

1. “Природа контраста в слоях Ge/Si(111) в сканирующей туннельной микроскопии в присутствии сурфактантов Bi и Sb”

2. н.с., к.ф.-м.н. Жачук Руслан Анатольевич

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

4.1. Известно, что из-за большой разницы в параметрах кристаллических решеток Ge и Si (около 4%) трудно вырастить эпитаксиальную сплошную пленку Ge/Si: после формирования нескольких эпитаксиальных сплошных слоев, происходит спонтанное формирование островков. Использование сурфактантов позволяет изменять свойства поверхности таким образом, что становится возможным выращивать относительно толстые упруго напряженные эпитаксиальные слои Ge на подложке Si(111). Роль сурфактантов при этом двоякая: всплывая на поверхность слоёв во время роста, они подавляют как перемешивание атомов Ge и Si, так и формирование многослойных островков. Изначально в качестве сурфактантов использовали в основном элементы As и Sb. Позднее было обнаружено, что Bi обладает еще одним полезным свойством. А именно, при использовании Bi в качестве сурфактанта при росте Ge на поверхности Si(111) стало возможным различать слои Si и Ge посредством сканирующей туннельной микроскопии (СТМ). Обычно в СТМ трудно различить эти элементы из-за их схожей электронной структуры. Обнаруженное свойство было использовано недавно для контролируемого создания Ge/Si наноструктур на поверхности Si(111) [1] и позволило изучить перемешивание Ge и Si на атомном уровне [2].

Можно предположить несколько причин для объяснения наблюдаемого в СТМ контраста при использовании Bi. Эти причины могут быть как структурной, так и электронной природы. Во-первых, Ge обладает большей постоянной решетки по сравнению с Si, что должно вызывать искажение решетки в вертикальном направлении для уменьшения механического напряжения. Однако, измеряемая в СТМ разность высот поверхностей со слоями Ge и Si ΔH_{tot} (рис. 1), достигающая 1.0 Å, на порядок больше значения, полученного из теории упругости ΔH_{geom} . Во-вторых, наблюдаемый в СТМ контраст мог бы возникать из-за различных поверхностных структур, индуцируемых атомами Bi на поверхностях слоёв кремния и германия. Однако снова мы должны исключить эту причину, так как по данным СТМ поверхностные структуры на гранях Si(111) и Ge(111) одинаковы и состоят из периодически расположенных тримеров Bi. Таким образом, наблюдаемая в СТМ разница высот между слоями Si(111)

и Ge(111) должна иметь электронную природу. Целью работы было установление связи между электронной структурой поверхности и наблюдаемой в СТМ разницей высот слоёв Ge и Si. Метод исследования: компьютерное моделирование на основе теории функционала плотности (ТФП).

4.2. В недавно опубликованной работе [3] приведены результаты исследования системы Ge/Si(111) в присутствии Bi с помощью сканирующей туннельной спектроскопии (СТС). Эксперименты, в частности, показали, что при туннелировании электронов из острия в пустые электронные состояния поверхности наблюдаемый контраст значительно превышает контраст, наблюдаемый при туннелировании в обратном направлении, то есть из заполненных электронных состояний поверхности в острие. Это свидетельствует о том, что контраст в СТМ имеет в значительной степени электронную природу. Кроме того, было найдено, что разница высот слоёв Ge и Si, измеренная при туннелировании электронов из заполненных электронных состояний поверхности почти не зависит от величины приложенного напряжения между остриём СТМ и образцом. Тем не менее, на основании одних лишь данных СТМ невозможно отделить реальный геометрический вклад в наблюдаемую в СТМ разность высот слоёв от электронной составляющей.

4.3. На рис. 2а показан экспериментальный спектр СТС от поверхностей Ge и Si в присутствии сурфактанта Bi. На рис. 2б показана рассчитанная с помощью ТФП локальная плотность электронных состояний (ЛПЭС) изучаемых поверхностей. Можно видеть, что графики, полученные из расчетов, воспроизводят основные черты экспериментальных зависимостей. Имеются и другие вклады в экспериментальные спектры СТС, которые не учитываются в расчетах и вызывают появление пиков "Inv" и других особенностей. При отрицательной полярности приложенного напряжения зависимости ЛПЭС от поверхностей Ge и Si практически совпадают. Следовательно, в случае сурфактанта Bi, при туннелировании электронов из заполненных электронных состояний поверхности, наблюдаемая в СТМ разность высот слоёв Ge и Si вызвана в основном геометрической разницей высот поверхностных слоёв. И действительно, было найдено, что измеренная в СТМ разница высот поверхностных слоёв около 0.2 Å хорошо согласуется с рассчитанной геометрической разницей в положении ядер Ge и Si. Напротив, при туннелировании в пустые электронные состояния поверхности (положительная полярность) можно наблюдать усиление пика c_2 на графике ЛПЭС от поверхности со слоем Ge (рис. 2б). Установлено, что соответствующие пику c_2

электронные состояния локализованы над тримерами Vi и, таким образом, являются причиной большой длины затухания в вакуум ($1.6-1.8 \text{ \AA}$). В согласии с экспериментом, эффект усиления пика $c2$ в присутствии слоя Ge отсутствовал при использовании Sb в качестве сурфактанта, а значит, в этом случае наблюдаемая в СТМ разница высот вызвана исключительно структурными факторами. Было также найдено, что пик $c1$ на графике ЛПЭС от поверхности со слоем сурфактанта вызван изменением вида СТМ картин тримеров Vi (Sb) при увеличении напряжения. На рис. 3 показаны смоделированные СТМ изображения от поверхностей $\text{Si}(111)\text{-Vi}$ и $\text{Ge/Si}(111)\text{-Vi}$ при двух напряжениях: $U=-1.8 \text{ В}$ (а) и $U=+1.8 \text{ В}$ (б). В первом случае контраст имеет только геометрическую природу, тогда как во втором случае имеется дополнительный электронный вклад в наблюдаемую в СТМ разность высот поверхностных слоев.

4.4. Работа целиком выполнена с использованием вычислительных мощностей кластера. Так как в изображениях СТМ структурные и электронные данные перепутаны, то с его помощью невозможно получить реальную геометрическую разницу высот поверхностных слоев Ge/Si (между отдельными атомными ядрами). Исследования с помощью моделирования на основе ТФП играют в этом случае дополнительную и даже ключевую роль. В данной работе мы рассчитывали ЛПЭС, относящуюся к ней длину затухания в вакуум и реальную геометрическую разницу высот поверхностных слоев Si и Ge , покрытых Sb и Vi с помощью ТФП на кластере ИВЦ НГУ.

4.5.

Рис. 1. Структурная модель поверхности $\text{Si}(111)$ со слоями Ge и Si и сурфактантом Vi .

ΔH_{geom} – геометрическая разница высот поверхностей со слоями Ge и Si , ΔH_{tot} – полная разница высот поверхностей (включая электронный вклад), измеряемая в СТМ. Ломаная линия над поверхностью представляет траекторию движения острия СТМ.

Рис. 2. а) Экспериментальный спектр СТС от поверхностей со слоями Si и Ge и сурфактантом Vi из работы [1]. На графике обозначены пики в валентной зоне ($v1$ и $v2$) и зоне проводимости ($c1$, $c2$ и $c3$). б) Рассчитанный спектр ЛПЭС для поверхностей со слоями Si и Ge и сурфактантом Vi .

Рис. 3. Смоделированные СТМ изображения размером $60 \times 60 \text{ \AA}^2$ поверхности $\text{Si}(111)$ с бислойными полосками Ge в присутствии сурфактанта Vi . а) $U = -1.8 \text{ В}$, б) $U = +1.8 \text{ В}$.

Литература

[1] M. Kawamura, N. Paul, V. Cherepanov et al., Phys. Rev. Lett. **91** (2003) 096102.

[2] N. Paul, S. Filimonov, V. Cherepanov et al., Phys. Rev. Lett. **98** (2007) 166104.

[3] J. Mysliveček, F. Dvořák, A. Stróžecka et al., Phys. Rev. B **81** (2010) 245427.

5. Результаты работы опубликованы в ведущих международных физических журналах:

1) Ruslan Zhachuk and Jose Coutinho, Physical Review B **84** (2011) 193405: “Ab initio study of height contrast in scanning tunneling microscopy of Ge/Si surface layers grown on Si(111) in presence of Bi”

2) Р.А. Жачук, Б.З. Ольшанецкий, Ж. Кутины, Письма в ЖЭТФ **95** (2012) 283: “Природа контраста в слоях Ge/Si(111) в сканирующей туннельной микроскопии в присутствии сурфактантов Bi и Sb”

6. Предоставленные вычислительные ресурсы кластера достаточны для решения большинства возникающих задач. Хотелось бы увидеть на сайте 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.