

Квантовые эффекты при формировании двойниковой границы в Pb

© С.И. Божко,¹ А.С. Ксенз,¹ Д.А. Фокин,² А.М. Ионов¹

¹ Институт физики твердого тела им. Ю.А. Осипьяна РАН,
142432 Черноголовка, Москва, Россия

² Московский государственный технический университет им. Н.Э. Баумана,
1005005 Москва, Россия
e-mail: bozhko@issp.ac.ru

Поступило в Редакцию 31 марта 2023 г.

В окончательной редакции 31 марта 2023 г.

Принято к публикации 31 марта 2023 г.

Расслоение наностроек Pb на вицинальной поверхности Si(7710) на слои толщиной 2 nm, обусловленное квантованием электронного спектра, подразумевает образование двумерных дефектов, разделяющих слои Pb. С помощью модельных расчетов в приближении теории функционала плотности показано, что минимальной энергией образования обладает двойниковая граница, энергия которой равна 15 meV/at. Установлено, что двойниковая граница формируется на стадии роста очередного слоя после образования слоя толщиной 2 nm, в котором образуется стоячая волна фермиевских электронов. На поверхности слоя меньшей толщины, где стоячей электронной волны нет, реализуется рост совершенной кристаллической структуры. Образование двойниковой границы между слоями Pb толщиной 2 nm начинается с формирования разреженного атомного монослоя пар атомов.

Ключевые слова: тонкие пленки, электронный рост, дефекты ГЦК кристаллов.

DOI: 10.21883/JTF.2023.07.55747.65-23

Введение

Исследования роста тонких пленок Pb на вицинальной поверхности Si(7710) показали, что рост пленки происходит по механизму Странски–Крастанова с формированием смачивающего слоя, на котором растут наностройки Pb [1–3]. Обнаружено, что наностройки имеют слоистую структуру, причем толщина слоев составляет 2 nm, что соответствует 8 моноатомным слоям (МС) Pb [4]. Такое расслоение связывают с механизмом электронного роста (ЭР) [5–7]. В рамках ЭР энергия системы электронов в слое Pb толщиной 2 nm ниже энергии электронов слоя такой же толщины в объеме. Это связано с квантованием электронного спектра и образованием стоячих электронных волн фермиевских электронов в направлении к нормали поверхности слоя. Для реализации условий квантования электронного спектра в квазиклассическом приближении границы между слоями должны обеспечивать циклическое движение электронов при отражении от них. С другой стороны, выигрыш в энергии от разбиения островка на слои должен превышать энергию, затрачиваемую на образование границы. Кандидатами на роль межслоевой границы могут выступать как двойниковые границы, так и дефекты упаковки, поскольку в ГЦК металлах именно эти дефекты обладают минимальной энергией образования [8]. В настоящей работе представлены результаты расчетов энергии двойниковой границы и дефекта упаковки в Pb в приближении теории функционала плотности (ТФП). Предложен механизм роста очередного атомного слоя при образовании двойниковой

границы в качестве двумерного дефекта между слоями двухнанометровой толщины.

1. Результаты и обсуждение

Формирование межслоевых границ в наностройках Pb на поверхности Si(7710) может быть связано со структурой границы „поверхность Si(7710) — наностройки Pb“. Однако в [4] показано, что слои толщиной 2 nm формируются в режиме гомоэпитаксии без контакта с поверхностью кремния. Поэтому ТФП расчеты проводились для свободной висящего слоя Pb. Расчеты были выполнены с использованием программы Vienna Ab initio Simulation Package (VASP), которая реализует проектируемый расширенный базисный набор (PAW) [9] и периодические граничные условия. В расчетах использовали энергию отсечки 400 eV, k -сетку $17 \times 17 \times 17$ и функционал PBEsol. При проведении модельных расчетов изначально проводилась релаксация структуры.

Расчеты показали, что осциллирующая зависимость энергии нанослоя Pb от его толщины, обусловленная квантованием электронного спектра, реализуется при малых толщинах, меньше 15 МС. Для расчета энергии образования двумерного дефекта необходимо использовать модель островка толщиной по 15 МС сверху и снизу от дефекта, а также учитывать толщину 1 МС самого дефекта. Таким образом, размер минимальной расчетной ячейки должен быть не менее 31 МС. Для расчета энергии образования двумерного дефекта, двойниковой границы (рис. 1, а) и дефекта упаковки была выбрана расчетная ячейка толщиной 41 МС. Энергия двумерного

дефекта определялась как разность энергий слоя, содержащего двумерный дефект, и слоя с совершенной кристаллической структурой. Расчетные значения энергии образования двойниковой границы и дефекта упаковки составили соответственно 15 и 32 мэВ. Дальнейшие расчеты проводились для дефекта, обладающего меньшей энергией образования — для двойниковой границы.

На рис. 1, *b* представлены результаты расчета энергии слоя Pb, содержащего двойниковую границу, от его толщины. Подобные расчеты для нерелаксированных структур ранее были представлены в [10]. Значение отклонения E от энергии образования двойниковой границы незначительно, выигрыш в энергии слоя, обусловленный квантованием электронного спектра, при всех толщинах слоя существенно меньше энергии образования двойниковой границы. Следовательно, формирование двойниковой границы происходит на стадии роста очередного атомного слоя после завершения роста слоя толщиной 2 нм.

Кристаллическая структура двойниковой границы в модели плотно упакованных слоев твердых шаров может быть представлена как расположение атомов верхнего атомного слоя в положениях атомов гексагональной плотно упакованной структуры (*hcp*-слой). Поэтому для расчета энергии структур, образующихся на начальной стадии формирования двойниковой границы, использовалась расчетная ячейка размером 5×5 и толщиной 8 МС (в слое образуется стоячая волна фермиевских электронов) и 6 МС (стоячей электронной волны нет). На поверхности таких структур располагался один адсорбированный атом или кластер атомов как в положениях *hcp*-слоя, так и в положениях кубической гранецентрированной структуры — *fcc*-слоя.

На рис. 2 представлена зависимость разности энергий кристаллических структур с одиночным атомом в позиции *hcp* и с атомом в позиции *fcc* на поверхности слоя от его толщины. Видно, что для одного атома, распо-

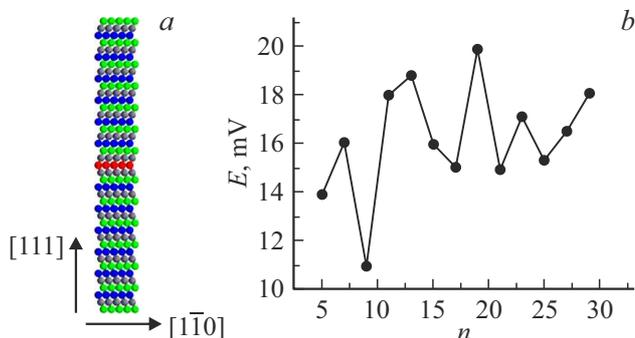


Рис. 1. Модель структуры Sb41, использовавшаяся для расчетов энергии образования двойниковой границы. Двойниковая граница выделена красным цветом (в онлайн версии) (*a*). Энергии слоя Pb, содержащего двойниковую границу, от его толщины n (*b*). Здесь n — число атомных плоскостей (111) в расчетной ячейке, E — разность энергий слоя, содержащего двумерный дефект, и слоя с совершенной кристаллической структурой.

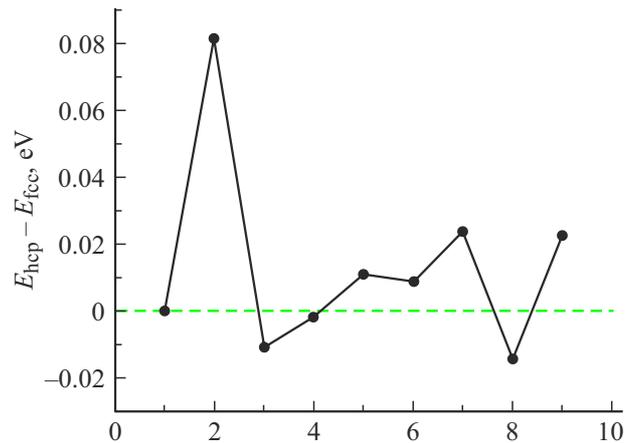


Рис. 2. Разность энергий кристаллических структур с одиночным атомом в позиции *hcp* и с атомом в позиции *fcc* на поверхности слоя от его толщины.

Разность энергий кластера, состоящего из атомов, расположенных в *hcp*-положении, и кластера, состоящего из атомов, расположенных в *fcc*-положении, от количества в нем атомов

Число атомов в кластере	Разность энергий, eV	
	8 слоев	6 слоев
1	-0.0143	0.00898
2	0.05862	0.07496
3	0.19963	0.19863
4	0.18969	0.16651

лагающегося в *hcp*-положении, энергетически выгодны структуры толщиной 3, 4 и 8 МС.

Модельные расчеты энергии кластеров из 2-х, 3-х, и 4-х атомов были проведены на структурах толщиной 6 и 8 МС. В кластерах атомы располагались в пределах первой координационной окружности. Результаты расчетов приведены в таблице. *fcc*-положения атомов кластеров энергетически выгодно как на шести-, так и на восьмислойных структурах. Моделирование было проведено как для кластеров, у которых все атомы расположены в ГЦК позиции, так и в случае расположения атомов в ГПУ позиции, смешанные позиции не рассматривались.

Приведенные данные свидетельствуют, что, по-видимому, рост очередного монослоя атомов начинается с образования разреженной структуры на поверхности завершеного слоя. Поэтому были проведены расчеты энергии структуры для пары атомов адсорбированной на поверхности слоя Pb в зависимости от расстояния между ними. Адсорбция пары атомов в положениях *hcp* энергетически невыгодна при любых расстояниях между атомами на слое толщиной 6 МС. Для 2-х атомов, находящихся на расстояниях первой ($R_1 = 3.5 \text{ \AA}$), второй ($R_2 = 6.06 \text{ \AA}$), третьей ($R_3 = 7.0 \text{ \AA}$) и четвертой ($R_4 = 9.26 \text{ \AA}$) координационных окружно-

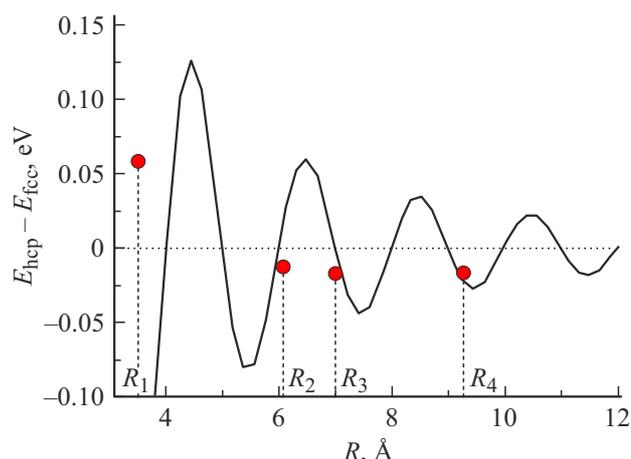


Рис. 3. Разность энергий кристаллических структур с парой атомов в позиции hcp и с парой атомов в позиции fcc на поверхности слоя толщиной 8 МС (показана красными кружками (в онлайн версии)). Кривая на рисунке демонстрирует зависимость энергии взаимодействия между атомами, обусловленной фриделевскими осцилляциями с фермиевским волновым вектором для Pb в модели свободных электронов $k_F = 1.575 \text{ \AA}^{-1}$.

стей, $E_{hcp} - E_{fcc}$ соответственно равно 75, 11, 23 и 24 meV.

При толщине слоя 8 МС паре атомов энергетически выгодно находиться в положениях hcp при больших расстояниях между ними. Если же атомы расположены в пределах первой координационной окружности (расстояние между атомами R_1), то разность энергий положительна. Энергия взаимодействия пары атомов на больших расстояниях определяется фриделевскими осцилляциями [11] и может быть представлена в виде

$$E(R) \sim R^{-2} \sin(2k_F R).$$

Расчетные значения энергии взаимодействия хорошо согласуются этой зависимостью, представленной черной кривой на рис. 3.

Таким образом, образование двойниковой границы между слоями 2 nm толщины Pb начинается с формирования разреженного атомного монослоя пар атомов на поверхности слоя толщиной 2 nm.

Использование современных нанотехнологий привело к разработке принципиально новой элементной базы микроэлектроники. Базовые элементы с характерными размерами 3 nm уже производятся в промышленных масштабах, например Gate-All-Around транзисторная архитектура производства Samsung Electronics. В устройствах такого размера квантовые эффекты играют решающую роль. Реализация подобных квантовых эффектов в металлах может существенно влиять на транспортные свойства совершенных монокристаллов и наноструктур. Двойниковые границы оказывают существенное влияние на сверхпроводящие свойства материалов [12,13], что является важным фактором, который следует учитывать

при разработке технологии элементной базы квантовых компьютеров.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] H.H. Weitering, D.R. Heslinga, T. Himba. Phys. Rev. B, **45**, 5991 (1992). DOI: 10.1103/PhysRevB.45.5991
- [2] K. Budde, E. Abram, V. Yeh, M.C. Tringides. Phys. Rev. B, **61**, R10602 (2000). DOI: 10.1103/PhysRevB.61.R10602
- [3] I.B. Altfeder, K.A. Matveev, D.M. Chen. Phys. Rev. Lett., **78**, 2815 (1997). DOI: 10.1103/PhysRevLett.78.2815
- [4] D.A. Fokin, S.I. Bozhko, V. Dubost, F. Debontridder, A.M. Ionov, T. Cren, D. Roditchev. Phys. Status Solidi C, **7**, 165 (2010). DOI: 10.1002/pssc.200982480
- [5] Zh. Zhang, Q. Niu, Ch.-K. Shih. Phys. Rev. Lett., **80**, 5381 (1998). DOI: 10.1103/PhysRevLett.80.5381
- [6] W.B. Su, S.H. Chang, W.B. Jian, C.S. Chang, L.J. Chen, T.T. Tsong. Phys. Rev. Lett., **86**, 5116 (2001). DOI: 10.1103/PhysRevLett.86.5116
- [7] Р. Хоникомб. *Пластическая деформация металлов* (Мир, М., 1972), с. 408.
- [8] V. Fock. Zeitschrift für Physik, **61**, 126 (1930). DOI: 10.1007/BF01340294
- [9] S.I. Bozhko, A.S. Ksenz, A.M. Ionov, D.A. Fokin, V. Dubost, F. Debontridder, T. Cren, D. Roditchev. Phys. Procedia, **71**, 332 (2015). DOI: 10.1016/j.phpro.2015.08.345
- [10] О.М. Браун, В.К. Медведев. УФН, **157**, 631 (1989). DOI: 10.3367/UFNr.0157.198904c.0631
- [11] C.-L. Song, Y.-L. Wang, Y.-P. Jiang, L. Wang, K. He, X. Chen, J.E. Hoffman, X.-C. Ma, Q.-K. Xue. Phys. Rev. Lett., **109**, 137004 (2012). DOI: 10.1103/PhysRevLett.109.137004
- [12] И.Н. Хлюстикова, С.И. Москвин. ЖЭТФ, **89**, 1846 (1985).