

## Соразмерные и несоизмерные фазы In на поверхности (111)A InAs

© Ю.Г. Галицын, В.Г. Мансуров, И.И. Мараховка, И.П. Петренко

Институт физики полупроводников Сибирского отделения Российской академии наук,  
630090 Новосибирск, Россия

(Получена 17 марта 1997 г. Принята к печати 29 апреля 1997 г.)

В данной работе исследованы адсорбционные фазы In на поверхности (111)A InAs. Обнаружены три фазы: соразмерные  $(2 \times 2)_a$ ,  $(1 \times 1)$  и несоизмерная  $(0.77 \times 0.77)$ . Предложена структурная модель несоизмерной фазы  $(0.77 \times 0.77)$  как плотноупакованный слой (111) кристалла In (*fcc*), находящийся в эпитаксиальном соотношении с подложкой InAs  $\langle 110 \rangle_{\text{In}} \parallel \langle 110 \rangle_{\text{InAs}}$ . Проанализированы причины реализации структуры *fcc*. Показано, что несоизмерная фаза пространственно модулирована периодическим потенциалом подложки. Сравнительный анализ наших данных по адсорбции In на (111) InAs и литературных данных по адсорбции In на (111) Si, Ge выявил важную роль релаксации упругих напряжений в образовании двумерных, индуцированных адсорбцией сверхструктур.

Изучение взаимодействия атомов металла с поверхностью полупроводников представляет большой научный интерес; кроме того, такие исследования стимулируются технологическими потребностями.

Адсорбция атомов металла индуцирует на поверхности полупроводника упорядоченные двумерные структуры. Эти структуры могут быть соразмерными, несоизмерными и находиться в различном эпитаксиальном соотношении с решеткой подложки. Широкий спектр возникающих реконструкций поверхности не только делает адсорбционные системы весьма привлекательными в исследованиях физики и химии фазовых переходов на поверхности, но также указывает на исключительную сложность взаимодействия в системе адсорбат–подложка.

К настоящему времени наиболее широко исследуемой фазой является  $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})R30^\circ$ , возникающая при адсорбции как трехвалентных атомов металлов (Al, Ga, In), так и ряда других металлов (Pb, Ag, Au, Bi и др.) на поверхностях (111) кристаллов Si и Ge [1–9].

Известно, что причиной реконструкции идеальных граней (111) Si и Ge является процесс насыщения оборванных связей (*dangling bonds*) собственными адатомами и димерами в Si, и адатомами в Ge. Например, в сверхрешетке  $(7 \times 7)$  в Si плотность оборванных связей уменьшена в 2.58 раза по сравнению с идеальной нереконструированной  $(1 \times 1)$  поверхностью. Адатомы в Si и Ge расположены в местах  $T_4$  и образуют субъчейки  $(2 \times 2)$  в реконструкциях  $(7 \times 7)$  и  $(2 \times 8)$  соответственно [10]. В процессе адсорбции происходит замена адатомов на атомы металла. Однако реализуется реконструкция не  $(2 \times 2)$ , а  $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})R30^\circ(\alpha)$ , которая приводит к полному насыщению оборванных связей атомами металла при минимальной плотности заполнения  $\theta = 1/3$ .

При повышении плотности адатомов образуются плотноупакованные фазы  $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})R30^\circ(\beta)$  [1,3–5,7]. Взаимодействие адатомов в адсорбированном слое становится существенным, и возникают условия для реализации несоизмерных фаз. Для Pb на (111) Si по мере повышения степени заполнения в 1, 1.5, 2 монослоя возникают несоизмерные фазы с расстояниями между

адатомами 3.46, 3.43, 3.41 Å соответственно [1]. Еще более "сжатую" несоизмерную фазу Pb на (111) Si наблюдали в работе [3], где ближайшее расстояние между адатомами Pb составляло 3.35 Å. Удивительным фактом является то обстоятельство, что ближайшее расстояние между атомами Si в плоскости (111) составляет 3.84 Å, для кристалла Pb оно есть 3.50 Å, а реализуется плотноупакованная фаза Pb  $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})R30^\circ(\beta)$ , в которой расстояние между атомами Pb 3.35 Å.

Адсорбции атомов металлов на поверхностях (111) кристаллов  $A^{III}B^V$  уделено значительно меньшее внимание. Основной реконструкцией атомарно чистой грани (111)A этих кристаллов является вакансионная структура  $(2 \times 2)_v$  [11]. Здесь так же движущей силой реконструкции является процесс насыщения оборванных связей (т.е. выталкивание электронных состояний оборванных связей из запрещенной зоны: пустых орбиталей в зону проводимости, а занятых — в валентную зону). В InAs из четырех атомов In в элементарной ячейке  $(2 \times 2)$  один атом удаляется, оставляя вакансию и три оборванных связи As во втором слое. Перенос трех электронов с трех оборванных связей катионов на три оборванные связи анионов с последующей релаксацией атома до  $sp^2$ -гибридизации катиона и  $s^2p^3$ -гибридизации аниона приводит к стабильной реконструкции  $(2 \times 2)_v$ , в результате грань (111)A становится подобной релаксированной грани (110) [10]. Теоретические оценки показывают, что на (111)A GaAs процесс образования катионной вакансии — экзотермический [12] (можно предположить, что это верно и для InAs), т.е. подтверждают высокую стабильность этой реконструкции. Статическая фазовая диаграмма (диаграмма в отсутствие эпитаксиального роста), определенная нами из данных по дифракции быстрых электронов (ДБЭ) для (111)A InAs, аналогична фазовой диаграмме (111)A GaAs [13]. В области температур  $200 \div 550^\circ\text{C}$  и давлений As<sub>4</sub> от  $10^{-9}$  до  $5 \cdot 10^{-6}$  Тор существует единственная реконструкция  $(2 \times 2)_v$  — вакансионная. Грань (111)A невосприимчива к молекулам мышьяка (As<sub>4</sub>, As<sub>2</sub>). Мы не наблюдали какие-либо адсорбционные фазы мышьяка. С другой стороны, для грани (111)B разнообразные фазы мышьяка существуют [13].

На реконструированной поверхности  $(2 \times 2)_v$  нет собственных адатомов, поэтому адсорбция атомов металла на эту грань в отличие от адсорбции на Si и Ge будет носить другой характер. Здесь отсутствуют причины образования  $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})R30^\circ$ . Учитывая химическую инертность поверхности (111)A с реконструкцией  $(2 \times 2)_v$ , при низких температурах нанесения атомов металла на поверхность можно ожидать беспорядочную адсорбцию, а при относительно высокой будут образовываться трехмерные кластеры или капли. Например, In конденсируется в трехмерные островки на (110) GaAs уже при комнатной температуре, начиная с  $\theta = 0.2$  монослоя [14]. Наши данные, однако, по адсорбции In на InAs (111)A показывают более сложную картину: наряду с образованием трехмерных островков In образуются и двумерные упорядоченные фазы (соразмерная адсорбционная фаза  $(2 \times 2)_a$  и несоразмерная плотноупакованная фаза  $(0.77 \times 0.77)$ ).

## Эксперимент

Исследования поверхностных фаз выполнялись в системе молекулярно-лучевой эпитаксии (фирмы Riber) с фоновым давлением  $10^{-10}$  Тор, оборудованной дифракцией быстрых электронов на отражение (энергия электронов  $E_p = 7 \div 15$  кэВ). Картины ДБЭ анализировались с использованием видеосистемы "Фотон-микро". Процедура химической подготовки образцов перед загрузкой в камеру была ранее описана нами в работах [15,16]. Калибровка потока In проводилась стандартной осцилляционной методикой при гомоэпитаксиальном росте InAs (001). Степени заполнения  $\theta = 1$  соответствовала величина  $6.3 \cdot 10^{14}$  атомов/см<sup>2</sup>, равная числу поверхностных атомов In в InAs для идеальной нереконструированной грани (111)A. Температура поверхности определялась с помощью калиброванной термопары W-W/Re.

## Результаты

Чтобы получить ту или иную адсорбционную фазу, обычно применяют следующий цикл: нанесение определенного количества атомов на поверхность, отжиг образца при повышенных температурах, охлаждение до комнатной температуры. Фазовые диаграммы для адсорбционных систем, как правило, только качественно передают характер фазовых превращений. Многие поверхностные фазы фактически являются метастабильными. Чтобы установилось истинное термодинамическое равновесие, обычно требуется длительный отжиг образца при той или иной температуре.

В получении адсорбционных фаз In мы стартовали с реконструкции  $(2 \times 2)_v$  и сосуществующими с ней на поверхности трехмерными In-кластерами. Необходимо отметить, что при термической очистке поверхности в вакууме и получении реконструкции  $(2 \times 2)_v$  образование In-кластеров неизбежно из-за разложения двух-трех

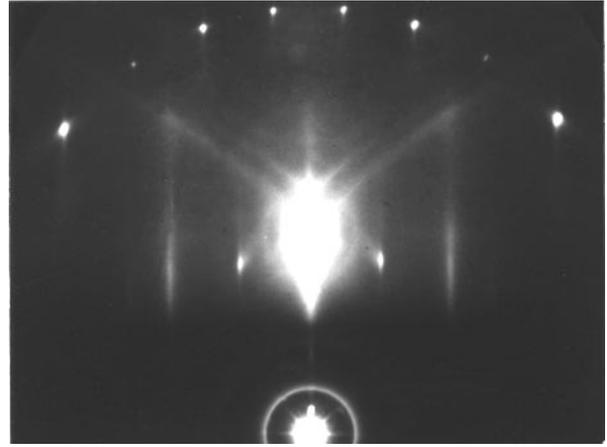


Рис. 1. Картина ДБЭ исходной поверхности (111)A InAs с реконструкцией  $(2 \times 2)_v$  азимут [112].  $E_p = 11$  кэВ.

поверхностных слоев, нарушенных химической обработкой.

Кратко охарактеризуем дифракцию от такой поверхности. На атомарно-гладкой поверхности (111)A InAs с реконструкцией  $(2 \times 2)_v$  в дифракционных картинах ярко проявляется резонансное рассеяние [15,16]. Индикаторами такого рассеяния служат резонансные параболы, появляющиеся в фоновой интенсивности, высокий контраст картины и резкое увеличение интенсивности зеркального рефлекса в резонансных условиях возбуждения. На рис. 1 резонансные параболы хорошо видны. При резонансном рассеянии электрон движется вдоль поверхности, а по нормали к поверхности (поперечное движение) находится в одном из стационарных состояний (поверхностное или объемное блоховское) одномерного латерально усредненного потенциала рассеяния [17].

Рассмотрим адсорбцию In на эту поверхность. Чтобы получить адсорбционную фазу  $(2 \times 2)_a$ , мы дополнительно наносили на поверхность  $(2 \times 2)_v$  приблизительно 10 монослоев In при температуре  $T = 300 \div 350^\circ\text{C}$ . При этой температуре In образует жидкие трехмерные кластеры на поверхности, картина ДБЭ при таком процессе не изменяется. Затем образец необходимо охладить до комнатной температуры и выдержать не менее 3 ч. В процессе выдержки постепенно исчезают фоновые резонансные параболы, как следствие увеличивается диффузное фоновое рассеяние и уменьшается контраст картины. Возникает обычная (нерезонансная) картина с точечными дробными рефлексами, расположенными по Лауэ-кругу. При этом характерные размеры доменов фазы и ширины террас не изменяются. Дифракционная картина полученной фазы показана на рис. 2. Кинетику образования фазы  $(2 \times 2)_a$  хорошо наблюдать по "гашению" резонансной параболы (рис. 3). Это "гашение" демонстрирует изменение спектра состояний поперечного движения электрона, вызванного изменением поверхностного состава при фазовом переходе из  $(2 \times 2)_v$  в  $(2 \times 2)_a$ . Аналогичное гашение резонансов

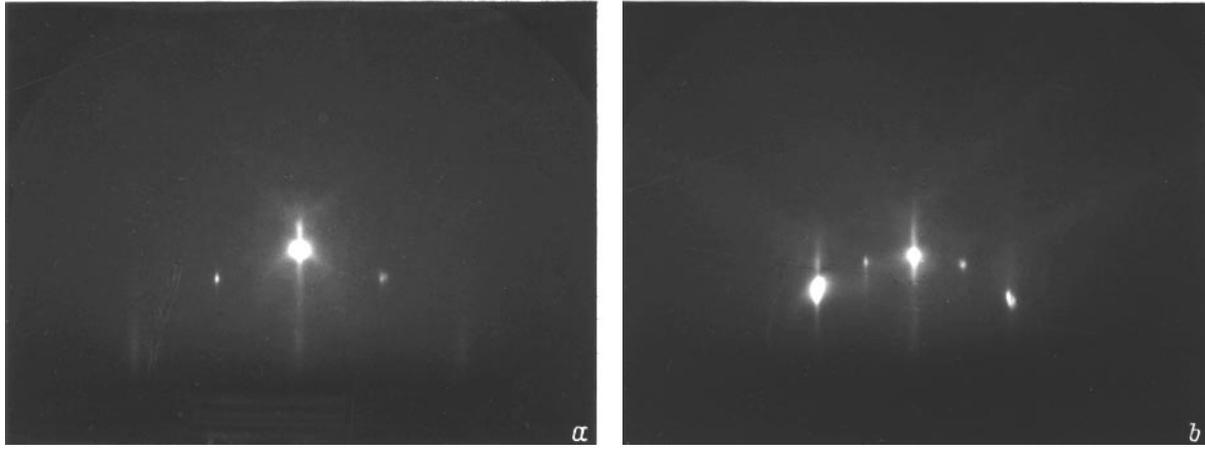


Рис. 2. Картина ДБЭ адсорбционной фазы  $(2 \times 2)_a$ .  $E_p = 10$  кэВ.  $a$  — азимут  $[\bar{1}12]$ ,  $b$  — азимут  $[110]$ .

мы наблюдали при адсорбции Cs на поверхность (111)A InAs с реконструкцией  $(2 \times 2)_v$  [16]. Непосредственным нанесением In на поверхность при комнатной температуре нельзя получить фазу  $(2 \times 2)_a$ . В наших экспериментах хорошо контролируемый поток In составлял не менее 0.1 монослоя в секунду, в то же время образование фазы  $(2 \times 2)_a$  происходит за  $3 \div 3.5$  ч. т. е. процесс образования фазы лимитируется кинетическими факторами.

Плотноупакованная несообразная фаза  $(0.77 \times 0.77)$  получается при отжиге образца с адсорбционной фазой  $(2 \times 2)_a$  при температуре  $250 \div 300^\circ\text{C}$  (рис. 4). Переход из  $(2 \times 2)_a$  в несообразную фазу  $(0.77 \times 0.77)$  происходит через промежуточную соразмерную фазу  $(1 \times 1)$ . Промежуточную фазу можно получить и при нанесении In на вакансионную фазу из внешнего источника в количестве  $\theta = 1$  в температурной области от комнатной до  $200^\circ\text{C}$ .

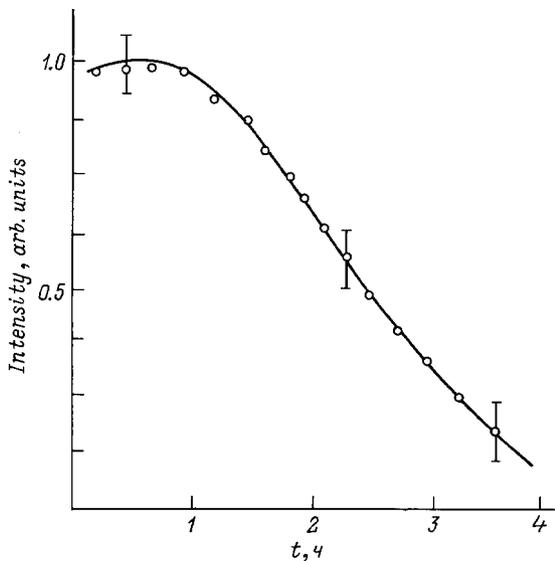


Рис. 3. "Гашение" фоновой резонансной параболы в процессе перехода  $(2 \times 2)_v \rightarrow (2 \times 2)_a$ . Интенсивность параболы измерялась на ее пересечении со стержнем  $(11)_{\text{InAs}}$  в азимуте  $[\bar{1}12]$ .  $T = 25^\circ\text{C}$ .

При таком нанесении происходит исчезновение рефлекса  $(1/2\ 0)$ . По нашему мнению, образование адсорбционной фазы  $(1 \times 1)$  связано с реакцией аннигиляции катионной вакансии In с адатомом In. Эта реакция ведет к обратной регидризации связей атомов на поверхности до  $sp^3$ -гибридизации. На каждом поверхностном атоме In снова возникает наполовину заполненная оборванная связь. Разумеется, такая поверхность будет неустойчива к процессу насыщения оборванных связей адатомами In, поставляемыми либо из кластеров на поверхности, либо внешним источником. При данной температуре плотность решеточного газа (подвижные адатомы In) определяется равновесием с конденсированной фазой (In-кластерами).

Отметим также, что промежуточная фаза  $(1 \times 1)$ , как правило, возникает при получении плотноупакованных фаз из менее плотных фаз. К примеру, она наблюдается при переходе  $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})R30^\circ(\alpha) \rightarrow (1 \times 1) \rightarrow (\sqrt{3} \times \sqrt{3})R30^\circ(\beta)$  фаз Pb на поверхности (111) Si и Ge [1,3,8].

Фундаментальные рефлексы двумерной фазы  $(0.77 \times 0.77)$ , т. е.  $(1\ 0)$  и  $(\bar{1}\ 0)$ , появляются вблизи возможного расположения стержней  $(4/3\ 0)$  и  $(\bar{4}/3\ 0)$  при дифракции от (111)A InAs, однако точные измерения дают

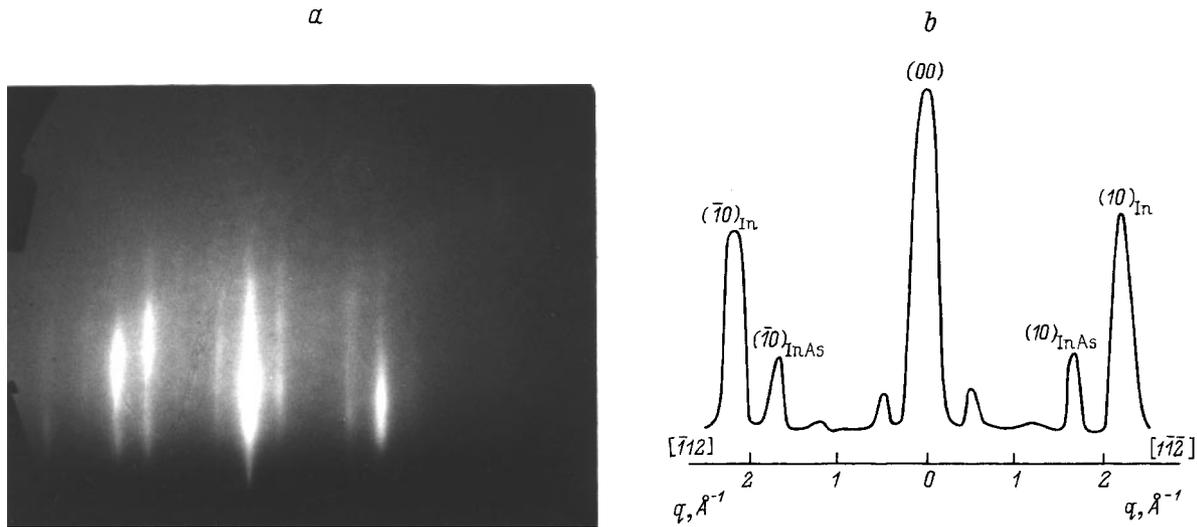
$$P = (1\ 0)_{\text{InAs}} / (1\ 0)_{\text{In}} = 0.77 \pm 0.01,$$

что позволяет идентифицировать их как рефлексы новой несообразной фазы. Кроме фундаментальных рефлексов в этой фазе отчетливо наблюдаются и сателлитные рефлексы с векторами рассеяния

$$\mathbf{q}_t = \mathbf{g}_s - \mathbf{g}_a,$$

где  $\mathbf{g}_a$  — вектор двумерной обратной решетки адсорбированного слоя In,  $\mathbf{g}_s$  — вектор двумерной обратной решетки подложки InAs.

В области температур  $350^\circ\text{C}$  происходит плавление плотноупакованного слоя атомов In, образуются капли



**Рис. 4.** *a* — картина ДБЭ фазы  $(0.77 \times 0.77)$ , азимут  $[110]$ . *b* — профили интенсивности рефлексов в азимуте  $[110]$ , измерения осуществлялись параллельно проекции края образца на экране дифрактометра; рефлексы фазы  $(0.77 \times 0.77)$  и фундаментальные рефлексы InAs обозначены  $(10)_{\text{In}}$  и  $(10)_{\text{InAs}}$  соответственно.

жидкого In и возникает стабильная вакансионная фаза  $(2 \times 2)_v$  с ярким проявлением резонанса. Обратим внимание, что температура плавления этой фазы значительно выше температуры плавления кристаллического In ( $T_m = 157^\circ\text{C}$ ). С другой стороны, температура неконгруэнтного разложения поверхности  $(111)\text{A}$  InAs составляет около  $520^\circ\text{C}$ . Это подразумевает достаточно сильное взаимодействие адсорбата с подложкой.

Снова охлаждая образец до комнатной температуры и выдерживая в течение 3 ч можно получить фазу  $(2 \times 2)_a$  и далее воспроизвести все фазовые переходы.

## Обсуждение результатов

**Адсорбционная фаза  $(2 \times 2)_a$ .** Фазовый переход  $(2 \times 2)_v \rightarrow (2 \times 2)_a$  происходит при низких температурах и, следовательно, плотность решеточного газа, т.е. подвижных адатомов In, на поверхности невелика. С другой стороны, учитывая, что промежуточная фаза  $(1 \times 1)$  образуется из  $(2 \times 2)_v$  только при  $\theta = 1$ , для области существования адсорбционной фазы  $(2 \times 2)_a$  будем иметь  $\theta < 1$ , т.е. она не является плотноупакованной. Стабильность фазы  $(2 \times 2)_a$  низкая: уже при  $T = 90^\circ\text{C}$  происходит необратимый фазовый переход в  $(1 \times 1)$ . Отсюда следует, что при переходе  $(2 \times 2)_v \rightarrow (2 \times 2)_a$  адатомы In, диффундируя по поверхности, закрепляются вблизи вакансионных мест, "декорируя" вакансионную фазу, однако аннигиляции вакансии с адатомом и регбридизации связей в этом процессе не происходит.

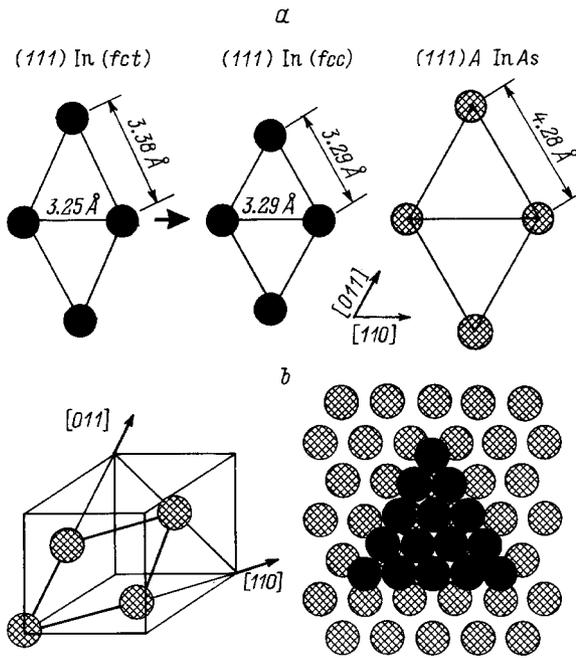
Следует отметить, что для In при степенях заполнения  $\theta < 0.5$  на поверхностях  $(111)$  более характерна сверхструктура  $(2 \times 2)$ , чем  $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})R30^\circ$ . Например, известно, что In на  $(111)$  Ge при  $\theta < 0.5$  образует структуры с большими периодами типа  $m \times 2\sqrt{3}$ , где

$m = 13, 12, 11, 10$  [8]. Эти структуры состоят из нескольких субъчеек  $(2 \times 2)$  с антифазными границами. По существу адсорбция In здесь также декорирует реконструкцию  $(2 \times 8)$  [8]. Мы полагаем, что в данной системе возникновение антифазных границ является следствием частичной релаксации упругих напряжений в Ge, возникших при адсорбции In. В InAs упругие константы значительно меньше, чем в Ge [10]. Нет причин для образования антифазных границ, так как выигрыша в релаксации упругой энергии не будет. Поэтому и реализуется простая адсорбционная фаза  $(2 \times 2)_a$ .

**Несоразмерная фаза  $(0.77 \times 0.77)$ .** Как мы уже отмечали, для рефлексов этой фазы имеем

$$P = (10)_{\text{InAs}} / (10)_{\text{In}} = (11)_{\text{InAs}} / (11)_{\text{In}} = 0.77 \pm 0.01,$$

это точно совпадает с отношением  $2.85 \text{ \AA} / 3.71 \text{ \AA} = 0.77$ , где  $3.71 \text{ \AA}$  есть расстояние между рядами атомов в плоскости  $(111)$  InAs, расположенных вдоль эквивалентных азимутов  $[110]$ , а  $2.85 \text{ \AA}$  есть расстояние между рядами атомов в плоскости  $(111)$  тетрагонального искажения кристалла In ( $c/a = 1.076$ ) расстояние между рядами атомов, расположенных вдоль двух других азимуты  $[110]$  и  $[\bar{1}\bar{1}0]$ , равно  $2.96 \text{ \AA}$ . Для этих азимуты должно быть  $P = 2.96 \text{ \AA} / 3.71 \text{ \AA} = 0.8$ . Экспериментально, однако, мы не обнаружили различия в  $P$  ни для каких азимуты. Для всех азимуты  $P = 0.77 \pm 0.01$ . Следовательно, несоразмерная фаза представляет плоскость  $(111)$  гранцентрированного кубического кристалла In ( $fcc$ ). Чтобы "получить переход"  $(111)\text{In}(fcc) \rightarrow (111)\text{In}(fcc)$  необходимо вдоль направления  $[110]$  растянуть связи с  $3.25$  до  $3.29 \text{ \AA}$  и сжать вдоль направления  $[\bar{1}\bar{1}2]$  (нормального к  $[110]$ ) так, чтобы связи стали короче: от  $3.38$



**Рис. 5.** *a* — схема структурного перехода  $(111) \text{In}(fcc) \rightarrow (111)\text{In}(fcc)$ . *b* — структурная модель фазы  $(0.77 \times 0.77)$  на поверхности  $(111)\text{A InAs}$ .

также до  $3.29 \text{ \AA}$  (см. рис. 5). Однако при таком процессе наименьшее расстояние между рядами атомов, равное  $2.85 \text{ \AA}$ , характерное для  $\text{In}(fcc)$ , сохраняется.

Интересно сравнить наши данные с данными по адсорбции In на  $(111) \text{Ge}$  [8]. Авторы этой работы дифракционные рефлексы, возникшие при адсорбции In при  $\theta > 1$ , обозначили как рефлексы от плоскости  $(111)$  кристалла  $\text{In}(fcc)$ . Однако они не привели доказательств тетрагонального искажения плоскости  $(111) \text{In}$ . По приведенным в работе дифракционным данным можно определить отношение  $P = (1\ 0)_{\text{Ge}} / (1\ 0)_{\text{In}} = 0.82 \pm 0.01$ . Эта величина точно соответствует отношению  $3.29 \text{ \AA} / 4.00 \text{ \AA} = 0.82$ , где  $3.29 \text{ \AA}$  — межатомное расстояние для  $(111) \text{In}(fcc)$ , определенное нами (см. рис. 5);  $4.00 \text{ \AA}$  — межатомное расстояние в плоскости  $(111) \text{Ge}$ . Наиболее вероятно, что и в этой работе авторы наблюдали плоскость  $(111) \text{In}(fcc)$ . Именно поэтому они могли заключить, что эта плоскость находится в эпитаксиальном соотношении с плоскостью  $(111) \text{Ge}$ , а азимуты в соотношении  $\langle 110 \rangle_{\text{In}} \parallel \langle 110 \rangle_{\text{Ge}}$  [8]. Если бы имело место тетрагональное искажение, то параллельность всех азимутов была бы невозможна.

Хорошо известно, что тетрагональное искажение кристалла In является следствием неустойчивости структуры  $fcc$  к процессу расщепления набора обратных векторов  $\{002\}$  [18]. В структуре  $\text{In}(fcc)$  обратные вектора  $\mathbf{g}$  из набора  $\{002\}$  близко расположены к точке  $q_0$ , где фурье-образ псевдопотенциала атома In как функция от обратного вектора  $\mathbf{q}$  проходит через 0, т.е.  $V(q_0) = 0$ . Показано [18], что возникает уменьшение зонной струк-

турной энергии кристалла In ( $fcc$ ), если часть обратных векторов  $\{002\}$  слегка уменьшится, а другая увеличится, т.е. вектора  $\mathbf{g}$  "отойдут" от точки  $q_0$ . Это и приводит к тетрагональному искажению кристаллической структуры In. Мы же имеем дело с двумерной плоскостью  $(111) \text{In}$ , набор обратных векторов  $\{002\}$  отсутствует, следовательно, отсутствуют и причины тетрагонального искажения.

Как мы отмечали, кроме основных рефлексов фазы  $(0.77 \times 0.77)$  мы наблюдаем в дифракционной картине и ряд других (сателлитные отражения). Сателлитные рефлексы естественно объяснить (как и в случае с температурой плавления фазы) в предположении существенного взаимодействия между несообразмерной фазой In и решеткой подложки. В силу этого атомные положения каждой из этих решеток будут модулированы с периодичностью другой. Так как подложка более жесткая, чем слой адсорбата, модулированы будут главным образом атомные положения адсорбата.

Если положение  $j$ -го адатома In обозначить как  $\mathbf{R}_j$  при отсутствии взаимодействия, тогда при взаимодействии положение  $j$ -го атома будет

$$\mathbf{R}_j + \mathbf{U}_j,$$

где  $\mathbf{U}_j$  — малое смещение адатома при воздействии периодического потенциала подложки. Разложение периодического потенциала по обратным векторам  $\mathbf{g}$ , подложки дает

$$V_s(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{g}_s} V_g e^{i\mathbf{g}_s \cdot \mathbf{r}}. \quad (1)$$

Тогда для сдвига  $\mathbf{U}_j$  при линейности смещения от потенциала подложки имеем

$$\mathbf{U}_j = \sum_{\mathbf{g}_s} U_g e^{i\mathbf{g}_s \cdot \mathbf{R}_j}. \quad (2)$$

Амплитуда рассеяния на вектор  $\mathbf{q}$  определяется обычным образом:

$$\begin{aligned} A(\mathbf{q}) &= \sum_j e^{-i\mathbf{q}(\mathbf{R}_j + \mathbf{U}_j)} = \sum_j F_j e^{-i\mathbf{q}\mathbf{R}_j} (1 - i\mathbf{q}\mathbf{U}_j + \dots) \\ &= NF(\mathbf{q}) \left[ \sum_{\mathbf{g}_a} \delta(\mathbf{q}_t - \mathbf{g}_a) \right. \\ &\quad \left. - i \sum_{\mathbf{g}_a} \sum_{\mathbf{g}_s} \mathbf{q} U_g \delta(\mathbf{q}_t - (\mathbf{g}_a - \mathbf{g}_s)) \right], \quad (3) \end{aligned}$$

где  $N$  — число адатомов In, участвующих в рассеянии,  $F(q)$  — амплитуда рассеяния адатома,  $\delta(x)$  — дельта-функция,  $\mathbf{q}_t$  — компонента вектора рассеяния, параллельная поверхности.

Первый член выражения (3) определяет главные дифракционные рефлексы несообразмерной фазы  $(0.77 \times 0.77)$ . Второй член представляет сателлитные рефлексы, появляющиеся при  $\mathbf{q}_t = \mathbf{g}_a - \mathbf{g}_s$ .

По дифракционным данным несоизмерная фаза ( $0.77 \times 0.77$ ) находится в следующем эпитаксиальном соотношении с поверхностью (111)A:  $\langle 110 \rangle_{\text{In}} \parallel \langle 110 \rangle_{\text{InAs}}$ . Если наименьшее расстояние между атомами In в этой фазе уменьшить на 2.4%, возникла бы соразмерная плотноупакованная фаза индия ( $3 \times 3$ ). С другой стороны, при эпитаксиальном соотношении  $\langle 110 \rangle_{\text{In}} \parallel \langle 112 \rangle_{\text{InAs}}$  для получения соразмерной фазы ( $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$ ) необходимо связи In–In в фазе ( $0.77 \times 0.77$ ) увеличить на 11.3%, поэтому несоизмерность меньше для эпитаксиального соотношения  $\langle 110 \rangle_{\text{In}} \parallel \langle 110 \rangle_{\text{InAs}}$  и возникает больший выигрыш в релаксации упругой энергии.

Некоторый выигрыш в релаксации несоизмерной упругой энергии можно было бы получить, если реализовать плотноупакованную фазу ( $0.77 \times 0.77$ ) доменами, повернутыми относительно подложки на небольшие углы  $\alpha$ , которые удовлетворяют следующим условиям:

$$m\mathbf{b}_1 = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2,$$

$$\sin \alpha = \sqrt{3}n_2/2(n_1^2 + n_2^2 + n_1n_2)^{1/2},$$

где  $\mathbf{b}_1$ ,  $\mathbf{b}_2$  — вектора элементарной ячейки адсорбата,  $\mathbf{a}_1$ ,  $\mathbf{a}_2$  — вектора элементарной ячейки подложки,  $m$ ,  $n_1$ ,  $n_2$  — целые числа. Фактически такой поворот доменов равносильно превращению несоизмерной фазы в длиннопериодную соразмерную структуру. Например, в нашем случае для набора  $m = 30$ ,  $n_1 = 23$ ,  $n_2 = 1$  имеем  $\alpha = 2.1^\circ$ , а для  $m = 17$ ,  $n_1 = 13$ ,  $n_2 = 1$  имеем  $\alpha = 4^\circ$  и т.д. Однако ориентированных на малые углы доменов мы не наблюдали в эксперименте. С другой стороны, In при адсорбции ( $\theta > 0.6$ ) на (111) Si и Ge образует ряд соразмерных фаз ( $\sqrt{3}\Gamma \times \sqrt{3}\Gamma$ ) $R(\pm 9^\circ)$  и ( $\sqrt{6}\Gamma \times \sqrt{6}\Gamma$ ) $R(30^\circ \pm 4^\circ)$  [7,8]. Здесь вновь, как мы полагаем, проявились существенные различия в упругих константах InAs и Si, Ge. В системах с жесткими связями релаксация упругих напряжений при адсорбции In приводит к созданию длиннопериодных доменных сверхструктур либо с антифазными границами, либо с поворотами доменов на малые углы.

Таким образом, мы впервые обнаружили и охарактеризовали три различных адсорбционных фазы In на поверхности (111)A InAs: соразмерные ( $2 \times 2$ ) $_a$ , ( $1 \times 1$ ) и несоизмерная ( $0.77 \times 0.77$ ). Из анализа дифракционных данных мы предложили структурную модель несоизмерной фазы ( $0.77 \times 0.77$ ) как плотноупакованный слой (111) кристалла In (*fcc*), находящийся в эпитаксиальном соотношении с подложкой  $\langle 110 \rangle_{\text{In}} \parallel \langle 110 \rangle_{\text{InAs}}$ . Проанализированы причины реализации структуры (*fcc*), а не структуры обычного кристалла In (*fcc*). Показано, что несоизмерная фаза пространственно модулирована периодическим потенциалом подложки. При высоких температурах адатомы In конденсируются в трехмерные островки. Сравнительный анализ наших данных по адсорбции In на (111) InAs и литературных данных по адсорбции In на (111) Si, Ge выявил важность релаксации упругих напряжений в образовании двумерных, индуцированных адсорбцией, сверхструктур.

Авторы благодарят Российский фонд фундаментальных исследований за поддержку данной работы (грант № 96-03-33916-а).

## Список литературы

- [1] E. Ganz, I. Hwang, F. Xiong, S. Theiss, J. Golovchenko. Surf. Sci., **257**, 259 (1991).
- [2] R. Shioda, A. Kawarn, A. Baski, C. Quate, J. Nogami. Phys. Rev. B, **48**, 4895 (1993).
- [3] H. Weitering, D. Heslinga, T. Hibma. Phys. Rev. B, **45**, 5991 (1992).
- [4] D.M. Cornelison, C.S. Chang, I.S. Tsong. J. Vac. Sci. Technol. A, **8**, 3443 (1990).
- [5] J.J. Lander, J. Morrison. Surf. Sci., **2**, 553 (1964).
- [6] H. Hirayama, T. Tatsumi, N. Aizaki. Surf. Sci., **193**, L47 (1988).
- [7] T. Aiyama, Sh. Ino. Surf. Sci., **82**, L585 (1979).
- [8] T. Ichikawa. Surf. Sci., **111**, 227 (1981).
- [9] M. Bertucci, L. Lay, M. Manneville, R. Kern. Surf. Sci., **85**, 471 (1979).
- [10] W. Monch. *Semiconductor Surfaces and Interfaces* (Springer, Berlin, 1993) p. 180.
- [11] J.M. Thornton, P. Unsworth, M.D. Jackson, P. Weightman, D.A. Woolf. Surf. Sci., **316**, 231 (1994).
- [12] D.J. Chadi. Phys. Rev. Lett., **52**, 1911 (1984).
- [13] D.A. Woolf, D.J. Westwood, R.H. Williams. Appl. Phys. Lett., **62**, 1370 (1993).
- [14] D.E. Savage, M.G. Lagally, J. Vac. Sci. Technol., **4**, 943 (1986).
- [15] Ю.Г. Галицын, В.Г. Мансуров, В.И. Пошевнев, Р.А. Соколов. Поверхность, вып. 4, 25 (1993).
- [16] Ю.Г. Галицын, В.Г. Мансуров, В.И. Пошевнев. Поверхность, вып. 8–9, 81 (1994).
- [17] S.L. Dudarev, M.J. Whelan. Int. J. Mod. Phys. B, **10**, 133 (1996).
- [18] V. Heine, D. Weaire. Phys. Rev. B, **152**, 603 (1966).

Редактор Л.В. Шаронова

## Commensurate and incommensurate In phases on a (111)A InAs surface

Yu.G. Galitsyn, V.G. Mansurov, I.I. Marahovka, I.P. Petrenko.

Institute of Semiconductor Physics,  
Siberian Branch of Russian Academy of Sciences,  
630090 Novosibirsk, Russia

**Abstract** An In/InAs (111)A system investigated by RHEED demonstrates a set of simple reconstructions: ( $2 \times 2$ ), ( $1 \times 1$ ) and incommensurate ( $0.77 \times 0.77$ ) phases. As shown, the incommensurate phase is almost In crystalline plane (111) with epitaxial relation of  $\langle 110 \rangle_{\text{In}} \parallel \langle 110 \rangle_{\text{InAs}}$ , but this plane has not tetragonal distortion (i.e. *fcc*  $\rightarrow$  *fcc*). This phase is the most dense surface structure induced by In at (111)A InAs.

E-mail: marah@isp.nsc.ru