

Атомная и электронная структура поверхности GaAs(001)

© С.Е. Кулькова^{+*}†, С.В. Еремеев^{+*}, А.В. Постников^{‡*}, Д.И. Бажанов^{^#}, Б.В. Потапкин[#]

⁺ Институт физики прочности и материаловедения Сибирского отделения Российской академии наук, 636021 Томск, Россия

^{*} Томский государственный университет, 634050 Томск, Россия

[‡] Институт физики металлов Уральского отделения Российской академии наук, 620219 Екатеринбург, Россия

[•] Университет Поля Верлена, F-57078, Мец, Франция

[^] Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, 119992 Москва, Россия

[#] Kinetic Technologies Ltd, 123182 Москва, Россия

(Получена 20 сентября 2006 г. Принята к печати 2 октября 2006 г.)

В рамках псевдопотенциального подхода изучена атомная структура четырех структурных реконструкций полярной поверхности GaAs(001), обогащенной галлием. Определены геометрические параметры поверхностных структур α -, β -, β_2 - и ξ -GaAs(001)-(4×2). Рассчитана электронная структура и относительные поверхностные энергии. Рассмотрена адсорбция цезия на Ga-стабилизированной ξ -структуре GaAs(001)-(4×2). Наибольшая энергия адсорбции (2.57 эВ) получена в позиции S₅, которая отличается повышенной координацией атома цезия атомами мышьяка. Анализ электронной структуры позволил прояснить механизм связи цезия на поверхности GaAs(001) и вносимые им изменения в поверхностную электронную структуру подложки.

PACS: 68.35.Bs, 68.43.Bc, 68.43.Fg, 81.05.Ea

1. Введение

В последние годы интерес к структуре поверхностей полупроводниковых соединений на основе элементов III и V групп существенно усилился. Это обусловлено экспериментальными и теоретическими исследованиями, которые показали, что геометрия полярной поверхности (001) отличается от предложенных ранее димерных моделей. Известно, что ориентированные (001) подложки полупроводников III–V широко используются в технологиях, таких как молекулярно-лучевая эпитаксия. На поверхности (001) существует широкий спектр структур в зависимости от химического состава поверхностного слоя и способов ее приготовления [1]. Например, поверхность GaAs(001), обогащенная мышьяком, имеет структуру $c(4 \times 4)$, но она изменяет свою периодичность до $(2 \times 4)/c(2 \times 8)$, а затем до $(4 \times 2)/c(8 \times 2)$ с увеличением содержания катиона (галлия) на поверхности. Разнообразие структур на поверхности (001) в полупроводниках III–V потребовало понимания и объяснения механизмов их формирования исходя из физических закономерностей и принципов [2–6]. Было показано, что кулоновским отталкиванием между отрицательно заряженными анионными димерами можно объяснить стабильность структуры GaAs(001) $\beta_2(2 \times 4)$ с двумя димерами мышьяка в поверхностном слое по сравнению с $\beta(2 \times 4)$ с тремя димерами. Основываясь на электростатических аргументах, авторы работы [4] предсказали более стабильную по сравнению с $\alpha(2 \times 4)$

структуру $\alpha_2(2 \times 4)$ с одним димером. В ряде случаев предложенные модели [5,6] помогли объяснить экспериментально наблюдаемые структуры на полупроводниковых поверхностях. В то же время понимание поверхностных реконструкций в полупроводниках III–V далеко не полное, и движущие механизмы целого ряда реконструкций не укладываются в рамки простых соотношений, рассмотренных в [2–6]. Подход, основанный на симметричных димерах, также не в состоянии объяснить многие структуры на поверхности (001) [7]. Отклонение от правила подсчета числа электронов в поверхностном слое было найдено для AlSb и GaSb [8].

Структура поверхности GaAs(001), обогащенной галлием, изучена в рамках теоретических подходов меньше, чем для случая ее мышьякового окончания [1]. В работе [9,10] изображения, полученные методом сканирующей туннельной микроскопии, были интерпретированы как структура $\beta_2(4 \times 2)$ с тремя димерами галлия (один димер находится в третьем от поверхности слое). В работах [11–13] были предложены другие модели для поверхности GaAs(001)-(4×2), обогащенной галлием, — это модель Скалы, $\beta_3(4 \times 2)$ и $\beta(4 \times 2)$. В работе [14] на основе расчетов из первых принципов была предложена довольно сложная ξ -структура для Ga-GaAs(001) $(4 \times 2)/c(8 \times 2)$. Стабильность этой структуры по отношению к ранее предложенным геометриям (4×2) была подтверждена в [1,15]. Данная ξ -структура содержит два димера галлия во втором атомном слое от поверхности и один димер Ga, а также трехкратно координированные атомы Ga и As в поверхностном слое.

† E-mail: kulkova@ispms.tsc.ru

Однако результаты дифракции медленных электронов и данные рентгеновской дифракции [16,17] позволяют говорить о возможных новых моделях, которые могут быть предложены для обогащенной галлием поверхности GaAs(001).

Таким образом, несмотря на то, что атомная структура поверхности GaAs(001) изучена детально экспериментальными методами, даже основные наблюдаемые реконструкции поверхности GaAs(001) недостаточно изучены в рамках теоретических подходов. В отмеченных выше работах в основном обсуждается атомная структура поверхностей, но практически не анализируются электронные характеристики, такие как плотности электронных состояний или электронный энергетический спектр. Стабильность реконструкции ξ -GaAs(001)-(4×2) подтверждена фактически лишь результатами авторов, предложивших данную модель [14,18,19]. Таким образом, исследование атомной и электронной структуры реконструированной поверхности GaAs(001), обогащенной галлием, остается актуальной задачей, а стабильность фаз нуждается в подтверждении независимыми расчетными методиками. Цель настоящей работы состоит в исследовании атомной и электронной структуры четырех реконструкций поверхности GaAs(001)-(4×2), обогащенной галлием, и рассмотрении адсорбции цезия на наиболее стабильной ξ -структуре.

2. Метод расчета

Для расчета атомной и электронной структуры поверхности GaAs(001)-(4×2) использовалась модель повторяющихся шестислойных пленок и модель [20], в которой поверхность, оканчивающаяся мышьяком, насыщалась водородом с зарядом 0.75 электрона. Идеальная ячейка содержала 48 атомов Ga, As и 16 атомов водорода с зарядом 0.75 электрона. Число атомов в поверхностных слоях для конкретных реконструкций задавалось исходя из рассчитываемой модели. Величина промежутка вакуума была равна ~ 10 Å. Расчет проводился в рамках подхода, предложенного в [21,22], с использованием кода VASP [23,24]. В последнем наряду с псевдопотенциальным подходом может быть использован метод проекционных присоединенных волн (PAW) [22]. На расчете объемного GaAs были протестированы различные псевдопотенциалы в формализме PAW с использованием разных типов обменно-корреляционного функционала: в приближениях локальной плотности (LDA) и обобщенного градиента (GGA). Полученный равновесный параметр решетки был равен $a = 5.626$ Å для LDA и $a = 5.756$ Å для GGA, что хорошо согласуется с экспериментальным значением $a = 5.6537$ Å [25]. Оптимизация атомной структуры поверхности (4×2) проводилась с использованием k -сетки $2 \times 4 \times 1$ и $3 \times 6 \times 1$. Оптимизировались четыре верхних атомных слоя, тогда как два слоя галлия и мышьяка фиксировались при объемных значениях.

3. Атомная и электронная структура поверхности GaAs(001)

Были рассмотрены атомные структуры четырех реконструкций поверхности GaAs(001)-(4×2) — это реконструкции α , β , $\beta 2$ и ξ . Наименее искаженной является β -структура, которая имеет три димера галлия в поверхностном слое. Атомные структуры всех исследованных реконструкций GaAs(001) представлены на рис. 1. Для β -структуры наблюдается планарное смещение атомов мышьяка вблизи пропущенного димера галлия, тогда как вблизи центрального димера атомы мышьяка практически не смещаются, что находится в согласии с результатом, полученным в [26]. Длина связи в среднем димере галлия равна 2.49 Å, тогда как крайние димеры имеют длину 2.50 Å при использовании GGA ($a = 5.756$ Å). В работе [27] приведены несколько меньшие значения длин связи во всех димерах, равные 2.38 и 2.39 Å, полученные в рамках LDA ($a = 5.644$ Å). В работе [28], в которой также использовалось приближение

Таблица 1. Координаты некоторых атомов поверхности ξ -GaAs(001)-(4×2), оканчивающейся галлием, и адсорбированного цезия

Чистая поверхность					
Атом	x	y	z		
Ga(1)	0.375	0.596; 0.904	0.214		
Ga(2)	0.155; 0.595	0.25	0.317		
Ga(3)	0.152; 0.598	0.75	0.290		
As(S)	0.240; 0.510	0.506	0.385		
		0.994			
As(T)	0.007	0.25	0.262		
	0.006	0.75	0.255		
	0.743	0.25	0.262		
	0.744	0.75	0.255		
Ga(7)	0.000	0.000	0.000		
Поверхность с адсорбированным цезием					
Атом	x	y	z	Cs-Ga _{min} , Å	Cs-As _{min} , Å
Cs(M ₁)	0.375	0.524	0.850	3.817 Ga(1)	3.563 As(S)
Cs(M ₂)	0.120	0.250	0.839	3.433 Ga(1)	3.821 As(T)
Cs(M ₃)	0.089	0.750	0.831	3.528 Ga(3)	3.601 As(S)
Cs(S ₁)	0.375	0.750	0.798	3.687 Ga(1)	3.863 As(S)
Cs(S ₂)	0.375	0.250	0.748	4.182 Ga(1)	3.707 As(S)
Cs(S ₃)	0.221	0.750	0.881	3.747 Ga(3)	3.585 As(S)
Cs(S ₄)	0.875	0.750	0.724	5.153 Ga(3)	3.518 As(T)
Cs(S ₅)	0.875	0.506	0.647	5.210 Ga(2)	3.675 As(T)
Cs(S ₆)	0.508	0.500	0.943	4.430 Ga(2)	3.356 As(S)
Cs(S ₇)	0.767	0.750	0.800	4.143 Ga(3)	3.351 As(T)

Примечание. Координаты атомов даны относительно атома Ga (7) в третьем слое от поверхности; координаты вдоль осей $x \parallel [110]$ и $y \parallel [110]$ даны в относительных единицах ячейки (4×2), координаты вдоль направления $z \parallel [001]$ даны в долях объемного параметра решетки (5.756 Å). As(S) — атомы мышьяка вблизи поверхностного димера (4-й и ему подобные на рис. 1); As(T) — поверхностные атомы мышьяка, лежащие на крае пропущенного ряда (5-й и 6-й на рис. 1).

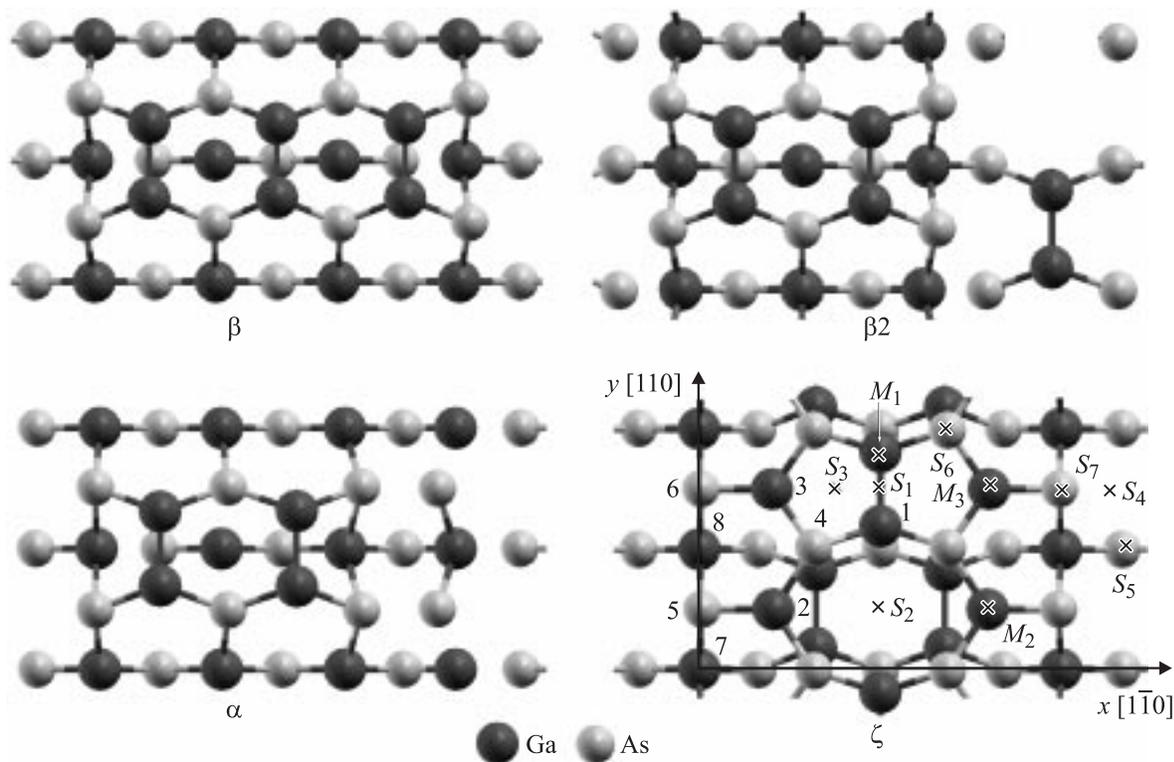


Рис. 1. Равновесные атомные структуры поверхности GaAs(001)-(4×2), обогащенной галлием (вид сверху): реконструкции β , $\beta 2$, α и ζ . Координаты пронумерованных атомов приведены в табл. 1. Позиции цезия на поверхности ζ -GaAs(001)-(4×2) при адсорбции показаны буквенными символами.

LDA, длина связи в димерах оказалась равной 2.43 Å. За счет планарного смещения атомов мышьяка в сторону пропущенного димера галлия наблюдается большее расстояние между атомами мышьяка второго слоя по сравнению с объемными слоями. При этом расстояние As–As под центральным димером несколько меньше расстояний между атомами мышьяка, лежащими под крайними димерами.

В случае структуры $\beta 2$ -GaAs(001)-(4×2) в поверхностном слое находятся только два димера галлия, еще один димер формируется в третьем от поверхности слое. Длина связи в димерах галлия поверхностного слоя равна 2.51 Å, тогда как в третьем от поверхности слое 2.52 Å (2.42 и 2.44 Å в LDA). Это согласуется с результатами работы [27], в которой также установлено небольшое различие в длинах димеров галлия для разных слоев — 2.42 и 2.43 Å соответственно. Практически такое же значение, 2.40 Å, было получено в работе [29]. Следует отметить, что в работе [13] дифракцией медленных электронов были обнаружены необычные длины димеров галлия, равные 2.13 и 3.45 Å. В [30] было показано существование вертикального сдвига димеров мышьяка в поверхностном слое друг относительно друга ~ 0.02 Å. Смещение слоев галлия, равное 0.013 Å, получено нами для поверхности, обогащенной галлием. Кроме того, в работе [29] отмечается существенное уменьшение межплоскостного рас-

стояния d_{12} между поверхностным и подповерхностным слоями практически в 2 раза. Подобное поведение наблюдается и в нашем расчете ($d_{12} \approx 0.7$ Å по сравнению с 1.44 Å — межплоскостным расстоянием в объеме). Сопоставление энергетики двух фаз показывает, что структура $\beta 2$ -GaAs(001)-(4×2) с двумя галлиевыми димерами в поверхностном слое выгоднее на ~ 2 мэВ/Å² (0.80 мэВ/Å³ [29]), чем β -структура.

В работе [8] было найдено, что реконструкция α -GaAs(001)-(4×2) является менее стабильной для поверхности, обогащенной галлием. Она содержит два димера галлия в поверхностном слое, а также два димера мышьяка в подповерхностном слое, причем последние располагаются в направлении, перпендикулярном связи Ga–Ga. Для данной структуры характерны различные расстояния между атомами даже в пределах одного слоя. Длина связи в димере мышьяка составляет 2.74 Å (LDA) и 2.61 Å (GGA), тогда как длины связей Ga–Ga равны 2.42 и 2.52 Å (LDA), 2.50 и 2.54 Å (GGA). Ранее в [29] была получена длина связи димера галлия в α -фазе, равная 2.50 Å, но о разнице длин связей в димерах не сообщалось. В одной из последних публикаций [27] приведены значения 2.39 и 2.41 Å, а длина димера мышьяка 2.91 Å для LDA. Вертикальное смещение димеров галлия друг относительно друга составило ~ 0.14 Å, но оно значительно меньше в расчете с использованием приближения обобщенного градиента, ~ 0.05 Å.

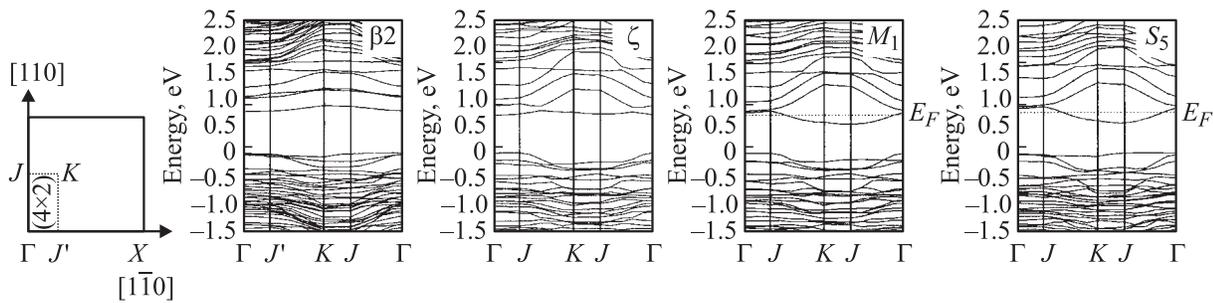


Рис. 2. Думерная зона Бриллюэна и зонные спектры для реконструкций β_2 - и ξ -GaAs(001)-(4 \times 2), а также с адсорбированным цезием в позициях M_1 и S_5 для случая ξ -реконструкции.

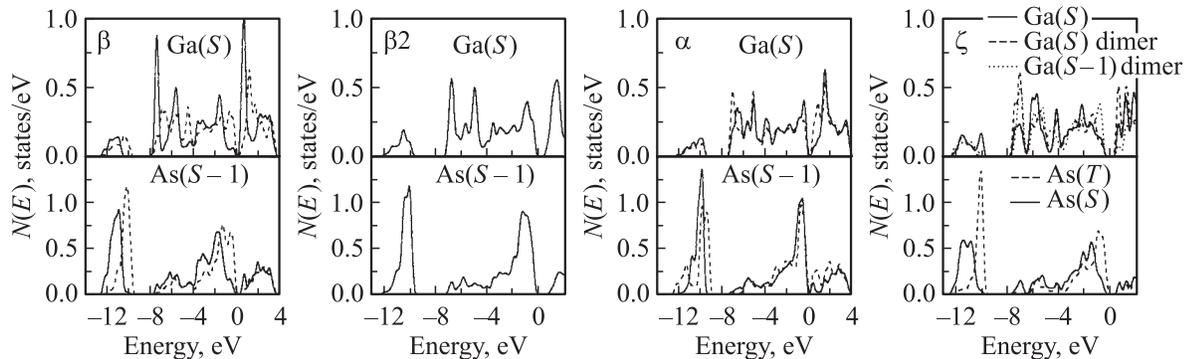


Рис. 3. Полные и локальные плотности электронных состояний $N(E)$ для атомов поверхностного (S) и подповерхностного ($S-1$) слоев для β -структуры (сплошная линия — ПЭС Ga и As вблизи центрального димера, штриховая — ПЭС атомов вблизи крайних димеров), β_2 -структуры, α -структуры (штриховая линия — усредненная по атомному слою ПЭС) и ξ -GaAs(001)-(4 \times 2). As(S) и As(T) — поверхностные атомы мышьяка вблизи поверхностного димера галлия (Ga(S) dimer) и лежащие на краю пропущенного галлиевого ряда; Ga($S-1$) dimer — димер галлия в подповерхностном слое.

Реконструкция ξ -GaAs(001)-(4 \times 2) считается наиболее стабильной на поверхности, обогащенной галлием [4,14]. Равновесные координаты поверхностных атомов приведены в табл. 1. Для данной геометрии характерно формирование одного димера галлия в поверхностном слое с длиной связи 2.51 Å и двух димеров галлия в третьем от поверхности слое с длиной димера 2.59 Å (расчет в градиентном приближении для обменно-корреляционного потенциала). В работе [28] в приближении локальной плотности были получены длины димеров в первом и третьем слоях, равные 2.44 и 2.49 Å соответственно (при этом параметр решетки составлял 5.61 Å). Поверхностный димер галлия располагается ниже атомов мышьяка на 0.96 и 0.92 Å, согласно результатам работ [18] и [28] соответственно. Оценка показала, что смещение димера галлия в нашем расчете составляет 0.99 Å. Кроме того, атомы галлия, формирующие димер, лежат ниже на 0.45 Å (0.39 Å [18] и 0.45 Å [28]), чем трехцентрированные атомы галлия в поверхностном слое. Связь между поверхностным и подповерхностным слоями обусловлена взаимодействиями атомов мышьяка 5,6, лежащих на крае пропущенного ряда, и атомами галлия 7,8 (см. рис. 1). Длина связи в этом случае составляет ~ 2.52 Å. Расстояние между атомом мышьяка 4 и лежащим под ним атомом галлия (2.66 Å) достаточно большое для образования

химической связи. Аналогичный вывод был сделан в работах [14,28]. Отметим, что экспериментальное значение равно 2.72 Å [28]. Оценка энергетика такой реконструкции показала, что данная фаза ниже по энергии на величину 2.56 мэВ/Å² по сравнению с β_2 -фазой. Значение, равное 3.3 мэВ/Å², было получено в [14]. Таким образом, можно сделать вывод, что полученные оптимизированные атомные структуры для поверхности GaAs(001) позволили корректно воспроизвести тенденции в энергиях рассмотренных реконструкций, которые находятся в хорошем согласии с теоретическими и экспериментальными данными [1,4-7,14,15,18,19,26-29].

В упомянутых выше работах основной акцент был сделан на описании структурных аспектов поверхности GaAs(001), значительно меньше в работах обсуждалась поверхностная электронная структура [1,19,31]. Для всех исследованных модификаций были рассчитаны электронные спектры и плотности электронных состояний (ПЭС). На рис. 2 приведены кривые дисперсии для β_2 - и ξ -реконструкций вблизи фундаментальной щели. В случае β_2 -структуры щель (~ 0.8 эВ, LDA) уже, чем для поверхности, заканчивающейся мышьяком (1.08 эВ для LDA), и видно достаточно сильное отщепление нижних незанятых состояний от дна зоны проводимости. Меньшие значения фундаментальной щели получаются при использовании GGA-приближения.

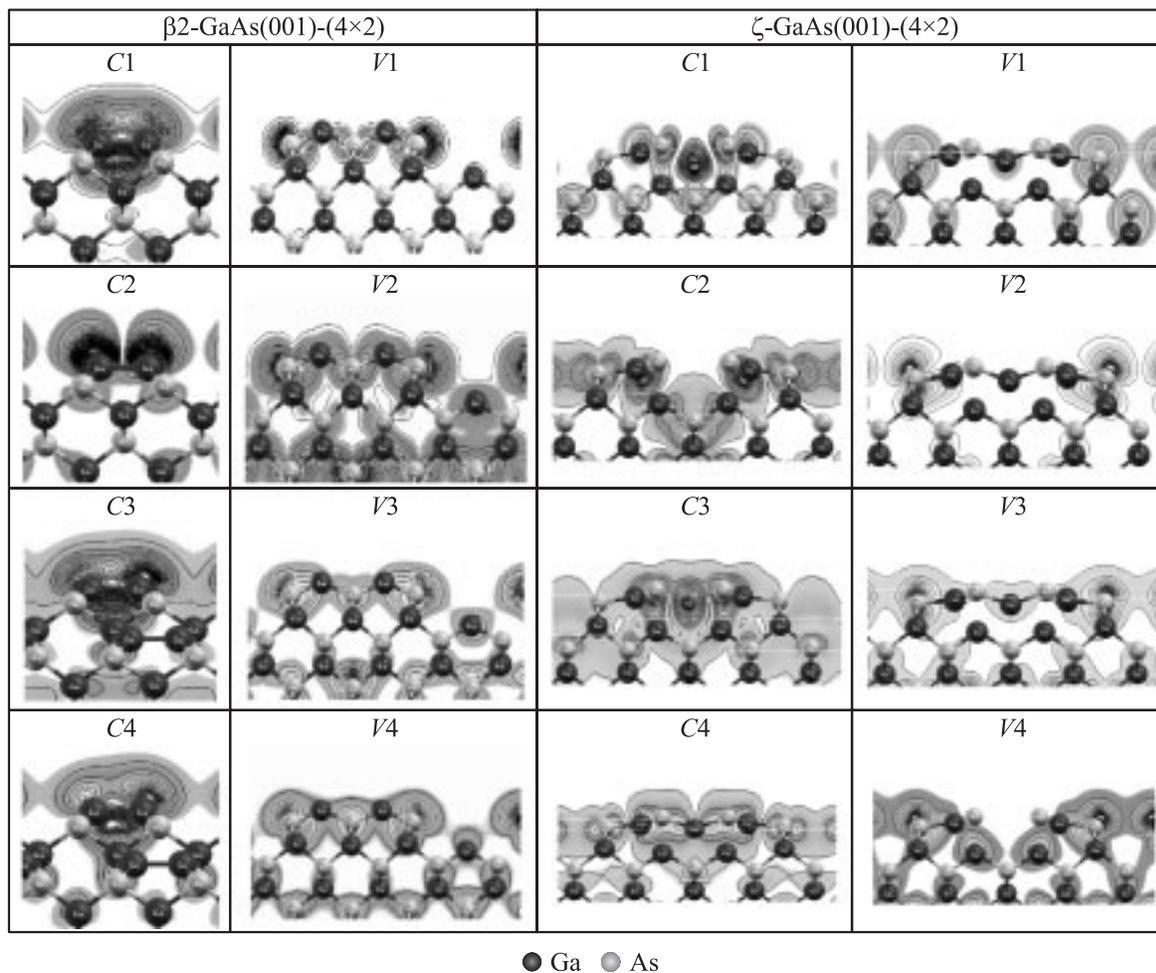


Рис. 4. Орбитальный состав поверхностных состояний в зоне проводимости (C_1 – C_4) и в валентной зоне (V_1 – V_4) для $\beta 2$ - и ζ -GaAs(001)-(4×2).

Локальные ПЭС $N(E)$ для атомов поверхностных слоев всех исследованных структур представлены на рис. 3. Поверхностные локальные ПЭС изменяются сильно по сравнению с ПЭС объемных слоев. В α -структуре щель практически исчезает при размытии плотности состояний. Кривые ПЭС для ζ -структуры находятся в хорошем согласии с результатом, представленным в работе [19]. Приведенные локальные ПЭС для разных атомов галлия и мышьяка в поверхностных слоях иллюстрируют зависимость локальных электронных характеристик от положения атома в двумерной ячейке. Видно, что дно зоны проводимости в основном формируется состояниями димерных Ga-атомов, тогда как вершина валентной зоны — преимущественно состояниями мышьяка, локализованными на атомах, которые находятся на крае канавки, образованной пропущенным рядом атомов галлия, в случае ζ -структуры. Нами был проведен анализ распределений зарядовой плотности в точке K двумерной зоны Бриллюэна для локализованных поверхностных состояний в зоне проводимости (незанятые состояния) и в валентной зоне (занятые состояния) для $\beta 2$ - и ζ -реконструкций (рис. 4). Анализ орбитального

состава поверхностных состояний $\beta 2$ -структуры показал, что незанятые состояния в основном обусловлены орбиталями, локализованными на димерных атомах галлия; состояния C_1 и C_2 — на димерах третьего от поверхности слоя, а в C_3 и C_4 больший вклад вносят атомы двух поверхностных димеров. Занятые состояния (V_1 – V_4) в основном локализованы на атомах мышьяка подповерхностного слоя. Для ζ -структуры наблюдается удовлетворительное согласие с результатами работы [1]. C_1 и C_3 представляют состояния, локализованные преимущественно на поверхностном димере галлия, тогда как C_2 , в отличие от данных [1], локализовано на недимеризованных атомах галлия. Состояние C_4 получается практически из всех анионных и катионных оборванных связей в поверхностном слое. Наивысшее занятое состояние V_1 локализовано преимущественно на атомах мышьяка вблизи вакансионного ряда, в отличие от [1], где наблюдается локализация на атомах третьего от поверхности слоя. Аналогичную локализацию имеют и состояния V_2 – V_4 , в два последних дают вклад атомы поверхностного галлиевого димера, а также атомы галлия третьего слоя (V_4).

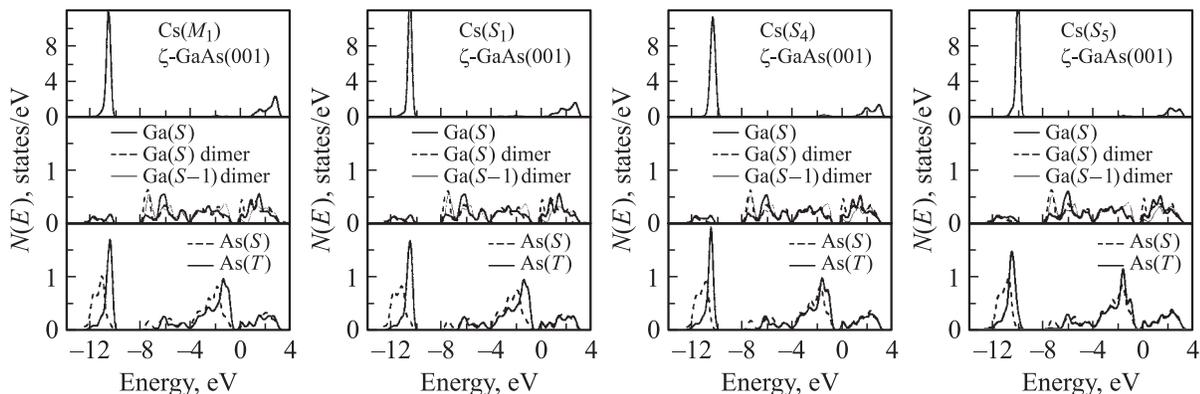


Рис. 5. Локальные ПЭС $N(E)$ в системе с адсорбированным цезием для нескольких высокосимметричных позиций адсорбата (рис. 1) на поверхности ξ -GaAs(001)-(4 × 2). Обозначения поверхностных и подповерхностных атомов галлия и мышьяка такие же, как на рис. 3.

4. Адсорбция цезия на ξ -GaAs(001)-(4 × 2)

Изученные атомные структуры позволили рассмотреть адсорбцию цезия на Ga-стабилизированной поверхности ξ -GaAs(001)-(4 × 2). Были рассмотрены десять позиций для адсорбции, показанные на рис. 1. Обозначения точек, в которых изучалась адсорбция цезия, такие же, как и в [19], где исследовались адсорбция и диффузия хлора. Отметим, что проведенный тест для хлора, адсорбируемого в галлиевых вершинных позициях (M_1 – M_3), показал хорошее согласие с результатами работы [19]. В частности, энергия адсорбции хлора в позиции M_1 была равна -2.86 эВ (-2.87 эВ [19]). В случае цезия, кроме позиций, изученных в [19] для хлора, представлялось интересным исследовать дополнительно позиции над атомом мышьяка четвертого слоя (S_5), а также над поверхностным и краевым атомами мышьяка (S_6 и S_7 соответственно). Максимальная энергия адсорбции цезия на поверхности ξ -GaAs(001)-(4 × 2) была получена для позиции S_5 (табл. 2). Отметим, что адсорбция цезия на данной поверхности изучалась нами также другим расчетным методом (SIESTA [32,33]). Несмотря на количественное различие в энергиях, что обусловлено использованием другого типа обменно-корреляционного функционала (LDA), тенденции в изменениях энергии адсорбции от положения адсорбата согласуются хорошо. Так, наиболее предпочтительной позицией для адсорбции с использованием данного расчетного метода также оказалась позиция S_5 , где энергия адсорбции равна -2.10 эВ. В отличие от хлора, который значительно

смещает димерные атомы галлия в сторону поверхности [19], цезий смещает атомы галлия в позициях M_1 – M_3 в сторону объема. Данные смещения составляют 0.11 Å для димерной позиции M_1 и 0.39 и 0.28 Å для позиций M_2 и M_3 соответственно. Причем в последних двух случаях получены также небольшие разнонаправленные смещения по x для атомов цезия и лежащих под ними атомов галлия из исходных положений. Последнее обусловлено образованием связи между атомами цезия и поверхностными атомами мышьяка. В позиции M_1 такого смещения не обнаруживается, так как в этом случае атомы мышьяка являются ближайшими соседями к адсорбированному цезию (табл. 1).

Зонные спектры цезия, адсорбированного в позициях M_1 и S_5 , представлены на рис. 5. Если при адсорбции хлора наблюдается опустошение состояний вблизи вершины валентной зоны, то в случае адсорбции цезия имеется заполнение оборванных связей галлия. Как видно из рис. 5, на котором представлены локальные поверхностные ПЭС, лишь незначительные изменения $5p$ -зоны Cs можно обнаружить в зависимости от его положения на поверхности. Из рис. 6 видно, что для всех исследованных позиций не наблюдается выраженного зарядового переноса, обнаруженного в работе [31] для T'_2 -позиции на поверхности $\beta 2$ -GaAs(001)-(2 × 4) с мышьяковым окончанием. Механизм связи цезия на поверхности ξ -GaAs(001)-(4 × 2) с галлиевым окончанием остается практически таким же, как и на $\beta 2$ -реконструкции с мышьяковым окончанием. Наиболее предпочтительными позициями являются те, в которых цезий имеет повышенную координацию атомами мышьяка. По-

Таблица 2. Энергии адсорбции цезия E_{ads} на поверхности ξ -GaAs(001)-(4 × 2), оканчивающейся галлием

Положение Cs	M_1	M_2	M_3	S_1	S_2	S_3	S_4	S_5	S_6	S_7
E_{ads} , эВ	-1.91	-1.77	-1.81	-1.91	-2.13	-1.64	-2.33	-2.57	-1.52	-1.95

Примечание. Обозначения позиций приведены на рис. 1.

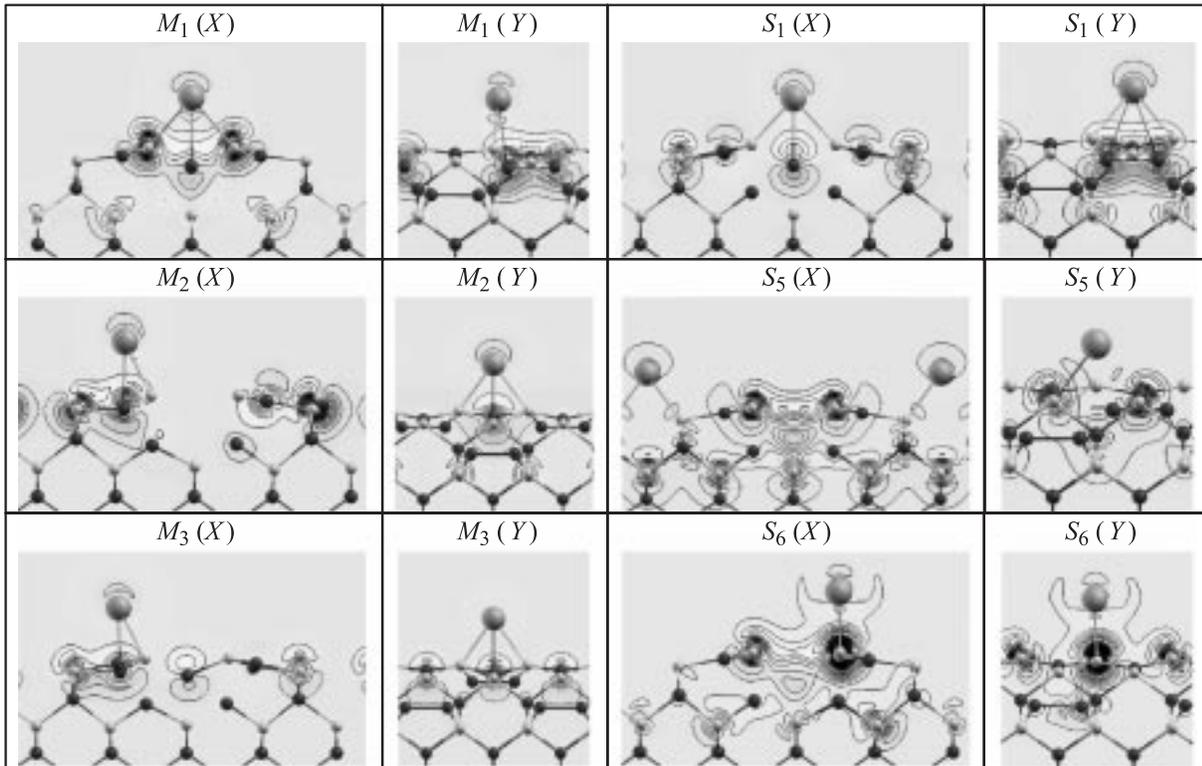


Рис. 6. Разность зарядовых плотностей $\Delta\rho(r) = \rho(r)|_{\text{GaAs}} + \rho(r)|_{\text{Cs}} - \rho|_{\text{Cs/GaAs}}$ для цезия в позициях M_1 , M_2 , M_3 , S_1 , S_5 , S_6 на поверхности ξ -GaAs(001)-(4×2). X соответствует сечению в плоскости (110), Y — в плоскости (1 $\bar{1}$ 0). Светлые области обозначают положительный заряд, темные — отрицательный.

следний факт может быть использован в современных нанотехнологиях для удаления атомов поверхностных слоев определенного типа, как в случае с галогенами, которые селективно взаимодействуют с атомами галлия.

5. Заключение

Таким образом, в рамках единого подхода рассмотрены четыре реконструкции поверхности GaAs(001)-(4×2): α , β , β_2 и ξ . Определены равновесные положения атомов поверхностных слоев, релаксация межслоевых расстояний, планарные смещения атомов, длины связей в димерах и между атомами поверхностных слоев. Проведенные расчеты подтвердили, что структура ξ -(4×2) является наиболее стабильной среди рассмотренных структур. Показано, что структура ξ -(4×2) ниже по энергии на величину 2.56 мэВ/Å² по сравнению со структурой β_2 . Рассчитаны электронные спектры, плотности электронных состояний, распределения зарядовых плотностей для поверхностных состояний вблизи фундаментальной щели. Изучена адсорбция цезия для ряда позиций на Ga-стабилизированной поверхности ξ -GaAs(001)-(4×2). Максимальная энергия адсорбции (2.57 эВ) получена для позиции S_5 , которая отличается повышенной координацией атомов мышьяка. Механизм связи с образованием гибридных состояний адсорбата и мышьяка с заполнением оборванных

связей галлия является определяющим для большинства рассмотренных позиций при адсорбции цезия на поверхности ξ -GaAs(001)-(4×2). Адсорбция цезия на поверхности GaAs(001) на начальной стадии осаждения металла будет определяться как количеством наиболее предпочтительных позиций для адсорбции в элементарной ячейке, так и последующим диполь-дипольным взаимодействием между атомами цезия на поверхности.

Работа выполнена при финансовой поддержке Федерального агентства по науке и инновациям (госконтракт № 02.434.11.2016) в рамках комплексного проекта ИФПМ СО РАН.

Список литературы

- [1] W.C. Schmidt. Appl. Phys. A, **75**, 89 (2002).
- [2] M.D. Pashley. Phys. Rev. B, **40**, 10 481 (1989).
- [3] J.E. Northrup, S. Froyen. Phys. Rev. B, **50**, 2015 (1994).
- [4] W.G. Schmidt, S. Mirbt, F. Bechstedt. Phys. Rev. B, **62**, 8087 (2000).
- [5] S.B. Zhang, A. Zunger. Phys. Rev. B, **53**, 1343 (1996).
- [6] S. Mirbt, N. Moll, A. Kley, J.D. Joannopoulos. Surf. Sci., **422**, L177 (1999).
- [7] C.D. MacPherson, R.A. Wolkow, C.E.J. Mitchell, A.B. McLean. Phys. Rev. Lett., **77**, 691 (1996).
- [8] L.J. Whitman, P.M. Thibado, S.C. Erwin, B.R. Bennett, B.V. Shanabrook. Phys. Rev. Lett., **79**, 693 (1997).

- [9] D.K. Biegelsen, R.D. Bringans, J.E. Northrup, L.E. Swartz. *Phys. Rev. B*, **41**, 5701 (1990).
- [10] Q.-K. Xue, T. Hashizume, J.M. Zhou, T. Sakata, T. Ohno, T. Sakurai. *Phys. Rev. Lett.*, **74**, 3177 (1995).
- [11] S.L. Skala, J.S. Hubacek, J.R. Tucker, J.W. Lyding, S.T. Chou, K.-Y. Cheng. *Phys. Rev. B*, **48**, 9138 (1993).
- [12] P. Moriarty, P.H. Beton, Y.-R. Ma, A.W. Dunn, M. Henini, D.A. Woolf. *J. Vac. Sci. Technol. B*, **14**, 943 (1996).
- [13] J. Cerda, F.J. Palomares, F. Soria. *Phys. Rev. Lett.*, **75**, 665 (1995).
- [14] S.-H. Lee, W. Moritz, M. Scheffler. *Phys. Rev. Lett.*, **85**, 3890 (2000).
- [15] W.G. Schmidt, S. Mirbt, F. Bechstedt. *Proc. 25th Int. Conf. on the Physics of Semiconductors* (Berlin, Springer, 2001) p. 279.
- [16] D. Paget, Y. Garreau, M. Sauvage, P. Chiaradia, R. Pinchaux, W.G. Schmidt. *Phys. Rev. B*, **64**, R161 305 (2001).
- [17] C. Kumpf, L.D. Marks, D. Ellis, D. Smilgies, E. Landemark, M. Nielsen, R. Feidenhans'l, J. Zegenhagen, O. Bunk. *Phys. Rev. Lett.*, **86**, 3586 (2001).
- [18] K. Seino, W.G. Schmidt, F. Bechstedt, J. Bernholc. *Surf. Sci.*, **507–510**, 406 (2002).
- [19] S.M. Lee, S.H. Lee, M. Scheffler. *Phys. Rev. B*, **69**, 125 317 (2004).
- [20] K. Shiraiishi. *J. Phys. Soc. Japan*, **59**, 3455 (1990).
- [21] G. Kresse, J. Joubert. *Phys. Rev. B*, **59**, 1758 (1999).
- [22] P.E. Blöchl. *Phys. Rev. B*, **50**, 17953 (1994).
- [23] G. Kresse, J. Hafner. *Phys. Rev. B*, **47**, 558 (1993).
- [24] G. Kresse, J. Furthmuller. *Comput. Mater. Sci.*, **6**, 15 (1996).
- [25] D.K. Bowen, B.K. Tanner. *J. Appl. Cryst.*, **28**, 753 (1995).
- [26] J.E. Northrup, S. Froyen. *Phys. Rev. Lett.*, **71**, 2276 (1993).
- [27] M. Murayama, K. Shiraiishi, T. Nakayama. *Jap. J. Appl. Phys.*, **37**, 4109 (1998).
- [28] D. Paget, O. Pulci, M. Sauvage, Y. Garreau, L. Reining, P. Chiaradia, F. Bechstedt, R. Pinchaux. *Surf. Rev. Lett.*, **9**, 1497 (2002).
- [29] N. Möll, A. Kley, E. Pehlke, M. Scheffler. *Phys. Rev. B*, **54**, 8844 (1996).
- [30] W.G. Schmidt, F. Bechstedt. *Surf. Sci.*, **360**, L473 (1996).
- [31] C. Hogan, D. Paget, Y. Garreau, M. Sauvage, G. Onida, L. Reining, P. Chiaradia, V. Corradini. *Phys. Rev. B*, **68**, 205 313 (2003).
- [32] J.M. Soler, E. Artacho, J.D. Gale, A. García, J. Junquera, P. Ordejón, D. Sánchez-Portal. *J. Phys.: Condens. Matter*, **14**, 2745 (2002).
- [33] P. Ordejón, E. Artacho, J.M. Soler. *Phys. Rev. B*, **53**, R10 441 (1996).

Редактор Л.В. Шаронова

Atomic and electronic structure of the GaAs(001) surface

S.E. Kulkova^{+*}, S.V. Eremeev^{+*}, A.V. Postnikov^{‡*},
D.I. Bazhanov^{^#}, B.V. Potapkin[#]

⁺ Institute of Strength Physics and Materials Science,
Russian Academy of Sciences, Siberian Branch,
636021 Tomsk, Russia

* Tomsk State University,
634050 Tomsk, Russia

‡ Institute of Metal Physics,
Russian Academy of Sciences, Ural Branch,
620219 Ekaterinburg, Russia

• Paul Verlaine University — LPMD/IPC,
F-57078 Metz, France

^ Moscow State University,
119992 Moscow, Russia

Kinetic Technologies Ltd.,
123182 Moscow, Russia

Abstract Atomic structure of four structural reconstructions for the GaAs(001) polar surface was studied using pseudopotential approach. Geometrical parameters of α -, β -, $\beta 2$ - and ξ -structures of GaAs(001)-(4 × 2) surface were determined. Electronic structure and comparative surface energies were calculated. The adsorption of cesium of the Ga-stabilized ξ -GaAs(001)-(4 × 2) structure was considered. The largest adsorption energy (2.57 eV) was found for the site which is highly coordinated by As atoms. The analysis of the electronic structure allows us to clarify the bonding mechanism of Cs with GaAs(001) substrate and cesium induced changes of its surface electronic structure.