

1. “Структурные трансформации на поверхностях Si(111) и Ge(111) под воздействием упругих напряжений”.

2. н.с., к.ф.-м.н. Жачук Руслан Анатольевич (расчеты, ТФП), zhachuk@gmail.com,

с.н.с., к.ф.-м.н. Гийс Сергей Александрович (эксперимент, СТМ), teys@isp.nsc.ru

3.1. Упругие напряжения возникают при гетероэпитаксиальном росте, когда постоянные решеток подложки и растущей пленки не совпадают, вблизи дефектов на поверхности, на ступенчатых поверхностях вблизи краев ступеней и др. Они влияют на структуру поверхности, диффузию адсорбированных атомов, и, в конечном счете, на рост тонких пленок и формирование наноструктур.

Германий на кремнии является типичным примером напряженной системы, имеющей большой технологический потенциал. Исследование роста Ge на подложках Si интересно по нескольким причинам. Во-первых, эта система может служить основой для новых высокочастотных полупроводниковых устройств, при этом можно использовать технологии, разработанные и используемые в настоящее время для Si. Во-вторых, была показана возможность формирования структурно совершенных Ge/Si наноструктур типа нанопроволок и наноколец, которые могут найти применение в качестве отдельных структурных блоков в будущих нанoeлектронных устройствах. В третьих, система Ge/Si является модельной для изучения роста напряженных слоев по механизму Странского-Крастанова. Технологический недостаток этой системы состоит в том, что трудно вырастить эпитаксиальную сплошную плёнку Ge на Si. Из-за рассогласования постоянных решеток германия и кремния, которое составляет около 4%, слой Ge на Si напряжен. После формирования нескольких эпитаксиальных сплошных слоев, происходит формирование островков (механизм роста Странского-Крастанова). Это сопровождается трансформацией атомной структуры поверхности Ge. Целью настоящей работы было установить соответствие между структурой поверхностей Si(111) и Ge(111) и приложенными латеральными напряжениями.

3.2. Хотя имеется общее понимание того, что изменение величины упругих напряжений должно приводить к изменению структуры поверхности [1], тем не менее, отсутствуют сколько-нибудь точные количественные данные. Это вызвано тем, что существующие данные основаны либо на упрощенных моделях реконструкции поверхности и использовании эмпирических потенциалов, либо на использовании расчетов, основанных на методе сильной связи [2, 3]. Точность вычисления энергии формирования поверхности в этих методах невысока. Отсутствие точных данных, а именно, зависимости структуры поверхностей Si(111) и Ge(111) от упругих

напряжений решётки, препятствует дальнейшему прогрессу в этой области науки о поверхности.

3.3-3.4. Работа была выполнена с использованием методов сканирующей туннельной микроскопии и расчетов, основанных на теории функционала плотности с применением программного пакета Siesta. На рис. 1 и 2 представлены рассчитанные зависимости энергии поверхностей Si(111) и Ge(111) от величины упругих напряжений и различных реконструкций поверхности, наблюдаемых в экспериментах. Реконструкции, обеспечивающие наименьшую энергию поверхности при данном значении упругого напряжения, являются равновесными. Можно видеть, что имеется тенденция изменения структуры $c(2\times 8)\rightarrow 7\times 7\rightarrow 5\times 5$ при переходе от напряжения растяжения к сжатию. Это справедливо как для поверхности Si(111), так и для поверхности Ge(111). Исходя из рассчитанной фазовой диаграммы можно заключить, что все остальные структуры, наблюдаемые в экспериментах, являются метастабильными. Сравнение экспериментальных и расчетных данных показало, что построенные фазовые диаграммы могут объяснить последовательность структурных изменений, наблюдаемых в напряженной системе Ge/Si(111) во время роста. Таким образом, использование расчетов на основе ТФП позволило прояснить природу изменений структуры поверхности, наблюдаемых в экспериментах во время роста Ge на Si(111). Построенная фазовая диаграмма позволяет по наблюдаемой структуре поверхности оценить величину упругих напряжений верхних атомных слоев.

3.5.

Рис. 1. Энергия формирования поверхности Si(111) в зависимости от двухосевых упругих напряжений ϵ_b и реконструкции поверхности.

Рис. 2. Энергия формирования поверхности Ge(111) в зависимости от двухосевых упругих напряжений ϵ_b и реконструкции поверхности.

Литература

[1] H.-J. Gossmann, J.C. Bean, L.C. Feldman et al., Phys. Rev. Lett. **55**, 1106 (1985).

[2] D. Vanderbilt, Phys. Rev. Lett. **59** (1987) 1456.

[3] J.L. Mercer, M.Y. Chou, Phys. Rev. B **48**, 5374 (1993).

4. Результаты работы опубликованы в R. Zhachuk, S. Teys, and J. Coutinho, "Strain-induced structure transformations on Si(111) and Ge(111) surfaces: A combined density-functional and scanning tunneling microscopy study", Journal of Chemical Physics (Impact Factor 2.894) **138**, 224702 (2013). DOI: 10.1063/1.4808356

5. Предоставленные вычислительные ресурсы кластера достаточны для решения большинства возникающих задач. Имеется потребность в приобретении программного пакета для расчетов из первых принципов VASP (Vienna Ab-initio Simulation Package, https://en.wikipedia.org/wiki/Vienna_Ab_initio_Simulation_Package). Данный программный пакет наиболее широко используем научными группами и является своего рода стандартом качества получаемых результатов. При необходимости можно составить презентацию сравнительных характеристик пакетов VASP и Siesta.