

1. Тема работы: “Атомная структура поверхности Ge(331)-5×1”.

2. Состав коллектива:

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

Жозе Кутиньо, университет г. Авейро (Португалия).

3. Информация о гранте:

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант 18-02-00025).

4. Научное содержание работы.

4.1. Аннотация к работе.

Высокоиндексные поверхности кремния и германия широко используются в качестве подложек для выращивания упорядоченно расположенных наноструктур [1]. В этой работе разработана модель атомной структуры высокоиндексной поверхности Ge(331)-5×1. Модель построена на основе структурного блока поверхности Si(331)-12×1, состоящего из пентамера с межузельным атомом [2]. С помощью расчетов из первых принципов, основанных на теории функционала плотности, было показано, что предложенная модель поверхности приводит к низкой энергии формирования поверхности и хорошо согласуется с изображениями поверхности Ge(331)-5×1, полученными с помощью сканирующей туннельной микроскопии (СТМ) и имеющимися в литературе [3]. Таким образом, было продемонстрировано, что поверхность Ge(331)-5×1 принадлежит семейству поверхностей, стабилизированных пентамерами с межузельными атомами, а именно Si(331), Si(113), Ge(113), Si(110), Ge(110).

4.2. Современное состояние проблемы.

Поверхность Ge(331) является одной из немногих стабильных поверхностей германия. Известно, что чистая поверхность реконструирована и имеет периодичность 5×1. Была предложена одна атомная модель этой поверхности [3], однако надежность модели ранее не проверяли расчетами из первых принципов. Известно, что атомные модели, предложенные без применения таких расчетов, впоследствии часто оказывались ошибочными. Цель данной работы построение реалистичной модели поверхности Ge(331)-5×1.

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

С помощью расчетов из первых принципов исследована структура чистой поверхности Ge(331)-5×1. Расчеты выполнены на основе теории функционала плотности с использованием программного пакета Siesta (<https://departments.icmab.es/leem/siesta>). Критериями корректности атомной модели являются минимальная расчетная энергия

формирования поверхности и хорошее согласие расчетных и экспериментальных СТМ изображений. Расчеты показали, что существующая модель поверхности Ge(331)-5×1 [3] плохо согласуется с экспериментальными СТМ изображениями этой поверхности. Кроме того, расчетная энергия формирования поверхности, полученная на основе этой модели, значительно выше энергий других поверхностей германия [(001), (111) и (113)], что также вызывает сомнения в ее корректности.

На основе структурного блока 8PU, разработанного ранее для описания поверхности Si(331)-12×1 (рис. 1 (a, b)) [2], нами была разработана новая модель 8P поверхности Ge(331)-5×1 (рис. 1 (c)). Блок 8PU (8-pentagon unit) состоит из пентамера с межузельным атомом и соседней реконструированной области, содержащей шесть пентагонов германия (6PU, закрашена оранжевым на рис. 1). Энергия поверхности Ge(331)-5×1 в соответствии с моделью 8P значительно ниже, чем в модели, предложенной ранее [3]. Кроме того, расчетная энергия поверхности Ge(331)-5×1 в новой модели близка к энергиям других стабильных поверхностей Ge. Расчетные СТМ изображения поверхности Ge(331)-5×1, основанные на модели 8P, отлично согласуются с экспериментальными СТМ изображениями этой поверхности (рис. 2). Низкая расчетная энергия поверхности и хорошее соответствие между экспериментальными и расчетными СТМ изображениями являются весомыми аргументами в пользу предложенной нами модели структуры поверхности Ge(331). Таким образом, мы продемонстрировали структурное подобие чистых реконструированных поверхностей Si(331) и Ge(331), обнаруженное ранее для Si(100) и Ge(100), Si(110) и Ge(110), Si(113) и Ge(113).

4.5 Иллюстрации, визуализация результатов.

Рис. 1. (a) и (b): элементарный структурный блок поверхностей Si(331)-12×1 и Ge(331)-5×1 – 8PU (8-pentagon unit). Пентагоны в 6PU закрашены оранжевым цветом для облегчения восприятия. Три атома 8PU, наблюдающиеся на экспериментальных СТМ изображениях при $U < 0$, выделены черными окружностями. (a) Вид сбоку. (b) Вид сверху. (c) Атомная модель 8P поверхности Ge(331)-5×1. Элементарная ячейка, используемая в расчетах, и примитивная ячейка показаны пунктирной и сплошной линиями соответственно. Ячейка 1×1 выделена голубым цветом.

Рис. 2. (a) Экспериментальное изображение сканирующей туннельной микроскопии поверхности Ge(331)-5×1, $U = +1.8$ В, $I = 1$ нА. Размер изображения $48 \times 48 \text{ \AA}^2$. Из работы [ZZZ]. (b) Расчетное изображение сканирующей туннельной микроскопии поверхности Ge(331)-5×1, полученное с использованием модели 8P для $U = +1.0$ В.

Ориентация поверхности и размер изображения такие же, как для рис. (а). Атомная модель поверхности Ge(331)-5×1 частично наложена на изображения на рис. (а) и (b). Черными окружностями выделены атомы Ge, связанные с самыми яркими пятнами на изображениях.

Литература:

- [1] R. A. Zhachuk, S. A. Teys, A. E. Dolbak, B. Z. Olshanetsky. Surf. Sci. **565**, 37 (2004).
- [2] R. Zhachuk, S. Teys, Phys. Rev. B **95**, 041412(R) (2017).
- [3] Z.h. Gai, R.G. Zhao, W.S. Yang, Phys. Rev. B **58**, R4223(R) (1998).

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. Результаты этой работы основаны на расчетах, выполненных с использованием кластера НГУ и их сравнения с опубликованными экспериментальными данными.

6. Перечень публикаций, содержащих результаты работы.

- 1) R.A. Zhachuk, J. Coutinho, “Pentamers with interstitial atoms as the building blocks of the Ge(331)-5×1 surface”, Applied Surface Science (Impact Factor: 7.392), 533, 147507 (2020). DOI: 10.1016/j.apsusc.2020.147507

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

Оборудование, установленное на кластере НГУ, достаточно для решения большинства возникающих задач. Однако хотелось бы, чтобы была решена проблема с перегревом кластера, повторяющаяся каждое лето.