

研究快报

Si(111)7×7 表面结构的运动学低能电子衍射及数据平均方法的研究*

贾金峰 赵汝光 杨威生

北京大学物理系,北京 100871

(1992年5月25日收到,1992年9月1日收到修改稿)

本文用运动学低能电子衍射(KLEED)及数据平均方法(CMTA)对 Si(111)7×7 表面结构进行了研究。通过对 DAS 和 DACS 模型的彻底优化, 我们得到了和实验最相符合的 DAS 模型, 并给出了该表面前五层原子的全部结构参数。

PACC: 6820

1. 引言

Si(111)7×7 表面是人们用 LEED 研究的第一个重构表面。在过去的近 30 年中, 人们使用了几乎所有的表面灵敏的手段来研究这一表面^[1-17]。虽然该表面复杂, 原胞很大, 结构参数非常多, 人们还是得到了许多关于该表面的信息。1983 年, Binnig 等人^[1]根据 STM 图象提出了有 12 个吸附原子(adatom)的模型, Bennett 等人^[8]根据 LEED CMTA 等实验提出 Si(111)7×7 表面存在层错(stacking fault), 还是在这一年, McRae 等人^[9-11]根据 TEM 图象上的强度分布提出了 triangular-dimer 模型, 这一模型中包含了在层错和非层错部分间的二聚物。1985 年, 在对这些模型进行总结后, Takayanagi 等人^[12]提出了包含二聚物、吸附原子和层错的 DAS 模型。之后这一模型得到了许多支持, 如 Tromp 等人^[13]的 STM 实验及 Robinson 等人^[14]的 XD 实验。1988 年黄等人^[15]用 DLEED 确定了 DAS 模型中具体的原子位置。但由于 Si(111)7×7 表面的 DLEED 计算量庞大, 很难对所有的结构参数进行彻底的优化, 因此, 他们的结果并不十分可靠。他们的计算曲线和实验间的 R_{VHT} 因子^[18]只有 0.34, 而给出的参数也不很合理, 如模型中有的键长只有 2.13 Å 等。

另一方面, 杨威生等人^[16]提出的 DACS 模型(dimer adatom-cluster stacking-fault)也能解释许多实验结果, 理论计算也表明这一模型和 STM 结果十分符合^[17]。到目前为止, 还没有实验能区别这两种模型哪一个是正确的。

为了区分这两种模型, 找出与实验最符合的结构参数, 我们用改进后的 KLEED/CMTA 方法^[19-22]对这两种模型进行了彻底的优化。

* 国家自然科学基金资助项目。

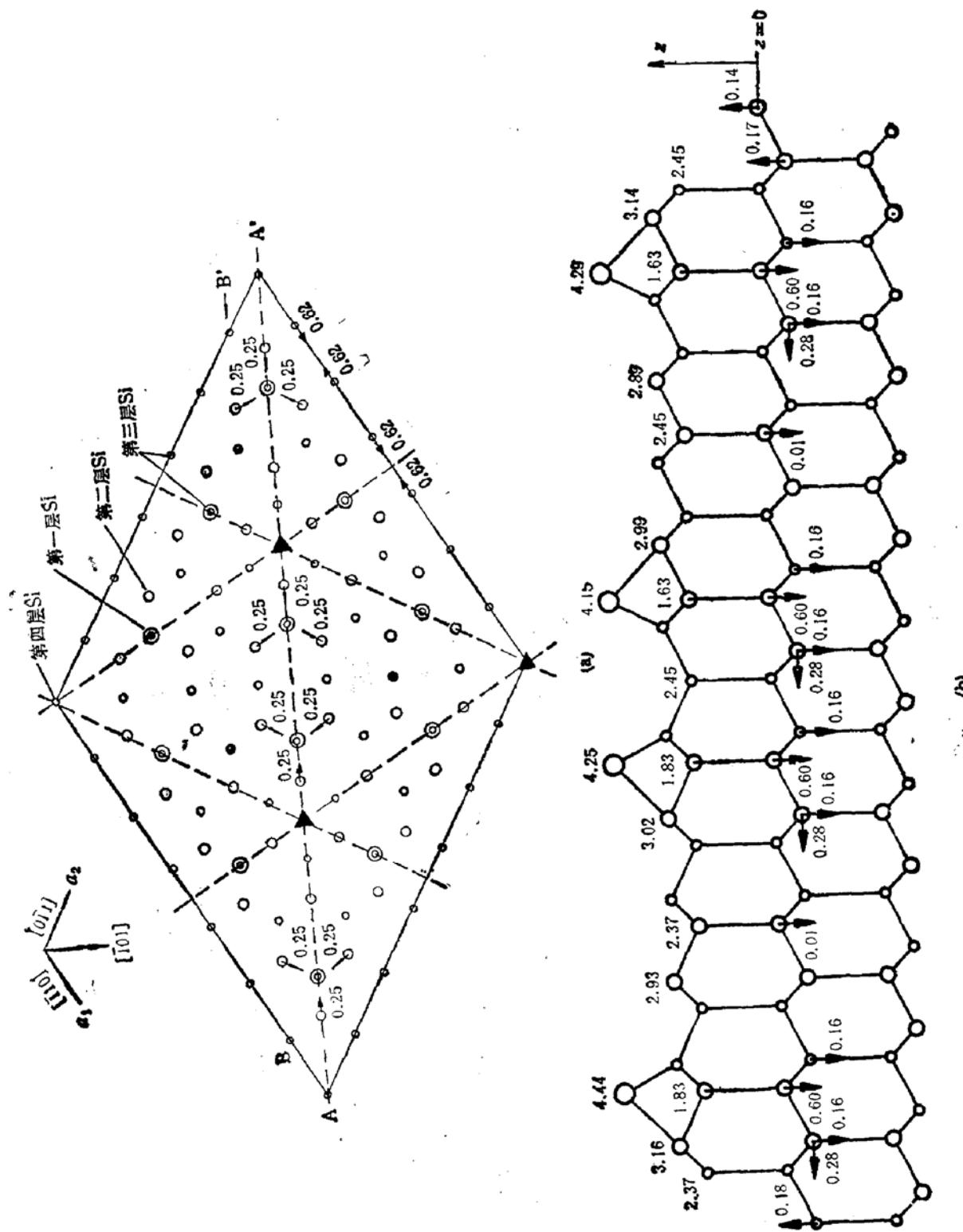


图1 Si(111)7×7 表面的 DAS 模型的原胞结构示意图。(a) 为顶视图,(b) 为侧视图

2. 实验及计算

我们的实验在由主分析室和预制室构成的超高真空系统中进行，主室中装备有四栅极 LEED 光学系统，AES 及 ELS 测量系统。电子入射方向的改变靠五维样品架调节，其调节精度为 $\pm 0.5^\circ$ 。LEED 强度的测量由摄像机-计算机系统完成。所用样品的大小约为： $8 \times 12 \times 0.5\text{ mm}^3$ 。把 Si(111) 单晶片放入主室中，经过 Ar^+ 轰击和高温退火（ 1100°C ，5 分钟， 850°C 保温 10 分钟），便可得到清洁的 Si(111) 表面，在荧光屏上能看到明锐的 7×7 图形。LEED 强度的测量在室温下进行，测量时真空中好于 1.1×10^{-8} 帕斯卡。

我们测量了 10 个衍射束（6 个整数束，4 个分数束）的 CMTA 曲线。每条 CMTA 曲线是用 9 个角度下的测量曲线按相同的 S_\perp 平均后得到的。用文献[19]中的方法，我们对 CMTA 曲线中是否还留有多次散射的影响进行了检验，结果表明 CMTA 曲线中多次散射消除得很好。

在以前的工作中，我们已对 KLEED 计算方法进行了重大的改进^[19-21]。本工作的 KLEED 计算使用的是文献[19]中的公式，为了减小 $f(\theta, E) = 1$ 的近似所引起的误差，计算中使用了平均原子散射因子 $\langle |f(\theta, E)|^2 \rangle$ ^[22-24]。计算原子散射因子所用的相移值由 M. A. Van Hove 等人^[25]的程序及数据库中给出，我们用了五级相移。

由于 Si(111) 7×7 表面结构十分复杂，原胞很大，参数很多，使得在作参数优化时局部最小问题变得十分突出，为了解决这一问题，我们利用了模拟退火的方法和其它一些方法^[24]在大范围内对全部参数进行了优化。计算结果表明这些方法能较好地避免陷入局部最小状态。

3. 结果及分析

图(1)给出了 DAS 模型示意图和优化后的参数。箭头代表原子相对体位置的移动，所标出的数值为位移量，没标箭头的数值为该类原子在 z 方向的位置，单位为 \AA 。(a) 顶视图(在(111)平面上的投影图)，(b) 侧视图(在(101)平面上的投影图)，最大的和中等的圆圈表示在通过 AA' 的(101)面上的原子，小的圆圈表示通过 BB' 的(101)面上的原子。第五层各原子的水平位移的方向与(a)中第二层相同，数值如(b)中标出值。图(2)给出了我们得到的最佳 DAS 模型的 KLEED 计算曲线和实验曲线的比较。经过优化的内势 $V_0 = 11.4\text{ eV}$ 、平均自由程 $\lambda_0 = 5.0\text{ \AA}$ 。

我们的模型中所有的键长变化(相对于体内值 2.35 \AA)都小于 5%。这说明我们给出的参数比文献[15]中的更合理。模型的计算曲线和实验曲线间的总 $R_{\text{VHT}} = 0.15$ ，这比文献[15]中的 0.34 小很多，理论计算和实验曲线间如此好的符合也说明了模型的正确性和可靠性。

在计算中我们发现：模型的计算曲线要与实验符合，一个关键的参量就是吸附原子下面的原子的位置，它要比同一层的原子低很多(约 0.6 \AA)。把我们的结果和黄等人^[15]的比较可看出这些关键参数十分符合。因此情况很可能是，当这些参数合适后 DLEED 计算曲线就与实验比较一致，而他们给出的其它参数优化不够。另外，在黄等人的模型中，第四层 Si 原子有很大重构，而同一双层的第五层 Si 原子却没有重构，这是很不合理的。这也可能是造成他们的计算与实验符合不好的一个原因。

对 DACS 模型的优化也得到了与实验符合得很好的结果(总 $R_{\text{VHT}} = 0.18$)。但吸

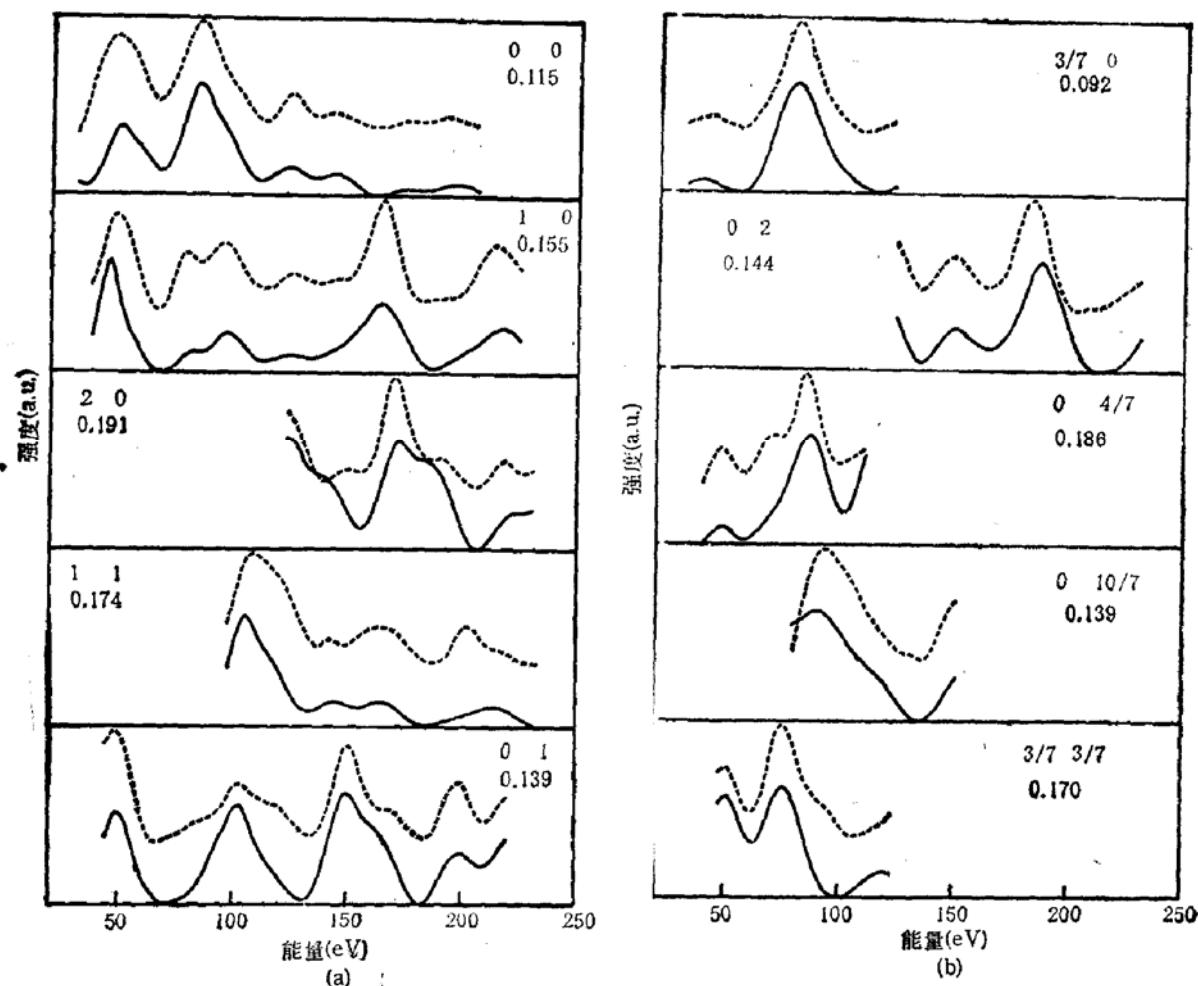


图 2 最佳的 DAS 模型(见图1)的 KLEED 计算曲线(实线)和相应的 CMTA 实验曲线(虚线)的比较。
计算和实验两组曲线间的总 $R_{VHT} = 0.15$ 。图中标出了每个衍射束的指数及单个的 R_{VHT} 因子

附原子团下面的 Si 原子也必须低于同一层的原子很多。在 DAS 模型中, 由于这一原子上面有吸附原子, 这种移动是合理的; 对 DACS 模型, 由于没有吸附原子的作用, 这种很大的移动是不合理的。

4. 结论

我们在大的参数范围内, 对 DAS 模型和 DACS 模型进行了优化。结果表明 DAS 模型与实验符合更好, 并给出了 DAS 模型前五层原子的全部结构参数。

参 考 文 献

- [1] R. E. Schlier and H. E. Farnsworth, *J. Chem. Phys.*, **30**, 917(1959).
- [2] J. J. Lander and J. Morrison, *J. Appl. Phys.*, **34**, 1403(1963).
- [3] W. A. Harrison, *Surf. Sci.*, **55**, 1(1976).
- [4] L. C. Snyder, *Surf. Sci.*, **140**, 101(1984).
- [5] W. S. Yang and R. G. Zhao, *Phys. Rev.*, **B30**, 6015(1984).
- [6] W. S. Yang and F. Jona, *Solid State Commun.*, **48**, 377(1983).
- [7] G. Binnig, H. Rohrer, C. Gerber and E. Weibel, *Phys. Rev. Lett.*, **50**, 120(1983).
- [8] P. A. Bennett, L. C. Feldman and P. J. Silverman, *Phys. Rev.*, **B28**, 3656(1983).
- [9] E. G. McRae, *Phys. Rev.*, **B28**, 2305(1983).
- [10] E. G. McRae, *Surf. Sci.*, **147**, 385(1984).
- [11] E. G. McRae and P. M. Petroff, *Surf. Sci.*, **147**, 385(1984).

- [12] K. Takayanagi, Y. Tanishiro, S. Takahashi and M. Takahashi, *Surf. Sci.*, **164**, 367(1985).
- [13] R. M. Tromp, R. J. Hammers and J. E. Demuth, *Phys. Rev.*, **B34**, 1388(1986).
- [14] I. K. Robinson, W. K. Wasikiewicz, P. H. Fuess, L. J. Norton, *Phys. Rev.*, **B37**, 4325(1988).
- [15] H. Huang, S. Y. Tong, W. E. Packard and M. B. Webb, *Phys. Lett.*, **A130**, 166(1988).
- [16] W. S. Yang and R. G. Zhao, in Proc. 18th Int. Conf. on Physics of Semiconductor, ed. O. Engstrom (World Scientific, Singapore, 1987) p. 65; in Proc. Asia Pacific Symposium on Surf. Phys., ed. Xie XiDe (World Scientific, Singapore, 1987, p. 36).
- [17] F. Wu, R. S. Han and W. S. Yang, in Proc. Asia Pacific Symposium on Surf. Phys., ed. Xie XiDe (World Scientific, Singapore, 1987) p. 203.
- [18] M. A. Van Hove, S. Y. Tong and M. H. Eleonin, *Surf. Sci.*, **64**, 85(1977).
- [19] 贾金峰, 李燕芳, 赵汝光, 杨威生, 《物理学报》, **41**(5), 819(1992).
- [20] 贾金峰, 赵汝光, 杨威生, 《物理学报》, **41**(5), 827(1992).
- [21] 贾金峰, 赵汝光, 杨威生, 《半导体学报》, **13**(10), 646(1992).
- [22] 贾金峰, 赵汝光, 杨威生, 《半导体学报》, **14**(1), 63(1993).
- [23] M. G. Lagally, T. C. Ngoc and M. B. Webb, *Phys. Rev. Lett.*, **26**, 1557(1971).
- [24] 贾金峰, 博士论文, 北京大学物理系, 未发表.
- [25] M. A. Van Hove, S. Y. Tong, *Surface Crystallography by LEED* (Springer, Berlin, 1979).

Atomic Structure of the Si(111) 7×7 Surface Studied by KLEED/CMTA Method

Jia Jinfeng, Zhao Ruguang, and Yang Weisheng

Department of Physics, Peking University, Beijing 100871

(Received 25 May 1992; revised manuscript received 1 September 1992)

Abstract

The atomic structure of the Si(111) 7×7 surface is investigated using the improved kinematic low-energy electron diffraction approach in conjunction with the constant-momentum transfer averaging technique (KLEED/CMTA). After optimizing DAS and DACS models, we got the optimum DAS model which produces calculated spectra in remarkably good agreement with the experimental curves. We give all the structural parameters of the model.

PACC: 6820