

# Зарядовое упорядочение, индуцированное собственными дефектами в субмонослоях типа Sn/Ge(111) со степенью покрытия, близкой к 1/3

© В.Н. Меньшов, В.В. Тугушев

Российский научный центр „Курчатовский институт“,  
123182 Москва, Россия

E-mail: vvtugushev@mail.ru

(Поступила в Редакцию 19 августа 2002 г.

В окончательной редакции 15 декабря 2002 г.)

Предложена термодинамическая модель формирования структуры с волной зарядовой плотности (ВЗП) типа  $(3 \times 3)$ , возникающей на фоне структуры типа  $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})R30^0$  в субмонослое металла IV группы (Sn, Pb), адсорбированного со степенью покрытия  $\approx 1/3$  на поверхности (111) полупроводника (Ge, Si). Расчеты проведены в рамках самосогласованной теории для статических флуктуаций амплитуды параметра порядка. Показано, что низкосимметричная фаза  $(3 \times 3)$  может зародиться на точечных дефектах субмонослоя в виде зарядово-упорядоченных областей конечного радиуса. Рассчитаны пространственная конфигурация ВЗП и ее температурная зависимость. Полученные результаты сопоставляются с экспериментальными данными для системы Sn/Ge(111).

Работа выполнена в рамках научно-исследовательского проекта Минпромнауки РФ по теме „Нанозлектроника“.

Явление реконструкции вида  $(\sqrt{3} \times \sqrt{3}) \rightarrow (3 \times 3)$  в металлических субмонослоях (Pb, Sn), адсорбированных на поверхности (111) алмазоподобных полупроводников (Ge, Si) со степенью покрытия, близкой к 1/3 (см. работы [1,2] и ссылки в них), интенсивно обсуждаются в настоящее время [3,4]. С понижением температуры  $T$  в такой изовалентной системе происходит структурный фазовый переход из фазы  $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})R30^0$  с одним атомом металла в элементарной поверхностной ячейке в фазу  $(3 \times 3)$ , где элементарная ячейка содержит три атома металла, два из которых заряжены положительно и смещены вниз, а один заряжен отрицательно и смещен вверх. Поверхностная  $(3 \times 3)$  структура допускает при  $T = 0$  описание в терминах модели треугольной решетки с волной зарядовой плотности [1], возможные механизмы формирования которой, базирующиеся на учете электронных корреляций в узкой поверхностной зоне, изучались в [1,5]. Согласно этой модели, основное состояние, имеющее  $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$  структуру, вследствие электрон-электронной и (или) электрон-фононной связи неустойчиво относительно перехода в  $(3 \times 3)$  структуру с соответствующим зарядовым перераспределением и изменением электронного спектра. Данная неустойчивость может в принципе усиливаться как из-за нестинга (конгруэнтности) на части поверхности Ферми, так и из-за сингулярности ванхововского типа в плотности электронных состояний вблизи уровня Ферми. Оба этих фактора, способствующих упорядочению поверхностных электронов с образованием волны зарядовой плотности (ВЗП), качественно проанализированы в рамках простейшей модели треугольной решетки в приближении сильной связи [5]. Основной вывод, следующий из рассмотрения [5], состоит в том, что влияние нестинга

на формирование ВЗП сильно зависит от используемой аппроксимации и проявляется при имеющем место в реальных системах уровне заполнения поверхностной зоны, близком к половинному. Последняя ситуация, очевидно, реализуется в структурах с нейтральными слоями адсорбата, где нет значительного перераспределения заряда между поверхностью и объемом полупроводника и где отсутствует допирование поверхности за счет дефектов. Заметим, что численные расчеты поверхностного электронного спектра для рассматриваемых систем показывают отсутствие нестинга при половинном уровне заполнения поверхностной зоны [1,6].

Влияние сингулярности Ван-Хова на формирование ВЗП со структурой  $(3 \times 3)$  почти не зависит от используемого приближения и представляется более значимым. По-видимому, эта сингулярность приводит к тому, что статическая функция отклика  $\chi^0(\mathbf{q})$  для решетки  $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})R30^0$  имеет четко выраженный пик при  $\mathbf{q} \approx \mathbf{P}$ , где  $\mathbf{P}$  — вектор обратной  $(3 \times 3)$  решетки, совпадающий с вектором ГК в зоне Бриллюэна  $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})R30^0$  решетки. Особенность функции  $\chi^0(\mathbf{q})$  становится более сильной, когда уровень Ферми сдвигается слегка вверх по энергии относительно положения, отвечающего половинному заполнению зоны [7], поэтому пренебрежение влиянием допирования на зарядовое упорядочение, строго говоря, несправедливо.

Напомним, что возможность формирования ВЗП в основном состоянии коррелированной электронной системы качественно оценивается с помощью критерия неустойчивости

$$1 - V(\mathbf{q})\chi^0(\mathbf{q}) \leq 0, \quad (1)$$

где  $V(\mathbf{q})$  — эффективный потенциал межэлектронного взаимодействия, вообще говоря, зависящий от волнового

вектора,  $\mathbf{q}$ ,  $\chi^0(\mathbf{q})$  — функция отклика невзаимодействующих электронов при нулевой температуре. Произведение  $V(\mathbf{q})\chi^0(\mathbf{q})$  достигает максимального значения при волновом векторе  $\mathbf{q}_{\max}$ , соответствующем „оптимальной“ (наименьшей по энергии) пространственной структуре ВЗП. Если потенциал  $V(\mathbf{q})$  не зависит от  $\mathbf{q}$ , то, естественно, вектор  $\mathbf{q}_{\max}$  строго соответствует пику функции  $\chi^0(\mathbf{q})$ . Напротив, как впервые отмечено в работе [1], потенциал  $V(\mathbf{q})$  вследствие учета кулоновского взаимодействия между электронами на ближайших узлах треугольной решетки приобретает сильную зависимость от  $\mathbf{q}$  с максимумом на волновом векторе  $\mathbf{P} = (4\pi/3a)\mathbf{e}$ , где  $\mathbf{e}$  — единичный вектор в направлении ГК зоны Бриллюэна поверхностной  $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})R30^0$  решетки с периодом  $a$ . В то же время пик функции  $\chi^0(\mathbf{q})$  не отвечает необходимому требованию для выполнения критерия (1) при  $\mathbf{q} = \mathbf{P}$ . Принимая в расчет данное обстоятельство, авторы работы [5] в рамках микроскопического подхода определили условия возникновения зарядового упорядочения на треугольной решетке и построили основное состояние системы с соизмеримой ВЗП на волновом векторе  $\mathbf{P}$ .

Далее распространим модель [1,5] на область конечных температур, предполагая, что именно наличие максимума потенциала  $V(\mathbf{q})$  при  $\mathbf{q} = \mathbf{P}$  является принципиальной причиной формирования ВЗП со структурой  $(3 \times 3)$ , в то время как особенность в зависимости  $\chi^0(\mathbf{q})$  играет только дополнительную роль. Однако критерий типа (1) может существенным образом модернизироваться благодаря присутствию в системе дефектов. Реально в адсорбированном субмонослое всегда имеет место допирование благодаря неустранимым собственным дефектам (например, это замещающие олово атомы германия или вакансии самого олова в структуре Sn/Ge(111) [7,8]). С понижением температуры такого рода дефекты могут выступать в роли центров формирования локализованных областей новой  $(3 \times 3)$  фазы внутри исходной  $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$  фазы. Цель настоящей работы — построение термодинамической модели фазового перехода с образованием ВЗП на плоскости в присутствии точечных дефектов.

## 1. Модель самосогласованных зарядовых флуктуаций

Выполнение условия зарядовой неустойчивости в зависимости от температуры и степени заполнения зоны определяется в нашей модели только параметрической зависимостью восприимчивости  $\chi^0(\mathbf{q})$  от  $T$  и  $\mu$ , где  $\mu$  есть сдвиг энергии Ферми относительно уровня половинного заполнения. В соответствии с формулой (1) общее выражение для температуры  $T_c^0$  перехода второго рода из  $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$  фазы (при  $T > T_c^0$ ) в низкосимметричную  $(3 \times 3)$  фазу (при  $T < T_c^0$ ) в приближении

среднего поля имеет вид

$$1 - V(\mathbf{P})\chi^0(\mathbf{P}, T_c^0) = 0. \quad (2)$$

Здесь  $\chi^0(\mathbf{P}, T)$  — функция отклика свободных электронов на волновом векторе  $\mathbf{P}$  при температуре  $T$ . В двумерных системах термодинамические флуктуации параметра порядка играют серьезную роль, в значительной мере понижая истинную температуру перехода  $T_c$  по сравнению со среднеполевой величиной  $T_c^0$  ( $T_c \ll T_c^0$ ) [9] и изменяя род фазового перехода со второго на первый [10]. Следовательно, величина  $T_c^0$  должна рассматриваться только как некоторая формальная характеристическая температура, возможно даже превышающая температуру осаждения или плавления адсорбированного субмонослоя в реальных структурах типа Sn/Ge(111).

Для качественных оценок в рамках условия (2) используем простую модель плотности поверхностных электронных состояний  $\rho(\epsilon)$ , предполагая, что основной вклад в температурную зависимость  $\chi^0(\mathbf{P}, T)$  вносит прямоугольный пик  $\rho(\epsilon)$  вблизи уровня Ферми. Если предположить отсутствие нестинга в электронном спектре  $\epsilon(\mathbf{k})$ , то разница  $|\epsilon(\mathbf{k}) - \epsilon(\mathbf{k} + \mathbf{P})|$ , будет порядка полуширины зоны  $W$  при всех  $\mathbf{k}$  вблизи поверхности Ферми. Поскольку в области рассматриваемых температур выполняется неравенство  $T \ll W$  ( $W \approx 0.1-0.3$  eV,  $T \leq 300$  K), справедливо разложение

$$\chi^0(\mathbf{P}, T) \approx \chi^0(\mathbf{P}) - \Theta T^2, \quad (3)$$

где  $\Theta \sim \bar{\rho}W^{-2}$ ,  $\bar{\rho}$  — средняя плотность состояний на поверхности Ферми. Подставляя выражение (3) в (2), получим оценку сверху для критической температуры

$$T_c^0 \sim \sqrt{\frac{|\alpha|}{\bar{\rho}}} W.$$

Величина  $T_c^0$  мала по сравнению с энергией  $W$ , если мал параметр  $\frac{|\alpha|}{\bar{\rho}} = \frac{\chi^0(\mathbf{P}) - V^{-1}(\mathbf{P})}{\bar{\rho}} \ll 1$ ; тем не менее она значительно превышает истинную температуру перехода  $T_c$  [9,10]. Температурный интервал между  $T_c^0$  и  $T_c$  характеризуется значительной ролью термодинамических флуктуаций и наличием ближнего порядка. В этой области реализуется смешанное состояние двух фаз  $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$  и  $(3 \times 3)$ , а индуцированная собственными дефектами субмонослоя ВЗП имеет очень сложную пространственно неоднородную структуру. Верхняя температурная граница определяется здесь, скорее, температурой осаждения субмонослоя металла на поверхность полупроводника нежели температурой  $T_c^0$ , которая в таком случае не имеет особого физического смысла.

Для описания формирования структуры ВЗП с симметрией  $(3 \times 3)$  вблизи изолированного дефекта на  $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$  решетке выше истинной температуры перехода  $T_c$  используем известную и весьма наглядную

концепцию „локального фазового перехода“ макроскопической, но конечной корреляционной длиной зарядовых флуктуаций [11], основанную на разложении Ландау функционала свободной энергии  $F[\Delta]$ , где  $\Delta(\mathbf{r})$  — параметр порядка, определяющий огибающую зарядовой плотности  $\delta n(\mathbf{r})$  на близком к  $\mathbf{P} = \frac{4\pi}{3a} \mathbf{e}$  волновом векторе. Имеем

$$n(\mathbf{r}) = \delta n(\mathbf{r}) \cos(\mathbf{P}\mathbf{r}),$$

$$\delta n(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{q}} \frac{\Delta_{\mathbf{q}}}{V(\mathbf{P} + \mathbf{q})} \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}), \quad (4)$$

где  $n(\mathbf{r})$  — плотность распределения заряда. В отсутствие дефектов и при выполнении условия  $\frac{\Delta}{W} \ll 1$  выражение для функционала  $F[\Delta]$  может быть записано в виде

$$F_0[\Delta] = \int f(\mathbf{r}) d\mathbf{r}, \quad (5)$$

$$f(\mathbf{r}) = \alpha \Delta^2(\mathbf{r}) + \beta \Delta^4(\mathbf{r}) + \gamma \left( \frac{\partial \Delta(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{r}} \right)^2 + \nu \left( \frac{\partial^2 \Delta(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{r}^2} \right)^2. \quad (6)$$

Интегрирование в формуле (5) распространяется на всю плоскость  $(x, y)$ , коэффициенты  $\alpha, \beta, \gamma, \nu$  в разложении (6) почти не зависят от температуры, причем  $\alpha = -|\alpha| = (V(\mathbf{P})^{-1} - \chi^0(\mathbf{P}))$  — отрицательная величина, а  $\beta, \gamma, \nu$  — положительные величины ( $\beta \sim W^{-2}\bar{\rho}$ ,  $\gamma \sim \bar{\rho}\xi_0^2$ ,  $\nu \sim \bar{\rho}\xi_0^4$ ,  $\xi_0 = (v_F/W)$ ,  $v_F$  — скорость на поверхности Ферми). Предполагаем, что  $|\alpha| \ll \bar{\rho}$ ; таким образом, в приближении среднего поля при  $T = 0$  величина  $\Delta_0 = \sqrt{|\alpha|/2\beta} \ll W$  реализует минимум функционала (5). При конечных  $T$  термодинамика системы (5)–(6) определяется зарядовыми флуктуациями, которые будем учитывать в гауссовой аппроксимации, как это делается, например, в теории перенормированных (самосогласованных) спиновых флуктуаций [12]. Выделив среднеполевую  $\varphi(\mathbf{r})$  и флуктуационную  $\eta(\mathbf{r})$  компоненты параметра порядка  $\Delta(\mathbf{r}) = \varphi(\mathbf{r}) + \eta(\mathbf{r})$  и усреднив функционал (5)–(6) по случайной переменной  $\eta(\mathbf{r})$ , переопределим эффективную свободную энергию  $F_0[\varphi]$

$$F_0[\varphi] = \int f(\mathbf{r}) d\mathbf{r}, \quad (7)$$

$$f(\mathbf{r}) = \tilde{\alpha} \varphi^2(\mathbf{r}) + \beta \varphi^4(\mathbf{r}) + \gamma \left( \frac{\partial \varphi(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{r}} \right)^2 + \nu \left( \frac{\partial^2 \varphi(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{r}^2} \right)^2, \quad (8)$$

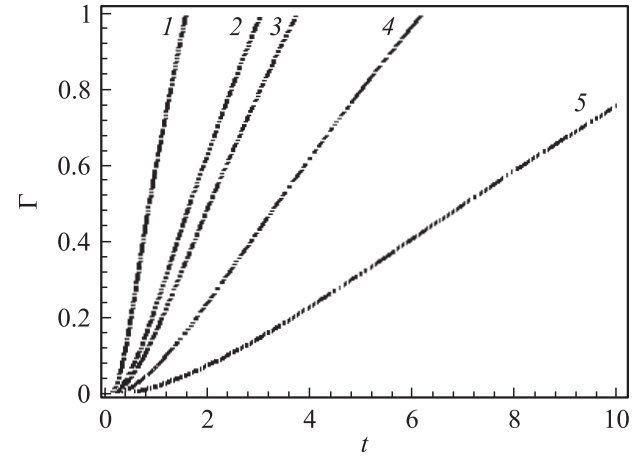
$$\tilde{\alpha} = \alpha + 6\beta \langle \eta^2 \rangle. \quad (9)$$

Здесь  $\langle \eta^2 \rangle$  — среднеквадратичная флуктуация параметра порядка, зависящая, строго говоря, от величины  $\varphi$  и вычисляемая самосогласованным образом.

Когда  $\varphi = 0$ , флуктуация  $\langle \eta^2 \rangle$  в главном логарифмическом приближении описывается следующей формулой:

$$\langle \eta^2 \rangle = \frac{\pi T}{2\gamma} \ln [(lq_c)^2 + 1], \quad (10)$$

где  $l = \sqrt{\gamma/\tilde{\alpha}}$  — корреляционная длина,  $q_c$  — квазиимпульс обрезания, параметр  $\tilde{\alpha} > 0$  выше температуры



Температурная зависимость обратной корреляционной длины зарядовых флуктуаций при различных значениях параметра  $k$ : 1 — 1, 2 — 0.1, 3 — 0.05, 4 — 0.01, 5 — 0.001. Для координатных осей введены обозначения:  $t = \frac{T}{T^*}$ ,  $\Gamma = \frac{1}{l} \sqrt{\gamma/|\alpha|}$ .

перехода  $T_c$ , где  $\varphi = 0$ . Если  $(lq_c)^2 \gg 1$  и  $T < T^*$ , тогда зависимость  $\tilde{\alpha}(T)$  имеет вид  $\tilde{\alpha}(T) \approx \gamma q_c^2 \exp(-T^*/T)$ , где  $T^* = \frac{|\alpha|\gamma}{3\pi\beta}$  — температура кроссовера. Заметим, что  $T^* \ll T_c^0$  при  $|\alpha| \ll \bar{\rho}$ , поскольку  $T^* \sim (|\alpha|/\bar{\rho})W$ ,  $T_c^0 \sim \sqrt{|\alpha|/\bar{\rho}}W$ . С понижением температуры в точке  $T_c < T^*$  система испытывает фазовый переход первого рода в состояние с  $\varphi \neq 0$ , сопровождаемый сильной перенормировкой величины  $\langle \eta^2 \rangle$  [10]. Наша оценка (10), очевидно, несправедлива ниже точки  $T_c$ . Режим  $(lq_c)^2 \ll 1$  становится возможным при температуре  $T > T^*$ , в этом случае имеем  $\tilde{\alpha}(T) \approx \sqrt{3\beta\pi T} q_c$ . В феноменологической теории статических зарядовых флуктуаций импульс обрезания  $q_c$  вводится как некоторый внешний параметр, определяемый в микроскопическом подходе неупругим рассеянием электронов на плазмонах или фононах и по порядку величины пропорциональный  $T/v_F$  выше температуры перехода  $T_c$ . Это означает, что характер температурной зависимости корреляционной длины изменяется от экспоненциального  $l^{-1}(T) \sim T \exp(-\frac{T^*}{2T})$  к степенному  $l^{-1}(T) \sim T^{3/4}$ , когда  $T$  увеличивается, проходя через область кроссовера вблизи  $T^*$ .

На рисунке представлены результаты численного анализа системы уравнений (9)–(10) в линейной по  $T$  аппроксимации для импульса обрезания  $q_c = sT/v_F$ , где  $s$  — не зависящий от  $T$  коэффициент; безразмерный параметр  $k = \frac{s^2\gamma^2 T^*}{3\pi\beta v_F^2}$  в нашей модели много меньше единицы. Видно, что при  $T > T^*$  в широком температурном интервале зависимость  $l^{-1}(T)$  можно качественно аппроксимировать линейной функцией  $l^{-1}(T) \sim T$ , угол наклона которой определяется величиной параметра  $k$ , и только при  $T \gg T^*$  вступает в силу соотношение  $l^{-1}(T) \sim T^{3/4}$ .

## 2. Формирование ВЗП вблизи изолированного точечного дефекта

Обсудим модель изолированного точечного дефекта в системе с ВЗП, основанную на представлении о „локальном фазовом переходе“. Рассматривая функционал  $F_0[\varphi]$  (7) как эффективную свободную энергию недомированной системы выше точки фазового перехода ( $\tilde{\alpha} > 0$ ), введем слагаемое  $\delta F[\varphi]$ , в простейшем виде „точечного источника“ моделирующее возмущение вблизи дефекта. Тогда выражение для полной энергии принимает вид

$$F[\varphi] = F_0[\varphi] + \delta F[\varphi], \quad (11)$$

$$\delta F[\varphi] = \int \lambda(\mathbf{r})\varphi(\mathbf{r})d\mathbf{r}. \quad (12)$$

Физический смысл слагаемого  $\delta F[\varphi]$  в (11)–(12) понятен: это энергия перераспределения заряда вокруг дефекта, вычисляемая в первом порядке по возмущающему потенциалу  $\lambda(\mathbf{r})$ . В локальном приближении, когда эффективный радиус изолированного дефекта мал по сравнению с корреляционной длиной, имеем  $\lambda(\mathbf{r}) = \lambda\delta(\mathbf{r})$ ,  $\lambda \sim U_0/W$ ,  $U_0$  — матричный элемент возмущающего потенциала на волновом векторе  $\mathbf{P}$ , имеющий положительное или отрицательное значение в зависимости от знака заряда дефекта (например, атом замещения или вакансии). В приближении (11) мы пренебрегли перенормировкой коэффициента  $\tilde{\alpha}$  за счет потенциала дефекта, полагая  $(\varphi^2/\eta^2) \ll 1$ , что кажется вполне разумным при низкой концентрации дефектов выше температуры перехода.

Минимизация свободной энергии (11) по параметру порядка  $\varphi(\mathbf{r})$  приводит к уравнению самосогласования

$$\left[ v \frac{\partial^4}{\partial \mathbf{r}^4} - \gamma \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}^2} + \tilde{\alpha} + 2\beta\varphi^2(\mathbf{r}) \right] \varphi(\mathbf{r}) = -\frac{\lambda}{2}\delta(\mathbf{r}). \quad (13)$$

Здесь специально сохранено слагаемое с четвертой производной, благодаря которому в модели „точечного дефекта“ удастся исключить сингулярность функции  $\varphi(\mathbf{r})$  при  $\mathbf{r} \rightarrow 0$ . Если опустить нелинейный член  $\sim \varphi^3$  в уравнении (13), что во всяком случае корректно вдали от дефекта при  $r \gg l$ , то его решение можно записать в следующем виде:

$$\varphi(\mathbf{r}) = -\frac{\lambda}{4\pi\nu(p_+^2 - p_-^2)} [K_0(p_-r) - K_0(p_+r)], \quad (14)$$

$$p_{\pm}^2 = \frac{\gamma \pm \sqrt{\gamma^2 - 4\nu\tilde{\alpha}}}{2\nu}, \quad (15)$$

$K_0(z)$  — модифицированная функция Бесселя нулевого порядка [13]. Амплитуда ВЗП вблизи дефекта равна

$$\varphi(0) = -\frac{\lambda \ln\left(\frac{p_+}{p_-}\right)}{4\pi\nu(p_+^2 - p_-^2)}, \quad (16)$$

или в характерном для нашего рассмотрения пределе  $\frac{\tilde{\alpha}\nu}{\gamma^2} \ll 1$

$$\varphi(0) \approx -\frac{\lambda}{8\pi\gamma} \ln \frac{\gamma^2}{\tilde{\alpha}\nu}. \quad (17)$$

Если выполняется условие  $\frac{U_0}{W} \ll \frac{\sqrt{\tilde{\alpha}/\tilde{\rho}}}{\ln(\tilde{\rho}/\tilde{\alpha})}$ , тогда нелинейный член  $\sim \varphi^3$  в уравнении (13) несуществен на всех расстояниях  $r$  от дефекта. Асимптотическое поведение функции  $\varphi(\mathbf{r})$  при  $p_{\pm}r \gg 1$  оценивается как

$$\varphi(\mathbf{r}) \approx -\frac{\lambda}{8\sqrt{\pi(\gamma^2 - 4\tilde{\alpha}\nu)}} \times \left[ \frac{\exp(-p_-r)}{\sqrt{p_-r}} - \frac{\exp(-p_+r)}{\sqrt{p_+r}} \right]. \quad (18)$$

В пределе  $\frac{\tilde{\alpha}\nu}{\gamma^2} \ll 1$  из (18) получим при  $r \gg l$

$$\varphi(\mathbf{r}) \approx -\frac{\lambda}{4\sqrt{2\pi}\gamma} \frac{\exp(-r/l)}{\sqrt{r/l}}, \quad (19)$$

т.е. поведение огибающей ВЗП на больших масштабах не зависит от коэффициента  $\nu$ , а характерный радиус локализации параметра порядка совпадает с перенормированной корреляционной длиной зарядовых флуктуаций  $l(T)$ .

Модель изолированных точечных дефектов на поверхности сохраняет свою корректность только при выполнении условия  $n_d l^2 \ll 1$ , где  $n_d$  — концентрация дефектов. С понижением температуры область индуцированной дефектами зарядовой перестройки растет пропорционально  $l(T)^2$ , и при достижении характерной температуры  $\tilde{T}$ , когда  $n_d \sim l^{-2}(\tilde{T})$ , перестраивается почти вся поверхность. Выше температуры  $\tilde{T}$  смешанную фазу, скорее всего, можно представить как суперпозицию случайным образом разбросанных на плоскости и слабо перекрывающихся друг с другом локализованных областей с ВЗП типа  $(3 \times 3)$  на фоне структуры  $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$  и описать обобщенным „параметром порядка“  $\Phi(\mathbf{r}) \cong \sum_n \varphi_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n)$ , где  $\mathbf{R}_n$  — положение  $n$ -го дефекта. Координатная зависимость огибающей функции  $\varphi_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n)$  описывается формулами (14)–(19), а ее знак определяется матричным элементом потенциала  $n$ -го дефекта  $\lambda_n = \lambda \cos(\mathbf{P}\mathbf{R}_n)$  и может быть как положительным, так и отрицательным. Таким образом,  $\langle \Phi(\mathbf{r}) \rangle = 0$  после усреднения по координатам дефектов на поверхности при  $T > \tilde{T}$ , но при этом  $\langle \Phi(\mathbf{r})^2 \rangle \neq 0$ . В смешанном состоянии выше точки  $\tilde{T}$  доля  $(3 \times 3)$  фазы, индуцированной дефектами в  $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$  фазе, непрерывно сокращается с ростом  $T$ . Величину  $\tilde{T}$  можно рассматривать как характерную температуру размытого фазового перехода типа порядок–беспорядок из смешанного состояния с „островками“ ВЗП в состоянии с однородной структурой ВЗП, которое сохраняется вплоть до самых низких температур.

Обсудим теперь некоторые экспериментальные результаты, касающиеся системы Sn/Ge(111). Как показывают эксперименты по сканирующей туннельной микроскопии [8,13,14], металлический монослой этой системы всегда содержит собственные дефекты: атомы Ge, замещающие 3–4% атомов Sn, а также вакансии Sn. Эти дефекты индуцируют  $(3 \times 3)$  фазу с ВЗП, окруженную  $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})R30^\circ$  фазой, так что уже при комнатной температуре образуется состояние со смешанной структурой. Эволюция данной структуры от „островковой“ к почти однородной  $(3 \times 3)$  фазе ниже 120 К [15] подтверждает картину индуцированного дефектами фазового перехода. Фотоэмиссионное изучение смешанной фазы выявляет наличие энергетической щели вблизи границы зоны Бриллюэна для  $(3 \times 3)$  решетки в интервале температур от 300 до 80 К, что является свидетельством существования  $(3 \times 3)$  фазы с ВЗП [7]. Согласно работе [8], температурная зависимость обратного характерного радиуса индуцированной дефектом локализованной ВЗП при высоких  $T$  близка к линейной  $l^{-1}(T) \sim T$ , что качественно согласуется с результатами нашего рассмотрения (см. раздел 2). По эмпирическим данным [8] можно также оценить температуру  $T^* \approx 70$  К как границу между областями сильной ( $T > T^*$ ) и слабой ( $T < T^*$ ) зависимости  $l^{-1}(T)$ . К сожалению, невозможно непосредственно распространить наш подход на низкотемпературную область  $T < T^*$ , где корреляционная длина  $l(T)$  превышает среднее расстояние между дефектами ( $n_d l^2 \gg 1$ ) и приближение изолированного дефекта оказывается несостоятельным. Строго говоря, можно только делать предположения о сопоставимости нашей теоретической оценки  $l^{-1} \sim T \exp(-\frac{T^*}{2T})$  с экспериментальной зависимостью [8] при  $T < 70$  К.

В заключение отметим, что явление реконструкции субмонослоя с образованием индуцированной дефектами ВЗП наблюдается не только в структуре Sn/Ge(111). Например, слабая локальная модуляция зарядовой плотности вблизи дефектов была обнаружена методом отражательной дифракции электронов высокой энергии в субмонослойном покрытии 1/3 монослоя олова на Si(111) при  $T = 120$  К [16]. Другой интересный пример — одномерные металлические цепочки на поверхности In/Si(111) —  $(4 \times 1)$ . Сканирующая туннельная микроскопия данной поверхности при комнатной температуре явно показывает присутствие новой локализованной на адатомах натрия  $(4 \times 2)$  структуры этой цепочки, электронный спектр которой имеет присущую системе с ВЗП диэлектрическую щель [17]. Предложенная в настоящей статье теоретическая схема, по-видимому, позволяет (по крайней мере на качественном уровне) описывать термодинамику фазового перехода с образованием ВЗП в присутствии дефектов в подобных системах.

## Список литературы

- [1] G. Santoro, S. Scandolo, E. Tosatti. Phys. Rev. B **59**, 3, 1891 (1999).
- [2] S. Sokolowski, K. Binder, A. Patrykiewicz. Surf. Sci. Rep. **37**, 6–8, 207 (2000).
- [3] L. Peterson, A. Ismail, E.W. Plummer. Phys. Rev. Lett. **88**, 18, 189 701 (2002).
- [4] T.E. Kidd, T. Miller, M.Y. Chou, T.-C. Chiang. Phys. Rev. Lett. **88**, 18, 189 702 (2002).
- [5] М. Авиньон, В.Н. Меньшов, В.В. Тугушев. ФТТ **43**, 3, 543 (2001).
- [6] J. Ortega, R. Perez, F. Flores. J. Phys. **C12**, 1, L21 (2000).
- [7] T.E. Kidd, T. Miller, M.Y. Chou, T.-C. Chiang. Phys. Rev. Lett. **85**, 17, 3684 (2000).
- [8] A.V. Melechko, J. Braun, H.H. Weitering, E.W. Plummer. Phys. Rev. B **61**, 3, 2235 (2000).
- [9] М. Barber. Phys. Rep. **59**, 6, 375 (1980); J.M. Kosterletz, K.J. Thouless. Progr. Low Temp. Phys. **7B**, 2, 371 (1978).
- [10] Е.А. Жуковский, В.В. Тугушев. Письма в ЖЭТФ **60**, 4, 267 (1994).
- [11] А.П. Леванюк, В.В. Осипов, А.С. Сигов, А.А. Собянин. ЖЭТФ **76**, 1, 345 (1979).
- [12] K. Murata, S. Doniach. Phys. Rev. Lett. **29**, 2, 285 (1972); G.G. Lonzarich, L. Taillefer. J. Phys. C **18**, 22, 4339 (1985).
- [13] J. Carpinelly, H.H. Weitering, M. Bartowiak, R. Stumpf, E.W. Plummer. Phys. Rev. Lett. **79**, 15, 2859 (1997).
- [14] A.V. Melechko, J. Braun, H.H. Weitering, E.W. Plummer. Phys. Rev. Lett. **83**, 5, 999 (1999).
- [15] T. Kidd, T. Miller, T.-C. Chiang. Phys. Rev. Lett. **83**, 14, 2789 (1999).
- [16] H. Morikawa, I. Matsuda, S. Hasegawa. Phys. Rev. B **65**, 20, 201 308 (2002).
- [17] S.S. Lee, J.R. Ahn, N.D. Kim, J.H. Min, C.G. Hwang, J.W. Chung, H.W. Yeom, S.V. Ryjkov, S. Hasegawa. Phys. Rev. Lett. **88**, 19, 196 401 (2002).