

6H-SiC(0001)- $6\sqrt{3} \times 6\sqrt{3} R30^\circ$ 重构表面的 同步辐射角分辨光电子能谱研究*

武煜宇¹⁾ 陈 石²⁾ 高新宇²⁾ Andrew Thye Shen Wee²⁾ 徐彭寿^{1)†}

¹⁾ 中国科学技术大学国家同步辐射实验室, 合肥 230029)

²⁾ 新加坡国立大学物理系, 117542 新加坡)

(2008 年 6 月 19 日收到, 2008 年 10 月 23 日收到修改稿)

利用同步辐射角分辨光电子能谱(SRARPES)对 6H-SiC(0001)- $6\sqrt{3} \times 6\sqrt{3} R30^\circ$ 重构表面的电子结构和表面态进行了研究. 通过鉴别价带谱中来自于体态的信息, 可以推断出重构表面的费米能级位于体态价带顶之上(2.1 ± 0.1) eV 处. 实验测出的体能带结构与理论计算的结果较为符合. 在重构表面上发现三个表面态, 分别位于结合能 -0.48 eV(S_0), -1.62 eV(S_1) 和 -4.93 eV(S_2) 处. 沿着表面布里渊区的高对称线 $\bar{\Gamma}\bar{K}\bar{M}$ 方向, 测量了相关表面态的能带色散. 只有表面态 S_0 (-0.48 eV) 表现出了所希望的 $6\sqrt{3} \times 6\sqrt{3} R30^\circ$ 重构周期性. 根据实验现象, 可以认为, 表面态 S_0 应归结于重构表面的 C—C 悬键, 而表面态 S_1 则由重构表面未钝化的 C 悬键所导致.

关键词: 角分辨光电子能谱, 碳化硅(SiC), 电子结构, 表面态

PACC: 8280P, 7320A

1. 引言

SiC 具有宽带隙、高电子迁移率、高热传导性、高硬度和优异的化学稳定性等特性^[1,2], 在高频、大功率、耐高温、耐辐射等电子器件方面有着巨大的应用潜力. SiC 有多种异构多形体, 在 3C-SiC(100)^[3-6], 3C-SiC(111)^[7,8], 4H-SiC(0001)^[9] 和 6H-SiC(0001)^[10-15] 等各种异构多形体表面有大量表面重构存在. 而由于表面重构在异质外延生长和表面的氧化、钝化以及表面电极制备中的重要性, 使人们对它的研究尤感兴趣^[16-18].

在各种异构多形体中, 六方晶型 6H-SiC 在 SiC 微电子器件中具有重要应用, 尤其是作为衬底在电子学中的潜在应用, 从而在基础物理研究和器件应用方面都吸引了人们的极大关注. 依赖于不同的表面处理, 可以在 6H-SiC(0001) 表面获得多种表面重构, 例如 $3 \times 3 \sqrt{3} \times \sqrt{3} R30^\circ$ 和 $6\sqrt{3} \times 6\sqrt{3} R30^\circ$ 等. 在这些表面重构中, 人们对硅富集的 3×3 和 $\sqrt{3} \times \sqrt{3} R30^\circ$ 重构已经开展了大量的研究工作. 而碳富

集的 $6\sqrt{3} \times 6\sqrt{3} R30^\circ$ 重构, 无论是表面结构还是电子结构, 研究工作都还比较缺乏. 考虑到 6H-SiC(0001)- $6\sqrt{3} \times 6\sqrt{3} R30^\circ$ 重构表面作为纳米模板在分子电子学、生物探测器和其他方面的巨大潜在应用, 进一步从表面电子结构方面开展对于 $6\sqrt{3} \times 6\sqrt{3} R30^\circ$ 表面重构的基础物理研究的重要性可见一斑.

本文利用 SRARPES 研究了 6H-SiC(0001)- $6\sqrt{3} \times 6\sqrt{3} R30^\circ$ 重构表面的电子结构, 并对表面态沿着表面布里渊区高对称方向的能带色散进行了测量. 此外, 还使用第一性原理全势线性缀加平面波(FPLAPW)方法计算了 6H-SiC(0001) 的能带结构和态密度. 根据实验测量和理论计算结果的比较, 对测量的价带谱中不同特征峰的起源进行了探讨.

2. 实验条件和计算方法

实验是在合肥国家同步辐射实验室(NSRL)的表面物理站完成的. 实验站系统处于超高真空条件下, 真空度好于 2×10^{-8} Pa. 样品出射的光电子由一台角分辨半球形能量分析器(Vacuum Generators,

* 国家自然科学基金(批准号: 50572100, 50872128)资助的课题.

† 通讯联系人. E-mail: psxu@ustc.edu.cn

ARUPS 10)采集.能量分析器的角度分辨率为 $\pm 1^\circ$.整个实验站系统还配置了X射线电子能谱仪(XPS)、低能电子衍射仪(LEED)、反射高能电子衍射仪(RHEED)和俄歇电子能谱仪(AES)等设备.实验站光束线的能量范围为10—300 eV,能量分辨本领($E/\Delta E$)好于1000.关于实验站和光束线的更多参数及细节可参考文献[19].测量时同步辐射光的入射角被固定为 45° .光电子在由样品表面法线和能量分析器方向组成的平面内被采集.固定在样品架上的样品能够沿着极角和方位角方向旋转,内置角分辨电子能量分析器能够探测不同出射角度的光电子.

Si端面的n型6H-SiC(0001)样品(购于CREE公司)先通过有机溶剂除去表面杂质,并浸泡于HF酸溶液中除去表面的硅氧化物.在快速传进超高真空系统后,样品在硅束流气氛下于 850°C 退火5 min,形成硅富集的 3×3 表面重构.在没有硅束流气氛下,于 1100°C 退火2 min以形成碳富集的 $6\sqrt{3}\times6\sqrt{3}$ R30°表面重构.图1为 $6\sqrt{3}\times6\sqrt{3}$ R30°重构表面的LEED图.此重构表面较易被吸附污染物所影响,在超高真空条件下工作一段时间后将会发现,LEED斑点有明显变暗或消失的现象.为了保持该重构表面,样品在ARPES测量过程中每隔一段时间就要在高温下退火以除去表面吸附的污染物.

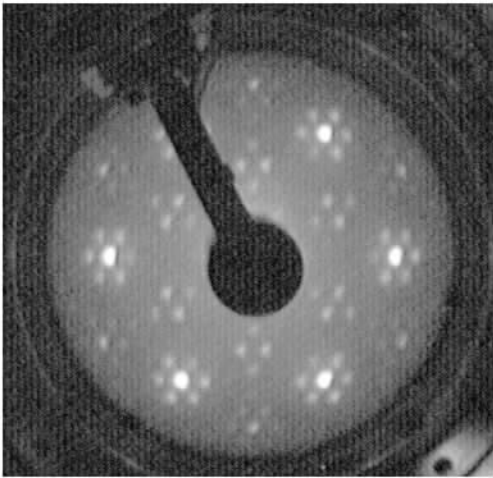


图1 6H-SiC(0001) $6\sqrt{3}\times6\sqrt{3}$ R30°重构表面的LEED图.电子能量为116 eV

6H-SiC(0001)的体能带通过基于密度泛函理论(DFT)的FPLAPW方法^[20,21]计算得到.理论计算基于WIEN2K软件包开展,交换关联势采用Perdew

等^[22]提出的含梯度修正的广义局域密度近似.碳化硅的晶格常数使用实验值, $a=3.08\text{ \AA}$, $c=15.117\text{ \AA}$.当计算体系总能量的变化差值小于 10^{-3} mRy 时,我们就认为体系自洽,迭代计算已完全收敛.

3. 结果和讨论

理论计算的6H-SiC局域态密度(LDOS)如图2所示.图中的能量位置相对于体态价带顶(VBM)而定.总态密度(未在本文中标示)和之前的一些计算工作相当符合^[23].从图2中我们可以发现,价带主要由两个子带所组成,其中低能子带的能量范围是 $-15.5\sim-10\text{ eV}$,高能子带的能量范围是 $-8.5\sim0\text{ eV}$.低能子带包括C 2s和Si 3s+3p态,其中C 2s态作为主要组成部分.高能子带包括有C 2s+2p和Si 3s+3p态,其中低能段主要由C 2p和Si 3s态组成,高能段主要由C 2p态组成.

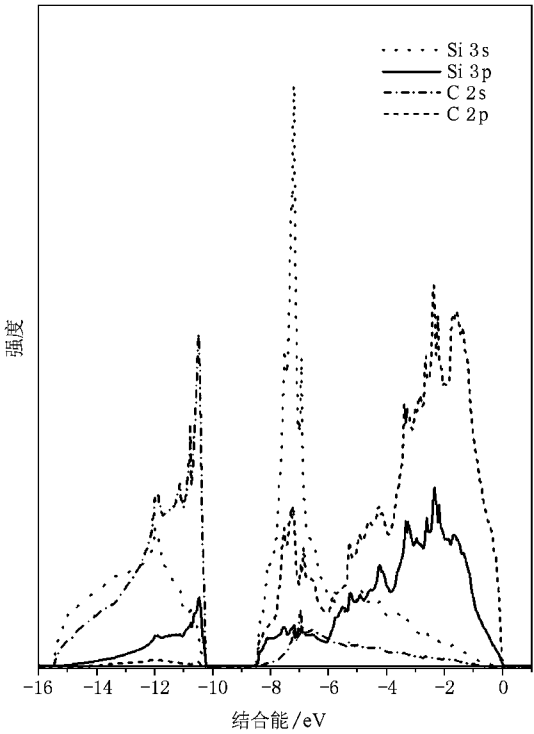


图2 理论计算的6H-SiC中硅和碳元素的局域态密度.图中的结合能相对于价带顶位置

图3显示6H-SiC(0001) $6\sqrt{3}\times6\sqrt{3}$ R30°重构表面在垂直出射下变光子能量的光电子能谱图.光子能量由21 eV增加到120 eV.其中光子能量60 eV时测量的谱图,与在同样光子能量所测量的结果^[24]基本符合.在谱图中,我们能够分辨出四个不同的色散

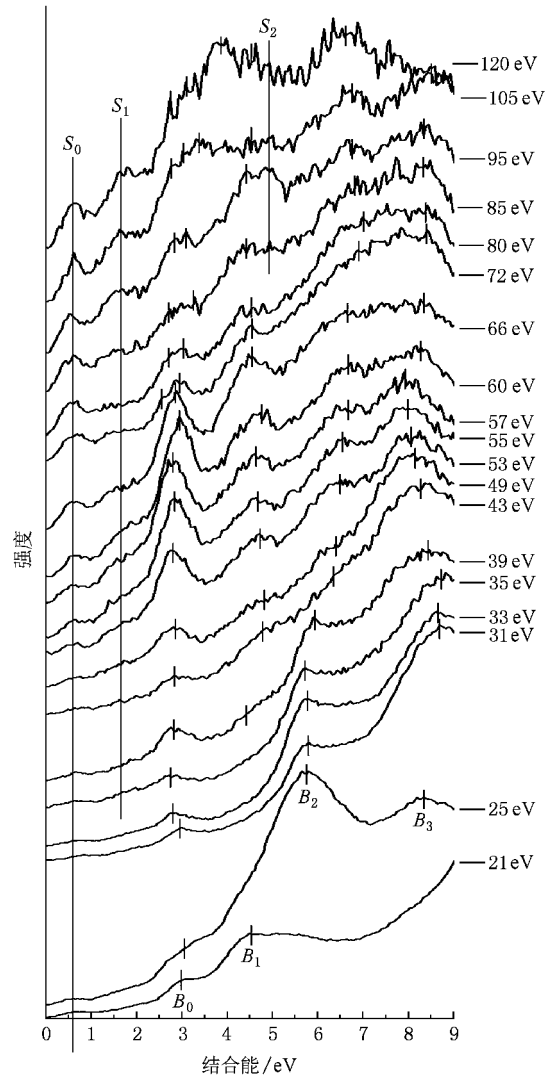


图 3 6H-SiC(0001) $6\sqrt{3} \times 6\sqrt{3} R30^\circ$ 重构表面的垂直出射价带谱

特征峰,分别标示为 B_0 , B_1 , B_2 和 B_3 . 这四个峰会随着光子能量的改变而发生色散,也就是说它们的初始能量会随着垂直于样品表面的波矢分量而改变,所以我们可以认为这四个峰来源于体态跃迁.进一步利用实验结果和理论计算结果比较时,需要注意能量位置的差异:实验结果中能量位置是相对于费米能量位置而定的,而理论计算结果是相对于体态价带顶而定的.所以我们需要在测量的能谱中确定出体态价带顶相对于费米能量的位置.这四个特征峰中, B_0 显然就是最低结合能的体态峰,自然也就是来源于体态价带顶的直接跃迁.通过测量 B_0 的结合能位置,我们能够估计出体态价带顶位于费米能级位置之下 (-2.1 ± 0.1) eV 处.本文中测量的价带顶能量位置与文献 [24] 的结果基本一致.在考

虑能量位置差异后比较实验结果和理论计算结果,发现实验测量的能谱中观察到的四个体态峰与理论计算结果中主要由 C 2p 和 Si 3s + 3p 态组成的高能电子带的能量位置相互符合.通过这些体态峰结合能位置的比较,我们能够得出以下推论: B_0 主要由 C 2p, Si 3p 和 Si 3s 态组成,其中 C 2p 态是主要组成部分. B_1 和 B_2 主要由 C 2p, Si 3p, Si 3s 和 C 2s 态组成. B_3 主要由 Si 3s 和 C 2p 态组成,其中 Si 3s 态占据较大比重.上述结果和以前的研究结果基本一致^[24, 25].

对于垂直出射来说,由于波矢的平行分量 $K_{\parallel} = 0$, 因此所有沿着晶体学 [0001] 方向的直接跃迁就仅仅与波矢的垂直分量 $K_{\perp}$ 有关.所以从垂直出射的可变光子能量激发的角分辨光电子能谱中,我们能够计算得出沿六方布里渊区 ΓA 方向的体态能带结构.考虑末态的近自由电子近似,根据光跃迁过程中的能量守恒和动量守恒规则,可用如下公式计算得出波矢的垂直分量:

$$K_{\perp} = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(\hbar\nu - E_B - \Phi + V_o)}, \quad (1)$$

其中 $\hbar\nu$ 是入射的光子能量, E_B 是初态的结合能, Φ 是仪器功函数, m 是自由电子质量, V_o 也就是所谓的内势(inner potential),即晶体势的“Muffin-tin”底相对于真空能级的能量位置.对于 6H-SiC 而言,晶格常数分别为: $a = 3.08 \text{ \AA}$, $c = 15.117 \text{ \AA}$, 所以计算得到 ΓA 方向的长度为 $0.21 \text{ \AA}^{-1}$.

图 4 为沿 ΓA 方向的能带结构,图中的实线部分是使用 FPLAPW 方法计算出的沿 ΓA 方向的理论计算能带结构,角分辨光电子能谱的实验结果点也被标注于图中.如图所示,就整体比较而言,实验结果和理论计算结果还比较符合.

进一步分析图 3 中的垂直出射光电子能谱,我们还能够分辨出其他三个特征峰,它们的结合能在光子能量改变时保持不变.而与体电子态相反,对于局限在表面层的二维电子态而言, $K_{\perp}$ 并不是一个好量子数,表面电子态在垂直出射时无能带色散.因此这三个特征峰应该来源于表面电子态,分别标注为 S_0 , S_1 和 S_2 . 考虑到 6H-SiC 的禁带宽度为 3.0 eV,而体态价带顶位于费米能级位置下 (-2.1 ± 0.1) eV 处,特征峰 S_0 和 S_1 都应完全处于 6H-SiC 的禁带当中,这也再次确认了这两个价带特征峰的表面态起源.为了进一步研究这三个表面电子态,我们将开展一些非垂直出射角分辨光电子能谱研究.

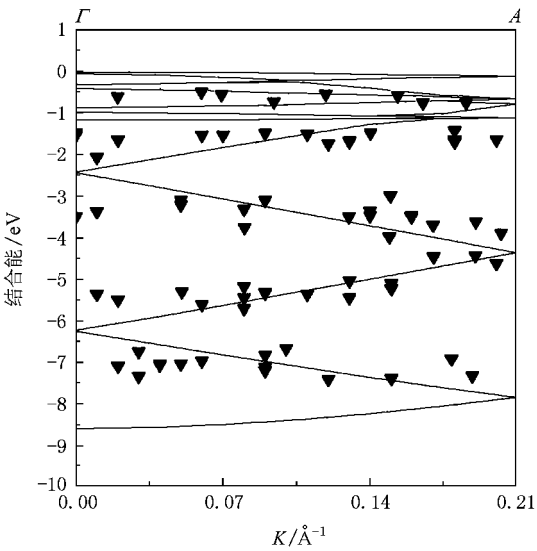


图4 6H-SiC沿ΓA方向的能带结构 其中实线为理论计算结果,倒三角形为实验数据点

图5表示在光子能量30 eV时采集的非垂直出射角分辨价带谱,采集时出射角沿着样品 $\bar{1}10$ 方向改变,也就是沿着 $6\sqrt{3}\times6\sqrt{3}R30^\circ$ 重构表面布里渊区(SBZ)的 $\bar{\Gamma}\bar{K}\bar{M}$ 方向(如图6所示)而改变,出射角从 6° 增加到 15° .图中特征峰的位置都用虚线加以标明.

前面观察到的体态和表面态也能够在这些非垂直出射价带谱中被辨认出来.图中最主要的特征峰就是之前所提及的体电子态 B_0 ,其结合能会随着出射角的增加而向高结合能方向偏移,其他的两个特征峰也可以从它们的结合能位置和能带色散而被辨认出来.结合垂直出射谱的结果,我们能够在非垂直出射谱中发现三个特征峰,这三个特征峰都表现出与重构表面布里渊区对称性不一致的能带色散.它们的结合能位置表明这三个特征峰分别来源于体电子态 B_0 、 B_2 和 B_3 ,我们的实验结果和Johansson等^[26]的结果相一致.

如同垂直出射能谱一样,我们也能够非垂直出射能谱中发现表面电子态 S_0 、 S_1 和 S_2 .首先研究作为最顶端价带特征峰的表面态 S_0 . S_0 对于背景污染或LEED测试中来源于电子枪的污染非常敏感.在LEED测试后,或ARPES测试中每几个小时都需要通过 900°C 高温退火(将会除去吸附分子等污染)来清洁样品重构表面.随着出射角的改变, S_0 在所有谱图中都能被观察到,它的结合能变化范围从 -0.543 eV 到 -0.431 eV ,这意味着 S_0 完全位于SiC

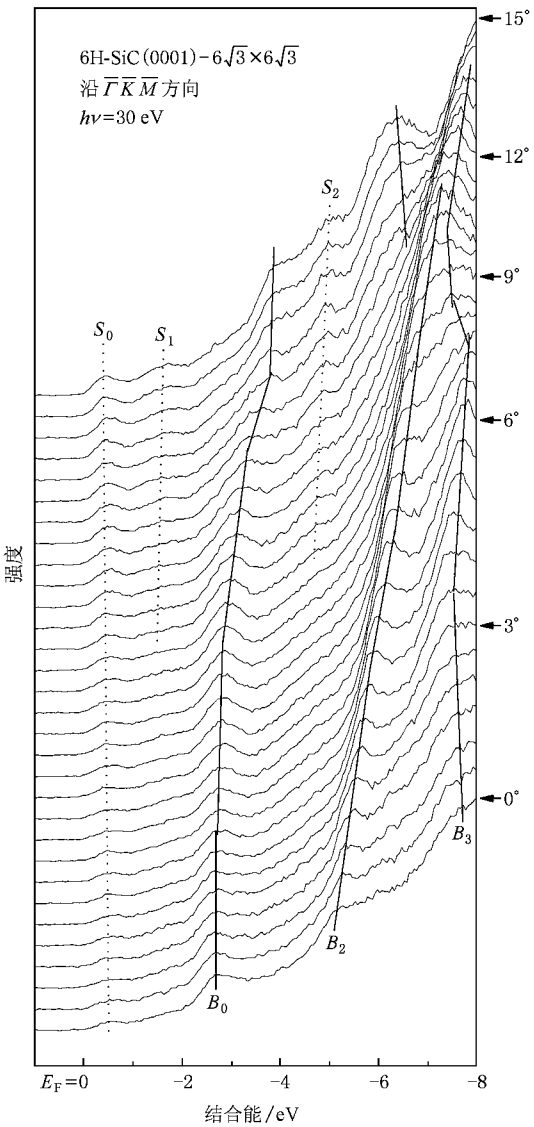


图5 6H-SiC(0001)-6√3×6√3R30°重构表面的非垂直出射价带能谱 光子能量为30 eV,出射角沿表面布里渊区的 $\bar{\Gamma}\bar{K}\bar{M}$ 方向而改变

的禁带当中.由此可进一步确认 S_0 的表面电子态特征.更重要的是,我们发现 S_0 的能带色散与重构表面布里渊区的对称性一致(下文中将详细解释),由此可以进一步推断 S_0 应来源于由表面原子所导致的,具有高表面敏感性的表面电子态.而对于残余气体和污染杂质的高表面敏感性则意味着它可能来源于表面悬键导致的表面电子态.当出射角从 9° 增加到 15° 时,我们能够在结合能 -1.62 eV 处发现另一个较弱的特征峰 S_1 .尽管 S_1 强度较弱,使得确定它的准确位置有困难,但由于体态价带顶(VBM)的能量位置位于费米能级下 $(-2.1\pm0.1)\text{ eV}$ 处, S_1 也完

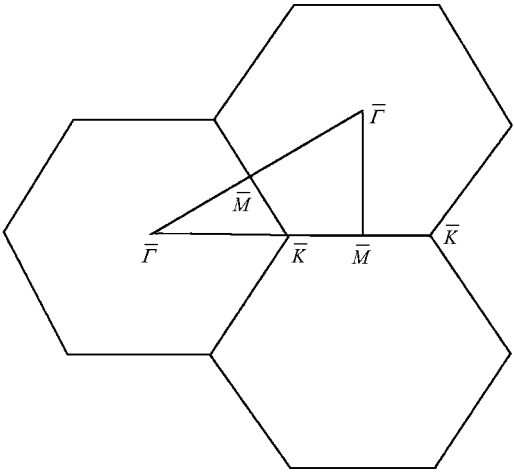


图 6 6H-SiC (0001) $6\sqrt{3} \times 6\sqrt{3}$ 重构表面布里渊区

全位于禁带当中,同样说明它来源于表面电子态.几乎在同样的出射角范围内,另外一个较弱的伴峰 S_2 出现在结合能 -4.93 eV 处. S_2 与前两个峰不同,它完全位于体能带当中. S_1 和 S_2 这两个峰的结合能随着出射角改变有着较大的延伸,且由于这两个峰的强度较弱,由此导致难以确定其位置,这也使得推测这两个表面特征峰的来源更加困难.

对于非垂直出射来说,波矢的平行分量 $K_{\parallel}$ 能够通过以下公式来获得

$$K_{\parallel} = \frac{\sqrt{2mE_{\text{kin}}}}{\hbar} \sin\theta, \quad (2)$$

其中 E_{kin} 是出射光电子的动能, θ 是光电子的出射角度.

依据(2)式,我们能够计算出这些表面电子态沿着重构表面布里渊区 $\bar{\Gamma}\bar{K}\bar{M}$ 方向的能带色散,如图7所示.为了更直观地表现表面布里渊区的对称性,表面第一布里渊区外的数据没有反向迭代回第一布里渊区内,而是在扩展范围内加以标示.从图中我们能够清楚地发现,来源于表面态 S_0 的特征峰在全部表面布里渊区内都存在,而来源于表面态 S_1 和 S_2 的特征峰并未在第一布里渊区内发现,这可能是由于这两个表面态强度较弱或设备分辨率较差所导致.图中表面电子态 S_0 表现出两个特性:一是沿高对称点 $\bar{\Gamma}$ 两边结合能都有一个相似的能带色散,二是表面态 S_0 沿着表面布里渊区,其色散分量 $E(K_{\parallel})$ 基本上表现出与 $6\sqrt{3} \times 6\sqrt{3}$ $R\ 30^\circ$ 重构表面周期性一致的对称性.由此可以推断, S_0 应该起源于组成表面重构的那部分原子.考虑到 6H-SiC (0001) $6\sqrt{3} \times 6\sqrt{3}$

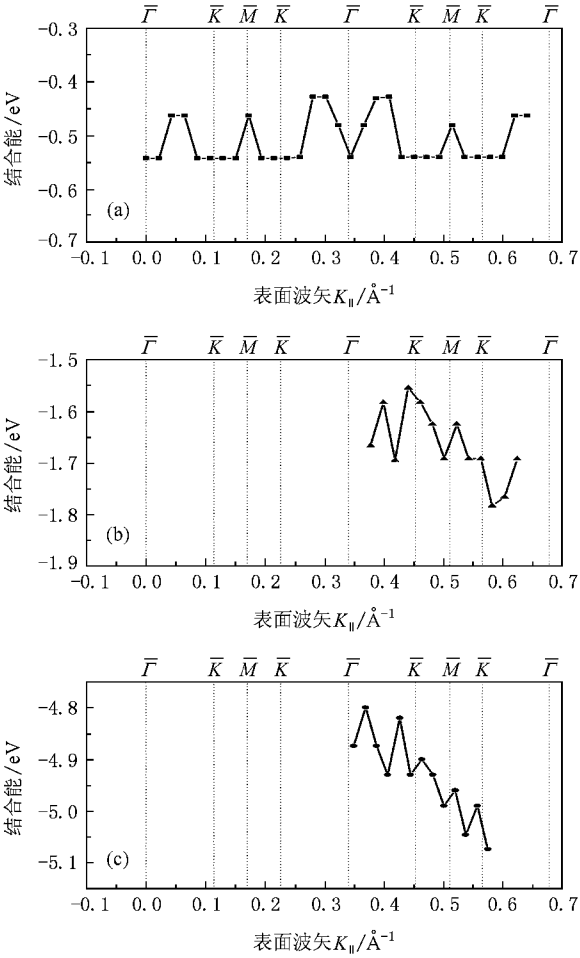


图 7 6H-SiC (0001) $6\sqrt{3} \times 6\sqrt{3}$ $R\ 30^\circ$ 重构表面表面态 S_0 (正方形) (a), S_1 (三角形) (b) 和 S_2 (圆形) (c) 沿 $\bar{\Gamma}\bar{K}\bar{M}$ 方向的能带色散.图中虚线标示重构表面布里渊区的边界,图中结合能相对于费米能量位置

$\sqrt{3}$ $R\ 30^\circ$ 重构表面是一个碳富集的表面,重构表面完全被碳原子所覆盖;进一步考虑 Chen 等^[27]所提出的 6H-SiC (0001) $6\sqrt{3} \times 6\sqrt{3}$ 重构模型,其中表面的纳米网(nanomesh)结构主要由两种表面碳原子组成,即与下方一个硅原子成键的 A 类碳原子以及位于 SiC 表面上方但未形成 Si—C 键的 B 类碳原子.我们可认为 S_0 应该来源于最外层的 B 类碳原子的 C—C 悬键.表面电子态 S_1 的能带色散并未表现出所希望的重构周期性,它的结合能位于体价带顶之上 ($0.3\text{--}0.55\text{ eV}$) 处,结合能位置差和 6H-SiC (0001) 表面上^[28]表面态 D_c 的情况相差不大,其中表面态 D_c 能带色散较大, Γ 点处位于体价带顶之上 0.2 eV ,应来源于样品最外层的 C 悬键.此外,由于表面态 S_1 对于吸附污染比较敏感,而 $6\sqrt{3} \times 6\sqrt{3}$

$R30^\circ$ 重构表面的一些区域也仅仅是被单层碳原子所覆盖, 所有这些现象都说明, 与表面态 D_c 情况类似, S_1 应该是由表面未钝化的 C 悬键所导致的. 表面电子态 S_2 的能带色散也没有显示出所希望的重构周期性, S_2 完全位于体能带当中, 目前我们还不能确定其起源, 深入的研究工作很有必要.

4. 结 论

利用同步辐射角分辨光电子能谱对 6H-SiC(0001) $\sqrt{3} \times \sqrt{3} R30^\circ$ 重构表面的电子结构和表

面态进行了详细的实验研究. 实验测量出的体能带结构与理论计算结果比较一致, 三个表面态分别在结合能 $-0.48\text{ eV}(S_0)$, $-1.62\text{ eV}(S_1)$ 和 $-4.93\text{ eV}(S_2)$ 处被分辨出来. 沿着表面布里渊区的高对称线 $\bar{\Gamma}\bar{K}\bar{M}$ 方向, 我们测量了相关表面态的能带色散. 只有表面态 S_0 在全部表面布里渊区内显示出了所希望的 $\sqrt{3} \times \sqrt{3} R30^\circ$ 周期对称性. 表面态 S_0 应该被归结于表面重构区域的 C—C 悬键, 表面态 S_1 则该被归结于表面未钝化的 C 悬键. 表面态 S_2 的起源需进行更为深入的研究.

[1] Morkoc H , Strite S , Gao G B , Lin M E , Sverdlov B , Burns M 1994 *J. Appl. Phys.* **76** 1363

[2] Zorman C A , Fleischman A J , Dewa A S , Meheregany M , Jacob C , Nishino S , Pirouz P 1995 *J. Appl. Phys.* **78** 5136

[3] Derycke V , Soukiassian P , Mayne A , Dujardin G , Gautier J 1998 *Phys. Rev. Lett.* **81** 5868

[4] Silly M G , Radtke C , Enriquez H , Soukiassian P , Gardonio S , Moras P , Perfetti P 2004 *Appl. Phys. Lett.* **85** 4893

[5] Ostendorf R , Benesch C , Hagedorn M , Merz H , Zacharias H 2002 *Phys. Rev. B* **66** 245401

[6] Lu W , Schmidt W G , Briggs E L , Bernholc J 2000 *Phys. Rev. Lett.* **85** 4381

[7] Glans P A , Balasubramanian T , Syvajarvi M , Yakimova R , Johansson L I 2001 *Surf. Sci.* **470** 284

[8] Tsai M H , Chang C S , Dow J D , Tsong I S T 1992 *Phys. Rev. B* **45** 1327

[9] Johansson L I , Owman F , Mårtensson P 1996 *Surf. Sci.* **360** L483

[10] Starke U , Scharadt J , Bernhardt J , Franke M , Reuter K , Wedler H , Heinz K 1998 *Phys. Rev. Lett.* **80** 758

[11] Scharadt J , Bernhardt J , Starke U , Heinz K 2000 *Phys. Rev. B* **62** 10335

[12] Reuter K , Bernhardt J , Wedler H , Scharadt J , Starke U , Heinz K 1997 *Phys. Rev. Lett.* **79** 4818

[13] Takami J , Naitoh M , Yokoh I , Nishigaki S , Toyama N 2001 *Surf. Sci.* **482 – 485** 359

[14] Xie X N , Loh K P 2000 *Appl. Phys. Lett.* **77** 3361

[15] Ong W J , Tok E S , Xu H , Wee A T S 2002 *Appl. Phys. Lett.* **80** 3406

[16] Pollmann J , Kruger P 2004 *J. Phys. : Condens. Matter* **16** S1659

[17] Heinz K , Bernhardt J , Scharadt J , Starke U 2004 *J. Phys. : Condens. Matter* **16** S1705

[18] Catellani A , Galli G 2002 *Prog. Surf. Sci.* **69** 101

[19] Zou C W , Sun B , Zhang W H , Wang G D , Xu P S , Wang Q P , Xu F Q , Pan H B 2005 *Nucl. Instrum. Meth. A* **548** 574

[20] Blaha P , Schwarz K , Herzig P 1985 *Phys. Rev. Lett.* **54** 1192

[21] Blaha P , Sorantin P I , Schwarz K , Singh D 1992 *Phys. Rev. B* **46** 1321

[22] Perdew J P , Burke S , Ernzerhof M 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 3865

[23] Park C H , Cheong B H , Lee K H , Chang K J 1994 *Phys. Rev. B* **49** 4485

[24] Johansson L I , Owman F , Martensson P , Person C , Lindefelt U 1996 *Phys. Rev. B* **53** 13803

[25] Xie C K , Xu P S , Xu F Q , Pan H B , Li Y H 2003 *Physica B : Condense Matter* **336** 284

[26] Johansson L S O , Duda L , Laurenzis M , Krieffewirth M , Reihl B 2000 *Surf. Sci.* **109 – 114** 445

[27] Chen W , Xu H , Liu L , Gao X Y , Qi D C , Peng G , Tan S C , Feng Y P , Loh K P , Wee A T S 2005 *Surf. Sci.* **176 – 186** 596

[28] Entsev K V , Seyller T , Ley L , Broekman L , Tadich A , Riley J D , Leckey R G C 2006 *Surf. Sci.* **3845 – 3850** 600

Synchrotron radiation angle-resolved photoelectron spectroscopy studies of 6H-SiC(0001)- $6\sqrt{3} \times 6\sqrt{3}$ $R30^\circ$ surface^{*}

Wu Yu-Yu¹⁾ Chen Shi²⁾ Gao Xin-Yu²⁾ Andrew Thye Shen Wee²⁾ Xu Peng-Shou¹⁾†

¹⁾ *National Synchrotron Radiation Laboratory, University of Science and Technology of China, Hefei 230029, China*

²⁾ *Department of Physics, National University of Singapore, 117542, Singapore*

(Received 19 June 2008; revised manuscript received 23 October 2008)

Abstract

The electronic structure including some surface states of the $6\sqrt{3} \times 6\sqrt{3}$ $R30^\circ$ reconstructed 6H-SiC(0001) surface have been investigated by synchrotron radiation angle-resolved photoelectron spectroscopy (SRARPES). The energy position of the bulk valence band maximum (VBM) is determined to be at (-2.1 ± 0.1) eV related to the Fermi level by identifying bulk states from valence band spectra. The experimentally measured bulk energy band structure agrees well with the theoretical calculation result. Three surface states are clearly identified at the binding energies of -0.48 eV (S_0), -1.62 eV (S_1) and -4.93 eV (S_2) referred to the Fermi level. The surface state dispersion is measured along $\overline{\Gamma}\overline{K}\overline{M}$, the high symmetry lines of the surface Brillouin zone. Only surface state S_0 (-0.48 eV) shows expected $6\sqrt{3} \times 6\sqrt{3}$ $R30^\circ$ periodicity in all probed SBZ. Surface state S_0 should be attributed to the C—C dangling bonds of the surface reconstruction. Surface states S_1 should be attributed to the unsaturated C dangling bonds.

Keywords: angle-resolved photoelectron spectroscopy, SiC, electronic structure, surface states

PACC: 8280P, 7320A

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 50572100, 50872128).

† Corresponding Author. E-mail: psxu@ustc.edu.cn