

ПАСИВАЦІЯ ПОВЕРХНІ ПЛІВКОВОГО КРЕМНІЮ ОРГАНІЧНИМИ МОНОШАРАМИ 1-ОКТАДЕЦЕНУ: РОЗРАХУНКИ ІЗ ПЕРШИХ ПРИНЦИПІВ

Р.М. Балабай, О.М. Чернікова

*Криворізький державний педагогічний університет, кафедра фізики
Україна*

Надійшла до редакції 20.01.2011

Отримані розподіли густини валентних електронів та електронні спектри для плівки Si з покриттям за допомогою методів функціоналу електронної густини та псевдопотенціалу із перших принципів. Показано, що змішане покриття поверхонь плівки Si(100) воднем та молекулами 1-октадецену до концентрації 10% приводить до зміни провідності плівки за рахунок стабілізації рівня Фермі додатковими станами у валентній та забороненій зонах плівки з покриттям. Показано, що пасивація поверхні плівки Si(100) воднем та молекулами 1-октадецену відбувається ще і за рахунок обмежених можливостей приповерхневого руху оксидантів як перпендикулярно так і паралельно поверхні плівки.

Ключові слова: плівка кремнію, пасивація поверхні, розрахунки із перших принципів, функціоналізація поверхні, алкілована поверхня.

Полученны распределения плотности валентных электронов и электронные спектры для пленки Si с покрытием с помощью методов функционала электронной плотности и псевдопотенциала из первых принципов. Показано, что смешанное покрытие поверхностей пленки Si(100) водородом и молекулами 1-октадецена в концентрации 10% приводит к изменению проводимости пленки за счет стабилизации уровня Ферми дополнительными состояниями в валентной и запрещенной зонах пленки с покрытием. Показано, что пассивация поверхности пленки Si(100) водородом и молекулами 1-октадецена происходит еще и за счет ограниченных возможностей приповерхностного движения оксидантов как перпендикулярно так и параллельно поверхности пленки.

Ключевые слова: пленка кремния, пассивация поверхности, расчеты из первых принципов, функционализация поверхности, алкилированная поверхность.

Distributions of the valence electron density and the electronic energy spectrum for the film of Si with coverage are received by the methods of the density functional theory and the first principal pseudopotential. It is observed that the mixed coverage of Si(100) surfaces by hydrogen and molecules of 1-octadecene with the 10% concentration cause a change conductivity of the Si film due to stabilization of the Fermi level by a appearance of additional states in its valence and bandgap. It is observed that the passivation of surface of Si(100) film by hydrogens and molecules of 1-octadecene is realized due to the limited possibilities of the surface perpendicular/parallel motion of oxidizers also.

Keywords: silicon film, passivation of surface, the first principal calculations, functionalization of surface, alkylation of surface.

ВСТУП

Цікавість до функціоналізації поверхні кремнію походить із необхідності пасивувати поверхню напівпровідника по відношенню до окислення на повітрі або у воді, з одного боку, і із іншого – по відношенню до процесів рекомбінації носіїв заряду на локалізованих електронних дефектних станах, пов'язаних з поверхнею. У виробництві напівпровідників, де переважно використовують поверхню кремнію орієнтації (100), пасивація поверхні щодо рекомбінації носіїв заряду відбувається

шляхом створення шару відпаленого при високій температурі окислу кремнію. Сформована таким чином високо впорядкована границя розподілу Si/SiO₂ обумовлює об'ємну структуру, що вільна від активних електронних дефектів [1]. Однак, ця технологія покриття окислом потребує значної теплової енергії, бо потрібно формування шару завтовшки, у крайній мірі, в декілька нанометрів. Так як розміри кремнієвих приладів стають все меншими, ця мінімальна товщина стає завадою, зважаючи на те, що пасивуючи шари

меншої товщини можуть мати суттєвий вплив на роботу мініатюрних пристроїв.

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧІ

В останні роки підвищилась цікавість до модифікації поверхні кремнію шляхом ковалентного прикріплення до неї атомних груп, ця, так звана, функціоналізація поверхні приводить до її пасивації і зміни властивостей підкладки [2 – 6]. Ковалентні зв'язки між атомами Si та C демонструють виняткову вигідність і з точки зору стабільності самого зв'язку у порівнянні з кремній-водневим зв'язком, і з боку багатства вибору схем реакцій органічної хімії для прикріплення підходящих функціональних груп.

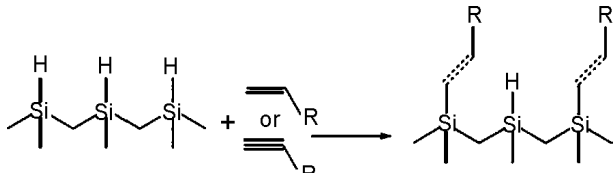


Рис. 1. Механізм реакції гідросилізації, що проходить через реакцію Si-H зв'язків з алкенами після активації теплом або світлом.

Спочатку методики функціоналізації для формування Si-C зв'язків використовували поверхню Si(111), завершену H-шаром, для реакції з ненасиченими алкенами через процеси з радикалами, каталізованими діаксил пероксидом [7]. Подалі, ці реакції були доповнені використанням ультрафіолетового або білого [8, 9] світла, теплової енергії [10], комплексів перехідних металів [11] та кислот Льюїса [12], щоб каталізувати їх, і поширилися на кристали кремнію з поверхнею (100) [10] та на пористий кремній [13].

Кремній-вуглецеві ковалентні зв'язки є привабливою альтернативою пасивуючому шару термічного окислу, бо ці зв'язки є дуже стабільними та значно зменшують активність алкілованої поверхні по відношенню до кисню, ці обидва фактори, в свою чергу, запобігають формуванню окислу і гальмують формування рекомбінаційних центрів як в об'ємі кремнію так і біля поверхні. Було продемонстровано [14 – 16], що поверхню Si(111) можна модифікувати, використовуючи двох кроковий процес хлорування/алкілування із споживанням реагентів Грігнарда (Grignard), що надає поверхні електричну і хімічну стабі-

лізацію. Як було показано, таким способом виготовлені поверхні значно знижують оксидацію на повітрі, зменшують поверхневу рекомбінацію і, просто, фізично блокують поверхню від атак оксидантів за рахунок додавання лінійних ланцюгів алкілових груп, що замінюють хімічно активні воднево-кремнієві зв'язки. Поверхня Si(111), завершена H-шаром, може бути приготовлена шляхом травлення в розчині NH_4F і представляє собою добре впорядковані тераси моногідрогенованих атомів кремнію, котрі охоплюють сотні нанометрів і містять тільки один зв'язок Si-H на поверхневий атом Si. Поверхня ж Si(100) не може бути приготовлена хімічним травленням так чисто. Фтористе травлення поверхні Si(100) виявляє декілька гібридних утворень, що включають SiH, SiH₂, SiH₃, і лишає поверхню нерівною на атомному масштабі. Ця нерівність поверхні представляє собою дуже велику проблему щодо пасивації у зв'язку з великою густиною поверхневих зв'язків для функціоналізації. Так, на поверхні Si(111), де не більше ніж одна алкілова група може бути зв'язана з кожним поверхневим атомом Si, кількість атомних позицій, що можуть бути функціоналізовані обмежуються простором, що займається атомами алкілових груп. Тоді як, для поверхні Si(100) доля місць функціоналізації може бути значно меншим у зв'язку з високою густиною Si-H_x зв'язків і не перпендикулярності кута зв'язку до поверхні. Однак, як алкілована поверхня Si(111), що формувалася за два кроки процедурою хлорування/алкілування, показувала виняткові електронні та окислювальні пасиваційні властивості, незважаючи на нещільне покриття поверхні алкілами [17], так і поверхня Si(100).

Досі недостатньо порівняльних досліджень для виявлення яке покриття є найкраще для пасивації поверхонь кристалічного Si. Що стосується пасивації поверхонь тонких плівок Si, то вплив типу поверхні та розподіл на ній атомів H чи інших пасиваторів потребує ще більшої уваги. Як перспективне пасивуюче покриття поверхонь кремнію зараз розглядаються органічні моношари, і, особливо, моношари із молекул класу алкінів $\text{CH}_2 = \text{CH} - (\text{CH}_2)_{n-3} \text{CH}_3$ для n із $10 < n < 22$ [6].

МОДЕЛІ ТА МЕТОДИ ОБЧИСЛЕННЯ

Пасиваційний ефект досліджувався в розрахунках із перших принципів. Результати були одержані за допомогою авторського програмного коду [18], що реалізує квантово-механічну динаміку Кар-Паррінелло з використанням локального наближення функціоналу електронної густини [19, 20] та нормозберігаючого псевдопотенціалу із перших принципів Бечелета, Хеменна, Шльотера [21]. Основні стани електронно-ядерних систем виявлялися за алгоритмом квантової динаміки, якщо одночасно оптимізувалися змінні електронної та ядерних підсистем, або шляхом діагоналізації матриці Кона-Шема, якщо визначалися тільки електронні змінні при фіксованих атомних остовах. Слідуючи Кону і Шему [19, 20], електронна густина записувалася в термінах зайнятих ортонормованих одночастинкових хвильових функцій:

$$n(\vec{r}) = \sum_i |\psi_i(\vec{r})|^2. \quad (1)$$

Точка на поверхні потенціальної енергії в наближенні Борна-Оппенгеймера визначалася мінімумом по відношенню до хвильових функцій енергетичного функціоналу:

$$E[\{\psi_i\}, \{R_j\}, \{\alpha_v\}] = \sum_i \int_{\Omega} d^3r \psi_i^*(\vec{r}) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \right] \times \psi_i(\vec{r}) + U[\{n(\vec{r})\}, \{R_j\}, \{\alpha_v\}], \quad (2)$$

де $\{R_j\}$ – координати атомних остовів, $\{\alpha_v\}$ – всі можливі зовнішні впливи на систему.

В загальноприйнятому формулюванні мінімізація енергетичного функціоналу (2) по відношенню до одночастинкових орбіталей при накладених на них додаткових умовах ортонормування приводить до одночастинкових рівнянь Кона-Шема:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \frac{\partial U}{\partial n(\vec{r})} \right\} \psi_i(\vec{r}) = \epsilon_i \psi_i(\vec{r}). \quad (3)$$

В даних розрахунках одночастинкова хвильова функція розкладалася в ряд за плоскими хвилями, довжина ряду вибиралася такою, щоб на один атом базису приходилося близько 30 плоских хвиль. В разі пошуку тільки електронних змінних при фіксованих атом-

них остовах обчислювалася матриця Кона-Шема для рівняння (3) при певному значенні хвильового вектора із зони Брилюєна штучної суперрешітки із тетрагональною елементарною коміркою, атомний базис якої визначав атомну систему, що досліджувалася. Матриця складалася із елементів на операторах кінетичної енергії та іонного псевдопотенціалу, що екранований діелектричною функцією в наближенні Томаса-Фермі. Діагоналізація цієї матриці після приведення її до дійсної тридіагональної форми далі відбувалася, використовуючи QL/QR алгоритм.

Для відтворення плівки кремнію із 6 атомних шарів і поверхнями (100) непокритими або покритими моношарами водню, або шарами із водню і молекул 1-октадецену – був створений атомний базис примітивної тетрагональної комірки суперрешітки, що складався або із 24 атомів, або із 40, або із 154 атомів (рис. 2), відповідно. При цьому параметри комірки були такими, щоб у напрямках X та Y змоделювати нескінченну поверхню плівки, а у напрямку Z – вільні поверхні (100) з пасивуючим покриттям. У площині, перпендикулярній поверхні, розмір підбирався таким, аби запобігти впливу одна на одну плівок, що трансляційно повторюються. При цьому, поверхня Si(100) використовувалася нереконструйованою; покриття поверхні воднем здійснювалося шляхом її завершення групою SiH₂; змішане покриття поверхні воднем та молекулами 1-октадецену утворювалося шляхом видалення 1 атому водню і підведення радикала молекули 1-октадецену (без 1 атому водню) атомом вуглецю до атома кремнію на відстань ковалентного зв'язку 2,37 Å під кутом, що зберігає тетраедричну орієнтацію зв'язків, і у концентрації 10% по відношенню до повного водневого покриття.

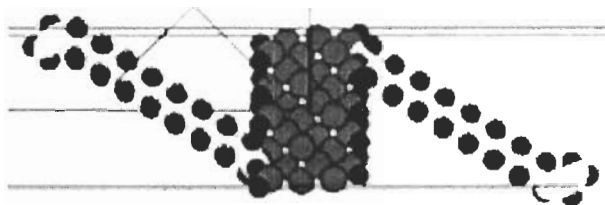


Рис. 2. Вид на елементарну комірку з атомним базисом, що відтворює плівку кремнію покрити з обох поверхонь воднем та молекулами CH₂=CH-(CH₂)₁₅CH₃ (1-октадецен).

РЕЗУЛЬТАТИ ОБЧИСЛЕННЯ ТА ЇХ ОБГОВОРЕННЯ

Із рис. 3а, б, в, г, д, на котрих зображені просторові розподіли електронної густини для плівки кремнію з поверхнями (100) і різними покриттями та для порівняння розподіл електронної густини для кристалу кремнію.

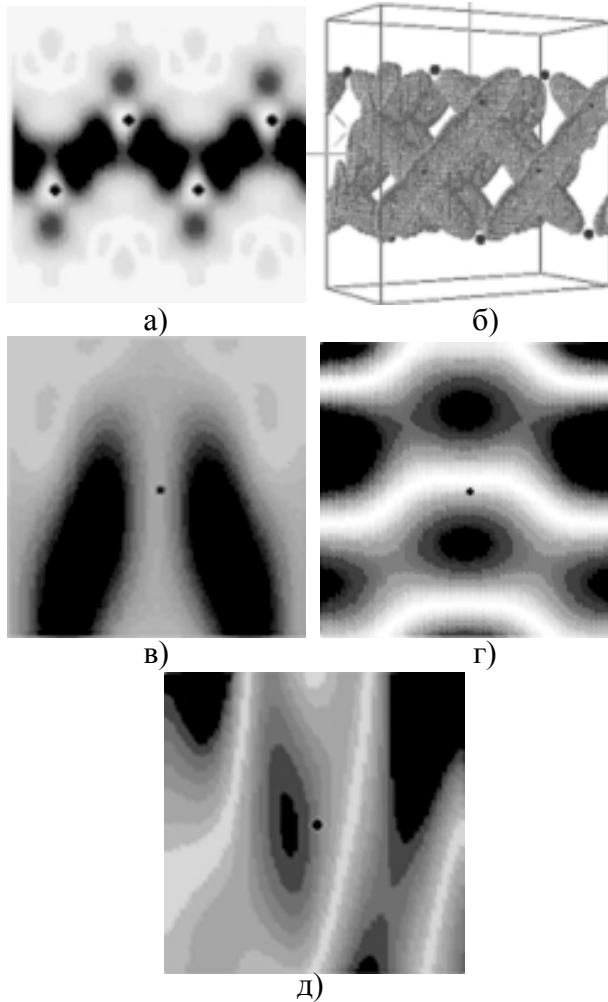


Рис. 3. Розподіл густини валентних електронів: а) – перетин в площині (110) просторового розподілу в кристалічному Si; б) – просторовий розподіл електронної густини для ізозначення 0,7 від максимального в плівці Si(100) без покриття (вид на елементарну комірку); в) – перетин в площині (110) просторового розподілу в плівці Si(100) без покриття біля атому із внутрішнього шару плівки; г) – перетин в площині (110) просторового розподілу в плівці Si(100) із Н-покриттям біля атому із внутрішнього шару плівки; д) – перетин в площині (110) просторового розподілу в плівці Si(100) із змішаним покриттям воднем та молекулами 1-октадецена біля атому із внутрішнього шару плівки.

Видно як суттєво впливає покриття поверхні плівки на перебудову розподілу валентних електронів у плівці. Зважаючи на те, що плівка дуже тонка, усього у 6 атомних шарів, і має вплив збоку двох поверхонь, перебудова

електронної густини відбувається по усій товщині плівки. Так, покриття поверхонь плівки воднем викликає зникнення характерних для sp^3 -гібридизації електронних розподілів – спостерігаються тільки сферично симетричні форми (див. рис. 3г). Що стосується змішаного покриття поверхні, то розподіл валентних електронів набуває шаруватих форм, орієнтованих перпендикулярно до поверхонь плівки.

На рис. 4 приводяться густини зайнятих станів для Γ – точки зони Бриллюена штучної суперрешітки відповідно зверху вниз для кристалічного кремнію, нескінченної плівки Si з непокритими та нереконструйованими поверхнями типу (100), плівки Si з водневим покриттям, для ізольованої молекули $CH_2=CH-(CH_2)_{15}CH_3$, плівки Si з покриттям із водню та молекул $CH_2=CH-(CH_2)_{15}CH_3$,

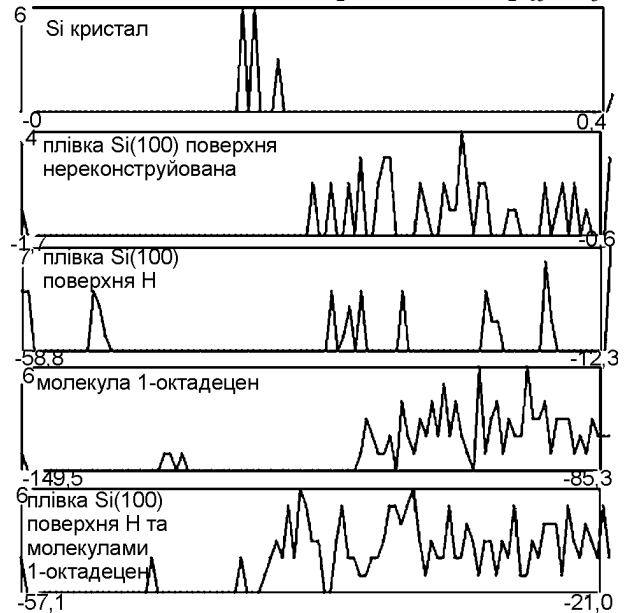


Рис. 4. Розподіл електронів по енергетичним зонам для Γ -точки зони Бриллюена суперрешітки з атомним базисом, що відтворює: кристал кремнію, чисту нескінченну плівку Si, плівку Si з водневим покриттям, ізольовану молекулу $CH_2=CH-(CH_2)_{15}CH_3$, плівку Si з покриттям із водню та молекул $CH_2=CH-(CH_2)_{15}CH_3$ (зверху вниз) По вертикальній вісі відкладено кількість станів, по горизонтальній – енергетичний діапазон в атомних одиницях. (Розрахунки проводяться для $T=0$ K, права границя відповідає положенню останнього зайнятого рівня, тобто енергії Фермі).

Порівнюючи характер розподілу електронних станів по енергіям заповненої зони (валентної) для названих об'єктів, можна виділити: характерні для кристалічного кремнію

чотири точки (дві накладаються) енергетичних кривих для хвильового вектора $\vec{k} = 0$ (Γ -точка) та область енергій забороненої зони – права границя показаного енергетичного діапазону відповідає останньому заповненому стану, тобто енергії Фермі (див рис. 4а); стани, відповідні за незакінчені зв'язки на поверхнях плівки (див рис. 4б); зникнення станів, пов'язаних з незавершеною поверхнею, поява областей заборонених енергій та розширення валентної зони у порівнянні як з кристалом так і незавершеною плівкою (рис. 4в); стабілізацію рівня Фермі додатковими станами у валентній та забороненій зонах плівки з покриттям із водню та молекул $\text{CH}_2 = \text{CH} - (\text{CH}_2)_{15}\text{CH}_3$ (рис. 4д).

На рис. 5 приводяться просторові розподіли валентних електронів для ізо-значення 0.1 від максимального для плівки кремнію покритої з обох поверхонь воднем (а) та воднем і молекулами $\text{CH}_2 = \text{CH} - (\text{CH}_2)_{15}\text{CH}_3$ (б). Форма цих розподілів із зникаючим значенням для електронної густини дає можливість оцінити розміри та форму молекул і степінь заповнення простору біля поверхні кремнію, що, в свою чергу дає можливість проілюструвати пасивацію поверхні за рахунок обмежених можливостей приповерхневого руху оксидантів як перпендикулярно так і паралельно поверхням плівки.

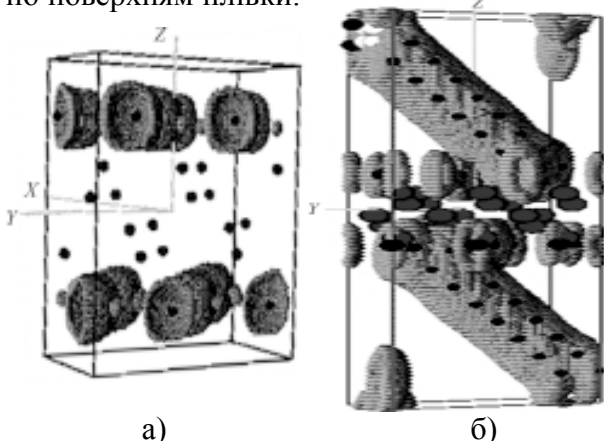


Рис. 5. Вид на елементарну комірку з атомним базисом та просторовим розподілом валентних електронів для ізо-значення 0.1 від максимального, що відтворює плівку кремнію покрити з обох поверхонь воднем – а) та воднем і молекулами $\text{CH}_2 = \text{CH} - (\text{CH}_2)_{15}\text{CH}_3$ – б).

ВИСНОВКИ

Методами функціоналу електронної густини та псевдопотенціалу із перших принципів отримані розподіли густини валентних електро-

нів та електронні енергетичні спектри для нескінченної плівки Si з непокритими та нереконструйованими поверхнями типу (100), плівки Si з водневим покриттям, для ізольованої молекули $\text{CH}_2 = \text{CH} - (\text{CH}_2)_{15}\text{CH}_3$, плівки Si з покриттям із водню та молекул $\text{CH}_2 = \text{CH} - (\text{CH}_2)_{15}\text{CH}_3$.

Покриття поверхні плівки суттєво впливає на перебудову розподілу валентних електронів у плівці. Зважаючи на те, що плівка дуже тонка, усього у 6 атомних шарів, і має вплив збоку двох поверхонь, перебудова електронної густини відбувається по усій товщині плівки.

Показано, що змішане покриття поверхонь плівки Si(100) воднем та молекулами 1-октадецену до концентрації 10% приводить до зміни провідності плівки за рахунок стабілізації рівня Фермі додатковими станами у валентній та забороненій зонах плівки з покриттям.

Показано, що пасивація поверхні плівки Si(100) воднем та молекулами 1-октадецену відбувається ще і за рахунок обмежених можливостей приповерхневого руху оксидантів як перпендикулярно так і паралельно поверхні плівки.

ЛІТЕРАТУРА

1. Yablonovitch E., Swanson R.M., Eades W.E., Weinberger B.R. Electron hole recombination at the Si/SiO₂ interface//Appl. Phys. Lett. – 1986. – Vol. 48. – P. 245-247.
2. Buriak, J.M. Organometallic Chemistry on Silicon and Germanium Surfaces//Chemical Rev. Phys. Lett. – 2002. – Vol. 102. – P. 1271-1308.
3. Buriak, J.M. Organometallic Chemistry on Silicon Surfaces: Formation of Monolayers Bound Through Si-C Bonds//J. Chem. Soc., Chemical Communications. – 1999. – P. 1051-1060.
4. Haber J.A., Lauermaun I., Michalak D., Vaid T.P., Lewis N.S. Electrochemical and Electrical Behavior of (111)-Oriented Si Surfaces Alkoxylated through Oxidative Activation of Si-H Bonds //J. Phys. Chem. – 2000. – Vol. 104. – P. 9947-9950.
5. Stewart M.P., Robins E.G., Geders T.W., Allen M.J., Choi H.C., Buriak, J.M. Three Methods for Stabilization and Functionalization of Porous Silicon Surfaces via Hydrosilylation and Electrografting Reactions//J. Phys. Stat. Sol. (a). – 2000. – Vol. 182. – P. 109-115.

6. Антонова И.В. и др. Электрическая пассивация поверхности кремния органическими монослоями 1-октадецена//Физика и техника полупроводников. – 2007. – Т. 41, Вып. 8. – С. 1010-1016.
7. Linford M.R., Fenter P.C., Eisenberger P.M., Chidsey C.E. Alkyl Monolayers on Silicon: Reaction of 1-Alkenes with Hydrogen-Terminated Silicon //D. J. Am. Chem. Soc. – 1995. – Vol. 117. – P.3145-3155.
8. Terry J., Mo R., Wigren C., Cao R.Y., Mount G., Pianetta P., Linford M.R., Chidsey C.E.//D. Nucl. Instrum. Meth. – 1997. – Vol. 133. – P. 94-101.
9. Effenberger F., Gotz G., Bidlingmaier B., Wezstein M.A. Theoretical Investigation of the Structure and Coverage of the Si(111) – OCH₃ Surface//Chem. Int. Ed. – 1998. – Vol. 37. – P. 2462-2464.
10. Sieval A.B., Demirel A.L., Nissink J.W.M., Linford M.R., van der Maas J.H., et al. Highly Stable Si-C Linked Functionalized Monolayers on the Silicon (100) Surface//Langmuir. – 1998. – Vol. 14. – P. 1759-1768.
11. Zazzera L.A., Evans J.F., Deruelle M., Tirrell M., Kessel C.R., Mckeown P. Bonding organic molecules to hydrogen-terminated silicon wafers// J. Electrochem. Soc. – 1997. – Vol. 144. – P. 2184-2189.
12. Holland J.M., Stewart M.P., Allen M.J., Buriak J.M. Metal Mediated Reactions on Porous Silicon Surfaces//J. Solid State Chem. – 1999. – Vol. 147. – P. 251-258.
13. Stewart M.P., Buriak J.M. Photopatterned Hydrosilylation on Porous Silicon//Angew. Chem. Int. Ed. Eng. – 1998. – Vol. 23. – P. 3257.
14. Royea W.J., Juang A., Lewis N.S. Preparation of air-stable, low recombination velocity Si(111) surfaces through alkyl termination//Appl. Phys. Lett. – 2000. – Vol. 77. – P. 1988-1990.
15. Nemanick E.J., Hurley P.T., Brunschwig B.S., Lewis N.S. Electrochemical and Thermal Grafting of Alkyl Grignard Reagents onto (100) Silicon Surfaces//J. Phys. Chem. B. – 2005.
16. Балабай Р.М. Обчислювальні методи із перших принципів у фізиці твердого тіла: квантово-механічна молекулярна динаміка. – Кривий Ріг: Видавничий дім, 2009. – 123 с.
17. Hohenberg P., Kohn W. Inhomogeneous electron gas//Phys. Rev. A.– 1964. – Vol. 2. – P. 864-871.
18. Kohn W., Sham L.J. Self-consistent equations including exchange and correlation effects//Phys. Rev. B. – 1965. – Vol. 140. – P. 1133-1137.
19. Bachelet G.B., Hamann D.R., Schluter M. Pseudopotentials that work: from H to Pu//Phys. Rev. B. – 1982. – Vol. 26. – P. 4199-4228.

LITERATURA

1. Yablonovitch E., Swanson R.M., Eades W.E., Weinberger B.R. Electron hole recombination at the Si SiO₂ interface//Appl. Phys. Lett. – 1986. – Vol. 48. – P. 245-247.
2. Buriak, J.M. Organometallic Chemistry on Silicon and Germanium Surfaces//Chem. Rev. Phys. Lett. – 2002. – Vol. 102. – P. 1271-1308.
3. Buriak, J.M. Organometallic Chemistry on Silicon Surfaces: Formation of Monolayers Bound Through Si-C Bonds//J. Chem. Soc., Chem. Communications. – 1999. – P. 1051-1060.
4. Haber J.A., Lauermaier I., Michalak D., Vaid T.P., Lewis N.S. Electrochemical and Electrical Behavior of (111)-Oriented Si Surfaces Alkoxylated through Oxidative Activation of Si-H Bonds //J. Phys. Chem. – 2000. – Vol. 104. – P. 9947-9950.
5. Stewart M.P., Robins E.G., Geders T.W., Allen M.J., Choi H.C., Buriak, J.M. Three Methods for Stabilization and Functionalization of Porous Silicon Surfaces via Hydrosilylation and Electrografting Reactions//J. Phys. Stat. Sol. (a). – 2000. – Vol. 182. – P. 109-115.
6. Antonova I.V. i dr. Elektricheskaia passivatsiia poverkhnosti kremniia organicheskimi monosloyami 1-oktadetsena//Fizika i tekhnika poluprovodnikov. – 2007. – Т. 41, Vyp. 8. – S. 1010-1016.
7. Linford M.R., Fenter P.S., Eisenberger P.M., Chidsey C.E. Alkyl Monolayers on Silicon: Reaction of 1-Alkenes with Hydrogen-Terminated Silicon//D. J. Am. Chem. Soc.– 1995. – Vol. 117. – P.3145-3155.
8. Terry J., Mo R., Wigren C., Cao R.Y., Mount G., Pianetta P., Linford M.R., Chidsey C.E.//D. Nucl. Instrum. Meth. – 1997. – Vol. 133. – P. 94-101.
9. Effenberger F., Gotz G., Bidlingmaier B., Wezstein M.A. Theoretical Investigation of the Structure and Coverage of the Si(111) – OCH₃ Surface//Chem. Int. Ed. – 1998. – Vol. 37. – P. 2462-2464.
10. Sieval A.B., Demirel A.L., Nissink J.W.M., Linford M.R., van der Maas J.H., et al. Highly Stable Si-C Linked Functionalized Monolayers on the Silicon (100) Surface//Langmuir. – 1998. – Vol. 14. – P. 1759-1768.
11. Zazzera L.A., Evans J.F., Deruelle M., Tirrell M., Kessel C.R., Mckeown P. Bonding organic molecules to hydrogen-terminated silicon wafers//

- J. Electrochem. Soc. – 1997. – Vol. 144. – P. 2184-2189.
12. Holland J.M., Stewart M.P., Allen M.J., Buriak J.M. Metal Mediated Reactions on Porous Silicon Surfaces//J. Solid State Chem. – 1999. – Vol. 147. – P. 251-258.
13. Stewart M.P., Buriak J.M. Photopatterned Hydrosilylation on Porous Silicon//Angew. Chem. Int. Ed. Eng. – 1998. – Vol. 23. – P. 3257.
14. Royea W.J., Juang A., Lewis N.S. Preparation of air-stable, low recombination velocity Si(111) surfaces through alkyl termination//Appl. Phys. Lett. – 2000. – Vol. 77. – P. 1988-1990.
15. Nemanick E.J., Hurley P.T., Brunshwig B.S., Lewis N.S. Electrochemical and Thermal Grafting of Alkyl Grignard Reagents onto (100) Silicon Surfaces//J. Phys. Chem. B. – 2005.
16. Balabay R.M. Obchislyuvalni metodi iz pershikh printsiyiv u fizitsi tverdogo tila: kvantovomekhanichna molekulyarna dinamika. – Kriviy Rig: Vidavnichiy dim, 2009. – 123 s.
17. Hohenberg P., Kohn W. Inhomogeneous electron gas//Phys. Rev. A.– 1964. – Vol. 2. – P. 864-871.
18. Kohn W., Sham L.J. Self-consistent equations including exchange and correlation effects//Phys. Rev. B. – 1965. – Vol. 140. – R. 1133-1137.
19. Bachelet G.V., Hamann D.R., Schluter M. Pseudopotentials that work: from H to Pu//Phys. Rev. B. – 1982. – Vol. 26. – P. 4199-4228.