

Si(111) 7×7 清洁表面的总电流谱

王向东 胡际璜 戴道宣

(复旦大学表面物理实验室)

1988 年 2 月 17 日收到

用自制的总电流谱仪对 Si(111) 7×7 清洁表面进行了测量, 得到 A, B, C, D 四个谱峰的能量位置分别在真空能级以上 2.6, 5.2, 8.6 和 12.9 eV. 样品饱和吸氢后表面峰 A 消失. 用带间跃迁模型对实验结果作了初步分析.

一、引 言

由于硅是目前应用最为广泛的半导体材料, 因此其表面物理特性的研究一直是表面科学中的重要课题, 其中尤以 Si(111) 7×7 再构的清洁表面最为引人注目^[1-4].

总电流谱 (total current spectroscopy, 简称 TCS) 是通过测量样品电流随低能入射电子能量的变化来研究表面电子态的新技术^[5-7]. Komolov^[8] 已对 Si(111) 清洁表面的 TCS 谱进行了研究, 但文献[8]中没有确认 Si 表面为 7×7 再构. 本文用自制的总电流谱仪对清洁的 Si(111) 7×7 再构表面进行了研究, 并用带间跃迁模型对结果进行了分析.

二、实 验 结 果

TCS 实验装置如图 1 所示. 有关实验细节可参阅文献 [9,10]. 实验在 3×10^{-7} Pa 的超高真空中进行.

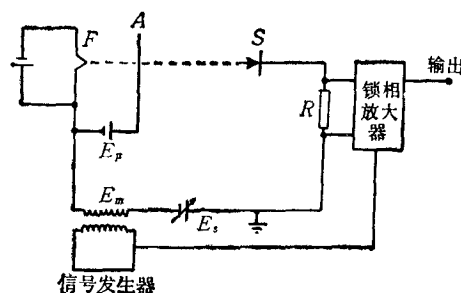
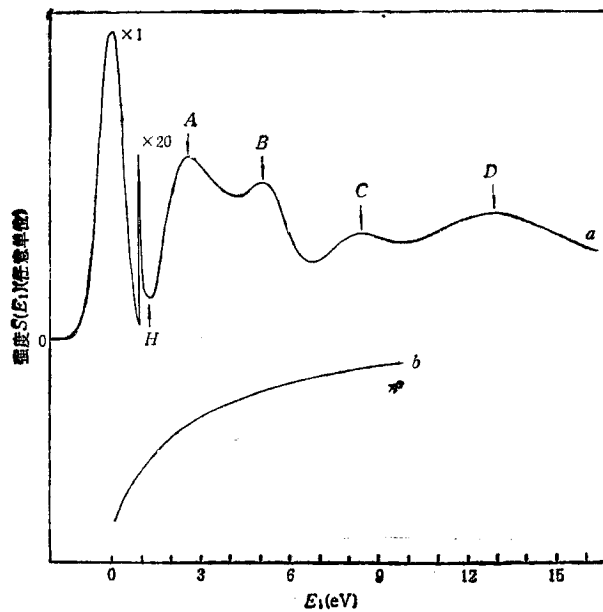


图 1 实验装置示意图

F 为灯丝; A 为阳极; E_p 为加速电压; S 为样品; E_s 为扫描电压;
 E_m 为调制电压; R 为取样电阻



图2 Si(111)7×7 表面的 LEED 图样

图3 Si表面的 TCS 谱 *a* 为 Si(111)7×7 清洁表面的 TCS 谱 *b* 为本底曲线变化趋势

样品为电阻率 $10\Omega \cdot \text{cm}$ 的 P 型 Si(111) 单面抛光片, 经标准工艺清洗后置于超高真空室内。用电子束背面轰击法将样品加热至 850°C , 持续 10min 后自然冷却。重复处理数次后, 观察到清晰的 7×7 再构的 LEED 图样, 如图 2 所示, 并测得稳定重复的 TCS 谱线如图 3 曲线 *a* 所示。图 3 曲线 *b* 所示为理论计算的本底曲线变化趋势。图 3 中电子能量 E_i 以真空能级为参考点。谱线 3 曲线 *a* 在 $E_i = 2.6, 5.2, 8.6$ 及 12.9eV 附近出现 *A, B, C, D* 四个峰, 而在 $E_i = 1.2\text{eV}$ 附近出现谷 *H*。

吸附氢的实验方法同文献[2]。并以吸氢过程中功函数不再变化作为饱和吸氢的依据。吸氢后样品功函数变小, 测得 TCS 谱与图 3 曲线 *a* 相比, *A* 峰消失, *H* 谷变深, 其余均无明显变化。

三、讨 论

根据 Komolov^[6] 的近似理论,认为入射电子进入表面后的散射过程可分为弹性散射和非弹性散射,设其自由程分别为 L_1 和 L_2 , 则可得 TCS 信号

$$S(E_1) = \frac{G(E_1)}{2} L_1 (1 + L_1/L_2)^{-2} \frac{d}{dE_1} \left(\frac{1}{L_2} \right) - \frac{1}{2} (1 + L_1/L_2)^{-1} \frac{dG(E_1)}{dE_1}, \quad (1)$$

式中

$$G(E_1) = 1 - \ln 2 - \sqrt{\frac{\phi}{\phi + E_1}} + \ln \left(\sqrt{\frac{\phi}{\phi + E_1}} + 1 \right) \quad (2)$$

为阈值函数, ϕ 为样品的功函数。(1)式中 L_1 随能量的变化缓慢, L_2 的变化主要由带间跃迁及表面态至导带的跃迁所致,它是谱线精细结构的主要原因。

如假设谱线没有精细结构,即

$$\frac{d}{dE_1} \left(\frac{1}{L_2} \right) = 0,$$

可得

$$S(E_1) \propto -dG(E_1)/dE_1 = -\frac{1}{2\phi} \cdot \left(\frac{\phi}{\phi + E_1} \right)^2 \left(1 + \sqrt{\frac{\phi}{\phi + E_1}} \right)^{-1}. \quad (3)$$

这是一个随 E_1 单调变化的函数,如图 3 曲线 b 所示。 $E_1 = 0$ 时(3)式有极小值

$$S_{\min}(E_1)|_{E_1=0} \propto -1/4\phi. \quad (4)$$

其绝对值随功函数 ϕ 的减小而增大。 $E_1 \rightarrow \infty$ 时, $S(E_1) \rightarrow 0$ 。由于本底是一个逐渐趋近于零的单调函数,故对谱峰位置没有明显的影响。实际测量时,入射电流在 $E_1 = 0$ 附近存在宽约 1.5eV 的上升区^[9],加上(3)式的影响,使谱线在 $E_1 = 1.2\text{eV}$ 附近出现谷 H。吸氢后,此谷变深,与实测功函数的变小相一致。

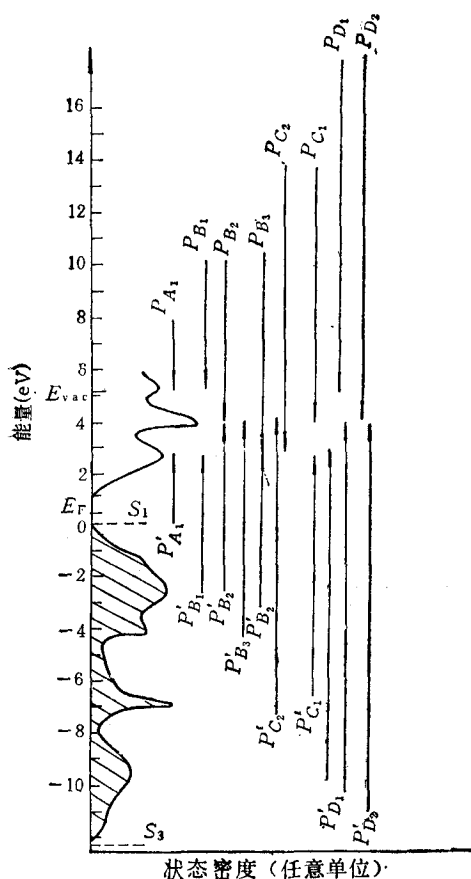


图 4 跃迁关系示意图

下面根据 Kane^[11] 理论计算的态密度分布,参照 Ibach^[12] 的 ELS 的实验结果来分析 Si(111) 7×7 清洁表面的 TCS 谱。TCS 谱峰的物理意义在于入射电子损失能量后落入真空能级以下 E_2 处的导带空态密度极大值、同时激发电子从价带密度极大或表面态跃迁至导带中真空能级以下的空态密度极大处,设跃迁能量为 ΔE 。由于跃迁必须遵守能量守恒定则,即

表 1 TCS 和 ELS 结果的对比关系(能量单位: eV)

TCS 结 果						ELS 结果 ^[12]					
峰	E_1	损失能量 ($E_1 - E_2$)		跃迁能量 ΔE		S_1	E_1	损失能量 E_2	S_2	$\hbar\omega_i$	S_3
A	2.6	P_{A1}	2.6	P'_{A1}	2.6	2.4 ± 0.4					
B	5.2	P_{B1}	5.2	P'_{B1}	5.2	5.0					
		P_{B2}	6.5	P'_{B2}	6.5, 6.6						
		P_{B3}	7.8	P'_{B3}	8.0						
C	8.6	P_{C1}	9.9	P'_{C1}	9.6	11.0					
		P_{C2}	11.2	P'_{C2}	10.9						
D	12.9	P_{D1}	12.9	P'_{D1}	13.6, 12.3	14.5 ± 0.4					
		P_{D2}	14.2	P'_{D2}	14.8						
						3.5				7.4 ± 0.4	

$$E_1 - E_2 = \Delta E, \quad (5)$$

但不必遵守动量守恒定则^[7],因此 TCS 谱上同一峰值可以涉及多个不同初态至相应末态的跃迁。

图 4 所示为根据 Kane^[11] 计算的 Si 体能带的态密度分布及根据(5)式所推测的跃迁关系。与图 3 曲线 α 中 A, B, C 和 D 诸峰相应入射电子的跃迁以矢量 $P_{A1} \approx P_{D1}$ 表示,下标上的数字用以区别不同的内部跃迁过程(前已指出,同一谱峰可以涉及多个跃迁过程),对应的激发跃迁以 $P'_{A1} \approx P'_{D1}$ 表示。矢量的始末端分别表示跃迁的初态和末态位置,长度对应跃迁能量。图 4 中费密能级 E_F 和真空能级 E_v^* 得自 Ranke 等人^[13] 的实验结果,即 $E_{vac} - E_v = 5.33\text{eV}$, $E_F - E_v = 0.46\text{eV}$ (E_v 为价带顶位置)。图中 S_1, S_3 为 Ibach^[12] 由 ELS 结果所得的表面态位置。

上述结果和 Ibach^[12] 对 Si(111)7×7 表面的 ELS 结果的比较列于表 1 中。表 1 中 S_1, S_2, S_3 为表面态至导带底的跃迁, E_1, E_2 为体内的带间跃迁。表 1 中同一行上的数据对应于可能的相同跃迁过程。即 A 峰为表面态 S_1 至导带的跃迁所致 (P_{A1} 与 Ibach^[12] 的 S_1 相符)。饱和吸氢后, A 峰消失也证实了这一点。B, C, D 峰吸氢前后的变化不甚明显,由此作者认为, B 峰为带间跃迁所致,而 C 峰和 D 峰也以带间跃迁的可能性为大。关于 B 峰。当 $E_1 = 5.2\text{eV}$ 的入射电子落入真空能级以下 $E_2 \approx 0$ 附近的导带空态密度极大处(如图 4 中 P_{B1} 所示),而激发了价带以下 2.6eV 处的态密度极大至价带以上 2.6eV 处的导带空态密度极大的跃迁(如图 4 中 P'_{B1} 所示),其能量 $\Delta E = 5.2\text{eV}$,基本上与(5)式相符。其余跃迁过程类推,不再一一说明。此外,关于 C 峰和 D 峰,也不能排除 C 峰为 $E_1 = 8.6\text{eV}$ 处的入射电子落入真空能级以下 $E_2 = -2.6\text{eV}$ 处的空态密度极大而激发表面等离子体振荡^[12] ($\Delta E = \hbar\omega = 11\text{eV}$,见表 1), D 峰为表面态 S_3 至导带的跃迁所致可能性。

四、结 语

利用带间跃迁模型对 TCS 在 Si(111) 7×7 表面测得四个峰的产生机制作了初步的解释。结果表明, A 峰为表面态所致, 而 B, C, D 峰则为体内的带间跃迁所致。G(E_1) 的作用使谱线产生一个单调缓变的本底, 但不影响谱峰的位置。本文的结果说明 TCS 可作为一种研究表面电子空态和占有态的新的实验方法, 其潜力的进一步发挥还有待于理论和实验工作者的共同努力。

- [1] K. Takayanagi, Y. Tanishiro, M. Takahashi, S. Takahashi, *J. Vac. Sci. Technol.*, **A3**(1985), 1502.
- [2] 胡际璜、刘国辉、王迅, 物理学报, **35**(1986), 1192.
- [3] G. Binnig, H. Rohrer, C. Gerber and E. Weibel, *Phys. Rev. Lett.*, **50**(1983), 120.
- [4] B. N. J. Persson and J. E. Demuth, *Phys. Rev.*, **B30**(1984), 5968.
- [5] V. E. Henrich, *Rev. Sci. Instr.*, **44**(1973), 456.
- [6] S. A. Komolov, *Soviet Phys. Tech. Phys.*, **49**(1979), 1318.
- [7] P. J. Møller and M. H. Mahamad, *Vacuum*, **35**(1985), 29.
- [8] S. A. Komolov, *Sov. Phys. Tech. Phys.*, **26**(1981), 1108.
- [9] 王向东、周红、胡际璜、戴道宣, 真空科学与技术, 待发表.
- [10] 戴道宣等, 物理, **11**(1982), 603.
- [11] E. O. Kane, *Phys. Rev.*, **146**(1966), 558.
- [12] J. E. Rowe and H. Ibach, *Phys. Rev. Lett.*, **31**(1973), 102.
- [13] W. Ranke and Y. R. Xing, *Phys. Rev.*, **B31**(1985), 2246.

TOTAL CURRENT SPECTROSCOPY STUDY ON CLEAN Si(111) 7×7 SURFACE

WANG XIANG-DONG HU JI-HUANG DAI DAO-XUAN

(Laboratory of Surface Physics, Fudan University, Shanghai)

ABSTRACT

A total current spectroscopy measurement has been performed on Si(111) 7×7 surface. Four peaks at 2.6, 5.2, 8.6, and 12.9 eV above vacuum level have been observed on clean surface, assigned as A, B, C, D respectively. Among them, the peak A contributed by the surface state is identified by hydrogen adsorption experiment. A preliminary explanation of the experimental result has been made.