

УДК 538.911

Горячко А. М.¹, к.ф.-м.н.,
Кулик С. П.¹, к.ф.-м.н., доцент,
Мельник П. В.¹, к.ф.-м.н., професор,
Находкін М. Г.¹, д.ф.-м.н., професор.

Нова атомарна модель нано- структурованої поверхні Si(001)-c(8×8)

¹ Київський національний університет
імені Тараса Шевченка,
83000, м. Київ, пр-т. Глушкова 4г,
e-mail: andreandy2000@gmail.com

A. M. Goriachko¹, Ph.D,
S. P. Kulyk¹, Ph. D. Assoc. Prof.,
P. V. Melnik¹, Ph. D. Prof.,
M. G. Nakhodkin¹, Dr. Sc. Prof.

New atomic model of the Si(001)-c(8×8) nanostructured surface

¹ Taras Shevchenko National University of Kyiv,
83000, Kyiv, Glushkova ave., 4g,
e-mail: andreandy2000@gmail.com

Методом скануючої тунельної мікроскопії (СТМ) із атомною роздільною здатністю досліджено наноструктуровану поверхню Si(001)-c(8×8) та запропоновано атомарну модель цієї надструктури. Ключові слова: кремній, реконструкція, СТМ, наноструктуризація.

The Si(001)-c(8×8) reconstruction is a rarely observed nanostructured state of the Si(001) surface. An exact mechanism of its stabilization is not yet clear, but the factor giving rise to this reconstruction is the presence of trace amounts of Cu or Bi (below the detection limit of Auger electron spectroscopy). We present high resolution STM images of the Si(001)-c(8×8) nanostructure, which provide a detailed view of its constituents: elementary building blocks of three epitaxial Si ad-dimers with non-dense packing. Such blocks are separated by double dimer vacancies within the Si(001) substrate and are arranged with a c(8×8) periodicity. A detailed atomic model of the ideal Si(001)-c(8×8) reconstruction as well as its nonstandard building blocks, which lead to the absence of a long range order, are suggested. The model consists of only Si atoms, since the concentration of Bi or Cu was found below the detection limit of electron spectroscopy. The scope and complexity of this surface phenomenon are of the same order as for the well known Si(111)-(7×7) reconstruction.

Key Words: silicon, reconstruction, STM, nanostructuring.

Статтю представив д.ф.-м.н. Скришевський В.А.

В науковій літературі існує консенсус щодо стану глобального мінімуму вільної енергії поверхні Si(001), яким є димернорядова реконструкція 2×1. Періодичність в площині поверхні Si(001)-(2×1) складає 0.768 нм × 0.384 нм, що не дає можливості вважати її наноструктурованою. Також існує консенсус щодо способу приготування реконструйованої поверхні Si(001)-(2×1). Він полягає у відпалюванні надчистого зразка Si(001) в умовах надвисокого вакууму при температурі 1200°C та достатньо повільного охолодження до кімнатної температури. В окремих роботах спостерігалась структура Si(001)-c(8×8) як результат наявності домішок Cu [1-3]. В цьому випадку періодичність надструктури в площині поверхні складає 3.072 нм × 3.072 нм, тобто дозволяє розглядати таку поверхню як наноструктуровану. Атомарні

моделі реконструкції Si(001)-c(8×8) запропоновані в роботах [1-3] не узгоджуються одна із одною. Метою даної роботи було з'ясування деталей атомарної будови цієї поверхні за допомогою методики скануючої тунельної мікроскопії (СТМ).

В наших експериментах використовувалися зразки Si(001), що є стандартними підкладками для мікроелектронних технологій. Відпалювання до 1200°C, а також СТМ дослідження при кімнатній температурі відбувалося у надвисоковакуумній камері із базовим тиском 3×10⁻¹⁰ мбар. Єдиною відмінністю від приготування стандартної реконструкції Si(001)-(2×1) було внесення домішок Cu або Bi в кількостях нижчих за межу чутливості електронної Оже-спектроскопії (відносні атомні концентрації менше за 1%).

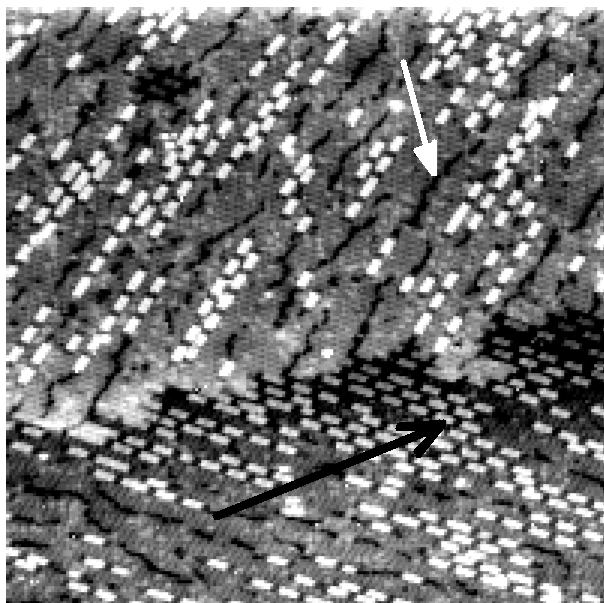


Рис. 1 СТМ зображення ($65 \text{ нм} \times 65 \text{ нм}$) поверхні $\text{Si}(001)$ частково покритої реконструкцією $c(8 \times 8)$ внаслідок забруднення домішкою Cu . Тунельна напруга на зразку $U_T = +2 \text{ В}$, тунельний струм $I_T = 0.3 \text{ нА}$.

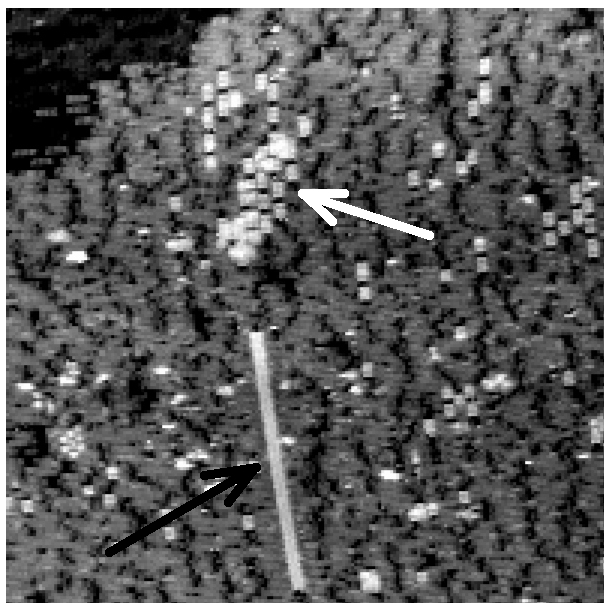


Рис. 2 СТМ зображення ($65 \text{ нм} \times 65 \text{ нм}$) поверхні $\text{Si}(001)$ частково покритої реконструкцією $c(8 \times 8)$ внаслідок адсорбції Bi . Тунельна напруга на зразку $U_T = +2.5 \text{ В}$, тунельний струм $I_T = 0.3 \text{ нА}$.

На рис. 1 наведено СТМ зображення поверхні $\text{Si}(001)$ із частковим покриттям реконструкцією $c(8 \times 8)$ внаслідок наявності домішки Cu . Елементарні складові блоки цієї

надструктури формують характерний візерунок типу "цегляної кладки". Як приклад, одна із таких ділянок позначена стрілкою чорного кольору. На решті поверхні присутня димерно-рядова реконструкція 2×1 , проте її деталі не можуть бути розрізнені на даному масштабі. Також, на поверхні присутня велика кількість димерних вакансій, що групуються в суцільні лінії, одна з яких для прикладу відзначена стрілкою білого кольору.

Окрім домішок Cu , реконструкцію $c(8 \times 8)$ спричиняла також і наявність домішок Bi , що демонструє рис. 2. На присутність Bi чітко вказує ідеально рівна нанолінія (позначена стрілкою чорного кольору). В попередніх роботах інших авторів було безсумнівно встановлено, що в саме такі лінії групуються атоми Bi на поверхні $\text{Si}(001)$ при глибоко субмоношарових ступенях покриття. Загалом же поверхня даного зразка є сильно дефектною, а також містить невелику кількість елементарних блоків надструктури $c(8 \times 8)$, останню позначено стрілкою білого кольору. Важливим спостереженням є те, що в наших експериментах, ступінь заповнення поверхні реконструкцією $c(8 \times 8)$ була значно нижчою у випадку домішок Bi ніж у випадку домішок Cu .

Для детального з'ясування природи поверхні $\text{Si}(001)$ - $c(8 \times 8)$ були одержані зображення із атомною роздільною здатністю, зокрема наведено на рис. 3 СТМ зображення у вільних станах зразка. Видно, що наноструктурована поверхня складається із стандартних елементарних блоків подібних до виділеного прямокутника (біло-чорна точкова лінія). Кожен такий блок складається із шести максимумів яскравості, які відповідають шести атомам Si . Окремі блоки групуються в надструктуру $c(8 \times 8)$, елементарна комірка якої має форму квадрату окресленого біло-чорною точковою лінією. Також, на зображенні помітні заглиблення між сусідніми елементарними блоками (відзначено еліпсом, біло-чорною точковою лінією), які є глибшими за ділянки поверхні із димерно-рядовою реконструкцією 2×1 (позначено стрілкою білого кольору).

На основі детального аналізу СТМ даних із атомною роздільною здатністю було запропоновано атомарну модель ідеально періодичної надструктури $\text{Si}(001)$ - $c(8 \times 8)$, представлену на рис. 4. Найвищий атомний шар зображений великими зафарбованими колами чорного кольору. Він складається з епітаксійних ад-димерів (маленький прямокутник).

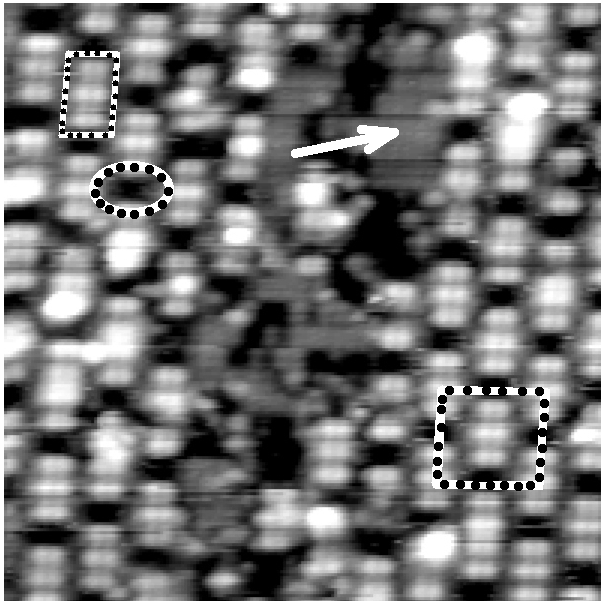


Рис. 3 СТМ зображення (19 нм × 19 нм) поверхні Si(001)-c(8×8). Тунельна напруга на зразку $U_T = +1$ В, тунельний струм $I_T = 0.3$ нА.

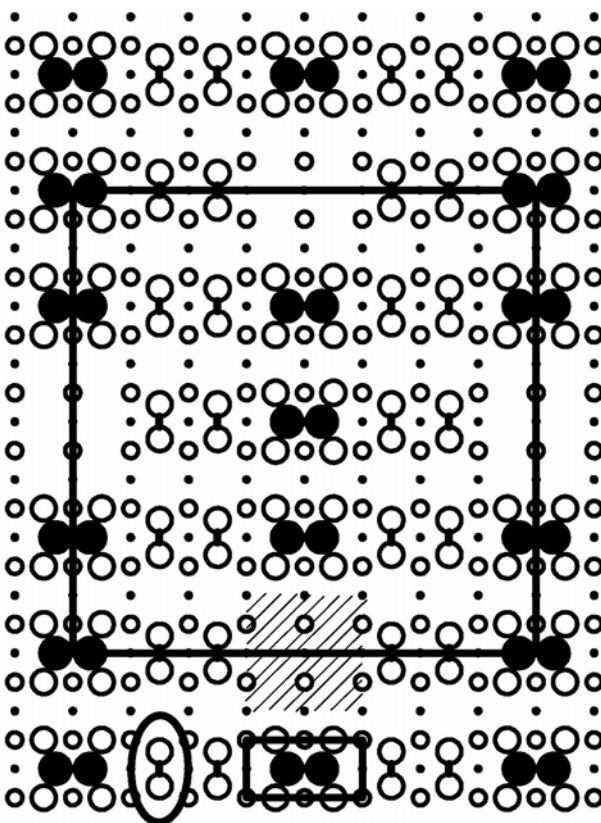


Рис. 4 Атомарна модель ідеальної надструктури Si(001)-c(8×8). Менший розмір атома означає більшу віддаленість від читача.

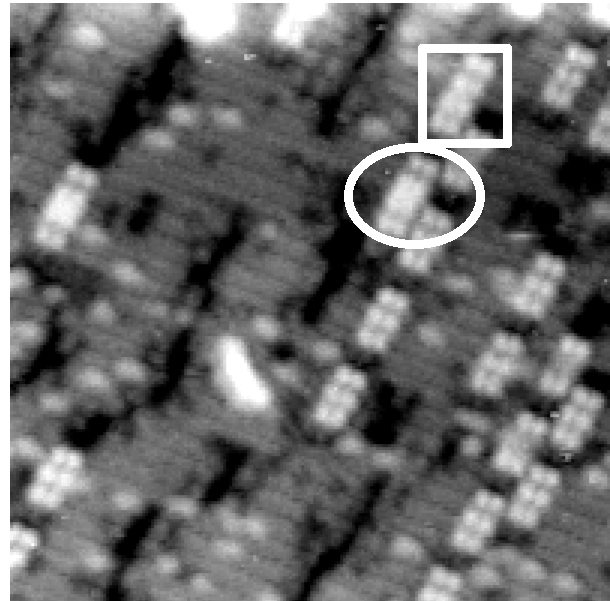


Рис. 5 СТМ зображення (19 нм × 19 нм) із нестандартними елементарними блоками наноструктурованої поверхні Si(001)-c(8×8). Тунельна напруга на зразку $U_T = +1.5$ В, тунельний струм $I_T = 0.3$ нА.

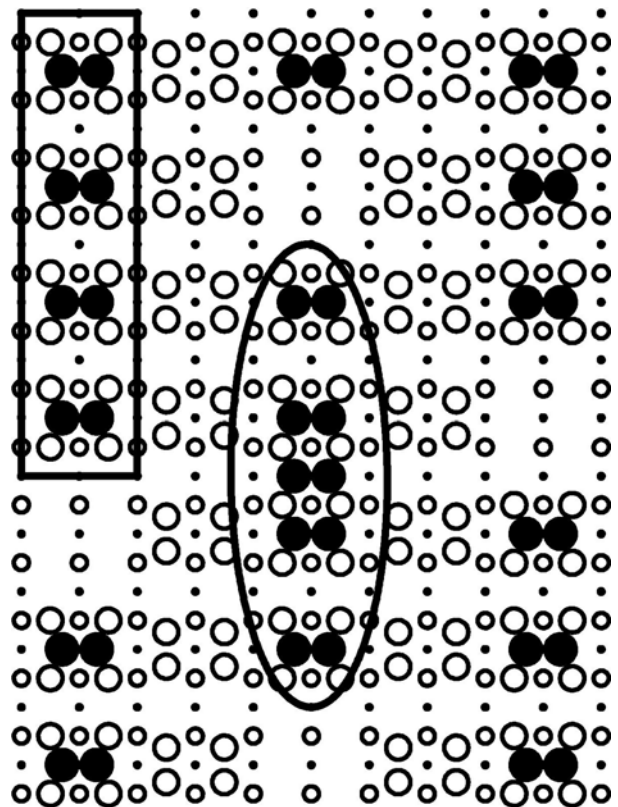


Рис. 6 Атомарна модель нестандартних елементарних блоків c(8×8) на поверхні Si(001).

Групи з трьох ад-димерів формують елементарні блоки, впорядковане розміщення яких в шаховому порядку формує елементарну комірку $c(8 \times 8)$ - окреслено великим квадратом, лінією чорного кольору. На частці поверхні незайнятій ад-димерами присутні залишкові димери реконструкції 2×1 (окреслено еліпсом, лінія чорного кольору) а там де відсутні і вони - заглиблення до наступного атомного шару (відзначено штриховкою).

Детальний аналіз ділянок поверхні, що мали суцільне покриття елементами $c(8 \times 8)$ показав, що дана структура не характеризується дальнім порядком. Порушення ідеальної періодичності відбуваються через наявність нестандартних елементарних блоків. Приклади останніх можна спостерігати на СТМ зображенні (рис. 5), де лінією білого кольору окреслено видовжений елементарний блок (прямокутник) та елементарний блок із фрагментом димерного ряду (еліпс). Відповідну атомарну модель наведено на рис.6, де лінією чорного кольору окреслено видовжений блок (прямокутник), що складається з чотирьох аддимерів Si замість лише трьох у стандартному випадку, та блок із фрагментом димерного ряду (еліпс). Останній складається вже із п'яти ад-димерів, причому три із них формують короткий димерний ряд (тобто наступний атомний шар із реконструкцією 2×1) внаслідок відповідної щільної упаковки. Запропонована на рис. 6 атомарна модель узгоджується із СТМ зображенням нестандартних елементів на рис. 5. Так, на зображеннях із атомною роздільною здатністю, видовжений блок містить вісім максимумів

яскравості замість шести стандартних (кожен максимум відповідає окремому атому Si). В той же час, фрагмент димерного ряду у нестандартному блоці, проявляється на зображенні у вигляді центральної смужки проміж чотирьох максимумів на краях, які відповідають двом нещільно упакованим ад-димерам.

Моделі представлені на рис. 4 та рис.6 складаються виключно з атомів Si, хоча в наших експериментах, існування структури $c(8 \times 8)$ було спричинене наявністю Bi або Cu. В той же час кількість цих домішок була настільки низькою, що виключала наявність хоча б одного атома Bi або Cu в кожній елементарній комірці. Таким чином, було зроблено висновок, що домішки стабілізують надструктуру $c(8 \times 8)$, наприклад через дефектоутворення або поверхневі механічні напруження, проте самі по собі не є "будівельним матеріалом" реконструкції. Основна відмінність запропонованої моделі від тих, що були описані в літературі [1-3], полягає в асоціації кожного максимуму яскравості із окремим атомом Si, а не димером, як у інших авторів. Слід зазначити, що реконструйована поверхня Si(001)- $c(8 \times 8)$ є явищем такого самого масштабу що і загальна відома реконструкція Si(111)- (7×7) - як за розміром елементарної комірки, так і за різномаяттям структурних елементів.

Таким чином, дана робота наочно демонструє будову поверхні Si(001)- $c(8 \times 8)$ із атомною роздільною здатністю та пропонує оригінальну атомарну модель цієї реконструкції, що якнайкраще узгоджується із наявними експериментальними даними.

Список використаних джерел

1. Murray P.W. Direct observation of the $c(8 \times 8)$ defect structure on Si(001) using scanning tunneling microscopy / P.W. Murray, R. Lindsay, F.M. Leibsle, et al // Physical Review B. - 1996. - **54**. - P. 13468-13471.
2. Liu B.Z. An STM study of Cu on Si(001) in the $c(8 \times 8)$ structure / B.Z. Liu, M.V. Katkov, J. Nogami // Surface Science. - 2000. - **453**. - P. 137-142.
3. Zilani M.A.K. Scanning tunneling microscopy study of higher-order Si(100)- $c(8 \times 8)$ surface reconstruction / M.A.K. Zilani, H. Xu, X.S. Wang, et al // Journal of Physics: Condensed Matter. - 2008. - **20**. - P. 395003(1)-395003(6).

References

1. MURRAY, P.W. et al. (1996) Direct observation of the $c(8 \times 8)$ defect structure on Si(001) using scanning tunneling microscopy. *Physical Review B*. 54. p. 13468-13471.
2. LIU, B.Z. et al. (2000) An STM study of Cu on Si(001) in the $c(8 \times 8)$ structure. *Surface Science*. 453. p. 137-142.
3. ZILANI, M.A.K. et al. (2008) Scanning tunneling microscopy study of higher-order Si(100)- $c(8 \times 8)$ surface reconstruction. *Journal of Physics: Condensed Matter*. 20. p. 395003(1)-395003(6).

Надійшла до редколегії 12.11.14