

1. Тема работы: “ Динамика адатомов Sn вблизи ступени на поверхности Si(111)- $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -Sn”.

2. Состав коллектива:

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

Латышев Александр Васильевич, ИФП СО РАН, д.ф.-м.н., академик РАН.

3. Информация о гранте:

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант 19-72-30023).

4. Научное содержание работы.

4.1. Аннотация к работе.

Изучены атомная структура ступеней на поверхности Si(111)- $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -Sn и динамика адатомов Sn вблизи них. Работа выполнена с помощью расчетов на основе теории функционала плотности (ТФП) и сравнения полученных данных с экспериментальными результатами сканирующей туннельной микроскопии (СТМ). Разработана атомная модель ступени, состоящая из цепочек атомов Sn вдоль краев ступеней. Эта структура приводит к формированию двойных потенциальных ям вблизи ступеней, действующих как ловушки для диффундирующих атомов Sn. Найдено, что атомы Sn, флуктуирующие в двойных потенциальных ямах, приводят к флуктуирующему туннельному току СТМ в этих областях.

4.2. Современное состояние проблемы.

Среди других химических элементов, используемых при создании гетероструктур на кремнии для применений в микро- и оптоэлектронике, олово вызывает особый интерес, так как оно относится к той же группе элементов, что и германий с кремнием и используется в качестве сурфактанта при росте. В этой работе с помощью методов сканирующей туннельной микроскопии (СТМ) и расчетов на основе теории функционала плотности была исследована атомная структура ступеней на поверхности Si(111)- $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -Sn и динамика адатомов Sn вблизи них.

Экспериментально динамику флуктуирующих адатомов Sn на поверхности Si(111)- $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -Sn регистрировали с помощью записи туннельного тока от времени при отключенной системе обратной связи в СТМ [1-3]. При температуре 80 К динамика адатомов регистрировалась только на нижних террасах вблизи ступеней. Вид зависимости туннельного тока от времени в таких областях представляет собой шум, случайным образом переключающийся между верхним и нижним значением туннельного тока.

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

С помощью расчетов из первых принципов исследована структура поверхности Si(111)- $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -Sn и динамика адсорбированных атомов Sn на ней. Расчеты выполнены

на основе теории функционала плотности с использованием программного пакета Siesta (<https://departments.icmab.es/leem/siesta>).

Разработана атомная модель ступени, состоящая из цепочек атомов Sn вдоль краев ступеней (рис. 1(a)). Предложенная модель обладает наименьшей энергией формирования среди 50 рассмотренных моделей в широком диапазоне химического потенциала атомов Sn. Атомная модель также хорошо согласуется с экспериментальными СТМ-изображениями высокого разрешения ступеней на поверхности Si(111)- $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -Sn, полученными при обеих полярностях приложенного напряжения.

Используя разработанную модель атомной ступени были рассчитаны карты потенциальной энергии для адсорбированных атомов Sn и Si на поверхности Si(111)- $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -Sn. Было найдено, что для атомов Sn наиболее глубокие минимумы потенциальной энергии находятся как раз на нижней террасе вблизи края ступени и при этом образуют двойную потенциальную яму (рис. 1(a)). Таким образом, атомы Sn, совершающие прыжки между двумя минимумами потенциальной ямы, приводят к флуктуирующему туннельному току СТМ в этих областях. Величина рассчитанного энергетического барьера в двойной потенциальной яме хорошо согласуется с частотой шума при записи туннельного тока в СТМ.

Расчет показал, что наиболее глубокие минимумы потенциальной энергии для адсорбированных атомов Si расположены со стороны верхних террас. Поэтому наличие на поверхности атомов кремния можно исключить, так как экспериментальные данные указывают на адсорбцию со стороны нижних террас.

На рис. 1(б) показана конфигурация связей атома Sn (Si) при адсорбции в двойной потенциальной яме. Сильные ковалентные связи образуются с рест-атомом R₂ нижней террасы и адатомом A₁ олова в составе цепочки атомов вдоль ступени. Слабая связь, выделенная стрелкой на рис. 1(б) образуется с атомом Si террасы, у которого уже все четыре связи насыщены. Эта слабая связь рвется при перескоке адсорбированного атома из одной половины двойной потенциальной ямы в другую.

4.5 Иллюстрации, визуализация результатов.

Рис. 1. (а) Поверхность потенциальной энергии для атома Sn на ступенчатой поверхности Si(111)- $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -Sn; атомная модель ступени наложена на изображение сверху. Светлые (темные) участки соответствуют областям с низкой (высокой) энергией. Белые маленькие кружки - атомы Si; желтые кружки - атомы Sn. A₁ и A₂ - адатомы Sn на краях ступеней; R₁ и R₂ - рест-атомы Si на верхней и нижней террасах (111). Ячейки структуры Si(111)- $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -Sn выделены сплошной линией. (б) Атомные конфигурации для локальных минимумов вблизи рест-атома R₂. Бирюзовые и синие кружки - атомы Si нижней и верхней террас (111); желтые

кружки - адатомы A_1 олова на краю ступени; черные кружки – дополнительный адсорбированный атом Sn (Si). Пунктиром показано положение адсорбированного атома во втором локальном минимуме двойной потенциальной ямы. Маленькой стрелкой на схеме отмечена слабая связь между адсорбированным атомом и атомом на нижней террасе Si(1 1 1).

Литература:

1. F. Ronci, S. Colonna, S. D. Thorpe, A. Cricenti, G. LeLay, Direct Observation of Sn Adatoms Dynamical Fluctuations at the Sn/Ge(111) Surface // Phys. Rev. Lett. 95, 156101 (2005). DOI: 10.1103/PhysRevLett.95.156101
2. F. Ronci, S. Colonna, A. Cricenti, G. LeLay, Evidence of Sn Adatoms Quantum Tunneling at the α -Sn/Si(111) Surface // Phys. Rev. Lett. 99, 166103 (2007). DOI: 10.1103/PhysRevLett.99.166103
3. F. Ronci, S. Colonna, A. Cricenti, and G. LeLay, Detecting and localizing surface dynamics with STM: a study of the Sn/Ge(111) and Sn/Si(111) α -phase surfaces // J. Phys.: Condens. Matter 22, 264003 (2010). DOI: 10.1088/0953-8984/22/26/264003

5. Эффект от использования кластера в достижении целей работы.

Теоретические результаты этой работы основаны на расчетах, выполненных с использованием кластера НГУ и их сравнения с экспериментальными данными. Интерпретация экспериментальных СТМ-данных этой работы основана на компьютерном моделировании атомной структуры изучаемой поверхности, расчете ее энергии формирования, СТМ-изображений и динамики адсорбированных атомов на ней.

6. Перечень публикаций, содержащих результаты работы.

- 1) R.A. Zhachuk, D.I. Rogilo, A.S. Petrov, D.V. Sheglov, A.V. Latyshev, S. Colonna, F. Ronci, “Atomic structure of a single step and dynamics of Sn adatoms on the Si(111)- $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ -Sn surface”, Physical Review B (Impact Factor: 4.0), 104, 125437 (2021). DOI: 10.1103/PhysRevB.104.125437

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

Оборудование, установленное на кластере НГУ, достаточно для решения большинства возникающих задач. Хотелось бы, чтобы была решена проблема с перегревом кластера, повторяющаяся каждое лето.