08,10

Формирование атомной и электронной структуры двумерных слоев Si на $CrSi_2(0001)$

© Н.И. Плюснин [1], В.Г. Заводинский [2], О.А. Горкуша [2]

[1] Институт нанотехнологии микроэлектроники РАН,
Москва, Россия
[2] Хабаровское отделение Института прикладной математики ДВО РАН,
Хабаровск, Россия

E-mail: plusnin.n@inme-ras.ru

Поступила в Редакцию 15 апреля 2025 г.
В окончательной редакции 26 мая 2025 г.
Принята к публикации 27 мая 2025 г.

Проведено квантово-механическое моделирование начальной стадии роста Si на $CrSi_2(0001)$. Рост осуществляли, путем порционного нанесения на замороженную при 0 K поверхность $CrSi_2(0001)$, неплотного (порциями по 0.3 ML) или плотного (порциями по 1 ML) атомного конденсата Si с последующей его релаксацией под действием квантово-механических сил. Показано, что в первом случае формируются поверхностные фазы Si, состоящие из массива 2D и, затем, 3D кластеров Si с тетраэдрической sp^3 связью. А во втором случае, происходит формирование твердофазного смачивающего слоя (ТСС) Si: сначала в виде псевдоморфного, а, затем, менее стабильного — полиморфного (по упаковке) слоя. Псевдоморфный твердофазный смачивающий слой, при этом, повторяет трехслойную упаковку (ABC) атомов в подложке $CrSi_2(0001)$, а полиморфный твердофазный смачивающий слой, — кроме упаковки ABC, приобретает, дополнительно, двухслойную упаковку атомов AB. Обнаружено, что, по крайней мере, при 1−3 ML Si в твердофазном смачивающем слое Si на $CrSi_2(0001)$ формируется спектр плотности электронных состояний, характерный для металла.

Ключевые слова: двумерные фазы, твердофазные смачивающие слои, упаковка атомов, фазовый переход, квантово-механическое моделирование, Si, $CrSi_2(0001)$.

DOI: 10.61011/FTT.2025.05.60755.70-25

1. Введение

На начальной стадии роста, координация атомов в неизоструктурной подложке $CrSi_2$ (параметр гексагональной решетки $CrSi_2$ около: $a = 4.428$ Å и $c = 6.369$ Å) может влиять на координацию атомов в пленке Si (параметр кубической решетки около: $a = 5.431$ Å). Изучение этого явления представляет интерес с точки зрения развития теории и технологии роста тонких пленок.

В эксперименте двумерные слои Si на $CrSi_2(0001)$, при твердофазном росте, образуют аморфные или кристаллические твердофазные смачивающие слои (ТСС) Si, которые адаптированы по плотности и структуре к подложке, имеют атомную плотность большую, чем у объемного кремния и находятся в метастабильном — напряженном состоянии под действием давления, создаваемого подложкой [1–3]. В этих ТСС Si, как и в фазах высокого давления кремния (например, Si−II с решеткой Sn [4]), можно ожидать металлическую проводимость. А так как кремний имеет сравнительно большую величину спиновой когерентности [5], то эти ТСС Si могут быть потенциальными кандидатами в качестве новых наноматериалов для спинтроники.

Кроме того, монокристалл $CrSi_2$ находит применение в микроэлектронных, оптоэлектронных, фотогальванических и термоэлектрических устройствах, и преобразователях, так как он является узкозонным полупроводником, совместимым с технологией кремниевой микроэлектроники и обладающий высокой термостабильностью, термоэлектрической мощностью, электропроводностью и химической устойчивостью (см. например, [6] — обзор во введении). Можно ожидать, что и 2D Si на пленке $CrSi_2$, выращенной на подложке Si, может найти применение в соответствующих приборах.

Работ по эпитаксии $CrSi_2$ на подложке кремния достаточно много (см., например [7–11]. Но работ по росту Si на монокристалле $CrSi_2$ или эпитаксиальных пленках $CrSi_2$, за исключением работ [1,3], нами не найдено. Что же касается работ по моделированию роста ТСС Si на $CrSi_2$, то в литературе их не было обнаружено совсем.

Вместе с тем, в предыдущих статьях, квантово-механическое моделирование показало, что ближняя координация атомов в ТСС металлов на кремнии изменяется с их толщиной и, что это явление вызывает фазовые переходы в ТСС и перестройку приграничного слоя подложки [12,13]. Очевидно, что в случае Si на $CrSi_2(0001)$ также следует ожидать изменения, вызванные ближним порядком, потому что, как и в случае металлов на кремнии, объемная фаза Si — неизоструктурная по отношению к подложке $CrSi_2(0001)$.

В настоящей статье, проведено квантово-механическое моделирование, которое позволило исследовать изменение структуры поверхностных фаз и ТСС Si на $CrSi_2(0001)$ в зависимости от их плотности и толщины. Это моделирование показало, что ТСС Si, благодаря сильному взаимодействию с подложкой и близости атомных радиусов с ней, приобретает атомную плотность большую, чем в объемном кремнии, причем тип упаковки атомов в подложке определяет упаковку атомов в пленке.

2. Методика исследования

Моделирование состояния системы пленка–подложка проводилось пошагово — в статике. Для этого, было осуществлено порционное нанесение 2D конденсата Si толщиной 1/3 ML и 1 ML (с малой и, соответственно, большой плотностью) в исходные позиции поверхности $CrSi_2(0001)$ (см. ниже) в условиях заморозки ($T = 0$ K). После этого, каждый раз, на каждом шаге, осуществлялась релаксация системы — ее переход в минимум свободной энергии, двигаясь с учетом „выгоды“ (см. ниже) той или иной структуры [14]. Порции наносились последовательно: второй — после релаксации первого и т. д.

Вычисления были выполнены с использованием пакета FHI96md [15], работающего на базе теории функционала плотности [16,17], методов псевдопотенциала и набора плоских волн. Псевдопотенциалы генерировались с помощью пакета FHI98PP [18]. Для набора плоских волн использовалась одна k-точка зоны Бриллюэна (0,0,0). Энергия обрезания набора плоских волн составляла 40 Ry, а обменно-корреляционное взаимодействие учитывалось в приближении обобщенных градиентов [19].

Решетки массивных Si и $CrSi_2$ — это объемно-центрированная кубическая с базисом в два атома для Si и гексагональная для $CrSi_2$. Вдоль граней (111) Si и (0001) $CrSi_2$ имеется близкое совпадение рядов. В то же время, в решетке $CrSi_2$, в параллельном грани (0001) направлении, сочетаются две схемы плотной упаковки атомов (см. рис. 1): ABC + AB (о вариантах плотной упаковки атомов в кристаллах — см., например, [20]).

На рис. 1 показаны виды на кристаллическую решетку $CrSi_2$ со стороны четырех ее граней [21], а на рис. 2 показана гипотетическая 2D решетка Si, которая наложена на 2D решетку верхнего слоя $CrSi_2$ с поворотом на 30° (слева) и 0° (справа). При этом, два атома ее элементарной ячейки одинаково вписываются внутрь элементарной ячейки слоя $CrSi_2$, независимо от его ориентации.

Из рис. 1 видно, что $CrSi_2$ имеет гексагональное расположение шести атомов Si вокруг одного атома Cr в слоях и упаковку верхних трех слоев — ABC. Видно, что эта гексагональная группа атомов расположена когерентно позиции 7-ми атомных рядов в $CrSi_2$ (черные и серые шарики). Кроме того, видно, что ТСС

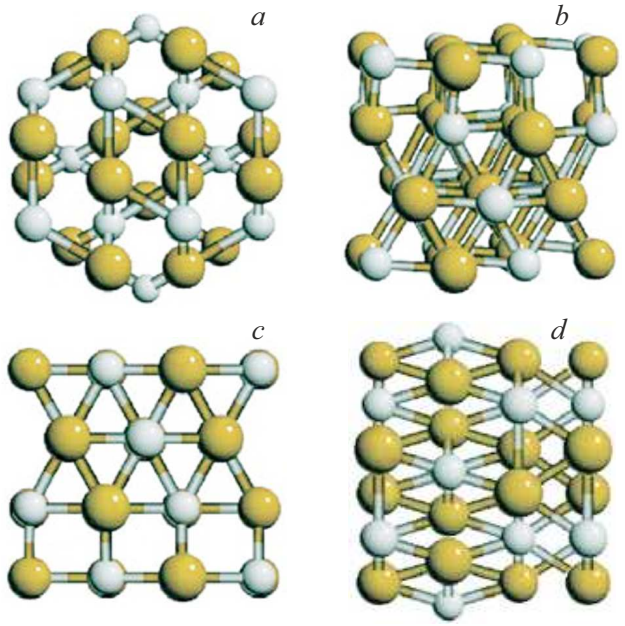

Рис. 1. Виды на различные грани (a–d) решетки $CrSi_2$ [21]: a — грань (0001). Атомы Si и Cr — коричневые и, соответственно, светло-серые шарики (по мере удаления на задний план, атомы имеют меньший размер).

Si имеет параметр 2D решетки и ее плотность в 3/2 и, соответственно, 9/4 раза большие по отношению к 2D слою ОФ Si(111) (коричневые шарики).

Для упрощения расчетов, мы ограничились рассмотрением только первых трех верхних слоев решетки $CrSi_2(0001)$ с упаковкой по схеме ABC, так как последующие — более глубокие слои экранированы этими слоями и оказывают слабое влияние на упаковку Si.

Так как, атомы в ТСС Si на $CrSi_2(0001)$ повторяют упаковку верхних (ограниченных приблизительно 3-мя длинами экранирования) атомов подложки $CrSi_2$, т. е. „адаптируются“ к подложке, то мы предположили, что в первых слоях ТСС наиболее вероятна упаковка ABC, как в подложке, хотя в последующих слоях ТСС Si возможна двухвариантная упаковка: ABC или AB.

Ограничение только 3-мя верхними слоями $CrSi_2$ позволяет представить гексагональную решетку $CrSi_2$ в виде прямоугольной решетки с горизонтальными (в плоскости) размерами: $a(X) = 9.875$ Å, $b(Y) = 6.899$ Å. При этом, вертикальные размеры определяются ее толщиной или n — количеством ML: $c(Z) = 5.73n$ Å.

Такая прямоугольная суперъячейка, после ее трансляции образует сверхрешетку, кратную $1\sqrt{3}$, т. е. $mn\sqrt{3}$. Трансляция этой прямоугольной суперъячейки в декартовой системе координат XY позволяет получить атомную систему с подложкой $CrSi_2$ в виде двумерного листа („слэба“).

Кроме того, мы использовали, кроме одностороннего „слэба“ Si на $CrSi_2(0001)$, двухсторонний „слэб“ с ростом Si — сверху и снизу. Двухсторонний „слэб“

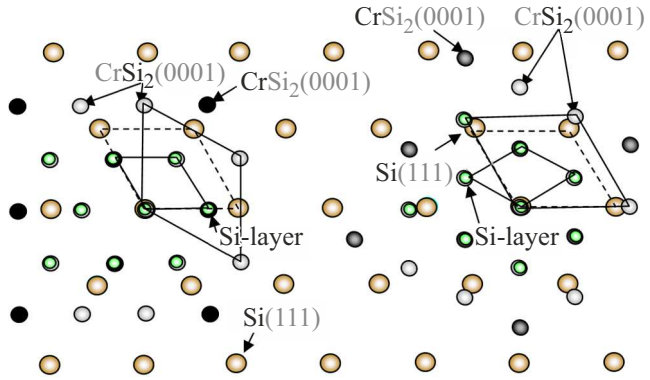

Рис. 2. Гипотетическое расположение атомов в двумерном слое кремния, Si-layer (маленькие шарики), поверх атомов $CrSi_2(0001)$ (черные шарики — Cr и серые шарики среднего размера — Si), для решетки $CrSi_2(0001)$, повернутой относительно Si(111) (большие шарики) на 30° (слева) и 0° (справа).

позволил избежать необходимости искусственной фиксации нижних слоев $CrSi_2(0001)$. Кроме того, две стороны „слэба“ усилили влияние поверхностных слоев $CrSi_2(0001)$ на рост Si.

При расчете одностороннего „слэба“, суперъячейку $CrSi_2$ составляли из 6 ML $CrSi_2$. При этом, 3 нижних ML суперъячейки искусственно фиксировали, а 3 верхних слоя релаксировали (равно как и наносимые сверху слои кремния).

При расчете двустороннего „слэба“, суперъячейку $CrSi_2$ составляли из двух половинок по 3 или 4 ML $CrSi_2$. При этом, ее общая толщина была, соответственно, $3+3=6$ ML или $4+4=8$ ML. Половинки состояли из гексагональных слоев, упакованных по схеме ABC, как в верхних 3-х слоях $CrSi_2(0001)$ или, соответственно, — ABC + AB, как в верхних 4-х слоях $CrSi_2(0001)$.

Методика осаждения Si была такова. Первый слой-конденсат мы располагали центрировано по отношению к верхним атомам Cr в $CrSi_2(0001)$, как показано на рис. 2 слева. Такое расположение было выбрано исходя из того, что положение отдельных атомов Si сверху атомов Cr — наиболее энергетически выгодно. Следующие монослои мы располагали по схемам ABC, ABC + AB или AB. При этом, после нанесения каждого следующего слоя, производилась релаксация атомов к минимуму свободной энергии системы.

На каждом этапе расчетов, вычислялось приращение энергии (приходящееся на один атом) по формуле $\delta E_A = E_A/N_{\mathrm{Si}} = (E-E_0)/N_{\mathrm{Si}}$. Где E и E_0 — энергия E_A системы $\mathrm{Si}-\mathrm{CrSi_2}$ на определенном этапе и, соответственно, некоторая „нулевая“ точка отсчета („опорная“ энергия), а N_{Si} — количество атомов Si. Уменьшение приращения энергии для той или иной структуры служило показателем ее энергетической „выгоды“ и, в следующем слое, эта „выгодная“ структура, вместе с новым слоем, задавала энергетическую „выгоду“ новой упаковки.

Построенные модели, по причине малого размера суперъячейки $CrSi_2(0001)$, конечно, не позволили учесть дальний порядок и сверхструктурное сопряжение. Тем не менее, расчет моделей ближнего порядка позволил выявить общие закономерности в изменении упаковки атомов в процессе роста ТСС Si.

3. Результаты и их обсуждение

3.1. Сверхструктурное сопряжение 2D Si с $CrSi_2(0001)$

На рис. 2 показано гипотетическое идеальное сверхструктурное сопряжение 2D решеток, соответствующих плотным монослоям Si и $CrSi_2(0001)$. При угле между ними 30° (слева на рисунке) или, соответственно, 0° (справа на рисунке), эти решетки сопрягаются в соотношениях $\sqrt{3/2}$ или 6/7. Эти отношения близки к реальному прямому соответствию 2D решеток (111) неплотной ОФ Si и (0001) плотной ОФ $CrSi_2$ — около 1.13 [8,11]. Но элементарная ячейка 2D решетки плотного ТСС Si по площади меньше ячейки неплотной ОФ Si в 9/4 раза.

Если продолжить идеально-сопрягаемые решетки 2D Si и $CrSi_2(0001)$, которые показаны на рис. 2, и наложить их друг на друга, то получим, для обоих вышеупомянутых углов, совпадающие узлы решеток, которые дадут сверхструктуру $CrSi_2(0001)3\sqrt{3}\times3\sqrt{3}-2\mathrm{DSi}$. При этом, для углов между $CrSi_2(0001)$ и Si(111) 30 и 0° мы получим теоретические сверхструктуры совпадения узлов: $\mathrm{Si}(111)2\times2-\mathrm{CrSi_2R30^\circ}$ и, соответственно, $\mathrm{Si}(111)6/7\times6/7-\mathrm{CrSi_2R0^\circ}$.

Эти теоретические структуры соответствуют картинам дифракции медленных электронов (ДМЭ), полученным в работах [2,3]. Мы предполагаем, что, в картина ДМЭ $6/7\times6/7$, в случае ориентации R0°, относилось к индуцируемой подложкой Si(111) периодичности самого $CrSi_2(0001)$, а картина ДМЭ $3\sqrt{3}\times3\sqrt{3}$, в случае ориентации R30°, — к периодичности самого двумерного метастабильного ТСС Si на $CrSi_2(0001)$. Тем не менее, в случае ориентации R0°, картина ДМЭ $3\sqrt{3}\times3\sqrt{3}$ не наблюдалась. Возможная причина этого — это, то, что она была нарушена из-за напряжений на интерфейсе, вызванных несоответствием решеток.

3.2. Рост неплотного конденсата

В большинстве случаев, как и здесь, мы использовали двухстороннее осаждение конденсата на подложку $CrSi_2(0001)$. Осаждение проводили сначала с шагом 1/3 ат./ML, а затем — с шагом 1/6 ат./ML. На рис. 3, *a–d* показаны фронтальный (слева) и боковой (справа) виды на ячейку $\mathrm{Si/CrSi_2}(0001)/\mathrm{Si}$ при толщине Si, соответственно: 2/3, 4/3, 5/3 и 11/6 ML.

Характер структур на рис. 3, говорит о том, что на $CrSi_2(0001)$, при толщинах 2/3 ML, 4/3 ML, 5/3 ML и 11/6 ML, формируются 2D ПФ и слои. Они состоят: при 2/3 ML — из разряженных атомных рядов, при

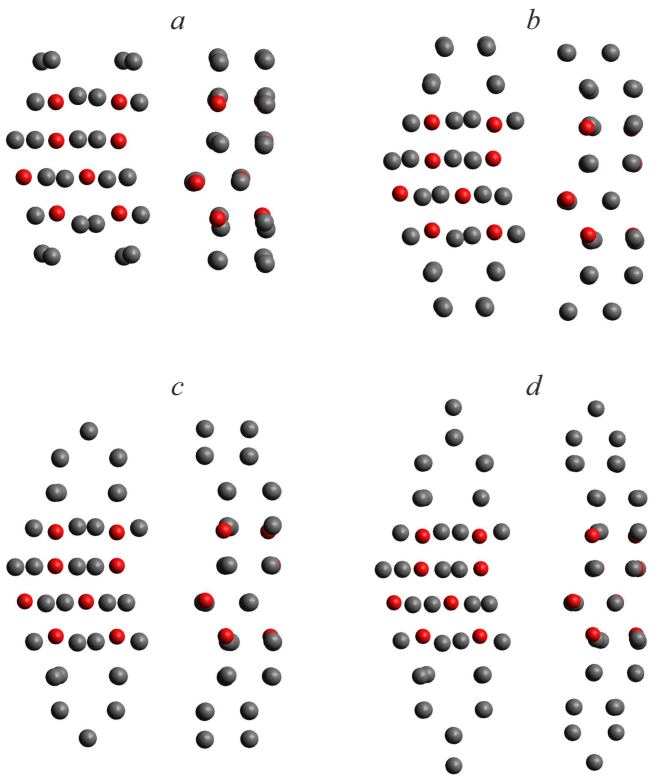

Рис. 3. Фронтальный и боковой вид Si/4 ML $CrSi_2(0001)$/Si при толщине Si: *a* — 2/3 ML, *b* — 4/3 ML, *c* — 5/3 ML, *d* — 11/6 ML.

4/3 ML и 5/3 ML — из 2D, а при 11/6 ML — из 3D кластеров с тетраэдрической sp^3 конфигурацией связей (как в Si с решеткой алмаза).

Согласно нашим расчетам, энергия Хартри (E_A) двумерной системы Si/$CrSi_2(0001)$/Si, при толщинах 2/3 ML, 4/3 ML, 5/3 и 11/6 ML, равна, соответственно: −4.110, −4.000, −3.946 и −4.000 a.e.

Если учесть, что поверхность $CrSi_2(0001)$ имеет оборванные связи и не самая „выгодная“, то можно принять в качестве „опорной“ самую минимальную энергию системы −4.000 a.e. Соответственно, приращение энергии (δE_A) по отношению к „опорной“, составит для указанного выше ряда толщин в a.e. (в eV): −0.110 (2.99); 0 (0), 0.054 (1.47) и 0 (0). Таким образом, стабильность фаз растет, падает и затем снова растет. При этом, стабильность является максимальной у первой их этих фаз (при 2/3 ML). Последующий рост стабильности объясняется образованием тетраэдрических sp^3 связей.

В следующих разделах мы рассмотрим рост более плотных (адаптированных по плотности к $CrSi_2$) ТСС Si.

3.3. Рост плотного конденсата

На рис. 4, *a*–*c* и рис. 4, *e* показаны фронтальный (слева) и боковой (справа) виды на Si/$CrSi_2(0001)$, при толщине $CrSi_2$ 3 ML и толщине конденсата Si (до его релаксации), соответственно: 0 ML, 1 ML, 3 ML и 7 ML. А на рис. 4, *d* показан вид сверху на верхние два слоя структуры Si/$CrSi_2(0001)$. Где светло-коричневые и черные шарики — первый (верхний) и, соответственно, лежащий под ним второй слои Si. Отметим, что в последующих разделах, мы не будем показывать на рисунках верхнюю и боковую проекции, т. к.дальше упаковка рядов в этих проекциях практически не изменялась.

Рис. 4, *d* показывает упаковку двух верхних слоев Si. Боковой вид на рис. 4, *a*–*c* и рис. 4, *e* справа, показывает, что атомы в ТСС Si, независимо от его толщины, формируют ряды с такой же упаковкой рядов, как в подложке. Фронтальный вид на рис. 4, *a*–*c* и рис. 4, *e* слева также показывает, что, при толщине Si 1–2 ML, в самих

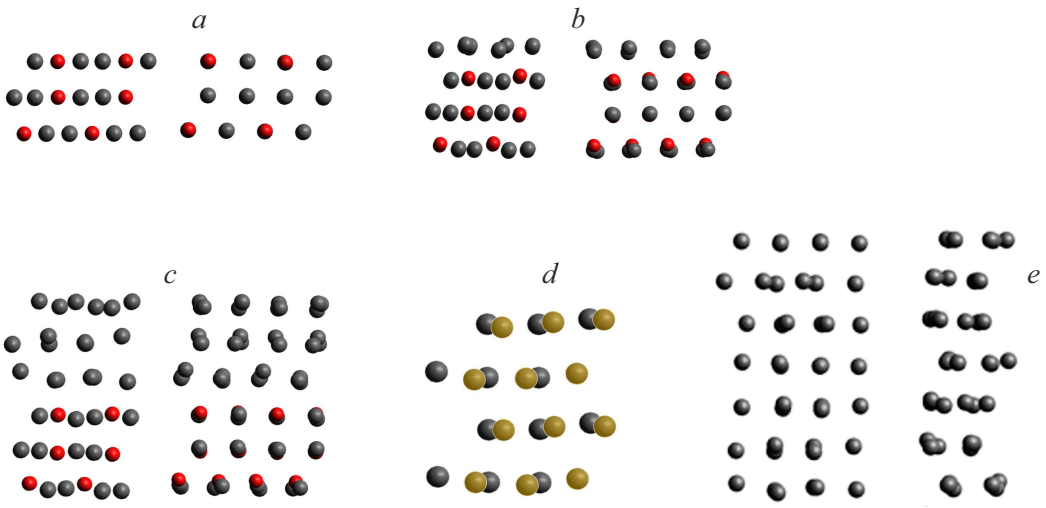

Рис. 4. Фронтальный (слева) и боковой (справа) виды (*a*–*c* и *e*) и вид сверху (*d*) на Si/3 ML $CrSi_2(0001)$ при толщине Si: 0 ML (*a*), 1 ML (*b*), 3 ML (*c*, *d*) и 7 ML (*e*). Где (*a*) — суперъячейка до релаксации, а светло-коричневые шарики на (*d*) — верхний слой Si.

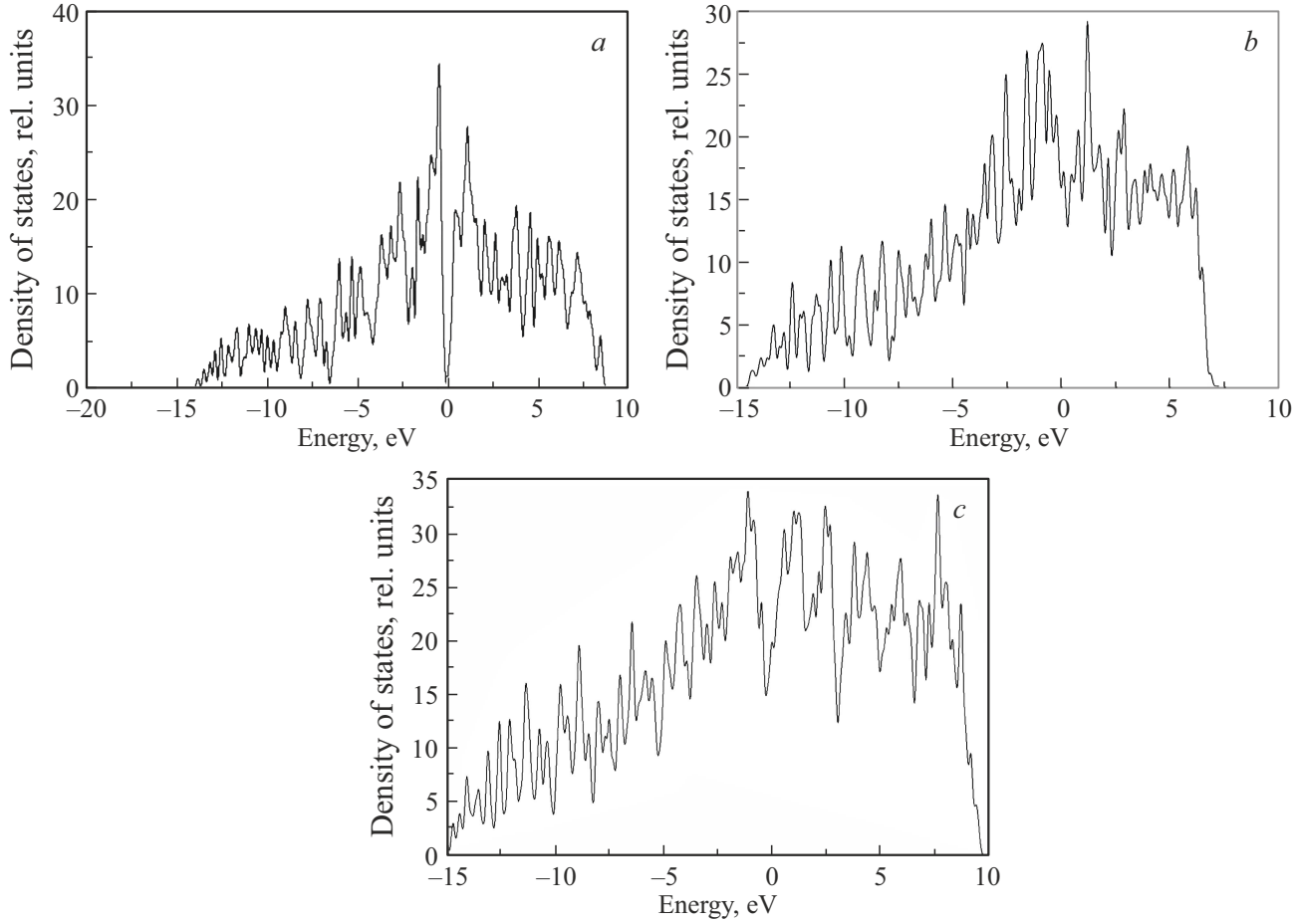

Рис. 5. Плотность электронных состояний в подложке $CrSi_2$ (*a*) и в гетероструктурах $Si/CrSi_2(0001)$ (см. рис. 4) с толщиной Si 1 ML (*b*) и 3 ML (*c*).

рядах упаковка повторяет упаковку ABC подложки. При толщине Si 3–7 ML, упаковка уже идет по схеме AB (кроме первых двух слоев и, соответственно, 1-го слоя), что подтверждает и рис. 4, *d*.

В целом, это означает, что образуется смешанная упаковка: в первых 1–3 слоях — упаковка ABC, а в последующих — AB. Причем, чем больше толщина пленки, тем большую долю толщины занимает упаковка AB. Таким образом, при 7 ML, под влиянием подложки остается только 1-ый слой, а весь ТСС Si оказывается слабо стабилизирован подложкой (при 7 ML. это происходит возможно из-за того, что толщина ТСС больше, чем толщина подложки).

На рис. 5 показаны плотности электронных состояний $CrSi_2(0001)$ и односторонних гетероструктур $Si/CrSi_2(0001)$ с толщиной Si 1 ML и 3 ML.

Из этих усредненных кривых, видно, что провал на уровне Ферми на спектре подложки $CrSi_2(0001)$ значительно уменьшается после осаждения уже 1-го ML Si. При этом, уровень плотности состояний вблизи уровня Ферми и по всему спектру при 1–3 ML Si существенно повышается, а при 3-х ML Si распространяется даже за его пределы (7.5–10 eV).

Поэтому, если вычесть плотность состояний подложки, то мы получим исчезновение запрещенной зоны и появление плотности металлических состояний, как вблизи уровня Ферми (при 1 ML), так и за его пределами (при 3-х ML). Это показывает формирование на $CrSi_2(0001)$, при 1 ML, двумерного, а при 3 ML уже некоторого двумерного/псевдо-объемного металлического ТСС Si.

При двухстороннем росте Si на суперъячейке $CrSi_2(0001)$, которую получали сращиванием двух половинок толщиной 3 ML (см. рис. 6), происходила более выраженная деформация подложки $CrSi_2$. Как мы предполагаем, это происходит из-за разбалансировки электронной плотности на поверхности $CrSi_2$ и в ее объеме. Однако, при 1 ML Si, эта деформация исчезает, очевидно из-за возвращения баланса электронной плотности, а при 3-х ML она вновь появляется.

Интересно, что на рис. 6, *f* упаковка ABC продлевается до 4-х ML. Таким образом, симметричная сшивка 2-х половинок увеличивает толщину ТСС с упаковкой ABC. Это говорит о том, что влияние более глубоких, чем 3 ML, слоев подложки все-таки нельзя совсем исключать.

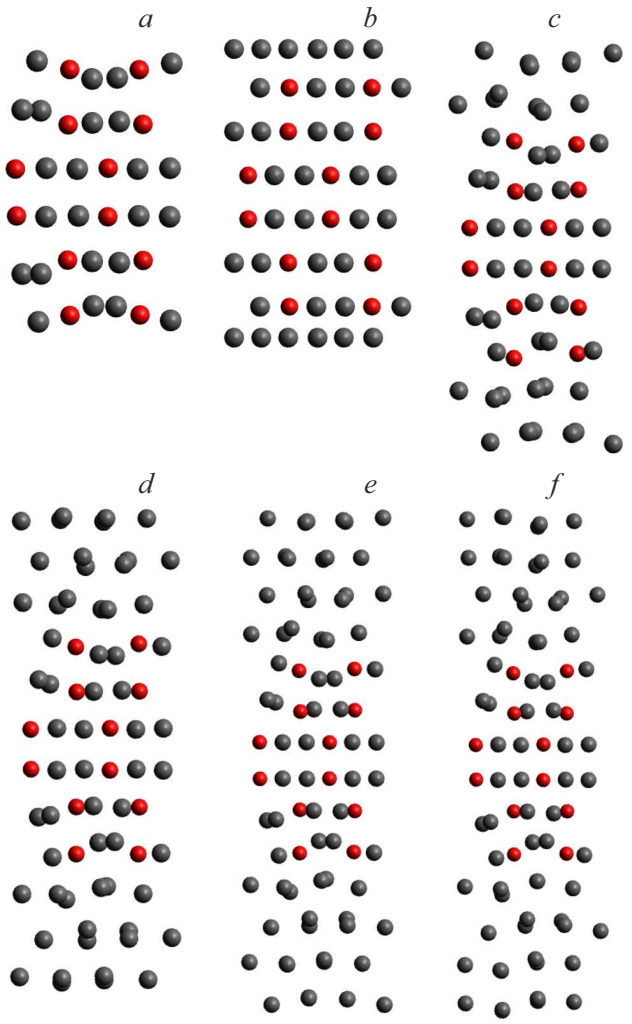

Рис. 6. Фронтальный вид на Si/6 ML $CrSi_2(0001)$/Si с толщиной Si: *a* — 0 ML, *b* — 1 ML, *c* — 2 ML, *d* — 3 ML, *e* — 4 ML, *f* — 5 ML.

Тем не менее, как видно из рис. 7 и сравнения с рис. 6, упаковка ABC, при толщине подложки $CrSi_2(0001)$ 8 ML, изменяется на упаковку AB после 3-х ML Si. То, что упаковка ABC на рис. 7 стабильна до 3-х ML, можно объяснить экранированием влияния подложки, поскольку три плотных монослоя Si близки по толщине к 3-м длинам экранирования Ферми в металле.

Таким образом, при росте ТСС Si на $CrSi_2(0001)$, растет сначала некий „экранирующий“ слой Si. При этом, до 3-х ML предпочтительна упаковка ABC и еще нет полного экранирования подложки. Далее, происходит смена типа упаковки с ABC на AB и, при большей толщине, более выгодной становится упаковка AB.

3.4. Конкуренция упаковок в суперъячейках разной толщины

В табл. 1, приведены расчеты для $CrSi_2$ с толщиной 6 ML. Наименьшая величина энергии, для упаковок ABC и AB, во всех таблицах выделена жирным шрифтом. Из табл. 1 видно, что энергия системы и ее приращение, в случае упаковки ABC, достигает „глубокого“ минимума при 2 ML и ТСС со схемой ABC становится наиболее стабильным. Далее, при 3–5 ML, более метастабильным и выгодным становится ТСС со схемой упаковки AB. Однако стабильность этого ТСС до „критической“ толщины в 4 ML несколько уменьшается, а затем, при 5 ML, становятся одновременно выгодной обе упаковки. Это означает, что ТСС после „критической“ толщины становится полиморфным.

Вероятнее всего, при 3-х ML, упаковка ABC подложки экранируется, и она становится менее выгодной. При этом, стремление ТСС образовать гексагональную упаковку AB типа достигает максимума. Однако, стабильность этого ТСС и упаковки AB типа далее падает с толщиной из-за уменьшения стабилизирующего влияния подложки, а упаковка ABC остается почти постоянной. Вследствие этого при 5 ML вероятность двух упаковок становится равновероятной. Как мы предполагаем, что при дальнейшем осаждении, эта конкуренция сменится зарождением ОФ Si и переходом ТСС Si к ОФ Si.

Таблица 1. Энергия на атом (E_A) и ее приращение (δE_A) по отношению к $E_A = -4.0000$ для структуры Si/$CrSi_2$(0001)-6ML/Si при различных толщинах Si и упаковках атомов: жирным шрифтом, при каждой толщине, выделена наиболее выгодная упаковка

Толщина	Схема упаковки			
	ABC		AB	
	E_A, a.e.	δE_A, a.e. (eV)	E_A, a.e.	ΔE_A, a.e. (eV)
1	**−3.9864**	**0.0136 (0.37)**	−3.8682	0.1318 (3.58)
2	**−3.9896**	**0.0104 (0.28)**	−3.9840	0.016 (0.44)
3	−3.9835	0.0165 (0.45)	**−3.9846**	**0.0154 (0.42)**
4	−3.9829	0.0171 (0.47)	**−3.9838**	**0.0162 (0.44)**
5	**−3.9839**	**0.0161 (0.44)**	**−3.9839**	**0.0161 (0.44)**

Таблица 2. Энергия на атом (E_A) и ее приращение (δE_A) по отношению к $E_A = -4.0000$ для структуры Si/$CrSi_2$(0001)-8ML/Si при различных толщинах Si и упаковках атомов: жирным шрифтом, при каждой толщине, выделена наиболее выгодная упаковка

Толщина	Схема упаковки			
	ABC (рис. 6)		AB	
	E_A, a.e.	δE_A, a.e. (eV)	E_A, a.e.	ΔE_A, a.e. (eV)
1	**−3.9820**	**0.018 (0.49)**	−3.9740	0.026 (0.71)
2	**−3.9830**	**0.017 (0.46)**	−3.9810	0.019 (0.52)
3	−3.9814	0.0186 (0.51)	**−3.9828**	**0.0172 (0.47)**
4	−3.9796	0.0204 (0.55)	–	–

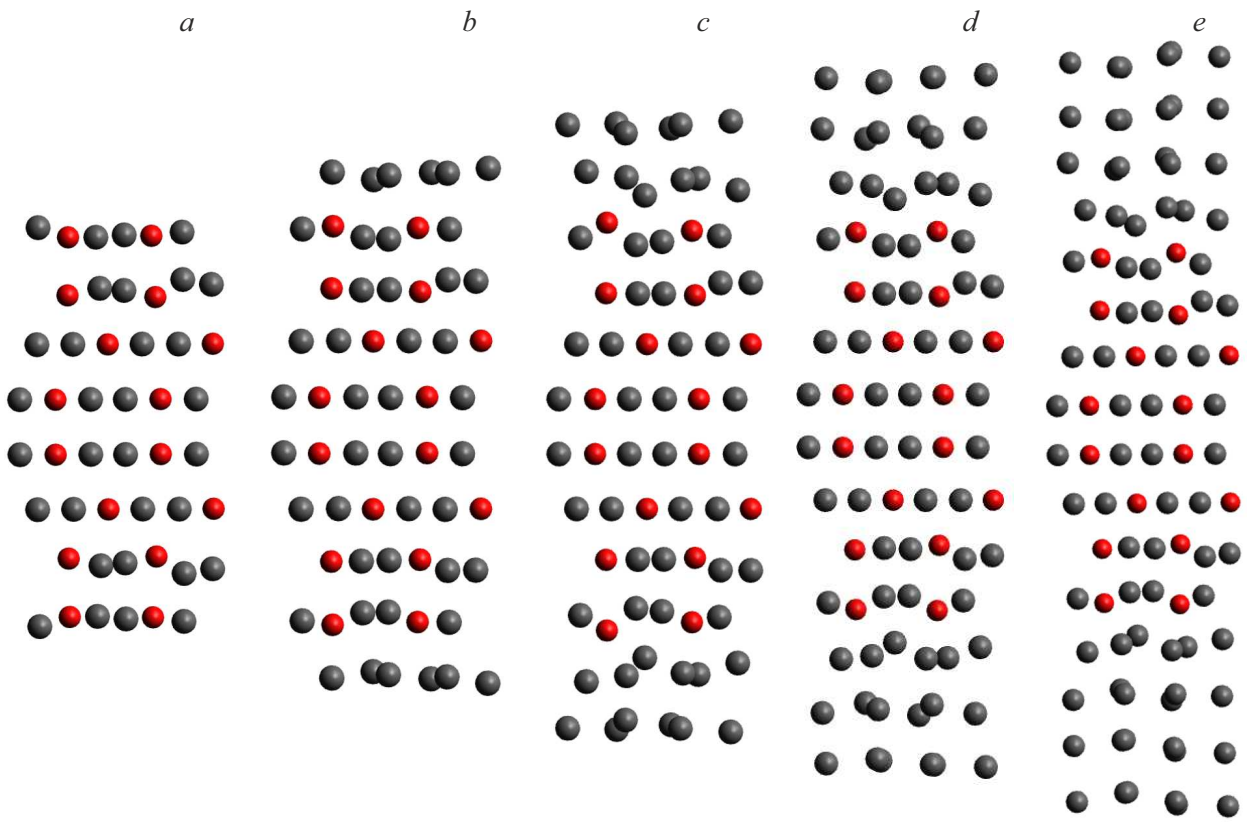

Рис. 7. Фронтальный вид на структуру $Si/CrSi_2(0001)/Si$ при толщинах $CrSi_2$ 8 ML и Si: *a* — 0 ML, *b* — 1 ML, *c* — 2 ML, *d* — 3 ML, *e* — 4 ML.

Таблица 3. Энергия на атом (E_A) и ее приращение (δE_A) по отношению к $E_A = -4.0000$ для структуры Si-ABC/$CrSi_2$ (0001)-8ML/Si-ABC различной толщины, при расположении сверху нее монослоя Si с упаковкой AB

Толщина Si, ML		Структура ABC+AB	
Подслой, упаковка ABC	Топ-слой, упаковка AB	E_A, a.e.	δE_A, a.e. (eV)
2	1	**−3.9837**	**0.0163 (0.44)**
3	1	−3.9814	0.0186 (0.51)

В табл. 2, приведены расчеты для суперъячейки $CrSi_2$ с толщиной 8 ML. Сопоставление с табл. 1 показывает, что новая суперъячейка $CrSi_2$, повышает энергию и приращение энергии системы, что свидетельствует о понижении ее стабильности. Кроме того, при толщине суперъячейки $CrSi_2$ 8 ML и толщине Si 1−2 ML, происходит „нивелирование“ степени стабильности упаковок ABC и AB. Однако, в целом, поведение системы остается таким же.

Скорее всего, понижение стабильности системы и вышеупомянутое „нивелирование“ связаны с четным (четыре) количеством слоев в половинках суперъячейки, которое нарушает „идеальность“ упаковки ABC на границе этих двух половинок. Вместе с тем, нужно иметь ввиду, что такое нарушение „идеальности“ в 4-м слое имеет место и в реальной решетке $CrSi_2(0001)$ (см. рис. 1). Поэтому, рост, при толщине суперъячейки $CrSi_2$ 8 ML, лучше отражает „вторую сторону медали“ при росте ТСС — полиморфизм упаковок.

В табл. 3, приведены величины энергии при расположении монослоя Si с упаковкой AB с обеих сторон структуры Si-ABC/$CrSi_2(0001)$/Si-ABC.

Сравнение с табл. 2, показывает, что, при 3 ML, смешанная упаковка ABC (2 ML) + AB (1 ML), является более стабильной, чем упаковка AB (3 ML). Поэтому, до формирования объемной фазы Si, возможен переход к более толстому полиморфному ТСС, содержащему, кроме упаковки ABC, упаковку AB гексагонального типа. Тем не менее, во всех случаях максимальная стабильность ТСС Si достигается со схемой упаковки ABC при 2-х ML Si, что соответствует эксперименту [2,3].

4. Заключение

Проведено квантово-механическое моделирование роста Si на пластинах $CrSi_2(0001)$ в виде транслированной вдоль плоскости суперъячейки Si/$CrSi_2(0001)$ или Si/$CrSi_2(0001)$/Si. При моделировании неплотных конденсатов Si обнаружено образование 2D поверхностных

фаз и двумерного массива 3D кластеров Si с тетраэдрической sp^3 конфигурацией межатомных связей. При моделировании плотных конденсатов Si, показано, что идет рост ТСС Si с электронной структурой двумерного металла, причем этот двумерный металл, при 1−2 ML, растет с упаковкой по схеме ABC, а после 2−3 ML, — с упаковкой по схеме AB с дальнейшим переходом к полиморфной упаковке ABC + AB.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

[1] N.I. Plyusnin. Condens. Matter Interphases **25**, *4*, 594 (2023). https://doi.org/10.17308/kcmf.2023.25/11471

[2] N.I. Plusnin, N.G. Galkin, V.G. Lifshits, A.P. Milenin. Phys. Low-Dim. Struct. (PLDS) **1–2**, 55 (1999). https://elibrary.ru/item.asp?id=13307399

[3] Н.И. Плюснин, Н.Г. Галкин, В.Г. Лифшиц, А.П. Миленин. Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования **16**, *6*, 22 (2000). http://www.issp.ac.ru/journal/surface/2000/06-2000.htm/ N.I. Plusnin, N.G. Galkin,

[4] S.M. Jeong, T. Kitamura. Jpn. J. Appl. Phys. **46**, *9R*, 5924 (2007). https://doi.org/10.1143/jjap.46.5924

[5] F.A. Zwanenburg, A.S. Dzurak, A. Morello, M.Y. Simmons, L.C. Hollenberg, G. Klimeck, S. Rogge S.N. Coppersmith, M.A. Eriksson. Rev. Mod. Phys. **85**, *3*, 961 (2013). https://doi.org/10.1103/revmodphys.85.961

[6] S.O. Mathias, Y. Malozovsky, L. Franklin, D. Bagayoko. J. Mod. Phys. **9**, *14*, 2457 (2018). https://doi.org/10.4236/jmp.2018.914158

[7] В.Г. Лифшиц, В.Г. Заводинский, Н.И. Плюснин. Поверхность. Физика, химия и механика **3**, 82 (1983).

[8] F.Y. Shiau, H.C. Cheng, L.J. Chen. J. Appl. Phys. **59**, *8*, 2784 (1986). https://doi.org/10.1063/1.336990

[9] A. Rocher, A. Oustry, D.M. Josée, M. Caumont. J. Vac. Sci. Technol. A: Vac. Surf. Films **12**, *6*, 3018 (1994). https://doi.org/10.1116/1.578930

[10] N.I. Plusnin, N.G. Galkin, V.G. Lifshits, S.A. Lobachev. Surf. Rev. Lett. **2**, *4*, 439 (1995). https://doi.org/10.1142/s0218625x9500039x

[11] O. Filonenko, A. Mogilatenko, H. Hortenbach, F. Allenstein, G. Beddies, H.J. Hinneberg. J. Cryst. Growth **262**, *1–4*, 281 (2004). https://doi.org/10.1016/j.jcrysgro.2003.10.054

[12] В.Г. Заводинский, Н.И. Плюснин, О.А. Горкуша. ЖТФ **94**, *2*, 231 (2024). https://doi.org/10.61011/JTF.2024.02.57077. 199-23

[13] Н.И. Плюснин, В.Г. Заводинский, О.А. Горкуша. ФТТ **66**, *2*, 275 (2024). https://doi.org/10.61011/FTT.2024.02.57251.273

[14] X. Gonze, B. Amadon, P.-M. Anglade, J.-M. Beuken, F. Bottin, P. Boulanger, F. Bruneval, D. Caliste, R. Caracas, M. Côté, T. Deutsch, L. Genovese, Ph. Ghosez, M. Giantomassi, S. Goedecker, D.R. Hamann, P. Hermet, F. Jollet, G. Jomard, S. Leroux, J.W. Zwanziger. Comput. Phys. Commun. **180**, *12*, 2582 (2009). https://doi.org/10.1016/j.cpc.2009.07.007

[15] M. Bockstedte, A. Kley, J. Neugebauer, M. Scheffler. Comput. Phys. Commun. **107**, *1–3*, 187 (1997). https://doi.org/10.1016/S0010-4655(97)00117-3

[16] P. Hohenberg, W. Kohn. Phys. Rev. **136**, *3B*, B864 (1964). https://doi.org/10.1103/PhysRev.136.B864

[17] W. Kohn, L.J. Sham. Phys. Rev. **140**, *4A*, A1133 (1965). https://doi.org/10.1103/PhysRev.140.A1133.

[18] M. Fuchs, M. Scheffler. Comp. Phys. Commun. **119**, *1*, 67 (1999). http://dx.doi.org/10.1016/S0010-4655(98)00201-X.

[19] J.P. Perdew, W. Yue. Phys. Rev. B **33**, *12*, 8800 (1986). https://doi.org/10.1103/PhysRevB.33.8800

[20] Н.В. Белов. Структура ионных кристаллов и металлических фаз, Издательство Академии Наук СССР, М. (1947). https://ufn.ru/ru/articles/1947/9/m/

[21] Crystal Lattice Structures: (21 Oct 2004): The $CrSi_2$ (C40) Structure. Интернет ресурс — https://www.atomic-scale-physics.de/lattice/struk/c40.html

Редактор А.Н. Смирнов