

# 可望实用的 Si(113) 晶面

邢 益 荣

(中国科学院半导体研究所)

1985年3月4日收到

LEED 分析、氧气吸附和表面偶极子的研究结果表明, Si(113) 可能是适合于生长半导体异质结外延的晶面。

由于半导体异质结外延技术的需要和理论上的兴趣, 近两三年人们开始注意对高指数晶面的研究。利用高指数晶面进行外延, 可望得到更好的质量。例如, Kroemer 等人认为<sup>[1]</sup>, 对于 GaP/Si 系统, (112)是最合适的外延生长晶面; Olsen 等人的研究也证明<sup>[2]</sup>, 对于 InGaAs 和 InP 在 InP 衬底上的汽相外延, 应用(113)B 和(115)B 做为衬底晶面获得的结果最优; 后来, Chadi 从理论上分析了 Si(112)、(113) 和(331)表面的原子结构<sup>[3]</sup>, 指出(113)晶面具有独特的性质。

本工作简要报道关于 Si(113) 表面的原子结构和表面偶极子的研究结果, 表明它具有较好的表面特性, 是一个可望有实际用途的晶面。

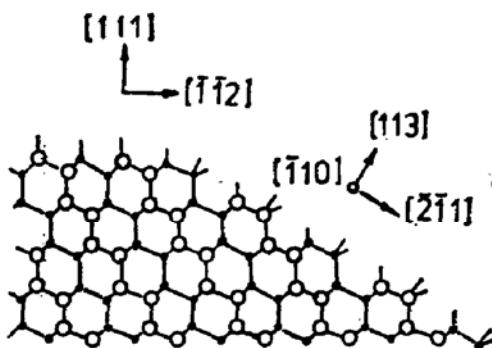


图 1 理想的 Si(113) 晶面的方位(侧视)图

为了对各个晶面进行比较, 采用以[110]为轴的圆柱状 Si 样品, 以便在同一个圆柱面上获得所有的晶向。(113)晶面的方位如图 1 所示。样品表面经过仔细抛光后, 在超高真空中利用 Ar 或 Xe 离子进行轰击和 1050—1100K 退火, 然后进行各种测量。关于样品制备的详细介绍见文献[4]。

## 一、表面原子结构

各个晶面原子结构的 LEED 分析结果表明: (111) 和(001)面分别出现(7×7)和双畴(2×1)的表面原子再构, 而在(112)、(113)、(115)和(331)等最重要的高指数晶面中,

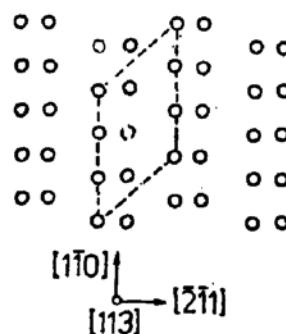


图 2 在理想的(113)平面上的(3×1)原子再构元胞(虚线)

(113)的 LEED 图象最为清晰,显出单一的表面相对应于(3×1)的表面原子再构,示于图 2。以前,Olshanetsky 等人分析过 Si(113) 表面的原子结构,得到(3×2)再构<sup>[5]</sup>。出现不同再构的原因可能在于样品退火的温度不一样。究竟哪一种再构是稳定的表面相,尚待进一步研究。

气体吸附实验也是研究表面原子结构的一种辅助手段。我们利用 AES 测量氧在 Si 圆柱面上吸附量与晶向关系的结果表明,当曝氧量为 10 L 时,氧的覆盖度分别在(111)和(113)表面上出现极大值和极小值<sup>[6]</sup>。图 3 是利用同步辐射光( $h\nu = 146$  eV)对氧覆盖的几个主要晶面测得的 Si $2p$  光电子谱。化学位移峰的相对强度(面积)同样表明,氧的覆盖度在(111)面上最大,在(113)面上最小。此外,根据位移峰的分布还可以推断,在(111)-(7×7)表面上氧原子已经贯穿进晶格内部,形成  $\text{SiO}_x$ ( $x = 1-4$ );与此不同,对于(113)-(3×1)表面, Si 的氧配位数只有 1 和 2,说明氧原子仅吸附在表面上。一般认为,氧之所以容易从 Si(111)-(7×7) 表面进入体内,原因在于这种原子再构是属于“缺陷”类模型的<sup>[7]</sup>。从而推论: Si(113)-(3×1) 表面不存在明显的缺陷。

## 二、表面偶极子

半导体的电子亲合势  $\chi$  (或电离能)的变化反映表面电偶极矩的大小。对于非极性的共价键半导体 Si, 表面偶极子来源于表面原子弛豫和再构所引起的电子电荷向外转移,从而产生使  $\chi$  增加的表面电偶极子。不同原子再构所产生的电荷迁移量也不同,因而导致  $\chi$  的值是随晶向而变化的。 $\chi$  值,表明其表面偶极矩较小。

对于(001)-(112)区域,利用  $h\nu = 108.6$  eV 的同步辐射光源,测量光电子发射的低能(二次电子)阈值以及  $\text{Si}2p_{3/2}$  峰位置随角度  $\alpha$  的变化,从而求出电子亲合势  $\chi$  与晶向的

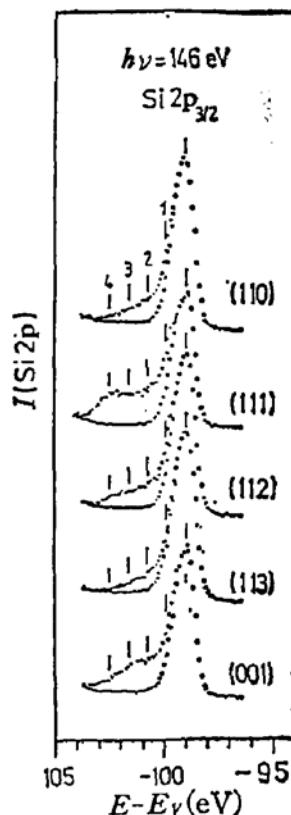


图 3 对 5 个主要晶面测得的清洁表面(下)和曝 10L 氧时表面(上)的  $\text{Si}2p$  光电子谱。纵坐标表示归一化的光电子强度  $I$ , 横坐标表示低于价带顶的能量  $E - E_F$ 。标号 1、2、3 和 4 代表 Si 原子的氧配位数分别为 1、2、3 和 4 时相应的  $\text{Si}2p$  化学位移峰位置。平坦的低指数晶面具有较低的  $\chi$  值, 表明其表面偶极矩较小。

关系,如图 4 所示。关于详细的分析可参阅文献[4]。从(001)至(113),  $\chi$  值随台阶密度的增加而增大,并且从(115)附近开始形成类(113)小面,使(115)-(113)之间的 Si 2p 光电子峰不再是象其它所有晶向那样的单畴结构,而是双畴结构;同时,光电子谱的低能边也表现为两个阈值的叠加。把这些谱线进行分解,得出(113)面的贡献如下面的那条曲线所示。

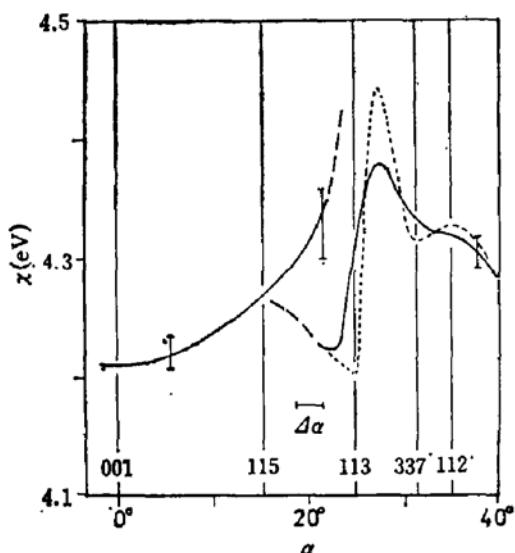


图 4 利用光电子谱测得 Si(113) 附近的电子亲合势  $\chi$  随角度  $\alpha$ (即晶向)的变化。详见文中说明

在光电子谱的测量中,投射到样品表面的入射光束的宽度为 0.3 mm,所对应的角度分辨率  $\Delta\alpha$  约为  $3^\circ$ 。因此,图 4 中每一个晶向的  $\chi$  值实际上是对  $\Delta\alpha$  范围内所有晶向的平均值。考虑到这种影响而对角度分辨率进行定性的修正,其结果如图中的虚线所示。显然,修正后的  $\chi(\alpha)$  关系具有更陡的结构。

$\chi$  在(113)和(337)晶向分别出现极小值,这同在这两个晶向上观察到清晰的和没有小面结构的 LEED 衍射图象很好一致。尤其值得注意的是,(113)晶向的  $\chi$  绝对值为 4.20 eV 与低指数晶面(001)、(111)和(110)的  $\chi$  值(分别为 4.21、4.14 和 4.14 eV<sup>[4]</sup>)很接近。这个结果说明,(113)晶面同低指数晶面一样,具有较小的表面电偶极矩。

综合上述实验结果,即 Si(113)-(3×1) 表面具有较完整的原子排列和象低指数晶面一样低的表面电偶极矩,估计可用于生长优质的半导体异质结外延。

本工作是在西德马普学会 Fritz-Haber 研究所和西柏林 BESSY 完成的。在实验中得到 Dr. W. Ranke 的有效合作,谨表感谢。

### 参 考 文 献

- [1] S. L. Wright, M. Inada and H. Kroemer, *J. Vac. Sci. Technol.*, **21**, 534 (1982).
- [2] G. H. Olsen, T. J. Zamerowsk and F. Z. Hawrylo, *J. Crystal Growth*, **59**, 654 (1982).
- [3] D. J. Chadi, *Phys. Rev.*, **B29**, 785 (1984).
- [4] W. Ranke and Y. R. Xing (邢益荣), *Phys. Rev.*, **B31**, 2246 (1985).
- [5] B. Z. Olshanetsky and V. I. Mashanov, *Surf. Sci.*, **111**, 414 (1981).
- [6] 邢益荣, W. Ranke, 物理学报, 待发表。
- [7] C. Y. Su, P. R. Skeath, I. Lindau and W. E. Spicer, *J. Vac. Sci. Technol.*, **18**, 843 (1981).

### Could Si(113) be Promising in Actual Use?

Xing Yirong

(Institute of Semiconductors, Academia Sinica)

#### Abstract

LEED, oxygen adsorption and surface dipole investigations have been performed on Si(113) surface. The results show that this orientation may be promising for the semiconductor heterojunction epitaxy.