

08,10

Формирование атомной и электронной структуры двумерных слоев Si на CrSi₂(0001)

© Н.И. Плюснин¹, В.Г. Заводинский², О.А. Горкуша²

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 CrSi₂(0001). Рост осуществляли, путем порционного нанесения на замороженную при 0 К поверхность CrSi₂(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 CrSi₂(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 CrSi₂(0001) формируется спектр плотности электронных состояний, характерный для металла.

Ключевые слова: двумерные фазы, твердофазные смачивающие слои, упаковка атомов, фазовый переход, квантово-механическое моделирование, Si, CrSi₂(0001).

DOI: 10.61011/FTT.2025.05.60755.70-25

1. Введение

На начальной стадии роста, координация атомов в неизоструктурной подложке CrSi₂ (параметр гексагональной решетки CrSi₂ около: $a = 4.428 \text{ \AA}$ и $c = 6.369 \text{ \AA}$) может влиять на координацию атомов в пленке Si (параметр кубической решетки около: $a = 5.431 \text{ \AA}$). Изучение этого явления представляет интерес с точки зрения развития теории и технологии роста тонких пленок.

В эксперименте двумерные слои Si на CrSi₂(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 CrSi₂ находит применение в микроэлектронных, оптоэлектронных, фотогальвани-

ческих 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 CrSi₂, выращенной на подложке Si, может найти применение в соответствующих приборах.

Работ по эпитаксии CrSi₂ на подложке кремния достаточно много (см., например [7–11]). Но работ по росту Si на монокристалле CrSi₂ или эпитаксиальных пленках CrSi₂, за исключением работ [1,3], нами не найдено. Что же касается работ по моделированию роста ТСС Si на CrSi₂, 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 CrSi₂(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 CrSi₂(0001).

В настоящей статье, проведено квантово-механическое моделирование, которое позволило исследовать изменение структуры поверхностных фаз и ТСС Si на $\text{CrSi}_2(0001)$ 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 $\text{CrSi}_2(0001)$ (см. ниже) в условиях заморозки ($T = 0\text{ K}$). 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

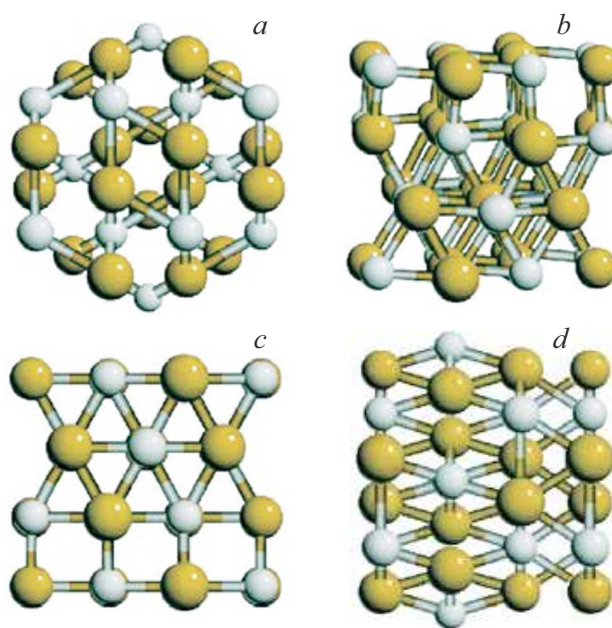


Рис. 1. Виды на различные грани ($a-d$) решетки CrSi_2 [21]: a — грань (0001). Атомы Si и Cr — коричневые и, соответственно, светло-серые шарики (по мере удаления на задний план, атомы имеют меньший размер).

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 $\text{CrSi}_2(0001)$ 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 $\text{CrSi}_2(0001)$ 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: $a(X) = 9.875\text{ \AA}$, $b(Y) = 6.899\text{ \AA}$. При этом, вертикальные размеры определяются ее толщиной или n — количеством ML: $c(Z) = 5.73n\text{ \AA}$.

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 $\text{CrSi}_2(0001)$, двухсторонний „слэб“ с ростом Si — сверху и снизу. Двухсторонний „слэб“

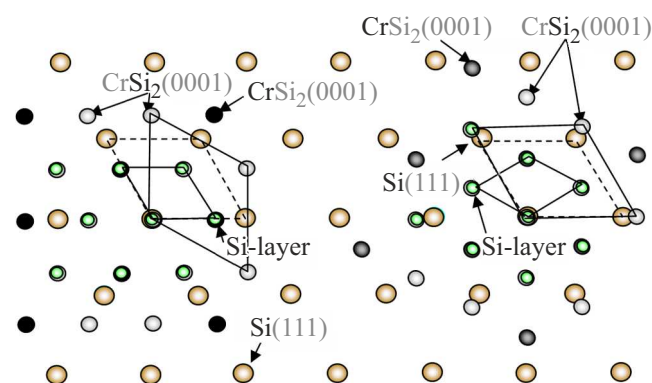


Рис. 2. Гипотетическое расположение атомов в двумерном слое кремния, Si-layer (маленькие шарики), поверх атомов CrSi₂(0001) (черные шарики — Cr и серые шарики среднего размера — Si), для решетки CrSi₂(0001), повернутой относительно Si(111) (большие шарики) на 30° (слева) и 0° (справа).

позволил избежать необходимости искусственной фиксации нижних слоев CrSi₂(0001). Кроме того, две стороны „слэба“ усилили влияние поверхностных слоев CrSi₂(0001) на рост Si.

При расчете одностороннего „слэба“, суперъячейку CrSi₂ составляли из 6 ML CrSi₂. 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 CrSi₂ составляли из двух половинок по 3 или 4 ML CrSi₂. 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 CrSi₂(0001) или, соответственно, — ABC + AB, как в верхних 4-х слоях CrSi₂(0001).

Методика осаждения Si была такова. Первый слой-конденсат мы располагали центрировано по отношению к верхним атомам Cr в CrSi₂(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 $\delta E_A = E_A/N_{Si} = (E - E_0)/N_{Si}$. Где E и E_0 — энергия E_A системы Si–CrSi₂ 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 CrSi₂(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 TCC Si.

3. Результаты и их обсуждение

3.1. Сверхструктурное сопряжение 2D Si с CrSi₂(0001)

На рис. 2 показано гипотетическое идеальное сверхструктурное сопряжение 2D решеток, соответствующих плотным монослоям Si и CrSi₂(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 CrSi₂ — около 1.13 [8,11]. Но элементарная ячейка 2D решетки плотного TCC Si по площади меньше ячейки неплотной ОФ Si в 9/4 раза.

Если продолжить идеально-сопрягаемые решетки 2D Si и CrSi₂(0001), которые показаны на рис. 2, и наложить их друг на друга, то получим, для обоих вышеупомянутых углов, совпадающие узлы решеток, которые дадут сверхструктуру CrSi₂(0001) $3\sqrt{3} \times 3\sqrt{3}$ –2DSi. При этом, для углов между CrSi₂(0001) и Si(111) 30 и 0° мы получим теоретические сверхструктуры совпадения узлов: Si(111) 2×2 –CrSi₂R30° и, соответственно, Si(111) $6/7 \times 6/7$ –CrSi₂R0°.

Эти теоретические структуры соответствуют картинкам дифракции медленных электронов (ДМЭ), полученным в работах [2,3]. Мы предполагаем, что, в картина ДМЭ $6/7 \times 6/7$, в случае ориентации R0°, относилось к индуцируемой подложкой Si(111) периодичности самого CrSi₂(0001), а картина ДМЭ $3\sqrt{3} \times 3\sqrt{3}$, в случае ориентации R30°, — к периодичности самого двумерного метастабильного TCC Si на CrSi₂(0001). Тем не менее, в случае ориентации R0°, картина ДМЭ $3\sqrt{3} \times 3\sqrt{3}$ 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 CrSi₂(0001). Осаждение проводили сначала с шагом 1/3 ат./ML, а затем — с шагом 1/6 ат./ML. На рис. 3, а–d показаны фронтальный (слева) и боковой (справа) виды на ячейку Si/CrSi₂(0001)/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 CrSi₂(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 разрыхленных атомных рядов, при

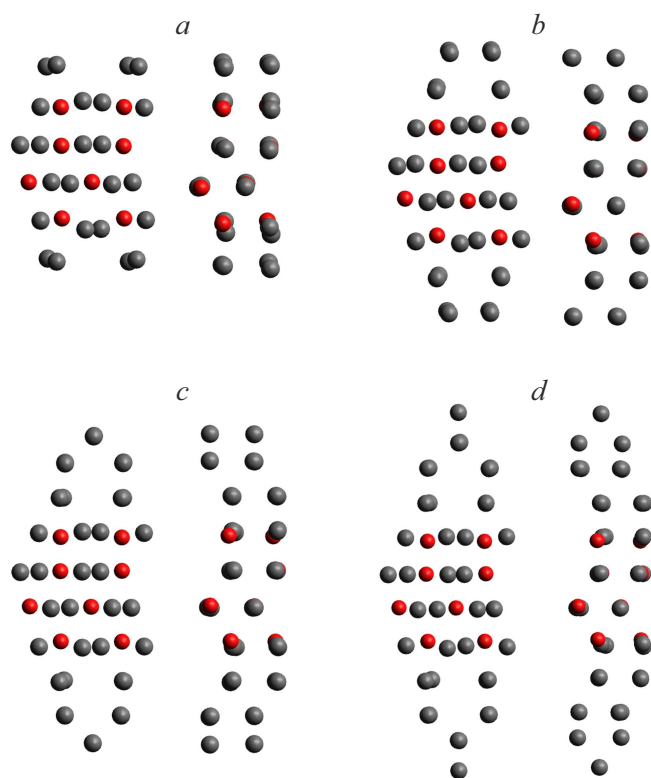


Рис. 3. Фронтальный и боковой вид Si/4 ML CrSi₂(0001)/Si при толщине Si: *a* — 2/3 ML, *b* — 4/3 ML, *c* — 5/3 ML, *d* — 11/6 ML.

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/CrSi₂(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 а.е.

Если учесть, что поверхность CrSi₂(0001) имеет обрывные связи и не самая „выгодная“, то можно принять в качестве „опорной“ самую минимальную энергию системы -4.000 а.е. Соответственно, приращение энергии (δE_A) по отношению к „опорной“, составит для указанного выше ряда толщин в а.е. (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 из 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 CrSi₂) TCC Si.

3.3. Рост плотного конденсата

На рис. 4, *a–c* и рис. 4, *e* показаны фронтальный (слева) и боковой (справа) виды на Si/CrSi₂(0001), при толщине CrSi₂ 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/CrSi₂(0001). Где светло-коричневые и черные шарики — первый (верхний) и, соответственно, лежащий под ним второй слой 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 TCC 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

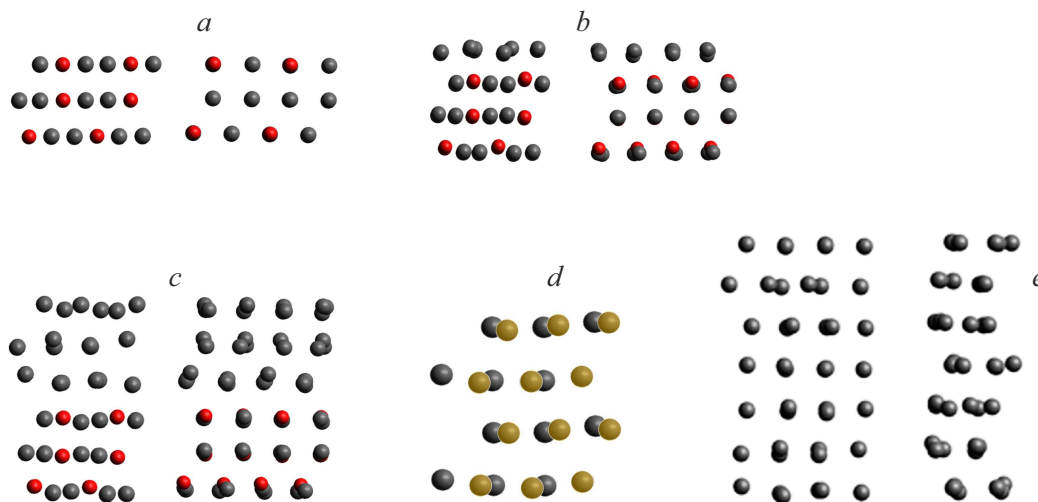


Рис. 4. Фронтальный (слева) и боковой (справа) виды (*a–c* и *e*) и вид сверху (*d*) на Si/3 ML CrSi₂(0001) при толщине Si: 0 ML (*a*), 1 ML (*b*), 3 ML (*c*, *d*) и 7 ML (*e*). Где (*a*) — суперъячейка до релаксации, а светло-коричневые шарики на (*d*) — верхний слой Si.

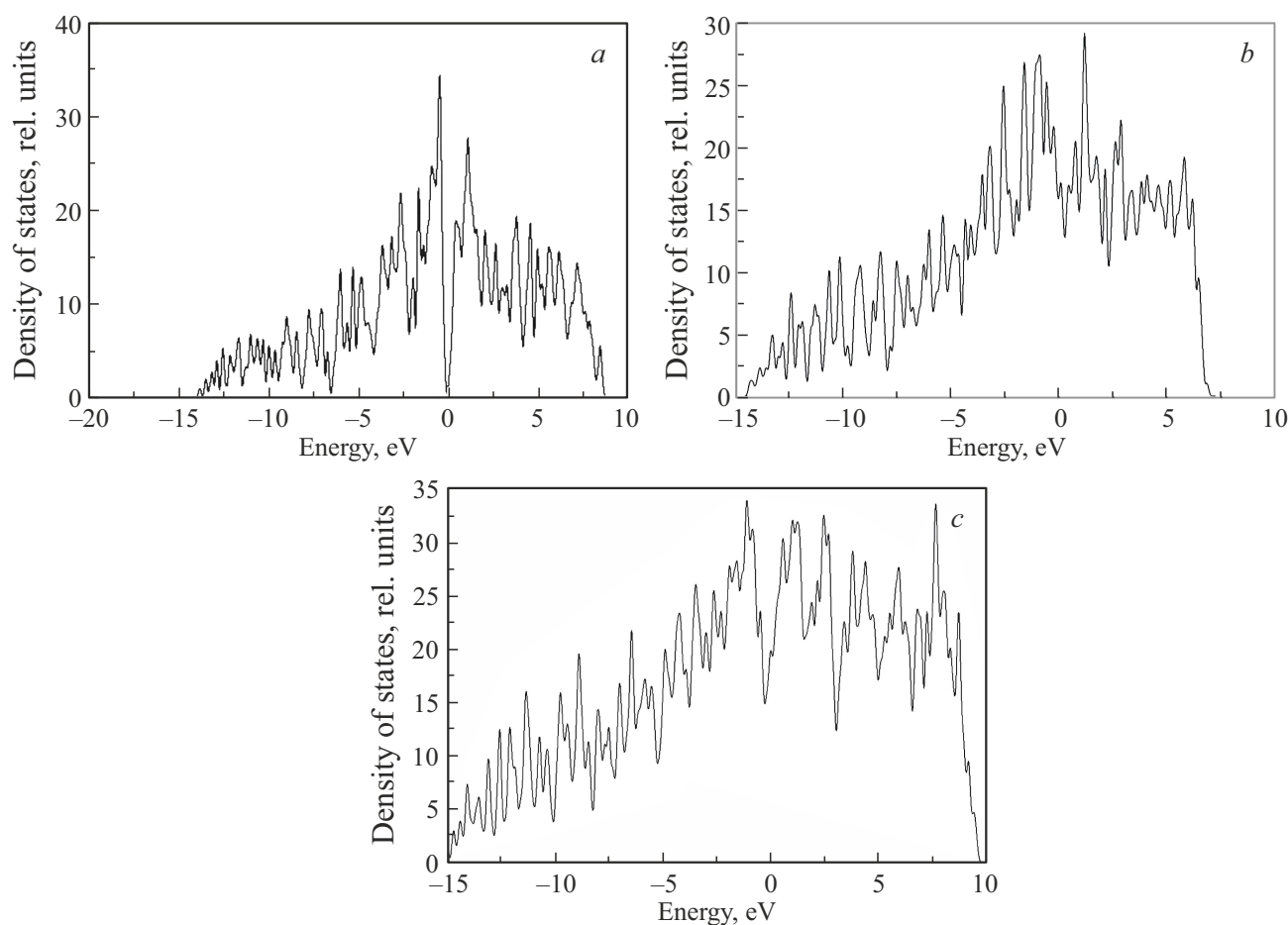


Рис. 5. Плотность электронных состояний в подложке CrSi_2 (a) и в гетероструктурах $\text{Si}/\text{CrSi}_2(0001)$ (см. рис. 4) с толщиной Si 1 ML (b) и 3 ML (c).

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 TCC Si оказывается слабо стабилизирован подложкой (при 7 ML это происходит возможно из-за того, что толщина TCC больше, чем толщина подложки).

На рис. 5 показаны плотности электронных состояний $\text{CrSi}_2(0001)$ и односторонних гетероструктур $\text{Si}/\text{CrSi}_2(0001)$ с толщиной Si 1 ML и 3 ML.

Из этих усредненных кривых, видно, что провал на уровне Ферми на спектре подложки $\text{CrSi}_2(0001)$ 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 $\text{CrSi}_2(0001)$, при 1 ML, двумерного, а при 3 ML уже некоторого двумерного/псевдо-объемного металлического TCC Si.

При двухстороннем росте Si на суперрешке $\text{CrSi}_2(0001)$, 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 TCC с упаковкой ABC. Это говорит о том, что влияние более глубоких, чем 3 ML, слоев подложки все-таки нельзя совсем исключать.

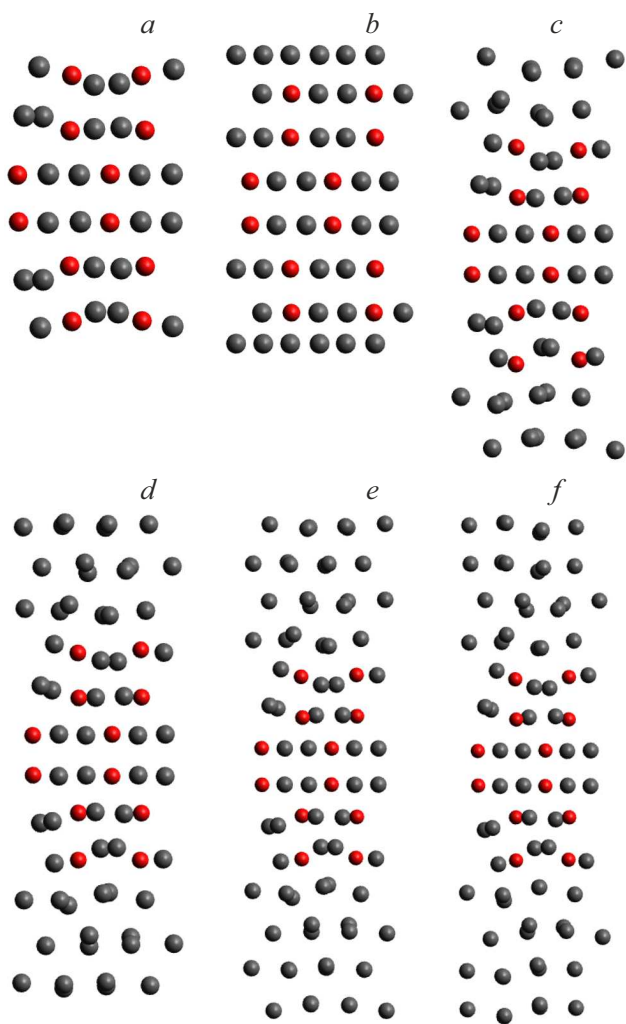


Рис. 6. Фронтальный вид на Si/6 ML CrSi₂(0001)/Si с толщиной Si: *a* — 0 ML, *b* — 1 ML, *c* — 2 ML, *d* — 3 ML, *e* — 4 ML, *f* — 5 ML.

Тем не менее, как видно из рис. 7 и сравнения с рис. 6, упаковка ABC, при толщине подложки CrSi₂(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 CrSi₂(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 CrSi₂ 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/CrSi₂(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 , а.е.	δE_A , а.е. (eV)	E_A , а.е.	ΔE_A , а.е. (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/CrSi₂(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 , а.е.	δE_A , а.е. (eV)	E_A , а.е.	ΔE_A , а.е. (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)	—	—

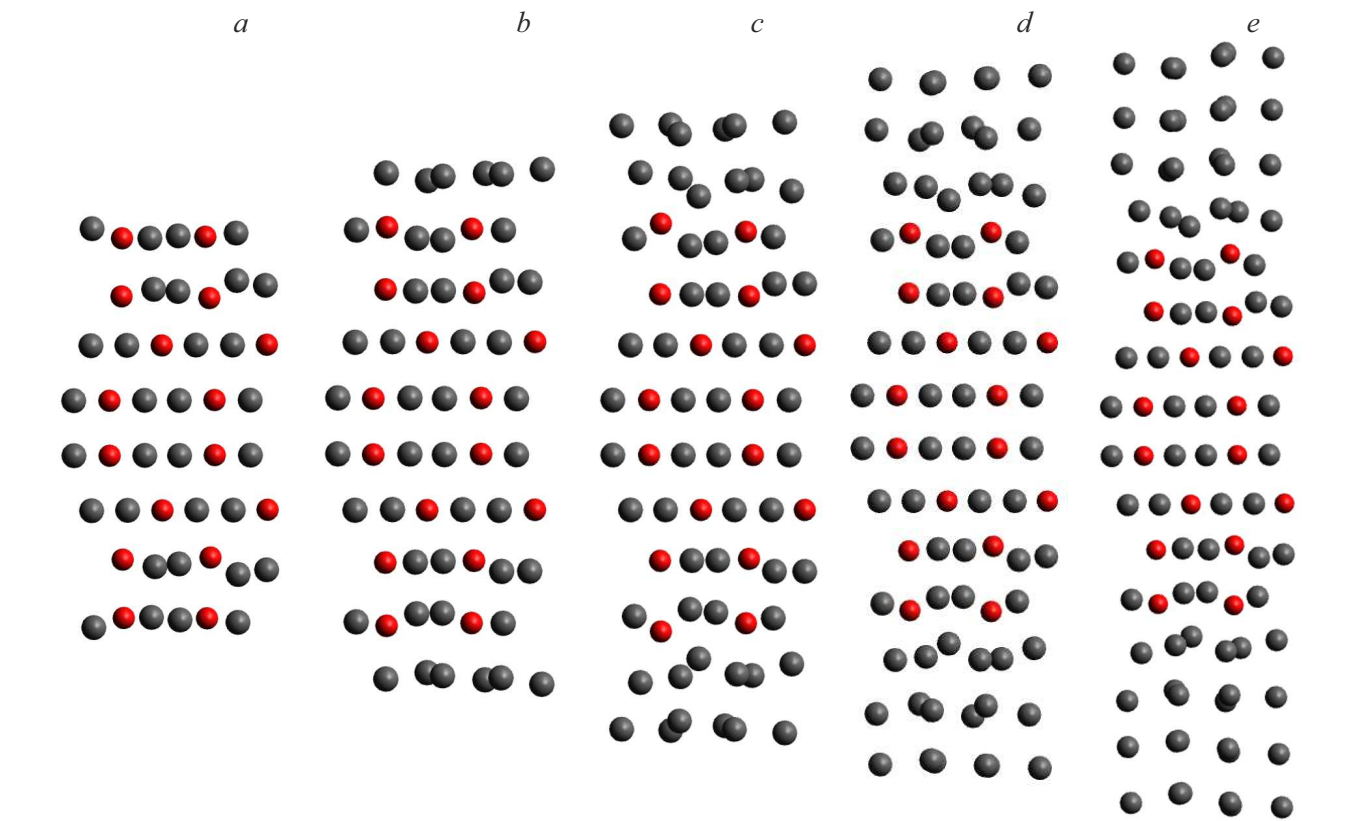


Рис. 7. Фронтальный вид на структуру Si/CrSi₂(0001)/Si при толщинах CrSi₂ 8 ML и Si: *a* — 0 ML, *b* — 1 ML, *c* — 2 ML, *d* — 3 ML, *e* — 4 ML.

Таблица 3. Энергия на атом (E_A) и ее приращение (δE_A) по отношению к $E_A = -4.0000$ для структуры Si-ABC/CrSi₂(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 , а.е.	δE_A , а.е. (eV)
2	1	-3.9837	0.0163 (0.44)
3	1	-3.9814	0.0186 (0.51)

В табл. 2, приведены расчеты для суперъячейки CrSi₂ с толщиной 8 ML. Сопоставление с табл. 1 показывает, что новая суперъячейка CrSi₂, повышает энергию и приращение энергии системы, что свидетельствует о понижении ее стабильности. Кроме того, при толщине суперъячейки CrSi₂ 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 CrSi₂(0001) (см. рис. 1). Поэтому, рост, при толщине суперъячейки CrSi₂ 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/CrSi₂(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 CrSi₂(0001) в виде транслированной вдоль плоскости суперъячейки Si/CrSi₂(0001) или Si/CrSi₂(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, растёт 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](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](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 CrSi₂ (C40) Structure. Интернет ресурс — <https://www.atomic-scale-physics.de/lattice/struk/c40.html>

Редактор А.Н. Смирнов