Атомная и электронная структура реконструированной поверхности Si(331)

Жачук Р.А.¹, Кутиньо Ж.²

¹ ИФП СО РАН, 630090, Новосибирск, пр. Ак. Лаврентьева, 13, Россия

² Department of Physics & I3N, University of Aveiro, Campus Santiago, 3810-193 Aveiro, Portugal

DOI 10.34077/Semicond2019-77

Высокоиндексные поверхности кремния перспективны для использования в спинтронике, а также широко используются в качестве подложек для выращивания упорядоченно расположенных наноструктур. В этом цикле работ [1-4] с помощью расчетов на основе теории функционала плотности была исследована атомная и электронная структура поверхности Si(331), исследованы её свойства и проведено сравнение с имеющимися экспериментальными данными. Хотя экспериментально поверхность Si(331) была известна более 25 лет, исследована многими методами и было предложено 5 моделей для объяснения её атомной структуры, реальная структура Si(331) все это время оставалась неизвестной из-за её большой сложности, сравнимой со структурой поверхности Si(111)-7×7.

Нами была разработана оригинальная модель реконструированной поверхности Si(331). Модель содержит идентичные структурные блоки, упорядоченные в зигзагообразные цепочки, которые отделены друг от друга димерами, динамически изгибающимися при комнатной температуре. Структурный блок (рис. 1) состоит из пентамера, атомы которого удерживает вместе межузельный атом, и реконструированной области (затененная часть). Пентамеры в реконструированной области упорядочены подобно пентамерам в структуре фуллерена C₂₀.

Разработанная модель поверхности Si(331) приводит к очень низкой энергии поверхности, сравнимой с энергией поверхности Si(111)-7×7, что свидетельствует о высокой стабильности поверхности. Изображения сканирующей туннельной микроскопии (СТМ), рассчитанные на основе предложенной модели, полностью согласуются с экспериментальными СТМ изображениями этой поверхности, полученными при обеих полярностях приложенного напряжения. Показано, что различие в размерах пентамера в атомной модели и полученных с помощью СТМ вызваны наклоном оборванных связей к нормали поверхности. Такое расхождение в размерах реальных атомных структур и их изображений, полученных с помощью СТМ, необходимо учитывать для корректной интерпретации экспериментальных данных, полученных на любых поверхностях с направленными оборванными связями.

Расчет электронной структуры поверхности Si(331) показал, что в объемной запрещенной зоне Si имеются два широких пика, один вблизи потолка валентной зоны, а другой вблизи дна зоны проводимости в согласии с данными сканирующей туннельной спектроскопии и фотоэлектронной спектроскопии. Найдено, что дырки на поверхности Si(331) преимущественно локализуются на пентамерах с межузельными атомами, а электроны на димерах и атомах реконструированной области, имеющих одну оборванную связь в sp³-подобной конфигурации. Величина расчетной запрещенной зоны поверхности составляет 0.58 эВ и полностью согласуется с экспериментальными данными.

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

[2] Р. Жачук, Ж. Кутиньо, *Письма в ЖЭТФ* **106**, 322 (2017).

[3] R. Zhachuk, J. Coutinho, K. Palotás, *J. Chem. Phys.* **149**, 204702 (2018).

[4] Р. Жачук, Ж. Кутиньо, *ЖЭТФ* **155**, 103 (2019).