

# Si(111)- $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ R30°-Ga 表面原子结构

邓丙成<sup>1</sup> 徐 耕<sup>2</sup> 陈文华<sup>3</sup> 何永健<sup>3</sup> 谢茂海<sup>3</sup> 唐叔贤<sup>3</sup>

(1 华南建设学院西院基础部, 广州 510405)

(2 中山大学物理系, 广州 510275)

(3 香港大学物理系, 香港)

**摘要:** 利用自动张量低能电子衍射(ATLEED)定量地研究 Si(111)- $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ R30°-Ga 重构表面的原子结构。证实了 Ga 原子吸附在  $T_4$  位即第二层 Si 原子所对的空位上, 同时给出了表面最顶层 7 个原子层的详细坐标。可靠性因子  $R_{\text{VHT}} = 0.143$  表明理论计算和实验符合得非常好。

**关键词:** Si; 表面; 原子结构

**PACC:** 7320; 6820; 6855

**中图分类号:** O472+.1      **文献标识码:** A      **文章编号:** 0253-4177(2001)04-0427-04

## 1 引言

$(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$  重构(以下简称  $\sqrt{3}$  结构)是金属-半导体界面最常见的原型结构之一。自 1964 年 Lander 和 Morrison 首先在 Si(111) 表面观察到  $\sqrt{3}$  结构后<sup>[1]</sup>, 这些由三价或四价金属诱导形成的  $\sqrt{3}$  结构常用来检验新的理论方法和实验方法<sup>[2]</sup>。大多数情况下,  $\sqrt{3}$  结构涉及表面吸附减少表面悬挂键(dangling bond)从而降低表面结构能的机制。以 Si(111) 的解理面为例, 在室温下 Si(111) 的解理面是  $2 \times 1$  重构, 表面 Si 原子重新排列形成  $\pi$  键链<sup>[3]</sup>。当表面有原子吸附时,  $(2 \times 2)$ 、c( $2 \times 4$ ) 和  $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ R30° 结构都被观察到。由于每个表面原子上有一个未配对的悬挂键,  $(1 \times 1)$  结构是极其不稳定的。当吸附原子与三个 Si 原子键接形成  $\sqrt{3}$  结构时, 表面悬挂键的数目大大减少, 从而降低表面能量。

人们对 Si(111)- $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ R30°-Ga(简称  $\sqrt{3}$ -Ga) 表面做了大量研究<sup>[4]</sup>, 结果支持 1/3 单层的 Ga 原子吸附在  $T_4$  位上, 如图 1 所示。在  $T_4$  的 Ga

吸附原子有 4 个 Si 近邻原子, 其中 3 个在第一个 Si 原子层与 Ga 原子键接, 另一个位于 Ga 原子正下方而处在第二个 Si 原子层内。近期的许多工作研究  $\sqrt{3}$  重构时, 往往用  $\sqrt{3}$ -Ga 结构作为已知结构进

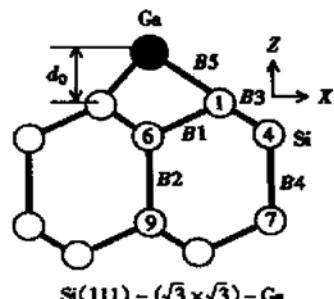


图 1 Si(111)- $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ R30°-Ga 表面  $T_4$  位 Ga 原子吸附模型

FIG. 1 Absorbed Model for Ga Atom on  $T_4$  Site

行比较而得出结论<sup>[5,6]</sup>。早期的低能电子衍射(LEED)曾对  $\sqrt{3}$ -Ga 重构的原子结构进行研究<sup>[7]</sup>, 但是由于早期 LEED 面临的一些当时难以克服的困难, 这些工作也就有较大的局限性。一方面, 实验数据的采集比较困难, 比如文献[7]对  $\sqrt{3}$ -Ga 结构分析时只有 9 个衍射束, 并且能量范围 30–180 eV 也较窄; 另一方面, 早期的 LEED 计算采用尝试法

邓丙成 男, 博士, 从事半导体表面结构与性质的研究。

1999-12-12 收到, 2000-02-16 定稿

©2001 中国电子学会

寻找“最佳结构”，不仅效率低而且不能对整个参数空间进行全面搜寻，结果的可靠程度受到很大的限制。

因此，本工作采用新的实验数据（更多衍射束、更宽能量范围）对 $\sqrt{3}$ -Ga 重构表面进行自动张量低能电子衍射(ATLEED)<sup>[8]</sup>计算，得到比较精确的原子结构，指出以前 LEED 工作未能发现的表面重构新特征，从而为新的实验方法和理论方法提供可靠依据。

## 2 实验

本工作的实验部分由香港大学物理系表面物理实验室完成。LEED 数据的收集采用先进的 TV 摄像机系统，能够把较弱的 LEED 斑点在较大的能量范围内存储起来，并且使用计算机自动处理实验数据。在 740K 温度下，对 $\sqrt{3}$ -Ga 重构表面测量的 I-V 曲线包括十六个垂直入射的非等价衍射束，即八个整数束 $(1, 0)、(0, 1)、(1, 1)、(2, 0)、(0, 2)、(1, 2)、(2, 1)、(3, 0)$ 及八个分数束 $(1/3, 1/3)、(1/3, 4/3)、(2/3, 2/3)、(2/3, 5/3)、(4/3, 1/3)、(4/3, 4/3)、(5/3, 2/3)、(7/3, 1/3)$ 。能量范围是 30–360eV，每 2eV 记录一次衍射花样，每次记录以一个较长的曝光时间记录较弱的衍射斑点强度，而以一个较短的曝光时间记录较强的衍射斑点强度，采用计算机自动化处理后，扣除本底并对等价点取平均做为实验数据。

## 3 结果和讨论

理论计算采用 ATLEED 方法。我们使用早期 LEED 计算所得结果<sup>[7]</sup>作为参考结构，对包括 Ga 原子吸附层和四个 Si 复合层的共九个原子表面层进行模型计算和自动搜寻。Ga 原子和 Si 原子的散射势用自洽的 LAPW 方法<sup>[9]</sup>计算得到，然后采用球对称近似计算散射相移。多层散射计算使用九个平面分波( $I_{\max} = 8$ )，并用十个平面分波作为收敛验证。描述非弹性散射的自能的实数部分和虚数部分分别取 3.7eV 和 3.5eV，前者是由 ATLEED 自动搜寻后得出最佳值。自动搜寻时使用 Van Hove-Tong 可靠性因子( $R_{VHT}$ )<sup>[10]</sup>作为判据，最小  $R_{VHT}$  对应“最佳结构”。

ATLEED 计算收敛后得到“最佳结构”表面最顶层 Ga 吸附原子和两个 Si 原子复合层的坐标如表 1 所示。为比较方便起见，同时还给出了相应的体结构原子坐标。主要原子键长列于表 2，其中符号由图 1 定义给出。我们的研究结果支持早期 LEED 以及其它工作提出的  $T_4$  位 Ga 原子吸附模型，“最佳结构”理论计算 I-V 曲线与实验符合得非常好，如图 2 所示。十六个衍射束的平均可靠性因子  $R_{VHT} = 0.143$ （比未做自动搜寻时的参考结构<sup>[7]</sup>对应的  $R_{VHT} = 0.22$  小得多），表明“最佳结构”已经非常可靠。

表 1 “最佳结构”表面最顶层 Ga 吸附原子和两个 Si 原子复合层的坐标(0.1nm)

Table 1 Coordinates of Absorbed Ga Atom in First Layer on Si Surface and Two Si Atoms Bilayer for Optimized Structure (Unit: 0.1nm)

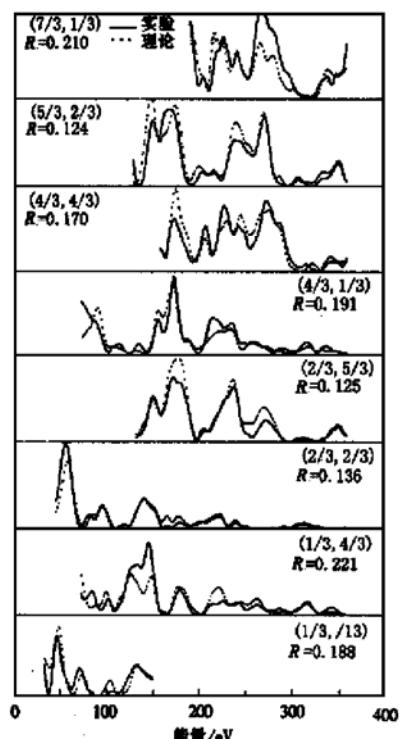
原子	体结构					最佳结构		
	X	Y	Z	X	Y	Z		
Adatom	Ga							
1st Bilayer	1	Si	1.9198	1.1084	0.0000	1.7874	1.0319	0.0000
	2	Si	3.8396	-2.2168	0.0000	3.9720	-2.2933	0.0000
	3	Si	5.7594	1.1084	0.0000	5.7594	1.2613	0.0000
	4	Si	3.8396	0.0000	-0.7838	3.8396	0.0000	-0.6202
	5	Si	1.9198	3.3252	-0.7838	1.9198	3.3252	-0.6202
	6	Si	0.0000	0.0000	-0.7838	0.0000	0.0000	-1.1795
2nd Bilayer	7	Si	3.8396	0.0000	-3.1351	3.8396	0.0000	-3.0582
	8	Si	1.9198	3.3252	-3.1351	1.9198	3.3252	-3.0582
	9	Si	0.0000	0.0000	-3.1351	0.0000	0.0000	-3.4162
	10	Si	0.0000	2.2168	-3.9198	0.0000	2.2631	-3.9351
	11	Si	3.8396	2.2168	-3.9198	3.7995	2.1936	-3.9351
	12	Si	1.9198	-1.1084	-3.9198	1.9599	-1.1316	-3.9351

表 2 主要原子键长(0.1nm)

Table 2 Bond Length of Main Atoms (Unit: 0.1nm)

键	种类	键长	体结构值	压缩(-)或伸长(+)
B <sub>1</sub>	Si-Si	2.3771	2.3513	+ 1.1%
B <sub>2</sub>	Si-Si	2.2367	2.3513	- 4.9%
B <sub>3</sub>	Si-Si	2.3793	2.3513	+ 1.2%
B <sub>4</sub>	Si-Si	2.4380	2.3513	+ 3.7%
B <sub>5</sub>	Ga-Si	2.5156	2.40	+ 4.8%

我们的研究结果与早期 LEED 工作的不同之处主要包括: (1) Ga 吸附原子与第一个 Si 原子层的



距离  $d_0$  是 0.144 nm, 与早期 LEED 的 0.135 nm 比较, 增大了 7%; (2) 表面原子的弛豫和重构在第三个 Si 原子复合层时已经很小, 而到了第四个 Si 原子复合层, ATLEED 自动搜寻的结果和体结构没有什么差别, 也就是说, 可以认为表面原子的弛豫和重构被限制在最顶层的三个复合层。由于  $\sqrt{3}$ -Ga 结构的可调参数不多, 理论计算  $I-V$  曲线与实验曲线符合程度的明显改善以及可靠性因子的较大幅度的降低表明, Ga 吸附原子与第一个 Si 原子层的距离是个非常重要的参数, ATLEED 的自动搜寻给出比较精确的数值。

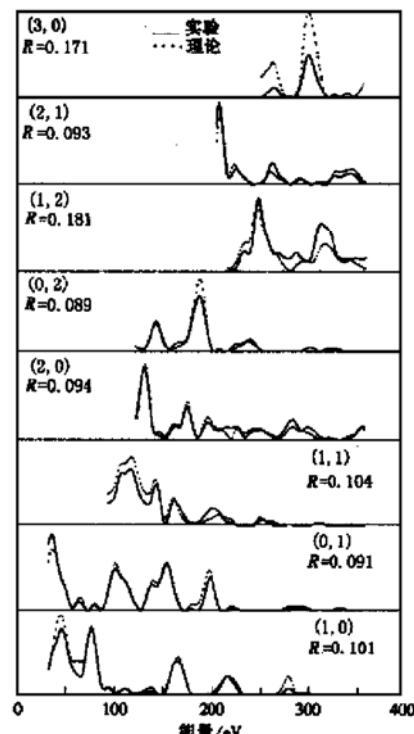
图 2 理论计算曲线与实验曲线符合得非常好 平均可靠性因子  $R_{VHT}=0.143$ 

FIG. 2 Theoretical and Experimental Curves

我们还设计了其它四种模型进行 ATLEED 计算, 即  $M_1$ : Ga 原子吸附的  $H_3$  位(第四层 Si 原子的正上方);  $M_2$ :  $1/3$  单层的 Ga 原子代替  $T_4$  位的 Si 原子, 表面无吸附;  $M_3$ : 在  $M_2$  的基础上, 表面增加 Si 原子吸附在  $T_4$  位;  $M_4$ :  $1/3$  单层的 Ga 原子顶位吸附在表面 Si 原子上。计算结果表明, 这些模型都不是  $\sqrt{3}$ -Ga 重构表面的可能结构, 对应的可靠性因子  $R_{VHT}$  分别为 0.35、0.22、0.23 和 0.27, 与  $T_4$  位 Ga 原子吸附模型比较, 上述模型均可排除。

总之, 我们对 Si(111)-( $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ )R30°-Ga

重构表面进行了定量的 ATLEED 计算, 结果证实了  $T_4$  位 Ga 原子吸附模型, 自动搜寻计算结果给出表面最顶层原子层的原子坐标, 为其它新的理论方法和实验方法提供依据。

## 参考文献

- [1] J. J. Lander and J. Morrison, Surf. Sci., 1964, 2: 553.
- [2] C. A. Sebenne, in Surface Physics and Related Topics: Festschrift for Xide Xie, Eds. F. J. Ni, X. Wang, K.-M. Zhang and D. Lu, World Scientific, Singapore, 1991, 259.

- [ 3 ] K. C. Pandey, Phys. Rev. Lett., 1981, **47**: 1913.
- [ 4 ] S. W. Wang, M. W. Radny and P. V. Smith, Surf. Sci., 1998, **396**: 40 and references therein.
- [ 5 ] F. Owman and P. Martensson, Surf. Sci., 1995, **330**: L639; J. Vac. Sci. Technol. B, 1996, **14**(2): 933.
- [ 6 ] S. W. Wang, M. W. Randy and P. V. Smith, Surf. Sci., 1998, **396**: 40.
- [ 7 ] A. Kawazu and H. Sakama, Phys. Rev. B, 1988, **37**: 2904.
- [ 8 ] P. J. Rous and J. B. Pendry, Surf. Sci., 1989, **219**: 355; M. A. Van Hove, W. Mority *et al.*, Surf. Sci. Rep., 1993, **127**: 191.
- [ 9 ] E. Wimmer, H. Krakauser, M. Weinert and L. E. Swatz, Phys. Rev. B, 1981, **24**: 864.
- [ 10 ] M. A. Van Hove, S. Y. Tong and M. H. Elconin, Surf. Sci., 1977, **64**: 85; M. L. Xu and S. Y. Tong, Phys. Rev. B, 1985, **31**: 6332.

## Refined Atomic Structure of Si(111)-( $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ )R30°-Ga Surface

DENG Bing-cheng<sup>1</sup>, XU Geng<sup>2</sup>, CHEN Wen-hua<sup>3</sup>, HE Yong-jian<sup>3</sup>, XIE Mao-hai<sup>3</sup> and S. Y. Tong<sup>3</sup>

(1 Department of Basic Courses, South China Construction University, Guangzhou 510405, China)

(2 Department of Physics, Zhongshan University, Guangzhou 510275, China)

(3 Department of Physics, University of Hongkong, Hongkong, China)

**Abstract:** Refined atomic geometry of the Si(111)-( $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ )R30°-Ga surface has been obtained by the quantitative analysis of the intensity-energy spectra obtained from the measurement of a total of 16 symmetry-inequivalent beams by the method of low-energy electron diffraction in the energy range of 30—360eV. Ga atom is located on the hollow site above the second-layer Si atom, namely *T*<sub>4</sub> hollow site, but the distance between Ga adatom and the first Si layer is 0.144nm. Detailed atomic coordinates for atoms in the first 7 layers of the best-fit structure are given. A good level correspondence between the calculated intensities and the experimental ones has been reached with an average Van Hove-Tong R-factor of 0.143.

**Key words:** Si; surface; atomic structure

**PACC:** 7320; 6820; 6855

**Article ID:** 0253-4177(2001)04-0427-04

DENG Bing-cheng graduated from Department of the Physics, Zhongshan University and got the Ph. D degree in Condense Matter Physics in 1998. He is engaged in some research on surface structure of semiconductors.