

STM images of the silicon (001) surface

a first-principles study

Antoine Pairet

Université catholique de Louvain (UCL)
École polytechnique de Louvain (EPL)

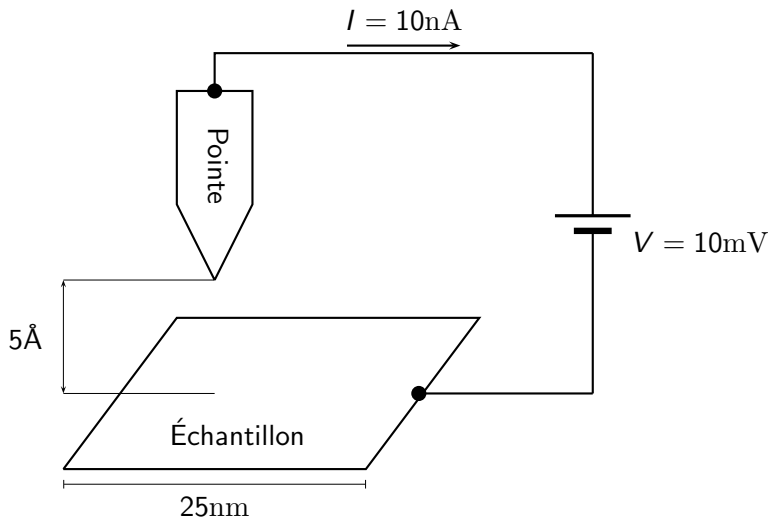
6 septembre 2010

Le microscope à effet tunnel (STM)
permet de “voir” les atomes

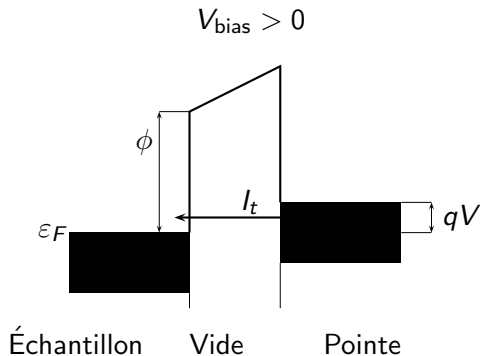


Le diamètre d'un cheveu est 1 000 000 x plus grand qu'un atome

Le STM crée une image de la surface en mesurant le courant tunnel

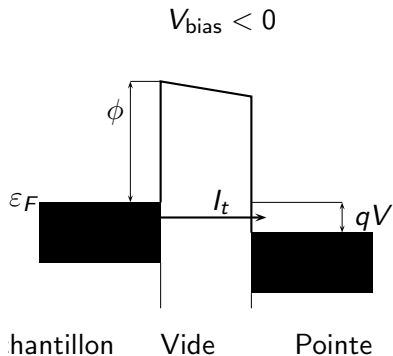


Le courant tunnel est une image
de la densité d'états électronique locale



Un voltage positif sonde les états inoccupés de l'échantillon

Le courant tunnel est une image
de la densité d'états électroniques locale



Un voltage négatif sonde les états occupés de l'échantillon

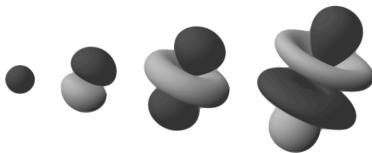
Interpréter les images STM n'est pas une tâche aisée

- ▶ Dans le cadre de l'approximation de Tersoff-Hamann, le courant tunnel est proportionnel à la LDOS
- ▶ Expérimentalement, la pointe peut influencer l'image STM
- ▶ Certains systèmes sont complexes par nature :
 - ▶ les reconstructions de surface
 - ▶ l'adsorption de molécules

Effectuer des simulations *ab initio* peut aider à interpréter les images STM expérimentales

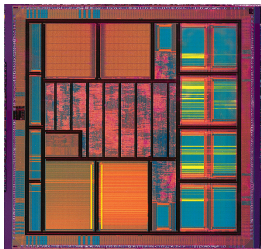
Les simulations *ab initio* ne font pas appel à des données expérimentales

- ▶ Le cadre théorique est celui de la mécanique quantique, l'équation de Schrödinger est résolue
- ▶ Siesta utilise une base localisée composée d'orbitales atomiques pour implémenter la DFT



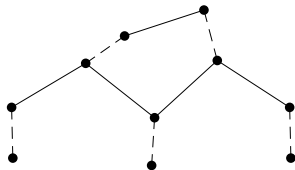
J'ai effectué des simulations *ab initio* de la surface (001) du silicium

Intérêts technologiques



La surface (001) du silicium
est utilisée dans pratiquement
toutes les puces actuelles

Richesse physique



Les atomes de surface se
reorganisent pour rendre le
système plus stable

Images STM de la surface (001) du silicium

Reconstructions de la surface (001) du silicium

Images STM de la surface (001) du silicium

Adsorption de molécules et perspectives

Images STM de la surface (001) du silicium

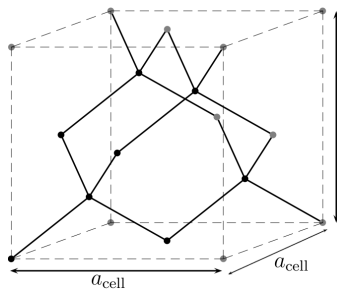
Reconstructions de la surface (001) du silicium

Images STM de la surface (001) du silicium

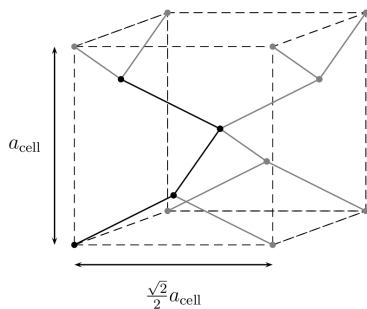
Adsorption de molécules et perspectives

La surface (001) du silicium comporte
2 liaisons pendantes par atome en surface

Crystal



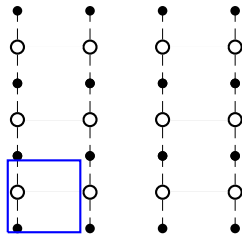
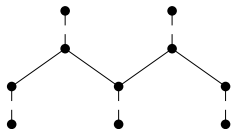
Surface (001)



Pour diminuer son énergie de surface, elle va se reconstruire

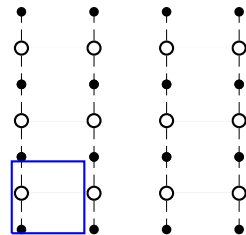
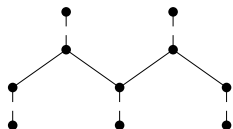
La surface (001) se reconstruit pour diminuer son energie de surface

Surface non reconstruite

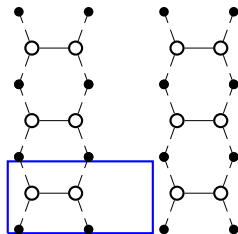
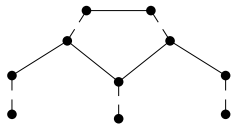


La surface (001) se reconstruit pour diminuer son energie de surface

Surface non reconstruite

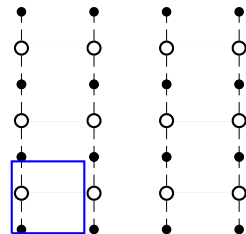
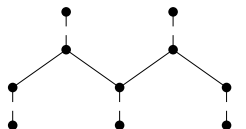


Dimère symétrique (2 × 1)_s

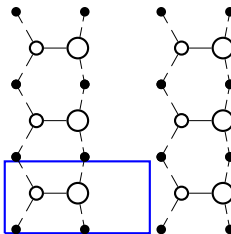
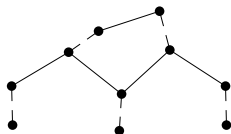


La surface (001) se reconstruit pour diminuer son energie de surface

Surface non reconstruite

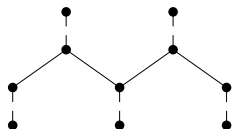


Dimère asymétrique (2×1)a

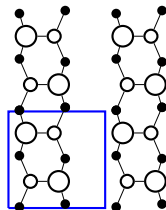
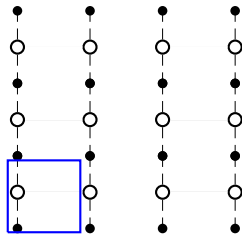
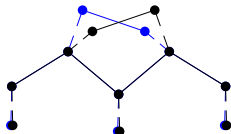


La surface (001) se reconstruit pour diminuer son energie de surface

Surface non reconstruite

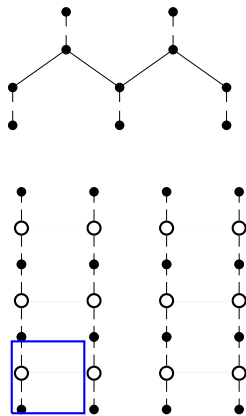


Dimères alternés (2×2)

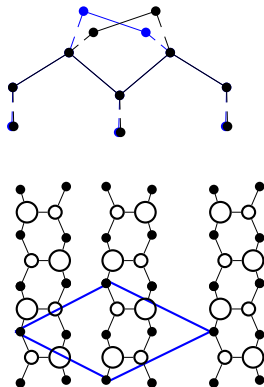


La surface (001) se reconstruit pour diminuer son energie de surface

Surface non reconstruite

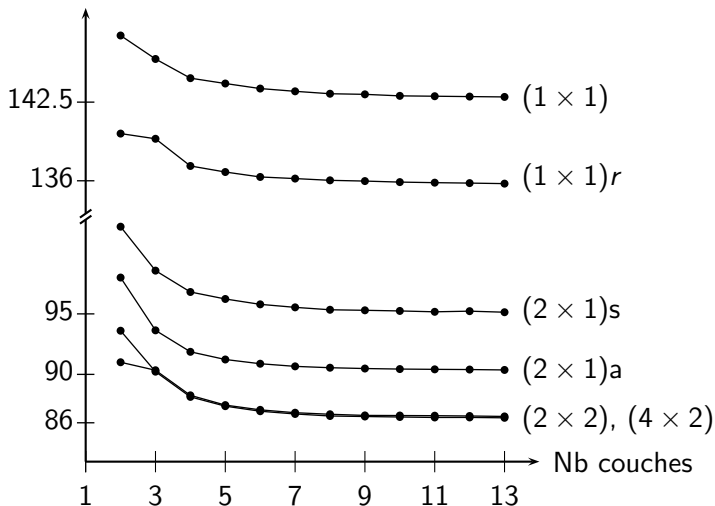


Décalage des rangées (4×2)



Plus la surface a une faible énergie, plus elle est stable

Énergie de surface [$\text{meV}/\text{Å}^2$]



Images STM de la surface (001) du silicium

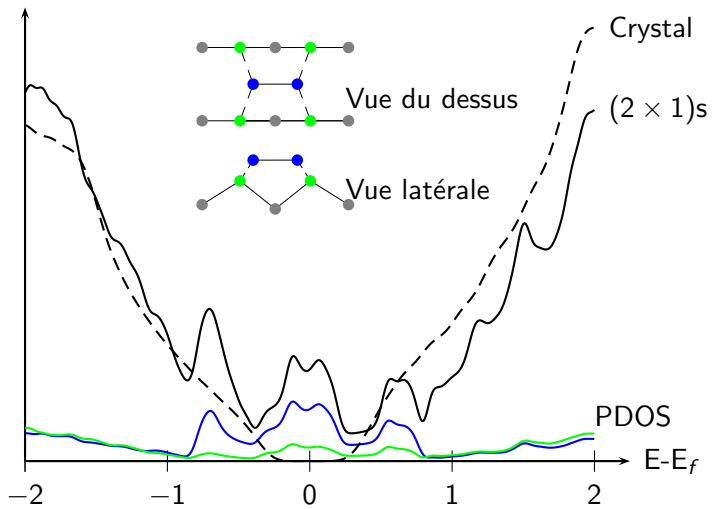
Reconstructions de la surface (001) du silicium

Images STM de la surface (001) du silicium

Adsorption de molécules et perspectives

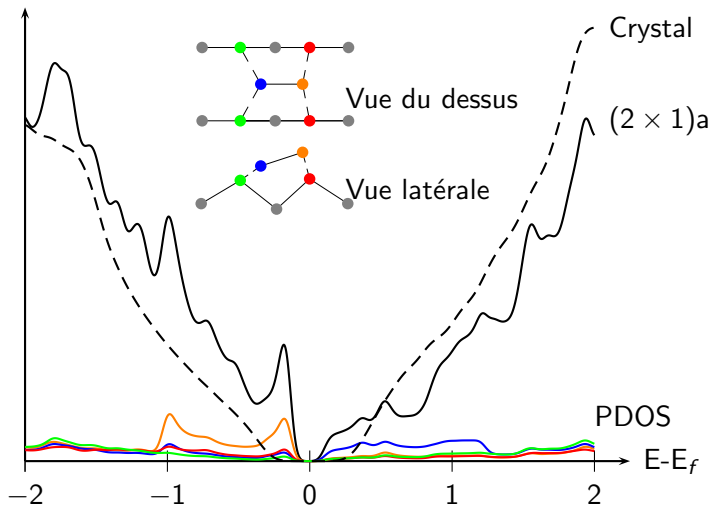
La PDOS peut donner un aperçu des images STM

(P)DOS [a.u.]

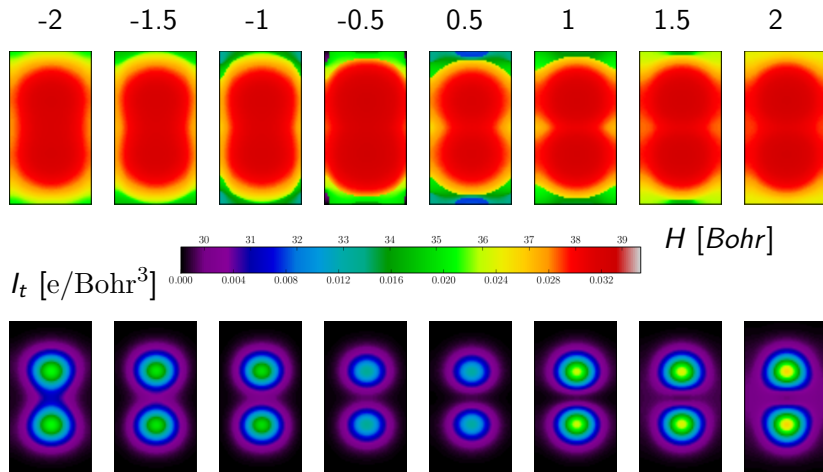


La PDOS peut donner un aperçu des images STM

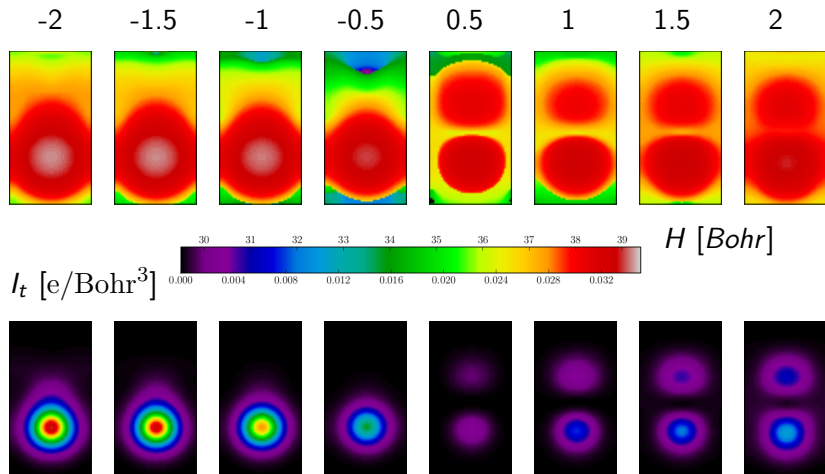
(P)DOS [a.u.]



Le voltage est le paramètre physique le plus important, son signe détermine le type d'états sondés



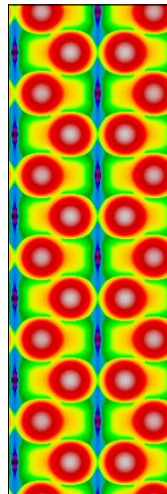
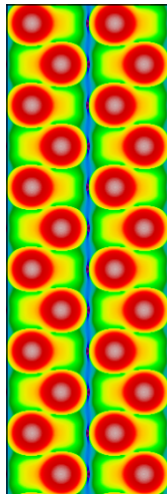
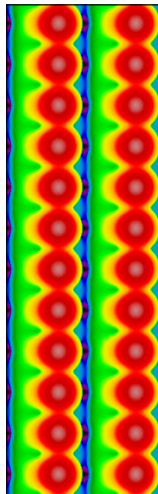
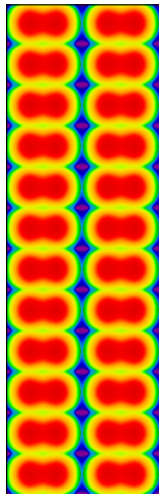
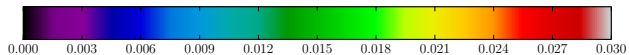
Le voltage est le paramètre physique le plus important, son signe détermine le type d'états sondés



$(2 \times 1)a$

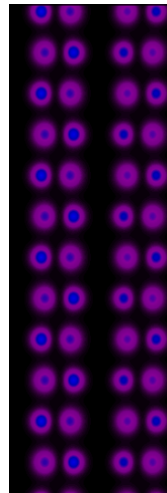
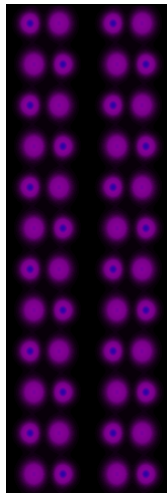
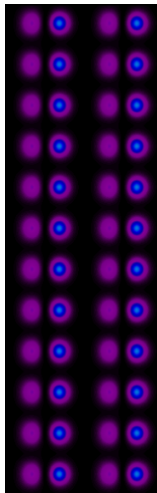
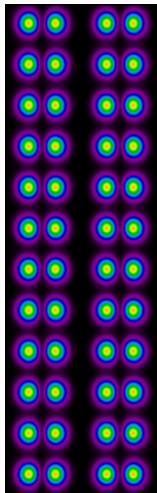
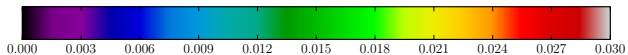
Comparaison des reconstructions

H [Bohr]



Comparaison des reconstructions

I_t [e/Bohr³]



Images STM de la surface (001) du silicium

Reconstructions de la surface (001) du silicium

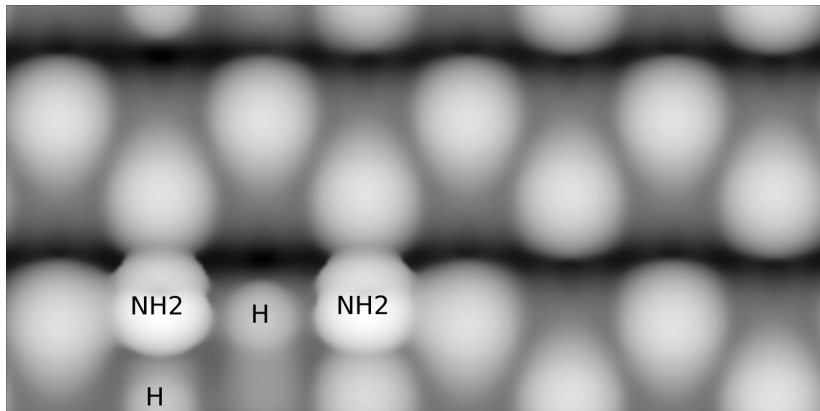
Images STM de la surface (001) du silicium

Adsorption de molécules et perspectives

L'ammoniac se dissocie lorsqu'il s'adsorbe sur la surface (001) du silicium

- ▶ NH_3 s'adsorbe sur l'atome le plus bas du dimère
- ▶ Il se dissocie en $NH_2 - H$:
 - ▶ sur le même dimère
 - ▶ entre deux dimères
 - ▶ entre deux rangées
- ▶ Différents couples $NH_2 - H$ interagissent :
 - ▶ par des liaisons hydrogènes
 - ▶ par les distortions du réseau

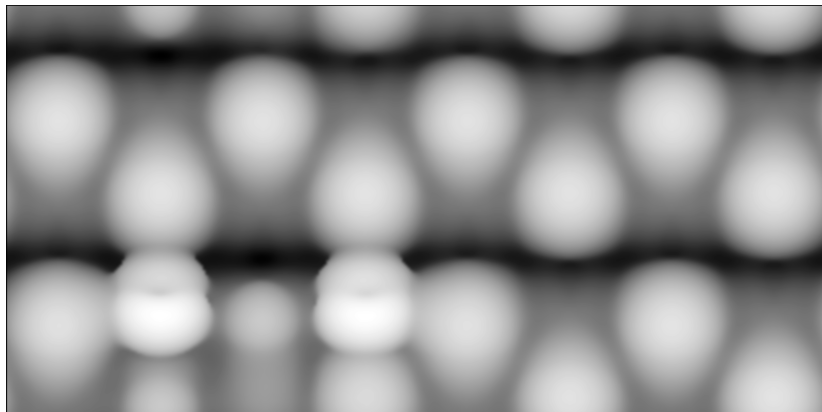
Un couple NH_2-H est rarement observé de manière isolée



Intéractions entre

- ▶ NH_2-H sur un même dimère
- ▶ NH_2-H sur deux dimères

L'approximation de Tersoff-Hamann permet d'obtenir des images STM

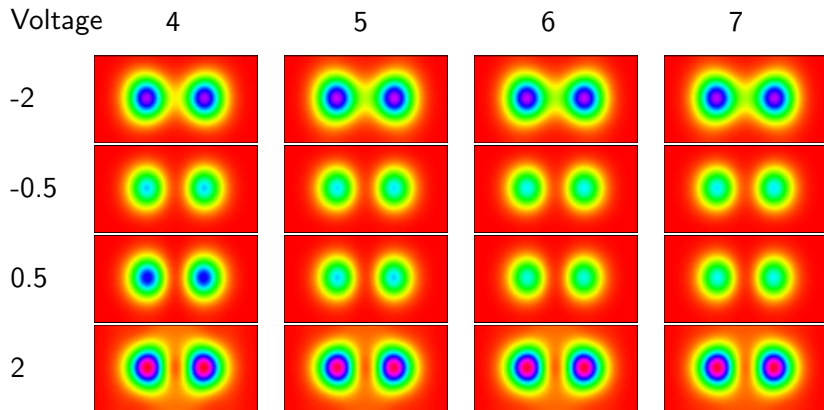


On peut améliorer les images simulées en allant au delà de l'approximation de Tersoff-Hamann

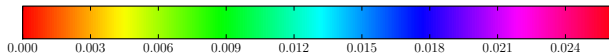
Images STM de la surface (001) du silicium



L'image STM converge vite avec le nombre de couches

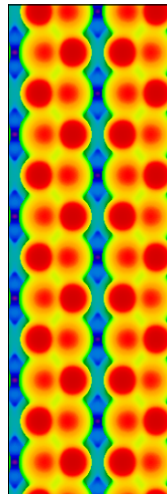
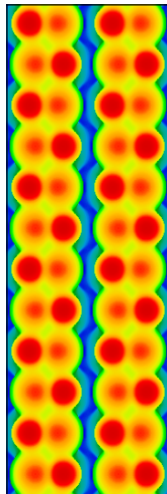
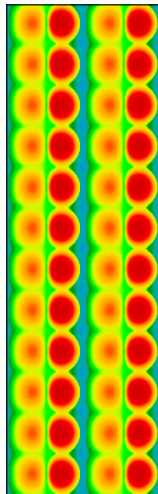
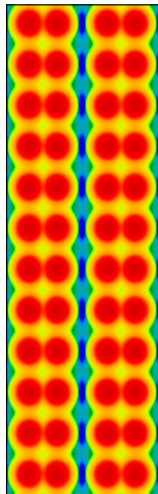
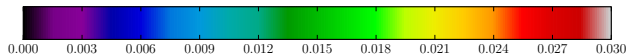


I_t [e/Bohr^3]



Comparaison des reconstructions

H [Bohr]



Comparaison des reconstructions

I_t [e/Bohr³]

