

1. Тема работы: “Атомная и электронная структура поверхности Si(331)-12x1”.

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.

С помощью расчетов на основе теории функционала плотности (ТФП) исследована атомная и электронная структура чистой поверхности Si(331)-12x1. На основе структуры поверхности, предложенной в работе [1], были разработаны значительные усовершенствования как атомной модели, так и используемого в расчетах набора локализованных базисных функций. Эти изменения являются критически важными для корректного воспроизведения зависимости изображений сканирующей туннельной микроскопии (СТМ) от полярности приложенного напряжения. Расхождение размеров Si пентамеров в атомной модели поверхности и на экспериментальных СТМ-изображениях было объяснено в рамках модели Терсофа-Хамана. Были рассчитаны энергетические барьеры, отделяющие друг от друга различные конфигурации изогнутых (buckled) структур на поверхности Si(331) и показано, что эти структуры должны динамически изгибаться при комнатной температуре. Было найдено, что незаполненные электронные состояния на поверхности Si(331) преимущественно локализованы на пентамерах с межузельными атомами и Si-атомах с одной оборванной связью и имеющих sp^2 -подобную конфигурацию электронных орбиталей. Заполненные электронные состояния локализованы на Si-атомах с одной оборванной связью и имеющих sp^3 -подобную конфигурацию электронных орбиталей. Было показано, что в рассчитанной плотности электронных состояний имеются два широких пика в запрещенной зоне Si: один вблизи вершины валентной зоны и другой вблизи дна зоны проводимости. Рассчитанная ширина запрещенной зоны поверхности 0.58 эВ прекрасно согласуется с результатами, полученными с помощью сканирующей туннельной спектроскопии (СТС) и фотоэлектронной спектроскопии (ФЭС).

4.2. Современное состояние проблемы.

Исследования структуры высокоиндексных поверхностей Si и Ge представляют интерес в связи с их возможным применением в электронике. Из-за анизотропии таких поверхностей формирование антифазных доменов и кластеризация пронизывающих

дислокаций при гетероэпитаксии оказываются подавленными, что приводит к формированию более гладких поверхностей и снижению дефектности эпитаксиальных слоев.

Наибольший интерес представляют плоские (не фасетированные) высокоиндексные поверхности Si и Ge, такие как (113) и (331). Эти поверхности, однако, реконструированы и обладают сложной атомной структурой, которая не всегда известна. Недавно нами была предложена атомная модель чистой поверхности Si(331)-12x1 [1]. В настоящей работе сделано важное исправление в модели, теоретически исследованы свойства поверхности Si(331)-12x1 и проведено сравнение с имеющимися экспериментальными данными.

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

Работа была выполнена с помощью расчетов на основе ТФП с использованием программных пакетов Siesta (<https://www.icmab.es/siesta>, установлен на кластере НГУ) и VASP (<https://www.vasp.at>, установлен на кластере г. Авейро, Португалия). Необходимость использования платного пакета VASP обусловлена возможностью гораздо более точного расчета электронного спектра поверхности с использованием гибридных функционалов, что необходимо для корректного сравнения с экспериментальными данными.

В работе предложено важное исправление структурной модели поверхности Si(331), опубликованной в работе [1], состоящее в том, что траншеи между зигзагообразными рядами пентамеров состоят из димеров (рис. 1). Показано, что для детального описания экспериментальных СТМ-изображений критически важно учесть это исправление и использовать набор базисных функций, оптимизированный для расчетов, применительно к поверхности. В этом случае получаемое сходство расчетных и экспериментальных СТМ-изображений очень высокое (рис. 2).

Была установлена причина, по которой размеры пентамеров на поверхности Si(331) на СТМ-изображениях в 1.5-2.0 раза больше, чем в атомной модели. А именно, было найдено, что положения ярких пятен на СТМ-изображениях с высоким разрешением и фактические координаты атомных ядер на поверхности могут существенно различаться. Такие искаженные СТМ-изображения могут формироваться на поверхностях с оборванными связями, чьи направления не перпендикулярны исследуемой поверхности и могут приводить к ошибочной интерпретации экспериментальных данных (рис. 3). Таким образом, с учетом этого эффекта, снимается кажущееся противоречие между

теоретическим и экспериментально измеренным размером пентамеров, наблюдающихся на поверхности Si(331).

Расчетный электронный спектр от исправленной модели поверхности Si(331) и полученная ширина запрещенной зоны (E_g) прекрасно согласуется с данными, полученными экспериментально с помощью СТС и ФЭС (рис. 4). Установлено, что незаполненные электронные состояния на поверхности Si(331) преимущественно локализованы на пентамерах с межузельными атомами и Si-атомах с одной оборванной связью и имеющих sp^2 -подобную конфигурацию электронных орбиталей (рис. 5). Заполненные электронные состояния локализованы на Si-атомах с одной оборванной связью и имеющих sp^3 -подобную конфигурацию электронных орбиталей.

В целом, полученные результаты демонстрируют, что исправленная модель реконструированной поверхности Si(331) находится в очень хорошем согласии с имеющимися экспериментальными данными и, таким образом, может служить надежной основой для дальнейших исследований, касающихся этой поверхности.

4.5 Иллюстрации, визуализация результатов.

Рис. 1. Модель реконструированной поверхности Si(331)-12x1. Пунктирной линией показана элементарная ячейка поверхности. Черным показаны димеры, предложенные в этой работе.

Рис. 2. Расчётные и экспериментальные СТМ-изображения поверхности Si(331)-12x1.

Рис. 3. СТМ-изображение (слева) и вертикальное сечение (справа) пентамера. На рисунке слева показаны отличия в размерах пентамера на СТМ-изображении и в атомной модели. На рисунке справа показано направление оборванной связи на вершине пентамера.

Рис. 4. Расчетная (сверху) и экспериментальная (снизу) плотности электронных состояний поверхности Si(331)-12x1. Серая область показывает плотность электронных состояний, относящуюся к объему Si.

Рис. 5. Локализация НОМО (highest occupied molecular orbitals) и ЛУМО (lowest unoccupied molecular orbitals) орбиталей на поверхности Si(331)-12x1.

Литература:

[1] R. Zhachuk, S. Teys, Phys. Rev. B 95, 041412(R) (2017).

5. Эффект от использования кластера в достижении целей работы.

Для реалистичной интерпретации СТМ изображений высокого разрешения и понимания электронного спектра рассматриваемой физической системы необходим расчет ее атомной и электронной структуры на основе ТФП. Все результаты этой работы основаны на расчетах, выполненных с использованием кластера НГУ и их сравнении с имеющимися в литературе экспериментальными данными.

6. Перечень публикаций, содержащих результаты работы.

1) R. Zhachuk, J. Coutinho, K. Palotas, “Atomic and electronic structure of the Si(331)-(12x1) surface”, The Journal of Chemical Physics (Impact Factor: 2.997), 149, 204702 (2018). DOI: 10.1063/1.5048064

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

Новое оборудование, установленное на кластере НГУ, позволило значительно увеличить скорость выполнения задач. Это привело как к значительному ускорению работы, так и к возможности изучения новых, более сложных объектов. Хотелось бы, чтобы на части новых узлов ограничение walltime=24h было снято. Хотелось бы также, чтобы была решена проблема с перегревом кластера, повторяющаяся каждое лето в течение много лет.