

Si(001) 邻面上与台阶有关的电子态*

陈晓华 徐亚伯

(浙江大学物理系)

W. Ranke

(Fritz-Haber-Institut der Max-Planck-Gesellschaft, F. R. G.)

李 海 洋

(浙江大学物理系)

季 振 国

(浙江大学中心实验室)

1986年6月18日收到

提 要

我们用角分辨光电子谱 (ARUPS) 研究了 Si(001) 邻面上与台阶有关的电子态。在对称点 $\Gamma(K_{11} = 0)$, 发现此态的能级在 E_F 以下 0.5—0.6 eV 处。同时还测得该态的色散 (< 0.3 eV) 比正常的 Si(001) 表面态的色散 (0.6—0.7 eV) 来得小。

一、引 言

单晶表面的台阶对表面的许多性质 (诸如吸附热、粘着系数、催化活性、表面的电子状态、功函数及能带弯曲等^[1]) 有显著的影响。因此, 常用高 Miller 指数的面与低 Miller 指数的面进行比较的方法来研究台阶对表面的影响^[2]。使用柱形或球形表面的样品, 可更方便地对表面性质依赖于面方向的情况进行系统的测量与研究^[3]。

我们的工作是用透镜形的 Si 样品 (电阻率 $0.1 \Omega \cdot \text{cm}$, p 型硼掺杂), 研究了与台阶相关的电子态。在有台阶的面上, 由于在面内的某一方向的周期性中断, 在台阶周围有局域 (具有与正常表面态不同的能量) 的电子态存在。通过对球面样品上不同点的 UPS 谱的比较, 可测出与 Si(001) 邻面上的台阶有关的电子态。

二、实 验

实验是在 ADES-400 角分辨能谱仪上进行的, 系统的本底真空度为 5×10^{-9} Pa。

透镜形的 Si 单晶样品如图 1 所示, 曲率半径 $R = 40 \text{ mm}$, 样品直径 $d = 20 \text{ mm}$ 。图 1 中还标出了两个测量点的法线的取向。

* 中国科学院科学基金资助的课题。

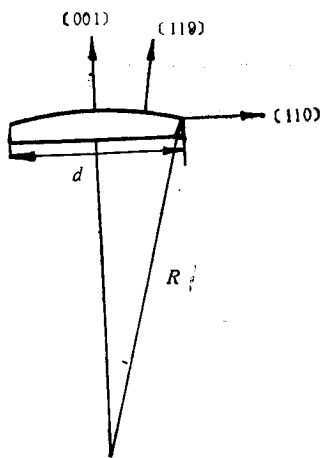


图 1

测量前,样品用能量为 1keV 的氦离子轰击后经加热到 $\geq 1000^\circ\text{C}$ 保温 5min 退火。样品表面的清洁程度和有序程度,用 AES 和 LEED 来检测。在测试中为保持样品的清洁,每次测量 25min ,后就对样品快速加热到 $(700-800^\circ\text{C})$ 除气一次,测量是在样品温度 $< 150^\circ\text{C}$ 时进行的。每快速加热四次后就再进行一次离子轰击和退火。

为了提高在样品表面上位置的分辨率,在紫外灯和样品间加入了光栏,其小孔大小为 $1.4 \times 1.0\text{mm}^2$,照到样品表面的光斑约为 $2 \times 2\text{mm}^2$ 。

用吸附水(暴露量 2L)来区分出体内电子对 UPS 谱的贡献。在 E_F 以下 1.5eV 范围内吸附的水对谱的贡献很小。

测量不同点时,将样品相对于固定光束移动,并保证不同的样品点被测时都在分析器的“焦点”处。

三、邻近面的结构

Olshanetsky^[4] 和 Kaplan^[5] 对 $\text{Si}(100)$ 的邻面进行过研究。与我们的工作有关的两个重要结果是:(1)邻面上存在着有序的台阶,每台阶的高度是两个原子层;(2) $\text{Si}(001)$ 表面上 (2×1) 和 (1×2) 两种畴的数量是均等的,但在沿 $[110]$ 方向有台阶的邻近面上,两种畴数量不等,凡双聚原子间连线在面上投影与台阶平行的畴占明显优势。

球形表面上各点(图6所示的 O, F, G, H 点)的 LEED 如图2所示。和 Olshanetsky, Kaplan 在平的面上所得结果一致。

无再构的有台阶表面原子排列的侧视图如图3所示。

当台面的宽度足够大时,台面上的表面态应与无台阶的 (001) 面上的表面态相似,但要注意有以下两点区别:

(1)在台面两端的悬键态,由于外侧没有与其相互作用的悬键态,会有不同的能量,因此和正常表面态联系的台面“面积”将变小(见第4节)。

(2)某种畴的优势,也可使台面的表面态与 (001) 面上有所不同。在将有台阶面与无台阶面进行比较时,以上两点是必须考虑的。

四、UPS 的结果

先选取光入射面平行 $[110]$ 方向,对如图4所示的样品各点测得清洁和吸水后的法向光电子谱如图5所示,其吸水的 UP 谱依据文献[3]的能带弯曲的变化数据,向左移动了 0.1eV 。为了消除台面某一畴的优势对 UP 谱的影响,取了 A, B 两点的平均值(同样取 C, D 两点的平均值)来与 O 点的 UP 谱进行比较。

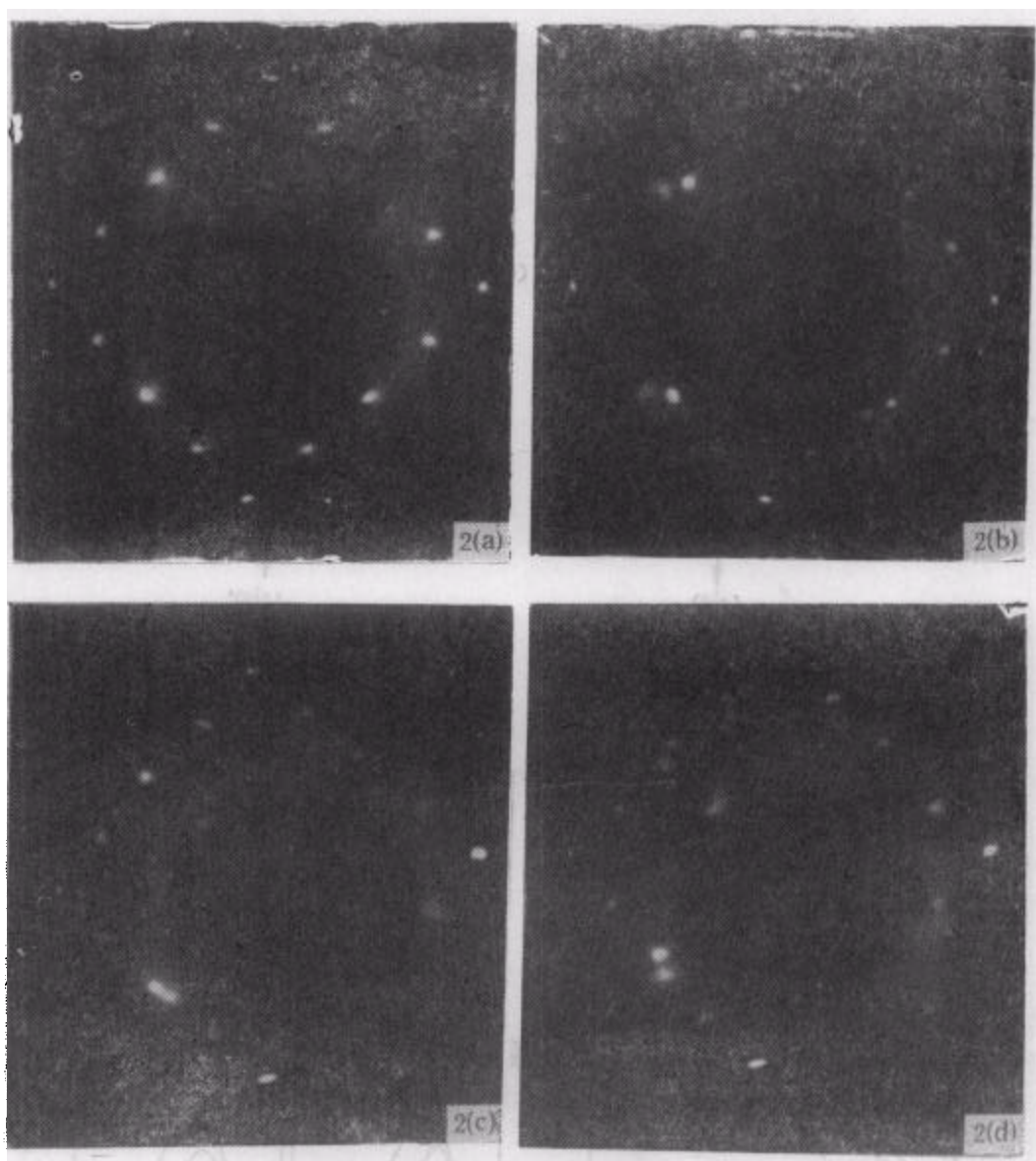


图2 样品上各点的 LEED 图

(a) 为样品中心,即图 6 中的 O 点,电子束能量 50eV; (b), (c), (d) 为离开中心 4.2mm, 相应图 6 的 F, G, H 点,电子束能量 54eV

另一消除某种畴优势影响的方法是选择光的入射面及电子发射面平行于 $[100]$ 方向。在如图 6 所示, O, F, G 和 H 各点上,两种畴对 UP 谱的贡献是相同的。对以上各点在不同发射角 ($0-40^\circ$) 测得 UP 谱。 O 点的 UP 谱与 Si(001) 平面的谱很相近^[7]。图 7 中给出了 O, F, G, H 各点清洁表面和吸水后的差谱,从图 7 中看出,有台阶的点 (F, G, H) 的谱与无台阶的 O 点的谱存在明显的差别,尤其是在偏离法向较大角度测到的谱。这表明确有台阶态存在。

为了更清楚地看出台阶态对 UP 谱的贡献,从有台阶表面总的 UP 谱中减去 (001)

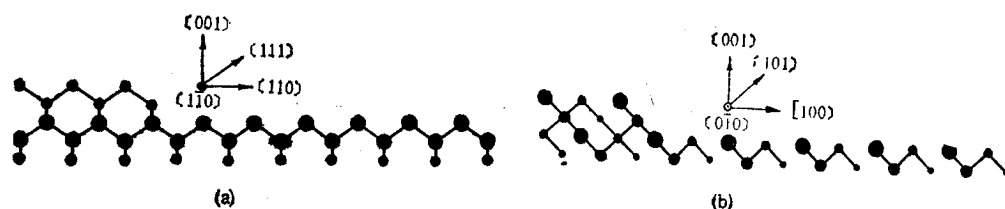
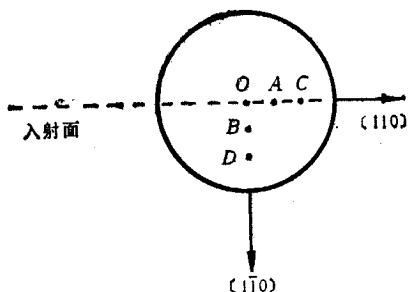


图 3

(a) 为台阶平行于 $\langle 110 \rangle$ (b) 为台阶平行于 $\langle 100 \rangle$ 图 4 UP 谱的测量点 光入射面平行于 $[110]$

OA, OB 对样品面球心的张角为 4.3° ;
 OC, OD 对样品面球心的张角为 8.6°

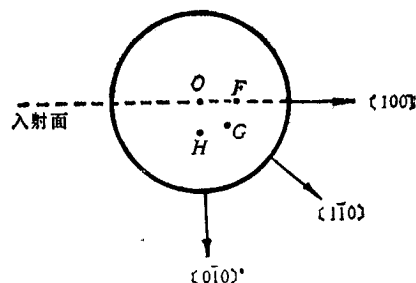


图 6 样品表面的测量点

OF, OG, OH 对样品面球心的张角 6° ; 光的入射面平行于 $[100]$

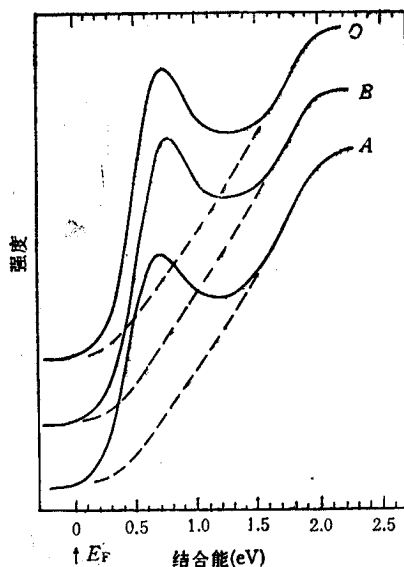


图 5 样品点 O, A, B 的法向 UP 谱
 实线为清洁表面; 虚线为吸水后的表面;
 光入射角 45°

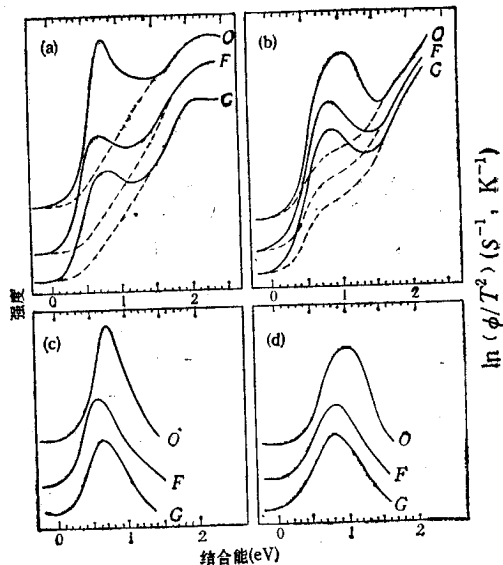
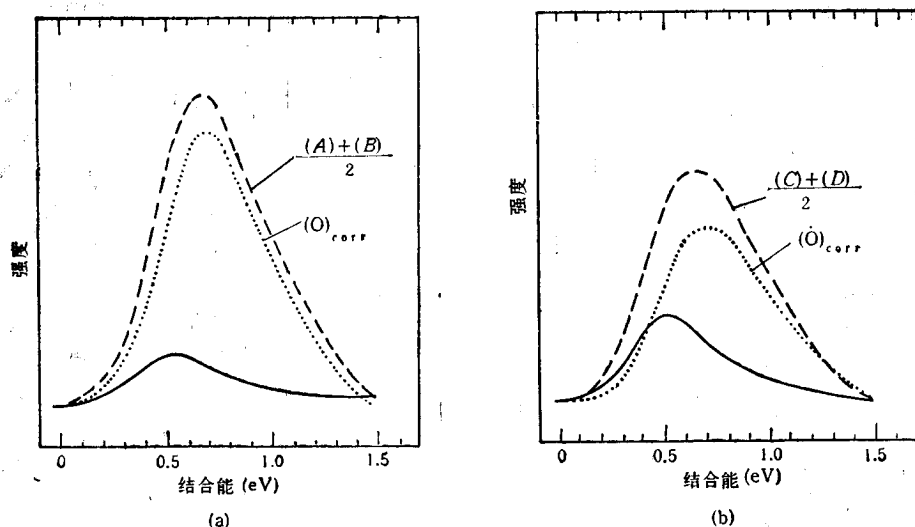


图 7 样品上 O, F, G 点法向与 35° 发射的 UP 谱
 光入射角 45° ; 实线为清洁表面; 点线为吸水表面;
 (a) 为法向(即 0° 角)发射; (b) 为 35° 角发射;
 (c) 为法向发射的差谱; (d) 为 35° 角发射的差谱

平台上的表面态的贡献, 这个贡献近似地应等于中心点的 UP 谱乘一个相应的面积因子。

图 8 与台阶(沿 $\langle 110 \rangle$ 方向)有关的电子态贡献的 UP 谱

(a) 为 (A, B) 点; (b) 为 (C, D) 点; ---- 为 A 和 B (C 和 D) 的平均谱;
 为 O 点乘一面积因子的谱; —— 为台阶态贡献 UP 谱

对平的 Si(001) 面的研究文献中^[7]将 UP 谱中 E_F 以下 1eV 左右的峰归因于悬键态, 这些悬键态由于有相互作用而形成一表面能带. 如用紧束缚近似考虑 $N+1$ 个原子组成的一维链中相互作用着的 $N+1$ 个电子态, 则不难证明其中有 $N-1$ 个态构成一与无限长链相似的能带, 但可能有两个态分裂出去而处在能带之外的能级上. 这是由于两端原子中的电子态没有与外侧电子态的相互作用. 在有台阶的面上, 平台上的悬键态也类似于此, 有两个悬键态可能处在表面能带之外而归入“台阶电子态”. 因此平台上表面态对 UP 谱的贡献比完全平的 Si(001) 面上相同面积贡献要小一些. 这就是面积因子的由来 (面积因子 < 1).

面积因子可利用图 3 的几何关系来估算. 例如 A 或 B 点, 台阶是沿 $[110]$ 方向, 如图 3(a) 平台的宽度有 8.9 个单元 (每个单元宽 $a/\sqrt{2}$), 去掉平台边上 (台阶处) 的两个单元, 还有 6.9 个单元联系着正常的 (001) 表面态. 两相邻台阶间的宽度有 9.4 单元, 相比得面积因子 6.9/9.4. 以下列出各点的面积因子:

$$\begin{array}{ll} A, B & 0.74; \\ G & 0.63; \end{array} \quad \begin{array}{ll} C, D & 0.47; \\ F, H & 0.47. \end{array}$$

利用这些因子可求出台阶对 UP 谱的贡献, 它能大致反映出与台阶有关的电子态的能量分布.

(A, B) 点和 (C, D) 点具有相同的台阶 (平行于 $\langle 110 \rangle$), 但两处的台阶密度不同. (A, B) 和 (C, D) 的台阶态贡献的 UP 谱如图 8 所示, 都在 0.5eV 处有峰值且分布相似, 而强度之比约为 2, 这个比例与 (C, D) 与 (A, B) 处的台阶密度之比一致.

对台阶方向沿 $\langle 110 \rangle$ 的 G 点, 在各个发射角的 UP 谱中台阶态的贡献如图 9 所示. 而台阶方向沿 $\langle 100 \rangle$ 方向的 F, H 点的相应结果则由图 10 和图 11 表示.

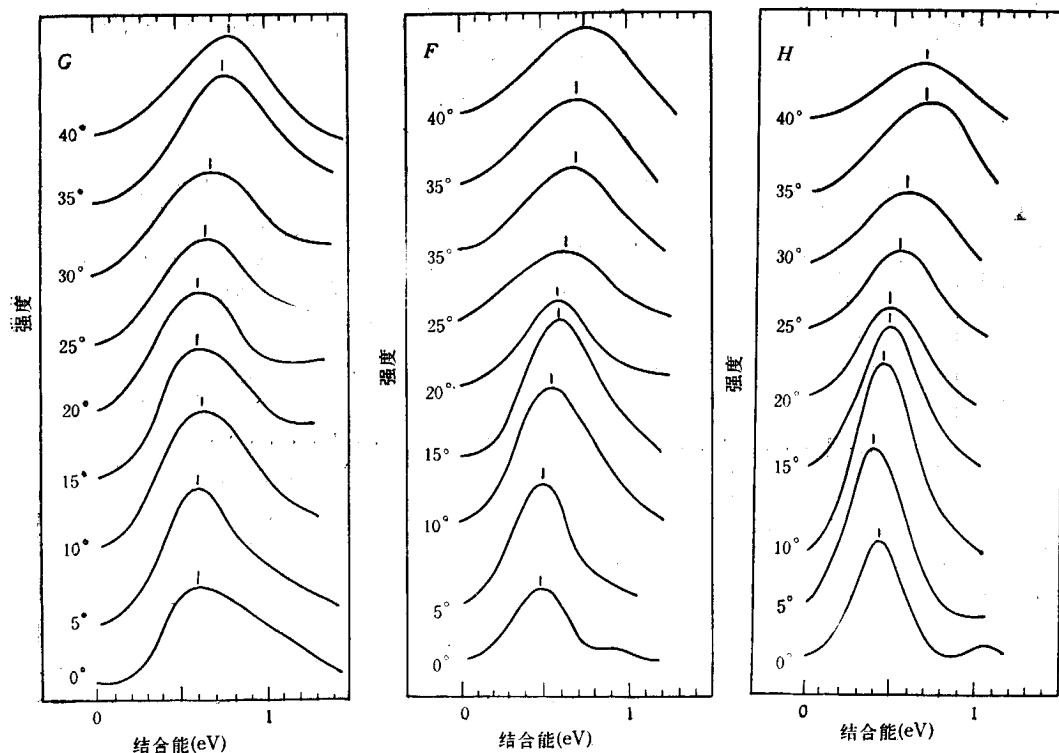


图9 样品G点的台阶(沿 $\langle 110 \rangle$ 方向)态贡献的UP谱 图10 样品F点台阶(沿 $\langle 100 \rangle$)态贡献的UP谱其 $K_{||}$ 垂直于 $\langle 100 \rangle$ 图11 样品H点的台阶(沿 $\langle 100 \rangle$)态贡献的UP谱其 $K_{||}$ 平行于 $\langle 100 \rangle$

五、讨 论

上述实验结果(尤其图8给出有力证据)表明,在具有平行于 $[100]$ 或 $[110]$ 方向的台阶的 $\text{Si}(001)$ 的邻面上确有台阶态存在。其能级在 E_F 以下 $0.5-0.6\text{eV}$ 处,比 $\text{Si}(001)$ 的正常表面态的能级高 $0.1-0.2\text{eV}$,这个结果和“差”的解理面 (111) 上的结果也相近^[6]。

在较表面能级低的能量处也可存在台阶态。可由于吸附物水的UP谱峰的影响,没法将它区分出来。

我们可根据图9至图11来考查台阶态的色散,按理台阶相互间距较大(对 F, G, H 点约有 $20\text{\AA}$),两相邻台阶上的态间没有(或很弱)相互作用,故在垂直于台阶方向上应无色散;色散仅存在于沿台阶方向上。图10是 $K_{||}$ 垂直于台阶方向的结果,从中可看出约有 0.3eV 的色散,这个结果与预期的不符。这也难以归因于测量误差,对此作者有以下两种可能的解释:

(1) 台面不够宽,用 (001) 平面的贡献乘一个面积因子来近似不够理想。事实上, H, F 点处的台面只有 $4-5$ 个原子的宽度。

(2) 可能存在两个与台阶有关的电子态,其能量很近,它们对UP谱的相对贡献随发射角而变化,造成表观上的色散(非真色散)。

由于上述不确定因素,我们也难以确定图 9 和图 11 所示的 K_{11} 沿台阶方向上是否真比色散。但作者从图 9, 至图 11 中可确定一点, 就是台阶态即使有色散 ($< 0.3\text{eV}$) 也比表面态的色散 ($0.6-0.7\text{eV}$) 要小。

感谢在实验工作中给予帮助的物理系刘古教授, 毛祖遂、张训生、蔡莲珍老师及周小霞同志。

参 考 文 献

- [1] M. Henzler, *Appl. Phys.*, 9(1976), 11.
- [2] G. Somorjai, *Chemistry in Two Dimensions Surfaces*, Cornell University Press, (1981).
- [3] W. Ranke and Xing Yi-rong, *Phys. Rev.*, B31(1985), 2246.
- [4] B. Z. Olshanetsky and V. I. Mashanov, *Surf. Sci.*, 111(1981), 414.
- [5] R. Kaplan, *Surf. Sci.*, 93(1980), 145.
- [6] J. E. Rows, S. B. Christman and H. Ibach, *Phys. Rev. Lett.*, 34(1975), 874.
- [7] H. A. Van Hoof and Van der Wiel, *Appl. Sci.*, 6(1980), 444; R. I. G. Uhrberg *et al.*, *Phys. Rev.*, B24 (1981), 4684.

THE STEP-RELATED ELECTRONIC STATES ON THE VICINAL SURFACES OF Si(001)

CHEN XIAO-HUA XU YA-BO

(Department of Physics, Zhejiang University, Hangzhou)

W. RANKE

(Fritz-Haber-Institut der MPG, F. R. G.)

LI HAI-YANG

(Department of Physics, Zhejiang University, Hangzhou)

Ji ZHEN-GUO

(Central laboratory, Zhejiang University, Hangzhou)

ABSTRACT

Angle-resolved ultraviolet photoelectron spectroscopy has been used to investigate the step-related electronic states on the vicinal surfaces of Si(001). Such states have been found at 0.5—0.6 eV below E_F at Γ point ($K=0$) for vicinal surfaces with steps along $\langle 100 \rangle$ or $\langle 110 \rangle$. The dispersion of these states is smaller than that of the (001) surface states.