

1. “Диффузия атомов Sr по поверхности Si(111)-7×7: данные сканирующей туннельной микроскопии и моделирование”

2. н.с., к.ф.-м.н. Жачук Руслан Анатольевич (компьютерное моделирование),

с.н.с., к.ф.-м.н. Гийс Сергей Александрович (сканирующая туннельная микроскопия)

3. Жачук Руслан Анатольевич, e-mail: zhachuk@gmail.com

4.1. Поверхности полупроводников почти всегда реконструированы. Это приводит к тому, что период трансляции таких поверхностей больше, чем в параллельных поверхности плоскостях в объеме кристалла. Так, поверхность кремния с ориентацией (111), имеет реконструкцию 7×7. Здесь “7” означает, что длина периода трансляции вдоль поверхности в 7 раз больше периода в объеме кремния. На рис. 1 показано изображение сканирующей туннельной микроскопии (СТМ) поверхности Si(111)-7×7.

Диффузия адсорбированных атомов на поверхностях кристаллов влияет на формирование наноструктур и рост тонких пленок, поэтому изучение поверхностной диффузии является важной задачей. Реконструкция поверхности влияет на диффузию атомов, так как она определяет изменение поверхностной энергии при их перемещении. Таким образом, пространственное изменение поверхностной энергии определяет места адсорбции атомов и диффузионные барьеры. Цель данной работы – изучение влияния реконструкции 7×7 поверхности Si(111) на диффузию атомов Sr. Методы исследования: СТМ и компьютерное моделирование на основе теории функционала плотности (ТФП) и Монте-Карло.

4.2. Экспериментально было найдено, что быстрое движение атомов Sr в пределах половинок ячеек структуры Si(111)-7×7 создает резкие флуктуации сигнала на картинах СТМ. Флуктуации сигнала являются причиной наблюдения шумоподобных пятен в половинках ячеек 7×7 (рис. 2). Эти шумоподобные пятна на изображениях СТМ вызваны тепловым движением атомов Sr между различными местами адсорбции внутри половинок ячеек структуры 7×7. Сам атом Sr не удается визуализировать, так скорость его теплового движения превышает скорость сканирования в СТМ. Перескоки между соседними половинками ячеек 7×7 происходят намного реже, так как на границе ячеек структуры 7×7 имеется большой диффузионный барьер. На рис. 2 показаны два СТМ изображения, полученных последовательно, один за другим. В нижнем правом углу изображения можно видеть, что атом Sr переместился из одной половинки ячейки 7×7 (кадр 1) в соседнюю полуячейку (кадр 2). Данное поведение наблюдалось и ранее для адсорбированных атомов Pb, Si, Al, Tl, Sn, Ag, Y на поверхности Si(111)-7×7. Однако, хотя адсорбция и диффузия атомов на поверхности Si(111)-7×7 изучалась ранее как экспериментально, так и теоретически, тем не менее, не было сделано

попыток оценить среднюю скорость адсорбированных атомов, движущихся в половинках ячеек 7×7 . Кроме того, изменения в электронной структуре поверхности, вызванные адсорбцией инородных атомов и их влияние на СТМ изображения не были проанализированы. Это привело к некорректной интерпретации некоторых СТМ изображений, встречающихся в литературе.

4.3.-4.4. Наблюдаемые росчерки, вытянутые вдоль оси x и образующие шумоподобные пятна, связаны с направлением быстрого сканирования острия СТМ (рис. 3). Острие СТМ создает растровое изображение поверхности путем ее сканирования иглой вдоль оси x линия за линией. Было найдено, что длина этих росчерков зависит от скорости сканирования острия СТМ (рис. 3).

Нами была составлена программа, позволяющая моделировать СТМ изображения от хаотично движущегося в пределах ограниченной области атома Sr. Изменяемыми параметрами в программе являются размер области сканирования, радиус острия СТМ и отношение скорости острия СТМ к скорости атома Sr. Моделирование, основанное на модели независимо движущихся атомов Sr и острия СТМ, позволяет довольно точно описать наблюдаемые СТМ изображения (рис. 3). Таким образом, была получена зависимость средней длины росчерков на СТМ изображениях от скорости сканирования. Средняя длина росчерков была также измерена на смоделированных изображениях в зависимости от отношения скорости острия СТМ к скорости атома Sr. Теоретическая кривая проходит близко к экспериментальным точкам (рис. 4). Из графика на рис. 4 можно сделать вывод, что скорость атома Sr, движущегося в пределах половины ячейки структуры 7×7 при комнатной температуре составляет 300 нм/с.

С помощью программного обеспечения, основанного на ТФП (Siesta) был рассчитан рельеф поверхностной энергии для атома Sr на кремнии в ячейке 7×7 и определены основные пути миграции и соответствующие им энергии активации (рис. 5). Было найдено, что наиболее глубокие минимумы энергии расположены вокруг рест-атомов. Таким образом, во время теплового движения атом Sr совершает круговые движения вокруг рест-атомов в полуячейке 7×7 , случайным образом перескакивая от одного рест-атома к другому (рис. 6).

Найдено, что рассмотрение одного лишь теплового движения атомов Sr недостаточно для объяснения всех особенностей наблюдаемых с помощью СТМ шумоподобных пятен. На рис. 7 вверху показаны экспериментальные СТМ изображения шумоподобных пятен в пустых и заполненных электронных состояниях. Можно заметить, что на СТМ изображении в заполненных электронных состояниях ярким пятном выделяется центральная часть полуячейки 7×7 , образуя как бы

перевернутый треугольник. Ранее в литературе это объясняли большей вероятностью нахождения адсорбированного атома. Однако такое объяснение противоречит картине рельефа поверхностной энергии на рис. 5.

На основе проведенных расчетов предложено другое объяснение. Из-за различной электроотрицательности атомов Sr и Si при адсорбции происходит смещение электронного облака от атома Sr к ближайшим атомам Si с оборванными связями (адатомам). В результате такого процесса пустые электронные состояния оказываются сосредоточены на атоме Sr, а заполненные на ближайших к нему адатомам Si. Это хорошо видно на смоделированных СТМ изображениях на рис. 7 внизу. Далее, во время теплового движения атом Sr совершает круговые движения вокруг каждого из трех рест-атомов в полуячейке 7×7 (рис. 6). Это сопровождается ярким выделением ближайших к атому Sr групп адатомов Si на СТМ изображениях в заполненных электронных состояниях. Следует заметить, однако, что в соответствии с рис. 6, в среднем адатом Sr находится в 2 раза чаще вблизи центральных адатомов, чем вблизи угловых. Это и объясняет большую интенсивность светлых пятен, расположенных на этих адатомах.

4.5. Данная работа в большой степени зависит от использования вычислительных мощностей кластера. В частности, основные результаты работы, такие как рельеф поверхностной энергии для атома Sr на кремнии, энергии диффузионных барьеров, детальная интерпретация изображений СТМ, были получены с помощью квантово-механических расчетов из первых принципов на кластере ИВЦ НГУ. Из-за быстрого теплового движения атома Sr на поверхности СТМ дает лишь усредненное по времени изображение. Однако, с помощью компьютерного моделирования удалось проанализировать отдельные стадии движения атома Sr и дать верную интерпретацию СТМ картинам.

4.6. Рис. 1. СТМ изображение поверхности Si(111)- 7×7 . Сверху наложена атомная модель реконструкции 7×7 . Большие кружки – атомы кремния верхних слоев, маленькие – атомы в объеме кремния. Обозначения элементов реконструкции: A – адатомы (adatoms), R – рест-атомы (rest atoms), D – димеры (dimers), CH – угловые ямки (corner holes). Хорошо видны адатомы (яркие пятна) и угловые ямки (темные пятна).

Рис. 2. Два последовательных СТМ изображения одного участка поверхности Si(111)- 7×7 с адсорбированными атомами Sr. Вакансии служат в качестве репера. Атомы Sr видны как шумоподобные пятна в половинках ячеек структуры 7×7 . Атом Sr в правом

нижнем углу изображения перескочил из одной половинки ячейки 7×7 (кадр 1) в соседнюю полуячейку (кадр 2).

Рис. 3. Зависимость вида шумоподобных пятен в половинках ячеек структуры 7×7 от скорости сканирования острием СТМ.

Рис. 4. Средняя длина росчерков, образующих шумоподобные пятна, в зависимости от скорости сканирования острием СТМ.

Рис. 5. Рельеф поверхностной энергии кремния для атомов Sr на поверхности Si(111)- 7×7 . Обозначения соответствуют рис. 1. Контурные линии отделяют уровни энергии на 0.2 эВ. Яркие (темные) пятна указывают на минимумы (максимумы) энергии, и, следовательно на вероятные места адсорбции (седловые точки). Стрелки указывают основные пути миграции атома Sr.

Рис. 6. Схематический рисунок, поясняющий движение атома Sr в полуячейке 7×7 .

Рис. 7. СТМ изображения шумоподобных пятен в полуячейках 7×7 в пустых и заполненных электронных состояниях. Верхняя панель: экспериментальные изображения; нижняя панель: смоделированные изображения, при условии, что атом Sr находится неподвижно в положении "1" рисунка 5.

5. Результаты работы опубликованы в ведущих международных физических журналах:

1) R.Zhachuk, S.Teys, B.Olshanetsky, and S.Pereira, Applied Physics Letters 95 (2009) 061901: "Speed determination of single Sr adatoms moving within Si(111)- 7×7 half unit cells"

2) R.Zhachuk, B.Olshanetsky, J.Coutinho and S.Pereira, Physical Review B 81 (2010) 165424: "Electronic effects in the formation of apparently noisy scanning tunneling microscopy images of Sr on Si(111)- 7×7 "

Кроме того, работа заняла второе место на конкурсе научных работ Института Физики Полупроводников СО РАН в апреле 2010 года.

6. На взгляд нашей научной группы, работа вычислительной системы ИВЦ НГУ организована очень хорошо. Предоставленные вычислительные ресурсы достаточны для решения большинства возникающих задач. Особо хотелось бы поблагодарить Дмитрия Чубарова за помощь в инсталляции и устранении ошибок в работе программного обеспечения. Хотелось бы, чтобы в будущем было меньше непредвиденных отключений кластера в связи со сбоями в электросети НГУ. Интересно было бы увидеть на сайте www.nusc.ru описание работ, выполняемых другими пользователями кластера с публикациями (в свободном доступе). Это позволило бы пользователям ориентироваться в работах, выполняемых на кластере, и, возможно, привело бы к сотрудничеству между отдельными научными группами.