

GaAs(100) 表面 (4×1) 结构的 UPS 研究

徐 亚 伯

(浙江大学物理系)

董国胜 丁训民 杨 曙 王 迅

(复旦大学现代物理研究所)

1982年12月28日收到

提 要

用偏振的紫外光源测量了 GaAs(100)表面(4×1)结构的 UPS 谱. 从清洁表面和吸附氧以后 UPS 的差谱中辨别出了在价带顶以下 2eV 以内的表面态峰. 根据用偏振光所得到的谱和跃迁选择定则的讨论, 认为表面态包含了三个峰. 价带顶以下 0.5eV 处有一个对应于表面 Ga 原子桥键态的峰, 在 0.7eV 处有对应于表面 As 原子桥键态的峰, 而在 1.3eV 处的峰则同表面原子的悬键态相联系.

一、引 言

GaAs 是继 Si 之后最重要的半导体材料. 它在制备微波器件、光电器件和高速集成电路方面有良好的前景, 因而成为目前国内外进行基础研究投入力量最多的一种半导体材料. 对于清洁的 GaAs 表面, 过去的研究较多集中于 (110) 面. 但在器件工艺中, 最常用的是 (100) 面. 对它的研究较少, 了解也不多. 且这种表面上可以出现许多种再构^[1], 因而是研究表面再构的起因及其对表面性质影响的比较合适的一种表面, 值得进一步探索.

GaAs(100) 面是一个极性表面, 平行于表面的各原子层交替地只包含 As 或 Ga 一种原子. 最外面的一层可能是不完整的, 因而表面的 Ga, As 原子比会偏离化学计量比. 不同的表面再构是同表面不同的原子比相联系的. 表面再构的变化会反映在表面电子态及其分布的变化上. 紫外光电子能谱是研究表面电子态的一种方法. 一些作者测量过 GaAs(100) 面的紫外光电子能谱^[2-4], 其中 Larsen 等人^[4]用的是角分辨的光电子能谱, 从中获得了有关表面态及其色散关系的信息, 他们所研究的结构是 (2×4), $c(4 \times 4)$ 和 (4×2) 再构. 迄今没有见文献报道过用偏振光来研究 GaAs(100) 面 UPS 谱的工作. 而从偏振光激发的 UPS 谱中, 一般可以给出表面电子态对晶体中某些平面的对称性质.

本文用角分辨紫外光电子能谱对过去研究得较少的一种 GaAs(100) (4×1) 再构进行了测量, 并且用偏振光将测得的表面态同表面 Ga, As 原子的不同键状态相联系起来.

二、实验方法

实验是在 ADES400 型角分辨电子能谱仪上进行的。样品为 n 型 GaAs(100) 单晶, 掺 Te, $n = 5 \times 10^{17}/\text{cm}^3$, 经化学机械抛光和清洗后, 放入真空室。真空室的基本压强低于 10^{-8}Pa 。样品表面的清洁处理是: 先用 4keV 能量的氩离子刻蚀 30min, 去掉约 1000 Å 厚的表面损伤层, 再用 1keV 氩离子刻蚀 10min, 以减轻由高能氩离子刻蚀所引起的损伤及表面粗糙化, 然后在 500—550°C 温度下退火半小时, 冷却后可看到 (4×1) LEED 图样。用 XPS 在表面上测不出 C, O 或其它杂质的信号, 证明它是清洁表面的一种再构。这种再构在 10^{-8}Pa 的真空室中放置 24h, LEED 图样看不出明显变化。如果氩刻后的退火温度提高到 550°C 以上, 则开始出现 $c(8 \times 2)$ 图样, 这是用氩刻加退火最容易获得的一种再构^[1]。而退火温度降低到 500°C 以下时, 看到的是所谓的“ (4×6) ”图样^[2], 即由 (4×1) 和一个较模糊的 (1×6) 图样的混合。对几块不同掺杂的样品, 用上述办法均能重复地获得 (4×1) LEED 图样。只有 Massies 等人^[6]报道过在 GaAs(100) 面得到 (4×1) 再构, Bachrach 等人^[7]则认为 (4×1) 再构只在高温下出现, 在室温时看不到, 仅是一种过渡结构。而从我们的实验中说明, (4×1) 是 GaAs(100) 表面出现的一种介于“ (4×6) ”和 $c(8 \times 2)$ 之间的稳定再构。

UPS 的测量用 HeI 和 NeI 紫外共振灯作为光源, 其光子能量分别为 21.2eV 和 16.8eV, 可以激发从价带和表面态的电子到达不同终态的跃迁。激发的光电子用一个 127° 扇形电子能量分析器接收, 分析器可以绕样品转动, 其角度分辨率约为 $\pm 4^\circ$ 。能量分辨率可根据分析器的通能调节, 一般约为 0.2eV 左右。

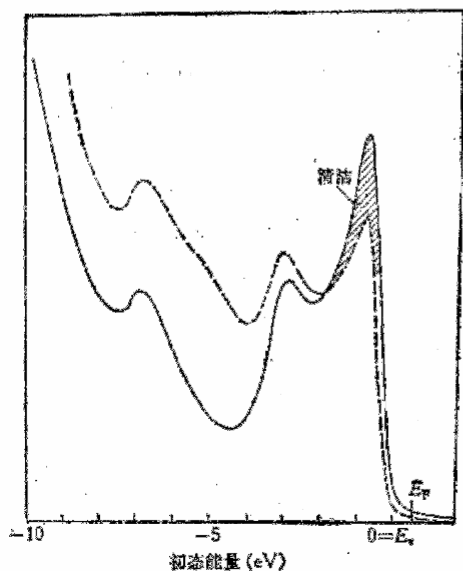


图 1 用 NeI 光测得的 GaAs(100)(4×1) UPS 谱

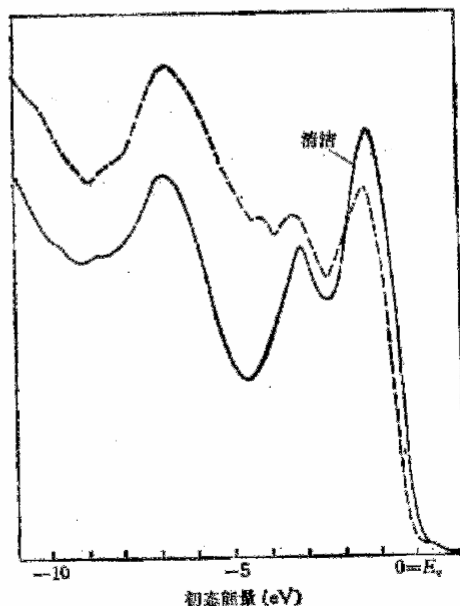


图 2 用 HeI 光测得的 GaAs(100) (4×1) UPS 谱

三、实验结果和讨论

1. 法向发射的 UPS 谱

图 1 和 2 是用 NeI 和 HeI 光源对 GaAs(100) (4×1) 再构表面所测得的法向发射光电子能谱。图中虚线表示吸附氧(暴露量 $\sim 2 \times 10^5 \text{L}$)以后的谱。谱仪本身的能量定标可给出费密能级 E_F 的位置, 而表面价带顶 E_v 的位置由氧吸附后谱的前沿外推来确定。用两种光源都测得 E_v 位于 E_F 以下 0.5eV 处。

HeI 和 NeI 谱的基本特征相同, 表示在这样的光子能量范围内终态不起主要的影响。谱中价带顶以下约 3eV 和 6.8eV 处的两个峰被认为是来自于体内^[4]。在价带顶以下约 1eV 处有一个峰, 根据表面吸附氧以后这个峰明显降低, 可以判断它是由表面态所贡献的, 关于这个峰的性质在下面还要讨论。在 E_v 以下 $2-12 \text{eV}$ 的范围内, 虽然吸附氧以后的谱线也有明显变化, 但因为在这一范围内氧的谱峰也很强, 因而难于从差谱中将表面态的贡献区分出来。

2. 用偏振光产生的法向发射谱

用 NeI 光经过偏振器后可以产生电场矢量平行于入射面的 P 偏振光或电场矢量垂直于入射面的 s 偏振光(由转动偏振器的角度来决定)。取入射面平行于 (4×1) LEED 图中“4”的方向, 测得清洁的和吸附氧的 GaAs(100) 面由偏振光所产生的 UPS 谱, 如图 3 和图 4 所示。由它们的差谱得到了表面态的分布, 示于图中上半部。在 s 偏振光的情形, 表面态是一个峰, 位于 E_v 以下 0.5eV 处; 而在 P 偏振光的情形, 表面态是两个峰, 分别位于 E_v 以下 0.7eV 和 1.3eV 处。所以, 由偏振光的测量表明, 前面图 1 和图 2 中所看到的表面态峰, 实际上是由三个态的峰所组成的。

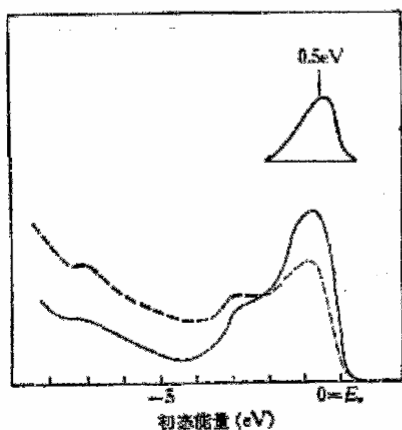


图 3 用 NeI s 偏振光测得的 UPS 谱
虚线氧暴露量 10^4L

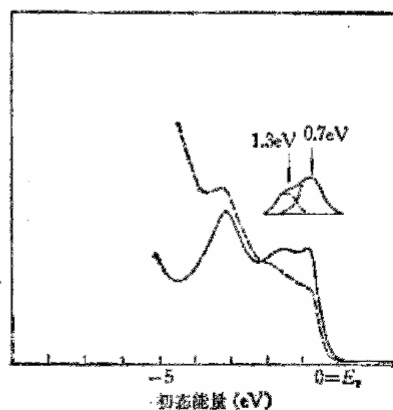


图 4 用 NeI p 偏振光测得的 UPS 谱
虚线氧暴露量 10^4L

从偏振光激发的光电子谱中, 可以获得有关表面电子态对入射面对称性的信息。因为从初态 i 到终态 f 的跃迁几率 P 是由下述关系决定的:

$$P \propto |\langle f | \mathbf{A} \cdot \mathbf{p} | i \rangle|^2,$$

式中 $\mathbf{A}$ 为光的矢量势, $\mathbf{p}$ 为电子的动量算符, $\langle f |$ 和 $| i \rangle$ 分别为终态和初态的波函数. 假定终态是近似自由电子态, 其波函数是球面对称的, 对入射面也总是对称的. 对于 s 偏振光, $\mathbf{A}$ 垂直于入射面, 当初态波函数对入射面为对称时, 上述跃迁矩阵元为零, 即这种跃迁是禁戒的, 所以 s 偏振光探测的是对入射面反对称的初态. 而 p 偏振光的 $\mathbf{A}$ 平行于入射面, 对反对称的初态是禁戒的, 它所探测的是对入射面对称的初态.

在 $\text{GaAs}(100)$ 面上, 表面 Ga 和表面 As 原子都具有被切断的键. 根据 Appelbaum 等人^[9]的分析, 表面原子被割断的键联系着两种表面态: 一种是悬键态, 它的伸展方向垂直于表面向外, 它对于垂直于表面的入射面总是对称的; 另一种是桥键态, 它的伸展方向在表面平面内, 它对被割键所处的平面对称的, 而对与此面垂直的平面是反对称的. 在我们的实验条件下, 入射面是沿 (4×1) LEED 图样中的“4”方向, 即与 As 的被割键平面相重合, 而与 Ga 的被割键平面相垂直^[9]. 因而, 对 Ga 和 As 的悬键态, 入射面总是对称面; 对 As 的桥键态, 入射面也是对称面; 而对 Ga 的桥键态, 入射面是反对称的. 根据前面关于选择定则的论述, s 偏振光测到的是 Ga 的桥键态, p 偏振光测到的则是 As 的桥键态、悬键态以及 Ga 的悬键态. 于是我们可以认为, 0.5eV 处的峰对应于表面 Ga 原子的桥键态, 而 0.7eV 和 1.3eV 的两个峰可能对应于表面 Ga 的悬键、表面 As 的悬键和桥键这三种态中的某些态.

为了辨认后面两个峰, 我们将样品绕表面法线旋转 90° 后再测量用 NeI s 偏振光激发的 UPS 谱. 这时入射面平行于 (4×1) LEED 图样中“1”的方向, 在 s 偏振光下的差谱 (见图 5) 中有一个峰在 E_v 以下 0.7eV 处. 这个态对平行于“1”方向的镜像面是反对称的, 看来属于表面 As 原子的桥键态. 至于 1.3eV 的峰则可能来自悬键态.

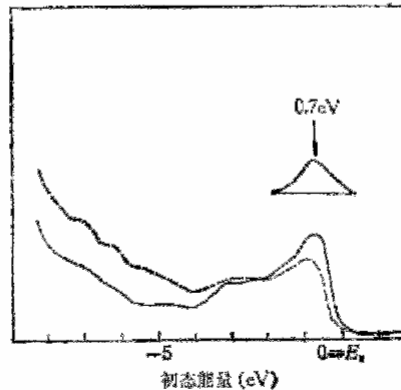


图 5. 虚线氧暴露量 10^{19}L

对 $\text{GaAs}(100) (4 \times 1)$ 结构的表面态尚无理论计算可以比较. 但 Ivanov 等人^[10]对 (1×1) 理想表面作了计算, 其悬键和桥键均在 E_v 以下约 2eV 以内. 与之比较, 上述推测看来是合理的.

参 考 文 献

- [1] W. Ranke and K. Jacobi, *Progress in Surface Science*, **10**(1981), 1.
- [2] R. Ludeke and L. Ley, *Physics of Semiconductors*, (1978), (Inst. Phys. Conf. Ser. 43), p. 1069.
- [3] R. Z. Bachrach, R. S. Bauer, P. Chiaradia and G. V. Hansson, *J. Vac. Sci. Technol.*, **19**(1981), 335.
- [4] P. K. Larsen, J. H. Neave and B. A. Joyce, *J. Phys. C*, **12**(1979), L869; P. K. Larsen *et al.*, *J. Phys. C*, **14**(1981), 167; P. K. Larsen *et al.*, *Solid State Commun.*, **40**(1981), 459; P. K. Larsen and J. F. van der Veen, *J. Phys. C*, **15**(1982), L431.
- [5] P. Drathen, W. Ranke and K. Jacobi, *Surface Sci.*, **77**(1978), L162.
- [6] J. Massies, P. Devoldere and N. T. Linh, *J. Vac. Sci. Technol.*, **15**(1978), 1353.
- [7] R. Z. Bachrach, R. S. Bauer, P. Chiaradia and G. V. Hansson, *J. Vac. Sci. Technol.*, **18**(1981), 797.
- [8] J. A. Appelbaum, G. A. Baraff and D. R. Hamann, *Phys. Rev.*, **14**(1976), 1623.
- [9] A. Y. Cho, *J. Appl. Phys.*, **47**(1976), 2841.
- [10] I. Ivanov, A. Mazur and J. Pollmann, *Surface Sci.*, **92**(1980), 365.

THE UPS STUDY OF GaAs(100) SURFACE (4×1) STRUCTURE

XU YA-BUO

(Department of Physics, Zhejiang University)

DONG GUO-SHENG DING XUN-MIN YANG SHU WANG XUN

(Institute of Modern Physics, Fudan University)

ABSTRACT

The ultraviolet photoelectron spectroscopy of GaAs (100) surface (4×1) structure has been measured by using a polarized UV light source. From the differential spectra between the UPS of the clean surface and the surface with adsorbed oxygen, the surface state peak located within 2eV below valence band maximum could be identified. According to the spectra obtained with s- and p-polarized light and the selection rule of electron transition, it could be shown that this surface state consists of three peaks: the peak at 0.5eV below valence band maximum corresponding to the bridge bond states of surface Ga atoms, the peak at 0.7eV resulting from the bridge bond states of surface As atoms, and the peak at 1.3eV related to the dangling bond states.