

In/InP(110) 及 P/InP(110) 表面电子态

徐至中 沈静志

(复旦大学现代物理研究所)

1985年8月4日收到

以 In/InP(110) 及 P/InP(110) 表面模拟富 In 及富 P 的 InP 表面,采用半经验的紧束缚方法计算了 In/InP(110) 及 P/InP(110) 表面的电子能态. 并与实验结果相比较,讨论了 InP(110) 表面化学成分偏析对费米能级钉扎的影响.

一

Au、Ag、Cu/InP(110) 表面的实验结果表明^[1-3], Au、Ag、Cu 与 InP 表面间存在有复杂的互扩散效应. 在界面形成过程中, InP(110) 表面层的化学成分常发生偏析,表面 In 原子或表面 P 原子或者扩散至金属覆盖层外侧,或者与金属覆盖层形成合金或化合物. 很显然, InP(110) 表面层的化学成分偏析一定会影响肖脱基势垒高度,也即影响费米能级的钉扎位置. 为了探讨半导体表面化学成分偏析与费米能级钉扎之间的关系,我们以 0.5 ML 覆盖度的 In/InP(110) 及 P/InP(110) 表面模拟 InP(110) 表面富 In 及富 P 的情况,计算了此两种情况下的表面电子能态.

我们用以赝 In、赝 P 原子分别去饱和底表面 P、In 原子悬键的五层平板模拟半无限大的 InP 晶体. 吸附的 In 或 P 原子分别处于其相应的体正常位置上. 采用半经验的紧束缚方法进行计算,紧束缚参数使用 Vogl 等^[4]所给出的数据. 赝原子的饱和参数按下面的方法选恰得到: 以上下表面都用赝原子饱和的五层平板模拟体 InP 晶体,计算它的电子能带结构及态密度,调节饱和参数使计算得到的禁带宽度及电子态密度与 InP 的体禁带宽度及体态密度符合得最好.

二

图 1、图 2 分别示出了 In/InP(110) 及 P/InP(110) 表面的局域态密度. 实线与虚线分别表示定域在表面层及吸附原子附近的局域态密度,锁线表示 InP 的体态密度. 从图中可以看到,对于 In/InP(110) 表面,在体价带顶上面约 0.6 eV 处存在有表面电子态. 而对于 P/InP(110) 表面,在禁带中存在有两个表面电子态,一个处于价带顶附近,使价带边延伸至体价带顶上面 0.4 eV 附近. 另一个表面态处于体价带顶上面 0.8 eV 处. 前者由未饱和的表面 In 原子悬键所产生,而后者则主要由吸附的 P 原子所产生.

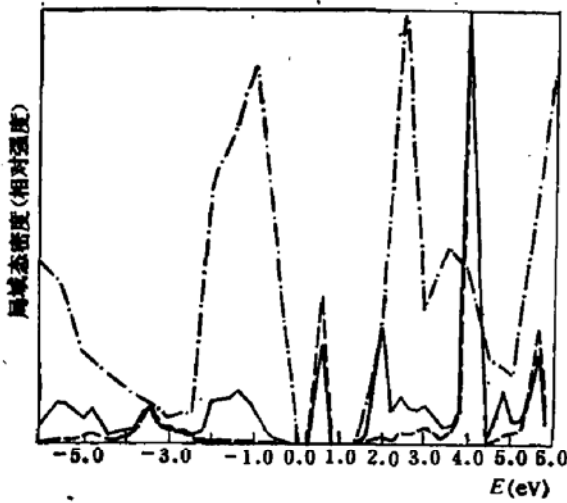


图1 In/InP(110) 表面电子局域态密度

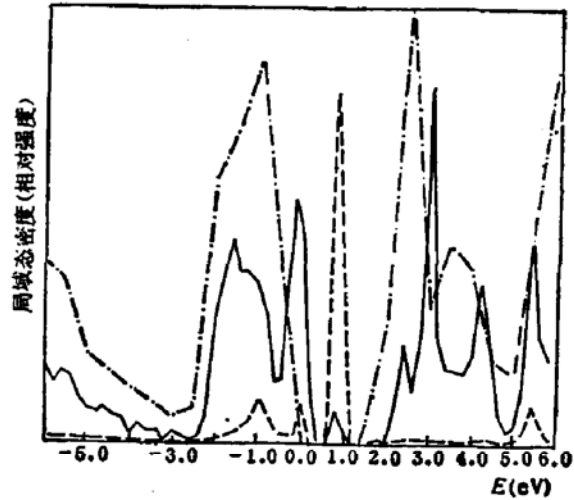


图2 P/InP(110) 表面电子局域态密度

三

Shapira 等利用表面光伏谱 (SPS) 及俄歇电子能谱 (AES) 对在各种工艺条件下的 InP(110) 表面进行测量的结果表明^[2], 在超高真空条件下解理的 InP(110) 表面可能是富 P 的。并且指出 n-InP 在体价带顶上面 0.2 eV 处存在有满的表面态。这一表面态可与我们的计算结果, 体价带顶上面 0.4 eV 表面能级相对应。但是他们的实验对 n-InP 并没有发现体价带顶上面的空的 0.8 eV 表面能级。对于 P-InP, 他们的实验结果指出, I 型的 p-InP 可能在体导带底下面 1.25 eV (如果认为 InP 的体禁带宽度为 1.35 eV, 即相应于价带顶上面 0.1 eV) 处存在有满的表面态, 而在体价带顶上面 1.1 eV 处存在有空的表面态; II 型的 p-InP 分别在体价带顶上面 0.05 eV 及 1.25 eV 处存在有满的及空的表面态。这些表面能级能与我们的计算结果定性相符。

Au/InP(110) 表面^[1] 及 Cu/InP(110) 表面^[2] 的实验都表明在金属层与 InP 界面处, InP(110) 表面可能是富 In 的。实验结果表明: 对 n-InP, Au/InP(110) 及 Cu/InP(110) 界面处的费米能级钉扎位置均处在体价带顶上面 0.75 eV (即体导带底下面 0.6 eV) 处; 对 P-InP, Au/InP(110) 界面处的费米能级钉扎在体价带顶上面 0.64 eV 处。这些实验结果均可与我们的计算值定性相符。

四

从 Shapira 等的实验结果可以看到, 实际上理解 InP(110) 表面情况是非常复杂的。表面化学成分的偏析程度常与具体工艺过程有关。而我们的模型却比较简单, 认为表面的某种化学成分发生完全的偏析。因此, 我们的计算只能对上述实验结果作定性的说明。对于 Au、Cu/InP(110) 表面, 情况更为复杂。这时, 不仅表面化学成分的偏析程度可以各不相同, 而且各种不同的金属覆盖层对表面电子结构可以产生各不相同的影响。因此, 在这种情况下, 我们的计算结果对表面化学成分偏析与费米能级钉扎之间的关系只能作

某些定性的说明。要完全说明费米能级钉扎与表面化学成分偏析间的关系,尚须作更大量的理论方面以及实验方面的工作。

作者感谢希德老师及张开明老师的指导和帮助。

参 考 文 献

- [1] I. A. Babalola, W. G. Petro, T. Kendelewicz, I. Lindau and W. E. Spicer, *J. Vac. Sci. and Technol.*, **A1**, 762(1983).
- [2] T. Kendelewicz, W. G. Petro, I. A. Babalola, J. A. Silberman, I. Lindau and W. E. Spicer, *Phys. Rev.*, **B27**, 3366(1983).
- [3] I. A. Babalola, W. G. Petro, T. Kendelewicz, I. Lindau and W. E. Spicer, *Phys. Rev.*, **B29**, 6614(1984).
- [4] P. Vogl, H. P. Hjalmanson and J. D. Dow, *J. Phys. Chem. Solid*, **44**, 365(1983).
- [5] Y. Shapira, L. J. Brillson and A. Heller, *Phys. Rev.*, **B29**, 6824(1984).

Electronic States of In/InP (110) and P/InP (110) Surfaces

Xu Zhizhong and Shen Jingzhi

(Institute of Modern Physics, Fudan University)

Abstract

By semi-empirical tight-binding method, we have calculated the electronic states for the In/InP(110) and P/InP(110) surfaces, which are supposed to simulate the In-rich and P-rich InP(110) surfaces respectively. Comparing the results of our calculations with those of the experiments, the effects of the compositional and stoichiometric variations of InP(110) surfaces on the Fermi-level pinning are discussed.