с нулевым энергетическим балансом» (MSCA-RISE-2019-871284 SSHARE) и «Инновационные водорастворимые фитоматериалы-ингибиторы для предотвращения болезней Альцгеймера и Паркинсона» (MSCA-RISE-2020-101007642 PhytoAPP), которые частью основаны на результатах наших исследований [50, 86, 91–93].

Наконец немного о перспективах и ассоциированных с ними подходах к математическому и компьютерному моделированию полупроводниковых систем различной размерности и элементов приборных структур на их основе по схеме: от расчетов к эксперименту и далее к практике. Перечислим некоторые актуальные направления исследований и действий по этой тематике в их физико-математическом, химическом и биомедицинском аспектах. 1. Разработка методов математического моделирования и физико-химических принципов молекулярного зодчества низкоразмерных кремний-углеродных систем и радиационно-стойких приборных структур на их основе. 2. Развитие квантовой теории ионизационного равновесия и дрейфово-диффузионной миграции электронов, дырок, биполяронов и ионов в низкоразмерных полупроводниковых системах для целей водородной энергетики. В реакции разложения молекул воды на поверхности кристаллических полупроводников для выделения молекул кислорода требуются дырки (электронные вакансии). Поэтому материалы, в которых электропроводность осуществляется посредством прыжков пар электронов между точечными дефектами одного сорта в зарядовых состояниях (-1) и (+1), могут ускорять эту реакцию. Решение данной задачи позволит создать эффективные электроды для получения водорода и кислорода из воды. 3. Исследование одиночных и консолидированных воронкообразных макромолекул, криволинейных квантоворазмерных проволок, а также наноструктурированных «мягких» материалов для разработки функциональных элементов устройств электромеханики и бионики. 4. Изыскание способов формирования ассоциатов из атомов примеси и/или собственных дефектов кристаллической структуры в полупроводниковых материалах при создании твердотельных аналогов катушек индуктивности для целей силовой электроники. 5. Интегрирование магнетизма в кремниевую электронику. Развитие инженерии магнитных низкоразмерных систем на поверхности и внутри пластин кристаллического кремния позволит распространить их использование в рамках планарной технологии на спинтронику. 6. Разработка теории формирования низкоразмерных систем (нитей, лент и рулонов) при воздействии компрессионных плазменных потоков и интенсивного лазерного излучения на химически и термически стойкие кристаллы (алмаз, GaN, SiC и др.) с целью создания на их поверхности селективных катализаторов для целей нанохимии. 7. Построение теории, связывающей механическую прочность полупроводниковых материалов (алмаз, AlN и BN), у которых энергия сродства к электрону меньше ширины запрещенной зоны, с положением в запрещенной зоне (энергетической щели) уровня Ферми, управляемого атомами примесей и/или собственными дефектами кристаллической структуры. Это позволит предсказывать (и предотвращать) процессы разрушения этих материалов в устройствах высокотемпературной электроники, оптики и механики. 8. Изучение прыжковой миграции электронов по многозарядным точечным дефектам кристаллической матрицы частично разупорядоченных полупроводников для разработки элемента Пельтье. 9. Развитие концепции спиновой наномеханики для композитных и фрактальных углеродных материалов. Это позволит прогнозировать внезапные выбросы каменного угля при его добыче. 10. Установление методами теории групп, топологии и квантовой термодинамики дискретных и непрерывных нарушений симметрии фуллеренов, необходимых для формирования на их поверхности водорастворимых аддуктов для целей биомедицины. 11. Передача зна-

ний, умений и разработок (инноваций) от исследователей к конструкторам, от конструкторов к производителям и осуществление коммерциализации наукоемкой продукции.

Ясно, что при научных изысканиях и в приложениях их результатов необходима опора на теорию, эксперимент и практику, благодаря которым математическое и компьютерное моделирование разноразмерных полупроводниковых систем и элементов приборных структур на их основе возникли и развиваются в Республике Беларусь.

Благодарности. Работа поддержана государственными программами научных исследований «Конвергенция-2025» и «Материаловедение, новые материалы и технологии» Республики Беларусь.

Acknowledgements. The work was supported by the Belarusian National Research Programs “Convergence-2025” and “Materials Science, New Materials and Technologies”.

References

1. Poklonski N. A. Semiconductors in the world of materials. *Nauka i Innovatsii = Science and Innovations*, 2016, no. 8, pp. 64–69 (in Russian).
2. Poklonski N. A., Vyrko S. A., Siahlo A. I., Poklonskaya O. N., Ratkevich S. V., Hieu N. N., Kocherzhenko A. A. Synergy of physical properties of low-dimensional carbon-based systems for nanoscale device design. *Material Research Express*, 2019, vol. 6, no. 4, pp. 042002 (1–25). <https://doi.org/10.1088/2053-1591/aafblc>
3. Poklonski N. A. (ed.). *Encyclopedia for Pupils and Students. Vol. 2. Physics. Mathematics*. Minsk, BelEn Publ., 2010. 600 p. (in Russian).
4. Poklonski N. A. (ed.). *Encyclopedia for Pupils and Students. Vol. 4. World of Technology*. Minsk, BelEn Publ., 2012. 712 p. (in Russian).
5. Wilson A. H. Solid state physics 1925–33: opportunities missed and opportunities seized. *Proceedings of the Royal Society A*, 1980, vol. 371, no. 1744, pp. 39–48. <https://doi.org/10.1098/rspa.1980.0054>
6. Vavilov V. S. Semiconductors in the modern world. *Physics-Uspokhi*, 1995, vol. 38, no. 5, pp. 555–558. <https://doi.org/10.1070/PU1995v038n05ABEH000088>
7. Ioffe A. F. Unsolved problems of the semiconductor theory. *Izvestiya Akademii Nauk SSSR. Seriya Fizicheskaya* [Bulletin of the Academy of Sciences of the USSR. Physical Series], 1951, vol. 15, no. 4, pp. 477–486 (in Russian).
8. Osip'yan Yu. A. Modern trends in solid state physics. *Vestnik Akademii Nauk SSSR* [Herald of the Academy of Sciences of the USSR], 1987, no. 5, pp. 16–21 (in Russian).
9. Poklonski N. A., Vyrko S. A., Yatskevich V. I., Kocherzhenko A. A. A semiclassical approach to Coulomb scattering of conduction electrons on ionized impurities in nondegenerate semiconductors. *Journal of Applied Physics*, 2003, vol. 93, no. 12, pp. 9749–9752. <https://doi.org/10.1063/1.1573735>
10. Poklonski N. A., Kocherzhenko A. A., Vyrko S. A., Vlassov A. T. A comparison of two-particle models for conduction electron scattering on hydrogen-like impurity ions in non-degenerate semiconductors. *Physica Status Solidi B*, 2007, vol. 244, no. 10, pp. 3703–3710. <https://doi.org/10.1002/pssb.200642528>
11. Poklonski N. A., Vyrko S. A., Dzeraviah A. N. Quasi-classical model of the static electrical conductivity of heavily doped degenerate semiconductors at low temperatures. *Semiconductors*, 2018, vol. 52, no. 6, pp. 692–701. <https://doi.org/10.1134/S1063782618060192>
12. Poklonski N. A., Stelmakh V. F. Screening of electrostatic fields in crystalline semiconductors by electrons hopping over defects. *Physica Status Solidi B*, 1983, vol. 117, no. 1, pp. 93–99. <https://doi.org/10.1002/pssb.2221170109>
13. Poklonskii N. A., Stelmakh V. F., Tkachev V. D., Voitikov S. V. Screening of electrostatic fields in semiconductors by multicharged defects. *Physica Status Solidi B*, 1978, vol. 88, no. 2, pp. K165–K168. <https://doi.org/10.1002/pssb.2220880266>
14. Poklonski N. A., Dzeraviah A. N., Vyrko S. A. Model of stationary migration of free and hopping via acceptor holes in a crystalline semiconductor. *Vestsi Natsyional'най akademii navuk Belarusi. Seriya fizika-matematichnykh navuk = Proceedings of the National Academy of Sciences of Belarus. Physics and Mathematics series*, 2020, vol. 56, no. 1, pp. 92–101 (in Russian). <https://doi.org/10.29235/1561-2430-2020-56-1-92-101>
15. Poklonskii N. A., Lopatin S. Yu. A model of hopping and band DC photoconduction in doped crystals. *Physics of the Solid State*, 2000, vol. 42, no. 2, pp. 224–229. <https://doi.org/10.1134/1.1131150>
16. Poklonskii N. A., Lopatin S. Yu., Zabrodskii A. G. A lattice model of nearest-neighbor hopping conduction and its application to neutron-doped Ge:Ga. *Physics of the Solid State*, 2000, vol. 42, no. 3, pp. 441–449. <https://doi.org/10.1134/1.1131228>
17. Poklonski N. A., Lopatin S. Yu. A lattice model of thermopower in hopping conduction: application to neutron-doped crystalline germanium. *Physics of the Solid State*, 2001, vol. 43, no. 12, pp. 2219–2228. <https://doi.org/10.1134/1.1427945>
18. Poklonski N. A., Vyrko S. A., Zabrodskii A. G. Fluctuation model of the high-frequency hopping electrical conductivity of moderately compensated semiconductors with hydrogenic impurities. *Physics of the Solid State*, 2005, vol. 47, no. 7, pp. 1236–1244. <https://doi.org/10.1134/1.1992598>
19. Poklonski N. A., Vyrko S. A., Zabrodskii A. G. Calculation of capacitance of self-compensated semiconductors with intercenter hops of one and two electrons (by the example of silicon with radiation defects). *Semiconductors*, 2008, vol. 42, no. 12, pp. 1388–1394. <https://doi.org/10.1134/S1063782608120038>
20. Poklonski N. A., Vyrko S. A., Zabrodskii A. G. Model of hopping dc conductivity via nearest neighbor boron atoms in moderately compensated diamond crystals. *Solid State Communications*, 2009, vol. 149, no. 31–32, pp. 1248–1253. <https://doi.org/10.1016/j.ssc.2009.05.031>

21. Poklonski N. A., Vyrko S. A., Zabrodskii A. G. Quasiclassical description of the nearest-neighbor hopping dc conduction via hydrogen-like donors in intermediately compensated GaAs crystals. *Semiconductor Science and Technology*, 2010, vol. 25, no. 8, pp. 085006 (1–6). <https://doi.org/10.1088/0268-1242/25/8/085006>
22. Kocherzhenko A. A., Grozema F. C., Vyrko S. A., Poklonski N. A., Siebbeles L. D. A. Simulation of hopping transport based on charge carrier localization times derived for a two-level system. *The Journal of Physical Chemistry C*, 2010, vol. 114, no. 48, pp. 20424–20430. <https://doi.org/10.1021/jp104673h>
23. Poklonski N. A., Vyrko S. A., Kovalev A. I., Zabrodskii A. G. A quasi-classical model of the Hubbard gap in lightly compensated semiconductors. *Semiconductors*, 2016, vol. 50, no. 3, pp. 299–308. <https://doi.org/10.1134/S1063782616030192>
24. Poklonski N. A., Vyrko S. A., Zabrodskii A. G. Electrostatic models of insulator–metal and metal–insulator concentration phase transitions in Ge and Si crystals doped by hydrogen-like impurities. *Physics of the Solid State*, 2004, vol. 46, no. 6, pp. 1101–1106. <https://doi.org/10.1134/1.1767252>
25. Poklonskii N. A., Vyrko S. A. Electrostatic model of edge luminescence of heavily doped degenerate semiconductors. *Journal of Applied Spectroscopy*, 2002, vol. 69, no. 3, pp. 434–443. <https://doi.org/10.1023/A:1019715602928>
26. Poklonski N. A., Vyrko S. A., Dzeraviaha A. N. Thermal ionization energy of hydrogen-like impurities in semiconductor materials. *Journal of the Belarusian State University. Physics*, 2020, no. 2, pp. 28–41 (in Russian). <https://doi.org/10.33581/2520-2243-2020-2-28-41>
27. Poklonski N. A., Vyrko S. A., Poklonskaya O. N., Zabrodskii A. G. Transition temperature from band to hopping direct current conduction in crystalline semiconductors with hydrogen-like impurities: Heat versus Coulomb attraction. *Journal of Applied Physics*, 2011, vol. 110, no. 12, pp. 123702 (1–7). <https://doi.org/10.1063/1.3667287>
28. Poklonski N. A., Vyrko S. A., Poklonskaya O. N., Zabrodskii A. G. Role of electrostatic fluctuations in doped semiconductors upon the transition from band to hopping conduction (by the example of *p*-Ge:Ga). *Semiconductors*, 2016, vol. 50, no. 6, pp. 722–734. <https://doi.org/10.1134/S1063782616060191>
29. Poklonski N. A., Vyrko S. A., Poklonskaya O. N., Kovalev A. I., Zabrodskii A. G. Ionization equilibrium at the transition from valence-band to acceptor-band migration of holes in boron-doped diamond. *Journal of Applied Physics*, 2016, vol. 119, no. 24, pp. 245701 (1–10). <https://doi.org/10.1063/1.4954281>
30. Poklonski N. A., Dzeraviaha A. N., Vyrko S. A., Zabrodskii A. G., Veinger A. I., Semenikhin P. V. Curie–Weiss behavior of the low-temperature paramagnetic susceptibility of semiconductors doped and compensated with hydrogen-like impurities. *AIP Advances*, 2021, vol. 11, no. 5, pp. 055016 (1–9). <https://doi.org/10.1063/5.0048886>
31. Poklonski N. A., Lapchuk N. M., Lapchuk T. M. Inverted EPR signal from nitrogen defects in a synthetic diamond single crystal at room temperature. *Journal of Experimental and Theoretical Physics Letters*, 2004, vol. 80, no. 12, pp. 748–751. <https://doi.org/10.1134/1.1868799>
32. Poklonskii N. A., Lapchuk T. M., Baev V. G., Gusakov G. A. Inversion of the electron spin resonance signal from a P1 center in a synthetic diamond crystal. *Journal of Applied Spectroscopy*, 2006, vol. 73, no. 1, pp. 5–9. <https://doi.org/10.1007/s10812-006-0029-9>
33. Poklonski N. A. Inversion of the EPR signal from P1 centers in a synthetic diamond single crystal under normal conditions. *Technical Physics Letters*, 2006, vol. 32, no. 4, pp. 309–311. <https://doi.org/10.1134/S1063785006040109>
34. Poklonski N. A., Lapchuk N. M., Khomich A. V., Lu F.-X., Tang W.-Zh., Ralchenko V. G., Vlasov I. I., Chukichev M. V., Munkhtsetseg S. Nitrogen-doped chemical vapour deposited diamond: a new material for room-temperature solid state maser. *Chinese Physics Letters*, 2007, vol. 24, no. 7, pp. 2088–2090. <https://doi.org/10.1088/0256-307X/24/7/083>
35. Poklonski N. A., Kislyakov E. F., Bubel’ O. N., Vyrko S. A. Maser effect in a Jahn–Teller center: Single substitutional nitrogen atom in diamond. *Physics, Chemistry and Applications of Nanostructures. Reviews and Short Notes: Proc. of Int. Conf. Nanomeeting-2011, Minsk, 24–27 May 2011*. Singapore, World Scientific, 2011, pp. 110–113. https://doi.org/10.1142/9789814343909_0025
36. Zakharov A. G., Poklonskii N. A., Varichenko V. S., Gontar’ A. G. Characteristics of microwave photoconductivity of natural diamond in the spectral range 200–250 nm. *Physics of the Solid State*, 2000, vol. 42, no. 4, pp. 664–669. <https://doi.org/10.1134/1.1131267>
37. Zakharov A. G., Poklonskii N. A., Varichenko V. S. The microwave photoconductivity of electrons flying over natural diamond. *Technical Physics*, 2000, vol. 45, no. 10, pp. 1325–1330. <https://doi.org/10.1134/1.1318971>
38. Poklonski N. A., Dzeraviaha A. N., Vyrko S. A. Spin-phonon magnetic resonance of conduction electrons in indium antimonide crystals. *Journal of Applied Spectroscopy*, 2020, vol. 87, no. 4, pp. 652–661. <https://doi.org/10.1007/s10812-020-01050-x>
39. Poklonski N. A., Svito I. A., Vyrko S. A., Poklonskaya O. N., Kovalev A. I., Martyanov A. K., Kozlova M. V., Khomich A. V. Ordering of uncompensated spin moments of electrons in irradiation-modified diamonds. *Interaction of Radiation with Solids (IRS-2021): Proceedings of the 14th International Conference, Minsk, Belarus, September 21–24, 2021*. Minsk, Belarusian State University, 2021, pp. 210–214.
40. Poklonskii N. A., Lapchuk T. M., Gorbachuk N. I. Electron spin resonance measurements of a demagnetizing field on the surface of metal samples. *Journal of Applied Spectroscopy*, 2001, vol. 68, no. 4, pp. 543–547. <https://doi.org/10.1023/A:1012511517323>
41. Dorosinets V. A., Poklonski N. A., Samuilov V. A., Stel’makh V. F. Ultralow-frequency spontaneous oscillations of the current in polycrystalline silicon. *Soviet Physics. Semiconductors*, 1988, vol. 22, no. 4, pp. 476–477.
42. Poklonski N. A., Shpakovski S. V., Gorbachuk N. I., Lastovskii S. B. Negative capacitance (impedance of the inductive type) of silicon p^+-n junctions irradiated with fast electrons. *Semiconductors*, 2006, vol. 40, no. 7, pp. 803–807. <https://doi.org/10.1134/S1063782606070128>

43. Poklonski N. A., Gorbachuk N. I., Shpakovski S. V., Petrov A. V., Lastovskii S. B., Fink D., Wieck A. Electrical properties of silicon diodes with p^+n junctions irradiated with $^{197}\text{Au}^{+26}$ swift heavy ions. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B*, 2008, vol. 266, no. 23, pp. 5007–5012. <https://doi.org/10.1016/j.nimb.2008.09.001>
44. Poklonski N. A., Gorbachuk N. I., Shpakovski S. V., Filipenia V. A., Skuratov V. A., Wieck A. Kinetics of reverse resistance recovery of silicon diodes: the role of the distance the metallurgical p^+n -junction-defect layer formed by 250 MeV krypton implantation. *Physica B*, 2009, vol. 404, no. 23–24, pp. 4667–4670. <https://doi.org/10.1016/j.physb.2009.08.129>
45. Poklonski N. A., Gorbachuk N. I., Shpakovski S. V., Filipenia V. A., Lastovskii S. B., Skuratov V. A., Wieck A., Markevich V. P. Impedance and barrier capacitance of silicon diodes implanted with high-energy Xe ions. *Microelectronics Reliability*, 2010, vol. 50, no. 6, pp. 813–820. <https://doi.org/10.1016/j.microrel.2010.02.007>
46. Pulfrey D. L., Shulman D. D., Samujlov V., Bondarionok E., Krasnitski V., Poklonski N., Stelmakh V. *Inverted heterojunction bipolar device having undoped amorphous silicon layer*. US Patent. No. 5285083. Publ. date 08.02.1994. Available at: <https://patents.google.com/patent/US5285083>
47. Dorosinets V. A., Samuilov V. A., Poklonski N. A., Kyritsi K. G., Anagnostopoulos A. N., Bleris G. L., Čenys A. Current pulses and high-frequency oscillations in a-Si/Si(p)/Si(n) heterojunction device. *Semiconductor Science and Technology*, 1999, vol. 14, no. 10, pp. 897–900. <https://doi.org/10.1088/0268-1242/14/10/303>
48. Dorosinets V. A., Samuilov V. A., Poklonski N. A., Belous A., Kyritsi K. G., Anagnostopoulos A. N., Bleris G. L., Carter R. L., Čenys A. Electrical properties of an a-Si/Si(p)/Si(n) heterojunction device. *Semiconductor Science and Technology*, 2000, vol. 15, no. 10, pp. 980–984. <https://doi.org/10.1088/0268-1242/15/10/309>
49. Poklonski N. A., Kovalev A. I., Vyrko S. A., Vlassov A. T. Semiconductor diode with hopping migration of electrons via point defects of crystalline matrix. *Doklady Natsional'noi akademii nauk Belarusi = Doklady of the National Academy of Sciences of Belarus*, 2017, vol. 61, no. 3, pp. 30–37 (in Russian).
50. Gorbachuk N. I., Gurin V. S., Poklonski N. A. Effect of the moisture content on the electrical conductivity of SiO_2/LiCl xerogels. *Glass Physics and Chemistry*, 2001, vol. 27, no. 6, pp. 520–526. <https://doi.org/10.1023/A:1013246208529>
51. Gritskevich R. N., Poklonski N. A., Gorbachuk N. I., Shpak E. P. *A method of obtaining a thin-film resistor structure*. BY Patent 14221. Publ. date 30.04.2011 (in Russian).
52. Poklonski N. A., Vyrko S. A., Kocherzhenko A. A. Ramo–Shockley relation for a series RCL circuit. *Technical Physics*, 2004, vol. 49, no. 11, pp. 1469–1472. <https://doi.org/10.1134/1.1826192>
53. Poklonskii N. A., Lopatin S. Yu. Superconducting–coil–resistor circuit with electric field quadratic in the current // *Technical Physics Letters*, 1998, vol. 24, no. 1, pp. 45–46. <https://doi.org/10.1134/1.1261987>
54. Poklonskii N. A., Syaglo A. I., Vyrko S. A. Analog of the Auger effect in radiative decay of a trion in a quantum well. *Journal of Applied Spectroscopy*, 2001, vol. 68, no. 3, pp. 371–376. <https://doi.org/10.1023/A:1011961603382>
55. Poklonski N. A., Dzeraviah A. N., Vyrko S. A., Siahlo A. I. Radiative decay of a trion in a quantum well of a semiconductor heterostructure. *Journal of Applied Spectroscopy*, 2017, vol. 84, no. 4, pp. 611–619. <https://doi.org/10.1007/s10812-017-0518-z>
56. Poklonski N. A., Siaglo A. I. Electrostatic model of band-gap renormalization and the photoluminescence line shape in a GaAs/AlGaAs two-dimensional layer at a high excitation level. *Physics of the Solid State*, 2001, vol. 43, no. 1, pp. 157–165. <https://doi.org/10.1134/1.1340202>
57. Poklonski N. A., Kislyakov E. F., Fedoruk G. G., Sagaidak D. I., Siaglo A. I., Vyrko S. A. Switching effect in lead phthalocyanine nanostructure. *Physics, Chemistry and Application of Nanostructures: Reviews and Short Notes to Nanomeeting-2001, Minsk, 22–25 May 2001*. Singapore, World Scientific, 2001, pp. 202–205. https://doi.org/10.1142/9789812810076_0036
58. Poklonski N. A., Kislyakov E. F., Sagaidak D. I., Siaglo A. I., Fedoruk G. G. One-dimensional quantum transport in lead phthalocyanine nanostructures. *Technical Physics Letters*, 2001, vol. 27, no. 3, pp. 180–182. <https://doi.org/10.1134/1.1359818>
59. Vu T. V., Vi V. T. T., Phuc H. V., Nguyen C. V., Poklonski N. A., Duque C. A., Rai D. P., Hoi B. D., Hieu N. N. Electronic, optical, and thermoelectric properties of Janus In-based monochalcogenides. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2021, vol. 33, no. 22, pp. 225503 (1–13). <https://doi.org/10.1088/1361-648X/abf381>
60. Do T.-N., Hieu N. N., Poklonski N. A., Binh N. T. T., Nguyen C. Q., Hien N. D. Computational insights into structural, electronic, and optical properties of Janus GeSO monolayer. *RSC Advances*, 2021, vol. 11, no. 45, pp. 28381–28387. <https://doi.org/10.1039/D1RA05424D>
61. Poklonski N. A., Siahlo A. I., Vyrko S. A., Popov A. M., Lozovik Yu. E., Lebedeva I. V., Knizhnik A. A. Graphene-based nanodynamometer. *Journal of Computational and Theoretical Nanoscience*, 2013, vol. 10, no. 1, pp. 141–146. <https://doi.org/10.1166/jctn.2013.2670>
62. Vlassov A. T., Poklonski N. A. Principles of modeling of regular-block nanostructures. *Actual Problems of Solid State Physics: Proceedings of the International Scientific Conference, Minsk, 23–26 October 2007. Vol. 3*. Minsk, Belarusian State University, 2007, pp. 148–152 (in Russian).
63. Vlassov A. T., Poklonski N. A., Vyrko S. A. Regular-block modeling of monolayer carbon surfaces. *Actual Problems of Solid State Physics: Proceedings of the International Scientific Conference, Minsk, 20–23 October 2009. Vol. 3*. Minsk, Varaksin A. N. Publ., 2009, pp. 53–55 (in Russian).
64. Vlassov A. T., Poklonski N. A., Vyrko S. A. Funnel and other graphene-like surfaces. *Actual Problems of Solid State Physics: Proceedings of the International Scientific Conference, Minsk, 18–21 October 2011. Vol. 2*. Minsk, Varaksin A. N. Publ., 2011, pp. 303–305 (in Russian).
65. Poklonski N. A., Ratkevich S. V., Vyrko S. A., Vlassov A. T., Hieu N. N. Quantum chemical calculation of reactions involving C_{20} , C_{60} , graphene and H_2O . *International Journal of Nanoscience*, 2019, vol. 18, no. 3–4, pp. 1940008 (1–5). <https://doi.org/10.1142/S0219581X19400088>

66. Siahlo A. I., Poklonski N. A., Lebedev A. V., Lebedeva I. V., Popov A. M., Vyrko S. A., Knizhnik A. A., Lozovik Yu. E. Structure and energetics of carbon, hexagonal boron nitride, and carbon/hexagonal boron nitride single-layer and bilayer nanoscrolls. *Physical Review Materials*, 2018, vol. 2, no. 3, pp. 036001 (1–9). <https://doi.org/10.1103/PhysRevMaterials.2.036001>
67. Siahlo A. I., Vyrko S. A., Ratkevich S. V., Poklonski N. A., Vlassov A. T., Hieu N. N., Lozovik Yu. E. Quantum chemical calculations of nanoscroll energy rolled from zigzag graphene nanoribbon. *Semiconductors*, 2020, vol. 54, no. 12, pp. 1678–1681. <https://doi.org/10.1134/S1063782620120350>
68. Poklonski N. A., Siahlo A. I., Vyrko S. A., Ratkevich S. V., Vlassov A. T., Lozovik Yu. E., Hieu N. N. Geometry of bilayer nanoscroll rolled from zigzag nanoribbons of graphene and boron nitride. *Vestsi Natsyional'noi akademii navuk Belarusi. Seryia fizika-matematychnykh navuk = Proceedings of the National Academy of Sciences of Belarus. Physics and Mathematics series*, 2020, vol. 56, no. 4, pp. 411–418. <https://doi.org/10.29235/1561-2430-2020-56-4-411-418>
69. Lebedeva I. V., Popov A. M., Knizhnik A. A., Lozovik Yu. E., Poklonski N. A., Siahlo A. I., Vyrko S. A., Ratkevich S. V. Tunneling conductance of telescopic contacts between graphene layers with and without dielectric spacer. *Computational Materials Science*, 2015, vol. 109, pp. 240–247. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2015.07.006>
70. Siahlo A. I., Poklonski N. A., Vyrko S. A., Ratkevich S. V. Model of metamaterial based on graphene scrolls and carbon nanotubes with negative refractive index. *Semiconductors*, 2018, vol. 52, no. 14, pp. 1886–1889. <https://doi.org/10.1134/S1063782618140294>
71. Siahlo A. I., Popov A. M., Poklonski N. A., Lozovik Yu. E., Vyrko S. A., Ratkevich S. V. Multi-layer graphene membrane based memory cell. *Physica E*, 2016, vol. 84, pp. 348–353. <https://doi.org/10.1016/j.physe.2016.08.003>
72. Lebedev A. V., Lebedeva I. V., Popov A. M., Knizhnik A. A., Poklonski N. A., Vyrko S. A. Universal description of potential energy surface of interlayer interaction in two-dimensional materials by first spatial Fourier harmonics. *Physical Review B*, 2020, vol. 102, no. 4, pp. 045418 (1–12). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.102.045418>
73. Poklonski N. A., Kislyakov E. F., Vyrko S. A., Bubel' O. N., Ratkevich S. V. Electronic band structure and magnetic states of zigzag graphene nanoribbons: quantum chemical calculations. *Journal of Nanophotonics*, 2012, vol. 6, pp. 061712 (1–9). <https://doi.org/10.1117/1.JNP.6.061712>
74. Poklonski N. A., Halimski I. A., Vyrko S. A., Vlassov A. T., Hieu N. N. Relativistic electric potential near a resting straight carbon nanotube of a finite-length with stationary current. *Journal of the Belarusian State University. Physics*, 2021, no. 1, pp. 20–25. <https://doi.org/10.33581/2520-2243-2021-1-20-25>
75. Poklonski N. A., Vlassov A. T., Vyrko S. A., Kislyakov E. F., Ratkevich S. V., Siahlo A. I. Inducton: soliton-like motion of one electron in one-dimensional wire with inductance of environment. *Physics, Chemistry and Applications of Nanostructures. Reviews and Short Notes: Proc. of Int. Conf. Nanomeeting-2013, Minsk, 28–31 May 2013*. Singapore, World Scientific, 2013, pp. 36–39. https://doi.org/10.1142/9789814460187_0007
76. Poklonski N. A., Vyrko S. A., Vlassov A. T., Siahlo A. I., Ratkevich S. V. Model of electromagnetic emitter based on a stream of single electrons inside curved carbon nanotube. *Priboiry i metody izmerenij = Devices and Methods of Measurements*, 2018, vol. 9, no. 4, pp. 288–295 (in Russian). <https://doi.org/10.21122/2220-9506-2018-9-4-288-295>
77. Poklonskii N. A., Kislyakov E. F., Fedoruk G. G., Vyrko S. A. Electronic structure model of a metal-filled carbon nanotube. *Physics of the Solid State*, 2000, vol. 42, no. 10, pp. 1966–1971. <https://doi.org/10.1134/1.1318895>
78. Poklonski N. A., Kislyakov E. F., Hieu N. N., Vyrko S. A., Bubel' O. N. Magnetically operated relay based on two carbon nanotubes filled with endofullerenes Fe@C₂₀. *Vestnik Fonda fundamental'nykh issledovanii = Bulletin of the Foundation for Fundamental Research*, 2008, no. 4, pp. 29–37 (in Russian).
79. Poklonski N. A., Kislyakov E. F., Vyrko S. A., Hieu N. N., Bubel' O. N., Siahlo A. I., Lebedeva I. V., Knizhnik A. A., Popov A. M., Lozovik Yu. E. Magnetically operated nanorelay based on two single-walled carbon nanotubes filled with endofullerenes Fe@C₂₀. *Journal of Nanophotonics*, 2010, vol. 4, pp. 041675 (1–18). <https://doi.org/10.1117/1.3417104>
80. Poklonski N. A., Kislyakov E. F., Vyrko S. A., Hieu N. N., Bubel' O. N., Siahlo A. I., Lebedeva I. V., Knizhnik A. A., Popov A. M., Lozovik Yu. E. A low-voltage magnetic nanorelay design. *SPIE Newsroom*, 19 Nov. 2010, 3 p. <https://doi.org/10.1117/2.1201010.003091>
81. Poklonski N. A., Kislyakov E. F., Hieu N. N., Bubel' O. N., Vyrko S. A., Popov A. M., Lozovik Yu. E. Uniaxially deformed (5, 5) carbon nanotube: Structural transitions. *Chemical Physics Letters*, 2008, vol. 464, no. 4–6, pp. 187–191. <https://doi.org/10.1016/j.cplett.2008.09.011>
82. Poklonski N. A., Kislyakov E. F., Hieu N. N., Bubel' O. N., Vyrko S. A., Phong T. C. Electronic energy band structure of uniaxially deformed (5, 5) armchair carbon nanotube. *Molecular Simulation*, 2009, vol. 35, no. 8, pp. 681–684. <https://doi.org/10.1080/08927020802680711>
83. Poklonski N. A., Ratkevich S. V., Vyrko S. A., Kislyakov E. F., Bubel' O. N., Popov A. M., Lozovik Yu. E., Hieu N. N., Viet N. A. Structural phase transition and band gap of uniaxially deformed (6, 0) carbon nanotube. *Chemical Physics Letters*, 2012, vol. 545, pp. 71–77. <https://doi.org/10.1016/j.cplett.2012.07.023>
84. Ershova O. V., Lozovik Yu. E., Popov A. M., Bubel' O. N., Kislyakov E. F., Poklonski N. A. NEMS based on carbon nanotube: New method of control. *Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures*, 2008, vol. 16, no. 5–6, pp. 374–378. <https://doi.org/10.1080/15363830802269281>
85. Ershova O. V., Lebedeva I. V., Lozovik Yu. E., Popov A. M., Knizhnik A. A., Potapkin B. V., Bubel O. N., Kislyakov E. F., Poklonskii N. A. Nanotube-based nanoelectromechanical systems: Control versus thermodynamic fluctuations. *Physical Review B*, 2010, vol. 81, no. 15, pp. 155453 (1–15). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.81.155453>
86. Poklonski N. A., Ratkevich S. V., Vyrko S. A. Quantum-chemical calculation of carbododecahedron formation in carbon plasma. *The Journal of Physical Chemistry A*, 2015, vol. 119, no. 34, pp. 9133–9139. <https://doi.org/10.1021/acs.jpca.5b03573>

87. Poklonski N. A., Vlassov A. T., Vyrko S. A. *Finite Symmetry Groups: Fundamentals and Applications*. Minsk: BelEn, Publ., 2011. 464 p. (in Russian).
88. Bubel' O. N., Vyrko S. A., Kislyakov E. F., Poklonskii N. A. Totally symmetric vibrational modes of fullerene C_{60} , Publ., *Journal of Experimental and Theoretical Physics Letters*, 2000, vol. 71, no. 12, pp. 508–510. <https://doi.org/10.1134/1.1307477>
89. Poklonskii N. A., Kislyakov E. F., Bubel' O. N., Vyrko S. A. Coulomb distortion of carbododecahedron C_{20}^{2+} . *Journal of Applied Spectroscopy*, 2002, vol. 69, no. 3, pp. 323–327. <https://doi.org/10.1023/A:1019714211588>
90. Poklonski N. A., Vyrko S. A., Vlassov A. T. Regular-block modeling of clusters in the carbon arc discharge plasma. *Contributed Papers of VI International Conference Plasma Physics and Plasma Technology (PPPT-6), Minsk, Sept. 28 – Oct. 2, 2009. Vol. 2*. Minsk, Polyfact, 2009, pp. 740–743.
91. Popov A. M., Lebedeva I. V., Vyrko S. A., Poklonski N. A. Multiscale modeling strategy to solve fullerene formation mystery. *Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures*, 2021, vol. 29, no. 10, pp. 755–766. <https://doi.org/10.1080/1536383X.2021.1900124>
92. Adamchuck D. V., Ksenevich V. K., Poklonski N. A., Kavaleu A. I. Features of water vapor adsorption and desorption on the surface of non-stoichiometric tin dioxide films. *Vesti Natsyional'noi akademii navuk Belarusi. Seriya fizika-matematychnykh navuk = Proceedings of the National Academy of Sciences of Belarus. Physics and Mathematics series*, 2020, vol. 56, no. 1, pp. 102–113 (in Russian). <https://doi.org/10.29235/1561-2430-2020-56-1-102-113>
93. Samuilov V., Galibert J., Poklonski N. Chapter 9. Electron transport in the assemblies of multiwall carbon nanotubes. *Perspective of Carbon Nanotubes*. Rijeka, IntechOpen, 2019, pp. 1–21. <https://doi.org/10.5772/intechopen.89937>

Информация об авторе

Поклонский Николай Александрович – доктор физико-математических наук, профессор, Белорусский государственный университет (пр. Независимости, 4, 220030, г. Минск, Республика Беларусь). E-mail: poklonski@bsu.by. <http://orcid.org/0000-0002-0799-6950>

Information about the author

Nikolai A. Poklonski – Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Professor, Belarusian State University (4, Nezavisimosti Ave., 220030, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: poklonski@bsu.by. <http://orcid.org/0000-0002-0799-6950>