

Ge(112)(4 × 1)-In 表面重构的原子结构*

涂修文 盖 峥

(北京大学物理系,人工微结构和介观物理国家重点实验室,北京 100871)

(2001 年 4 月 2 日收到)

用扫描隧道显微镜 (STM) 研究了亚单层 In 原子引起的 Ge(112)(4 × 1)-In 表面重构. 结合随偏压极性不同而显著不同的 STM 图象和相应的“原子图象”, 为这个重构提出了一个原子结构模型, 供进一步研究参考. 其中, In 原子的吸附位置与它在 Si(112) 表面的吸附位置一致, 但与 Al 原子和 Ga 原子在 Si(112) 表面的吸附位置不同. 这个吸附位置的不同主要是由 In 原子较长的共价键键长引起的.

关键词: 表面结构, In, Ge, 扫描隧道显微镜 (STM)

PACC: 6848, 6820, 6116P

1 引 言

作为一种典型的金属-半导体界面, III 族金属原子在 IV 族半导体表面的吸附已经被广泛地研究了三十多年. 绝大多数的研究都集中在低指数表面的吸附现象, 尤其是在 (111) 表面^[1-3] 和 (001) 表面^[4-6]. 现在, 高指数表面的吸附现象正在引起越来越多的重视. 一个原因是, 当覆盖有亚单层 III 族金属原子时, 某些高指数的 Si 或 Ge 表面的表面自由能比相应的低指数表面的更低. 于是, 在适当地退火以后, 具有这些高指数取向的小面就会在覆盖有亚单层 III 族金属原子的低指数表面出现并发展. Al/Si(001)^[7] 和 In/Ge(001)^[8] 界面小面化到 {103} 就是两个这样的例子. 另一个原因是, 高指数表面有较高的台阶密度, 因而有可能用作制造纳米尺度的或者具有空间调制的结构的模板^[9].

在所有作为衬底研究过的高指数表面之中, Si(112) 表面特别受重视. 有报道指出, 充分退火的 Al/Si(112) 和 Ga/Si(112) 界面在原子尺度上是平的 (即不小面化到别的取向), 形成 5 × 1 或 6 × 1 重构^[10,11], 并且提出 Al 原子和 Ga 原子吸附在台阶边沿形成纳米线^[11]. Ga 原子在 Si(112) 表面形成纳米线已经被后来的俄歇电子能谱 (AES) 实验^[12] 和 STM

实验^[13] 所证实, 而且形成纳米线的 Ga 原子的脱附能也比在 Ga 岛上和吸附在 Si(111) 或 Si(001) 表面的 Ga 原子的脱附能要高得多^[10]. 这说明, 对于 Ga 原子而言, 台阶边沿的吸附位置 (以下简称为台阶边沿位) 比别的吸附位置在能量上更有利. 既然 In 也是一种 III 族金属, 人们可能会预期 In 原子在 Si(112) 表面也倾向于吸附在台阶边沿形成纳米线. 但是, 最近的研究^[14] 表明, 事实并非如此. In/Si(112) 界面有两种重构 4 × 1 和 7 × 1. 在更稳定的 Si(112)(7 × 1)-In 重构里, In 原子不是吸附在台阶边沿而是吸附在微小的 (111) 平台上^[14]. 这就提出了一个有意思的问题: 是什么使得 In 原子的吸附行为与 Al 原子和 Ga 原子的吸附行为如此不同? 另一方面, 仅仅由于 Ge 在应用上略逊于 Si, Ge 表面作为衬底只得到了很少的关注. 从基础科学的观点上看, 我们认为 Ge 表面不应当被忽略. 相反, 对于相似系统的比较性研究能够加深对整个 IV 族半导体系统的理解. 在本文中, 我们用低能电子衍射 (LEED) 和 STM 研究了 In/Ge(112) 界面. 我们的结果表明, In 原子在退火以后的 In/Ge(112) 界面也不占据台阶边沿位. 比较 In/Ge(112) 界面和其他稳定的 III 族金属/IV 族半导体界面 (以下简称为 III/IV 界面), 我们认为, In 原子较长的共价键键长是导致其不同于 Al 原子和 Ga 原子的吸附行为的主要原因.

* 国家自然科学基金 (批准号: 19634010) 资助的课题.

2 实 验

本工作的 LEED 和 STM 实验是在同一个超高真空系统中进行的,这个系统曾用于一系列的研究工作^[3,8,15-18].简言之,这个系统由一个主室和一个样品制备室构成,主室安装有 LEED 和一个实验室自制的 STM,Ar 离子轰击、退火和金属蒸镀则在样品制备室中进行. STM 针尖是用电化学腐蚀的方法从 W 丝制得的.在 STM 实验中,针尖接地,偏压加在样品上,STM 工作在恒定电流模式.本文中的 STM 图象都是在交流模式下采集的,几张高分辨的图象经过光滑处理. Ge 样品是从一块电阻率为 40—50Ω·cm 的 Ge(112)晶片上切割下来的.经过 Ar 离子轰击(6×10^{-3} Pa, 600V \times 1 μ A \times 2h)和退火(700℃, 10min)以后, LEED 和 STM 都证明我们得到了高质量的 Ge(112)清洁表面. In 是从用 Ta 片做成的 In 源里蒸镀到处于室温的清洁 Ge(112)表面.这个 In 源的做法与以前用于研究 In 与半导体界面^[3,8,14,19]的源做法相同.在蒸镀 In 的过程中,样品制备室的真空度好于 7×10^{-7} Pa.蒸镀大约一个 In 单层的样品在 460℃退火 5min 后,用 LEED 可以观察到非常锐的 4×1 重构.在大约 550℃退火几分钟后, LEED 衍射图样变得与清洁 Ge(112)表面的一样,说明 In 已经从表面脱附.

3 结果与讨论

有报道指出,清洁的 Ge(112)表面是不稳定的,在充分退火以后,它会彻底小面化到(113)和(7713)^[16].我们没有给清洁表面充分退火,因而它的小面化并不彻底,表面有许多大的(112)平台与(113)小面和(7713)小面共存.这在 LEED 和 STM 观察中都看到了.图 1(a)给出了清洁 Ge(112)表面的 LEED 衍射图样,它是由(112)平台、(113)小面和(7713)小面的衍射斑点共同构成的一个复杂的衍射图样.图 1(b)为相应的大范围 STM 图象,其中灰色的区域为(112)平台,较亮和较暗的区域分别为(7713)小面和(113)小面.在蒸镀 In 并退火以后,表面的形貌发生了很大的变化.图 1(c)给出了退火后 In/Ge(112)界面的 LEED 衍射图样,这个很锐的衍射图样说明表面具有 4×1 重构.图 1(d)为相应的大范围 STM 图象,它表明这个界面在原子尺度上是平的.

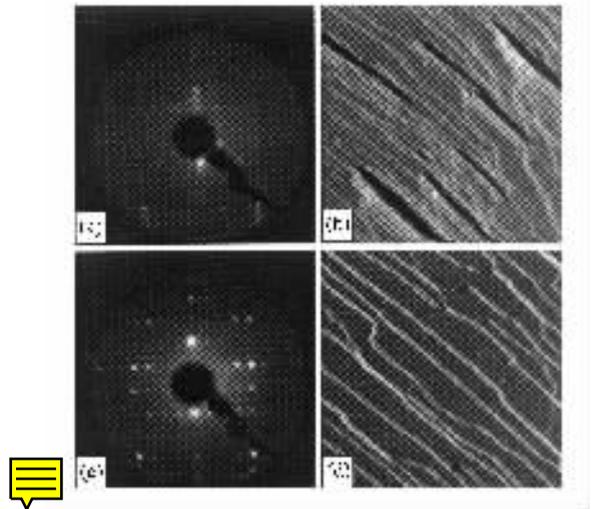


图 1 (a)为清洁 Ge(112)表面的 LEED 衍射图样(电子能量为 64eV)(b)为相应的大范围 STM 图象(扫描范围 280nm \times 280nm, 样品偏压为 +3.6V,隧道电流为 0.6nA.以下 STM 图象参量格式与此相同)图中灰色的区域为 Ge(112)平台,较亮(暗)的区域为 Ge(7713)(Ge(113))小面(c)为退火后 In/Ge(112)界面的 LEED 衍射图样(电子能量为 64eV)(d)为相应的大范围 STM 图象(280nm \times 280nm, +3.6V, 0.5nA).注意,部分小面化了清洁表面在蒸镀 In 并退火以后变成在原子尺度上是平的并且形成 4×1 重构

In 可以引起衬底大范围的结构改变这一事实说明, In/Ge(112)界面在能量上要比 In/Ge(113)和 In/Ge(7713)界面都要低.文献[20]中观察到退火以后的 In/Ge(113)界面小面化到(112),与我们的结果是一致的.吸附引起的小面化消失和表面变平这一现象在 Al/Si(112), Ga/Si(112)和 In/Si(112)界面上也观察到了.清洁的 Si(112)表面形成 2×1 重构,是比较稳定的.最近的研究发现,充分退火以后,清洁的 Si(112)表面会重构,形成纳米尺度的(111)和(337)小面^[21].在清洁 Si(112)表面蒸镀亚单层的 Al, Ga 或 In 并且在适当的温度退火能够消除这些小面,使表面回到严格的(112)取向^[10,11,14]. Al/Si(112), Ga/Si(112), In/Si(112)和 In/Ge(112)这 4 个界面的另一个共同之处就是,它们都形成“ $N \times 1$ ”重构;“ $N \times$ ”和“ $\times 1$ ”分别在 $[1\bar{1}0]$ 和 $[11\bar{1}]$ 方向.对于 Al/Si(112), $N = 5$, $6^{[11]}$;对于 Ga/Si(112), $N = 4-7$, 以 5 和 6 最常见^[10,13];对于 In/Si(112), $N = 4$, $7^{[14]}$;对于 In/Ge(112), $N = 4$.

图 2(a)为分辨率更高一些的占有态 STM 图象.从图 2(a)中可以看出,这个表面由平行于 $[1\bar{1}0]$ 方向的列构成,在列上有均匀分布的鼓包.在每个平台上,这些鼓包是垂直于列对齐的,形成长方形的表面

元胞. 相邻两列的间隔为 0.98nm , 同一列上相邻两鼓包的间隔为 1.6nm . 理想的(即没有弛豫、重构或小面化的) $\text{Ge}(112)$ 表面的 1×1 元胞的长和宽分别为 0.98 和 0.40nm . 因此, 如同 LEED 衍射图样所显示的那样, 退火以后的 $\text{In}/\text{Ge}(112)$ 界面的确形成 4×1 重构.

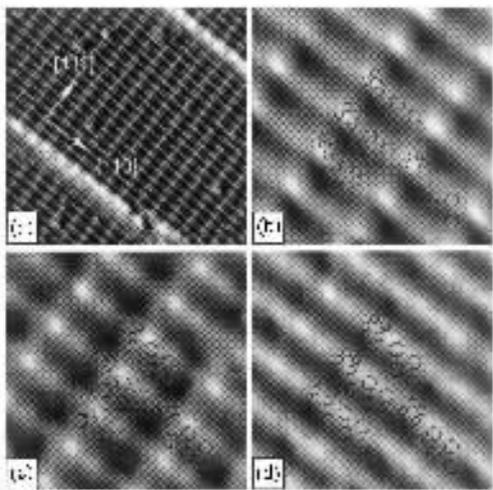


图2 从退火后的 $\text{In}/\text{Ge}(112)$ 界面采集的 STM 图象 (b) 和 (c) 经过了光滑处理 (a) 为占有态图象 ($23.4\text{nm} \times 23.4\text{nm}$, -2.9V , 0.6nA). 其中标出了表面的两个主要晶体学方向 (b) 为高分辨率的占有态图 ($4.3\text{nm} \times 4.3\text{nm}$, -2.4V , 0.6nA) (c) 为高分辨率的空态图 ($4.3\text{nm} \times 4.3\text{nm}$, $+1.8\text{V}$, 0.6nA) (b) 和 (c) 为一对同时采集的双偏压图 (d) 为 (b) 和 (c) 的平均, 即“原子图象”^[17] (b) (c) 和 (d) 中叠加了模型表层的原子, 其中大的圆圈表示 In 原子, 小的表示 Ge 原子

下面我们来尝试确定表面的原子结构. 必须注意的是, 在恒定电流模式, STM 针尖扫过的是表面的等电子态密度面而不是表面的形貌, 从而 STM 图象中既含有表面的形貌的贡献也含有电子态的贡献. 所以, 从 STM 图象分析表面的原子结构通常需要进行冗长的理论计算. 作为一种替代的方法, 已经有人提出“原子图象”(定义为同时采集到的一对空态图和占有态图的平均) 包含的主要是表面的原子结构信息, 从而对得出表面的结构模型非常有帮助^[17]. 这个方法已经被成功地应用于最近的一系列研究工作中^[14, 16, 18]. 图 2 (b) 和图 2 (c) 就是这样一对双偏压 STM 图象, 它们分别对应于占有态和空态. 占有态图和空态图相差很大, 这说明电子态对 STM 图象的贡献是相当显著的. 可以看出, 在图 2 (a) 中的一列在图 2 (b) 和图 2 (c) 中其实是两列, 一列较亮, 一列较暗(以下分别简称为亮列和暗列). 图 2 (a) 中看到的鼓包位于图 2 (b) 的亮列上, 在图 2 (c) 的相应的位置上只有一个很弱的鼓包. 在图 2 (b) 的亮列上两个鼓包中间分辨不出原子(或键), 但是在图 2 (c) 的相应的位置能看到两个明显的突起. 暗列的最显著的特点就是在每个 4×1 元胞里都有一个凹陷. 图 2 (d) 为图 2 (b) 和图 2 (c) 的平均, 即“原子图象”^[17]. 这个原子图象同时保留了占有态图和空态图的主要特征, 即, 在每个 4×1 元胞中亮列上有一个鼓包和两个突起, 暗列上有一个凹陷. 如前面所述, 这些特征应是表面原子结构特点的反映. 由此, 我们为这个表面重构提出一个原子模型, 如图 3 (b) 所示.

列I 列II 列III 列I 列II 列III

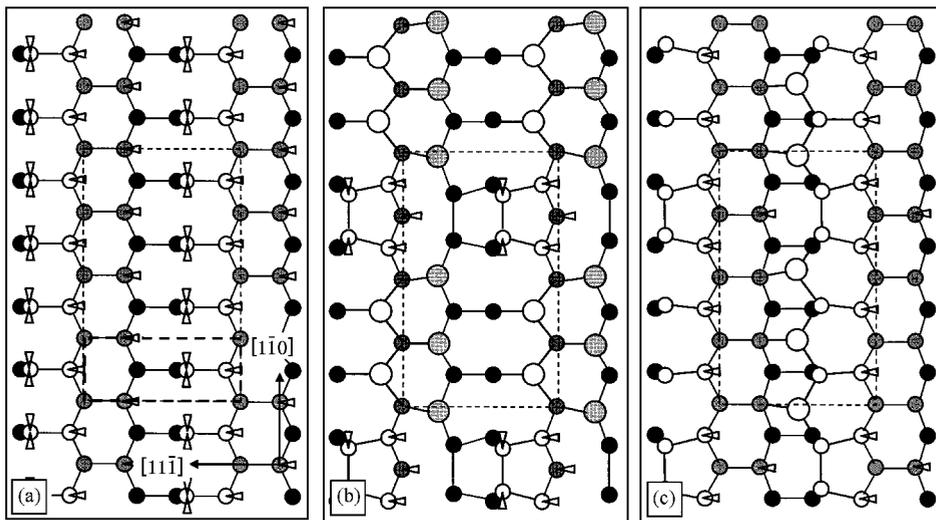


图3 (a) 为理想的 $\text{Ge}(112)$ 表面的示意图, 圆圈表示 Ge 原子, 较暗的原子的位置较低, 实线表示键, 三角形表示悬挂键. 粗、细虚线分别标出表面的一个 1×1 和 4×1 元胞 (b) 为本文提出的 $\text{Ge}(112)(4 \times 1)\text{-In}$ 重构的原子结构模型示意图, 大的圆圈表示 In 原子. (c) 为周期为 4 的台阶边沿/空位模型^[11]的示意图

在看结构模型之前,我们先来看一下理想的 Ge (112)表面.图 3(a)为是它的结构示意图.理想的 Ge (112)表面可以看作由被等间隔的(100)台阶隔开的微小的(111)平台构成,它也可以看作由三种平行于 $[1\bar{1}0]$ 方向的原子列(以下分别称为列 I,列 II 和列 III,见图 3)构成.在列 I 上的每个 Ge 原子有两个悬挂键(dangling bond, DB),列 II 和列 III 上的每个 Ge 原子各有一个悬挂键.列 I 和列 II 高度相同,列 III 则要低一些.在图 3(a)中,一个 1×1 元胞和一个 4×1 元胞分别用粗的和细的虚线标出.在图 3(b)所示的原子结构模型中,每个 4×1 元胞里有 5 个 In 原子,相当于 $5/12$ 单层.其中,3 个 In 原子占据列 III 上的替代位,另外两个 In 原子则占据较高的列 I 和列 II 上的增原子位.列 I 上剩下的两个 Ge 原子形成二聚体以减少一个悬挂键,这个二聚体加上列 II 上相邻的两个 Ge 原子又构成一个四聚体.列 III 上未被 In 原子替代的那个 Ge 原子被移走了,剩下一个空位,它两边的两个 Ge 原子之间产生一个新的键形成一个二聚体.

因为这个模型是在最近发现的稳定 III/IV 界面的三条共同要素^[22]的指导下提出的,为方便读者,我们复述这三条共同要素如下:1) III 族金属原子趋向与衬底形成 sp^2 型键;2)金属原子经常占据替代位,因为它们在替代位只会产生压应力;当金属占据增原子位而又不产生张应力时,它们也有可能选择这种位置;3)为了更好地消除由金属原子引入的局部应力,表面总会保留一些不饱和的悬挂键.下面,我们给出支持这个模型的理由.首先,空态图中亮列上的两个突起应当是两个 In 原子.对稳定 III/IV 界面的大量理论^[23]和实验^[2,3,5,6,13,24-26]研究都表明,在亚单层覆盖度下,III 族金属原子形成类似 sp^2 杂化的键与衬底结合,从而在表面的金属原子上方有一个局域的空态.这两个突起在空态图上比较显著,在占有态图上则不明显,说明主要是局域的空态,因而对应着两个 In 原子.其次,在这个结构模型中 Ge 四聚体和二聚体的出现是可以理解的.清洁的 Si(113)(3×2)表面^[27]和 Si(114)(2×1)^[28]表面都是高度稳定的, Si 四聚体是这两个表面重构的重要结构单元, Si 二聚体则是被普遍接受的 Si(111) 7×7 重构的(dimer-adatom-stacking fault(DAS))模型^[29]的重要组成部分.所以,四聚体和二聚体这两种构形都应当是在能量上比较有利的.别人的研究^[13,25,26]表明,在稳定的 III/IV 界面,表面上的 IV 族

半导体原子方有局域的占有态.在我们这里,占有态图中最显著的鼓包在空态图中要弱得多,说明鼓包主要是局域的占有态,所以应当是 Ge 原子形成的团簇.而且,在以前的对 In 与半导体界面的研究^[3,8,14,19]中从未见过 In 原子出现在四聚体和这种二聚体的构形中.第三,暗列上的三个原子应该都是 In 原子.在 STM 图象(图 2)中,除了由于 Ge 四聚体中的弛豫和相应的电荷转移造成的一些不对称(下面还将论及这一点)之外,暗列上相邻的两个凹陷之间没有什么反差,这说明暗列上应当是同一种原子,即都是 In 或都是 Ge.否则,如果它们是不同种原子,即既有 In 也有 Ge,由于局域在他们上方的电子态截然相反,它们之间是应当有反差的.况且,暗列上 Ge 二聚体的存在说明沿着列的方向(即 $[1\bar{1}0]$ 方向)有压应力,这个压应力只能由较大的 In 原子替代 Ge 原子并且向下弛豫产生.第四,这个原子结构模型可以非常有效地消除应力.沿 $[1\bar{1}0]$ 方向,暗列上的压应力基本上被 Ge 二聚体消除了,亮列上的压应力则主要被 Ge 四聚体消除了.虽然亮列上的两个 In 增原子可能会产生沿 $[11\bar{1}]$ 方向的张应力,但是这张应力大部分都被那三个 In 替代原子产生的沿此方向的压应力抵消了.此外,这个结构模型在每个 4×1 元胞保留了五个悬挂键,相应的悬挂键密度为 3.2 DB/nm^2 .注意到 Si(001)和 Si(111)表面的悬挂键密度分别为 6.8 和 3.0 DB/nm^2 ,这是相当小的.最后,我们给出排除台阶边沿/空位模型的理由.这个台阶边沿/空位模型是为了解释 Al/Si(112)和 Ga/Si(112)界面的重构而提出的^[11],并且被后来的研究肯定对于 Ga/Si(112)界面是正确的^[12,13].一个周期为 4 的台阶边沿/空位模型在每个 4×1 元胞里有 3 个 In 增原子和一个空位沿着台阶边沿排列,如图 3(c)所示.根据前面所论述的稳定的亚单层 III/IV 界面的电子结构和文献[13]中 Ga/Si(112)界面的 STM 图象,这个模型所对应的空态图上每个 4×1 元胞里应当有三个等间距的突起和一个弱鼓包沿着台阶边沿排列.这与实际观察到的 STM 图象不符.所以,这个台阶边沿/空位模型被排除了.

前面的讨论已经说明,这个模型与原子图象以及 STM 图象中的主要特点(鼓包、突起和凹陷)是相符的,这可以从图 2(b),图 2(c),图 2(d)中的图象和模型表层的原子彼此符合看出来.仔细观察图 2(b)和图 2(c)可以进一步看出,这两个图都有些偏离模型所具有的沿 $[11\bar{1}]$ 方向的镜面对称,而且偏离的

方向正好相反:在图 2(b)中,凹陷偏向 $[\bar{1}10]$ 方向,鼓包略微偏向 $[\bar{1}10]$ 方向;在图 2(c)中,凹陷偏向 $[\bar{1}10]$ 方向,鼓包(较弱)略微偏向 $[\bar{1}10]$ 方向,并且亮列上这边的这个鼓包更突出一些.前面说过,STM 图象包含有表面的形貌和电子态两方面的贡献.我们分析图 2(b)和图 2(c)对于镜面对称的偏离主要是由电子态的贡献造成的.在前面讨论模型的时候,我们没有考虑列 I 上四聚体的弛豫.我们注意到,在清洁 $\text{Si}(001)$ 和 $\text{Ge}(001)$ 表面的基态, Si 二聚体和 Ge 二聚体都是不对称,即二聚体中的一个原子较低而另

一个原子较高,同时伴随有电荷从较低的转移到较高的原子上.我们认为,在这里,Ge 四聚体中的二聚体也有这种原子高低的不同和随之而来的电荷转移,使得四聚体上空态略微偏向 $[\bar{1}10]$ 方向而占有态则略微偏向相反的方向,从而造成 STM 图象对于镜面对称的偏离.在平均以后,这两个相反方向的偏离相互抵消,所以原子图象(图 2(d))又是沿着 $[\bar{1}11]$ 方向的镜面对称.这进一步说明,我们的模型可以很好地解释观察到的 STM 图象.

表 1 稳定 III/IV(112)界面的重构和吸附位置的比较

	清洁表面	Al	Ga	In
$\text{Si}(112)$	小面化 ^[21]	5×1 和 6×1 ^[10] 台阶边沿位	$N \times 1 (N=4-7)$ ^[13] 台阶边沿位	4×1 和 7×1 ^[14] 增原子位与替代位
$\text{Ge}(112)$	小面化 ^[16]	未知 ¹⁾	未知 ¹⁾	4×1 增原子位与替代位

注:1)根据已有的信息,我们推测 Al 原子和 Ga 原子在 $\text{Ge}(112)$ 表面很可能吸附在台阶边沿位并产生周期更长的 $N \times 1$ 重构,即形成更长的纳米线,见正文.

最后,我们比较 Al, Ga 和 In 原子在 $\text{Si}(112)$ 和 $\text{Ge}(112)$ 表面的吸附位置. Al 原子和 Ga 原子在 $\text{Si}(112)(N \times 1)\text{-Al}(N=5,6)$ ^[11] 和 $\text{Si}(112)(N \times 1)\text{-Ga}(N=4-7)$ ^[11-13] 重构里都占据台阶边沿位,而 In 原子在 $\text{Si}(112)(7 \times 1)\text{-In}$ ^[14] 和 $\text{Ge}(112)(4 \times 1)\text{-In}$ 重构里则都占据增原子位和替代位.我们提出,这个不同是 Al, Ga, In, Si 和 Ge 等元素的原子具有不同的共价键键长的结果.(我们注意到,在文献 [22] 中,稳定 III/IV(103), III/IV(100) 和 III/IV(113) 界面的几种不同的重构和小面化已经被归因于相应的原子的不同的共价键键长.) Al 原子和 Ga 原子的共价键键长都为 0.125nm, In 原子为 0.150nm, Si 原子为 0.117nm, Ge 原子为 0.122nm. 值得注意的是, In 原子的键长比 Al 原子和 Ga 原子的大 0.025nm, 或 20%, 而 Ge 原子的键长只比 Si 原子的大 0.005nm, 或 4%. 于是, Al 原子和 Ga 原子倾向于吸附在 $\text{Si}(112)$ 表面的台阶边沿位,因为它们在这里可以与衬底形成更强的键,并且产生的压应力可以被空位很有效地消除;另一方面,因为 In 原子要大得多,它们在 $\text{Si}(112)$ 表面或 $\text{Ge}(112)$ 表面占据台阶边沿位都会产生太大的压应力,因而只能吸附在平台上的增原子位和替代位.这有可能意味着,因为 Ge 的晶格略大于 Si, Al 原子和 Ga 原子在 $\text{Ge}(112)$ 表面的台阶边沿所引起的压应力会略小一些,从而形成的纳米线也会更长

一些.用实验来检验这一想法将是一个有意思的工作.我们把稳定 III/IV(112)界面的共同和不同之处总结在表 1 中.

4 结 论

我们用 LEED 和 STM 研究了 $\text{Ge}(112)(4 \times 1)\text{-In}$ 重构.在蒸镀大约一单层 In 并且在 460°C 退火以后,清洁 $\text{Ge}(112)$ 表面的小面化被消除了,变得在原子尺度是平滑的并且形成 4×1 重构.这与 $\text{Al/Si}(112)$, $\text{Ga/Si}(112)$ 和 $\text{In/Si}(112)$ 界面相似.根据观察到的随偏压极性不同而明显不同的 STM 图象和亚单层 III/IV 界面共同的电子结构,我们为这个 $\text{Ge}(112)(4 \times 1)\text{-In}$ 重构提出了一个原子结构模型供进一步研究参考.在这个模型中, In 原子在这个重构中占据增原子位与替代位,而非台阶边沿位.这结果与 In 原子在 $\text{Si}(112)(7 \times 1)\text{-In}$ 重构中的吸附位置一致,但与 Al 原子、Ga 原子分别在 $\text{Al/Si}(112)$ 界面和 $\text{Ga/Si}(112)$ 界面占据台阶边沿位并形成纳米线不同.我们提出, In 原子吸附位置不同于 Al 原子和 Ga 原子的主要原因是 In 原子具有较长的共价键键长.我们进一步推测, Al 原子和 Ga 原子有可能在 $\text{Ge}(112)$ 表面占据台阶边沿位并形成纳米线,而且其长度比它们在 $\text{Si}(112)$ 表面所形成的更长.

- [1] A. V. Zotov *et al.*, *Surf. Sci.*, **316**(1994), L1034 ; M. Y. Lai, Y. L. Wang, *Phys. Rev.*, **B60**(1999), 1764 ; P. Molinàs-Mata *et al.*, *Surf. Sci.*, **317**(1994), 378.
- [2] A. A. Saranin *et al.*, *Surf. Sci.*, **450**(2000), 34.
- [3] Z. Gai *et al.*, *Phys. Rev.*, **B53**(1996), 1539.
- [4] Y. Oshima *et al.*, *Surf. Sci.*, **465**(2000), 81 ; A. A. Baski *et al.*, *J. Vac. Sci. Techn.*, **A8**(1990), 245 ; Z. Gai *et al.*, *Surf. Sci.*, **405**(1998), L484.
- [5] O. Bunk *et al.*, *Appl. Surf. Sci.*, **123**(1998), 104.
- [6] G. Falkenberg *et al.*, *Surf. Sci.*, **371**(1997), 86.
- [7] R. G. Zhao *et al.*, *Surf. Sci.*, **318**(1994), L1206.
- [8] Z. Gai *et al.*, *Surf. Sci.*, **338**(1995), L851.
- [9] P. M. Petroff, *Ultramicroscopy*, **31**(1989), 67.
- [10] T. M. Jung *et al.*, *Surf. Sci.*, **289**(1993), L577.
- [11] T. M. Jung *et al.*, *J. Vac. Sci. Techn.*, **A12**(1994), 1838.
- [12] J. E. Yater *et al.*, *Phys. Rev.*, **B51**(1995), 7365.
- [13] A. A. Baski *et al.*, *Surf. Sci.*, **423**(1999), L265.
- [14] Z. Gai *et al.*, *Phys. Rev.*, **B61**(2000), 9928.
- [15] Z. Gai *et al.*, *Phys. Rev.*, **B59**(1999), 15230 ; *Phys. Rev.*, **B56**(1997), 12303 ; *Surf. Sci.*, **383**(1997), 1 ; *Phys. Rev.*, **B53**(1996), 1042.
- [16] Z. Gai *et al.*, *Phys. Rev.*, **B58**(1998), 4572.
- [17] Z. Gai *et al.*, *Phys. Rev.*, **B54**(1996), 8593.
- [18] Z. Gai *et al.*, *Phys. Rev.*, **B56**(1997), 12308 ; *ibid.*, **B57**(1998), R6795 ; *ibid.*, **B57**(1998) R15060 ; *ibid.*, **B58**(1998), R4223.
- [19] Z. Gai *et al.*, *Surf. Rev. & Lett.*, **6**(1999), 405.
- [20] H. Ji *et al.*, *Surf. Sci.*, **371**(1997), 349.
- [21] A. A. Baski *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **74**(1995), 956.
- [22] H. Ji *et al.*, *Surf. Sci.*, **384**(1997), 276.
- [23] J. E. Northrup, *Phys. Rev. Lett.*, **53**(1984), 683 ; J. E. Northrup, *Phys. Rev. Lett.*, **57**(1986), 154 ; J. R. Chelikowsky, *Phys. Rev.*, **B16**(1977), 3618 ; J. M. Ricart *et al.*, *Phys. Rev.*, **B42**(1990), 5212.
- [24] R. J. Hamers, *Phys. Rev.*, **B40**(1989), 1657.
- [25] R. J. Hamers, J. E. Demuth, *Phys. Rev. Lett.*, **60**(1988), 2527 ; R. J. Hamers, *J. Vac. Sci. Techn.*, **B6**(1988), 1462 ; J. Nogami *et al.*, *J. Vac. Sci. Techn.*, **B6**(1988), 1479 ; F. Owman, P. Mårtensson, *Surf. Sci.*, **359**(1996), 122.
- [26] A. A. Saranin *et al.*, *Surf. Sci.*, **398**(1998), 60 ; Z. C. Dong *et al.*, *Surf. Sci.*, **380**(1997), 23.
- [27] J. Dabrowski *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **73**(1994), 1660.
- [28] S. C. Erwin *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **77**(1996), 687.
- [29] K. Takayanagi *et al.*, *J. Vac. Sci. Techn.*, **A3**(1985), 1502.

ATOMIC STRUCTURE OF THE Ge(112)(4 × 1)-In RECONSTRUCTION*

TU XIU-WEN GAI ZHENG

(*Department of Physics and State Key Laboratory for Artificial Microstructures and Mesoscopic Physics ,
Peking University , Beijing 100871 , China*)

(Received 2 April 2001)

ABSTRACT

We have studied the Ge(112)(4 × 1)-In reconstruction with scanning tunneling microscopy (STM). Based on our bias-dependent STM images and the characteristic electronic structure of stable submonolayer group-III-metal/group-IV-semiconductor interfaces , we propose an atomic model of this reconstruction for further investigation . The adsorption sites of In atoms are the same as In atoms ' adsorption sites in the Si(112)(7 × 1)-In reconstruction , but are different from the adsorption sites of Al and Ga atoms on the Si(112) surface . We suggest that this difference in adsorption sites is mainly due to the longer covalent bond length of In atoms . We further propose that , due to the smaller misfit , Al and Ga atoms may form longer nano-wires along the step edges on the Ge(112) surface .

Keywords : surface structure , indium , germanium , scanning tunneling microscope (STM)

PACC : 6848 , 6820 , 6116P

* Project supported by the National Natural Science Foundations of China (Grant No.19634010).