

Si(113) 表面的原子结构

邢 益 荣

(中国科学院半导体研究所, 表面物理实验室, 北京, 100083)

张 敬 平 吴 汲 安

(中国科学院半导体研究所, 北京, 100083)

刘 赤 子 王 昌 衡

(中国科学院表面物理实验室, 物理研究所, 北京 100080)

1990年2月5日收到

利用 LEED 研究了 Si(113) 表面的原子结构。清洁表面是采用离子轰击和退火方法制备的。实验发现：当温度高于 600℃ 时表面为 1×1 结构，随着温度缓慢下降，表面原子结构发生 $1 \times 1 \xrightarrow{\sim 600^\circ\text{C}} 3 \times 1 \xrightarrow{\sim 450^\circ\text{C}} 3 \times 2$ 的可逆相变。

主题词 Si(113), 表面再构, 原子结构相变

虽然对 Si 的高指数表面的认识在学术上和技术上都是很重要的，但至今的研究还很少。Si(113) 表面是很稳定的，它的理想的 1×1 原胞中包含一个(100)台阶原子（具有两条悬挂键）和一个(111)台面原子（具有一条悬挂键）。Heckingbottom 和 Wood^[1] 以及 Olshanetsky 和 Mashanov^[2] 曾先后利用 LEED 研究过 Si(113) 表面的原子结构，对于经过 $\sim 750^\circ\text{C}$ 退火的表面，得到 3×2 原子再构，这两个数字分别给出在 $[\bar{1}10]$ 和 $[33\bar{2}]$ 方向上表面原子结构的周期性。Ranke 和邢益荣^[3] 利用圆柱状样品研究表面电偶极矩和 Fermi 能级位置的晶向关系时发现，对于 Si 的高指数表面来说，在(113)晶向最容易获得没有小平面的有序结构。但从 LEED 测量得到的是 3×1 再构^[4]。Gibson 等^[5] 利用高分辨率的 TEM 也观察到 Si(113) 表面原子在 $[33\bar{2}]$ 方向上的周期性为 1。最近，Myler 和 Jacobi^[6] 报道了清洁的和氢吸附的 Si(113) 表面的 LEED 和 ARUPS 联合研究结果，他们发现 3×1 和 3×2 结构的出现与样品的退火温度有关，即退火至 900K 得到 3×1 再构，而当温度高于 1050K 时则出现 3×2 再构。上述许多研究工作表明 Si(113) 表面原子结构的实验结果有分歧，因而进一步研究 Si(113) 表面结构是很有意义的。

本实验研究采用电阻率为 $1.5\Omega \cdot \text{cm}$ 的 n 型 Si(113) 片状样品，表面晶向的偏差小于 $10'$ 。表面经过机械抛光和常规的化学处理后，装入具有 LEED 和 AES 功能的超高真空系统中，进行 Ar^+ 轰击和退火 (IBA) 处理，最高退火温度约 800°C 。经过多次 IBA 循环之后，用 AES 监测得到表面上所沾污的 C 和 O 的信号低于探测的极限。然后观察并摄下 LEED 图象。观测时系统的真空中度为 7×10^{-11} — 2×10^{-10} 托。实验细节将在

另文介绍。

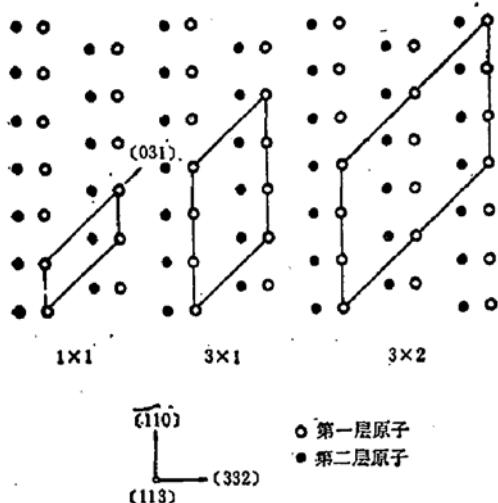
我们的实验发现，经过约 800℃ 退火的 Si(113) 清洁表面存在 3 个表面原子相，分别存在于不同的温度范围。图 1(a)是在 650℃ 时观察到的 LEED 图象^{*}，它对应于 1×1 表面结构。我们称它为高温相。当样品温度缓慢冷却到 600℃ 时，便开始出现 3×1 表面再构，它至少保持到 450℃ 左右。我们称这种结构为中间温度相。它的存在表明，Si(113) 表面原子的再构首先是发生在 [110] 晶向上，其周期是体内原子周期的 3 倍。图 1(b) 是在 450℃ 时获得的 3×1 再构的 LEED 图象。如果仔细观察，可以发现这时已开始出现 3×2 形式的再构，即开始发生从 3×1 至 3×2 的结构转变。当样品温度为 400℃ 直至室温，观察到清晰的 3×2 再构图象。我们称它为低温相，如图 1(c) 所示。它表明在 $[1\bar{1}0]$ 和 $[03\bar{1}]$ 晶向上表面原子结构的周期分别为体内原子周期的 3 倍和 2 倍。

上述三种表面结构的原胞如图 2 所示。

具有 3×2 再构的表面在室温下是很稳定的。当样品在 7×10^{-11} 托的超高真空下保持十多个小时，其表面原子结构也没有明显变化。

上述结果表明，对于经过离子轰击和 $\sim 800^\circ\text{C}$ 退火的 Si(113) 表面，当样品温度缓慢冷却时，其表面结构发生从 $1 \times 1 \rightarrow 3 \times 1 \rightarrow 3 \times 2$ 的原子结构相变。前一转变发生在 600℃ 左右，而后一转变发生在 450℃ 左右。我们还发现上述的相变是可逆的。另外，为了得到完好的 3×1 和 3×2 的 LEED 图象，要求温度冷却速率足够慢，这说明上述的相变需要一定的时间。还应指出，至少是在某些温度范围内，同时存在两种或三种表面相，即对于较高的温度区域 (~ 450 — 600°C) 可能同时存在 1×1 和 3×1 两种结构，而在较低的温度区域 ($\sim 450^\circ\text{C}$ —室温)，可能同时存在 3×1 和 3×2 两种结构，甚至是 1×1 、 3×1 和 3×2 三种结构。由此也可以看出，对于 Si(113) 表面的这三种不同结构，其表面能量是相近的。Chadi^[7] 已经从理论上研究过 Si(113) 表面的再构形式，计算了 1×1 、 3×1 和 3×2 三种表面结构的经验束缚总能量和表面能量。对于台阶重新键合 (Steprebonding) 的再构模型，得到上述三种结构的表面能量是很相近的，并且以 3×2 结构的为最小。这与我们的实验结果相符合。Ranke^[8] 最近又提出两种新的 Si(113) 3×1 和 3×2 再构模型，其中之一也表明，实现 3×1 与 3×2 再构之间的转变是很容易的，但未能说明 1×1 与 3×1 结构之间表面能量的差别为何也很小。

图 2 Si(113) 表面 1×1 、 3×1 和 3×2 三种原子结构的原胞示意图



作者感谢徐耕教授对本工作的很大兴趣和非常有益的讨论。本实验是在中国科学院表面物理实验室完成的，并得到国家自然科学基金的部分资助。

* 图 1 见图版 I。

参 考 文 献

- [1] R. Heckingbottom and P. R. Wood, *Surf. Sci.*, **23**, 437(1970).
- [2] B. Z. Olshanetsky and V. I. Mashanov, *Surf. Sci.*, **111**, 414(1981).
- [3] W. Ranke and Y. R. Xing, *Phys. Rev.*, **B31**, 2246(1985).
- [4] Y. R. Xing and W. Ranke, 未发表.
- [5] I. M. Gibson, M. L. McDonald and F. C. Unterwald, *Phys. Rev. Lett.*, **55**, 1765(1985).
- [6] U. Myler and K. Jacobi, *Surf. Sci.*, **220**, 353(1989).
- [7] D. J. Chadi, *Phys. Rev.*, **B29**, 785(1984).
- [8] W. Ranke, *Phys. Rev. B*, 印刷中.

Study of Atomic Structure on Si(113) Surface

Xing Yirong

(Institute of Semiconductors and National Laboratory for Surface Physics, Academia Sinica)

Zhang Jingping and Wu Ji'an

(Institute of Semiconductors, Academia Sinica)

Liu Chizi and Wang Changhong

(National Laboratory for Surface Physics and Institute of Physics, Academia Sinica)

Abstract

Atomic reconstructions were studied in terms of LEED on Si(113) surface prepared by ion bombardment and annealing at $\sim 800^{\circ}\text{C}$. As lowering the temperature of specimen, we observed the following reversible phase transitions: $1 \times 1 \xrightarrow{\sim 600^{\circ}\text{C}} 3 \times 1 \xrightarrow{\sim 450^{\circ}\text{C}} 3 \times 2$.

Key words Si(113), Surface Reconstruct, Atomic Structure Phase Transition