

На правах рукописи

ЯКОВЛЕВ Алексей Андреевич

**Структура и свойства поверхностных реконструкций
 $\text{Si}(111)\sqrt{3}\times\sqrt{3}\text{-Bi}$ и $\text{Si}(111)\sqrt{3}\times\sqrt{3}\text{-Au}$,
модифицированных атомами металлов**

01.04.10 - Физика полупроводников

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико–математических наук



Владивосток - 2016

Работа выполнена в лаборатории технологии полупроводников и диэлектриков Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института автоматики и процессов управления Дальневосточного отделения Российской академии наук (ИАПУ ДВО РАН)

Научный руководитель: **Саранин Александр Александрович**, член-корреспондент РАН, доктор физико-математических наук, профессор, заместитель директора по научной работе Института автоматики и процессов управления ДВО РАН, г. Владивосток

Официальные оппоненты: **Фёдоров Александр Семенович**, доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник лаборатории физики магнитных явлений, ФГБНУ “ФИЦ” “КНЦ СО РАН” Институт Физики им. Л. В. Киренского СО РАН, г. Красноярск

Пячин Сергей Анатольевич, кандидат физико-математических наук, заведующий лабораторией функциональных материалов и покрытий, ФГБУН Институт материаловедения ХНЦ ДВО РАН, г. Хабаровск

Ведущая организация: ФГБУН Институт общей физики им. А. М. Прохорова РАН, г. Москва

Защита состоится “ 9 “ декабря 2016 г. в 12 часов на заседании диссертационного совета Д 005.007.02 при Институте автоматики и процессов управления ДВО РАН по адресу: 690041, г. Владивосток, ул. Радио, 5.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ИАПУ ДВО РАН и на сайте <http://www.iacp.dvo.ru/diss/notifications>

Автореферат разослан “ “ 2016 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета Д 005.007.02
к.т.н., доцент

Гамаюнов Е.Л.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА ДИССЕРТАЦИИ

Актуальность работы Основной тенденцией современной электронной промышленности является миниатюризация элементов интегральных схем. Ещё в 1975 году американским учёным Гордоном Муром по этому поводу было отмечено, что за предшествующее время, начиная с 1971, каждые два года происходит удвоение числа транзисторов в схеме. Однако, такой экспоненциальный рост скоро достигнет своего предела из-за ряда физических ограничений. Это связано, с одной стороны, с дальнейшим ростом энергопотребления из-за увеличения числа устройств на интегральной схеме и проблемами с отводом тепла. С другой стороны, при дальнейшей миниатюризации приходится учитывать квантово-размерные эффекты. В связи с этим дальнейший прогресс связан с поиском альтернативных решений, одним из которых является изменение типа носителя информации, с заряда электрона (когда в качестве регистрируемого значения выступает электрический ток) на другие, связанные с квантовыми свойствами частиц, например, спин электрона.

Возможностью использования спина как носителя информации, управлением его степенями свободы и способами воздействия на него занимается такая область квантовой электроники, как спинтроника, которая как отдельное направление сформировалась в последние десятилетия. Управление спином при помощи магнитного поля активно применяется – уже созданы накопители на основе гигантского магнитосопротивления и устройства магнитной оперативной памяти. В последнее время активно развивается направление спинтроники, которое подразумевает управление спином электрона не посредством внешнего магнитного поля, а при помощи спин-орбитального взаимодействия. Одним из основных эффектов в данной области является релятивистский эффект Рашбы. Этот эффект заключается в том, что под воздействием электрического поля и спин-орбитального взаимодействия в двумерном электронном газе (ДЭГ) происходит снятие вырождения по спину [1]. Количество материалов, в которых наблюдается эффект Рашбы, в настоящее время ограничено, поэтому поиск новых двумерных структур с существенным спиновым расщеплением становится актуальной задачей. Одним из возможных путей расширения спектра таких материалов на поверхностях Si является использование модифицированной поверхности кремния, реконструированной, например, с помощью атомов металлов, для выращивания на ней плёнок и двумерных структур с заданными свойствами [2].

Впервые эффект Рашбы был обнаружен на металлических поверхностях золота и висмута и в плёнках висмута и свинца на Ag(111). Даль-

нейшие поиски привели к заключению, что расщепление по спину поверхностных состояний возможно (и чаще всего ещё и усиливается) при помещении одного монослоя атомов химического элемента с большим атомным номером на поверхность, состоящую из атомов химического элемента с малым номером. Согласно исследованиям впервые обнаруженных спин-расщеплённых металлических состояний на полупроводниковых подложках, было установлено, что эффект Рашбы не зависит от каких-либо уникальных свойств подложки, и, следовательно, существует возможность создать подобную электронную структуру на поверхности кристалла кремния. Действительно, спин-расщеплённые поверхностные состояния были обнаружены в реконструкциях золота на поверхности германия и одномерных цепочках золота на поверхности кремния. В дальнейшем было показано, что монослои Bi и Pb на Si(111) также демонстрируют эффект Рашбы, но для неметаллических состояний. Одно из направлений дальнейших поисков – использование бинарных или многокомпонентных систем, так чтобы как минимум один из компонентов являлся тяжёлым металлом.

Целью диссертационной работы является поиск новых двумерных бинарных материалов со спин-расщеплёнными металлическими состояниями на поверхности кремния на основе висмута и золота и исследование их атомной структуры и электронных свойств.

Для достижения цели работы ставятся следующие задачи:

1. Исследовать структурные и электронные свойства двумерных сплавов, состоящих из атомов Bi и Ag на поверхности Si(111).
2. Изучить влияние атомов Na, Tl и Cs на структурные и электронные свойства поверхностных реконструкций системы Au/Si(111).

Научная новизна работы В работе получены новые экспериментальные результаты, основными из которых являются следующие:

1. Исследованы структурные и электронные свойства новых двумерных поверхностных сплавов Bi-Ag на поверхности Si(111), имеющих различную периодичность, в т.ч. квазипериодических. Для реконструкций $\text{Si}(111)\sqrt{19}\times\sqrt{19}\text{-(Bi,Ag)}$ и $\text{Si}(111)4\times4\text{-(Bi,Ag)}$ построены структурные модели. Установлено, что хорошоупорядоченная реконструкция $\text{Si}(111)4\times4\text{-(Bi,Ag)}$ обладает структурными и электронными свойствами, аналогичными свойствам поверхностного сплава BiAg_2 на поверхности Ag(111), у которого в электронной структуре есть спин-расщеплённые поверхностные состояния.

2. Показано, что модификация системы Au/Si(111) адсорбатами из элементов I группы, Na и Cs, приводит к исчезновению доменных стенок и формированию структуры со свойствами двумерного электронного газа. Для структур на кремнии наблюдалось расщепление поверхностных металлических зон на спиновые подзоны (эффект Рашбы), при этом величина расщепления по волновому вектору на уровне Ферми достигает $0,027 \text{ \AA}^{-1}$ и по энергии – 110 мэВ.
3. Показано, что модификация системы Au/Si(111) адсорбатом Tl, элементом III группы, также как для другого адсорбата из этой группы, In, приводит к исчезновению доменных стенок и формированию структуры со свойствами двумерного электронного газа. Наблюдалось расщепление поверхностных металлических зон на спиновые подзоны (эффект Рашбы), при этом величина расщепления по волновому вектору на уровне Ферми достигает $0,052 \text{ \AA}^{-1}$ и по энергии – 190 мэВ.

Практическая ценность работы заключается в создании новых двумерных сплавов на основе реконструкций висмута и золота. Получены новые двумерные сплавы Bi-Ag на Si(111) со спин-расщеплёнными поверхностными состояниями. На примере модификации реконструкции $\text{Si}(111)\alpha\text{-}\sqrt{3}\times\sqrt{3}\text{-Au}$ продемонстрировано качественное улучшение структурных и электронных свойств, в частности, существенное снижение плотности дефектов на поверхности и формирование спин-расщеплённых поверхностных состояний.

Результаты работы в дальнейшем могут быть использованы для исследований в области спинтроники и для создания прототипов новых приборов, использующих спины, как носители информации.

Достоверность полученных результатов обеспечена применением аттестованных измерительных приборов и апробированных методик измерения; использованием совокупности взаимодополняющих современных физических методов исследования (сканирующая туннельная микроскопия (СТМ), сканирующая туннельная спектроскопия (СТС), дифракция медленных электронов (ДМЭ), фотоэлектронная спектроскопия с угловым разрешением (ФЭСУР), рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия (РФЭС)); статистической обработкой экспериментальных данных и повторяемостью результатов.

Основные защищаемые положения

1. Адсорбция серебра на поверхностные реконструкции системы Bi/Si(111) приводит к формированию новых поверхностных реконструкций системы (Bi,Ag)/Si(111): хорошоупорядоченных Si(111)4×4-(Bi,Ag) и Si(111)2√3×2√3-(Bi,Ag), плохоупорядоченной Si(111)√19×√19-(Bi,Ag) и квазипериодической Si(111)“3√3×3√3”-(Bi,Ag). Структуры Si(111)4×4-(Bi,Ag) и Si(111)√19×√19-(Bi,Ag) представляют собой одноатомные слои Ag(111)1×1, развёрнутые относительно Si(111) на 30° и на ±27,6°, соответственно, и в которых часть атомов Ag замещена на атомы Bi.
2. Поверхностная реконструкция Si(111)2√3×2√3-(Bi,Ag) обладает полупроводниковыми свойствами, а поверхностные реконструкции Si(111)√19×√19-(Bi,Ag) и Si(111)4×4-(Bi,Ag) – металлическими. Атомная структура Si(111)4×4-(Bi,Ag) аналогична структуре поверхностного сплава BiAg₂, и в её электронной структуре также присутствуют спин-расщеплённые металлические поверхностные состояния.
3. Система Au/Si(111), модифицированная различными адсорбатами (In, Tl, Na и Cs), приобретает высокое кристаллическое совершенство и характеризуется металлической зоной поверхностных состояний, расщеплённой на спиновые подзоны. Выбор адсорбата и его концентрации позволяет варьировать степень заполнения зоны (0,3-0,7 электрона на элементарную ячейку) и величину спинового расщепления от ~0,018Å⁻¹ до ~0,052Å⁻¹ по волновому вектору на уровне Ферми от ~100 до ~190 мэВ по энергии.

Личный вклад соискателя Автор осуществил анализ литературных данных по теме исследования, провел основную часть экспериментов, выполнил обработку и анализ экспериментальных данных, участвовал в обсуждении полученных результатов, в написании научных статей, материалов конференций. Часть экспериментальных исследований проведена при участии сотрудников Института автоматики и процессов управления ДВО РАН (Саранин А. А. – научный руководитель диссертанта, Зотов А. В., Грузнев Д. В., Цуканов Д. А., Чукуров Е. Н., Луняков Ю. В., Утас О. А., Бондаренко Л. В., Матецкий А. В., Денисов Н. В., Азатьян С. Г., Рыжкова М. В., Тупчая А. Ю. и Борисенко Е. А.), а также сотрудников других учреждений (Усачёв Д., Вилков О., Фёдоров А., Вяликх Д. В., Еремеев С. В., Чулков Е. В.).

Апробация результатов работы Основные результаты работы докладывались на международных, российских и региональных конференциях, в том числе на:

Десятом Российско-Японском семинаре по физике поверхности полупроводников JRSSS-10 (г. Токио, Япония, 2012 г.); XXI-ом Международном симпозиуме “Наноструктуры: Физика и Технология” (г. Санкт-Петербург, Россия, 2013 г.); 14-ой Международной конференции по формированию полупроводниковых интерфейсов (г. Кёнджу, Корея, 2013 г.); Второй Азиатской Школе-конференции по физике и технологии наноструктурированных материалов ASCO-NANOMAT (г. Владивосток, Россия, 2013 г.); 5-ом Евро-Азиатском симпозиуме “Тенденции в МАГнетизме”: Наномагнетизм EASTMAG-2013 (г. Владивосток, Россия, 2013 г.); 12-ой Международной конференции по атомарному получению поверхностей, интерфейсов и наноструктур параллельно с 21-ым Международным Коллоквиумом по сканирующей туннельной микроскопии ACSIN-12&ICSPM21 (г. Токио, Япония, 2013 г.); семинаре “Полупроводники: проблемы подготовки и изучения функциональных материалов” TU-SBRAS-FEBRAS-ISTC (г. Сёндай, Япония, 2013 г.).

Публикации По теме диссертации опубликовано 3 статьи в рецензируемых научных журналах, входящих в список ВАК, 4 статьи в сборниках трудов конференций и 5 тезисов докладов.

Структура и объем диссертации Диссертация состоит из введения, пяти глав, заключения и списка цитируемой литературы. Общий объем диссертации составляет 119 страниц, включая 50 рисунков, 1 таблицу и список литературы из 116 наименований.

КРАТКОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении отображена актуальность темы исследования, научная новизна и практическая ценность работы, сформулирована её цель и задачи, указаны основные защищаемые положения, представлен список конференций, семинаров и школ, на которых докладывались результаты диссертационной работы, приведен список публикаций по тематике диссертационной работы, а также даны краткие сведения об объёме и структуре самой диссертации.

Первая глава является обзорной. Описаны строение и электронные свойства реконструкций кремния, модифицированных атомами металлов; кратко описаны известные литературные данные о некоторых реконструкциях поверхности Si(111), которые в последующих главах будут использоваться как подложки для получения исследуемых структур; рассмотрены поверхностные реконструкции ряда металлов на поверхности Si(111), которые будут использоваться в качестве адсорбатов. Часть главы посвящена двухкомпонентной системе $\text{Si}(111)h-\sqrt{3}\times\sqrt{3}-(\text{Au},\text{In})$, краткий обзор известных литературных данных по этой теме также содержится в данной главе. Также кратко описан эффект Рашбы, связанный со спин-орбитальным расщеплением поверхностных состояний.

Во второй главе кратко рассмотрены условия и методики проведения экспериментов, а также основные методы исследования. В частности, были описаны основные принципы работы СТМ, ДМЭ, и ФЭС. Все эксперименты проводились в двух отдельных сверхвысоковакуумных камерах: Omicron STM-1 (оборудована СТМ и ДМЭ) и Omicron STM VT-XA (оборудована СТМ, ДМЭ, ФЭС).

В третьей главе рассматриваются новые двумерные сплавы Ag-Bi на поверхности Si(111).

Совместная адсорбция Ag и Bi на поверхность Si(111) не всегда приводит к формированию новых поверхностных реконструкций системы (Bi,Ag)/Si(111). Оказалось, что наиболее выгодной в этой системе является $\text{Si}(111)\sqrt{3}\times\sqrt{3}\text{-Ag}$, а необходимым условием формирования совместных реконструкций Bi-Ag является порядок осаждения элементов на поверхность, а именно осаждение Ag на предварительно сформированные реконструкции Bi. Как будет показано далее, большая часть совместных реконструкций Bi-Ag получена на поверхности, являющейся смесью двух реконструкций с разным покрытием Bi: $\alpha\text{-}\sqrt{3}\times\sqrt{3}\text{-Bi}$ и $\beta\text{-}\sqrt{3}\times\sqrt{3}\text{-Bi}$. В данной работе для простоты рассматривали долю площади поверхности, занятой $\beta\text{-}\sqrt{3}\times\sqrt{3}\text{-Bi}$.

Когда Ag осаждается при КТ на поверхность, полностью занятую $\alpha\text{-}\sqrt{3}\times\sqrt{3}\text{-Bi}$, формируется новая реконструкция – мозаичная структура, в которой атомы Ag занимают адсорбционные позиции в верхнем слое без разрушения нижележащего слоя Bi. Новая реконструкция содержит около 1,0 МС Ag в виде адатомов, слабо связанных с поверхностью. Структура стабильна до $T\sim 250^\circ\text{C}$.

Если начальная поверхность содержала домены $\beta\text{-}\sqrt{3}\times\sqrt{3}\text{-Bi}$, и доля площади, занятой ими, была меньше 10%, то осаждение на неё около 1 МС Ag при КТ с последующим отжигом при 250°C приводит к фор-

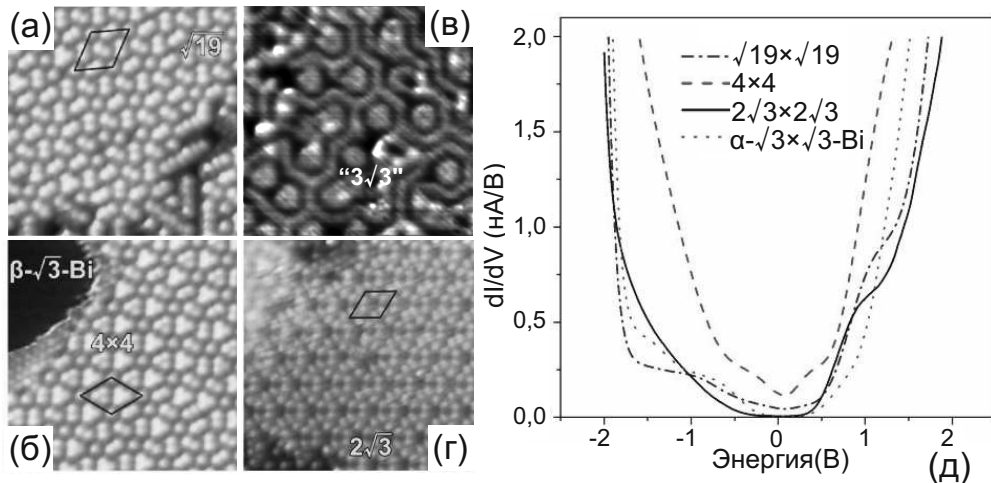


Рис. 1: СТМ изображения ($100 \times 100 \text{ \AA}^2$) новых реконструкций в системе (Ag,Bi)/Si(111): (а) – $\sqrt{19} \times \sqrt{19}$ -(Bi,Ag), сплошной линией выделена ячейка $\sqrt{19} \times \sqrt{19}$; (б) – 4×4 -(Bi,Ag), сплошной линией выделена ячейка 4×4 , и указана $\beta\text{-}\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -Bi; (в) – " $3\sqrt{3} \times 3\sqrt{3}$ "-(Bi,Ag); и (г) – $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$ -(Bi,Ag), сплошной линией выделена ячейка $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$. (д) – Спектры СТС реконструкций $\sqrt{19} \times \sqrt{19}$ -(Bi,Ag), 4×4 -(Bi,Ag), $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$ -(Bi,Ag) и $\alpha\text{-}\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -Bi.

мированию новой реконструкции Si(111) $\sqrt{19} \times \sqrt{19}$ -(Bi,Ag) (рис. 1, а), которая занимает больше 75% площади поверхности подложки. На основе анализа СТМ изображений предложена структурная модель, которая достаточно точно описывает реконструкцию (не представлена). В этой плёнке среднее расстояние между уровнями атомов Bi и Ag равно $\sim 0,58 \text{ \AA}$ и близко к полученному экспериментально расстоянию между уровнями атомов Bi и Ag в поверхностном сплаве Ag(111) $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -Bi – $0,57 \text{ \AA}$.

Реконструкция $\sqrt{19} \times \sqrt{19}$ -(Bi,Ag) плохо упорядочена, так как у неё есть тенденция переходить в более стабильную структуру системы (Bi,Ag)/Si(111), а именно, в Si(111) 4×4 -(Bi,Ag) (рис. 1, б). Эта реконструкция формируется, когда на исходной поверхности больше по площади доменов $\beta\text{-}\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -Bi. На основе анализа СТМ изображений также предложена структурная модель, которая достаточно точно описывает реконструкцию (не представлена). В 4×4 -(Bi,Ag) среднее расстояние между уровнями атомов Bi и Ag равно $\sim 0,59 \text{ \AA}$, что также близко к расстоянию между уровнями атомов Bi и Ag в поверхностном сплаве Ag(111) $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -Bi – $0,57 \text{ \AA}$. С учётом пространственного размещения атомов, реконструкция 4×4 -(Bi,Ag) имеет ряд особенностей, аналогичных особенностям поверхностного сплава BiAg₂.

Когда на исходную поверхность с промежуточным количеством доменов $\beta\text{-}\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -Bi осаждается 0,8 МС Ag при КТ с последующим отжигом при 150°C , около 80% поверхности занято новой реконструкцией системы (Bi,Ag)/Si(111). Её периодичность не очевидна из полученных СТМ изображениях (рис. 1, в), но Фурье-анализ установил, что это квазипериодическая реконструкция Si(111)" $3\sqrt{3} \times 3\sqrt{3}$ "-(Bi,Ag). На СТМ изоб-

ражениях видно, что эта реконструкция содержит два базовых элемента. Первый из них - это яркая “палочка” протяжённостью в три длины ячейки $\text{Si}(111)1 \times 1$, которая может соединяться с одной или двумя аналогичными под углом в 120° . И если они сами сформируют упорядоченную структуру, то это будет массив больших шестиугольников с периодичностью $3\sqrt{3} \times 3\sqrt{3}$. Вторым элементом является маленький шестиугольник с длиной стороны $5 \text{ \AA}$, что близко к длине ячейки $3\sqrt{3} \times 3\sqrt{3}$ на поверхности $\text{Ag}(111)$. Плотнo упакованный массив таких маленьких шестиугольников также будет обладать периодичностью $3\sqrt{3} \times 3\sqrt{3}$. Реальная реконструкция “ $3\sqrt{3} \times 3\sqrt{3}$ ”-(Bi,Ag) является смесью этих структур, и в идеале она будет выглядеть, как массив сопряжённых больших шестиугольников, каждый из которых содержит малый шестиугольник поменьше. Однако в данной работе на СТМ изображениях не удалось увидеть даже одной полностью законченной ячейки.

Если исходную поверхность с промежуточным количеством доменов $\beta\text{-}\sqrt{3} \times \sqrt{3}\text{-Bi}$ с осаждённым при КТ 0,8-1,0 МС Ag отжечь при 250°C , то формируется $\text{Si}(111)2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}\text{-(Bi,Ag)}$, занимающая до 75% площади всей поверхности (рис. 1, г).

Согласно спектрам СТС (рис. 1, д) реконструкции $\sqrt{19} \times \sqrt{19}\text{-(Bi,Ag)}$ и $4 \times 4\text{-(Bi,Ag)}$ обладают металлическими свойствами, в то время как $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}\text{-(Bi,Ag)}$ и $\alpha\text{-}\sqrt{3} \times \sqrt{3}\text{-Bi}$ – полупроводниковыми. Металлическая природа у $4 \times 4\text{-(Bi,Ag)}$ более выражена, чем у $\sqrt{19} \times \sqrt{19}\text{-(Bi,Ag)}$. Поэтому, в таком случае, поверхностная реконструкция $4 \times 4\text{-(Bi,Ag)}$ опять кажется наиболее подходящим кандидатом в качестве двумерного металлического материала для спинтроники, так как её свойства аналогичны свойствам поверхностного сплава BiAg_2 , у которого в электронной структуре есть спин-расщеплённые поверхностные состояния вблизи уровня Ферми.

В четвёртой главе рассматриваются структурные и электронные свойства поверхностной реконструкции $\text{Si}(111)\sqrt{3} \times \sqrt{3}\text{-Au}$ (рис. 2, а), модифицированной элементами I группы Na и Cs и элементом III группы Tl. Показано, что реконструкции системы Au/Si(111) после добавления атомов Na, Cs, In и Tl проявляют похожие структурные свойства, демонстрируют одинаковую электронную структуру. Влияние адсорбатов заключается в снижении плотности дефектов на поверхности и изменении положения уровня Ферми в электронной структуре.

Рассмотрим эволюцию поверхности при адсорбции Na на $\text{Si}(111)\sqrt{3} \times \sqrt{3}\text{-Au}$. Исходная поверхность характеризуется высокой плотностью доменных стенок (ДС) (рис. 2, а). После адсорбции Na доменные стенки полностью исчезают, и формируется хорошоупорядочен-

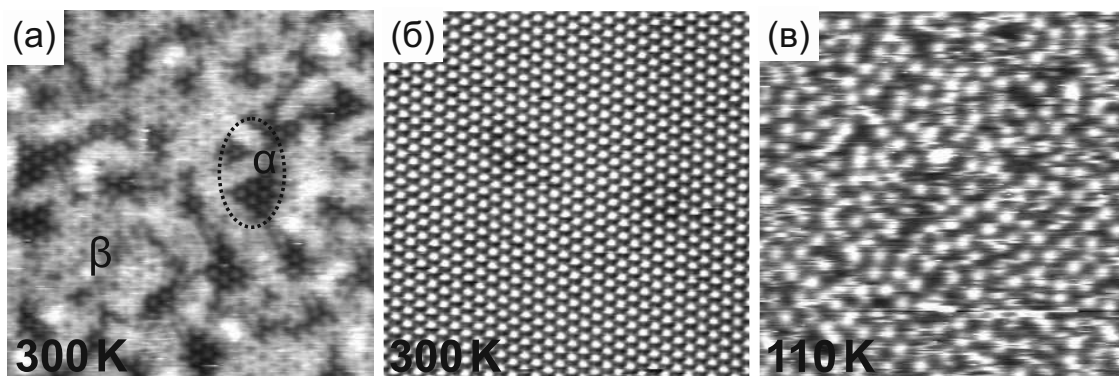


Рис. 2: СТМ изображения ($180 \times 180 \text{ \AA}^2$) поверхностных реконструкций: $\text{Si}(111)\sqrt{3} \times \sqrt{3}\text{-Au}$ – (а); и $\text{Si}(111)h\text{-}\sqrt{3} \times \sqrt{3}\text{-(Au,Na)}$ при КТ – (б) и 110К – (в).

ная поверхностная реконструкция $\text{Si}(111)h\text{-}\sqrt{3} \times \sqrt{3}\text{-(Au,Na)}$, как видно на СТМ изображениях на рис. 2, б. Ещё одним признаком этой поверхности являются чёткие рефлексy на картине ДМЭ (не показана), соответствующие периодичности $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$, без каких-либо особенностей.

Полученная реконструкция $\text{Si}(111)h\text{-}\sqrt{3} \times \sqrt{3}\text{-(Au,Na)}$ во многом схожа с ранее изученной $\text{Si}(111)h\text{-}\sqrt{3} \times \sqrt{3}\text{-(Au,In)}$. Обе реконструкции выглядят на СТМ изображениях похоже как при КТ, так при низких температурах. В качестве примера, на рис. 2, б, в показаны СТМ изображения поверхностной реконструкции $\text{Si}(111)h\text{-}\sqrt{3} \times \sqrt{3}\text{-(Au,Na)}$ при КТ и при 110 К. Предполагая, что при низких температурах (рис. 2, в) каждый яркий максимум соответствует одному атому Na, по СТМ изображениям было оценено среднее расстояние между двумя атомами Na, как $2\sqrt{3}a$, где a – постоянная кристаллической решётки. Такое расстояние между атомами соответствует покрытию $\sim 0,08 \text{ MC Na}$.

На рис. 3, а представлена структурная модель поверхностной реконструкции $\text{Si}(111)h\text{-}\sqrt{3} \times \sqrt{3}\text{-(Au,Na)}$. Наличие атома натрия, как было установлено из расчётов, изменяет длины сторон тримеров. В тримере Au, чьи стороны равны $2,86 \text{ \AA}$, длина изменяется на величину меньше $\sim 0,02 \text{ \AA}$. Однако, тримеры Si претерпевают значительно больше изменений по сравнению с золотыми тримерами: первоначально оба тримера были одинаковыми с длиной связи Si-Si, равной $3,51 \text{ \AA}$. После адсорбции атома Na, в одном из тримеров (с адсорбированным атомом Na) длины сторон возрастают до $3,65 \text{ \AA}$, а во втором – уменьшаются до $3,43 \text{ \AA}$, $3,46 \text{ \AA}$ и $3,50 \text{ \AA}$. Таким образом, присутствие слабосвязанных с поверхностью атомов Na в элементарных ячейках реконструкции $\text{Si}(111)\sqrt{3} \times \sqrt{3}\text{-Au}$ незначительно изменяет устройство и взаимное расположение тримеров Au, но приводит к структурным изменениям на мезоскопическом уровне – увеличении доменов $\sqrt{3}$ до размеров монокристаллических террас и существенному снижению плотности дефектов.

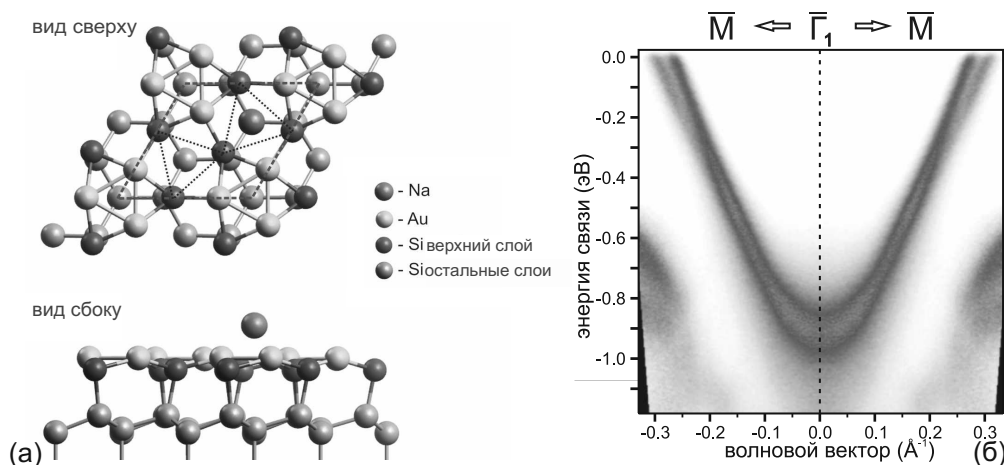


Рис. 3: Поверхностная реконструкция $\text{Si}(111)h\text{-}\sqrt{3}\times\sqrt{3}\text{-(Au,Na)}$: структурная модель – (а) и симметризованный спектр ФЭСУР, записанный вдоль направления $\overline{M}\text{-}\overline{\Gamma}_1\text{-}\overline{M}$ и показывающий расщепление по спину зоны S_1 поверхностных состояний – (б). На (а) указана доменная стенка (ДС).

Исследования остовных уровней методом РФЭС установили, что после адсорбции Na в спектрах происходит заметный сдвиг для пиков, характеризующих электронную структуру Au и Si, в сторону более высоких значений энергии. Следовательно, наиболее возможная природа наблюдаемых смещений пиков Au $4f$ и Si $2p$ связана с релаксационным сдвигом, т.е. экранированием остовной фотодырки. Известно, что в случае металла, слабосвязанные валентные электроны очень подвижны и экранируют остовную дырку очень эффективно [3], поэтому появление в системе ДЭГ усиливает релаксационный сдвиг.

Согласно исследованиям методом ФЭСУР после адсорбции Na все спектральные особенности первоначальной реконструкции (т.е. зоны поверхностных состояний S_2 , S_3 и зона лёгких дырок (ЛД) инверсионного слоя) стали более резкими и опустились вниз, в сторону более высоких значений энергии. На рис. 3, в представлена зона S_1 , записанная в точке $\overline{\Gamma}_1$, для того чтобы избежать вклада в спектр от объёмной составляющей и инверсионного слоя. На спектре ФЭСУР отчётливо заметно спиновое расщепление зоны, с величиной расщепления по волновому вектору на уровне Ферми $0,027 \text{ \AA}^{-1}$ и с величиной расщепления по энергии на уровне Ферми 110 мэВ . Средняя эффективная масса электронов в системе около уровня Ферми была определена как $(0,028 \pm 0,006) m_e$, что в 10 раз меньше, чем эффективная масса электронов до адсорбции атомов Na – $0,3 m_e$.

Модификация поверхности Au/Si(111) атомами Cs в целом аналогична процессам, происходящим в случае адсорбции Na на ту поверхность. В отличие от Na, атомы цезия прекращают хаотическое движение и останавливаются в определённых позициях только при температурах ниже 30 К.

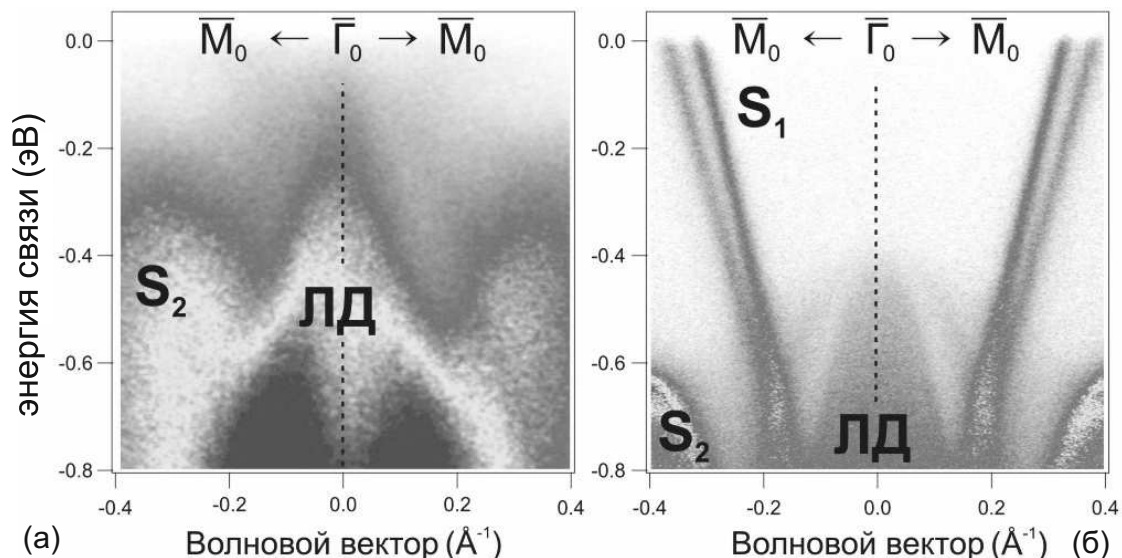


Рис. 4: Спектры ФЭСУР, снятые в направлениях $\bar{\Gamma}-\bar{M}$ и при $T = 78\text{ K}$ для $\text{Si}(111)\sqrt{3}\times\sqrt{3}\text{-Au}$ – (а) и для $\text{Si}(111)\sqrt{3}\times\sqrt{3}\text{-(Au,Tl)}$ – (б). На рисунках отмечены зоны поверхностных состояний S_1, S_2 и зона лёгких дырок (ЛД).

Поверхностная реконструкция $\text{Si}(111)h\text{-}\sqrt{3}\times\sqrt{3}\text{-(Au,Cs)}$, согласно исследованиям методом ФЭСУР, проведённым в данной работе, обладает металлическими свойствами, схожими с металлическими свойствами, которые есть у других реконструкций из семейства модифицированной адсорбатами системы $\text{Au/Si}(111)$ с одинаковой периодичностью $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$. Установлено, что реконструкция $\text{Si}(111)h\text{-}\sqrt{3}\times\sqrt{3}\text{-(Au,Cs)}$ в электронной структуре обладает спин-расщеплёнными поверхностными состояниями с величиной расщепления по волновому вектору на уровне Ферми $0,018\text{ \AA}^{-1}$ и величиной расщепления по энергии на уровне Ферми 100 мэВ .

Осаждение Tl на поверхностную реконструкцию $\text{Si}(111)\sqrt{3}\times\sqrt{3}\text{-Au}$ при КТ с последующим отжигом при 350°C ведёт к перестройке исходной поверхности и появлению новой реконструкции $\text{Si}(111)h\text{-}\sqrt{3}\times\sqrt{3}\text{-(Au,Tl)}$, сходной по структуре и составу с рассмотренными ранее реконструкциями $\text{Si}(111)h\text{-}\sqrt{3}\times\sqrt{3}\text{-(Au,Me)}$, где $\text{Me} = \text{In, Na, Cs}$.

При КТ полученная поверхность на СТМ изображениях как и в рассмотренных ранее случаях представляет собой усреднённое по времени изображение массива ярких максимумов, образующих гексагональную решётку. При низких температурах, около 110 K , виден массив адатомов Tl, замёрзших в позициях T_4 . На картине ДМЭ (не представлена), полученной при КТ, видны чёткие рефлексy, соответствующие периодичности $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$, без дополнительных особенностей (линий), присущих исходной системе $\text{Au/Si}(111)$ вследствие антифазного разупорядочения.

По-видимому, атомы таллия перемещаются под полем иглы СТМ, поэтому затруднительно определить покрытие Tl на поверхности путём

прямого подсчёта. Данный эффект указывает, предположительно, на слабую связь атомов Tl с поверхностью.

Проведённые исследования методом ФЭСУР также продемонстрировали, что после воздействия адсорбатов все спектральные особенности исходной реконструкции $\text{Si}(111)\sqrt{3}\times\sqrt{3}\text{-Au}$ (рис. 4, а) сохранились, но их форма стала более заметной – из-за устранения антифазного разупорядочения, как показано на рис. 4, б. Все зоны электронной структуры смещаются вниз, в область более высоких значений энергии связи, и отчётливо видна металлическая зона S_1 поверхностных состояний (ясно видна даже в нулевой ПЗБ), которая расщепляется на две подзоны (здесь и ниже описываются внутренние и внешние подзоны, как S_1^A и S_1^B , соответственно). Расщепление наименьшее в направлении $\bar{\Gamma}\text{-}\bar{K}$ и наибольшее в направлении $\bar{\Gamma}\text{-}\bar{M}$. Согласно полученным данным реконструкция обладает ярко выраженной металлической зоной проводимости, характеризующейся спин-расщеплёнными поверхностными состояниями с величиной расщепления по волновому вектору на уровне Ферми $0,052 \text{ \AA}^{-1}$ и величиной расщепления по энергии на уровне Ферми 190 мэВ.

Наиболее важной особенностью данной системы является расщепление зоны S_1 . Для подтверждения того, что расщепление состояния S_1 связано со снятием вырождения по спину, были проведены измерения методом фотоэлектронной спектроскопии со спиновым разрешением электронной структуры системы Au/Si(111) после адсорбции Tl. Измерения проводились с использованием детектора Мотта для двух взаимно противоположных векторов поляризации электронов. На рисунке 5, а показано полученное распределение интенсивности по энергии в виде двух кривых для подзон S_1^A и S_1^B . Эти результаты наглядно показывают, что состояние S_1 является расщеплённым по спину и ориентации по спину противоположны в подзонах S_1^A и S_1^B .

На рисунке 5, б показаны обобщённые результаты для различных адсорбатов. Все спектры идентичны по качественным признакам, но величина спинового расщепления для каждого из них различна. Величина расщепления по волновому вектору на уровне Ферми $\Delta k_{//}$ меняется от $\sim 0,018 \text{ \AA}^{-1}$ для Cs до $\sim 0,052 \text{ \AA}^{-1}$ для Tl. Следовательно, величина расщепления по энергии на уровне Ферми ΔE_F находится в диапазоне 100÷190 мэВ, соответственно. Из графика, показанного на рис. 5, в, заметно, что величина расщепления зависит существенным образом от положения уровня Ферми, т.е. от заполнения электронами зоны S_1 поверхностных состояний.

На рис. 5, г представлена зонная структура системы Au/Si(111), численно рассчитанная из первых принципов методом функционала плотности для модели СНСТ. На рассчитанный спектр наложены эксперимен-

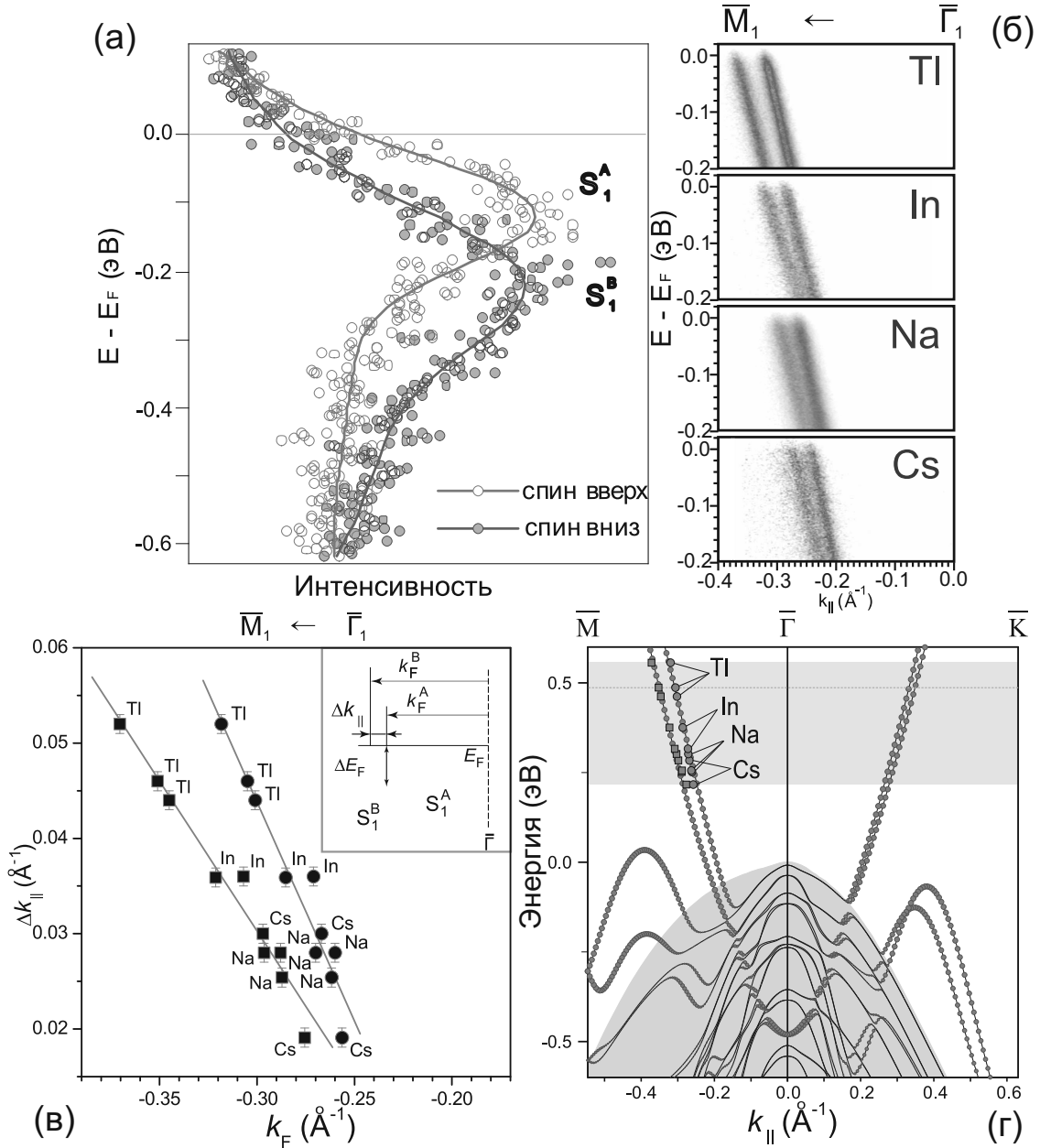


Рис. 5: (а) – Спектр фотоэлектронной спектроскопии со спиновым разрешением для модифицированной Тl поверхностной реконструкции $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -Au. Серыми и белыми кружками указаны состояния с противоположной поляризацией. (б) – Фрагменты спектра ФЭСУР, снятые в направлении $\bar{\Gamma}-\bar{M}$ около уровня Ферми для поверхностной реконструкции $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -Au, модифицированной Тl, In, Na и Cs. (в) – Величина расщепления по волновому вектору на уровне Ферми $\Delta k_{||}$ представлена как функция от k_F для подзон S_1^A и S_1^B для различных адсорбатов. (г) – Теоретически рассчитанная зонная структура вдоль направления $\bar{M}-\bar{\Gamma}-\bar{K}$, на которую наложены экспериментально полученные значения при расчёте величины расщепления по волновому вектору на уровне Ферми $\Delta k_{||}$. Уровни поверхностных состояний показаны кружками, затенённая тёмно-серым область на рисунке показывает проекцию объёмных состояний. Диапазон смещения положения уровня Ферми указан светло-серым цветом.

тальные значения k_F для различных адсорбатов с несколькими величинами покрытий для каждого адсорбата. Как видно из рисунка, экспериментальные данные хорошо согласуются с теоретическим спектром, при этом становится ясно, чем обусловлена величина расщепления $\Delta k_{||}$ для

разных рассмотренных случаев. Адатомы донируют электроны в зону S_1 поверхностных состояний; так как разные элементы донируют различное количество электронов, и система Au/Si(111) может принять неодинаковое количество адатомов, заполнение зоны (т.е. положение уровня Ферми) различно. Наклон подзон S_1^A и S_1^B неодинаков, поэтому при разных значениях E_F наблюдается разное расщепление зоны S_1 : максимальное для Tl и минимальное для Cs. В данных экспериментах положение уровня Ферми варьировалось в диапазоне ~ 350 мэВ (область смещения указана светло-серым цветом).

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

1. В результате адсорбции 0,8-1,3 МС Ag на поверхность, занятую смесью поверхностных реконструкций $\text{Si}(111)\alpha\text{-}\sqrt{3}\times\sqrt{3}\text{-Bi}$ и $\text{Si}(111)\beta\text{-}\sqrt{3}\times\sqrt{3}\text{-Bi}$, с последующим отжигом при 350°C сформировались несколько новых поверхностных реконструкций системы (Bi,Ag)/Si(111): хорошоупорядоченные $\text{Si}(111)4\times4\text{-(Bi,Ag)}$ и $\text{Si}(111)2\sqrt{3}\times2\sqrt{3}\text{-(Bi,Ag)}$, плохоупорядоченная $\text{Si}(111)\sqrt{19}\times\sqrt{19}\text{-(Bi,Ag)}$ и квазипериодическая $\text{Si}(111)3\sqrt{3}\times3\sqrt{3}\text{-(Bi,Ag)}$. Из них реконструкция $\text{Si}(111)4\times4\text{-(Bi,Ag)}$ имеет ряд особенностей, аналогичных особенностям поверхностного сплава BiAg_2 и может быть кандидатом для создания двумерных металлических структур на поверхности, обладающих спин-орбитальным расщеплением.
2. В результате адсорбции атомов элементов I группы Na и Cs и элемента III группы Tl удалось сформировать реконструкции семейства поверхностных реконструкций типа $\text{Si}(111)h\text{-}\sqrt{3}\times\sqrt{3}\text{-(Au,Me)}$. Все полученные поверхностные реконструкции стабильны при комнатной температуре и обладают свойствами ДЭГ.
3. В электронной структуре всех полученных реконструкций семейства типа $\text{Si}(111)h\text{-}\sqrt{3}\times\sqrt{3}\text{-(Au,Me)}$ присутствует расщепление металлической зоны S_1 поверхностных состояний. Все полученные поверхностные реконструкции схожи по своим свойствам и различаются степенью разупорядоченности при низких температурах (для элементов III группы существуют периодические решётки), и воздействием адсорбатов на положение уровня Ферми.

Основные результаты диссертации представлены в следующих печатных работах (жирным шрифтом выделены издания, входящие в Перечень ВАК РФ)

1. Bondarenko, L. V. Large spin splitting of metallic surface-state bands at adsorbate-modified gold/silicon surfaces / L. V. Bondarenko, D. V. Gruznev, A. A. Yakovlev, A. Y. Tupchaya, D. Usachov, O. Vilkov, A. Fedorov, D. V. Vyalikh, S. V. Ereemeev, E. V. Chulkov, A. V. Zotov, A. A. Saranin // **Scientific Reports**. – 2013. – Vol. 3. – P. 1826–1832.
2. Bondarenko, L. V. Effect of Na adsorption on the structural and electronic properties of Si(111) $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ -Au surface / L. V. Bondarenko, A. V. Matetskiy, A. A. Yakovlev, A. Y. Tupchaya, D. V. Gruznev, M. V. Ryzhkova, D. A. Tsukanov, E. A. Borisenko, E. N. Chukurov, N. V. Denisov, O. Vilkov, D. V. Vyalikh, A. V. Zotov, A. A. Saranin // **Journal of Physics: Condensed Matter**. – 2014. – Vol. 26. – P. 055009–055016.
3. Denisov, N. V. Two-dimensional bismuth-silver structures on Si(111) / N. V. Denisov, E. N. Chukurov, Yu. V. Luniakov, O. A. Utas, S. G. Azatyan, A. A. Yakovlev, A. V. Zotov, A. A. Saranin // **Surface Science**. – 2014. – Vol. 623. – P. 17–24.
4. Yakovlev, A. A. Formation of Ag-Bi structures on the Si(111) $\alpha\text{-}\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ -Bi surface / A. A. Yakovlev, N. V. Denisov, O. A. Utas, S. G. Azatyan, A. V. Zotov, A. A. Saranin // Abstracts of the 10th Japan-Russia Seminar on Semiconductor Surfaces, (JRSSS-10). – University of Tokyo, Japan. – September 26-28, 2012 / Tokyo: The Surface Science Society of Japan, 2012. – P. P22.
5. Bondarenko, L. V. Adsorbate-modified gold/silicon surfaces with a large spin splitting of metallic surface-state bands / L. V. Bondarenko, D. V. Gruznev, A. A. Yakovlev, A. Yu. Tupchaya, D. Usachov, O. Vilkov, A. Fedorov, D. V. Vyalikh, S. V. Ereemeev, E. V. Chulkov, A. V. Zotov, A. A. Saranin // Proceedings of 21st International Symposium “Nanostructures: Physics and Technology”. – Saint Petersburg, Russia. – June 24-28, 2013 / Saint Peterburg: St. Petersburg Academic University, 2013. – P. 46-47.
6. Bondarenko, L. V. Domain wall removal at Si(111) $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ -Au surface by Tl, Na, Cs adsorption / L. V. Bondarenko, A. V. Matetskiy, A. Yu. Tupchaya, A. A. Yakovlev, D. V. Gruznev, A. V. Zotov, A. A. Saranin // Abstracts of the 14th International Conference on the Formation of Semiconductor Interfaces (ICFSI-14). – Gyeongju, Korea. – 30th June–5th July, 2013 / Gyeongju: The Korean Vacuum Society, 2013. – P. 94.
7. Saranin, A. A. Spin splitting of surface-state bands of Au/Si(111) surface / A. A. Saranin, L. V. Bondarenko, D. V. Gruznev, A. A.

- Yakovlev, A. Y. Tupchaya, D. Usachov, O. Vilkov, A. Fedorov, D. V. Vyalikh, S. V. Ereemeev, E. V. Chulkov, A. V. Zotov // Abstracts of the 14th International Conference on the Formation of Semiconductor Interfaces (ICFSI-14). – Gyeongju, Korea. – 30th June-5th July, 2013 / Gyeongju: The Korean Vacuum Society, 2013. – P. 101.
8. Bondarenko, L. V. Spin-orbit splitting on Tl-modified $\text{Si}(111)\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ -Au surface / L. V. Bondarenko, D. V. Gruznev, A. Yu. Tupchaya, A. A. Yakovlev, D. Usachev, O. Vilkov, A. Fedorov, D. V. Vyalikh, A. V. Zotov, A. A. Saranin // Asian School-Conference on Physics and Technology of Nanostructured Materials. – Vladivostok, Russia. – August 21-27, 2013. – P. 88.
 9. Yakovlev, A. A. STM study of alkali metals on $\text{Si}(111)\alpha\text{-}\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ -Au surface / A. A. Yakovlev, L. V. Bondarenko, A. V. Matetskiy, A. Yu. Tupchaya, D. V. Gruznev, A. V. Zotov, A. A. Saranin // Proceedings of Second Asian School-Conference on Physics and Technology of Nanostructured Materials (ASCO-NANOMAT 2013). – Vladivostok, Russia, August 20-27, 2013 / Vladivostok: Dalnauka, 2013. – P. 71-72.
 10. Bondarenko, L. V. Large spin splitting of surface-state bands of Au/Si(111) surface / L. V. Bondarenko, D. V. Gruznev, A. A. Yakovlev, A. Yu. Tupchaya, D. Usachov, O. Vilkov, A. Fedorov, D. V. Vyalikh, S. V. Ereemeev, E. V. Chulkov, A. V. Zotov, A. A. Saranin // Abstracts of V Euro-Asian Symposium “Trends in MAGnetism”: Nanomagnetism (EASTMAG-2013). – Russky Island, Vladivostok, Russia. – September 15-21, 2013 / Vladivostok: FEFU, 2013. – P. 150.
 11. Bondarenko, L. V. Large spin splitting of surface-state bands of Au/Si(111) surface / L. V. Bondarenko, D. V. Gruznev, A. A. Yakovlev, A. Yu. Tupchaya, O. Vilkov, D. V. Vyalikh, S. V. Ereemeev, E. V. Chulkov, A. V. Zotov, A. A. Saranin // 12th International Conference on Atomically Controlled Surfaces, Interfaces and Nanostructures in conjunction with 21st International Colloquium on Scanning Probe Microscopy (ACSIN-12&ICSPM21). – Tsukuba, Japan. – November 4-8, 2013 / Tokyo: The Japan Society of Applied Physics, 2013. – P. 5.
 12. Gruznev, D.V. Formation and electronic structure of Au/Si(111) surface with spin-split surface states / D. V. Gruznev, L. V. Bondarenko, A. A. Yakovlev, A. Y. Tupchaya, D. Usachov, O. Vilkov, A. Fedorov, D. V. Vyalikh, S. V. Ereemeyev, E. V. Chulkov, A. V. Zotov, A. A. Saranin // Semiconductor: Problems of preparation and characterization of functional materials. – Tohoku University, Sendai, Japan. – November 7, 2013 / Moscow: International Science and Technology Center (ISTC), 2013. – P. 7.

Список литературы

- [1] Рашба, Э. И. Свойства полупроводников с петлей экстремумов. I. Циклотронный и комбинированный резонанс в магнитном поле, перпендикулярном плоскости петли. / Э. И. Рашба // Физика тверд. тела. – 1960. – V. 2 (6). – P. 1224–1238.
- [2] Azatyan, S. G Variable termination of $\text{MnSi/Si}(111)\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ films and its effect on surface properties. / S. G. Azatyan, O. A. Utas, N. V. Denisov, A. V. Zotov, A. A. Saranin // Surf. Sci. – 2011. – V. 605. – P. 289–295.
- [3] Вудраф, Д. Современные методы исследования поверхности. / Д. Вудраф, Т. Делчар. – Москва: Мир, 1989.– 564 с.

Яковлев Алексей Андреевич

**Структура и свойства поверхностных реконструкций
 $\text{Si}(111)\sqrt{3}\times\sqrt{3}\text{-Bi}$ и $\text{Si}(111)\sqrt{3}\times\sqrt{3}\text{-Au}$, модифицированных атомами
металлов**

Автореферат

Подписано к печати 06.10.2016 г. Усл.п.л. 1,0 Уч.-изд.л. 0,8
Формат 60×84/16. Тираж 100 экз. Заказ №

Издано ИАПУ ДВО РАН. 690041, г. Владивосток, ул. Радио, 5
Отпечатано участком оперативной печати ИАПУ ДВО РАН.
690041, г. Владивосток, ул. Радио, 5