

# Badanie stopni na powierzchni 4H-SiC{0001} przy pomocy DFT

**E. Wachowicz<sup>1,2</sup>, T. Ossowski<sup>1</sup>, A. Kiejna<sup>1</sup>**

<sup>1</sup> *Instytut Fizyki Doświadczalnej, Uniwersytet Wrocławski, Wrocław, Polska*

<sup>2</sup> *Interdyscyplinarne Centrum Matematycznego i Komputerowego Modelowania, Uniwersytet Warszawski, Warszawa, Polska*

Wzrost heksagonalnych kryształów politypów 4H-SiC i 6H-SiC zachodzi wzdłuż kierunku  $\langle 0001 \rangle$ . Powierzchnia kryształu składa się z tarasów powierzchni  $\{0001\}$  oddzielonych stopniami atomowymi o wysokości połowy lub całej komórki elementarnej. Przedstawiamy badania przeprowadzone w oparciu o teorię funkcjonału gęstości (DFT – density functional theory) struktury atomowej i morfologii stopni atomowych powstałych w kierunkach  $[10-10]$  i  $[11-20]$  na zakończonej krzemem powierzchni 4H-SiC $\{0001\}$  i zakończonej węglem powierzchni 4H-SiC $\{000-1\}$ . Na tej drugiej, struktura atomowa i elektronowa powierzchni zmodyfikowana jest jedynie na samym stopniu, podczas gdy struktura tarasu prawie nie różni się od struktury czystej, stechiometrycznej powierzchni. W przeciwieństwie do tego, na terminacji krzemowej, niezależnie od rodzaju stopnia i szerokości tarasu, powierzchnia pomiędzy stopniami jest znacznie pofałdowana. Obliczona energia stopnia pokazała, że spośród rozważanych przypadków, najłatwiej powstaje stopień  $[11-20]$  na powierzchni zakończonej krzemem z atomem C na krawędzi.

[1] E. Wachowicza, T. Ossowski, A. Kiejna, Appl. Surf. Sci. **420** (2017) 129.