

А. А. ГАЛАЕВ, С. С. ГОРЕЛИК, Ю. Н. ПАРХОМЕНКО, Ю. С. САФОНОВ,
В. Л. ШВАРЦМАН

ИССЛЕДОВАНИЕ ПОВЕРХНОСТИ (110) КРИСТАЛЛА
АНТИМОНИДА ИНДИЯ МЕТОДОМ ДИФРАКЦИИ
МЕДЛЕННЫХ ЭЛЕКТРОНОВ

(Представлено академиком Г. В. Курдюмовым 1 X 1973)

Из общих соображений следует, что несимметричность сил, действующих на поверхностные атомы, особенно для кристалла с направленной связью, должна привести к изменению структуры и межатомных расстояний на поверхности. Изменение структуры на гранях {111} кристалла антимонида индия качественно показано в работах (1, 2).

В настоящей работе описаны результаты исследования грани (110) кристалла антимонида индия методом дифракции медленных электронов.

Дифракционные картины снимали в электронографе медленных электронов с цилиндрической дифракционной камерой, при энергиях электронов от 30 до 600 эв. Исследования проводили на кристаллах антимонида индия, легированных Mn или Te до 10^{18} ат/см³. Поверхность для исследования готовили двумя методами: а) сколом кристалла в сверхвысоком вакууме ($5 \cdot 10^{-9}$ мм рт.ст.), б) бомбардировкой положительными ионами аргона химически полированной поверхности с последующим отжигом. Дифракционные картины, полученные для поверхностей, приготовленных двумя указанными способами, для кристаллов, легированных Mn и Te, были одинаковы, что свидетельствует об идентичности поверхности и их атомарной чистоте. Пример картины дифракции медленных электронов показан на рис. 1. Из анализа интенсивности рефлексов при изменении ускоряющего напряжения, а также угла падения электронов установлено, что в нашем случае при энергии электронов менее 100 эв дифракция является двумерной, а глубина проникновения ~ 3 Å.

При расчете дифракционных картин использовали кинематическую теорию рассеяния. Элементарная ячейка антимонида индия (решетка сфалерита) по плоскости (110) представляет собой прямоугольник, образованный атомами одного сорта и центрированный атомами другого сорта с координатами ($1/2, 1/4$).

Структурная амплитуда для отражений от плоскости (110) записывается в виде

$$F = \sum_i f_i \exp[-2\pi i(Hx_i + Ky_i)], \quad (1)$$

где f_i — атомная функция рассеяния, H и K — индексы отражений, x и y — координаты базиса ячейки по плоскости (110) — $(0; 1/2, 1/4)$.

При

$$2H + 3K = 2(2n + 1) \quad (2)$$

структурная амплитуда равна

$$F = f_A - f_B.$$

В силу незначительного различия величин атомных функций рассеяния f_A и f_B следует ожидать, что рефлексy H, K , соответствующие усло-



Рис. 1. Картина дифракции. Фотография с экрана электроно-
графа. Антимонид индия, грань (110), энергия электронов
80 эв

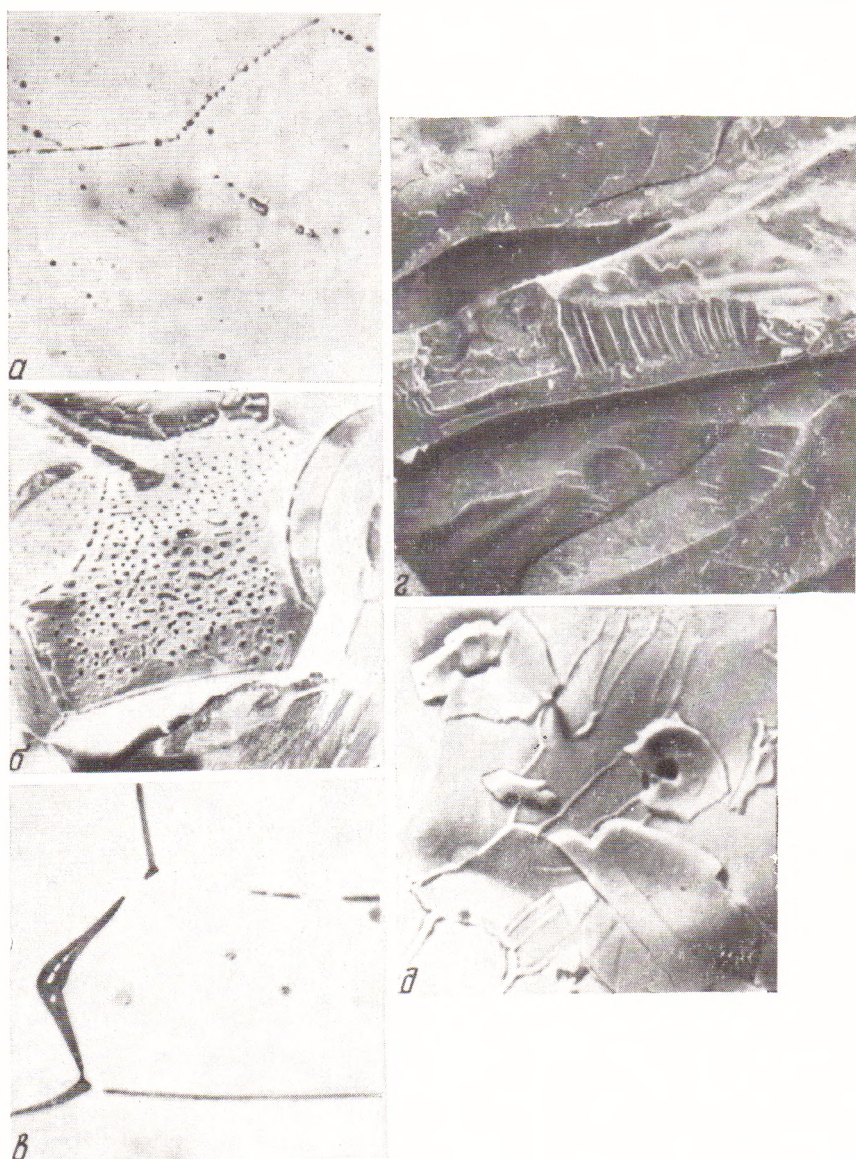


Рис. 1. Микрофотографии литого молибдена с включениями окислов. *a, б* 0,01 вес. % кислорода: *a* — снимок в световом оптическом микроскопе поверхности шлифа, 1000×; окислы имеют вид мелких круглых включений, расположенных цепочкой по границам зерен. *б* — тот же образец в месте излома, сканирующая электронная микроскопия, 1000×; окислы располагаются по границам кристаллов в виде пористой пленки. *в — д* 0,1 вес. % кислорода: *в* — световой микроскоп, 1000×; окислы располагаются на поверхности кристаллов в виде пленки толщиной 2–10 мкм. *г* — тот же образец в месте излома, сканирующий микроскоп, 300×; окислы располагаются на поверхности кристаллов в виде сплошной пленки, местами разорванной. *д* — отдельные составляющие окисной пленки пластинчатой и дискообразной формы, 3000×

вию погасания (2), должны отсутствовать на электронограмме. Учитывая это, была построена теоретическая электронограмма.

Расчет экспериментальных картин дифракции показал, что элементарная ячейка на поверхности (110) по размерам совпадает с соответствующей ячейкой по плоскости (110) в объеме. Однако при сравнении экспериментальных электронограмм с теоретическими установлено, что условие погасания (2) не выполняется. На электронограмме присутствуют запрещенные рефлексy. Невыполнение закона погасания свидетельствует о том, что объемная и поверхностная ячейки по плоскости (110) различны.

Расчет экспериментальных электронограмм дает, что поверхностная ячейка примитивная, с параметрами, соответствующими объемной. Это можно было бы объяснить тем, что атомная функция рассеяния одного из сортов атомов мала и не оказывает влияния на величину структурной амплитуды. Однако в (3) показано, что атомная функция рассеяния слабо зависит от атомного номера элемента, а для атомов индия и сурьмы, имеющих близкие атомные номера, тем более нельзя ожидать существенных различий в их атомных функциях рассеивания.

Другое возможное объяснение невыполнения закона погасания связано с перестройкой поверхности. Модель, описывающая нормальные смещения атомов различного сорта в соединениях типа A^3B^5 для граней (111) и $(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$, предложена в (2). Согласно этой модели, для поверхностных атомов третьей группы периодической таблицы реализуется тригонально-плоская конфигурация связей (sp^2 -гибридизация) и они смещаются вниз от тетраэдрического (равновесного для объема) положения; для поверхностных атомов пятой группы реализуется пирамидальная конфигурация связей (p^3 -связи) и они смещаются вверх. По-видимому, аналогичный механизм действует на поверхности (110), где координационное число атомов также равно трем. В отличие от поверхности (111), в случае поверхности (110) оборванная связь направлена не по нормали к поверхности, а под углом. А так как смещение атомов происходит именно в направлении этой оборванной связи, то нормальные смещения каждого атома в случае поверхности (110) будут меньше, чем для поверхности (111). Поскольку поверхность (110) состоит из одинакового количества атомов различного сорта, а их смещения противоположны по знаку, то суммарное смещение может быть достаточно велико (см. рис. 2).

Такая перестройка поверхности (110) приводит к тому, что элементарная ячейка поверхностной сетки атомов из центрированной превращается в примитивную. Запрещенные в случае центрированной ячейки рефлексy (условие (2)) в этом случае присутствуют на картине дифракции медленных электронов.

Количественные измерения интенсивностей рефлексов в дальнейшем позволят более детально разобраться в описанном явлении.

Московский институт стали
и сплавов

Поступило
28 VIII 1973

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

¹ D. Haneman, J. Phys. Chem. Solids, v. 14, 1962 (1960). ² А. А. Галсев, С. С. Горелик, ДАН, т. 184, № 3 (1969). ³ E. Bauer, J. Fac. Sci. Technol., v. 7, 1 (1972).

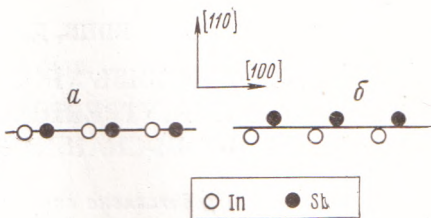


Рис. 2. Схема атомной структуры плоскости (110) в направлении [001]: а — в объеме, б — на поверхности