

# K 对 H<sub>2</sub>O 在 Si(001) 表面上吸附的影响\*

李海洋 范朝阳 徐亚伯

(浙江大学物理系 杭州 310027)

**摘要** 在 Si(001)-2 × 1 表面上沉积碱金属 K, 接着在室温下吸附一定量的 H<sub>2</sub>O, 光电子谱证明: K 的存在有促进 H<sub>2</sub>O 分解和使 Si 氧化的作用. 但其作用是局域在 K 原子附近的.

**PACC:** 7960, 7320, 6265

## 1 引言

水蒸汽法是 Si 表面氧化生成 SiO<sub>2</sub> 膜的重要方法之一. 因此近年来对 Si 表面吸附 H<sub>2</sub>O 进行了广泛的研究<sup>[1-3]</sup>. 室温下 H<sub>2</sub>O 在 Si(001) 表面上有较大的吸附系数, 主要以未分解状态吸附. 当表面加热时才形成 H<sub>2</sub>O 的分解吸附. 形成 SiO<sub>2</sub> 一般要求较高的温度. 众所周知, 碱金属是表面催化的促进剂, 近年来对碱金属在过渡金属表面上的助催作用进行了大量的研究<sup>[4]</sup>. 同样碱金属在半导体表面上也有助催作用. 如 K 在 Si(001) 表面上有助氧化作用<sup>[5]</sup>. 本文报道了采用 UPS 研究了 K 对 H<sub>2</sub>O 在 Si(001) 表面上的吸附, 分解及其氧化物形成的影响.

## 2 实验

样品是掺 B 的 P-型 Si(001) 表面, 经磨抛和化学清洗后, 在超高真空中 ( $P = 1 \times 10^{-8}$  Pa), 经多次氩离子刻蚀加退火的处理 (1000°C × 5 分钟) 观察到清晰的 2 × 1 LEED 图样, AES 测不到 C、O 等污染信号. 然后, 利用真空加热方法在清洁有序的 Si(001) 表面上蒸镀一定量的 K. 其覆盖度是通过测量功函数的变化来测定的. 然后用漏阀导入一定量的水蒸汽, H<sub>2</sub>O 的暴漏量是以 Languimer (1L = 1.33 × 10<sup>-4</sup> Pa · s) 为单位. 实验是在英国 VG 公司生产的 ADES-400 型能谱仪上进行的. 用非偏振的 HeI 紫外光来激发光电子, 用角分辨的半球型电子能量分析器来获得 H<sub>2</sub>O 吸附在 K/Si(001) 表面上的紫外光电子谱.

## 3 结果与讨论

吸附 K 和 H<sub>2</sub>O 后测得 AES 谱如图 1 所示, 只有 O、K 和 Si 的 AES 信号. 表面

\* 浙江省科学基金资助项目

1993年3月22日收到初稿, 1993年5月11日收到修改稿

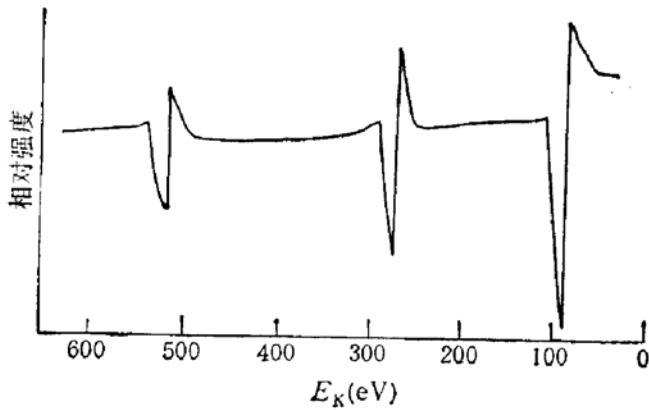


图1  $\text{H}_2\text{O} + \text{K}/\text{Si}(001)$  的 AES 谱  
 $\theta_{\text{K}} = 0.5$   $\text{H}_2\text{O}$  饱和吸附

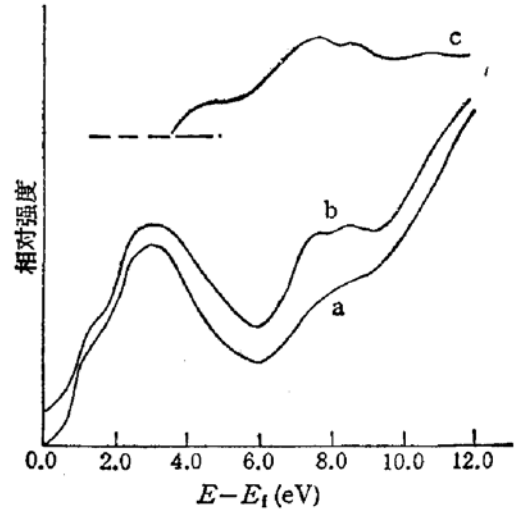


图2  $\text{H}_2\text{O} + \text{K}/\text{Si}(001)$  的 UPS 谱  $\text{HeI}\theta_{\text{K}} = 0.1$   
 a)  $(0\text{LH}_2\text{O})$  b)  $(2\text{LH}_2\text{O})$  c)  $(2\text{L H}_2\text{O}-0\text{LH}_2\text{O})$

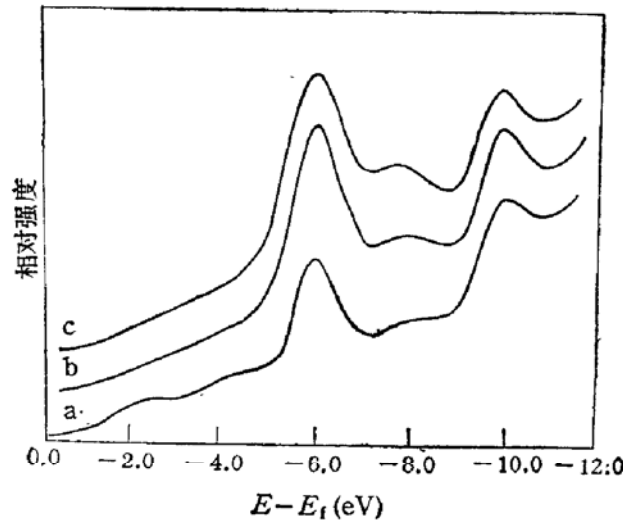


图3  $\text{H}_2\text{O} + \text{K}/\text{Si}(001)$  的 UPS 谱  $\text{HeI}\theta_{\text{K}} = 0.5$   
 a)  $0.2\text{L}$  b)  $0.5\text{L}$  c)  $1.5\text{L}$

上没有污染。

在K的覆盖度  $\theta_{\text{K}} = 0.1$  时,暴露 2L 的  $\text{H}_2\text{O}$  后测得紫外光电子谱的差谱如图 2c 所示,从中可以看出四个光电子峰,其能量分别处在费米能级  $E_{\text{f}}$  以下 4.3, 7.3, 8.3 和 11.2eV 处。费米能级  $E_{\text{f}}$  以下 4.3eV 处的光电子峰是吸附在K原子近邻的  $\text{H}_2\text{O}$  与K相互作用形成  $\text{KO}_x$ 。  $\text{H}_2\text{O} + \text{K}/\text{Si}(001)$  面上此峰的解释类似于  $\text{O}_2$  吸附在  $\text{K}/\text{Si}(001)$  的情况<sup>[5]</sup>。图 2 中后三个峰与  $\text{H}_2\text{O}$  吸附在清洁的  $\text{Si}(001)$  表面上,在 300K 时的紫外光电子谱上的峰位很相近。在室温下  $\text{H}_2\text{O}$  在  $\text{Si}(001)$  面上还未分解<sup>[6]</sup>,这是由于除了靠近K原子的  $\text{H}_2\text{O}$  外,其他吸附位上的  $\text{H}_2\text{O}$  受到K的影响很小(此时K的覆盖度很小)。具有和清洁  $\text{Si}(001)$  面上类似的未分解吸附状态。故光电子谱和无K时相近。这说明K对吸附在  $\text{Si}(001)$  表面上的  $\text{H}_2\text{O}$  的作用是局域的。

当K的覆盖度  $\theta_{\text{K}} = 0.5$  时,  $\text{H}_2\text{O} + \text{K}/\text{Si}(001)$  室温下紫外光电子谱如图 3 所示,

与未分解的 H<sub>2</sub>O 有关的三个光电子峰消失。因为  $\theta_K$  较大没有离 K 原子较远的吸附位可吸附未分解的 H<sub>2</sub>O, 此时的光电子谱在  $E_f$  以下 6.1, 8.1 和 10.2eV 处出现三个光电子峰, 这三个光电子峰与参考文献 [1] 报道的 H<sub>2</sub>O 吸附在清洁的 Si(001) 表面上经 600K 退火后的光电子谱上的峰位类似。H<sub>2</sub>O 吸附在清洁的 Si(001) 表面上, 当加热到 500K 以上时吸附在 Si(001) 表面的 H<sub>2</sub>O 变为分解吸附。有 K 存在的 Si(001) 表面在室温下吸附 H<sub>2</sub>O 的紫外光电子谱与 H<sub>2</sub>O 吸附在清洁的 Si(001) 表面上经 600K 退火后的紫外光电子谱相似。说明在室温下 H<sub>2</sub>O 是以分解状态吸附在有 K 的 Si(001) 表面。

综上所述, K 的存在对吸附在 Si(001)-2 × 1 表面上的 H<sub>2</sub>O 有促进分解的作用, 这是由于 K 吸附在 Si(100) 表面使功函数变小增加对反键态的填充, 类似于 CO 吸附在有 K 的过渡金属表面的情况<sup>[4]</sup>, 碱金属的吸附增加了反键态的填充, 从而促进了 H<sub>2</sub>O 在 Si(001) 表面上的分解。其分解作用是局域的。

**致谢** 感谢浙江大学测试中心鲍德松同志在实验中的帮助和支持。

### 参 考 文 献

- [1] D. Schmeisser *et al.*, Phys. Rev., 1983, B27:7813.
- [2] Kenzo Fujiwara, Surf. Sci., 1981, 108:124.
- [3] 邢益荣, W. Ranke, 半导体学报, 1985, 6: 511.
- [4] S. Bao, *et al.*, Surf. Sci., 1992, 271:513 J. J. Weimer and E. Umbach, Phys. Rev., 1984, B30: 4863.
- [5] S. Kennov and T. A. Ngvyen, Surf. Sci., 1991, 251:1029.

## Effect of K on H<sub>2</sub>O Adsorption on K/Si(001) Surface

Li Haiyang, Fan Chaoyang and Xu Yabo

(Department of Physics, Zhejiang University, Hangzhou 310027)

**Abstract** In water adsorption on K/Si(001) surface at room temperature, four peaks are observed at 4.3, 7.3, 8.3 and 11.2 eV below  $E_f$ , when  $\theta_K = 0.1$ . The later three peaks are similar to the result of water adsorption on clean Si(001) surface. the peak at 4.3 eV is explained in terms of formation of KO<sub>x</sub> from K and the water in the vicinity of potassium. Since most water molecules seem still to be intact, the effect of potassium is shown to be localized. When  $\theta_K = 0.5$ , three peaks at 6.1, 8.1 and 10.2eV below  $E_f$  are measured from water adsorption on K/Si(001) surface at room temperature. This UP spectrum is close to that of H<sub>2</sub>O/Si(001) after annealing at 500K[1]. The result shows that pre-deposited potassium promotes the water dissociation on Si(001) surface.

**PACC:** 7960, 7320, 6265.