

# 半导体硅重构表面及其相变动力学的研究进展\*

徐野川 刘邦贵<sup>†</sup>

(中国科学院物理研究所 北京 100190)

**摘要** 简单介绍了文章作者在半导体硅重构表面及其相变动力学研究方面的进展. 近期 Si(111)(7×7)(1×1)相变的实验研究发现, 将温度升高到相变温度以上时, 7×7 岛面积以恒定的衰减速率随时间减小至零, 且初始面积越大的岛这个衰减速率就越大. 文章作者分析了大量的实验事实, 由此提出了一个双速相场模型来解释这个重要而令人困惑的现象. 模型重点是: 在相变过程中, 7×7 关键结构变化较快, 随后的层错消解过程要慢得多. 这个模型完美地解释了相关实验现象, 说明该模型抓住了关键物理要素. 这种相场方法也可以用于其他半导体表面相变研究.

**关键词** 半导体 表面重构 相变 硅

## Silicon reconstructed surfaces and phase transitions

XU Ye-Chuan LIU Bang-Gui<sup>†</sup>

(Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China)

**Abstract** We present a brief report about our research on silicon reconstructed surfaces and phase transitions. Recent experiments on the Si(111)(7×7)(1×1) phase transition showed that when the temperature is raised above the critical temperature, a 7×7 island decays to zero at a constant area decay rate which increases with the size of the initial area. Based on an analysis of the experimental results we propose a two-speed phase-field model to explain this important but puzzling phenomenon. The key point of our model is that the essential 7×7 structures change fast during the phase transition while erasure of the stacking faults takes substantially more time. Our model satisfactorily explains the experimental phenomena, which shows that the model captures the main physics and that this phase-field method is a good approach for studying semiconductor surface phase transitions.

**Keywords** semiconductor, surface reconstruction, phase transition, silicon

半导体硅是现代计算机技术的核心, 是半导体最重要的代表, 因而被长期、广泛地研究. 技术手段的发展使半导体表面在原子水平上的物理和化学特性得以清楚地表征, 这也使人们认识了多种多样的半导体重构表面<sup>[1]</sup>. 把一个半导体按一个平面切开, 然后保持原子相对位置不变, 所得的表面应该具有原晶体内相同平面的周期平移不变性, 即 1×1 理想表面, 但是, 大多数情况下最靠近表面的几层原子会经历弛豫甚至重组, 结果表面周期往往不再是 1×1, 而经常是  $m \times n$  结构 ( $m$  和  $n$  可以是正整数, 或其平方根), 这就是表面重构, 相应的表面称为  $m \times n$  重构表面. 硅表面与其他半导体表面一样也有多种重构形式, 其中 Si(111) 表面上的 7×7 重构表面最富盛名, 也最有代表性. Si(111)-7×7 重构表面是 Schlier 和 Farnsworth 于 1959 年根据低能电子衍射

(low energy electron diffraction, LEED) 实验发现的<sup>[2]</sup>, 它包括的原子众多, 结构非常复杂. 直到 25 年以后 Takayanagi<sup>[3]</sup> 等人才通过系统的透射电子衍射 (transmission electron diffraction, TED) 实验提出了描述其原子结构的著名 Dimer - Adatom - Stacking fault (DAS) 模型. 该模型经受住了实验的严格检验, 获得了广泛的承认, 其结构要点为: 一个 7×7 单元包含了 49 (即 7 乘 7) 个 1×1 单元, 可分为两个等边三角形亚单元, 一个亚单元有原子层错, 另一个没有; 每个亚单元顶点有一个原子空位, 每两个顶点空位之

\* 国家自然科学基金(批准号: 10774180, 60621091)、国家重点基础研究发展计划(批准号: 2005CB623602)、中国科学院知识创新工程(批准号: KJ CX2. YW. W09-5)资助项目

2008-03-17 收到

<sup>†</sup> 通讯联系人. Email: bglu@mail.iphy.ac.cn

间有 3 对二聚原子,每个亚单元最上层有 6 个吸附原子。

表面温度的变化会使表面结构发生相变,最著名的表面相变是 Si(111)- $7\times 7$  重构表面在温度  $T_c = 1125\text{K}$  时转变到高温“ $1\times 1$ ”表面相的相变<sup>[4-6]</sup>。 $7\times 7$  表面相有如此复杂的结构,这就决定了其向“ $1\times 1$ ”相转变的物理内容将是丰富而复杂的。扫描隧道显微镜(scanning tunneling microscopy, STM)实验<sup>[4]</sup>指出,有层错的三角亚单元的快速形成是 Si(111)-( $7\times 7$ )-( $1\times 1$ )相变的关键过程。反射高能电子衍射(reflection high energy electron diffraction, RHEED)实验显示“ $1\times 1$ ”相其实是由硅  $1\times 1$  理想表面加上覆盖在上面的 0.25 个单层快速移动的吸附原子构成<sup>[7]</sup>。当温度从  $T_c$  以上降到  $T_c$  以下时, $7\times 7$  结构在台阶的上沿开始形核,并向平台内部生长,而当温度变化反向时,相反的过程发生。实验确认  $7\times 7$  相和“ $1\times 1$ ”相在  $T_c$  上下约 25K 的温度区间内可以共存,这个表面相变是一阶而非连续相变<sup>[5,6]</sup>。Hannon 等人<sup>[5]</sup>近期将具有较大平台宽度的 Si(111)表面升温到 1500K 以清洁表面,然后降到相变温度  $T_c$  以下并快速冷却,使  $7\times 7$  相在平台内部形核,再回到  $T_c$  以上退火时,通过低能电子显微镜(low energy electron microscopy, LEEM)实验发现, $7\times 7$  岛的面积始终以恒定的衰减速率随时间减小,且初始面积越大的岛这一衰减速率也越大。这个现象反映了这个相变的美妙和复杂性,找到它的微观机理对理解 Si(111)-( $7\times 7$ )-( $1\times 1$ )相变具有重要的意义。

根据 DAS 模型,顶点空位、二聚原子链和层错的形成被认为是构成  $7\times 7$  重构的关键因素<sup>[3]</sup>。当二聚原子链断裂和顶点空位消失时, $7\times 7$  结构完整的七倍单胞的周期就已经被破坏了<sup>[8]</sup>。这些没有原来  $7\times 7$  周期的区域的结构与“ $1\times 1$ ”结构的差别只是层错的存在,而有层错和没有层错区域的周期结构是相同的,只是方位角不同,这样的两个区域在 LEEM 亮场成像的条件下没有差别<sup>[8]</sup>。所以当二聚原子链断裂同时顶点空位消失这一相对较快的过程完成时,即使仍然存在层错,LEEM 也不会再认为这一区域是  $7\times 7$  结构。这就会出现了一个过渡区域,其中耗时较长的层错消解过程还没有完成,即  $7\times 7$  相还没有完全转变为“ $1\times 1$ ”相。根据对实验事实的系统分析,我们提出用一个双速相场模型来描述这个相变。我们用主相场变量  $\phi$  描述  $7\times 7$  相的关键因素(二聚原子链和顶点空位), $\phi = 1$  表示 LEEM

能观测到的  $7\times 7$  岛,用次相场变量  $\xi$  来反映相变中较慢的层错消解过程。相变过程中  $7\times 7$  岛的演变由含时相场方程组决定<sup>[9]</sup>,我们的模拟计算是利用自适应网格技术<sup>[10]</sup>来求解该相场方程组<sup>[9]</sup>。

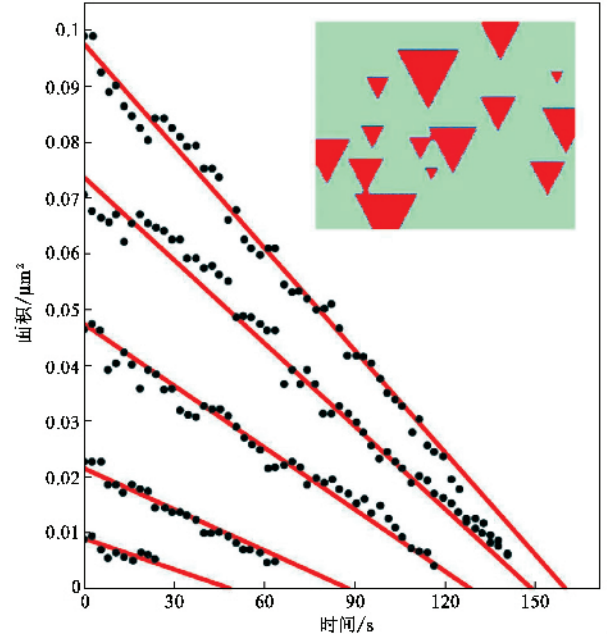


图1 针对 5 个不同尺寸的  $7\times 7$  岛,我们的相场模拟所得到的岛面积衰减行为(图中的直线)与相应实验数据(黑色圆点)的比较;右上角插图中的倒三角是模拟的相变过程中一个时间点上的  $7\times 7$  岛(深灰色)的 LEEM 形貌图,形状都是三角形,与实验一致

图 1 的右上角插图给出了我们模拟的  $7\times 7$  到“ $1\times 1$ ”相变过程中一个时间点的主相场变量的形貌图。深灰色部分  $\phi = 1$ ,对应 LEEM 实验中的  $7\times 7$  岛形貌,浅灰色部分  $\phi = -1$ ,相应地表示 LEEM 实验中的“ $1\times 1$ ”相。它给出了与 LEEM 实验一致的  $7\times 7$  岛形貌,更多的时间点的形貌见文献<sup>[9]</sup>。图 1 主图给出了我们的岛面积模拟结果与实验数据<sup>[5]</sup>的比较。黑色的实心圆圈是实验数据,图中的 5 条直线是我们的模拟结果。我们模拟计算中的  $7\times 7$  岛的初始面积与实验中的不尽相同,但我们发现  $7\times 7$  岛的初始面积与其衰减速率存在很好的线性关系,所以我们将模拟中不同尺寸的  $7\times 7$  岛的初始面积与模拟得到的相应的衰减速率作线性拟合,然后根据实验中的  $7\times 7$  岛的初始面积通过插值得到图中每个实线的斜率,图中 5 个不同尺寸的  $7\times 7$  岛的初始面积从大到小为 0.0976  $\mu\text{m}^2$ , 0.0737  $\mu\text{m}^2$ , 0.0475  $\mu\text{m}^2$ , 0.0216  $\mu\text{m}^2$  和 0.0090  $\mu\text{m}^2$ ,而相应的面积衰减速率为 6.4, 5.2, 3.9, 2.6 和  $2.0 \times 10^{-4} \mu\text{m}^2/\text{s}$ 。 $7\times 7$  岛的面积衰减速率随着初始面积的增加而近似线性地增大。从图中

可以看见,我们的模拟结果与实验数据符合得很好<sup>[10]</sup>.

上述针对 Si(111)(7×7)(1×1)表面相变的双速相场模型,是基于 7×7 和“1×1”两个表面相的具体原子结构,以及我们从大量的相变动力学实验结果做系统分析得出的重要结论:在相变过程中,7×7 关键结构变化较快,随后的层错消解过程则要慢得多.在我们的工作中,相变过程中涉及的关键物理内容是通过相场方法来实现的,这个方法的优点是我们不需具体考虑原子间过程,而只需着眼于更大尺度上的关键物理量的平均效果;具体模拟计算是采用自适应网格技术来进行的,它使得我们能模拟更大的空间和时间范围.我们的模拟结果对 LEEM 实验结果<sup>[5]</sup>给出了满意的解释,对 Si(111)(7×7)(1×1)表面相变中的动态相结构演化给出了一个简单明了的图像.Si(111)(7×7)(1×1)相变是表面相变中最重要、最典型的,也是研究得最充分的相变,上述关于它的研究工作充分说明,这种相场方法对于表面相变研究是一个可靠的途径;表面

相变过程中的大范围动态相结构演化过程,可以通过相关实验与类似的相场模拟相结合的方式得到满意的图像.

### 参考文献

- [ 1 ] Monch W. Semiconductor Surfaces and Interfaces. Third edition. Berlin Springer, 2001
- [ 2 ] Schlier R E, Farnsworth H E. J. Chem. Phys., 1959, 30 : 917
- [ 3 ] Takayanagi K, Tanishiro Y, Takahashi S *et al.* Surf. Sci., 1985, 164 : 367
- [ 4 ] Hoshino T, Kokubun K, Fujiwara H *et al.* Phys. Rev. Lett., 1995, 75 : 2372
- [ 5 ] Hannon J B, Hibino H, Bartelt N C *et al.* Nature, 2000, 405 : 552
- [ 6 ] Hoshino H, Watanabe Y, Hu C W *et al.* Phys. Rev. B, 2005, 72 : 245424
- [ 7 ] Fukaya Y, Shigeta Y. Phys. Rev. Lett., 2000, 81 : 5150
- [ 8 ] Bauer E. Rep. Prog. Phys., 1994, 57 : 895
- [ 9 ] Xu Y C, Liu B G. Phys. Rev. Lett., 2008, 100 : 056103
- [ 10 ] Provatas N, Goldenfeld N, Dantzig J. J. Comput. Phys., 1999, 148 : 265

· 读者和编者 ·

## 订阅《物理》得好礼 ——超值回馈《物理学学科发展报告》

《物理》是中国物理学会、中国科学院物理研究所主办出版的学术期刊,1972 年创刊,致力于传播当代物理学及其交叉学科的前沿最新进展,促进物理学与相关学科的相互交叉和渗透,沟通科研与产业,推动中国物理学的发展.作为中国物理学会的会员刊物,《物理》拥有众多来自科研和教学一线的优秀作者,集科学性、前沿性和可读性为一体,特色鲜明,让读者轻松掌握当前物理学各领域的最新动态,读者遍及国内各相关院所、高等学校和企业界.

《物理》每月 12 日出版发行,邮局定价为 240 元/年.2009 年度的期刊订阅正在进行,为感谢广大读者长期以来对《物理》杂志的关爱和支持,《物理》编辑部特推出以下优惠订阅活动:

1、凡是中国物理学会交纳会费的会员,可享受优惠订阅价 120 元/年,或者 400 元/四年(订阅杂志的费用可以连同会费一起交纳到中国物理学会,也可以直接向编辑部订阅并提供相关证明);

2、其他非会员订户,凡向编辑部一次订阅两年《物理》杂志的,可享受优惠订阅价 180 元/年,并将免费获得《物理学学科发展报告》一本(该书由中国物理学会组织专家编写,中国科学技术出版社出版,定价 40 元).

汇款方式 (1) 邮局汇款:100190 北京 603 信箱《物理》编辑部收;

(2) 银行汇款:户名:中国科学院物理研究所

帐号:30948821-250101040005699

开户行:农行北京科院南路支行.

汇款时请注明“《物理》(D07-3A)”

欲了解更多详情可以登录 [www.wuli.ac.cn](http://www.wuli.ac.cn) 查询,也可来电来信咨询.

联系人:王进萍;咨询电话:010-82649266;Email:physics@iphy.ac.cn