

## Комментарий к статье “Различные СТМ-изображения сверхструктуры чистой грани Si(133)-6 × 2” (Письма в ЖЭТФ 105(8), 469 (2017))

Р. Жачук<sup>+\*1),2)</sup>, Ж. Кутиньо<sup>+2)</sup>

<sup>+</sup>*Department of Physics & I3N, University of Aveiro, Campus Santiago, 3810-193 Aveiro, Portugal*

<sup>\*</sup>*Институт физики полупроводников, 630090 Новосибирск, Россия*

Поступила в редакцию 10 июля 2017 г.

DOI: 10.7868/S0370274X1717012X

В недавно опубликованной статье С.А. Тийса [1] предложена атомная модель реконструированной поверхности Si(331) (далее Т-модель), основанная на изображениях сканирующей туннельной микроскопии (СТМ) высокого разрешения. Хотя автор описал преимущества своей модели перед другими, он не упомянул о наиболее актуальной модели этой поверхности, названной 8Р, про которую было опубликовано несколько недель ранее Р. Жачуком и С. Тийсом, подвергая, таким образом, сомнению результаты своей прошлой работы [2]. Следовательно, работа [1] не полностью отражает современное состояние исследований поверхности Si(331) и, более того, вводит читателей журнала Письма в ЖЭТФ в заблуждение. Модель 8Р, предложенная в работе [2], также основана на СТМ-изображениях, но в отличие от Т-модели она дополнительно находится в согласии с результатами расчетов, основанных на первых принципах. Авторы работы [2] утверждают, что модель 8Р хорошо воспроизводит экспериментальные СТМ-изображения и приводит к очень низкой энергии поверхности Si(331).

Так как Т-модель основана исключительно на СТМ данных, то упомянутую выше неоднозначность можно разрешить, если сравнить 8Р и Т-модели на одинаковой основе. Следовательно, нужно рассчитать из первых принципов энергию и СТМ-изображение поверхности Si(331) в Т-модели. Используя тот же метод расчета, что и в работе [2], было найдено, что Т-модель нестабильна. После оптимизации положений атомов связь Si–Si в тримерах рвется, приводя к значительному смещению атомов на поверхности. Поэтому расчетное СТМ-изображение в режиме постоянного тока получается несовместимым с экспериментальными изображениями, приведенными на рис. 3а и б в работе [1]. Энер-

гия поверхности Si(331) после оптимизации положений атомов в Т-модели оказалась на  $8 \text{ мэВ}/\text{Å}^2$  больше, чем в модели 8Р и намного больше типичной погрешности расчетов (менее  $1 \text{ мэВ}/\text{Å}^2$ ), что позволяет с уверенностью судить об относительной стабильности поверхности в моделях Т и 8Р. Сравнивая эти значения с верхним пределом для энергии поверхности Si(331) [2], можно прийти к выводу, что в соответствии с Т-моделью поверхность Si(331) должна быть не стабильной и фасетироваться с образованием поверхностей Si(111) и Si(110), что явно противоречит экспериментальным наблюдениям.

В работе [1] было сделано критическое замечание в адрес модели, предшествовавшей 8Р [3], а именно указано, что пентамеры на экспериментальных СТМ-изображениях в 1.5–1.8 раз больше, чем 5-ти звенные кольца атомов Si в атомной модели пентамера [3]. Так как данный элемент конструкции встречается также и в модели 8Р, то мы должны обсудить это замечание. Нужно заметить, что метод СТМ чувствителен к локальной плотности электронных состояний (ЛПЭС) поверхности, а не к положениям ядер атомов [4]. Также очевидно, что атомные орбитали, в особенности у полупроводников IV группы, могут быть поляризованы и максимумы их амплитуды не обязательно центрированы на атомных ядрах. На рис. 1а показано экспериментальное СТМ-изображение Si-пентамера и его атомная модель. Пунктирными линиями (А–А' и В–В') указаны вертикальные плоскости, на которых была рассчитана ЛПЭС, результат этих расчетов представлен на рис. 1б и с соответственно. Наиболее яркие пятна на рис. 1б, с указывают на высокое значение незаполненной ЛПЭС, связанной с радикалами Si на вершинах пентамера. Очевидно, что эти электронные состояния направлены не строго вверх, а под некоторым углом к нормали поверхности и вне пентамера. Так как при работе СТМ острие находится на высоте от 4 до  $10 \text{ Å}$  над поверхностью [4], то наклон-

<sup>1)</sup> e-mail: zhachuk@gmail.com

<sup>2)</sup> R. Zhachuk, J. Coutinho

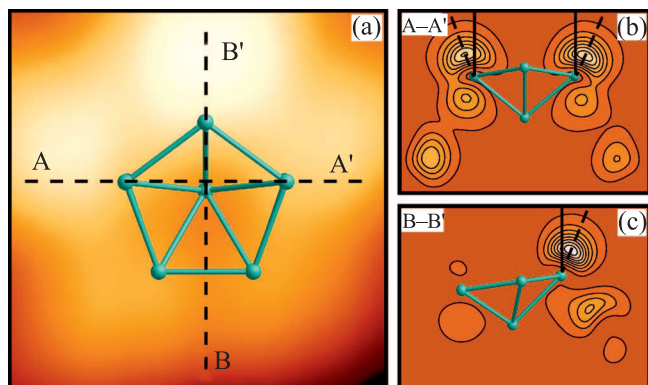


Рис. 1. (Цветной онлайн) (а) – Экспериментальное СТМ-изображение пентамера на поверхности  $\text{Si}(331)$  и его атомная модель. (b), (c) – Расчетные контуры поверхностей постоянной ЛПЭС на секущих плоскостях  $A-A'$  и  $B-B'$ . Напряжение составляет  $+0.8\text{ В}$  как для экспериментальных, так и для расчетных изображений

ные орбитали проецируют увеличенное изображение пентамера. Измеряя угол на рис. 1 и принимая во внимание высоту, на которой находится острие, мы оценили линейное увеличение размера пентамера на СТМ-изображениях – в 1.5–2.0 раза. Описанный эффект устраняет кажущееся противоречие между линейными размерами пентамеров на экспериментальных СТМ-изображениях и в атомной модели.

Таким образом, в представленном комментарии к работе [1] нами приведено отсутствующее и критически важное сравнение стабильности и электронной структуры Т- и 8Р-моделей поверхности  $\text{Si}(331)$ . На основе расчетов из первых принципов мы показали несостоятельность как Т-модели, так и аргумента, высказанного против формирования пентамера. Напротив, было показано, что модель 8Р, опубликованная в работе [2], обеспечивает очень низкую энергию поверхности  $\text{Si}(331)$  (намного ниже предельной энергии этой поверхности, при которой должно наблюдаться ее фасетирование) и прекрасно воспроизводит ее СТМ-изображения.

Работа выполнена при финансовой поддержке Фонда Науки и Технологии Португалии (Fundação para a Ciência e a Tecnologia, FCT), контракт UID/CTM/50025/2013 и фонда FEDER в рамках программы COMPETE 2020.

1. С. А. Тийс, Письма в ЖЭТФ **105**, 469 (2017).
2. R. Zhachuk and S. Teys, Phys. Rev. B **95**, 041412 (2017).
3. C. Battaglia, K. Gaál-Nagy, C. Monney, C. Didiot, E. F. Schwier, M. G. Garnier, G. Onida, and P. Aebi, Phys. Rev. Lett. **102**, 066102 (2009).
4. W. A. Hofer, Prog. Surf. Sci. **71**, 147 (2003).