

# ИССЛЕДОВАНИЕ ЭНЕРГЕТИКИ АДсорбЦИИ МОЛЕКУЛЫ ВОДОРОДА НА ПОВЕРХНОСТЬ МЕДИ (100) МЕТОДОМ ФУНКЦИОНАЛА ПЛОТНОСТИ.

Студент гр. 113414 Ткачевич В.В.,

студентка гр. 113425 Ланюк А.А.,

доктор техн. наук, профессор А.Л. Зайцев

*Белорусский национальный технический университет*

Медные пленки широко используются в технологии радиоэлектроники. В некоторых ответственных технологических процессах изготовления интегральных схем для устранения окисления в качестве защитной среды используется водород, который может адсорбироваться на поверхность медной нанокристаллической меди и изменять ее электрофизические свойства. Кроме экспериментальных методов исследования наиболее эффективным способом прогнозирования процессов адсорбции молекулярного водорода на поверхность металла является метод функционала электронного плотности, который позволяет рассчитывать энергетику взаимодействия и геометрию стабильных структур в системе «поверхность металла – молекула».

Целью данной работы является расчет энергии взаимодействия молекулы водорода с поверхностью меди (100) при ее последовательном приближении. Расчеты выполнены с использованием программы «ABINIT», позволяющей производить вычисления полной энергии и структурную оптимизацию атомно-молекулярной системы в рамках теорий функционала плотности и псевдопотенциалов. В качестве модели поверхности металла использовали периодическую ячейку, моделирующую пятислойную нанокристаллическую пластину алюминия с гранцентрированной решеткой. При проведении расчетов использовался алгоритм структурной оптимизации. Моделирование взаимодействия валентных электронов алюминия проводили с использованием сохраняющих норму псевдопотенциалов Трулье-Мартинса при ограничении кинетической энергии электронов выбрано равным 25 Хартри. Ширина вакуумной зоны периодической ячейки равнялась 16 Å.

Результаты расчетов позволили установить зависимость полной энергии системы от расстояния молекулы водорода от поверхности (граничного атомного слоя) меди. Определены энергия физической и химической адсорбции водорода. Показано, что для хемосорбции водорода характерны две устойчивые пространственные конфигурации, которые соответствуют адсорбции водорода на вершинный атом меди и мостиковое расположение атома водорода между двумя вершинными атомами. Определен энергетический барьер перехода молекулы водорода из физического в хемосорбционное состояние (0,27 – 0,4 эВ).

В результате исследований установлено, что молекула водорода в процессе адсорбции и диффузии не подвергается полной диссоциации, а существенно растягивается, причем расстояние между атомами не превышает параметра кристаллической решетки меди. поверхностью металла.