

Surface crystallography and lattice dynamics : GaAs(110) VS Si(111) 2x1

Autor(en): **Santini, P. / Ruggerone, P. / Miglio, L.**

Objekttyp: **Article**

Zeitschrift: **Helvetica Physica Acta**

Band (Jahr): **62 (1989)**

Heft 6-7

PDF erstellt am: **20.04.2024**

Persistenter Link: <https://doi.org/10.5169/seals-116120>

Nutzungsbedingungen

Die ETH-Bibliothek ist Anbieterin der digitalisierten Zeitschriften. Sie besitzt keine Urheberrechte an den Inhalten der Zeitschriften. Die Rechte liegen in der Regel bei den Herausgebern.

Die auf der Plattform e-periodica veröffentlichten Dokumente stehen für nicht-kommerzielle Zwecke in Lehre und Forschung sowie für die private Nutzung frei zur Verfügung. Einzelne Dateien oder Ausdrucke aus diesem Angebot können zusammen mit diesen Nutzungsbedingungen und den korrekten Herkunftsbezeichnungen weitergegeben werden.

Das Veröffentlichen von Bildern in Print- und Online-Publikationen ist nur mit vorheriger Genehmigung der Rechteinhaber erlaubt. Die systematische Speicherung von Teilen des elektronischen Angebots auf anderen Servern bedarf ebenfalls des schriftlichen Einverständnisses der Rechteinhaber.

Haftungsausschluss

Alle Angaben erfolgen ohne Gewähr für Vollständigkeit oder Richtigkeit. Es wird keine Haftung übernommen für Schäden durch die Verwendung von Informationen aus diesem Online-Angebot oder durch das Fehlen von Informationen. Dies gilt auch für Inhalte Dritter, die über dieses Angebot zugänglich sind.

SURFACE CRYSTALLOGRAPHY AND LATTICE DYNAMICS:
GaAs(110) VS Si(111) 2x1

P. Santini, P. Ruggerone, L. Miglio and G. Benedek,
Dipartimento di Fisica dell'Università, via Celoria 16,
I-20133 Milano, Italy

The GaAs(110) surface is the most extensively studied one for heteropolar semiconductors: a well settled scheme for its relaxation is available¹ which consists in a nearly bond length conserving rotation of the surface chains by a tilt angle of about 30°. This configuration originates a striking crystallographic similarity between this surface and the Si(111) 2x1, where tilted chains are produced by the 2x1 reconstruction².

We extend the bond-charge-model approach which we used for Si(111) 2x1³ to calculate the lattice dynamics of a 23 layers GaAs(110) slab: The cores positions at the two surfaces are modified according to the relaxation pattern, and the surface bond charges are positioned where the charge density maps display their maxima. Static equilibrium conditions are imposed on the surface cores and bond charges and no fitting procedure is here used.

The calculated surface phonons (see fig.1) show a quite good agreement with the experimental data⁴⁻⁷, confirming the reliability of our approach. However, we are here interested just in comparing the dispersion curves of GaAs(110) to the ones of Si(111) 2x1 (see fig.1 and fig.2). In both systems a 10 meV flat branch is present, consisting in a normal-to-the-surface vibration of the topmost surface chains: Its frequency position at zone border with respect to the Rayleigh wave is determined by the chain tilt. A striking similarity in the dispersion relations is also found for the optical modes (longitudinal vibrations of the topmost chains) starting in Γ at 24.9 meV in GaAs and 52.5 meV in Si: In our opinion this is actually a dynamical fingerprint of the surface chain configuration.

Finally, the different substrate orientations have a remarkable effect on the surface modes that are deeply penetrating into the bulk. The high-energy modes above the bulk bands in Si, for instance, involve vibrations of stiff sub-surface structures (five-fold rings): They are missing in the GaAs case since only regular six-fold structures are here present.

References

1. G. Quian, R.M. Martin and D.J. Chadi, PRB 37, 1303 (1988).
2. K.C. Pandey, PRL 49, 223 (1982).
3. L. Miglio, P. Santini, P. Ruggerone and G. Benedek, Surf. Sci. 211, 335 (1989).

4. U. Harten and J.P. Toennies, *Europhys. Lett.* 4, 833 (1987).
5. R.B. Doak and D.B. Nguyen, *J. Electr. Spectr.* 44, 205 (1987).
6. U.del Pennino, M.G.Betti, C.Mariani and I.Abbati, *Surf.Sci.* 211 (1989).
7. P.Santini, L. Miglio and G. Benedek, U. Harten, P. Ruggerone and J.P. Toennies, to be published.

