

# Si(001)-(2×1)的金属性表面态

徐亚伯 陈晓华 李海洋

(浙江大学物理系)

1986年11月11日收到

利用角分辨紫外光电子谱仪,首次发现在 Si(001)-(2×1) 面上存在着金属性表面态,该态位于能量为 $\sim 0.1\text{eV}$ ( $E_F$  以下)  $\Gamma$  对称点附近,而且存在范围很窄. 在(001)的邻面上未发现这种态. 我们认为 Si(001) 面的金属性表面态可能来自表面部分的对称双聚键.

## 一、引言

近几年来,虽然 Si(001) 的表面性质得到广泛的研究,但其表面结构和表面电子结构仍存在一些问题有待回答<sup>[1]</sup>. 目前,人们普遍认为 Si(001) 面除了(2×1)再构外,还存在 C(4×2)、P(2×2) 等再构. 对 Si(001)-(2×1) 表面再构提出了许多模型<sup>[2]</sup>,如对称双聚键模型、空位模型等,根据这些模型理论上计算得到的表面能带都属于金属性,与 Himpsel<sup>[2]</sup> 等人的 UPS 结果不一致. Chadi<sup>[3]</sup> 从双聚键模型出发,提出非对称双聚键模型,即双聚键不再是与表面平行,而是发生倾斜,双聚键中一个原子向内、另一个原子向外发生弛豫,根据该模型计算得到的表面态呈半导体性,与 UPS 实验<sup>[2]</sup>的结果一致. 非对称双聚键迄今已得到越来越多的理论计算和实验的支持. 但是,1984年 Kevan<sup>[4]</sup> 等人利用高分辨光电子谱在 Ge(001) 面上首次发现存在金属性表面态;1985年 Tromp<sup>[5]</sup> 等人用扫描隧道显微镜 (STM) 对 Si(001) 面的双聚键进行了观察,发现在 Si(001) 面上不仅有非对称双聚键,而且也存在相当数量的对称双聚键.

本工作利用角分辨紫外光电子谱仪,首次发现在 Si(001) 面上存在金属性表面态.

## 二、实验

实验所用的 Si 样品 (0.1 $\Omega$ -cm, n 型, B 掺杂) 表面呈透镜形,曲率半径为 40mm,直径为 20mm,样品中心区域为(001)平面,(001)面的邻面是些台阶面<sup>[6,7]</sup>.

样品的清洁是通过多次 Ar<sup>+</sup> 轰击和退火 ( $\sim 1000^\circ\text{C}$ ) 获得的,清洁度和有序度经 AES 和 LEED 检测,LEED 观察显示,在样品中心区域即(001)平面上,LEED 点不分裂,只有(2×1)再构,在 Si(001) 的邻面,LEED 点发生分裂,说明存在台阶结构.

角分辨光电子谱测量在 ADES400 (VG 公司) 上进行,紫外光源是 HeI(21.2eV),费米能级由制作样品架的材料钽的光电发射确定,能量分辨率约为 0.2eV,在样品和紫外灯之间设置了光栏,使光斑在样品表面上大小约为  $2 \times 2\text{mm}^2$ ,入射面和分析面都取在 [100] 方向,这样(001)面上的两个畴(2×1)和(1×2)的光电发射等价,避免畴的影响.

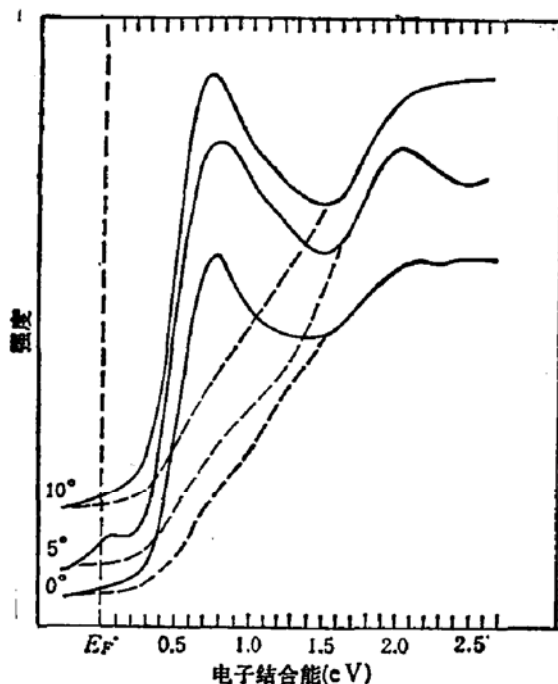


图1 Si(001) 面的角分辨光电子谱,光源是 HeI(21.2eV), 光的人射角为 45°,人射面和分析面取在[100]方向. 实线是清洁表面的光电发射,虚线是吸水(2L)后表面的光电发射

通过吸附水,将表面的光电发射与体内的光电发射分离。

### 三、实验结果和讨论

图1是在(001)面上测到的光电子谱,除了能量在 0.7eV ( $E_F$  以下)处的表面态外,我们还发现在  $E_F$  附近有一个金属性表面态,实验观察到的该态能量宽度约为 240meV,我们估计该态自然宽度  $\leq 100\text{meV}$ . 该态在  $k$  空间存在范围很窄,在发射角为 5° 时达到极大,随着偏离角度增加而逐渐减小,当偏离超过 4° 时,小峰完全消失. 另外我们还测量了取向偏离(001)面 6° 三个台阶面上的光电发射,均未发现金属性表面态。

我们在(001)面上得到的实验结果,与 Kevan<sup>[4]</sup> 等人在 Ge(001) 面上发现的类金属表面态相似,特别是与角度的关系,他们发现的金属性表面态在法向发射达到极大,偏离法向 3.5° 时峰消失,我们观察到的峰的出现范围与他们基本一致,只是峰的极大发生很小的偏离,这可能来自实验中样品的定向. 他们研究了该态随温度变化与 Ge(001) 面无序向有序转化的关系,认为金属性表面态来自一些表面缺陷团,这些表面缺陷团的相干范围  $\sim 3$  双聚键长,从而形成很窄的能带. 台阶也是一种表面缺陷,我们在台阶面上未观察到金属性表面态,说明台阶这种缺陷不产生金属性表面态. 目前,我们对该态还没有确定的解释,虽然该态在  $E_F$  处有一定强度,明显呈现出金属性,但是由于存在一定的能量分辨率,我们还不能排除能隙小于 100meV 的半导体能带的存在. Tromp<sup>[5]</sup> 等人用扫描隧道显微镜发现在 Si(001) 面上不仅存在非对称双聚键,而且也存在对称双聚键和部分空位缺陷;理论上计算对称双聚键得到的表面态是金属性的,根据以上两点,我们推测表面的

部分对称双聚键也有产生金属性表面态的可能,而且根据 Tromp<sup>[1]</sup> 的 STM 观察,具有对称双聚键原子团的范围约十几个埃,也能形成很窄的能带,不过对这样大小的原子团,对称双聚键模型是否在理论上仍能得到金属性表面态,以及在对称双聚键和非对称双聚键数量相当时,取什么模型,理论上和实验上尚需进一步的研究。

#### 四、结 论

我们利用 AR UPS 首次在 Si(001)-(2×1) 表面发现金属性表面态,我们认为该态可能来自表面的部分对称双聚键。

作者感谢西德马普学会 Fritz-Haber 研究所的 W. Ranke 博士在实验初期给予的帮助。本工作是在浙江大学测试中心电子能谱室完成的,得到了刘古教授、季振国和周小霞同志的支持。

#### 参 考 文 献

- [ 1 ] D. E. Eastman, *J. Vac. Sci. Technol.*, 17, 492(1980).
- [ 2 ] F. J. Himpsel and D. E. Eastman, *J. Vac. Sci. Technol.*, 16, 1297(1979).
- [ 3 ] D. J. Chadi, *Phys. Rev. Lett.*, 43, 43(1979).
- [ 4 ] S. D. Kevan and N. G. Stoffel, *Phys. Rev. Lett.*, 53, 702(1984). S. D. Kevan, *Phys. Rev.*, 32, 2344(1985).
- [ 5 ] R. J. Tromp, R. J. Hammers and J. E. Demuth, *Phys. Rev. Lett.*, 16, 1303(1985).
- [ 6 ] B. Z. Olshanetsky and A. A. Shklyayev, *Surf. Sci.*, 82, 445(1979).
- [ 7 ] R. Kaplan, *Surf. Sci.*, 93, 145(1980).

### Metallic Surface State on Si(001)-(2×1)

Xu Yabo, Chen Xiaohua and Li Haiyang

(Department of Physics, Zhejiang University)

#### Abstract

A metallic or nearly metallic surface state on Si(001)-(2×1) has been firstly discovered, using angle-resolved UV photoemission. It locates at about 0.1 eV below  $E_F$  near the  $\Gamma$  symmetry point. Because the metallic surface state has not been found on the stepped surfaces, it could be excluded that defects such as steps are the origin of the metallic surface state. We propose that the metallic surface state would be from the partly symmetric dimers on the Si(001).