

1. Тема работы: “Структура напряжённых слоёв Si на поверхности Ge(111)”.

2. Состав коллектива:

Жачук Руслан Анатольевич, ИФП СО РАН, с. н. с., к.ф.-м.н. (расчёт),

Долбак Андрей Евгеньевич, ИФП СО РАН, н. с., к.ф.-м.н. (эксперимент).

3. Информация о гранте:

Российский грант отсутствует. Работа выполнена при поддержке фонда науки и технологии Португалии (FCT), номер гранта UID/CTM/50025/2013.

4. Научное содержание работы.

4.1. Аннотация к работе.

С помощью методов дифракции медленных электронов (ДМЭ), сканирующей туннельной микроскопии (СТМ) и расчетов на основе теории функционала плотности (ТФП) была исследована структура напряжённых слоёв Si(111), сформированных на поверхности Ge(111). Показано, что поверхность таких слоёв содержит домены структуры  $c(2\times 4)$ , разделённые доменными стенками в направлениях  $\langle \bar{1}10 \rangle$ . Предложены атомные модели структуры  $c(2\times 4)$  и доменных стенок, хорошо согласующиеся с данными СТМ, ДМЭ и приводящие к низкой энергии поверхности. С помощью расчетов на основе ТФП показано, что атомы Si с оборванными связями на поверхности (адатомы и рест-атомы) должны замещаться атомами Ge подложки и это должно приводить к значительному уменьшению энергии поверхности и формированию доменных стенок. Экспериментально и теоретически показано, что структура поверхности Si(111) при деформации растяжения изменяется от  $7\times 7$ , основанной на димерах, адатомах и дефектах упаковки (dimer-adatom-stacking fault, DAS) к структуре  $c(2\times 4)$ , состоящей из одних лишь адатомов.

4.2. Современное состояние проблемы.

Система Ge-Si является модельной системой для изучения роста напряжённых слоёв. В то время как имеется множество работ, посвященных росту Ge на поверхности Si, в литературе почти полностью отсутствует информация о росте слоёв Si на поверхности Ge. При росте Si на поверхности Ge(111), слои кремния должны быть под воздействием напряжения растяжения, так как параметр решетки у германия больше, чем у кремния. В соответствии с результатами наших расчетов, при изменении деформации слоёв от сжатия к растяжению, на поверхностях Si(111) и Ge(111) должно наблюдаться изменение от DAS-структур ( $7\times 7$ ,  $5\times 5$ , ...) к структурам, основанных на адатомах ( $2\times 2$ ,  $c(2\times 4)$ ,  $c(2\times 8)$ , ...) [1]. Целью этой работы было изучить структуру напряжённых слоёв Si на Ge(111) экспериментально и теоретически.

#### 4.3.-4.4 Подробное описание работы, включая используемые алгоритмы; Полученные результаты.

С помощью методов дифракции медленных электронов (ДМЭ), сканирующей туннельной микроскопии (СТМ) и расчетов на основе теории функционала плотности (ТФП) была исследована структура напряжённых слоев Si(111), сформированных на поверхности образцов Ge(111) и на вершинах релаксированных 3D островков Ge/Si(111). Расчеты выполнены на основе ТФП с использованием программного пакета Siesta (<https://www.icmab.es/siesta>).

Показано, что зависимость расчётной структуры поверхности Si(111) от упругих напряжений на рис. 1 согласуется с экспериментальными наблюдениями. А именно, было продемонстрировано, что поверхность Si(111) при приложении напряжений растяжения содержит домены адатомной структуры  $c(2\times 4)$ , разделённые доменными стенками (рис. 2). Это отличается от режимов релаксированной или упруго-сжатой поверхности Si(111), при которых наблюдаются dimer-adatom-stacking fault (DAS) структуры  $7\times 7$  и  $5\times 5$  соответственно [1]. Предложена атомная модель структуры  $c(2\times 4)$  и доменных стенок, согласующаяся с данными СТМ, ДМЭ и приводящая к низкой энергии поверхности. С помощью СТМ и ДМЭ была определена средняя ширина доменов структуры  $c(2\times 4)$ .

В соответствии с результатами расчётов формирование доменных стенок на чистой поверхности Si(111) энергетически не выгодно и поэтому они не должны возникать в условиях термодинамического равновесия (рис. 3). С помощью расчетов на основе ТФП показано, что перемешивание атомов Si и Ge с замещением атомов Si с оборванными связями на поверхности (адатомы и рест-атомы) атомами Ge должно приводить к значительному уменьшению энергии поверхности. Так как число оборванных связей в доменной стенке в два раза больше, чем в структуре  $c(2\times 4)$ , то с учётом перемешивания атомов Si и Ge формирование доменных стенок структуры  $c(2\times 4)$  становится энергетически выгодным и может объяснить наблюдение доменных стенок в эксперименте.

#### 4.5 Иллюстрации, визуализация результатов.

Рис. 1. Экспериментальное СТМ изображение высокого разрешения поверхности Ge(111) после напыления двух бислоев Si при  $T = 540$  °C. На изображении видна атомная ступень, отделяющая разные по высоте террасы в левой и правой частях изображения. Релаксированная часть поверхности Si имеет структуру  $7\times 7$ , а деформированные слои Si имеют структуру  $c(2\times 4)$  с доменными стенками. Стрелками показано направление релаксации напряжённых слоёв.

Рис. 2. Расчётные энергии формирования поверхности Si(111) со структурами  $7 \times 7$ ,  $c(2 \times 4)$ ,  $c(2 \times 8)$ ,  $2 \times 2$ ,  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$  для различных значений деформации растяжения.

Рис. 3. Зависимость расчётной энергии поверхности Si(111) от типа доменной стенки (DW type) и ширины домена (DW width) при деформации растяжения слоя кремния +4.0%.

#### Литература:

[1] R. Zhachuk, S. Teys, J. Coutinho, J. Chem. Phys. 138, 224702 (2013).

#### 5. Эффект от использования кластера в достижении целей работы.

Надежная интерпретация СТМ изображений высокого разрешения невозможна без компьютерного моделирования этих изображений и расчета энергии формируемой атомной структуры на основе ТФП. Основные результаты этой работы основаны на расчетах, выполненных с использованием кластера НГУ.

#### 6. Перечень публикаций, содержащих результаты работы.

1) R. Zhachuk, J. Coutinho, A. Dolbak, V. Cherepanov, B. Voigtländer, "Si(111) strained layers on Ge(111): Evidence for  $c(2 \times 4)$  domains", Physical Review B (Impact Factor: 3.836), 96, 085401 (2017). DOI: 10.1103/PhysRevB.96.085401

#### 7. Впечатления от работы вычислительной системы и деятельности ИВИЦ НГУ, а также предложения по их совершенствованию.

Наши сравнительные тесты скорости выполнения задач на blade-серверах кластера НГУ и на новом кластере в университете г. Авейро (Португалия) показали, что скорость выполнения задач на кластере в г. Авейро примерно в 10 раз выше, чем на кластере, установленном в НГУ. Это, по-видимому, связано с более новым оборудованием кластера в г. Авейро по сравнению с оборудованием, установленным в НГУ. Хотелось бы, чтобы кластер НГУ работал со скоростью не меньше, чем кластеры у наших зарубежных коллег.

В настоящее время для расчетов используется бесплатный пакет программ Siesta (<https://departments.icmab.es/leem/siesta>), который ограничен в некоторых своих возможностях. Приобретение коммерческого программного обеспечения VASP (<https://www.vasp.at>) позволило бы повысить качество получаемых результатов. 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.