



InGaAs (110)解理面的扫描隧道谱的理论诠释

戴昊光 查访星 陈平平

Theoretical explanation of scanning tunneling spectrum of cleaved (110) surface of InGaAs

Dai Hao-Guang Zha Fang-Xing Chen Ping-Ping

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 70, 196801 (2021) DOI: 10.7498/aps.70.20210419

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210419>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

铁基超导体的扫描隧道显微镜研究进展

Studies of scanning tunneling spectroscopy on iron-based superconductors

物理学报. 2018, 67(20): 207401 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20181818>

二维拓扑绝缘体的扫描隧道显微镜研究

Scanning tunneling microscopy study on two-dimensional topological insulators

物理学报. 2019, 68(22): 226801 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20191631>

Bi (110)薄膜在NbSe₂衬底上的扫描隧道显微镜研究

Scanning tunneling microscopy research of Bi(110) thin films grown on NbSe₂

物理学报. 2018, 67(17): 170701 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20180977>

表/界面水的扫描探针技术研究进展

Recent advances in probing surface/interfacial water by scanning probe microscopy

物理学报. 2019, 68(1): 016802 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20182201>

反铁磁轴子绝缘体候选材料EuIn₂As₂的表面原子排布和电子结构

Surface and electronic structure of antiferromagnetic axion insulator candidate EuIn₂As₂

物理学报. 2021, 70(18): 186801 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210783>

单层FeSe薄膜/氧化物界面高温超导

Interface enhanced superconductivity in monolayer FeSe film on oxide substrate

物理学报. 2018, 67(20): 207415 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20181681>

InGaAs(110) 解理面的扫描隧道谱的理论诠释*

戴昊光¹⁾ 查访星^{1)†} 陈平平²⁾

1) (上海大学物理系, 上海 200444)

2) (中国科学院上海技术物理研究所, 红外物理国家重点实验室, 上海 200083)

(2021年3月5日收到; 2021年5月6日收到修改稿)

本工作应用截面扫描隧道显微镜 (XSTM) 研究了 $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}/\text{InP}$ 异质结构的 (110) 解理面. 扫描隧道谱 (STS) 测量结果显示, InGaAs 的电流-电压 (I - V) 隧道谱呈现与衬底 InP(110) 面完全不同特点. InP 的 I - V 谱呈现的零电流平台宽度 (隧道谱表观带隙) 接近材料带隙, 可基于平带模型解释. $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ 的表观带隙却比其带隙 (室温 0.74 eV) 高出约 50%. 这反映了针尖与 InGaAs 发生隧穿时的不同物理图像, 需应用针尖诱导能带弯曲 (TIBB) 模型来解释. 基于三维 TIBB 模型的计算, 我们发现表面态密度是对隧道谱线特征具有敏感影响的参数. 适当选取参数不仅能定量解释 InGaAs 的 I - V 谱的零电流平台宽度, 而且能较准确预言零电流平台的起、止能量位置, 并能计算给出与实验高度重合的 I - V 理论谱线.

关键词: 半导体表面, 扫描隧道显微镜, 扫描隧道谱, 针尖诱导能带弯曲**PACS:** 68.37.Ef, 74.55.+v, 73.20.At, 68.47.Fg**DOI:** 10.7498/aps.70.20210419

1 引言

作为研究纳米结构和表面界面的先进表征技术, 扫描隧道显微镜 (STM) 与其他显微技术相比有一个重要优势, 即不仅给出高空间分辨的形貌特征, 而且能通过扫描隧道谱 (STS) 测量获得局域电子结构信息. 不过, 在很多 STM 应用中, 对 STS 测量结果的解释却是比较复杂的问题, 往往涉及不同物理因素的影响, 如针尖诱导能带弯曲 (tip-induced band bending, TIBB) 效应^[1-5], 镜像势^[6,7]等, 进而依赖不同物理模型来解释. 对于半导体的 STM/STS 实验来说, 物理图像较简单的平带模型是在某些特定条件下才适用的, 往往发生在半导体具有高的掺杂浓度或因高的表面态密度 (density of surface states, DOSS) 而产生表面费米能级钉扎的情形. 很多其他情形下 TIBB 效应是不可忽略的. 该条件

下半导体能带带隙与电流-电压隧道谱 (I - V) 所观测的零电流平台宽度 (表观带隙) 需要通过模型计算方能建立定量关系.

Feenstra 等^[8-12] 所发展的 TIBB 模型是目前被较多采用的诠释半导体 STS 结果的物理模型. 本质上该模型系唯像模型, 当具体被应用于半导体的 STS 测量结果分析时, 还涉及半导体功函数、表面态等物理参量的影响, 这些参数对 STS 谱线形、表观带隙大小和带边位置等参量具体影响规律如何, 迄今尚未见到有文献系统阐述. 结合具体实验数据澄清对上述问题的认知, 对于更好地发挥 STS 这一重要分析手段在半导体表面界面研究上的应用, 无疑是一个非常值得探讨的重要课题.

本文采用 XSTM 测量技术对分子束外延 (MBE) 生长的晶格匹配 $\text{InP}/\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ 异质结构进行了表征. 该结构是构建 0.9—1.7 μm 近红外波段光电探测器的基础. 不仅应用于制作短波红外焦平面

* 国家自然科学基金 (批准号: 61474073, 61874069) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: fxzha@shu.edu.cn

器件^[13], 而且基于此结构所发展的雪崩光电二极管 (APD) 属于应用于长距离和高比特率光纤通信的最重要的器件方案^[14]. 目前通过 MBE 进行的该材料结构生长中, 异质界面的优化生长一直都是备受重视的研究课题^[15]. 与此紧密相关的是需要借助对界面生长质量和界面特性有效表征的技术手段, 而 XSTM 方法则具备独特优势^[5].

本工作所研究的沿 InP(001) 衬底外延生长的 InP/In_{0.53}Ga_{0.47}As 异质结构, 其截面为非极化 (110) 面. *I-V* 谱测量显示, InP 的零电流平台宽度略小于材料带隙, 这可基于平带模型予以解释, 说明 InP(110) 面存在较高 DOSS 能够引起费米能级钉扎; 较小的表观带隙则与能带的带边态引起的带隙窄化有关. 但与 InP 缓冲层的 STS 实验明显不同的是, InGaAs(110) 面 STS 测量显示, 其表观带隙则比材料带隙约大 50%, 意味着 InGaAs 的 STM 实验中存在明显的 TIBB 效应. 对此应用 Feentra 的三维能带弯曲模型进行了分析计算^[9,10], 发现仅计入 TIBB 效应尚不足以准确解释 *I-V* 谱的零电流平台的能量起、止位置等特征参数. 对此需纳入参量 DOSS, 后者对线形特征有着敏感影响. 通过对 DOSS 数值的恰当选取能够计算出与实验高度吻合的 *I-V* 测量谱线.

2 实验

利用 MBE 技术在 n 型 InP 衬底 (001) 面上相继生长 0.2 μm 的 InP 缓冲层和 1.5 μm 的 In_xGa_{1-x}As 层, 其中 In 的组分 $x = 0.53$, 形成晶格匹配的 InGaAs/InP 异质结. 另外, InP 缓冲层 n 型掺杂, 掺杂浓度为 $1.0 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, 而 InGaAs 层非故意掺杂, 呈弱 n 型, 杂质浓度约 $1.0 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$.

图 1 所示为进行 XSTM 实验的样品构型图. 薄片样品通过样品托上的夹具垂直于样品托表面固定, 为了获得平整解理面, 先在样品表面沿着夹具上端缘形成轻微划痕, 以便于轻微撞击样品后就获得垂直样品面沿划痕解理的端面. 为避免空气影响, 样品解理操作在氮气手套箱中完成. 另外手套箱与 STM 预腔密封对接, 使得样品到 STM 真空进样室的传输也在氮气保护下完成^[16]. 样品先在进样室里由分子泵抽真空 3 h 左右再传入超高真空腔进行 STM 测量. STM 设备为 Omicron 低温超高真空扫描隧道显微镜, 基准压强小于 $3.0 \times$

10^{-10} mbar ($1 \text{ mbar} = 100 \text{ Pa}$). 采用恒流成像模式, 成像参数设置为: 偏压 1.30 V (加在样品上), 参考电流 25 pA. STS 数据基于 *I-V* 数据采集获得. 进行 XSTM 测量时, 需要在 (110) 解理面以每次约 800 nm 的步长向样品表层侧逐步横向移动 STM 针尖, 每次移动针尖后进行成像扫描, 并通过观察扫描轮廓线有无高度突变来判断是否到达样品表层边缘^[17]. 当解理面边缘位置确定后, 再结合样品生长时已确定的外延层厚度参数, 自表层向内移动相应针尖坐标位置找到需要测试的界面区域进行测量.

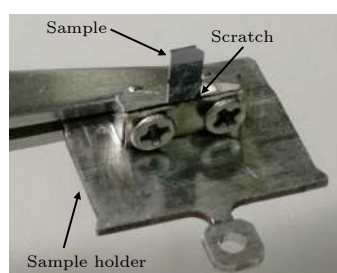


图 1 处于样品托中用于 XSTM 实验的样品照片

Fig. 1. Photography of sample in the sample holder for the XSTM experiment.

3 结果与讨论

图 2(a) 为 InGaAs/InP 异质结 (110) 解理面的 STM 形貌结果. 形貌图中标出了晶体生长的 (001) 方向, 可以看到沿该方向在界面两侧呈现出较为明显的衬度变化. 左侧颜色较暗淡的为 InP 缓冲层, 右侧较明亮的为 InGaAs 层. 本工作中重点分析这两种外延层的 STS 测量结果. 在 STM 实验中, *I-V* 谱是最为常用的 STS 测量方式. 对于半导体样品, *I-V* 谱在 $V = 0 \text{ V}$ 附近所呈现的零电流平台宽度由半导体能带带隙决定. 图 2(b) 和图 2(c) 分别给出了 InP 和 InGaAs 的典型测量结果 (为了突出零电流平台附近谱线特征, 图中仅显示了 $\pm 1.2 \text{ V}$ 范围的谱线). 需要指出的是, 虽然很多文献在进行 *I-V* 数据分析时习惯对 *I-V* 数据作微分处理, 进而以 dI/dV 谱或归一化微分隧道谱的形式来表示^[18], 但上述数据处理过程一般要对原始 *I-V* 数据进行必要的平滑处理以降低数值微分所放大的噪声干扰. 该数据处理也会对谱线特征结构 (如峰位或拐点) 的准确指认有一定影响. 为了避免此类误差, 本文的数据分析基于未做任何处理的原始 *I-V*

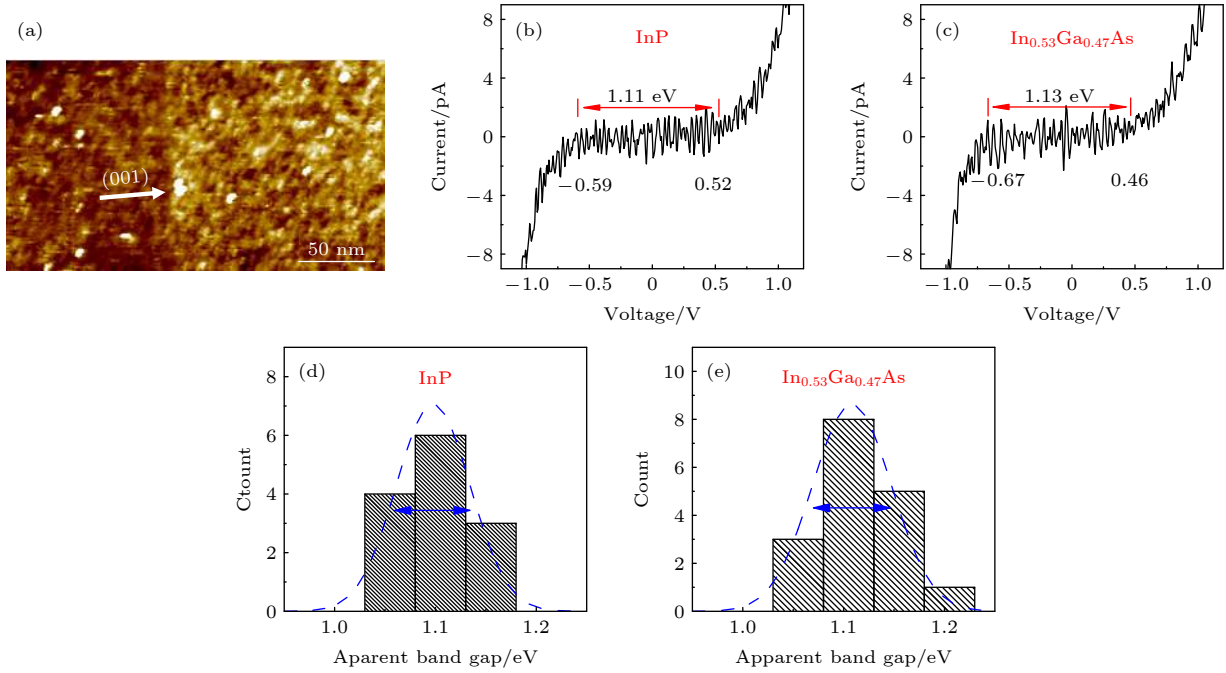


图 2 (a) InGaAs/InP 异质结 (110) 解理面的 STM 形貌; (b) 和 (c) 为 InP 和 InGaAs(110) 面的典型的 I - V 隧道谱给出的表观带隙测量结果; (d) 和 (e) 分别为在 InP 和 InGaAs(110) 表面分别随机采样 13 和 17 条 I - V 谱线给出的表观带隙直方图统计结果
 Fig. 2. (a) STM topography of the cleaved (110) surface of InGaAs/InP hetero-structure; (b) and (c) are the typical I - V tunneling spectra of InP and InGaAs (110) surface, respectively; (d) and (e) are the statistical histograms of the apparent tunneling gaps with the sampling of 13 and 17 spectra on the (110) surfaces, respectively.

谱线数据^[19]. 另外, 为了尽可能减小数据指认的不确定性以及局域缺陷态叠加产生的影响, 对每一材料的 I - V 数据分析基于在表面不同空间随机取样十几组数据获得, 并采用如图 2(d) 和图 2(e) 所示的表观带隙能量分布直方图的形式 (能量间隔 0.05 eV) 归纳获得统计性测量结果.

图 2(b) 为 InP 表面给出的一典型 I - V 谱线, 其零电流平台宽度 (隧道谱表观带隙) 约为 1.11 eV, 还注意到 I - V 曲线零电流平台正负电压侧对应的拐点位置分别为 -0.59 和 0.52 eV (从平带模型来说它们分别对应价带顶和导带底能量位置, 见图 3). InP 隧道谱表观带隙略小于其材料带隙 1.35 eV. 实验中在 InP 表面随机采集了 13 条谱线, 总体上其谱线特征和图 2(b) 所示均非常类似. 根据这些谱线计算出的零电流平台宽度均值为 1.098 eV, 均方差为 0.035 eV, 进而可利用正态分布函数更直观地反映带隙能量的统计分布, 如图 2(d) 中与直方图叠加的蓝色虚线所示.

图 2(c) 是测量给出的 InGaAs(110) 面的典型 I - V 谱线. 隧道谱表观带隙为 1.13 eV, 价带顶和导带底能量分别为 -0.67 和 0.46 eV. 图 2(e) 为用直方图展示的基于 17 条测量谱线所绘出的表观带

隙直方图的统计分布结果. 其均值为 1.108 eV, 均方差为 0.038 eV. 值得注意的是, 前面 InP 的隧道谱表观带隙较接近其材料带隙 1.35 eV, 但 In_{0.53}Ga_{0.47}As 表观带隙明显大于材料带隙 0.74 eV; 测量值超过材料带隙的 50%. 这一不同特征, 意味着这两种外延层的隧穿模型机制是不同的.

对 InP 的测量结果, 可基于图 3(a) 和 3(b) 所示的平带模型能带图进行解释. 平带模型一般适用于材料高掺杂或有高的 DOSS 引起的费米能级钉扎情形. 平带模型条件下, 样品正偏压下针尖费米能级高于导带底能量 E_C (如图 3(a) 所示 $eV \geq E_C$, e 为单位电荷), 电子由针尖隧穿至样品. 如定义 $eV_C = E_C$, 则平带模型下 V_C 对应图 3(a) 中零电流平台的右侧拐点. 当偏压如图 3(b) 所示偏压为负时, 针尖费米能级对准价带顶, 发生电子由样品到针尖的隧穿, V_V 对应 I - V 谱零电流平台的左拐点. 这样有 $e(V_C + |V_V|) = E_g$, 即隧道谱的表观带隙应等于材料的带隙 E_g .

不过图 2(b) 和图 2(d) 的实验测量结果显示, 平均表观带隙约 1.10 eV 比 InP 的带隙 1.35 eV (室温) 要小一些. 这一现象可解释为: 已有关于 InP 表面态的实验研究发现^[20,21], InP(110) 表面很容易

因氧吸附而产生在距离导带底 0.1—0.3 eV 的能量区间产生大量深能级, 而本文 I - V 隧道谱所测量的 InP(110) 面的表观带隙比实际带隙数值上小约 0.2—0.3 eV, 和上述氧吸附产生的深能级态恰在基本相同的数值范围. 由此看来 InP 表观带隙的窄化或源自上述深能级表面态对隧穿电流的贡献. 对此还要补充说明的是, 虽然前面提到本样品解理是在氮气手套箱保护氛围下进行的, 包括样品到 STM 真空腔的传递也是通过氮气手套箱与 STM 进样室对接来避免样品在空气中的暴露, 但是该制备条件尚不能达到对环境分子吸附充分抑制的超高真空条件原位解理所能提供的效果. 对于洁净半导体表面来说, 表面敏感的气体分子的吸附会是迅速的过程, 所以在我们的样品制备条件下 InP 表面仍存在产生氧吸附表面态的机制. 不过对同一气体分子的吸附敏感性也会因材料而异. 同一样品中 InGaAs(110) 解理面的 STS 结果则展示出不同于 InP 的特点. 如图 2(c) 的隧道谱显示, 其零电流平台宽度 (表观带隙) 比材料带隙大出很多, 意味着平带模型对应的物理图像是不适用的. 故对 InGaAs 隧道谱的解释必须应用 TIBB 模型而非平带模型机制 [8—12].

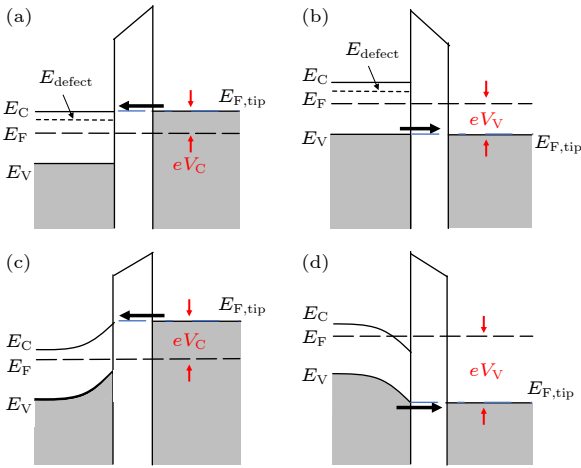


图 3 平带模型的 STM 隧道结能带示意图 (a) 正偏压; (b) 负偏压; TIBB 模型下的隧穿能带图 (c) 正偏压; (d) 负偏压. E_C , E_V 和 E_F 分别是样品的导带、价带和费米能级, $E_{F,tip}$ 是针尖的费米能级, E_{defect} 表示缺陷态能级.

Fig. 3. Schematic energy band diagram of STM tunneling junction with flat band model: (a) Positive sample bias; (b) negative sample bias; schematic energy band diagram of tunneling junction with the TIBB model: (c) positive sample bias; (d) negative sample bias. E_C , E_V and E_F are the conduction band, valence band and Fermi level of the sample respectively, $E_{F,tip}$ is the Fermi level of the tip, and E_{defect} is the defect level.

先从图 3(c) 和图 3(d) 的隧穿能带图就 TIBB 效应对带隙测量的影响给予定性说明. 当针尖和半导体表面施加电压时, 电场会感应表面处原来电中性的电荷载体 (电子、空穴、电离的施主和受主) 形成空间电荷的重新分布而对外加电场产生屏蔽作用, 导致外加电势部分偏压降落在半导体上产生所谓 TIBB 效应: 正偏压下如图 3(c) 能带向上弯曲; 负偏压下如图 3(d) 所示能带向下弯曲. 它必然导致大于材料带隙的隧道谱表观带隙, 即 $e(V_C + |V_V|) > E_g$.

TIBB 效应下的 I - V 谱能量宽度可基于电势微分方程的求解给出定量结果 [22,23]. 图 3 是基于隧穿的一维能带图的说明. 2003 年 Feenstra [8] 进一步考虑 STM 针尖形状的影响, 发展了更符合 STM 隧穿情形的三维能带弯曲模型. 对于 InGaAs 计算所用到的参数选取如下: 针尖曲率半径 $R = 30$ nm, 张角 $\theta = 90^\circ$, 针尖-样品间距 $s = 0.75$ nm, 针尖 (钨) 功函数采用 $\phi_m = 4.74$ eV [4]. 基于该模型的表面电势分析就可以预言 TIBB 效应存在时 I - V 谱的零电流平台宽度 (表观带隙) 的大小. 如图 4 所示, 计算出的 InGaAs 表面电势能随所加偏压的变化曲线如图中实线所示 [24]. 图 4 的横坐标为针尖-样品的偏压, 纵坐标为以样品费米能级作为零参考点的能量变化值; 图中两组实线分别为表面处导带和价

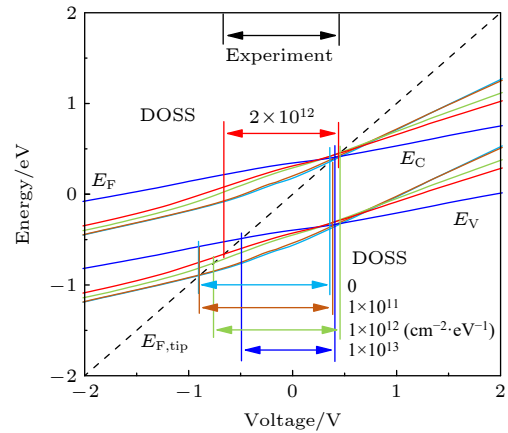


图 4 三维 TIBB 模型给出的 InGaAs 表面处带边电势能随所加样品偏压的变化关系, 不同颜色的实线对应于不同 DOSS, 对应箭头所指为该态密度下计算得到的表观带隙, 优化的 DOSS 对应计算结果如红色实线所示

Fig. 4. Variation of surface potential of InGaAs with the sample voltage calculated by the 3D TIBB model. The solid lines of different colors correspond to different DOSS, and the corresponding arrows indicate the calculated apparent tunneling gaps at the DOS. The optimized calculation result is shown by the red line.

带电势随所加偏压的变化情况,除了浅蓝色实线为未考虑表面态修正情形,红、橙、浅绿和蓝色实线分别为考虑不同 DOSS 修正后情形,稍后讨论.另外,图中黑色虚线是针尖费米能级随所加偏压改变而产生的与样品费米能级差的变化.它与表面处价带或导带的交点为产生隧道电流的阈值点,即 I - V 谱线上零电流平台的左、右拐点电压值(分别记为 V_{-onset} 和 V_{+onset}).二者差值 ΔV 给出的表观带隙取值 ($e\Delta V$).

表 1 给出了隧道谱实验测量结果以及不同 DOSS 情况下(包括不考虑表面态贡献)的 TIBB 模型对 I - V 谱特征参数的计算结果.可看到表面态参数的选取对于表观带隙大小,尤其是 I - V 谱零电流平台对应的电压起、止位置(即针尖费米能级对准价带顶和导带底的隧穿的能量位置)有着灵敏的

表 1 InGaAs 隧道谱特征参量的实验数据与 TIBB 模型计算的对比

Table 1. Comparison of experimental data and TIBB model calculations on the characteristic parameters of InGaAs tunneling spectra.

| The parameters of I - V spectra | Apparent band gap/eV | V_{-onset}/V | V_{+onset}/V |
|---|----------------------|----------------|----------------|
| Experimental | 1.13 | -0.67 | 0.46 |
| Calculations with the density of surface states/($\text{cm}^2\cdot\text{eV}$) ⁻¹ | | | |
| 0 | 1.25 | -0.89 | 0.36 |
| 1.0×10^{11} | 1.29 | -0.89 | 0.40 |
| 1.0×10^{12} | 1.21 | -0.75 | 0.46 |
| 2.0×10^{12} | 1.11 | -0.66 | 0.45 |
| 1.0×10^{13} | 0.90 | -0.49 | 0.41 |

影响.当不计入表面态贡献时上述参数分别为-0.89 V 和 0.36 V,与实验测量明显不一致.

注意到 Feenstra^[11,12]在 TIBB 模型中引入过 DOSS 这一唯像参量修正.模型中该修正对于能量位于禁带中的表面态分布采取如下简化处理,即中性能级位于禁带中央,禁带中的施主和受主能态分别在中性能级上下均匀分布.而 DOSS 大小的取值目前文献中一般在 10^{11} — 10^{13} ($\text{cm}^2\cdot\text{eV}$)⁻¹ 量级^[25].为了考察 DOSS 取值对 I - V 谱的影响,选取 1.0×10^{11} — 1.0×10^{13} ($\text{cm}^2\cdot\text{eV}$)⁻¹ 态密度范围内几组典型取值进行计算.各组取值下的电势能变化如图 4 所示.如前所述,每组的价带和导带带边与针尖费米能量(黑色虚线)交点间的电压间隔预言了相应 DOSS 下 I - V 谱的零电流平台宽度(STS 表观带隙),如图 4 中不同颜色水平箭头线所指示,具体数值见表 1.为了与实验比较,图中实验测量给出的表观带隙用黑色水平箭头标明.

如图 4 上方所标示,当 DOSS 取为 2.0×10^{12} ($\text{cm}^2\cdot\text{eV}$)⁻¹ 时所给出的计算结果(红色线)与实验最为一致:此时不仅表观带隙值最接近实验结果,而且对零电流平台起、止能量位置的预测也与实验吻合最好.另外,通过比较不同 DOSS 下的计算结果,观察到 DOSS 增大时表观带隙展宽效应变小并趋近材料带隙.例如当取较高 DOSS (1.0×10^{13} ($\text{cm}^2\cdot\text{eV}$)⁻¹) 时,表观带隙值为 0.90 eV 已经很接近材料带隙值(室温 0.74 eV).

事实上,对上述模型结果的更充分的验证还可以通过 InGaAs 的 I - V 谱的理论计算结果比较来获得^[11,12].图 2(c) 的实验测量谱线与计算谱线

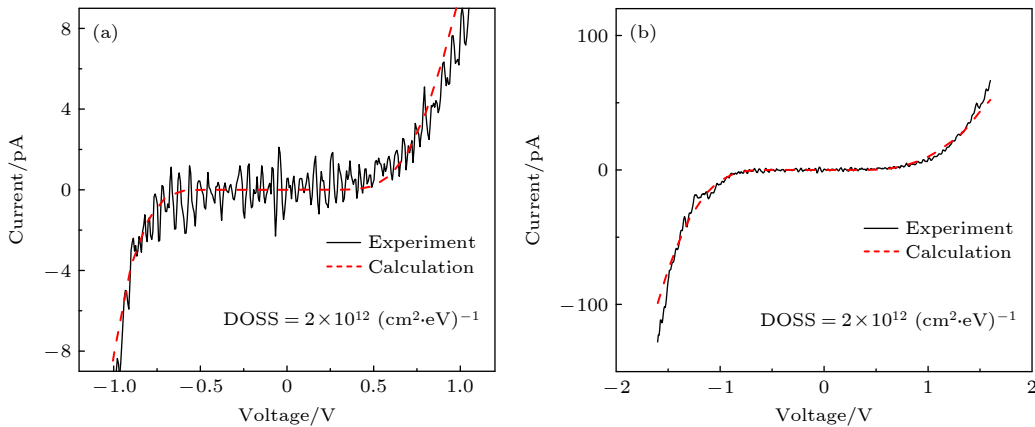


图 5 (a) InGaAs 的 I - V 谱的计算(红色虚线)结果与实验谱线(黑色实线)的对比; (b) 图(a)谱线在整个(-1.6 V, 1.6 V)电压范围对计算/实验对比结果的呈现

Fig. 5. (a) Comparison of the I - V spectra between the calculated (red dashed line) and experimental (black solid line); (b) comparison of the spectra within the whole voltage range of (-1.6 V, 1.6 V).

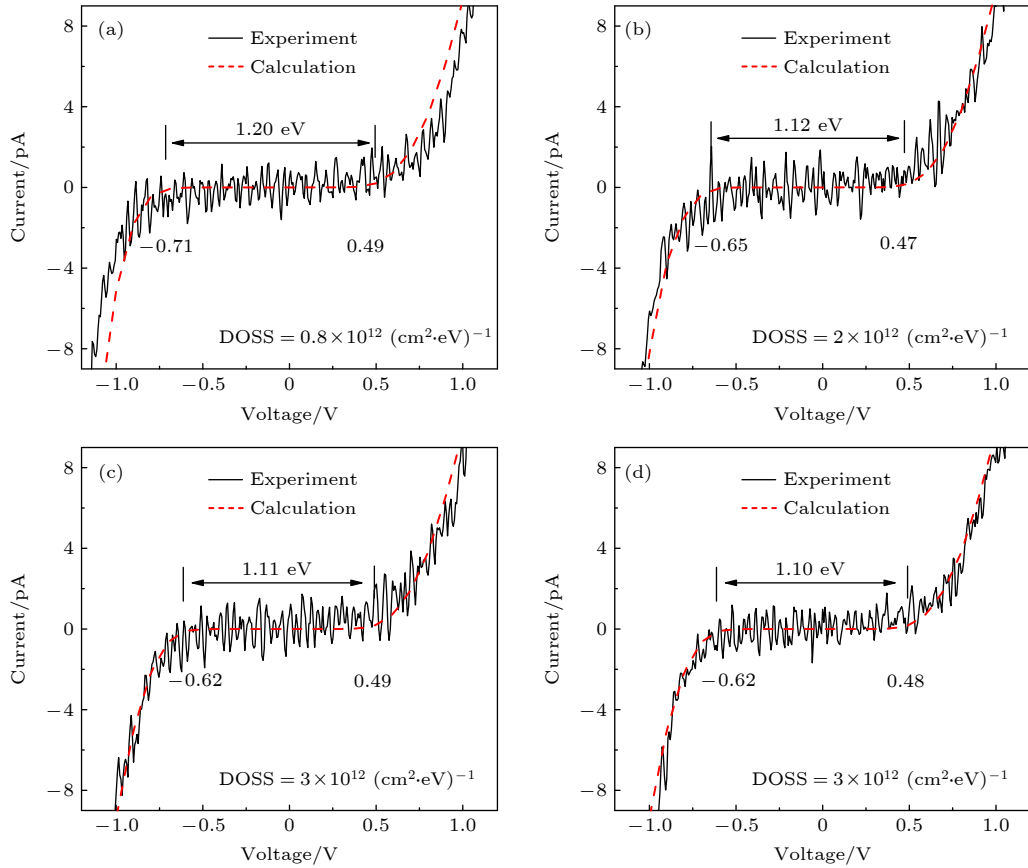


图 6 (a)–(d) InGaAs 的四组 I - V 谱实验谱线 (黑色实线) 与模型计算 (红色虚线) 的对比, 各图中分别注明了计算时采用的表面态密度 (DOSS) 数值

Fig. 6. (a)–(d) Comparison of four groups of experimental I - V spectra (black solid lines) with the corresponding calculated I - V spectra (red dashed line). The DOSS for each curve is indicated, respectively.

放到一起的对比如图 5(a) 所示. 其中, 红色虚线为计算结果. 图 5(b) 则是测量谱线 (黑线) 与计算谱线在更宽测量范围即 $(-1.6 \text{ V}, 1.6 \text{ V})$ 区间的对比. 可以看到, 无论从图 5(a) 所展示的细节特征还是图 5(b) 对整条谱线的线形趋势特征的预言, 计算结果均与实验吻合得很好.

分析认为, 以图 5 中特定的 I - V 谱线进行的讨论说明是代表性的. 结合图 2(e) 的测量统计结果, I - V 谱线的零电流平台宽度及其电压起止位置等参数对于来自表面不同位置的测量谱线会略有差异, 但是采用同样方法对其他谱线进行测试计算, 发现只要适当调节 DOSS 取值, 可以获得对相应实验谱线较满意的拟合结果. 其道理也不难解释, 因为 STS 给出的是局域电子态信息, 不同位置的 I - V 线形难免也存在局域性的表面态的调控, I - V 谱线形特征自然也携带着具有空间局域特征的表面态信息. 作为进一步的说明, 在图 6(a)–(d) 中又给出了 InGaAs 解理面上另外 4 组测量谱线 (黑色) 与计算 (红色虚线) 放到一起对比的结果,

可以看到二者的吻合均令人满意.

4 结 论

扫描隧道谱的定量解释至今仍是一个较为复杂且研究并不充分的领域. 本工作基于现有 TIBB 理论框架计算分析了 InGaAs(110) 面的 STS 测量结果, 发现了 DOSS 参量同 STS 谱线线形有着密切关联. 理论模拟与实验对比表明, DOSS 作为 TIBB 模型中的唯像参量对 I - V 谱上零电流平台起止电压位置有着显著的影响. 在 TIBB 模型中该参量的恰当选取不仅可较准确地解释 I - V 谱的零电流平台宽度、平台能量起始和终止能量位置等谱线特征量, 而且在相当宽的能量范围内计算给出的 I - V 谱线能非常满意的与实验测量吻合. 本文虽然针对的是 InGaAs 这一具体材料的 STS 实验结果的分析, 但是所展示的分析方法对于半导体表面或界面的 STS 数据分析却具有普遍参考意义.

参考文献

- [1] Tian Z, Gan Y, Zhang T, Wang B, Ji H, Feng Y, Xue J 2019 *Phys. Rev. B* **100** 085440
- [2] Lee D H, Gupta J A 2010 *Science* **330** 1807
- [3] Wijnheijmer A P, Garleff J K, Teichmann K, Wenderoth M, Loth S, Ulbrich R G, Maksym P A, Roy M, Koenraad P M 2009 *Phys. Rev. Lett.* **102** 166101
- [4] Timm R, Feenstra R M, Eisele H, Lenz A, Ivanova L, Lenz E, and Dähne M 2009 *J. Appl. Phys.* **105** 093718
- [5] Huang B C, Chiu Y P, Huang P C, Wang W C, Tra V T, Yang J C, He Q, Lin J Y, Chang C S, Chu Y H 2012 *Phys. Rev. Lett.* **109** 246807
- [6] Lin H, Lagoute J, Repain V, Chacon C, Girard Y, Lauret J - S, Ducastelle F, Loiseau A, Rousset S 2010 *Nat. Mater.* **9** 235
- [7] Shao F, Zha F X, Pan B C, Shao J, Zhao X L, Shen X C 2014 *Phys. Rev. B* **89** 085423
- [8] Feenstra R M 2003 *J. Vac. Sci. Technol. B* **21** 2080
- [9] Feenstra R M 2009 *Surf. Sci.* **603** 2841
- [10] Feenstra R M, Gaan S, Meyer G, Rieder K H 2005 *Phys. Rev. B* **71** 125316
- [11] Dong Y, Feenstra R M, Semtsiv M P, Masselink W T 2008 *J. Appl. Phys.* **103** 073704
- [12] Ishida N, Sueoka K, Feenstra R M 2009 *Phys. Rev. B* **80** 075320
- [13] Rouvié A, Coussement J, Huet O, Truffer JP, Pozzi M, Oubensaid E H, Hamard S, Maillart P, Costard E 2014 *Proc. of SPIE* **9249** 92490Z
- [14] Wen J, Wang W J, Chen X R, Li N, Chen X S, Lu W 2018 *J. Appl. Phys.* **123** 161530
- [15] Zheng W L, Zhang Y G, Gu Y, Li B B, Chen Z Z, Chen P P 2019 *J. Infrared Millim. Waves* **38** 1001 (in Chinese) [郑文龙, 张亚光, 顾溢, 李宝宝, 陈泽中, 陈平平 2019 红外与毫米波学报 **38** 1001]
- [16] Zha F X, Hong F, Pan B C, Wang Y, Shao J, Shen X C 2018 *Phys. Rev. B* **97** 035401
- [17] Mikkelsen A, Lundgren E 2005 *Prog. Surf. Sci.* **80** 1
- [18] Feenstra R M 1994 *Phys. Rev. B* **50** 4561
- [19] Albrektsen O, Arent D J, Meier H P, Salemink H W M, 1990 *Appl. Phys. Lett.* **57** 31
- [20] Newman N, Spicer W E, Kendelewicz T, Lindau I 1986 *J. Vac. Sci. Technol. B* **4** 931
- [21] Deng Z W, Kwok Raymond W M, Lau Leo W M, Cao L L 1999 *Acta Phys-Chim. Sin.* **15** 303 (in Chinese) [邓宗武, 郭伟民, 刘焕明, 曹立礼 1999 物理化学学报 **15** 303]
- [22] Kingston R H, Neustadter S F 1955 *J. Appl. Phys.* **26** 718
- [23] Seiwatz R, Green M 1958 *J. Appl. Phys.* **29** 1034
- [24] Jäger N D, Weber E R, Urban K, Ebert P H 2003 *Phys. Rev. B* **67** 165327
- [25] Ivanova L, Borisova S, Eisele H, Dähne M, Laubsch A, Ebert P H 2008 *Appl. Phys. Lett.* **93** 192110

Theoretical explanation of scanning tunneling spectrum of cleaved (110) surface of InGaAs*

Dai Hao-Guang¹⁾ Zha Fang-Xing^{1)†} Chen Ping-Ping²⁾

1) (*Department of Physics, Shanghai University, Shanghai 200444, China*)

2) (*National Laboratory for Infrared Physics, Shanghai Institute of Technical Physics, Chinese Academy of Sciences, Shanghai 200083, China*)

(Received 5 March 2021; revised manuscript received 6 May 2021)

Abstract

The cross-sectional (110) surface of $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}/\text{InP}$ hetero-structure grown by molecular beam epitaxy on an InP (001) substrate is characterized by the cross-sectional scanning tunneling microscopy (XSTM). The cleaved (110) surface across the interface between the $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ layer and InP layer is atomically flat but displays slight different image contrast between the two neighbor regions. The scanning tunneling spectroscopy (STS) is used to measure the current/voltage (I - V) spectra. The I - V data of the InGaAs surface and InP (110) surface show the different characteristics. The voltage range of zero-current plateau (apparent band gap) in the I - V spectrum of InP displays the values close to its energy band gaps whereas the plateau ranges in the spectra of $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ are by contrast generally 50% larger than the energy band gap of $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$. The above phenomenon implies the different physical pictures on the tunneling of two surfaces. In the case of InP, the flat band model is feasible since the band edge states existing in the InP (110) surface can prevent the surface from being affected by the tip-induced band bending (TIBB) effect. In contrast, the TIBB effect must be taken into account to explain the I - V spectra of the $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ (110) surface. A statistical analysis of the I - V data of $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ reveals that the width of current plateau in the I - V spectrum is generally between 1.05 eV and 1.20 eV and the current onset points (turn-points) with the plateau for the different spectra are slightly different from each other. We are able to explain quantitatively the above features based on the three-dimensional TIBB model given by Feenstra (2003 *J. Vac. Sci. Technol. B* **21** 2080). Our calculation reveals that the parameter of density of surface states (DOSS) is a sensitive parameter responsible for the I - V features mentioned above. According to an appropriate assignment of the value of DOSS, which is generally taken in the scope of $(0.8-3.0) \times 10^{12} (\text{cm}^2\text{-eV})^{-1}$, we well predict both the width and the onset points of the current-plateau. Moreover, the model also reproduces the line-shapes of the I - V spectra measured on $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$.

Keywords: semiconductor surface, scanning tunneling microscopy, scanning tunneling spectroscopy, tip-induced band bending

PACS: 68.37.Ef, 74.55.+v, 73.20.At, 68.47.Fg

DOI: 10.7498/aps.70.20210419

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 61474073, 61874069).

† Corresponding author. E-mail: fxzha@shu.edu.cn