



ТЕРЕБІНСЬКА

Марія Іванівна —

кандидат хімічних наук,
науковий співробітник відділу
квантової хімії і хімічної
фізики наносистем Інституту
хімії поверхні ім. О.О. Чуйка
НАН України
terbinska_m.i@bigmir.net

УДК 544.72

АДСОРБЦІЙНІ ПРОЦЕСИ НА ПОВЕРХНІ КРИСТАЛІЧНОГО КРЕМНІЮ: КВАНТОВО-ХІМІЧНИЙ ПІДХІД

За матеріалами наукового повідомлення
на засіданні Президії НАН України
21 жовтня 2015 року

Сучасним методом квантової хімії (теорія функціонала густини) виконано розрахунки структурних і енергетичних параметрів адсорбційних комплексів O_2 , H_2O та атомарного германію на чітко структурованій грані Si(001). Добре узгодження теоретично отриманих енергетичних характеристик розглянутих об'єктів з експериментальними даними дає підставу вважати, що їх геометричні параметри, які неможливо встановити дослідним шляхом, вірно відтворюються методами квантової хімії.

Ключові слова: теорія функціонала густини, адсорбційні комплекси, молекулярний кисень, квантова точка, атомарний германій.

Дослідження взаємодії молекул газової фази з чітко структурно охарактеризованою поверхнею твердого тіла посідають центральне місце в хімії поверхні. Результати таких досліджень становлять інтерес для багатьох технологічних процесів, наприклад у промисловому каталізі або у виробництві матеріалів для мікроелектронних пристроїв [1]. Одним з найважливіших серед них слід вважати реакцію окиснення кристалічного кремнію сухим молекулярним киснем, яка приводить до формування на його поверхні окисненого шару, утворення якого можливе також під дією парів води. Одночасний перебіг паралельних і послідовних стадій зумовлює значні труднощі експериментального дослідження цього процесу. У таких випадках відповідні дані можна отримати методами квантової хімії. Лише детальний розгляд на атомно-молекулярному рівні основоположних елементарних стадій, таких як фізична адсорбція молекулярного кисню або води, хемосорбція, дисоціація адмолекул, дає змогу зрозуміти механізм і кінетику формуван-

ня оксидного шару на поверхні кристалічного кремнію.

Усі розрахунки, результати яких наведено в доповіді, було виконано методом теорії функціонала густини з обмінно-кореляційним функціоналом B3LYP з базисним набором 6-31G** за допомогою різних варіантів програмного модуля PC GAMESS [2–4].

Нереконструйована грань Si(111) моделювалася кластером $\text{Si}_{26}\text{H}_{24}$ (кластер 111), який містить 6 поверхневих трикоординатних атомів кремнію, а обірвані зв'язки по місцях його контакту з кристалом кремнію, згідно з кластерним наближенням, насичувалися атомами водню.

Для комплексу з молекулярно адсорбованим киснем $111 \cdot \text{O}_2$ характерна паралельність осі O—O площині (111) поверхневих атомів кремнію, нееквівалентність атомів кисню і велика довжина зв'язку O—O, яка сягає 0,154 нм. Це є наслідком значного переносу електронної густини з поверхні кристалічного кремнію на молекулу O_2 , який становить 0,8 ат. од., у результаті чого зростає заселеність $2\pi^*$ розпушуючої орбіталі двоатомного O—O фрагмента адсорбційного комплексу. Саме такій структурі молекулярного комплексу відповідає бімодальна форма лінії остівного рівня $\text{O}1s$, а також негативний зсув положення її максимумів відносно положення максимуму в молекулі O_2 у вільному стані (рис. 1).

Подовження зв'язку O—O свідчить про схильність адсорбованої молекули O_2 до подальшого розпаду, після якого можливе утворення низки послідовних структур: top-top відповідає розташуванню двох атомів кисню над поверхневими атомами кремнію; top-ins формується з top-top-структури при впровадженні одного атома кисню у зв'язок Si—Si; ins-ins відрізняється від top-ins-структури тим, що обидва атоми кисню інкорпоровані в Si—Si зв'язки, які прилягають до одного атома кремнію (рис. 2).

Енергія top-top-кластера дещо вища за енергію кластера, який являє собою молекулярний комплекс $111 \cdot \text{O}_2$ (приблизно 0,2 еВ), а перехід від нього до top-top-структури відбуваєть-

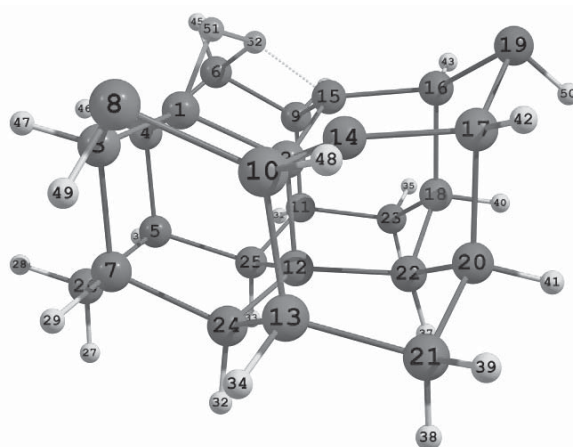


Рис. 1. Рівноважна структура кластера, що моделює адсорбційний комплекс молекули кисню на грані Si(111)

ся з енергією активації 1,3 еВ через перехідний стан TS1. Наявність активаційного бар'єра можна пояснити витратами енергії на розрив подовженого O—O і одного Si—O зв'язків у молекулярному комплексі $111 \cdot \text{O}_2$. Це слугує непрямим доказом наявності молекулярного прекурсора, який формується на поверхні грані Si(111) і має досить тривалий термін життя. Безпосередній доказ наявності молекулярного прекурсора отримано із зіставлення теоретично розрахованого для кластера $111 \cdot \text{O}_2$ коливального спектра та наявного в літературі експериментального ІЧ-спектра молекулярно адсорбованих молекул O_2 на грані Si(111) за низьких температур. Так, частота валентного колювання зв'язку O—O молекулярно адсорбованого кисню становить 756 см^{-1} , тоді як згідно з експериментальними даними в ізолюваній молекулі O_2 вона дорівнює 1580 см^{-1} . Досить низьку частоту O—O валентного колювання в адсорбційному комплексі можна пояснити потрібною координацією молекули кисню поверхневими атомами кремнію грані Si(111).

Надалі один з атомів кисню впроваджується у зв'язок Si—Si з утворенням top-ins-структури. Ця стадія є екзотермічною, і її тепловий ефект становить 5,6 еВ щодо вибраного нульового рівня енергії, а енергія активації — 0,4 еВ (перехідний стан TS2). Її невелике значення мож-

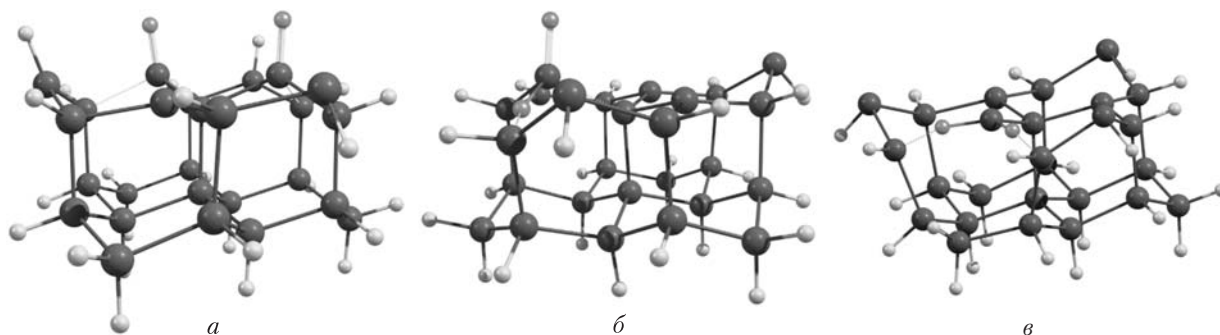


Рис. 2. Рівноважні просторові структури кластерів, які моделюють комплекси: top-top (а); top-ins (б); ins-ins (в)

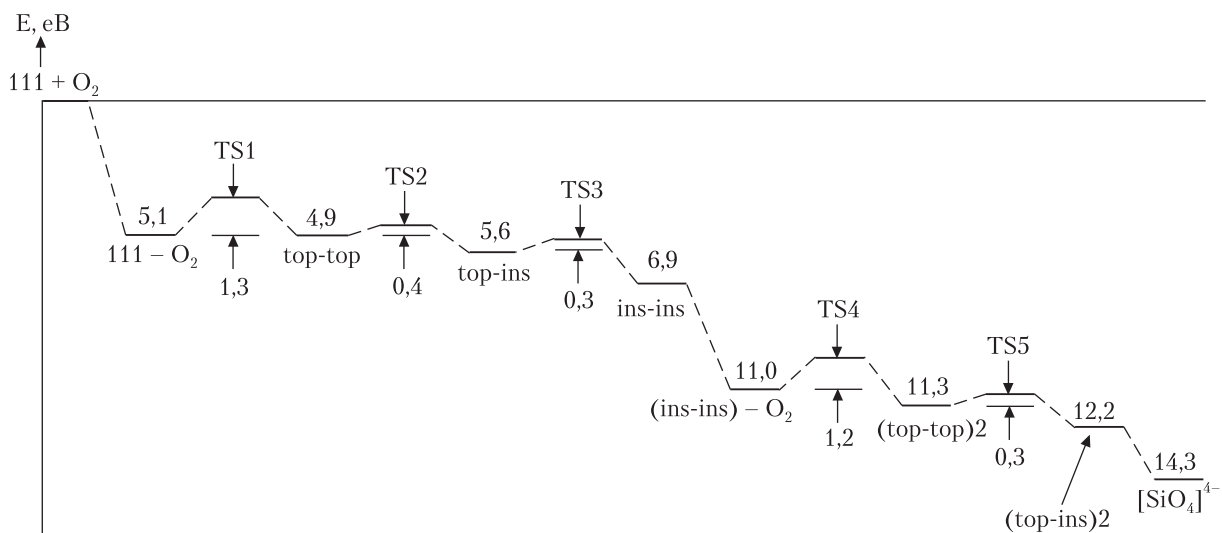


Рис. 3. Енергії утворення адсорбційних комплексів у системі «кластер 111+O₂» та енергії активації переходів між ними

на пояснити тим, що це перетворення супроводжується не розривом зв'язків у вихідній структурі, а тільки незначним зміщенням двох поверхневих атомів кремнію зі своїх рівноважних положень у top-top-кластері. Комплекс top-ins трансформується в ins-ins, для якого характерна наявність двох вбудованих атомів кисню у зв'язки Si—Si, які примикають до одного атома кремнію. Енергія утворення цієї структури — 6,9 еВ (666 кДж/моль), а енергія перехідного стану TS3 всього лише на 0,3 еВ вища за енергію top-ins-структури. У цьому поверхневому комплексі ідентичність хімічного оточення атомів кисню підтверджується мономодальною формою лінії O1s у спектрі густини

ни остівних станів. Зсув її максимуму відносно відповідного аналогічного положення в молекулі O₂ значно нижчий, а також значно нижчі, ніж в ізолюваній молекулі Si—O, частоти валентних коливань зв'язків Si—O свідчать про невелику енергію зв'язування атомів кисню поверхневими атомами кремнію грані Si(111) (рис. 3).

Формування оксидного шару на поверхні кристалічного кремнію передбачає утворення хемосорбційного комплексу (ins-ins)•O₂ з другою молекулою O₂ на частково окисненій поверхні, яка вже містить два впроваджені у зв'язки Si—Si атоми кисню. Як і у випадку хемосорбції однієї молекули O₂, між'ядерна

вісь другої молекули кисню так само розташовується паралельно площині грані Si(111), а відстань O—O також значно перевищує рівноважну довжину цього зв'язку в ізольованій молекулі кисню і становить 0,151 нм. Подальша еволюція структури за участю другої молекули кисню аналогічна процесу початкового окиснення кристалічного кремнію і завершується формуванням тетраедра $[\text{SiO}_4]^{4-}$, який є будівельним блоком діоксиду силіцію. Структура кластера з тетраедром $[\text{SiO}_4]^{4-}$ у поверхневому шарі підтверджується спектром густини остівних станів O1s рівня, з якого видно, що всі чотири атоми кисню, які примикають до одного атома кремнію, перебувають у різному хімічному оточенні.

Грань Si(100) моделювали кластером $\text{Si}_{45}\text{H}_{36}$. Для рівноважної структури кластера 100 розташування поверхневих трикоординативних атомів кремнію відповідає двовимірній гратці 2×1 , утвореній атомами, половина з яких втягнута в об'ємну фазу кристала, а друга — розміщена дещо вище першої, тобто формуванню поверхневих $=\text{Si}=\text{Si}=\text{Si}$ димерів. На грані Si(100) відбуваються перетворення, аналогічні перетворенням на грані Si(111).

З використанням кластерів 111 та 100 було з'ясовано також послідовність елементарних актів впровадження кисню в поверхневий шар кристалічного кремнію при його контакті з водою.

На поверхні потенціальної енергії систем «кластер 111+ H_2O » і «кластер 100+ H_2O » локалізовано точки, які відповідають молекулярній адсорбції. Стабілізація утворених комплексів $111 \cdot \text{H}_2\text{O}$ та $100 \cdot \text{H}_2\text{O}$ зумовлена двоцентровим зв'язуванням молекули води поверхневими атомами кремнію. Надалі відбувається розрив одного O—H зв'язку в молекулі H_2O і утворення двох нових зв'язків $\equiv \text{Si}-\text{OH}$ та $\equiv \text{Si}-\text{H}$ з поверхневими атомами кремнію. Тому висоти відповідних активаційних бар'єрів є незначними.

У подальшому на гранях Si(111) та Si(100) між поверхневими атомами кремнію утворюється кремній-кисневий місток у вигляді брэнстедівського центру $=\text{Si}-\text{OH}-\text{Si}(\text{H})=$.

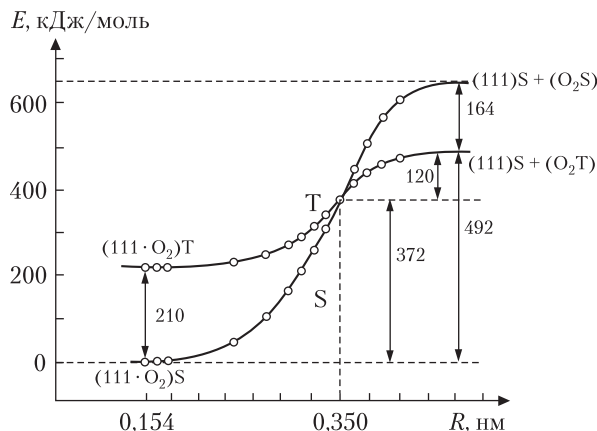


Рис. 4. Перерізи поверхонь потенціальної енергії системи «кластер 111+ O_2 » для триплетного та синглетного станів залежно від відстані між кластером 111 та молекулою кисню

На останній стадії взаємодії, яку ми власне і розглядаємо, атом водню брэнстедівського центру переміщується до сусіднього поверхневого атома кремнію з генерацією силанольного містка $\equiv \text{Si}-\text{O}-\text{Si}$.

Досить цікавим було питання щодо утворення адсорбційного комплексу молекули кисню на грані (111) кристалічного кремнію, оскільки в газовій фазі молекула кисню перебуває в триплетному стані, а кластер, що моделює кристалічний кремній, — у синглетному.

Для розгляду ролі триплет-синглетного переходу при дисоціативній адсорбції молекули O_2 на грані Si(111) розраховано залежності енергії утворення системи «кластер 111 + молекула O_2 » від відстані між складовими комплексу.

З рис. 4 видно, що утворення молекулярного комплексу відбувається безактиваційно в результаті триплет-синглетного переходу. Енергія утворення комплексу $111 \cdot \text{O}_2$ з кластера 111 і молекули O_2 в синглетному стані становить 656 кДж/моль. З урахуванням того, що основний стан молекули O_2 триплетний $^3\Sigma_g^-$, ця величина зменшується до 492 кДж/моль. Наведені дані дозволяють зробити висновок, що зв'язування в цій системі можливе лише в результаті спін-забороненого для газової фази

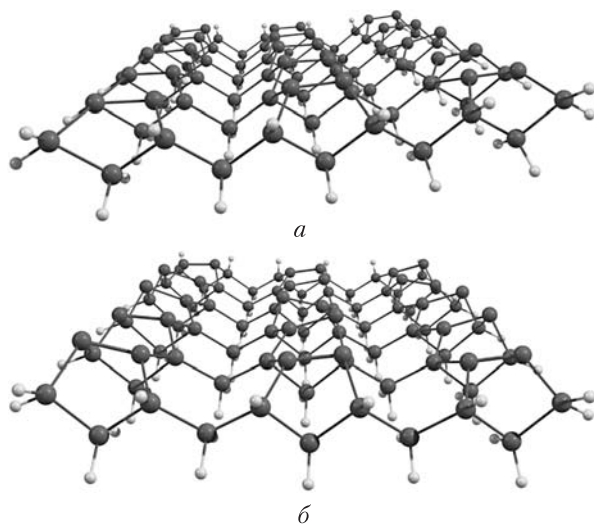


Рис. 5. Кластер, що моделює поверхню Si(001) з рядами: *a* – симетричних димерів (реконструкція типу 2×1); *б* – антисиметричних димерів (реконструкція типу 4×2)

в молекулі O_2 триплет-синглетного переходу ($T \rightarrow S$) в адсорбційному молекулярному комплексі $111 \cdot O_2$.

Аналіз перерізів поверхонь потенціальної енергії (ППЕ) синглетного і триплетного станів уздовж координати наближення молекули O_2 до кластера 111 дає змогу припустити наявність принаймні двох можливостей для такого $T \rightarrow S$ переходу: а) перехід молекули O_2 з основного триплетного електронного стану $^3\Sigma_g^-$ в збуджений синглетний $^1\Sigma_g^-$ стан, розташований на 164 кДж/моль вище. Після досягнення системою $111 + O_2$ синглетного стану подальша еволюція системи відбувається уздовж кривої S; б) триплет-синглетний перехід у точці перетину перерізів ППЕ з початкового стану системи з триплетною молекулою кисню до синглетного стану комплексу $111 \cdot O_2$. Подальший рух системи по поверхні потенціальної енергії до досягнення рівноважної структури комплексу $111 \cdot O_2$ відбувається вздовж нижньої частини кривої S.

Більш імовірною є друга можливість, що впливає з порівняння енергії триплет-синглетного розщеплювання в молекулі O_2

з аналогічною величиною для кластера 111 (210 кДж/моль).

До точки перетину перерізів ППЕ молекула O_2 орієнтована перпендикулярно площині грані (111), проте після досягнення $R = 3,5 \text{ \AA}$ вісь молекули розташовується паралельно поверхні.

Не менш важливими, особливо з урахуванням нинішніх і майбутніх тенденцій у розвитку елементної бази твердотільної електроніки, є дослідження, спрямовані на вивчення послідовності утворення наноструктур германію на поверхні кристалічного кремнію [5, 6].

Нереконструйована поверхня кремнію (001) моделювалася кластером $Si_{96}H_{84}$. У результаті оптимізації просторової будови цієї структури на поверхні сформувалися ряди димерів, які вдвічі зменшують кількість обірваних зв'язків. Однак така димеризована поверхня залишається хімічно активною, оскільки на кожному атомі поверхневого димера залишається одна некомпенсована валентність. Поверхня Si(001) може містити симетричні димери, що відповідає реконструкції типу 2×1 . Енергетично вигіднішою є поверхня кремнію з антисиметричними димерами, така структура має назву букльованої і відповідає реконструкції типу 4×2 (рис. 5).

Утворення квантової точки на грані Si(001) починається з адсорбції ізолюваних атомів Ge на активних центрах поверхні. До таких насамперед належать атоми кремнію, розташовані у нижній частині поверхневих димерів (down-положення). Загальна сума абсолютних значень відхилень валентних кутів від тетраедричних ($109,5^\circ$) для down-атомів димерів становить $\sim 17,8^\circ$, тоді як для up-атомів димерів вона досягає $\sim 35,9^\circ$. Це дає змогу припустити, що найімовірнішим активним центром, на якому можлива адсорбція ізолюваних атомів Ge, є down-атоми димерів. На користь цієї думки свідчать також дані розрахунків просторового розподілу нижчої вакантної молекулярної орбіталі.

Безпосередні розрахунки рівноважної будови адсорбційних комплексів $Si(001) \cdot Ge$ з різними вихідними розміщеннями атома Ge від-

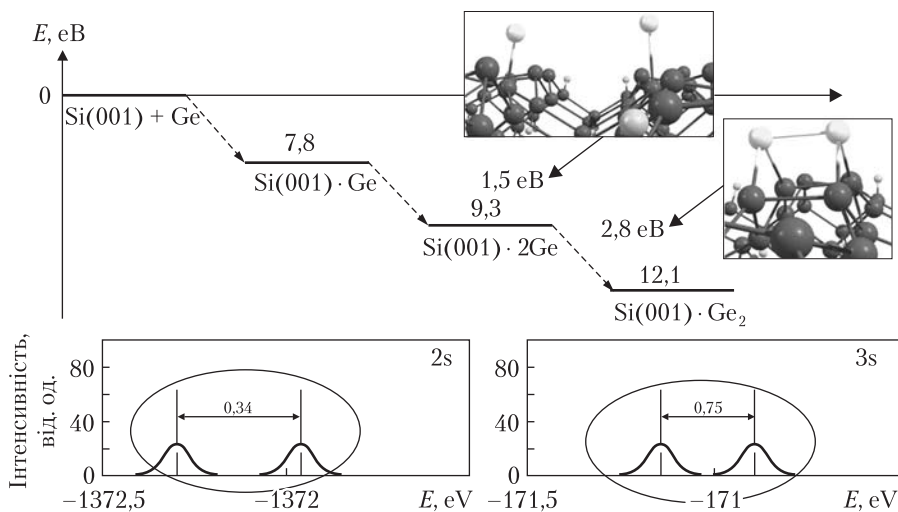


Рис. 6. Енергія утворення поверхневих сполук $\text{Si}(001) \cdot \text{Ge}$, $\text{Si}(001) \cdot 2\text{Ge}$ і $\text{Si}(001) \cdot \text{Ge}_2$ та густина електронних станів цих кластерів в області енергій атомних орбіталей 2s- і 3s- атома германію

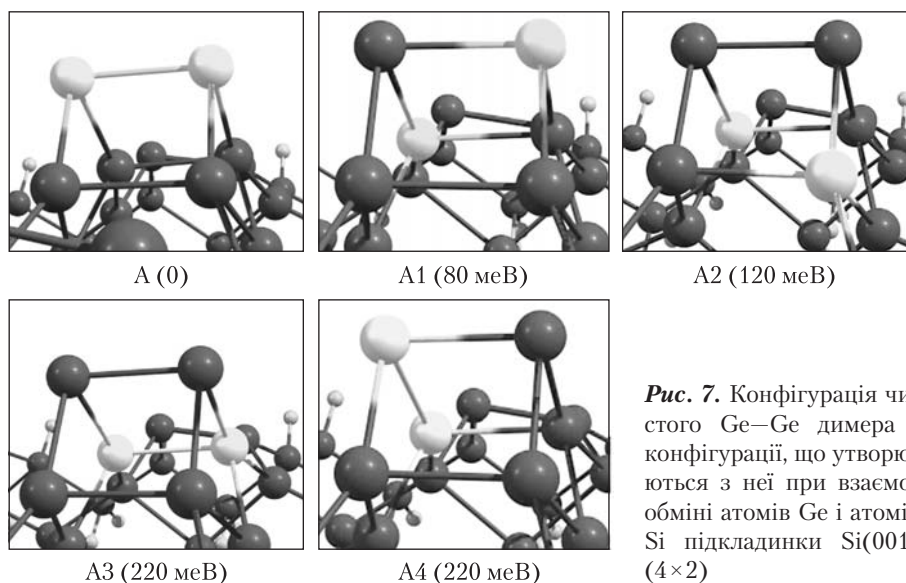


Рис. 7. Конфігурація чистого Ge–Ge димера і конфігурації, що утворюються з неї при взаємобміні атомів Ge і атомів Si підкладинки Si(001) (4×2)

носно атомів грані Si(001) привели до структури з локалізацією адатома в околі down-атома кремнію поверхневого димера.

Як показали розрахунки, довжина зв'язку Si–Ge в кластері $\text{Si}_{96}\text{H}_{84} \cdot \text{Ge}$ становить 2,44 Å, тоді як у двохатомній молекулі Si–Ge в основному стані вона дорівнює 2,11 Å. Таке видо-

вження зв'язку Si–Ge в адсорбційному комплексі свідчить про рухливість атома Ge і його можливі переміщення по поверхні, тобто про поверхневу дифузію.

Було також розраховано рівноважну просторову структуру адсорбційного комплексу $\text{Si}(001) \cdot \text{Ge}_2$.

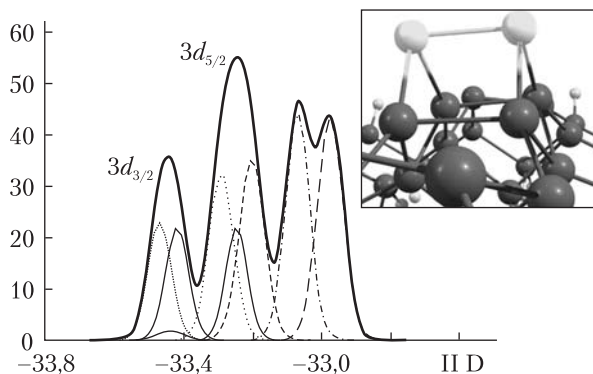


Рис. 8. Положення 3d-рівнів атомів Ge, що входять до складу кластера $\text{Si}_{96}\text{H}_{84}\text{Ge}_2$ (A0)

Енергія утворення поверхневої сполуки з адсорбованим димером Ge нижча за енергію поверхневої сполуки з двома ізольованими атомами Ge на 1,5 еВ. Значне відхилення цієї величини від енергії зв'язування кластером $\text{Si}_{96}\text{H}_{84}$ одного атома Ge свідчить про суттєву взаємодію атомів Ge в адсорбційному шарі поверхні Si(001). Структура димера характеризується нееквівалентністю атомів Ge, доказом чого є бімодальна форма ліній для 2s- та 3s-остівних рівнів атома Ge, що відповідає дослідним даним (рис. 6).

Після адсорбції двох атомів Ge на грані Si(001) відбувається їх поверхнева дифузія з утворенням адсорбційного комплексу $\text{Si}_{96}\text{H}_{84}\cdot\text{Ge}_2$, енергія якого на 2,8 еВ нижча за енергію комплексу з розділеними на поверхні атомами германію.

Наявні в літературі експериментальні дані і результати виконаних нами квантово-хімічних розрахунків дають змогу запропонувати чотири різні конфігурації поверхневих димерів германію відносно поверхневих димерів кремнію. Димер Ge_2 може розташовуватися вище поверхневих $=\text{Si}-\text{Si}=\text{Si}$ димерів паралельно їм (конфігурація А) або перпендикулярно (конфігурація В). Конфігурація В відрізняється від попередньої поворотом димера Ge_2 на 90° .

Згідно з виконаними нами розрахунками, найвигіднішою за енергією виявилася конфігурація А. Після утворення димера Ge_2 в конфігурації А можлива дифузія одного або двох атомів германію в об'ємну фазу підкладинки з

одночасним виходом з неї одного або двох атомів кремнію. Найближчою за енергією до конфігурації А є конфігурація А1. Слід зазначити, що різниця енергій конфігурацій А і А1–А4 досить невелика, що дозволяє припустити їх можливі взаємні перетворення за кімнатної температури (рис. 7).

З отриманих нами і літературних даних випливає, що епітаксiale формування гетеропереходу Ge/Si зумовлене не лише осадженням атомів Ge на грані Si(001), а й заміщенням атомів Si поверхневих димерів і більш глибоких шарів атомами германію. Поєднання цих процесів призводить до порушення різкості утвореного гетеропереходу і формування поверхневих структур з різним хімічним оточенням атомів германію.

Найточнішу інформацію про локальну конфігурацію атомів у поверхневому шарі підкладинки можна отримати, виходячи з величин зсувів остівних рівнів атома Ge, які залежать від його фізико-хімічного стану.

Найчутливішим до взаємного розміщення атомів Ge і Si в кластері $\text{Si}_{96}\text{H}_{24}\text{Ge}_2$ виявилася положення остівних 3d-рівнів атомів Ge.

Слід звернути увагу, що дублетна Ge-3d-лінія, зумовлена спін-орбітальною взаємодією, також має тонку структуру. Причин виникнення такої структури може бути декілька, а саме:

- утворення так званих внутрішніх молекулярних орбіталей;
- мультиплетні розщеплення;
- динамічні ефекти;
- багатоелектронне збудження.

Детальний аналіз будови і властивостей молекулярних орбіталей кластера $\text{Si}_{96}\text{H}_{24}\text{Ge}_2$ показав, що в утворенні молекулярних орбіталей беруть участь не лише атомні орбіталі 4s і 4p атомів германію, а й 3d його орбіталі, чим і пояснюються досить високі енергії зв'язування атомів германію на грані Si(001) (рис. 8).

Зсуви енергій остівних електронів відносно положень у кластері А0 свідчать, що переміщення атомів Ge в об'ємну фазу підкладинки приводить до збільшення абсолютного значення енергії зв'язування 3d-електронів атома германію.

Висновки

Розраховані енергії утворення адсорбційних комплексів молекул O_2 та H_2O на кластерах, які моделюють грані $Si(111)$ і $Si(100)$, та енергії активації переходів між ними свідчать про екзотермічність реакцій утворення всіх проміжних структур, що може бути доказом самочинності окиснення поверхні кристалічного кремнію під дією молекулярного кисню або води. Загалом енергетичні ефекти проміжних стадій взаємодії кластерів, які моделюють грані $Si(111)$ та $Si(100)$, з молекулярним киснем перевищують аналогічні величини взаємодії з молекулами води, що можна розглядати як теоретичне обґрунтування технологічності використання води для формування окисного шару на поверхні кристалічного кремнію.

Уперше встановлено, що формування поверхневих сполук з силосановими зв'язками у поверхневому шарі кремнію з молекулярних комплексів відбувається по-різному: в кластері 111, який відтворює грань $Si(111)$, один з атомів кисню, що утворюється після розриву зв'язку $O-O$, впроваджується у зв'язок $Si-Si$, а в кластері 100 він зв'язує між собою поверхневі атоми кремнію, між якими в молекулярному комплексі хімічного зв'язку не було, що є наслідком різної атомної структури цих граней.

Теоретично розраховані в гармонічному наближенні частоти і форми нормальних коливань атомів у кластерах, які відтворюють адсорбційні комплекси на гранях $Si(111)$ і $Si(100)$, продемонстрували їх залежність від хімічного оточення атомів кисню, що дає змогу з отриманих ІЧ-спектрів визначити можливу будову поверхневих комплексів. Додаткова інформація щодо структури кисневмісних утворень на гранях кристалічного кремнію міститься в зсувах максимумів розподілу остівних $O1s$ -рівнів відносно положень у молекулярному кисні.

Уперше показано, що взаємодія молекули O_2 , яка в газовій фазі перебуває в триплетному стані, з кластером 111 приводить до утворення молекулярного комплексу в синглетному стані. Триплет-синглетний перехід у системі «кластер 111+молекула O_2 » відбувається в

околі точки перетину перерізів поверхонь потенціальної енергії триплетного і синглетного станів зі зміною орієнтації атакуючої молекули O_2 відносно площини поверхні.

Адсорбція одного атома германію на грані $Si(001)(4 \times 2)$ відбувається на трикоординатному down-атомі кремнію поверхневого димера з енергетичним ефектом 7,8 еВ, а енергетичний ефект адсорбції другого атома германію кластером $Si_{96}H_{84} \cdot Ge$ становить лише 1,6 еВ, що свідчить про значну взаємодію адсорбованих атомів германію. Утворення димера Ge_2 на поверхні кластера $Si_{96}H_{84} \cdot Ge_2$ також є екзотермічним процесом, у результаті якого формується поверхневий димер $=Ge-Ge=$, що розміщується над рядом поверхневих димерів $=Si-Si=$ паралельно ним. Енергії конфігурацій, утворених при взаємному обміні атомів германію поверхневого димера $=Ge-Ge=$ з атомами кремнію поверхневих димерів $=Si-Si=$, мало відрізняються від енергії вихідної конфігурації А, що є непрямим доказом можливості дифузійного впровадження адсорбованих атомів германію в кремнієву підкладку з одночасним виходом з неї атомів Si і утворенням змішаних поверхневих $=Si-G=$ димерів. Остівні $Ge-3d$ -електрони беруть участь в утворенні так званих внутрішніх молекулярних орбіталей, що зумовлює значну енергію зв'язування атомів германію підкладкою $Si(001)$.

Отже, до методологічних висновків слід віднести перспективність використання сучасних методів квантової хімії для досліджень зі з'ясування структури і властивостей адсорбційних комплексів на поверхні кристалічного кремнію, результати яких на кожному етапі мають бути скореговані відповідними експериментальними даними.

Доповідач висловлює глибоку вдячність за допомогу в роботі директору Інституту хімії поверхні ім. О.О. Чуйка НАН України академіку НАН України Миколі Тимофійовичу Картелю і завідувачу відділу квантової хімії та хімічної фізики наносистем цього ж інституту доктору хімічних наук, професору Віктору Васильовичу Лобанову.

REFERENCES

1. Waltenburg H.N., Yates J.T. Surface chemistry of silicon. *Chem. Rev.* 1995. **95**(5): 1589.
2. Schmidt M.W., Baldrige K.K., Boatz J.A., Elbert S.T., Gordon M.S., Jensen J.H., Koseki Sh., Matsunaga N., Nguyen K.A., Su S., Windus T.L., Dupuis M., Montgomery J.A. Jr. General atomic and molecular electronic-structure system. Review. *J. Comput. Chem.* 1993. **14**(11): 1347.
3. Parr R.G., Yang W. *Density-functional theory of atoms and molecules.* (Oxford Univ. Press, 1989).
4. Becke A.D. Density-functional exchange-energy approximation with correct asymptotic behavior. *Phys. Rev. A.* 1988. **38**(6): 3098.
5. Pchelyakov O.P., Bolkhovityanov Yu.B., Dvurechenskii A.V., Sokolov L.V., Nikiforov A.I., Yakimov A.I., Voigtlander B. Silicon-germanium nanostructures with quantum dots: Formation mechanisms and electrical properties. *Semiconductors.* 2000. **34**(11): 1229.
[Пчеляков О.П., Болховитянов Ю.Б., Двуреченский А.В. и др. Кремний-германиевые наноструктуры с квантовыми точками: механизмы образования и энергетические свойства. *Физика и техника полупроводников.* 2000. Т. 34, № 11. С. 1281–1299].
6. Brunner K. Si/Ge nanostructures. *Rep. Prog. Phys.* 2002. **65**: 27.

М.И. Тербинская

Институт химии поверхности им. А.А. Чуйко Национальной академии наук Украины (Киев)

АДСОРБЦИОННЫЕ ПРОЦЕССЫ НА ПОВЕРХНОСТИ КРИСТАЛЛИЧЕСКОГО КРЕМНИЯ:
КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЙ ПОДХОД

По материалам научного сообщения на заседании Президиума НАН Украины 21 октября 2015 года

Современным методом квантовой химии (теория функционала плотности) выполнены расчеты структурных и энергетических параметров адсорбционных комплексов O_2 , H_2O и атомарного германия на четко структурированной грани Si(001). Хорошее согласование теоретически полученных энергетических характеристик рассматриваемых объектов с экспериментальными данными дает основания считать, что их геометрические параметры, которые невозможно установить экспериментально, верно воспроизводятся методами квантовой химии.

Ключевые слова: теория функционала плотности, адсорбционные комплексы, молекулярный кислород, квантовая точка, атомарный германий.

M.I. Terebinska

Chuiko Institute of Surface Chemistry of National Academy of Sciences of Ukraine (Kyiv)

ADSORPTION PROCESSES ON THE SURFACE OF CRYSTALLINE SILICON:
QUANTUM CHEMICAL APPROACH

According to the materials of scientific report at the meeting of the Presidium of NAS of Ukraine October 21, 2015

The structural and energetic parameters for adsorption complexes O_2 , H_2O and atomic germanium on clear structured Si(001) face were calculated using the modern quantum chemical method (DFT). The results of theoretical calculations are in the good agreement with experimental data, so there is evidence that geometrical parameters, which can not be established empirically, are correctly reproduced by quantum chemical methods.

Keywords: density functional theory, adsorption complexes, molecular oxygen, quantum dot, atomic germanium.