

На правах рукописи

ЖАЧУК Руслан Анатольевич

**СТРУКТУРА ПОВЕРХНОСТЕЙ КРЕМНИЯ И ГЕРМАНИЯ
И ЕЕ ВЛИЯНИЕ НА ДИНАМИКУ АДАТОМОВ
И ФОРМИРОВАНИЕ НАНОСТРУКТУР**

Специальность – 1.3.8
Физика конденсированного состояния

АВТОРЕФЕРАТ
диссертации на соискание ученой степени
доктора физико-математических наук

Новосибирск
2024

Работа выполнена в федеральном государственном бюджетном учреждении науки «Институт физики полупроводников им. А. В. Ржанова Сибирского отделения Российской академии наук», г. Новосибирск.

Научный консультант: Терещенко Олег Евгеньевич, доктор физико-математических наук, профессор РАН, федеральное государственное бюджетное учреждение науки «Институт физики полупроводников им. А. В. Ржанова СО РАН»

Официальные оппоненты: Авакян Леон Александрович, доктор физико-математических наук, профессор Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Южный федеральный университет»

Ельцов Константин Николаевич, доктор физико-математических наук, заведующий отделом технологий и измерений атомного масштаба, заведующий кафедрой квантовых технологий Федерального государственного бюджетного учреждения науки Федеральный исследовательский центр «Институт общей физики им. А. М. Прохорова РАН»

Гринберг Яков Симхонович, доктор физико-математических наук, главный научный сотрудник кафедры прикладной и теоретической физики Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Новосибирский государственный технический университет»

Ведущая организация: Федеральное государственное бюджетное учреждение науки «Институт автоматики и процессов управления ДВО РАН», г. Владивосток

Защита состоится «30» апреля 2024 года в 15 часов на заседании диссертационного совета 24.1.134.01 в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Институте физики полупроводников им. А. В. Ржанова Сибирского отделения Российской академии наук по адресу: 630090, Новосибирск, проспект академика Лаврентьева, 13.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова Сибирского отделения Российской академии наук» и на сайте http://_____

Автореферат разослан «__» _____ 2024 г.

Ученый секретарь диссертационного совета,
доктор физико-математических наук

Погосов Артур Григорьевич

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы Развитие полупроводниковых нанотехнологий и приборов на их основе базируется на понимании атомной структуры и свойств поверхности. Поэтому исследование структуры и морфологии поверхностей полупроводников, влияния на нее адсорбции инородных атомов, изучение поверхностной диффузии и начальных стадий роста слоев является важной и актуальной задачей. Исследование структуры и свойств чистых поверхностей при этом имеет особое значение, так как практически любая работа, связанная с формированием полупроводниковых наноструктур, начинается с чистой поверхности.

Поверхности многих полупроводниковых кристаллов обычно обладают собственной сложной атомной структурой (*реконструкцией*), отличной от структуры в плоскостях, параллельных поверхности, в объеме кристалла. Это относится как к чистым поверхностям, так и с примесными атомами [1]. Реконструкция поверхности непосредственно определяет ее многие свойства, такие как электронную структуру, диффузию адатомов, места зародышеобразования и др. Формирование наноструктур на поверхности также во многом зависит от реконструкции поверхности подложки и наличия на ней ступеней. Например, одним из наиболее эффективных способов формирования больших массивов наноструктур является использование процессов самосборки (самоорганизации). В этом процессе формирование наноструктур происходит на структурных элементах поверхности, таких как атомные ступени или ячейки реконструкции поверхности, во многом определяя их взаимное расположение, размер и форму. Так, была продемонстрирована возможность создания нанобъектов типа “магических” кластеров с четко определенным составом и структурой внутри ячеек поверхностной структуры $\text{Si}(1\ 1\ 1) - 7 \times 7$ [2].

Поверхности $\text{Si}(1\ 1\ 1)$, как сингулярные, так и ступенчатые, лучше подходят для формирования наноструктур, чем поверхности $\text{Si}(0\ 0\ 1)$. Это объясняется тем, что поверхность $\text{Si}(1\ 1\ 1)$ имеет реконструкцию 7×7 с большой ячейкой. Размеры изломов ступеней кратны размеру ячейки поверхности и поэтому плотность дефектов на поверхности $\text{Si}(1\ 1\ 1)$ низкая. В частности, было показано, что вицинальные поверхности $\text{Si}(1\ 1\ 1)$ можно приготовить с высокой степенью структурного совершенства [3]. В то же время ячейка 2×1 поверхности $\text{Si}(0\ 0\ 1)$ имеет гораздо меньшие размеры, поэтому ступени на этой поверхности менее упорядоченные.

Более 90% всех полупроводниковых приборов состоят из кремния. Структуру поверхностей кремния и германия предпочтительно исследовать совместно. Во-первых, атомы этих элементов обладают близкими физическими и химическими свойствами. Поэтому можно ожидать, что

атомная структура поверхностей этих кристаллов будет подобна и, сравнивая полученные результаты можно проследить тенденции изменения структуры и понять закономерности их формирования. Во-вторых, система Ge/Si вызывает значительный интерес в связи с тем, что технология создания устройств на основе Ge/Si совместима с уже имеющейся комплементарной технологией металл-оксид-полупроводник для Si. В то же время использование Ge дает ряд преимуществ. Например, подвижность носителей заряда в Ge больше, чем в Si [4]. Кроме того, наноструктуры Ge/Si с квантовыми точками являются перспективными для применения в оптоэлектронике [5]. Так как система Ge/Si является напряженной, то из этого следует, что влияние упругой деформации слоев Ge и Si на атомную структуру их поверхностей и диффузию адатомов является важной темой исследований.

Известно весьма ограниченное число поверхностей кремния и германия, являющихся гладкими при комнатной температуре. Кроме низкоиндексных поверхностей (0 0 1), (1 1 1) и (1 1 0), это высокоиндексные (1 1 3) и (3 3 1). Высокая стабильность этих поверхностей обусловлена низкой энергией формирования, которая непосредственно зависит от атомной структуры поверхности. Из перечисленных выше поверхностей в большинстве экспериментальных и теоретических исследований изучались Si(0 0 1) и Si(1 1 1), хотя в промышленности в основном используется поверхность Si(0 0 1). Структура высокоиндексных поверхностей представляет значительный интерес, так как было продемонстрировано, что на них возможен рост эпитаксиальных слоев с низкой плотностью дефектов и низкой шероховатостью поверхности [6,7]. Это связано с сильной анизотропией этих поверхностей, из-за чего формирование антифазных доменов и кластеризация пронизывающих дислокаций оказываются подавлены. На момент выполнения работы структура поверхностей (0 0 1), (1 1 1) и (1 1 3) кремния и германия была твердо установлена. Однако, несмотря на множество предложенных моделей реконструированных поверхностей (1 1 0) и (3 3 1), ни одну из них нельзя было считать удовлетворительной, так как все они вызвали множество противоречий и плохо описывали имеющиеся экспериментальные данные. Отсутствие надежных атомных моделей реконструированных поверхностей (1 1 0) и (3 3 1) кремния и германия делает невозможным исследование свойств этих поверхностей с помощью расчетов, основанных на первых принципах, а также серьезно затрудняет интерпретацию экспериментальных данных.

Главная трудность в определении атомной структуры поверхности состоит в существовании большого количества атомных конфигураций даже для ячеек небольшого размера. Эксперименты с использованием сканирующей туннельной микроскопии и расчеты на основе теории

функционала плотности представляют собой два взаимодополняющих метода, которые часто используются вместе для определения структуры поверхности. В настоящее время предсказание структуры поверхности кристалла с большой ячейкой на основе одних лишь расчетов является сложной задачей из-за высокой вычислительной ресурсоемкости таких задач. Экспериментальные данные микроскопии помогают сузить поиск возможных атомных конфигураций, показывая реальную структуру поверхности образца в атомном масштабе. Однако интерпретация изображений туннельной микроскопии с высоким разрешением сама по себе достаточно сложна, поскольку эти изображения не отражают напрямую положения атомных ядер. В упрощенном виде эти изображения представляют собой комбинацию вкладов от топографии и электронной структуры поверхности образца [8,9]. Следовательно, интерпретация таких изображений, в свою очередь, может требовать знания атомной структуры поверхности и расчетов на основе теории функционала плотности.

Изложенное выше определило направление исследований – изучение структуры поверхностей Si и Ge и ее влияния на динамику адатомов и формирование наноструктур.

Целью диссертационной работы является установление закономерностей формирования атомных структур чистых поверхностей кремния и германия, исследование их устойчивости и влияния структуры поверхности на динамику адатомов и формирование наноструктур.

Для достижения цели работы ставятся следующие задачи:

1. Исследовать устойчивость реконструкций поверхностей Si(1 1 1) и Ge(1 1 1) к упругим деформациям решетки и влиянию температуры.
2. Изучить влияние структуры поверхностей Si(1 1 1) и Ge(1 1 1) и их упругих деформаций на диффузию адатомов.
3. Исследовать устойчивость элементов реконструкции тройных ступеней на поверхности Si(7 7 10) к изгибам и изучить возможность формирования нанопроволок и наноточек на этой поверхности.
4. Определить атомную структуру реконструированных поверхностей (3 3 1) и (1 1 0) кремния и германия и их вициналей.

Научная новизна работы Были получены теоретические и экспериментальные результаты, главные из которых перечислены ниже.

1. Теоретически показано, что структура 7×7 поверхности Si(1 1 1) при температурах ниже 300 – 400 К является метастабильной и должна перестраиваться в структуру 5×5 . Наблюдение структуры 7×7 при

более низких температурах вызвано низким коэффициентом диффузии атомов Si, затрудняющей фазовый переход.

2. Теоретически установлено соответствие между латеральными упругими деформациями решетки в диапазоне от -0.04 до 0.04 и структурой чистых поверхностей Si(1 1 1) и Ge(1 1 1). Показано, что образование доменов структуры $c(2 \times 4)$ на поверхности тонких пленок Si/Ge(1 1 1) вызвано растягивающей деформацией решетки Si.
3. Теоретически найдены стабильные места адсорбции, их относительные энергии, основные пути диффузии и соответствующие им энергии активации для адатомов Sr и Ge на поверхностях Si(1 1 1) и Ge(1 1 1) со структурами 5×5 и 7×7 . Показано, что основные пути миграции адатомов связаны с образованием ковалентных связей между адатомами и атомами димеров в составе структур 5×5 и 7×7 .
4. Экспериментально показано, что вид изображений сканирующей туннельной микроскопии, наблюдающихся при тепловом движении адатомов в ячейке структуры Si(1 1 1) – 7×7 , зависит от скорости сканирования иглы. Сравнение результатов Монте-Карло моделирования таких изображений с экспериментальными данными показало, что средняя скорость движения атомов Sr в пределах ячейки 7×7 при комнатной температуре составляет ≈ 300 нм/с.
5. Теоретически показано, что скорость диффузии адатомов Ge по поверхностям Ge(1 1 1) со структурами 5×5 и 7×7 одинакова. Установлено, что это происходит из-за того, что структура 5×5 состоит из того же набора структурных блоков, что и 7×7 , упорядоченных аналогичным образом. Таким образом, одинаковое локальное атомное строение поверхности приводит к идентичным диффузионным барьерам.
6. Теоретически, на основе расчетов установлен механизм увеличения диффузионного барьера при сжатии поверхностей Ge(1 1 1) со структурами 5×5 и 7×7 . Он состоит в усилении связей в димерах структур 5×5 и 7×7 и, как следствие, ослаблении связей между адатомом и димером при сжатии поверхности.
7. Теоретически показано, что на тройных ступенях, формирующихся на вицинальных поверхностях Si(1 1 1), имеются как статически изогнутые элементы структуры, так и динамически изгибающиеся при комнатной температуре под действием тепловых флуктуаций. Установлено, что статический изгиб элементов структуры вызван их кулоновским взаимодействием с ближайшим атомным окружением.
8. Экспериментально обнаружена зависимость формы и размеров растущих на поверхности Si островков Ag от количества

предварительно адсорбированного на поверхности Si кислорода. Продемонстрирована возможность формирования плотных массивов упорядоченно расположенных и с высокой однородностью форм и размеров наноструктур Ag на ступенчатой поверхности Si(7 7 10): при небольших покрытиях кислорода (≈ 0.003 монослоя) формируются нанопроволоки Ag, а при более высоких покрытиях (≈ 0.025 монослоя) - наноточки Ag.

9. Теоретически установлено, что реконструированные поверхности (1 1 0) и (3 3 1) кремния и германия и их вицинали построены на основе подобных компактных структурных блоков, состоящих из пентамера с межузельным атомом и соседней реконструированной области. Для поверхностей обеих ориентаций разработаны структурные блоки и на их основе построены атомные модели всех структур, наблюдающихся на этих поверхностях.
10. Теоретически, на примере поверхности Si(3 3 1) показано, что если направления оборванных связей атомов поверхности не перпендикулярны ей, то положения регистрируемых пятен на изображениях сканирующей туннельной микроскопии не будут соответствовать фактическим координатам атомных ядер на поверхности. Это явление необходимо принимать во внимание при интерпретации экспериментальных изображений высокого разрешения сканирующей туннельной микроскопии.

Теоретическая и практическая значимость работы состоит в том, что полученные знания о структуре поверхностей Si и Ge и ее влиянии на динамику атомов на поверхности и рост наноструктур могут служить основой для разработки новых функциональных материалов. Например, установленные зависимости структуры поверхностей Si(1 1 1) и Ge(1 1 1) от их упругих деформаций могут использоваться для быстрого определения деформаций решетки поверхности при росте пленок Ge на Si, имеющих практическую ценность. Найденная зависимость размеров и формы образующихся на поверхности Si островков Ag от концентрации адсорбированного на поверхности кислорода открывает широкие возможности для создания различных наноструктур. С установлением атомной структуры поверхностей (1 1 0) и (3 3 1) кремния и германия стало возможным корректно интерпретировать результаты, полученные с использованием этих подложек, осознанно планировать эксперименты по изменению их свойств и исследовать свойства этих поверхностей теоретически, с применением расчетов, основанных на первых принципах.

Методология и методы исследования Исследования проводились методами сканирующей туннельной микроскопии (СТМ), дифракции медленных электронов (ДМЭ), электронной оже-спектроскопии (ЭОС) и с помощью расчетов на основе теории функционала плотности (ТФП). В качестве объектов исследования использовались образцы кристаллического кремния различных ориентаций, изготовленные в Институте физики полупроводников СО РАН. Осаждение атомов адсорбата на поверхность образцов проводили в вакуумной камере, из специально изготовленных источников. Эксперименты проводили при комнатной температуре в сверхвысоком вакууме.

Теоретическое исследование атомной структуры поверхностей Si и Ge и динамики адатомов проводилось с использованием стандартных программных пакетов, реализующих метод функционала плотности (SIESTA, VASP, AIMPRO) и использующих метод псевдопотенциалов. Для исследования атомной структуры поверхности проводился расчет энергии формирования поверхности (обычно при $T = 0$ К) и ее теоретических изображений сканирующей туннельной микроскопии, проводилось сравнение с имеющимися экспериментальными данными. При исследовании динамики адатомов на поверхности строилась карта поверхности потенциальной энергии для адсорбированного атома, по ней определялись устойчивые места адсорбции, основные пути диффузии адатома и соответствующие энергии активации.

Положения, выносимые на защиту

1. Структура 7×7 поверхности Si(1 1 1) при температурах ниже 300 – 400 К является метастабильной и должна перестраиваться в структуру 5×5 . Этот фазовый переход затруднен из-за низкого коэффициента диффузии атомов Si при температурах около комнатной и ниже. Установлены границы устойчивости различных структур на поверхностях Si(1 1 1) и Ge(1 1 1) при латеральных упругих деформациях решетки в диапазоне от -0.04 до 0.04 и найдено, что формирование доменов структуры $c(2 \times 4)$ на поверхности тонких пленок Si на Ge(1 1 1) вызвано растягивающей деформацией решетки Si. Формирование доменных границ структуры $c(2 \times 4)$ объясняется сегрегацией атомов Ge на поверхности растущей пленки Si.
2. Основные пути миграции адатомов Ge и Sr по поверхностям Ge(1 1 1) и Si(1 1 1) связаны с образованием ковалентных связей между этими адатомами и атомами димеров в составе поверхностных структур 5×5 и 7×7 . Экспериментально измеренная скорость диффузии адатомов Ge по поверхностям Ge(1 1 1) с этими структурами одинаковая из-за одинакового локального атомного строения реконструкций 5×5 и 7×7 . Диффузионный барьер на поверхностях со структурами 5×5 и

7×7 увеличивается при сжатии поверхности из-за усиления связей в димерах этих структур и соответствующего ослабления связей между адатомом и атомом димера.

3. Вид изображений сканирующей туннельной микроскопии, на которых регистрируются флуктуации туннельного тока, вызванные тепловым движением адатома в ячейке поверхностной структуры, зависит от скорости сканирования иглы. Серия таких изображений, полученных при разных скоростях сканирования, позволяет получить информацию о скорости движения адатома.
4. Тройные ступени на поверхности $\text{Si}(7 \ 7 \ 10)$ имеют как статически изогнутые элементы структуры, так и динамически изгибающиеся при комнатной температуре. Статический изгиб элементов структуры вызван их кулоновским взаимодействием с ближайшим атомным окружением. На форму образующихся на поверхности $\text{Si}(7 \ 7 \ 10)$ островков Ag влияет предварительная адсорбция кислорода. В зависимости от концентрации кислорода на поверхности $\text{Si}(7 \ 7 \ 10)$ формируются нанопроволоки или наноточки Ag.
5. Реконструированные поверхности $(1 \ 1 \ 0)$ и $(3 \ 3 \ 1)$ кремния и германия и их вицинали построены на основе подобных компактных структурных блоков, состоящих из пентамера с межузельным атомом и соседней реконструированной области. Атомные модели этих поверхностей, построенные на основе таких структурных блоков, хорошо описывают имеющиеся экспериментальные данные и приводят к низкой энергии формирования поверхности.

Научная обоснованность и достоверность представленных в диссертационной работе экспериментальных и теоретических результатов определяется корректностью постановки решаемых задач и их физической обоснованностью, применением различных взаимодополняющих современных методов исследования поверхности, а также соответствием полученных результатов известным экспериментальным и теоретическим данным.

Апробация результатов работы Результаты работы были представлены на российских и международных конференциях: международная конференция “Микро- и наноэлектроника – 2005” (г. Звенигород, Россия, 3-7 октября 2005 г.); II международная конференция по передовым наноматериалам (г. Авейро, Португалия, 22-25 июня 2008 г.); IX Российская конференция по физике полупроводников (г. Новосибирск, г. Томск, Россия, 28 сентября - 3 октября 2009 г.); VI международная конференция и V школа молодых ученых и специалистов по актуальным проблемам физики,

материаловедения, технологии и диагностики кремния, нанометровых структур и приборов на его основе, “Кремний-2009” (г. Новосибирск, Россия, 7-10 июля 2009 г.); XI международная конференция и X Школа молодых ученых и специалистов по актуальным проблемам физики, материаловедения, технологии и диагностики кремния, нанометровых структур и приборов на его основе, “Кремний-2016” (г. Новосибирск, Россия, 12-15 сентября 2016 г.); XIV Российская конференция по физике полупроводников (г. Новосибирск, Россия, 9-13 сентября 2019 г.); I международная конференция “Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов” (г. Москва, Россия, 21-23 октября 2019 г.); международная конференция “Физика полупроводниковых структур”, посвященная 100-летию со дня рождения академика А. В. Ржанова (г. Новосибирск, Россия, 6-10 апреля 2020 г.); II международная конференция “Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов” (г. Москва, Россия, 19-21 октября 2020 г.); III международная конференция “Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов” (г. Москва, Россия, 25-27 октября 2021 г.); XIV Международная конференция и XIII Школа молодых ученых и специалистов по актуальным проблемам физики, материаловедения, технологии и диагностики кремния, нанометровых структур и приборов на его основе, «Кремний-2022” (г. Новосибирск, Россия, 26-30 сентября 2022 г.); X международная конференция им. Завойского “Физика и химия элементарных химических процессов” (г. Новосибирск, Россия, 5-9 сентября 2022 г.); V международная конференция “Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов” (г. Москва, Россия, 23-25 октября 2023 г.).

Публикации По теме диссертации опубликовано 27 статей в рецензируемых научных журналах, входящих в список ВАК. Общее число опубликованных работ у соискателя 48.

Структура и объем диссертации Диссертация состоит из введения, пяти глав, заключения и списка литературы. Объем диссертации составляет 238 страниц и включает 12 таблиц, 115 рисунков и список литературы из 206 наименований.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обоснована актуальность темы исследований и сформулирована цель и задачи работы, обоснована научная новизна и практическая значимость полученных результатов, изложены основные положения, выносимые на защиту и личный вклад автора.

В первой главе представлен обзор методов исследования поверхностей кристаллов, использованных в работе. В качестве основных были применены такие взаимодополняющие теоретические и экспериментальные методы как расчет на основе ТФП (первый раздел главы) в сравнении с экспериментальными данными, полученными с помощью СТМ (второй раздел). В то время как метод СТМ позволяет получить первоначальные экспериментальные данные о морфологии и структуре поверхности, метод ТФП позволяет корректно интерпретировать их, а также получить дополнительные данные, недоступные для непосредственного экспериментального наблюдения. В качестве дополнительных методов изучения структуры поверхности использовались ДМЭ и ДМЭ-АПР (ДМЭ с анализом профилей дифракционных рефлексов, третий раздел). Химический состав поверхности контролировали с помощью метода ЭОС (четвертый раздел).

Во второй главе кратко рассмотрены основные понятия и представления, касающиеся поверхностей кристаллов и приведен обзор имеющихся данных о поверхностях Si и Ge из литературы. В первом разделе дано определение равновесной формы кристалла, классификация поверхностей и перечислены основные гладкие поверхности Si и Ge. Рассмотрены известные данные, касающиеся вицинальных поверхностей Si(1 1 1), в том числе ступенчатых поверхностей, обладающих высокой степенью упорядоченности. Дано представление об эпитаксиальном росте кристаллов и рассмотрены основные механизмы роста. Во втором разделе дано понятие о реконструкции поверхности кристаллов и детально рассмотрены основные сведения, касающиеся атомной структуры поверхностей (0 0 1), (1 1 1), (1 1 3), (1 1 0), (3 3 1) кремния и германия и ступенчатой поверхности Si(7 7 10). В третьем разделе дано определение квантово-размерного объекта и рассмотрены способы формирования больших массивов наноструктур на поверхности.

Третья глава посвящена теоретическим и экспериментальным исследованиям относительной термодинамической устойчивости атомных структур на чистых поверхностях (1 1 1) кремния и германия и их влияния на диффузию адсорбированных атомов. Решение этой задачи представляет большой интерес в связи с огромным количеством экспериментов, в которых эти поверхности использовались в качестве подложки. Результаты работы важны, в частности, для понимания атомных процессов, происходящих при росте в напряженной системе Ge/Si, имеющей практическое значение [5,10,11].

В первом разделе теоретически рассмотрен вопрос о термодинамической устойчивости структуры 7×7 на поверхности Si(1 1 1). Были рассчитаны относительные энергии формирования структур 3×3 , 5×5 , 7×7 , 9×9 и бесконечно большой, основанных на DAS-модели (dimers – adatoms – stacking faults, димеры – адатомы – дефекты упаковки) [12] при температуре 0 К. Было найдено, что наименьшей энергией формирования обладает поверхность Si(1 1 1) со структурой 5×5 , при этом энергия поверхности со структурой 7×7 примерно на $0.3 \text{ мэВ}/\text{Å}^2$ выше. Эти данные находятся в кажущемся противоречии с экспериментальными результатами, так как известно, что структура 7×7 является наиболее часто наблюдаемой на поверхности Si(1 1 1) после ее очистки. Для исключения погрешностей, вызванных различными реализациями ТФП в программном коде, этот результат был воспроизведен с использованием пакетов VASP [13] и SIESTA [14] и нескольких обменно-корреляционных функционалов: LDA PZ [15], GGA PBE [16], GGA PBEsol [17] и GGA PBE-D3 [18].

Для разрешения полученного противоречия был рассчитан вклад колебательных и электронных возбуждений в свободную энергию формирования поверхности Si(1 1 1) со структурами 5×5 и 7×7 в диапазоне температур от 0 до 1100 К. Для оценки вклада электронных возбуждений использовалось приближение Зоммерфельда для свободной энергии металлов [19]. Найдено, что вклад электронных возбуждений в свободную энергию поверхности по крайней мере на порядок меньше, чем вклад колебательных возбуждений и им можно пренебречь.

Установлено, что при повышенных температурах и при учете вклада колебательных возбуждений свободная энергия поверхности Si(1 1 1) со структурой 7×7 ниже, чем поверхности со структурой 5×5 . Это согласуется со стандартным способом приготовления чистой поверхности Si(1 1 1) – 7×7 , включающем в себя отжиг образца при температуре $\approx 1250 \text{ }^\circ\text{C}$ и последующее охлаждение до желаемой температуры. Согласно проведенным расчетам, фазовый переход от 7×7 к 5×5 должен происходить при температуре чуть выше комнатной (300 – 400 К).

Тем не менее, в экспериментах структура 7×7 наблюдается и при температурах ниже комнатной. Наиболее вероятным объяснением этого факта является существование высокого кинетического барьера, затрудняющего фазовый переход от 7×7 к 5×5 при низких температурах. Действительно, так как структуры 5×5 и 7×7 имеют разную атомную плотность [20], то фазовый переход требует удаления (или добавления) избыточных (или недостающих) поверхностных атомов Si. Однако диффузия атомов Si на поверхности Si(1 1 1) – 7×7 при комнатной температуре и

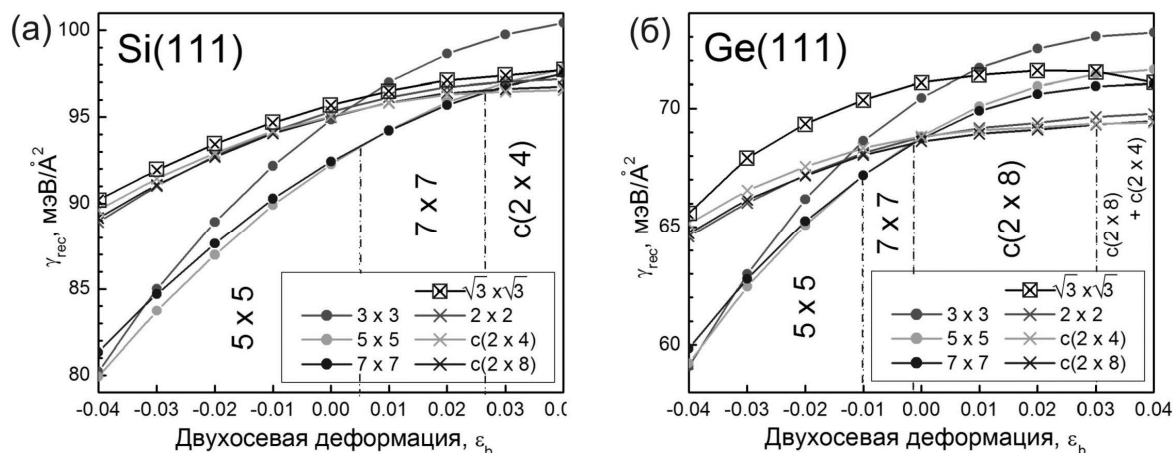


Рис. 1. Энергии формирования поверхностей (γ_{rec}), рассчитанные для различных двухосевых значений деформаций (ϵ_b) поверхностей Si(1 1 1) (а) и Ge(1 1 1) (б) с различной структурой.

ниже сильно затруднена из-за высокого энергетического барьера (≈ 1 эВ), разделяющего две половины элементарной ячейки 7×7 [21,22].

Во втором разделе обсуждается вопрос термодинамической устойчивости различных реконструкций поверхностей Si(1 1 1) и Ge(1 1 1) к воздействию упругих двухосевых деформаций (ϵ_b) и построена соответствующая фазовая диаграмма этих поверхностей. Хотя к моменту выполнения работы было известно, что упругая деформация поверхностей Si(1 1 1) и Ge(1 1 1) может вызывать изменение их атомной структуры [23], точных данных, позволяющих количественно оценить этот эффект, не было. Опубликованные в литературе расчетные данные были основаны либо на упрощенных моделях структуры поверхности (которые не включали в себя адатомы и другие важные элементы структуры), либо были получены с использованием эмпирического потенциала или расчетов с применением метода сильной связи [24,25].

На рис. 1 приведены рассчитанные энергии формирования $\gamma_{rec}(\epsilon_b)$ поверхностей Si(1 1 1) и Ge(1 1 1) с различной структурой. Энергии всех реконструированных поверхностей увеличиваются при изменении деформации поверхности от -0.04 до 0.04 (напряжение растяжения поверхности). Графики на рис. 1 разделены на две хорошо различимые группы: первая группа включает в себя DAS-структуры 3×3 , 5×5 и 7×7 , а вторая группа адатомные структуры $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$, 2×2 , $c(2 \times 4)$, $c(2 \times 8)$. Было показано, что разделение на группы связано с различными структурными блоками, из которых построены соответствующие поверхностные структуры.

Из рис. 1 (б) следует, что на поверхности Ge(1 1 1) в области вблизи $\epsilon_b = 0$ две группы структур имеют близкую энергию формирования и что

каждая из них может проявляться в эксперименте в зависимости от знака деформации. С другой стороны, DAS-структуры на поверхности Si(1 1 1) стабильны в большей части исследованного интервала деформаций.

Были проведены расчеты тензора напряжений для различных реально наблюдаемых и гипотетических структур для $\epsilon_b = 0$ и установлено, что все элементы структуры поверхностей (1 1 1) кремния и германия (димеры, адатомы и дефекты упаковки) приводят к напряжению растяжения поверхности (положительное значение тензора напряжений). Из рис. 1 также видно, что переход от деформации растяжения к деформации сжатия должен сопровождаться изменением структуры поверхности (1 1 1) в последовательности: [адатомная структура, $c(2 \times 4)$ или $c(2 \times 8)$] далее 7×7 и затем 5×5 как для Si, так и для Ge. Это связано с тем, что сжатие поверхности приводит к релаксации внутреннего растягивающего напряжения и поэтому энергетически выгодными становятся структуры с большим напряжением растяжения.

Было проведено детальное сравнение полученных теоретических результатов с имеющимися экспериментальными СТМ-данными. Показано, что фазовая диаграмма на рис. 1 (б) хорошо согласуется с последовательностью формирования структур на поверхности островков Ge в процессе роста Ge/Si(1 1 1) (как в процессе формирования смачивающего слоя, так и при росте островков Ge на смачивающем слое). Фазовые диаграммы на рис. 1 согласуются также с наблюдением структуры 5×5 на узких террасах (1 1 1) чистой ступенчатой поверхности Si(7 7 10) [26] и при росте Ge на этой поверхности [27].

Впервые показано, что при росте Si на поверхности Ge(1 1 1) формируются домены структуры $c(2 \times 4)$ в соответствии с фазовой диаграммой на рис. 1 (а). С помощью ТФП-расчетов и сравнения с экспериментальными СТМ-данными определена атомная структура доменных стенок. Продемонстрировано, что релаксация напряженных слоев Si(1 1 1) не является причиной формирования доменных стенок структуры $c(2 \times 4)$. Этот вывод сделан на основании того, что поверхность с однодоменной структурой всегда имеет более низкую энергию и поэтому формирование доменных стенок энергетически не выгодно. Было показано, что сегрегация атомов Ge на поверхности растущей пленки Si может приводить к формированию доменных стенок структуры $c(2 \times 4)$, так как этот процесс ведет к значительному уменьшению энергии поверхности. Причина уменьшения энергии поверхности Si при сегрегации атомов Ge на ней состоит в более слабой связи Ge-Ge по сравнению со связью Si-Si. Поэтому оборванные связи Ge, входящие в состав доменных стенок, являются менее энергетически затратными, чем оборванные связи Si.

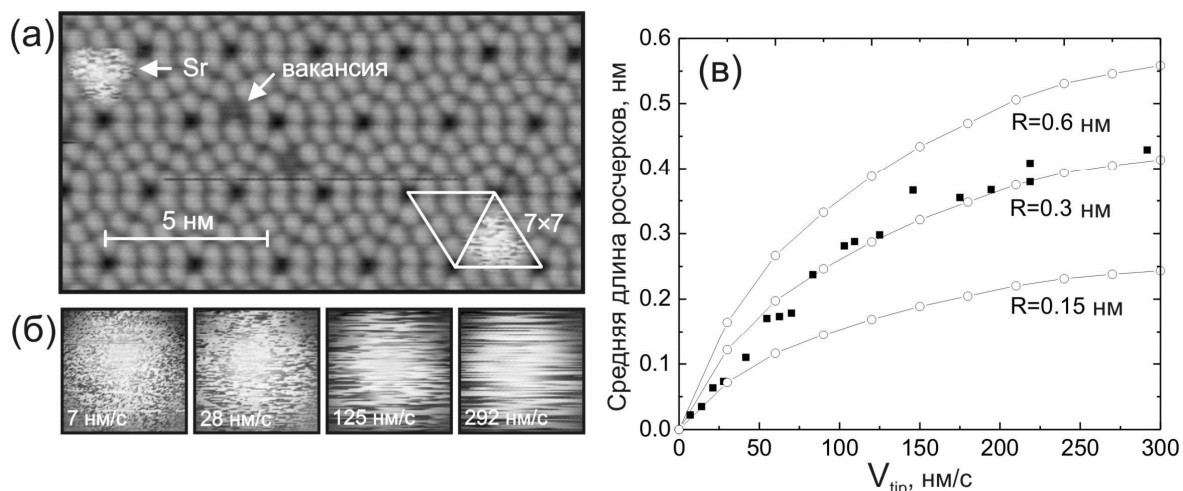


Рис. 2. (а) СТМ-изображение поверхности $\text{Si}(1\ 1\ 1) - 7 \times 7$ с адсорбированными атомами Sr, $U = +1.9$ В. На рисунке видны шумоподобные пятна, вызванные быстрым тепловым движением одиночных атомов Sr в пределах ячеек 7×7 . (б) Экспериментальные СТМ-изображения шумоподобного пятна, полученные при различных скоростях движения иглы СТМ, $U = +1.6$ В. Размер изображений 1.8×1.8 нм². (в) Зависимость средней длины росчерка на СТМ-изображениях от скорости иглы. Черные квадратики – экспериментальные данные, белые кружки – результаты Монте-Карло моделирования для параметра $R = 0.15$ нм, 0.3 нм и 0.6 нм.

В третьем разделе представлены экспериментальные и теоретические результаты исследований динамики адатомов Sr на поверхности $\text{Si}(1\ 1\ 1) - 7 \times 7$ и адатомов Ge на недеформированной и упруго-сжатой поверхностях $\text{Ge}(1\ 1\ 1)$ со структурами 7×7 и 5×5 .

При адсорбции атомов Sr в половинках ячеек 7×7 на поверхности $\text{Si}(1\ 1\ 1)$ наблюдаются шумоподобные пятна, вызванные быстрым тепловым движением этих адатомов (рис. 2 (а)). Подобные СТМ-изображения наблюдались ранее при адсорбции атомов других элементов – Si [28], Al [29], Tl [30], Sn [31], Pb [32], Ag [33], Y [34] и, таким образом, являются типичными.

Впервые экспериментально было показано, что длина росчерков, образующих шумоподобные пятна, зависит от скорости сканирования иглы СТМ (рис. 2 (б)). Была разработана программа для генерации СТМ-изображений, подобных представленным на рис. 2 (б), методом Монте-Карло моделирования. В модели предполагается, что адатом движется хаотически в пределах половинки ячейки 7×7 , а острие СТМ последовательно сканирует участок этой поверхности, линия за линией. Яркость на СТМ-изображении в

модели зависит от расстояния в плоскости xu между адатомом и острием иглы СТМ как $I \sim \exp(-r/R)$, где параметр R характеризует как размер адатома, так и острия иглы СТМ. Значение параметра R было получено из экспериментальных СТМ-изображений из величины перекрытия шумоподобного пятна с соседней половинкой ячейки 7×7 , в которой атом Sr отсутствовал ($R \approx 0.3$ нм). Другим параметром в модели было отношение скорости острия к скорости адатома стронция (V_{tip}/V_{Sr}). Этот параметр подбирали так, чтобы экспериментальная и теоретическая зависимости средней длины росчерков на СТМ-изображении от скорости острия совпадали (рис. 2 (в)). В результате была получена оценка скорости движения атома Sr в половинке ячейки 7×7 при комнатной температуре (≈ 300 нм/с).

Используя DAS-модель структуры 7×7 были рассчитаны поверхности потенциальной энергии для атома Sr на поверхности Si(1 1 1) и атома Ge на поверхности Ge(1 1 1) с этой структурой (рис. 3). Общей чертой обоих изображений является то, что наиболее глубокие минимумы энергии находятся в половинках ячеек структуры 7×7 , которые отделены друг от друга относительно высокими барьерами. Это согласуется с экспериментальными СТМ-данными, свидетельствующими о быстрых движениях атомов внутри половинок ячеек структуры и редких перескоках

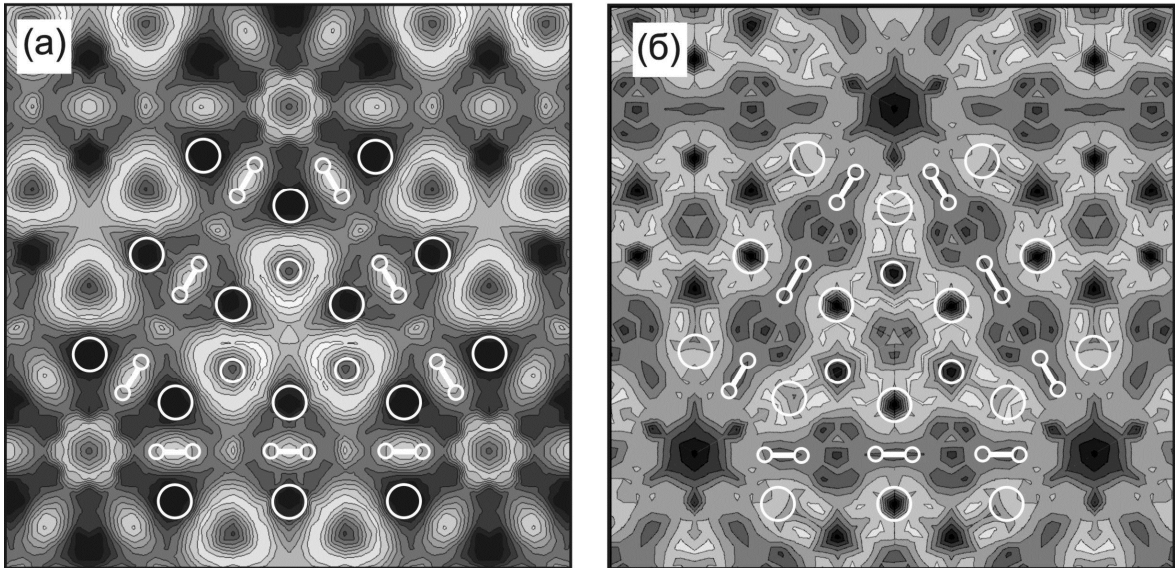


Рис. 3. Поверхности потенциальной энергии для: (а) атома Sr на поверхности Si(1 1 1) – 7×7 и (б) атома Ge на поверхности Ge(1 1 1) – 7×7 . Темные (яркие) области соответствуют высокой (низкой) энергии. В центре показана дефектная половинка ячейки структуры 7×7 и атомная модель этой структуры. Большие кружки – адатомы, средние кружки – рест-атомы, маленькие кружки с отрезками между ними – димеры.

атомов между ними. Полученный рельеф поверхности потенциальной энергии для Ge/Ge(1 1 1) – 7 × 7 близок рельефу, полученному для Si/Si(1 1 1) – 7 × 7 [22]. Поэтому отличие рельефов поверхности потенциальной энергии на рис. 3 (а) и (б) объясняется в основном разным размером адатомов Ge и Sr и их разной валентностью.

Наиболее глубокие минимумы для атома Sr на рис. 3 (а) образуют кольца вокруг рест-атомов. При этом одна из связей Sr-Si образуется с рест-атомом, а вторая – с адатомом Si. При вращении атома Sr по кольцу, связь Sr-рест-атом сохраняется, а вторая связь переключается с одного адатома Si на другой. Так как адатомы Si расположены близко друг к другу, а атом Sr достаточно большой, то разрыв одной связи и образование другой происходят одновременно, и это приводит к низкому энергетическому барьеру. Было показано, что глубокие минимумы для атома Ge на рис. 3 (б) связаны с формированием ад-димера с адатомами Ge, входящими в состав структуры 7 × 7. Величина энергетических барьеров внутри ячейки структуры 7 × 7 для Sr/Si(1 1 1) составляет 0.1 – 0.5 эВ, а для Ge/Ge(1 1 1) 0.2 – 0.3 эВ.

При перескоке диффундирующего атома в соседнюю ячейку на границе 7 × 7 происходит значительное ослабление связей с атомами подложки, так как в области димеров все связи поверхности замкнуты и это приводит к высокому энергетическому барьеру. Места перескоков границ ячейки 7 × 7 для атомов Ge и Sr разные, что связано с разным размером и валентностью этих атомов. Так, путь с минимальной высотой энергетического барьера для атомов Ge лежит между димером и угловой вакансией, а атомов Sr между димерами. Относительно низкий энергетический барьер в этих областях вызван формированием слабых ковалентных связей диффундирующего атома с атомами димеров (рис. 4 (а)). Величина энергетических барьеров для перескока диффундирующего атома в соседнюю ячейку 7 × 7 для Sr/Si(1 1 1) составляет 0.9 – 1.0 эВ, а для Ge/Ge(1 1 1) 0.4 – 0.5 эВ.

Широко распространено мнение, что скорость диффузии адатомов по поверхности должна сильно зависеть от ее структуры. Проведенное нами исследование показывает, что это не всегда так. Например, для структур, состоящих из одинаковых структурных блоков, скорости диффузии будут близки. Чтобы доказать это, была рассчитана поверхность потенциальной энергии для атома Ge на поверхности Ge(1 1 1) – 5 × 5 на основе DAS-модели структуры 5 × 5. Эта поверхность оказалась подобна той, что была получена для структуры 7 × 7 (рис. 3 (б)). Это происходит из-за того, что поверхности со структурами 5 × 5 и 7 × 7 состоят из одинаковых элементов структуры (димеров, адатомов и дефектов упаковки), упорядоченных аналогичным образом. Поэтому энергетический барьер между половинками ячеек 5 × 5 и коэффициенты диффузии для атомов Ge на поверхности со

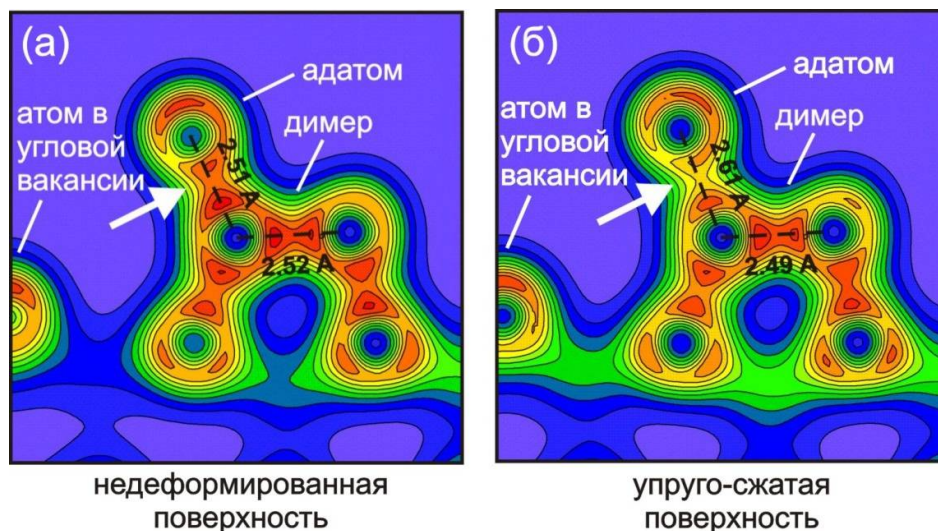


Рис. 4. Вертикальное сечение вдоль димерного ряда плотности валентных электронов для атома Ge, адсорбированного в седловой точке поверхности $\text{Ge}(1\ 1\ 1) - 5 \times 5$ вблизи угловой вакансии. Стрелкой показана ковалентная связь между адатомом и атомом димера. (а) Недеформированная поверхность. (б) Упруго-сжатая поверхность ($\epsilon_b = -0.04$).

структурой 5×5 близки тем, что были получены для поверхности со структурой 7×7 . Этот результат согласуется с экспериментальными СТМ-данными [35].

Дополнительно была рассчитана поверхность потенциальной энергии для атома Ge на упруго-сжатой на 4% поверхности $\text{Ge}(1\ 1\ 1) - 5 \times 5$. Было найдено, что энергетический барьер на такой поверхности увеличивается на 0.2 – 0.3 эВ по сравнению с недеформированной поверхностью $\text{Ge}(1\ 1\ 1) - 5 \times 5$, что соответствует экспериментальным СТМ-данным [35]. Интересно, что сжатие поверхностей металлов напротив, всегда приводит к уменьшению энергетического барьера, так как диффундирующий атом в этом случае находится на менее гофрированной поверхности [36,37]. Важно отметить, что металлическая связь является всенаправленной, тогда как ковалентные связи между атомами полупроводников направлены и это может значительно изменить характер зависимости. На момент выполнения работы влияние упругих деформаций поверхностей Si и Ge на диффузию адатомов было слабо изучено и этот вопрос представлял значительный интерес.

В результате подробного исследования этого явления было найдено, что увеличение энергетического барьера на упруго-сжатой поверхности $\text{Ge}(1\ 1\ 1)$ вызвано ослаблением связи между диффундирующим атомом и атомом димера при сжатии поверхности. Это сопровождается увеличением расстояния между этими атомами и уменьшением электронной плотности между ними (рис. 4). Ослабление этой связи в свою очередь вызвано

усилением связи между атомами димера при сжатии поверхности и увеличением электронной плотности между ними (то есть перераспределением электронной плотности от одной связи к другой). Следует отметить, что связь между атомами димера на поверхностях (1 1 1) с DAS-структурами всегда растянута по отношению к длине связи в объеме кристалла. Таким образом, при сжатии поверхности кристалла длина связи в димере становится ближе к равновесной длине связи между атомами.

Четвертая глава посвящена теоретическим и экспериментальным исследованиям атомных структур, формирующихся на ступенчатой поверхности Si(7 7 10) и исследованию возможности формирования массивов наноструктур на этой поверхности. Поверхность Si(7 7 10) является вицинальной поверхностью Si(1 1 1), отклоненной от нее на 10.0° . Эта поверхность имеет высокую амплитуду рельефа и большой период расположения атомных ступеней, что важно для формирования наноструктур. Так, при комнатной температуре поверхность состоит из эквидистантно расположенных с периодом 5.33 нм террас Si(1 1 1) шириной в одну ячейку 7×7 и тройных ступеней. Таким образом, поверхность Si(7 7 10) является удобной подложкой для роста различного рода наноструктур, так как хорошо упорядочена и имеющийся на поверхности рельеф может служить в качестве шаблона, определяя размер, взаимное расположение и форму наноструктур. Особый интерес представляет формирование металлических нанопроволок нанометрового масштаба, обладающих квантоворазмерными свойствами, для исследования проводимости в таких системах [38].

В первом разделе приведены результаты теоретических исследований изгибов элементов атомной структуры ступенчатой поверхности Si(7 7 10). В основу исследования была положена атомная модель поверхности Si(7 7 10) без изгибов (рис. 5) [39], которая получила подтверждение с помощью методов СТМ, атомно-силовой микроскопии и дифракции синхротронного излучения [39–42].

В результате исследования было найдено, что элементы структуры D_3^{\parallel} , TDU и ZR изгибаются в процессе релаксации поверхности. Атомы, сдвигающиеся в направлении кристалла имеют sp^2 -подобную конфигурацию орбиталей с p -подобной оборванной связью, а сдвигающиеся в направлении вакуума sp^3 -подобную конфигурацию. При этом происходит передача заряда от атомов, сдвигающихся внутрь (доноры) к атомам, сдвигающимся наружу (акцепторы). Для каждого из элементов структуры тройной ступени – TDU, ZR и D_3^{\parallel} существуют две возможные устойчивые конфигурации с изгибами. Показанная на рис. 5 конфигурация (наблюдаемая экспериментально), на которой доноры и акцепторы выделены темно-серым и светло-серым

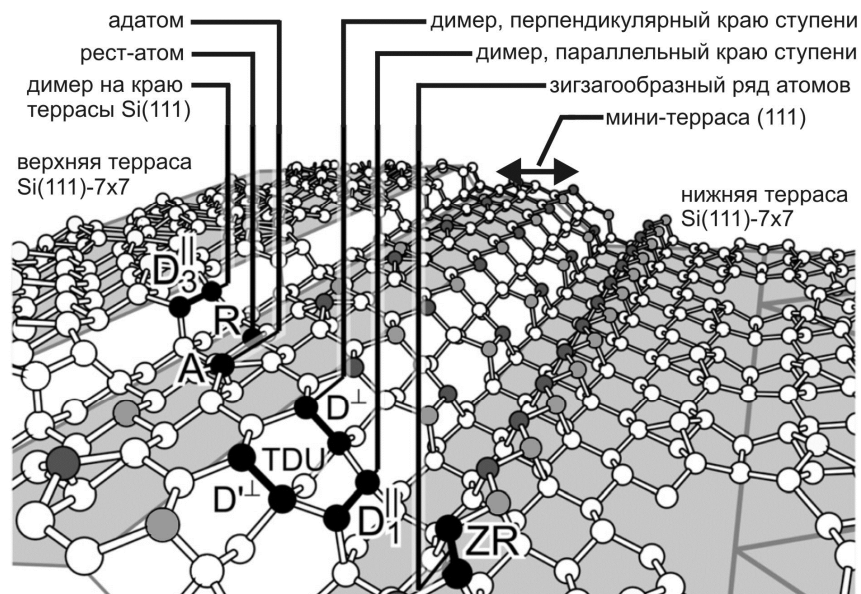


Рис. 5. Атомная модель тройной ступени на поверхности Si(7 7 10), состоящая из: зигзагообразного ряда атомов (zig-zag row, ZR), блока из трех димеров (triple dimer unit, TDU) D^\perp , $D^{\perp'}$ и D_1^\parallel , мини-террасы Si(1 1 1), вмещающей в себя адатомы (A) и рест-атомы (R), димера на краю террасы Si(1 1 1) (D_3^\parallel). Светло-серым и темно-серым цветами выделены атомы кремния, являющиеся акцепторами и донорами электронов после релаксации поверхности (сдвигающиеся в процессе релаксации наружу и внутрь кристалла соответственно).

цветами соответственно, имеет минимальную энергию. Были рассчитаны энергии и СТМ-изображения поверхности Si(7 7 10) со всеми возможными конфигурациями изгибов элементов структуры и установлено следующее.

1. Взаимодействие между элементами структуры TDU, ZR и D_3^\parallel достаточно слабое и им можно пренебречь.
2. Несмотря на зеркальную симметрию элементов TDU, их две возможные конфигурации изгибов не эквивалентны и имеют разную энергию. Это объясняется кулоновским взаимодействием TDU с зарядами на адатомах (положительны) и рест-атомах (отрицательны), расположенных на мини-террасе Si(1 1 1). Конфигурация изгибов TDU, имеющая минимальную энергию, обеспечивает наибольшее удаление от зарядов того же знака на мини-террасе. Этим обеспечивается наименьшая энергия кулоновского взаимодействия зарядов в TDU и зарядов на адатомах и рест-атомах на мини-террасе Si(1 1 1). Также установлено, что при отсутствии адатомов на мини-террасе элементы TDU имеют симметричную структуру, без изгибов.

3. Две возможные конфигурации изгибов ZR также не эквивалентны и имеют разную энергию. Это объясняется электростатическим взаимодействием атомов ZR и атомов верхнего бислоя поверхности Si(1 1 1). Показано, что аналогичные изгибы формируются на поверхности Si(1 1 1) – 2 × 1 (без ступеней), построенной целиком из элементов ZR.
4. Две возможные конфигурации изгибов димеров D_3^{\parallel} эквивалентны и имеют одинаковую энергию. Эти димеры, расположенные на краю террасы Si(1 1 1) и входящие в состав структуры 7 × 7, имеют низкий барьер между устойчивыми конфигурациями (≈ 35 мэВ). Поэтому при комнатной температуре они быстро переключаются из одного устойчивого положения в другое, подобно тому, как это имеет место для димеров на поверхности Si(1 1 1) – 2 × 1 при комнатной температуре. На экспериментальных СТМ изображениях димеры D_3^{\parallel} выглядят симметричными.

Во втором разделе приведены результаты экспериментальных исследований формирования наноструктур Ag на поверхности Si(7 7 10) при комнатной температуре. Выбор Ag обусловлен тем, что серебро растет эпитаксиально на поверхности Si(1 1 1) при комнатной температуре [43] и поэтому рост в этих условиях должен сохранять регулярную структуру тройных ступеней на поверхности Si(7 7 10). Было найдено, что форма образующихся на поверхности островков Ag существенно зависит от предварительной адсорбции на поверхности образца кислорода из остаточной атмосферы вакуумной камеры.

На рис. 6 (а) показано СТМ-изображение поверхности Si(7 7 10) после адсорбции 4.0 монослоев серебра при комнатной температуре сразу после процедуры очистки поверхности. Видны редко расположенные островки Ag, перекрывающие несколько террас Si(1 1 1), имеющие большой разброс по размерам и расположенные на поверхности неупорядоченно. На рис. 6 (б) показано СТМ-изображение массива нанопроволок Ag, сформированного на поверхности Si(7 7 10) после ее предварительной выдержки в вакуумной камере при давлении 5×10^{-10} Торр в течение 15 минут и последующей адсорбции 4.0 монослоев Ag при комнатной температуре. Ширина большинства сформированных нанопроволок Ag примерно равна ширине террас Si(1 1 1) и составляет ≈ 3 нм, а высота ≈ 1 нм. Выдержка образцов при давлении 5×10^{-10} Торр в течение 2-ух часов до осаждения Ag, приводит к формированию массива наноточек Ag. На рис. 6 (в) показано СТМ-изображение поверхности Si(7 7 10) после адсорбции 2.0 монослоев серебра при комнатной температуре. Образовавшиеся наноточки располагаются на террасах Si(1 1 1) и выровнены в линии, параллельные тройным ступеням.

Изучение сравнительной динамики адсорбции кислорода на поверхностях Si(1 1 1) и Si(7 7 10) с помощью ЭОС показало, что его концентрация на краях тройных ступеней растет значительно быстрее, чем на террасах Si(1 1 1). Это происходит из-за того, что плотность оборванных связей на краях ступеней выше, чем на террасах Si(1 1 1).

Таким образом, адсорбированный на поверхности кислород выступает при росте Ag в качестве сурфактанта, влияющего на форму растущих островков. Возможный механизм этого воздействия состоит в следующем. Адсорбирующиеся на поверхности атомы кислорода замыкают оборванные связи Si на поверхности. В результате этого части поверхности Si, покрытые кислородом, перестают смачиваться Ag. Таким образом, адсорбированный кислород создает на поверхности Si маску для адсорбирующихся атомов Ag и поэтому островки Ag могут формироваться лишь в областях, свободных от кислорода. Из-за того, что при небольших экспозициях кислород преимущественно встраивается в края тройных ступеней на поверхности Si(7 7 10), на террасах Si(1 1 1) серебро формирует нанопроволоки (рис. 6 (б)). При более высоких экспозициях кислород адсорбируется в достаточных количествах также и на террасах Si(1 1 1), в результате чего образуются наноточки Ag (рис. 6 (в)).

С помощью ДМЭ установлено, что наноструктуры Ag, образующиеся на террасах Si(1 1 1) поверхности Si(7 7 10) имеют кристаллическую структуру объемного Ag и растут эпитаксиально, при этом $Ag(1\ 1\ 1) \parallel Si(1\ 1\ 1)$. Полученные наноструктуры Ag могут обладать квантоворазмерными свойствами, так как их размеры сравнимы с длиной волны электронов в Ag на уровне Ферми (≈ 0.5 нм). Действительно, авторы работ [44,45] наблюдали пики размерного квантования в спектре фотоэлектронов от эпитаксиальной пленки Ag толщиной ≈ 5 нм на поверхности Si(1 1 1).

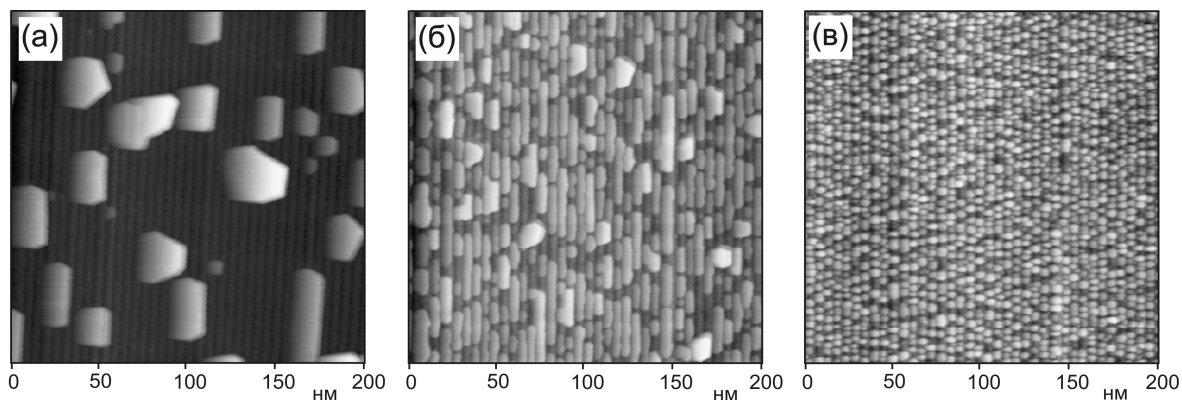


Рис. 6. СТМ-изображения поверхности Si(7 7 10), $U = +2.0$ В: (а) покрытие Ag 4.0 монослоя; (б) покрытие Ag 4.0 монослоя, покрытие кислорода 0.003 монослоя; (в) покрытие Ag 2.0 монослоя, покрытие кислорода 0.025 монослоя.

В третьем разделе приведены результаты экспериментальных исследований с помощью СТМ формирования островков Pb на поверхности Si(7 7 10). Выбор Pb обусловлен тем, что он растет эпитаксиально на поверхности Si(1 1 1) при комнатной температуре и вплоть до температуры 25 К [46]. Поэтому можно было предполагать, что рост Pb на поверхности Si(7 7 10) при комнатной температуре может привести к формированию металлических нанопроволок и наноточек, подобно тому, как это имело место при адсорбции атомов Ag.

В результате исследований было найдено, что осаждение 1 – 2 монослоев Pb на чистой поверхности Si(7 7 10) при комнатной температуре сразу после ее очистки приводит к формированию больших островков Pb, вытянутых вдоль краев тройных ступеней. Эти островки перекрывают множество террас Si(1 1 1) и находятся на очень большом удалении друг от друга (1 – 2 мкм), что свидетельствует об исключительно высокой подвижности атомов Pb на поверхности Si. Как и в случае Ag, предварительная адсорбция кислорода на поверхности Si(7 7 10) из остаточной атмосферы вакуумной камеры, ведет к уменьшению размеров формируемых островков Pb. Однако даже длительная предварительная выдержка образцов в вакуумной камере при давлении 5×10^{-10} Торр в течение 4-ех часов, приводит к формированию недостаточно локализованных на террасах Si(1 1 1) островков Pb, которые, к тому же, имеют значительный разброс по размерам.

В четвертом разделе приведены результаты экспериментальных исследований с помощью СТМ начальных стадий роста Ge на поверхности Si(7 7 10). Изучена зависимость морфологии и структуры поверхности Si(7 7 10) от величины покрытия Ge в диапазоне 0.0 – 2.0 бислоев и температуры его осаждения в диапазоне 300 – 600 °С.

Найдены условия формирования вытянутых нанообъектов типа нанопроволок трех типов. Нанообъекты I-ого типа представляют собой вытянутые островки, расположенные в пространстве между соседними тройными ступенями поверхности Si(7 7 10). Нанообъекты II-ого типа представляют собой чередующиеся двойные и одинарные ступени с террасами (1 1 1) – 5×5 , полученные в результате расщепления тройных ступеней чистой поверхности Si(7 7 10). Нанообъектами III-его типа являются вытянутые структуры, одна грань которых состоит из равномерно расположенных двойных ступеней, образующих плоскость с ориентацией (2 2 3), а вторая грань (1 1 1) – 5×5 .

Пятая глава посвящена теоретическим исследованиям атомной структуры чистых поверхностей (1 1 0) и (3 3 1) кремния и германия и их вициналей. В результате реконструкции поверхностей Si и Ge на них образуются

повторяющиеся элементарные структурные блоки, упорядоченные между собой определенным образом. Для поверхностей $(0\ 0\ 1)$ эти блоки состоят из димеров, для поверхностей $(1\ 1\ 1)$ из димеров, адатомов и дефектов упаковки, а для поверхностей $(1\ 1\ 3)$ из пентамеров с межузельными атомами, адатомов и димеров. В этой главе показано, что атомные структуры на поверхностях Si и Ge, расположенных в выделенной области стереотреугольника на рис. 7, имеют структурный блок, содержащий пентамер с межузельным атомом. Таким образом, новые результаты, изложенные в этой главе, существенно расширяют и дополняют сведения об атомной структуре чистых поверхностей Si и Ge, имеющие большой академический и практический интерес. Полученные в результате исследования надежные атомные модели реконструированных поверхностей $(1\ 1\ 0)$ и $(3\ 3\ 1)$ кремния и германия могут быть использованы для исследования свойств этих поверхностей с помощью расчетов на основе ТФП и для интерпретации экспериментальных данных.

В первом разделе обсуждается атомная структура чистых поверхностей $(1\ 1\ 0)$ кремния и германия и их вициналей. Общей чертой всех реконструированных поверхностей $(1\ 1\ 0)$ кремния и германия является наличие ярких пятен пятиугольной или четырехугольной формы (далее пентагоны) на СТМ-изображениях высокого разрешения в зависимости от приложенного напряжения между образцом и иглой СТМ [47,48]. При повышенных температурах (выше $430\text{ }^{\circ}\text{C}$), пентагоны на поверхности Ge $(1\ 1\ 0)$ близко расположены друг к другу и дальний порядок в их расположении на поверхности отсутствует [49–51]. Однако при понижении температуры до $\approx 380\text{ }^{\circ}\text{C}$ пентагоны начинают выравниваться и их концентрация на поверхности уменьшается, приводя к формированию структуры $c(8 \times 10)$. Продолжительные отжиги при $380\text{ }^{\circ}\text{C}$ приводят к

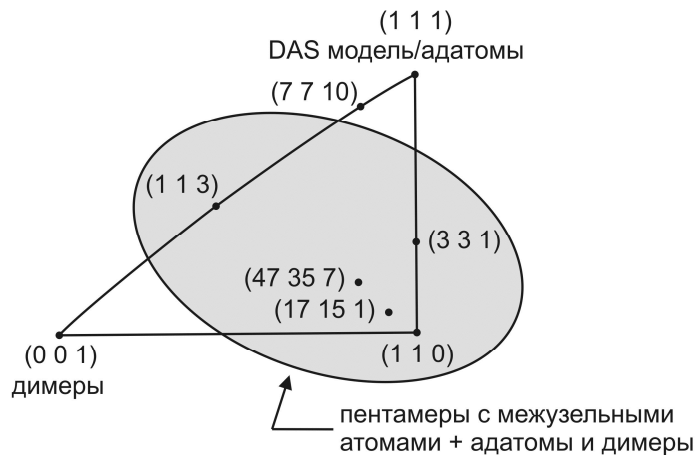


Рис. 7. Стереотреугольник, на котором обозначены основные гладкие и хорошо упорядоченные ступенчатые поверхности Si и Ge.

перестройке структуры поверхности из $c(8 \times 10)$ в " 16×2 ". Таким образом, " 16×2 " является равновесной, а $c(8 \times 10)$ метастабильной структурой поверхности Ge(1 1 0). Структурные превращения на чистой поверхности Si(1 1 0) аналогичны превращениям на поверхности Ge(1 1 0), однако метастабильная структура в этом случае 5×8 [52]. Нужно отметить, что даже адсорбция инородных атомов на поверхности часто не приводит к разрушению пентагонов, а лишь к изменению порядка, в котором они расположены на поверхности [53–56]. Формирование пентагонов в различных экспериментальных условиях и при различных температурах является признаком их исключительной стабильности, вызванной низкой энергией формирования.

В литературе можно найти 13 полных и частичных атомных моделей структур, наблюдаемых на поверхностях (1 1 0) кремния и германия и их вициналей [47–49, 57–66], что свидетельствует как о значительном научном интересе к структуре этих поверхностей, так и о высокой сложности поставленной задачи. Взаимное расположение пентагонов на этих поверхностях довольно хорошо установлено, однако основную сложность в понимании структуры этих поверхностей представляет атомная структура самих пентагонов.

На рис. 8 (а, б) показана разработанная нами атомная структура универсального структурного блока (Universal Building Block, UBB) семейства поверхностей Si(1 1 0) и Ge(1 1 0). UBB обладает зеркальной симметрией в плоскости $(\bar{1} 1 0)$. Блок состоит из межузельного атома, удерживающего вместе пять атомов окружающего его пентамера, и глубоко интегрированную в структуру пентамера реконструированную область. Реконструированная область содержит четыре пентагональных кольца и два гексагональных. Структура UBB приводит к насыщению 8 оборванных связей нереконструированной поверхности (1 1 0). Формирование UBB требует всего три дополнительных атома.

UBB имеет существенно трехмерную структуру, которая лишь частично доступна для наблюдений с помощью СТМ. Так, межузельный атом и атомы в реконструированной области трудно визуализировать с помощью СТМ, так как все связи этих атомов замкнуты и, кроме того, эти атомы расположены несколько ниже уровня поверхности. В этом смысле межузельный атом подобен димерам в DAS-структурах на поверхности Si(1 1 1). Наличие межузельного атома можно считать надежно установленным фактом, так как при его отсутствии правильная форма пентамера нарушается и он изгибается, чего не наблюдается экспериментально. Кроме того, отсутствие межузельного атома приводит к увеличению энергии поверхности.

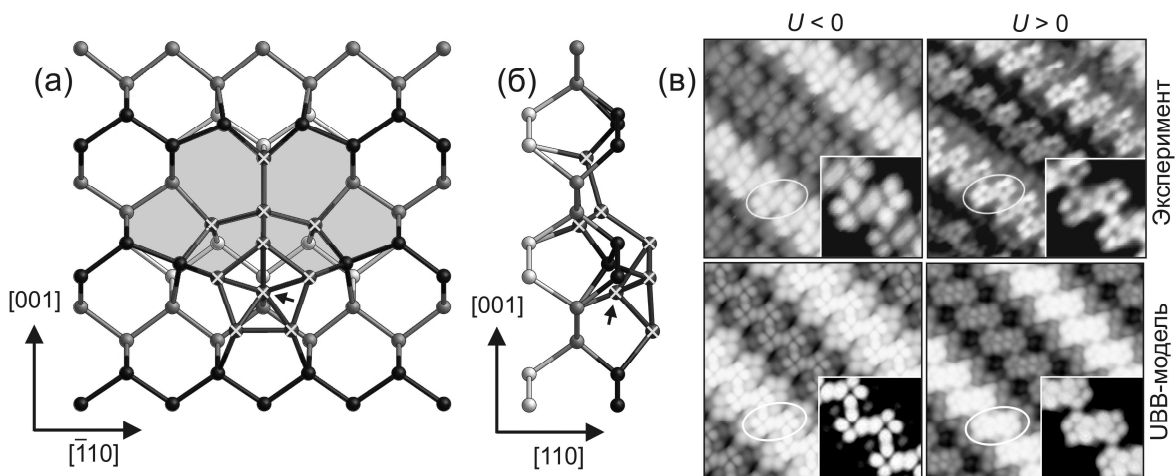


Рис. 8. (а), (б) Универсальный структурный блок (Universal Building Block, UBB) реконструированных поверхностей $(1\ 1\ 0)$ кремния, германия и их вициналей. Зигзагообразные цепочки атомов в направлении $[\bar{1}\ 1\ 0]$ — это атомы первого, второго и третьего слоев. Добавленные атомы и атомы, значительно сдвинутые из своих положений в идеальной решетке кристалла, выделены крестиками. Межузельный атом помечен стрелкой. (а) Вид сверху, в направлении $[1\ 1\ 0]$. Реконструированная область вблизи пентамера затенена. (б) Вид сбоку, в направлении $[\bar{1}\ 1\ 0]$. (в) Экспериментальные и расчетные, построенные на основе UBB-модели СТМ-изображения поверхности $\text{Si}(1\ 1\ 0)$ — "16 × 2". Размер изображений $100 \times 100 \text{ \AA}^2$. Овалами выделены пары пентамеров. На вставках показано увеличенное изображение пентамеров.

На основе модели универсального структурного блока были разработаны UBB-модели реконструированных поверхностей $\text{Si}(1\ 1\ 0) - 5 \times 8$, $\text{Ge}(1\ 1\ 0) - c(8 \times 10)$ и $(1\ 1\ 0) - "16 \times 2"$ кремния и германия и вицинальных поверхностей $\text{Si}(47\ 35\ 7) - 1 \times 1$ и $(17\ 15\ 1) - 2 \times 1$ кремния и германия. Исходя из построенных UBB-моделей были рассчитаны энергии формирования и СТМ-изображения поверхностей и проведено сравнение с имеющимися в литературе экспериментальными СТМ-изображениями. Также проведено сравнение с теоретическими СТМ-изображениями и энергиями поверхностей, полученными на основе альтернативных атомных моделей, предложенных ранее и сохранивших актуальность на момент проведения исследования. Показано, что во всех случаях UBB-модели приводят к наименьшей энергии формирования поверхностей из всех рассмотренных моделей и очень хорошо согласуются с экспериментальными СТМ-изображениями соответствующих поверхностных структур.

На рис. 8 (в) приведены экспериментальные (из работы [47]) и расчетные, построенные на основе UBB-модели СТМ-изображения

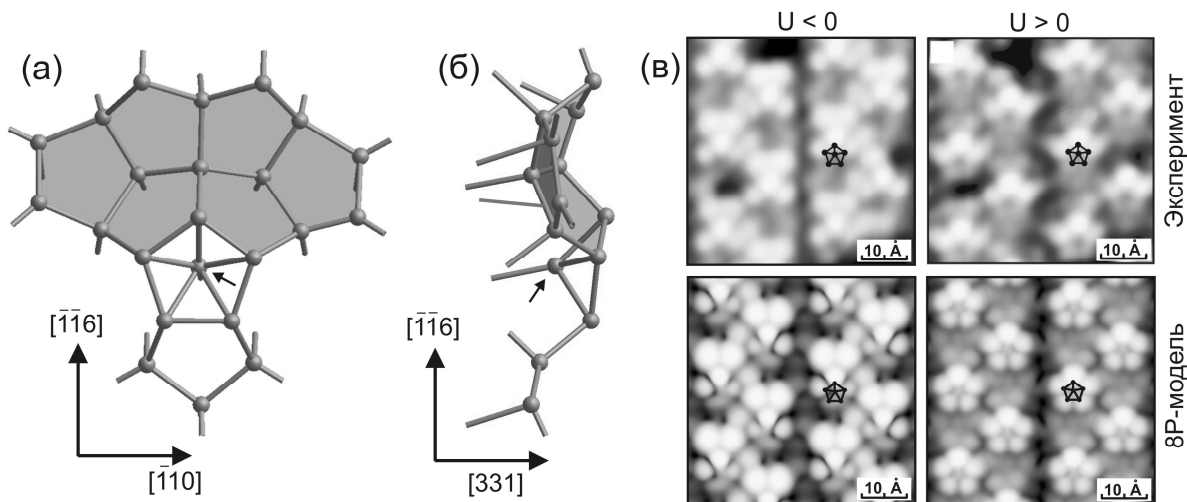


Рис. 9. (а), (б) Элементарный структурный блок поверхностей $\text{Si}(3\ 3\ 1)$ – " 12×1 " и $\text{Ge}(3\ 3\ 1)$ – 5×1 : 8-pentagon unit (8PU). Реконструированная область вблизи пентамера с межузельным атомом затенена. (а) Вид сверху, в направлении $[3\ 3\ 1]$. (б) Вид сбоку, в направлении $[\bar{1}\ 1\ 0]$. (в) Экспериментальные и расчетные, построенные на основе 8P-модели, СТМ-изображения поверхности $\text{Si}(3\ 3\ 1)$ – " 12×1 ".

поверхности $\text{Si}(1\ 1\ 0)$ – " 16×2 ". Известно, что как форма, так и плотность электронных состояний, а значит и получаемые СТМ-изображения, сильно зависят от атомной структуры поверхности. Как видно из рис. 8 (в), UBВ-модель отлично воспроизводит эти электронные состояния, а именно четырехугольную форму пентамера при $U < 0$ (заполненные электронные состояния поверхности) и пятиугольную форму при $U > 0$ (незаполненные электронные состояния поверхности). В то же время другие атомные модели не способны были описать даже базовую геометрию пентамеров, наблюдаемую в СТМ. Это сильный аргумент в пользу UBВ-модели.

Во втором разделе обсуждается атомная структура чистых поверхностей $(3\ 3\ 1)$ кремния и германия. В литературе можно найти множество экспериментальных данных, касающихся формирования и структуры чистых поверхностей $\text{Si}(3\ 3\ 1)$ – " 12×1 " и $\text{Ge}(3\ 3\ 1)$ – 5×1 . Было опубликовано 5 атомных моделей структур этих поверхностей [67–72].

Нами было найдено, что структура чистых поверхностей $(3\ 3\ 1)$ кремния и германия хорошо описывается с помощью идентичных элементарных структурных блоков, атомная структура которого показана на рис. 9 (а, б). Этот блок содержит пентамер с межузельным атомом и соседнюю реконструированную область с шестью пентагонами (6-pentagon unit, 6PU), затененную на рис. 9 (а, б). Структуру 6PU можно представить в виде двух зеркально-симметричных групп с тремя пентагонами в каждой из

них (3PU). Пятиугольники в 3PU сложены в трилистник, один из лепестков которого является стороной пентамера с межузельным атомом, из-за чего 6PU оказывается тесно интегрирован в структуру пентамера. Топология связей атомов Si в 3PU аналогична топологии связей атомов углерода в самом маленьком фуллерене – C₂₀ [73]. Поверхность 3PU вогнутая, как если смотреть на поверхность C₂₀ изнутри фуллерена. Пентамер с межузельным атомом добавляет два дополнительных пентагона: один в верхней части пентамера, а другой со стороны, противоположной 6PU. Поэтому полная структура элементарного структурного блока поверхностей (3 3 1) кремния и германия, состоящая из пентамера и 6PU, была обозначена 8PU.

На основе модели структурного блока 8PU были разработаны 8P-модели реконструированных поверхностей Si(3 3 1) – "12 × 1" и Ge(3 3 1) – 5 × 1, рассчитаны энергии их формирования и СТМ-изображения. Было проведено сравнение с имеющимися в литературе экспериментальными СТМ-изображениями этих поверхностей и теоретическими СТМ-изображениями, полученными на основе альтернативных атомных моделей, предложенных ранее. Показано, что расчетные СТМ-изображения, полученные на основе 8P-моделей поверхностных структур хорошо согласуются с соответствующими экспериментальными СТМ-изображениями (в отличие от альтернативных моделей). На рис. 9 (в) приведены экспериментальные (из работы [71]) и расчетные, построенные на основе 8P-модели СТМ-изображения поверхности Si(3 3 1) – "12 × 1". Можно видеть, что 8P-модель хорошо воспроизводит как относительное расположение ярких пятен на экспериментальных СТМ-изображениях, так и их изменение яркости при изменении полярности приложенного напряжения.

Энергии формирования поверхностей в моделях, построенных на основе 8PU существенно ниже энергий, полученных для альтернативных моделей. Кроме того, было показано, что только 8P-модели обладают достаточно низкой энергией поверхности, обеспечивающей устойчивость поверхностей (3 3 1) по отношению к их огранке с образованием фасеточных поверхностей (1 1 1) и (1 1 0).

С использованием гибридного обменно-корреляционного функционала HSE06 [74,75] была исследована электронная структура поверхности Si(3 3 1) – "12 × 1" в 8P-модели. Было найдено, что расчетная ширина запрещенной зоны составляет 0.58 эВ и хорошо согласуется с экспериментальными данными сканирующей туннельной спектроскопии, согласно которым запрещенная зона этой поверхности составляет ≈ 0.5-0.6 эВ [76]. Энергии поверхностных состояний образуют два широких пика на графике плотности электронных состояний в запрещенной зоне объемного Si, один вблизи потолка валентной зоны, а второй вблизи дна зоны проводимости. Незаполненные электронные состояния преимущественно

локализованы на атомах пентамера, а заполненные состояния на атомах с оборванной связью в составе 6PU.

В таблице 1 приведены рассчитанные значения энергий формирования реконструированных поверхностей Si и Ge. Интересно отметить, что энергии этих поверхностей расположены в узких диапазонах 92.4 – 101.1 мэВ/Å² для Si и 68.1 – 71.7 мэВ/Å² для Ge.

Идея построения моделей поверхностей (1 1 0) и (3 3 1) на основе пентамеров с межузельными атомами была заимствована из известной структуры поверхностей (1 1 3) кремния и германия [79,80] и первые попытки построения моделей поверхностей с использованием этих элементов были реализованы в моделях АП и П [47,60,69]. Однако даже сама идея существования пентамеров на поверхностях (1 1 0) и (3 3 1) была далеко не очевидной. Так, модели АП и П плохо согласовывались с экспериментальными СТМ-изображениями соответствующих поверхностей и имели высокую энергию формирования. Наиболее актуальными моделями на момент выполнения работы были модели, построенные на совершенно других элементах и при этом имеющие более низкие энергии формирования [65,71].

Сложности с построением реалистичных моделей поверхностей (1 1 0) и (3 3 1) вызваны тем, что перенос пентамера с межузельным атомом с поверхности (1 1 3) на другие поверхности Si и Ge является нетривиальной задачей, так как поверхности разных ориентаций имеют разную конфигурацию оборванных связей. Так, согласование связей в пентамере и на поверхностях (1 1 0) и (3 3 1) требует создания обширной реконструированной области вблизи пентамера, которая имеет нетривиальную систему связей и глубоко интегрирована в структуру пентамера.

Табл. 1. Абсолютные энергии формирования реконструированных поверхностей Si и Ge (мэВ/Å²), рассчитанные из первых принципов с помощью программного пакета SIESTA (LDA).

Пов- сть	Si			Ge		
	Стр-ра	Модель	γ_{rec}	Структура	Модель	γ_{rec}
(1 1 1)	7 × 7	DAS [12]	92.4	c(2 × 8)	[77]	68.6
(0 0 1)	c(4 × 2)	[78]	94.4	c(4 × 2)	[78]	67.9
(1 1 3)	3 × 2	ADI [79]	94.5	3 × 2/3 × 1	ADI/AI [80]	68.1/68.4
(3 3 1)	12 × 1	8P	97.3	5 × 1	8P	68.2
(1 1 0)	“16 × 2”	UBB	101.1	“16 × 2”	UBB	71.7

В третьем разделе обсуждается искажение реальных координат атомов на поверхности на СТМ-изображениях высокого разрешения. Такие

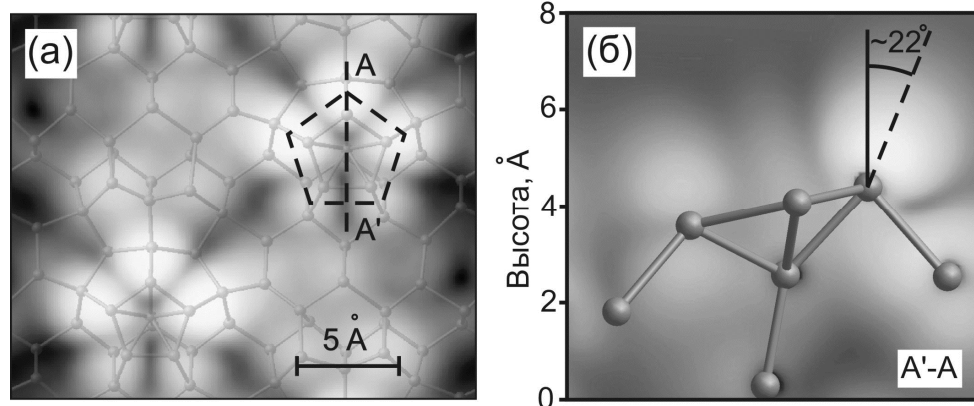


Рис. 10. (а) Расчетное СТМ-изображение поверхности Si(3 3 1) – "12 × 1" согласно 8Р-модели (схема модели наложена сверху), $U = +0.8$ эВ. Пентагон, выделенный пунктирной линией, иллюстрирует видимый размер пентамера, полученный соединением центров ярких пятен. Вертикальные и горизонтальные края изображения расположены вдоль направлений $[\bar{1} \bar{1} 6]$ и $[\bar{1} 1 0]$ соответственно. (б) Вертикальное сечение плотности локальных электронных состояний вдоль сечения А' - А на рис. (а). На рисунок наложена проекция атомной структуры пентамера. Вертикальная сплошная линия показывает направление нормали к поверхности (3 3 1). Пунктирная линия проведена из атома на вершине пентамера в направлении максимальной интенсивности ближайшего яркого пятна.

“искаженные” СТМ-изображения формируются на поверхностях с оборванными связями, чьи направления не перпендикулярны исследуемой поверхности и могут приводить к ошибочной интерпретации экспериментальных данных. Описанный эффект продемонстрирован на примере пентамеров, наблюдаемых на реконструированных поверхностях Si и Ge, где он особенно сильно проявляется.

На рис. 10 (а) представлено расчетное СТМ-изображение поверхности Si(3 3 1) – "12 × 1", полученное с использованием 8Р-модели. Центры ярких пятен в углах одного из пентамеров соединены пунктирными линиями. Из этого расчетного СТМ-изображения было получено, что расстояние между двумя ближайшими яркими пятнами составляет примерно 3.5 Å и хорошо согласуется с расстоянием, полученным из экспериментальных СТМ-изображений. Однако из атомной модели, показанной на рис. 10 (а), следует, что фактическое расстояние между ближайшими атомами Si в пентамере составляет всего 2.3 Å, что соответствует отклонению более чем на 50% по отношению к наблюдаемым в СТМ положениям атомов. Большое расхождение теоретических и экспериментально измеренных размеров пентамеров было использовано в качестве аргумента против атомных

моделей поверхностей кремния (1 1 0) и (3 3 1), содержащих пентамеры [63,71].

Как известно, СТМ-изображения, полученные в режиме постоянного тока, содержат информацию как о топографии, так и об электронной структуре поверхности [8,9]. Следовательно, корректная интерпретация таких изображений требует знания атомной структуры и расчетов электронной структуры с помощью ТФП.

На рис. 10 (б) показано вертикальное сечение плотности локальных электронных состояний поверхности в сечении А' - А на рис. 10 (а) вместе с проекцией атомной структуры пентамера. Наиболее яркое пятно в правом верхнем углу на рис. 10 (б) соответствует высокой плотности незаполненных локальных электронных состояний, расположенной вблизи атома Si на вершине пентамера на рис. 10 (а). Очевидно, что это электронное состояние направлено не строго вверх, а от центра атома и под углом к нормали поверхности. Так как СТМ чувствительна к плотности локальных электронных состояний [9] и поскольку острие иглы СТМ обычно сканирует на высоте от 4 Å до 10 Å над поверхностью [8], то очевидно, что наклонные радикалы будут приводить к увеличенному изображению пентамера. Это объясняет кажущееся противоречие между размером пентамеров в атомных моделях и данными, полученными непосредственно из СТМ-изображений [63,71]. Таким образом, описанный эффект необходимо принимать во внимание при интерпретации СТМ-изображений высокого разрешения.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

1. Найдено, что при температурах ниже $\approx 300 - 400$ К структура 5×5 поверхности Si(1 1 1) термодинамически устойчива. Экспериментальное наблюдение структуры 7×7 при температурах ниже $\approx 300 - 400$ К вызвано низким коэффициентом диффузии атомов Si при температурах около комнатной и ниже, из-за чего фазовый переход от структуры 7×7 к структуре 5×5 оказывается затруднен. Результаты демонстрируют решающую роль фононной энтропии в формировании структуры 7×7 при повышенных температурах и метастабильный характер этой структуры при температурах ниже комнатной.
2. Установлено соответствие между латеральными упругими деформациями решетки (в диапазоне от -4% до 4%) и структурой поверхностей Si(1 1 1) и Ge(1 1 1) (из набора 3×3 , 5×5 , 7×7 , 2×2 , $c(2 \times 8)$, $c(2 \times 4)$, $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$). Показано, что экспериментально наблюдаемые структурные изменения на поверхностях Si(1 1 1) и Ge(1 1 1) при росте одного материала на поверхности другого вызваны в основном изменением деформации решетки верхних атомных слоев.

Формирование доменных границ структуры $c(2 \times 4)$ при росте Si на поверхности Ge(1 1 1) объясняется сегрегацией атомов Ge на поверхности растущей пленки Si.

3. Показано, что основные пути миграции адатомов Sr и Ge на поверхностях Si(1 1 1) и Ge(1 1 1) со структурами 5×5 и 7×7 обусловлены образованием ковалентных связей между этими атомами и атомами димеров в составе структур 5×5 и 7×7 .
4. Найдено, что вид наблюдаемых СТМ-изображений поверхности, образуемых флуктуациями туннельного тока при тепловом движении адатомов в пределах ячейки Si(1 1 1) – 7×7 , зависит от скорости сканирования иглы СТМ. Сравнение результатов Монте-Карло моделирования таких СТМ-изображений и экспериментальных данных показало, что средняя скорость движения адатомов Sr в ячейке 7×7 при комнатной температуре составляет ≈ 300 нм/с.
5. Показано, что скорость диффузии атомов Ge по поверхности Ge(1 1 1) со структурами 5×5 и 7×7 должна быть одинаковой, потому что они имеют одинаковое локальное атомное строение. Найдено, что диффузионный барьер на упруго-сжатой на 4% поверхности Ge(1 1 1) на ≈ 0.3 эВ выше, чем на поверхности без деформаций. Увеличение диффузионного барьера на напряженной поверхности Ge(1 1 1) вызвано усилением связей в димерах поверхностных структур при сжатии поверхности, что приводит к ослаблению связей между адатомом и атомом димера.
6. Найдено, что на регулярных тройных ступенях поверхности Si(7 7 10) имеются как статически изогнутые элементы структуры, так и динамически изменяющие свою конфигурацию при комнатной температуре под действием тепловых флуктуаций. Показано, что статический изгиб элементов структуры вызван их кулоновским взаимодействием с ближайшим атомным окружением.
7. Используя обнаруженную зависимость формы растущих островков Ag от предварительной адсорбции на поверхности кислорода были получены плотные массивы упорядоченно расположенных и с высокой однородностью форм и размеров наноструктур Ag на ступенчатой поверхности Si(7 7 10). При небольших покрытиях кислорода (≈ 0.003 монослоев) на террасах Si(1 1 1) формируются нанопроволоки Ag, а при более высоких покрытиях (≈ 0.025 монослоев) формируются наноточки Ag, упорядоченные в линии, параллельные краям ступеней.
8. Найдено, что реконструированные поверхности (1 1 0) и (3 3 1) кремния и германия и их вицинали построены на основе подобных компактных структурных блоков, состоящих из пентамера, атомы которого удерживает вместе межузельный атом, и соседней

реконструированной области. Разработаны атомные модели структурных блоков и на их основе построены реалистичные модели реконструированных поверхностей (1 1 0) и (3 3 1) кремния и германия и их вициналей. Таким образом, было продемонстрировано, что поверхности (1 1 0) и (3 3 1) кремния и германия и их вицинали относятся к семейству поверхностей, стабилизированных пентамерами с межузельными атомами, такими как Si(1 1 3) и Ge(1 1 3).

9. Показано, что положения регистрируемых пятен на СТМ-изображениях высокого разрешения не будут соответствовать фактическим координатам атомных ядер на поверхности, если оборванные связи атомов не перпендикулярны исследуемой поверхности. Продemonстрировано, что при учете этого эффекта снимается противоречие между теоретическим и экспериментально измеренным размером пентамеров, наблюдающихся на поверхностях (1 1 0), (1 1 3) и (3 3 1) кремния и германия.

Совокупность результатов и выводов диссертационной работы можно квалифицировать как научное достижение в области физики конденсированного состояния, существенно продвигающем современное понимание атомной структуры поверхностей кремния и германия и связанных с нею свойств, влияния структуры поверхности на диффузию адатомов и формирование наноструктур. В частности, обнаружение целого семейства поверхностей кремния и германия, стабилизированных пентамерами с межузельными атомами и разработка атомных моделей этих поверхностей открывает широкие возможности как для исследования, так и для осознанного изменения свойств этих поверхностей.

Список литературы

- [1] *Лифшиц В.Г., Гаврилюк Ю.Л., Саранин А.А., Зотов А.В., Цуканов Д.А.* Поверхностные фазы на кремнии. Успехи Физических Наук –2000 – V.170 –P.569-571.
- [2] *Wang Y.L., Saranin A.A., Zotov A.V., Lai M.Y., Chang H.H.* Random and ordered arrays of surface magic clusters. // Int. Rev. Phys. Chem. –2008 – V.27 –P.317-360.
- [3] *Kirakosian A., Bennowitz R., Crain J.N., Fauster T., Lin J.L., Petrovykh D.Y., Himpel F.J.* Atomically accurate Si grating with 5.73 nm period. // Appl. Phys. Lett. –2001 –V.79 –P.1608.
- [4] *Pillarisetty R.* Academic and industry research progress in germanium nanodevices. // Nature. –2011 –V.479 –P.324–328.
- [5] *Pchelyakov O.P., Dvurechensky A.V., Latyshev A.V., Aseev A.L.* Ge/Si heterostructures with coherent Ge quantum dots in silicon for applications in

- nanoelectronics. // *Semicond. Sci. Technol.* –2010 –V.26 –P.014027.
- [6] *Waltereit P., Fernández J.M., Kaya S., Thornton T.J.* Si/SiGe quantum wells grown on vicinal Si(001) substrates: Morphology, dislocation dynamics, and transport properties. // *Appl. Phys. Lett.* –1998 –V.72 –P.2262–2264.
- [7] *Jurkovic M.J., Alperin J., Du Q., Wang W.I., Chang M.F.* AlGaAs/GaAs Npn heterojunction bipolar transistors grown on Si(3 1 1) by molecular beam epitaxy. // *J. Vac. Sci. Technol. B Microelectron. Nanom. Struct. Process. Meas. Phenom.* –1998 –V.16 –P.1401–1403.
- [8] *Hofer W.A.* Challenges and errors: interpreting high resolution images in scanning tunneling microscopy. // *Prog. Surf. Sci.* –2003 –V.71 –P.147–183.
- [9] *Tersoff J., Hamann D.R.* Theory of the scanning tunneling microscope. // *Phys. Rev. B.* –1985 –V.31 –P.805.
- [10] *Liu J., Camacho-Aguilera R., Bessette J.T., Sun X., Wang X., Cai Y., Kimerling L.C., Michel J.* Ge-on-Si optoelectronics. // *Thin Solid Films.* –2012 –V.520 –P.3354–3360.
- [11] *Lozovoy K.A., Voytsekhovskiy A. V., Kokhanenko A.P., Satdarov V.G., Pchelyakov O.P., Nikiforov A.I.* Heterostructures with self-organized quantum dots of Ge on Si for optoelectronic devices. // *Opto-Electronics Rev.* –2014 –V.22 –P.171–177.
- [12] *Takayanagi K., Tanishiro Y., Takahashi S., Takahashi M.* Structure analysis of Si(1 1 1) – 7×7 reconstructed surface by transmission electron diffraction. // *Surf. Sci.* –1985 –V.164 –P.367–392.
- [13] *Kresse G., Furthmüller J.* Efficient iterative schemes for *ab initio* total-energy calculations using a plane-wave basis set. // *Phys. Rev. B.* –1996 –V.54 –P.11169.
- [14] *Soler J.M., Artacho E., Gale J.D., García A., Junquera J., Ordejón P., Sánchez-Portal D.* The SIESTA method for *ab initio* order-N materials simulation. // *J. Phys. Condens. Matter.* –2002 –V.14 –P.2745.
- [15] *Perdew J.P., Zunger A.* Self-interaction correction to density-functional approximations for many-electron systems. // *Phys. Rev. B.* –1981 –V.23 –P.5048.
- [16] *Perdew J.P., Burke K., Ernzerhof M.* Generalized Gradient Approximation Made Simple. // *Phys. Rev. Lett.* –1996 –V.77 –P.3865.
- [17] *Perdew J.P., Ruzsinszky A., Csonka G.I., Vydrov O.A., Scuseria G.E., Constantin L.A., Zhou X., Burke K.* Restoring the density-gradient expansion for exchange in solids and surfaces. // *Phys. Rev. Lett.* –2008 –V.100 –P.136406.
- [18] *Grimme S., Antony J., Ehrlich S., Krieg H.* A consistent and accurate *ab initio* parametrization of density functional dispersion correction (DFT-D) for the 94 elements H-Pu. // *J. Chem. Phys.* –2010 –V.132 –P.154104.
- [19] *Ashcroft N., Mermin D.* *Solid State Physics.* // Saunders College Publishing,

- New York, 1976.
- [20] Yang Y.-N., Williams E.D. High atom density in the “1 × 1” phase and origin of the metastable reconstructions on Si(1 1 1) // *Phys. Rev. Lett.* – 1994 –V.72 –P.1862.
- [21] *Sato T., Kitamura S., Iwatsuki M.* Surface diffusion of adsorbed Si atoms on the Si(1 1 1)7 × 7 surface studied by atom-tracking scanning tunneling microscopy. // *J. Vac. Sci. Technol. A.* –2000 –V.18 –P.960–964.
- [22] *Chang C.M., Wei C.M.* Diffusion of an adsorbed Si atom on the Si(1 1 1) – (7 × 7) surface. // *Phys. Rev. B.* –2003 –V.67 –P.033309.
- [23] *Gossmann H.J., Bean J.C., Feldman L.C., McRae E.G., Robinson I.K.* 7 × 7 Reconstruction of Ge(1 1 1) Surfaces under Compressive Strain. // *Phys. Rev. Lett.* –1985 –V.55 –P.1106.
- [24] *Vanderbilt D.* Model for the energetics of Si and Ge(111) surfaces. // *Phys. Rev. B.* –1987 –V.36 –P.6209.
- [25] *Mercer J.L., Chou M.Y.* Energetics of the Si(1 1 1) and Ge(1 1 1) surfaces and the effect of strain. // *Phys. Rev. B.* –1993 –V.48 –P.5374.
- [26] *Kim M.K., Oh D.H., Baik J., Jeon C., Song I., Nam J.H., Woo S.H., Park C.Y., Ahn J.R.* Control of a quasi-one-dimensional phase of a Si nanostructure: Vicinal Si(5 5 7) surfaces. // *Phys. Rev. B* –2010 –V.81 – P.085312.
- [27] *Жачук Р.А., Романюк К.Н., Тийс С.А., Ольшанецкий Б.З.* Начальные стадии роста Ge на поверхности Si(7 7 10). // *Физика Твёрдого Тела* – 2009 –V.51 –P.202–207.
- [28] *Sato T., Kitamura S.I., Iwatsuki M.* Initial adsorption process of Si atoms on an Si(1 1 1) 7 × 7 surface studied by scanning tunneling microscopy. // *Surf. Sci.* –2000 –V.445 –P.130–137.
- [29] *Uchida H., Kuroda T., Mohamad F.B., Kim J., Kashiwagi K., Nishimura K., Inoue M.* Hopping Al atom on Si(1 1 1) 7 × 7 surface studied by scanning tunneling microscopy. // *Phys. Status Solidi.* –2004 –V.241 –P.1665–1668.
- [30] *Vitali L., Ramsey M.G., Netzer F.P.* Nanodot Formation on the Si(1 1 1) – (7 × 7) Surface by Adatom Trapping. // *Phys. Rev. Lett.* –1999 –V.83 – P.316.
- [31] *Custance O., Brihuega I., Gómez-Rodríguez J.M., Baró A.M.* Initial stages of Sn adsorption on Si(1 1 1) – (7 × 7). // *Surf. Sci.* –2001 –V.482–485 – P.1406–1412.
- [32] *O. Custance, S. Brochard, I. Brihuega, E. Artacho, J.M. Soler, A.M. Baró, J.M. Gómez-Rodríguez.* Single adatom adsorption and diffusion on Si(1 1 1) – (7 × 7) surfaces: Scanning tunneling microscopy and first-principles calculations. // *Phys. Rev. B.* –2003 –V.67 –P.235410.
- [33] *Mysliveček J., Sobotík P., Ošt’ádal I., Jarolínek T., P. Šmilauer.* Unconventional features of Ag epitaxy on the Si(1 1 1)7 × 7 surface. //

- Phys. Rev. B. –2001 –V.63 –P.045403.
- [34] *Polop C., Vasco E., Martín-Gago J.A., Sacedón J.L.* Diffusion and nucleation of yttrium atoms on Si(1 1 1) 7×7 : A growth model. // Phys. Rev. B. –2002 –V.66 –P.085324.
- [35] *Cherepanov V., Voigtländer B.* Influence of material, surface reconstruction, and strain on diffusion at the Ge(1 1 1) surface. // Phys. Rev. B. –2004 –V.69 –P.125331.
- [36] *Brune H., Bromann K., Röder H., Kern K., Jacobsen J., Stoltze P., Jacobsen K., Norskov J.* Effect of strain on surface diffusion and nucleation. // Phys. Rev. B. –1995 –V.52 –P.R14380.
- [37] *Ratsch C., Seitsonen A., Scheffler M.* Strain dependence of surface diffusion: Ag on Ag(1 1 1) and Pt(1 1 1). // Phys. Rev. B. –1997 –V.55 –P.6750.
- [38] *Hofmann Ph., Wells J.W.* Surface-sensitive conductance measurements. // J. Phys.: Condens. Matter –2009 –V.21 –P.013003.
- [39] *Teys S.A., Romanyuk K.N., Zhachuk R.A., Olshanetsky B.Z.* Orientation and structure of triple step staircase on vicinal Si(1 1 1) surfaces. // Surf. Sci. –2006 –V.600 –P.4878–4882.
- [40] *Pérez León C., Drees H., Wippermann S.M., Marz M., Hoffmann-Vogel R.* Atomically resolved scanning force studies of vicinal Si(1 1 1). // Phys. Rev. B. –2017 –V.95 –P.245412.
- [41] *Pérez León C., Drees H., Wippermann S.M., Marz M., Hoffmann-Vogel R.* Atomic-Scale Imaging of the Surface Dipole Distribution of Stepped Surfaces. // J. Phys. Chem. Lett. –2016 –V.7 –P.426–430.
- [42] *Prévoit G., Leroy F., Crose B., Garreau Y., Coati A., Müller P.* Step-induced elastic relaxation and surface structure of the Si(7 7 10) surface. // Surf. Sci. –2012 –V.606 –P.209–216.
- [43] *Hasegawa S., Tong X., Takeda S., Sato N., Nagao T.* Structures and electronic transport on silicon surfaces. // Prog. Surf. Sci. –1999 –V.60 –P.89–257.
- [44] *Neuhold G., Horn K.* Depopulation of the Ag(1 1 1) Surface State Assigned to Strain in Epitaxial Films. // Phys. Rev. Lett. –1997 –V.78 –P.1327.
- [45] *Wachs A.L., Shapiro A.P., Hsieh T.C., Chiang T.C.* Observation of film states and surface-state precursors for Ag films on Si(1 1 1). // Phys. Rev. B. –1986 –V.33 –P.1460.
- [46] *Petkova A., Wollschläger J., Günter H.-L., Henzler M.* Order and disorder in ultrathin Pb films grown on Si(1 1 1) 7×7 substrates at low temperatures. // Surf. Sci. –2001 –V.482–485 –P.922–927.
- [47] *An T., Yoshimura M., Ono I., Ueda K.* Elemental structure in Si(1 1 0) – "16 \times 2" revealed by scanning tunneling microscopy. // Phys. Rev. B. –2000 –V.61 –P.3006.
- [48] *Setvín M., Brázdová V., Bowler D.R., Tomatsu K., Nakatsuji K., Komori F.,*

- Miki K.* Electronic structure of Si(1 1 0) – (16 × 2) studied by scanning tunneling spectroscopy and density functional theory. // *Phys. Rev. B* –2011 –V.84 –P.115317.
- [49] *Ichikawa T.* In situ STM observations of ordering behaviors on Ge(1 1 0) surfaces and atomic geometry of the Ge{17 15 1} facet. // *Surf. Sci.* –2004 –V.560 –P.213–225.
- [50] *Mullet C.H., Chiang S.* Reconstructions and phase transition of clean Ge(1 1 0). // *Surf. Sci.* –2014 –V.621 –P.184–190.
- [51] *Ichikawa T., Sueyosi T., Sato T., Iwatsuki M., Udagawa F., Sumita I.* Ge(1 1 0) surface reconstruction observed with scanning tunneling microscopy. // *Solid State Commun.* –1995 –V.93 –P.541–545.
- [52] *Ohira Y., Yoshimura M., Ueda K.* Metastable phase of Si(1 1 0) surface: 5 × 8 reconstruction. // *Japanese J. Appl. Physics* –2007 –V.46 –P.5652–5654.
- [53] *An T., Yoshimura M., Ueda K.* Rearrangement of up-and-down terrace in Si(1 1 0) "16 × 2" induced by Sn adsorption. // *Surf. Sci.* –2005 –V.576 –P.165–174.
- [54] *Hong I.H., Tsai Y.F., Chen T.M.* Self-organization of mesoscopically ordered parallel Gd-silicide nanowire arrays on a Si(1 1 0) – 16 × 2 surface: A massively parallel active architecture. // *Appl. Phys. Lett.* –2011 –V.98 –P.193118.
- [55] *Hong I.H., Liao Y.C., Tsai Y.F.* Template-directed atomically precise selforganization of perfectly ordered parallel cerium silicide nanowire arrays on Si(1 1 0) – 16 × 2 surfaces. // *Nanoscale Res. Lett.* –2013 –V.8 –P.1–10.
- [56] *Maslova N.S., Oreshkin A.I., Oreshkin S.I., Panov V.I., Radchenko I.V., Savinov S.V.* Ag-induced atomic structures on the Si(1 1 0) surface // *Письма в ЖЭТФ* –2006 –V.84 –P.381–384.
- [57] *Yamamoto Y.* Atomic arrangements of 16 × 2 and (17,15,1)2 × 1 structures on a Si(1 1 0) surface. // *Phys. Rev. B.* –1994 –V.50 –P.8534.
- [58] *Packard W.E., Dow J.D.* Si(1 1 0) – 16 × 2 and Si(1 1 0) – 5 × 1 surface reconstructions: Stretched-hexagon face-centered adatom model. // *Phys. Rev. B.* –1997 –V.55 –P.15643.
- [59] *Gai Z., Zhao R., Yang W.* Atomic structure of the Ge(1 0 1) surface. // *Phys. Rev. B.* –1998 –V.57 –P.R6795.
- [60] *Stekolnikov A.A., Furthmüller J., Bechstedt F.* Long-range surface reconstruction: Si(1 1 0) – (16 × 2). // *Phys. Rev. Lett.* –2004 –V.93 –P.136104.
- [61] *T. Ichikawa.* An ab initio study on the atomic geometry of reconstructed Ge(1 1 0)16 × 2 surface. // *Surf. Sci.* –2003 –V.544 –P.58–66.
- [62] *Ichikawa T.* Atomic geometry of the Ge(1 1 0)c(8 × 10) structure. // *Surf.*

- Sci. –2004 –V.560 –P.205–212.
- [63] *Sakamoto K., Setvin M., Mawatari K., Eriksson P.E.J., Miki K., Uhrberg R.I.G.* Electronic structure of the Si(1 1 0) – (16 × 2) surface: High-resolution ARPES and STM investigation. // *Phys. Rev. B* –2009 –V.79 – P.045304.
- [64] *Setvin M., Brázdová V., Miki K., Bowler D.R.* Step structure of Si(1 1 0) – (16 × 2) and adsorption of H₂O. // *Phys. Rev. B* –2010 –V.82 –P.125421.
- [65] *Yamasaki T., Kato K., Uda T., Yamamoto T., Ohno T.* First-principles theory of Si(1 1 0) – (16 × 2) surface reconstruction for unveiling origin of pentagonal scanning tunneling microscopy images. // *Appl. Phys. Express.* – 2016 –V.9 –P.035501.
- [66] *Shkrebtii A.I., Bertoni C.M., Del Sole R., Nesterenko B.A.* Structural models of reconstructed Si(1 1 0) surface phases. // *Surf. Sci.* –1990 –V.239 – P.227–234.
- [67] *Olshanetsky B.Z., Teys S.A., Kozhemyako I.G.* STM studies of vicinal Si(1 1 1) and Si(3 3 1) surfaces. // *Phys. Low-Dimens. Struct.* –1998 – V.11–12 –P.85–92.
- [68] *Gai Z., Zhao R.G., Sakurai T., Yang W.S.* Si(3 1 3)12 × 1: Another metallic stable surface of silicon having a complex reconstructed layer. // *Phys. Rev. B.* –2001 –V.63 –P.085301.
- [69] *Battaglia C., Gaál-Nagy K., Monney C., Didiot C., Schwier E.F., Garnier M.G., Onida G., Aebi P.* New structural model for the Si(3 3 1) – (12 × 1) surface reconstruction. // *Phys. Rev. Lett.* –2009 –V.102 –P.066102.
- [70] *Battaglia C., Onida G., Gaál-Nagy K., Aebi P.* Structure and stability of the Si(3 3 1) – (12 × 1) surface reconstruction investigated with first-principles density functional theory. // *Phys. Rev. B* –2009 –V.80 –P.214102.
- [71] *Tuñic C.A.* Различные СТМ-изображения сверхструктуры чистой грани Si(1 3 3) – 6 × 2. // *Письма в ЖЭТФ.* –2017 –V.105 –P.469–476.
- [72] *Gai Z., Zhao R., Yang W.* Atomic structure of the Ge(3 1 3) surface. // *Phys. Rev. B.* –1998 –V.58 –P.R4223.
- [73] *Jarrod M.F.* The smallest fullerene. // *Nature* –2000 –V.407 –P.26–27.
- [74] *Heyd J., Scuseria G.E., Ernzerhof M.* Hybrid functionals based on a screened Coulomb potential. // *J. Chem. Phys.* –2003 –V.118 –P.8207.
- [75] *Krukau A.V., Vydrov O.A., Izmaylov A.F., Scuseria G.E.* Influence of the exchange screening parameter on the performance of screened hybrid functionals. // *J. Chem. Phys.* –2006 –V.125 –P.224106.
- [76] *Battaglia C., Schwier E.F., Monney C., Didiot C., Mariotti N., Gal-Nagy K., Onida G., Gunnar Garnier M., Aebi P.* Valence band structure of the Si(3 3 1) – (12 × 1) surface reconstruction. // *J. Phys. Condens. Matter.* – 2011 –V.23 –P.135003.
- [77] *Becker R.S., Swartzentruber B.S., Vickers J.S., Klitsner T.* Dimer–adatom–

- stacking-fault (DAS) and non-DAS (1 1 1) semiconductor surfaces: A comparison of Ge(1 1 1) – c(2 × 8) to Si(1 1 1) – (2 × 2), –(5 × 5), –(7 × 7), and –(9 × 9) with scanning tunneling microscopy. // *Phys. Rev. B.* –1989 –V.39 –P.1633.
- [78] *Hamers R.J., Tromp R.M., Demuth J.E.* Scanning tunneling microscopy of Si(0 0 1). // *Phys. Rev. B.* –1986 –V.34 –P.5343.
- [79] *Dąbrowski J., Müssig H.J., Wolff G.* Atomic Structure of Clean Si(1 1 3) Surfaces: Theory and Experiment. // *Phys. Rev. Lett.* –1994 –V.73 –P.1660.
- [80] *Laracuente A., Erwin S.C., Whitman L.J.* Structure of Ge(1 1 3): Origin and Stability of Surface Self-Interstitials. // *Phys. Rev. Lett.* –1998 –V.81 –P.5177.

СПИСОК ОСНОВНЫХ ПУБЛИКАЦИЙ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

1. Henzler M., Zhachuk R. The step structure of the Si(5 5 7) surface // *Thin Solid Films.* –2003. –Т.428. –С.129-132.
2. Dolbak A.E., Zhachuk R.A., Olshanetsky B.Z. Ag growth on Si(5 5 7) surface // *Physics of Low-Dimensional Structures.* –2003. –Т.7-8. –С.35-42.
3. Zhachuk R.A., Teys S.A., Dolbak A.E., Olshanetsky B.Z. Formation of ordered arrays of Ag nanowires and nanodots on Si(5 5 7) surface // *Surface Science.* –2004. –Т.565. –С.37-44.
4. Жачук Р.А., Тийс С.А., Ольшанецкий Б.З. Формирование наноточек и нанопроволок серебра на поверхности Si(5 5 7) // *Письма в ЖЭТФ.* –2004. –Т.79. –В.8. –С.467-469.
5. Жачук Р.А., Тийс С.А., Ольшанецкий Б.З. Исследование начальных стадий роста Pb на поверхности Si(7 7 10) методом сканирующей туннельной микроскопии. // *Физика и техника полупроводников.* –2007. –Т.41. –В.5. –С.580-583.
6. Zhachuk R., Pereira S. Comment on “Atomic structure model of the reconstructed Si(5 5 7) surface with a triple step structure: Adatom-parallel dimer model” // *Physical Review B.* –2009. –Т.79. –С.077401.
7. Жачук Р.А., Романюк К.Н., Тийс С.А., Ольшанецкий Б.З. Начальные стадии роста Ge на поверхности Si(7 7 10) // *Физика твердого тела.* –2009. –Т.51. –В.1. –С.189-194.
8. Zhachuk R., Teys S., Olshanetsky B., Pereira S. Speed determination of single Sr adatoms moving within Si(1 1 1) – 7 × 7 half unit cells // *Applied Physics Letters.* –2009. –Т.95. –С.061901.
9. Zhachuk R., Olshanetsky B., Coutinho J., Pereira S. Electronic effects in the formation of apparently noisy scanning tunneling microscopy images of Sr on Si(1 1 1) – 7 × 7 // *Physical Review B.* –2010. –Т.81. –С.165424.

10. Жачук Р.А., Тийс С.А., Ольшанецкий Б.З. Влияние реконструкции поверхности Si(1 1 1) – 7 × 7 на диффузию атомов стронция // ЖЭТФ. –2011. –Т.140. –В.6(12). –С.1113-1124.
11. Zhachuk R., Teys S., Coutinho J. Strain-induced structure transformations on Si(1 1 1) and Ge(1 1 1) surfaces: A combined density-functional and scanning tunneling microscopy study // The Journal of Chemical Physics. – 2013. –Т.138. –С.224702.
12. Zhachuk R., Teys S., Coutinho J., Rayson M.J., Briddon P.R. Static and dynamic buckling of reconstructions at triple steps on Si(1 1 1) surfaces // Applied Physics Letters. –2014. –Т.105. –С.171602.
13. Жачук Р.А., Кутиньо Ж., Рэйсон М.Ж., Бриддон П.Р. Изгиб элементов реконструкции краев тройных ступеней на вицинальных поверхностях (1 1 1) Si // ЖЭТФ. –2015. –Т.147. –В.4. –С.729-735.
14. Zhachuk R., Coutinho J., Dolbak A., Cherepanov V., Voigtländer B. Si(1 1 1) strained layers on Ge(1 1 1): Evidence for c(2 × 4) domains // Physical Review B. –2017. –Т.96. –С.085401.
15. Zhachuk R., Teys S. Pentagons in the Si(3 3 1) – (12 × 1) surface reconstruction // Physical Review B. –2017. –Т.95. –С.041412(R).
16. Жачук Р., Кутиньо Ж. Комментарий к статье “Различные СТМ-изображения сверхструктуры чистой грани Si(1 3 3) – 6 × 2” // Письма в ЖЭТФ. –2017. –Т.106. –В.5. –С.322-323.
17. Zhachuk R., Coutinho J., Palotás K. Atomic and electronic structure of the Si(3 3 1) – (12 × 1) surface // The Journal of Chemical Physics. –2018. – Т.149. –С.204702.
18. Жачук Р.А., Кутиньо Ж. Эффект увеличения размеров пентамеров при сканирующей туннельной микроскопии: роль поверхностных радикалов // ЖЭТФ. –2019. –Т.155. –В.1. –С.103-107.
19. Zhachuk R.A., Shklyayev A.A. Universal building block for (1 1 0)-family silicon and germanium surfaces // Applied Surface Science. –2019. –Т.494. –С.46-50.
20. Zhachuk R.A., Dolbak A.E., Shklyayev A.A. Atomic structure of high Miller index Si(47 35 7) surface // Surface Science. –2020. –Т.693. –С.121549.
21. Жачук Р.А. Атомные модели поверхностей Si(1 1 0) – 5 × 8 и Ge(1 1 0) – c(10 × 8) // ЖЭТФ. –2020. –Т.158. –В.2(8) –С.257-364.
22. Zhachuk R. Structural dataset for Si(1 1 0) and Si(17 15 1) surface models and related calculated STM images // Data in brief. –2020. –Т.28. – С.104847.
23. Zhachuk R.A., Coutinho J. Pentamers with interstitial atoms as the building blocks of the Ge(3 3 1) – 5 × 1 surface // Applied Surface Science. –2020. –Т.533. –С.147507.

24. Долбак А.Е., Жачук Р.А. Деформация межатомных связей в верхних слоях поверхности Ge(1 1 1) со структурами $c(2 \times 8)$, 7×7 и 5×5 // ЖЭТФ. –2021. –Т.160. –В.1(7). –С.55-61.
25. Zhachuk R.A., Coutinho J. Comment on “Experimental evidence for a new two-dimensional honeycomb phase of silicon: A missing link in the chemistry and physics of silicon surfaces?” // The Journal of Physical Chemistry C. –2022. –Т.126. –С.866-867.
26. Zhachuk R.A., Coutinho J. Crucial role of vibrational entropy in the Si(1 1 1) – 7×7 surface structure stability // Physical Review B. –2022. – Т.105. –С.245306.
27. Zhachuk R.A., Latyshev A.V., Coutinho J. Impact of strain and surface reconstruction on long-range-diffusion of Ge atoms on Ge(1 1 1) surface // Physical Review B. –2023. –Т.107. –С.245305.