

“Статические и динамические изгибы элементов реконструкции тройных ступеней  
на поверхности Si(111)”

Научный сотрудник Р. А. Жачук (моделирование, ТФП),

старший научный сотрудник С. А. Тийс (эксперимент, СТМ)

*Институт физики полупроводников СО РАН, 630090 Новосибирск, Россия*

Тройные ступени на поверхности Si(111) широко используются для роста упорядоченно расположенных наноструктур однородных размеров. В проведенной работе мы использовали регулярную ступенчатую поверхность Si(7 7 10) в качестве модельной системы для изучения тройных ступеней с помощью сканирующей туннельной микроскопии (СТМ) и расчетов на основе теории функционала плотности (ТФП) (рис. 1a, b). В случае роста на ступенчатой поверхности регулярная ступенчатая структура определяет как положение, так и размер растущих нанопроволок и наноточек. Несмотря на то, что тройные ступени являются важной частью ландшафта поверхностей Si(111), их атомная структура до сих пор не является твердо установленной. Целью работы является установление структуры элементов реконструкции тройных ступеней и причин формирования их определенных изгибов.

В расчетах использовали атомную модель поверхности Si(7 7 10), предложенную нами ранее (рис. 1c) [Surface Science 600, 4878 (2006)], состоящую из: цепочек Зейваца (*ZR*), блоков из трех димеров (*TDU*) и димеров  $D_3^{\parallel}$  на краю террас (111). Расчеты проводили с использованием программных пакетов Siesta и Aimpro, основанных на ТФП.

Расчеты показывают, что элементы реконструкции *ZR*, *TDU* и  $D_3^{\parallel}$  подвержены изгибу. При комнатной температуре димеры  $D_3^{\parallel}$  постоянно переключаются из одного изогнутого состояния в противоположное (симметричное), так как барьер на переключение порядка тепловой энергии  $kT$ . В результате на СТМ картинах изображения этих димеров симметричные (рис. 2). В то же время изгиб элементов реконструкции *ZR* и *TDU* при комнатной температуре статичен. Каждый из элементов *ZR* и *TDU* может изгибаться в двух, асимметричных к поверхности направлениях. Таким образом, рассматривая все возможные комбинации изогнутых элементов *ZR* и *TDU*, мы получаем 4 возможных состояния поверхности, отличающихся по энергии. Были рассчитаны энергии и атомные конфигурации всех возможных состояний края тройной ступени и определено ее основное состояние. На основе рассчитанного основного состояния поверхности Si(7 7 10) была рассчитана локальная плотность электронных состояний (ЛПЭС). Были смоделированы СТМ изображения и проведено сравнение с экспериментальными СТМ изображениями,

полученными при обеих полярностях приложенного напряжения. Значительное сходство экспериментальных и смоделированных СТМ изображений свидетельствует в пользу модели поверхности  $\text{Si}(7 \times 7 \times 10)$ , предложенной нами ранее. Визуализация распределения ЛПЭС позволила выявить причину формирования определенных изгибов элементов  $ZR$  и  $TDU$ , состоящую в минимизации кулоновской энергии взаимодействия отдельных элементов реконструкции между собой. Так, изгиб элементов  $TDU$  вызван кулоновским взаимодействием адатомов на мини (111) террасе с димерами, входящими в состав  $TDU$ . Изгиб элементов  $ZR$  вызван кулоновским взаимодействием верхних атомов цепочки Зейваца с электронами в верхнем атомном слое террас (111).

Работа в основном выполнена с использованием вычислительных мощностей кластера ИВЦ НГУ. Благодаря расчетам на основе ТФП удалось определить основное состояние поверхности и энергии возбужденных состояний. Была рассчитана геометрия изогнутых элементов реконструкции тройных ступеней. Путем моделирования гипотетических поверхностей (не существующих в природе) удалось установить механизм изгиба отдельных элементов реконструкции тройных ступеней на поверхности  $\text{Si}(111)$ . Результаты расчетов хорошо согласованы с экспериментальными данными сканирующей туннельной микроскопии.

Результаты работы опубликованы в статье R. Zhachuk, S. Teys, J. Coutinho, M. J. Rayson, and P. R. Briddon, “Static and dynamic buckling of reconstructions at triple steps on  $\text{Si}(111)$  surfaces” *Applied Physics Letters* (Impact Factor: 3.52). 10/2014; 105(10):171602-14904. DOI: 10.1063/1.4900783.

Предоставленные вычислительные ресурсы кластера достаточны для решения большинства возникающих задач. Хотелось бы увидеть на сайте [www.nusc.ru](http://www.nusc.ru) отчеты о проделанной работе всех пользователей кластера с публикациями. Это позволило бы ориентироваться в работах, выполняемых на кластере, и, возможно, привело бы к сотрудничеству между отдельными научными группами.

Подписи к рисункам

Рис. 1. (а) СТМ изображение чистой поверхности  $\text{Si}(7 \times 7 \times 10)$  с тройными ступенями. (б) Край тройной ступени на поверхности  $\text{Si}(7 \times 7 \times 10)$ . Пунктирной линией обведена ячейка моделирования. (с) Атомная модель тройной ступени. Элементы реконструкции показаны без изгибов. Красным/синим цветами обозначены атомы, являющиеся акцепторами/донорами электронов в основном состоянии поверхности.

Рис. 2. Экспериментальные изображения СТМ края тройной ступени и контуры ЛПЭС для основного состояния поверхности.