

Si(337)——另一个较稳定的 高密勒指数晶面

邢益荣

(中国科学院半导体研究所 表面物理国家重点实验室 北京 100083)

W. Ranke

(德国马普学会 Fritz-Haber 研究所 柏林)

摘要 我们的 LEED 实验结果发现: 偏离(112)约 4° 的 Si(337)表面, 在超高真空中经 Xe 离子轰击并加 $\sim 800^\circ\text{C}$ 退火后, 呈现较清晰的 (1×1) 结构. 在同样条件下, Si(112)表面没有产生好的 LEED 图样, 从而预料: Si(337)可能是异质外延 GaAs 和 GaP 等极性化合物半导体的好衬底.

PACC: 6820

随着分子束外延以及类似的薄膜生长技术及其器件应用的迅猛发展, 半导体的某些高密勒指数晶面(包括低指数面的邻晶面)逐渐地得到应用.

在所有的高指数晶面中, 最重要因而也是至今研究得最多的, 当属 $\{hkk\}_{h < k}$ 一类晶面. 这种晶面的原子排列形成 $m(100) \times n(111)$ (其中 m, n 为整数)台阶结构, 或称楼梯结构, 它对晶体的外延生长具有特殊的意义. 例如, 对于在具有金刚石结构的 Si 衬底上外延生长具有闪锌矿结构的化合物半导体(如 GaAs 和 GaP 等)的场合, 高指数晶面衬底可被用来抑制作为晶体缺陷之一的反相畴的产生. 理论分析还认为, 为此目的而选择 Si(112)晶面作为衬底是理想的^[1,2].

然而, 我们在早先发表的文章[3]中首次报道: LEED 的观测表明, 在 Si 的[112]晶向的近邻区域中, 较为稳定的完整有序晶面并不是(112), 而是(337). 后来, Gardeniers 等^[4]利用球面状的 Si 单晶衬底研究 CVD 外延生长的晶向关系时也发现: 当生长温度足够高时, 对于 $\{hkk\}_{h < k}$ 系列晶面, 可以得到平整的好外延面有(113), (337)和(7 7 13)等. 值得注意的是, 其中也包括(337), 而没有(112)晶面.

本文第一次简单介绍 Si(337)表面的原子结构及其 LEED 的研究结果.

实验是在一个直径为 23mm 的圆柱状 Si 单晶样品上进行的. 设计圆柱体的轴线沿 [110]方向, 以便在圆柱面上(111)晶面的两侧分别获得 $\{hkk\}_{h < k}$ 和 $\{hkk\}_{h > k}$ 两类最重要的高指数晶面. 圆柱样品是利用掺 B 的 P 型 ($\rho \sim 0.1\Omega\text{cm}$) Si 单晶加工而成的. 仔细

抛光其表面后,装进多功能表面电子能谱仪的超高真空室,其背景真空度为 1.3×10^{-8} Pa 量级.应用 Xe 离子进行轰击,然后在 $\sim 800^\circ\text{C}$ 下退火.这种处理反复多次,以消除表面的损伤和减少表面上碳和其它杂质的沾污.当利用 AES 监测到 C-KLL 与 Si- $L_{23}VV$ 的俄歇电子强度之比为 1:200 时,进行 LEED 观测.结果表明:在圆柱面的相应位置上出现清晰明锐的(100)-(2×1)+(1×2), (111)-(7×7) 和 (113)-(3×1) 原子再构图样的同时,还在其它几个晶面上观察到整数束和分子束的衍射斑点,表明这些晶面也存在较为完整有序的原子结构.(337)晶面便是其中之一,其 LEED 图样如图 1 所示(见图版 I).

测量时, LEED 的入射电子束的直径约为 1 mm, 相应于圆柱面上的角度分辨率约为 5° . [337] 与 [112] 两个晶向之间的夹角仅为 $\sim 4^\circ$, 故可以说, (337) 是 (112) 的邻晶面. 这样一来, 在这样的圆柱面上进行 LEED 观测时, 不可能把这两个晶面加以分开. 我们认定图 1 的花样是来自 (337) 晶面的电子衍射, 其根据是两者的原胞完全相符合.

图 2 是 Si(337) 晶面的原子结构图(见图版 I). 在侧视图也给出 (112) 和 (111) 晶面的方位; 在俯视图中, 实线所示的菱形或虚线所示的平行四边形给出该晶面的 (1×1) 原胞. 显然, 这是一个相当大的原胞, 在 [110] 和 [776] 晶向的菱形对角线长度分别为 3.84 \AA 和 31.44 \AA . 由它产生的 LEED 图样与图 1 完全一致. 因而可以说, 经过 Xe 离子溅射并在 $\sim 800^\circ\text{C}$ 下退火的 Si(337) 表面具有较完整的 (1×1) 原子结构. 这是次于 (113) 晶面的另一个较为稳定的 Si 高指数晶面.

我们曾报道 Si 的电子亲和势(或电离能)随晶向变化的如下实验结果^[3]: 除三个低指数晶面和 (113) 晶面外, 在 (337) 晶面上也观察到一个极小值. 由于电子亲和势或电离能反映表面电偶极矩的大小, 所以, 这一事实从另一个角度证明: Si(337) 是一个较稳定的晶面.

另一方面, Kaplan^[5] 曾利用 LEED 详细研究 Si(112) 表面的原子结构, 但没有得到一个完整的重构表面. 我们利用平面状的 Si(112) 样品进行实验时, 也得到类似的结果. 总之, 各种实验表明: 与 Si(112) 相比, 它的邻晶面 (337) 具有较为完整和稳定的原子结构.

由此看来, 如果利用 Si(337) 晶面代替 Kroemer 等人^[1,2] 建议的 (112) 作为衬底, 进行具有闪锌矿结构的极性化合物半导体的异质外延生长, 也许效果更佳.

实验工作是在德国马普学会 Fritz-Haber 研究所完成的.

参 考 文 献

- [1] H. Kroemer. *J. Crystal Growth*, 1987, **81**: 193.
- [2] S. L. Wright, M. Inada and H. Kroemer. *J. Vac. Sci. Technol.*, 1982, **21**: 534.
- [3] W. Ranke and Y. R. Xing. *Phys. Rev.*, 1985, **B31**: 2246.
- [4] J.G.E. Gardeniers, C. H. Klein Douwel and L. J. Giling. *J. Crystal Growth*, 1991, **108**: 319.
- [5] Kaplan. *Surf. Sci.*, 1982, **116**: 104.

Si(337)-a Stable and Intriguing High Miller-Index Surface

Xing Yirong

*(Institute of Semiconductors, National Laboratory for Surface
Physics, The Chinese Academy of Sciences, Beijing 100083)*

W. Ranke

(Fritz-Haber-Institut der Max-Planck-Gesellschaft, Faradayweg 4-6, D-1000 Berlin 33, Germany)

Abstract LEED pattern from the Si (337), a high Miller-index surface inclined at $\sim 4^\circ$ to (112), cleaned by Xe-ion bombardment and $\sim 800^\circ\text{C}$ annealing in ultra-high vacuum showed clearly unreconstructed (1×1) structure. However, we could not obtain good LEED patterns from Si(112) under the same conditions. It is therefore expected that Si(337) may be a favorable substrate for the heteroepitaxial growth of polar compound semiconductors, like GaAs and GaP etc.

PACC: 6820