

反射式高能电子衍射图样分析

陈可明 张翔九 王迅

(复旦大学表面物理实验室)

1987年5月14日收到

ANALYSIS OF REFLECTED HIGH ENERGY ELECTRON DIFFRACTION PATTERNS

Chen Ke-ming, Zhang Xiang-jiu, Wang Xun
(Surface Physics Laboratory, Fudan University)

Abstract

The principle of Reflected High Energy Electron Diffraction (RHEED) and the characteristics of the diffraction patterns are briefly introduced in this paper. A compilation of RHEED patterns on a variety of surface reconstructions for the two-dimensional square and hexagonal lattices is given. Comparing the observed RHEED patterns by the compilation, the corresponding surface structures obtained in the experiments could be easily and unambiguously determined.

本文简要介绍了反射式高能电子衍射 (RHEED) 的原理及其衍射图样的详细特征。并对常见的正方和六角二维晶格的各种再构绘编了RHEED的图集。实验工作者可以方便地对照此图集来确定他们所观察到的衍射图样所对应的表面结构。

一、引言

反射式高能电子衍射 (RHEED) 是观察单晶表面原子结构的一种实验方法。它在原理上同低能电子衍射 (LEED) 有很多相似之处, 由于具体实验方法的不同, 它具有一些独特的优点。因为RHEED的入射电子和被探测的散射电子沿与表面成掠角的方向, 样品表面与RHEED装置间有较大的空间, 因而便于同其他的样品制备或与分析装置相容。特别是在分子束外延生长时, 用它对表面的结构进行原位监测, 甚至利用测量生长过程中衍射束强度的周期性振荡控制生长质量和研究生长机理^[1-4], 这都是LEED所不能做的。另外, 因高能电子受固体原子散射的截面较小, 分析衍射强度时, 多重散射效应可以忽略。使理论计算的模型比LEED强度分析简单得多。虽然, 到目前为止, 用RHEED的强度分析来研究表面原子结构还没有象LEED那样成功。

RHEED的图样在显示表面再构的特征方面不如LEED来得直接。因为LEED图样直接对应于表面原子的二维倒格子, 所以沿着表面两个基矢方向上的周期性反映在衍射图

样上一目了然,不同的再构图样一般不会混淆。然而RHEED显示的不是二维倒格子,只是倒易棒在某一维度方向的排列。要知道整个倒格子,至少要观察两个不同方向的RHEED图样。对于LEED,从衍射图样来确定表面原子排列(即再构类型),需要用倒正格子基矢之间的对应关系。有一种方便的办法是^[5],预先将各种再构所对应的倒格子求出,画成图集进行查对,这可不必要对每次实验观察到的LEED图样进行倒、正格子的变换手续。对于RHEED,用同样的办法编绘出衍射图集,不仅方便,且可避免在辨识极为相似的衍射图样时出现差错。

对于RHEED图样的分析,Neave和Joyce作过简单的介绍并给出了典型的例子^[6]。本文根据他们的分析方法,绘编了较为常见的或在分子束外延中常出现的若干种表面再构的RHEED图样,相信它对从事表面物理学及分子束外延研究的同行会有所裨益。

二、RHEED原理

为了解释RHEED图样所反映的晶体表面结构特征,有必要先简单叙述RHEED原理。

一束能量约为10keV的电子束以同晶体表面成5°以下的角度掠入射到表面上,晶体表面的原子有规则排列对于入射的电子波起了衍射光栅的作用。在满足Laue方程的条件下可出现衍射强度的极大,也就是围绕电子镜面反射方向会出现衍射斑点。为了形象地确定衍射斑点的分布,先画出晶体表面的倒易棒和Ewald球,如图1所示。图中 \vec{R}_0 为

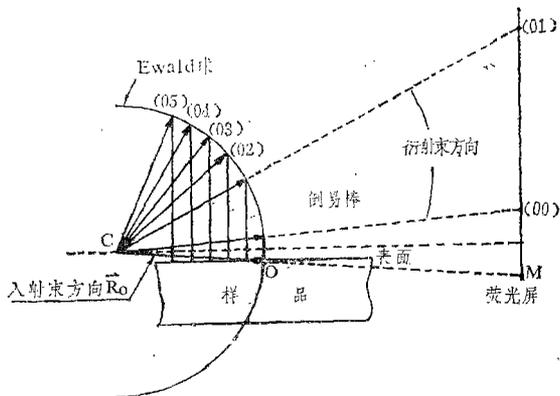


图1 表示RHEED图样形成的示意图

入射电子的波矢,它从C点指向二维倒格子的原点O, \vec{R}_0 的方向即为电子入射的方向。以C点为中心 \vec{R}_0 为半径作Ewald球。倒易棒与晶体表面相垂直,它们与表面的交点即为二维倒格子。倒易棒与Ewald球相交在一些点上,由C点到这些交点作连线,则沿连线的方向Laue方程可以满足,因而是衍射亮斑出现的方向。在沿电子束镜面反射的方向放置RHEED的荧光屏,就可以显示出衍射的图样。

从理论上分析,Ewald球与倒易棒相交的是一些点,衍射图样应该是许多斑点,呈同心圆环式的分布。但是,在实际观察中发现,当晶体表面达到原子级平整时,衍射图样不是点而是条纹状。有过许多工作解释为什么出现条纹,如认为入射电子束能量的非单色性、电子束的非准直和漫散射等,使Ewald球并非是一个球面而是一定厚度的球壳,于是同倒易棒相交处成为长线条而不是点。但这仅都是可能的原因,完全满意的解释还没有给出。如果表面不完全平整,存在岛、小丘等,即使其尺寸在100Å左右,高能电子束可以穿透而发生二维衍射效应,这时的RHEED图样反而是点状分布的了。如图2(a)是Si(100)清洁表面的RHEED图样,在其表面用分子束外延生长单晶硅以后,表面

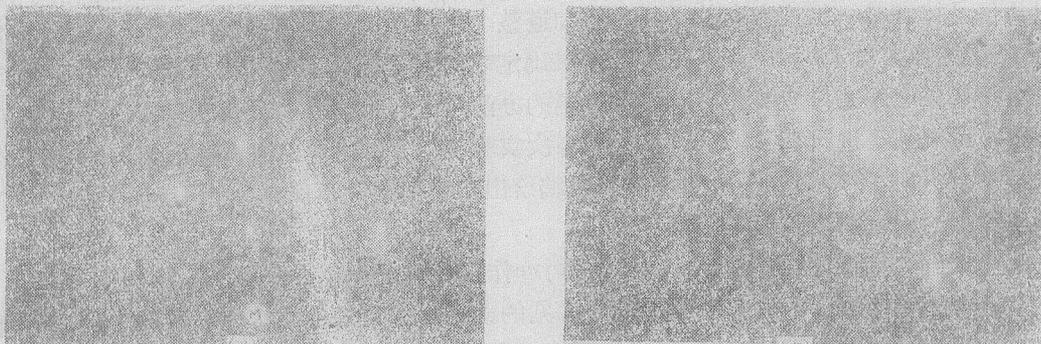


图2 RHEED图样的照片

(a) 表面不平整, 衍射图样为点状分布

(b) 平整表面, 衍射斑点伸长成条纹状

平整, RHEED成为条纹状分布, 如图2(b)所示。这是Si(100)(2×1)再构表面的图样。

由于电子束掠入射到晶体表面, 只有Ewald球的上半部与倒易棒相交, Ewald球的下部不产生衍射束, 所以在RHEED荧光屏上只有一半显示出衍射斑点或条纹。但在图2中, 衍射图样的下方多出一个亮点, 即M点, 它是(0, 0)束的镜象点, 这个斑点是入射电子束未经衍射直接透过晶体产生的。M点同(0, 0)点在荧光屏上的间距 d_M 同掠射到表面的角度 α 有如下关系:

$$\operatorname{tg} \alpha = \frac{d_M/2}{L} \quad (1)$$

式中 L 是电子束与样品表面的交点到荧光屏的距离, 称为像机常数。测量出 d_M 就可以准确地知道电子束的掠射角度。

图2(b)中, 最中间的条纹代表的是(0, 0)倒易棒, 称为(0, 0)束。其右侧的条纹依次为 $(1/2, 0)$, $(1, 0)$, $(3/2, 0)$, $(2, 0)$, $(5/2, 0)$..., 左侧则为 $(\bar{1}/2, 0)$, $(\bar{1}, 0)$, $(\bar{3}/2, 0)$, $(\bar{2}, 0)$, $(\bar{5}/2, 0)$...等。这些分数级指数的条纹是由再构所引起的, 它们的强度比整数级条纹来得弱些。条纹的间隔取决于晶格常数或者表面原子的间距。如果相邻整数级条纹在荧光屏上的间隔是 d , 则有

$$d = \frac{\lambda L}{a} \quad (2)$$

式中 a 为原子间距, λ 为电子波长, 不考虑相对论效应时有

$$\lambda = \sqrt{\frac{150}{V}} (\text{\AA}) \quad (3)$$

式中 V 为电子的加速电压, 以伏为单位。例如, 能量为10keV的电子 $\lambda = 0.122 \text{\AA}$, 像机常数为310mm, 量得Si(100)表面(0, 0)束与(1, 0)束的间隔为9.8mm, 由(2)式可求得原子间距 a 为 3.86\AA , 与硅晶格常数的 $1/\sqrt{2}$ 倍 $a_0/\sqrt{2} = 3.84 \text{\AA}$ 符合的很好。

前面说过, 倒易棒与Ewald球相交所决定的衍射点在荧光屏上呈同心圆状分布。在

图2(b)中斑点伸长成条纹后不容易看出这一特征。图3是Si(111)表面(7×7)再构的RHEED图样。图(a)中最靠近中心的一组环状条纹称为零级衍射条纹,它是同Ewald球边界靠得最近的一组倒易棒所产生的。从零级条纹向外,各同心圆环上分布的依次是1/7级、1/7级、3/7级、4/7级、5/7级、6/7级和1级衍射条纹。由于受荧光屏尺寸的限制,1级衍射在照片上只显示出很少几个亮斑。更高级的衍射条纹一般看不到。图3(b)则是电子束沿另一晶向(与图3(a)中的方向成90°角)入射时观察到的RHEED图样。

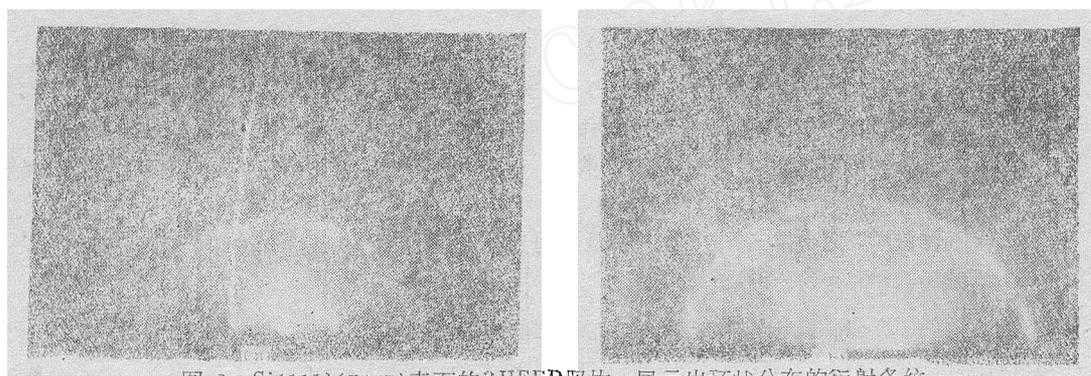


图3 Si(111)(7×7)表面的RHEED照片。显示出环状分布的衍射条纹

(a) 入射束平行于(112)

(b) 入射束平行于(110)

不同的RHEED装置,由于电子束能量和像机常数不同,荧光屏上显示的衍射条纹数目可以不一样。电子束能量愈高或像机常数愈小,所能观察到的衍射级数愈多,但条纹的间隔变小,清晰程度略差。另外,调节电子束的掠射角度可以使条纹上下移动,一些衍射条纹在荧光屏上出现,而另一些条纹则移到荧光屏外面。

三、RHEED的图集

附图给出了立方晶格的(100)和(111)面上一些表面再构沿不同晶向观察时的RHEED图样。所选择的这些例子大多是考虑在分子束外延时有可能遇到的结构。这些图样根据倒格子结构画出,其中零级衍射用条纹表示,非零级衍射画成点和短条纹。实际的衍射照片因条纹长短的差异,强度的不均匀等,可能会同图中显示的略有差别。但基本特征相符。另外,由于荧光屏尺寸的限制,图中所画的条纹不一定能全部显示,往往需要调节电子束的能量和掠射角,方能获得与附图中相似的最佳图样。

一般情况下都是将零级衍射的条纹调节到最清晰。根据零级衍射条纹,从一张RHEED照片上只能确定晶体表面沿一个方向上的周期性。如要知道二维晶格结构,至少要观察两个不同方向上的RHEED图样。但是由于某些再构,由于非零级条纹的延伸,它们的图样间差别很小,只有仔细比较各个不同方向上的分数级衍射条纹,才能加以区别。从这一点来说,RHEED观察表面再构不如LEED来得直观,而本文所绘编的图集实际应用上就更有参考作用。

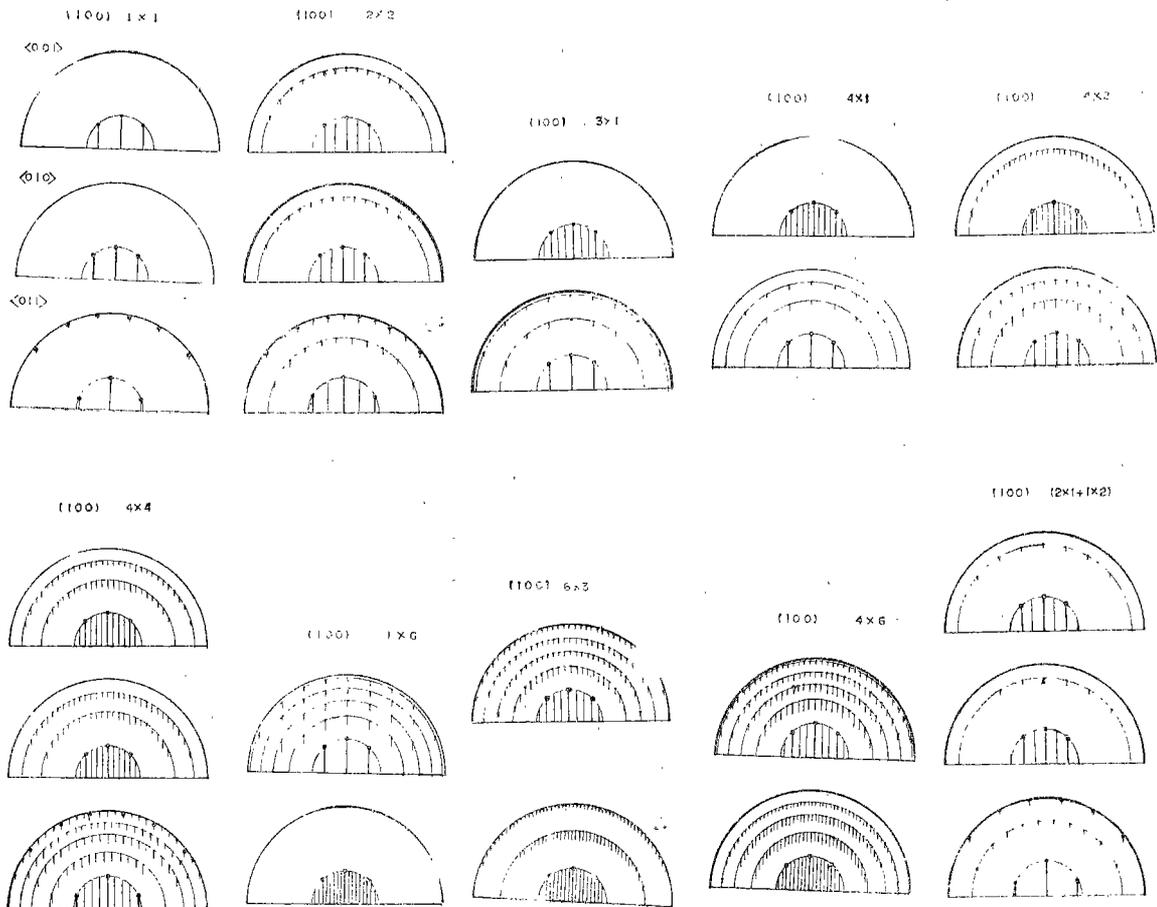
表1 RHEED图集目录

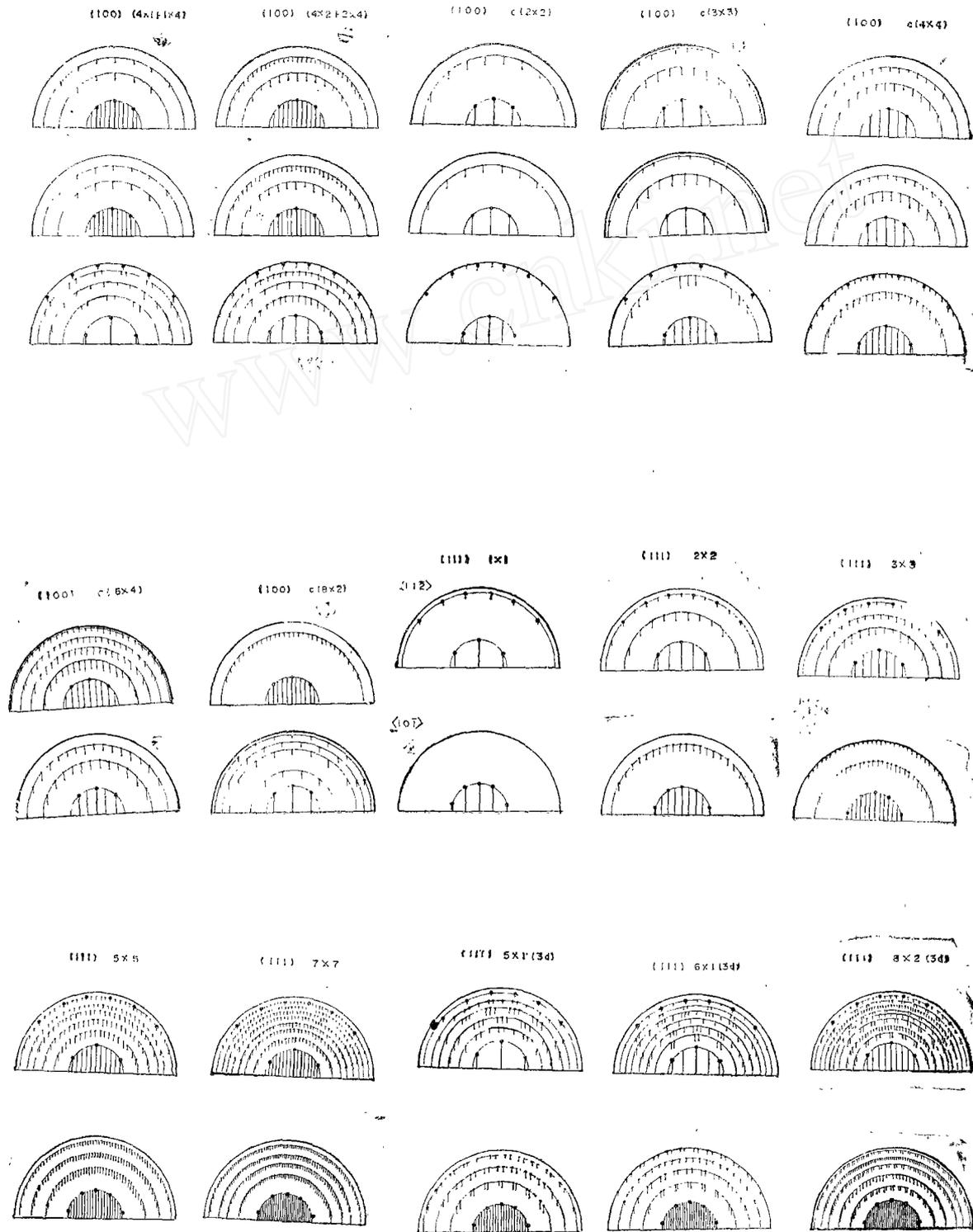
- | | | |
|----------------------|----------------------|--|
| (1) (100) (1×1) | (11) (100) (4×1+1×4) | (21) (111) (5×5) |
| (2) (100) (2×2) | (12) (100) (4×2+2×4) | (22) (111) (7×7) |
| (3) (100) (3×1) | (13) (100) C(2×2) | (23) (111) (5×1)(3d) |
| (4) (100) (4×1) | (14) (100) C(3×3) | (24) (111) (6×1)(3d) |
| (5) (100) (4×2) | (15) (100) C(4×4) | (25) (111) (2×8)(3d) |
| (6) (100) (4×4) | (16) (100) C(6×4) | (26) (111) C(4×2)(3d) |
| (7) (100) (6×1) | (17) (100) C(8×2) | (27) (111) C(4×2)(3d) |
| (8) (100) (6×3) | (18) (111) (1×1) | (28) (111) ($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$) R30° |
| (9) (100) (6×4) | (19) (111) (2×2) | (29) (111) ($\frac{2}{3}\sqrt{3} \times \frac{2}{3}\sqrt{3}$) R30° |
| (10) (100) (2×1+1×2) | (20) (111) (3×3) | |

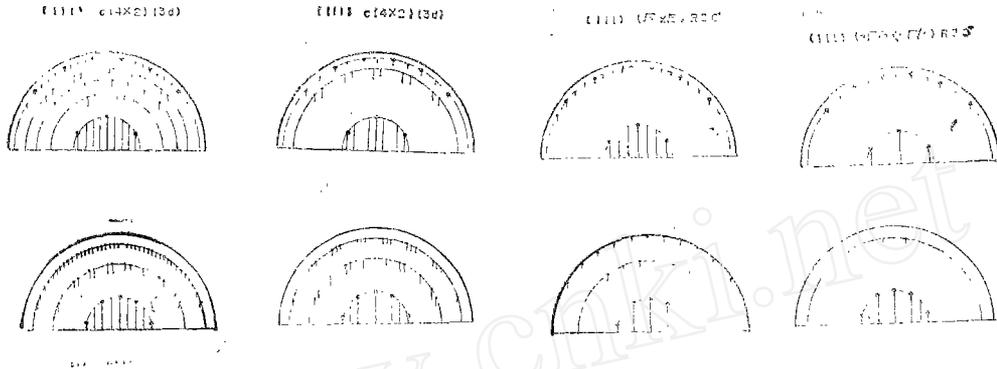
附注：本图集中每组图样的上方标明了(100)面或(111)面的再构标记。其中(2×1+1×2)、(4×1+1×4)……等都是两个畴区共存时的情形。(111)面再构标记后面有(3d)的表示是三个互成120°的畴区的迭加。

(100)面的图样取两个或三个方向，图样从上到下依次是沿<001>、<010>和<011>方向观察得到的，即它们的相对夹角分别为0°、90°和45°。

(111)面的图样取自<112>和<101>，它们之间的夹角为30°。







参考文献

- [1] J.H.Neave, B.A.Joyce P.Dobson and N.Norton, *Appl. phys.* A31, 1(1983)
- [2] J.M.VanHove, C.S.Lent, P.R.Pukit and P.I.Cohen, *J.Vac. Sci. Technol.* B1, 741 (1983)
- [3] P.Chen, A.Madhukar, J.H.Kim and T.C.Lee, *Appl.phys. Lett.*43, 650(1985)
- [4] B.A.Joyce, P.J.Dobson, J.H.Neave, K.Woodbridge, J.Zhang, P.K.Larson and B.Bolger, *Surface Sci* 168, 423 (1986)
- [5] 蒋平、董树忠、王迅, *真空科学与技术*, 3, 42 (1983)
- [6] J.H.Neave and B.A.Joyce, *J.Crystal Growth*, 44, 387 (1978)

(上接第 414 页)

快建立各项标准。我们已进行联系,并准备参加这方面工作,务使我国的表面分析标准与国际标准保持一致。在逐步建立表面分析标准中进一步促进表面分析技术的发展、提高和推广应用。

参考文献

- [1] C.J.Powell, *Application of Surface Science* (1),143,(1978)
- [2] J.R.Cuthill, *ASTM Standarizatioo News* 6,(2),8,(1978)
- [3] AMTS E673-84
- [4] 罗兴华,第四届标准物质学术讨论会论文集1986
- [5] 王迅, *真空科学与技术*(1)205,(1981)
- [6] XPS会测组, *真空科学与技术*(4),101(1984)
- [7] M.P.Seah, *Surface & Interface analysis* (6),95,(1984)
- [8] C.J.Powell, NBSIR 85-3120