

02;11
©1995

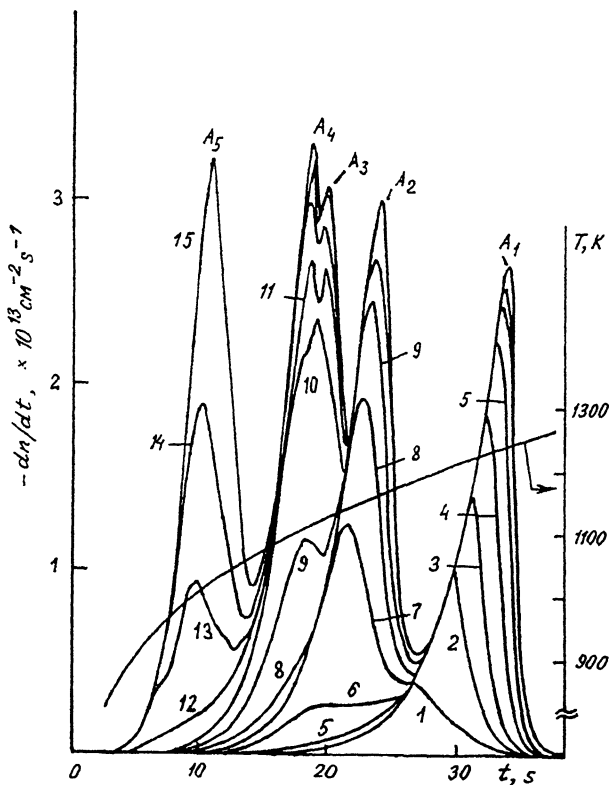
ОСОБЕННОСТИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ АТОМОВ ИТТЕРБИЯ С ГРАНЬЮ Si(111)(7×7)

М.В.Кузьмин, М.В.Логинов, М.А.Митцев

Изучение взаимодействия редкоземельных металлов с поверхностью Si(111) представляет интерес из-за специфичности электронного строения атомов редкоземельных элементов и неординарных свойств этой грани. Как известно [1], поверхность Si(111) имеет сложную морфологию. На ней возможно существование адсорбционных центров нескольких типов, энергии связи адсорбированных атомов для которых могут существенно различаться. Кроме того, она подвержена структурным перестройкам. В этих условиях важную информацию об адсорбционных процессах на поверхности можно получить с помощью метода термодесорбционной спектроскопии, поскольку энергетическая структура и всякое изменение состояния адсорбированной пленки могут найти свое отражение в десорбционных спектрах.

В настоящей работе методом термодесорбционной спектроскопии проведено изучение начальных стадий роста пленок Yb на грани Si(111). Исследования проводились на описанной ранее [2] экспериментальной установке, дополнительно оборудованной оптикой дифракции медленных электронов.

На рисунке приведены спектры термодесорбции, полученные при различных начальных концентрациях n_0 атомов Yb на поверхности Si. Они характеризуются последовательным, по мере возрастания n_0 , появлением пяти десорбционных максимумов. В области малых концентраций ($n_0 < 1.0 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}$) в спектре присутствует один десорбционный максимум A_1 . При $n_0 > 1.0 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}$ появляется второй A_2 , а при $n_0 > 2.0 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}$ появляется максимум, который при возрастании покрытия расщепляется на два — третий и четвертый A_3 и A_4 . И после достижения концентрации $n_0 = 3.6 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}$ появляется пятый, самый низкотемпературный максимум A_5 . Он неограниченно растет при увеличении концентрации адсорбата, а скорость десорбции на его фронте не зависит от концентрации атомов Yb на поверхности и может быть описана кинетическим уравнением нулевого порядка. Необходимо отметить, что и первый высокотемпературный максимум A_1 проявляет такую же особенность. И если “нулевой порядок” десорбции для низко-



Термодесорбционные спектры адсорбционной системы Yb-Si (111)7x7 при различных начальных концентрациях n_0 адсорбата на поверхности; ($n_0 \cdot 10^{-14}$) cm^{-2} : 1 — 0.22; 2 — 0.43; 3 — 0.65; 4 — 0.87; 5 — 1.08; 6 — 1.30; 7 — 1.73; 8 — 2.16; 9 — 2.60; 10 — 3.25; 11 — 3.47; 12 — 3.68; 13 — 4.12; 14 — 4.55; 15 — 4.98.

температурного неограниченно растущего пика не является удивительным, то тот факт, что десорбция при малых концентрациях адсорбата описывается кинетическим уравнением нулевого порядка, не является тривиальным. Объяснение этому может быть следующее. В работе Р. Керна с соавторами [4] рассмотрена модель десорбции атомов с поверхности в условиях существования на ней глубоких изолированных адсорбционных центров. Наряду с атомами, адсорбированными на таких центрах, на поверхности присутствуют относительно слабо связанные адсорбированные атомы, и между этими адсорбционными состояниями возможен обмен адатомами. Авторами работы [4] показано, что при перекрытии зон захвата соседних глубоких адсорбци-

онных центров десорбция описывается уравнением

$$dn/dt = -2\pi \cdot N_0 \cdot C \cdot \exp(-E/kT),$$

где n — концентрация адсорбата, N_0 — концентрация глубоких адсорбционных центров, C — предэкспоненциальный множитель для десорбции из глубокого центра, а E — энергия активации десорбции адсорбированного атома из глубокого центра в газовую фазу. Уравнение это является уравнением нулевого порядка относительно концентрации адсорбата. Возникает вопрос о природе глубоких адсорбционных центров. Они могут индуцироваться на поверхности при адсорбции на ней атомов Yb, но могут существовать и априорно. Индуцированные адсорбционные центры могут возникать, например, вследствие перераспределения поверхностных валентных связей Si, присходящего при адсорбции. Априорно существующие на поверхности адсорбционные центры могут быть обусловлены структурой чистой поверхности кремния. В большей части температурного диапазона наших исследований чистая поверхность подложки имеет структуру с элементарной ячейкой (7×7), которая характеризуется наличием на поверхности глубоких дефектов с концентрацией $1.1 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}$. Наличие на поверхности подложки таких дефектов, на которых происходит адсорбция атомов Yb, может, в принципе, объяснить нулевой порядок десорбции при малых ($< 1.0 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}$) концентрациях адсорбата на поверхности. Однако нельзя исключить из рассмотрения и возможное перераспределение валентных связей, которое может приводить к возникновению на поверхности адсорбционных центров и ее реконструкции при адсорбции.

Уравнение для скорости десорбции, вытекающее из модели Керна, позволило определить энергию активации десорбции E_1 из соответствующих адсорбционных центров, которая оказалась равной 4.4 eV. Это значение близко к теплоте сублимации Si (4.67 eV) [5]. Тем не менее испарение Yb с поверхности подложки заканчивается при температурах существенно ниже температур, при которых начинается заметное испарение Si. Это может быть оправдано аномально высоким значением предэкспоненциального множителя для десорбции атомов Yb из соответствующих адсорбционных центров. По нашим оценкам, величина его оказывается $1.5 \cdot 10^{17} \text{ с}^{-1}$, что на 4 порядка превышает обычные значения предэкспоненциального множителя в уравнении для скорости термодесорбции для случая нелокализованной адсорбции. Такое высокое значение частотного фактора не может быть объяснено и локализованной адсорбцией атомов Yb на априорно существующих на поверхности адсорбционных

центрах. Вероятнее всего адсорбция происходит на центрах, индуцированных самим адсорбатом, что предполагает реконструкцию подложки. Это сильно усложняет картину адсорбции и математическое описание процесса десорбции.

Можно также отметить, что второй термодесорбционный пик по своему поведению близок к "десорбции по нулевому порядку", а третий, как видно из рисунка, включает два слабо разрешенных максимума. По фронту второго пика в предположении нулевого порядка десорбции нами было определено значение энергии активации десорбции из соответствующих адсорбционных состояний. Эта величина оказалась равной $E_2 = 3.6$ eV. Что касается низкотемпературного десорбционного максимума A_s , то для него соответствующая энергия оказалась равной $E_s = 2.7$ eV, что примерно на 1.0 eV превышает теплоту сублимации объемного Yb [6]. Неограниченный рост этого максимума и величина E_s , существенно превышающая теплоту испарения металлического Yb, позволяют утверждать, что он обусловлен удалением атомов Yb из слоя силицида Yb, образующегося на поверхности при этих концентрациях адсорбата. А величина E_s равна энергии активации его разложения.

Таким образом, можно заключить, что при напылении атомов Yb на поверхность Si(111)7×7 сначала последовательно заполняются четыре адсорбционных состояния, после чего начинается образование силицида иттербия.

Список литературы

- [1] *Shluter M.* The chemical physics of solid surfaces and heterogenous catalysis / Ed. by D.A. King and D.P. Woodruff. V. 5. Surface properties of electronic materials. Elsevier, 1988. P. 37-68.
- [2] *Кузьмин М.В., Логинов М.В., Мутцев М.В., Крачино Т.В.* // ФТТ. 1995. Т. 37. № 4. С. 1030-1039.
- [3] *Ishizaka A., Shiraki Y.* // J. Electrochem. Soc. 1986. V. 133. N 4. P. 666-671.
- [4] *Kern R., Le Lay G., Metois J.J.* // Basic mechanisms in early stages of epitaxy. Current Topics in Material Science. 1979. V. 3. P. 131-419.
- [5] *Свойства элементов. Ч. 1. Физические свойства. Справочник / Под ред. Г.В. Самсонова.* М.: Металлургия, 1976. 599 с.
- [6] *Савицкий Е.М., Терехова В.Ф.* Металловедение резкоземельных металлов. М.: Наука, 1975. 271 с.

Физико-технический институт
им. А.Ф. Иоффе РАН
Санкт-Петербург

Поступило в Редакцию
30 июня 1995 г.