Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0420U100138

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 10-01-2020

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Ткачук Ольга Іванівна
2. Tkachuk Olha

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: кандидат наук

Аспірантура/Докторантура: так

Шифр наукової спеціальності: 02.00.04

Назва наукової спеціальності: Фізична хімія

Галузь / галузі знань: Не застосовується

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Не застосовується

Дата захисту: 26-12-2019

Спеціальність за освітою: 7.04020301 - фізика

Місце роботи здобувача: Інститут хімії поверхні ім. О.О. Чуйка НАН України

Код за ЄДРПОУ: 03291669

Місцезнаходження: вул.Генерала Наумова, 17, м. Київ, Київська обл., 03164, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

III. Відомості про організацію, де відбувся захист

Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради): Д 26.210.01

Повне найменування юридичної особи: Інститут хімії поверхні ім. О.О. Чуйка НАН України

Код за ЄДРПОУ: 03291669

Місцезнаходження: вул.Генерала Наумова, 17, м. Київ, Київська обл., 03164, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

IV. Відомості про підприємство, установу, організацію, в якій було виконано дисертацію

Повне найменування юридичної особи: Інститут хімії поверхні ім. О.О. Чуйка НАН України

Код за ЄДРПОУ: 03291669

Місцезнаходження: вул.Генерала Наумова, 17, м. Київ, Київська обл., 03164, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 31.15

Тема дисертації:

1. Квантовохімічне моделювання поверхневих структур Ge на грані Si(001)
2. Quantum-chemical modeling of surface structures of Ge on the Si(001) surface

Реферат:

1. Методом теорії функціоналу густини (B3LYP, 6-31G**) виконані квантовохімічні розрахунки рівноважної просторової будови та електронної структури АК атома, двох атомів Ge та утвореної двоатомної молекули Ge2 на кластері Si96H84, який моделює букльовану грань Si(001), а також на кластері Si115H80+Si18O30H16, що відтворює ізолюючий шар на поверхні кристалічного кремнію. Показано, що адсорбція одного атома Ge відбувається на down-атомі Si «букльованих» димерів >Si=Si< поверхні з енергетичним ефектом 7,8 еВ. Така досить значна величина енергії адсорбції свідчить про координаційну ненасиченість down-атомів Si. Адсорбція другого атома Германію в межах застосованого кластера також є екзотермічний процес з енергетичним ефектом 1,5 еВ щодо кластера Si96H84•Ge з подальшим формуванням аддимера >Ge=Ge<. Атоми Ge аддимера >Ge=Ge< здатні до об'ємної дифузії з утворенням як змішаних аддимерів >Ge=Si<, так і чистих аддимерів >Si=Si<. Хімічне оточення атомів Германію в таких АК визначалось по зсуву 3d5/2-компоненти лінії Ge3d відносно її положення в комплексі Si96H84•Ge2 з аддимером >Ge=Ge<. Узагальнення результатів трактування зсувів положення лінії 3d5/2 дано в рамках уявлень про «електростатичний

потенціал», згідно якого зміна енергії зв'язку остовних електронів розглядається як функція ефективного заряду самого атома і ефективних зарядів сусідніх атомів. Згаданим методом з використанням кластера Si28H28, який містить п'ять букльованих поверхневих димерів >Si=Si<, розглянуто трансформацію аддимерів >Ge=Ge<, >Ge=Si< та >Si=Si< на релаксованій грані Si(001)(4×2). Встановлена енергетика коливань згаданих димерів у залежності від кута буклювання та розраховані величини відповідних бар'єрів активації. Для аддимера >Ge=Si< отримані величини активаційних бар'єрів зміни орієнтації (A□B) у межах однієї комірки поверхні Si(001)(4×2), а також дифузії між двома сусідніми комірками підкладинки. Розгляд трьох видів переміщень аддимерів >Ge=Ge<, >Si=Si< та >Ge=Si<, зокрема коливання їх як цілого, обертання та дифузії над рядом букльованих димерів >Si=Si< підкладинки свідчить, що всі вони відбуваються з невеликими енергіями активації (< 1 еВ), чисельні значення яких задовільно узгоджуються з результатами СТМ-експериментів, наявними в літературі. Виконані розрахунки рівноважної структури АК одного, двох атомів Германію та утвореної молекули Ge2 на поверхні плівки SiO2 на грані Si(001), а також їх рентгенофотоелектронних спектрів дозволяють визначати причини локалізації заряду на адсорбованих атомах Ge та на двоатомній молекулі Ge2.

2. Density functional theory (B3LYP, 6-31G**) has been employed for the investigation of the equilibrium spatial and electronic structure of adsorption complexes of one and two Ge atoms as well as diatomic molecule Ge2 with two different clusters: (i) Si96H84 which simulates the Si(001) buckled face and (ii) Si115H80+Si18O30H16 which reproduces an insulating layer on the crystal silicon surface. It is shown that the adsorption of one germanium atom takes place on the down atom of buckled surface >Si=Si< dimers and is accompanied by the energetic effect of 7.8 eV. Such a large adsorption energy indicates for down silicon atoms to be coordinationally unsaturated. Adsorption of the second germanium atom within the same cluster is also exothermic (1.5 eV with respect to the Si96H84•Ge cluster). Later on, as the result of the surface diffusion, a >Ge=Ge< addimer is formed over a number of >Si=Si< dimers in a parallel way. A diffusion of germanium atoms of that >Ge=Ge< surface dimer into the bulk phase is accompanied by the substitution of Si atoms by Ge atom followed by the formation of both mixed >Ge=Si< dimers and pure >Si=Si< ones. Chemical environment of germanium atoms in those adsorption complexes has been determined by the shift of the 3d5/2 component of the Ge3d line with respect to its original position in the Si96H84•Ge2 complex with >Ge=Ge< addimers. Such a shift turns out to be negative for adsorption complexes with the pure >Si=Si< dimer on the surface and two germanium atoms inside the crystalline substrate. 3d5/2 sublevel shift has been interpreted in terms of the "electrostatic potential", namely, binding energy of core electrons has been considered as a function of the effective charge of a given atom as well as effective charges of neighboring atoms. Transformation of five buckled surface dimers >Ge=Ge< >Ge=Si<, and >Si=Si< on the relaxed Si(001)(4×2) face has been investigated using DFT calculations (B3LYP, 6-31G**) of the Si28H28 cluster. In particular, energetic effects of the vibration of those dimers at fixed bond length and different buckling angles □ have been studied, and corresponding activation barriers have been calculated. For the >Ge=Si< addimer, activation barriers for the change of the orientation (A□B) have been evaluated within the same cell of the Si(001)(4×2) substrate surface, as well as for the diffusion between the adjacent cells. For all the three types of displacements of addimers >Ge=Ge<, >Si=Si<, and >Ge=Si< (in particular, their vibration as a whole, rotation, and diffusion over a number of buckled >Si=Si< dimers of the substrate), the activation energies turned out to be small, less than 1 eV. Such numerical values are in a satisfactory agreement with the STM data available in literature. Calculations performed by the doctoral candidate for the equilibrium structure and X-ray photoelectron spectra of the adsorption complex of one and two germanium atoms as well as diatomic molecule Ge2 on the surface of the SiO2 film covering the Si(001) surface allowed one to get an insight into the charge localization on the adsorbed Ge atoms and Ge2 molecule.

Державний реєстраційний номер ДіР:

Пріоритетний напрям розвитку науки і техніки:

Стратегічний пріоритетний напрям інноваційної діяльності:

Підсумки дослідження:

Публікації:

Наукова (науково-технічна) продукція:

Соціально-економічна спрямованість:

Охоронні документи на ОПІВ:

Впровадження результатів дисертації:

Зв'язок з науковими темами:

VI. Відомості про наукового керівника/керівників (консультанта)

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Лобанов Віктор Васильович
2. Lobanov Viktor V.

Кваліфікація: д. х. н., 01.04.18

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

Офіційні опоненти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Іванов Володимир Венедиктович
2. Ivanov Volodymyr V.

Кваліфікація: д. х. н., 02.00.04

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Стрижак Петро Євгенович
2. Stryzhak Petro Ye.

Кваліфікація: д. х. н., 02.00.15

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Рецензенти

VIII. Заключні відомості

Власне Прізвище Ім'я По-батькові голови ради	Картель Микола Тимофійович
Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні	Картель Микола Тимофійович
Відповідальний за підготовку облікових документів	
Реєстратор	

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності

Юрченко Т.А.