

一个新的 Si {001} 2×1 表面原子结构模型

蓝 田 徐飞岳

成都电讯工程学院微电子技术 with 电子材料系

1988 年 11 月 1 日收到

本文提出了一个由低能电子衍射能带理论计算所确定的 Si{001} 2×1 表面新的原子结构模型。新结构模型包括二聚键长 $l_d = 2.387 \text{ \AA}$, 表面三个原子层间距 $d_1 = 0.50 \pm 0.01 \text{ \AA}$, $d_2 = 0.96 \pm 0.01 \text{ \AA}$, $d_3 = 1.17 \pm 0.01 \text{ \AA}$ 和二聚原子的两个反对称移动。

一、引 言

Jona 等人分别在三个不同的实验室内,详细地观测了 Si{001} 2×1 表面的低能电子衍射 (LEED) 谱^[1]。Chadi^[2], Yin 等人^[3] 和 Holland 等人^[4] 分别提出了不同的 Si{001} 2×1 表面结构模型。他们采用能量最小化近似^[2,3,5]或多重散射与正交实验法^[4] 从理论上计算了相应的 LEED 谱。但这些结果彼此间以及与观测值都符合得不好。同时各自获得的表面原子层间距(d)和二聚键长(l_d)相差较大。

本文采用自建的 LEED 动力学理论能带近似的非镜象束公式^[7],对 Si{001} 2×1 表面考虑为反对称二聚模型,通过对(10), (11), $(\frac{1}{2} \ 0)$ 和 $(\frac{1}{2} \ 1)$ 束 LEED 谱的理论计算与观测值的比较,确定了二聚原子在 x, y 和 z 方向的最佳结构参数,获得的二聚键长 $l_d = 2.387 \text{ \AA}$ 和表面三个原子层间距分别为 $d_1 = 0.50 \pm 0.01 \text{ \AA}$, $d_2 = 0.96 \pm 0.01 \text{ \AA}$ 和 $d_3 = 1.17 \pm 0.01 \text{ \AA}$ 。

二、结 构 模 型

由清洁的 Si{001} 的 LEED 图(图 1(a))可知,其表面结构是由非重构的 1×1 结构,重构成 2×1 结构(见图 1(b))。在 2×1 表面原胞中共有两个 Si 原子,其中一个处于 4 重轴的位置,其余两个半个处于 2 重轴位置。在相邻 Si 原子间是以正四面体形的四个 sp^3 杂化轨道成键。但处于表面的 Si 原子只用两个 sp^3 杂化轨道与衬底相连,还余下两个悬挂键,因此从能量上看应不是稳定的结构,所以要通过重构来达到能量最低的稳定结构。我们认为在重构过程中,每两个 Si 原子在 x 方向上作相向移动;在 y 方向上作反对称移动;在 z 方向上都向衬底移动,但移动的位置可不相等。通常称此为反对称二聚模型。图 1(d) 为它的表面原胞图; (e) 和 (f) 分别表示它的第 1—3 原子层的各原子位置在 x, y 和 z 方向移动的侧视和顶视图。

表 1

参 数	(10)	(11)	$\left(\frac{1}{2} 0\right)$	$\left(\frac{1}{2} 1\right)$
坐标 $X(\text{\AA})$	3.090	2.790	7.680	7.680
$Y(\text{\AA})$	0.000	4.740	0.000	3.840
二维倒格矢长 $K_{hk}(\text{\AA}^{-1})$	0.394	0.197	0.130	0.117
可调有效势 $W_0(\text{eV})$	15.0	17.0	9.5($E < 88\text{eV}$) 13.0($E > 88\text{eV}$)	14.0($E < 112\text{eV}$) 24.0($E > 112\text{eV}$)

注: $e = 1.602 \times 10^{-19} \text{C}$, $m = 9.106 \times 10^{-31} \text{kg}$, $Z = 14$, $F = 9 \times 10^9 \text{N} \cdot \text{m}^2 \cdot \text{C}^{-2}$, $\hbar = 1.055 \times 10^{-34} \text{J} \cdot \text{s}$, $a = 5.430 \text{\AA}$, $\sigma_s = 14.746 \text{\AA}^2$, $R = 0.195 \text{\AA}$, $\theta = 0^\circ$, $V_0 = 17.500 \text{eV}$, $v_0 = 5.421 \text{eV}$.

表 2 各原子位置移动与 d_s 和 l_d 的关系(单位: $\text{\AA}$)

模 型	LX-1	LX-2	LX-3	LX-4	LX-5
Δx_{11}	-0.482	-0.458	-0.490	-0.545	-0.549
Δy_{11}	0.200	0.200	0.200	0.200	0.200
Δz_{11}	-0.210	-0.150	-0.090	-0.030	0.030
Δx_{12}	1.050	1.050	1.050	1.000	1.000
Δy_{12}	-0.200	-0.200	-0.200	-0.200	-0.200
Δz_{12}	-0.670	-0.630	-0.590	-0.550	-0.510
Δx_{21}	-0.050	-0.050	-0.050	-0.050	-0.050
Δy_{21}	0.100	0.100	0.100	0.100	0.100
Δz_{21}	-0.190	-0.190	-0.190	-0.190	-0.190
Δx_{22}	0.100	0.100	0.100	0.100	0.100
Δy_{22}	-0.100	-0.100	-0.100	-0.100	-0.100
Δz_{22}	-0.190	-0.190	-0.190	-0.190	-0.190
d_1	0.460	0.480	0.500	0.520	0.540
d_2	0.920	0.940	0.960	0.980	1.000
d_3	1.130	1.150	1.170	1.190	1.210
l_d	2.387	2.387	2.387	2.387	2.387

二聚键长 $l_d = 2.387 \text{\AA}$ 不变, 分别改变表面三个原子层间距($d_1 = 0.46 - 0.54 \text{\AA}$, $d_2 = 0.92 - 1.00 \text{\AA}$, $d_3 = 1.13 - 1.21 \text{\AA}$) 和相应的各原子的位置移动, 如表 2 所述.

在表 2 中, 二聚键长 l_d 与表面三个原子层间距 (d_1 , d_2 和 d_3) 和各原子的位置移动之间的关系为: $l_d = [(x_{12} - x_{11})^2 + (y_{12} - y_{11})^2 + (z_{12} - z_{11})^2]^{1/2}$, $d_1 = d_0 - \Delta z_{11} - (d_2 - \Delta z_{22})$, $d_2 = d_0 + \Delta z_{22} - \Delta z_{12}$, $d_3 = d_0 - \Delta z_{22}$. 其中 d_0 为理想的 Si{001} 面层间距.

3. 计算结果

我们选用表 1 所列参数, 分别对表 2 所述的五种结构模型的 (10), (11), $(\frac{1}{2} 0)$ 和 $(\frac{1}{2} 1)$ 束, 使用自建的非镜像束公式和自编的 FORTRAN 程序在 VAX11/780 计算机上计算的 LEED 谱与观测值的比较, 见图 2 和图 3.

在计算每条 LEED 谱(以 10 束为例)时, 首先进行各衍射波和散射波的位相组合, 见

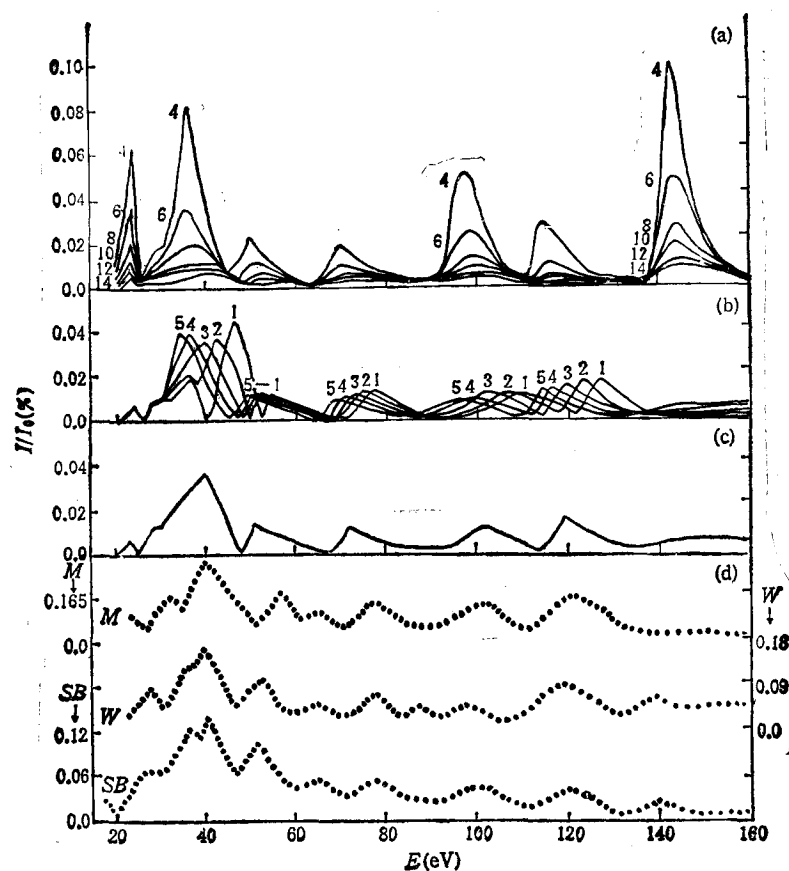


图 2 Si{001} 2×1 表面(10)束随 W_0 变化 (a) 与随 d 变化 (b) 的 LEED 谱与观测值 (d) 的比较 (d) 中 M, W 和 SB 表示三种观测值^[1], 本文取 M 为标准值, W 和 SB 作参考值; (b) 中曲线 1 为 $d_1 = 0.46 \text{ \AA}$, $d_2 = 0.92 \text{ \AA}$, $d_3 = 1.13 \text{ \AA}$; 曲线 2 为 $d_1 = 0.48 \text{ \AA}$, $d_2 = 0.94 \text{ \AA}$, $d_3 = 1.15 \text{ \AA}$; 曲线 3 为 $d_1 = 0.50 \text{ \AA}$, $d_2 = 0.96 \text{ \AA}$, $d_3 = 1.17 \text{ \AA}$; 曲线 4 为 $d_1 = 0.52 \text{ \AA}$, $d_2 = 0.98 \text{ \AA}$, $d_3 = 1.19 \text{ \AA}$; 曲线 5 为 $d_1 = 0.54 \text{ \AA}$, $d_2 = 1.00 \text{ \AA}$, $d_3 = 1.21 \text{ \AA}$

表 3 (10)束各衍射波与散射波的位相结合

组合方式	a	b	c	d	e	f	g	h
表面 j 原子的衍射波	$e^{ik_j d}$	$e^{ik_j d}$	$e^{ik_j d}$	$e^{ik_j d}$	$e^{-ik_j d}$	$e^{-ik_j d}$	$e^{-ik_j d}$	$e^{-ik_j d}$
表面其他原子的散射波	$e^{ik d}$	$e^{-ik d}$	$e^{ik d}$	$e^{-ik d}$	$e^{-ik d}$	$e^{ik d}$	$e^{-ik d}$	$e^{ik d}$
衬底原子的散射波	$e^{ig d}$	$e^{ig d}$	$e^{-ig d}$	$e^{-ig d}$	$e^{-ig d}$	$e^{-ig d}$	$e^{ig d}$	$e^{ig d}$

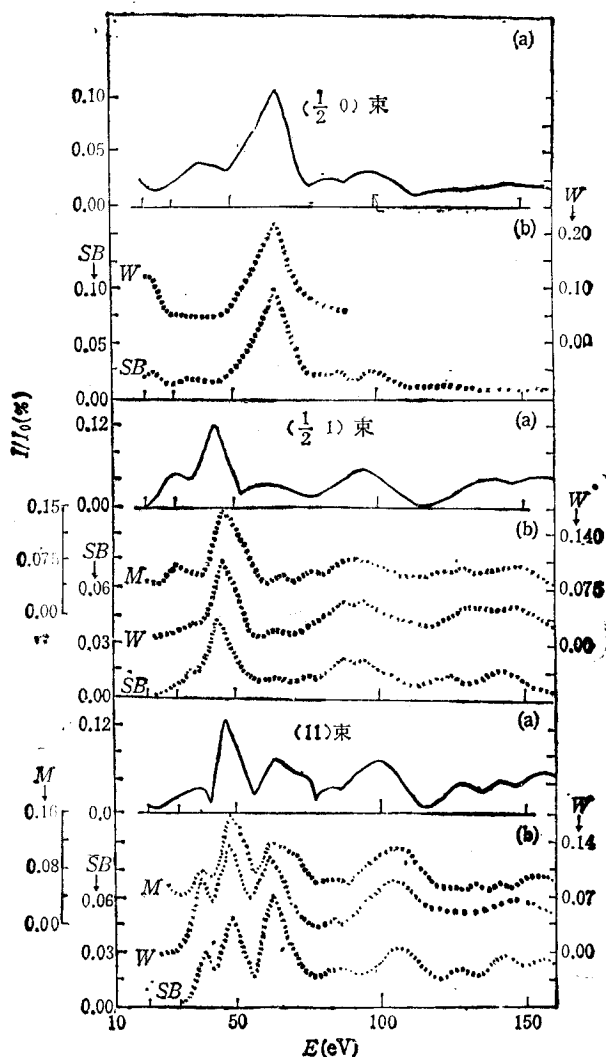


图 3 $\text{Si}\{001\}2\times1$ 表面的 $(1/2\ 0)$, $(1/2\ 1)$ 和 (11) 束
理论计算 (a) 和观测值^[1] (b) LEED 谱的比较
 $d_1 = 0.50\text{ \AA}$, $d_2 = 0.96\text{ \AA}$, $d_3 = 1.17\text{ \AA}$; $\theta = 0^\circ$

表 3 和图 4, 然后进行各原子层间的衍射(或散射)波的组合, 见图 5, 再经有效势 W_0 调节 LEED 谱峰的高与宽后(见图 2(a)), 最后精确地调整 LEED 谱峰的位置来确定各层间距 (d_1 , d_2 和 d_3), 见图 2(b).

由图 4 和表 3 可知, 只有 h 组合才是最合理的. 由图 5 可知, 其中的 d 是由 a , b 和 c 组合而成, 它与观测值 e 非常相似. 由图 2(a) 可知, 将 W_0 值调到所需值时, 再改变各原子层间距, 当 $d_1 = 0.50\text{ \AA}$, $d_2 = 0.96\text{ \AA}$ 和 $d_3 = 1.17\text{ \AA}$ 时, 理论计算的 LEED 谱(c)与观测值(d)才符合得最好.

采用上述相同方法, 理论计算的 (11) , $(1/2\ 0)$ 和 $(1/2\ 1)$ 束的 LEED 谱(a)与观测值(b)的比较, 见图 3.

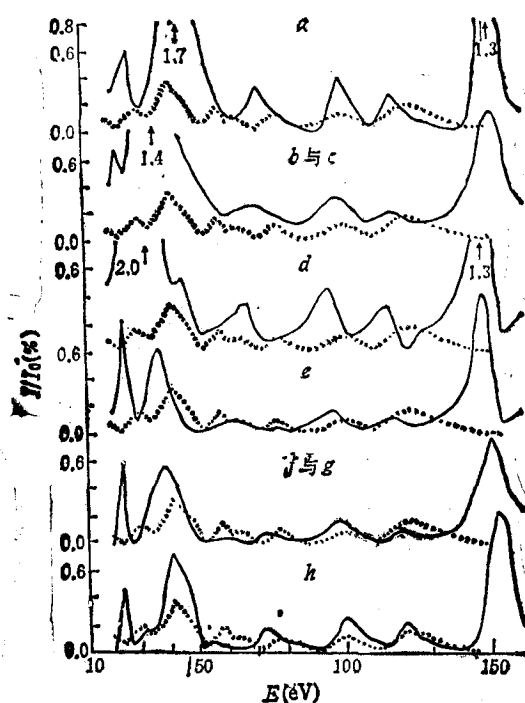


图 4 Si{001}2×1 表面(10)束不同位相组合的 LEED 谱(实线)与观测值^[1](虚线)的比较 曲线 a—h 与表 3 同; $d_1 = 0.50 \text{ \AA}$, $d_2 = 0.96 \text{ \AA}$, $d_3 = 1.17 \text{ \AA}$; $W_0 = 10 \text{ eV}$; $\theta = 0^\circ$

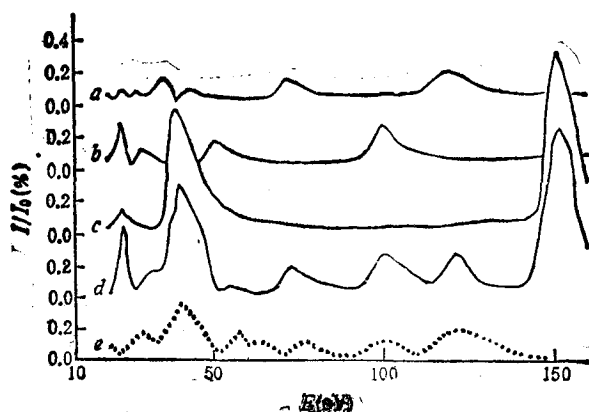


图 5 Si{001}2×1 表面(10)束不同层散射波的组合(d)与观测值^[1](e)的比较 曲线 a 为 $d_3 = 1.17 \text{ \AA}$; 曲线 b 为 $d_2 = 0.96 \text{ \AA}$; 曲线 c 为 $d_1 = 0.50 \text{ \AA}$; 曲线 d 为 $d_1 = 0.50 \text{ \AA}$, $d_2 = 0.96 \text{ \AA}$, $d_3 = 1.17 \text{ \AA}$, $W_0 = 6 \text{ eV}$; $\theta = 0^\circ$

由图 2(c) 和(d)以及图 3(a) 和(b)可知,对四种不同的衍射束,在五种不同的结构模型中,只有 LX-3($d_1 = 0.50 \text{ \AA}$, $d_2 = 0.96 \text{ \AA}$ 和 $d_3 = 1.17 \text{ \AA}$)模型理论计算的各条 LEED 谱峰的位置、强度和宽度才与观测值符合得最好。因此我们认为 LX-3 模型是比较合理的。

四、与其他模型结果的比较

1. 对各模型(10)束 LEED 谱的比较

为了简单起见,我们只对各模型(10)束 LEED 谱进行比较。本文确定的 LX-3 模型(10)束 LEED 谱峰的位置和强度与观测值都符合得很好,见图 6(a)。但文献[2—5]的模型所计算的 LEED 谱峰的位置与强度彼此之间以及与观测值之间都符合得不够好,见图 6(b)。

2. 与各模型主要结构参数的比较

本文确定的 LX-3 模型与其他各模型的二聚键长 l_d , 表面原子层间距 d_s 及其他豫量的比较见表 4。

由表 4 可知, LX-3 模型与 HDP 模型^[5]相近似,但与其他模型^[2-4]的差别较大。

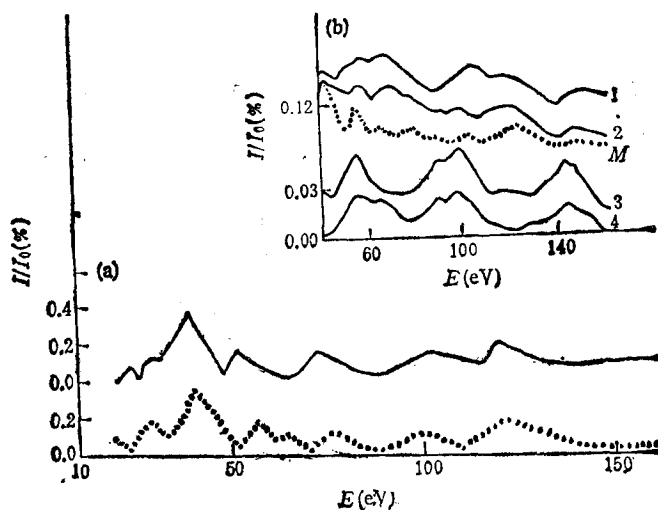


图 6 $\text{Si}\{001\}2 \times 1$ 表面(10)束不同理论模型计算的 LEED 谱(实线)与观测值^[1](虚线)的比较(a)为本文结果;(b)为文献结果,其中曲线 1 为 YJM1 模型^[4];曲线 2 为 YJM2 模型^[4];曲线 3 为 Ch 模型^[2];曲线 4 为 YC 模型^[3]

表 4 各模型的 l_d, d_s 和地豫量的比较(单位: $\text{\AA}$)

模 型	计算方法	二聚键长			原子层间距		
		l_d	$l_d - l_0$	(%)	d_s	$d_s - d_0$	(%)
LX-3[本文]	能带近似	2.387	0.037	1.6	$d_1 = 0.50 \pm 0.01$ $d_2 = 0.96 \pm 0.01$ $d_3 = 1.17 \pm 0.01$		
Ch ^[2]	能量最小化	2.350	0.00	0.0	1.15	-0.21	-15.4
YC ^[3]	能量最小化	2.250	-0.10	-0.43	1.06	-0.30	-22.0
YJM ^[4]	多重散射与正交法	2.54	0.19	8.0	1.251	-0.109	-8.0
HDP ^[5]	能量最小化	2.470	0.12	5.1	0.944	-0.461	-30.6

五、结 论

本文提出了一个新的 $\text{Si}\{001\}2 \times 1$ 表面的反对称二聚结构模型,其二聚键长 $l_d = 2.387 \text{\AA}$, 表面三个原子层间距分别为 $d_1 = 0.50 \pm 0.01 \text{\AA}$, $d_2 = 0.96 \pm 0.01 \text{\AA}$ 和 $d_3 = 1.17 \pm 0.01 \text{\AA}$ 。用能带近似的非镜像束公式,理论计算(10),(11),(1/2 0)和(1/2 1)束

的 LEED 谱,其峰的位置和强度与观测值符合的程度比其他模型都要好,因此我们认为本文提出的结构模型是比较理想的。

- [1] A. Ignatiev, F. Jona, M. Debe, D. E. Johnson, S. J. White and D. P. Woodruff, *J. Phys. C*, **10**(1977), 1109.
- [2] D. J. Chadi, *Phys. Rev. Lett.*, **41**(1978), 1062.
- [3] M. J. Yin and M. L. Cohen, *Phys. Rev.*, **B24**(1981), 2303.
- [4] W. S. Yang, F. Jona and P. M. Marcus, *Phys. Rev.*, **B28**(1983), 2049.
- [5] B. W. Holland, C. B. Duke, A. Paton, *Surf. Sci.*, **140**(1984), L269.
- [6] 蓝田、徐飞岳,化学学报, **47**(1989), 104.

A NEW ATOMIC STRUCTURE MODEL OF Si {001} 2×1 SURFACE

LAN TIAN XU FEI-YUE

*Department of Micro-Electronics Technology and Electronic Materials,
Chengdu Institute of Radio Engineering*

(Received 1 November 1988)

ABSTRACT

In this paper, a new atomic structure model of the Si {001} 2×1 surface determined from band theory calculation of low-energy-electron diffraction are presented.

The new structure model involves a dimer bond length $l_d = 2.387 \text{ \AA}$ and three atomic layer distances $d_1 = 0.50 \pm 0.01 \text{ \AA}$, $d_2 = 0.96 \pm 0.01 \text{ \AA}$, $d_3 = 1.17 \pm 0.01 \text{ \AA}$ and two asymmetric displacements of dimer atoms.