

Облікова картка дисертації (ОКД)

Шифр спецради: К 61.051.01

Відкрита

Вид дисертації: 04

Державний обліковий номер: 0406U002533

Дата реєстрації: 16-06-2006



1. Відомості про здобувача

ПІБ (укр.): АНАНЬІНА Ольга Юріївна

ПІБ (англ.): ANAN'YiNA Ol'ga Yuriyivna

Аспірантура: так

Шифр спеціальності, за якою відбувся захист: 01.04.10

Дата захисту: 26-05-2006

На здобуття наукового ступеня: к.ф.-м.н.

Спеціальність за освітою: 7/070101

2. Відомості про установу, організацію, у вченій раді якої відбувся захист

Назва організації: Ужгородський національний університет

Підпорядкованість: Міністерство освіти і науки України

Код ЄДРПОУ: 02070832

Адреса: 88000, м. Ужгород, вул. Університетська, 14

Телефон: 33341

Інше:

3. Відомості про організацію, де виконувалася (готувалася) дисертація

Назва організації: Запорізький національний університет

Підпорядкованість: Міністерство освіти і науки України

Код ЄДРПОУ: 02125243

Адреса: 69600, м. Запоріжжя, вул. Жуковського, 66

Телефон: 642392

Інше:

4. Відомості про організацію, де працює здобувач

Назва організації: Запорізький національний університет

Підпорядкованість: Міністерство освіти і науки України

Код ЄДРПОУ: 02125243

Адреса: 69600, м. Запоріжжя, вул. Жуковського, 66

Телефон: 642392

Інше:

5. Наукові керівники та консультанти

Наукові керівники

Яновський Олександр Сергійович (к.ф.-м.н., доц., 01.04.17)

6. Офіційні опоненти та рецензенти

Офіційні опоненти

Попик Юрій Васильович (д.ф.-м.н., професор, 01.04.10)

Гранкін Віктор Павлович (к.ф.-м.н., професор, 01.04.07)

7. Підсумки дослідження та кількісні показники

Підсумки дослідження: 40 - Нове вирішення актуального наукового завдання

Кількість сторінок: 150

Кількість додатків:

Ілюстрації: 61

Таблиці: 24

Схеми:

Використані першоджерела: 159

Кількість публікацій: 13

Кількість патентів:

Впровадження результатів роботи: 35

Мова документа: Українська

Зв'язок з науковими темами:

8. Індекс УДК тематичних рубрик НТІ

Індекс УДК: 537.311.322, 536.4:546.18/28

Тематичні рубрики: 29.19.31

9. Тема та реферат дисертації

Тема (укр.)

Квантово-хімічне моделювання процесів взаємодії водню, силану, атомів та іонів фосфору і бору з упорядкованими та дефектними поверхнями Si(100) і Ge(100)

Тема (англ.)

Quantum-chemical simulation of interaction processes of hydrogen, silane, phosphorus and boron atoms and ions with ordered and disordered Si(100) and Ge(100) surfaces

Реферат (укр.)

Дисертація присвячена дослідженню геометричних, енергетичних та електронних характеристик чистих поверхонь Si(100) і Ge(100), поверхонь з вакансійними дефектами та дефектами у вигляді адсорбованих атомів і іонів (H, P, P⁻, P⁺, B, B⁺). В роботі в рамках напівемпіричного методу MNDO проведено моделювання процесів адсорбції, десорбції, поверхневої міграції частинок адсорбату на поверхнях Si(100) і Ge(100). В роботі вирішується проблема врахування впливу ступеня покриття поверхонь воднем на механізм десорбції із моно- та дигідридних станів; встановлюється вплив вакансійних дефектів на адсорбційні властивості поверхонь. Розраховані енергетичні характеристики процесів взаємодії силану з поверхнями Si(100) і H/Si(100), встановлено механізми початкових стадій росту кремнієвих плівок. Розраховані хемосорбційні стани іонів та атомів фосфору і бору, що адсорбуються на поверхні Si(100) і Ge(100). Продемонстрована різниця в геометричних і електронних характеристиках цих станів.

Реферат (англ.)

Thesis deals with the study of geometric, energy and electronic characteristics of clean ordered Si(100) and Ge(100) surfaces, surfaces with vacancy defects and defects as adsorbed or implanted atoms and ions (H, P, P⁻, P⁺, B, B⁺). By means of MNDO semi-empirical method simulation of adsorption, desorption, surface migration, diffusion of adsorbed particles into semiconductor subsurface layers was carried out. The influence of hydrogen surface coverage on desorption mechanism from mono- and dihydride surfaces and the influence of vacancy defects on adsorption properties is studied in the work. Energy characteristics of interaction of silane with Si(100) and H/Si(100) surfaces are calculated, mechanisms of initial stages of silicon films growth are established. Chemisorption states of phosphorus and boron atoms and ions adsorbed on Si(100) and Ge(100) surfaces have been calculated. Difference in geometric and electronic properties of these states has been demonstrated.

Голова спеціалізованої вченої ради: Шимон Людвик Людвикович (к.ф.-м.н., професор)

Підпис

М.П.

Відповідальний за подання документів: (Тел.: (03122) 3-33-41)

Підпис

**Керівник відділу реєстрації наукової діяльності
УкрІНТЕІ**



Юрченко Т.А.