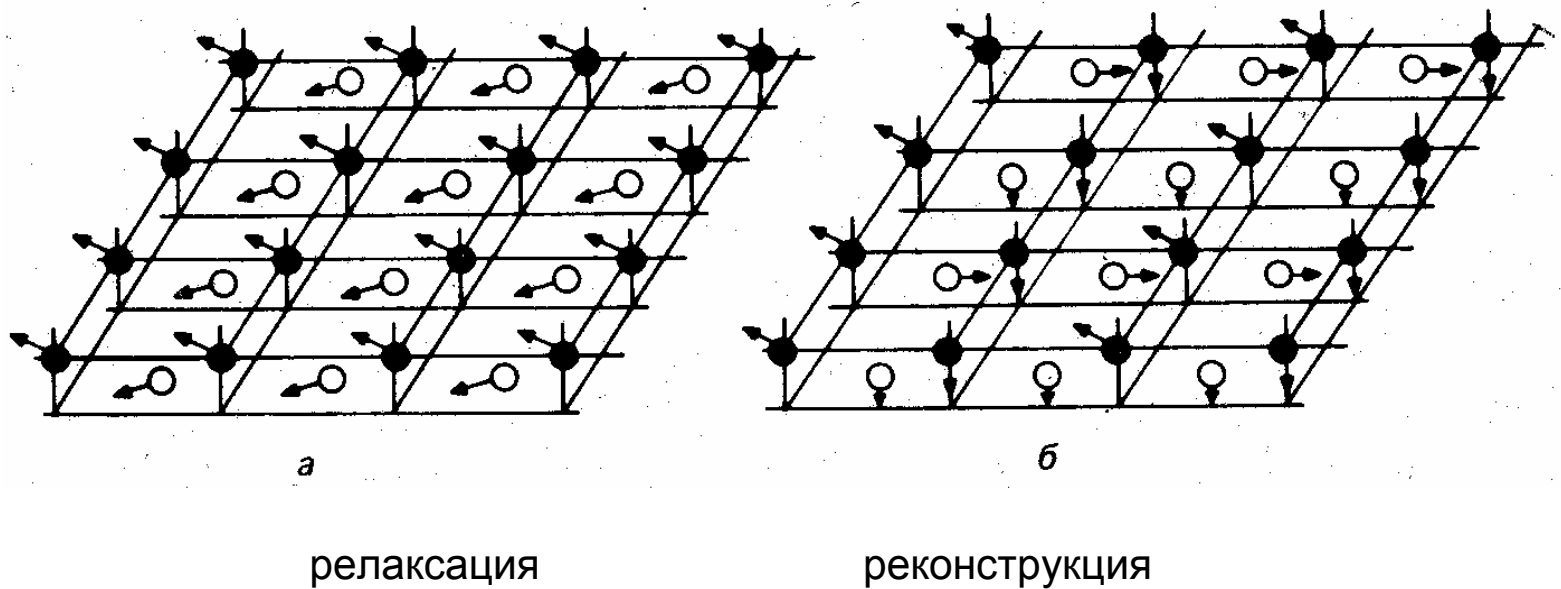


**КВАДРАТИЧНЫЕ НЕЛИНЕЙНО-ОПТИЧЕСКИЕ ЭФФЕКТЫ
на реконструированных и релаксированных поверхностях
полупроводников**

Понятие о реконструированных и релаксированных поверхностях



признак – сохранение или изменение трансляционной симметрии
поверхностных слоев

Типы и классификация реконструированных поверхностей

$\mathbf{f}_1, \mathbf{f}_2$ - векторы решетки идеальной поверхности

вектора решетки реконструированной поверхности $\mathbf{f}'_1, \mathbf{f}'_2$ задаются в виде:

$$\begin{aligned}\mathbf{f}'_1 &= q_{11}\mathbf{f}_1 + q_{12}\mathbf{f}_2, \\ \mathbf{f}'_2 &= q_{21}\mathbf{f}_1 + q_{22}\mathbf{f}_2\end{aligned}$$

Q - матрица коэффициентов q_{ij} задает тип реконструкции

если $|\det Q|$ - иррациональное число – решетка несоразмерна исходной

если $|\det Q|$ - рациональное число – решетка соразмерна исходной

Обозначения типа реконструированных поверхностей

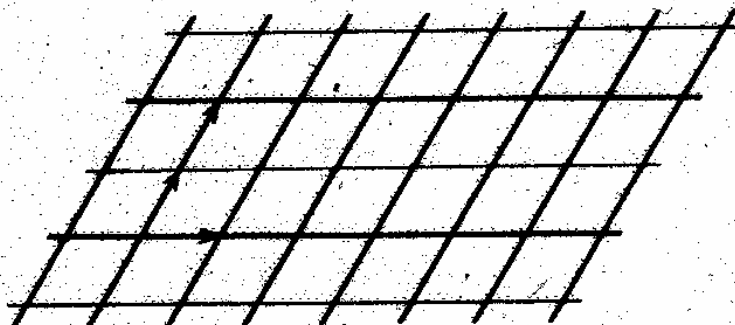
если $q_{12} = q_{21} = 0$, то

$$\mathbf{f}'_1 = n\mathbf{f}_1, \mathbf{f}'_2 = m\mathbf{f}_2 \quad - \text{реконструкция (n x m)}$$

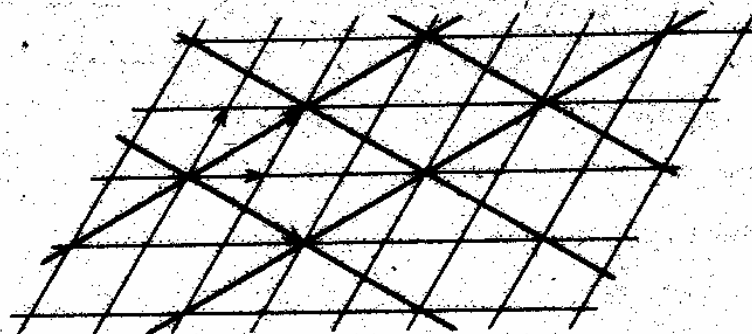
если Q недиагональна, то

$$\frac{|\mathbf{f}'_1|}{|\mathbf{f}_1|} \times \frac{|\mathbf{f}'_2|}{|\mathbf{f}_2|} = \alpha$$

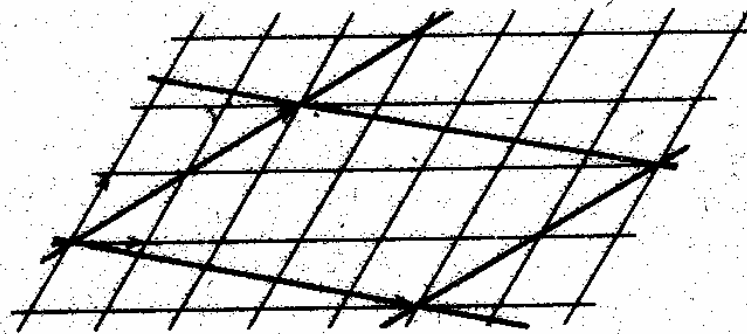
Примеры реконструированных поверхностей



а



б



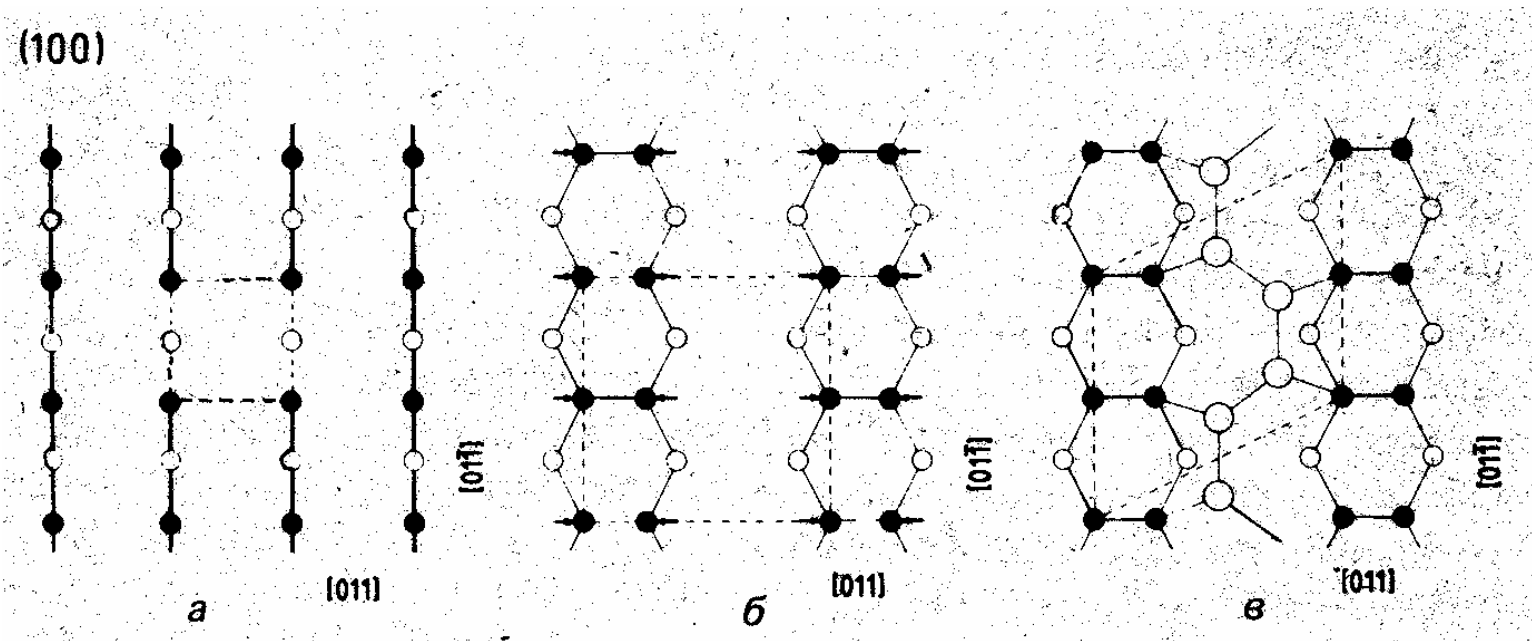
в

(а) – реконструкция (1 x 2)

(б) - реконструкция $\sqrt{3} \times \sqrt{3} - 30^0$

(в) – несоразмерная реконструкция

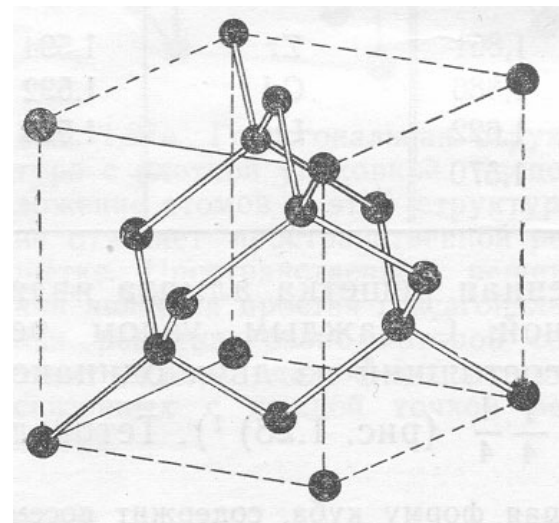
Реконструкция поверхностей кремния



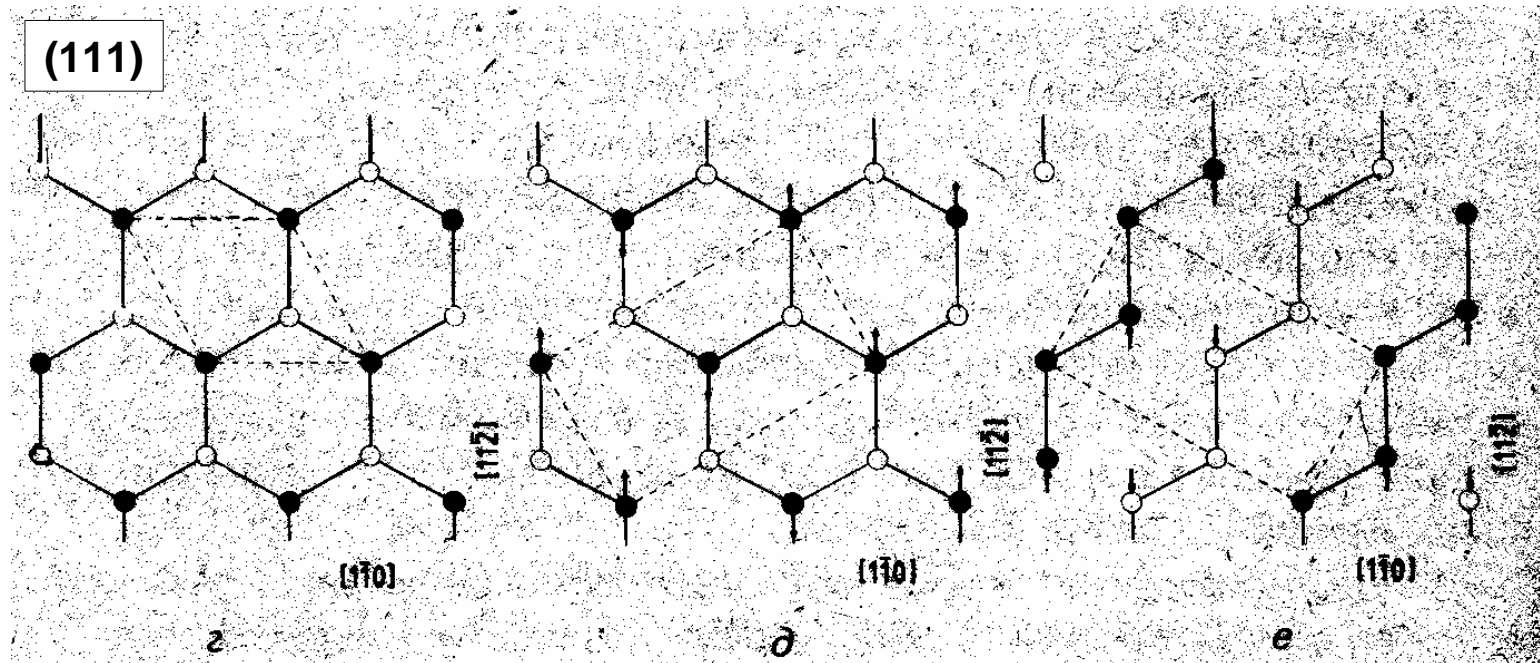
(a) – идеальная поверхность

(б) - реконструкция 2 x 1

(в) –реконструкция 4 x 2



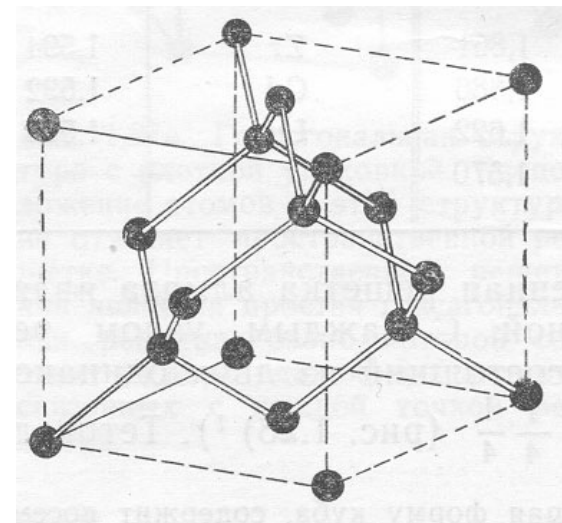
Реконструкция поверхностей кремния



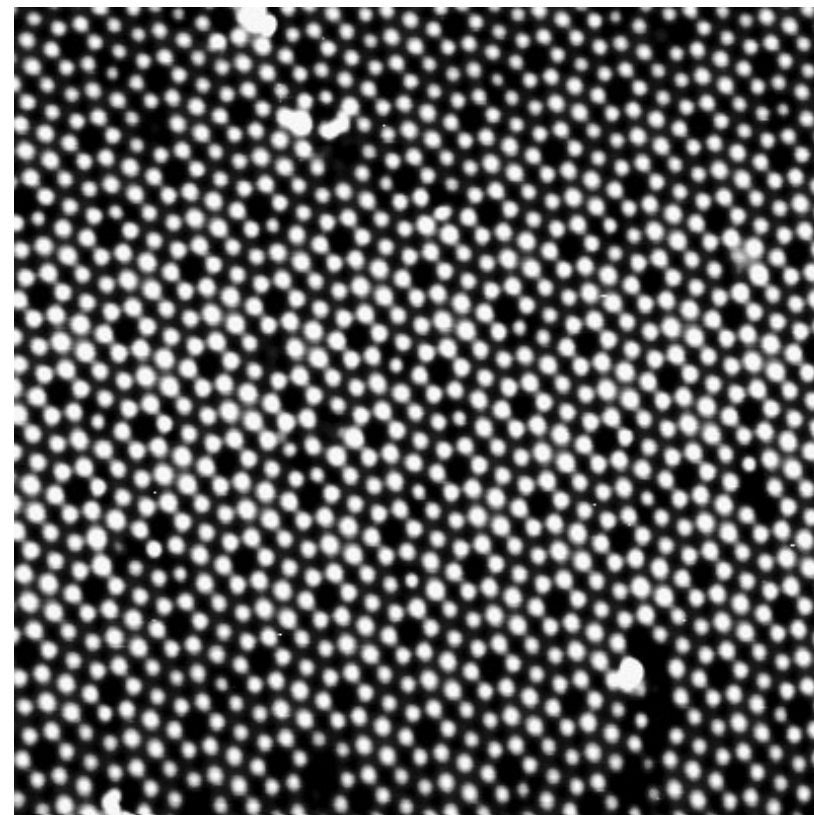
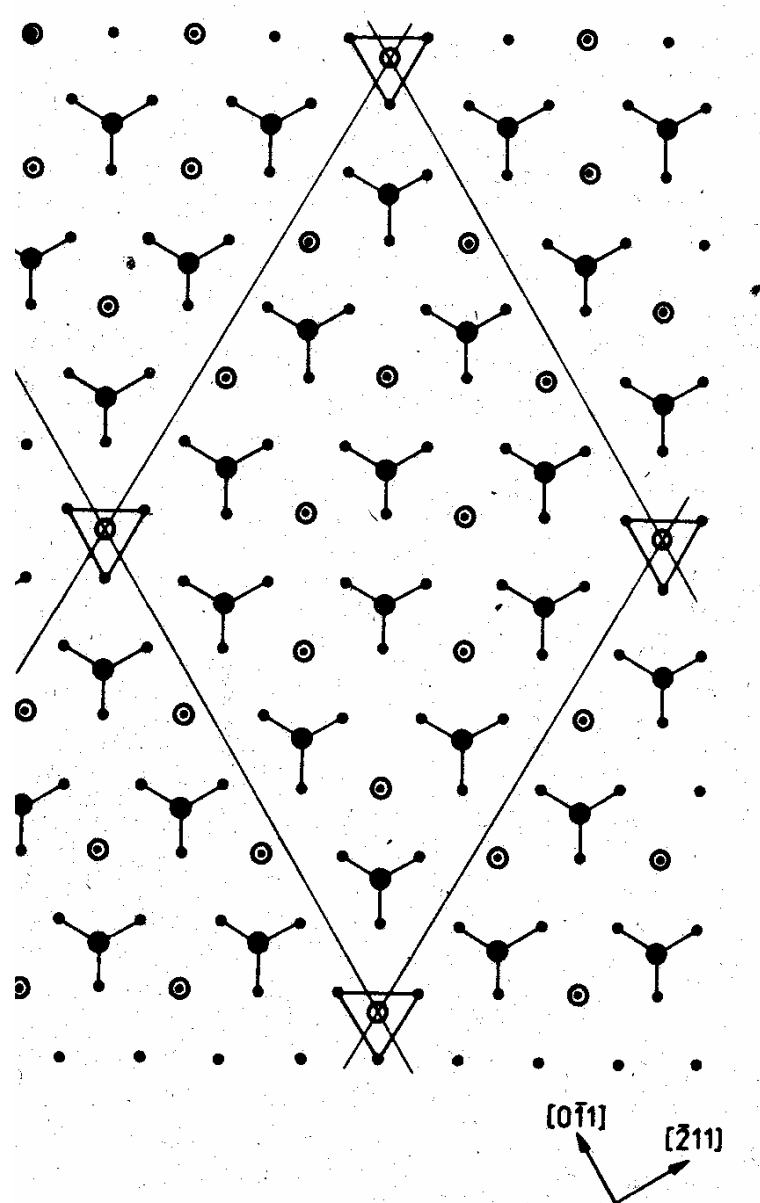
(г) – идеальная поверхность

(д) - реконструкция 2 x 1

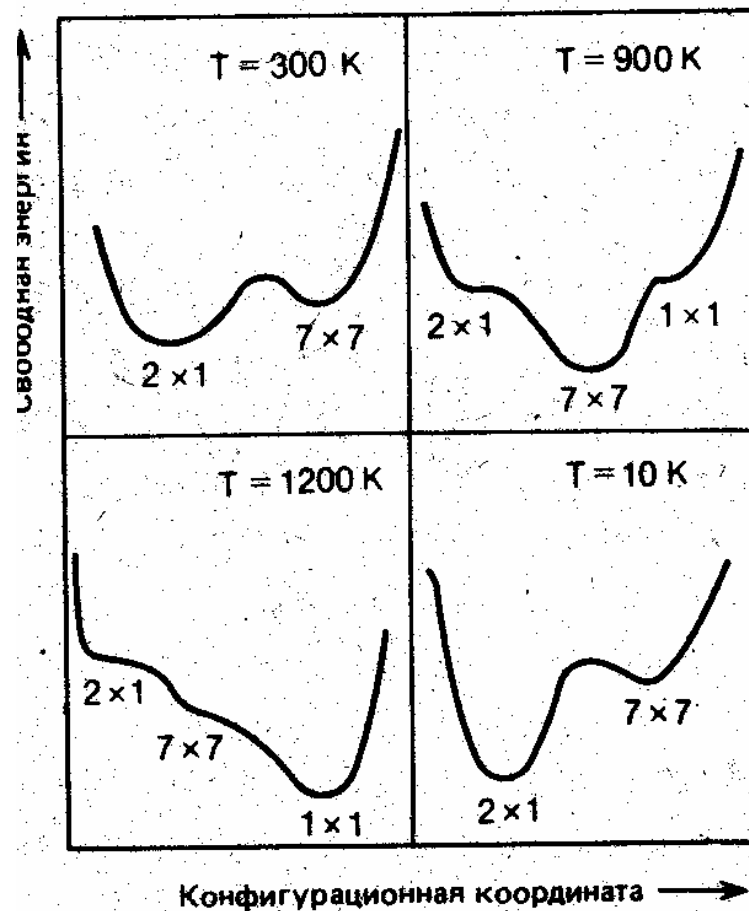
(е) – реконструкция 2 x 1



Реконструкция (7 x 7) поверхности кремния



Температурная зависимость реконструкции поверхности кремния



Генерация второй гармоники от реконструированных поверхностей кремния

В системе координат, связанных с поверхности Si (111) : $\mathbf{x} \parallel [2\bar{1}\bar{1}]$, $\mathbf{y} \parallel [01\bar{1}]$ $\mathbf{z} \parallel [111]$
ненулевые компоненты поверхностной квадратичной восприимчивости
для исходной поверхности Si (111) :

$$\chi_{zzz}^{(2)},$$

$$\chi_{zxx}^{(2)} = \chi_{zyy}^{(2)},$$

$$\chi_{xxz}^{(2)} = \chi_{yyz}^{(2)},$$

$$\chi_{xxx}^{(2)} = -\chi_{xyy}^{(2)} = -\chi_{yxy}^{(2)}$$

для поверхности Si(111) 2 x 1: $\chi_{xxx}^{(2)}$, $\chi_{xyy}^{(2)}$, $\chi_{yxy}^{(2)}$ - нет одной плоскости симметрии

для поверхности Si (111) 7 x 7: $\chi_{xxx}^{(2)} = -\chi_{xyy}^{(2)} = -\chi_{yxy}^{(2)}$

надо выбрать геометрию эксперимента,
чувствующего разность между x и y

Генерация второй гармоники от реконструированных поверхностей кремния

Под нормалью к поверхности, зависимости интенсивности х- и у- поляризованных излучений ВГ от угла поворота поляризации накачки, имеют вид:

$$T_{\alpha\beta} = \begin{pmatrix} \cos \psi & -\sin \psi & 0 \\ \sin \psi & \cos \psi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned} I_x^{2\omega} |_{2 \times 1} &= A |\chi_{xxx}^{(2)} \cos^2 \psi + \chi_{xyy}^{(2)} \sin^2 \psi|^2, \\ I_y^{2\omega} |_{2 \times 1} &= A |\chi_{yyx}^{(2)}|^2 \sin^2 2\psi, \\ I_x^{2\omega} |_{7 \times 7} &= A |\chi_{xxx}^{(2)}|^2 \cos^2 2\psi, \\ I_y^{2\omega} |_{7 \times 7} &= A |\chi_{yyx}^{(2)}|^2 \sin^2 2\psi \end{aligned}$$



$$\begin{aligned} I_y^{2\omega} |_{2 \times 1} &= I_y^{2\omega} |_{7 \times 7}, \\ I_x^{2\omega} |_{2 \times 1} &\neq I_x^{2\omega} |_{7 \times 7} \end{aligned}$$

Генерация второй гармоники от реконструированной поверхности кремния (111)

VOLUME 54, NUMBER 1

PHYSICAL REVIEW LETTERS

7 JANUARY 1985

Study of Si(111) Surfaces by Optical Second-Harmonic Generation: Reconstruction and Surface Phase Transformation

T. F. Heinz, M. M. T. Loy, and W. A. Thompson

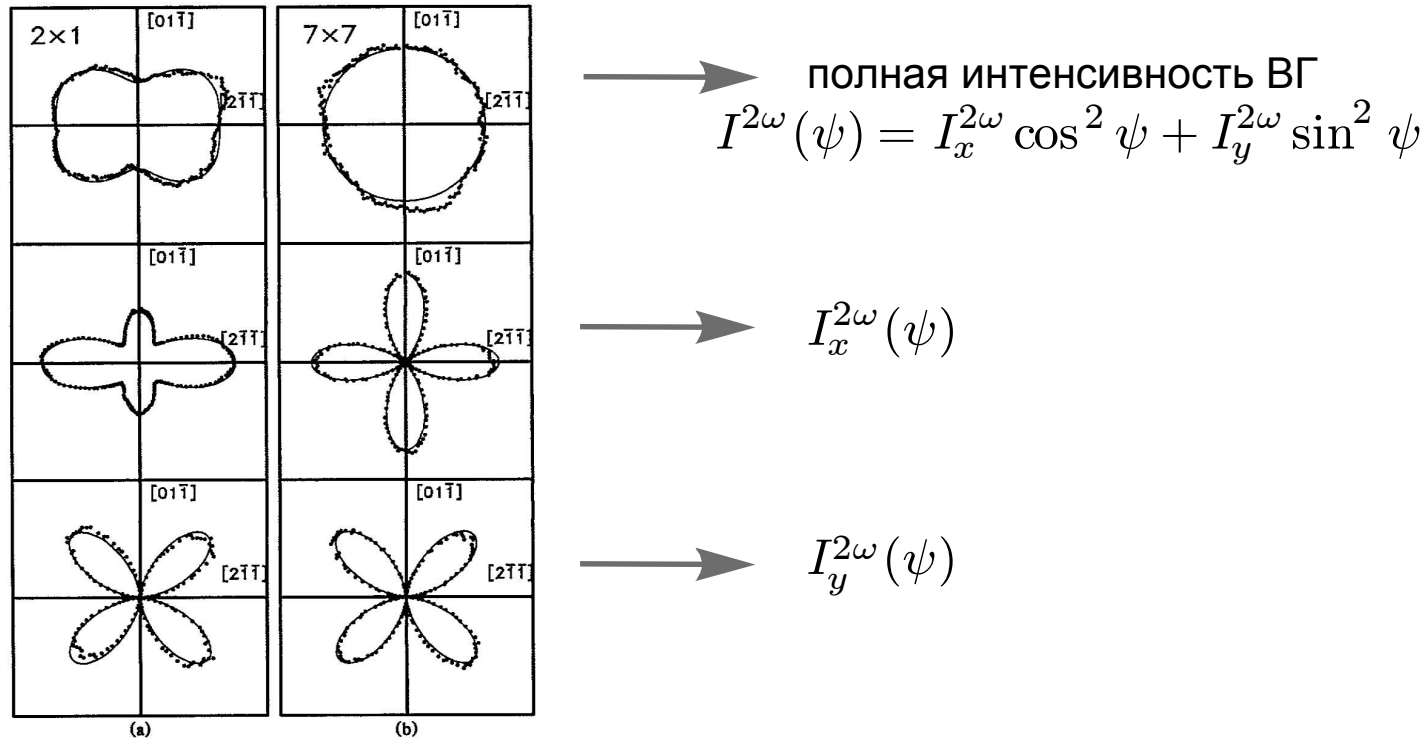


FIG. 1. SH intensity from (a) Si(111) 2×1 and (b) Si(111) 7×7 surfaces as a function of the polarization of the normally incident pump beam. The top panels display the total SH signal; the middle and lower panels show, respectively, the SH signal polarized along the $[2\bar{1}\bar{1}]$ and $[0\bar{1}\bar{1}]$ directions. The dotted curves represent the experimental data, while the solid curves show the result of the symmetry analysis discussed in the text.

Генерация второй гармоники от реконструированной поверхности кремния (111)

можно показать, что при $\psi_1 = 210^\circ$, $\psi_2 = -30^\circ$

интенсивность ВГ $I^{2\omega}|_{7\times 7} = 0$, $I^{2\omega}|_{2\times 1} \neq 0$

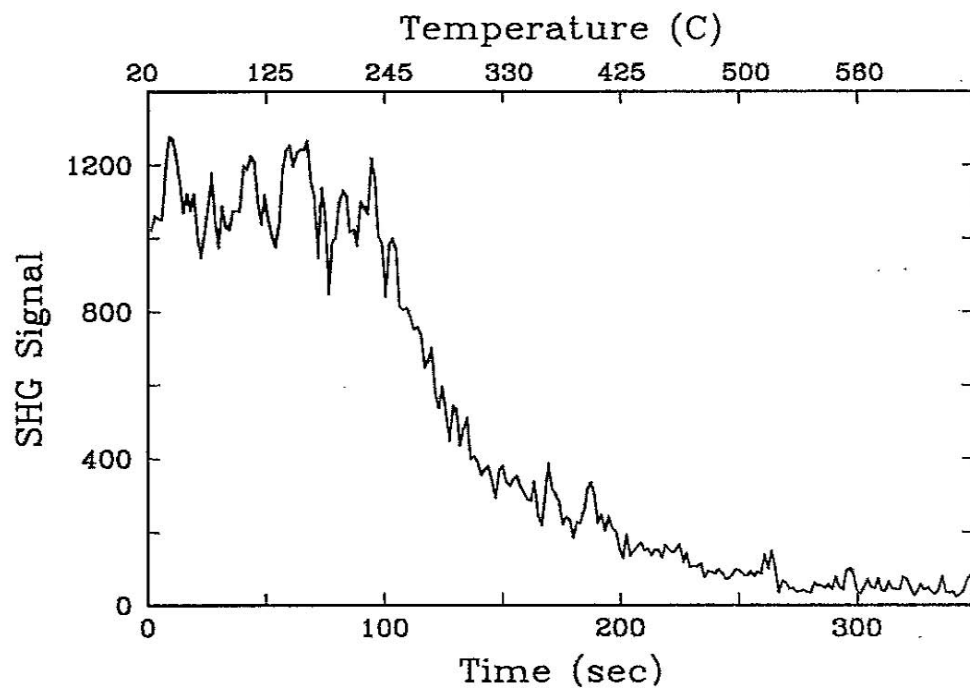


FIG. 2. SH signal monitoring the establishment of a mirror plane during the 2×1 to 7×7 surface phase transformation. The horizontal axis is calibrated both in elapsed time (below) and in sample temperature (above).