08

Влияние электронной структуры на топографию поверхностей Ge(100) и Si(100) в сканирующей туннельной микроскопии

© В.Е. Ремеле, М.В. Кузьмин

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН,
Санкт-Петербург, Россия

E-mail: m.kuzmin@mail.ioffe.ru

Поступила в Редакцию 2 сентября 2025 г.
В окончательной редакции 16 января 2026 г.
Принята к публикации 22 января 2026 г.

Проведен анализ изображений сканирующей туннельной микроскопии, смоделированных с помощью теории функционала плотности и измеренных при 12 K для реконструкций $c(4 \times 2)$ и $p(2 \times 2)$ на грани (100) германия и кремния. Показано, что в зависимости от знака и величины напряжения смещения вид этих изображений может существенно трансформироваться, а наблюдаемый топографический рельеф может отражать как атомное строение, так и особенности электронной структуры поверхности. Полученные результаты демонстрируют, что при интерпретации картин сканирующей туннельной микроскопии для указанных реконструкций необходим тщательный учет целого ряда факторов, включая детальное знание локальной плотности состояний.

Ключевые слова: поверхностная реконструкция, атомная структура, электронные свойства, теория функционала плотности.

DOI: 10.61011/FTT.2026.01.62588.243-25

1. Введение

Поверхности полупроводниковых кристаллов подвержены структурной и электронной перестройке, в результате которой образуются „двумерные“ (поверхностные) реконструкции с уникальными физико-химическими свойствами [1,2]. Для их исследования на субнанометровом масштабе одним из наиболее информативных методов является сканирующая туннельная микроскопия (СТМ). Однако интерпретация результатов СТМ может быть нетривиальной по целому ряду причин. Например, в случае, когда характерное время элементарных процессов на поверхности (колебательных движений атомов и молекул, диффузии примесей, флуктуаций ступеней и т. п.) много меньше времени перемещения иглы СТМ, наблюдаемая топография будет представлять собой усредненную картину, а не „моментальный снимок“ поверхностной структуры. Так, поверхностные димеры на грани (100) кремния и германия при комнатной температуре вследствие их быстрых колебаний между двумя возможными асимметричными (наклонными) конфигурациями $Si^{\uparrow}-Si_{\downarrow}$ ($Ge^{\uparrow}-Ge_{\downarrow}$) и $Si^{\downarrow}-Si_{\uparrow}$ ($Ge^{\downarrow}-Ge_{\uparrow}$), или движений флип-флоп (flip-flop motion), отображаются на СТМ-картинах в симметричной форме [3,4]. В то же время при низкой температуре ($T < 200$ K) такие колебания могут быть „заморожены“, и тогда поверхностные димеры визуализируются как асимметричные.

Другая хорошо известная проблема, затрудняющая интерпретацию изображений СТМ, связана с влиянием электронной структуры. Для уже упомянутых граней Si(100) и Ge(100) наблюдаемый в СТМ рельеф задается в бóльшей степени пространственным распределением локальной плотности состояний (LDoS) на поверхности, а не ее атомной геометрией. Иными словами, вид СТМ-картин резко зависит от напряжения смещения (V), и при варьировании этого параметра различные электронные состояния на поверхности могут давать вклад в наблюдаемое изображение. Природа этих состояний, однако, до сих пор остается предметом дискуссии даже для таких хорошо изученных систем, как Si(100) и Ge(100) [5–29]. В работах [5,6] было показано, что при небольших значениях $|V|$ СТМ-топография поверхности Si(100) обусловлена π- или π^*-состояниями (в зависимости от знака приложенного напряжения смещения), расположенными на шкале энергий соответственно немного ниже максимума валентной зоны и немного выше минимума зоны проводимости на поверхности, и что при бóльших значениях $|V|$ основной вклад в СТМ-картину дают другие, отличные от π и π^*, состояния. Что же касается последних, то их однозначное объяснение в литературе отсутствует: в различных исследованиях они были идентифицированы как σ^*-состояния, обусловленные связями между атомами в димерах [6–8], и состояния, обусловленные обратными π^*-связями (back bonding) верхних атомов димеров [6,9] или поверхностными резонансами [10].

В случае поверхности Ge(100) вершина валентной зоны имеет более сложный характер, чем для Si(100), и определяется не только π-состояниями [11–15]. В работе [16] было показано, что СТМ-изображения этой поверхности, полученные в режиме заполненных состояний в области значений V от -0.6 до -0.1 V, очень сильно зависят от напряжения смещения. При -0.1 V особенности на изображении были приписаны

обратным π-связям атомов димеров, а в интервале от -0.6 до 0.45 V — π-состояниям, обусловленным оборванными связями этих атомов. Такая интерпретация была поставлена под сомнение в сообщении [17]. Его авторами был сделан вывод, что вершина валентной зоны поверхности Ge(100) определяется состоянием, обусловленным объемной решеткой германия, что подтверждается другими исследованиями [14,15]. Похожая, не менее сложная ситуация наблюдается и для электронной структуры поверхности Ge(100) выше уровня Ферми [18–27]. Краткий обзор поверхностных состояний, способных давать вклад в СТМ-изображения Si(100) и Ge(100) при различных значениях V, можно найти в работе [29]. Таким образом, чтобы надежно идентифицировать электронные состояния, обуславливающие СТМ-топографию рассмотренных поверхностей, необходимы дальнейшие систематические теоретические и экспериментальные исследования. Очевидно, такие исследования важны для понимания результатов СТМ не только чистых поверхностей кремния и германия, но и адсорбатов [30–32] и примесей [33,34] на этих подложках.

В настоящей работе проведено сравнительное теоретическое и экспериментальное исследование СТМ-изображений реконструкций $c(4\times2)$ и $p(2\times2)$ на поверхностях Ge(100) и Si(100) для выяснения основных закономерностей влияния на них электронной структуры и прояснения перечисленных выше нерешенных вопросов (хотя бы частично). Расчеты выполнялись на основе теории функционала плотности (DFT, density functional theory). Для корректного сравнения полученных результатов с данными экспериментов последние проводились при $T = 12$ K.

2. Методика расчета

Расчеты проводились в программном пакете Quantum Espresso [35] в рамках обобщенного градиентного приближения (GGA, generalized gradient approximation) с использованием обменно-корреляционного функционала PBE [36] и ультрамягких (ultrasoft) псевдопотенциалов [37]. При выполнении расчетов применялся базис плоских волн с энергиями отсечки по волновой функции и электронной плотности равными 46 и 221 Ry для Si и 46 и 239 Ry для Ge соответственно. Интегрирование в зоне Бриллюэна производилось с густотой сетки квазиволнового вектора обратного пространства $2\times4\times1$ для Si и $3\times6\times1$ для Ge. При расчете плотности состояний густота сетки была увеличена в 4 раза для каждого случая. Для имитации поверхности использовалась элементарная ячейка, содержащая плиту (slab) толщиной пять моноатомных слоев и вакуумный промежуток величиной 15 Å. Нижняя часть плиты была пассивирована атомами водорода для устранения оборванных связей. Реконструкции, рассматриваемые в работе, были получены посредством геометрической оптимизации атомной структуры, выполненной с помощью алгоритма Бройдена–Флетчера–Гольдфарба–Шано (BFGS) [38]. При этом два нижних слоя плиты были фиксированы, а положение атомов в трех верхних слоях варьировалось. Для полученных в ходе геометрической оптимизации структур было проведено моделирование СТМ-изображений в рамках подхода Терсоффа–Хаманна [39] с помощью программного пакета critic2 [40,41].

3. Методика эксперимента

Эксперименты проводились *in situ* с помощью сканирующего туннельного микроскопа Scienta Omicron Fermi SPM (Германия) при остаточном давлении $< 1\cdot10^{-10}$ mbar. При регистрации СТМ-изображений температура образца, как указывалось в разд. 1, поддерживалась равной 12 K, а температура сканера микроскопа — равной 20 K. Изображения были получены в режиме постоянного тока. Иглы СТМ были изготовлены из вольфрама. Для пост-обработки и анализа изображений применялся программный пакет WSXM [42].

В качестве образцов использовались монокристаллы Ge(100), легированные Sb (n-тип, $\sim 1\cdot10^{19}$ cm^{-3}). Для приготовления чистой поверхности применялась серия бомбардировок ионами Ar^+ с энергией 1.0 keV при 673 K, чередуемых с прогревом кристалла при 900 K. Процедура повторялась до тех пор, пока не была получена атомно-гладкая, свободная от чужеродных примесей, поверхностная реконструкция.

4. Результаты и их обсуждение

4.1. Атомная геометрия

На рис. 1 представлены оптимизированные атомные структуры реконструкций $c(4\times2)$ и $p(2\times2)$ на поверхностях Si и Ge. Дальний порядок и тип элементарной ячейки в них обусловлен особенностями димеризации в верхнем атомном слое кристалла. В структуре $c(4\times2)$ (рис. 1, *a*) наблюдается чередование наклона димеров ($\uparrow-\downarrow$ или $\downarrow-\uparrow$) в двух направлениях: вдоль образуемых ими рядов и в поперечном направлении перпендикулярно этим рядам. Иными словами, ближайшими соседями для димера $Si^{\uparrow}-Si_{\downarrow}$ ($Ge_{\uparrow}-Ge^{\downarrow}$) в ряду и в смежных с ним рядах будут димеры $Si_{\downarrow}-Si^{\uparrow}$ ($Ge_{\downarrow}-Ge^{\uparrow}$) и наоборот. Таким образом, наклон димеров в реконструкции $c(4\times2)$ аналогичен направлению спина электронов в антиферромагнитных системах. В структуре $p(2\times2)$ (рис. 1, *b*) чередование асимметричных димеров происходит только в одном направлении — вдоль их рядов. В поперечном направлении соседние димеры всегда наклонены в одну и ту же сторону. Значения длины связи и угла наклона димеров в полученных структурах приведены в таблице.

Эти значения хорошо согласуются с опубликованными ранее величинами [43–48]. По энергии рассматрива-

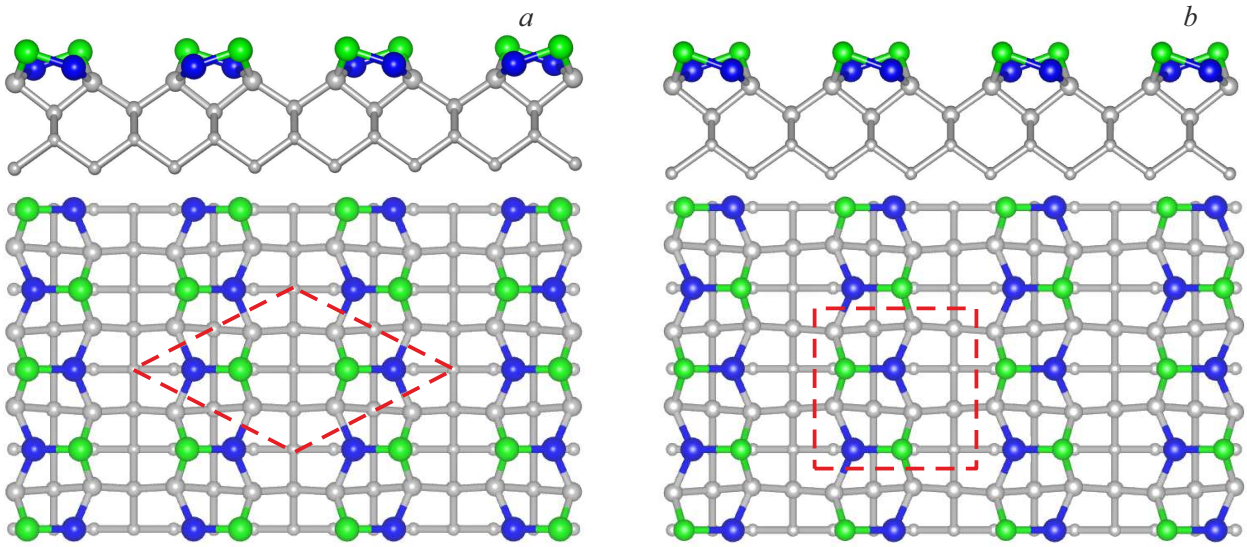


Рис. 1. Атомные модели реконструкций на Si(100) и Ge(100): a — $c(4\times2)$, b — $p(2\times2)$. В верхней части каждой панели показан вид атомной структуры сбоку (side view), в нижней — сверху (top view). Пунктирной линией выделены границы элементарной ячейки поверхностной сверхструктуры.

Параметры оптимизированных структур $c(4\times2)$ и $p(2\times2)$. Обозначения: d — расстояние между атомами (длина связи) в димере и α — угол наклона димера относительно поверхности

	Si(100)		Ge(100)	
	d, Å	α, deg	d, Å	α, deg
$c(4\times2)$	2.37	19.26	2.58	17.23
$p(2\times2)$	2.37	19.22	2.58	20.11

емые реконструкции отличаются очень незначительно, т. е. практически вырождены; например, для кремния такое отличие составляет 0.7 meV/dimer [49]. Это приводит к тому, что при взаимодействии с иглой структура $c(4\times2)$, которая является основным состоянием, может спонтанно переходить в $p(2\times2)$ и наоборот. Более подробно такие переходы будут рассмотрены в разд. 4.3.2.

Далее реконструкции $c(4\times2)$ и $p(2\times2)$, приведенные на рис. 1, будут использованы для расчетов плотности состояний и моделирования СТМ-изображений.

4.2. Электронная структура

На рис. 2 и 3 приведены результаты расчета парциальной плотности состояний (pDoS, partial density of states), т. е. проекции полной плотности состояний на s- и p-орбитали атомов димеров (сплошные линии), для реконструкций $c(4\times2)$ и $p(2\times2)$ на Si и Ge. Область, закрашенная серым цветом, показывает суммарную плотность состояний для верхнего ($Si^{\uparrow}$ или $Ge^{\uparrow}$) и нижнего ($Si_{\downarrow}$ или $Ge_{\downarrow}$) атома. Величина $E=0$ на шкале энергии соответствует положению уровня Ферми.

Выделим наиболее характерные особенности приведенных результатов.

Прежде всего, при анализе полученных распределений pDoS необходимо учитывать, что в димерах на поверхностях Si(100) и Ge(100) происходит образование π связей и перетекание заряда от нижнего атома к верхнему. Это должно приводить к появлению связывающих π- и антисвязывающих π^*-состояний ниже и выше уровня Ферми соответственно. Для всех реконструкций на рис. 2 и 3 в области энергий выше уровня Ферми наблюдаются две характерные узкие зоны, связанные с π^*-состояниями: одна при малых значениях E (~ 0.1 eV), а другая — при более высоких значениях: $\sim 0.8-0.9$ eV для Si (рис. 2) и $\sim 0.6-0.8$ eV для Ge (рис. 3). Основной вклад в эти зоны дает антисвязывающая p_z-орбиталь (ось z ориентирована по нормали к поверхности). При $E\approx 0.1$ eV эта орбиталь локализована вблизи нижнего атома димера. При бóльших значениях энергии она менее локализована, особенно для Si: соответствующая ей плотность состояний распределена вблизи обоих атомов димера. Кроме того, небольшую добавку к ней дает p_x-орбиталь, располагающаяся у нижнего атома (ось x лежит в плоскости поверхности и перпендикулярна рядам димеров).

При более высоких значениях энергии (≥ 1.2 eV для Ge и ≥ 1.4 eV для Si) вклад в плотность состояний дают одновременно несколько антисвязывающих орбиталей, включая s и p_y (ось y параллельна рядам димеров). Это вызвано формированием σ- и/или обратных π-связей между поверхностными атомами.

Ниже уровня Ферми вклад связывающей p_z-орбитали в плотность состояний является доминирующим при энергиях от -0.9 до -0.25 eV для Si и от -1.1

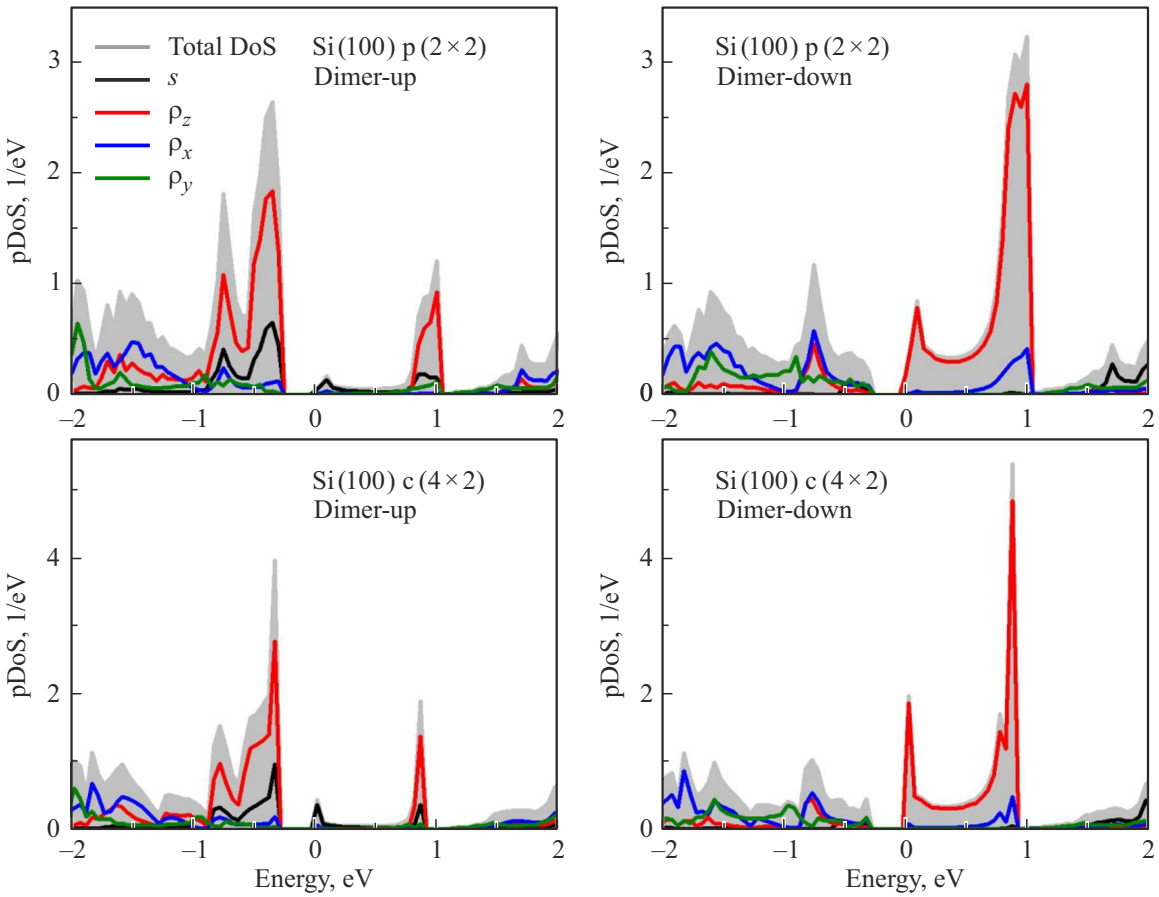


Рис. 2. Парциальная плотность состояний для реконструкций на поверхности Si(100).

до -0.5 eV для Ge. Эта орбиталь локализована на верхних атомах димеров. При ме́ньших энергиях плотность состояний определяется несколькими, менее локализованными, орбиталями, а их вклад сопостави́м.

Отметим также еще одну интересную деталь электронного строения рассматриваемых реконструкций. Вершина валентной зоны для Si и Ge обусловлена различными состояниями. В случае Si максимум этой зоны (он находится ниже уровня Ферми на $\sim 0.23-0.25$ eV на рис. 2) формируется, прежде всего, p_z-орбиталью, к которой подмешаны s-состояния. Принципиально иная картина наблюдается для Ge-реконструкций. В этом случае максимум валентной зоны ($\sim 0.05-0.08$ eV ниже уровня Ферми на рис. 3) обусловлен орбиталью p_y. Что же касается минимума зоны проводимости, то для всех исследованных структур его природа одинакова. За его формирование отвечают антисвязывающие p_z-состояния.

4.3. Сканирующая туннельная микроскопия

4.3.1. Моделирование

При анализе результатов СТМ важно учитывать, что вклад поверхностного состояния с энергией E в туннельный ток зависит от приложенного напряжения смещения V. Согласно [41,50], туннельный ток может быть представлен как $I \propto \int_0^{eV} \rho(E)T(E, eV)dE$, где e — заряд электрона, $T(E, eV)$ — проницаемость барьера между острием и образцом для электрона (т. е. вероятность прохождения последнего через вакуумный зазор), а $\rho(E)$ — значение LDoS на поверхности образца. Данное выражение справедливо, когда LDoS поверхности острия вблизи уровня Ферми слабо зависит от энергии, что является разумным предположением в случае металлических игл, выполненных, в частности, из вольфрама. Значение проницаемости барьера может быть выражено в виде $T(E, eV) = e^{-2\kappa s}$, где s — протяженность вакуумного зазора, а κ — инверсная длина затухания. Последняя величина равна

$$\kappa = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}\left(\frac{\varphi + \varphi^*}{2} - E + \frac{eV}{2}\right) + k_{\|}^2},$$

где φ и φ^* — значения работы выхода образца и иглы соответственно, $k_{\|}$ — компонента волнового вектора для поверхностного состояния, параллельная поверхности, m — масса электрона и $\hbar$ — постоянная Планка–Дирака. Из только что приведенных выражений вытекает, что вклад в туннельный ток состояния с энергией E максимален при $V = E/e$ и уменьшается с ростом напряжения смещения.

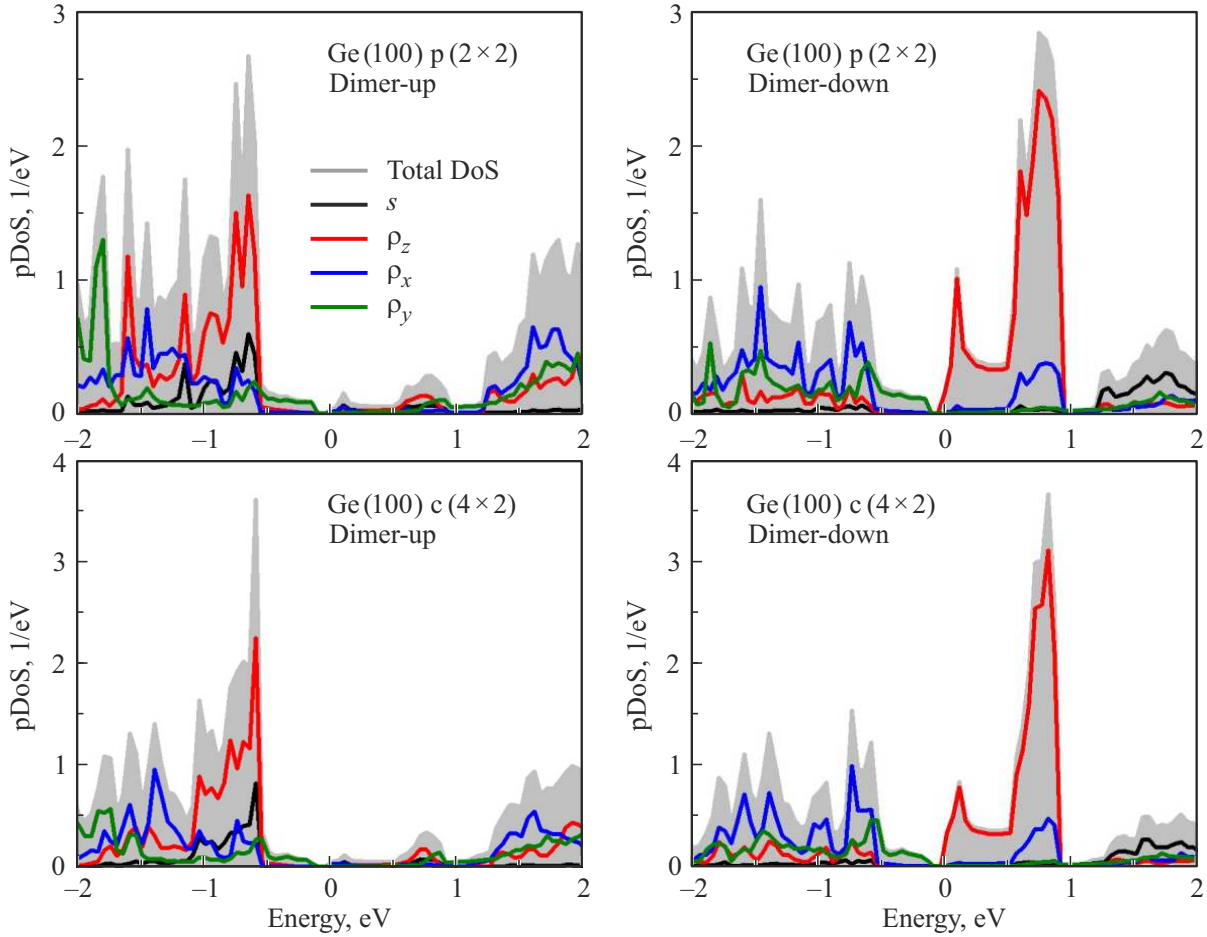


Рис. 3. То же, что и на рис. 2, но для поверхности Ge(100).

На рис. 4 показаны результаты моделирования СТМ-изображений для реконструкций $c(4\times 2)$ и $p(2\times 2)$ при различных значениях напряжения смещения. Геометрические положения верхних и нижних атомов димеров показаны зелеными и синими кружками соответственно. Как видно, характерные особенности, наблюдаемые для двух структур, подобны, а различия в СТМ-картинах обусловлены неодинаковым расположением атомов на этих поверхностях. Поэтому далее в настоящем разделе будем рассматривать только результаты для реконструкции $p(2\times 2)$. Выводы, сделанные для этой структуры, легко перенести и на случай реконструкции $c(4\times 2)$.

Прежде всего, отметим, что знак напряжения смещения на рис. 4 качественно влияет на основные тенденции изменения изображений с ростом параметра V. Более простым является случай туннелирования электронов из заполненных состояний образца на пустые уровни в игле (случай $V<0$). В этом режиме, как следует из рисунка, выступам на изображениях, т.е. участкам, на которых игла поднимается на максимальную высоту, соответствуют верхние атомы димеров. Это обусловлено двумя факторами. Во-первых, LDoS вблизи этих атомов выше, чем на нижних атомах димеров. И во-вторых, атомы $Si^{\uparrow}$ и $Ge^{\uparrow}$ приподняты над атомами $Si_{\downarrow}$ и $Ge_{\downarrow}$ на 0.75–0.88 Å.

Также следует отметить, что в случае Ge выступы хорошо разрешены при всех значениях V от -2.0 до -0.5 V. Можно предположить, что это связано с формой p_z-орбиталей, локализованных на атомах $Ge^{\uparrow}$. Похожая тенденция наблюдается и для Si при смещениях V от -1.5 до -0.5 V. В случае $V=-2.0$ V выступы не разрешаются и сливаются в зигзагообразную цепочку. Это связано с тем, что туннельный ток при данном напряжении смещения примерно в равной степени обусловлен несколькими орбиталями. Таким образом, в режиме заполненных состояний при всех выбранных значениях V выступы на полученных изображениях соответствуют положениям атомов $Ge^{\uparrow}$ и $Si^{\uparrow}$. Как уже было сказано, этот случай прост для интерпретации: наблюдаемый топографический рельеф на СТМ-изображениях примерно повторяет атомное строение поверхности.

Более сложная ситуация наблюдается в режиме незаполненных состояний ($V>0$). При малых значениях напряжений смещения (0.5 V) в случае Ge выступы на СТМ-изображениях соответствуют нижним атомам димеров. Эти особенности образуют зигзагообразные

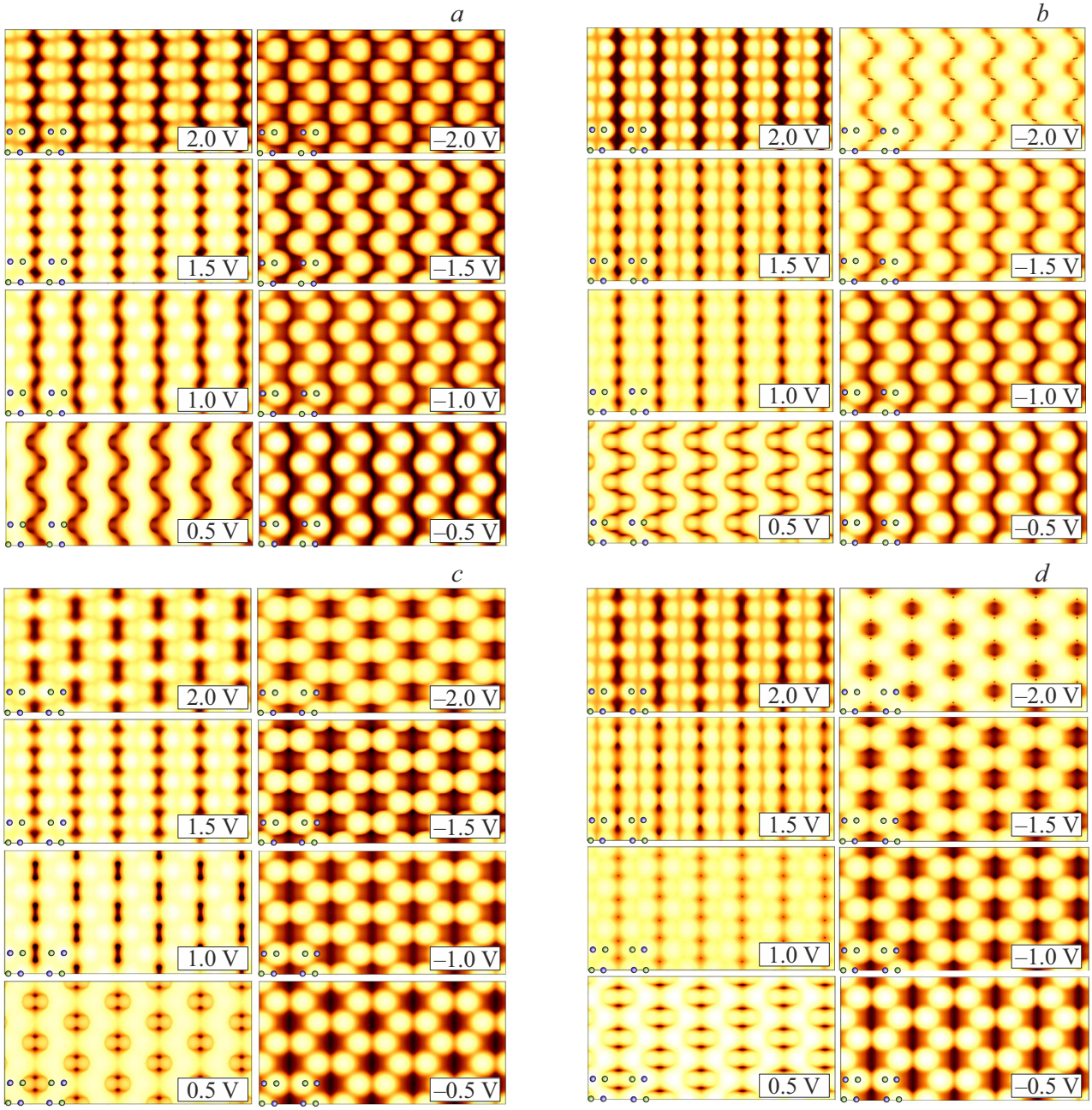


Рис. 4. СТМ-изображения, смоделированные для различных реконструкций: *a* — Ge(100)$p(2\times2)$, *b* — Si(100)$p(2\times2)$, *c* — Ge(100)$c(4\times2)$, *d* — Si(100)$c(4\times2)$. На вставках указаны величины напряжений смещения. Зелеными и синими кружками обозначены положения верхних и нижних атомов димеров.

цепочки. В то же время вблизи верхних атомов на изображениях наблюдаются впадины. Такая топография обусловлена тем, что π^*-состояния в области энергий $\leq 0.5\,\text{eV}$ сильно локализованы на атомах $\text{Ge}_\downarrow$ (рис. 2 и 3).

Для Si на изображении при $V = 0.5\,\text{V}$ также наблюдаются аналогичные зигзагообразные цепочки, обусловленные атомами $\text{Si}_\downarrow$. В дополнение к ним видны небольшие выступы округлой формы, которые расположены вблизи атомов $\text{Si}^\uparrow$ и отсутствуют в случае Ge. По-видимому, такие дополнительные особенности обусловлены вкладом в туннельный ток s-орбиталей, локализованных на атомах $\text{Si}^\uparrow$ (рис. 2).

При увеличении напряжения смещения до 1.0 V и нижние, и верхние атомы германиевых и кремниевых димеров дают сопоставимый вклад в СТМ-изображения, что приводит к появлению широких полос вместо зигзагообразных цепочек. Причиной этого является менее локализованный характер π^*-состояний при энергиях $\sim 1.0\,\text{eV}$ (разд. 4.2). Указанный эффект выражен силь-

нее в случае кремниевых реконструкций, для которых димеры имеют форму, напоминающую симметричную. Очевидно, что в данном случае более высокая плотность состояний на нижнем атоме димера компенсируется геометрическим положением верхнего атома — он приподнят над нижним. Аналогичные выводы можно сделать и для случая $V = 1.5\,\mathrm{V}$.

При $V = 2.0\,\mathrm{V}$ картина качественно меняется. Наиболее яркие особенности (выступы) на изображении соответствуют верхним атомам димеров. Это более рельефно проявляется в случае Ge. Нижним атомам димеров также соответствуют характерные особенности. Их яркость несколько меньше, чем в случае верхних атомов. Подобная трансформация СТМ-изображений обусловлена изменениями pDoS, о которых говорилось в разд. 4.2.

Таким образом, вид изображений, полученных для $V > 0$, качественно отличается от аналогичных при $V < 0$, а также существенно зависит от величины напряжения смещения. При малых значениях V основные особенности изображений в режиме незаполненных состояний обусловлены нижними атомами димеров и формируют непрерывные зигзагообразные цепочки. Верхние атомы димеров дают небольшой вклад в изображения (для Si) или не дают вовсе (для Ge). При высоких значениях V основные особенности изображений связаны с верхними атомами. В промежуточной же области значений напряжения смещения и тот, и другой атом димера дают примерно одинаковый вклад в туннельный ток, что приводит к появлению полос на изображении. Такая сложная зависимость топографии СТМ от электронной структуры означает, что для прямой визуализации атомного строения реконструкций Si(100) и Ge(100) более подходит режим заполненных состояний; в то же время в режиме незаполненных состояний наблюдаемый рельеф обусловлен, прежде всего, особенностями электронного строения данных поверхностей.

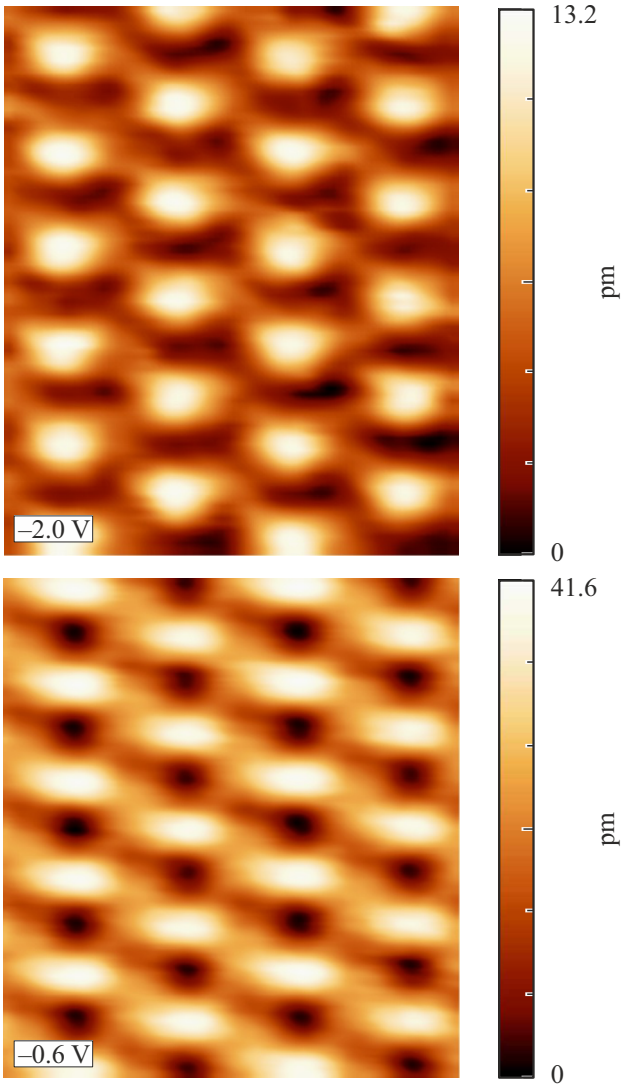


Рис. 5. СТМ-изображения поверхности Ge(100)$c(4 \times 2)$, полученные при $V = -0.6$ и $-2.0\,\mathrm{V}$. Туннельный ток 2.0 nA. Размер изображений 3.7×4.1 и $3.7 \times 4.5\,\mathrm{nm}$ соответственно.

4.3.2. Эксперимент

Как известно, использование обменно-корреляционного функционала PBE в расчетах электронной структуры приводит к систематическому занижению ширины запрещенной зоны [51]. Поэтому сравнение СТМ-изображений, полученных с помощью этого функционала, с экспериментальными изображениями при одних и тех же значениях напряжения смещения, является, строго говоря, некорректным. В настоящей работе целью эксперимента было выявить общие тенденции в эволюции картин СТМ при вариации напряжения смещения и сравнить их с аналогичными закономерностями, наблюдающимися при моделировании (разд. 4.3.1). Измерения проводились только для реконструкций на поверхности Ge(100). При взаимодействии этой поверхности с иглой СТМ, как сообщалось в литературе [20,21], возможен обратимый фазовый переход $c(4 \times 2) \leftrightarrow p(2 \times 2)$. Согласно указанным работам, направление стрелки в обозначении данного перехода зависит от типа носителей, инжектируемых в поверхность кристалла из иглы. При туннелировании электронов в незаполненные состояния структуры $c(4 \times 2)$ она переходит в $p(2 \times 2)$ и далее сохраняется до переключения полярности напряжения смещения V. После переключения полярности и туннелирования электронов из заполненных состояний $p(2 \times 2)$ в иглу, т. е. инжекции дырок в кристалл, указанная структура вновь переходит в $c(4 \times 2)$ и сохраняется неизменной до смены знака напряжения смещения и типа инжектируемых в образец носителей. Приведенная схема фазовых превращений полностью подтверждается в настоящем исследовании. Эти результаты означают, что анализ СТМ-изображений структуры $c(4 \times 2)$ может быть проведен только для случая $V < 0$, а структуры $p(2 \times 2)$ — при $V > 0$.

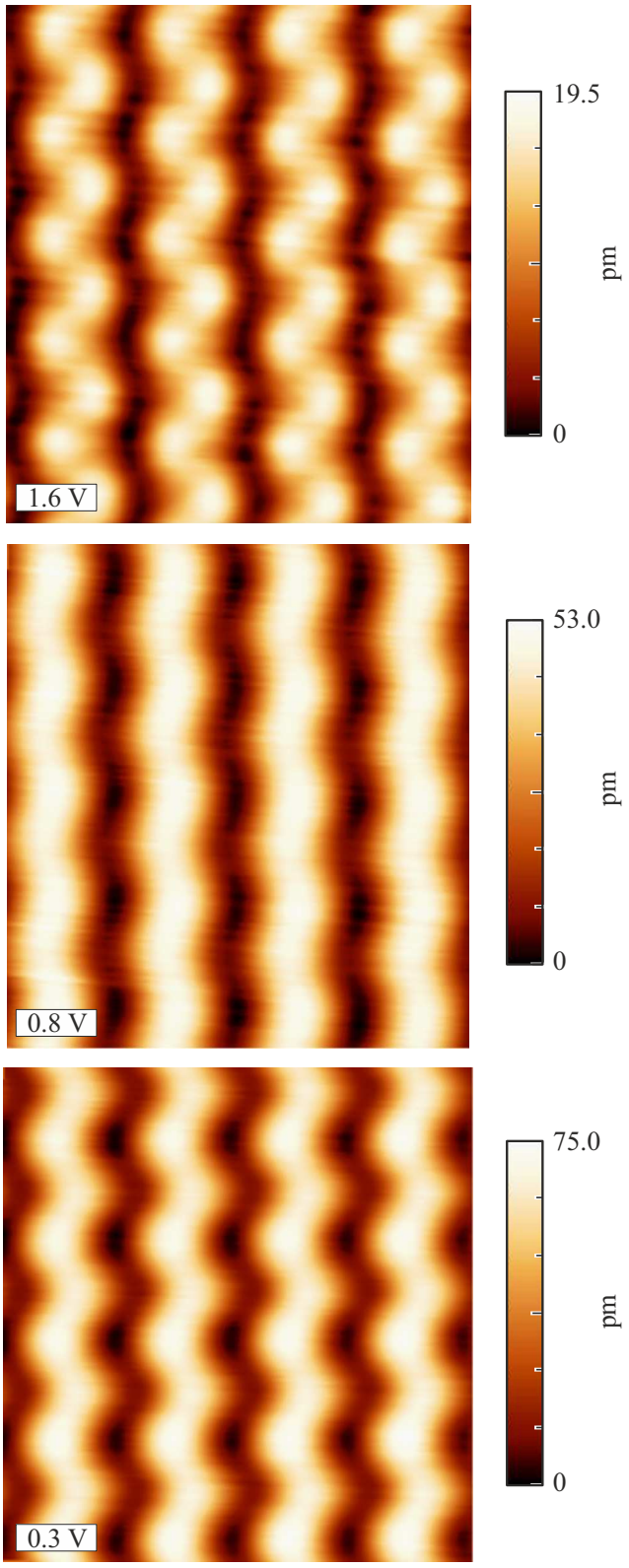


Рис. 6. СТМ-изображения поверхности Ge(100)$p(2\times 2)$, полученные при $V = 0.3, 0.8$ и 1.6 V. Туннельный ток 500 pA. Размер изображений 3.7×3.9, 3.5×3.8 и 3.7×4.1 nm соответственно.

На рис. 5 показаны экспериментальные СТМ-изображения, полученные при значениях $V = -0.6$ и -2.0 V. Как видно, топография реконструкции $c(4\times 2)$ на этих изображениях практически неизменна, что хорошо согласуется с результатами расчета (рис. 4). Сдвоенные выступы на рис. 5 обусловлены парами соседних атомов $Ge^{\uparrow}$ в структуре $c(4\times 2)$, как и в случае на рис. 4. Единственное отличие состоит в том, что на картинах, полученных в эксперименте, эти атомы не разрешаются. Одной из возможных причин такого отличия может быть неидеальная форма иглы, используемой в измерениях. Кроме того, заметную роль в эксперименте может играть туннелирование в боковом направлении (sideways tunneling) [29], которое не учитывается при моделировании СТМ-изображений. Можно предположить, что при регистрации картин на рис. 5 игла занимает максимальную высоту, когда она находится между соседними атомами $Ge^{\uparrow}$ и туннелирование происходит из них одновременно. Профили линий, полученные для выступов на рис. 5 (в статье не показаны), полностью подтверждают это предположение.

Отметим также, что величина контраста на изображениях рис. 5 зависит от значения напряжен V. При -0.6 V перепад высот составляет 41.6 pm, а при -2.0 V — 13.2 pm. Причину, почему меняется контраст на изображениях, легко понять, сравнивая плотности состояний на атомах $Ge^{\uparrow}$ и $Ge^{\downarrow}$ в реконструкции $c(4\times 2)$ при соответствующих энергиях на рис. 3.

В режиме незаполненных состояний при малых значениях напряжения смещения ($V = 0.3$ V) выступы на экспериментальном изображении (рис. 6) соответствуют атомам $Ge^{\downarrow}$ реконструкции $p(2\times 2)$. Эти выступы образуют зигзагообразные линии, что находится в полном согласии с расчетными данными на рис. 4.

При увеличении значения V до 0.8 V зигзагообразные цепочки на изображении структуры $p(2\times 2)$ плавно трансформируются в почти прямые линии (полосы). Это обусловлено возрастанием вклада в туннельный ток атомов $Ge^{\uparrow}$. Наконец, при 1.6 V на изображении вновь появляются характерные зигзагообразные цепочки. Максимумы туннельного тока при данных условиях соответствуют атомам $Ge^{\uparrow}$. Все указанные трансформации СТМ-картин согласуется с результатами DFT (рис. 4).

Обращает на себя внимание последовательное понижение контраста изображений при увеличении напряжения смещения на рис. 6: перепад высот при $V = 0.3$, 0.8 и 1.6 V составляет соответственно 75.0, 53.0 и 17.5 pm. Причины этого аналогичны причинам изменения контраста СТМ-изображений при $V < 0$, обсуждаемым выше.

Таким образом, проведенные эксперименты полностью подтверждают основные закономерности, которые были выявлены для СТМ-изображений, полученных для поверхности Ge(100) с помощью DFT (рис. 3 и 4).

5. Заключение

С помощью DFT-моделирования и измерений при 12 K исследованы общие закономерности влияния электронной структуры реконструкций $c(4\times 2)$ и $p(2\times 2)$

на Ge(100) и Si(100) на вид СТМ-изображений этих поверхностей в режиме постоянного туннельного тока. Показано, что топографический рельеф на них существенно зависит от напряжения смещения. При $V < 0$, т.е. в режиме заполненных состояний, СТМ-картины определяются, прежде всего, атомным строением поверхностей при всех напряжениях смещения от -2.0 до -0.5 V. Выступы на этих картинах соответствуют димерным атомам $Ge^{\uparrow}$ и $Si^{\uparrow}$, в частности, они обусловлены туннелированием из локализованных на этих атомах p_z-орбиталей. При $V > 0$ (режим незаполненных состояний) ситуация кардинально меняется: СТМ-картины отражают в значительной степени электронное, а не атомное строение реконструкций. При малых значениях $V \approx 0.3-0.5$ V основные выступы на них соответствуют нижним атомам димеров, образуя зигзагообразные цепочки, и обусловлены антисвязывающими π^*-состояниями, сильно локализованными на этих атомах. При увеличении напряжения смещения до $0.8-1.0$ V эти состояния становятся менее локализованными, и оба атома димеров дают приблизительно равный вклад в изображения, приводя к появлению полос. При дальнейшем росте напряжения (при $V > 1.5$ V) основные особенности на СТМ-изображениях соответствуют верхним атомам димеров, а туннельный ток определяется разными орбиталями на поверхности.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

[1] W. Mönch. Semiconductor Surfaces and Interfaces. In: Springer Series in Surface Surfaces, v. 26. Springer-Verlag, Berlin–Heidelberg (2001). 548 p.

[2] P. Laukkanen, M. Punkkinen, M. Kuzmin, K. Kokko, X. Liu, B. Radfar, V. Vähänissi, H. Savin, A. Tukiainen, T. Hakkarainen, J. Viheriälä, M. Guina. Rep. Prog. Phys. **87**, *4*, 044501 (2024).

[3] R.J. Hamers, R.M. Tromp, J.E. Demuth. Phys. Rev. B **34**, *8*, 5343 (1986).

[4] R.A. Wolkow. Phys. Rev. Lett. **68**, *17*, 2636 (1992).

[5] X.R. Qin, M.G. Lagally. Phys. Rev. B **59**, *11*, 7293 (1999).

[6] K. Hata, S. Yasuda, H. Shigekawa. Phys. Rev. B **60**, *11*, 8164 (1999).

[7] H. Okada, Y. Fujimoto, K. Endo, K. Hirose, Y. Mori. Phys. Rev. B **63**, *19*, 195324 (2001).

[8] K.S. Nakayama, M.M.G. Alemany, T. Sugano, K. Ohmori, H. Kwak, J.R. Chelikowsky, J.H. Weaver. Phys. Rev. B **73**, *3*, 035330 (2006).

[9] L. Perdigão, D. Deresmes, B. Grandidier, M. Dubois, C. Delerue, G. Allan, D. Stiévenard. Phys. Rev. Lett. **92**, *21*, 216101 (2004).

[10] K. Hata, S. Yoshida, H. Shigekawa. Phys. Rev. Lett. **89**, *28*, 286104 (2002).

[11] A. Dimoulas, P. Tsipas, A. Sotiropoulos, E.K. Evangelou. Appl. Phys. Lett. **89**, *25*, 252110 (2006).

[12] T. Nishimura, K. Kita, A. Toriumi. Appl. Phys. Lett. **91**, *12*, 123123 (2007).

[13] P. Tsipas, A. Dimoulas. Appl. Phys. Lett. **94**, *1*, 012114 (2009).

[14] M. Kuzmin, P. Laukkanen, J. Mäkelä, M. Tuominen, M. Yasir, J. Dahl, M.P.J. Punkkinen, K. Kokko. Phys. Rev. B **94**, *3*, 035421 (2016).

[15] H. Seo, R.C. Hatch, P. Ponath, M. Choi, A.B. Posadas, A.A. Demkov. Phys. Rev. B **89**, *11*, 115318 (2014).

[16] M.W. Radny, G.A. Shah, S.R. Schofield, P.V. Smith, N.J. Curson. Phys. Rev. Lett. **100**, *24*, 246807 (2008).

[17] B. Yan, C. Yam, A.L. da Rosa, T. Frauenheim. Phys. Rev. Lett. **103**, *18*, 189701 (2009).

[18] O. Gurlu, H.J.W. Zandvliet, B. Poelsema. Phys. Rev. Lett. **93**, *6*, 066101 (2004).

[19] J.A. Kubby, J.E. Griffith, R.S. Becker, J.S. Vickers. Phys. Rev. B **36**, *11*, 6079 (1987).

[20] Y. Takagi, K. Nakatsuji, Y. Yoshimoto, F. Komori. Phys. Rev. B **75**, *11*, 115304 (2007).

[21] Y. Takagi, Y. Yoshimoto, K. Nakatsuji, F. Komori. Surf. Sci. **559**, *1*, 1 (2004).

[22] U. Schwingenschlögl, C. Schuster. Chem. Phys. Lett. **449**, *1–3*, 126 (2007).

[23] K. Tomatsu, K. Nakatsuji, M. Yamada, F. Komori. Phys. Rev. Lett. **103**, *26*, 266102 (2009).

[24] L. Kipp, R. Manzke, M. Skibowski. Surf. Sci. **269–270**, 854 (1992).

[25] M. Skibowski, L. Kipp. J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom. **68**, 77 (1994).

[26] C. Jeon, C.C. Hwang, T.-H. Kang, K.-J. Kim, B. Kim, Y. Chung, C.Y. Park. Phys. Rev B **74**, *12*, 125407 (2006).

[27] P.E.J. Eriksson, M. Adell, K. Sakamoto, R.I.G. Uhrberg. Phys. Rev. B **77**, *8*, 085406 (2008).

[28] X.-Y. Ren, H.-J. Kim, C.-Y. Niu, Y. Jia, J.-H. Cho. Sci. Rep. **6**, 27868 (2016).

[29] M. Kuzmin, J. Mäkelä, J.-P. Lehtiö, M. Yasir, M. Tuominen, Z.S.J. Rad, A. Lahti, M.P.J. Punkkinen, P. Laukkanen, K. Kokko. Phys. Rev. B **98**, *15*, 155322 (2018).

[30] J. Tonhäuser, N. Kubetschek, U. Kürpick, R. Matzdorf. Phys. Rev. B **106**, *11*, 115404 (2022).

[31] E.V.S. Hofmann, E. Scalise, F. Montalenti, T.J.Z. Stock, S.R. Schofield, G. Capellini, L. Miglio, N.J. Curson, W.M. Klesse. Appl. Surf. Sci. **561**, 149961 (2021).

[32] W. Koczorowski, T. Grzela, M.W. Radny, S.R. Schofield, G. Capellini, R. Czajka, T. Schroeder, N.J. Curson. Nanotechnol. **26**, *15*, 155701 (2015).

[33] K. Noatschk, E.V.S. Hofmann, J. Dabrowski, N.J. Curson, T. Schroeder, W.M. Klesse, G. Seibold. Surf. Sci. **713**, 121912 (2021).

[34] P.T. Różański, G.W. Bryant, M. Zieliński. Sci. Rep. **14**, 18062 (2024).

[35] P. Giannozzi, S. Baroni, N. Bonini, M. Calandra, R. Car, C. Cavazzoni, D. Ceresoli, G.L. Chiarotti, M. Cococcioni, I. Dabo, A. Dal Corso, S. de Gironcoli, S. Fabris, G. Fratesi, R. Gebauer, U. Gerstmann, C. Gougoussis, A. Kokalj, M. Lazzeri, L. Martin-Samos, N. Marzari, F. Mauri, R. Mazzarello, S. Paolini, A. Pasquarello, L. Paulatto, C. Sbraccia, S. Scandolo, G. Sclauzero, A.P. Seitsonen, A. Smogunov, P. Umari, R.M. Wentzcovitch. J. Phys.: Condens. Matter **21**, *39*, 395502 (2009).

[36] J.P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof. Phys. Rev. Lett. **77**, *18*, 3865 (1996).

[37] D. Vanderbilt. Phys. Rev. B **41**, *11*, 7892(R) (1990).
[38] J. Nocedal, S.J. Wright. Numerical Optimization. In: Springer Series in Operations Research and Financial Engineering. Springer-Verlag, New York (2006). 664 p.
[39] J. Tersoff, D. Hamann. Phys. Rev. B **31**, *2*, 805 (1985).
[40] A. Otero-de-la-Roza, M.A. Blanco, A.M. Pendás, V. Luaña. Comput. Phys. Commun. **180**, *1*, 157 (2009).
[41] A. Otero-de-la-Roza, E.R. Johnson, V. Luaña. Comput. Phys. Commun. **185**, *3*, 1007 (2014).
[42] I. Horcas, R. Fernández, J.M. Gómez-Rodríguez, J. Cochero, J. Gómez-Herrero, A.M. Baro. Rev. Scient. Instrum. **78**, *1*, 013705 (2007).
[43] O.V. Yazyev, A. Pasquarello. Phys. Rev. Lett. **96**, *15*, 157601 (2006).
[44] J.E. Northrup. Phys. Rev. B **47**, *15*, 10032(R) (1993).
[45] J. Nakamura, A. Natori. Jpn. J. Appl. Phys. **44**, *7S*, 5413 (2005).
[46] Y. Yoshimoto, Y. Nakamura, H. Kawai, M. Tsukada, M. Nakayama. Phys. Rev. B **61**, *3*, 1965 (2000).
[47] L. Spiess, A.J. Freeman, P. Soukiassian. Phys. Rev. B **50**, *4*, 2249 (1994).
[48] P.E.J. Eriksson, R.I.G. Uhrberg. Phys. Rev. B **81**, *12*, 125443 (2010).
[49] K. Seino, W.G. Schmidt, F. Bechstedt. Phys. Rev. Lett. **93**, *3*, 036101 (2004).
[50] H.J.W. Zandvliet, A. van Houselt. Annu. Rev. Anal. Chem. **2**, *1*, 37 (2009).
[51] P. Borlido, T. Aull, A.W. Huran, F. Tran, M.A.L. Marques, S. Botti. J. Chem. Theory Comput. **15**, *9*, 5069 (2019).

Редактор Е.В. Толстякова