

利用 STM 观察 Si(100) 微斜面的表面结构

张兆祥

井藤浩志 市ノ川竹男

(北京大学无线电系 北京 100871)

(日本早稻田大学)

摘要 本文利用超高真空 STM 和 LEED 装置观察了错切角为 0.5° 和 4.5° 的 Si(100) 微斜面的原子结构。观察到错切角为 0.5° 时 STM 像为单原子高度台阶表面结构, 错切角为 4.5° 时 STM 像为双原子高度台阶结构。

PACC: 6820

1 引言

在 Si(100) 面的研究中许多作者观察到 2×1 和 1×2 结构的两个畴区的交替存在, 而且认为它们是由于单原子高度台阶的存在所造成的。由于表面上两个畴区交替的存在, 在以 Si(100) 面为基底进行 III-V 族半导体外延生长时会增加表面无序生长。另一些研究工作指出, 当 Si(100) 相邻表面由双原子高度台阶形成时, 可以得到单一 1×2 结构, 而这种单一 1×2 结构对于减少无序生长问题是很重要的, 因此研究 Si(100) 面的单和双原子高度台阶的表面结构是有实际意义的。

自从扫描隧道显微镜 (STM) 发明以来, 由于它具有原子级分辨, 因此引起人们极大的兴趣, 纷纷开展各种研究工作, 并获得了许多有意义的研究结果。Tromp 等人首先观察了 Si(100) 面单原子台阶高度的 STM 像^[1], 认为 STM 像的原子列就是由 Si 原子的聚合物列所组成, 这些聚合物是表面上两个 Si 原子的悬键互相连接而形成的, Si(100) 面是由单原子高度台阶结构分开, 交替出现 2×1 和 1×2 两种畴区, 一些文章对此进行了分析^[2-4]。Wierenga 等人使用 STM 首先观察到 Si(100) 面的双原子高度台阶的 STM 像^[5], 之后一些作者也用 STM 研究了 Si(100) 面的双原子高度台阶^[6-8]。Alerhand 等人研究了从单原子高度台阶到双原子高度台阶的相变, 指出相变依赖于 Si(100) 面沿 $[110]$ 方向的错切角和样品热处理温度^[9]。

一些作者利用不同实验方法对 Si(100) 面双原子高度台阶进行了研究。Nakayama 等人利用透射电子衍射观察了错切角 $2-5^\circ$ 的 Si(100) 面样品^[9], 观察了双原子高度台阶形成的 Si(100) 1×2 结构, 仅在 $(n/2, m)$ 位置出现衍射束斑, 且衍射束斑依位置不同分开为两个或三个。Kaplan 利用低能电子衍射 (LEED) 研究了 Si(100) 面错切角 6° 、 8° 、 10° 的双原子高度台阶的衍射图样^[10]。Sakamoto 等人利用反射高能电子衍射

(RHEED) 观察了 Si(100) 面从单原子高度台阶到双原子高度台阶的相变^[11], 指出相变依赖于样品退火温度。我们利用 STM 和 LEED 观察了 Si(100) 面错切角约为 0.5° 和 4.5° 时单原子高度台阶和双原子高度台阶的表面原子结构和 LEED 图样, 并对得到的 STM 像进行了分析。

2 实验装置

日本早稻田大学的超高真空抽气系统是由带液氮冷阱的油扩散泵和钛升华泵、机械泵组成。扩散泵油使用饱和蒸汽压可达 10^{-11} Pa 人造卫星上用的油, 当只使用扩散泵和液氮冷阱抽气时, 整个系统压强可达 $(7-8) \times 10^{-9}$ Pa, 如果钛升华泵加液氮冷却, 钛升华后, 压强可达 $(3-4) \times 10^{-9}$ Pa。

超高真空室中安装了德国 OMICRON 公司生产的 STM 部件和美国 ϕ 公司生产的 LEED-AES 部件, 因此在进行 STM 像观察前可根据需要做 LEED 和 AES 分析。系统装有真空锁, 可进行真空换样和更换 STM 用针尖。主室顶部装有能五维调节的样品架, 能进行样品加热。STM 部分有一长波纹管做的移动杆, 可方便地把样品和针尖从样品架移到 STM 部件上。根据需要可安装 Ar^+ 离子枪和筒镜式俄歇分析器, 主室中还装有蒸发源, 可向样品蒸积金属薄膜。整个系统暴露大气后, 经过 180°C 24 小时烘烤后, 扩散泵冷阱灌液氮, 很快就能达到 10^{-8} Pa, 2—3 天后系统进入 10^{-9} Pa。整个真空系统为了减少外界振动的影响安装在气垫上。

3 Si(100) 面的 LEED 像

实验中使用 P 型 Si(100) 半导体, 电阻率为 $10-15 \Omega \cdot \text{cm}$, $7 \times 5 \times 0.5 \text{ mm}^3$ 大小, 从(100)面沿 [011] 方向错切角为 0.5° 和 4.5° 两种类型的晶片。样品放入真空室前用丙酮、无水乙醇进行超声波清洗。样品在超高真空室中用电子轰击从背面进行除气, 加热到 1100°C , 用红外线高温计测量样品温度。用俄歇电子检测样品表面杂质原子, 其杂质原子与 Si 原子的俄歇电子信号比在初电子能量 3 keV 和 $10 \mu\text{A}$ 条件下小于 0.1% 仪器探测下限。

图 1 是错切角 0.5° 的 Si(100) 面在 72 eV 下的 LEED 像(见图版 I)。由于 Si(100) 面上有 2 个畴区, 因此 LEED 像为 2×1 和 1×2 两个畴区 LEED 像的叠加。

对于错切角 4.5° 的 Si(100) 面的 LEED 像类似于文献[10]给出的 LEED 图样, 其衍射束斑分开为两个或 3 个, 分开距离依赖于台阶宽度。

4 Si(100) 面的 STM 像

4.1 错切角 0.5° Si(100) 面的 STM 像

通过 LEED 观察已证明 Si(100) 面为清洁表面后, 把样品移到 STM 部件上进行 STM 像的观测。STM 装置使用的针尖是 $\phi 0.2 \text{ mm}$ 钨丝经化学腐蚀制成的。图 2 为错切

角 0.5° 的 Si(100) 面 $40 \times 50 \text{ nm}^2$ 区域的 STM 像(见图版 I)。一般讲图中白色区域对应表面突起,即表面原子所处位置,而黑色区域对应表面凹陷。图 2 中 STM 像是样品对针尖为负偏压,因此两个原子组成的聚合物不能被分辨,所以图中一个白点由 2 个原子组成。图中清楚地看到 2×1 结构的互相平行的聚合物列,图上有三个平台,即三个畴区。每个畴区的聚合物列有同一方向,畴区之间靠彼此互相垂直的聚合物列所分开。畴区之间的高度差为单原子高度台阶,即 0.136 nm 。图中可看出台阶边缘有两种类型,一种是呈直线型边缘,另一种是呈锯齿型边缘,直线型边缘和锯齿型边缘彼此交替出现。直线型台阶棱的行进方向与上面平台的聚合物列平行,而锯齿型台阶棱的行进方向垂直于上面平台的聚合物列。

Chadi 对这两种类型台阶提出了台阶棱附近原子结构的简化模型^[2],并计算了台阶的形成能。图 3 为 Chadi 模型的顶视图, S_A 代表与上面平台的聚合物列方向平行的台阶棱, S_B 代表与上面平台的聚合物列方向垂直的台阶棱。空心环代表最外层原子,实心黑点依大小分别代表第 2—4 层原子,虚线为台阶棱。依 Chadi 的计算, S_A 台阶单位长度的形成能 $\lambda(S_A) = (0.01 \pm 0.01 \text{ eV})/a$, S_B 台阶单位长度的形成能 $\lambda(S_B) = (0.15 \pm 0.03 \text{ eV})/a$, 其中 $a = 0.384 \text{ nm}$, 为未重构 1×1 表面的晶格常数。由上述数据可见, S_A 台阶的形成能远小于 S_B 台阶的形成能,因此 Si(100)面在高温退火之后 S_A 台阶趋向于

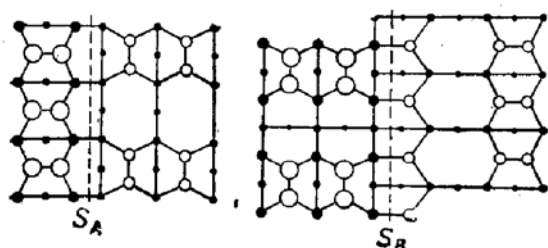


图 3 S_A, S_B 台阶的顶视图

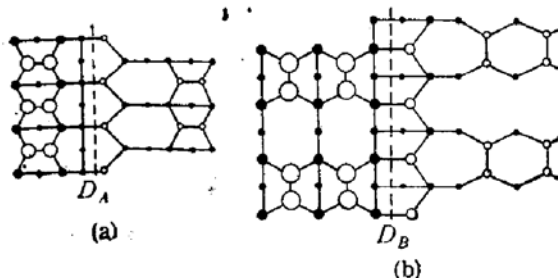


图 5 双原子高度台阶 D_A, D_B 的顶视图

成为直线, S_B 台阶成为有较多锯齿的弯曲折线。

图 2 为 Si(100) 面的原子结构形貌图,仔细观察图上同一平台上的聚合物,可以看到基本上分为两种类型。一种是呈长方形的聚合物,这是表面上两个原子位置处于同一高度;另一种是呈锯齿形状弯曲的聚合物,是表面上两个原子位置处于不同高度。在 S_A 台阶棱附近上边平台最靠近棱处除少数缺陷外,几乎都是弯曲形状的聚合物。长方形聚合物的表面结构为 2×1 结构,弯曲形状聚合物的表面结构,当相邻聚合物间为相同位相时是 $P(2 \times 2)$ 结构,当相邻聚合物间为反位相时是 $C(4 \times 2)$ 结构。

4.2 错切角 4.5° Si(100) 面的 STM 像

图 4 为错切角 4.5° Si(100) 面 $25 \times 35 \text{ nm}^2$ 区域的 STM 像(见图版 I),图中可见表面由具有间距约 3 nm 的双原子高度台阶组成,其聚合方向平行于台阶行进方向,聚合物列垂直于台阶,表面结构接近于单畴,为 1×2 结构。对于双原子高度台阶 Chadi 计算了两种类型结构模型,如图 5(a)(b) 所示。 D_A 代表聚合物列方向平行于台阶棱, D_B 代表聚合物列方向垂直于台阶棱。根据 Chadi 计算结果,这两种模型单位长度的形成能为 $\lambda(D_A) = (0.54 \pm 0.10 \text{ eV})/a$, $\lambda(D_B) = (0.05 \pm 0.02 \text{ eV})/a$, 其中 $a = 0.384 \text{ nm}$ 。从这个结果可知, D_B 类型双原子高度台阶的形成能远小于 D_A 类型双原子高度台阶的形成

能,因此在高温退火后易于形成 D_2 类型台阶。

双原子高度台阶棱附近的原子结构也类似于单原子高度台阶棱附近的原子结构,在棱附近上边最靠近棱的聚合物几乎都是弯曲的聚合物,其聚合物列与台阶平行,与上边平台和下边平台各差一个原子高度。图 4 中局部小区域可观察到 $P(2 \times 2)$ 和 $C(4 \times 2)$ 结构,还可看到靠近台阶棱附近存在有长方形缺陷,局部小区域可观察到 1×2 和 2×1 结构交替出现。

5 结束语

使用超高真空 STM 观察了两种不同错切角的 Si(100) 面样品,错切角为 0.5° 时表面原子结构为单原子高度台阶,而错切角为 4.5° 时表面原子结构为双原子高度台阶。由于两种样品均在 1100°C 以上高温退火后进行观察,因此这种表面结构是在高温处理时通过表面各向异性扩散形成的。如果能在低温退火后观察清洁表面的 STM 像的话,其表面结构将可能有很大的差别。

参 考 文 献

- [1] R.M. Tromp, R.J. Hamers and J.E. Demuth, Phys. Rev. Lett., 1985, **55**: 1303.
- [2] K. Miki, H. Tokumoto, T. Sakamoto and K. Kajimura, Japan. J. Appl. Phys., 1989, **28**: L1483.
- [3] J.Y. Tsao, E. Chason, U. Koeler and R. Hamers, Phys. Rev., 1989, **B40**: 11951.
- [4] 张兆祥,井藤浩志,云南大学学报,1992,14: 102(增刊).
- [5] P.E. Wierenga, J.A. Kubby and J.E. Griffith, Phys. Rev. Lett., 1987, **59**: 2169.
- [6] O.L. Alerhand, A.N. Berker, J.D. Joannopoulos, D. Vanderbilt, R.J. Hamers and J.E. Demuth, Phys. Rev. Lett., 1990, **64**: 2406.
- [7] C.E. Aumann, D.E. Savage, R. Kariotis and M.G. Lagally, J. Vac. Sci. Technol., 1988, **A6**: 1963.
- [8] H. Itoh, S. Narui, Z.X. Zhang and T. Ichinokawa, Surf. Sci., 1992, **277**: L70.
- [9] T. Nakamura, Y. Tanishiro and K. Takayanagi, Japan. J. Appl. Phys., 1987, **26**: L280.
- [10] R. Kaplan, Surf. Sci., 1980, **93**: 145.
- [11] T. Sakamoto and G. Hashiguchi, Japan. J. Appl. Phys., 1986, **75**: L78.
- [12] D.J. Chadi, Phys. Rev. Lett., 1987, **59**: 1691.

Observation of Surface Structure on Vicinal Surface of Si(100) by STM

Zhang Zhaoxiang

(Dept. of Radioelectronics, Peking University, Beijing 100871)

H. Itoh and T. Ichinokawa

(Waseda University, Japan)

Abstract The surface atomic structures are observed on Si(100) vicinal surface for miscut angles of 0.5° and 4.5° by UHV-STM and LEED. The STM image is shown the surface structure of the single atomic height step for miscut angle of 0.5° , and the surface structure of the double atomic height step for miscut angle of 4.5° .

PACC: 6820