

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК  
ДАЛЬНЕВОСТОЧНОЕ ОТДЕЛЕНИЕ  
ИНСТИТУТ АВТОМАТИКИ И ПРОЦЕССОВ УПРАВЛЕНИЯ

На правах рукописи

Тупчая Александра Юрьевна

**Двумерные соединения Tl-Sn, Tl-Pb и Au-Al на поверхности  
Si(111)**

Специальность 01.04.10 – физика полупроводников

Диссертации на соискание ученой степени  
кандидата физико–математических наук

Научный руководитель:  
Член-корреспондент РАН  
Саранин А.А.

Владивосток

2018

# Содержание

<b>Введение</b>	<b>4</b>
<b>1 Обзор литературы</b>	<b>10</b>
1.1 Введение . . . . .	10
1.2 Реконструкция поверхности и двумерная кристаллография . . . . .	10
1.3 Структура и свойства поверхности кремния Si(111) и некоторых рекон- струкций . . . . .	14
1.3.1 Поверхность Si(111)7×7 . . . . .	14
1.3.2 Реконструкции в системе Au/Si(111) . . . . .	16
1.3.3 Реконструкции в системе Tl/Si(111) . . . . .	22
1.4 Эффект Рашбы-Бычкова . . . . .	26
1.5 Выводы . . . . .	30
<b>2 Методы исследования поверхности и подготовка эксперимента</b>	<b>31</b>
2.1 Введение . . . . .	31
2.2 Методы исследования поверхности . . . . .	31
2.2.1 Сканирующая туннельная микроскопия . . . . .	31
2.2.2 Дифракция медленных электронов . . . . .	37
2.2.3 Фотоэлектронная спектроскопия . . . . .	39
2.3 Экспериментальная установка и условия проведения экспериментов . . . .	46
2.4 Выводы . . . . .	48

<b>3</b>	<b>Двумерные системы Tl-Sn, Tl-Pb и Au-Al на поверхности Si(111)</b>	<b>49</b>
3.1	Введение . . . . .	49
3.2	Структурные и электронные свойства системы (Tl, Sn)/Si(111) . . . . .	49
3.3	Структурные и электронные свойства системы (Tl, Pb)/Si(111) . . . . .	60
3.3.1	Реконструкция $\text{Si}(111)\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -(Tl, Pb) . . . . .	60
3.3.2	Реконструкция $\text{Si}(111)4 \times 4$ -(Tl, Pb) . . . . .	68
3.4	Структурные и электронные свойства системы (Au, Al)/Si(111) . . . . .	75
3.5	Выводы . . . . .	88
	<b>Общие выводы</b>	<b>89</b>
	<b>Примечание</b>	<b>91</b>
	<b>Список литературы</b>	<b>92</b>

# Введение

**Актуальность работы** Интерес к созданию двумерных поверхностных сплавов и бинарных систем на поверхности твердых тел вызван рядом уникальных эффектов, возникающих только в поверхностных слоях и двумерном электронном газе, таких как расщепление электронных состояний по спину (эффект Рашбы-Бычкова) [1, 2], 2D сверхпроводимость [3–8], квантовый эффект Холла [9–11] и т.д.

Особый интерес вызывает эффект Рашбы-Бычкова, обусловленный снятием вырождения электронных состояний по спину в двумерном электронном газе без приложения внешнего магнитного поля. Использование этого эффекта является одним из возможных подходов для реализации полупроводниковой спиновой электроники (спинтроники).

Экспериментально эффект Рашбы впервые наблюдался на поверхности монокристаллического золота [12], после этого было обнаружено и исследовано достаточно большое количество систем с этим эффектом. Так, например, эффект Рашбы наблюдался на поверхностях монокристаллических металлов (Au(111) [12, 13], Bi(111) [14, 15], модифицированных поверхностях металлов (Bi/Ag(111) [16, 17])) и полупроводников (Bi/Si(111) [18, 19], Bi/Ge(111) [20], Tl/Si(111) [21, 22], Pt/Si(110) [23]). В последнее время был обнаружен ряд низкоразмерных структур на основе элементов с сильным спин-орбитальным взаимодействием, формирующихся на поверхности металлов и полупроводников и имеющих спиновое расщепление поверхностных состояний с расщеплением по энергии достигающим 0,2 эВ [24], что достаточно для практического использования эффекта Рашбы в спинтронике.

Большинство поверхностных реконструкций, которые образуют элементы с боль-



шим спин-орбитальным взаимодействием на поверхности кремния, естественно, имеют спин-зависимое расщепление поверхностных состояний, однако, эти состояния не пересекают уровень Ферми, т. е. не участвуют в транспорте. Основная причина этого состоит в том, что при наличии только одного элемента (металла), характер его взаимодействия с поверхностью не допускает увеличения поверхностной плотности атомов адсорбата до такой величины, при которой происходит сильное перекрытие волновых функций валентных электронов и формирование металлической связи. Создание двумерных соединений и сплавов (т. е. многокомпонентных систем) на поверхности позволяет преодолеть это ограничение. Такой подход уже зарекомендовал себя как эффективный способ создания хорошо упорядоченных двумерных металлических сплавов [25] и двумерных металлических соединений с эффектом Рашбы [26]. Все вышесказанное определило цели и задачи данной работы.

**Целью диссертационной работы** является создание двумерных систем с эффектом Рашбы-Бычкова на поверхности Si(111) на основе атомов тяжелых металлов (Tl, Sn, Pb, Au) и изучение их структуры и электронных свойств.

**Для достижения поставленной цели предполагалось решить следующие задачи:**

1. Провести экспериментальные исследования процессов формирования, структуры и электронных свойств реконструкций, формирующихся на базе системы Si(111)1×1-Tl при адсорбции атомов Sn и Pb.
2. Провести экспериментальные исследования процессов формирования, структуры и электронных свойств реконструкций, формирующихся на базе системы Si(111) $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -Au при адсорбции атомов Al.

**Научная новизна работы.** В работе получены новые экспериментальные результаты, основными из которых являются следующие:

1. Получен ряд новых двумерных многокомпонентных соединений на поверхности кремния:  $\text{Si}(111)\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -(Tl, Sn),  $\text{Si}(111)\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -(Tl, Pb),  $\text{Si}(111)4 \times 4$ -(Tl, Pb),  $\text{Si}(111)2 \times 2$ -(Au, Al). Изучены атомные структуры данных соединений; предложены структурные модели.
2. Исследованы электронные структуры этих соединений, показано, что все они обладают расщепленными по спину металлическими поверхностными состояниями. Величина расщепления по спину изменяется для различных соединений в пределах от 17 до 250 мэВ по энергии и от 0,008 до 0,096  $\text{\AA}^{-1}$  по волновому вектору.
3. На поверхности кремния получено соединение, которое сочетает гигантское спиновое расщепление по типу Рашбы-Бычкова и 2D сверхпроводимость ( $T_c = 2,25$  К).
4. Структура  $2 \times 2$ -(Au, Al) демонстрирует необычную спиновую текстуру, где спины преимущественно ориентированы в направлении атомных цепочек золота, что приводит к значительной анизотропии спиновой текстуры.

**Практическая ценность работы** Получен ряд новых двумерных соединений на кремнии, которые удовлетворяют основным критериям полупроводниковой спинтроники (металлические спин-расщепленные поверхностные состояния в запрещенной зоне объема с существенным значением расщепления по энергии), что имеет практическое значение для дальнейших работ по созданию перспективных устройств спинтроники. Впервые на поверхности кремния получена структура с состоянием типа «устойчивая спиновая спираль» (persistent spin helix), особенностью которого является подавление релаксации поляризованных спинов при рассеянии носителей заряда, что важно с точки зрения спинового транспорта.

**Достоверность полученных результатов** Обоснованность и достоверность результатов обеспечивается использованием современных методов исследования поверхности, таких как сканирующая туннельная микроскопия (СТМ), дифракция медленных электронов (ДМЭ), ультрафиолетовая фотоэлектронная спектроскопия с угловым разрешением (УФЭСУР) и подтверждается численными расчетами с помощью метода функционала плотности и метода расчетов полной энергии атомной структуры.

**На защиту выносятся следующие основные положения:**

1. Адсорбция атомов Sn на поверхность Si(111)1×1-Tl приводит к формированию двумерного металлического сплава Si(111) $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -(Tl, Sn). Полученный сплав представляет собой сэндвичеподобную структуру Tl/Sn/Si(111) и содержит три атома Tl и три атома Sn на элементарную ячейку  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ . Структура обладает металлическими свойствами и ее зоны поверхностных состояний расщеплены по спину с  $\Delta k_{\parallel} = 0,037 \pm 0,001 \text{ \AA}^{-1}$ ;  $\Delta E_F = 167 \pm 3 \text{ мэВ}$ .
2. В системе Pb/Si(111)-Tl существуют стабильные бинарные реконструкции -  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$  и 4×4 - с суммарным покрытием металлов выше 1 МС в пределах одного атомного слоя. Обе реконструкции образованы сотообразной сеткой тримеров Tl и внедренных в ее ячейки либо отдельных атомов Pb, в случае реконструкции Si(111) $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -(Tl, Pb), либо 12-атомных массивов Pb, в случае реконструкции Si(111)4×4-(Tl, Pb). Обе реконструкции демонстрируют металлическое поведение и спиновое расщепление поверхностных состояний.
3. Двумерное соединение TlPb/Si(111) с периодом решетки  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$  характеризуется высоким значением константы электрон-фононного взаимодействия  $\lambda = 0,6 - 1,6$  для разных поверхностных состояний.
4. Реконструкция 2×2-(Au, Al) состоит из зигзагообразных цепочек Au, связанных атомами Al. Концентрация Al может меняться без изменений базового атомного устройства. Увеличение концентрации атомов Al приводит к изменению по-

ложения уровня Ферми. Квазиодномерная природа этой реконструкции находит отражение в анизотропной спиновой текстуре.

**Апробация результатов работы** Основные результаты работы докладывались на международных, российских и региональных конференциях, в том числе на:

Седьмом международном симпозиуме по науке о поверхности ISSS-7 (г. Мацуи, Япония, 2014 г.); Первом Азиатско-Тихоокеанском симпозиуме по поверхности твердых тел APSSS-1 (г. Владивосток, Россия, 2014 г.); Первой Азиатско-Тихоокеанская школе молодых ученых по поверхности твердых тел APSSS-1 Школа молодых ученых (г. Владивосток, Россия, 2014 г.); Пятнадцатой международной конференции по формированию полупроводниковых интерфейсов ICFSI-15, (г. Хиросима, Япония, 2015 г.); XII Российской конференции по физике полупроводников «Полупроводники-2015» (г. Ершово, Россия, 2015 г.); Международном симпозиуме «Нанofизика и наноэлектроника» (г. Нижний Новгород, Россия, 2015, 2016 гг.); Международной конференции «Спиновая физика, спиновая химия и спиновые технологии» SPCT-2015 (г. Санкт-Петербург, Россия, 2015 г.); Двадцатом Международном Вакуумном Конгрессе IVC-20 (г. Пусан, Корея, 2016 г.); Втором Азиатско-Тихоокеанском симпозиуме по поверхности твердых тел APSSS-2 (г. Тайпей, Тайвань, 2016 г.).

**Публикации.** По теме диссертации опубликовано 15 работ, в том числе 5 статей в рецензируемых журналах, индексируемых в базах данных РИНЦ, Web of Science и Scopus.

**Личный вклад автора** заключается в подготовке и проведении экспериментов, и интерпретации полученных результатов. Все экспериментальные результаты, представленные в работе, получены соискателем лично, либо в соавторстве при его непосредственном участии. Все численные расчеты, представленные в работе, выполнены соавторами Чукуровым Е.Н., Алексеевым А.А., Хсинг Ч.Р., Вэйем Ч.М., Еремеевым С.В., Михалюком А.Н.

**Структура и объем диссертации** Диссертация состоит из введения, трех глав, заключения и списка цитируемой литературы. Общий объем диссертации составляет 109 страниц, включая 63 рисунка и список литературы из 140 наименований.

# Глава 1. Обзор литературы

## 1.1 Введение

В данной главе кратко рассмотрены известные литературные данные об атомной и электронной структуре поверхности Si(111), модифицированной атомами Au и Tl. Эти системы будут использоваться в качестве исходных для получения исследуемых в диссертационной работе двухкомпонентных структур. Кроме того, также кратко описан эффект Рашбы-Бычкова, его основные физические принципы и системы, где он впервые наблюдался.

## 1.2 Реконструкция поверхности и двумерная кристаллография

Первые экспериментальные данные, подтверждающие, что поверхность кристалла имеет структуру, отличную от объемного материала, были получены в конце пятидесятих годов прошлого века группой Фансворса (Farnsworth) в университете г. Бостона и группой исследователей из Bell Telephone Laboratories. С помощью метода дифракции медленных электронов (ДМЭ) был проведен ряд экспериментов в которых исследовалась атомарно-чистая поверхность кремния. Группа исследователей наблюдала дифракционную картину с периодом решетки, отличающимся от периода решетки объемного кристалла. Основываясь на полученных данных было сделано предположение, что это различие связано с нарушением объема кристалла и изменением баланса межатомных сил, вследствие чего в приповерхностной области происходили перестроения атомов. Дальнейшие исследования показали, что поверхность имеет тенденцию к реконструированию [27, 28]. В общем случае поверхность реконструируется чтобы уменьшить число ненасыщенных оборванных связей. Для этого атомы верхнего слоя смещаются

из положений равновесия, которые они занимали в объеме, и образуют связи друг с другом, уменьшая свободную энергию поверхности. Дальнейшее уменьшение энергии происходит за счет переноса заряда между оставшимися ненасыщенными связями, в результате чего некоторые из них становятся полностью заполненными, а некоторые — полностью пустыми. Этот механизм называется автокомпенсацией [29]. В результате реконструкции поверхности не только расположение атомов, но и их концентрация в верхнем атомном слое подложки может отличаться от объемной атомной плоскости (неконсервативные реконструкции). Таким образом термином «поверхностная реконструкция» называют сверхтонкий приповерхностный слой атомов (до 10 Å), который находится в состоянии термодинамического равновесия с объемом кристалла [30,31].

Помимо реконструирования поверхности вследствие обрыва объема кристалла, поверхностные реконструкции могут образовываться на атомарно-чистой поверхности твердого тела при нанесении на нее некоторого количества чужеродных атомов - атомов адсорбата. При адсорбции двух или более элементов, независимо от способов и очередности их доставки, принято говорить о соадсорбции. При этом могут образовываться поверхностные реконструкции, в составе которых присутствуют атомы только одного адсорбата и атомы подложки (двухкомпонентные фазы), а также многокомпонентные системы, состоящие из атомов трех и более сортов. То, какая именно структура образуется в тех или иных условиях зависит от соотношений энергий связи «адсорбат - подложка» и «адсорбат - адсорбат» [30].

Плотность атомов адсорбата (покрытие  $\theta$ ) выражается в монослоях. Покрытие в один монослой (МС) соответствует одному атому или молекуле на одну элементарную ячейку  $1 \times 1$  нереконструированной (объемоподобной) атомной плоскости. Например, один монослой на поверхности Si(111) содержит  $7,8 \times 10^{14}$  атомов на  $1 \text{ см}^{-2}$ . В записи Si(111) цифры в скобках являются индексами Миллера и определяют грань кристалла или плоскость скола, которая в данный момент рассматривается (Рис. 1.1). Так, наиболее широко используемыми в микроэлектронике являются подложки с ориентацией (100), в то же время гораздо более интересной с точки зрения исследователей является поверхность Si(111).

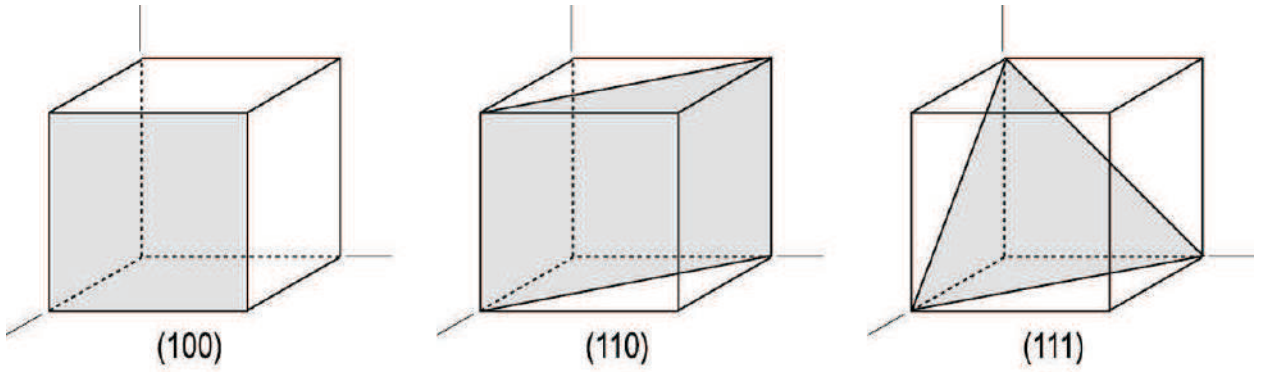


Рис. 1.1. Индексы Миллера нескольких плоскостей кубического кристалла [32].

Наиболее часто для идентификации поверхностных реконструкций используется их кристаллическая решетка. Несмотря на очевидные недостатки такого подхода, это является исторически сложившейся практикой и характеризуется относительной простотой и наглядностью.

Так как период поверхностной реконструкции обычно находится в родстве с периодом нижележащих слоев объемного кристалла, удобно определять период поверхности через соответствие с объемной решеткой. Тогда единичный вектор трансляции  $\vec{t}_i$  перестроенной поверхности может быть представлен через соответствующий вектор объемной решетки  $\vec{a}_j$  как

$$\vec{t}_i = \sum_j T_{ij} \vec{a}_j, \quad (1.1)$$

а периодичность двумерной (2D) решетки описана матрицей трансформаций  $T = T_{ij}$ . Такой способ представления двумерных решеток был предложен Парком и Мадденом в 1968 году [33] и часто используется для описания поверхностей со сложной структурой (например структуры Металл/Si(110) [34]).

Другой способ описания поверхностей был предложен Вуд (Рис. 1.2) [35]. В этом способе элементарная ячейка двумерной решетки, образованная адсорбатом А на поверхность подложки X(hkl), определяется двумя векторами с длинами  $|\vec{t}_1| = x\vec{a}_1$  и  $|\vec{t}_2| = y\vec{a}_2$  и углом  $\phi^\circ$ , на который развернута ячейка по отношению к решетке подложки, как

$$X(hkl)x \times y - R\phi^\circ. \quad (1.2)$$



Этот способ описания наиболее часто применяется в настоящее время. Он позволяет использовать сокращенные обозначения, например  $x \times y - A$ , а также поддерживает использование различных дополнительных указателей. В частности, примитивная ячейка  $(x \times y)$  обозначается как  $p(x \times y)$ , а центрированная - как  $c(x \times y)$ . Обозначение Вуд особенно хорошо подходит для описания поверхностей с низкими индексами Миллера, таких как Si(001), Si(111) и других. Однако, оно может быть использовано только для поверхностных решеток, оба вектора трансляции которых повернуты относительно векторов объемной решетки на один и тот же угол [31].

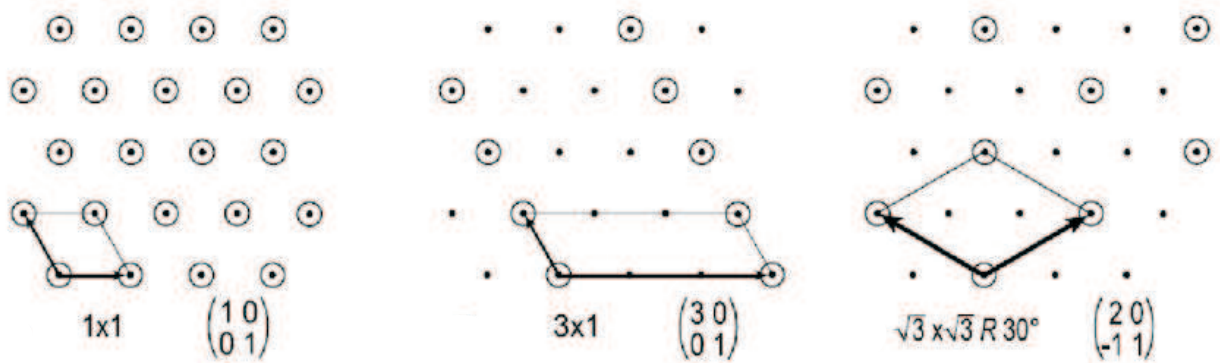


Рис. 1.2. Примеры записи Вуд и матричной записи для некоторых суперрешеток на гексагональной двумерной решетке [32].

## 1.3 Структура и свойства поверхности кремния Si(111) и некоторых реконструкций

В данном разделе кратко описаны известные литературные данные о некоторых реконструкциях поверхности Si(111), которые в последующих главах будут использоваться в качестве подложек для исследуемых структур. В частности будут рассмотрены структура и свойства поверхности Si(111)7×7, а так же реконструкции, сформированные путем адсорбции атомов Au и Tl.

### 1.3.1 Поверхность Si(111)7×7

Первые наблюдения поверхности Si(111)7×7 были осуществлены с помощью метода дифракции медленных электронов (ДМЭ) в 1959 году [27], но только в 1985 году была предложена знаменитая модель «димер-адатом-дефект упаковки» (dimer-adatom-stacking fault (DAS) model) реконструкции 7×7, которую предложили Такаянаги с сотрудниками [36]. В создании модели использовались данные, полученные научным сообществом за период в четверть века. В 1975 году Харрисон предложил, что самый верхний слой поверхности состоит из адатомов [37], в 1983 году Биннинг с сотрудниками получили первое изображение поверхности 7×7 с помощью сканирующего туннельного микроскопа (СТМ), на этом изображении были видны глубокие ямки в углах элементарной ячейки и 12 максимумов внутри ячейки [38]. Основываясь на этих наблюдениях, Химпсел [39] и МакРей [40] предсказали, что граница между треугольными подъячейками с дефектом упаковки и без него содержит димеры. В заключение, Такаянаги с сотрудниками сконструировали окончательную модель, содержащую димеры, адатомы и дефекты упаковки, и подтвердили ее на основе данных просвечивающей электронной дифракции [36].

DAS-модель и СТМ изображения поверхности Si(111)7×7 представлены на рисунке 1.3. Согласно этой модели элементарная ячейка 7×7 состоит из: 12 адатомов; 2 треугольных подъячейки, одна из которых содержит дефект упаковки; 9 димеров, огра-

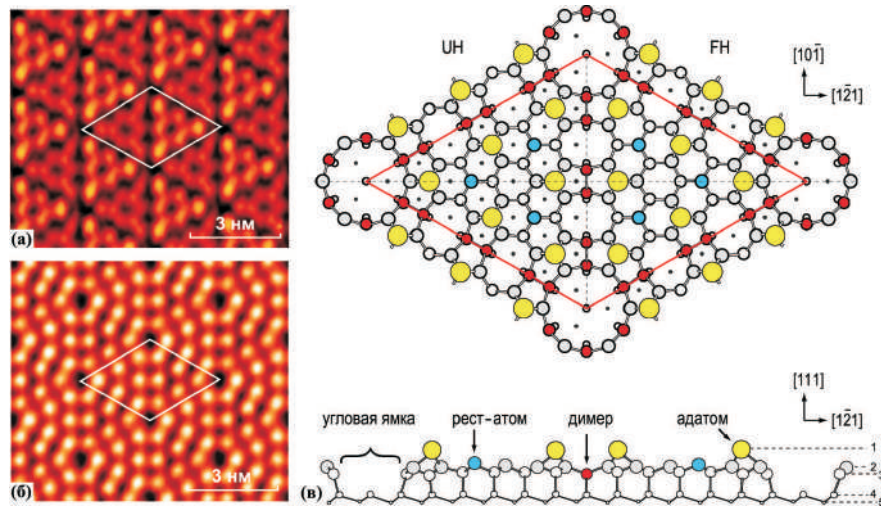


Рис. 1.3. Атомарно-чистая поверхность  $\text{Si}(111)7 \times 7$ : СТМ изображения (а) заполненных и (б) незаполненных электронных состояний поверхности, (в) схематическое изображение поверхности (вид сверху и вид сбоку) в соответствии с DAS-моделью (dimer-adatom-stacking fault) Такаянаги. Желтыми кружками показаны адатомы Si, красными – димеризованные атомы Si, голубыми – рест-атомы Si второго слоя. Ромбом обведена элементарная ячейка  $7 \times 7$ . Половина элементарной ячейки, содержащая дефект упаковки, помечена как FH (faulted half); половина без дефекта упаковки помечена как UH (unfaulted half). Видно, что на СТМ изображении заполненных состояний (а) половина ячейки с дефектом упаковки выглядит более яркой. Максимумы на СТМ изображении соответствуют адатомам. [36]

ничающих треугольные подъячейки; одной глубокой угловой ямки. Адатомы занимают положение  $T_4$  на поверхности второго слоя и образуют локальную структуру  $2 \times 2$ . Двойной слой  $\text{Si}(111)$ , включающий в себя атомы второго и третьего слоев, состоит из треугольных подъячеек. Подъячейки попеременно содержат и не содержат дефекты упаковки и ограничены рядами димеров. В углах ячейки кольца из 12 атомов окружают угловые ямки. 36 из 42 атомов второго слоя связаны с адатомами и их химические связи насыщены. Оставшиеся шесть атомов, у которых ненасыщенные связи сохранились, называют «рест-атомами» (rest atom). DAS-структура  $7 \times 7$  содержит в сумме 19 ненасыщенных связей на элементарную ячейку, из которых 12 приходится на адатомы, шесть на «рест-атомы» и одна на угловую ямку.

Реконструкция чистой поверхности кремния  $\text{Si}(111)7 \times 7$  является одной из наиболее изученных, в том числе с точки зрения электронных свойств. Однако, основываясь на известных литературных данных нельзя сделать однозначных выводов [41] о ее свойствах. Так известно, что  $\text{Si}(111)7 \times 7$  обладает слабовыраженной электронной плот-

ностью на поверхности Ферми [42] и достаточно сильным электрон-фононным взаимодействием [43], что говорит о ее металлическом характере. Данные спектроскопии характеристических потерь электронов [44] так же говорят в пользу того, что поверхность имеет металлический характер. С другой стороны согласно данным экспериментов по ядерному магнитному резонансу поверхность Si(111)7×7 близка к переходу металл-изолятор Мотта-Хаббарда [45].

### 1.3.2 Реконструкции в системе Au/Si(111)

Система Au/Si(111) примечательна большим количеством наблюдаемых реконструкций в малых пределах покрытий - от 0,7 МС до 1,4 МС (Рис. 1.4) [31]. Все эти реконструкции формируются при температурах свыше 400°C и стабильны до 700°C. Кроме реконструкций, изображенных на фазовой диаграмме, в системе также на-

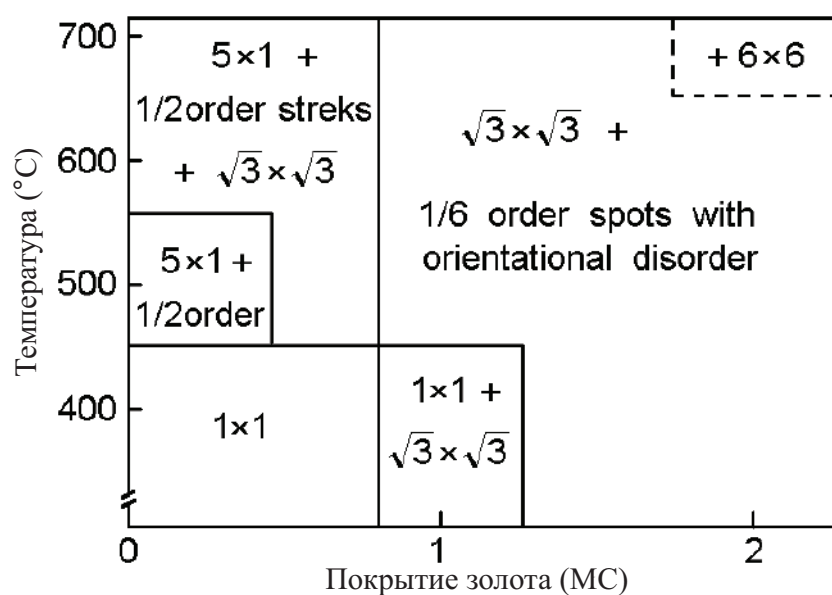


Рис. 1.4. Фазовая диаграмма системы Au/Si(111) [31].

блюдаются реконструкции с периодичностями  $2\sqrt{21} \times 2\sqrt{21}$  [46],  $3\sqrt{3} \times 3\sqrt{3}$ ,  $2 \times 2$  [47],  $\sqrt{39} \times \sqrt{39}$  [48], однако наиболее изученными и интересными являются реконструкции  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$  и  $5 \times 2$ . Так, например поверхность Si(111)5×2-Au может быть использована для создания хорошо упорядоченных цепочек адатомов путем напыления атомов индия [49]. На базе Si(111) $\alpha$ - $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -Au может быть создана система со свойствами

двумерного электронного газа  $\text{Si}(111)h\text{-}\sqrt{3}\times\sqrt{3}\text{-Au}$  [50]. Реконструкция  $\text{Si}(111)5\times 2\text{-Au}$  является типичным представителем систем саморганизующихся одномерных металлических цепочек [51–54] и служит источником интересных одномерных явлений таких как барьер Шоттки атомного масштаба [55], перескакивающие одномерные доменные стенки [56] и легированные металлические цепочки [57]. На сегодняшний день известно, что реконструкция  $\text{Si}(111)5\times 2\text{-Au}$  представляет собой цепочки атомов золота, вытянутые вдоль направления  $[1\bar{1}0]$ . Характерной особенностью этой реконструкции является наличие адатомов Si, которые на СТМ изображениях заполненных и незаполненных состояний выглядят как яркие максимумы (Рис. 1.5). Известно, что эти адатомы Si всегда присутствуют на поверхности  $\text{Si}(111)5\times 2\text{-Au}$  и образуют суперструктуру вдоль направления золотой цепочки с периодичностью  $4\times a_{[1\bar{1}0]}$ , но занимают только половину положений в сверхрешетке [58]. В зависимости от покрытия адатомов Si, система может обладать разными электронными свойствами, а именно, при покрытии меньше чем равновесное, система демонстрирует металлический характер, в то время как при более высоких покрытиях, она переходит в изолирующую фазу [59]. Атомная

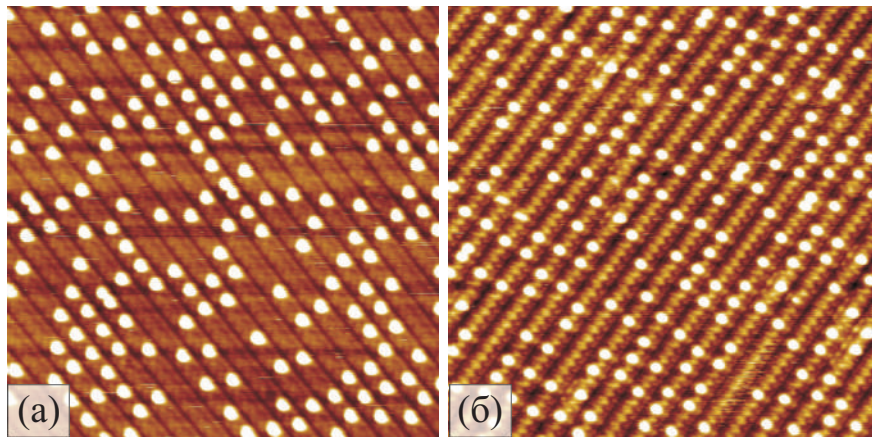


Рис. 1.5.  $30\times 30$  нм<sup>2</sup> СТМ изображения реконструкции  $\text{Si}(111)5\times 2\text{-Au}$ : (а) Незаполненные состояния ( $V = +1$  В,  $I = 1$  нА), (б) Заполненные состояния ( $V = -1,5$  В,  $I = 1$  нА).

модель реконструкции  $\text{Si}(111)5\times 2\text{-Au}$  содержит 7 атомов Au на элементарную ячейку  $5\times 2$  (то есть покрытие Au в  $5\times 2 = 0,7$  МС), которые занимают положения  $T_4$  (Рис. 1.6) [60]. Моделированные СТМ изображения на основе этой модели хорошо согласуются с экспериментальными СТМ изображениями чистой поверхности  $\text{Si}(111)5\times 2$ .



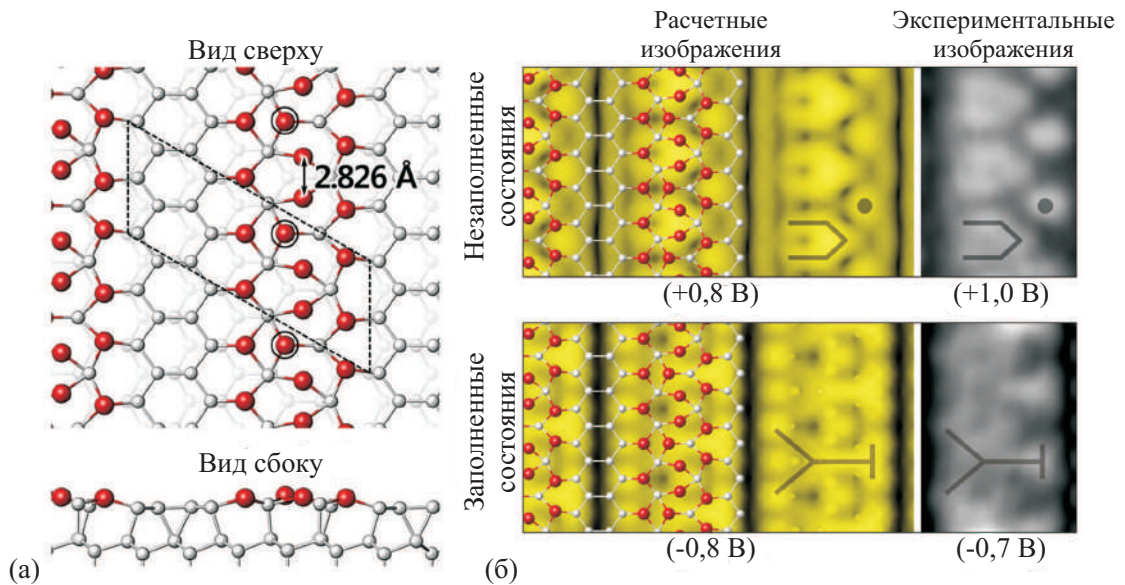


Рис. 1.6. (а) Структурная модель реконструкции  $\text{Si}(111)5 \times 2\text{-Au}$ . Красными кругами обозначены атомы золота, серыми - атомы кремния. Пунктирной линией обозначена элементарная ячейка  $5 \times 2$ . (б) Изображения реконструкции полученные с помощью расчетов (слева) [60] и изображения полученные с помощью СТМ (справа) [61].

Как видно на рисунке 1.6 (б), на расчетных и экспериментальных СТМ изображениях четко разрешаются характерные элементы V-образной (незаполненное состояние) и Y-образной (заполняется состояние) формы. С точки зрения электронной структуры поверхность  $\text{Si}(111)5 \times 2\text{-Au}$  обладает металлическими свойствами, что подтверждается расчетными и экспериментальными данными (Рис. 1.7) [59, 60]. Для нее характерно наличие двух зон поверхностных состояний  $S_1$  и  $S_2$ . Зона  $S_1$  имеет волнообразную дисперсию и является изолирующей. Зона  $S_2$  имеет резкую параболическую дисперсию, пересекающую уровень Ферми. Эта одномерная зона имеет эффективную массу всего четверть массы свободного электрона и заполнена на треть. Таким образом, зона  $S_2$  является металлической с полностью делокализованными электронами, что делает золотые цепочки хорошим одномерным проводящим каналом.

Реконструкция  $\text{Si}(111)\sqrt{3} \times \sqrt{3}\text{-Au}$  представляет собой структуру с тремя модификациями:  $\alpha\text{-}\sqrt{3} \times \sqrt{3}\text{-Au}$ ,  $\beta\text{-}\sqrt{3} \times \sqrt{3}\text{-Au}$  и  $\gamma\text{-}\sqrt{3} \times \sqrt{3}\text{-Au}$ , которые различаются покрытием золота и плотностью доменных стенок [62]. Изучению структуры и свойств поверхности  $\text{Si}(111)\alpha\text{-}\sqrt{3} \times \sqrt{3}\text{-Au}$  посвящена масса работ и на сегодняшний день известно, что эта реконструкция представляет собой массив упорядоченных доменов с периодич-

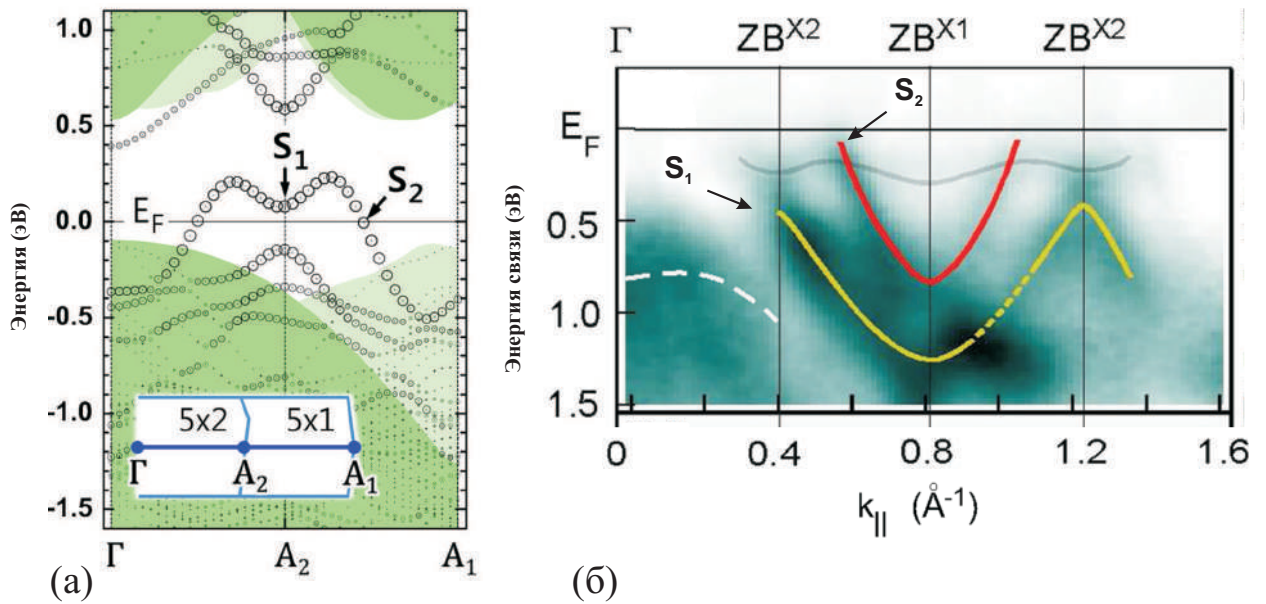


Рис. 1.7. Зонная структура поверхности  $\text{Si}(111)5 \times 2\text{-Au}$ : (а) рассчитанная с помощью метода функционала плотности (ТФП) [60]. Размер каждого кружка пропорционален вкладу от поверхностных атомов в области золотых цепочек. Затемненные области представляют проекцию объемной зоны кремния на поверхность  $5 \times 2$  [проекция  $5 \times 1$  подчеркивается более темным цветом]. (б) экспериментальные дисперсионные зависимости энергий электронных зон вдоль золотых цепочек, измеренные с помощью ФЭ-СУР [59]. Дисперсионные кривые обозначенные сплошными и пунктирными линиями обозначают спектральные особенности с высокой интенсивностью. Белой пунктирной линией обозначена объемная зона. Границы зон Бриллюэна обозначены как  $\times 1$  ( $\text{ZB}^{\times 1}$ ) и  $\times 2$  ( $\text{ZB}^{\times 2}$ ).

ностью  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ , разделенных доменными стенками [63] с локальной периодичностью  $2 \times \sqrt{3}$  [64] (Рис. 1.8 (б)). По разным данным покрытие этой реконструкции составляет от 0,8 до 1,2 МС Au [48, 63, 65–67] и она обладает более низкой плотностью доменных стенок по сравнению с  $\text{Si}(111)\beta\text{-}\sqrt{3} \times \sqrt{3}\text{-Au}$  [63]. Сложность в определении более точного покрытия золота заключается в том, что на данный момент неизвестно количество золота в доменных стенках. Атомная структура доменов  $\text{Si}(111)\sqrt{3} \times \sqrt{3}\text{-Au}$  хорошо изучена и описывается общепризнанной моделью СНСТ (conjugate honeycomb-chained-trimer) (Рис. 1.8 (а)) [68]. Эта модель представляет собой массив тримеров Au, расположенных в положениях  $T_1$ , и сопряженных тримеров Si, расположенных в положении  $H_3$ .

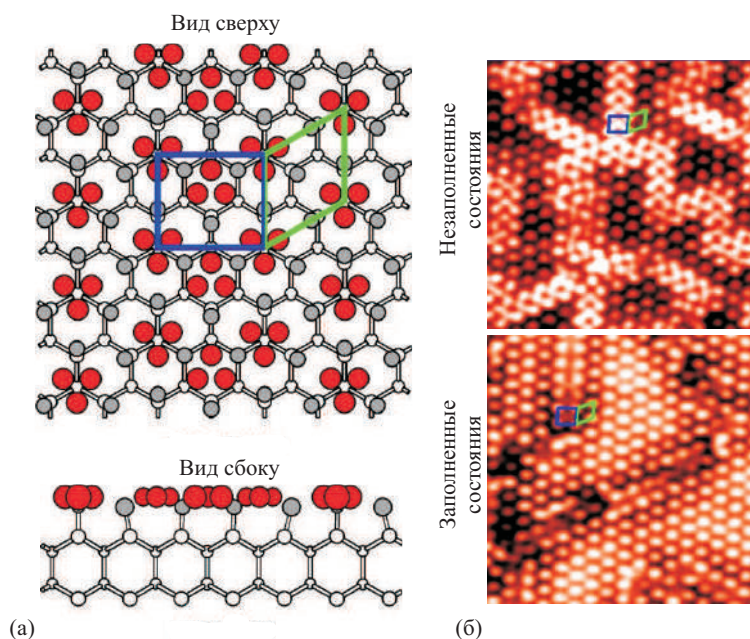


Рис. 1.8. (а) Структурная модель реконструкции  $\text{Si}(111)\sqrt{3} \times \sqrt{3}$  [68]. Красными кружками обозначены атомы золота, серыми - атомы кремния. Синим квадратом обозначена элементарная ячейка доменной границы  $2 \times \sqrt{3}$ , зеленым ромбом обозначена элементарная ячейка домена  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ . (б)  $10 \times 10 \text{ нм}^2$  СТМ изображения реконструкции  $\text{Si}(111)\sqrt{3} \times \sqrt{3}$  с высоким разрешением.

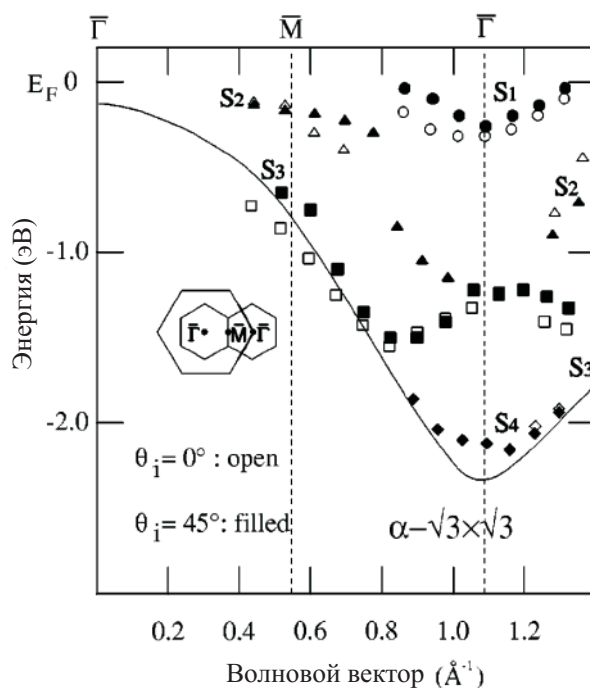


Рис. 1.9. Дисперсии поверхностных состояний поверхности  $\text{Si}(111)\alpha\sqrt{3} \times \sqrt{3}\text{-Au}$ . Размер точек соответствует относительной интенсивности разных поверхностных состояний. Сплошная линия показывает верхнюю границу объемной зоны, проецируемой на поверхностную зону Бриллюэна  $1 \times 1$  [69].



С точки зрения электронной структуры реконструкция  $\text{Si}(111)\alpha\text{-}\sqrt{3} \times \sqrt{3}\text{-Au}$  имеет четыре различных зоны поверхностных состояний, одна из которых пересекает уровень Ферми, что говорит о металлическом характере поверхности (Рис. 1.9).

Что касается других реконструкций в этой системе, то  $\text{Si}(111)\beta\text{-}\sqrt{3} \times \sqrt{3}\text{-Au}$  обладает полупроводниковыми свойствами [69], а для  $\text{Si}(111)6 \times 6\text{-Au}$  характерно наличие бездисперсионных зон и как следствие не металлический характер поверхности [69].

### 1.3.3 Реконструкции в системе Tl/Si(111)

Поверхностные реконструкции в системе Tl/Si(111) существуют в малых пределах покрытий (до 2 МС) и температур формирования (до 300°C) (Рис. 1.10).

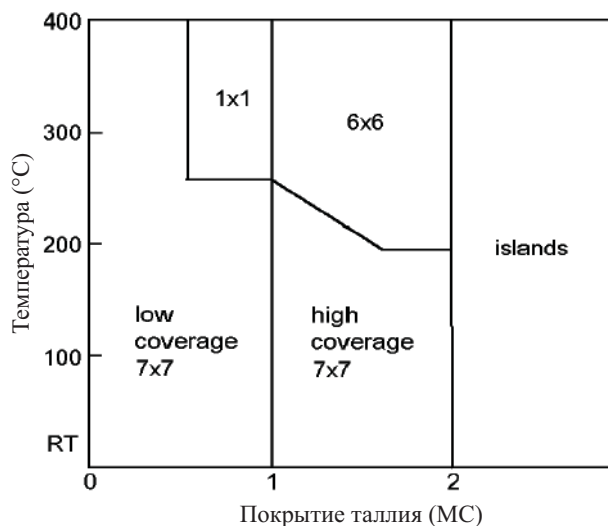


Рис. 1.10. Фазовая диаграмма системы Tl/Si(111) [31].

Адсорбция 0,12 МС Tl на поверхность Si(111)7×7 приводит к формированию упорядоченных массивов магических кластеров [70–75]. Их отличительной особенностью является постоянный состав и расположение в элементарной ячейке 7×7, а именно, каждый кластер состоит из 9 атомов и они всегда располагаются в треугольной подъячейке 7×7 с дефектом упаковки. Помимо этого такой упорядоченный массив кластеров можно рассматривать как квантовые точки, размер которых достаточно мал, чтобы квантово-механические эффекты определяли их свойства, таким образом могут возникать новые свойства, такие как квантовые интерференционные эффекты [76,77]. Из-за переменной валентности, одной или трех, Tl может формировать реконструкцию  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$  [78, 79], как и другие металлы III группы, но в отличие от других элементов, входящих в эту группу, Tl также может формировать реконструкцию Si(111)3×1-Tl [78, 80], аналогичную той, которая характерна для щелочных металлов. Реконструкция Si(111) $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -Tl формируется только путем десорбции и представляет собой мозаичную структуру с покрытием Tl 0,33 МС.

Адсорбция 1 МС Tl приводит к образованию специфической реконструкции Si(111)1×1-

Tl, которая имеет структуру псевдоморфного слоя [71, 78, 81, 82]. Этот слой представляет собой гексагональный массив, в котором атомы Tl занимают каждое положение  $T_4$  на объемоподобной поверхности Si(111), насыщая все оборванные связи поверхностных атомов кремния (Рис. 1.11) [83–85]. С точки зрения электронной структуры,

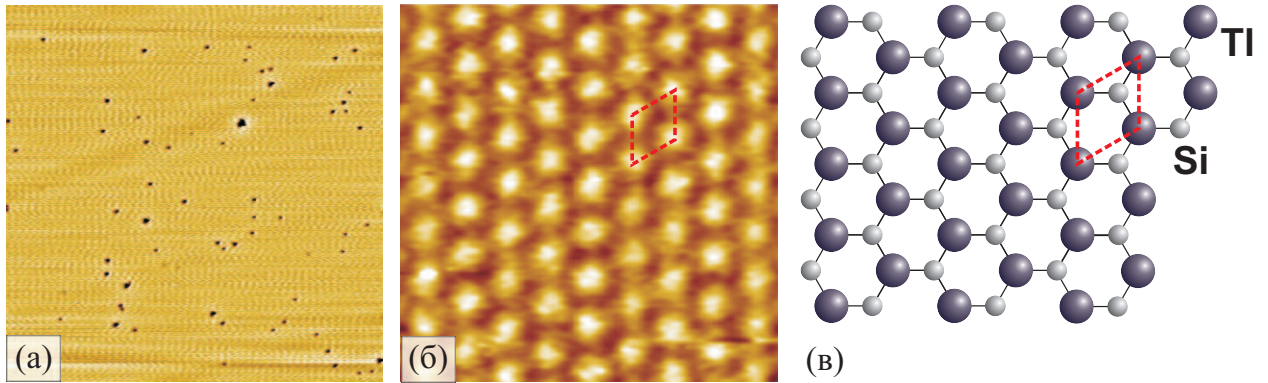


Рис. 1.11. (а)  $90 \times 90 \text{ nm}^2$  СТМ изображение реконструкции Si(111) $1 \times 1$ -Tl, (б)  $3 \times 3 \text{ nm}^2$  СТМ изображение реконструкции Si(111) $1 \times 1$ -Tl при 110 К, (в) структурная модель реконструкции Si(111) $1 \times 1$ -Tl. Красным ромбом обозначена элементарная ячейка  $1 \times 1$  [86].

по разным данным, реконструкция Si(111) $1 \times 1$ -Tl является либо полупроводниковой с шириной запрещенной зоны 0,34 эВ (Рис. 1.12) [21], либо слабо-металлической с электронным карманом в  $\bar{K}$ -точке [87]. Зонная структура представлена изолированной

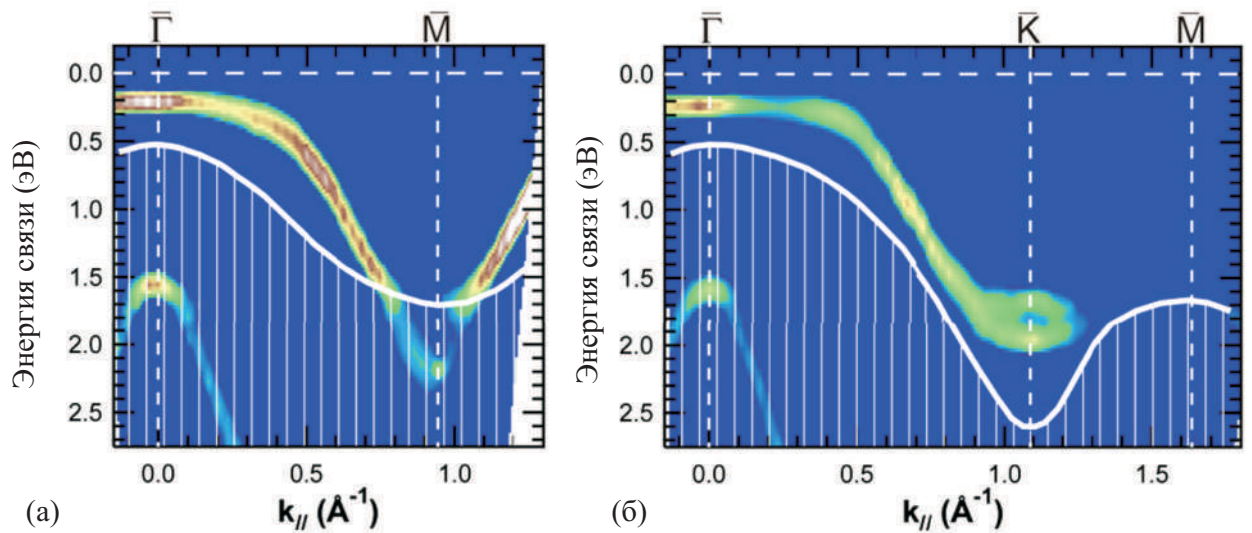


Рис. 1.12. Электронная структура реконструкции Si(111) $1 \times 1$ -Tl измеренная вдоль направлений (а)  $\bar{\Gamma}$ - $\bar{M}$ - $\bar{\Gamma}$  и (б)  $\bar{\Gamma}$ - $\bar{K}$ - $\bar{M}$ . Заштрихованные области показывают проекцию объемной зоны [88]. Горизонтальные пунктирные линии при  $E_F = 0 \text{ эВ}$  указывают на уровень Ферми [21].

зоной поверхностного состояния, которая сильно расщеплена по спину и величина расщепления составляет  $k_0 = 0,2 \text{ \AA}^{-1}$  по волновому вектору и  $E_R = 20 \text{ мэВ}$  по энергии, что было подтверждено с помощью ФЭСУР со спиновым разрешением и расчетов (Рис. 1.13) [21]. Кроме того, было определено, что расщепление этой поверхностной зоны яв-

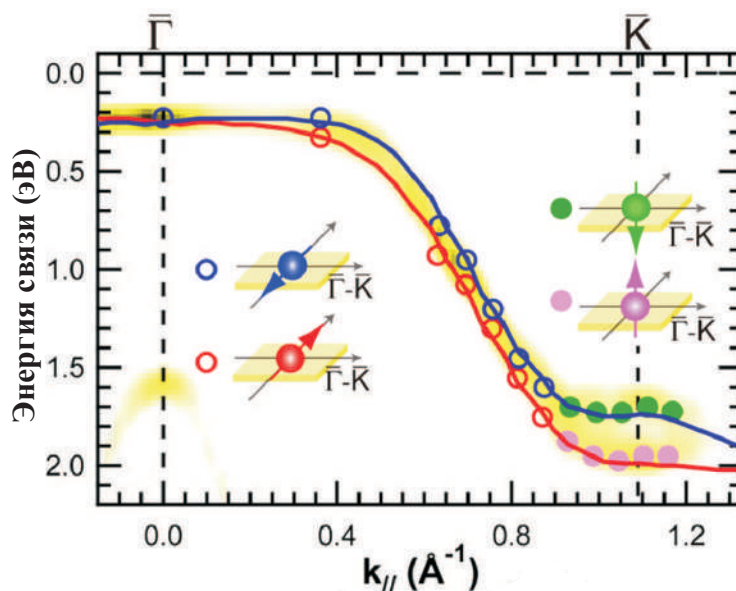


Рис. 1.13. Расщепленная по спину зона поверхностного состояния, полученная экспериментально (закрашенные и незакрашенные кружки) и теоретически (линии) вдоль направления  $\bar{\Gamma}-\bar{K}$  [21].

ляется расщеплением типа Рашбы-Бычкова [21, 87, 89], что в свою очередь привлекает большое внимание исследователей к этой реконструкции. Как уже было сказано выше, реконструкция  $\text{Si}(111)1 \times 1\text{-Tl}$  так же демонстрирует и слабо-металлические электронные свойства. Это связано с тем, что при допылении на поверхностную реконструкцию  $\text{Si}(111)1 \times 1\text{-Tl}$  малого количества атомов Tl (до 0,12 МС) на уровне Ферми в точке  $\bar{K}$  зоны Бриллюэна появляется параболическая зона. Появление этой зоны объясняется наличием дополнительных электронов, которые допируются в незаполненное поверхностное состояние, в результате чего происходит сдвиг этой зоны по энергии на 0,65 мэВ в сторону больших энергий связи [87]. Стоит отметить, что эта параболическая зона является полностью спин-поляризованной, а значит сформированную поверхность можно рассматривать как спиновый фильтр [87].

Дальнейшее осаждение Tl на поверхностную реконструкцию  $\text{Si}(111)1 \times 1\text{-Tl}$  при-

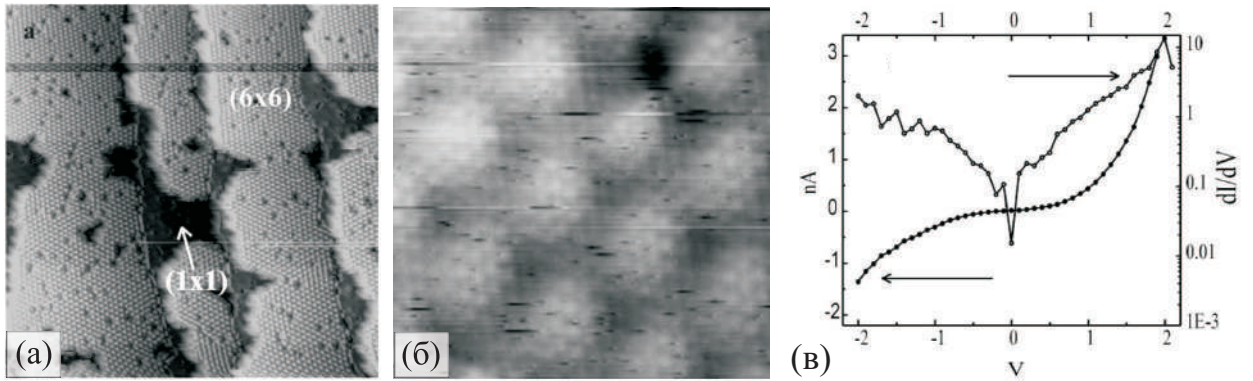


Рис. 1.14. (а)  $150 \times 150 \text{ nm}^2$  СТМ изображения реконструкции Si(111) $6 \times 6$ -Tl, (б)  $8 \times 8 \text{ nm}^2$  СТМ изображения реконструкции Si(111) $6 \times 6$ -Tl, (в) СТС спектр реконструкции Si(111) $6 \times 6$ -Tl [90].

водит к образованию так называемого «мягкого» двойного слоя Tl с суммарным покрытием 2 МС Tl [81, 90]. Этот двойной слой представляет собой гексагональный массив светлых максимумов с периодом решетки  $6 \times 6$  (Рис. 1.14 (а), (б)). На СТМ изображении с высоким разрешением видно, что на самом деле структура  $6 \times 6$  является изображением муарового типа, который создается интерференционным эффектом туннелирования электронов, вызванного несоответствием решетки между верхним поверхностным слоем и нижележащим слоем  $1 \times 1$ . При тщательном изучении муарового рисунка было обнаружено, что распределение максимумов не ориентировано вдоль какого-либо уникального направления, а угол разориентации решетки  $6 \times 6$  составляет от  $4^\circ \pm 0,5^\circ$  до  $8^\circ \pm 0,5^\circ$  по отношению к направлению Si $[\bar{1}10]$  [90]. Электронные свойства реконструкции Si(111) $6 \times 6$ -Tl демонстрируют металлический характер, что было определено экспериментальными данными полученными с помощью метода сканирующей туннельной спектроскопии (СТС), но до недавнего времени они были исследованы слабо (Рис. 1.14 (в)) [90]. Недавние исследования показали, что при охлаждении реконструкции Si(111) $6 \times 6$ -Tl до температуры кипения жидкого азота и ниже, происходит структурный переход в  $6\sqrt{3} \times 6\sqrt{3}$ , а при температуре 0,96 К происходит переход в сверхпроводящее состояние [91]. Стоит отметить, что «мягкий» двойной слой Tl является метастабильным и разрушается при увеличении покрытия Tl свыше 2 МС. При дальнейшем осаждении атомов Tl происходит формирование 3D островков в режиме роста Странского-Крастанова [90].

## 1.4 Эффект Рашбы-Бычкова

Эффект Рашбы-Бычкова (эффект Рашбы) представляет огромный интерес для фундаментальных исследований в области физики поверхности. Он послужил основой для создания спинового транзистора Датта и Дас в 1990 году, который во многом способствовал возникновению спинтроники. Исследования эффекта Рашбы привели к обнаружению новых эффектов, таких как, квантовый [9–11] и спиновый квантовый эффекта Холла [92, 93], что в свою очередь привело к активным исследованиям в области топологических изоляторов. Кроме того, эффект Рашбы играет одну из главных ролей в еще более экзотических областях физики, таких как поиск майорановских фермионов в интерфейсе полупроводник-сверхпроводник [94] и взаимодействие ультрахолодных атомных Бозе и Ферми газов [95]. В настоящее время особый интерес вызывают двумерные системы с эффектом Рашбы, т. к. такие системы являются перспективными кандидатами для реализации полупроводниковой спиновой электроники.

Эффект Рашбы основан на снятии спинового вырождения и расщеплении состояний по спину при отсутствии внешнего магнитного поля в двумерном электронном газе (на поверхности твердых тел, гетероструктурах и т.п.), благодаря сильному спин-орбитальному взаимодействию и нарушению пространственной инверсионной симметрии. Известно, что если на поверхности твердого тела трансляционная симметрия нарушается вдоль нормали к поверхности, то происходит нарушение пространственной инверсионной симметрии. Для электрона с заданным импульсом  $\vec{k}$  и спином ( $\uparrow$  и  $\downarrow$ ) присутствие пространственной инверсионной симметрии означает, что движение электрона эквивалентно в противоположных направлениях, т. е.  $E(\vec{k}, \uparrow) = E(-\vec{k}, \uparrow)$ . В отсутствие магнитного поля, имеет место симметрия относительно обращения времени, то есть  $E(\vec{k}, \uparrow) = E(-\vec{k}, \downarrow)$ . В объеме немагнитного, centrosymmetric металла наблюдаются как временная, так и пространственная инверсионная симметрия, что приводит к образованию спин-вырожденных состояний ( $E(\vec{k}, \uparrow) = E(\vec{k}, \downarrow)$ ). Для состояний расположенных на поверхности или границе раздела (например поверхностные состояния или состояния квантовых ям) пространственная инверсионная симметрия на самом деле

нарушается, что означает, что спиновое вырождение не обязательно выполняется для этих состояний. То, что спиновое вырождение фактически снято для поверхностных состояний можно понять с помощью простых релятивистских аргументов. Нарушение периодичности кристалла на поверхности создает градиент потенциала перпендикулярно к поверхности, который можно рассматривать в качестве локального электрического поля. В системе отсчета, связанной с движущимся валентным электроном это электрическое поле становится магнитным полем через релятивистские преобразования Лоренца. Это магнитное поле вызывает зеемановское расщепление электронных состояний и, следовательно, энергетическую разность между состояниями с различной ориентацией спина. Величина этого магнитного поля и энергия расщепления зависят от импульса электрона и меняют знак при изменении импульса на противоположный. При нулевом импульсе расщепление исчезает и зоны вырождаются. Такую зависимость энергетического расщепления поверхностных или интерфейсных состояний от импульса, как правило, называют эффектом Рашбы (или Рашбы-Бычкова) (Рис. 1.15) [96]. Стоит отметить, что величина энергетического расщепления Рашбы будет больше в присутствии атомов с сильным спин-орбитальным взаимодействием (например, атомов тяжелых металлов). Это связано с тем, что скорость валентных электронов в таких атомах больше, а значит и величина эффективного магнитного поля будет больше согласно релятивистским преобразованиям Лоренца.

С математической точки зрения этот эффект наиболее легко можно представить с помощью простого гамильтониана, известного как гамильтониан Рашбы:

$$H_R = \alpha(\vec{\sigma} \times \vec{p}) \cdot \hat{z}, \quad (1.3)$$

где параметр  $\alpha$  описывает взаимодействия Рашбы,  $\vec{p}$  импульс, а  $\vec{\sigma}$  матрица Паули. Это не что иное, как двумерная версия гамильтониана Дирака (с поворотом спинов на 90 градусов). Модель Рашбы в твердых телах может быть получена в рамках теории  $k \cdot p$  [97] или с точки зрения приближения сильной связи [98]. Однако эти методы считаются довольно сложными, а для упрощенного понимания эффекта Рашбы исполь-



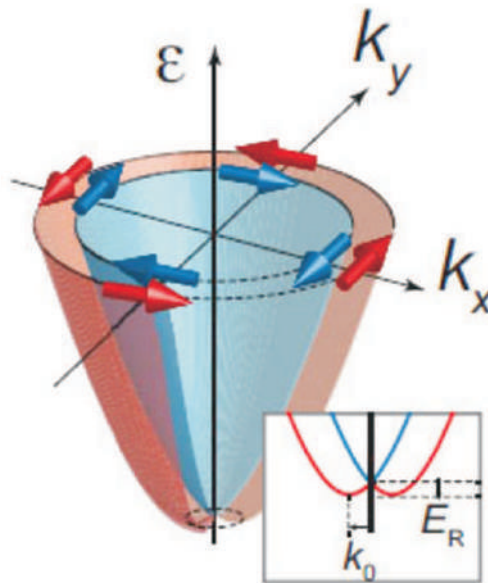


Рис. 1.15. Эффект Рашбы: расщепление электронных состояний по спину в немагнитном металле ( $k_0$  – рашбовский сдвиг) [100].

зывается «игрушечная модель», которая качественно объясняет ту же самую физику, но количественно дает плохую оценку параметра взаимодействия  $\alpha$  [99].

Экспериментально эффект Рашбы впервые наблюдался в 1996 году на поверхности монокристаллического золота (Рис. 1.16 (а)) [12, 13] и с тех пор было обнаружено и исследовано достаточно большое количество систем с этим эффектом. Так, например, эффект Рашбы наблюдался на поверхностях монокристаллических металлов  $\text{Bi}(111)$  [14, 15]) и модифицированных поверхностях металлов и полупроводников  $\text{Bi}/\text{Ag}(111)$  (Рис. 1.16 (б)) [16, 17],  $\text{Bi}/\text{Si}(111)$  (Рис. 1.17 (а)) [18, 19],  $\text{Pb}/\text{Ge}(111)$  (Рис. 1.17 (б)) [101],  $\text{Bi}/\text{Ge}(111)$  [20],  $\text{Tl}/\text{Si}(111)$  [21, 22],  $\text{Pt}/\text{Si}(110)$  [23]).

Однако среди этих систем практически отсутствуют системы, которые можно было бы использовать на практике, так как для практического использования система должна удовлетворять некоторым условиям. Во-первых, расщепленные по спину состояния должны быть металлическими, чтобы обеспечить достаточно большой спиновый ток. Во-вторых, в системе должны присутствовать элементы с большим спин-орбитальным взаимодействием, чтобы расщепление было достаточно большим для применений при комнатной температуре. В-третьих, подложка должна быть полупроводниковой (в идеальных условиях кремниевой, т. к. на сегодняшний день кремний является основным



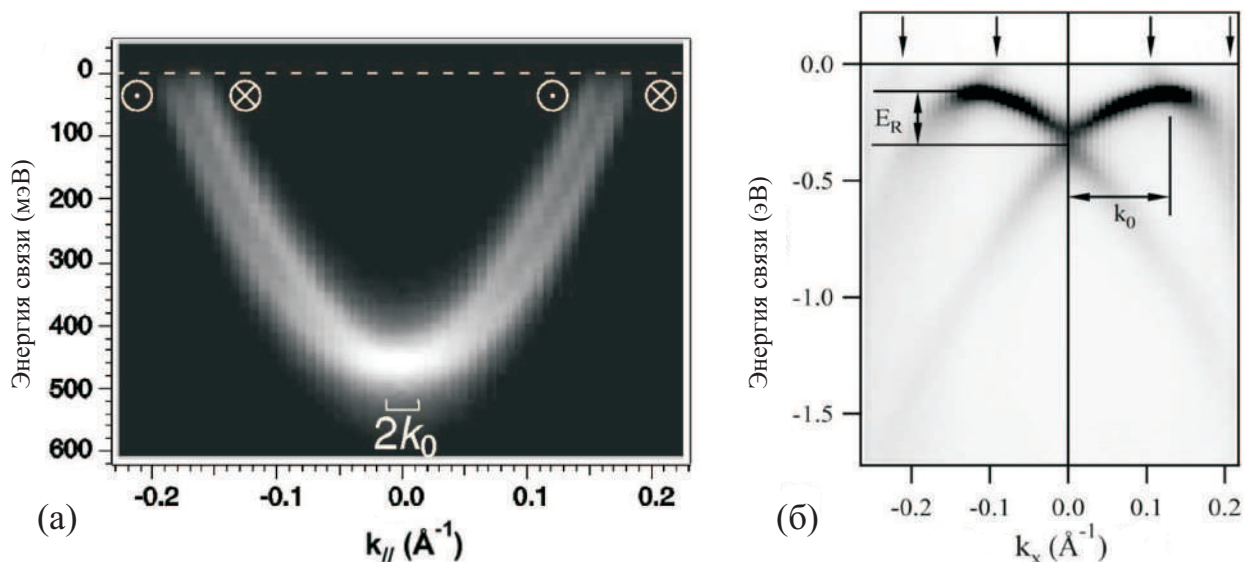


Рис. 1.16. Эффект Рашбы для (а) Au(111) [13] и (б) Bi/Ag(111) $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$  [16].

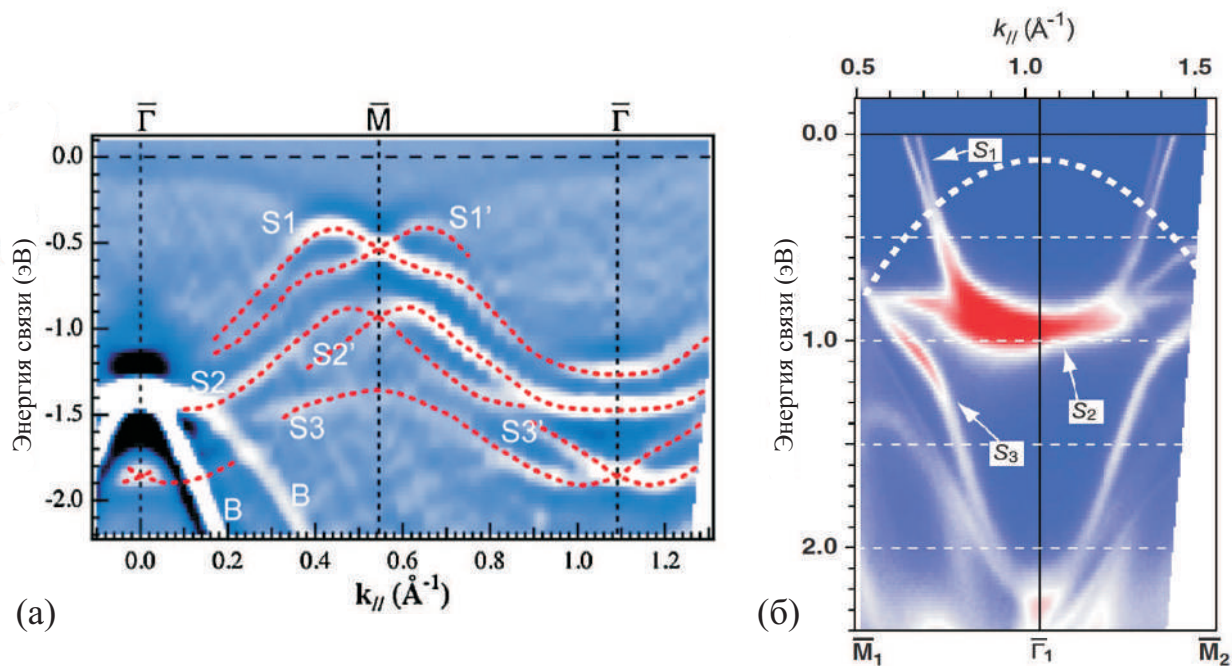


Рис. 1.17. Эффект Рашбы для (а) Bi/Si(111) $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$  [19] и (б) Pb/Ge(111) $\beta\sqrt{3} \times \sqrt{3}$  [101].

материалом в микроэлектронной промышленности), чтобы спиновый ток не шунтировался через объем подложки. На сегодняшний день в научной литературе существует довольно мало работ, в которых исследованы системы, удовлетворяющие описанным требованиям на кремниевой подложке: [26, 86, 87].

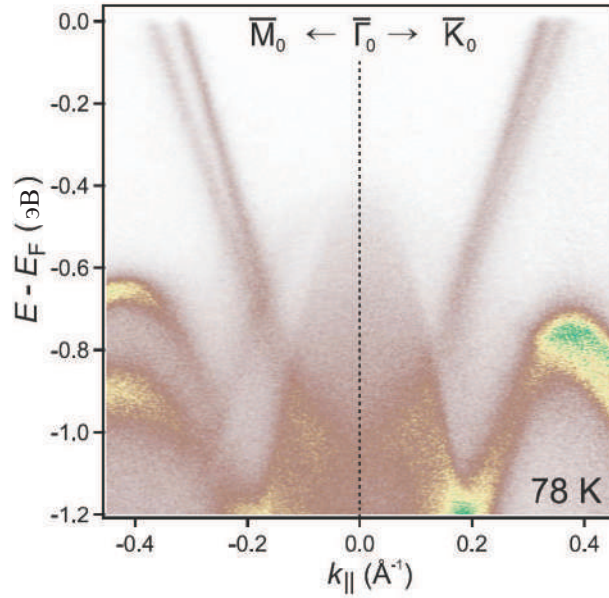


Рис. 1.18. Эффект Рашбы для Au/Si(111) $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$  модифицированной атомами Tl [26].

## 1.5 Выводы

В данной главе было дано определение реконструкции поверхности, а также описаны известные литературные данные по реконструкциям поверхности, которые в последующих главах будут использоваться как основа для создания исследуемых двухкомпонентных систем, а именно Si(111) $5 \times 2$ -Au, Si(111) $\alpha\text{-}\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -Au и Si(111) $1 \times 1$ -Tl. Также в главе дано объяснение эффекта Рашбы-Бычкова, его физического принципа и приведен ряд систем, в которых он был ранее обнаружен.

# **Глава 2. Методы исследования поверхности и подготовка эксперимента**

## **2.1 Введение**

В данной главе рассмотрены основные экспериментальные методы исследования поверхности, условия проведения экспериментов и экспериментальное оборудование. В частности, в главе описаны принципы работы сканирующего туннельного микроскопа (СТМ), дифрактометра медленных электронов (ДМЭ) и ультрафиолетового фотоэлектронного спектроскопа с угловым разрешением (УФЭСУР).

## **2.2 Методы исследования поверхности**

### **2.2.1 Сканирующая туннельная микроскопия**

Сканирующий туннельный микроскоп (СТМ) был создан в 1981 году Биннингом, Рохером и их коллегами в исследовательской лаборатории ИВМ в Цюрихе [102]. Появление СТМ позволило изучать расположение отдельных атомов, а также химические и физические свойства поверхности, связанные с поведением электронов в приповерхностном слое. Данный метод произвел настоящую революцию в науке о поверхности, за что его создатели были удостоены нобелевской премии по физике в 1986 году.

В отличие от других методов электронной микроскопии [103–107], разработанных на тот момент с 1931 года (время появления первого электронного микроскопа [108]), СТМ обладал несколькими значительными преимуществами, благодаря которым этот метод за короткий срок стал одним из ведущих аналитических методов исследования поверхности твердых тел:

- СТМ позволяет получать атомарное разрешение. Горизонтальное и вертикальное

разрешение может достигать 0,1 нм и 0,01 нм, соответственно.

- СТМ может быть использован при высоких и низких температурах в различных средах: вакуум, воздух, растворы.
- СТМ имеет дело с локальными свойствами вещества, не усредняя их по некоторой области, тем самым позволяя исследовать непосредственно атомы адсорбата, поверхностные дефекты, поверхностные реконструкции.
- Изображения поверхности в реальном пространстве могут быть получены в реальном времени, что позволяет исследовать некоторые динамические процессы, происходящие на поверхности.
- При помощи СТМ можно исследовать локальные электронные свойства поверхности, такие как волны электронной плотности, величину энергетической щели, электронную структуру атомов и молекул.
- СТМ может быть использован для модификации поверхности и манипуляции атомами и молекулами.

Метод СТМ основан на контроле туннельного тока, протекающего между острым металлическим зондом (иглой) и исследуемой поверхностью, к которым приложена небольшая разность потенциалов. Игла подводится к поверхности образца на расстояние, при котором перекрываются волновые функции атома на конце иглы и атомов на поверхности ( $\sim 5 \div 10 \text{ \AA}$ ).

В качестве примера, рассмотрим два металлических электрода, расположенных достаточно близко друг к другу. Когда расстояние между ними оказывается в диапазоне нескольких ангстрем, возникает туннельный эффект. Это квантовомеханический эффект, когда электрон способен преодолеть потенциальный барьер на границе металл–вакуум (или металл–диэлектрик) одного электрода и перейти прямо во второй электрод без эмиссии в вакуум. При этом возникает, так называемый, туннельный ток. Если два электрода электрически соединены, то туннельный ток практически равен ну-

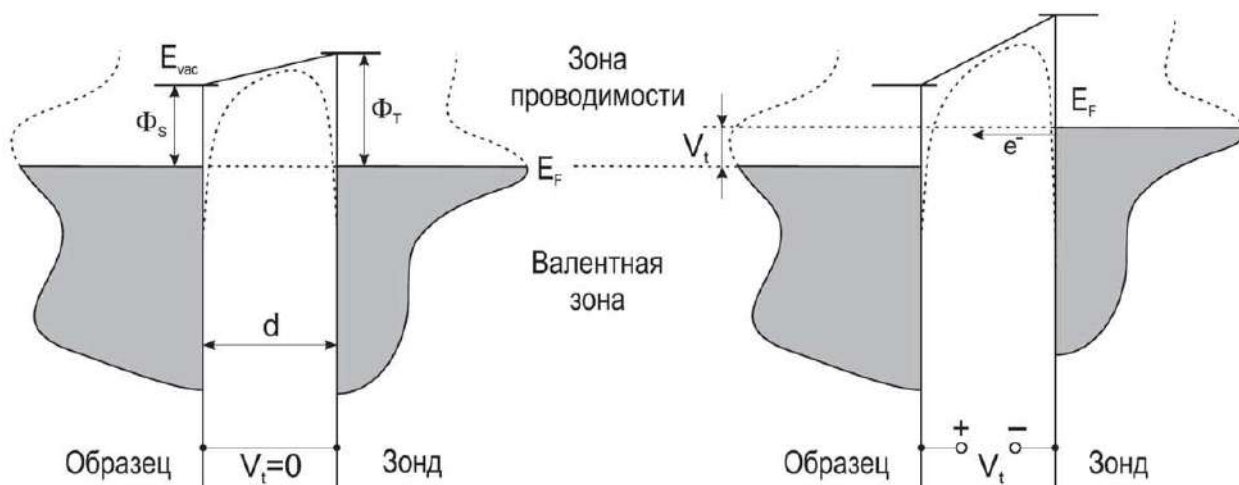


Рис. 2.1. Энергетическая диаграмма туннельного эффекта [109].

лю, т.к. энергии Ферми  $E_F$  электродов равны и нет направленного потока зарядов. Однако, если к электродам приложить разность потенциалов  $V_t$ , то произойдет сдвиг  $E_F$ , что вызовет предпочтительное туннелирование электронов из заполненных состояний одного электрода в свободные состояния другого и появиться заметный туннельный ток. Обычно величина туннельного тока лежит в диапазоне наноампер, что является хорошо детектируемой величиной. Направление туннельного тока зависит от полярности приложенного напряжения. Туннельный эффект проиллюстрирован на (Рис. 2.1), где показана энергетическая диаграмма системы образец–зонд для случая  $V_t = 0$  и  $V_t > 0$ .

Наиболее простое теоретическое описание туннельного эффекта можно получить в приближении одномерного прямоугольного потенциального барьера. В этом приближении коэффициент прохождения барьера имеет простую аналитическую форму [110]

$$T \sim e^{\left(-\frac{2d}{\hbar} \cdot \sqrt{2m(U_0 - E)}\right)}, \quad (2.1)$$

где  $E$  – энергия электрона,  $d$  – ширина барьера, а  $U_0$  – его высота. При достаточно малом напряжении  $V_t$  туннельный ток имеет вид [111,112]:

$$I_t = \left(\frac{e}{\hbar}\right)^2 \cdot \frac{V_t}{d} \cdot \sqrt{2m_e \bar{\Phi}} \cdot e^{-Ad\sqrt{\bar{\Phi}}}. \quad (2.2)$$

Здесь  $A \sim \frac{4\pi\sqrt{2m\epsilon}}{h}$ , а  $\bar{\Phi}$  - средняя работа выхода обоих электродов и имеет величину около 3–4 эВ. Согласно формуле 2.2 туннельный ток  $I_t$  изменяется на три порядка величины при изменении  $d$  на 1 Å. Такая сильная зависимость  $I_t$  от ширины барьера является ключом к высокой разрешающей способности СТМ. В СТМ первым электродом является образец, а вторым – очень острая игла с радиусом острия порядка нескольких десятков нанометров. Игла сканирует образец при фиксированной разности потенциалов  $V_t$ . При этом электрическая цепь обратной связи поддерживает ток  $I_t$  постоянным посредством изменения координаты острия. В этом режиме (режим постоянного тока) острие перемещается над поверхностью на практически постоянном расстоянии от нее. Схематически СТМ представлен на рисунке 2.2. В качестве X-, Y- и Z- двигателей используются электромеханические преобразователи из пьезокерамики, управляемые электрическим полем. С помощью поляризованной керамики высокого качества можно управлять положением зонда с точностью до сотых долей ангстрема. Напряжение на Z-двигателе ( $V_{pz}$  на рисунке 2.2) управляется цепью обратной связи и содержит информацию о рельефе поверхности, поэтому регистрируется в качестве топографического сигнала вместе с напряжениями развертки на X- и Y-двигателях. Разрешение СТМ в направлении перпендикулярно поверхности зависит лишь от способности электроники точно измерять туннельный ток и контролировать Z-положение зонда. Латеральное же разрешение зависит от таких факторов как электронная структура образца и зонда и атомное строение острия зонда. Существует два различных режима сканирования: режим постоянного тока и режим постоянной высоты.

В режиме постоянного тока, система обратной связи регулирует  $z$ -положение иглы так, чтобы ток в процессе сканирования оставался равен установленному значению. Тогда неомогенность на поверхности может быть представлена высотой иглы  $z(x, y)$ , которая определяется напряжением, подаваемым на пьезосканер для его растяжения и сжатия во время сканирования. Получаемая таким образом картина может быть представлена как поверхность постоянной электронной плотности состояний. Такое изображения можно соотносить с реальной топографией поверхности, так как концентрация электронов связана с кристаллической структурой и упорядочением атомов на

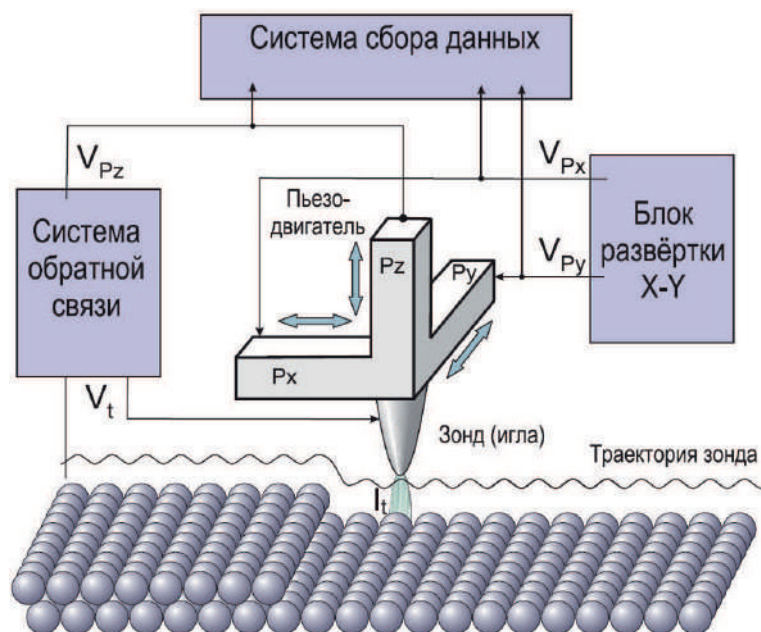


Рис. 2.2. Принцип работы СТМ [109].

поверхности. СТМ таким образом «видит» не сами атомы, а повышенную электронную концентрацию в окрестности этих атомов.

В режиме постоянной высоты в процессе сканирования вместо тока поддерживается постоянной первоначальная высота иглы над поверхностью (координата  $z(x, y)$ ), а обратная связь или не задействована, или сильно ослаблена и служит только для поддержания постоянного усредненного значения тока. Негомогенности электронной плотности теперь выглядят как всплески или спады туннельного тока. Уменьшение величины сигнала обратной связи позволяет осуществлять быстрые измерения, что необходимо при изучении динамических процессов на поверхности в реальном масштабе времени. Существенным недостатком данного режима является то, что на поверхности могут присутствовать высокие островки, что может привести к прямому контакту иглы с поверхностью и неминуемому повреждению иглы.

Вскоре после изобретения СТМ была показана возможность с помощью этой методики исследовать поверхность с атомным разрешением [113]. Получаемые изображения, однако, не могут быть интерпретированы лишь как топография из-за значительной роли локальной электронной структуры образца и зонда. Они требуют аккуратного описания с помощью квантовой механики. Теория СТМ, объясняющая возможность

атомного разрешения была разработана Терзофом и Хамманом [114, 115] в приближении сферического острия зонда, и в дальнейшем развита Ченом [116, 117]. Туннельный ток в первом порядке теории возмущений имеет вид [114]

$$I = \frac{2\pi e}{\hbar} \sum_{\mu\nu} f(E_\mu)[1 - f(E_\nu + eV_t)] \cdot |M_{\mu\nu}|^2 \delta(E_\mu - E_\nu), \quad (2.3)$$

где  $f(E)$  - функция распределения Ферми,  $M_{\mu\nu}$  - матричный элемент оператора туннелирования между состояниями  $\psi_\mu$  зонда и  $\psi_\nu$  образца с энергиями  $E_\mu$  и  $E_\nu$  соответственно. Матричный элемент имеет вид [118]

$$M_{\mu\nu} = \frac{\hbar^2}{2m} \int d\vec{S} (\psi_\mu^* \vec{\nabla} \psi_\nu - \psi_\nu^* \vec{\nabla} \psi_\mu). \quad (2.4)$$

В приближении малой разности потенциалов  $V_t$  и малой температуры, считая, что волновые функции острия имеют сферически симметричную асимптотику, можно получить [118]

$$I_t \sim V_t \cdot \Phi^2 \cdot \rho_{tip}(E_f) \cdot R^2 \cdot k^{-4} \cdot e^{2kR} \sum |\psi_\nu(r_0)|^2 \delta(E_\nu - E_f), \quad (2.5)$$

где  $k = \frac{2m_e\phi}{\hbar}$ ,  $r_0$  - вектор координат центра сферы острия,  $\Phi$  - работа выхода образца,  $R$  - радиус острия,  $\rho_{tip}(E_f)$  - плотность состояний острия на уровне Ферми. Поскольку локальная плотность состояний поверхности образца, выраженная через волновые функции имеет вид  $\rho(r_0, E_f) = \sum_\nu |\psi_\nu(r_0)|^2 \delta(E_\nu - E_f)$ , то выражение 2.5 приобретает вид

$$I_t \sim V_t \cdot R^2 \cdot \rho(r_0, E_f). \quad (2.6)$$

Это выражение показывает, что при фиксированной разности потенциалов и постоянном туннельном токе острие зонда следует по контуру постоянной локальной плотности состояний поверхности образца на уровне Ферми. Другими словами, картина СТМ отражает скорее плотность состояний, нежели топографию поверхности. В случае металлов разница между первым и вторым не принципиальна, поскольку электроны валентной зоны сильно делокализованы. В случае же полупроводников ситуация бо-



лее сложна, поскольку функция  $\rho(r, E)$  имеет сильную зависимость от  $r$  и  $E$ . В этом случае справедливо более общее выражение

$$I_t \sim \int_{E_f}^{E_f + eV_t} \rho(r_0, E) \cdot T(E, V_t) dE. \quad (2.7)$$

Здесь  $T(E, V_t)$  – коэффициент прохождения электрона через потенциальный барьер. В полупроводниковых кристаллах различные состояния могут быть локализованы на различных атомах. В этом случае СТМ изображения будут далеки от реальной топографии. В качестве примера можно привести поверхность GaAs(110), у которой заполненные состояния локализованы на атомах As, а свободные – на атомах Ga. Таким образом в СТМ картине, записанной при положительной полярности, когда туннелирование происходит из иглы в свободные состояния образца, видна лишь подрешетка Ga. При обратной же полярности, наоборот, видна подрешетка As [119].

Следует также отметить, что основным фактором, определяющим латеральное разрешение СТМ, является структура острия зонда, причем как кристаллическая, так и электронная. Идеальное острие должно быть чистым и иметь на конце один или несколько атомов. Теоретический предел разрешения СТМ был оценен Ченом [117]. Он показал, что латеральное атомное разрешение может быть достигнуто лишь в том случае, если волновые функции атомов острия, дающих основной вклад в туннелирование, являются достаточно пространственно локализованными. В связи с этим, для получения атомного разрешения острия должны быть изготовлены из d-металлов или полупроводников. В настоящее время наиболее распространенными материалами для зондов СТМ высокого разрешения являются W и сплав PtIr, содержащий ~20% Ir.

## 2.2.2 Дифракция медленных электронов

Дифракция медленных электронов (ДМЭ) широко используется для изучения строения поверхности кристаллических твердых тел [104]. В основе метода лежит явление дифракции электронной волны, падающей на поверхность с периодической атомной структурой (Рис. 2.3). Условие для конструктивной интерференции при падении элек-

тронной волны перпендикулярно к поверхности дается уравнением Брегга:

$$\alpha \cdot \sin \theta = n \cdot \lambda, \quad (2.8)$$

где  $\alpha$  – период поверхностной структуры (в простейшем случае межатомное расстояние),  $\lambda$  – длина волны электрона,  $\theta$  – угол рассеяния, а  $n$  – целое число (порядок дифракции).

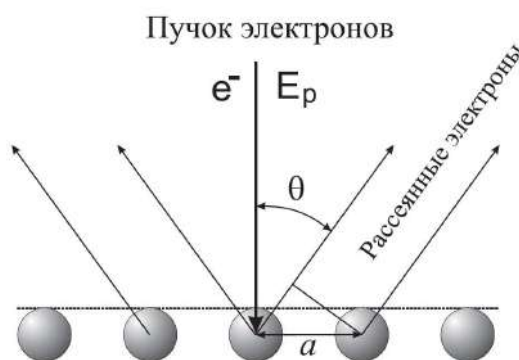


Рис. 2.3. Дифракция медленных электронов на периодической атомной структуре в формализме Брегга [109].

Поскольку длина волны де-Бройля для электрона равна

$$\lambda = \frac{h}{2m_e E} \approx \sqrt{\frac{150}{E[\text{эВ}]}} [\text{Å}], \quad (2.9)$$

где  $E$  – энергия электрона, а  $m_e$  – его масса, то для используемых в ДМЭ энергий (30 – 200 эВ) длина волны составляет  $\sim 1 - 2 \text{Å}$ , что сравнимо с межатомными расстояниями. Поэтому в соответствии с выражением 2.8 углы  $\theta$ , соответствующие различным порядкам дифракции достаточно сильно отличаются, что позволяет с легкостью наблюдать дифракционную картину. Кроме того, глубина выхода электронов с такими энергиями не превышает нескольких  $\text{Å}$ , поэтому дифракция происходит преимущественно лишь на атомах самого верхнего поверхностного слоя. Влияние объемной структуры кристалла проявляется в ДМЭ лишь в виде зависимости интенсивности рефлексов от энергии электронов. Аппаратная реализация методики ДМЭ схематично изображена на рисунке 2.4. Дифрактометр состоит из электронной пушки, произво-

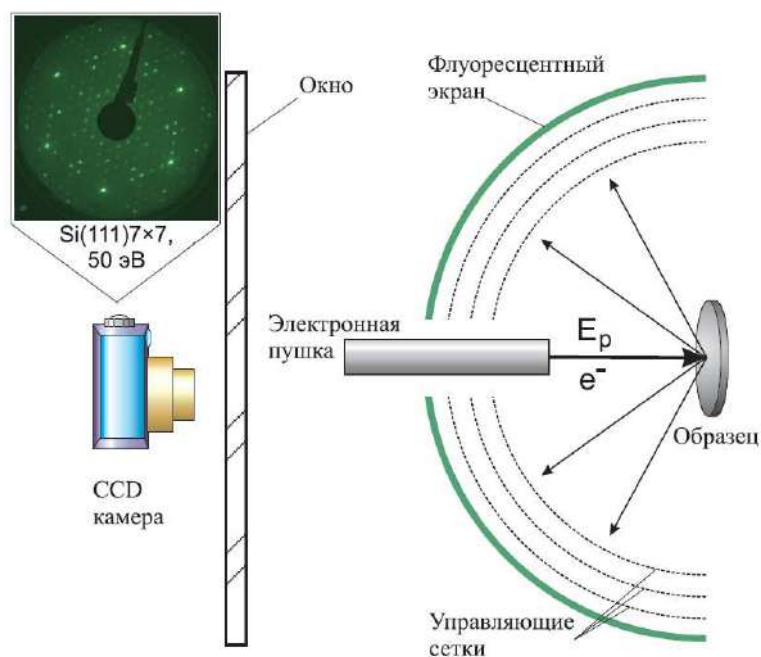


Рис. 2.4. Схема экспериментального оборудования для регистрации картин ДМЭ и пример картины ДМЭ поверхности Si(111)7×7, снятой при энергии электронов 50 эВ [109].

дающей пучок электронов определенной энергии, который направляется по нормали к образцу. После рассеяния электроны проходят через полусферическую задерживающую сетку, где отсекаются неупруго рассеянные и вторичные электроны, ускоряются высоким напряжением и детектируются в виде засветки флуоресцентного экрана с помощью CCD-камеры. Получаемая картина дает наглядное представление о структуре поверхности в обратном пространстве. В качестве примера на вкладке рисунка 2.4 показана картина ДМЭ поверхности Si(111)7×7.

### 2.2.3 Фотоэлектронная спектроскопия

Фотоэлектронная спектроскопия является наиболее широко используемым методом изучения спектра заполненных электронных состояний твердых тел. В основе метода лежит явление фотоэлектрического эффекта (фотоэффект). Если на тело падает поток фотонов с энергией  $\hbar\omega$ , то в нем может произойти процесс фотовозбуждения электронов, вызванный поглощением квантов света. И хотя этот процесс возможен в любом фазовом состоянии вещества, ограничимся рассмотрением случая твердого тела. Если

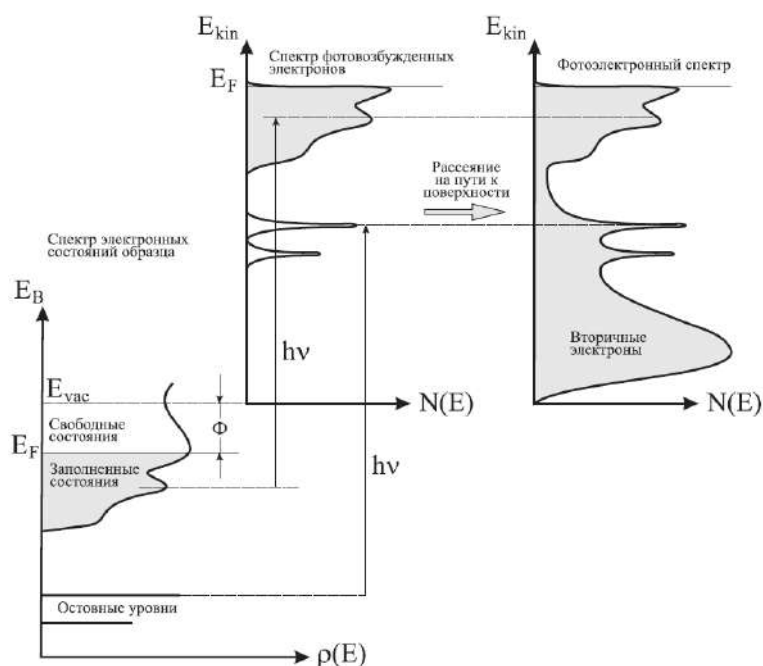


Рис. 2.5. Энергетическая диаграмма процесса фотоэмиссии электронов твердого тела [109].

кинетической энергии возбужденного электрона достаточно для преодоления потенциального барьера  $\Phi$  на поверхности, то электрон может покинуть твердое тело и выйти в вакуум. Величина  $\Phi$  называется фотоэлектронной работой выхода. Обычно она имеет величину порядка нескольких электрон-вольт и определяется электронной структурой твердого тела, а также строением его поверхности. Кинетическая энергия вышедшего фотоэлектрона определяется уравнением фотоэффекта:

$$E_{kin} = \hbar\omega - |E_B| - \Phi, \quad (2.10)$$

которое можно использовать для определения энергии связи  $E_B$  электронов в твердом теле [120]. Процесс фотоэмиссии схематично изображен на энергетической диаграмме на рисунке 2.5, иллюстрирующей фотоэмиссию из остовных уровней и валентной зоны. Из уравнения 2.10 следует, что энергии связи электронов в твердом теле можно определить путем измерения энергетического распределения фотоэлектронов, т.к. оно отражает плотность заполненных электронных состояний. В зависимости от используемых энергий фотонов, фотоэлектронную спектроскопию можно условно разделить на

две методики:

- *рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия (РФЭС)*, в которой рентгеновское излучение с энергией фотонов, лежащей в диапазоне 100–10 000 эВ, используется для изучения остовных уровней;
- *ультрафиолетовая фотоэлектронная спектроскопия (УФЭС)*, использующая фотоны с энергией 10–50 эВ для анализа электронных состояний валентной зоны.

Процесс фотоэмиссии обычно рассматривают в рамках трехступенчатой модели [120]. В этой модели выделены три стадии фотоэмиссии: фотовозбуждение электрона в твердом теле, транспорт электронов по направлению к поверхности и эмиссия электронов в вакуум. Все три стадии процесса рассматриваются независимо. На первой стадии происходит поглощение фотона, приводящее к переходу электронной подсистемы в возбужденное состояние. В одночастичном приближении это соответствует переходу электрона из начального состояния  $i$  с волновой функцией  $\psi_i$  в конечное состояние  $f$  с волновой функцией  $\psi_f$ . Вероятность перехода  $P_{if}$  может быть рассчитана в дипольном приближении, соответствующем так называемому золотому правилу Ферми:

$$P_{if} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \psi_f | \hat{H}_{int} | \psi_i \rangle|^2 \delta(E_f - E_i - \hbar\omega). \quad (2.11)$$

В этом выражении  $\delta$ -функция выражает закон сохранения энергии, а  $\hat{H}_{int}$  является гамильтонианом взаимодействия электрона с электромагнитным полем фотона, описываемым векторным потенциалом  $\mathbf{A}$ , и имеет вид

$$\hat{H}_{int} = \frac{e}{2mc} (\mathbf{A} \cdot \hat{\mathbf{p}} + \hat{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{A}), \quad (2.12)$$

где  $\hat{\mathbf{p}}$  – оператор импульса. Конечное состояние в процессе фотовозбуждения определяется зонной структурой свободных состояний. Для фотоэлектронов с большой кинетической энергией хорошей аппроксимацией конечного состояния является состояние свободного электрона с параболической дисперсией.

Следует отметить, что одночастичное приближение не всегда позволяет дать верную интерпретацию данным, полученным с помощью ФЭС. Очень часто значительную роль в фотоэмиссии играют коллективные или многочастичные процессы. Наиболее яркими примерами являются плазмонные и экситонные возбуждения. Коллективные процессы являются причиной многих характерных особенностей в спектрах фотоэмиссии, таких как уширение и асимметрия линий, сателлиты и энергетические сдвиги, поэтому они с необходимостью должны учитываться при анализе экспериментальных данных.

Во второй стадии трехступенчатой модели – транспорте электронов к поверхности – основным процессом является электрон-электронное рассеяние. Этот процесс можно описать с помощью функции  $K(E_{kin}, T)$ . Эта функция определяет вероятность того, что энергия электрона с первоначальной кинетической энергией  $E_{kin}$  после рассеяния на пути  $dR$  окажется в интервале  $[T, T + dT]$ . Эта вероятность равна  $K(E_{kin}, T)dRdT$ . Вид этой функции определяет форму фона неупруго рассеянных электронов в спектре в области больших кинетических энергий. В низкоэнергетической области спектра ( $E_{kin} < 50\text{эВ}$ ) присутствует пик истинно-вторичных электронов, возбужденных в процессе неупругого рассеяния. Основным параметром, описывающим ослабление первичного спектра фотовозбуждения (полезного сигнала), является длина свободного пробега электрона по отношению к неупругим соударениям  $\lambda(E_{kin})$ , связанная с функцией  $K(E_{kin}, T)$  соотношением

$$\int_0^{\infty} K(E_{kin}, T)dT = \frac{1}{\lambda(E_{kin})}. \quad (2.13)$$

Число электронов, прошедших слой толщиной  $d$  на пути к поверхности экспоненциально зависит от толщины слоя

$$N = N_0 e^{-\frac{d}{\lambda(E_{kin})}}. \quad (2.14)$$

Длина свободного пробега, стоящая в показателе экспоненты зависит от энергии электронов (Рис. 2.6). В диапазоне 100–1500 эВ, наиболее широко используемом в РФЭС, длина свободного пробега составляет  $\lambda \approx 1 - 3\text{нм}$ , а в диапазоне УФЭС –

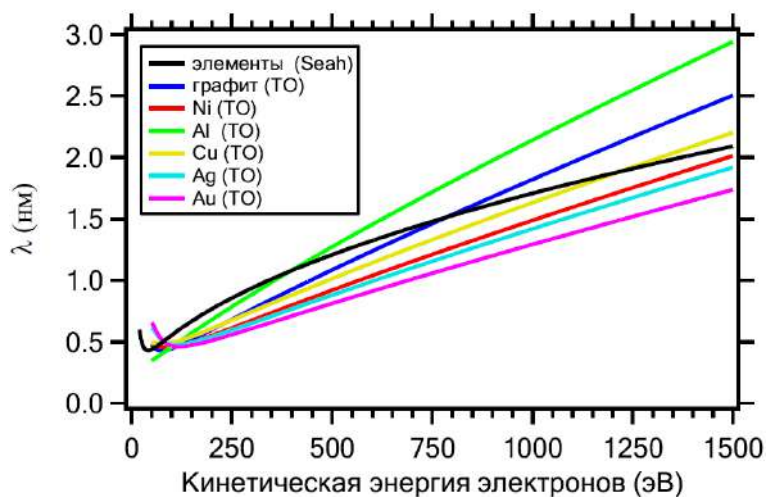


Рис. 2.6. Зависимость длины свободного пробега электрона по отношению к неупругим соударениям от кинетической энергии электрона. Показаны результаты расчета по оптическим данным для некоторых материалов, взятые из работы [121] (ТО), а также универсальная кривая, полученная усреднением экспериментальных данных для однокомпонентных материалов (элементов) из работы [122] (Seah).

$\lambda \approx 0,5 - 1,5$  нм. Этими значениями определяется высокая поверхностная чувствительность фотоэлектронной спектроскопии. Финальной стадией трехступенчатой модели является выход электрона в вакуум. При этом электрон преодолевает поверхностный потенциальный барьер, вследствие чего происходит изменение компоненты его импульса, перпендикулярной к поверхности вещества. В энергетической шкале этот эффект определяется величиной работы выхода. Геометрически это означает изменение направления движения электрона, поэтому решающее значение это приобретает в фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением.

**Фотоэлектронная спектроскопия с угловым разрешением (УФЭСУР)** – это наиболее широко используемый метод исследования дисперсий  $E(\vec{k})$  заполненных электронными состояниями валентной зоны кристаллических твердых тел. В ультрафиолетовом диапазоне импульс фотона пренебрежимо мал по сравнению с размером зоны Бриллюэна в твердом теле. Поэтому на первой стадии трехступенчатой модели происходит прямой (оптический) переход, при котором импульс электрона практически сохраняется, а происходит лишь изменение его энергии. Это проиллюстрировано на рисунке 2.7 (а), где показан оптический переход из валентной зоны в свободные состояния зоны проводимости. Импульс электрона в кристалле и в вакууме можно представить в виде

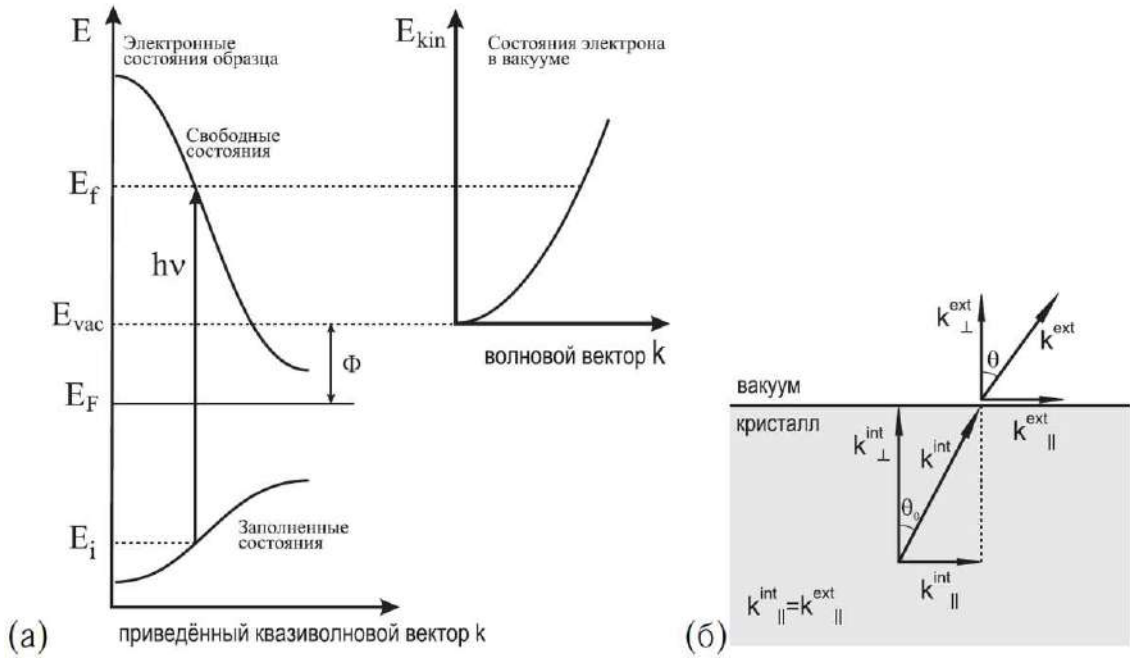


Рис. 2.7. (а) Энергетическая диаграмма процесса фотоэмиссии. (б) Изменение импульса электрона при выходе из кристалла в вакуум [109].

суммы двух компонент – параллельной поверхности кристалла и перпендикулярной ей, как показано на рисунке 2.7 (б)

$$k^{int} = k_{||}^{int} + k_{\perp}^{int} k^{ext} = k_{||}^{ext} + k_{\perp}^{ext}. \quad (2.15)$$

При переходе через поверхность электрон претерпевает преломление. При этом параллельная компонента волнового вектора сохраняется с точностью до вектора обратной решетки  $k_{||}^{ext} = k_{||}^{int} + G$ . Перпендикулярная компонента уменьшается (Рис. 2.7 (б)), вследствие чего изменяется угол направления движения электрона  $\theta$ . Работая в приведенной зонной схеме, т. е. не учитывая возможное изменение импульса на вектор  $G$ , можно получить выражение для параллельной компоненты волнового вектора, которое и используется в УФЭСУР:

$$k_{||}^{int} = k_{||}^{ext} = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E_{kin}} \sin \theta. \quad (2.16)$$

Схема эксперимента УФЭСУР показана на рисунке 2.8. Методика состоит в измерении энергетического распределения фотоэлектронов в зависимости от полярного угла



$N(E_{kin}, \theta)$ . Используя выражения 2.10 и 2.16 строят распределение в виде  $N(E_B, k_{||})$ . Далее, выделяя в распределении пики, соответствующие электронным состояниям, получают дисперсионные зависимости  $E_B(k_{||})$ . Полученные таким образом дисперсии соответствуют некоторому направлению в спроецированной на поверхность зоне Бриллюэна, определяемому азимутальным углом  $\phi$  (Рис. 2.8). Задавая угол  $\phi$ , можно определять электронную структуру в любом направлении спроецированной зоны Бриллюэна. Для двумерных систем этого достаточно для того, чтобы определить полную картину дисперсии зон, т. к. зона Бриллюэна является двумерной и  $k_{\perp}^{int}$  можно считать равным нулю. Для трехмерных систем ситуация более сложна, т. к. необходимую компоненту волнового вектора  $k_{\perp}^{int}$  нельзя определить из измеренного распределения фотоэлектронов. Эта компонента оказывается зависящей от энергии используемых фотонов [120].

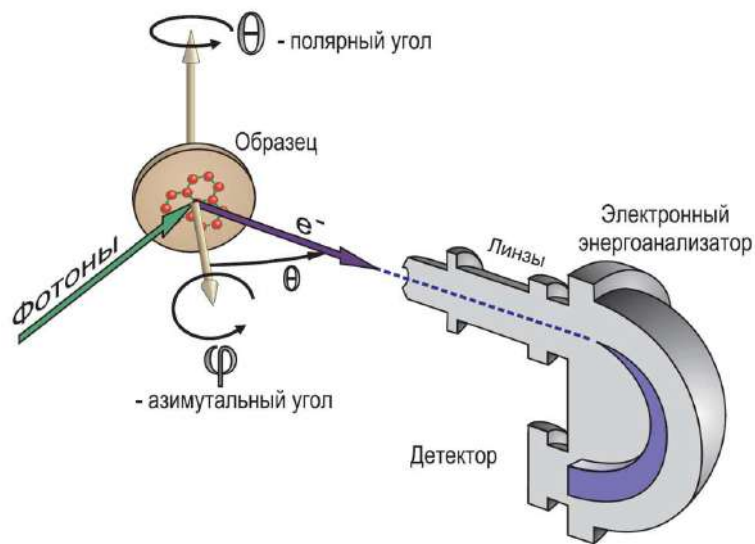


Рис. 2.8. Методика ФЭСУР [109].

Следует также отметить, что фотоэлектроны на пути к энергоанализатору преодолевают контактную разность потенциалов между образцом и входной сеткой. Поскольку эта разность потенциалов зависит от работы выхода образца и остается неизвестной, то анализатор позволяет определять энергию фотоэлектронов лишь относительно уровня Ферми образца, гальванически связанного со входной сеткой. Поэтому все величины энергии связи, определенные с помощью ФЭС традиционно отсчитываются от уровня Ферми.

## 2.3 Экспериментальная установка и условия проведения экспериментов

Экспериментальные исследования в рамках данной работы проводились на сверхвысоковакуумной (СВВ) установке Omicron STM XA (Рис. 2.9). Установка состоит из нескольких камер: загрузочной, препаративной и аналитической, а также оснащена системой манипуляторов. Аналитическая камера оборудована СТМ, ДМЭ, УФЭСУР. Давление остаточной атмосферы в аналитической камере составляло  $7 \times 10^{-11}$  Торр. Для достижения такого вакуума использовалось несколько видов высоковакуумных насосов и прогрев сверхвысоковакуумной системы в течение 20 часов при температуре  $150^\circ\text{C}$ . Откачка с атмосферы и во время отжига производилась турбомолекулярными насосами, на выходе которых были подключены роторно-масляные насосы. После отжига процесс откачки обеспечивался также ионными и сублимационными насосами. Через день после отжига турбомолекулярные насосы отключались для снижения механических вибраций при работе СТМ.



Рис. 2.9. Фотография СВВ установки Omicron STM XA.

Для создания поверхностных реконструкций в препаративной камере были установлены соответствующие источники: Tl, Pb, Sn, Au, Al. Напыление таллия и свинца осуществлялось путем нагрева током танталовой трубочки. Напыление олова произ-

водилось путем нагрева молибденовой лодочки. Напыление золота и алюминия осуществлялось путем нагрева вольфрамовой спирали «V»-образной формы. Скорости напыления адсорбатов определялись при помощи СТМ и ДМЭ изображений путем формирования поверхностных фаз с известными покрытиями.

Нагрев образца для чистки и формирования поверхностных реконструкций производился путем протекания переменного тока (до теплового пробоя образца), дальнейший нагрев производился путем протекания постоянного тока через образец.

Для экспериментов использовались образцы Si(111) n-типа, с удельным сопротивлением  $40 \div 70$  Ом·см и углом разориентации с плоскостью (111)  $\pm 0,03^\circ$ . Размер образцов составлял  $14 \times 4 \times 0,35$  мм<sup>3</sup>.

Подготовка образцов, загруженных с атмосферы, проходила в два этапа:

1. Предварительная очистка образца *ex situ* с помощью изопропилового спирта для удаления углеродсодержащих соединений.
2. Приготовление атомарно чистой поверхности *in situ* путем прогрева образца прямым пропусканием тока ( $\sim 600^\circ\text{C}$ ) в течение 12 часов для дегазации держателя и образца, затем очистка образца высокотемпературным прогревом - серией «вспышек» по несколько десятков секунд при температуре  $\sim 1280^\circ\text{C}$  в течение нескольких минут для получения исходной поверхность кремния с низкой плотностью чужеродных атомов на поверхности.

Перед экспериментами проводилась упрощенная очистка поверхности образца – прогрев серией «вспышек», с последующим остыванием образца до комнатной температуры. Для СТМ исследований использовались иглы из вольфрама, приготовленные методом электрохимического травления, и иглы из сплава платины и иридия 80/20, приготовленные механическим методом (срез кусачками).

## 2.4 Выводы

В данной главе кратко рассмотрены основные экспериментальные методы исследования поверхности, которые использовались для проведения экспериментов при написании диссертационной работы. Среди них сканирующая туннельная микроскопия, дифракция медленных электронов и ультрафиолетовая фотоэлектронная спектроскопия с угловым разрешением. Так же в главе рассмотрено устройство экспериментальной СВВ установки и условия проведения экспериментов. Данные методы и техническое оснащение установки позволили выполнить поставленные задачи по исследованию систем Tl-Pb, Tl-Sn и Au-Al на поверхности Si(111).

# Глава 3. Двумерные системы Tl-Sn, Tl-Pb и Au-Al на поверхности Si(111)

## 3.1 Введение

Данная глава посвящена экспериментальному исследованию новых двумерных двухкомпонентных структур на основе элементов с сильным спин-орбитальным взаимодействием на поверхности Si(111). Новые двумерные структуры были получены осаждением адсорбатов (Al, Sn, Pb) на поверхности Tl/Si(111) и Au/Si(111). В главе описываются основные результаты исследований атомных структур и электронных свойств новых сформированных систем: Si(111) $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -(Tl, Sn), Si(111) $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -(Tl, Pb), Si(111)4×4-(Tl, Pb) и Si(111)2×2-(Au, Al). Описываются их способы формирования, стехиометрический состав и электронные свойства. Результаты экспериментальных исследований были получены с помощью методов СТМ, ДМЭ и УФЭСУР.

## 3.2 Структурные и электронные свойства системы (Tl, Sn)/Si(111)

Двумерное (2D) соединение Tl-Sn формируется путем осаждения атомов Sn на предварительно сформированную поверхность Si(111)1×1-Tl. Реконструкция 1×1-Tl была получена путем осаждения 1 МС Tl на поверхность Si(111)7×7 при температуре ~300°C.

Формирование двумерного соединения Tl-Sn можно разделить на два этапа:

1. *Образование новой реконструкции Si(111) $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -(Tl, Sn) по всей поверхности.*  
Осаждение 0,2 МС Sn на исходную поверхность Si(111)1×1-Tl при КТ приводит к формированию участков новой поверхностной реконструкции с периодом решетки

$\sqrt{3} \times \sqrt{3}$  (Рис. 3.1 (а), (в)). Эти участки возникают произвольно, увеличиваясь в размерах при дальнейшем осаждении атомов Sn, а когда покрытие Sn достигает  $2/3$  МС, то всю площадь поверхности занимает реконструкция  $\text{Si}(111)\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -( $\text{Tl}$ , Sn) (Рис. 3.1 (б), (г)). Несмотря на то, что эта реконструкция сформирована по

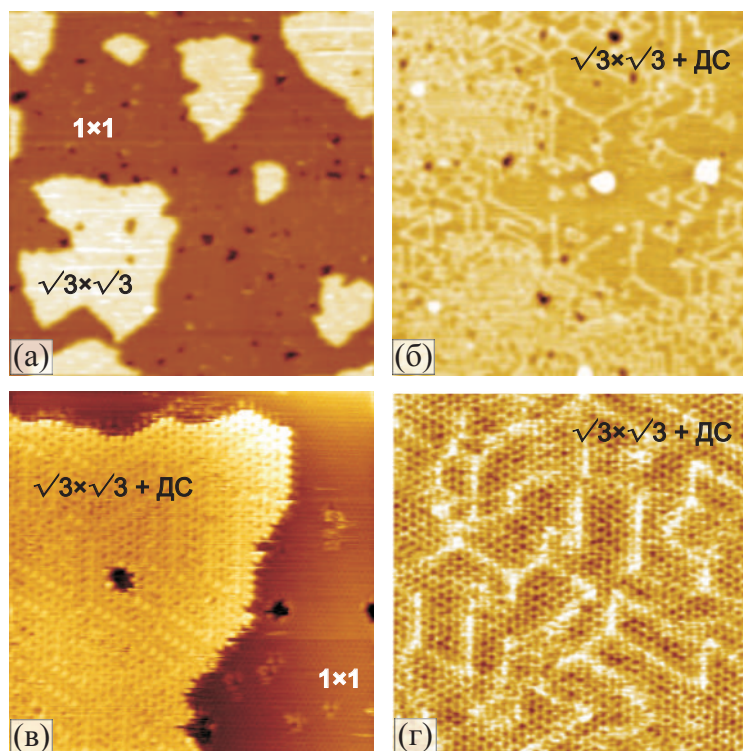


Рис. 3.1. Формирование двумерного соединения Tl-Sn на поверхности Si(111). (а)  $100 \times 100$  нм<sup>2</sup> и (в)  $25 \times 25$  нм<sup>2</sup> СТМ изображения поверхности Si(111)1×1-Tl после осаждения 0,2 МС Sn, (б)  $100 \times 100$  нм<sup>2</sup> и (г)  $25 \times 25$  нм<sup>2</sup> СТМ изображения поверхности Si(111)1×1-Tl после осаждения 0,66 МС Sn [123].

всей поверхности, на данном этапе для нее характерно наличие большого количества доменных стенок (ДС), которые разделяют между собой маленькие домены  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$  (Рис. 3.1 (б), (г)). Такая структура является плохо упорядоченной, что в свою очередь является критичным для исследования электронных свойств этой реконструкции с помощью метода УФЭСУР.

## II. Снижение концентрации ДС.

Увеличение покрытия Sn свыше  $2/3$  МС приводит к уменьшению плотности доменных стенок, а их расположение на поверхности становится более локализованным. При достижении покрытия в 1 МС Sn, завершается формирование реконструкции



$\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -(Tl, Sn). На этом заключительном этапе поверхность представляет собой хорошо упорядоченную структуру  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ , практически свободную от ДС (Рис. 3.2).

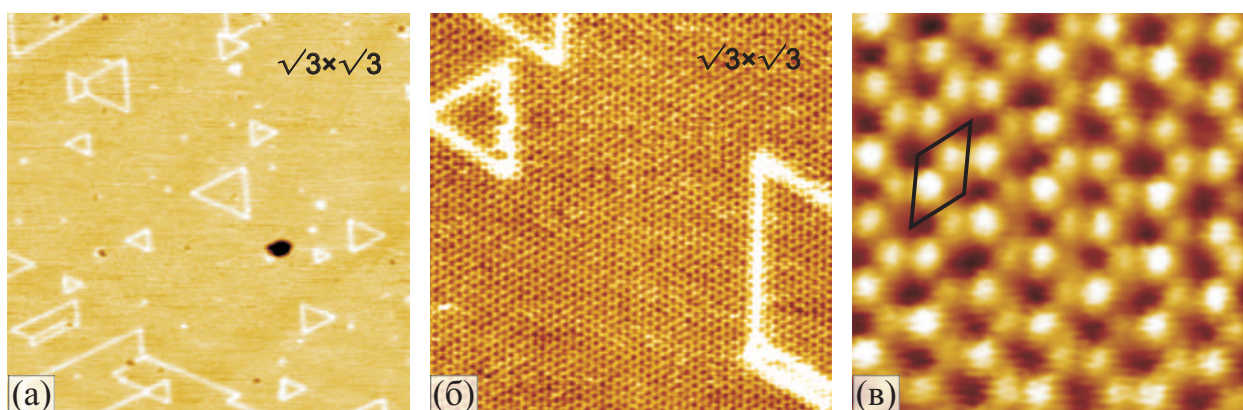


Рис. 3.2. СТМ изображения двумерного соединения Tl-Sn на поверхности Si(111) при покрытии 1 МС Sn: (а)  $100 \times 100$  нм<sup>2</sup>, (б)  $25 \times 25$  нм<sup>2</sup>, (в)  $5 \times 5$  нм<sup>2</sup> [123].

На рисунке 3.2 (в) представлено СТМ изображение с высоким разрешением, на котором видно, что реконструкция  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -(Tl, Sn) обладает сотовой структурой с двумя яркими максимумами на элементарную ячейку. Хотя формирование этой реконструкции происходит уже при комнатной температуре, для получения поверхности с более высоким структурным совершенством лучше всего осаждают атомы Sn при температуре  $\sim 150^\circ\text{C}$ .

Двух-этапный процесс формирования структуры  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -(Tl, Sn) также прослеживается на дифракционных картинах. На рисунке 3.3 представлены изображения ДМЭ, полученные на разных этапах формирования реконструкции Si(111) $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -(Tl, Sn). На рисунке 3.3 (а) хорошо видны яркие рефлексы  $1 \times 1$  (обозначены индексами 01 и  $\bar{1}\bar{1}$  на рисунке 3.3 (в)) и слабые рефлексы  $\sqrt{3}$  (обозначены индексами  $\frac{1}{3}\frac{1}{3}$  и  $\frac{2}{3}\frac{1}{3}$  на рисунке 3.3 (в)). По мере осаждения атомов Sn рефлексы  $\sqrt{3}$  становятся более яркими и между ними появляются заметные линии (Рис. 3.3 (б)). Так же можно отметить, что сами рефлексы довольно широкие и имеют не точечную форму. Уширение рефлексов связано с тем, что поверхность состоит из малых доменов  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ , а линии между рефлексами связаны с присутствием большого количества доменных стенок (Рис. 3.1 (б), (г)). При дальнейшем осаждении Sn, когда реконструкция сформирована по всей поверхности,

рефлексы  $\sqrt{3}$  приобретают более точечную форму, но все еще заметны линии между рефлексами  $\sqrt{3}$  (Рис. 3.3 (в)). На заключительном этапе формирования реконструкции  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -(Tl, Sn), когда домены  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$  становятся большими, а доменные стенки практически отсутствуют (Рис. 3.2 (а)), на изображении ДМЭ видны четкие точечные рефлексы  $\sqrt{3}$  без каких-либо дополнительных особенностей (Рис. 3.3 (г)).

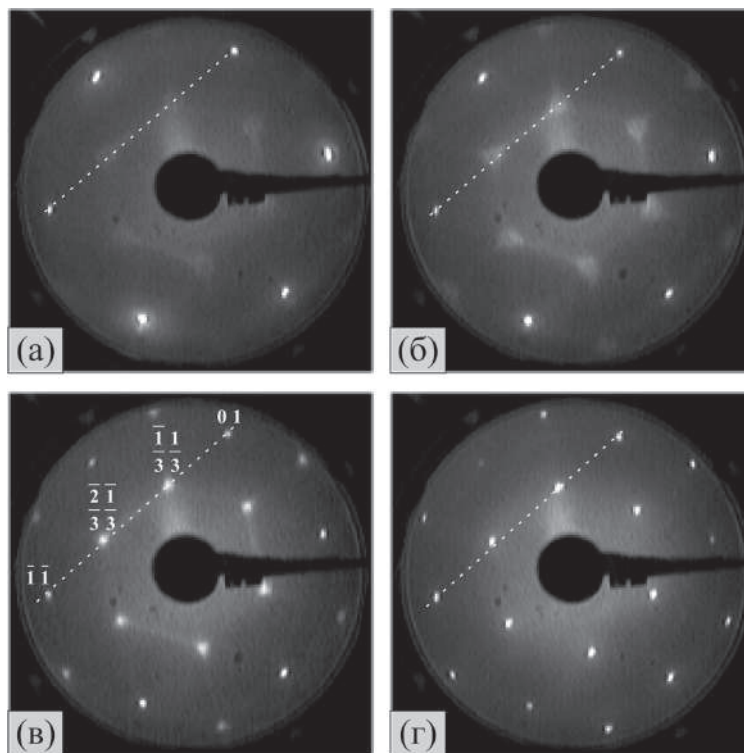


Рис. 3.3. Изображения ДМЭ ( $E_p = 41$  эВ) поверхности Si(111)1×1-Tl при (а) 0,2 MC Sn, (б) 0,5 MC Sn, (в) 0,8 MC Sn, (г) 1,0 MC Sn [123]. Пунктирной линией обозначено положения профилей, которые строились при анализе интенсивности и полуширины рефлексов. Индексами 01 и  $\bar{1}\bar{1}$  обозначены дифракционные рефлексы  $1 \times 1$ ,  $\frac{1}{3}\frac{1}{3}$  и  $\frac{2}{3}\frac{1}{3}$  обозначены дифракционные рефлексы  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ .

Для более детального анализа ДМЭ изображений были построены профили интенсивности рефлексов (обозначены белыми пунктирными линиями на рисунке 3.3) на основе которых были построены графики зависимости полуширины и интенсивности рефлексов ДМЭ  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$  и  $1 \times 1$  от покрытия Sn для поверхности Si(111) $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -(Tl, Sn). На рисунке 3.4 приведены примеры фитирования профилей для покрытий Sn - 0,5 и 1,0 MC, которые соответствуют изображениям ДМЭ на рисунке 3.3 (б) и (г), соответственно.

На рисунке 3.5 представлены графики зависимости полуширины (а) и интенсивно-



сти (б) рефлексов ДМЭ  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$  и  $1 \times 1$  от покрытия Sn для поверхности Si(111)  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ - (Tl, Sn). Эти графики наглядно показывают, что полуширина рефлексов  $1 \times 1$  не изменяется при увеличении покрытия Sn (Рис. 3.5 (а)) в то время как полуширина рефлексов  $\sqrt{3}$  претерпевает изменения. При покрытии  $\sim 0,65$  МС полуширина рефлексов  $\sqrt{3}$  значительно выше и она падает при увеличении покрытия Sn. Это связано с переходом от I-го этапа формирования реконструкции  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -(Tl, Sn) ко II-му, когда на поверхности происходит снижение концентрация ДС. Этот переход также хорошо виден на изображении ДМЭ (Рис. 3.3). Когда покрытие Sn достигает 1 МС никаких дальнейших изменений не происходит. Аналогичная ситуация наблюдается на графике зависимости интенсивности рефлексов от покрытия Sn. На I-м этапе формирования реконструкции  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -(Tl, Sn) при осаждении атомов Sn интенсивность рефлексов  $1 \times 1$  постепенно падает пропорционально увеличению интенсивности рефлексов  $\sqrt{3}$ , что свидетельствует о росте новой реконструкции. При покрытии  $\sim 0,65$  МС интенсивность рефлексов  $1 \times 1$  и  $\sqrt{3}$  становится одинаковой и затем наблюдается переход от I-го этапа формирования ко II-му, а именно, снижение концентрации ДС и формирование хорошо упорядоченной реконструкции. Дальнейшее увеличение покрытия Sn приводит к увеличению интенсивности рефлексов  $1 \times 1$  и  $\sqrt{3}$  и при 1 МС Sn дальнейшего роста интенсивности не наблюдается.

Расчеты полной энергии атомной структуры, полученной с помощью метода AIRSS (*Ab initio* Random Structure Searching), показали, что наиболее энергетически выгодной атомной конфигурацией является двухслойная структура, содержащая 1 МС Tl и 1 МС Sn (то есть три атома Tl и три атома Sn на элементарную ячейку  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ ). Стоит отметить, что для всех соединений с суммарным покрытием Sn и Tl меньше 2 МС, атомный слой, лежащий на подложке Si(111) состоит как из атомов Tl, так и атомов Sn, то есть образует сплав. При суммарном покрытии  $4/3$  МС все атомы сплава расположены в одном первом слое на подложке Si(111), при  $5/3$  МС на первом слое образуются адатомы с покрытием  $1/3$  МС, а дальнейшее увеличение покрытия приводит к расслоению структуры в результате чего, 1 МС атомов Sn лежит на подложке, а поверх него расположен 1 МС Tl. Такое расположение атомов подразумевает, что при

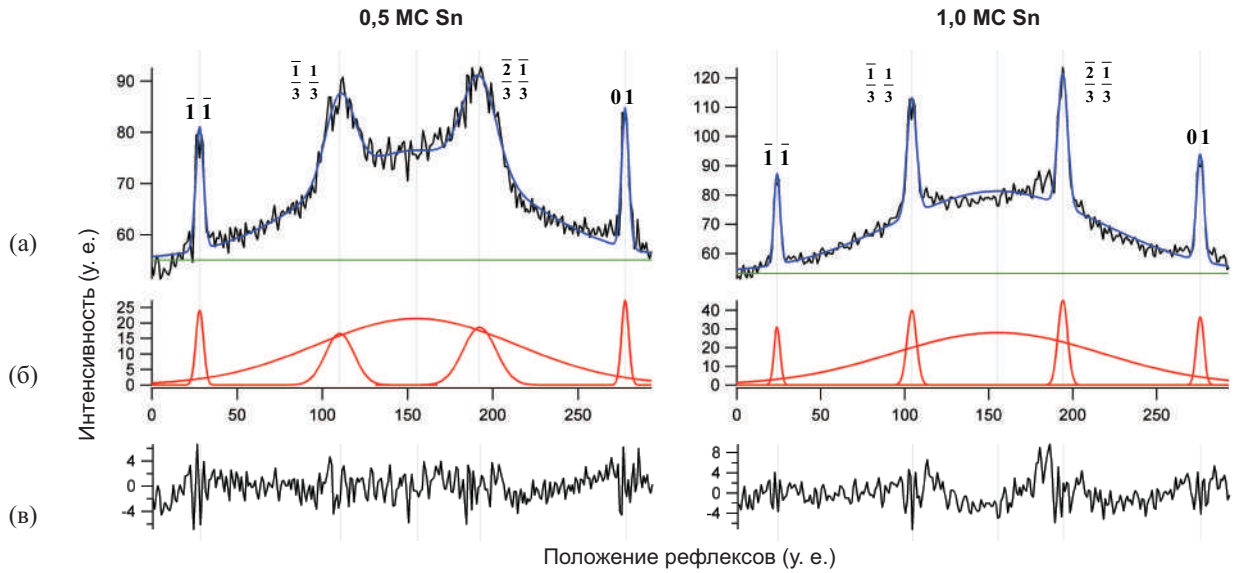


Рис. 3.4. Результаты фитирования профилей, отмеченных белой линией на ДМЭ изображениях (Рис. 3.3). (а) Профили рефлексов с наложенными результатами фитирования. (б) Результаты фитирования, разложенные по составным компонентам. (в) Разность между фитированными и экспериментальными данными.

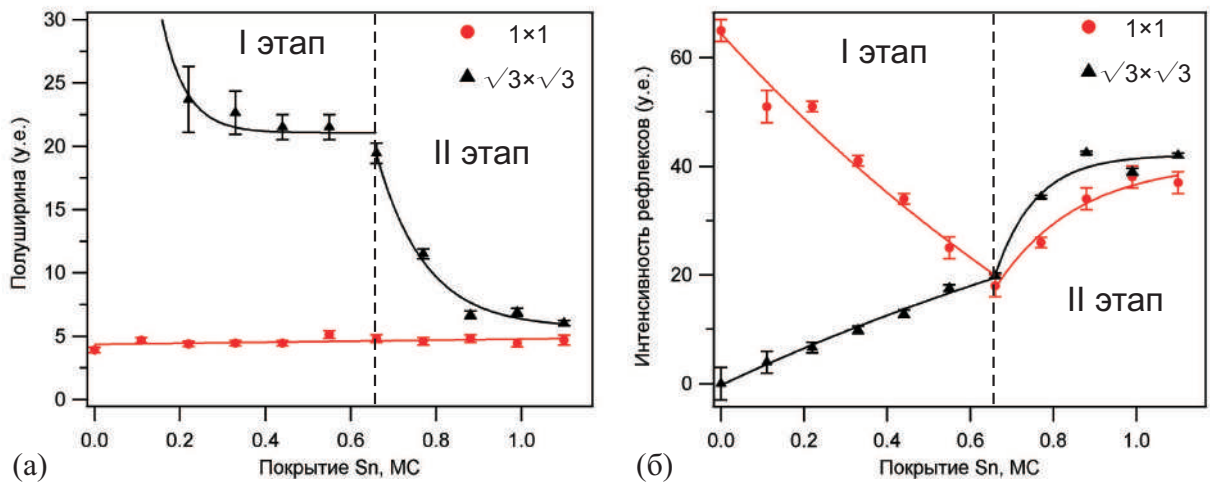


Рис. 3.5. Графики зависимости полуширины (а) и интенсивности (б) рефлексов ДМЭ  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$  и  $1 \times 1$  от покрытия Sn для поверхности  $\text{Si}(111)\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -Tl, Sn).

адсорбции на поверхность  $\text{Si}(111)1 \times 1$ -Tl атомы Sn сначала встраиваются в слой атомов Tl, а затем полностью вытесняют их во второй, самый верхний, слой.

На рисунке 3.6 (а) приведена структурная модель наиболее энергетически выгодной атомной конфигурации. Она представляет собой двухслойный атомный «сэндвич» на поверхности  $\text{Si}(111)$ . Атомы Sn расположены на  $2,55 \text{ \AA}$  выше верхнего слоя атомов Si, а атомы Tl на  $2,21 \text{ \AA}$  выше, чем атомы Sn. Атомы Sn занимают положения  $T_1$  и образуют тримеры с размером стороны  $2,99 \text{ \AA}$  и центром в положении  $H_3$  (модель «milk stool»).

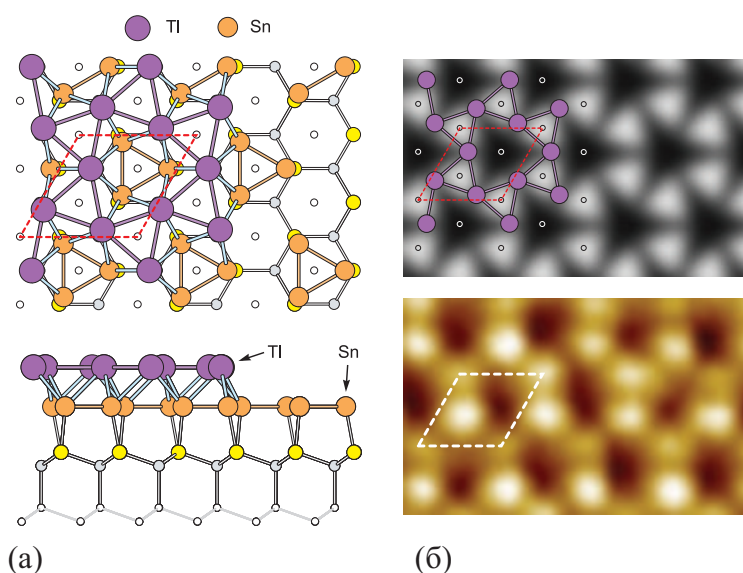


Рис. 3.6. Атомная структура двумерного соединения Tl-Sn на Si(111). (а) Вид сверху и с боку структурной модели соединения Tl-Sn состоящего из 1,0 МС Tl и 1,0 МС Sn. Атомы Tl показаны фиолетовыми кружками, атомы Sn показаны оранжевыми кружками, верхние атомы Si показаны желтыми кружками, нижележащие атомы Si показаны маленькими серыми и белыми кружками. Элементарная ячейка  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$  обозначена красной рамкой. (б) Сравнение расчетных (верхняя панель) и экспериментальных (нижняя панель) СТМ изображений. На верхней панели представлено моделированное СТМ изображение, совмещенное с рассчитанной структурной моделью [123].

Атомы Tl расположены над атомами Si(111), которые находятся в положении  $T_4$ , и образуют связанную сетку тримеров (Honeycomb-Chained Trimers (HCT)), в которой каждый тример центрирован, также как и тримеры Sn, в положении  $H_3$ , развернут на угол  $\pm 10,9^\circ$  и имеет размер стороны равный 3,49 Å. Моделированные СТМ изображения для этой структуры имеют сотовое расположение максимумов и находятся в хорошем соответствии с результатами экспериментов (Рис. 3.6 (б)).

Электронная структура поверхности  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -(Tl, Sn) была исследована методом УФЭСУР. Экспериментальные данные показали, что все спектральные особенности становятся ясно различимыми и «резкими» только после завершения II этапа формирования двумерного соединения Tl-Sn, то есть, при покрытии Sn равным 1 МС. При этом на спектре ясно видны две спин-расщепленные зоны,  $S_1$  ( $S'_1$ ) и  $S_2$  ( $S'_2$ ), которые представляют собой основные особенности электронной зонной структуры системы Si(111) $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -(Tl, Sn) (Рис. 3.7).

Поверхностная зона  $S_2$  ( $S'_2$ ) является неметаллической. Эта зона пересекает границу

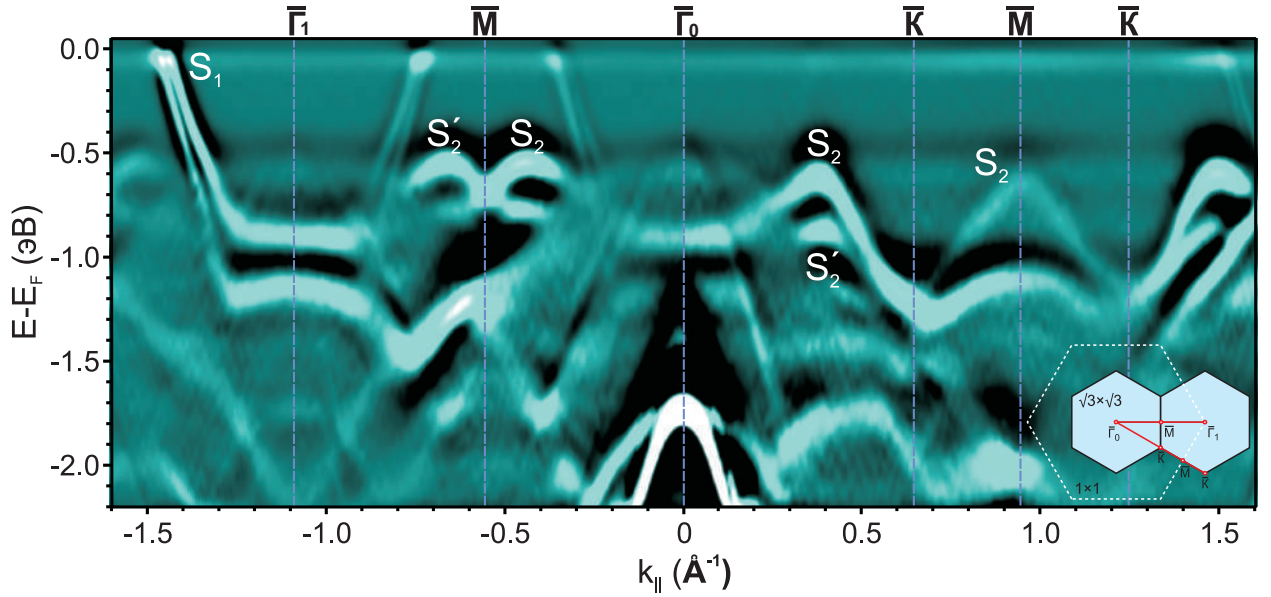


Рис. 3.7. Экспериментальные данные УФЭСУР электронной структуры двумерного соединения Tl-Sn на поверхности Si(111). Вторая производная спектра, снятого вдоль направлений  $\bar{\Gamma} - \bar{M}$  и  $\bar{\Gamma} - \bar{K}$ . На вставке схематически изображены границы ПЗБ  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$  и  $1 \times 1$  в обратном пространстве, красными линиями обозначены направления вдоль которых были получены спектры [123].

зоны Бриллюэна в точках  $\bar{M}$  и  $\bar{K}$  на  $\sim -0,70$  и  $\sim -1,25$  эВ, соответственно, расщепляется на две компоненты при удалении от высокосимметричных точек, что является явным признаком того, что это расщепление обусловлено эффектом Рашбы. Характеристиками расщепления зон являются энергия Рашбы  $E_R$  и сдвиг по волновому вектору  $k_0$ , которые для зоны  $S_2$  ( $S'_2$ ) составляют  $E_R = 83 \pm 3$  мэВ и  $k_0 = 0,096 \pm 0,002 \text{ \AA}^{-1}$ , соответственно (Рис. 3.8 (а)).

Металлическая зона  $S_1$  ( $S'_1$ ) центрирована относительно  $\bar{\Gamma}$  точки и пересекает уровень Ферми при  $k_F \sim 0,32$  ( $0,36$ )  $\text{\AA}^{-1}$ . Дисперсия этой зоны при пересечении уровня Ферми соответствует скорости электронов  $\approx 8,5 \times 10^5$  м/с, что близко к величине, полученной для графена  $\approx 1 \times 10^6$  м/с. Величина расщепления металлической зоны вблизи уровня Ферми по волновому вектору составляет  $\Delta k_{||} = 0,037 \pm 0,001 \text{ \AA}^{-1}$  и по энергии  $\Delta E_F = 167 \pm 3$  мэВ (Рис. 3.8 (б)).

На рисунке 3.9 (а) показана поверхность Ферми этого соединения, которая представляет собой два concentric контура, соответствующих зонам  $S_1$  и  $S'_1$ . На первый взгляд оба контура выглядят как окружности, однако, на самом деле они пред-

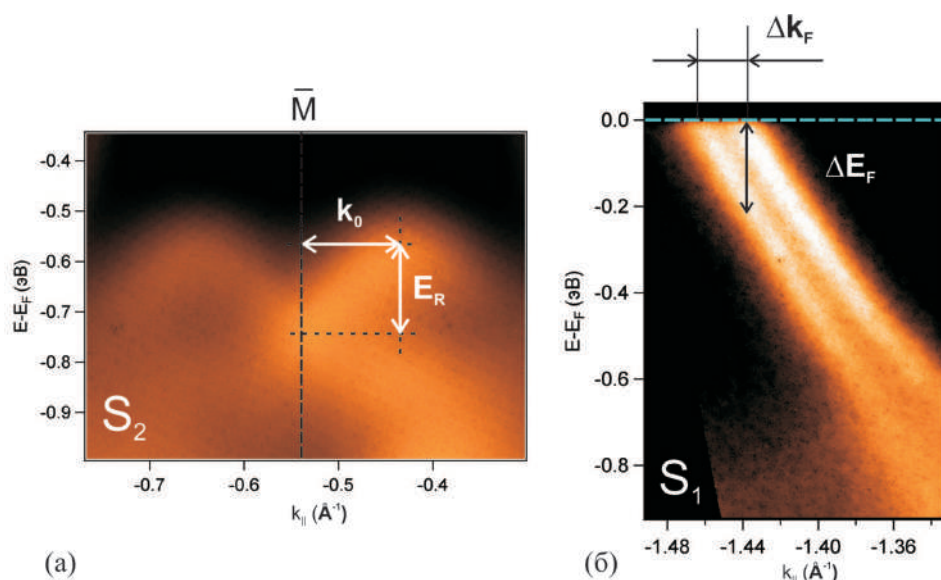


Рис. 3.8. Экспериментальные спектры УФЭСУР: (а) расщепленной по спину зоны  $S_2$ , (б) расщепленной по спину зоны  $S_1$ .

ставляют собой сглаженные шестиугольники, что характерно для известных систем, в которых наблюдаются спин-расщепленные зоны на подложках Si и Ge. Однако, отклонение формы от окружности весьма незначительно и, если описать форму контура в виде  $k + \Delta k \cos(6\phi)$ , составляет  $\Delta k/k \sim 1,0\%$  (Рис. 3.9 (б)).

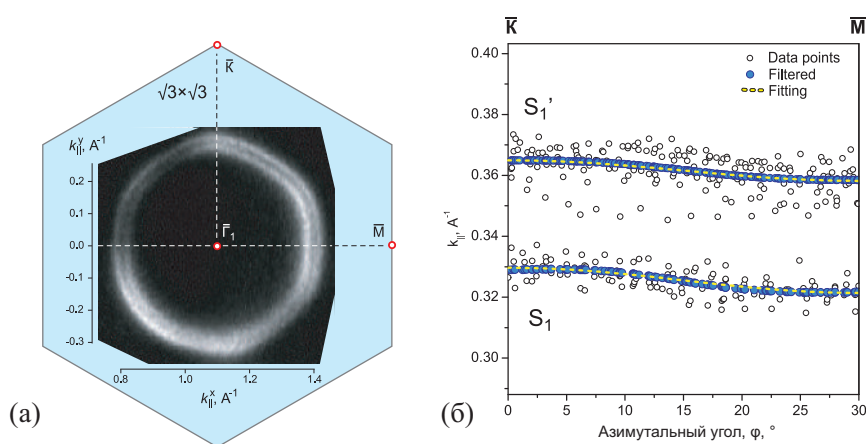


Рис. 3.9. (а) Ферми контуры полученные с помощью УФЭСУР. (б) Азимутальная зависимость длины волнового вектора Ферми ( $k_{||}$ ). Незакрашенные кружки показывают экспериментальные исходные значения, голубые кружки получены путем обработки экспериментальных значений алгоритмом быстрого преобразования Фурье (БПФ). Пунктирные желтые линии получены аппроксимацией экспериментальных данных в соответствии с выражением  $k + \Delta k \cos(6\phi)$  с  $k = 0,3616 \text{ \AA}^{-1}$  и  $\Delta k = 0,0034 \text{ \AA}^{-1}$  для зоны  $S_1$  и  $k = 0,3247 \text{ \AA}^{-1}$  и  $\Delta k = 0,0033 \text{ \AA}^{-1}$  для зоны  $S'_1$  [123].

Для модели двухслойного атомного сэндвича Tl-Sn на поверхности Si(111) были



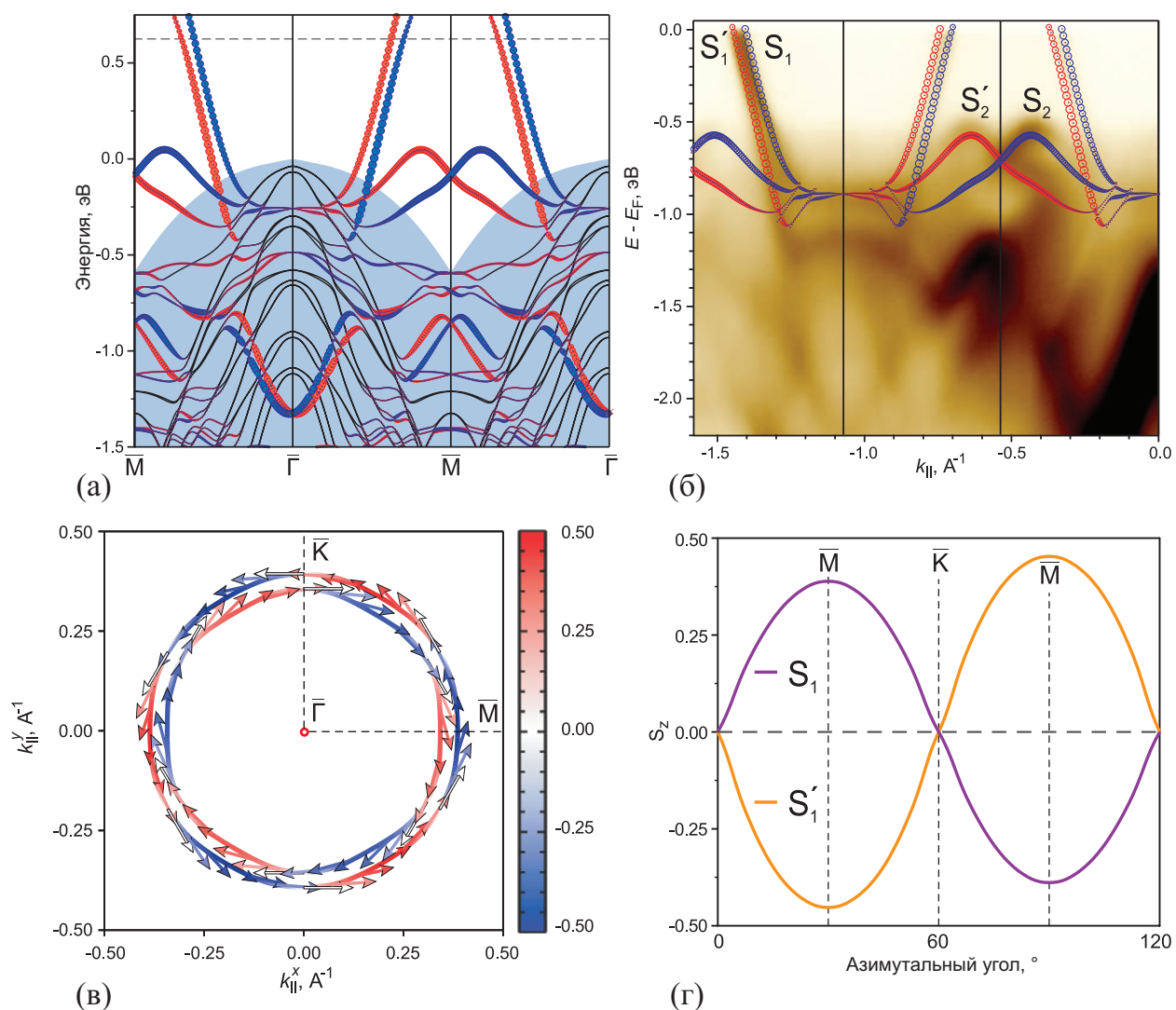


Рис. 3.10. Результаты расчетов ТФП. (а) Рассчитанная зонная структура соединения Tl-Sn на Si(111). Зоны с противоположной спиновой ориентацией выделены голубыми и красными кружками. Размер кружков соответствует силе поверхностного вклада, суммированного по всем орбиталям в конкретном значении  $k_{\parallel}$ . Заштрихованная область обозначает проекцию объемной зоны. (б) Рассчитанные дисперсии зон  $S_1$  и  $S_2$  наложенные с соответствующим спектром УФЭСУР. (в) Расчетный контур Ферми. Стрелки, прилегающие к контуру, и их длина обозначают спиновую компоненту в плоскости. Компонента спина вне плоскости обозначается красным и синим цветом с направлениям вверх и вниз, соответственно. Белый цвет показывает полное выравнивание в плоскости. (г) Азимутальные зависимости компоненты спина вне плоскости для зон  $S_1$  и  $S_1'$  [123].

выполнены расчеты зонной структуры, которые полностью согласуются с экспериментальной зонной структурой (Рис. 3.10 (а), (б)). Хорошее согласие между результатами расчета и данными УФЭСУР может служить убедительным свидетельством того, что модель адекватно описывает структуру  $\text{Si}(111)\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -(Tl, Sn).

Форма контура, полученная в расчетах для зон  $S_1$  ( $S'_1$ ) показана на рисунке 3.10 (в) и демонстрирует спиновое вращение по часовой стрелке для внутреннего и против часовой стрелки для внешнего контуров, в то время как спиновая компонента вне плоскости максимальна в направлениях  $\bar{\Gamma} - \bar{M}$  и меняет свой знак при пересечении нуля в направлениях  $\bar{\Gamma} - \bar{K}$  (Рис. 3.10 (г)). Такая спиновая текстура является типичной для состояний, расщепленных по типу Рашбы на гексагональных поверхностях. Таким образом, хорошее совпадение экспериментальных и расчетных данных убедительно подтверждает достоверность полученных результатов.

### 3.3 Структурные и электронные свойства системы (Tl, Pb)/Si(111)

#### 3.3.1 Реконструкция $\text{Si}(111)\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -(Tl, Pb)

Двумерное соединение Tl-Pb формируется путем осаждения атомов Pb при комнатной температуре на реконструкцию  $\text{Si}(111)1 \times 1$ -Tl, аналогично рассмотренной в предыдущей главе системе  $\text{Si}(111)\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -(Tl, Sn). На начальных стадиях адсорбции напыление атомов Pb на эту поверхность приводит к образованию небольших участков двумерного соединения Tl-Pb (Рис. 3.11 (а), (б)), которые при дальнейшем осаждении Pb увеличиваются в размерах и при покрытии Pb  $1/3$  МС всю поверхность занимает соединение Tl-Pb (Рис. 3.11 (в)). На СТМ изображениях соединение Tl-Pb отличается от исходного монослоя Tl более ярким контрастом и сотовой структурой с периодом решетки  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$  (Рис. 3.11 (б)).

На рисунке 3.12 представлены изображения ДМЭ, полученные от исходной поверхности  $1 \times 1$ -Tl и сформированной реконструкции  $\text{Si}(111)\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -(Tl, Pb). На этих изображениях видно, что все рефлексы точечные и яркие, без каких-либо дополнительных особенностей, что свидетельствует о ее высоком структурном совершенстве и низкой концентрации дефектов.

Интересной особенностью этой системы является то, что в зависимости от параметров записи, на СТМ изображениях с высоким разрешением видны либо атомы Pb, либо атомы Tl (Рис. 3.13). Так, например, при смещении на образце -2 В и туннельном токе 0,5 нА реконструкция  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -(Tl, Pb) представляет собой гексагональный массив, где каждый яркий максимум соответствует атому Pb (Рис. 3.13 (а)). С другой стороны, при смещении -0,5 В и токе 2,5 нА поверхность представляет собой сотовую структуру, каждый яркий максимум которой соответствует атому Tl (Рис. 3.13 (б)). При положительных смещениях на образце структура  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -(Tl, Pb), в большинстве случаев, выглядит как сотовый массив.

Атомная структура соединения Tl-Pb, рассчитанная при помощи метода AIRSS,



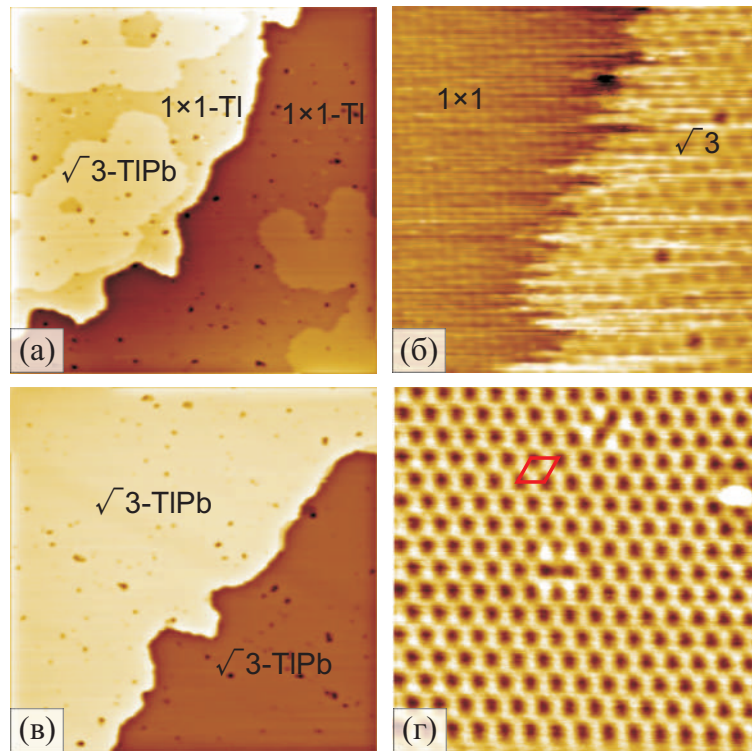


Рис. 3.11. (а)  $150 \times 150 \text{ нм}^2$  и (б)  $10 \times 10 \text{ нм}^2$  СТМ изображения, показывающие формирование двумерного соединения Тl-Pb на поверхности Si(111) $1 \times 1$ -Тl после осаждения при комнатной температуре  $0,18 \text{ МС Pb}$ . (в)  $150 \times 150 \text{ нм}^2$  и (г)  $10 \times 10 \text{ нм}^2$  СТМ изображения сформированной по всей поверхности структуры Si(111) $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -(Тl, Pb) после осаждения при комнатной температуре  $0,33 \text{ МС Pb}$  [124].

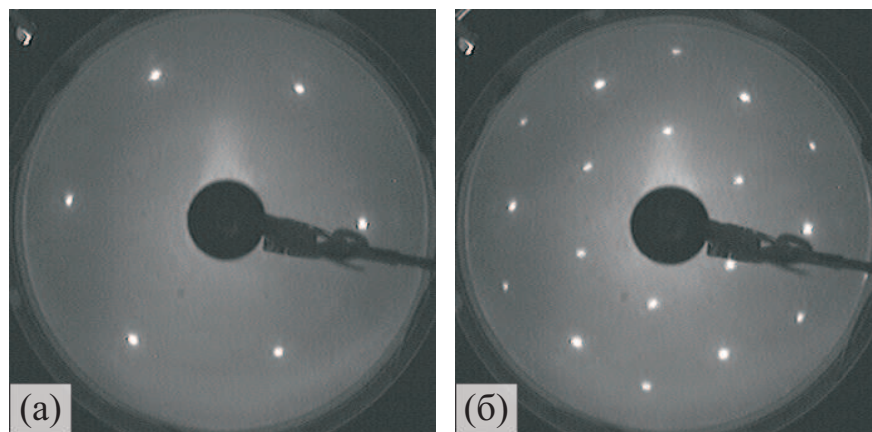


Рис. 3.12. Изображения ДМЭ ( $E_p = 54 \text{ эВ}$ ) поверхностей (а) Si(111) $1 \times 1$ -Тl, (б) Si(111) $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -(Тl, Pb) при  $78 \text{ К}$ .

представляет собой один атомный слой, в котором атомы Pb располагаются выше атомов Тl на  $0,37 \text{ \AA}$ . Структура состоит из сотово-связанных тримеров Тl с атомами Pb занимающими положения  $T_4$  в центре каждого сотового элемента (Рис. 3.14 (б)). На рисунке 3.14 (а) представлено СТМ изображение с высоким разрешением, на котором

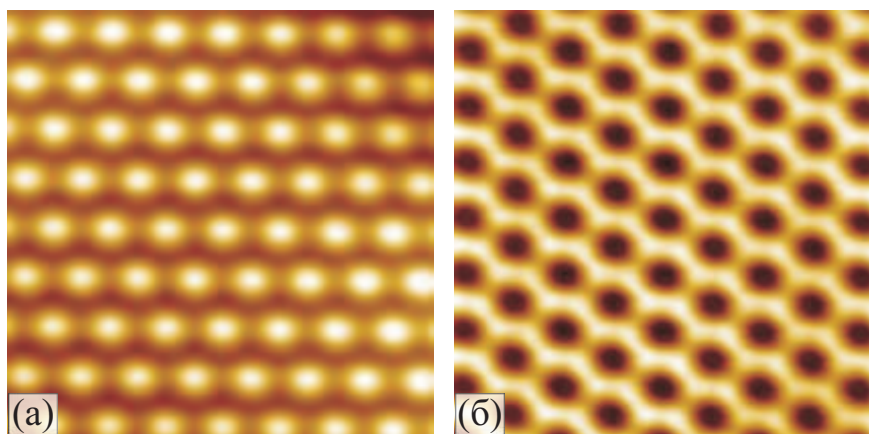


Рис. 3.13.  $5 \times 5 \text{ nm}^2$  СТМ изображение с высоким разрешением поверхности  $\text{Si}(111)\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -(Tl, Pb): (а) -2 В, 0,5 нА, (б) -0,5 В, 2,5 нА.

хорошо видны мелкие структурные особенности. Можно заметить, что на элементарную ячейку  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$  (обозначена красной рамкой) приходится три ярких максимума, которые соответствуют тримерам Tl в атомной модели. Такое соответствие экспериментального изображения с рассчитанной структурой свидетельствует о корректности предложенной атомной модели.

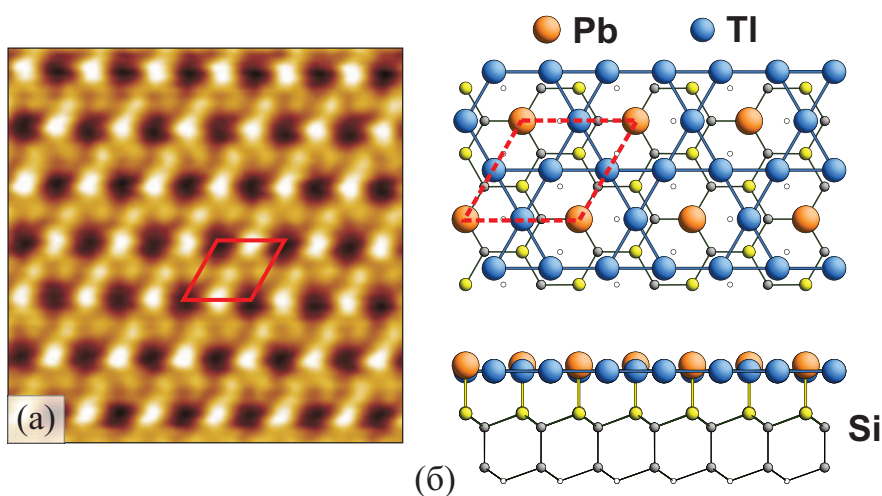


Рис. 3.14. (а)  $5 \times 5 \text{ nm}^2$  СТМ изображение с высоким разрешением поверхности  $\text{Si}(111)\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -(Tl, Pb). (б) Атомная структура соединения Tl-Pb. Атомы Tl показаны голубыми кружками, атомы Pb показаны оранжевыми кружками, верхние атомы Si показаны желтыми кружками, нижележащие атомы Si показаны светло серыми кружками. Элементарная ячейка  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$  обозначена красной рамкой [124].

Существенные структурные изменения, вследствие «сплавления» Tl-Pb, включая, в частности, изменение периодичности поверхности с  $1 \times 1$  на  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ , приводят к изменению зонной структуры. Как видно на рисунке 3.15 система является металлической

и наиболее важными особенностями электронной структуры этой системы являются две металлические расщепленные по спину зоны поверхностных состояний (обозначенные как  $\Sigma_1$  ( $\Sigma'_1$ ) и  $\Sigma_2$  ( $\Sigma'_2$ )). Эти зоны так же хорошо воспроизводятся на спектрах, полученных с помощью расчетов (Рис. 3.15 (нижняя панель)).

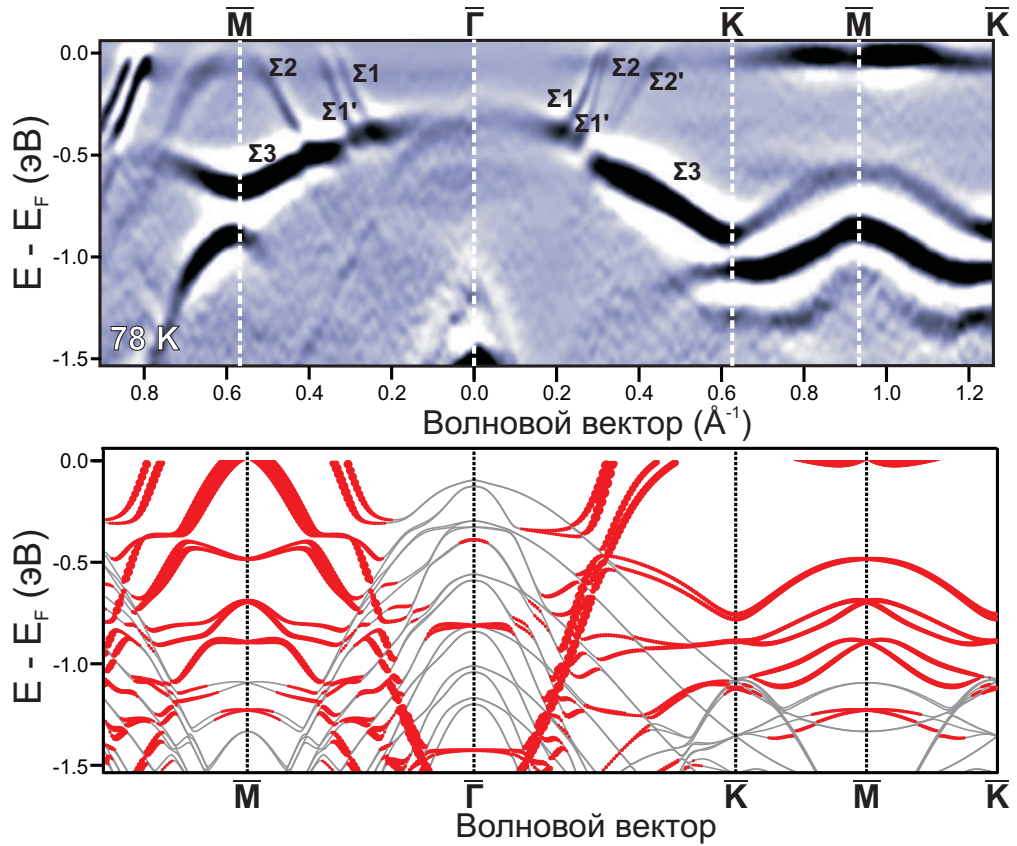


Рис. 3.15. Электронные свойства поверхности  $\text{Si}(111)\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -( $\text{Tl}$ ,  $\text{Pb}$ ). Экспериментальный УФЭСУР спектр (сверху) и расчетная электронная зонная структура (снизу). Экспериментальный спектр был получен при 78 К [86].

На поверхности Ферми зоны  $\Sigma_1$  ( $\Sigma'_1$ ) и  $\Sigma_2$  ( $\Sigma'_2$ ) выглядят как два расщепленных контура (Рис. 3.16). Для зоны  $\Sigma_1$  ( $\Sigma'_1$ ) внешний контур имеет почти круглую форму, в то время как внутренний контур имеет форму шестиугольника с углами, указывающими на направления  $\bar{\Gamma} - \bar{K}$  для поверхностной зоны Бриллюэна  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ . Максимальные расщепления по моменту и энергии для зоны  $\Sigma_1$  ( $\Sigma'_1$ )  $\Delta k=0,038 \text{ \AA}^{-1}$  и  $\Delta E_F=250 \text{ мэВ}$  соответственно, наблюдаются вдоль направления  $\bar{\Gamma} - \bar{M}$ . Максимальные расщепления для зоны  $\Sigma_2$  ( $\Sigma'_2$ )  $\Delta k=0,050 \text{ \AA}^{-1}$  и  $\Delta E_F=140 \text{ мэВ}$ , наблюдаются вдоль направления  $\bar{\Gamma} - \bar{K}$ . Расчеты при помощи метода функционала плотности показали, что планарные компоненты спина имеют спиральность в плоскости образца со спином, полностью ле-

жащим в плоскости и перпендикулярно векторам углового момента для направлений  $\bar{\Gamma} - \bar{K}$ . Такая спиновая текстура характерна для расщепления по типу Рашбы-Бычкова. Компоненты спина вне плоскости меняются между положительными и отрицательными значениями вдоль контура в соответствии с  $C_{3v}$  симметрией поверхности.

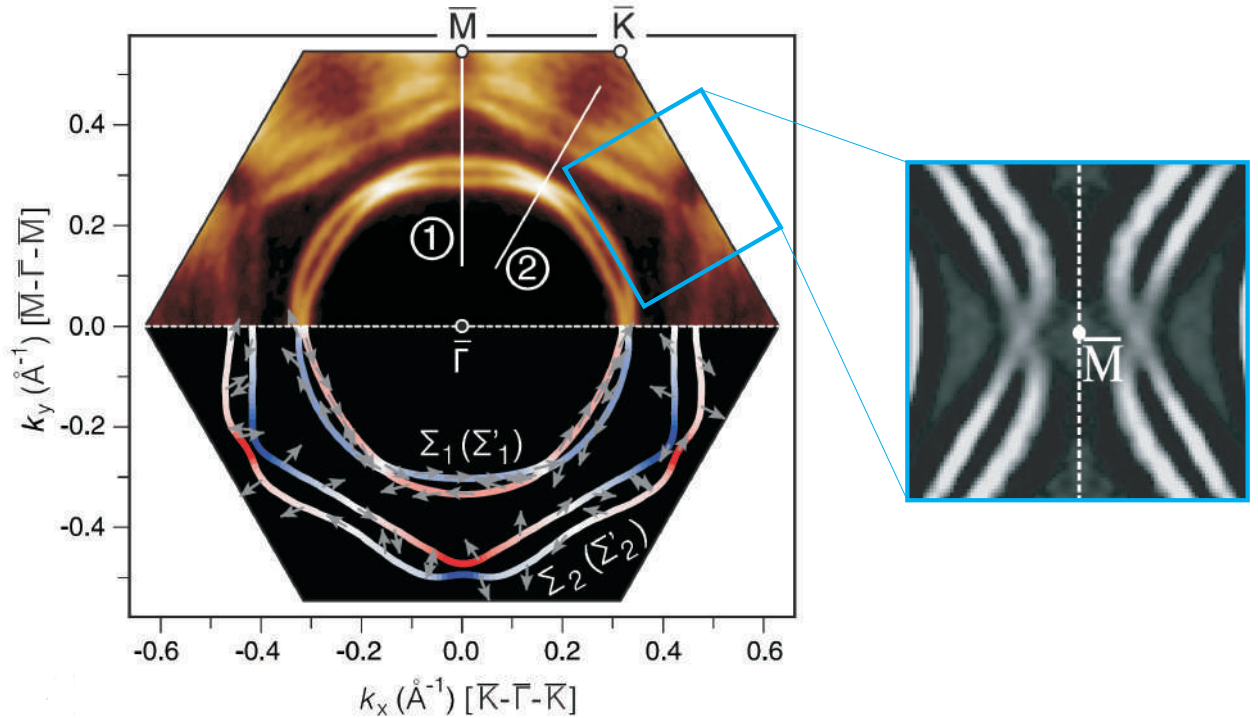


Рис. 3.16. Экспериментальные (сверху) и рассчитанные (снизу) Ферми контуры двумерного соединения Tl-Pb на поверхности Si(111) показанные в зоне Бриллюэна для поверхности  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ . Маленькими стрелками на нижней панели обозначены компоненты спина в плоскости, цветом обозначены компоненты спина вне плоскости. Голубым квадратом выделено изображение области вокруг  $\bar{M}$ -точки с более высоким разрешением [124].

Из литературных данных известно, что один атомный слой Pb на поверхности Si(111) обладает сверхпроводящими свойствами с критической температурой  $T_c \approx 1,1-1,8$  К [125], кроме того пленки Tl толщиной несколько десятков нанометров показывают сверхпроводимость при  $T_c = 2,4$  К [126]. Таким образом, для системы Si(111) $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -(Tl, Pb) является актуальным исследование сверхпроводящих свойств. Методом УФЭСУР возможно определить константу электрон-фононного взаимодействия (ЭФВ)  $\lambda$ , величина которой косвенно свидетельствует о наличии фононного спаривания электронов, т. е. высокое значение  $\lambda$  является индикатором возможности образования куперовских пар электронов, которые играют ключевую роль в сверхпро-



водимости. В литературных данных существует несколько примеров в которых были определены константы ЭФВ, а затем обнаружена сверхпроводимость. Так, например, для графена, допированного Са, теоретически [127] и экспериментально [128] была вычислена  $\lambda = 0,4$ , а затем при помощи прямых измерений проводимости была определена температура сверхпроводящего перехода  $T_c = 4$  К [129]. Среди двумерных систем на Si(111) такими примерами являются монослой In и монослой Pb для которых экспериментально была определена  $\lambda$ , значение которой составило для In 0,8-1,0 [130], для Pb 0,6-0,9 [131] и температура сверхпроводящего перехода  $T_c = 2,4$  К для In [6] и  $T_c = 1,1-1,8$  К для Pb [132, 133].

Для того чтобы определить коэффициент  $\lambda$  для исследуемой системы Si(111) $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -(Tl, Pb) были использованы зависимости данных УФЭСУР от температуры, где  $\lambda$  была вычислена из наклона температурной зависимости спектральной энергетической ширины зоны поверхностных состояний  $\Delta E$  по кривым распределения  $E$  (EDC, Рис. 3.17) в соответствии с соотношением  $\lambda = (d\Delta E/dT)/(2\pi k_B)$ , где  $k_B$  – постоянная Больцмана. Значение  $\lambda$  на уровне Ферми  $E_F$  наиболее важно для электрической про-

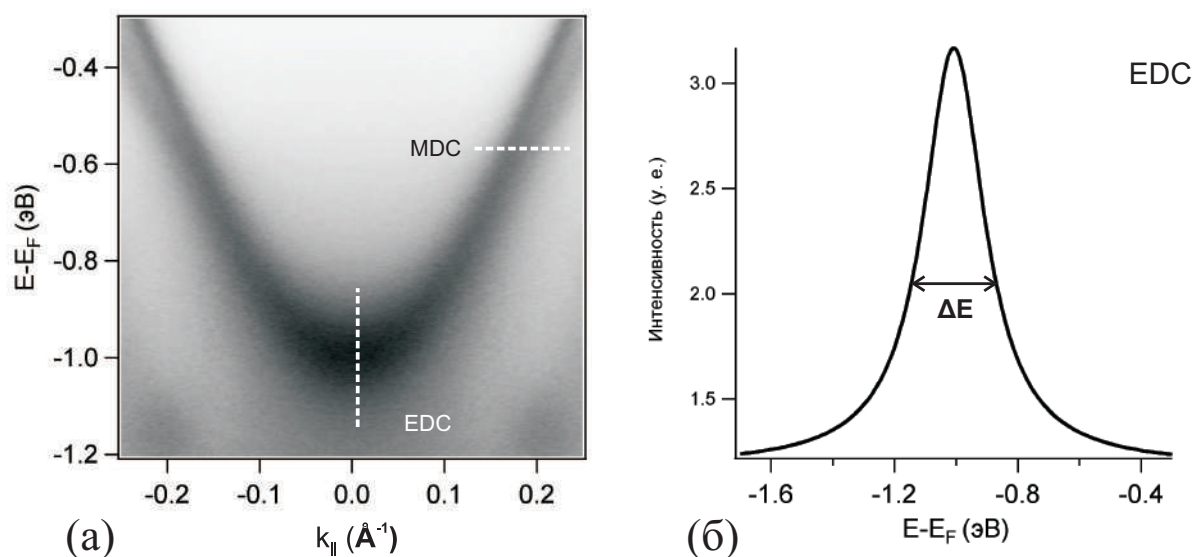


Рис. 3.17. Схематические иллюстрации: (а) Положения профилей для кривых распределения энергии (EDC) и импульса (MDC), (б) профиль кривой распределения энергии (EDC).

водимости. Однако, зоны  $\Sigma_1$  и  $\Sigma_2$  пересекают поверхность Ферми под углом, близким

к  $90^\circ$ , что затрудняет точное определение  $\Delta E$ . Поэтому, для начала были определены кривые распределения импульса (МДС) (Рис. 3.17 (а)) и ширина  $\Delta k$ , которая определяется из аппроксимации функцией Лоренца кривой распределения импульса (Рис. 3.18 (б)). Значение  $\Delta E$  было получено как произведение  $\Delta k$  на градиент дисперсии  $dE/dk$  вблизи уровня Ферми для каждой из зон. И, наконец,  $\lambda$  определялась из линейной аппроксимации зависимостей  $\Delta E(T)$ . Минимальные температуры были ограничены 110 К для того, чтобы превысить температуру Дебая, которая, как известно, составляет  $\sim 90$ -100 К для объемных Тl и Рb. Для каждой зоны измерения проводились в направлениях, где расщепление максимально (то есть в направлении  $\bar{\Gamma} - \bar{M}$  для зоны  $\Sigma_1$  ( $\Sigma'_1$ ) и в направлении  $\bar{\Gamma} - \bar{K}$  для зоны  $\Sigma_2$  ( $\Sigma'_2$ )) (Рис. 3.18 (а)), чтобы получить  $\lambda$  для каждой из подзон.

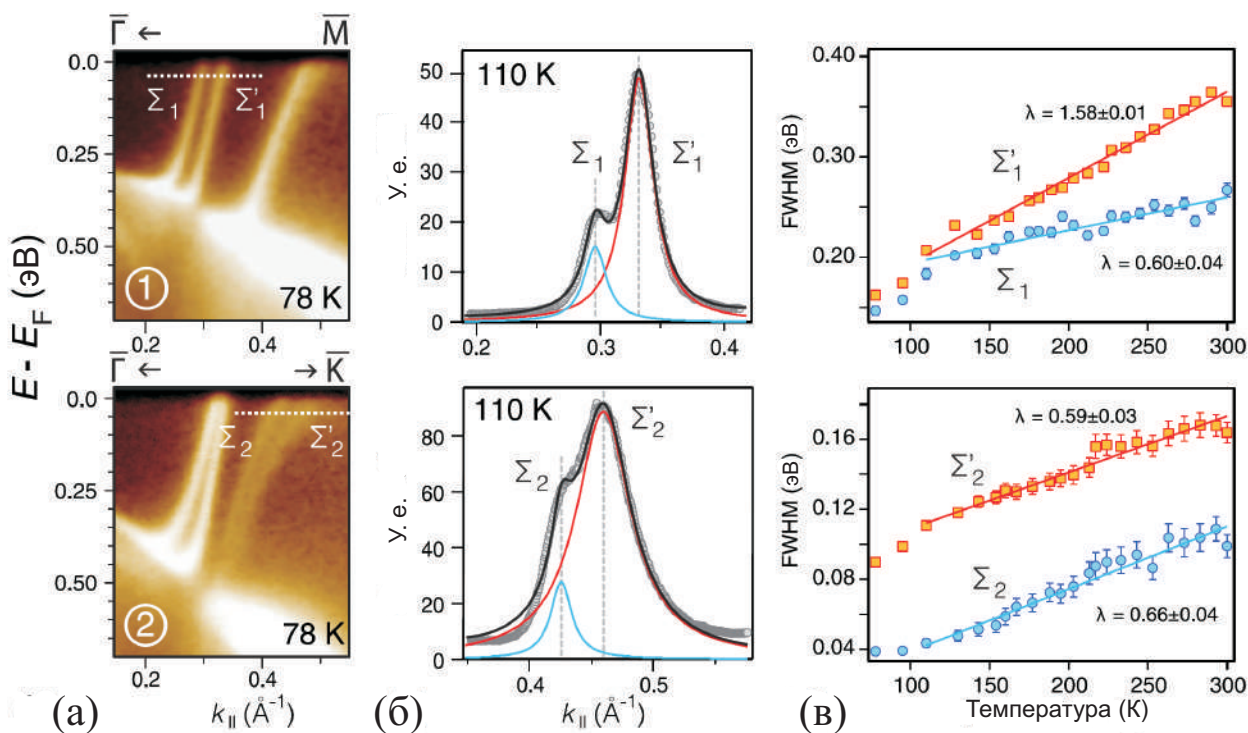


Рис. 3.18. (а) Фрагменты спектров УФЭСУР, показывающие дисперсию зон  $\Sigma_1$  ( $\Sigma'_1$ ) и  $\Sigma_2$  ( $\Sigma'_2$ ) вблизи уровня Ферми вдоль направлений  $\bar{\Gamma} - \bar{M}$  и  $\bar{\Gamma} - \bar{K}$  [линии 1 и 2 на рисунке 3.16]. (б) Кривые распределения импульсов измеренные вдоль пунктирных линий показанных на (а) и их функция Лоренца соотнесенная с постоянной фона зон  $\Sigma_1$  ( $\Sigma'_1$ ) и  $\Sigma_2$  ( $\Sigma'_2$ ). (в) Температурные зависимости энергетической ширины  $\Delta E$  для зон поверхностных состояний  $\Sigma_1$  ( $\Sigma'_1$ ) и  $\Sigma_2$  ( $\Sigma'_2$ ) [124].

На рисунке 3.18 (в) изображены графики зависимостей  $\Delta E(T)$  с результатами фитирования константы ЭФВ  $\lambda$ . Набор экспериментов, проведенных с разными образцами,

в режимах нагрева и охлаждения дает следующие средние значения  $\lambda$ :  $0,7 \pm 0,1$  для зоны  $\Sigma_1$ ,  $1,6 \pm 0,1$  для зоны  $\Sigma'_1$ , и  $\lambda$ :  $0,6 \pm 0,5$  для зон  $\Sigma_2$  и  $\Sigma'_2$ .

Видно, что константа ЭФВ отличается от зоны к зоне и может быть разной даже для двух соседних подзон имеющих противоположные ориентации спина. Однако, различия в ЭФВ для разных зон в одном материале является частым явлением из-за сильно меняющейся плотности состояний и фононного спектра для различных значений импульса. К тому же, соотношения между константой ЭФВ и сверхпроводящими особенностями не однозначно (например,  $\lambda$  может быть сильно усилена из-за эффектов поверхности или/и границы раздела). Тем не менее, наличие относительно высокой  $\lambda$  для зоны  $\Sigma'_1$  дало основания для проведения транспортных измерений, которые показали, что 2D однослойный сплав  $\text{TlPb/Si}(111)\sqrt{3} \times \sqrt{3}$  действительно является сверхпроводником с  $T_c = 2,25 \text{ К}$  [124].

### 3.3.2 Реконструкция Si(111)4×4-(Tl, Pb)

В системе Tl-Pb присутствует еще одна реконструкция, которая отличается от реконструкции Si(111) $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -(Tl, Pb) бóльшим покрытием Pb и периодом решетки 4×4. Формирование этой реконструкции происходит при осаждении атомов Pb на поверхность Si(111) $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -(Tl, Pb) при КТ. Как видно на СТМ изображении, на поверхности формируются области новой фазы 4×4-(Tl, Pb) (Рис. 3.19 (а)), которые при дальнейшем осаждении атомов Pb до  $\theta = 0,75$  МС занимают всю поверхность.

Эта реконструкция на СТМ изображении представляет собой массив с сотовой структурой (Рис. 3.19 (б)) и практически не меняется при охлаждении до 78 К. Отличительной особенностью реконструкции 4×4-(Tl, Pb) является появление участков, занятых двойным слоем Tl, которые предпочтительно размещаются по краям ступеней, что хорошо видно на СТМ изображении (Рис. 3.19 (в)). Появление избытка Tl означает, что при образовании реконструкции 4×4-(Tl, Pb) происходит замещение части атомов Tl на атомы Pb, при этом вытесненный Tl формирует двойной слой, который является характерной особенностью Tl на Si(111) [81, 90].

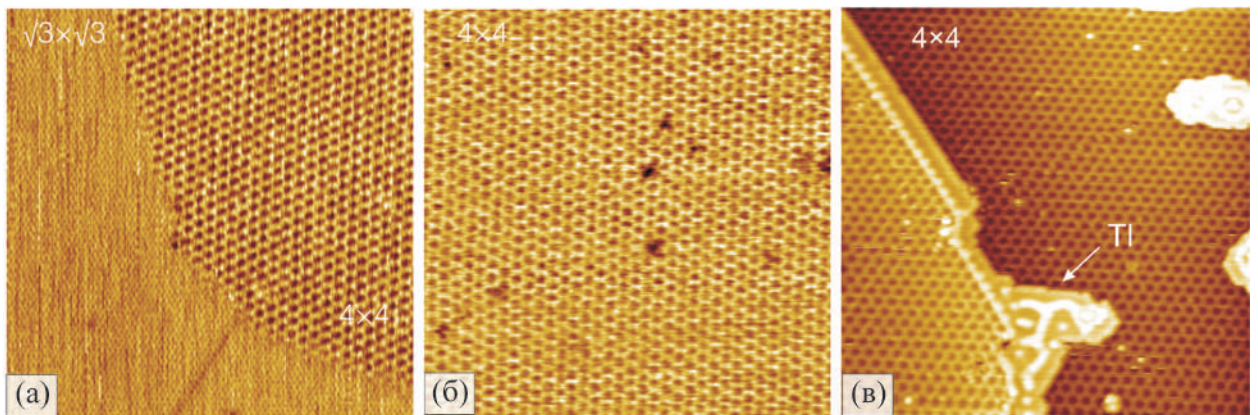
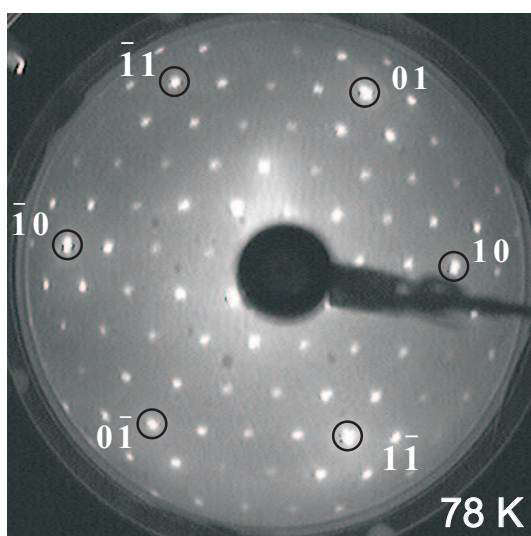


Рис. 3.19. (а) 50×50 нм<sup>2</sup> СТМ изображения формирования двумерного соединения Si(111)4×4-(Tl, Pb) на поверхности Si(111) $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -(Tl, Pb) после осаждения 0,55 МС Pb при КТ, (б) 50×50 нм<sup>2</sup> СТМ изображение сформированной по всей поверхности структуры Si(111)4×4-(Tl, Pb) после осаждения 0,75 МС Pb при КТ, (в) 50×50 нм<sup>2</sup> СТМ изображение поверхности Si (111)4×4-(Tl, Pb), полученной при 78 К. Стрелкой обозначен двойной слой Tl, расположенный вдоль края ступени [134].

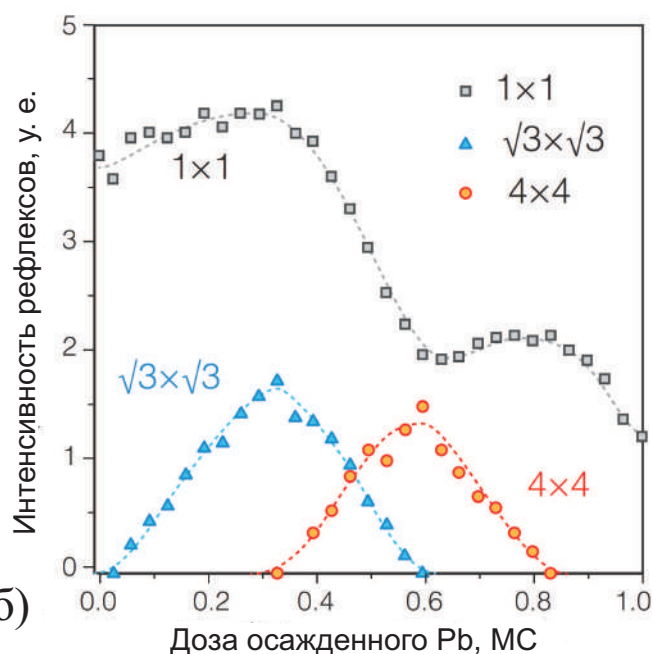
Изображение ДМЭ от сформированной по всей поверхности реконструкции 4×4-(Tl, Pb) представлено на рисунке 3.20 (а). На этом изображении хорошо видны яркие



точечные рефлексы соответствующие периоду  $4 \times 4$ , а так же рефлексы  $1 \times 1$  от объемного Si. Четкость изображения ДМЭ говорит о том, что структура хорошо упорядочена без каких-либо дополнительных особенностей. На рисунке 3.20 (б) представлен график зависимости интенсивности рефлексов от дозы Pb, на котором видно, что рефлексы  $4 \times 4$  демонстрируют наивысшую интенсивность после осаждения  $\sim 0,6$  МС Pb. В этой же точке наблюдается заметное снижение интенсивности рефлексов от  $1 \times 1$ , что говорит о присутствии двойного слоя Tl, который затеняет рефлексы от  $1 \times 1$ .



(a)



(б)

Рис. 3.20. (а) Изображение ДМЭ ( $E_p=54$  эВ) для поверхности Si(111) $4 \times 4$ -(Tl, Pb). (б) Эволюция интенсивности рефлексов ДМЭ в течение структурных превращений вызванных осаждением атомов Pb на поверхность Si(111) $1 \times 1$ -Tl при КТ [134].

С помощью расчетов методом функционала плотности (ТФП) был определен атомный состав реконструкции Si(111) $4 \times 4$ -(Tl, Pb). Исходя из полученных данных было выяснено, что энергия образования структуры уменьшается с заменой атомов Tl на атомы Pb, при этом полное покрытие в этой системе остается практически неизменным. Это означает, что число замещенных атомов Tl примерно такое же, как число принятых атомов Pb. Таким образом, определен состав реконструкции  $4 \times 4$ -(Tl, Pb) который содержит 9 атомов Tl и 12 атомов Pb на элементарную ячейку  $4 \times 4$ , то есть 0,56 МС Tl и 0,75 МС Pb, при этом общее покрытие сплава составляет 1,31 МС. В сравне-

нии с реконструкцией  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -(Tl, Pb) можно отметить явное отличие в соотношении атомов Tl и атомов Pb, а именно, фаза  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -(Tl, Pb) содержит 1,0 МС Tl и 0,33 МС Pb. Общее покрытие в реконструкции  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -(Tl, Pb) составляет 1,33 МС, что соотносится с общим покрытием реконструкции  $4 \times 4$ -(Tl, Pb) и подтверждает то, что соединение Tl-Pb является двумерным металлическим сплавом.

На рисунке 3.21 показаны атомные модели реконструкции  $4 \times 4$ -(Tl, Pb). Так как для гексагональной структуры характерна симметрия  $C_{3v}$ , была предложена атомная модель реконструкции  $4 \times 4$ -(Tl, Pb), подчиняющаяся этой симметрии (Рис. 3.21 (б)). Однако при дальнейших поисках оптимальной структуры было обнаружено, что если снять ограничение связанное с зеркальной симметрией, она эволюционирует в структуру, имеющую симметрию  $C_3$  и имеет меньшую энергию формирования (Рис. 3.21 (а)). Обе модели имеют очень похожее атомное расположение, состоящее из одинаковых элементов. В моделях 12 атомов Pb образуют гексагональную решетку, в которой атомы Pb занимают положения, близкие к положениям  $T_1$ . Атомный массив Pb имеет форму шестиугольника, который можно представить себе также как усеченный треугольник. Девять атомов Tl расположены в двух структурных элементах. Первый элемент содержит 6 атомов Tl, образующих массив треугольной формы, где атомы Tl занимают положения, близкие к положениям  $T_4$ . Остальные 3 атома Tl образуют тример, центрированный в положении  $T_1$ , в то время как атомы Tl в нем расположены вблизи положений  $H_3$ . Отсутствие зеркальной симметрии в модели  $C_3$  обусловлено поворотом структурных элементов, а именно, атомный массив Pb повернут на  $5,9^\circ$ , треугольник из шести атомов Tl на  $8,1^\circ$  и тример Tl на  $9,7^\circ$  относительно ориентации их аналогов в модели  $C_{3v}$ .

Энергия образования  $C_3$  модели на 77 мэВ ниже, чем у модели  $C_{3v}$ . На рисунке 3.21 (в) показана суперпозиция структурной модели  $C_3$  в двух эквивалентных ориентациях с поворотом структурных элементов по часовой стрелке или против часовой стрелки. Также следует отметить, что переход структурной модели  $C_3$  из одной ориентации в другую происходит через структурную модель  $C_{3v}$ , которая является промежуточной (Рис. 3.21 (в)). Такой переход подразумевает преодоление энергетического барьера

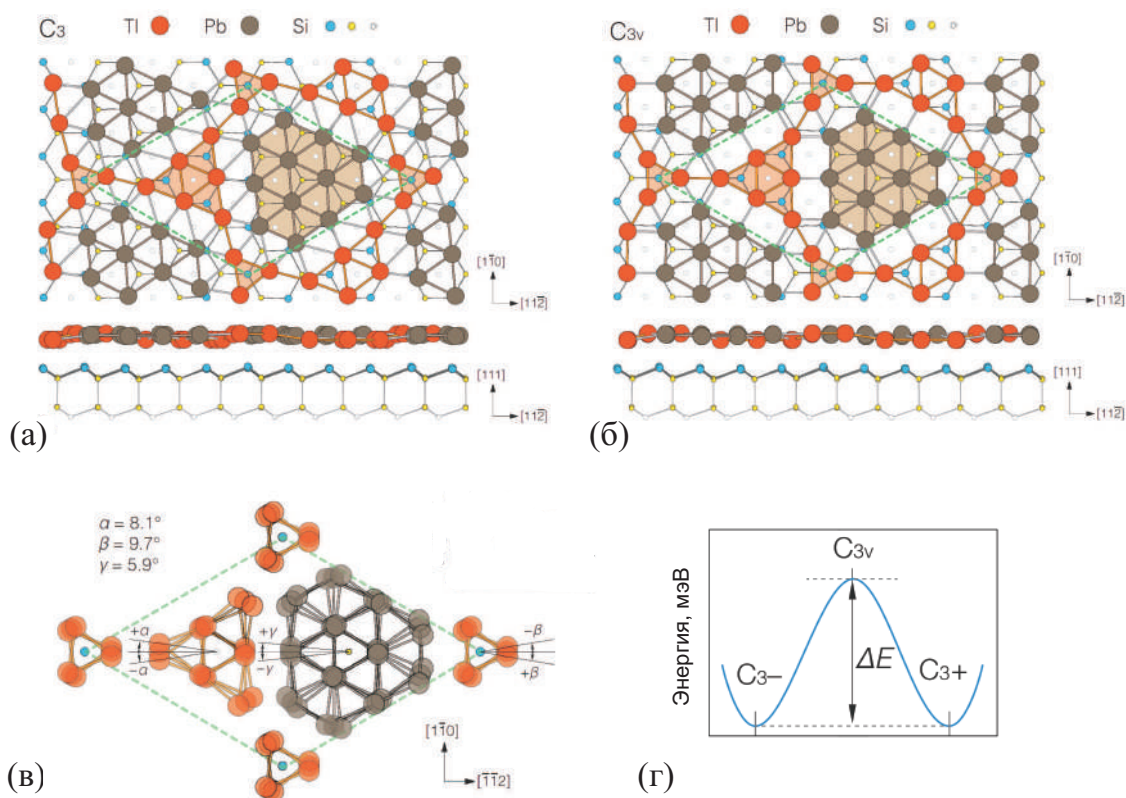


Рис. 3.21. Структурные модели  $\text{Si}(111)4 \times 4$ -(Tl, Pb), имеющие (а) симметрию  $C_3$  и (б) симметрию  $C_{3v}$ . (в) Принципиальная схема, иллюстрирующая переход между структурами  $C_3$  в двух возможных ориентациях со структурой  $C_{3v}$  в качестве промежуточной стадии. (г) Разница в энергии для приведенных структур [134].

(Рис. 3.21 (г)), но, как показали расчеты, он довольно мал, что позволяет структуре непрерывно поворачиваться между двумя ориентациями даже при относительно низких температурах.

В качестве подтверждения достоверности предложенных моделей, сравнивались моделированные СТМ изображения, полученные для моделей  $C_3$  и  $C_{3v}$  с экспериментальными СТМ изображениями с высоким разрешением, на которых хорошо видны мелкие структурные особенности. Результаты сравнения представлены на рисунке 3.22. Видно, что моделированные СТМ изображения для моделей  $C_3$  и  $C_{3v}$  (Рис. 3.22 (б) и (в)) почти идентичны. В свою очередь, обе модели демонстрируют близкое сходство с экспериментальными СТМ изображениями (Рис. 3.22 (а)), что подтверждает правильность моделей.

Не смотря на то, что СТМ и ДМЭ изображения свидетельствуют о структурном совершенстве реконструкции и достаточно хорошем дальнем порядке, экспериментальные

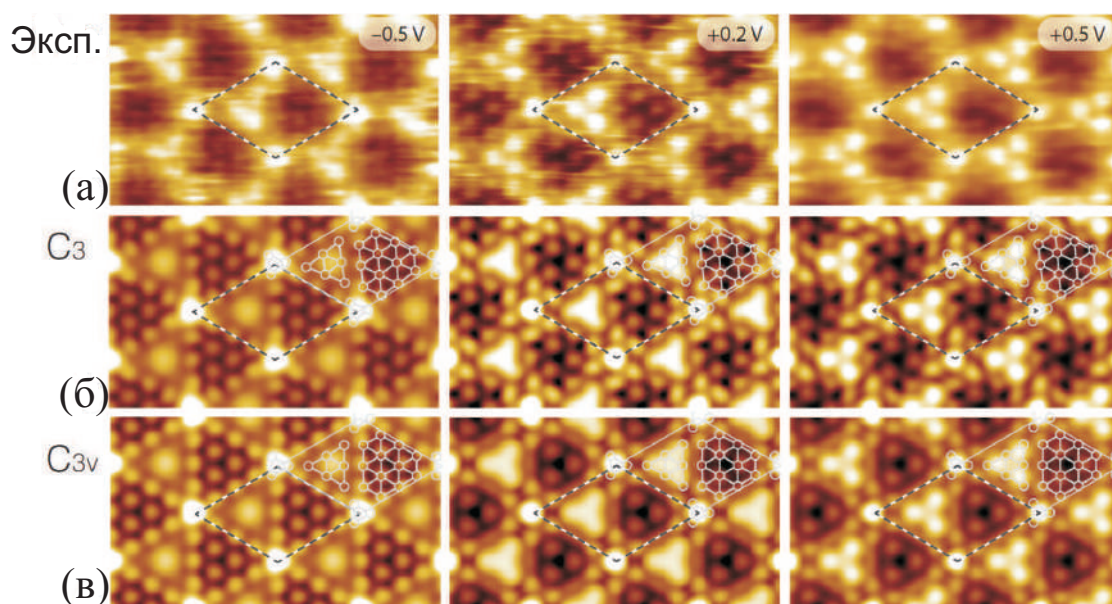


Рис. 3.22. Сравнение (а) экспериментальных изображений СТМ, полученных при +0,2 В, +0,5 В и -0,2 В с соответствующими моделированными СТМ изображениями для (б) модели  $C_3$  и (в) модели  $C_{3v}$  поверхности  $\text{Si}(111)4\times 4-(\text{Tl}, \text{Pb})$ . Элементарные ячейки  $4\times 4$  обозначены ромбом. Основные структурные элементы моделей (расположения атомов Pb, расположение треугольников атомов Tl и тримеры атомов Tl) накладываются на моделированные СТМ изображения, чтобы проиллюстрировать происхождение СТМ особенностей [134].

спектры УФЭСУР довольно размыты (Рис. 3.23). Из полученных экспериментальных

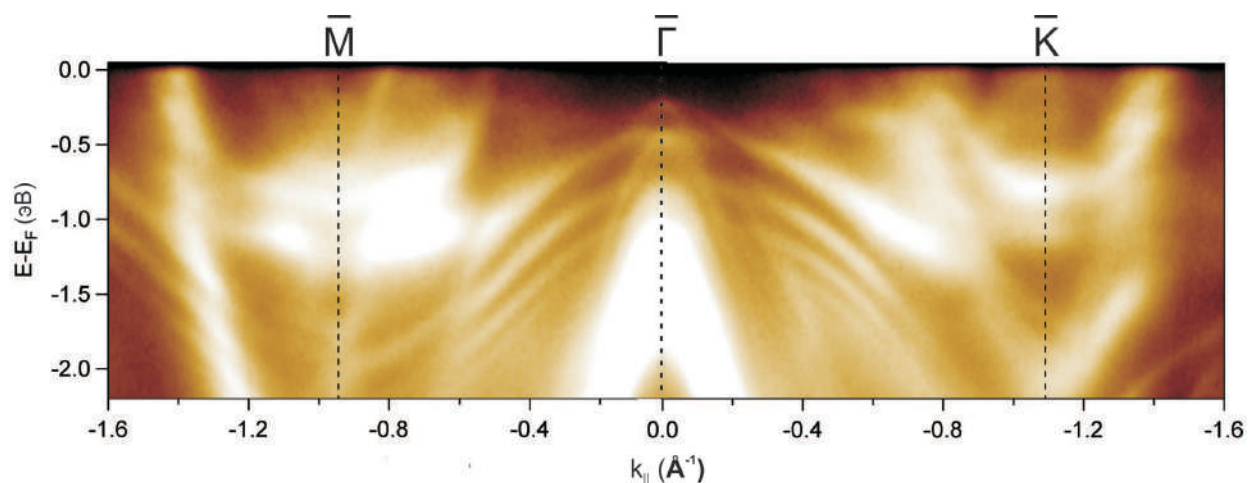


Рис. 3.23. Экспериментальные данные УФЭСУР электронной структуры поверхности  $\text{Si}(111)4\times 4-(\text{Tl}, \text{Pb})$ .

данных можно определить лишь наличие зон поверхностных состояний, пересекающих уровень Ферми, что говорит о металлических свойствах поверхности. Однако, разрешающая способность нашей измерительной системы не позволяет определить, расщеп-



лены ли эти зоны на подзоны или нет. Кроме того, на экспериментальных спектрах не прослеживается характерная зонная структура, которая соответствует поверхностной зоне Бриллюэна решетки  $4 \times 4$ , все дисперсии поверхностных состояний сведены в зоне Бриллюэна поверхности  $1 \times 1$ . Это связано с тем, что если рассматривать структурную модель (Рис. 3.21) реконструкции  $4 \times 4$ -(Tl, Pb), то можно заметить, что в этой структуре расположение большинства атомов соответствует периоду  $1 \times 1$ , в то время как, период  $4 \times 4$  является некоторой модуляцией поверхности в виде муарового рисунка. Это приводит к тому, что на экспериментальных спектрах отображается только основной период  $1 \times 1$ , без особенностей, вносимых модуляцией  $4 \times 4$ . Исходя из вышесказанного для определения более подробных деталей электронной структуры реконструкции  $4 \times 4$ -(Tl, Pb) были проведены расчеты электронной зонной структуры методом ТФП для этой поверхности.

На рисунке 3.24 показаны рассчитанные зонные структуры для моделей  $C_3$  и  $C_{3v}$ . Структуры зон представлены дисперсионными кривыми вдоль направлений  $\bar{\Gamma}-\bar{M}-\bar{\Gamma}$  и

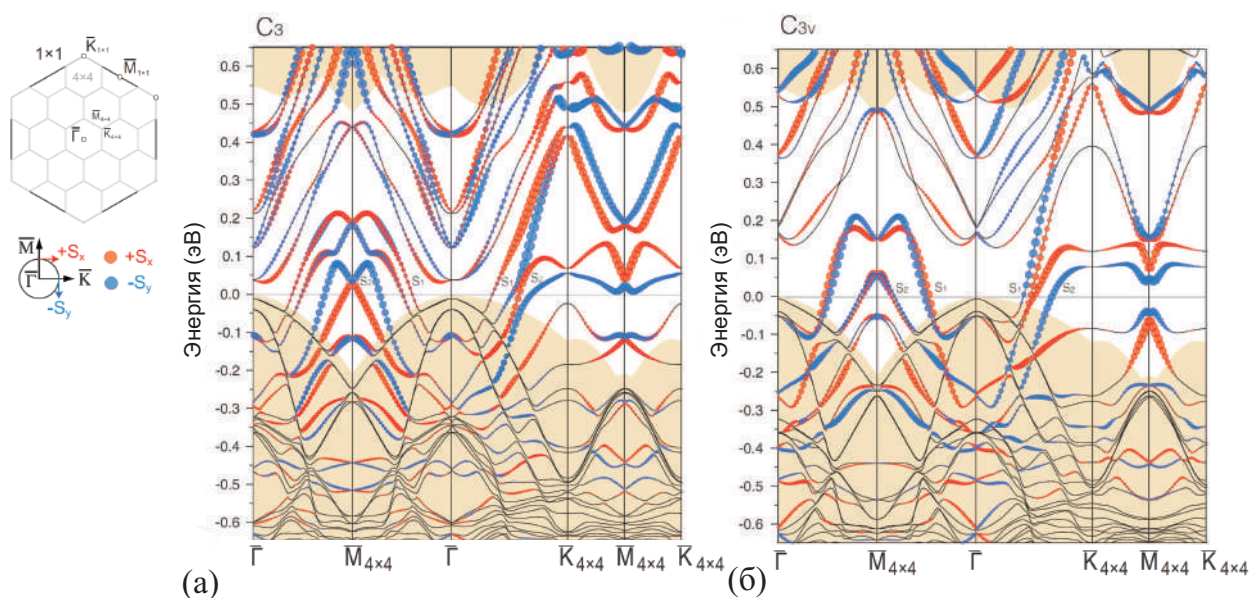


Рис. 3.24. Электронные зонные структуры, рассчитанные для (а) модели  $C_3$  и (б) модели  $C_{3v}$  реконструкции Si(111) $4 \times 4$ -(Tl, Pb) [134].

$\bar{\Gamma}-\bar{K}-\bar{M}-\bar{K}$  в поверхностной зоне Бриллюэна  $4 \times 4$ , как показано на схеме на рисунке 3.24. Видно, что обе структуры демонстрируют две металлически расщепленные по спину зоны поверхностных состояний, обозначенные как  $S_1$  ( $S'_1$ ) и  $S_2$  ( $S'_2$ ). Заметно,

что расщепление по спину в случае структурной модели  $C_3$  заметно больше, чем для структурной модели  $C_{3v}$  (Табл. 3.1, 3.2). Стоит также отметить, что, несмотря на различие в периодичности, рассчитанная зонная структура реконструкции  $4 \times 4$ -(Tl, Pb) качественно близка к тем, которые рассчитаны и экспериментально определены с помощью УФЭСУР для реконструкции  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -(Tl, Pb).

Модель	$\bar{\Gamma}-\bar{M}$			
	$S_1$		$S_2$	
	$\Delta k, \text{ \AA}^{-1}$	$\Delta E, \text{ мэВ}$	$\Delta k, \text{ \AA}^{-1}$	$\Delta E, \text{ мэВ}$
$C_3$	0,023	55	0,047	105
$C_{3v}$	0,009	34	0,008	17

Табл. 3.1. Значения параметров спинового расщепления зон  $S_1$  и  $S_2$  в направлении  $\bar{\Gamma}-\bar{M}$  вблизи уровня Ферми [134].

Модель	$\bar{\Gamma}-\bar{K}$			
	$S_1$		$S_2$	
	$\Delta k, \text{ \AA}^{-1}$	$\Delta E, \text{ мэВ}$	$\Delta k, \text{ \AA}^{-1}$	$\Delta E, \text{ мэВ}$
$C_3$	0,045	77	0,027	52
$C_{3v}$	0,017	48	0,042	128

Табл. 3.2. Значения параметров спинового расщепления зон  $S_1$  и  $S_2$  в направлении  $\bar{\Gamma}-\bar{K}$  вблизи уровня Ферми [134].

### 3.4 Структурные и электронные свойства системы (Au, Al)/Si(111)

Недавние исследования показали, что атомную и электронную структуру поверхностной реконструкции  $\text{Si}(111)\alpha\text{-}\sqrt{3} \times \sqrt{3}\text{-Au}$  можно существенно улучшить путем адсорбции небольших количеств адсорбатов, например таких как Tl, In, Cs, Na. В результате формируется хорошо упорядоченная однородная поверхность без доменных стенок с ярко выраженными металлическими поверхностными состояниями, которые демонстрируют большое расщепление по спину по типу Рашбы-Бычкова [26].

В данной диссертационной работе поверхностные реконструкции в системе Au/Si(111) модифицировались атомами Al, что приводило к более существенным изменениям в атомной и электронной структурах, а именно, созданию 2D сплава Au-Al с периодом решетки  $2 \times 2$  и интересной спиновой текстурой металлических поверхностных состояний.

Поверхностную реконструкцию  $\text{Si}(111)2 \times 2\text{-(Au, Al)}$  можно сформировать путем осаждения атомов Al на поверхностные реконструкции  $5 \times 2\text{-Au}$ ,  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}\text{-Au}$  и их смесь, что позволяет плавно варьировать покрытие Au в диапазоне  $0,7 \div 1$  МС, т. к. известно, что в реконструкции  $5 \times 2$  покрытие Au составляет 0,7 МС, а в реконструкции  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$  1 - 1,2 МС. На первом этапе в качестве исходной поверхности была выбрана реконструкция  $5 \times 2\text{-Au}$ , на втором - смесь реконструкций  $5 \times 2\text{-Au}$  и  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}\text{-Au}$ , на третьем - реконструкция  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}\text{-Au}$ .

Исходная поверхностная реконструкция  $\text{Si}(111)5 \times 2\text{-Au}$  была сформирована путем осаждения 0,7 МС Au на чистую поверхность  $\text{Si}(111)7 \times 7$  при температуре  $\sim 600^\circ\text{C}$  (Рис. 3.25). При осаждении атомов Al на эту реконструкцию при КТ с последующим отжигом при температуре  $\sim 600^\circ\text{C}$  происходит формирование лентоподобной структуры с темными желобами, которая обладает периодичностью  $2 \times 2$  (Рис. 3.26). Эти желоба ориентированы исключительно вдоль направления  $\langle 10\bar{1} \rangle$ , что соответствует основному кристаллографическому направлению Si(111). Внутри желоба структура поверхности

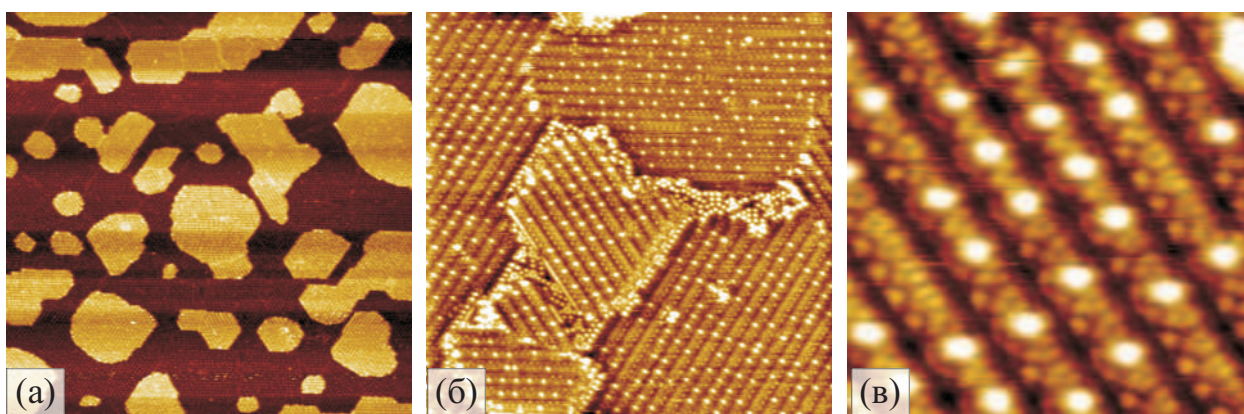


Рис. 3.25. СТМ изображения исходной поверхности Si(111)5×2-Au: (а) 200×200 нм<sup>2</sup>, (б) 50×50 нм<sup>2</sup>, (в) 10×10 нм<sup>2</sup>.

хорошо упорядоченна и также имеет период  $2 \times 2$ .

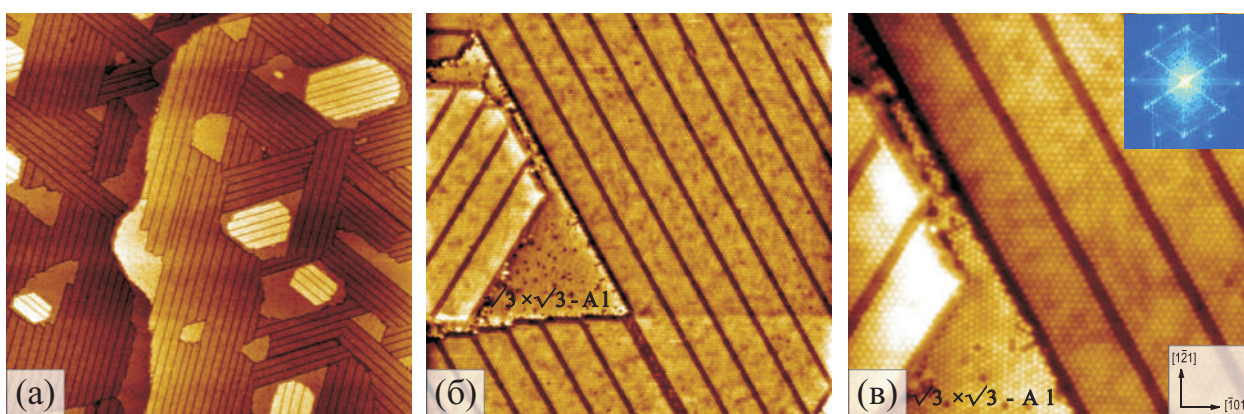


Рис. 3.26. СТМ изображения реконструкции  $2 \times 2$ -(Au, Al), сформированной при исходном покрытии Au  $\sim 0,7$  МС: (а) 400×400 нм<sup>2</sup>, (б) 90×90 нм<sup>2</sup>, (в) 40×40 нм<sup>2</sup>. На вставке представлено изображение преобразования Фурье полученное от поверхности (в) [135].

При дальнейшем осаждении атомов Al на уже сформированную реконструкцию Si(111)2×2-(Au, Al) темные желоба сохраняются на поверхности и появляются участки реконструкции  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -Al (Рис. 3.26 (б)). Это говорит о том, что на данной поверхности существует недостаток атомов Au для формирования реконструкции  $2 \times 2$ -(Au, Al) без дефектов в виде темных желобов, а избыток атомов Al приводит к образованию алюминиевой фазы. Это означает, что для формирования гомогенной поверхности с минимальным количеством дефектов покрытие Au должно быть больше 0,7 МС.

На рисунке 3.27 представлены СТМ изображения с высоким разрешением реконструкции Si(111)2×2-(Au, Al). На этих изображениях видно, что структура в основном



выглядит как гексагональный массив с одним ярким максимумом на элементарную ячейку  $2 \times 2$  как при положительном смещении, так и при отрицательном. Особенно это касается СТМ изображений незаполненных состояний, где все максимумы имеют ту же круглую форму, хотя, могут отличаться по яркости (Рис. 3.27 (верхняя панель)). СТМ изображения заполненных состояний выявляют более очевидные изменения в их внешнем виде, а именно, в дополнении к изменяющейся яркости, во многих случаях можно отметить появление перемычек между соседними максимумами (Рис. 3.27 (нижняя панель)).

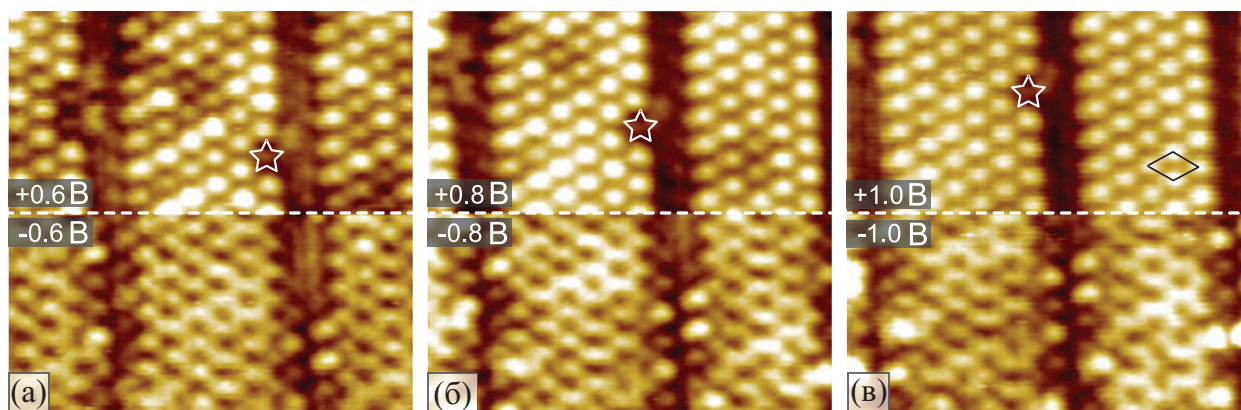


Рис. 3.27.  $11 \times 11 \text{ nm}^2$  СТМ изображения ленточных доменов реконструкции  $2 \times 2$ -(Au, Al) при разных смещениях: (а)  $\pm 0,6 \text{ В}$ , (б)  $\pm 0,8 \text{ В}$ , (в)  $\pm 1 \text{ В}$ . Изображения получены почти с одной и той же области поверхности, что подтверждается характерным дефектом, обозначенным звездой. Элементарная ячейка  $2 \times 2$  выделена на (в) [135].

Далее, для увеличения покрытия Au в реконструкции  $2 \times 2$ -(Au, Al) в качестве исходной поверхности была использована смесь реконструкций  $5 \times 2$ -Au и  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -Au, которая была сформирована путем осаждения 1 МС Au на чистую поверхность Si(111) $7 \times 7$  при температуре  $\sim 600^\circ\text{C}$  (Рис. 3.28).

При напылении атомов Al на сформированную смесь реконструкций на поверхности произвольно появлялись вкрапления реконструкции  $2 \times 2$ -(Au, Al), которые увеличиваются в размерах с последующим осаждением атомов Al. На этапе, когда домены реконструкции  $2 \times 2$ -(Au, Al) соединяются вместе по всей поверхности, проявляются характерные линейные дефекты реконструкции  $2 \times 2$ -(Au, Al), которые выглядят на СТМ изображении как многочисленные темные впадины (Рис. 3.29). Следует отметить, что эти дефекты можно условно разделить на длинные и короткие (Рис. 3.29 (б)). Большин-

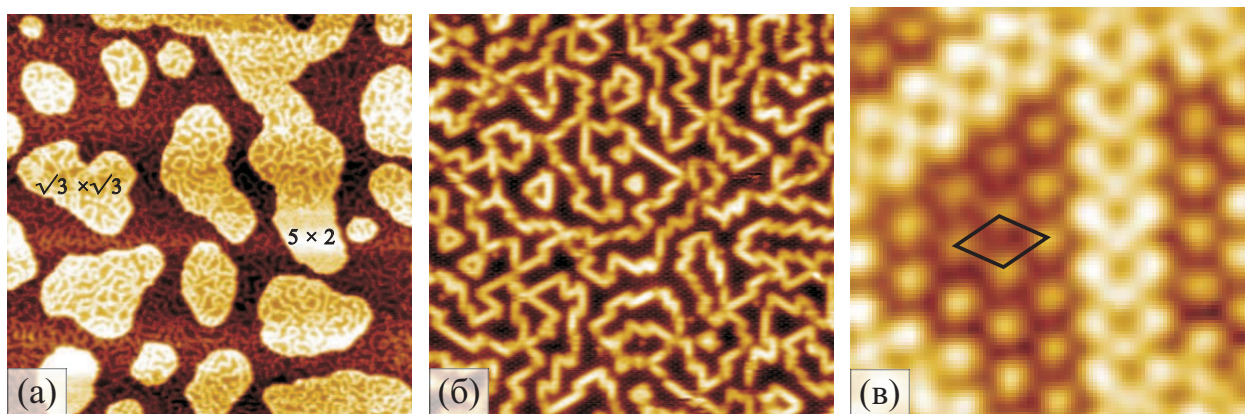


Рис. 3.28. СТМ изображения исходной поверхности с реконструкциями  $5 \times 2$ -Au и  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -Au: (а)  $200 \times 200$  нм<sup>2</sup>, (б)  $50 \times 50$  нм<sup>2</sup>, (в)  $5 \times 5$  нм<sup>2</sup>. Ромбом на (в) обозначена элементарная ячейка  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ .

ство длинных впадин ориентированы вдоль направления  $\langle 1\bar{2}1 \rangle$ , в то время как короткие впадины ориентированы вдоль направления  $\langle 10\bar{1} \rangle$ . Эти направления,  $\langle 10\bar{1} \rangle$  и  $\langle 1\bar{2}1 \rangle$ , соответствуют основным кристаллографическим направлениям Si(111) и направлениям периода  $\sqrt{3}$ , соответственно. При анализе СТМ изображений было обнаружено, что темные впадины не являются доменными стенками, поскольку решетки  $2 \times 2$  с обеих сторон от впадины находятся в фазе. Это особенно очевидно в тех областях, где впадины разбиты на отдельные короткие элементы. По мере осаждения атомов Al, плотность впадин уменьшается и в конечном счете формируется поверхность Si(111) $2 \times 2$ -(Au, Al) почти свободная от темных впадин (Рис. 3.29 (г)). Таким образом, можно сделать вывод, что наличие этих впадин связано с дефицитом Al.

Если в качестве исходной поверхности использовать реконструкцию  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -Au и осаждать атомы Al на нее при КТ с последующим отжигом при температуре  $\sim 600^\circ\text{C}$ , то также происходит формирование реконструкции  $2 \times 2$ -(Au, Al), но появляются большие бесформенные островки. По всей видимости, эти островки возникают в результате вытеснения лишнего Au, что свидетельствует о том, что для формирования структуры  $2 \times 2$ -(Au, Al) подходящим покрытием Au является 1 МС (смесь реконструкций  $5 \times 2$ -Au и  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -Au).

Исследования электронной структуры реконструкции Si(111) $2 \times 2$ -(Au, Al) с помощью метода УФЭСУР показали, что зонная структура, характерная для  $2 \times 2$ -(Au, Al),

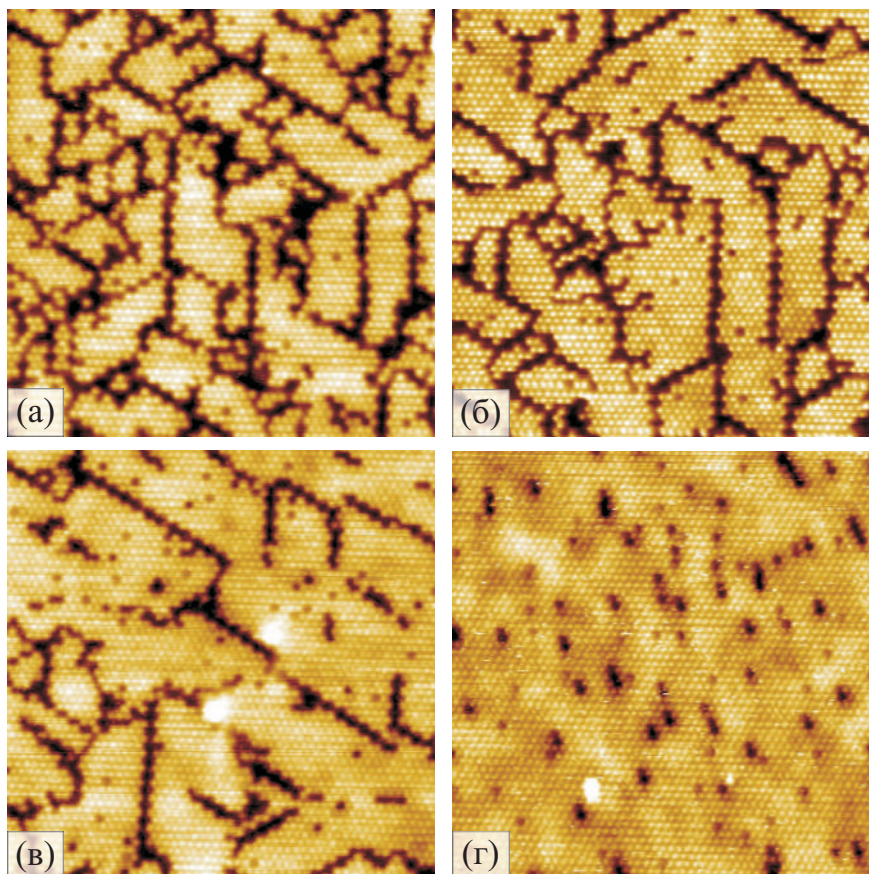


Рис. 3.29.  $40 \times 40$  нм<sup>2</sup> СТМ изображения реконструкции  $2 \times 2$ -(Au, Al) при напылении атомов Al: (а) 0,25 МС Al, (б) 0,40 МС Al, (в) 0,55 МС Al, (г) 0,75 МС Al [135].

появляется уже на начальном этапе, когда поверхностное соединение Au-Al содержит многочисленные впадины (Рис. 3.29 (а)). Наиболее характерные особенности электронной структуры этой системы расположены на  $\approx -1,65$  эВ и на  $\approx -0,65$  эВ (отмечены красными и синими стрелками в точках  $\bar{\Gamma}_0$  и  $\bar{\Gamma}_1$ ) (Рис. 3.30). Однако все спектральные особенности становятся более отчетливыми только с дальнейшим осаждением Al (Рис. 3.30 (б)). В то же время, все зоны сдвигаются в сторону более низких энергий связи электронов и нижняя зона (красная линия) сдвигается вверх на 0,35 эВ, а верхняя зона (синяя линия) сдвигается вверх на 0,53 эВ становясь более интенсивной (Рис. 3.30 (в)). Такие сдвиги положения зон поверхностных состояний, происходящие при увеличении концентрации атомов Al, являются одной из особенностей данной системы. Следует отметить, что, как показали расчеты, последняя зона имеет поверхностное происхождение, но перекрывается с проекциями объемных зон, следовательно, они являются резонансными зонами.



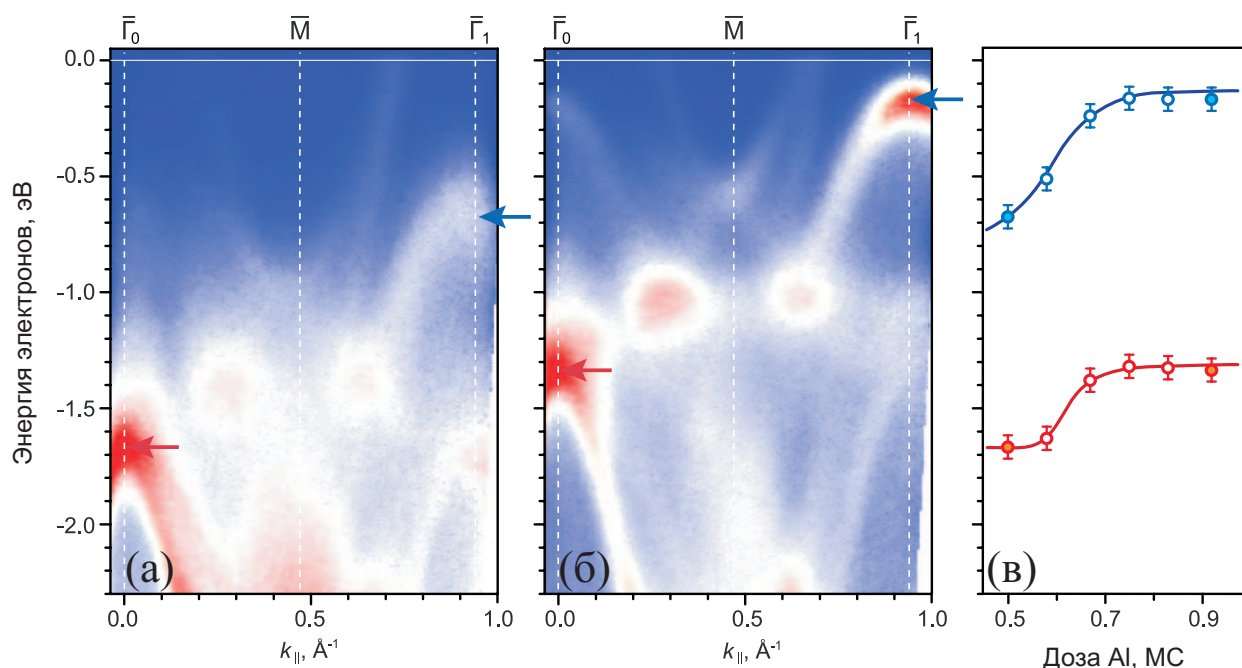


Рис. 3.30. Данные УФЭСУР, иллюстрирующие эволюцию электронной структуры в ходе формирования реконструкции  $2 \times 2$ -(Au, Al). Спектры УФЭСУР в (а) промежуточной и (б) финальной стадии формирования реконструкции  $2 \times 2$ -(Au, Al), т.е. после напыления на поверхность Au/Si(111) 0,5 МС Al и 0,9 МС Al, соответственно. (в) Энергетический сдвиг зон в зависимости от дозы Al. Незакрашенные голубые, красные кружки и линии соответствуют потолку зон, обозначенных голубыми и красными стрелочками на (а) и (б) [135].

Атомная структура реконструкции  $2 \times 2$ -(Au, Al) была определена с помощью метода AIRSS (*ab initio* random structure searching). Так как из экспериментальных данных было определено, что покрытие золота в этой реконструкции составляет 1 МС, в качестве отправной точки была рассмотрена поверхностная структура, состоящая из четырех атомов Au, четырех атомов Si и одного атома Al на элементарную ячейку  $2 \times 2$  (то есть, 1 МС Au, 1 МС Si и 0,25 МС адсорбированного Al), которые были расположены на нереконструированном двойном слое Si(111). Атомная конфигурация с самой низкой энергией для такого состава показана на рисунке 3.31 (а). Основным элементом этой реконструкции является прямоугольник, построенный из четырех атомов Au с атомом Al в его центре. Этот прямоугольный элемент окружен атомами Si на коротких сторонах и димерами Si на длинных сторонах. На моделированных СТМ изображениях прямоугольный элемент показан, как один круглый максимум в обеих полярностях (Рис. 3.31 (г), левая панель). Можно заметить, что для этого прямоугольного элемента

(следовательно, и для базиса кристаллической структуры) отсутствует симметрия  $C_{3v}$  типичная для гексагональных структур. Помимо прямоугольника для структуры характерен еще один элемент, а именно, извилистые атомные цепочки Au вдоль направления  $[1\bar{1}0]$ ; параллельные цепочки Au связаны между собой через атомы Al (Рис. 3.31 (а)).

При последующем добавлении атомов Al к основной атомной конфигурации реконструкции  $2 \times 2$ -(Au, Al), атом Al замещает ближайший к короткой стороне прямоугольного элемента атом Si, таким образом увеличивая количество Al на 1 атом на элементарную ячейку  $2 \times 2$  (Рис. 3.31 (б)). Затем атомами Al замещается следующий

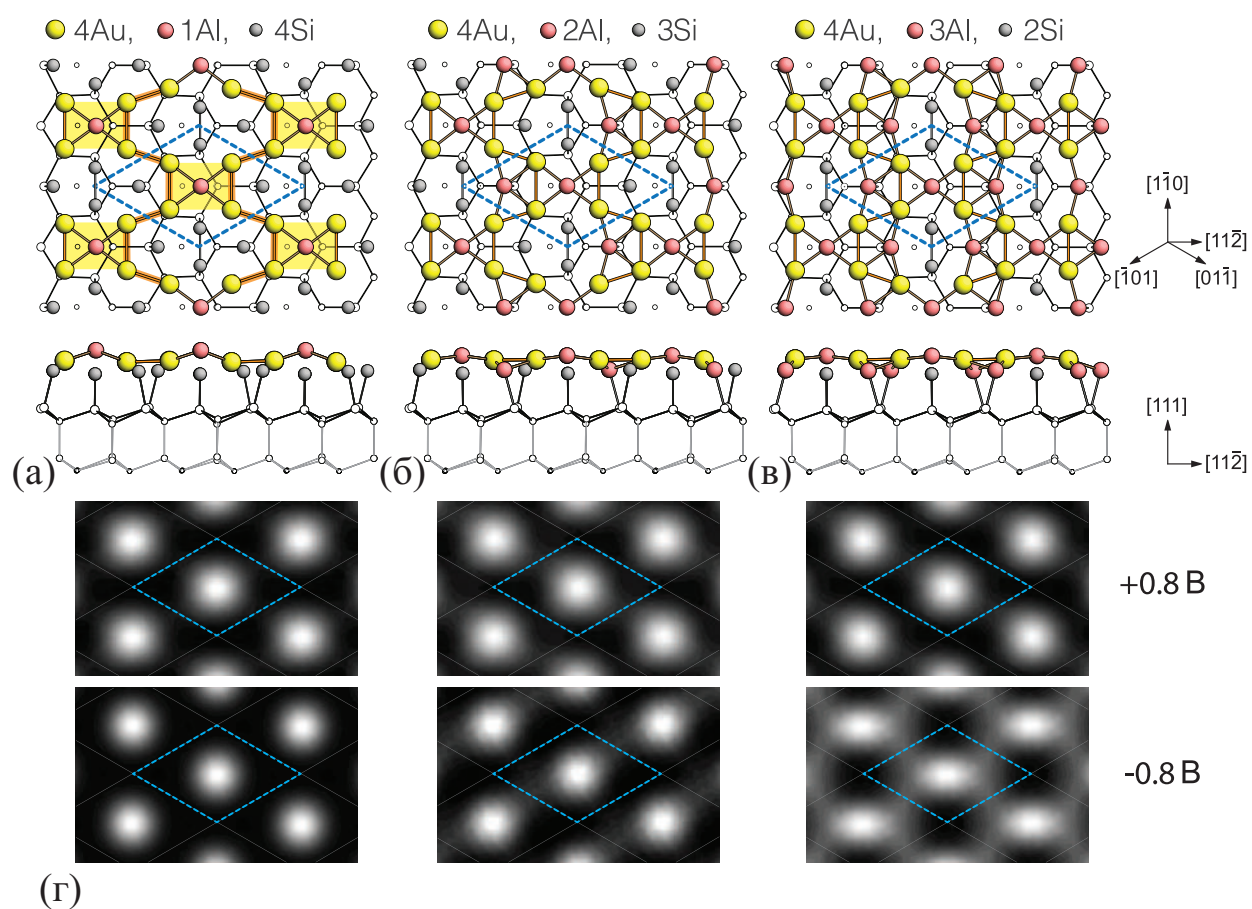


Рис. 3.31. Конфигурации атомов с наименьшей энергией, определенные с помощью метода AIRSS для реконструкции  $2 \times 2$ -(Au, Al), содержащие (а) один, (б) два и (в) три атома Al на элементарную ячейку  $2 \times 2$ . Атомы Au обозначены желтыми кружками, атомы Al обозначены красными кружками, а атомы Si обозначены серыми и белыми кружками. Основные прямоугольные элементы заштрихованы желтым цветом, а извилистые атомные цепочки Au выделены красными пунктирными линиями в (а). (г) Моделированные СТМ изображения в двух полярностях ( $\pm 0,8$  В), соответствующие каждой из вышеуказанных структур. Элементарные ячейки  $2 \times 2$  обозначены пунктирным ромбом, и их расположение в моделированных СТМ изображениях совпадают с расположением элементарных ячеек  $2 \times 2$  в структурных моделях [135].

ближайший к короткой стороне прямоугольного элемента атом Si, так что с обеих сторон прямоугольника располагаются атомы Al, увеличивая количество атомов Al на элементарную ячейку  $2 \times 2$  до трех (Рис. 3.31 (в)). Следует отметить, что дополнительные атомы Al связывают извилистые атомные цепочки Au. Моделированные изображения СТМ (Рис. 3.31 (г)) для модели с тремя атомами Al показали, что округлые максимумы на изображениях незаполненных состояний сохраняются, в то время как на изображениях заполненных состояний можно видеть появление перемычек между максимумами, которые видны на экспериментальных изображениях СТМ в заполненных состояниях (Рис. 3.27).

Основываясь на базовой модели атомной структуры были проведены расчеты электронной зонной структуры реконструкции  $2 \times 2$ -(Au, Al) в зависимости от количества атомов Al на элементарную ячейку  $2 \times 2$  (Рис. 3.32). Сравнивая расчетный спектр с полученным спектром УФЭСУР, показанном на рисунке 3.30, можно сделать вывод, что параболическая зона в точке  $\bar{\Gamma}$  при более высокой энергии связи должна быть связана с границей области объемных состояний (красная стрелка на рисунке 3.32), в то время как зона с более низкой энергией связи соответствует рассчитанному резонансному состоянию в точке  $\bar{\Gamma}$  в области проекции объемных зон (синяя стрелка на рисунке 3.32). Так же можно заметить, что все зоны смещаются вверх в сторону более низких энергий связи электронов, что находится в согласии с экспериментальными наблюдениями методом УФЭСУР (Рис. 3.30). Однако изменение содержания Al от одного к двум атомам на элементарную ячейку приводит к очень маленьким энергетическим сдвигам,  $\sim 0,15$  эВ для резонансной зоны и почти нулевых для объемных зон (Рис. 3.32 (а) и (б)), наиболее существенным изменением здесь является возникновение металлической зоны, следовательно, изменение полупроводниковых свойств поверхности на металлические. Когда добавляется третий атом Al (Рис. 3.32 (в)) наблюдаются значительные энергетические сдвиги величиной примерно 0,4-0,5 эВ. Так же можно заметить, что влияние замещения атомов Si на атомы Al двояко, а именно, форма поверхностных зон несколько изменяется и все зоны сдвигаются в сторону более низких энергий связи электронов. Последний эффект связан с явлением замены одного атома Si на атом Al,

что означает уменьшение количества электронов на одну элементарную ячейку  $2 \times 2$ , что естественно снижает уровень Ферми. Это так же можно визуализировать как сдвиг зон вверх по отношению к уровню Ферми. В заключение, сравнивая результаты расчета (Рис. 3.32) с экспериментальными данными УФЭСУР (Рис. 3.30) можно заметить хорошее сходство как в дозе Al, при которой происходит смещение зон по энергии, так и величине сдвига.

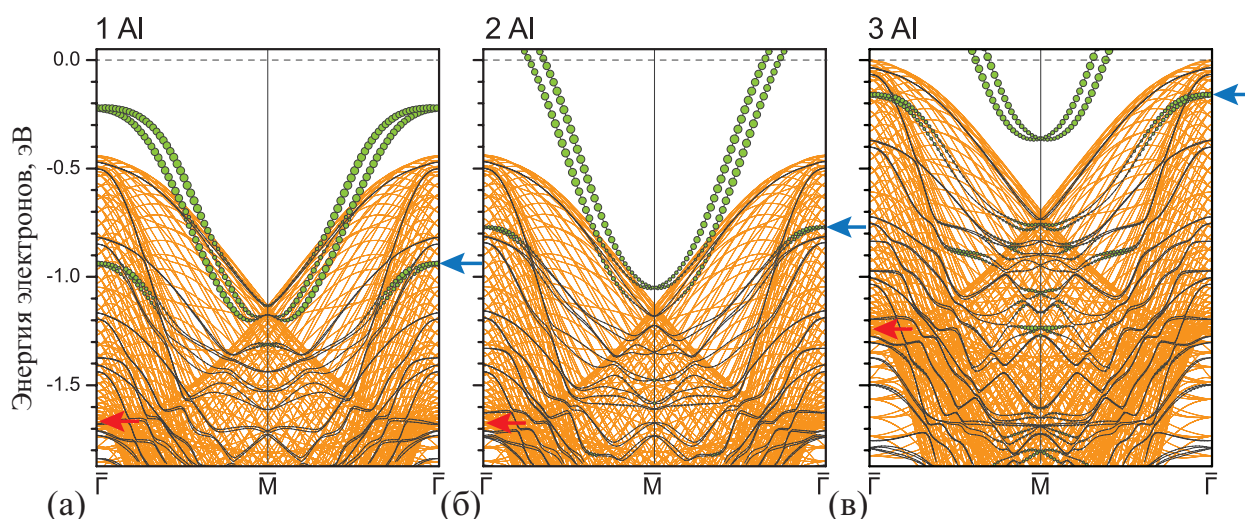


Рис. 3.32. Рассчитанные зонные структуры для реконструкций  $2 \times 2$ -(Au, Al), включающих (а) один, (б) два и (в) три атома Al на элементарную ячейку  $2 \times 2$ . Красной стрелкой обозначена объемная зона Si, синей стрелкой - поверхностная резонансная зона [135].

Как уже упоминалось выше, в двумерном соединении  $2 \times 2$ -(Au, Al) отсутствует симметрия  $C_{3v}$  и сохраняется симметрия  $C_{2v}$ . Таким образом, вектор  $[1\bar{1}0]$  гексагональной ячейки  $2 \times 2$  направлен вдоль извилистой атомной цепочки Au, в то время как вектора  $[\bar{1}01]$  и  $[01\bar{1}]$  образуют угол  $\pm 120^\circ$  с этой цепочкой. Такая зависимость атомной структуры от направлений, а именно вдоль или перпендикулярно атомной цепочки Au, естественно отражается в различии зонных дисперсий вдоль этих направлений, как проиллюстрировали расчеты зонной структуры, показанные на рисунке 3.33.

Присутствие на поверхности трех эквивалентных доменов  $2 \times 2$ -(Au, Al), развернутых на  $120^\circ$  друг относительно друга, приводит к тому, что на экспериментальном спектре УФЭСУР мы видим их суперпозицию. Рисунок 3.34 представляет собой сумму рассчитанных зонных дисперсий показанных на рисунке 3.33 (а) и (б) наложенных на

экспериментальный спектр УФЭСУР. Видны четкие аналогии основных спектральных особенностей в рассчитанной зонной структуре с экспериментальными данными. Од-

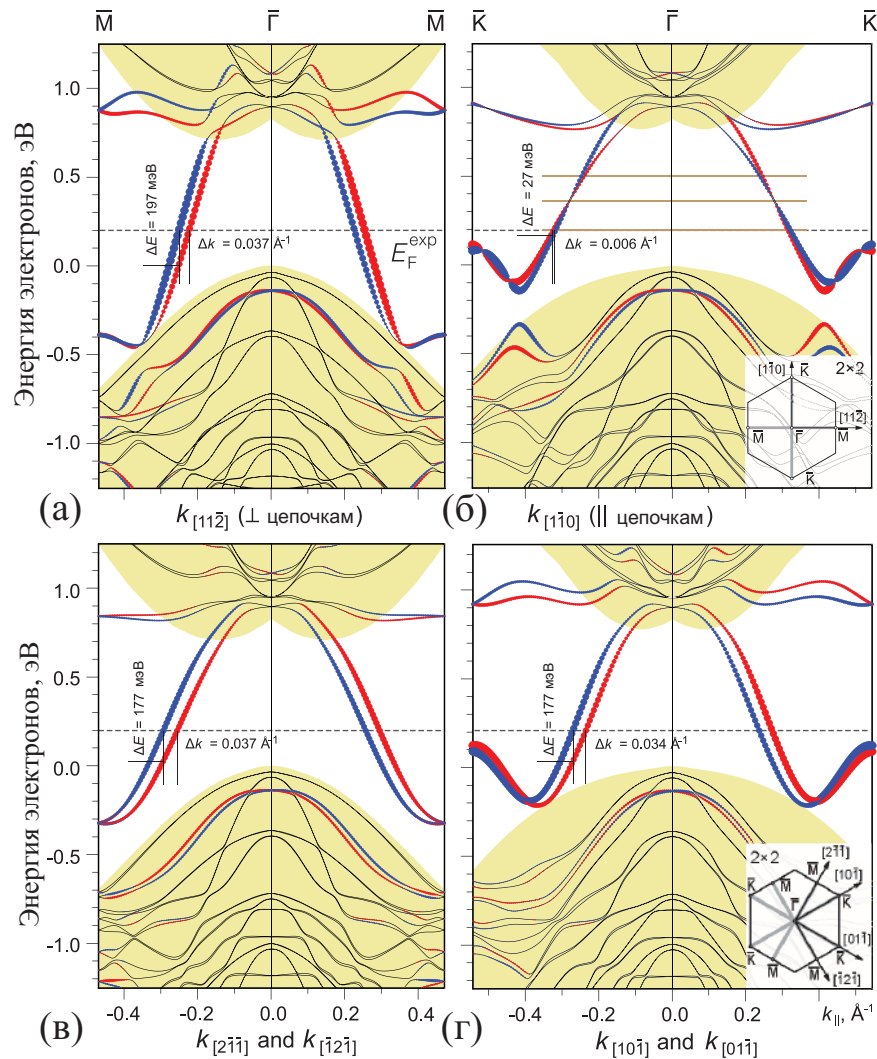


Рис. 3.33. Расчеты электронной зонной структуры соединения  $2 \times 2$ -(Au, Al), учитывающие отсутствие симметрии  $C_{3v}$ . На вставках показаны схемы геометрии обратного пространства с границами  $2 \times 2$  поверхностных зон Бриллюэна (ПЗБ). Зонная структура рассчитана для случая, когда (а) направление  $\bar{\Gamma} - \bar{M}$  вдоль  $[11\bar{2}]$  и (б) направление  $\bar{\Gamma} - \bar{K}$  вдоль  $[1\bar{1}0]$ , т.е. перпендикулярно и параллельно золотым атомным цепочкам, соответственно. Зонная структура также рассчитана для двух почти эквивалентных случаев, когда (в) направление  $\bar{\Gamma} - \bar{M}$  вдоль  $[2\bar{1}1]$  или  $[\bar{1}2\bar{1}]$  и (г) направление  $\bar{\Gamma} - \bar{K}$  вдоль  $[10\bar{1}]$  или  $[01\bar{1}]$ . Для правильного соответствия экспериментальному спектру уровень Ферми в рассчитанных зонных структурах сдвигается на 200 мэВ. В рассчитанных зонных структурах размер кругов соответствует силе поверхностного вклада, суммированного по всем орбиталям при определенном  $k_{||}$ . Красные и синие цвета кругов обозначают противоположные направления спина в плоскости  $[135]$ .

нако, следует иметь ввиду, что суперпозиция зонных диаграмм приводит к размытию спектральных особенностей на спектре УФЭСУР. Это, в свою очередь, затрудняет экс-



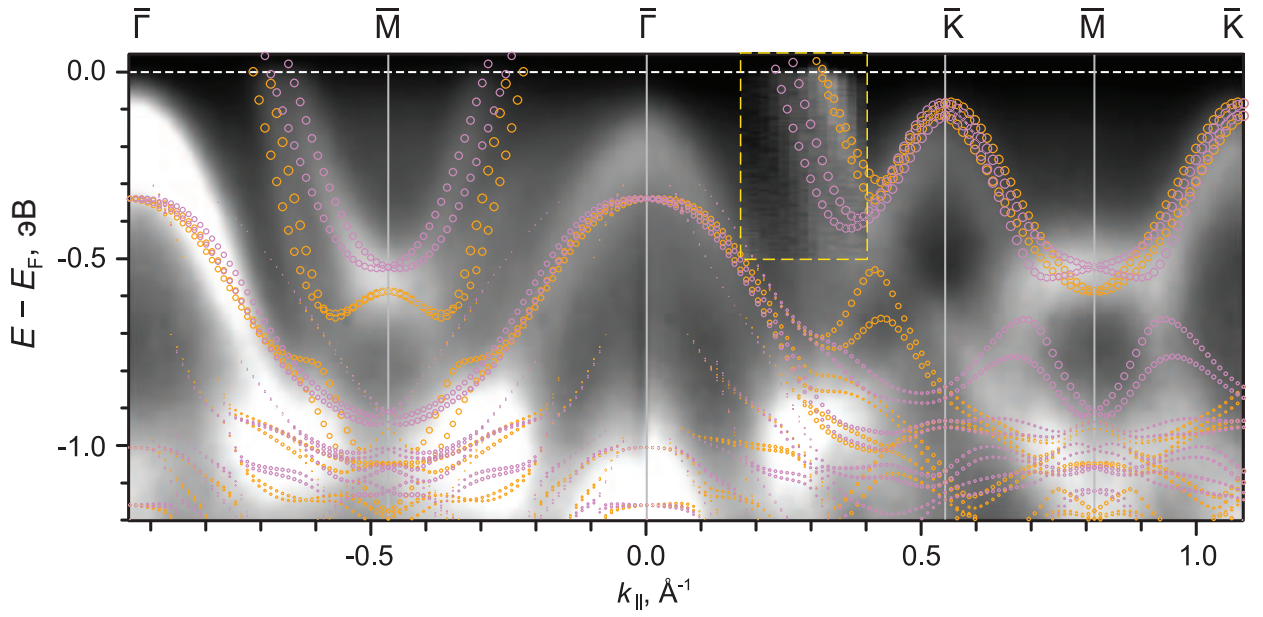


Рис. 3.34. Суммированные расчеты зонной структуры реконструкции  $2 \times 2$ -( $\text{Au}$ ,  $\text{Al}$ ), наложенные на экспериментальный спектр УФЭСУР. Часть спектра в направлении  $\bar{\Gamma} - \bar{K}$  (обозначена желтой пунктирной рамкой) извлечена из набора данных, полученного во второй зоне Бриллюэна (см. Рис. 3.36 (а)), где поверхностные спектральные характеристики проявляются более ярко [135].

периментальную оценку более тонких деталей, например, расщепления по спину. Что касается расчетов, они дают максимальное расщепление по спину металлических зон вблизи уровня Ферми вдоль направления  $\bar{\Gamma} - \bar{M}$ , которое слабо зависит от кристаллографической ориентации: оно характеризуется импульсом расщепления  $\Delta k_{\parallel} = 0,037 \text{ \AA}^{-1}$  во всех направлениях и энергией расщепления  $\Delta E_F = 197 \text{ мэВ}$  в направлении  $[11\bar{2}]$  и  $\Delta E_F = 177 \text{ мэВ}$  в направлениях  $[2\bar{1}\bar{1}]$  и  $[\bar{1}2\bar{1}]$ . Положение уровня Ферми здесь принимается за положение уровня Ферми в эксперименте.

Зонная структура данного 2D соединения характеризуется необычной поверхностью Ферми со спиновой текстурой (Рис. 3.35 (а)) с почти антипараллельной ориентацией спина вдоль направления  $[1\bar{1}0]$ . Схожая спиновая текстура ранее была предсказана [136] и обнаружена в гетероструктурах  $\text{GaAs}/\text{AlGaAs}$  [137, 138], а недавно на поверхности  $\text{ZnO}(10\bar{1}0)$  [139]. В таких системах с симметрией  $C_{2v}$  за счет близких значений констант Рашбы и Дрессельхауса, спин-орбитальное взаимодействие является линейно зависимым от импульса электрона в некоторых направлениях, что приводит к одномерной ориентации спиновой текстуры.

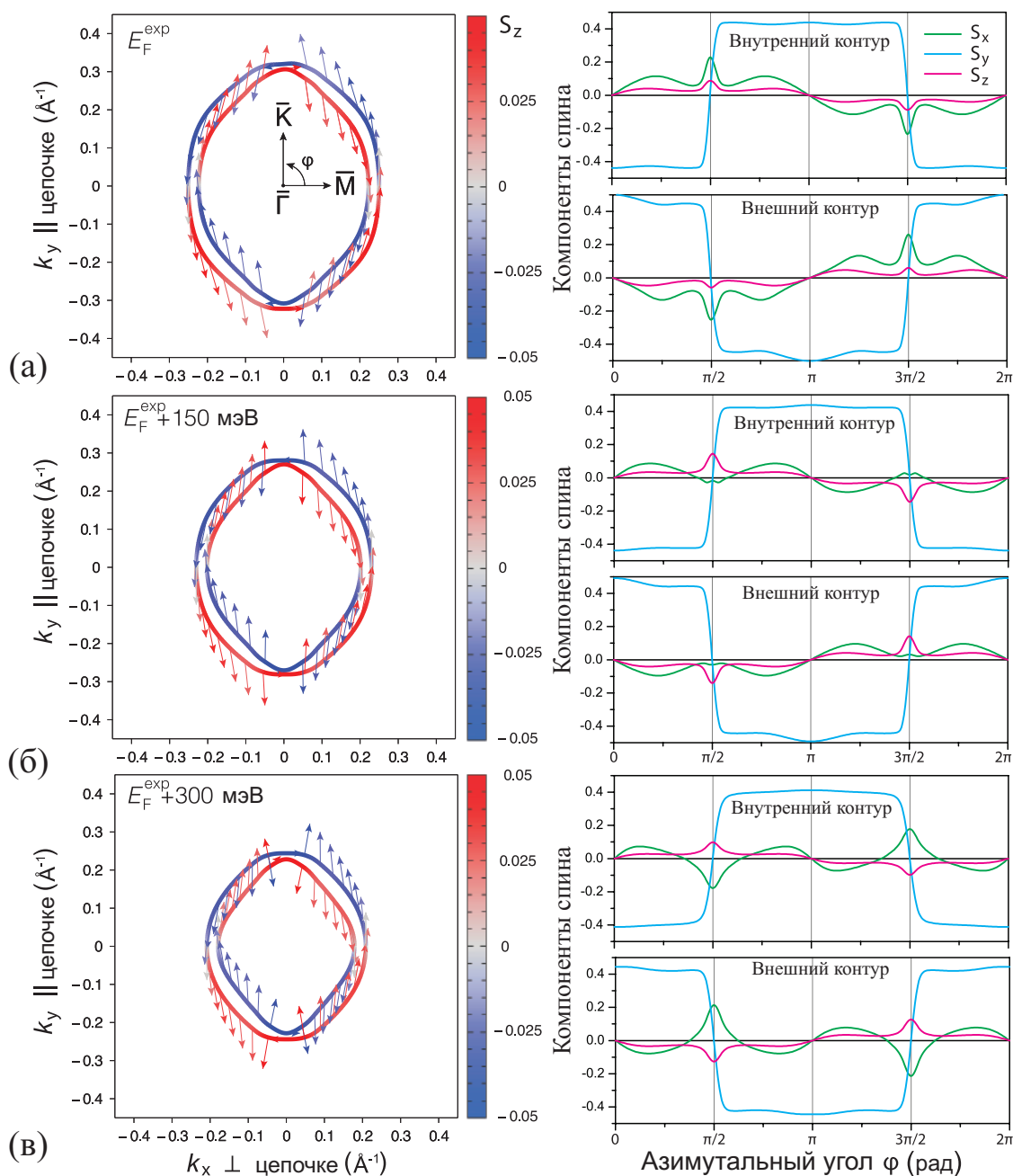


Рис. 3.35. Рассчитанные поверхности постоянных энергий (левый столбец) и спиновые компоненты  $S_x$ ,  $S_y$  и  $S_z$  в зависимости от азимутального угла (правый столбец) на (а) экспериментальном уровне Ферми, (б) на 150 мэВ выше уровня Ферми и (в) на 300 мэВ выше уровня Ферми [135].

Такое состояние, известное как «устойчивая спиновая спираль» (persistent spin helix, PSH), вызывает подавление спиновой релаксации и считается в настоящее время важным элементом спинтронных технологий, так как позволяет увеличить время жизни спиновой поляризации и обеспечить транспорт спиновых токов на большие расстояния [140]. В данном случае спин почти полностью выравнивается в плоскости

поверхности (компонента  $S_z$  довольно мала) за исключением точек, лежащих в направлении  $(-\bar{K})-\bar{\Gamma}-\bar{K}$  ( $[1\bar{1}0]$ ), где спин имеет ориентацию вне плоскости, которая является положительной или отрицательной для различных ветвей. Контурные вырождены в направлении  $\bar{\Gamma}-\bar{K}$  при значении  $\approx 0,35$  эВ выше уровня Ферми и расщепляются от этой энергии, в то время как спиновая текстура сохраняет предпочтительную ориентацию вдоль направления  $[1\bar{1}0]$ . Из-за такой спиновой ориентации возникает значительная анизотропия в эффекте Рашбы-Эдельштейна. Обычно в расщепленном по спину двумерном электронном газе, электрическое поле, приложенное вдоль некоторого направления в плоскости образца вызывает спиновую поляризацию в перпендикулярном направлении в плоскости образца и этот эффект является изотропным для систем с изотропным расщеплением Рашбы. В системе  $\text{Si}(111)2\times 2$ -(Au, Al), где спины выровнены предпочтительно в направлении золотых цепочек, электрическое поле приложенное вдоль направления  $[11\bar{2}]$  (то есть перпендикулярно цепочкам) должно приводить к наибольшей спиновой поляризации, в то время как этот эффект почти отсутствует в направлении  $[1\bar{1}0]$ , то есть вдоль цепочки (Рис. 3.35).

На рисунке 3.36 отображены экспериментальные контуры Ферми, полученные во второй поверхностной зоне Бриллюэна и три рассчитанных контура Ферми, повернутых на  $120^\circ$ .

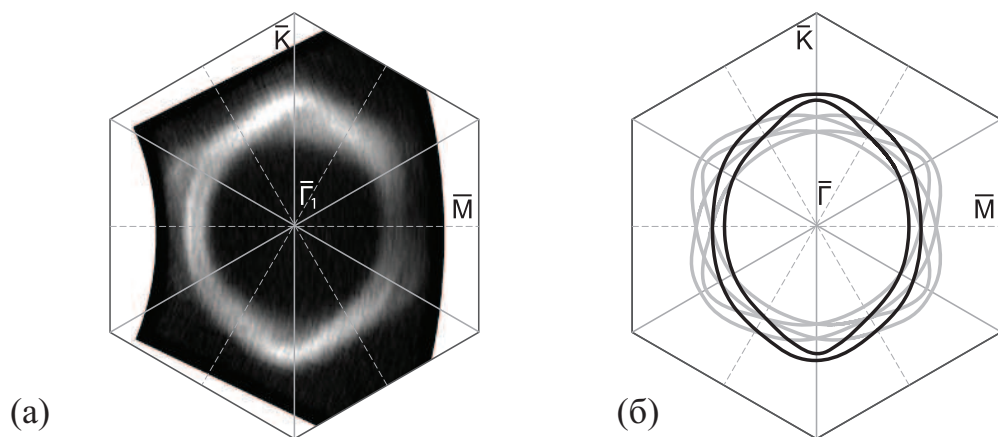


Рис. 3.36. (а) Экспериментальная карта Ферми, полученная во второй зоне Бриллюэна. (б) Три рассчитанных Ферми контура повернутых на  $120^\circ$  с одним, наиболее интенсивным, как в (а), из-за преобладающих доменов соответствующей ориентации [135].

Можно заметить, что рассчитанные контуры хорошо совпадают с контурами, по-

лученными экспериментально. Однако экспериментальные Ферми контуры являются размытыми из-за малых размеров доменов с различной ориентацией в структуре Si(111)2×2-(Au, Al), вследствие чего спин-расщепленные зоны могут быть разрешены только в некоторых направлениях. Помимо этого можно отметить, что на карте Ферми заметна асимметрия  $k_x/k_y$ , которая указывает на то, что одна ориентация домена преобладает над другими двумя.

### 3.5 Выводы

Методами СТМ, ДМЭ и УФЭСУР были исследованы структурные и электронные свойства систем Si(111) $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -(Tl, Sn), Si(111) $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -(Tl, Pb), Si(111)4×4-(Tl, Pb) и Si(111)2×2-(Au, Al). Все четыре системы являются двумерными металлическими сплавами и обладают расщепленными по спину металлическими поверхностными состояниями по типу Рашбы-Бычкова. Кроме этого, система Si(111) $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -(Tl, Sn) представляет собой сэндвичеподобную структуру в которой слой Tl лежит над слоем Sn, система Si(111) $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -(Tl, Pb) демонстрирует сверхпроводящий переход при 2,25 К, а система Si(111)2×2-(Au, Al) демонстрирует необычное выравнивание спиновой текстуры, которое вызывает существенную анизотропию в эффекте Рашбы-Эдельштейна.

## Общие выводы

В работе представлены результаты экспериментальных исследований структурных и электронных свойств систем Tl-Sn, Tl-Pb и Au-Al. В ходе проведенных исследований были обнаружены новые двумерные соединения, которые формируются, на поверхности кремния, а именно:  $\text{Si}(111)\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -(Tl, Sn),  $\text{Si}(111)\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -(Tl, Pb),  $\text{Si}(111)4 \times 4$ -(Tl, Pb) и  $\text{Si}(111)2 \times 2$ -(Au, Al).

Для каждого из этих соединений были определены условия формирования, состав и предложены структурные модели. Было выяснено, что атомная структура реконструкции  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -(Tl, Sn) представляет собой двухслойный атомный сэндвич, а реконструкции  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -(Tl, Pb),  $4 \times 4$ -(Tl, Pb) представляют собой один атомный слой, в котором различается соотношение концентраций атомов Tl и Pb при близком общем суммарном покрытии. В свою очередь, атомная структура реконструкции  $2 \times 2$ -(Au, Al) представляет собой параллельные золотые атомные цепочки, связанные между собой атомами Al.

Исследования электронной структуры всех указанных соединений показали, что все они обладают металлическими свойствами, при этом для зон поверхностных состояний снимается вырождение по спину вследствие эффекта Рашбы-Бычкова. Кроме того, для структуры  $\text{Si}(111)\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -(Tl, Pb) были исследованы сверхпроводящие свойства. Из экспериментальных данных ультрафиолетовой фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением была определена константа электрон-фононного взаимодействия для различных поверхностных состояний. Наличие относительно высокой  $\lambda$  дало основание для проведения транспортных измерений, которые показали, что 2D однослойный сплав TlPb/Si(111) $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$  является сверхпроводником с  $T_c = 2,25$  К.

При исследовании электронных свойств реконструкции  $2 \times 2$ -(Au, Al) было обнаружено существование анизотропной ориентации спина вдоль направления золотых цепочек. Такое необычное выравнивание спина происходит за счет близких констант взаимодействия Рашбы и Дрессельхауса, что приводит к одномерной ориентации спиновой текстуры. Такое состояние, известное как «устойчивая спиновая спираль» (persistent spin helix), вызывает подавление спиновой релаксации, что позволяет увеличить время жизни спиновой поляризации и возможность обеспечить транспорт спиновых токов на большие расстояния.

# Примечание

Все экспериментальные результаты, представленные в работе, получены соискателем лично, либо при его непосредственном участии. Ряд работ выполнен в соавторстве с сотрудниками Института автоматизации и процессов управления РАН, а также академии Синика г. Тайпей (Тайвань), университета г. Токио (Япония), Томского государственного университета г. Томск (Россия).

Участие соавторов в совместных работах заключалось в следующем:

Член-корреспондент РАН, профессор А.А. Саранин, член-корреспондент РАН, профессор А.В. Зотов, д.ф.-м.н. Д.В. Грузнев и д.ф.-м.н. Е. В. Чулков принимали участие в постановке задач и обсуждении результатов.

К.ф.-м.н. Л. В. Бондаренко и к.ф.-м.н. А. В. Матецкий принимали участие в планировании и проведении экспериментов, а также в обработке экспериментальных данных, обобщении результатов и подготовке материалов к публикации.

М. Ю. Лэй, Ю. Л. Ванг, Дж. П. Чоу, С. Р. Хсиг, Ч. М. Вэй, д.ф.-м.н. С. В. Еремеев, к.ф.-м.н. А.Н. Михалюк, Е. Н. Чукуров, А. А. Алексеев осуществляли теоретические расчеты, а также моделирование СТМ изображений.

С. Ичинокура, Р. Хобара, А. Такаяма, С. Хасегава участвовали в планировании и проведении экспериментов по исследованию сверхпроводимости, а также в обработке полученных экспериментальных данных, обобщении результатов и подготовке материалов к публикации.

В заключении, хочу выразить благодарность своему научному руководителю член-корреспонденту РАН, профессору Александру Александровичу Саранину и доктору физико-математических наук Димитрию Вячеславовичу Грузневу за постоянную под-

держку, терпеливое отношение и неоценимую помощь в процессе написания диссертационной работы. Хочу выразить искреннюю признательность всем сотрудникам Отдела физики поверхности Института автоматики и процессов управления ДВО РАН за дружеское, теплое отношение в коллективе, а также помощь в повседневном рабочем процессе и превосходную рабочую атмосферу. Хотелось бы выразить глубокую благодарность всем соавторам публикаций, без вклада которых эта работа не могла бы состояться.



## Список литературы

- [1] *Rashba E. I.* Properties of semiconductors with an extremum loop. 1. Cyclotron and combinational resonance in a magnetic field perpendicular to the plane of the loop. // *Sov. Phys. Solid State.* – 1960. – V. 2. – P. 1109–1022.
- [2] *Bychkov Y. A., Rashba E. I.* Properties of a 2D electron gas with lifted spectral degeneracy. // *JETP Lett.* – 1984. – V. 39. – P. 78.
- [3] *Zhang T., Cheng P., Li W. J., Sun Y. J., Wang G., Zhu X. G., He K., Wang L., Ma X., Chen X., Wang Y., Liu Y., Lin H. Q., Jia J. F., Xue Q. K.* Superconductivity in one-atomic-layer metal films grown on Si(111). // *Nature Physics.* – 2010. – V. 6. – P. 104–108.
- [4] *Qin S., Kim J., Niu Q., Shih C. K.* Superconductivity at the two-dimensional limit. // *Science.* – 2009. – V. 324. – P. 1314–1317.
- [5] *Uchihashi T., Mishra P., Aono M., Nakayama T.* Macroscopic superconducting current through a silicon surface reconstruction with indium adatoms: Si(111)-( $\sqrt{7}\times\sqrt{3}$ )-In. // *Phys. Rev. Lett.* – 2011. – V. 107, N. 20. – P. 207001–4.
- [6] *Yamada M., Hirahara T., Hasegawa S.* Magnetoresistance measurements of a superconducting surface state of In-induced and Pb-induced structures on Si(111). // *Phys. Rev. Lett.* – 2013. – V. 110. – P. 237001–5.
- [7] *Uchihashi T., Mishra P., Nakayama T.* Resistive phase transition of the superconductive Si(111)-( $\sqrt{7}\times\sqrt{3}$ )-In surface. // *Nanoscale Res.Lett.* – 2013. – V. 8. – P. 167–7.

- [8] *Yoshizawa S., Kim H., Kawakami T., Nagai Y., Nakayama T., Hu X., Hasegawa Y., Uchihashi T.* Imaging Josephson vortices on the surface superconductor Si(111)-( $\sqrt{7}\times\sqrt{3}$ )-In using a scanning tunneling microscope. // *Phys. Rev. Lett.* – 2014. – V. 113, N. 24. – P. 247004–5.
- [9] *Geissler F., Budich J C., Trauzettel B.* Group theoretical and topological analysis of the quantum spin Hall effect in silicene. // *New Journal of Physics.* – 2013. – V. 15, N. 8. – P. 085030.
- [10] *Kane C. L., Mele E. J.* Quantum Spin Hall Effect in Graphene. // *Phys. Rev. Lett.* – 2005. – V. 95. – P. 226801.
- [11] *Fialko O, Brand J, Zulicke U.* Fragility of the fractional quantum spin Hall effect in quantum gases. // *New Journal of Physics.* – 2014. – V. 16, N. 2. – P. 025006.
- [12] *LaShell S., McDougall B. A., Jensen E.* Spin Splitting of an Au(111) Surface State Band Observed with Angle Resolved Photoelectron Spectroscopy. // *Phys. Rev. Lett.* – 1996. – V. 77. – P. 3419–3422.
- [13] *Hoesch M., Muntwiler M., Petrov V. N., Hengsberger M., Patthey L., Shi M., Falub M., Greber T., Osterwalder J.* Spin structure of the Shockley surface state on Au(111). // *Phys. Rev. B.* – 2004. – V. 69. – P. 241401.
- [14] *Koroteev Yu. M., Bihlmayer G., Gayone J. E., Chulkov E. V., Blügel S., Echenique P. M., Hofmann Ph.* Strong Spin-Orbit Splitting on Bi Surfaces. // *Phys. Rev. Lett.* – 2004. – V. 93. – P. 046403.
- [15] *Kimura A., Krasovskii E. E., Nishimura R., Miyamoto K., Kadono T., Kanomaru K., Chulkov E. V., Bihlmayer G., Shimada K., Namatame H., Taniguchi M.* Strong Rashba-Type Spin Polarization of the Photocurrent from Bulk Continuum States: Experiment and Theory for Bi(111). // *Phys. Rev. Lett.* – 2010. – V. 105. – P. 076804.

- [16] *Ast Ch. R., Henk J., Ernst A. Moreschini L. Falub M. C. Pacilé D. Bruno P. Kern K. Grioni M.* Giant Spin Splitting through Surface Alloying. // *Phys. Rev. Lett.* – 2007. – V. 98. – P. 186807.
- [17] *Bihlmayer G., Blügel S., Chulkov E. V.* Enhanced Rashba spin-orbit splitting in Bi/Ag(111) and Pb/Ag(111) surface alloys from first principles. // *Phys. Rev. B.* – 2007. – V. 75. – P. 195414.
- [18] *Gierz I., Suzuki T., Frantzeskakis E., Pons S., Ostanin S., Ernst A., Henk J., Grioni M., Kern K., Ast C. R.* Silicon Surface with Giant Spin Splitting. // *Phys. Rev. Lett.* – 2009. – V. 103. – P. 046803.
- [19] *Sakamoto K., Kakuta H., Sugawara K. Miyamoto K. Kimura A. Kuzumaki T. Ueno N. Annese E. Fujii J. Kodama A. Shishidou T. Namatame H. Taniguchi M. Sato T. Takahashi T. Oguchi T.* Peculiar Rashba Splitting Originating from the Two-Dimensional Symmetry of the Surface. // *Phys. Rev. Lett.* – 2009. – V. 103. – P. 156801.
- [20] *Ohtsubo Y., Hatta Sh., Yaji K. Okuyama H. Miyamoto K. Okuda T. Kimura A. Namatame H. Taniguchi M. Aruga T.* Spin-polarized semiconductor surface states localized in subsurface layers. // *Phys. Rev. B.* – 2010. – V. 82. – P. 201307.
- [21] *Sakamoto K., Oda T., Kimura A. Miyamoto K. Tsujikawa M. Imai A. Ueno N. Namatame H. Taniguchi M. Eriksson P. E. J. Uhrberg R. I. G.* Abrupt Rotation of the Rashba Spin to the Direction Perpendicular to the Surface. // *Phys. Rev. Lett.* – 2009. – V. 102. – P. 096805.
- [22] *Ibañez Azpiroz Julen, Eiguren Asier, Bergara Aitor.* Relativistic effects and fully spin-polarized Fermi surface at the Tl/Si(111) surface. // *Phys. Rev. B.* – 2011. – V. 84. – P. 125435.

- [23] *Park Jewook, Jung Sung Won, Jung Min-Cherl, Yamane Hiroyuki, Kosugi Nobuhiro, Yeom Han Woong.* Self-Assembled Nanowires with Giant Rashba Split Bands. // *Phys. Rev. Lett.* – 2013. – V. 110. – P. 036801.
- [24] *Gierz I., Suzuki T., Frantzeskakis E., Pons S., Ostanin S., Ernst A., Henk J., Grioni M., Kern K., Ast C. R.* Silicon surface with giant spin splitting. // *Phys. Rev. Lett.* – 2009. – V. 103, N. 4. – P. 046803–4.
- [25] *Osiecki Jacek R., Sohail H. M., Eriksson P. E. J., Uhrberg R. I. G.* Experimental and Theoretical Evidence of a Highly Ordered Two-Dimensional Sn/Ag Alloy on Si(111). // *Phys. Rev. Lett.* – 2012. – V. 109. – P. 057601.
- [26] *Bondarenko L. V., Gruznev D. V., Yakovlev A. A., Tupchaya A. Y., Usachov D., Vilkov O., Fedorov A., Vyalikh D. V., Eremeev S. V., Chulkov E. V., Zotov A. V., Saranin A. A.* Large spin splitting of metallic surface-state bands at adsorbate-modified gold/silicon surfaces. // *Scientific Reports.* – 2013. – V. 3. – P. 1826.
- [27] *Schlier R. E., Farnsworth H. E.* Structure and adsorption characteristics of clean surfaces of germanium and silicon. // *J. Chem. Phys.* – 1959. – V. 30, N. 4. – P. 917–926.
- [28] *Duke C.B.* The amazing story of semiconductor surface structures. // *Progr. Surf. Sci.* – 1995. – V. 50. – P. 31.
- [29] *Duke C. B.* Surface structures of tetrahedrally coordinated semiconductors: principles, practice, and universality. // *Appl. Surf. Sci.* – 1993. – V. 65/66, N. 1/4. – P. 543–552.
- [30] *Лифшиц В.Г., Репинский С.М.* Процессы на поверхности твердых тел. – Владивосток: Дальнаука, 2003.– 703 с.
- [31] *Lifshits V. G., Saranin A. A., Zotov A. V.* Surface Phases on Silicon. – Chichester: Wiley, 1994.– 450 p.

- [32] *Оура К., Лифишиц В. Г., Саранин А. А., Зотов А.В., Катаяма М.* Введение в физику поверхности. – Москва: Наука, 2005.– 499 с.
- [33] *Park R.L., Madden H.H.* Annealing changes on the (100) surface of palladium and their effect on CO adsorption. // *Surf. Sci.* – 1968. – V. 11. – P. 188.
- [34] *Dkabrowski J., Mussig H.-J.* Silicon surfaces and formation of interfaces. – Singapore: World Scientific, 2000.– 550 с.
- [35] *Wood E. A.* Vocabulary of surface crystallography. // *J. Appl. Phys.* – 1964. – V. 35, N. 4. – P.1306–1312.
- [36] *Takayanagi K., Tanishiro Y., Takahashi S., Takahashi M.* Structure analysis of Si(111)– $7 \times 7$  reconstructed surface by transmission electron diffraction. // *Surf. Sci.* – 1985. – V. 164. – P.367–392.
- [37] *Harrison W. A.* Surface reconstruction on semiconductors. // *Surf. Sci.* – 1976. – V. 55, N. 1. – P.1–19.
- [38] *Binning G., Rohrer H., Gerber Ch., Weibel E.* ( $7 \times 7$ ) reconstruction on Si(111) resolved in real space. // *Phys. Rev. Lett.* – 1983. – V. 50, N. 2. – P.120–123.
- [39] *Himpsel F. J.* Structural model for Si(111)–( $7 \times 7$ ). // *Phys. Rev. B.* – 1983. – V. 27, N. 12. – P.7782–7785.
- [40] *McRae E. G.* Surface stacking sequence and ( $7 \times 7$ ) reconstruction at Si(111) surfaces. // *Phys. Rev. B.* – 1983. – V. 28, N. 4. – P.2305–2307.
- [41] *Hofmann Ph., Wells J. W.* Surface-sensitive conductance measurements. // *J.Phys.:Cond.Matt.* – 2009. – V. 21, N. 1. – P.013003–21.
- [42] *Losio R., Altmann K. N., Himpsel F. J.* Fermi surface of Si(111) $7 \times 7$ . // *Phys. Rev. B.* – 2000. – V. 61, N. 16. – P.10845–10853.

- [43] *Barke I., Zheng F., Konicek A. R., Hatch R. C., Himpsel F. J.* Electron-phonon interaction at the Si(111)-7×7 surface. // *Phys. Rev. Lett.* – 2006. – V. 96, N. 21. – P. 216801–4.
- [44] *Demuth J. E., Person B. N. J., Schell-Sorokin A. J.* Temperature-dependent surface states and transitions of Si(111)-7×7. // *Phys. Rev. Lett.* – 1983. – V. 51, N. 24. – P. 2214–2217.
- [45] *Schillinger R., Bromberger C., Jänsch H. J., Kleine H., Köhlert O., Weindel C., Fick D.* Metallic Si(111)-(7×7)-reconstruction: A surface close to a Mott-Hubbard metal-insulator transition. // *Phys. Rev. B.* – 2005. – V. 72, N. 11. – P. 115314–11.
- [46] *Sakai H., Khramtsova E. A., Ichimiya A.* Metastable ordering of domain walls into Si(111)(2√21 × 2√21)R(±10.9°)-Au structure studied by RHEED and STM. // *Jpn. J. Appl. Phys.* – 1998. – V. 37, N. 6B. – P. L755–L757.
- [47] *Seifert C., Hild R., Horn-von Hoegen M., Zhachuk R. A., Olshanetsky B. Z.* Au induced reconstructions on Si(111). // *Surf. Sci.* – 2001. – V. 488, N. 1/2. – P. 233–238.
- [48] *Zhang H. M., Balasubramanian T., Uhrberg R. I. G.* Core-level photoelectron spectroscopy study of the Au/Si(111) 5×2, α-√3×√3, β-√3×√3, and 6×6 surfaces. // *Phys. Rev. B.* – 2002. – V. 65, N. 3. – P. 035314–6.
- [49] *Stępniaak A., Nita P., Krawiec M., Jałochowski M.* In and Si adatoms on Si(111)5×2-Au: Scanning tunneling microscopy and first-principles density functional calculations. // *Phys. Rev. B.* – 2009. – V. 80, N. 12. – P. 125430–8.
- [50] *Kim J. K., Kim K. S., McChesney J. L., Rotenberg E., Hwang H. N., Hwang C. C., Yeom H. W.* Two-dimensional electron gas formed on the indium-adsorbed Si(111)√3×√3-Au surface. // *Phys. Rev. B.* – 2009. – V. 80, N. 7. – P. 075312–7.

- [51] *Collins I. R., Moran J. T., Andrews P. T., Cosso R., O'Mahony J. D., McGilp J. F., Margaritondo G.* Angle-resolved photoemission from an unusual quasi-one-dimensional metallic system: a single domain Au-induced  $5 \times 2$  reconstruction of Si(111). // *Surf. Sci.* – 1995. – V. 325, N. 1/2. – P. 45–49.
- [52] *Losio R., Altmann K. N., Himpsel F. J.* Continuous transition from two- to one-dimensional states in Si(111)-(5 $\times$ 2)-Au. // *Phys. Rev. Lett.* – 2000. – V. 85, N. 4. – P. 808–811.
- [53] *McChasney J. L., Crain J. N., Pérez-Dieste V., Zheng F., Gallagher M. C., Bissen M., Gundelach C., Himpsel F. J.* Electronic stabilization of a 5 $\times$ 4 dopant superlattice on Si(111)5 $\times$ 2-Au. // *Phys. Rev. B.* – 2004. – V. 70, N. 19. – P. 195430–7.
- [54] *Choi W. H., Kang P. G., Ryang K. D., Yeom H. W.* Band-structure engineering of gold atomic wires on silicon by controlled doping. // *Phys. Rev. Lett.* – 2008. – V. 100, N. 12. – P. 126801–4.
- [55] *Yoon H. S., Park S. J., Lee J. E., Whang C. N., Lyo I.-W.* Novel Electronic Structure of Inhomogeneous Quantum Wires on a Si Surface. // *Phys. Rev. Lett.* – 2004. – V. 92. – P. 096801.
- [56] *Kang Pil-Gyu, Jeong Hojin, Yeom Han Woong.* Hopping Domain Wall Induced by Paired Adatoms on an Atomic Wire: Si(111)-(5  $\times$  2)-Au. // *Phys. Rev. Lett.* – 2008. – V. 100. – P. 146103.
- [57] *Barke I., Polei S., v. Oeynhausen V., Meiwes-Broer K-H.* Confined Doping on a Metallic Atomic Chain Structure. // *Phys. Rev. Lett.* – 2012. – V. 109. – P. 066801.
- [58] *Stępniaak A., Nita P., Krawiec M., Jaochowski M.* In and Si adatoms on Si(111)5  $\times$  2-Au: Scanning tunneling microscopy and first-principles density functional calculations. // *Phys. Rev. B.* – 2009. – V. 80. – P. 125430.



- [59] *Choi Won Hoon, Kang Pil Gyu, Ryang Kyung Deuk, Yeom Han Woong.* Band-Structure Engineering of Gold Atomic Wires on Silicon by Controlled Doping. // *Phys. Rev. Lett.* – 2008. – V. 100. – P. 126801.
- [60] *Kwon Se Gab, Kang Myung Ho.* Identification of the Au Coverage and Structure of the Au/Si(111)-(5 × 2) Surface. // *Phys. Rev. Lett.* – 2014. – V. 113. – P. 086101.
- [61] *Erwin Steven C., Barke Ingo, Himpsel F. J.* Structure and energetics of Si(111)-(5 × 2)-Au. // *Phys. Rev. B.* – 2009. – V. 80. – P. 155409.
- [62] *Khramtsova E. A., Ichimiya A.* Structural study of the Si(111)( $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ )R30°-Au surface using one-beam reflection high energy electron diffraction intensity curve analysis. // *Jpn. J. Appl. Phys.* – 1997. – V. 36, N. 7B. – P. L926–L928.
- [63] *Nagao T., Hasegawa S., Tsuchie K., Ino S., Voges C., Klos G., Pfnür H., Henzler M.* Structural phase transitions of Si(111)-( $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ )R30°-Au: Phase transitions in domain-wall configurations. // *Phys. Rev. B.* – 1998. – V. 57, N. 16. – P. 10100–10109.
- [64] *Gruznev D. V., Filippov I. N., Olyanich D. A., Chubenko D. N., Kuyanov I. A., Saranin A. A., Zotov A. V., Lifshits V. G.* Si(111)- $\alpha$ - $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -Au phase modified by In adsorption: Stabilization of a homogeneous surface by stress relief. // *Phys. Rev. B.* – 2006. – V. 73, N. 11. – P. 115335–7.
- [65] *Dornisch D., Moritz W., Schulz H., Feidenhans'l R., Nielsen M., Grey F., Johnson R. L.* Au/Si(111): Analysis of the ( $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ )R30° and 6 × 6 structures by in-plane x-ray diffraction. // *Phys. Rev. B.* – 1991. – V. 44, N. 20. – P. 11221–11230.
- [66] *Khramtsova E. A., Ichimiya A.* Comparative study of room- and high-temperature Si(111)-( $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ )R30°-Au structures using one-beam RHEED intensity rocking-curve analysis. // *Phys. Rev. B.* – 1998. – V. 57, N. 16. – P. 10049–10053.

- [67] *Falta J., Hille A., Novikov D., Materlik G., Seehofer L., Falkenberg G., Johnson R. L.* Domain wall structure of Si(111)( $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ )R30°-Au. // Surf. Sci. – 1995. – V. 330, N. 2. – P. L673–L677.
- [68] *Ding Y. G., Chan C. T., Ho K. M.* Theoretical investigation of the structure of the ( $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ )R30-Au/Si(111) surface. // Surf. Sci. – 1992. – V. 275, N. 3. – P. L691–L696.
- [69] *Zhang H. M., Balasubramanian T., Uhrberg R. I. G.* Surface electronic structure study of Au/Si(111) reconstruction: Observation of crystal-to-glass transition. // Phys. Rev. B. – 2002. – V. 66, N. 16. – P. 165402–6.
- [70] *Vitali L., Ramsey M. G., Netzer F. P.* Nanodot Formation on the Si(111)- ( $7 \times 7$ ) Surface by Adatom Trapping. // Phys. Rev. Lett. – 1999. – V. 83. – P. 316–319.
- [71] *Vitali Lucia, Leisenberger Friedrich P., Ramsey Michael G., Netzer Falko P.* Thallium overlayers on Si(111): Structures of a "new" group III element. // Journal of Vacuum Science & Technology A: Vacuum, Surfaces, and Films. – 1999. – V. 17, N. 4. – P. 1676–1682.
- [72] *Zotov A.V., Saranin A.A., Kotlyar V.G., Utas O.A., Wang Y.L.* Diverse magic nanoclustering in submonolayer Tl/Si(1 1 1) system. // Surface Science. – 2006. – V. 600, N. 9. – P. 1936 – 1941.
- [73] *Kim N.D., Hwang C.G., Chung J.W., Kim Y., Kim T.C., Noh D.Y., Sumitani K., Tajiri H., Sakata O.* Atomic structure of a thallium nanodot lattice formed on the Si(1 1 1)- $7 \times 7$  surface. // Surface Science. – 2008. – V. 602, N. 1. – P. 369 – 374.
- [74] *Lee Geunsik, Hwang Choon Gyu, Kim Nam Dong, Chung Jinwook, Kim Jai Sam, Lee Sik.* Ab initio study of thallium nanoclusters on Si(111) $7 \times 7$ . // Phys. Rev. B. – 2007. – V. 76. – P. 245409.

- [75] *Hwang C G, Kim N D, Lee G, Shin S Y, Kim J S, Chung J W.* Self-trapping nature of Tl nanoclusters on the Si(111)- $7\times 7$  surface. // *New Journal of Physics.* – 2008. – V. 10, N. 5. – P. 053013.
- [76] *Brune Harald, Giovannini Marcella, Bromann Karsten, Kern Klaus.* Self-organized growth of nanostructure arrays on strain-relief patterns. // *Nature.* – 1998. – V. 394, N. 6692. – P. 451–453.
- [77] *Altfeder I. B., Matveev K. A., Chen D. M.* Electron fringes on a quantum wedge. // *Phys. Rev. Lett.* – 1997. – V. 78, N. 14. – P. 2815–2818.
- [78] *Kotlyar V.G., Saranin A.A., Zotov A.V., Kasyanova T.V.* Thallium overlayers on Si(1 1 1) studied by scanning tunneling microscopy. // *Surface Science.* – 2003. – V. 543, N. 1-3. – P. L663 – L667.
- [79] *Ozkaya S., Cakmak M., Alkan B.* Atomic and electronic structures of Tl/Si(1 1 1)- $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ . // *Surface Science.* – 2008. – V. 602, N. 7. – P. 1376 – 1380.
- [80] *Ozkaya Sibel, Cakmak Mehmet, Alkan Bora.* Ab initio study of Tl on Si(111)- $(3\times 1)$  surface. // *physica status solidi (b).* – 2014. – V. 251, N. 8. – P. 1570–1573.
- [81] *Vitali L., Ramsey M.G., Netzer F.P.* Unusual growth phenomena of group {III} and group V elements on Si(1 1 1) and Ge(1 1 1) surfaces. // *Applied Surface Science.* – 2001. – V. 175-176. – P. 146 – 156. 10th International Conference on Solid Films and Surfaces.
- [82] *Kocan Pavel, Sobotik Pavel, Ostadal Ivan.* Metallic-like thallium overlayer on a Si(111) surface. // *Phys. Rev. B.* – 2011. – V. 84. – P. 233304.
- [83] *Lee S. S., Song H. J., Kim N. D., Chung J. W., Kong K., Ahn D., Yi H., Yu B. D., Tochiyara Hiroshi.* Structural and electronic properties of thallium overlayers on the Si(111)- $7\times 7$  surface. // *Phys. Rev. B.* – 2002. – V. 66. – P. 233312.
- [84] *Noda Takayuki, Mizuno Seigi, Chung Jinwook, Tochiyara Hiroshi.*  $T_4$  Site Adsorption of Tl Atoms in a Si(111)- $(1\times 1)$ -Tl Structure, Determined by Low-Energy

- Electron Diffraction Analysis. // Japanese Journal of Applied Physics. – 2003. – V. 42, N. 3B. – P. L319.
- [85] *Kim N. D., Hwang C. G., Chung J. W., Kim T. C., Kim H. J., Noh D. Y.* Structural properties of a thallium-induced Si(111)- $1 \times 1$  surface. // Phys. Rev. B. – 2004. – V. 69. – P. 195311.
- [86] *Gruznev Dimitry V., Bondarenko Leonid V., Matetskiy Andrey V., Yakovlev Alexey A., Tupchaya Alexandra Y., Ereemeev Sergey V., Chulkov Evgeniy V., Chou Jyh-Pin, Wei Ching-Ming, Lai Ming-Yu, Wang Yuh-Lin, Zotov Andrey V., Saranin Alexander A.* A Strategy to Create Spin-Split Metallic Bands on Silicon Using a Dense Alloy Layer. // Scientific Reports. – 2014. – V. 4. – P. 4742.
- [87] *Sakamoto K., Kim T.-H., Kuzumaki T., Muller B., Yamamoto Y., Ohtaka M., Osiecki J.R., Miyamoto K., Takeichi Y., Harasawa A., Stolwijk S.D., Schmidt A.B., Fujii J., Uhrberg R. I.G., Donath M., Yeom H.W., Oda T.* Valley spin polarization by using the extraordinary Rashba effect on silicon. // Nature Communications. – 2013. – V. 4. – P. 2073.
- [88] *Ihm J., Cohen Marvin L., Chelikowsky James R.* Electronic structure of a Pd monolayer on an Si (111) surface. // Phys. Rev. B. – 1980. – V. 22. – P. 4610–4619.
- [89] *Stolwijk Sebastian D., Schmidt Anke B., Donath Markus, Sakamoto Kazuyuki, Krüger Peter.* Rotating Spin and Giant Splitting: Unoccupied Surface Electronic Structure of Tl/Si(111). // Phys. Rev. Lett. – 2013. – V. 111. – P. 176402.
- [90] *Vitali L., Ramsey M.G., Netzer F.P.* Rotational epitaxy of a 'soft' metal overlayer on Si(111). // Surface Science. – 2000. – V. 452. – P. L281–L286.
- [91] *Ichinokura S., Bondarenko L V, Tupchaya A Y, Gruznev D V, Zotov A V, Saranin A A, Hasegawa S.* Superconductivity in thallium double atomic layer and transition

- into an insulating phase intermediated by a quantum metal state. // *2D Materials*. – 2017. – V. 4, N. 2. – P. 025020.
- [92] *Nakabayashi Noriyuki, Tatara Gen.* Rashba-induced spin electromagnetic fields in the strong sd coupling regime. // *New Journal of Physics*. – 2014. – V. 16, N. 1. – P. 015016.
- [93] *Sherman E Ya, Sokolovski D.* von Neumann spin measurements with Rashba fields. // *New Journal of Physics*. – 2014. – V. 16, N. 1. – P. 015013.
- [94] *Qi Xiao-Liang, Zhang Shou-Cheng.* Topological insulators and superconductors. // *Rev. Mod. Phys.* – 2011. – V. 83. – P. 1057–1110.
- [95] *Dong Lin, Jiang Lei, Pu Han.* Fulde-Ferrell pairing instability in spin-orbit coupled Fermi gas. // *New Journal of Physics*. – 2013. – V. 15, N. 7. – P. 075014.
- [96] *Dil J Hugo.* Spin and angle resolved photoemission on non-magnetic low-dimensional systems. // *Journal of Physics: Condensed Matter*. – 2009. – V. 21, N. 40. – P. 403001.
- [97] *Winkler Roland.* Spin-orbit Coupling Effects in Two-Dimensional Electron and Hole Systems. : Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2003.
- [98] *Petersen L., Hedegard P.* A simple tight-binding model of spin orbit splitting of sp-derived surface states. // *Surface Science*. – 2000. – V. 459. – P. 49–56.
- [99] *Pfeffer P., Zawadzki W.* Spin splitting of conduction subbands in III-V heterostructures due to inversion asymmetry. // *Phy. Rev. B*. – 1999. – V. 59. – P. R5312–R5315.
- [100] *Barnes Stewart E., Ieda Jun'ichi, Maekawa Sadamichi.* Rashba Spin-Orbit Anisotropy and the Electric Field Control of Magnetism. // *Scientific Reports*. – 2014. – V. 4. – P. 4105.

- [101] *Yaji Koichiro, Ohtsubo Yoshiyuki, Hatta Shinichiro, Okuyama Hiroshi, Miyamoto Koji, Okuda Taichi, Kimura Akio, Namatame Hirofumi, Taniguchi Masaki, Aruga Tetsuya.* Large Rashba spin splitting of a metallic surface-state band on a semiconductor surface. // *Nature Communications.* – 2010. – V. 1. – P. 17.
- [102] *Binnig G., Rohrer H., Gerber Ch, Weibel E.* Tunneling through a controllable vacuum gap. // *Applied Physics Letters.* – 1982. – V. 40, N. 2. – P. 178–180. Cited By (since 1996): 460.
- [103] *Lüth H.* Surfaces and Interfaces of Solid Materials. – Berlin, Heidelberg, New York: Springer-Verlag, 1995.– 495 p.
- [104] *Вудраф Д., Делчар Т.* Современные методы исследования поверхности. – Москва: Мир, 1989.– 564 с.
- [105] *Зандерны А.* Методы анализа поверхностей. – Москва: Мир, 1979.– 582 с.
- [106] *Хейденрайх Р.* Основы просвечивающей электронной микроскопии. – Москва: Мир, 1966.– 239 с.
- [107] *Зотов А.В., Саранин А.А.* Введение в сканирующую туннельную микроскопию. – Владивосток: ИАПУ, 2002.– 62 с.
- [108] *Руска Э.* Развитие электронного микроскопа и электронной микроскопии. // *Успехи физических наук.* – 1988. – V. 154, N. 2. – P. 243–259.
- [109] *Усачев Дмитрий Юрьевич.* Электронная структура и морфология графена, синтезированного на монокристаллических поверхностях никеля и кобальта. Диссертация кандидата физико-математических наук: 01.04.07. - Санкт-Петербург, 2011.
- [110] *Л. Д. Ландау Е. М. Лифшиц.* Теоретическая физика. Т. III. Квантовая механика. : М.: Наука, 1989.

- [111] *Simmons J. G.* Generalized Formula for the Electric Tunnel Effect between Similar Electrodes Separated by a Thin Insulating Film. // *Journal of Applied Physics.* – 1963. – V. 34. – P. 1793–1803.
- [112] *E. Burstein S. Lundquist.* Tunneling Phenomena in Solids. : New-York: Plenum Press, 1969.
- [113] *Binnig G., Rohrer H., Gerber Ch., Weibel E.* Surface Studies by Scanning Tunneling Microscopy. // *Phys. Rev. Lett.* – 1982. – V. 49. – P. 57–61.
- [114] *Tersoff J., Hamann D. R.* Theory and Application for the Scanning Tunneling Microscope. // *Phys. Rev. Lett.* – 1983. – V. 50. – P. 1998–2001.
- [115] *Tersoff J., Hamann D. R.* Theory of the scanning tunneling microscope. // *Phys. Rev. B.* – 1985. – V. 31. – P. 805–813.
- [116] *Chen C. J.* Tunneling matrix elements in three-dimensional space: The derivative rule and the sum rule. // *Phys. Rev. B.* – 1990. – V. 42. – P. P. 8841–8857.
- [117] *Chen C. J.* Origin of atomic resolution on metal surfaces in scanning tunneling microscopy. // *Phys. Rev. Lett.* – 1990. – V. 65. – P. P. 448–451.
- [118] *Bardeen J.* Tunnelling from a Many-Particle Point of View. // *Phys. Rev. Lett.* – 1961. – V. 6. – P. 57–59.
- [119] *Kubby J.A., Boland J.J.* Scanning tunneling microscopy of semiconductor surfaces. // *Surface Science Reports.* – 1996. – V. 26, N. 3-6. – P. 61 – 204.
- [120] *Hufner Stephan.* Photoelectron Spectroscopy. : Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2003.
- [121] *Tanuma S., Powell C. J., Penn D. R.* Calculations of electron inelastic mean free paths. II. Data for 27 elements over the 50–2000 eV range. // *Surface and Interface Analysis.* – 1991. – V. 17, N. 13. – P. 911–926.



- [122] *Seah M. P., Dench W. A.* Quantitative electron spectroscopy of surfaces: A standard data base for electron inelastic mean free paths in solids. // *Surface and Interface Analysis*. – 1979. – V. 1, N. 1. – P.2–11.
- [123] *Gruznev D. V., Bondarenko L. V., Matetskiy A. V., Tupchaya A. Y., Alekseev A. A., Hsing C. R., Wei C. M., Ereemeev S. V., Zotov A. V., Saranin A. A.* Electronic band structure of a Tl/Sn atomic sandwich on Si(111). // *Phys. Rev. B*. – 2015. – V. 91. – P. 035421.
- [124] *Matetskiy A. V., Ichinokura S., Bondarenko L. V., Tupchaya A. Y., Gruznev D. V., Zotov A. V., Saranin A. A., Hobara R., Takayama A., Hasegawa S.* Two-Dimensional Superconductor with a Giant Rashba Effect: One-Atom-Layer Tl-Pb Compound on Si(111). // *Phys. Rev. Lett.* – 2015. – V. 115. – P. 147003.
- [125] *Yamada Manabu, Hirahara Toru, Hasegawa Shuji.* Magnetoresistance Measurements of a Superconducting Surface State of In-Induced and Pb-Induced Structures on Si(111). // *Phys. Rev. Lett.* – 2013. – V. 110. – P. 237001.
- [126] *Imamura Takeshi, Okamoto Kiyomi, Saito Munetaka, Ohtsuka Mieko.* Fluctuation-Induced Conductivity above the Superconducting Transition Temperature in Thallium Films. // *Journal of the Physical Society of Japan*. – 1976. – V. 40, N. 5. – P. 1256–1262.
- [127] *Profeta Gianni, Calandra Matteo, Mauri Francesco.* Phonon-mediated superconductivity in graphene by lithium deposition. // *Nat Phys*. – 2012. – V. 8, N. 2. – P. 131–134.
- [128] *Fedorov A. V., Verbitskiy N. I., Haberer D., Struzzi C., Petaccia L., Usachov D., Vilkov O. Y., Vyalikh D. V., Fink J., Knupfer M., Bǃchner B., Grǃneis A.* Observation of a universal donor-dependent vibrational mode in graphene. // *Nature Communications*. – 2014. – V. 5. – P. 3257.

- [129] *Ichinokura Satoru, Sugawara Katsuaki, Takayama Akari, Takahashi Takashi, Hasegawa Shuji.* Superconducting Calcium-Intercalated Bilayer Graphene. // ACS Nano. – 2016. – V. 10, N. 2. – P.2761–2765.
- [130] *Uhm S. H., Yeom H. W.* Electron-phonon interaction of one-dimensional and two-dimensional surface states in indium adlayers on the Si(111) surface. // Phys. Rev. B. – 2012. – V. 86, N. 24. – P.245408–7.
- [131] *Ligges M., Sandhofer M., Sklyadneva I., Heid R., Bohnen K. P., Freutel S., Retting L., Zhou P., Echenique P. M., Chulkov E. V., Bovensiepen U.* Electron-phonon coupling in quantum-well states of the Pb/Si(111) system. // J.Phys.:Cond.Matt. – 2014. – V. 26, N. 36. – P.352001–7.
- [132] *Zhang T., Cheng P., Li W.-J., Sun Y.-J., Wang G., Zhu X.-G., He K., Wang L., Ma X., Chen X., Wang Y., Liu Y., Lin H.-Q., Jia J.-F., Xue Q.-K.* Superconductivity in one-atomic-layer metal films grown on Si(111). // Nature Physics. – 2010. – V. 6. – P.104–108.
- [133] *Yamada M., Hirahara T., Hasegawa S.* Magnetoresistance measurements of a superconducting surface state of In-induced and Pb-induced structures on Si(111). // prl. – 2013. – V. 110. – P.237001–5.
- [134] *Mihalyuk A.N., Hsing C.R., Wei C.M., Gruznev D.V., Bondarenko L.V., Tupchaya A.Y., Zotov A.V., Saranin A.A.* One-atom-layer  $4\times 4$  compound in (Tl, Pb)/Si(111) system. // Surface Science. – 2017. – V. 657. – P.63 – 68.
- [135] *Gruznev D. V., Bondarenko L. V., Matetskiy A. V., Tupchaya A. Y., Chukurov E. N., Hsing C. R., Wei C. M., Ereemeev S. V., Zotov A. V., Saranin A. A.* Atomic structure and electronic properties of the two-dimensional (Au, Al)/Si(111) $2\times 2$  compound. // Phys. Rev. B. – 2015. – V. 92. – P. 245407.

- [136] *Bernevig B. Andrei, Orenstein J., Zhang Shou-Cheng.* Exact SU(2) Symmetry and Persistent Spin Helix in a Spin-Orbit Coupled System. // *Phys. Rev. Lett.* – 2006. – V. 97. – P. 236601.
- [137] *Koralek J. D., Weber C. P., Orenstein J., Bernevig B. A., Zhang Shou-Cheng, Mack S., Awschalom D. D.* Emergence of the persistent spin helix in semiconductor quantum wells. // *Nature.* – 2009. – V. 458, N. 7238. – P. 610–613.
- [138] *Walser M. P., Reichl C., Wegscheider W., Salis G.* Direct mapping of the formation of a persistent spin helix. // *Nat Phys.* – 2012. – V. 8, N. 10. – P. 757–762.
- [139] *Absor Moh Adhib Ulil, Ishii Fumiyuki, Kotaka Hiroki, Saito Mineo.* Persistent spin helix on a wurtzite ZnO (10 $\bar{1}$ 0) surface: First-principles density-functional study. // *Applied Physics Express.* – 2015. – V. 8, N. 7. – P. 073006.
- [140] *Kohda Makoto, Salis Gian.* Physics and application of persistent spin helix state in semiconductor heterostructures. // *Semiconductor Science and Technology.* – 2017.