

Р. З. Бахтизин, д-р физ.-мат. наук, проф.,
Башкирский государственный университет
(г. Уфа),
Ч.-К. Шуе, Ч.-Ж. Шуе, Ю. Хасегава,
Т. Сакурай, проф.,
Институт проблем материаловедения
Национального университета Тохоку, Сендай,
Япония,
И. С. Т. Цонг, проф.,
Аризонский государственный университет,
Темпе, США

АТОМНАЯ СТРУКТУРА ГЕТЕРОЭПИТАКСИАЛЬНЫХ ПЛЕНОК GaN¹

Методами сканирующей туннельной микроскопии (СТМ) и дифракции быстрых электронов на отражение в условиях сверхвысокого вакуума на поверхности тонких пленок GaN(0001) in situ исследованы серии упорядоченных сверхструктур, включающих реконструкции 2×2 , 4×4 , $\sqrt{7} \times \sqrt{7}$, 5×5 , $5\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$, 10×10 , а также жидкую фазу 1×1 -Ga. Пленки GaN выращивались на подложках 6H-SiC(0001) методами молекулярно-лучевой эпитаксии в сочетании с обработкой в высокочастотном разряде в азотной плазме. Из сопоставления СТМ-изображений высокого разрешения с результатами первопринципных расчетов полной энергии разработана структурная модель Ga-адатома, описывающая образование основных фаз 2×2 , 4×4 , а также фаз $\sqrt{7} \times \sqrt{7}$ и 10×10 , относящихся к семейству " $N \times N$ ". Для другой группы поверхностных реконструкций, к которым относятся фазы $5 \times 2,5$ и $5\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$, характерной оказалась квазидвимерная структура, которая может быть объяснена пайерлсовскими искажениями решетки адатомов, расположенных на участках T_d .

Введение

Нитрид галлия является одним из наиболее перспективных материалов для изготовления светодиодов и лазерных диодов сине-зеленого спектра и вызывает значительный интерес как со стороны физиков и материаловедов, так и разработчиков новых типов оптоэлектронных приборов, что связано с недавним технологическим прорывом в этой области, совершенным Накамурай [1]. Достижения последнего времени в изготовлении голубых светодиодов, лазеров, УФ детекторов и высокотемпературных транзисторов на основе GaN и других

¹Работа выполнялась при поддержке Российского Фонда Фундаментальных Исследований (Грант РФФИ № 01-02-17377) и Федеральной Программы "Поверхностные атомные структуры" Министерства промышленности, науки и технологий РФ (проект № 3.4.99).

нитридных материалов в значительной степени стимулировали исследования в области эпитаксиального роста нитридных полупроводников группы III и изучение характеристик этих материалов [2–4]. Тем не менее, в настоящее время лишь несколько компаний в мире производят GaN достаточно высокого качества, поэтому изучение особенностей роста этого материала по-прежнему является актуальной задачей и на этом пути все еще остается много нерешенных проблем [5, 6].

Вообще GaN представляет собой весьма специфический пример полупроводникового соединения $A^{III}B^V$. Он синтезирован из компонентов, обладающих большой разницей в атомных радиусах, электроотрицательности, способности к сцеплению, и характеризуется наличием обоих компонентов (ионного и ковалентного) химической связи. Кроме этого, GaN — это единственный пример соединения $A^{III}B^V$, который кристаллизуется в равновесной гексагональной структуре (решетке вюрцита) [5, 6]. Из-за трудностей в получении GaN в виде объемного материала (для системы GaN не существует даже фазовой диаграммы [7]) все нитридные материалы (Al/Ga/In-N) и их сплавы обычно получают с помощью гетероэпитаксиального роста на подложках с рассогласованием решеток [8]. Однако и в этом случае возникают серьезные проблемы, связанные с подбором подходящей подложки: из-за малости ковалентного радиуса азота (0,07 нм) параметр решетки всех кристаллов нитридов существенно меньше, чем у других полупроводниковых соединений $A^{III}B^V$. Поэтому информация о локальной атомной структуре поверхности растущей пленки является принципиально важной для понимания процесса эпитаксиального роста, особенно в случае молекулярно-лучевой эпитаксии (МЛЭ), а также для модернизации технологических процессов, используемых при изготовлении приборов, таких как создание омических контактов, поверхностных реакций и т. д. GaN может кристаллизоваться в структурах двух типов: стабильной гексагональной фазе и метастабильной кубической фазе. Поскольку в объемном кристалле GaN со структурой вюрцита отсутствует обратимая пространственная симметрия, гексагональная эпитаксиальная пленка, выращенная вдоль полярной подложки, всегда проявляет полярность, которая оказывает сильное влияние на структуру поверхности и процессы роста [9].

К настоящему времени методами дифракции быстрых электронов на отражение (ДБЭО) и сканирующей туннельной микроскопии (СТМ) уже наблюдались некоторые сверхструктуры на поверхности гексагональной пленки GaN, выращенной на 6H-SiC(0001) подложке [10, 11]. Более того, методы СТМ и теоретические исследования Смита [12, 13] позволили выявить новые аспекты в механизмах минимизации поверхностной энергии, ко-

которые оказались отличными от тех, которые наблюдались для традиционных полупроводниковых соединений $A^{III}B^V$.

В данной статье мы сообщаем о результатах наших *in situ* СТМ-исследований поверхностных реконструкций, наблюдавшихся на базовой плоскости (0001) эпитаксиальной пленки GaN в процессе ее роста.

Методика эксперимента

Все эксперименты проводили с помощью уникальной установки, состоящей из сверхвысоковакуумного ($4 \cdot 10^{-9}$ Па) сканирующего туннельного микроскопа, камеры МЛЭ в составе единой вакуумной системы, что позволило исследовать *in situ* процесс роста эпитаксиальных пленок [14]. Камера МЛЭ содержала шесть ячеек Кнудсена, заслонки которых управлялись автономно с помощью компьютера. Диагностика сканирующих зондов — W-острий — на атомном уровне осуществлялась с помощью встроенного в систему полевого ионного микроскопа [14, 15].

Для получения эпитаксиальных пленок GaN был разработан процесс, основанный на МЛЭ в присутствии высокочастотного разряда в азотной плазме. В качестве подложек использовали пластины гексагонального карбида кремния 6H-SiC — наилучшего из доступных материалов с точки зрения согласования параметров решеток и коэффициентов термического расширения, причем атомарно-чистую поверхность SiC(0001) со структурой 3×3 или $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ готовили с помощью разработанного нами двухступенчатого метода [16–18]. Сам процесс роста начинали с нитридации подложки, затем при 750°C наносили буферный слой AlN толщиной 15 нм для уменьшения рассогласования решеток; после этого температуру понижали до 650°C и эпитаксиальную пленку выращивали со скоростью ~ 100 нм/ч при парциальном давлении азота 0,010–0,013 Па и мощности ВЧ источника ~ 250 Вт в условиях обогащения Ga. В результате двухчасового роста поверхность приобретала характерную интерференционную окраску и для нее наблюдалась картина 1×1 ДБЭО. После дополнительного нанесения одного-двух монослоев Ga при нормальной температуре и последующего отжига при 350 – 400°C на Ga-полярной поверхности (0001) можно было получить серии упорядоченных сверхструктур 2×2 ; 4×4 ; $\sqrt{7} \times \sqrt{7}$; $5 \times 2,5$; $5\sqrt{3} \times 2\sqrt{13}$; 10×10 , жидкую фазу 1×1 -Ga, а на N-полярной поверхности (0001) — реконструкции 2×4 ; 2×3 ; $2\sqrt{7} \times 2\sqrt{7}$; 6×6 ; 6×8 , в зависимости от количества нанесенного Ga и температуры отжига [17, 19]. Упорядочение поверхности наблюдали сначала с помощью ДБЭО, а затем подтверждали с помощью СТМ.

Результаты и их обсуждение

Фазы 2×2 и 4×4 . Структурную фазу 2×2 можно было получить путем нанесения при нормальной температуре одного монослоя Ga на быстро охлажденную атомарно-чистую поверхность GaN(0001) и последующего отжига в течение 10 мин при 200°C . Эта фаза соответствует стабильному фронту роста, при котором получались наиболее высококачественные тонкие пленки [7, 17], и может рассматриваться как базис поверхности (0001), т. е. Ga-полярности. Атомная структура этой поверхности проанализирована теоретически в работах [20–22].

Реконструкцию 4×4 получали в результате отжига фазы 2×2 при температуре 400°C в течение 5 мин. В этом случае естественно было ожидать частичной десорбции галлия, поэтому фаза 4×4 должна быть менее обогащена Ga, чем фаза 2×2 . На рис. 1 продемонстрирован случай сосуществования этих фаз. Структура 2×2 характеризуется равномерно расположенными яркими точками, разделенными промежутками 0,64 нм вдоль направлений наиболее плотной упаковки, в то время как фаза 4×4 образуется благодаря отсутствию каждого второго ряда ярких точек в фазе 2×2 . В зависимости от выбора геометрической модели [20–22] точки на изображении фазы 2×2 могут рассматриваться как результат туннелирования из оборванных связей N, из адатомов Ga верхнего слоя

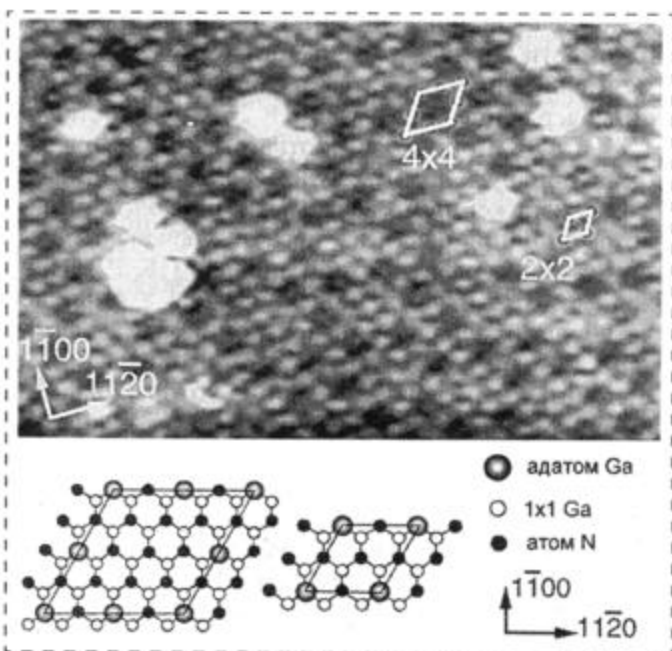


Рис. 1. СТМ-изображение высокого разрешения поверхности GaN(0001), демонстрирующее сосуществование фаз 4×4 и 2×2 ; соответствующие элементарные ячейки выделены ромбиками. Напряжение смещения между образцом и зондирующим острием $V_S = -3,0$ В, туннельный ток $I_t = 4 \times 10^{-11}$ А, площадь сканирования $12,0 \times 8,0$ нм. Ниже приведены модели Ga-адатома реконструкций 2×2 (справа) и 4×4 (слева)

или из заполненных поверхностных состояний. Модель N-адатома следует сразу же исключить из рассмотрения, поскольку маловероятно, чтобы поверхность была обогащена азотом в использованных нами условиях приготовления. Модель Ga-адатома энергетически более предпочтительна в условиях обогащения галлием, чем Ga-вакансионная модель, однако мы не можем проигнорировать и последнюю возможность из-за экспериментальной неопределенности в определении покрытия поверхности. Таким образом, яркие точки на СТМ-изображении могут быть обусловлены также туннелированием из низкоэнергетических состояний оборванных связей атомов N второго слоя. С учетом этого мы проанализировали детали обеих структур, 2×2 и 4×4 , сопоставляя наблюдавшиеся СТМ-изображения высокого разрешения с результатами первопринципных расчетов полной энергии. Как выяснилось [16, 17, 19], все они могут быть объяснены с помощью модели Ga-адатома (см. рис. 1), причем фаза 4×4 образуется просто за счет удаления одной точки в каждой элементарной ячейке поверхности 2×2 , что хорошо объясняет малую энергию активации в соответствующем фазовом переходе, а модели адатомов 2×2 и 4×4 оказываются энергетически предпочтительнее соответственно в условиях большего или меньшего обогащения поверхности галлием. В этом случае яркие точки обусловлены туннелированием из наружных адатомов Ga, расположенных на участках T_4 поверхности со структурой 1×1 объемного кристалла Ga, а рассчитанное нами распределение плотности заряда хорошо согласуется с экспериментальными результатами. Согласно нашей модели, содержание Ga в фазах 2×2 и 4×4 составляет 1,25 и 1,18 монослоев соответственно. При этом было обнаружено, что кулоновское отталкивание между заряженными адатомами, расположенными в треугольной решетке, играет ключевую роль в понижении поверхностной энергии [16, 19]. Необходимо отметить, что модель фазы 4×4 не удовлетворяет правилу счета электронов [23]: в элементарной ячейке структуры 4×4 находится три избыточных электрона, каждый из которых насыщает одну оборванную связь атома Ga. Ранее мы показали, что такая конфигурация может быть стабилизирована лишь благодаря электростатическому отталкиванию между заряженными адатомами Ga, и этот тип взаимодействия может играть важную роль в минимизации поверхностной энергии других обогащенных Ga-фаз [16, 19].

Фаза 5×5 . Процедура приготовления фазы 5×5 почти такая же, как и фазы 4×4 .

В действительности нам так и не удалось экспериментально установить отчетливую границу в образовании этих двух фаз, что позволяет предположить, что их поверхностные стехиометрии почти идентичны. Полученная поверхность показывала

очень резкую, но прерывистую картину ДБЭО 5×5 в направлении $[1\bar{1}00]$. На СТМ-изображении поверхности 5×5 можно было часто видеть небольшое количество доменов со структурой 4×4 (рис. 2, а). Как видно, структура 5×5 состоит из линейных цепочек, равномерно расположенных в направлении $[11\bar{2}0]$. Расстояние между цепочками равно 1,58 нм и соответствует $5a_0$ (a_0 — постоянная поверхностной решетки грани GaN(0001)). СТМ-изображение высокого разрешения этой поверхности позволило установить, что в действительности каждая линейная цепочка является дублетом, состоящим из двух линий, разделенных промежутком 0,64 нм в направлении $[0\bar{1}10]$ (рис. 2, б). В свою очередь линии состоят из отдельных ярких точек, причем вдоль самих линий расстояние между точками в зависимости от периодичности расположения составляет 0,64 ($2 \times$), 0,96 ($3 \times$) или 0,7 ($2,5 \times$) нм, что приводит к одномерному беспорядку в направлении $[11\bar{2}0]$. Легко видеть, что преобладают точки, отстоящие друг от друга на 0,7 нм (их почти 50%); при этом распределение промежутков вдоль линии явно нерегулярное. Реконструкция 5×5 , таким образом, не имеет даже элементарной ячейки, как фазы 2×2 или 4×4 , и не принадлежит к семейству сверхструктур " $N \times N$ " [20]. Мы полагаем, что фаза 5×5 наилучшим образом может быть описана как структура " $5 \times 2,5$ ". Согласно результатам измерения профиля сканирования, контраст фазы 5×5 лишь на 0,015 нм выше по сравнению с фазой 4×4 , следовательно, это чисто электронный

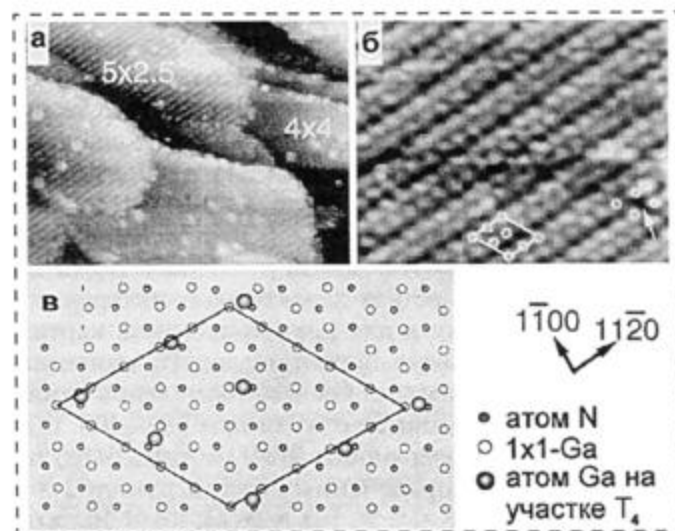


Рис. 2. СТМ-изображение заполненных состояний структурной фазы 5×5 : а — площадь сканирования $60,0 \times 60,0$ нм; б — $10,0 \times 8,0$ нм; $U_s = -3,1$ В, $I_t = 8 \times 10^{-11}$ А; в — геометрическая модель, на которой показаны возможные позиции для релаксации адатомов

эффект. Основываясь на модели фазы 4×4 , условиях приготовления и полученных СТМ-изображениях, мы разработали модель фазы 5×5 , которая приведена на рис. 2, в. Яркие точки на СТМ-изображении высокого разрешения (рис. 2, б) связываются нами с тунелированием из заполненных состояний адатомов Ga. Наблюдавшееся частичное разупорядочение структуры лучше всего может быть объяснено пайерлсовскими искажениями решетки адатомов, находящихся на участках T_4 поверхности. Как показано в [24], в квазиодномерном случае система может понижать энергию путем релаксации решетки, ведущей к образованию стабильной полупроводниковой зонной структуры. Наблюдавшаяся неравномерность в распределении положений атомов вдоль цепочки является, таким образом, результатом релаксации адатомов, занимающих участки T_4 , что отражено на предлагаемой модели фазы 5×5 (рис. 2, в). Отметим, что покрытие поверхности для этой модели составляет 1,16 монослоя, и она не удовлетворяет правилу автокомпенсации [16].

Фаза $5\sqrt{3} \times 2\sqrt{13}$. Фазу $5\sqrt{3} \times 2\sqrt{13}$ pripravляли путем нанесения 2,0 монослоев Ga на свежеразрабатываемую поверхность 1×1 -Ga и последующего десятиминутного отжига при 400°C . Соответствующее СТМ-изображение этой фазы (рис. 3) позволило установить, что ее структура образована цепочками, состоящими из регулярно расположенных одиночных точек и пар точек в направлении $[11\bar{2}0]$. Цепочки разделены промежутками 0,64 нм ($2 \times$) вдоль направления плотной упаковки. На увеличенном изображении поверхности (рис. 3, з) выделена элементарная ячейка с единичным вектором m в направлении $[1\bar{1}00]$. Поскольку рассматриваемая структура достаточно сложная и элементарная ячейка в дальнейшем должна быть повернута, для анализа ее деталей на рис. 3, б в точно таком же масштабе приведено изображение фазы 4×4 . Расстояние между цепочками вдоль вектора m составляет $\sqrt{a_0}$, что приводит к величине $5\sqrt{3}a_0$ элементарной ячейки в этом направлении. В направлении вектора n элементарная ячейка включает три цепочки и простирается на расстояние $5a_0$ вдоль оси $[11\bar{2}0]$ (эта величина определена путем сопоставления белых линий на рис. 3, а с сеткой линий на изображении фазы 4×4 на рис. 3, б). Сравнивая эти сетки линий, нетрудно убедиться, что 4-кратное расстояние между линиями на рис. 3, а в точности равно 5-кратному значению периода $4 \times (6,3 \text{ нм})$ на рис. 3, б. Поэтому мы приписали этой поверхности структуру $5\sqrt{3} \times 2\sqrt{13}$. Отличительная особенность фазы $5\sqrt{3} \times 2\sqrt{13}$ состоит в том, что она образована из цепочек с одномерной элементарной ячейкой длиной $25a_0$ в направлении

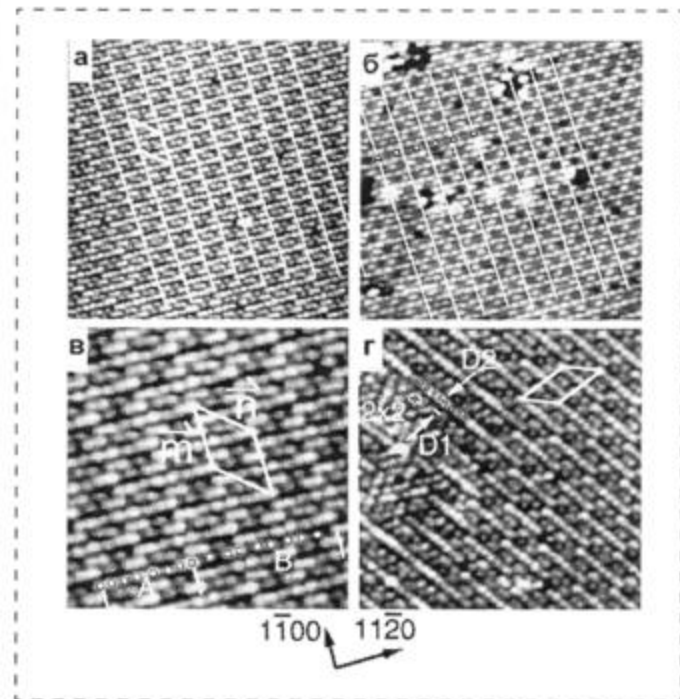


Рис. 3. СТМ-изображения:

а — заполненных состояний поверхностной фазы $5\sqrt{3} \times 2\sqrt{13}$. Параллельные белые линии расположены вдоль направления $[11\bar{2}0]$ с периодом L , равным проекции вектора n на это направление; $V_S = -3,0 \text{ В}$, $I_t = 8 \times 10^{-11} \text{ А}$, площадь сканирования $20,0 \times 20,0 \text{ нм}$; б — фазы 4×4 , полученное в том же масштабе, что и рис. 3, а; кружочки нанесены на места расположения решетки 4×4 , что означает $5 \times 4a_0 = 4L$, т. е. $L = 5a_0$; в — увеличенное изображение фазы $5\sqrt{3} \times 2\sqrt{13}$; m и n — базовые векторы структуры $5\sqrt{3} \times 2\sqrt{13}$; з — фазы $5\sqrt{3} \times 2\sqrt{13}$, демонстрирующее переходную область

$[11\bar{2}0]$. В свою очередь каждая элементарная ячейка состоит из 16 точек, которые можно разбить на две группы: А (занимает область $10a_0$, куда входят спаренные точки на обоих концах и четыре отдельные точки между ними) и В (занимает область $15a_0$, включающую две пары точек и четыре отдельные точки), как это видно на рис. 3, в. На рис. 3, з показан другой домен со структурой $5\sqrt{3} \times 2\sqrt{13}$, который повернут на 120° . На доменной границе можно наблюдать точки с локальным упорядочением 2×2 (элементарная ячейка приведена там же). В верхнем левом и нижнем левом углах этого изображения также наблюдаются линейные цепочки, образующие структуру 5×5 . Если убрать отдельные точки, то получим реконструкцию 5×5 . Поэтому Ga-покрытие поверхности со структурой $5\sqrt{3} \times 2\sqrt{13}$ должно быть близким тому, что присутствует в фазах 2×2 и 5×5 . Вариации контраста вдоль точек на изображении поверхности со структурой $5\sqrt{3} \times 2\sqrt{13}$ не превышают 0,03 нм, поэтому

мы заключили, что эти точки обусловлены туннелированием из атомов одного и того же слоя. Разработанная нами модель этой структуры приведена на рис. 4. Мы полагаем, что фазы 5×5 и $5\sqrt{3} \times 2\sqrt{13}$ — это две конфигурации, которые проявляют уникальное одномерное расположение адатомов, что можно объяснить с помощью когерентного пайерсовского искажения решетки адатомов вдоль направления $[11\bar{2}0]$ плотной упаковки [16, 24].

Фаза $L-\sqrt{7} \times \sqrt{7}$. Фаза, показывающая локально упорядоченную структуру $\sqrt{7} \times \sqrt{7}$, образуется в ходе приготовления фазы 2×2 , если количество нанесенного Ga слегка превышает то, которое требуется для получения фаз 2×2 или 4×4 . На рис. 5 показано типичное СТМ-изображение поверхности со структурой $\sqrt{7} \times \sqrt{7}$ сосуществующей с фазой 4×4 . Заметим, что нельзя было получить поверхность с однодоменной структурой $\sqrt{7} \times \sqrt{7}$ путем, например, нанесения большего количества Ga или отжига при других значениях температуры. При этом нам так и не удалось добиться упорядочения $\sqrt{7} \times \sqrt{7}$ дальнего порядка, даже если вся поверхность была покрыта этой структурой. Во всех случаях мы наблюдали картину 1×1 ДБЭО, означающую, что локальное упорядочение — это внут-

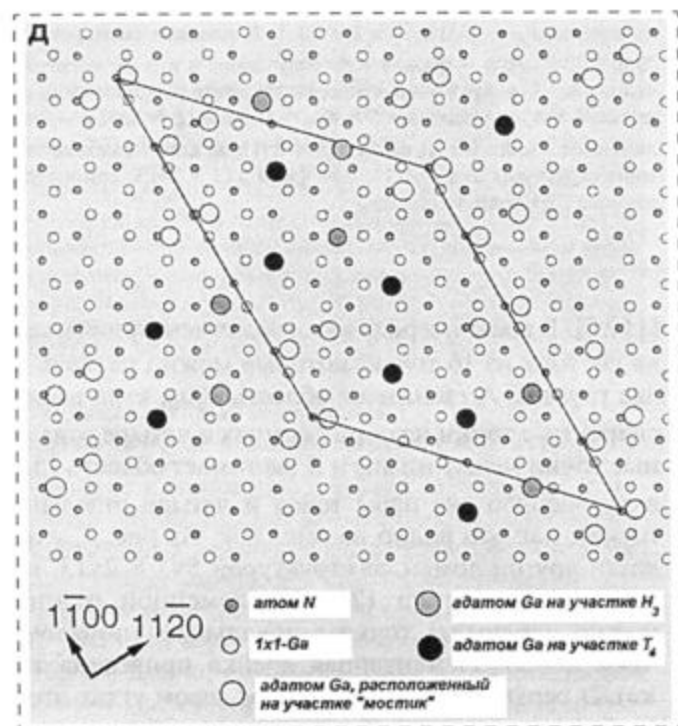


Рис. 4. Структурная модель фазы $5\sqrt{7} \times 2\sqrt{13}$ (вид сверху); маленькие белые кружочки — атомы Ga, расположенные в соответствии с объемной структурой 1×1 ; большие белые, серые и черные кружочки — адатомы Ga, расположенные соответственно на мостиках и участках N_3 и T_4 ; маленькие черные кружочки — атомы N второго слоя, находящиеся непосредственно под атомами 1×1 -Ga первого слоя

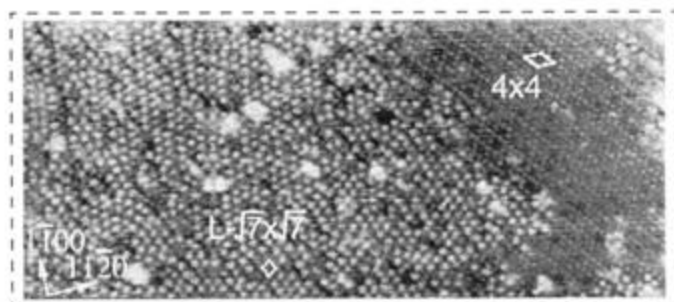


Рис. 5. СТМ-изображение заполненных состояний поверхности GaN(0001), содержащей фазы $L-\sqrt{7} \times \sqrt{7}$ и 4×4 , элементарные ячейки выделены; $U_s = -2,3$ В, $I_t = 8 \times 10^{-11}$ А

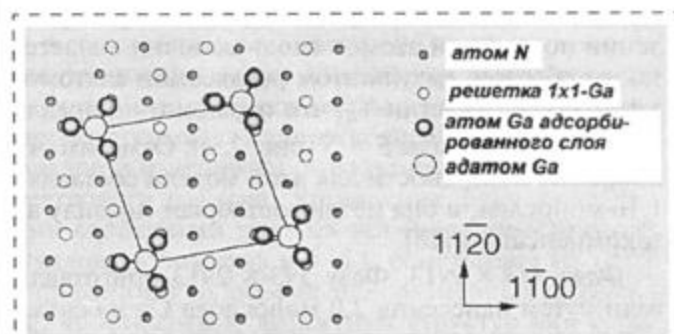


Рис. 6. Геометрическая модель поверхностной фазы $\sqrt{7} \times \sqrt{7}$ (вид сверху)

реннее свойство фазы $\sqrt{7} \times \sqrt{7}$, и по этой причине мы назвали ее $L-\sqrt{7} \times \sqrt{7}$. Контраст изображения фазы $L-\sqrt{7} \times \sqrt{7}$ выше, чем соседней фазы 4×4 , не менее чем на 0,1 нм. Ниже (рис. 6) показана разработанная нами геометрическая модель этой фазы, где серые кружочки — это атомы Ga адсорбированного слоя, которые связаны с атомами 1×1 -Ga двойного слоя N—Ga.

Фаза 10×10 . Фазу 10×10 получали путем нанесения еще 1,5 монослоя Ga на поверхность $L-\sqrt{7} \times \sqrt{7}$ и десятиминутного отжига при 350°C . Типичная реконструкция 10×10 показана на рис. 7, а, где она сосуществует с фазой $L-\sqrt{7} \times \sqrt{7}$ с контрастом изображения более 0,16 нм. Согласно условиям приготовления, фаза 10×10 включает три слоя галлия на поверхности с объемной структурой 1×1 -Ga (рис. 7, б); эта фаза характеризуется уникальной структурой типа пчелиных сот, состоящей из 18 ярких точек в элементарной ячейке (выделена ромбиком): внутреннее кольцо содержит шесть точек, а внешнее — 12 точек. На рис. 7, а также можно видеть множество мелких колец, которые локализованы на краях островка со структурой 10×10 . Полагая, что фаза 10×10 энергетически более стабильна, чем поверхность со структурой $L-\sqrt{7} \times \sqrt{7}$, упомянутое выше локальное упорядочение можно интерпретировать как фазовый переход к структуре 10×10 в условиях обогащения

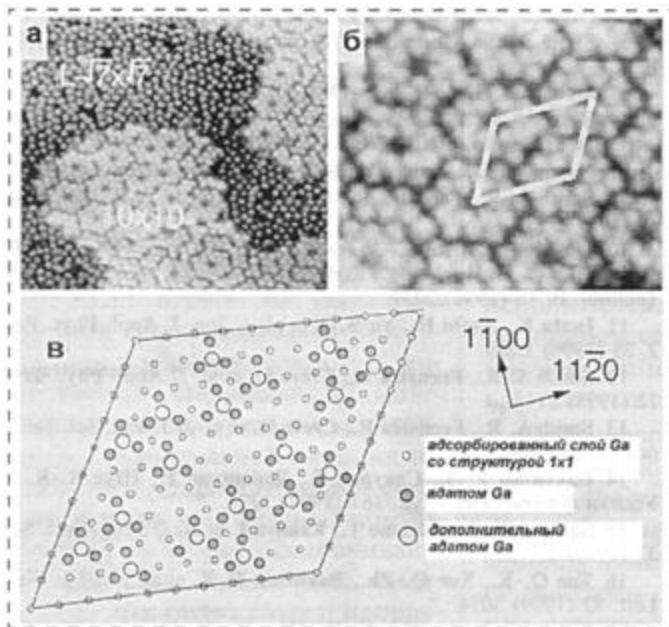


Рис. 7. СТМ-изображения заполненных состояний структурной фазы 10×10 :

a — площадь сканирования (20×20 нм), фаза 10×10 сосуществует с фазой $L\sqrt{7} \times \sqrt{7}$; *b* — увеличенное изображение этой же поверхности ($8,0 \times 8,0$ нм), ромбиком выделена элементарная ячейка; *v* — геометрическая модель фазы 10×10

Ga. Ее атомная модель приведена на рис. 7, *v*, где маленькие белые кружочки отображают адатомы Ga, находящиеся на вершинах атомов Ga, расположенных с сохранением объемной структуры. Серые кружочки — это адатомы Ga, связанные с тремя атомами Ga в адсорбированном Ga-слое. Адатомы Ga внешнего слоя (большие белые кружочки) расположены на этих трех адатомах (серые кружочки). Эта модель попросту основана на СТМ-изображении, представленном на рис. 7, *b*.

Независимо от полярности поверхности и условий приготовления все рассмотренные упорядоченные фазы являются обогащенными Ga и могут быть поняты на основе простой схемы Ga-адатома [16, 19]. За исключением фазы 2×2 , все остальные фазы не удовлетворяют правилу счета электронов [23]. Ни в одной из исследованных фаз не было обнаружено следов образования димеров N или Ga (или их вакансий), что заметно отличает их от атомных структур, наблюдавшихся на поверхности традиционных полупроводниковых соединений III—V. Образование нитридов элементов группы III вводит слишком большое упругое напряжение в пленке благодаря заметной разнице в длинах связей N—N и Ga—N. В последнем случае энергетический выигрыш оказывается слишком малым, чтобы объяснить низкое значение поверхностной энергии, поскольку длина связи Ga—Ga на поверхности очень близка к межатомному расстоянию Ga—Ga в объемном металлическом галлии.

Поиск процесса оптимизации энергии позволил выделить два типа реконструкций. Первый, к которому относятся такие фазы, как 4×4 , $2\sqrt{7} \times 2\sqrt{7}$ и 10×10 , характеризуется треугольной решеткой и относится к семейству "N × N". В этом случае важную роль может играть коллективное взаимодействие между заряженными адатомами, что ведет к образованию хаббардовской полупроводниковой зонной структуры и стабилизирует эту поверхность. Второй тип реконструкций, к которому относятся фазы 2×4 ; $5 \times 2,5$ и $5\sqrt{3} \times 2\sqrt{13}$, отчетливо демонстрирует квазиодномерную структуру и часто включает вне решеточные адатомы. В этом случае уменьшение полной поверхностной энергии может происходить благодаря пайерлсовским искажениям решетки адатомов [16, 19, 24].

Структура жидкой фазы 1×1 -Ga. Наше последнее наблюдение — структура жидкой фазы 1×1 -Ga (рис. 8, *a*). Это — наиболее обогащенная галлием фаза и она всегда сосуществует с другими фазами, за исключением поверхности 1×1 свежеработанной пленки GaN. СТМ-изображение, полученное в ходе приготовления поверхности 2×2 (рис. 8, *b*), показывает сосуществующие фазы 4×4 , $L\sqrt{7} \times \sqrt{7}$ и 1×1 -Ga. Фаза 1×1 -Ga впервые наблюдалась Смитом [13], и ее структура весьма отлична от структуры свежеприготовленной поверхности 1×1 . На рис. 8, *b* поверхность жидкой фазы 1×1 -Ga выглядит атомно-гладкой. Ни на одном из полученных СТМ-изображений этой фазы нам не удалось добиться атомного разрешения. Измерения профилей сканирования показали, что эта фаза располагается на $0,21$ нм выше, чем фаза 4×4 . Поверхность со структурой 1×1 -Ga всегда проявляла свойства металла, так как туннелирование оказывалось стабильным даже при напряжениях смещения $U_s \leq 0,2$ В, и СТМ-изображения, полученные при низких U_s , были подобны изобра-

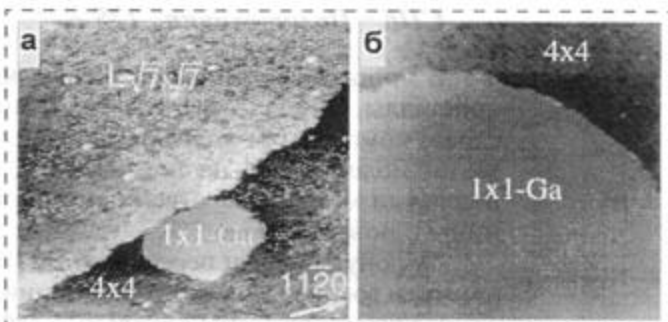


Рис. 8. СТМ-изображения:

a — заполненных состояний поверхности GaN(0001), демонстрирующее сосуществование структур 4×4 , $L\sqrt{7} \times \sqrt{7}$ и жидкой фазы 1×1 -Ga; $I_t = 4 \times 10^{-11}$ А, $U_s = -3,0$ В, площадь сканирования $45,0 \times 36,0$ нм; *b* — увеличенное изображение той же поверхности ($15,0 \times 8,0$ нм), показывающее структуру жидкой фазы 1×1 -Ga; в верхней части изображения можно видеть поверхностную фазу 4×4

жениям, полученным при больших U_3 . Наши наблюдения отчетливо продемонстрировали, что жидкая фаза 1×1 -Ga остается стабильной до тех пор, пока поверхность оказывается обогащенной Ga; это подразумевает очень низкую растворимость азота в объеме Ga. Мы также пришли к заключению, что для получения гладкой поверхностной морфологии необходимо обеспечить рост материала в условиях обогащения Ga.

Для приготовления чистых упорядоченных поверхностей SiC разработан новый двухступенчатый метод; использование таких поверхностей в качестве подложек позволило получать высококачественные пленки GaN.

На поверхности GaN(0001) наблюдались и исследовались с атомным разрешением серии упорядоченных поверхностных структур, такие как 2×2 ; 4×4 ; 5×5 ; $5\sqrt{2} \times 2\sqrt{13}$; $L-\sqrt{7} \times \sqrt{7}$; 10×10 , и жидкая фаза 1×1 -Ga. Предложены и обсуждены геометрические модели всех этих реконструкции.

Все упорядоченные поверхностные фазы оказались обогащенными Ga.

Список литературы

1. Nakamura S., Mukai T., and Senoh M. // Appl. Phys. Lett. 64 (1994) 1687.
2. Ponce F. A. and Bour D. P. // Nature. 386 (1997) 351.
3. Pearton S. J., Zolper J. C., Shul R. J. and Ren F. // J. Appl. Phys. 86 (1999) 1.

4. Orton J. W., Foxon C. T. // Rep. Prog. Phys. 61 (1998) 1.
5. Strite S. and Moroc H. // J. Vac. Sci. Technol. B. 10 (1992) 1237.
6. Ambacher O. // J. Phys. D: Appl. Phys. 31 (1998) 2653.
7. Binary Alloy Phase Diagrams. 2nd Edition, / Eds. T. B. Massalski, H. Okamoto, et al. / Vol. 2. P. 1824.
8. Neumayer D. A. and Ekerdt J. G. // Chem mater. 8 (1996) 9.
9. Smith A. R., Feenstra R., Creve D. et al. // Phys. Rev. Lett. 79 (1997) 3934.
10. Lin M. E., Strite S., Agarwal A. et al. // Appl. Phys. Lett. 62 (1993) 702; O. H. Hughes, D. Korakakis, T. Cheng, et al. J. Vac. Sci. Technol. B. 16 (1998) 2237.
11. Iwata K., Asahi H., Yu S. J. et al. // Jpn. J. Appl. Phys. Part 2. 35 (1996) L289.
12. Smith A. R., Feenstra R., Creve D. et al. // Appl. Phys. Lett. 72 (1998) 2114.
13. Smith A. R., Feenstra R., Creve D. et al. // J. Vac. Sci. Technol. B. 16 (1998) 2242.
14. Бахтизин Р. З., Сакурай Т., Хашизуме Т., Шце К.-К. // Успехи физических наук. 167 (1997) 1227.
15. Sakurai T., Hashizume T., Kamiya I. et al. // Prog. Surf. Sci. 33 (1990) 3.
16. Xue Q.-K., Xue Q.-Zh., Bakhtizin R. Z. et al. // Phys. Rev. Lett. 82 (1999) 3074.
17. Бахтизин Р. З., Шце К.-К., Шце Ч.-Ж., Хасерава Ю., Сакурай Т. // Микросистемная техника. № 2 (2001) 32.
18. Xue Q.-K., Xue Q.-Zh., Hasegawa Y. et al. // Jpn. J. Appl. Phys. Part. 2. 36 (1997) L1486.
19. Бахтизин Р. З., Шце К.-К., Шце Ч.-Ж., Хасерава Ю., Сакурай Т. // Поверхность. № 11 (2000) 9.
20. Northrup J. E., Di Felici R., Neugebauer J. // Phys. Rev. B. 55 (1997) 13878.
21. Rapcewicz K., Nardelli M. B., Bernholc J. // Phys. Rev. B. 56 (1997) R12725.
22. Fritsch J., Sankey O. F., Schmidt K. E., Page J. B. // Phys. Rev. B. 57 (1998) 15360.
23. Pashley M. D. // Phys. Rev. B. 40 (1990) 10481.
24. Peierls R. E. Quantum Theory of Solids. Oxford: Clarendon Press. 1955. 230 p.

НОВАЯ КНИГА

Томилин М. Г. *Взаимодействие жидких кристаллов с поверхностью.*
СПб.: Политехника. 325 с.

В монографии описаны физические явления, возникающие на границе жидкие кристаллы (ЖК) — твердое тело, индуцированные структуры приповерхностных слоев, компоненты энергии сцепления молекул ЖК с подложкой, природа ориентации молекул ЖК на поверхности, условия смачивания. Показано, что влияние подложки может существенным образом изменять физические свойства ЖК у границы с поверхностью.

Затронуты задачи передовых технологий, направленные на обеспечение контролируемой и воспроизводимой ориентации и энергии сцепления молекул ЖК с подложкой. Теоретически описаны локальные деформации ЖК в неоднородных внешних полях и даны результаты экспериментального выявления различного рода неоднородностей поверхности в материалах, не наблюдаемые в ряде случаев альтернативными методами в материаловедении, микроэлектронике и медицине.

Книга предназначена для студентов, аспирантов и научных сотрудников, работающих в области оптики ЖК, физики поверхности, неразрушающих методов контроля и материаловедения.