

01;02;05;11

## Адсорбция атомов водорода на кремнии

© С.Ю. Давыдов

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН,  
194021 Санкт-Петербург, Россия

(Поступило в Редакцию 16 июня 2004 г.)

В рамках модели, учитывающей наряду с диполь-дипольным взаимодействием адатомов водорода увеличение длины адсорбционной связи с ростом степени покрытия  $\Theta$ , рассчитано изменение работы выхода  $\Delta\phi(\Theta)$  поверхности (100) кремния. Определена зависимость величины заряда адатомов от  $\Theta$  и оценено изменение поверхностной проводимости подложки.

Теоретическому исследованию адсорбции газов на полупроводниковых поверхностях до недавнего времени уделялось сравнительно мало внимания. В работе [1] нами были предложены модели адсорбции атомарного водорода на германии. Оказалось, что для адекватного описания экспериментальных данных по адсорбции Н на Ge(111) [2] в стандартную модель адсорбции Андерсона-Ньюна [3,4] необходимо ввести зависимость длины адсорбционной связи  $a$  от степени покрытия  $\Theta = N/N_{ML}$  ( $N(N_{ML})$  — концентрация частиц в слое (монослое)), положив

$$a = a_0(1 + \alpha \cdot \Theta), \quad (1)$$

где  $a_0$  — длина адсорбционной связи при нулевом покрытии,  $\alpha$  — безразмерный коэффициент.

В системе Н/Ge(111) изменение работы выхода  $\Delta\phi(\Theta)$  при малых покрытиях отрицательно (заряд адатома  $Z$  положителен), проходит при  $\Theta = 0.15$  через нуль, после чего становится положительным (адатом приобретает отрицательный заряд) и возрастает. При переходе от  $Z > 0$  к  $Z = 0$  число заполнения адатома  $n = 1 - Z$  увеличивается и радиус оболочки  $a$  возрастает от значения, близкого к ионному радиусу  $r_i$ , до значения, близкого к атомному радиусу  $r_a$ . Здесь мы проанализируем результаты экспериментов [5], где исследовалась система Н/Ge(100).

При адсорбции водорода на поверхности (100) кремния наблюдается зависимость  $\Delta\phi(\Theta)$ , в определенной степени обратная по отношению к Ge(100): до  $\bar{\Theta} \approx 0.1$  работа<sup>1</sup> выхода системы не меняется, т.е.  $\Delta\phi(\Theta) = 0$ , а при  $\Theta > \bar{\Theta}$  функция  $\Delta\phi(\Theta)$  приобретает отрицательное значение. Вообще говоря, остается непонятным, почему в интервале покрытий (0, 0.1) работа выхода системы Н/Ge(100) остается постоянной. Обычно эта область, наоборот, соответствует наиболее резкому изменению работы выхода системы как при адсорбции металлов на металлических [4] и полупроводниковых [6] подложках, так и при адсорбции газов на полупроводниках [2,7]. Более того, в той же работе [5] показано, что при нанесении на кремниевую подложку субмонослойной пленки

<sup>1</sup> При анализе данных работы [5] мы полагаем, что экспозиция 10L соответствует  $\Theta = 0.1$  и предполагаем для простоты линейную связь между экспозицией и степенью покрытия.

германия, т.е. в системе Н/Ge/Si(100), наблюдается область покрытий (0,  $\Theta^*$ ), где  $\Delta\phi(\Theta) > 0$  и имеет максимум при  $\Theta \approx 0.05$ . С ростом концентрации адатомов германия величина  $\Theta^*$  возрастает. Все это позволяет предположить, что и в случае чистой поверхности (100) кремния в области (0, 0.1) должна иметь место положительная добавка к работе выхода. В дальнейшем мы будем исходить из этого предположения.

Как показано в [1], заряд адатома водорода  $Z$  и изменение работы выхода  $\Delta\phi$  с учетом диполь-дипольного взаимодействия в адсорбированном слое можно рассчитать по следующим формулам:

$$Z = \frac{2}{\pi} \arctg \left[ \frac{\Omega_0(1-x)/(1+\bar{\alpha} \cdot x) - x^{3/2}\bar{\xi}_0 Z(1+\bar{\alpha} \cdot x)^2}{\Gamma} \right], \quad (2)$$

$$\Delta\phi = -\bar{\Phi}_0 x(1 + \bar{\alpha} \cdot x)Z,$$

где

$$x = \frac{\Theta}{\bar{\Theta}}, \quad \bar{\xi}_0 = \xi_0 \bar{\Theta}^{3/2}, \quad \bar{\Phi}_0 = \Phi_0 \cdot \bar{\Theta},$$

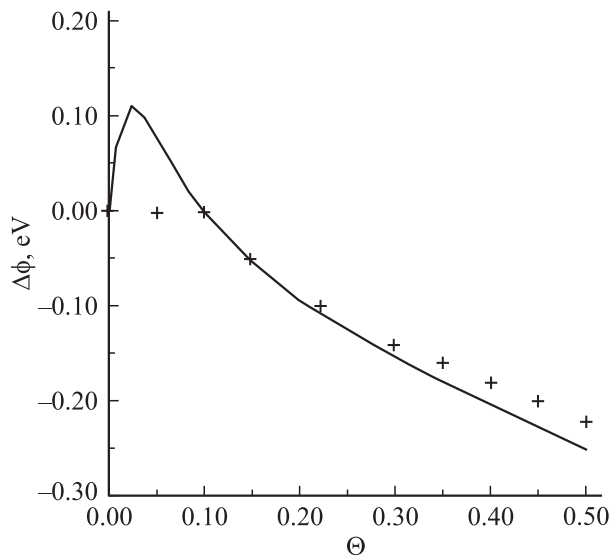
$$\bar{\alpha} = \alpha \cdot \bar{\Theta} = \frac{\Omega_0}{I - \phi}, \quad \xi_0 = 2e^2 a_0^2 N_{ML}^3 A,$$

$$\Omega_0 = \phi - I + \Delta_0, \quad \Delta_0 = \frac{e^2}{4a_0}, \quad \alpha = \frac{\Omega_0}{I - \phi}. \quad (3)$$

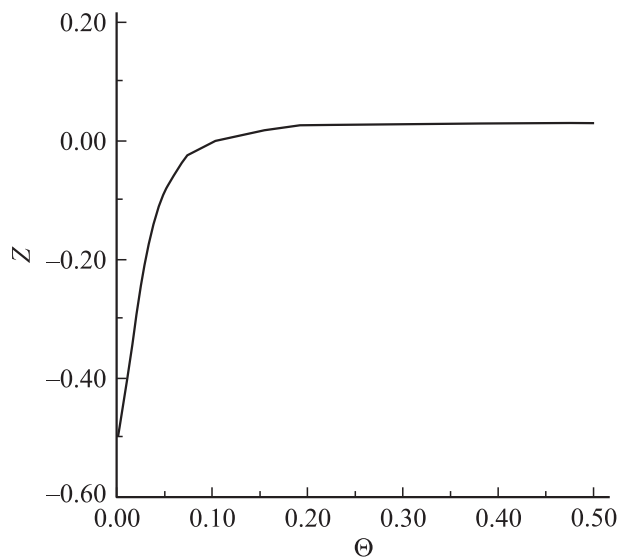
Здесь  $\Omega_0$  — энергия квазиуровня адатома относительно уровня Ферми подложки;  $\xi_0$  — константа диполь-дипольного отталкивания адатомов;  $A \sim 10$  — безразмерный коэффициент, слабо зависящий от геометрии решетки адатомов;  $\Gamma$  — полуширина квазиуровня изолированного адатома;  $I$  — энергия ионизации адорбируемого атома;  $\phi$  — работа выхода кремния;  $\Delta_0$  — кулоновский сдвиг квазиуровня адатома, вызванный взаимодействием его электрона с электронами подложки. Для численного расчета адсорбции были выбраны следующие параметры:  $a_0 = 1.5 \text{ \AA}$ ,  $N_{ML} = 6.78 \cdot 10^{-14} \text{ cm}^{-2}$ ,  $\bar{\Theta} = 0.1$ ,  $\xi_0 = 11.44 \text{ eV}$ ,  $\Phi_0 = 18.4 \text{ eV}$ ,  $\Omega_0 = -0.1 \text{ eV}$ ,  $\Gamma = 0.1 \text{ eV}$ ,  $\Delta_0 = 2.4 \text{ eV}$ ,  $\alpha = -0.1$ . Отметим, что в данном случае  $\alpha < 0$ , т.е. уменьшение длины адсорбционной связи, что соответствует сдвигу квазиуровня адатома вверх, в результате чего он переходит из начального положения под уровнем Ферми

( $\Omega_0 \equiv \Omega(\Theta = 0) < 0$ ) в положение над уровнем Ферми ( $\Omega(\Theta) = \Omega_0 - \Delta_0[\alpha\Theta/(1 + \alpha\Theta)]$ ).

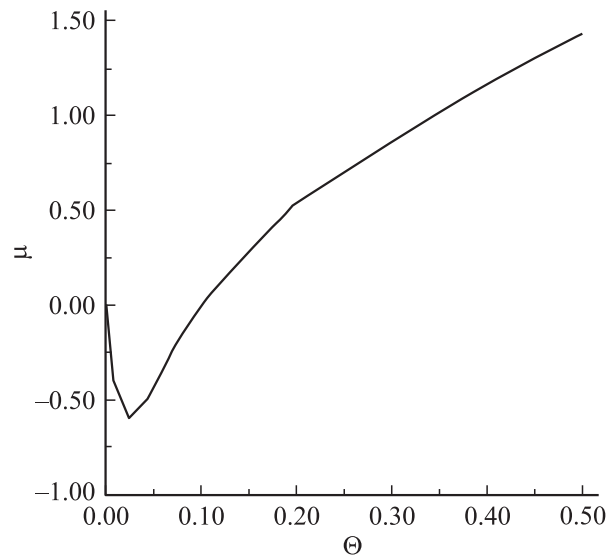
Результаты расчета  $\Delta\phi(\Theta)$  представлены на рис. 1. Наблюдается очень хорошее согласие с данными эксперимента в интервале покрытий от 0.1 до 0.3. Небольшое расхождение при  $\Theta > 0.3$  связано с игнорированием обменных процессов, ведущих к деполяризации адатомов [4]. На рис. 2 представлены результаты расчета изменения заряда  $Z(\Theta)$ . Отметим, что масштаб рис. 2 не позволяет показать тонкие особенности зависимости  $Z(\Theta)$ , а именно после обращения в нуль при  $\bar{\Theta}$  заряд  $Z$



**Рис. 1.** Зависимость изменения работы выхода  $\Delta\phi$  от степени покрытия  $\Theta$  поверхности кремния атомами водорода.



**Рис. 2.** Зависимость заряда адатома водорода  $Z$  от степени покрытия  $\Theta$  поверхности кремния.



**Рис. 3.** Зависимость параметра  $\mu \equiv |Z(\Theta)| \cdot \Theta \cdot 10^2$ , пропорционального относительному изменению поверхностной проводимости  $\Delta\sigma/\sigma_0$  от степени покрытия  $\Theta$  поверхности кремния.

принимает положительное значение и растет по модулю вплоть до  $\Theta = 0.4$  ( $Z(0.4) \approx 0.029$ ), после чего начинает медленно уменьшаться.

В соответствии с тем, что при  $\Theta \leq 0.1$  водород отбивает электроны от подложки, а при больших покрытиях отдает, поверхностная проводимость  $\sigma$  вначале уменьшается по сравнению с проводимостью чистой поверхности, а затем увеличивается. На рис. 3 представлена зависимость произведения  $\mu \equiv |Z(\Theta)| \cdot \Theta \cdot 10^2$ , пропорциональная изменению относительной поверхностной проводимости  $\Delta\sigma/\sigma_0$ , где  $\sigma_0$  — проводимость чистой поверхности (100) кремния.

Таким образом, простая модель, первоначально предложенная одним из авторов для описания адсорбции атомов натрия на цезии [8], описывает также и адсорбцию водорода на германии и кремнии.

## Список литературы

- [1] Давыдов С.Ю. // ЖТФ. 2004. Т. 75. Вып. 1. С. 110–112.
- [2] Surnev L., Tikhov M. // Surf. Sci. 1984. Vol. 138. N 1. P. 40.
- [3] Теория хемосорбции. / Под ред. Дж. Смита. М.: Мир, 1983.
- [4] Браун О.М., Медведев В.К. // УФН. 1989. Т. 157. Вып. 4. С. 631.
- [5] Boishin G., Surnev L. // Surf. Sci. 1996. Vol. 345. N 1. P. 64.
- [6] Physics and Chemistry of Alkali Metal Adsorption / Ed. H.P. Bonzel, A.M. Bradshaw, G. Ertl. Copenhagen: Elsevier, 1989.
- [7] Heinrich V.E., Cox V.E. The Surface Science of Metal Oxides. Cambridge University Press, 1994.
- [8] Davydov S.Y. // Appl. Surf. Sci. 1999. Vol. 140. N 1. P. 52.