

1. Тема работы: “Атомная структура поверхности Si(331)-12×1”.

2. Состав коллектива:

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

Тийс Сергей Александрович, ИФП СО РАН, с. н. с., к.ф.-м.н. (эксперимент)

3. Информация о гранте:

Название: “Рост, структура и свойства функциональных германий-кремниевых наноструктур на чистых и покрытых сурфактантами поверхностях Si(111)”

Номер: РФФИ N14-02-00181

Руководитель: Жачук Руслан Анатольевич, ИФП СО РАН

Срок действия: 2014-2016

4. Научное содержание работы.

4.1. Аннотация к работе.

С помощью методов сканирующей туннельной микроскопии (СТМ) и расчетов на основе теории функционала плотности (ТФП) исследована атомная структура высокоиндексной поверхности Si(331)-12×1. Разработана структурная модель поверхности Si(331), включающая в себя структурный элемент, состоящий из шести пентагонов кремния и пентамера с межузельным атомом. Продемонстрировано, что энергия поверхности Si(331) в рамках предложенной модели существенно ниже, чем в моделях, предложенных ранее. Показано, что в рамках предложенной модели поверхности Si(331) возможны несколько атомных конфигураций, отличающихся изгибами элементов реконструкции.

4.2. Современное состояние проблемы.

Поверхность Si(331) является одной из немногих стабильных поверхностей кремния. Экспериментально данная поверхность впервые была идентифицирована около 25 лет назад. Были предложены три атомные модели этой поверхности, в которых структурные элементы состояли либо из адатомов [1], либо димеров и адатомов [2], либо пентамеров и адатомов [3]. Однако энергия поверхности во всех трех моделях была достаточно высока, а согласие смоделированных СТМ изображений с экспериментальными картинками было достаточно низким. Цель данной работы построение реалистичной модели поверхности Si(331).

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

С помощью методов сканирующей туннельной микроскопии (СТМ) и расчетов на основе теории функционала плотности (ТФП) исследована структура чистой поверхности Si(331)-12×1. Расчеты выполнены на основе ТФП с использованием программного пакета

Siesta (<https://departments.icmab.es/leem/siesta>). Получены СТМ изображения реконструированной поверхности Si(331) более высокого разрешения, чем все, имеющиеся на данный момент в литературе. Данные СТМ показывают, что ячейка поверхности  $12 \times 1$  содержит два идентичных структурных блока (рис. 1(a)). Нами предложена атомная модель структурного блока поверхности Si(331)- $12 \times 1$  (рис. 2) и на ее основе разработана полная атомная модель этой поверхности. Основу модели структурного блока поверхности (331) кремния составляют пентамер с межузельным атомом и шесть пентагонов кремния (выделены оранжевым цветом). Модель получила название 8P (8-pentagon), по числу видимых пентагонов в одном структурном блоке поверхности (рис. 2).

Энергия поверхности Si(331)- $12 \times 1$  в соответствии с моделью 8P значительно ниже, чем в моделях предложенных ранее. Кроме того, энергия поверхности в новой модели близка к энергии поверхности Si(111) со структурой  $7 \times 7$ . Известно, что Si(111)- $7 \times 7$  является наиболее стабильной поверхностью кремния с наименьшей энергией. Следовательно, поверхность Si(331) не может иметь энергию значительно ниже той, что рассчитана в нашей модели.

Новая модель поверхности Si(331) также значительно лучше согласуется с экспериментальным СТМ изображением на рис. 1(a). А именно, модель адекватно описывает группы из пяти ярких пятен (пентамеры), темные вертикальные полосы между ними (траншеи) и пятна 1-3 между пентамерами (Рис. 1(б)).

Низкая энергия поверхности и хорошее соответствие экспериментальным СТМ изображениям являются весомыми аргументами в пользу предложенной нами модели структуры поверхности Si(331). Наша атомная модель предсказывает, что должны существовать несколько сдвиговых (buckling) конфигураций поверхности Si(331), близких по энергии. Теоретически возможно изменение сдвиговых конфигураций поверхности Si(331) с помощью острия СТМ. Это открывает возможность создания перезаписываемых элементов памяти нанометрового масштаба.

#### 4.5 Иллюстрации, визуализация результатов.

Рис. 1. (а) Экспериментальное СТМ изображение высокого разрешения поверхности Si(331)- $12 \times 1$ . (б) СТМ изображение, рассчитанное с помощью ТФП на основе модели 8P поверхности Si(331)- $12 \times 1$ . Пунктиром показана элементарная ячейка поверхности.

Рис. 2. Модель структурного блока поверхности Si(331)- $12 \times 1$ : 8PU (8-pentagon unit), состоящая из пентамера с межузельным атомом и шести пентагонов кремния (выделены оранжевым цветом).

## Литература:

- [1] B. Z. Olshanetsky, S. A. Teys, and I. G. Kozhemyako, Phys. Low-Dimens. Struct. **11-12**, 85 (1998).
- [2] Z. Gai, R. G. Zhao, T. Sakurai, and W. S. Yang, Phys. Rev. B **63**, 085301 (2001).
- [3] C. Battaglia, K. Ga'al-Nagy, C. Monney, C. Didiot, E. F. Schwier, M. G. Garnier, G. Onida, and P. Aebi, Phys. Rev. Lett. **102**, 066102 (2009).

## 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) Ruslan Zhachuk and Sergey Teys, "Pentagons in the Si(331)-(12×1) surface reconstruction", Physical Review B (Impact Factor: 3.718), 95, 041412(R) (2017). DOI: 10.1103/PhysRevB.95.041412
- 2) Р. Жачук, Ж. Кутиньо, "Комментарий к статье "Различные СТМ-изображения сверхструктуры чистой грани Si(133)-6 × 2" (Письма в ЖЭТФ 105(8), 469 (2017))", Письма в ЖЭТФ (Impact Factor: 1.235), том 106, вып. 5, с. 322 – 323. DOI: 10.7868/S0370274X1717012X

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

Предоставленные вычислительные ресурсы кластера достаточны для решения большинства возникающих задач. 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.