

1. Тема работы: “Универсальный структурный блок семейства поверхностей (110) кремния и германия”.

2. Состав коллектива:

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

Долбак Андрей Евгеньевич, ИФП СО РАН, н. с., к.ф.-м. н., эксперименты с использованием дифракции медленных электронов (ДМЭ).

Шкляев Александр Андреевич. ИФП СО РАН, НГУ, в. н. с., д. ф.-м. н., эксперименты с использованием сканирующей туннельной микроскопии (СТМ).

3. Информация о гранте:

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант 18-02-00025) и РНФ (грант 19-72-30023).

4. Научное содержание работы.

4.1. Аннотация к работе.

В работе предложена атомная модель универсального структурного блока, являющегося основной частью всех атомных структур на поверхностях (110) кремния и германия и их вициналей. Работа выполнена с помощью расчетов на основе теории функционала плотности (ТФП) и сравнения полученных результатов с имеющимися экспериментальными данными сканирующей туннельной микроскопии (СТМ). На основе модели универсального структурного блока были разработаны атомные модели поверхностей (110)-(16×2), (110)-с(8×10), (110)-(5×8) и (17 15 1)-(2×1) кремния и германия. Все модели демонстрируют очень низкие энергии формирования поверхностей и прекрасно согласуются с изображениями, полученными с помощью СТМ. Кроме того, с помощью СТМ и дифракции медленных электронов (ДМЭ) было показано, что высокоиндексная поверхность Si(47 35 7) (вицинальная по отношению к (110)) также состоит из универсальных структурных блоков. Была разработана атомная модель поверхности Si(47 35 7). Таким образом, в представленной работе решена давно известная и важная фундаментальная задача о структуре поверхностей (110) кремния и германия и атомной структуре пентамеров, наблюдающихся на них.

4.2. Современное состояние проблемы.

Хотя структура поверхностей (100) и (111) кремния и германия давно известна, детальное понимание атомной структуры поверхности (110) до настоящего времени отсутствовало из-за её большой сложности. Поэтому структура поверхности (110) представляет значительный интерес для фундаментальной науки. В литературе можно найти более 10 моделей атомных структур, наблюдаемых на поверхностях (110) кремния

и германия, однако все они являются ошибочными. Это указывает как на сложность этой задачи, так и на ее большое научное значение. Значительный интерес к поверхностям ориентаций (110) вызван их своеобразными свойствами, такими как большая подвижность дырок и сильная анизотропия таких поверхностей. Так, из-за анизотропии поверхностей (110) они являются удобными подложками для роста одномерных объектов, таких как нанопроволоки.

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

Работа была выполнена с помощью расчетов на основе ТФП с использованием программного пакета Siesta (<https://www.icmab.es/siesta>) установленного на кластере НГУ. Эксперименты выполнены с использованием сканирующей туннельной микроскопии (СТМ, НГУ) и дифракции медленных электронов (ДМЭ, ИФП СО РАН).

В работе с помощью расчетов на основе теории функционала плотности с применением программного пакета SIESTA разработан универсальный структурный блок, являющийся основной частью *всех* атомных структур, формирующихся на поверхностях (110) кремния, германия и их вициналей, таких как (17 15 1) и (47 35 7). Этот структурный блок состоит из пентамера, атомы которого удерживает вместе межузельный атом, и соседней реконструированной области (рис. 1). Структура пентамера аналогична наблюдавшейся ранее на поверхностях (331) и (113) кремния [1, 2, 3].

С использованием универсального структурного блока были разработаны атомные модели таких поверхностей как: равновесной (110)–(16×2) кремния и германия и метастабильных Ge(110)–с(8×10) и Si(110) – (5×8). Кроме того, построена атомная модель поверхности (17 15 1)–(2×1) и показана ее структурная общность с поверхностью (110)–(16×2) кремния и германия. Все модели приводят к самым низким энергиям поверхностей среди всех ранее предложенных, а значит являются термодинамически устойчивыми. Изображения СТМ, рассчитанные на основе предложенных моделей, детально согласуются с экспериментальными СТМ изображениями этих поверхностей, полученными при обеих полярностях приложенного напряжения (рис. 2).

Кроме того, с помощью методов СТМ, ДМЭ и ТФП исследована структура высокоиндексной поверхности Si(47 35 7) (вицинальной по отношению к (110)). Было найдено, что поверхность имеет периодичность 1×1 (как в объеме кристалла), однако при этом она значительно реконструирована и содержит пентамеры, идентичные наблюдаемым на поверхностях (110) кремния и германия. На основе универсального структурного блока разработана атомная модель поверхности Si(47 35 7), хорошо согласующаяся с экспериментальными СТМ изображениями этой поверхности и имеющая достаточно низкую энергию формирования.

Таким образом, в этой работе была решена важная фундаментальная задача о структуре поверхностей (110) кремния и германия и их вициналей. Было показано, что все эти поверхности построены на основе единого универсального структурного блока, состоящего из пентамера с межузельным атомом и соседней реконструированной области. Эта работа, в частности, является завершением длительных исследований структуры пентамеров на поверхностях (110) кремния и германия.

#### 4.5 Иллюстрации, визуализация результатов.

Рис. 1. Универсальный структурный блок семейства поверхностей (110) кремния и германия, состоящий из пентамера с межузельным атомом и соседней реконструированной области. Межузельный атом указан стрелкой. Красные шары – атомы универсального структурного блока, синие шары – атомы верхнего слоя, зеленые шары – атомы среднего слоя, белые шары – атомы нижнего слоя. (а) Вид сверху. (b) Вид сбоку.

Рис. 2. Экспериментальные [Phys. Rev. B 61, 3006 (2000)] и теоретические СТМ изображения поверхности Si(110)-16×2. Овалами выделены группы из двух универсальных структурных блоков (пентамеров).

#### Литература:

- [1] R. Zhachuk, S. Teys, Phys. Rev. B 95, 041412(R) (2017).
- [2] R. Zhachuk, J. Coutinho, K. Palotás, J. Chem. Phys. 149 (2018) 204702.
- [3] J. Dąbrowski, H.-J. Müssig, G. Wolff, Phys. Rev. Lett. 73 (1994) 1660.

#### 5. Эффект от использования кластера в достижении целей работы.

Основной результат этой работы, т.е. атомная структура универсального структурного блока семейства поверхностей (110) кремния и германия, получен с помощью расчетов на основе ТФП на кластере НГУ. При этом расчетные энергии и СТМ изображения поверхностей сравнивали с новыми и уже опубликованными экспериментальными данными.

#### 6. Перечень публикаций, содержащих результаты работы.

- 1) R. A. Zhachuk, A. A. Shklyaev, “Universal building block for (110)-family silicon and germanium surfaces”, Applied Surface Science (Impact Factor: 6.707), 494, 46 (2019). DOI: 10.1016/j.apsusc.2019.07.144
- 2) R. A. Zhachuk, A. E. Dolbak, A. A. Shklyaev, “Atomic structure of high Miller index Si(47 35 7) surface”, Surface Science (Impact Factor: 1.942), 693, 121549 (2020). DOI: 10.1016/j.susc.2019.121549

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

Оборудование, установленное на кластере НГУ, позволяет решать большинство имеющихся расчетных задач. Хотелось бы, чтобы на части новых узлов walltime увеличили с 24 часов до хотя бы 100 часов. Хотелось бы также, чтобы были решены проблемы с перегревом кластера и перебоями в электроэнергии.