

ОБЗОРЫ АКТУАЛЬНЫХ ПРОБЛЕМ

Поверхность β -SiC(100): атомная структура и электронные свойства

В.Ю. Аристов

Цель данного обзора — собрать воедино и показать современное состояние исследований, касающихся состава, атомной и электронной структуры, а также электронных свойств различных сверхструктур, обнаруженных недавно на чистой β -SiC(100) поверхности. В течение последних 10 лет наблюдался значительный прогресс в экспериментальных и теоретических исследованиях чистой поверхности β -SiC(100): были выявлены и изучены различные поверхностные реконструкции, обнаружено контролируемое формирование прямых, очень длинных и высокостабильных линий кремниевых димеров, самоорганизующихся на поверхности β -SiC(100). Расстояние между этими линиями определяется временем и температурой отжига. Однако многие детали (состав, модели элементарных ячеек и т.п.) все еще являются предметом обсуждений.

PACS numbers: 68.35.Rh, **68.65.+g**, 71.10.Pm, **73.61.-r**

Содержание

1. Введение (801).
2. Общая характеристика карбида кремния (802).
3. β -SiC(100) кремниевая поверхность стехиометрического состава, образованная одним моноатомным слоем кремния (803).
3.1 Структура 2×1 кремниевой поверхности β -SiC(100) стехиометрического состава, наблюдаемая при комнатной температуре. 3.2. Структура $c(4 \times 2)$ кремниевой поверхности β -SiC(100) стехиометрического состава. 3.3. Обратимый фазовый переход $c(4 \times 2) \leftrightarrow (2 \times 1)$ на поверхности β -SiC(100). 3.4. Одномерный характер металлической проводимости сверхструктуры 2×1 на поверхности β -SiC(100).
4. Поверхность β -SiC(100), обогащенная кремнием (813).
4.1. Сверхструктура 3×2 на поверхности β -SiC(100). 4.2 Сверхструктуры $m \times 2$ при $m = 2n + 1$. 4.3. Сверхструктура 8×2 на поверхности β -SiC(100). 4.4 Самоорганизующиеся одномерные цепочки димеров кремния на поверхности кубической модификации SiC. Термическая стабильность и механизмы разрушения.
5. β -SiC(100) углеродная поверхность стехиометрического состава, образованная одним моноатомным слоем С (819).
5.1. Структура $c(2 \times 2)$ углеродной поверхности β -SiC(100) стехиометрического состава. 5.2. Димерные цепочки углерода на поверхности $c(2 \times 2)$.
6. Заключение (823).
7. Приложение (824).
- Список литературы (825).

В.Ю. Аристов. Институт физики твердого тела РАН,
142432 Московская область, Черноголовка, Российская Федерация
Тел. (095) 993-27-55, Факс (096) 524-97-01
E-mail: aristov@issp.ac.ru

Статья поступила 29 марта 2001 г.

1. Введение

В значительной степени благодаря созданию и бурному развитию микроэлектроники, мы стали свидетелями, а многие и участниками необозримого количества исследований "традиционных" полупроводников, что привело к фантастическому прогрессу в различных областях техники, но особенно — в разработке и производстве компьютеров. Еще 7–10 лет назад невозможно было себе представить компьютер карманного размера с оперативной памятью в 250 мегабайт. Даже объем твердого диска у стандартного IBM совместимого компьютера составлял обычно 40 мегабайт. Однако в последнее десятилетие исследователи стали уделять все возрастающее внимание так называемым "нетрадиционным" материалам, среди которых особое место заняли соединения элементов четвертой группы: $A^{IV}B^{IV}$. И это не случайно, так как по числу публикаций, по крайней мере, в области физики твердого тела, в последние два-три десятка лет бесспорное лидерство принадлежит именно элементам четвертой группы.

Предметом данного обзора является SiC — единственное бинарное соединение элементов этой группы, существующее в твердой фазе. Точнее — поверхность (100) кубической фазы β -SiC. Как материал карбид кремния используется достаточно давно. Еще в середине 80-х годов было опубликовано несколько работ, посвященных изучению поверхности карбида кремния, но фактически интенсивные исследования поверхности этого полупроводника начались менее 10 лет назад, после того как научились более или менее воспроизводимым способом приготавливать поверхность. Здесь можно найти полную аналогию с физикой полупроводников: хотя первые исследования проводились и в 30-х годах, но понимание явлений, настоящее бурное развитие

исследований началось лишь в 50-е годы, когда научились получать очень чистые кристаллы полупроводников и затем легировать их контролируемым образом.

Как оказалось, поверхность $\beta\text{-SiC}(100)$, как, впрочем, и сам материал, обладают удивительными свойствами, существенно отличающими их, например, от кремния. Эти свойства уже сейчас можно было бы использовать для производства микроэлектронных приборов. А целью данного обзора является собрать воедино и проанализировать полученные за последние несколько лет учеными из разных стран знания, которые пока еще разбросаны по многочисленным научным журналам. Можно надеяться, что такой обзор окажет пользу как исследователям, желающим приложить свои силы и энергию в новых направлениях физики твердого тела, так и создателям новых приборов, которые, прочитав этот обзор, получат некоторую общую, хотя еще и не завершенную, картину о свойствах поверхности $\beta\text{-SiC}(100)$ и несколько идей по возможности ее использования в некоторых направлениях техники.

2. Общая характеристика карбида кремния

Значительный вклад в развитие технологии выращивания кристаллов карбида кремния и в исследование их объемных свойств был внесен В.М. Таировым и сотрудниками Электротехнического института, а также А.О. Константиновым и сотрудниками ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН (Санкт-Петербург, Россия) [1].

Карбид кремния (SiC) представляет собой полупроводник с широкой запрещенной зоной, имеющий 50 % атомов кремния и 50 % атомов углерода. Известно более 200 политипов SiC . Эти политипы отличаются порядком чередования двойных плоскостей $\text{Si}-\text{C}$. В каждом из политипов атомы одного типа являются центром тетраэдра, в вершинах которого находятся 4 атома другого типа (рис. 1). Существует много гексагональных фаз (2H, 4H, 6H...), сгруппированных под общим названием α . Наиболее часто в научной литературе встречаются фазы 4H и 6H, которые представляют собой чередование соответственно ABCB-ABCB и ABCACB-ABCACB.

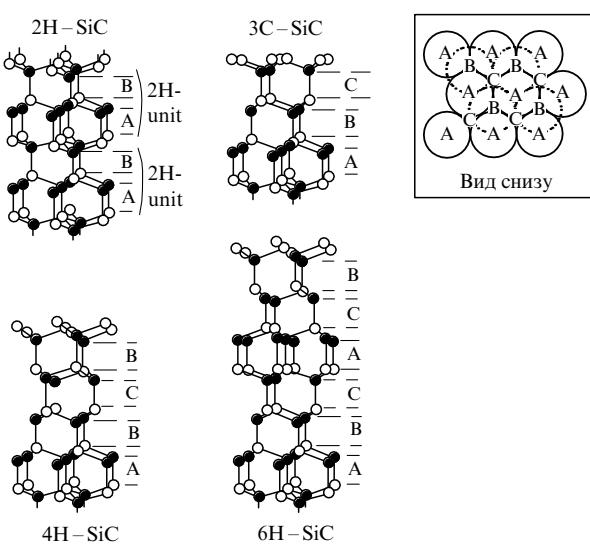


Рис. 1. Последовательность двойных плоскостей SiC в политипах 2H, 3C, 4H и 6H карбида кремния.

Фаза 2H имеет идеальную классическую гексагональную структуру вюрцита ($\text{AB}-\text{AB}$).

Предметом нашего рассмотрения является поверхность кубической фазы (ее часто обозначают β или 3C). Она характеризуется чередованием типа ABC-ABC. Этот тип SiC существует в форме объемных кристаллов очень малого размера (несколько кубических миллиметров) и низкого качества (со значительным количеством дефектов по сравнению с массивными кристаллами $\alpha\text{-SiC}$). Кубический карбид кремния существует также в виде тонких пленок, выращенных на кремниевых подложках. Эти пленки являются монокристаллическими, имеют достаточно высокое качество и могут достигать толщины в несколько микрометров и диаметра порядка 100 мм. Структуре и свойствам поверхности таких кристаллических пленок и посвящен данный обзор.

$\beta\text{-SiC}$ имеет кристаллическую структуру типа цинковой обманки (рис. 2). Это означает, что ее решетка состоит из двух гранецентрированных решеток, одна из которых сдвинута по отношению к другой в направлении диагонали куба на одну четверть ее длины. При этом одна из решеток состоит из атомов кремния, другая — из атомов углерода. К тому же в направлении $\langle 100 \rangle$ кубический карбид кремния представляет собой чередующуюся последовательность атомных плоскостей кремния и углерода. В случае идеального кристалла поверхность (100) может быть образована или только атомами Si, или только атомами C.

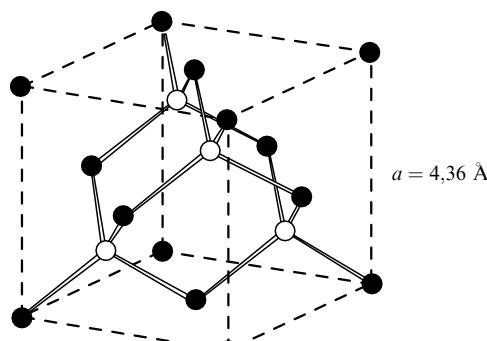


Рис. 2. Кристаллическая структура $\beta\text{-SiC}$.

Вследствие большой разницы в электроотрицательности между атомами кремния и углерода SiC является ионным материалом. Это означает, что значительная часть заряда атомов кремния переносится к атомам углерода. В объеме плоскости атомов углерода заряжены отрицательно, в то время как плоскости атомов кремния — положительно. Эта особенность, в сочетании с тем фактом, что у $\beta\text{-SiC}$ размер элементарной ячейки на 22 % больше, чем у алмаза, и на 20 % меньше, чем у кремния, является основным отличием данного материала от наиболее близких к нему алмаза и кремния.

SiC обладает очень важными свойствами. Благодаря сильной связи $\text{Si}-\text{C}$ его твердость и износостойкость уступают только алмазу и нитриду бора, поэтому он давно используется для производства режущих и полирующих материалов. Однако в настоящее время он рассматривается чаще всего как материал для электроники будущего [2–5]. Широкая запрещенная зона позволяет использовать полупроводниковые свойства SiC при высоких температурах, когда кремний уже проявляет

собственную проводимость. Высокое значение насыщения подвижности электронов в сочетании с высоким напряжением пробоя может использоваться для производства высокочастотных приборов большой мощности. В то же время его теплопроводность превышает таковую для меди, что, в свою очередь, способствует использованию SiC в приборах высокой мощности, благодаря его способности хорошо отводить тепло, выделяемое при работе прибора. И, наконец, нужно отметить его радиационную и химическую стойкость. Эти свойства дают возможность использовать SiC в особо тяжелых условиях работы, например, в ядерных реакторах или в космосе. В таблице 1 приводятся некоторые свойства SiC в сравнении с аналогичными свойствами для кремния.

Таблица 1. Некоторые свойства SiC в сравнении с аналогичными свойствами для кремния

Свойства	SiC	Si
Запрещенная зона, эВ	Прямая 2,4	Непрямая 1,1
Поле пробоя, МВ/см	2,0	0,3
Теплопроводность, Вт/(см·К)	4,9	1,5
Максимальная скорость электронов, 10^7 см/с	2,7	1
Точка плавления, °С	2830	1400

И все же из-за отсутствия простой технологии производства карбид кремния пока еще не может заменить в электронике кремний. Однако благодаря значительным усилиям промышленных лабораторий, особенно в Японии и Америке, в этом направлении все более и более очевиден прогресс [2–5]. Уже в настоящее время карбид кремния используют для производства мощных высокочастотных приборов, способных работать при высоких температурах и в химически агрессивных средах. Кроме того, на его основе изготавливают электролюминесцентные приборы, детекторы видимого и ультрафиолетового излучения. Практически все типы приборов могут быть реализованы на основе SiC: диоды, тиристоры, полевые транзисторы и т.п. Однако из-за большой плотности дефектов возможность производства больших интегральных схем в настоящее время пока находится под вопросом.

Для электроники среди всех политипов наиболее привлекательна кубическая модификация SiC, в частности благодаря особенно высокой подвижности электронов. Однако в настоящее время в промышленности в основном используется гексагональный SiC, так как для него разработана технология производства кристаллов более высокого качества и больших размеров. Тем не менее, β -SiC используется для производства датчиков, работающих при $T \geq 500$ °С. Кроме того, кристаллы кубического карбида кремния являются отличными подложками при выращивании важных для оптики нитридов. И, наконец, β -SiC используется для производства многослойных материалов типа α -SiC/ β -SiC. Запрещенная зона карбида кремния существенно зависит от структуры политипа (от 2,4 эВ для 3С до 3,3 эВ для 4Н). Выращивание кристаллов с такими структурами позволяет реализовать транзисторы на гомопереходах (типа HEMT), которые с успехом могут применяться для работы с высокими частотами и мощностями. Поэтому сейчас прилагаются большие усилия к разработке техно-

логии производства кубической модификации карбида кремния, что, без сомнения, не может не привести к широкому использованию этого материала.

И в заключение этого раздела нельзя не отметить еще одно обнаруженное недавно свойство: на поверхности SiC(100) могут образовываться самоорганизующиеся одномерные нанообъекты (одномерные структуры). Наноструктурами называются объекты, состоящие из элементов, размер которых, по крайней мере в одном из измерений, составляет несколько нанометров или меньше. В общем случае наноструктуры подразделяют на 3 категории: наноструктуры типа 2D (ультратонкие моно- и многослойные пленки), типа 1D (квантовые нити, линейные цепочки атомов) и типа 0D (квантовые кластеры).

В последние несколько лет исследование структуры низкоразмерных объектов и их свойств (электронных, оптических, химических) испытывает настоящий бум [6, 7]. Одномерные структуры получить гораздо сложнее и поэтому, несмотря на значительные усилия, они изучены гораздо хуже, чем структуры типа 0D и 2D. Предложено много методов получения одномерных структур, при этом каждый из них имеет свои преимущества и недостатки.

Один из методов заключается в манипулировании индивидуальными атомами на подложке и создании из этих атомов одномерных объектов желаемой формы [8]. Возможность реализации этого метода появилась с изобретением тунNELьного микроскопа. Преимуществом метода является возможность получения структуры фактически любой заранее заданной формы, недостатком — длительность процесса, ограничивающая возможность создания структур с достаточно большим числом атомов.

Обнаруженное свойство поверхности SiC(100) образовывать самоорганизующиеся одномерные нанообъекты (одномерные структуры) имеет огромное преимущество: можно быстро и в больших количествах выращивать структуры с большим числом атомов в каждом объекте. Этим свойством обладает очень ограниченное число систем, при этом особенно важно, что структуры, получаемые на поверхности SiC(100), проявляют уникальную стабильность в широкой области температур.

В большинстве работ, представленных в этом обзоре, в основном, были использованы высококачественные пленки SiC с поверхностью (100), выращенные группой Thierry Billon в лаборатории CEA-LETI (Гренобль, Франция) на подложках кремния (100) эпитаксией из газовой фазы (CVD — chemical vapor deposition), используя SiH_4 и C_3H_8 . Кроме того, часть образцов была выращена André Leycuras в CRHEA (Sophia-Antipolis, Франция), Yves Monteil в l'Université Claude Bernard (Lyon I, Франция) и в лаборатории профессора Ю.М. Таирова в Электротехническом институте (Санкт-Петербург).

3. β -SiC(100) кремниевая поверхность стехиометрического состава, образованная одним моноатомным слоем кремния

Как было сказано выше, в направлении (100) кубического кристалла карбида кремния имеет место чередование атомных плоскостей кремния и углерода. Поэтому

идеальная поверхность $\beta\text{-SiC}(100)$ может состоять или из атомов Si, или из атомов C. Естественно, можно приготовить поверхность, обогащенную кремнием (напылением избыточного количества Si в условиях вакуума) или обогащенную углеродом (десорбцией кремния). В данном разделе мы представим современное состояние знаний о возможных структурах чистой поверхности (100) кубического карбида кремния. На рисунке 3 схематически представлены различные структурные модели, предложенные для этой поверхности.

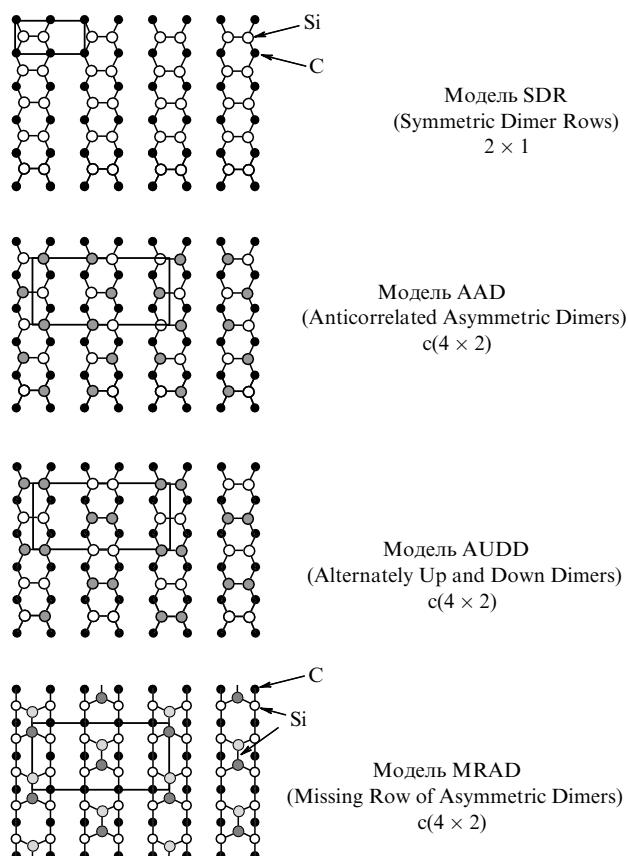


Рис. 3. Модели структур поверхности $\beta\text{-SiC}(100) 2 \times 1$ и $c(4 \times 2)$ (в соответствии с [41]).

Ввиду достаточно большого числа структур, выявленных при изучении чистой поверхности $\beta\text{-SiC}(100)$, первоначальное прочтение предлагаемого ниже раздела может потребовать некоторых усилий. Для облегчения его восприятия можно использовать приведенные в приложении сводные таблицы структур и методов их получения.

3.1. Структура 2×1 кремниевой поверхности $\beta\text{-SiC}(100)$ стехиометрического состава, наблюдаемая при комнатной температуре

Впервые данные о существовании на поверхности $\beta\text{-SiC}(100)$ структуры 2×1 были опубликованы в 1986 г. Dayan [9], Bellina et al. [10] и Kaplan et al. [11]. Методом рассеяния ионов средних энергий (MEIS) Hara et al. [12] выяснили, что поверхность карбида кремния, обладающая этой структурой, имеет один монослой атомов кремния. Поверхность (100) карбида кремния похожа на поверхность (100) чистого кремния при комнатной

температуре, которая имеет структуру 2×1 , состоящую из димеров кремния. При понижении температуры кристалла кремния его поверхность испытывает фазовый переход $\text{Si}(100) 2 \times 1 - \text{Si}(100) c(4 \times 2)$. В этой низкотемпературной поверхностной фазе вдоль цепочки димеров имеет место альтернативное чередование асимметричных димеров. Сразу необходимо отметить, что поверхности многих полупроводников испытывают реконструкцию с образованием димеров. При этом уменьшается число "болтающихся" связей на поверхности, так как атомы группируются в пары (димеры) с образованием σ связей, параллельных поверхности. Оставшиеся "болтающиеся" связи, как правило, хотя и более слабо, но тоже взаимодействуют между собой с образованием π связей, тем самым еще более понижая поверхностную энергию.

Анализируя экспериментальные данные по дифракции медленных электронов с помощью динамической теории дифракции, Powers et al. [13] предложили следующую модель структуры $\beta\text{-SiC}(100) 2 \times 1$: атомы кремния формируют сильно связанные асимметричные димеры, наклоненные в одну сторону и образующие длинные линии в направлении, перпендикулярном к направлению димерной связи.

Что касается теории, то все полуэмпирические расчеты приводят к выводу о наличии сильной связи в димерах для структуры 2×1 . При этом некоторые из них отдают предпочтение асимметричным димерам [14], другие считают, что димеры симметричны [15–22]. С другой стороны, *ab initio* расчеты, выполненные Sabisch et al. [23], Käckell et al. [24] и Catellani et al. [25], приводят к выводам, что межатомная связь в димерах слабая, а межатомное расстояние большое. Эти расчеты противоречат выводам, сделанным на основе экспериментальных данных по дифракции медленных электронов (ДМЭ) [13]. Однако, как будет показано ниже, при комнатной температуре структура 2×1 образуется, по-видимому, вследствие загрязнения поверхности, наличия большого числа дефектов или просто ее дегенерации. На самом деле эта структура существует при $T \geq 400^\circ\text{C}$ (см. ниже), а основной структурой, присущей поверхности $\beta\text{-SiC}(100)$ при комнатной температуре, является $c(4 \times 2)$.

3.2. Структура $c(4 \times 2)$ кремниевой поверхности $\beta\text{-SiC}(100)$ стехиометрического состава

Другая структура — $c(4 \times 2)$ на поверхности $\beta\text{-SiC}(100)$ была обнаружена в 1989 г. Kaplan et al. [26]. По аналогии со структурой $\text{Si}(100) c(4 \times 2)$ была предложена модель, согласно которой поверхность $\beta\text{-SiC}(100) c(4 \times 2)$ состоит из асимметричных антикоррелированных димеров (см. рис. 3).

Экспериментально эту структуру получить очень трудно, поэтому большинство исследовательских групп, как экспериментаторов, так и теоретиков, долгое время ее даже не упоминали. Только в 1996 г. было опубликовано первое исследование структуры $c(4 \times 2)$ [27]. При этом использовался метод фотоэмиссии с глубокого уровня Si_{2p} . Декомпозиция спектра этого уровня на три компоненты (две из которых — поверхностные), а также слишком большое отношение суммы интенсивностей поверхностных компонент к интенсивности объемной компоненты привели к выводу о том, что на поверхности $\beta\text{-SiC}(100)$ находится более одного монослоя атомов кремния.

В том же 1996 г. F. Semond et al. провели первое исследование этой структуры с помощью сканирующей туннельной микроскопии (СТМ) [28]. Было доказано, что структура $c(4 \times 2)$ является характеристикой поверхности (100), имеющей один монослой кремниевых атомов, в то время как структура 2×1 появляется, по-видимому, вследствие загрязнения поверхности, наличия большого числа дефектов или просто ее дегенерации.

Измерения, проведенные авторами [28], фактически были первыми, которые прямым способом позволили осуществить идентификацию димеров кремния на поверхности (100). Эти измерения в сочетании с симуляцией изображения СТМ, выполненной группой C. Joachi [29], позволили предложить еще одну модель структуры $c(4 \times 2)$ [29]. В соответствии с этой моделью, поверхность состоит из упорядоченно расположенных симметричных димеров атомов кремния. Имеющие дальний порядок димеры располагаются поочередно выше и ниже некоторого среднего уровня. Это альтернативное расположение сопровождается очень существенным перераспределением заряда между соседними димерами: димеры, расположенные выше, имеют более высокую плотность оккупированных состояний. Эта модель получила название AUDD (Alternately Up and Down Dimers). Несколько позже в работе Douillard et al. [30] с помощью *ab initio* вычислений была подтверждена эта модель. Нашло подтверждение альтернативное расположение димеров выше и ниже некоторого среднего уровня, доказан предполагаемый ранее перенос заряда, показано, что димеры, расположенные ниже, короче тех, что расположены выше ($2,27 \text{ \AA}$ и $2,54 \text{ \AA}$ соответственно), а разница в их высоте составляет $0,23 \text{ \AA}$. Заметим однако, что симулирование изображения СТМ, выполненное в [29], предсказывало разницу в высоте димеров, равную $0,1 \text{ \AA}$. В 1998 г. группа под руководством J. Gali провела новые *ab initio* расчеты для этой поверхности [31]. Во-первых, были подтверждены предыдущие расчеты, выполненные той же группой [25]. Показано, что в случае отсутствия напряженного состояния поверхности наиболее стабильной является структура 2×1 , которая состоит из длинных димеров со слабой связью. Вообще, поверхность испытывает напряженное состояние, но большое количество дефектов (димерных вакансий) уменьшает это напряжение и стабилизирует структуру 2×1 . Однако в тех же расчетах показано, что при наличии некоторого дополнительного напряжения, приложенного к поверхности, последняя демонстрирует структуру $c(4 \times 2)$ и подтверждает AUDD модель. Имея в виду способ получения пленок кубического карбида кремния, нетрудно понять, что избежать наличия напряженного состояния практически невозможно. Это напряжение и приводит к стабилизации структуры $c(4 \times 2)$. В работе [31] представлена также симуляция СТМ изображений (в режиме заполненных состояний), которая хорошо соглашается с изображениями, полученными в [28].

Необходимо сделать замечание по поводу напряженного состояния. Кристаллическая структура β -SiC фактически такая же, как у кремния, но параметр элементарной ячейки на 20 % меньше, чем у кремния. Это огромное различие в параметрах элементарных ячеек и приводит к сильному напряженному состоянию в пленке. Чтобы скомпенсировать такое различие, на кремниевую подложку предварительно наносится слой углерода. Тем не менее, из-за того, что выращивание происходит при

высокой температуре, а разница в коэффициентах термического расширения Si и SiC велика, в пленке всегда создается сильное напряженное состояние (даже при том, что пленка имеет толщину в несколько микрометров).

Совсем недавно еще одна группа исследователей на основе проведенных ею *ab initio* вычислений предложила новую модель структуры $c(4 \times 2)$ [32]. Эта модель, названная MRAD (Missing Row Asymmetric Dimers), предполагает наличие 1,5 монослоя кремния на поверхности (100). (В модели AUDD — 1 монослой атомов кремния.) Эта величина (1,5 монослоя) является довольно странной [12, 33] и не соответствует существующим к настоящему моменту экспериментальным данным [34].

В следующем разделе, где описано исследование поверхности $c(4 \times 2)$ методом фотоэмиссии из глубокого уровня Si_{2p} , будет показано, что модель AUDD более предпочтительна по сравнению с MRAD.

3.2.1. Исследование поверхности $c(4 \times 2)$ методом фотоэлектронной эмиссии

До результатов, представленных в данном разделе, фактически была только одна публикация, где изучалась структура $c(4 \times 2)$ [27]. В частности, методом фотоэлектронной эмиссии исследовалась структура глубокого уровня Si_{2p} . К недостаткам этой работы следует отнести следующее:

- 1) в то время приготовление поверхности с данным типом структуры плохо поддавалось контролю;
- 2) была использована только одна энергия фотонов;
- 3) энергетическое разрешение не превышало 0,4 эВ.

В этой работе M.L. Shek [27] осуществила разложение спектра на 3 компоненты, одна из которых — объемная и две — поверхностные. Отношение суммы интенсивностей поверхностных компонент к интенсивности объемной компоненты привели автора [27] к выводу о том, что содержание кремниевых атомов на внешней поверхности превышает один монослой. Этот вывод был использован Pollmann et al. для разработки MRAD модели [32] (см. выше).

Для проверки реальности той или иной модели недавно было проведено детальное исследование структуры $c(4 \times 2)$ методом фотоэлектронной эмиссии глубокого уровня Si_{2p} [35]. Исследование было проведено на SU3 линии источника синхротронного излучения Super-ACO (L.U.R.E Orsay). При этом использовался широкий спектр энергий фотонов с целью получить спектры глубокого уровня как в режимах повышенной чувствительности к поверхности и объему, так и промежуточные. Энергетическое разрешение составляло 150 мэВ. Структура поверхности соответствовала однодоменной структуре $c(4 \times 2)$, что регулярно контролировалось по наличию четких рефлексов в ДМЭ.

Были получены спектры глубокого уровня Si_{2p} в интервале энергий фотонов от 115 до 135 эВ. Замечено, что интенсивность пика, расположенного со стороны наименьших энергий связи, увеличивается с ростом энергии фотонов и достигает максимума при энергии фотонов 130 эВ, которая, в свою очередь, соответствует также максимальной чувствительности к поверхности (отношение сигнала от поверхности к таковому от объема) для случая возбуждения электронов с уровня Si_{2p} . Пик, находящийся на стороне больших энергий связи, напротив, увеличивается в интенсивности при уменьшении энергии фотонов вплоть до 115 эВ. Такая

энергия фотонов при изучении кремния используется для исследования атомов, находящихся в объеме. Центральная часть спектра сохраняет высокую интенсивность во всем диапазоне энергий фотонов и содержит, таким образом, вклад как от поверхностных атомов, так и от объемных.

Для лучшего понимания спектров они были разложены на дублеты Voigt [36]. Для разложения были приняты параметры, которые обычно используются для обработки экспериментальных спектров Si_{2p} [37]: ширина Лоренца — 85 эВ и спин-орбитальное расщепление — 602 мэВ. Пик S1, отстоящий достаточно далеко от всех других, позволил оценить гауссову ширину поверхностных компонент спектра: 0,55 эВ. Для объемного пика была использована ширина распределения Гаусса ≈ 0,6 эВ. Эта величина примерно в 3 раза больше, чем обычно используется при исследовании монокристаллического кремния, но вполне согласуется с другими фотоэмиссионными исследованиями SiC [38, 39].

На рисунке 4 представлены спектры для трех энергий фотонов и их разложение на компоненты. Это единственный способ, позволяющий разложить спектры для всех изученных энергий фотонов, и, как будет показано ниже, это разложение имеет физическое объяснение. В таблице 2 представлены результаты разложения. Поведение компоненты SB2 аналогично объемной компоненте B, в

Таблица 2. Результаты разложения на компоненты спектров глубокого уровня Si_{2p}, полученных в интервале энергий фотонов от 115 до 135 эВ

Компоненты	Энергия связи, эВ	Положение относительно пика B, эВ	Ширина Гаусса, эВ
S1	~99,8	-1,43	0,55
S2	~100,66	-0,54	0,55
SB1	~100,8	-0,40	0,55
B	~101,2	0,60	0,60
SB2	~101,51	+0,31	0,55

то время как поведение SB1 (промежуточное между объемной и поверхностной компонентами) больше напоминает поведение объемной компоненты при малых энергиях фотонов и поверхностной — при более высоких энергиях.

Для того чтобы определить физическое происхождение каждой из компонент, изучена эволюция их относительной интенсивности с изменением энергии фотонов. При этом оказалось, что интенсивности компонент S1 и S2 практически совпадают для каждой энергии во всем исследованном интервале энергий фотонов. Их интенсивность возрастает с увеличением энергии фотонов от 115 до 130 эВ и затем слегка уменьшается при 135 эВ. Эта зависимость находится в очень хорошем соответствии с поведением поверхностных компонент. Оно связано с эволюцией длины свободного пробега электронов, возбужденных с уровня Si_{2p} в том же диапазоне энергий фотонов. Таким образом, мы можем идентифицировать пики S1 и S2 как поверхностные. Противоположное поведение компоненты B позволяет идентифицировать ее как объемную.

Для лучшего понимания компонент SB1 и SB2 было прослежено поведение всех компонент, интенсивность которых нормирована на суммарную интенсивность поверхностных компонент S1 и S2. Из рисунка 4 видно, что все компоненты, кроме S1 и S2, ведут себя по типу объемных компонент; такое поведение более четко прослеживается для компонент B и SB2 и менее — для SB1.

И наконец, для того чтобы количественно оценить глубину зондирования, в работе использованы относительные интенсивности для определения средней длины свободного пробега электронов для каждой энергии. Для этого считалось, что суммарная интенсивность $I_{S1} + I_{S2}$ соответствует эмиссии от одного наружного (поверхностного) монослоя кремниевых атомов. Кроме того, допускалось, что измеренная интенсивность уменьшается экспоненциально с изменением расстояния от поверхности излучающего электрона атома (по определению длины свободного пробега). В течение всех измерений угол эмиссии составлял 45° относительно нормали к поверхности. Тогда отношение интенсивности фотоэлектронов I_n от n -й плоскости атомов, расположенной на расстоянии $d \times n$ от поверхности, к интенсивности от первого монослоя поверхностных атомов I_0 дается выражением

$$\frac{I_n}{I_0} = \exp\left(-\frac{1,414nd}{\lambda}\right),$$

где λ — средняя длина свободного пробега электронов для данной энергии и $d = 2,2 \text{ \AA}$ — расстояние между двумя ближайшими плоскостями кремния.

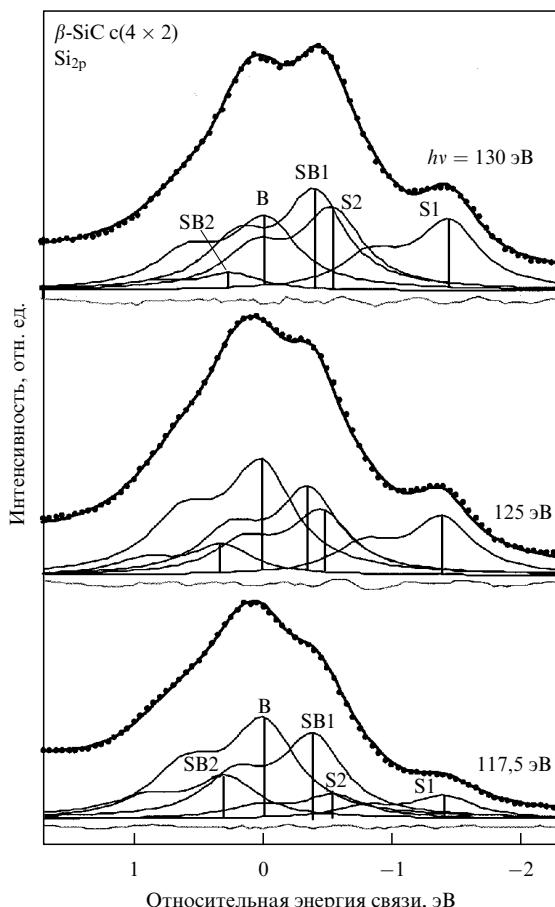


Рис. 4. Разложение фотоэмиссионных спектров Si_{2p} структуры c(4 × 2) для трех энергий возбуждающих фотонов: $h\nu = 130$, 125 и 117,5 эВ. Спектр при 130 эВ наиболее чувствителен к поверхности, в то время как при 117,5 эВ — наиболее чувствителен к объему [35].

Далее, отношение суммы интенсивностей от всех плоскостей, кроме наружной, к интенсивности от этой внешней плоскости дается выражением

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{I_n}{I_0} = \frac{\exp(-1,414d/\lambda)}{1 - \exp(-1,414d/\lambda)}.$$

Таблица 3 содержит результаты этих вычислений: в ней представлена средняя длина свободного пробега электрона λ как функция относительной интенсивности объема/поверхности, полученной из декомпозиции. Оцененная величина средней длины свободного пробега электрона меняется между 6 и 21 Å при изменении энергии фотонов в диапазоне 135–115 эВ. Заметим, что чем больше длина свободного пробега электронов в твердом теле, тем с большей глубины они могут выйти из кристалла без потери энергии и, тем самым, большая доля информации об объеме содержится в спектре (говорят: "большая чувствительность к объему"). Полученная зависимость прекрасно согласуется с "универсальной кривой". Опять же обратим внимание на то, что наибольшая чувствительность к поверхности оказалась для электронов, возбужденных фотонами с энергией, равной 130 эВ. Таким образом, полученные экспериментальные результаты являются прямым количественным доказательством ранее сделанного предположения, согласно которому компоненты S1 и S2 представляют собой эмиссию от атомов, непосредственно находящихся на поверхности и образующих одну атомную плоскость. Поэтому есть основания предположить, что компоненты S1 и S2 происходят от димеров, расположенных выше и ниже некоторого среднего уровня в модели AUDD сверхструктуры c(4×2). Однократные интенсивности S1 и S2 свидетельствуют о том, что каждая из них происходит от одинакового количества атомов, а большая разница в энергетическом положении между этими компонентами говорит о перераспределении заряда между поднятыми и опущенными димерами. Отметим аналогию с поверхностью Si(100) c(4×2), где две поверхностные компоненты, разделенные по энергии на 0,55 эВ [37], происходят, как было установлено, от поднятых и опущенных атомов асимметричных димеров, составляющих поверхность. В этом случае имеет место перенос заряда от низко расположенных атомов к атомам, расположенным выше, в то время как в случае SiC — от низко расположенных димеров к расположенным выше димерам. Это предположение находится в прекрасном соответствии с полученными данными по

СТМ, показывающими значительную разницу между зарядовыми состояниями двух типов димеров.

Напомним, что недавно на основе *ab initio* вычислений была предложена новая модель структуры c(4×2) [33]. Эта модель MRAD предполагает наличие 1,5 монослоя кремния на внешней поверхности вместо монослоя кремния в модели AUDD. В рамках модели MRAD можно предположить, что компоненты S1 и S2 происходят от димеров поверхности, расположенных выше и ниже некоего среднего уровня, а SB1 или SB1 + SB2 — от атомов Si первой полностью заполненной плоскости. Тогда интенсивность SB1 + SB2 должна быть в два раза выше интенсивности S1 + S2. Это не соответствует данным по поведению компонент, интенсивность которых нормирована на суммарную интенсивность поверхностных компонент S1 и S2 (при энергии фотонов, соответствующей случаю наибольшей чувствительности к анализу поверхности: $I_{SB1} + I_{SB2} \sim I_{S1} + I_{S2}$). Более того, чтобы соответствовать модели MRAD, разложение должно содержать две другие компоненты одинаковой интенсивности, которые соответствовали бы атомам выше или ниже расположенных димеров.

Остается обсудить происхождение компонент SB1 и SB2 в рамках модели AUDD. Как было показано выше, эти компоненты соответствуют эмиссии от атомов кремния, находящихся в объеме. Тем не менее, даже при 115 эВ глубина зондирования остается небольшой (22 Å ~ десяток атомных плоскостей кремния). Поэтому следует предположить, что сверхструктура по модели AUDD не только вызывает перестройку в поверхностном слое атомов, но и влияет на расположение атомов нескольких приповерхностных атомных плоскостей. Видимо, сильное перераспределение заряда, наблюдаемое в поверхностном слое, индуцирует перераспределение заряда и в лежащих ниже плоскостях. Так, для кремния теоретические расчеты показывают, что в случае реконструкции поверхностной структуры c(4×2) изменения атомного расположения и электронной структуры распространяются, по крайней мере, на 3 атомные плоскости, лежащие ниже первого поверхностного монослоя [40]. По-видимому, аналогичного поведения следует ожидать и для SiC, учитывая, что кристаллическая решетка SiC имеет ионный характер. В объеме каждая атомная плоскость кремния передает часть заряда двум расположенным с обеих сторон атомным плоскостям углерода. В то же время наружная плоскость атомов кремния может передать часть заряда только одной плоскости углерода. Таким образом, первая от поверхности плоскость углерода должна отличаться по заряду от остальных плоскостей углерода. Отсюда также следует, что и расположенная за ней кремниевая плоскость должна отличаться от таковых в объеме. Таким образом, расчеты, использующие кластерные модели, должны включать в рассмотрение довольно большое число атомных плоскостей для того, чтобы учесть общие структурные изменения, вызванные поверхностной перестройкой.

В заключение этого раздела еще раз обратим внимание на то, что в [35] предложено разложение спектра глубокого уровня Si_{2p} поверхности c(4×2) кубического карбида кремния на пять компонент, две из которых соответствуют выше и ниже расположенным относительно некоторого среднего положения кремниевым димерам поверхности. Две другие компоненты (кроме объемной)

Таблица 3. Средняя длина свободного пробега электрона λ как функция относительной интенсивности объема/поверхности, полученной из декомпозиции пиков

Энергия фотонов, эВ	Относительная интенсивность $(I_B + I_{SB1} + I_{SB2})/(I_{S1} + I_{S2})$	Оцененная средняя длина свободного пробега λ , Å
115	6,35	21,3
117,5	5,15	17,5
120	4	13,9
122,5	2,5	9,2
125	1,95	7,5
127,5	1,55	6,2
130	1,45	5,9
135	2,75	10

отражают перестройку лежащих глубже атомных плоскостей кремния. Это исследование находится в удовлетворительном согласии с моделью AUDD. Более того, спектроскопическая идентификация наличия альтернативного чередования ниже и выше расположенных димеров оказалась очень важной для изучения химических реакций этой поверхности с адсорбатами [41].

В следующем разделе будет описано еще одно необычное свойство кремниевой поверхности $\beta\text{-SiC}(100)$ стехиометрического состава: при $T \sim 400^\circ\text{C}$ обнаружен обратимый фазовый переход полупроводник $c(4 \times 2) \leftrightarrow c(2 \times 1)$. Более того, оказалось, что сверхструктура 2×1 может появляться не только из-за наличия дефектов, но существовать самостоятельно при повышенных температурах ($T > 400^\circ\text{C}$).

3.3. Обратимый фазовый переход $c(4 \times 2) \leftrightarrow (2 \times 1)$ на поверхности $\beta\text{-SiC}(100)$

3.3.1. Фазовый температурный переход $c(4 \times 2) \leftrightarrow (2 \times 1)$ на поверхности $\beta\text{-SiC}(100)$. Как указывалось выше, ранее считалось, что структура $\beta\text{-SiC}(100) 2 \times 1$ может существовать только в результате загрязнения или наличия дефектов на поверхности $c(4 \times 2)$. Однако оказалось, что при повышенных температурах эта структура может существовать самостоятельно [42, 43]. Эксперимент проводился на тунNELЬНОМ сканирующем микроскопе ВТ-СТМ фирмы Omicron, позволяющем работать в интервале температур от -230°C до $+900^\circ\text{C}$.

Кроме того, измерения проводились на электронном спектрометре фирмы VG с угловым разрешением и полусферическим анализатором электронов. Структура поверхности контролировалась также с помощью ДМЭ. На рисунке 5а представлена СТМ $100 \times 100 \text{ \AA}$ топограмма от поверхности $\beta\text{-SiC}(100)$, полученная при комнатной температуре, которая является типичной для структуры $c(4 \times 2)$. В правом нижнем углу представлена соответствующая картина ДМЭ. На рисунке 5б представлено аналогичное СТМ изображение того же образца после нагрева его до 400°C . Это изображение является типичным для структуры 2×1 . Ранее такое изображение

получали при комнатной температуре от плохо подготовленной поверхности. Картина ДМЭ, подтверждающая, что это действительно структура 2×1 , представлена в правом нижнем углу СТМ изображения. Изменение температуры образца до 25°C и обратно до 400°C обратимым образом приводило к получению топограмм, идентичных представленным соответственно на рис. 5а, б.

Для сравнения характеристик этих структур была проведена сканирующая тунNELЬНАЯ спектроскопия в ≈ 1000 точках как при 25°C , так и при 400°C . Усредненные кривые этих измерений представлены на рис. 6. На вольт-амперной характеристике структуры $c(4 \times 2)$ (кривая а) виден плоский горизонтальный участок размером $\sim 1,7$ В, явно указывающий на полупроводниковые свойства поверхности.

Напомним, что в объеме полупроводника величина фундаментальной щели составляет 2,3 эВ. С другой стороны, вольт-амперная характеристика структуры 2×1 (кривая б), снятая при 400°C , почти линейна, не имеет какой-либо измеримой щели, что указывает на металлический характер этой структуры.

Дополнительная информация о фазовом переходе была получена из исследований электронной структуры поверхности $c(4 \times 2)$ методом фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением. Обнаруженный в фотоэлектронных спектрах пик $\sim 1,3$ эВ ниже уровня Ферми (E_F), характерный для структуры $c(4 \times 2)$, обратимо исчезал и появлялся при изменении температуры в интервале $25\text{--}400^\circ\text{C}$. Исчезновение пика при повышенных температурах доказывает, что структура $c(4 \times 2)$ претерпевает фазовое превращение.

На рисунке 7 представлено схематическое изображение обсуждаемых сверхструктур. По-видимому, при 400°C (структуре 2×1) линии, соединяющие соседние атомы в димере, параллельны поверхности и все димеры находятся на одном уровне. По аналогии с расчетом [44], выполненным для точно такой же конфигурации димеров на поверхности $\text{Si}(100) 2 \times 1$, обнаруженная в данной работе сверхструктура 2×1 должна быть металличе-

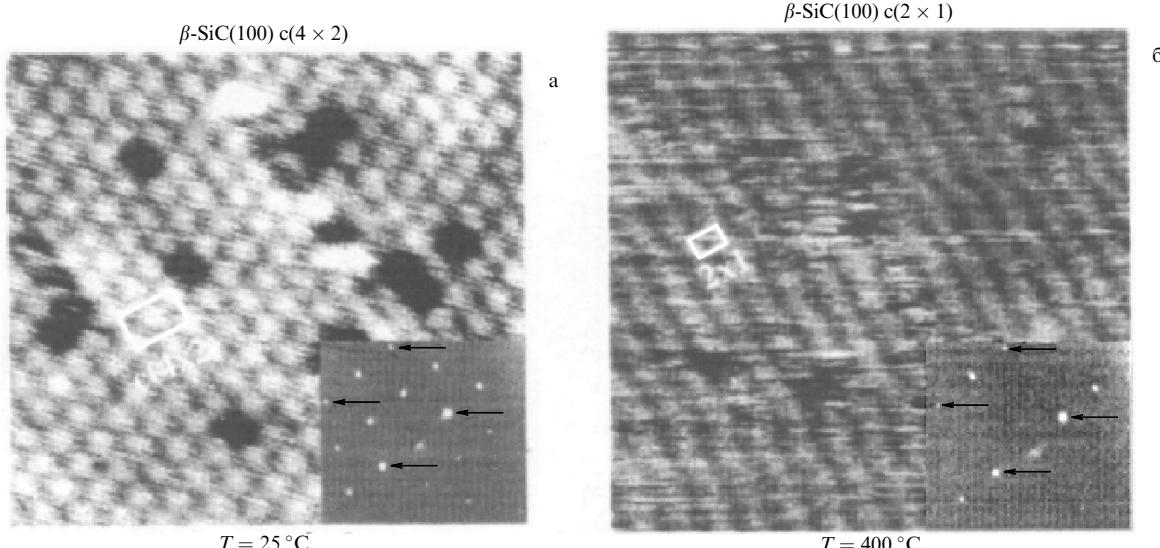


Рис. 5. $100 \times 100 \text{ \AA}$ СТМ изображение (заполненные состояния): (а) $\beta\text{-SiC}(100) c(4 \times 2)$ при 25°C ; (б) $\beta\text{-SiC}(100) 2 \times 1$ при 400°C ; $V = +3,2$ В, $I = 0,12$ нА. Соответствующие диаграммы ДМЭ ($E_p = 60$ эВ) представлены в правых нижних углах, где стрелки указывают на рефлексы (1×1) [42].

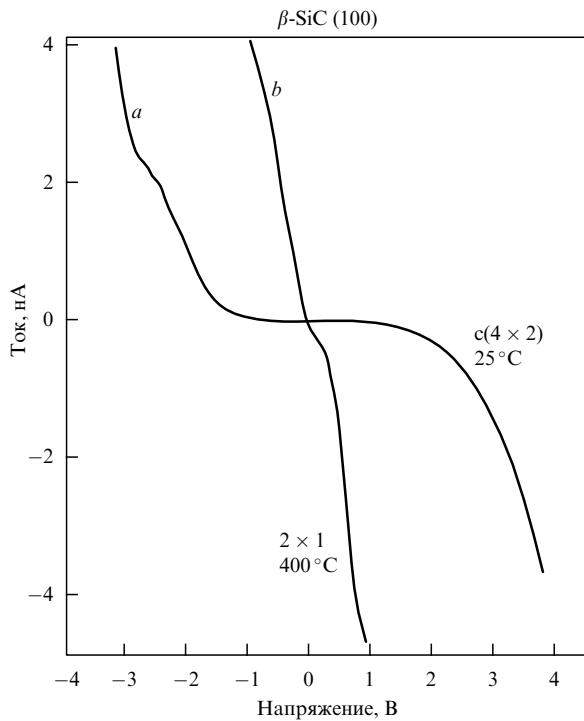


Рис. 6. Вольт-амперные характеристики, полученные методом СТС для: β -SiC(100) $c(4 \times 2)$ при 25°C (кривая *a*) и β -SiC(100) 2×1 при 400°C (кривая *b*). Каждая кривая является усреднением около 1000 ВАХ, снятых с точек, равномерно распределенных по участку поверхности $100 \times 100 \text{ \AA}$. Образец заземлен [42].

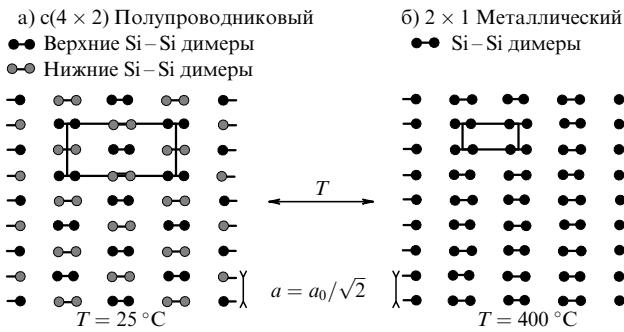


Рис. 7. Схема обратимого фазового перехода на поверхности β -SiC(100) от структуры $c(4 \times 2)$, которая имеет чередующуюся последовательность "вверх–вниз" димеров в ряду, к структуре 2×1 , димеры которой расположены на одном уровне. Указаны также соответствующие элементарные ячейки [42].

ской. Охлаждение образца, видимо, приводит к пайерловскому переходу и, как следствие, к появлению щели на уровне Ферми. При этом в соответствии с [45] линии, соединяющие соседние атомы в димере, параллельны поверхности, в то время как вдоль цепочки димеров имеет место чередование "вверх–вниз".

3.3.2. Обратимый фазовый переход $c(4 \times 2) \leftrightarrow (2 \times 1)$ на поверхности β -SiC(100), вызванный адсорбцией остаточных газов. Еще раз напомним, что до недавнего времени считалось, что кремниевая поверхность β -SiC (100) стехиометрического состава демонстрирует структуру 2×1 по аналогии с Si(100) и Ge(100). Это было показано как теоретически, так и в многочисленных экспериментах. Однако недавно с помощью ДМЭ было доказано,

что все эти экспериментальные данные были получены на поверхностях низкого качества: с большим количеством дефектов и/или загрязнений [3–5, 28, 46–49]. Заметим, что и в [8], и в расчетах [50] тоже были выдвинуты предположения, подтверждающие это утверждение. На самом деле оказалось, что тщательно приготовленная поверхность демонстрирует при комнатной температуре структуру $c(4 \times 2)$. Более того, эта структура не является аналогом и низкотемпературной фазы на поверхностях кремния и германия. В отличие от Si и Ge, она представляет собой чередующуюся последовательность выше и ниже расположенных симметричных димеров (параллельных поверхностей): модель AUDD [8]. Как будет показано ниже, в пользу этой модели говорят и результаты вычислений [50, 51].

Однако кроме данных по ДМЭ, а также предположений, высказанных в [8, 50], до результатов, опубликованных в работе [52], не было прямых доказательств того, что традиционно получаемая ранее и являвшаяся объектом многочисленных исследований при комнатной температуре структура 2×1 фактически является характеристикой плохо приготовленной поверхности. В данном разделе с помощью СТМ исследований прямым способом доказано, что адсорбция незначительных количеств остаточных газов в сверхвысоковакуумной установке фактически приводит к обратимому фазовому переходу $c(4 \times 2) \leftrightarrow (2 \times 1)$. Этим исследованием одновременно доказана большая чувствительность структуры $c(4 \times 2)$ к адсорбции остаточных газов [52]. Измерения были проведены на туннельном сканирующем микроскопе ВТ-СТМ фирмы Omicron при комнатной температуре. Давление в спектрометре поддерживалось на уровне 4×10^{-11} Торр. В качестве дополнительного контроля состояния поверхности использовался метод ДМЭ.

На рисунке 8а представлено $150 \times 150 \text{ \AA}$ СТМ изображение атомарно-чистой поверхности β -SiC(100) стехиометрического состава со структурой $c(4 \times 2)$. Изображение зарегистрировано при комнатной температуре в режиме заполненных электронных состояний. В левом верхнем углу рис. 8а представлена дифракционная картина этой поверхности. Она получена методом ДМЭ и также подтверждает наличие структуры $c(4 \times 2)$. СТМ изображение представляет собой систему ярких пятен, образующих псевдогексагональную картину, и аналогично полученному ранее в [8], где оно ассоциировалось с находящимися выше среднего уровня димерами кремния (AUDD модель). С помощью симуляции СТМ изображений было также показано [8], что, несмотря на небольшую разницу в высоте между чередующимися димерами ($0,1 \text{ \AA}$), в СТМ методе ниже расположенные димеры "невидимы" для зондирующей иглы. Чтобы определить влияние остаточных газов на структуру $c(4 \times 2)$, образец был оставлен на 14 часов в сверхвысоковакуумном спектрометре при давлении остаточных газов (в основном, H_2) $\approx 5 \times 10^{-11}$ Торр. Полученное затем в режиме заполненных состояний $150 \times 150 \text{ \AA}$ СТМ изображение этой поверхности представлено на рис. 8б. Как видим, наиболее заметное отличие от изображения на рис. 8а заключается в отсутствии характерного центрированного псевдогексагона. Вместо этого мы наблюдаем набор близко расположенных параллельных рядов. Периодичность в перпендикулярном к рядам направлении составляет $6,2 \text{ \AA}$, что соответствует примерно удвоенному параметру нереконструированной

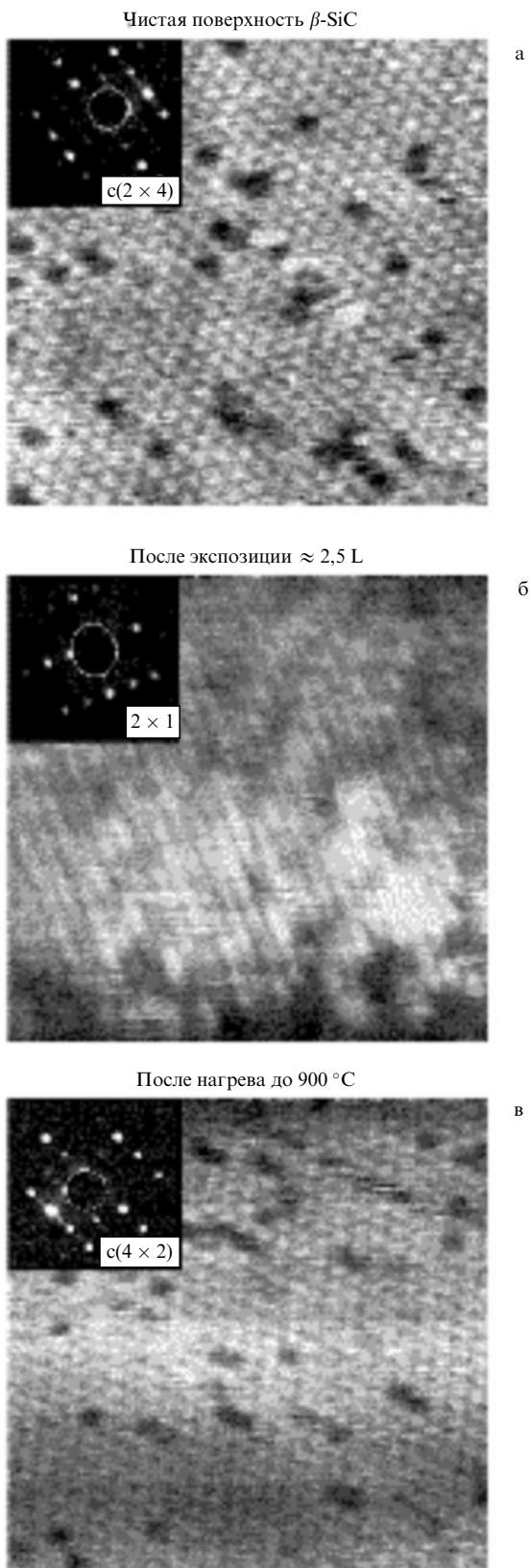


Рис. 8. 150 × 150 Å СТМ изображения: (а) атомарно-чистой поверхности $\beta\text{-SiC}(100)$ $c(4 \times 2)$; (б) $\beta\text{-SiC}(100)$ 2×1 , полученной после выдержки в течение 14 ч в вакууме 5×10^{-11} Торр структуры (а); (в) поверхности (б) после короткого нагрева до 900 °С. Изображения зарегистрированы при комнатной температуре в режиме заполненных электронных состояний. В левом верхнем углу каждой топограммы — соответствующая каждой поверхности ДМЭ фотография, подтверждающая наличие каждой структуры [52].

поверхности (3,08 Å). Никакой периодичности в направлении ряда разрешить не удалось. В дополнение к представленному СТМ изображению в левом верхнем углу рис. 8б представлена также полученная методом ДМЭ четкая дифракционная картина, соответствующая этой же поверхности. Фотография прекрасно подтверждает наличие структуры 2×1 , обнаруженной методом СТМ. Экспозиция в атмосфере остаточных газов, полученная поверхностью, соответствует 2,5 лангмюр (L) (1 лангмюр (L) = 10^{-6} Торр с). Однако можно выдвинуть контраргумент такому объяснению полученных результатов. Предположим, что на самом деле не поверхность подверглась значительным изменениям в течение 14-часовой выдержки, а произошло простое загрязнение вольфрамовой зондирующей иглы, которое и привело к невозможности получения атомного разрешения поверхности. Для проверки этого предположения образец нагревали до 900 °С и выдерживали при этой температуре в течение 30 с. Такой прогрев удаляет адсорбат с поверхности образца и в то же время не приводит к десорбции кремния, сохраняя таким образом неизменной стехиометрию поверхности. Поверхность иглы нагреву не подвергалась и поэтому осталась неизменной. На рисунке 8в представлено 150 × 150 Å СТМ изображение поверхности образца после такого прогрева. Оно получено также в режиме заполненных состояний. Явно видна структура $c(4 \times 2)$, которую мы уже наблюдали ранее на чистой поверхности (рис. 8а). Соответствующая четкая дифракционная картина, полученная методом ДМЭ от этой же поверхности и подтверждающая восстановление структуры $c(4 \times 2)$, также представлена на рис. 8в в левом верхнем углу. Таким образом, в [52] показано, что на кремниевой поверхности $\beta\text{-SiC}(100)$ стехиометрического состава при комнатной температуре имеет место обратимый фазовый переход $c(4 \times 2) \leftrightarrow (2 \times 1)$, вызванный адсорбцией–десорбцией остаточных газов сверхвысоковакуумного спектрометра. Одновременно прямым способом было доказано, что образование поверхностной сверхструктурой 2×1 может являться следствием загрязнения поверхности, как ранее было предположено в экспериментах, выполненных с помощью ДМЭ [3–5, 28, 46–49]. Это объясняет тот факт, что поверхностную структуру $c(4 \times 2)$ долго не могли получить и в течение длительного времени считали, что при комнатной температуре структура 2×1 является основной для кремниевой поверхности $\beta\text{-SiC}(100)$ стехиометрического состава. Кроме того, становится понятным, почему сверхструктуру $c(4 \times 2)$ трудно изучать по сравнению с другими структурами поверхности $\beta\text{-SiC}(100)$. Поскольку доминирующей составляющей остаточных газов является молекулярный водород, то, по-видимому, именно он ответствен за изменения структуры поверхности.

Таким образом, поверхностная структура может подвергаться существенным изменениям под влиянием небольшой адсорбции. При этом адсорбат существенно изменяет локальное распределение заряда, приводящее от альтернативного чередования выше и ниже расположенных димеров к расположению их всех на одной и той же высоте. Удаление этого газового адсорбата с поверхности кратковременным нагревом до 900 °С приводит к восстановлению распределения заряда между соседними димерами и первоначальной сверхструктурой, характерной для атомарно-чистой поверхности стехиометриче-

ского состава. Сразу обратим внимание, что природа этого явления, вызванного адсорбцией остаточных газов, совершенно отлична от обнаруженного нами и описанного выше обратимого температурного фазового перехода $c(4 \times 2) \leftrightarrow (2 \times 1)$.

3.4. Одномерный характер металлической проводимости сверхструктуры 2×1 на поверхности β -SiC(100)

В разделе 3.3.1 методом СТС было показано, что структура 2×1 поверхности (100) проявляет металлическую проводимость. Однако, как правило, по результатам СТС-спектроскопии нельзя однозначно утверждать, что поверхность проявляет действительно металлические свойства. Одним из главных методов, позволяющих доказать "металлическость" поверхности, является фотоэмиссионная спектроскопия (ФЭС). Поэтому в работе [53] методом ФЭС в окрестности уровня Ферми были проведены сравнительные исследования электронной структуры валентной зоны поверхности β -SiC(100) $c(4 \times 2)$ при 25°C (до фазового перехода) и β -SiC(100) 2×1 при $T > 400^\circ\text{C}$ (после фазового перехода). Ниже будет показано, что данные фотоэлектронной спектроскопии вблизи уровня Ферми однозначно демонстрируют наличие эмиссии, а следовательно, и металлической проводимости. Более детальный анализ показал [51], что одним из наиболее вероятных механизмов поверхностной проводимости структуры 2×1 является одномерная проводимость. Сравнительный анализ спектров глубокого уровня до и после фазового перехода также подтверждает правомерность такого вывода. Возможная квазидимерная проводимость поверхности β -SiC(100), заканчивающейся атомной плоскостью кремния, может быть причиной существенного отличия свойств этой поверхности от аналогичной на первый взгляд поверхности Si(100).

Фотоэмиссионные исследования были проведены на VUV линии источника синхротронного излучения ELETTRA (Триест, Италия) с использованием SGM монохроматора [53]. Эмиттированные электроны анализировались с помощью электростатического сферического анализатора с угловым разрешением. Энергетическое разрешение (вместе с температурным уширением) составляло 200 мэВ, в то время как угловое — $\pm 0,5^\circ$. Поскольку исследование структуры 2×1 необходимо проводить при $T > 400^\circ\text{C}$, нужно было разработать метод импульсного нагрева образца. Действительно, для нагрева методом прямого прохождения тока надо приложить к образцу разность потенциалов. В результате на участке поверхности, с которой эмиттируются направляемые в анализатор электроны, возникает градиент потенциала. Таким образом, при реальной длине образца ~ 10 мм, размере анализируемого участка образца ~ 1 мм и приложенной к образцу разности потенциалов ~ 10 В кинетическая энергия эмиттированных электронов для различных точек анализируемого участка может отличаться на 1 эВ. Если принять во внимание, что энергетическое разрешение даже при высокой температуре образца составляет ~ 200 мэВ, то становится ясно, что проводить измерения невозможно, так как фактическое энергетическое разрешение в таком случае становится более 1000 мэВ. Метод импульсного нагрева, разработанный и использованный в этих [53] измерениях, схематически заключался в следующем.

Через образец пропускался импульсный ток прямоугольной формы в координатах ток–время. Длительность импульса тока 50 мс. Это время, в течение которого происходил нагрев образца. Последующие 50 мс образец был заземлен, и именно в этот период осуществлялся сбор и анализ эмиттируемых электронов. Благодаря относительно большой массе образца, его температура во времени практически не менялась.

Как уже упоминалось выше, фотоэмиссионная спектроскопия валентной зоны является уникальным инструментом для определения типа поверхности. Для двух- и трехмерных систем в случае, когда поверхность проявляет металлические свойства, вблизи уровня Ферми в спектрах валентной зоны наблюдается ступенька Ферми, являющаяся характерной чертой этих свойств. Рисунок 9 представляет спектры фотоэмиссии в $\bar{\Gamma}$ -точке поверхности зоны Бриллюэна в окрестности уровня Ферми для обеих структур: $c(4 \times 2)$ при 25°C и 2×1 при 400°C . Спектр, соответствующий первой структуре, демонстрирует явную щель вблизи E_F , тем самым доказывая полупроводниковую природу этой поверхности. После нагрева образца щель исчезает, и мы наблюдаем постепенное появление эмиссии в окрестности E_F . Таким образом, поверхность при $T > 400^\circ\text{C}$ более не является полупроводниковой, но вместе с тем не была обнаружена и характерная металлическая ступенька. На этом же рис. 9 представлен спектр, снятый в тех же экспериментальных условиях от золотой фольги, находящейся в электрическом контакте с исследуемым образцом. Видна характерная металлическая ступенька, середина которой указывает на положение E_F , а ширина дает

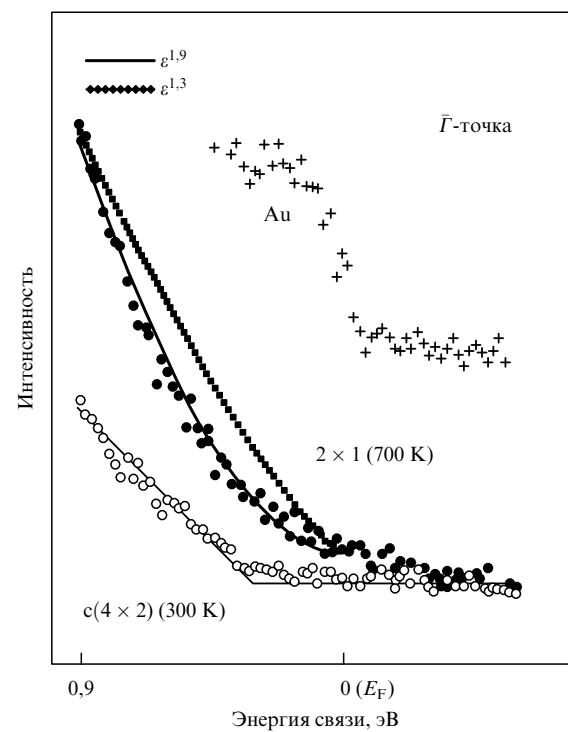


Рис. 9. Спектры фотоэмиссии в $\bar{\Gamma}$ -точке поверхности зоны Бриллюэна в окрестности уровня Ферми для обеих структур: $c(4 \times 2)$ при 300 K и 2×1 при 700 K . Жирная линия — аппроксимация степенной функцией со степенью 1,9. Сверху представлены данные от золотой фольги, находящейся в электрическом контакте с образцом. Энергия фотонов $h\nu = 18,9\text{ эВ}$ [53].

возможность определить инструментальное разрешение. Но даже учет температурного уширения, вызванного повышением температуры образца от комнатной до 400°C , не приводит к форме спектра, полученного нами для структуры 2×1 .

Таким образом, можно сделать вывод о том, что поведение электронной плотности вблизи E_F отлично от характерного для ферми-жидкости. По-видимому, представленных экспериментальных данных недостаточно, чтобы делать далеко идущие фундаментальные выводы, однако мы все же попробуем привести одно из возможных объяснений наблюдаемого явления.

Для ферми-жидкости характерно, что элементарные возбуждения являются независимыми, подчиняющимися статистике Ферми. Следствием этого является наличие в спектрах металлической ступеньки вблизи E_F . Однако в том случае, когда имеет место сильное электрон-электронное взаимодействие, что свойственно, например, низкоразмерным системам, картина ферми-жидкости может более не соответствовать поведению электронной системы. В одномерном случае система сильно коррелированных электронов может быть описана в рамках жидкости Латтинжера [54–56]. Возбуждения независимых квазичастиц заменяются коллективными возбуждениями со спин-зарядовым расщеплением. В этом случае теория предсказывает степенную зависимость интенсивности фотоэмиссии $(E - E_F)^x$ вблизи уровня Ферми, где экспонента x прямо связана с величиной корреляции в электронной системе [55, 56].

В [53] спектр от $\beta\text{-SiC}(100) 2 \times 1$ поверхности, измениенный вблизи уровня Ферми, был аппроксимирован степенной зависимостью. Этот результат свидетельствует в пользу возможности реализации одномерной модели электронной жидкости, соответствующей описанию Латтинжера.

Таким образом, одним из вероятных объяснений наблюдавшегося поведения электронной плотности в окрестности E_F является следующее. На поверхности $\beta\text{-SiC}(100)$ при $T > 400^{\circ}\text{C}$, по-видимому, может образовываться квазиодномерная, сильно коррелированная система электронов. Аналогичное поведение электронной плотности (со степенной зависимостью в фотоэлектронных спектрах вблизи ферми-уровня) наблюдается в хорошо известных квазиодномерных объемных материалах, таких как органические проводники [57] или неорганические материалы со структурой типа цепочек, например $(\text{TaSe}_4)_2\text{I}$, $\text{K}_{0.3}\text{MoO}_3$ или BaVS_3 [56, 58, 59]. В [57] поведение электронной системы этих материалов обсуждается в рамках жидкости Латтинжера.

Однако в отличие от перечисленных выше материалов, в случае $\beta\text{-SiC}(100)$ квазиодномерная система электронов, по-видимому, имеет место в наружном однотомном слое широкозонного полупроводника. Квазиодномерные свойства поверхности $\beta\text{-SiC}(100)$ никак не связаны со свойствами лежащего ниже объемного материала. Более того, они не связаны и с какими-либо металлическими нитями, образованными на поверхности в результате напыления металлических атомов. Квазиодномерность поверхности можно было бы объяснить поведением электронной системы взаимодействующих димеров $\text{Si}-\text{Si}$, принадлежащих одной и той же димерной цепочке. Обратим внимание на то, что на поверхности величина периода в направлении цепочки составляет $3,08 \text{ \AA}$, а в направлении, перпендикулярном

цепочке, — $6,16 \text{ \AA}$. Поэтому, очевидно, существует сильное перекрытие волновых функций между димерами одного и того же ряда (цепочки) и очень слабое — между соседними цепочками.

Если вблизи уровня Ферми поведение фотоэлектронных спектров, зарегистрированных в интегрированном по углам режиме, описывается степенной зависимостью, то величина корреляции может быть оценена по значению показателя степени α . В [53] спектры были аппроксимированы степенными зависимостями с показателями степеней $\alpha = 1,9$ для Γ -точки и $\alpha = 1,3$ для J -точки поверхности зоны Брилюэна. В рамках модели жидкости Латтинжера обе эти величины должны соответствовать очень сильной электрон-электронной корреляции. Так, например, в квазиодномерных объемных материалах интегрированная по углам спектроскопия дает величину α , меняющуюся в пределах $0,9 - 1,2$ [56–59].

Обратимый фазовый переход около 400°C на поверхности $\beta\text{-SiC}(100)$: металл $2 \times 1 \Leftrightarrow$ полупроводник $c(4 \times 2)$ может быть объяснен как переход Пайерлса. Действительно, пусть димерные цепочки проявляют одномерные свойства и показывают "металлическую" для периодичности 1 в направлении цепочки (при $T > 400^{\circ}\text{C}$). Тогда возможно, что при снижении температуры в районе 400°C электрон-фононное взаимодействие приводит к неустойчивости Пайерлса: вблизи уровня Ферми открывается энергетическая щель, связанная с удвоением периодичности решетки и появлением волн зарядовой плотности. Как следствие — поверхность становится полупроводниковой. При этом обнаруживает себя взаимодействие между соседними, далеко отстоящими цепочками. Оно выражено в появлении структуры $c(4 \times 2)$, характерной для всей поверхности в целом, т.е. в наличии корреляции и в направлении, перпендикулярном к направлению цепочек. Возможность фазового перехода возникает благодаря конечному взаимодействию между соседними цепочками, гасящему сильные флуктуации, которые характерны для идеальных одномерных систем. В отсутствие этого подавления сильные флуктуации препятствовали бы фазовому переходу и уменьшению энергии системы за счет появления щели в районе E_F .

Чтобы лучше понять природу этого фазового перехода, в работе [53] было проведено также фотоэмиссионное исследование глубокого уровня Si_{2p} поверхности $\beta\text{-SiC}(100)$ для обеих структур — полупроводниковой $c(4 \times 2)$ и металлической 2×1 . Как было показано выше, для полупроводниковой структуры $c(4 \times 2)$ проведено разложение спектра на 5 компонент, две из которых — $S1$ и $S2$ — соответствуют эмиссии от димеров, расположенных выше и ниже некоторого среднего положения. Две поверхностные компоненты разделены по энергии на $0,9 \text{ eV}$ с перераспределением заряда между ними. Эта картина соответствует удвоенной периодичности в направлении цепочек. Вследствие фазового перехода, обе поверхностные компоненты существенно уменьшили свою амплитуду, при этом между ними появилась новая компонента — S^* . В работе [53] предполагается, что новая компонента представляет собой результат эмиссии от димеров структуры 2×1 , расположенных примерно на одном и том же среднем уровне (между $S1$ и $S2$) и, следовательно, имеющих некую среднюю энергию. При этом периодичность в направлении цепочки становится равной 1. По-видимому, имеет

место частичный фазовый переход, так как согласно декомпозиции должны сосуществовать домены обеих структур — 2×1 (преобладающей) и $c(4 \times 2)$. Возможные большие флуктуации, связанные с фазовым переходом (см. выше), могут объяснить сосуществование обеих фаз и одновременно косвенно подтвердить одномерный характер поверхности β -SiC(100).

4. Поверхность β -SiC(100), обогащенная кремнием

Увеличивая количество кремния на поверхности β -SiC(100) $c(4 \times 2)$ сверх стехиометрического, можно получить несколько других поверхностных сверхструктур, при этом наиболее богатой кремнием является структура 3×2 .

4.1. Сверхструктура 3×2 на поверхности β -SiC(100)

В эксперименте проще всего получить на поверхности β -SiC(100) наиболее обогащенную кремнием сверхструктуру 3×2 . Видимо, это обстоятельство и является причиной того, что ей посвящено гораздо больше опубликованных работ, чем другим сверхструктурам, обнаруженным на указанной поверхности. Однако вплоть до настоящего момента нет окончательных и бесспорных доказательств (теоретических и экспериментальных) по количеству избыточного кремния, соответствующего структуре 3×2 . Нет и достаточных аргументов в пользу той или иной из предложенных моделей. Этот раздел

посвящен обзору различных точек зрения, высказываемых за или против тех или иных моделей этой структуры.

На кремниевой поверхности кристалла β -SiC(100) идеального стехиометрического состава находится монослой атомов Si. Все различные модели могут быть сгруппированы в зависимости от предполагаемого избыточного количества кремния на этой поверхности. Как теоретиками, так и экспериментаторами обсуждаются три варианта: избыточное количество кремния равно $1/3$, $2/3$ или 1 монослою. В таблице 4 проводится сопоставление обсуждаемых моделей [41].

4.1.1. Модели, предполагающие адсорбцию на поверхности $1/3$ монослоя избыточного кремния.

К настоящему времени известны две модели, предполагающие присутствие на поверхности $1/3$ монослоя избыточного кремния. Схематически они представлены на рис. 10а, б.

Первая модель, называемая SDRM (Single Dimer Row Model), была предложена Hara et al. [12] и предполагает наличие адсорбированных димеров Si в количестве одного димера на элементарную ячейку 3×2 . Ориентированы эти димеры перпендикулярно к ориентации димеров первоначальной (до адсорбции) структуры $c(4 \times 2)$.

Вторая модель, называемая ADRM (Alternate Dimer Row Model), была предложена Yan et al. [60] на основе проведенных *ab initio* вычислений. Она также предполагает наличие адсорбированных димеров Si в количестве одного димера на элементарную ячейку 3×2 . Сразу же

Таблица 4. Обобщение экспериментальных и теоретических данных по структуре β -SiC(100) 3×2 и сопоставление обсуждаемых моделей [41]

Модель	Положительные моменты	Отрицательные моменты
SDRM	Сопоставима с величиной покрытия, найденной Yoshinobu et al. Считается более предпочтительной по сравнению с ADRM в расчетах Pollmann et al.	Шесть "болтающихся" связей в 3×2 . Не объясняет STM изображения. Считается менее предпочтительной по сравнению с ADRM в расчетах Yan et al. Не объясняет переход $3 \times 2 \rightarrow 3 \times 1$ под влиянием водорода.
ADRM (Yan)	Сопоставима с величиной покрытия, найденной Yoshinobu et al. Считается более предпочтительной по сравнению с SDRM в расчетах Yan et al. Считается более предпочтительной в расчетах Galli et al. Лучше других моделей соответствует STM изображениям, полученным симуляцией, и расчетам зонной структуры, выполненным этой группой. Считается более предпочтительной по сравнению с DDRM в расчетах Shevlin et al.	Четыре "болтающиеся" связи на элементарную ячейку 3×2 . Соответствует структуре 2×3 вместо структуры 3×2 . Не объясняет переход $3 \times 2 \rightarrow 3 \times 1$ под влиянием водорода. Считается менее предпочтительной по сравнению с ADRM в расчетах Pollmann et al.
DDRM (Hara)	Позволяет Hara et al. объяснить проведенную ими декомпозицию спектров Si_{2p} . Единственная модель, объясняющая переход от 3×2 к 3×1 под влиянием водорода.	Четыре "болтающиеся" связи на элементарную ячейку 3×2 . Менее стабильная модель в расчетах Pollmann et al. Плохо объясняет STM изображения. Несопоставима с величиной покрытия, найденной Yoshinobu et al. Плохо соответствует симулированным STM изображениям и зонной структуре, вычисленной Galli et al. Считается менее предпочтительной по сравнению с ADRM в расчетах Shevlin et al.
TAADM (Pollmann)	Всего две "болтающиеся" связи на элементарную ячейку структуры 3×2 . Наиболее стабильная модель в расчетах Pollmann et al. Объясняет STM изображения. Совместима с данными по зонной структуре. (По-видимому, соответствует степени покрытия в работе Yoshinobu et al.)	Странная величина покрытия. Не объясняет переход $3 \times 2 \rightarrow 3 \times 1$ под влиянием водорода. Вычисления Pollmann et al. для поверхности 3×2 являются теми же, что и вычисления, подтверждающие MRAD для сверхструктуры $c(4 \times 2)$ (или же модель MRAD не является правильной).

следует обратить внимание на то, что элементарные ячейки этих моделей повернуты на 90° одна относительно другой и, если быть точными в обозначении поверхностной структуры, то необходимо учесть, что модель ADRM описывает структуру 2×3 .

Обе модели предусматривают также возможность для кремниевых атомов заполненного монослоя уменьшить число "болтающихся" связей, образуя димеры, которые схематически показаны на рис. 10 пунктирными линиями. При этом в модели SDRM — два димера на одну элементарную ячейку, в то время как в ADRM — три димера на ячейку.

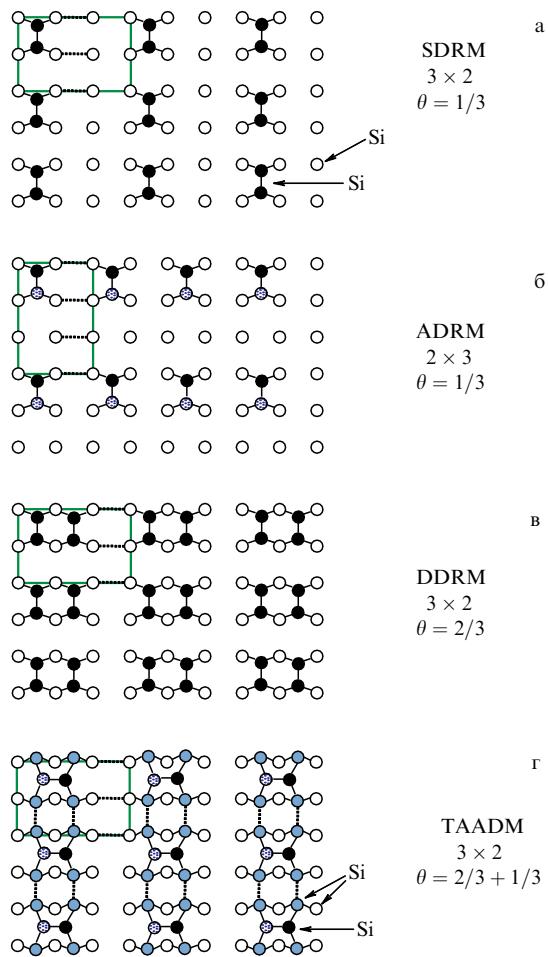


Рис. 10. Модели структур, предложенные для сверхструктур $\beta\text{-SiC}(100) 3 \times 2$. θ обозначает содержание избыточного кремния в долях монослоя на поверхности Si плоскости. Все изображенные атомы являются кремниевыми (в соответствии с [41]).

Модель SDRM не в состоянии объяснить СТМ изображения, полученные Hara et al. [61] и Semond et al. [62]. В работе [62] было показано, что в структуре 3×2 димеры ад-атомов асимметричны и все наклонены в одном направлении. Более того, на всех СТМ изображениях видно, что направление димерной связи перпендикулярно к направлению димерных цепочек структуры (рис. 10a), что противоречит модели SDRM. Впрочем, и расчеты Yan et al. [60] показывают, что эта модель менее предпочтительна по сравнению с моделью ADRM. В более поздних расчетах Pollmann et al. [63] предпочтение все же отдается модели SDRM. Однако там же показано,

что обе эти модели являются менее стабильными по сравнению с моделью, предполагающей покрытие поверхности большим количеством избыточных атомов кремния. Справедливости ради следует добавить, что Pollmann et al. [63] в своих расчетах использовали 16 точек зоны Бриллюэна, в то время как Yan et al. [60] — только одну точку, что, безусловно, снижает надежность расчетов, выполненных последней группой. Расчеты Pollmann et al. [63] показали, что, хотя модель SDRM и более предпочтительна по сравнению с ADRM, она все же не может объяснить не только симуляцию СТМ изображений, но и известные экспериментальные данные по зонной структуре [64, 65]. Таким образом, модель SDRM не соответствует реальности.

Модель ADRM хорошо описывает СТМ изображения и их симуляции, но тоже не отвечает реальности, так как противоречит результатам, полученным методом ДМЭ. Эти результаты показывают, что направление утрояния структуры 3×2 совпадает с направлением удвоения структуры 2×1 , что находится в противоречии с моделью ADRM, которая описывает структуру 2×3 .

Есть еще аргументы против обеих моделей (SDRM и ADRM). Dayan et al. [9], а затем Hara et al. [66] обратили внимание на то обстоятельство, что в результате адсорбции атомарного водорода происходит фазовый переход $3 \times 2 \rightarrow 3 \times 1$. В то же время, согласно модели ADRM, даже в случае разрушения димерных связей и насыщения "болтающихся" связей структура 2×3 должна сохранить свою периодичность, т.е. оставаться структурой 2×3 . Впрочем, это касается и структуры 3×2 модели SDRM.

Для полноты картины проведенных исследований структуры 3×2 , предполагающих наличие $1/3$ монослоя избыточных атомов кремния, следует остановиться на работах двух групп теоретиков.

Группа G. Galli провела *ab initio* молекулярно-динамические расчеты [67], из которых последовал вывод, что структура, соответствующая модели ADRM, является более стабильной, чем две другие (одна из них имеет $2/3$ монослоя избыточных атомов кремния). Симуляция СТМ изображений, проведенная этой группой, также отдает предпочтение модели ADRM по сравнению с моделью SDRM и моделью, предполагающей присутствие на поверхности $2/3$ монослоя избыточных атомов кремния.

Недавно *ab initio* расчеты структуры 3×2 провели Shevlin et al. [68]. Они также сравнили ADRM с моделью, предполагающей присутствие на поверхности $2/3$ монослоя избыточных атомов кремния. При этом модель SDRM вообще во внимание не принималась. Оказалось, что модель ADRM более стабильна и лучше соответствует экспериментальным измерениям зонной структуры.

В заключение следует заметить, что обе рассмотренные модели предполагают, что направление связи димеров, образованных ад-атомами (ад-димеры), перпендикулярно направлению димерной связи сверхструктуре 2×1 . Galli et al. [45] был осуществлен расчет возможности такого взаимного расположения димеров, когда направление связи ад-димеров параллельно направлению димерной связи в структуре 2×1 . Было показано, что эта ситуация менее предпочтительна по сравнению с классической, когда димеры взаимно повернуты на 90° .

4.1.2. Модель, основанная на адсорбции 2/3 монослоя избыточного кремния. Модель, предполагающая наличие 2/3 монослоя избыточного кремния, была предложена Dayan [9] и впоследствии развита Kaplan [26] и Hara et al. [61]. Эта модель, получившая название DDRM (Double Dimer Row Model), включает два ад-димера в элементарной ячейке структуры 3×2 (рис. 10в). Существует 5 возможных способов расположения этих двух ад-димеров в элементарной ячейке. Hara et al. [61] предложили модель, состоящую из симметричных димеров (рис. 10в). Остальные 4 возможных варианта расположения димеров предполагают их асимметричными [63].

Hara et al. утверждают, что их модель объясняет СТМ изображения, полученные Semond et al. [62]. Они считают, что каждое пятно этого изображения происходит от группы из четырех избыточных атомов, т.е. фактически от двух димеров. Изображением в режиме пустых состояний объясняется возможность чередования симметричных димеров, имеющих разное расстояние от поверхности. Эти авторы также провели разложение уровня Si_{2p} структуры 3×2 [38] на 4 компоненты — одну объемную и 3 поверхностные. Интенсивности поверхностных компонент оказались в соотношении 2:2:1. Предполагается, что первая компонента происходит от четырех избыточных атомов, вторая — от четырех атомов лежащего ниже монослоя, каждый из которых имеет одну связь с одним из избыточных атомов, а третья — от двух атомов лежащего ниже монослоя, каждый из которых имеет по две связи с избыточными атомами.

Модель DDRM нашла подтверждение в молекулярно-динамических расчетах, выполненных Kitabatake и Greene [69]. С другой стороны, расчеты Galli et al. [67] не исключают возможности существования такой модели с энергетической точки зрения, так как ее общая энергия незначительно превышает таковую в модели ADRM. Однако СТМ изображения и вычисленная зонная структура DDRM не соответствуют экспериментальным данным, опубликованным к настоящему времени. Более того, авторы [67] показали, что модель типа DDRM должна иметь асимметричные димеры, что противоречит предположениям Kitabatake et al. [69] и Hara et al. [61].

В недавних *ab initio* расчетах, выполненных Pollmann et al. [63], рассмотрена модель с симметричным расположением двух ад-димеров и показано, что эта конфигурация менее стабильна по сравнению с четырьмя другими моделями, предполагающими димеры асимметричными. Кроме того, эта модель оказалась и менее стабильной, чем две рассмотренные выше модели с 1/3 монослоя избыточных атомов кремния. Расчеты зонной структуры для модели с симметричным расположением двух ад-димеров показали, что HOMO (Highest Occupied Molecular Orbital) имеют гораздо большую дисперсию в направлении $\Gamma - J$ по сравнению с дисперсией, измеренной экспериментально Lübbe et al. [64] и Hara et al. [65]. Более того, симуляция СТМ изображений в режиме пустых состояний показывает, что для структуры 3×2 в модели DDRM должны быть видны 4 пятна, что также противоречит эксперименту. Таким образом, все имеющиеся в литературе данные позволяют утверждать, что модель DDRM с 2/3 монослоя избыточных атомов кремния не соответствует действительности.

4.1.3. Модель с одним избыточным монослоем кремния. Несколько лет назад Pollmann et al. [63] впервые высказали предположение, что избыточная концентрация кремния в структуре 3×2 превышает 2/3 монослоя и составляет 1 моносвой. За основу была взята модель DDRM с 2/3 монослоя избыточных атомов кремния. Поверх этого второго слоя в [63] допустили наличие третьего слоя с содержанием 1/3 монослоя кремния в форме асимметричных димеров и назвали модель TAADM (Two Adlayer Asymmetric Dimer Model). Как показано на рис. 10г пунктирными линиями, атомы второго слоя тоже образуют между собой связи и в результате в элементарной ячейке остаются только две "болтающиеся" связи.

Авторы модели считают, что TAADM может удовлетворительно объяснить все имеющиеся к настоящему моменту экспериментальные данные. Во-первых, они показали, что вычисленная на основе модели зонная структура находится в хорошем согласии с имеющимися измерениями [64, 65].

Это означает, что заполненные поверхностные состояния не имеют дисперсии в направлении $\Gamma - J$ (направление устроения периода) и демонстрируют дисперсию 0,37 эВ в направлении $\Gamma - J'$. Такое поведение объясняется большим расстоянием между димерами первого слоя в направлении $\Gamma - J$ ($3 \times a_0$). В направлении $\Gamma - J'$ димеры могут взаимодействовать через атомы второго слоя. Далее эти авторы показывают, что симуляция СТМ изображений, основанная на их модели, прекрасно объясняет экспериментальные данные Semond et al. [62]. Это вполне естественно, так как согласно [62] правильная модель должна предполагать существование асимметричных димеров, направление связи которых параллельно направлению устроения периода и перпендикулярно направлению цепочки димеров. Собственно, это и предполагается в модели TAADM.

Авторы [63] попытались в рамках своей модели описать и экспериментальный результат, полученный недавно Yoshinobu et al. [33] с помощью RHEED (Reflection High Energy Electron Diffraction). В работе [33] было показано, что для перехода от структуры $c(4 \times 2)$, являющейся характеристикой поверхности, имеющей один моносвой углерода, к структуре 3×2 нужно адсорбировать на эту углеродную поверхность в 1,36 раза больше атомов кремния, чем в случае перехода к структуре 2×1 . В принципе, это прекрасно подтверждают модели ADRM и SDRM, предполагающие наличие на поверхности 1/3 монослоя избыточного кремния. Авторы [63], чтобы привести свою модель TAADM в соответствие с результатом [33], предложили новую модель для структуры $c(4 \times 2)$, содержащей 1/2 дополнительного монослоя кремния (общее содержание Si атомов равно 1,5 монослоя) [32]. В этом случае для структуры 3×2 общее количество атомов Si, согласно [33], будет равно $1,5 \times 1,36 = 2,06$, что вполне соответствует TAADM модели (2 монослоя).

Сразу же следует заметить, что расчеты Pollmann et al. [63] для структуры 3×2 основываются на расчетах для модели MRAD структуры $c(4 \times 2)$. Однако, как будет показано ниже, модель MRAD находится в глубоком противоречии с полученными экспериментальными данными. Поэтому и к модели TAADM следует также относиться с осторожностью.

И, наконец, нужно отметить, что в рамках модели TAADM не может быть объяснен переход $3 \times 2 \rightarrow 3 \times 1$, происходящий при адсорбции атомарного водорода, если, конечно, не допустить, что при этом степень покрытия избыточными атомами кремния уменьшается за счет образования молекул Si_xH_y , покидающих поверхность. Однако такое снижение концентрации кремния не нашло до настоящего времени экспериментального подтверждения.

Таблица 4 представляет краткое обобщение имеющихся к настоящему времени экспериментальных и теоретических данных по структуре $\beta\text{-SiC}(100) 3 \times 2$ и сопоставление обсужденных моделей [41].

4.2. Сверхструктуры $m \times 2$ при $m = 2n+1$

Как было показано выше, $\beta\text{-SiC}(100) 3 \times 2$ является структурой с наибольшим числом избыточных, по сравнению со стехиометрическим составом, атомов кремния на поверхности (100). Идеальная стехиометрического состава поверхность кристалла, заканчивающаяся одной атомной плоскостью кремния, имеет структуру $c(4 \times 2)$. Если с помощью десорбции при $T = 1150^\circ\text{C}$ уменьшить содержание избыточного количества атомов кремния, можно наблюдать переход от $\beta\text{-SiC}(100) 3 \times 2$ к структуре $m \times 2$, где m не может быть четным, т.е. $m = (2n+1)$: 5×2 и 7×2 [45, 67, 68]. Считается, что далее должны образовываться структуры 9×2 , 11×2 и т.д., но они пока экспериментально не наблюдались. Обратим внимание, что 3×2 тоже принадлежит к этой группе поверхностных сверхструктур при $n = 1$. Кроме того, следует заметить, что, если для структуры 3×2 избыточное содержание кремния над стехиометрическим составом составляет $1/3$ монослоя, то избыточное содержание кремния для обсуждаемых структур (включая и структуру 3×2) определяется соотношением $\theta = 1/(2n+1)$.

Как и для структуры 3×2 , для их объяснения было предложено несколько моделей. Эти различные модели обобщены на рис. 11 на примере сверхструктуры 5×2 . Рассмотренные ранее модели SDRM и DDRM легко адаптируются к этому случаю, если концентрацию избыточного количества атомов кремния уменьшить соответственно с $1/3$ до $1/5$ и с $2/3$ до $2/5$ монослоя. Что касается модели TAADM, то Pollmann et al. [44] предложили между двумя "стандартными" линиями димеров (на рис. 11 они обозначены символом i) еще одну димерную линию с направлением связи, повернутым на 90° по сравнению с направлением связи в димерах основных линий (на рис. 11 она обозначена символом ii). Эти дополнительные димеры принадлежат нижней, полностью заполненной плоскости атомов кремния [44]. Все те аргументы "за" и "против" конкретной модели 3×2 , которые приводились выше, остаются в силе и для соответствующих моделей структуры 5×2 . Скажем только, что количество "болтающихся" связей для этих трех моделей структуры 5×2 составляет соответственно 10, 8 и 4.

4.3. Сверхструктура 8×2 на поверхности $\beta\text{-SiC}(100)$

Выше было показано, что сверхструктуры $m \times 2$ (где $m = (2n+1)$: 3×2 , 5×2 , 7×2 и т.д.) на поверхности идеального кристалла $\beta\text{-SiC}(100)$, заканчивающегося атомной плоскостью кремния, являются результатом упорядочения димерных рядов. Эти димерные ряды

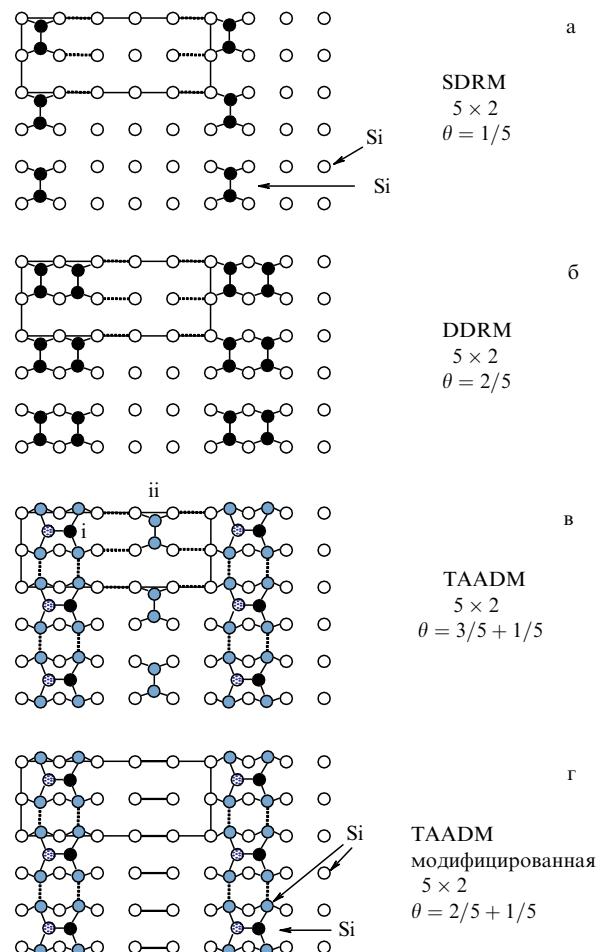


Рис. 11. Модели структур, предложенные для сверхструктуры $\beta\text{-SiC}(100) 5 \times 2$. θ обозначает содержание избыточного кремния в долях монослоя на поверхности Si плоскости. Все изображенные атомы являются кремниевыми (в соответствии с [41]).

образованы избыточными над стехиометрическим составом атомами кремния, причем до недавнего времени наблюдались и обсуждались только реконструкции с нечетным m . Однако в [70] показано, что параметр m сверхструктур $m \times 2$ может быть и четным.

На идеальную поверхность $\beta\text{-SiC}(100)$ напылялось избыточное количество Si. Как правило, кратковременные отжиги образцов при $T \approx 1150^\circ\text{C}$ приводят к уменьшению концентрации избыточного (над стехиометрическим составом) кремния и, как следствие, к последовательному получению структур 3×2 , 5×2 , 7×2 и т.д. Однако в [70] методом ДМЭ было обнаружено, что при отжигах при 1150°C , длительность которых находится в промежутке между необходимыми для получения сверхструктур 3×2 и 5×2 , образуется новая сверхструктура — 8×2 , которая из-за необычного положения в ряду не подчиняется правилу $\theta = 1/(2n+1)$.

Это несоответствие удалось разрешить с помощью СТМ. На рисунке 12 представлены топограммы, полученные с участка поверхности размером $100 \times 100 \text{ \AA}$, от такой структуры для заполненных (рис. 12а) и пустых (рис. 12б) состояний. Как видно, структура представляет собой самоупорядоченную периодическую последовательность пар димерных рядов.

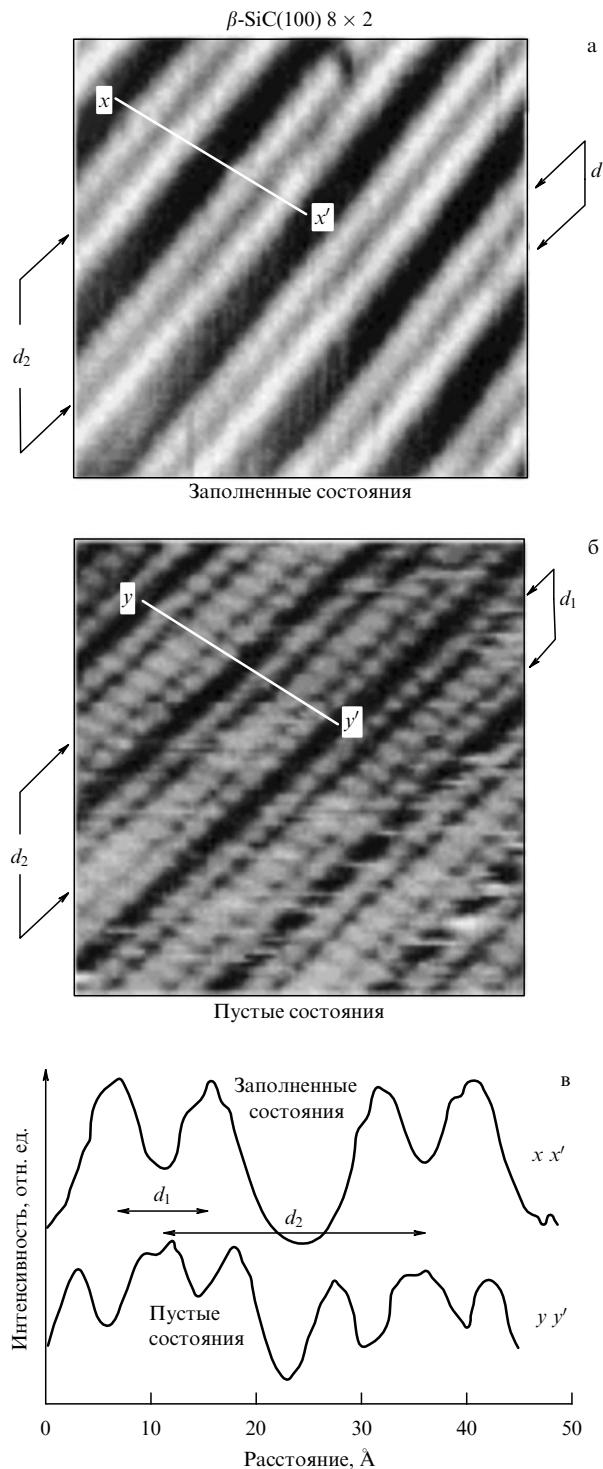


Рис. 12. $100 \times 100 \text{ \AA}$ STM изображение β -SiC(100) 8×2 , полученное в режимах: (а) заполненных состояний ($V = +3,55 \text{ В}$, $I = 0,3 \text{ нА}$) и (б) пустых состояний ($V = -2,75 \text{ В}$, $I = 0,3 \text{ нА}$). (в) Профили топограмм, измеренные поперек димерных рядов; d_1 и d_2 — расстояние соответственно между рядами в паре и между ближайшими парами [70].

Расстояние $d_1 = 9 \pm 1 \text{ \AA}$ (рис. 12в) соответствует расстоянию между соседними димерными рядами структуры 3×2 ; $d_2 = 25 \pm 1 \text{ \AA}$ — восьмикратному периоду подложки, что соответствует структуре 8×2 и соглашается с картиной ДМЭ. Расстояние между ближайшими рядами соседних пар равно $16 \pm 1 \text{ \AA}$, что соответствует расстоянию между соседними димерными рядами струк-

туры 5×2 . Таким образом, структуру 8×2 можно рассматривать как имеющую дальний порядок последовательность парных рядов димеров или чередующуюся последовательность наименьших элементов структур 3×2 и 5×2 : $3a + 5a = 8a$, где a — период подложки. Элементарный расчет показывает, что, если структура 3×2 содержит $1/3$ монослоя избыточного Si, то для структуры 8×2 избыточная концентрация кремния $\theta = 1/4$.

Таким образом, при уменьшении содержания избыточного кремния ниже стехиометрического на поверхности β -SiC(100) имеет место следующая последовательность структур и составов: $3 \times 2 (\theta = 1/3)$, $8 \times 2 (\theta = 1/4)$, $5 \times 2 (\theta = 1/5)$, $7 \times 2 (\theta = 1/7)$ и т.д. (состав указан при допущении, что структура 3×2 имеет избыточное содержание атомов кремния $\theta = 1/3$).

Свойства этих сверхструктур — линейность цепочек, одномерность, прямолинейность — делают их привлекательными для использования вnanoэлектронике, особенно в случае, когда плотность атомных линий в направлении, перпендикулярном к цепочке, можно было бы регулировать. Поэтому нам представлялось важным исследовать термическую устойчивость этих структур. Полученным результатам и будет посвящен следующий раздел.

4.4. Самоорганизующиеся одномерные цепочки димеров кремния на поверхности кубической модификации SiC. Термическая стабильность и механизмы разрушения

В данном разделе покажем, что в процессе фазового перехода от обогащенной кремнием структуры β -SiC(100) 3×2 к структуре β -SiC(100) $c(4 \times 2)$ (тоже образованной атомами кремния, но уже стехиометрического состава) формируются самоорганизующиеся прямые линии, представляющие собой цепочки из димеров атомов Si. Образующиеся при этом структуры оказались устойчивыми до 900°C .

Для перехода от структуры β -SiC(100) 3×2 , имеющей максимальное количество избыточного Si, к стехиометрической структуре β -SiC(100) $c(4 \times 2)$ необходимо выдержать образец некоторое время при $T \approx 1150^\circ\text{C}$ с целью удаления избыточного Si. При малых временах отжига формируются структуры, состоящие из упомянутых выше одномерных цепочек: $8 \times 2 (\theta = 1/4)$, $5 \times 2 (\theta = 1/5)$, $7 \times 2 (\theta = 1/7)$; (θ приведены из расчета, что для начальной структуры $3 \times 2 \theta = 1/3$) [44]. Более того, группой P. Soukiassian было показано, что при переходе от сверхструктуры 3×2 к стехиометрической структуре $c(4 \times 2)$ можно получить димерные цепочки, довольно удаленные друг от друга и даже отдельные индивидуальные линии [28, 43, 71, 72]. Димерные цепочки являются одномерными, прямолинейными и непрерывными (в пределах данной террасы) образованиями, плотность которых в направлении, перпендикулярном к линии цепочки, можно регулировать. На рисунке 13 представлена последовательность STM изображений размером $800 \times 800 \text{ \AA}$, полученных от поверхности β -SiC(100) при 300 K после отжигов различной продолжительности при 1150°C .

Эти нанообъекты, представляющие собой линии цепочек димеров кремния, самоорганизуются на поверхности β -SiC(100) и имеют уникальные свойства, которые существенно отличают их от аналогичных, полученных

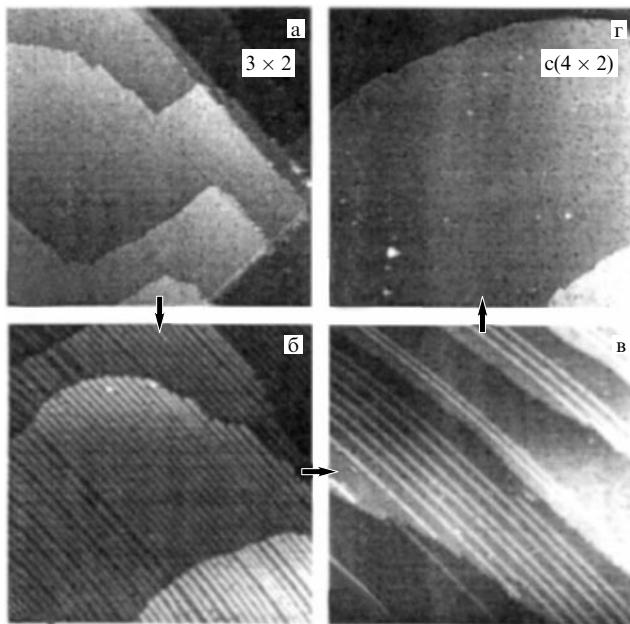


Рис. 13. $800 \times 800 \text{ \AA}$ СТМ топограммы поверхности $\beta\text{-SiC}(100)$: (а) $\beta\text{-SiC}(100) 3 \times 2$; (б) димерные линии высокой плотности атомов Si; (в) то же, что и на (б), но отличающиеся меньшей плотностью линий (между линиями видна поверхность со структурой $c(4 \times 2)$); (г) поверхность со структурой $c(4 \times 2)$ ($V = +3,0 \text{ В}$, $I = 0,2 \text{ нА}$) [72].

ранее, например, адсорбцией металлов на поверхности Si [28, 48]. Эти нанообъекты:

- состоят из Si–Si димеров;
- имеют очень большую длину, которая ограничивается только размерами террас на поверхности;
- могут быть получены в результате одноступенчатой обработки — отжига при определенной высокой температуре;
- их число и расстояние между ними может быть определено заранее выбором времени и температуры отжига; при этом можно получить, в зависимости от желания, широкий спектрnanoструктур — от сверхрешетки с минимальным периодом $6,16 \text{ \AA}$ до отдельной изолированной атомной линии;
- образуются на поверхности широкозонного полупроводника и, следовательно, являются интересными объектами для изучения транспортных свойств, т.е. являются гораздо более стабильными по сравнению со всеми другими известными nano- или субнаноструктурами [28, 48].

Как известно, $\beta\text{-SiC}$ — высокотемпературный полупроводник с набором особо уникальных свойств. Принимая во внимание, что во многих случаях для изготовления приборов есть необходимость использовать нанотехнологии, представляется интересным и необходимым изучить динамику трансформации обнаруженных нанообъектов (атомных линий Si) при изменении температуры. До недавнего времени не проводилось подобных исследований стабильности нанообъектов при высоких температурах и практически отсутствовали данные об их поведении в условиях экстремальных температур.

Для проверки термической стабильности обнаруженных одномерных цепочек в [73] были проведены исследования с помощью СТМ, позволяющей изучать поверхность при температуре до 950°C . Установлено, что

независимо от предыстории, линии, состоящие из димеров атомов Si, остаются устойчивыми к нагреву вплоть до $T \leq 900^\circ\text{C}$ и начинают разрушаться при $T \sim 900^\circ\text{C}$ [73]. (По-видимому, это самая высокая температура, при которой когда-либо проводились СТМ исследования.) Обнаружено, что разрушение одномерных цепочек происходит как путем удаления индивидуальных димеров (индивидуальный механизм), так и путем смещения в целом атомных линий в направлении, перпендикулярном к направлению линии (коллективный механизм).

Эксперимент проводился на туннельном сканирующем микроскопе BT-СТМ фирмы Omicron, позволяющем работать в интервале температур от -230°C до $+900^\circ\text{C}$. Давление в спектрометре поддерживалось на уровне 10^{-11} Торр вплоть до температуры образца $T \sim 925^\circ\text{C}$. При высокой температуре время, необходимое для стабилизации температурных дрейфов, не превышало 60 мин.

Рассмотрим влияние температуры на линии атомов Si. На рисунке 14 представлены $300 \times 300 \text{ \AA}$ СТМ изображения таких линий, зарегистрированные при комнатной температуре (слева) и при 1000 K (справа). Изображение, полученное при комнатной температуре, демонстрирует линии кремния, состоящие из индивидуальных димеров, что находится в полном соответствии с более ранними исследованиями [9]. При повышении температуры до 1000 K видно, что ни одна из линий не имеет разрывов. Более того, как и при комнатной температуре, расстояние между линиями кремния неизменно, они параллельны и регулярно расположены, образуя структуру 7×2 .

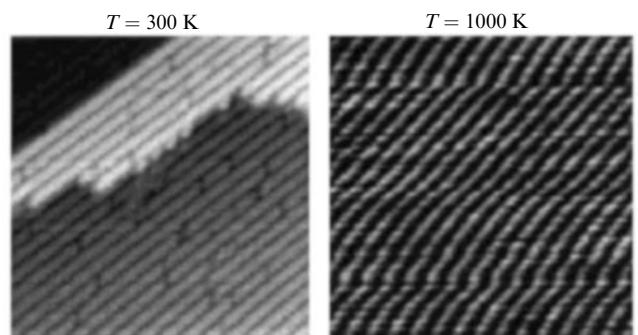


Рис. 14. $300 \times 300 \text{ \AA}$ СТМ изображения Si атомных линий на $\beta\text{-SiC}(100)$ поверхности, зарегистрированные при 300 K и 1000 K [73].

При температуре 1100 K начинается трансформация самоорганизованных nanoструктур. Исследуем эволюцию этих изменений, выбрав один из участков изображения и проследив за ним во времени при той же температуре — 1100 K . Рисунок 15 демонстрирует последовательность из восьми $300 \times 300 \text{ \AA}$ СТМ изображений, каждое из которых получено при 1100 K , при этом общее время измерений (от первого до восьмого изображения; рис. 15а–з) составило 25 мин. Два дефекта на поверхности, обозначенные $D1$ и $D2$, использовались нами как метки для слежения за одним и тем же участком поверхности. На всех восьми изображениях положения меток $D1$ и $D2$ оставались неизменными, как, впрочем, и плотность практически всех линий выделенного участка. Линия, обозначенная XX' , представляет особый интерес для наблюдения. Она нахо-

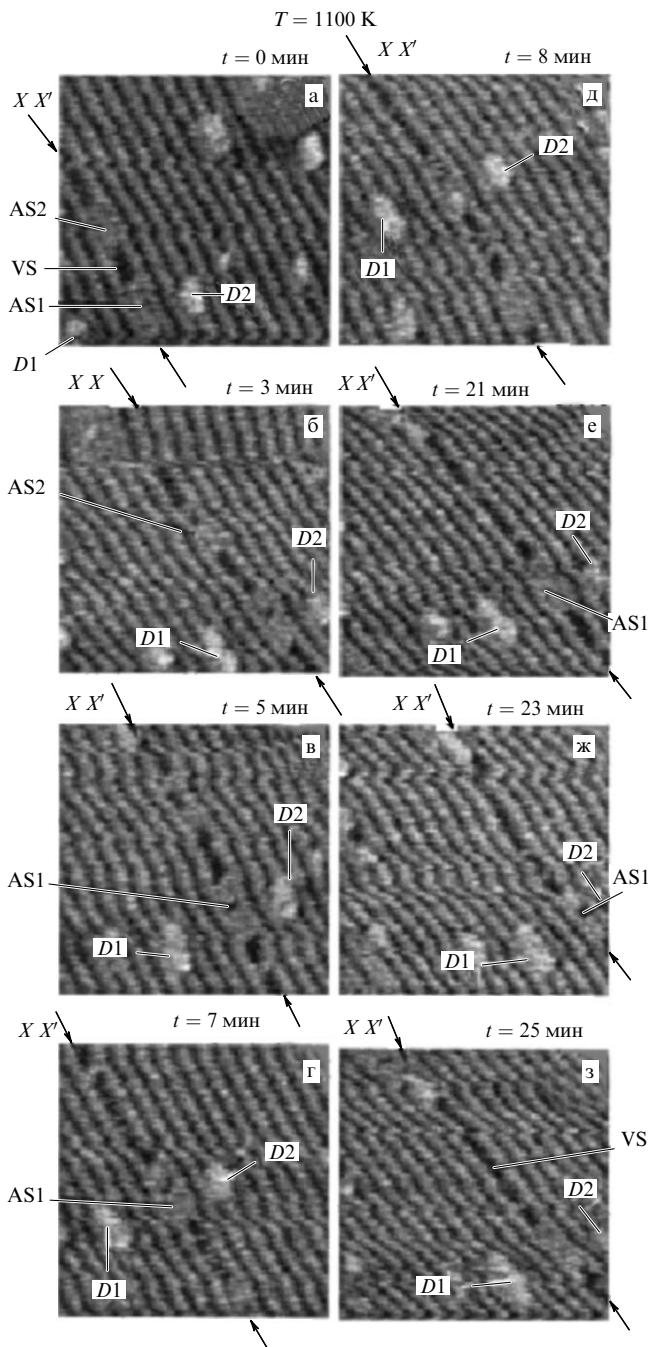


Рис. 15. Последовательность из восьми (а–з) $300 \times 300 \text{ \AA}$ СТМ изображений Si димерных линий при 1100 K (0 – 25 мин), демонстрирующая разрушение на линии XX' димерных сегментов AS1 и AS2, превращающихся в вакантный сегмент VS. Дефекты D1 и D2 использовались как метки для слежения за одним и тем же участком поверхности [73].

дится между метками D1 и D2 и имеет два сегмента, обозначенных AS1 (девять димеров) и AS2 (восемь димеров), разделенных сегментом вакансий VS (при мерно пять отсутствующих димеров) (рис. 15а). Расстояние между димерами вдоль атомной линии составляет $6,16 \text{ \AA}$.

Через 3 мин, как видно на рис. 15б, AS1 и AS2 теряют один и два димера соответственно, в то время как VS становится длиннее (семь отсутствующих димеров). Таким образом, AS2 удаляется от AS1, который не меняет своего положения. Двумя минутами позже

(рис. 15в) AS1 не изменился, в то время как AS2 дополнительно потерял димеры, а VS увеличивает свою длину на размер одного димера. Через 7 мин от начала наблюдения у AS2 остается только 1 димер, в то время как длина VS достигает размера, соответствующего 14 потерянным димерам. Это означает, что остающийся сегмент AS2 все еще удаляется от AS1 (рис. 15г). В интервале от 8 до 25 мин последний, принадлежащий AS2 димер исчезает, увеличивая тем самым VS сегмент до размера 25 потерянных димеров. Таким образом, эволюция выбранного участка изображения показала механизм разрушения димерной линии, состоящей из атомов кремния.

Для того чтобы определить температурный предел стабильности атомных линий, было исследовано и влияние более высоких температур: 1200 K и 1225 K . При температуре 1200 K непрерывные атомные линии в начале отжига имеют достаточно регулярное чередование. Однако дальнейшая выдержка при этой температуре приводит к заметным нарушениям: плотность их значительно уменьшается и становится непостоянной при переходе от одного участка поверхности к другому и, более того, в некоторых местах наблюдается полное отсутствие линий. Изменение расстояний между различными участками соседних линий свидетельствует в пользу того, что они движутся латерально (в перпендикулярном к линии направлении). По-видимому, температура 1200 K является предельной для кремниевых димерных цепочек. Для окончательной проверки этого предположения температура испытания была увеличена до 1225 K . Действительно, незначительное (всего на 25 K) повышение температуры привело к драматическим изменениям. Очевидно, был достигнут предел возможностей прибора.

Таким образом, описанные выше СТМ измерения позволяют утверждать, что при высокой температуре могут наблюдаться индивидуальный и коллективный механизмы поведения кремниевых атомных линий. Индивидуальный механизм включает удаление один за другим индивидуальных атомов и/или димеров из одномерных цепочек. Этот механизм может приводить к возникновению разрывов на линиях и образованию вакансационных линий. Коллективный механизм заключается в коллективном латеральном движении кремниевой линии как целого.

5. β -SiC(100) углеродная поверхность стехиометрического состава, образованная одним моноатомным слоем С

5.1 Структура $c(2 \times 2)$ углеродной поверхности β -SiC(100) стехиометрического состава

Как было показано в начале обзора, кристалл β -SiC можно рассматривать как состоящий из чередующихся в направлении $\langle 100 \rangle$ плоскостей Si и C моноатомной толщины. Поэтому, в зависимости от того, какая плоскость оказывается наружной, можно получить поверхность (100) , состоящую целиком или из атомов Si или из атомов C. Предыдущие разделы обзора были посвящены поверхности, состоящей из атомов кремния. В данном разделе рассматривается второй случай, когда поверхностный моноатомный слой целиком состоит из атомов углерода.

В первых работах, выполненных Dyan [9], Bellina et al. [74] и Kaplan [26], где исследовалась поверхность $\beta\text{-SiC}(100)$, образованная углеродом, было обнаружено, что она имеет структуру $c(2 \times 2)$. Далее в нескольких работах было показано, что этой структуре соответствует один монослой углерода [12, 33, 75–78].

Наиболее вероятной структурой поверхности кристалла, представляющей собой плоскость из атомов с координационным числом четыре, как в случае C(100), Si(100) или Ge(100), должна быть структура, образованная димерами 1×2 (рис. 16а). При этом здесь указывается именно 1×2 , чтобы обратить внимание на то, что направление димерных связей повернуто на 90° по отношению к димерам на такой же поверхности, но образованной кремнием. Для объяснения образования на поверхности структуры $c(2 \times 2)$ были предложены две модели.

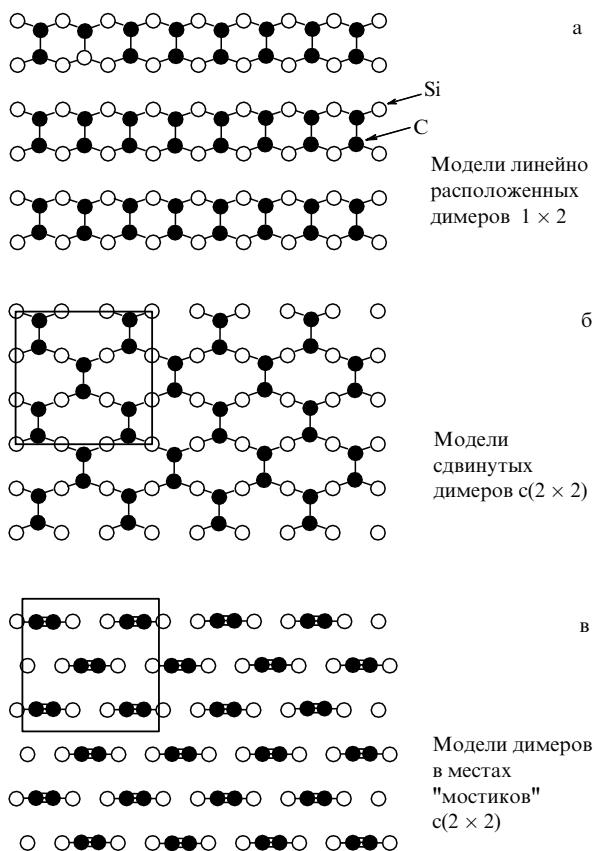


Рис. 16. Модели структур, предложенные для сверхструктур $\beta\text{-SiC}(100) c(2 \times 2)$, образованной одной атомной плоскостью углерода (в соответствии с [41]).

Первая модель предполагает структуру, образованную из классических димеров, напоминающих димеры реконструкции 2×1 кремния и алмаза, выстроенных не по прямым линиям, а со сдвигом, так что они образуют при этом структуру $c(2 \times 2)$. Эта модель названа моделью сдвинутых димеров. Атомы углерода имеют электронную конфигурацию гибридизованного типа sp^3 с одной "болтающейся" связью на атом. При этом лежащая под этой плоскостью плоскость атомов кремния имеет полностью насыщенные связи. Эта модель была впервые предложена Hara et al. [12], затем поддержана

Bermudez и Kaplan в 1991 г. на основе экспериментальных данных по оже-электронной спектроскопии, ДМЭ, спектроскопии характеристических потерь энергии электронов и стимулированной десорбции H^+ [78]. В этой работе также было показано, что длина димерной связи равна $1,54 \text{ \AA}$.

Вторая модель, способная объяснить структуры $c(2 \times 2)$ и являющаяся очень необычной, была предложена в том же 1991 г. Powers et al. [79] на основе расчетов и экспериментальных данных по ДМЭ, обработанных в динамическом приближении. В этой модели также использованы димеры, но каждый атом углерода имеет электронную конфигурацию sp^2 и только одну связь с атомом кремния (рис. 16в). Эта модель называется "модель димеров в местах моста". Два димерных атома связаны между собой одной связью типа σ и одной π -связью, при этом у каждого атома углерода остается по одной "болтающейся" связи. Длина димера в этой модели равна $1,31 \text{ \AA}$, что обусловлено сильной двойной связью между атомами углерода.

Существуют два различных метода приготовления структуры $c(2 \times 2)$:

- 1) десорбция внешней атомной плоскости кремния структуры $c(4 \times 2)$ при сильном нагреве образца;
- 2) осаждение на поверхность $c(4 \times 2)$ углеродного монослоя, полученного при разложении молекулярного этилена.

Согласно [79], в первом методе приготовления структуры при нагреве атомы кремния лежащего ниже слоя образуют слабые димерные связи, в то время как во втором методе, при осаждении этилена, на атомах кремния остаются "болтающиеся" связи.

В том же 1991 г. Badzigg [18] провел вычисления, которые подтвердили модель димеров, находящихся в позиции мостика. При этом длина связи оказалась равной $1,2 \text{ \AA}$, что фактически означает наличие тройной связи. Автор [18] предположил гибридизацию электронов по типу sp , что близко к модели [79], но означает более сильную связь, поскольку две "болтающиеся" связи образуют вторую π -связь. В этой модели также предполагается, что лежащие ниже атомы кремния образуют димеры.

Спор о том, какая модель более отвечает реальности, был разрешен в 1996 г. На основе экспериментальных данных по NEXAFS и фотоэмиссии Long, Bermudez и Ramaker [80] однозначно показали, что правильной является модель димеров в местах мостиков. Согласно авторам [80], электронная конфигурация является промежуточной между sp^2 и sp , более близкой к конфигурации с тройной связью. Это означает, что мостик, образованный димером углерода ближе к горизонтальному, чем в случае электронной конфигурации sp^2 . Данные [80] однозначно показывают направление каждой связи и подтверждают образование димеров в лежащей ниже плоскости кремния.

В более позднем исследовании Yeom et al. [81] на основе экспериментальных данных по СТМ, фотоэлектронной дифракции (было измерено изменение интенсивности спектров глубоких уровней в зависимости от энергии возбуждающих фотонов) и спектроскопии с угловым разрешением подтвердили модель димеров углерода с тройными связями (с характером связи, более близким к sp , чем к sp^2), находящимися в позициях мостиков.

Данные по ФЭС с угловым разрешением позволили идентифицировать два поверхностных (S1 и S6) и четыре резонансных (с S2 до S5) состояния. Два из них, S1 и S2, близкие к уровню Ферми ($\sim 2,2$ эВ и ~ 3 эВ в Γ -точке), являются σ -связями димеров углерода (гибридизованными с "болтающимися" связями кремния), поэтому они дают основной вклад в СТМ изображениях, получаемых в режиме заполненных состояний. Два резонансных состояния, S3 и S4, являются π -связями в направлениях z и x ($\sim 4,6$ эВ и $\sim 5,6$ эВ от Γ -точки). Эта ориентация была подтверждена при измерениях с использованием поляризованного излучения. Резонанс S5 и состояние S6 ($\sim 7,8$ эВ и $\sim 10,1$ эВ в Γ -точке) были идентифицированы как связи C–Si углеродных димеров. Напомним, что поверхностные состояния находятся в запрещенной зоне и по энергии не перекрываются с объемными состояниями; это отличает их от резонансных (поверхностных) связей.

В [81] отмечается, что две π -связи сверхструктуры $c(2 \times 2)$ имеют большую энергию связи, чем π -связи поверхностей C(100) и Si(100). Предполагается, что это может объяснить стабильность модели, которая не является минимизированной по числу ненасыщенных связей. И наконец, в [81] найдено, что длина димерной связи равна $1,22 \text{ \AA}$, что соответствует тройной связи молекулы ацетилена (чистая sp гибридизация).

В [41] обращается внимание на то, что экспериментальное и теоретическое согласие по поводу модели $c(2 \times 2)$ поверхности β -SiC(100), заканчивающейся углеродными атомами, является дополнительным аргументом против модели MRAD структуры $c(4 \times 2)$ поверхности, заканчивающейся атомами кремния. Так, если модель MRAD правильная, это, прежде всего, означает, что внешняя поверхность кристалла вместо одного монослоя кремния содержит 1,5. В таком случае адсорбция этилена на поверхность не может приводить к формированию структуры $c(2 \times 2)$, имеющей димеры в позициях мостиков. Хотя этот аргумент и не был ранее использован против модели MRAD, он является наиболее весомым, так как очень надежно подтвержден экспериментальными данными.

Было выполнено большое число теоретических расчетов. Все полумпирические вычисления [82–86], за исключением Badzigg [18], приводят к выводу о правильности модели смешанных димеров. И напротив, все *ab initio* вычисления [25, 87–91] подтверждают модель димеров, находящихся в позициях мостиков с тройной C–C связью.

Необходимо также уточнить, что все теоретические исследования всегда находят для поверхности, состоящей из углерода, очень малое расхождение в энергии связи между различными рассматриваемыми моделями. Некоторые авторы приходят к выводу, что на основе их расчетов [18, 88, 91] трудно с уверенностью указать более стабильную модель. Другие считают, что это небольшое различие в энергиях между различными моделями может приводить к существованию одновременно нескольких структур на поверхности [18, 25, 88]. Более поздние исследования с помощью СТМ [92] подтвердили это мнение. В [92] проведены СТМ исследования этой структуры. На рисунке 17 представлены СТМ изображения структуры $c(2 \times 2)$, полученные с участка поверхности $40 \times 40 \text{ \AA}$ в режиме заполненных состояний (а) и пустых состояний (б).

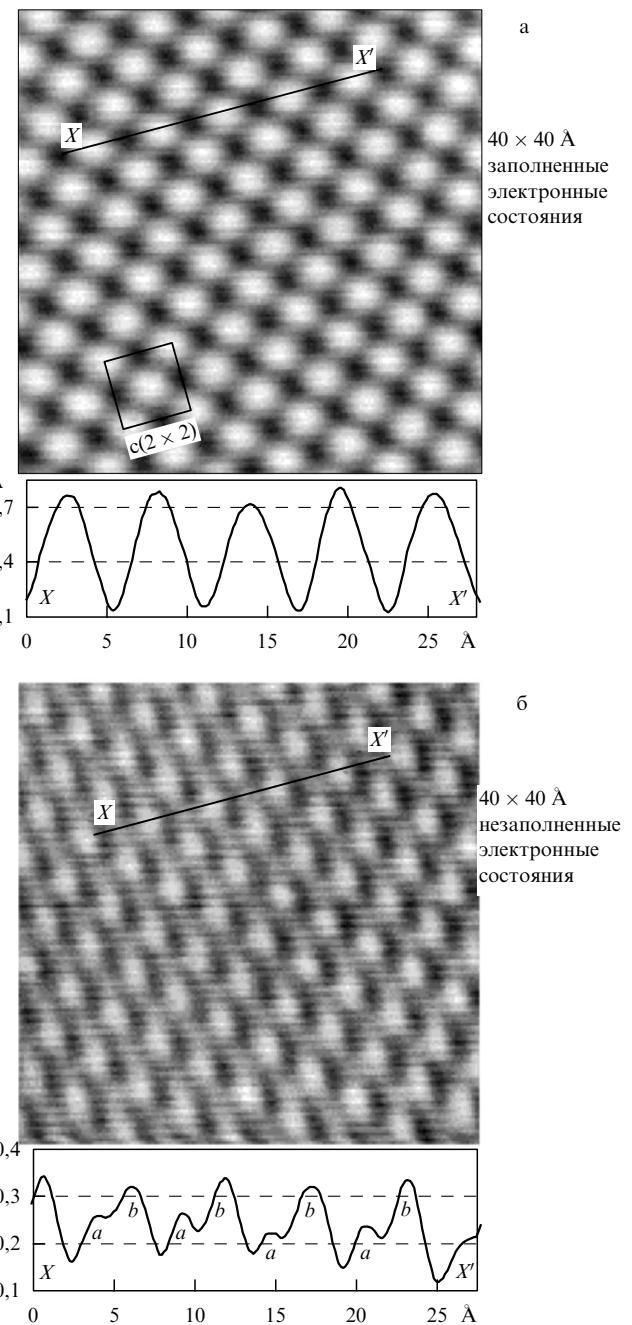


Рис. 17. СТМ изображения поверхности $c(2 \times 2)$ [92]: (а) заполненные электронные состояния ($V_t = -3$ В); (б) незаполненные электронные состояния ($V_t = +3$ В). В обоих случаях $I_t = 200$ пА. Представлены также профили интенсивностей в направлениях XX' .

На рисунке 17а ясно видно, что изображение состоит из ярких пятен, соответствующих структуре $c(2 \times 2)$. Профиль интенсивности изображения, зарегистрированный вдоль линии XX' (представленный под СТМ изображением), показывает, что расстояние между соседними пятнами равно $5,75 \text{ \AA}$, что является близким к величине $6,16 \text{ \AA}$, ожидаемой для структуры $c(2 \times 2)$. Поэтому авторы отождествляют каждое яркое пятно в изображении с димером углерода.

Изображение того же участка поверхности, но полученное в режиме пустых состояний, представлено на рис. 17б. Пятно предыдущего изображения на

данном состоит из двух, каждое из которых меньше предыдущего. Каждое пятно в данном случае представляет уже один атом углерода. Более того, это изображение позволяет определить также и направление димерной связи атомов углерода по отношению к подложке.

Однако наиболее интересным оказался тот факт, что высота расположения углеродных атомов в димере различна по отношению к подложке. Это прекрасно видно из профиля высоты, измеренного вдоль линии XX' и представленного под СТМ изображением (рис. 17б). Отсюда следует новый и важный вывод: димеры углерода структуры $c(2 \times 2)$ являются асимметричными и все они наклонены в одном и том же направлении. При этом, видимо, имеет место и перенос заряда от одного атома углерода к соседнему того же димера, что является обычным для классических димеров, как это наблюдается для поверхности Si(100) $c(4 \times 2)$. В данном случае, однако, в отличие от кремния, речь идет о димере, имеющем тройную связь. Более того, ни один из многочисленных расчетов, ни полумонтических, ни *ab initio*, не предсказывает наличие асимметричности этих димеров. Авторы [92] считают, что напряженное состояние поверхности, свойственное природе кристаллов SiC, играет главную роль в перераспределении заряда между атомами димера и как следствие — в образовании наблюдавшей асимметричности.

5.2. Димерные цепочки углерода на поверхности $c(2 \times 2)$

5.2.1. Экспериментальное наблюдение цепочек углерода на поверхности $c(2 \times 2)$. Возможность образования линий димеров кремниевых атомов на поверхности $\beta\text{-SiC}(100)$, образованной атомами кремния, является отличительным и многообещающим свойством этой поверхности. Было бы весьма заманчивым обнаружить что-либо подобное на той же поверхности, но образованной атомами углерода. Изучению этого вопроса была посвящена работа [93]. Известно, что структура $c(2 \times 2)$ весьма устойчива до $T \sim 1150^\circ\text{C}$, а при $T \sim 1250^\circ\text{C}$ имеет место графитизация поверхности, связанная с образованием избыточной по сравнению со стехиометрическим составом концентрации углерода на поверхности. С целью получения одномерных структур авторы [93] производили при различных температурах отжиги образцов, имеющих структуру $c(2 \times 2)$, и обнаружили при $T \sim 1200^\circ\text{C}$ (до проявления графитизации) образование нового типа одномерной структуры. Было обнаружено, что большая часть поверхности представляет собой известную структуру $c(2 \times 2)$, в то же время на фоне этого видны яркие цепочки, характеризуемые следующими свойствами:

- все цепочки ориентированы в одном и том же направлении;
- длина цепочки меняется в пределах от нескольких ангстрем до нескольких сотен ангстрем;
- цепочки могут начинаться и заканчиваться в различных местах, включая и края террас;
- расстояние между цепочками может быть различным, наблюдается также образование агломератов;
- некоторые участки цепочек могут отклоняться от прямой линии.

Эти свойства значительно отличаются от свойств димерных цепочек кремния на поверхности $c(4 \times 2)$, которые, в частности, всегда прямолинейны.

На рисунке 18 представлены более детальные СТМ изображения поверхности $c(2 \times 2)$ [93], содержащей указанные цепочки. Рисунок 18а представляет изображение в режиме пустых состояний, где видно, что каждый элемент цепочки состоит из двух ярких пятен, образующих "зигзаг". Изображение на рис. 18б представляет тот же участок, но зарегистрированный в режиме заполненных состояний. Видны два главных отличия от предыдущего изображения:

- 1) каждый димер представлен одним пятном;
- 2) все пятна расположены на одной высоте.

Таким образом, из рис. 18б следует, что цепочки расположены в той же атомной плоскости, что и атомы структуры $c(2 \times 2)$.

На рисунке 18в представлен профиль высоты изображения в направлении, перпендикулярном к направлению цепочки. Из профиля видно, что незаполненные состояния, соответствующие структуре 1D, располагаются на $\approx 1 \text{ \AA}$ выше состояний основной поверхности. Более того, из профиля можно сделать вывод, что димеры являются асимметричными, следствием чего является зигзагообразное изображение цепочек.

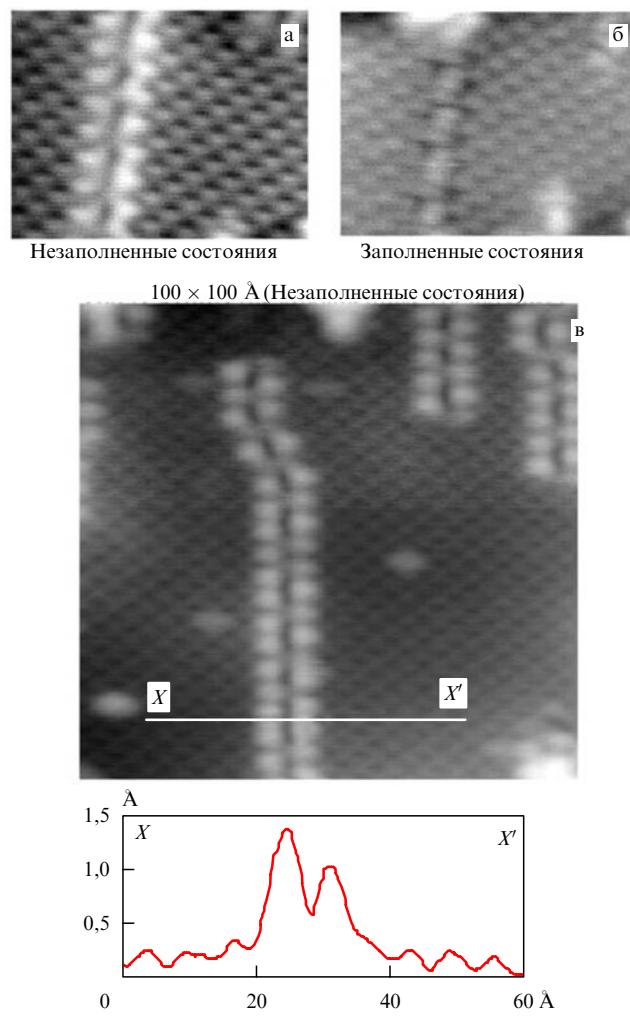


Рис. 18. Детальное изображение одномерных цепочек: (а) $50 \times 65 \text{ \AA}$ (незаполненные состояния); (б) $50 \times 65 \text{ \AA}$ (заполненные состояния); (в) $100 \times 100 \text{ \AA}$ (незаполненные состояния) и профиль интенсивности в направлении XX' . На всех трех изображениях $V_t = \pm 3 \text{ В}$ и $I_t = 200 \text{ нA}$ [93].

Для определения стабильности цепочек авторы [93] произвели серию последовательных отжигов данной структуры и обнаружили, что плотность цепочек возрастает и, в конечном счете, цепочки покрывают всю поверхность.

5.2.2. Модель цепочек на поверхности $c(2 \times 2)$. В результате исследований структуры цепочек на поверхности $c(2 \times 2)$ авторы [93] предложили следующую модель. Во время отжига при высокой температуре некоторая часть углеродных димеров, имеющая изначально тройную связь типа sp , приобретает классическую конфигурацию sp^3 . Такое преобразование требует поворота направления димера на 90° , а также реорганизации обратных связей Si—C. Классические димеры организуются в линии различной длины. При этом каждое пятно на СТМ изображении, полученном в режиме заполненных состояний, соответствует одному димеру, в то время как на СТМ изображении, полученном в режиме незаполненных состояний, — каждому атому. Чередующаяся интенсивность пятен обусловлена асимметрией димеров, что и объясняет зигзагообразное устройство цепочек.

В этой модели атомы цепочек принадлежат той же моноатомной плоскости атомов углерода, что и атомы основной структуры $c(2 \times 2)$. Такое утверждение является очевидным следствием изображений структуры, полученных в режиме заполненных состояний (см. выше). В режиме пустых состояний изображение цепочек представляется приподнятым над основной атомной плоскостью благодаря наличию двух "болтающихся" связей, которые отсутствуют у основной структуры $c(2 \times 2)$ вследствие образования тройных связей в димерах. Модель схематически представлена на рис. 19, где на общем "фоне" структуры $c(2 \times 2)$ изображены прямолинейные и изогнутые цепочки димерных линий.

Эта модель находит подтверждение в различных теоретических работах, как, например, [38, 47, 85].

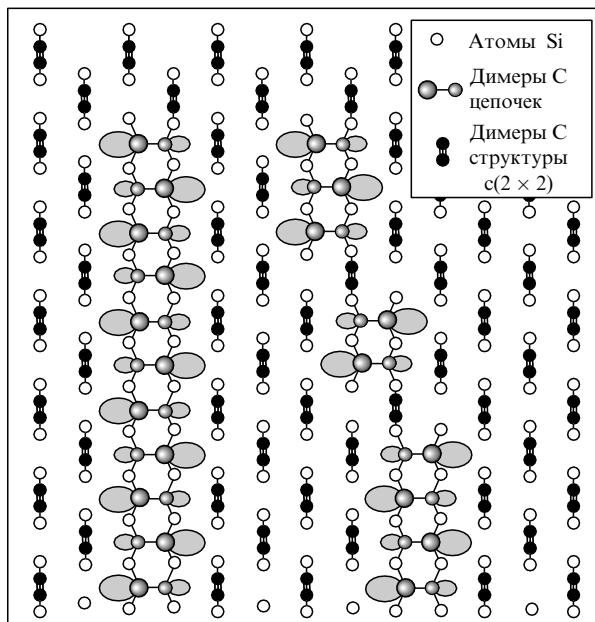


Рис. 19. Модель структуры углеродной поверхности (100) карбида кремния, содержащей одномерные прямолинейные и изогнутые цепочки [93].

Однако наиболее интересное подтверждение модель нашла в расчетах Gali et al. [94]. Используя наиболее современные методы расчетов возможных структур на углеродной поверхности, авторы [94] пришли к следующим выводам:

- разница в энергии для конфигураций структуры $c(2 \times 2)$ типа sp и структуры, образованной димерами sp^3 , незначительна и составляет около 65 мэВ димер $^{-1}$. При этом в отсутствие напряженного состояния более стабильной является структура $c(2 \times 2)$;
- чем выше плотность димеров типа sp^3 , тем меньше энергия их образования;
- расчеты показывают, что наличие вакансий димеров sp в структуре $c(2 \times 2)$ снижает барьер перехода типа $sp \rightarrow sp^3$.

(Заметим, что в [93] наблюдался некий процент вакансий в СТМ изображениях структуры $c(2 \times 2)$, что, согласно данным расчетам, должно способствовать наблюденному образованию цепочек.) Симуляция СТМ изображений, выполненная группой Gali [94], прекрасно подтверждает СТМ изображения структуры $c(2 \times 2)$ и одномерных цепочек, полученных экспериментально в [93].

6. Заключение

В начале 90-х годов были достигнуты значительные успехи в выращивании монокристаллов карбида кремния достаточно высокого качества. Как следствие — резко возрос интерес и экспериментаторов, и теоретиков к поверхности β -SiC(100). Объясняется это не только требованиями создания электронных приборов, работающих при более высоких температурах по сравнению с приборами, базирующимиися на кремнии, но и многими другими причинами. В частности, весьма заманчивым, особенно для теоретиков, было то обстоятельство, что кремниевая поверхность β -SiC(100) стехиометрического состава имеет (какказалось в то время) такую же структуру, что и поверхность (100) кристаллов кремния, но межатомное расстояние на поверхности при этом на 20 % меньше (!). Именно по этой причине в период, рассмотренный в данном обзоре, было опубликовано большое число теоретических работ, посвященных изучению структуры 2×1 . Однако, как было показано, при комнатной температуре на чистой поверхности такой структуры не существует, и эти работы в данный обзор практически не вошли.

В результате интенсивных исследований пришло понимание, какие сверхструктуры могут образовываться на чистых поверхностях и какими свойствами они обладают. Обнаружено, что основной структурой на кремниевой поверхности карбида кремния стехиометрического состава является $c(4 \times 2)$, проявляющая полупроводниковые свойства. Выяснено, что расположение димеров этой структуры принципиально отличается от расположения димеров аналогичной структуры $c(4 \times 2)$ поверхности (100) кремния, существующей в области пониженных температур. Однако до настоящего времени нам не известны теоретические исследования электронной зонной структуры поверхности $c(4 \times 2)$. Обнаружено, что структура 2×1 существует при $T \geq 400^\circ\text{C}$ и является металлической, в то время как в кремнии эта структура является полупроводниковой и существует при комнатной температуре. Совершенно удивительной оказалась возможность получения на кремниевой

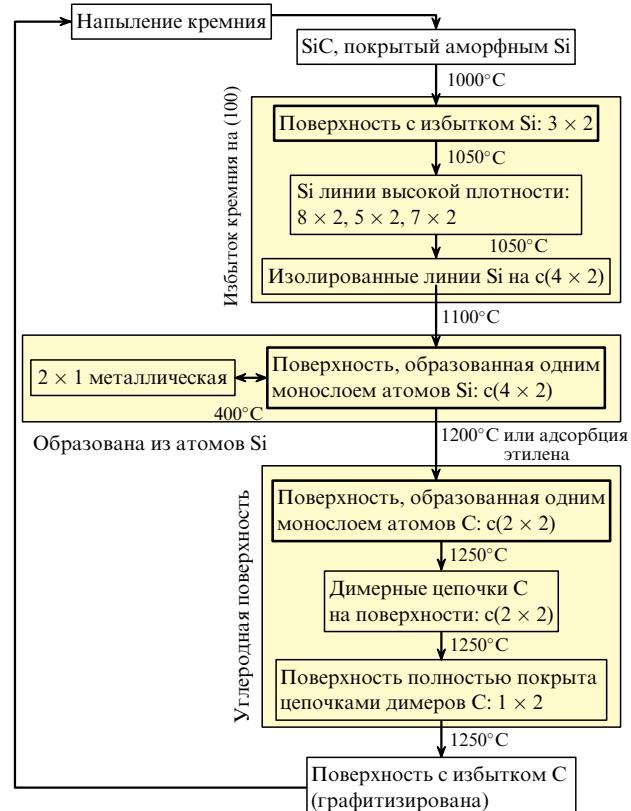
поверхности $\beta\text{-SiC}(100)$ самоорганизующихся одномерных прямолинейных цепочек, состоящих из димеров атомов кремния. При этом длина цепочек определяется только размерами террасы, а расстояние между ними можно регулировать от 6 до сотен ангстрем и даже получить по одной линии на террасе. Проводятся исследования по влиянию кислорода, водорода и щелочных металлов на свойства обнаруженных сверхструктур, но эти вопросы оказались вне рамок данного обзора.

Несмотря на очевидный прогресс в понимании структуры и свойств чистой поверхности $\beta\text{-SiC}$ (100), многое остается неясным или все еще не исследованным. Например, наиболее легко получаемой и наиболее изученной (согласно числу публикаций) является сверхструктура 3×2 обогащенной кремнием поверхности. Однако до сих пор нет согласия между различными группами исследователей не только в том, какой модели соответствует эта перестройка, но и в том, какое количество избыточных атомов кремния она содержит ($1/3$, $2/3$ или 1 избыточный монослой). Спор, видимо, будет решен только после проведения исследований этой структуры методом дифракции рентгеновских лучей в геометрии малых углов между первичным пучком и изучаемой поверхностью (около $0,5^\circ$) с использованием синхротронного излучения. Представляется необходимым продолжить исследования электронных свойств линейных цепочек, образованных из димеров кремния, и изучить возможность их использования вnanoэлектронике. Очень много предстоит сделать по изучению взаимодействия как субмонослойных, так и больших покрытий металлов с различными сверхструктурами подложки, что важно, в первую очередь, для производства различных приборов электроники. Таким образом, очевидно, что предстоит еще многое сделать для понимания структуры поверхности $\beta\text{-SiC}$ (100). Тем не менее, нам кажется, что благодаря удивительным свойствам карбида кремния, во многих отношениях существенно превышающим аналогичные свойства кремния, а также вследствие все более интенсивных исследований структуры и свойств поверхности этого материала, в ближайшие годы приборы на его основе займут достойное место в микро- и nanoэлектронике.

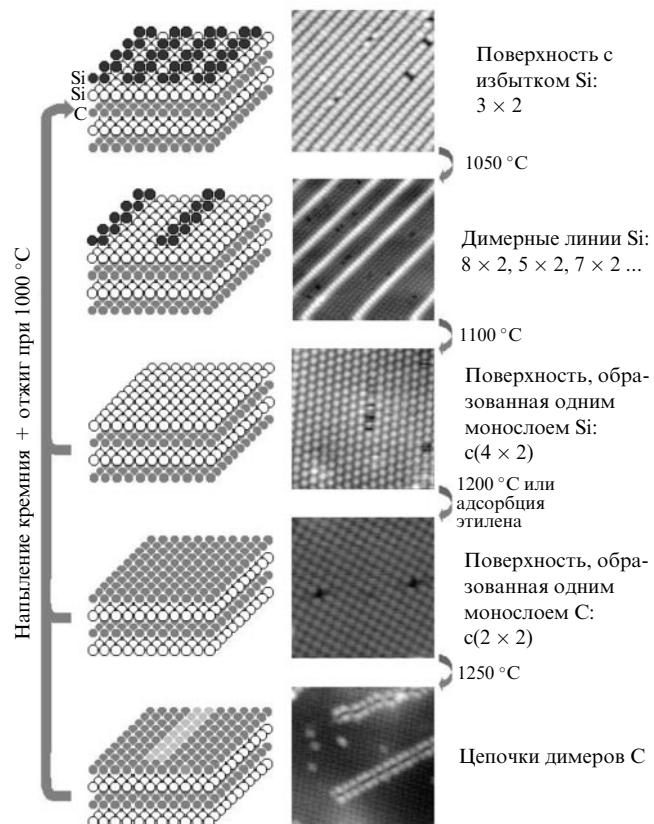
Автор благодарен академику Ю.А. Осипьяну за многократные дискуссии, полезные замечания и большой интерес к работе. Автор выражает также признательность профессору Патрику Соукиасьану, доктору Анне Энрикез, Мари Д'Анжело (Commissariate Energie Atomique, Saclay, France) и докторам Вансану Дерику (IBM, USA) и Фабрису Ами (Bell Lab., USA) за интересные дискуссии по обсужденным выше проблемам и за предоставление материалов для рисунков. Хотелось бы особо поблагодарить профессора Ю.М. Таирова (Электротехнический институт, Санкт-Петербург, Россия) за любезно предоставленные крайне дефицитные образцы.

Работа выполнена при частичной поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект 99-02-16157).

7. Приложение



П1. Последовательность получения сверхструктур $\beta\text{-SiC}(100)$ (в соответствии с [41]).



П2. Сверхструктуры на поверхности $\beta\text{-SiC}(100)$ (в соответствии с [41]).

Список литературы

1. Tairov Yu M *Mat. Sci. Eng. B* **29** 83 (1995)
2. *Silicon Carbide. A Review of Fundamental Questions and Applications to Current Device Technology* Vol. I & II (Eds W J Choyke, H Matsunami, G Pensl) (Berlin: Akademie Verlag, 1998)
3. Silicon Carbide Electronic Devices and Materials *Mater. Res. Soc. Bull.* **22** (1997)
4. Silicon Carbide Electronic Devices *IEEE Trans. Electron Dev.* **46** (Special Issue) (1999)
5. Proceedings of the 2nd European Conference on Silicon Carbide and Related Materials *Mat. Sci. Eng. B* **61–62** (1999); Proceedings of the International Conference on Silicon Carbide and Related Materials *Mat. Sci. Forum* **338–342** (1999); Proceedings of the 3rd European Conference on Silicon Carbide and Related Materials (в печати)
6. Nanotechnology Research Direction, Vision for Nanotechnology R&D in the Next Decade, National Science and Technology Council. Interagency Working Group on Nanoscience, Engineering and Technology, Workshop report (1999)
7. *Nanotechnology* (Ed. G Timp) (New York: AIP Press, Springer, 1999)
8. Stroscio J A, Eigler D M *Science* **254** 319 (1991)
9. Dyan M J. *Vac. Sci. Technol. A* **3** 361 (1985); *A* **4** 38 (1986)
10. Bellina J J, Ferrante J, Zeller M V *J. Vac. Sci. Technol. A* **4** 1692 (1986)
11. Kaplan R, Parrill T M *Surf. Sci.* **165** L45 (1986)
12. Hara S et al. *Surf. Sci.* **231** L196 (1990)
13. Powers J M et al. *Surf. Sci.* **260** L7 (1992)
14. Wenchang L, Weidong Y, Kaiming Z *J. Phys.: Condens. Matter* **3** 9079 (1991)
15. Carter S J N *Solid State Commun.* **72** 671 (1989)
16. Craig B I, Smith P V *Surf. Sci.* **233** 255 (1990)
17. Mehandru S P, Anderson A B *Phys. Rev. B* **42** 9040 (1990)
18. Badzic P *Phys. Rev. B* **44** 11143 (1991)
19. Yan H, Hu X, Jonsson H *Surf. Sci.* **316** 181 (1994)
20. Hu X et al. *J. Phys.: Condens. Matter* **7** 1069 (1995)
21. Halicioglu T *Phys. Rev. B* **51** 7217 (1995)
22. Gutierrez R et al. *Phys. Rev. B* **60** 1771 (1999)
23. Sabisch M et al. *Phys. Rev. B* **53** 13121 (1996)
24. Käckell P, Furthmüller J, Bechstedt F *Surf. Sci.* **352–354** 55 (1996)
25. Catellani A, Galli G, Gygi F *Phys. Rev. Lett.* **77** 5090 (1996)
26. Kaplan R *Surf. Sci.* **215** 111 (1989); *J. Vac. Sci. Technol. A* **6** 829 (1988)
27. Shek M L *Surf. Sci.* **349** 317 (1996)
28. Semond F, Thèse de Doctorat (Orsay: Université de Paris-XI, 1996)
29. Soukiassian P et al. *Phys. Rev. Lett.* **78** 907 (1997)
30. Douillard L, Semond F, Aristov V Yu et al. *Mat. Sci. Forum* **264–268** 379 (1998)
31. Catellani A et al. *Phys. Rev. B* **57** 12255 (1998)
32. Lu W, Krüger P, Pollmann J *Phys. Rev. Lett.* **81** 2292 (1998)
33. Yoshinobu T et al. *Appl. Phys. Lett.* **59** 2844 (1991)
34. Soukiassian P, Aristov V Yu, Douillard L et al. *Phys. Rev. Lett.* **82** 3721 (1999); Comment: Lu W, Krüger P, Pollmann J *Phys. Rev. Lett.* **82** 3722 (1999) (Reply)
35. Aristov V Yu et al. *Phys. Rev. B* **60** 16553 (1999)
36. Joyce J J, Del Giudice M, Weaver J H *J. Electron Spectrosc. Related Phenomena* **49** 31 (1989)
37. Landmark E et al. *Phys. Rev. Lett.* **69** 1588 (1992)
38. Yeom H W et al. *Phys. Rev. B* **56** R15525 (1997); *Surf. Sci.* **433** 392 (1999)
39. Johansson L I, Owman F, Martensson P *Phys. Rev. B* **53** 13793 (1996)
40. Tromp R M, Smeenk R G, Saris F W *Surf. Sci.* **133** 137 (1983)
41. Derycke V, Thèse de Doctorat (Orsay: Université de Paris-XI, 2000)
42. Aristov V Yu et al. *Phys. Rev. Lett.* **79** 3700 (1997)
43. Aristov V Yu et al. *Omicron Newsletter* **1** 4 (1997)
44. Lu W, Krüger P, Pollmann J *Phys. Rev. B* **61** 2680 (2000)
45. Catellani A, Galli G, Gygi F *Appl. Phys. Lett.* **72** 1902 (1998)
46. Bermudez V M *Phys. Status Solidi B* **202** 447 (1997)
47. Kaplan R, Bermudez V, in *Properties of Silicon Carbide* (EMIS Datareview Series, Vol. 13, Ed. G Harris) (1995) p. 101
48. Soukiassian P, Semond F *J. Phys. IV (Colloque)* (France) **7** (C6) 101 (1997)
49. Pollmann J, Krüger P, Sabisch M *Phys. Status Solidi B* **202** 421 (1997)
50. Iijima S *Nature* **354** 56 (1991)
51. *Surface Science Techniques* (Eds J M Walls, R Smith) (Oxford: Pergamon Press, 1994)
52. Douillard L, Fauchoux O, Aristov V, Soukiassian P *Appl. Surf. Sci.* **166** 220 (2000)
53. Enriquez H, Derycke V, Aristov V Yu et al. *Appl. Surf. Sci.* **162–163** 559 (2000)
54. Haldane F D M *J. Phys. C* **14** 2585 (1981)
55. Voit J *Phys. Rev. B* **47** 6740 (1993)
56. *Electron Spectroscopies Applied to Low-Dimensional Structures* (Eds H I Starnberg, H P Hughes) (Dordrecht: Kluwer Acad. Publ., 2000)
57. Dardel B et al. *Europhys. Lett.* **24** 687 (1983)
58. Dardel B et al. *Phys. Rev. Lett.* **67** 3144 (1991)
59. Nakamura M et al. *Phys. Rev. B* **49** 16191 (1994)
60. Yan H, Smith A P, Jonsson H *Surf. Sci.* **330** 265 (1995)
61. Hara S et al. *Surf. Sci.* **357–358** 436 (1996)
62. Semond F et al. *Phys. Rev. Lett.* **77** 2013 (1996)
63. Lu W, Krüger P, Pollmann J *Phys. Rev. B* **60** 2495 (1999)
64. Lübbe M et al. *J. Vac. Sci. Technol. A* **16** 3471 (1998)
65. Yeom H W et al. *Phys. Rev. B* **58** 10540 (1998)
66. Yeom H W et al. *Phys. Rev. B* **61** R2417 (2000)
67. Pizzagalli L et al. *Phys. Rev. B* **60** R5129 (1999)
68. Shevlin S A, Fisher A J *Appl. Surf. Sci.* **162** 94 (2000)
69. Kitabatake M, Greene I E *Appl. Phys. Lett.* **69** 2048 (1996); *Jpn. J. Appl. Phys. Pt. 1* **35** 5261 (1996)
70. Douillard L, Aristov V Yu, Semond F, Soukiassian P *Surf. Sci. Lett.* **401** L395 (1998)
71. Soukiassian P et al. *Phys. Rev. Lett.* **79** 2498 (1997)
72. Semond F, Aristov V Yu, Douillard L et al. *Mat. Sci. Forum* **264–268** 387 (1998)
73. Aristov V Yu, Douillard L, Soukiassian P *Surf. Sci. Lett.* **440** L825 (1999)
74. Bellina J J (Jr.), Zeller M V *Appl. Surf. Sci.* **25** 380 (1986)
75. Hara S et al. *Surf. Sci.* **273** 437 (1992); *Thin Solid Films* **225** 240 (1993)
76. Fuyuki T, Yoshinobu T, Matsunami H *Thin Solid Films* **225** 225 (1993)
77. Hasegawa S et al. *Surf. Sci.* **206** L851 (1988)
78. Bermudez V M, Kaplan R *Phys. Rev. B* **44** 11149 (1991)
79. Powers J M et al. *Phys. Rev. B* **44** 11159 (1991)
80. Long J P, Bermudez V M, Ramaker D E *Phys. Rev. Lett.* **76** 991 (1996)
81. Yeom H W et al. *Phys. Rev. Lett.* **83** 1640 (1999); Shimomura M et al. *Surf. Sci.* **438** 237 (1999)
82. Craig B I, Smith P V *Surf. Sci.* **276** 174 (1992); Erratum, *ibid.* **285** 295 (1993)
83. Badzic P *Surf. Sci.* **269/270** 1152 (1992); *Diamond Relat. Mater.* **1** 285 (1992)
84. Halicioglu T *Thin Solid Films* **286** 184 (1996)
85. Dyson A J, Smith P V *Surf. Sci.* **396** 24 (1998)
86. Craig B I, Smith P V *Surf. Sci.* **256** L609 (1991)
87. Pollmann J et al. *Mater. Sci. Forum* **338–342** 369 (2000)
88. Pollmann J et al. *Appl. Surf. Sci.* **104–105** 1 (1996)

89. Käckell P, Furthmüller J, Bechstedt F *Appl. Surf. Sci.* **104–105** 45 (1996)
90. Käckell P et al. *Phys. Rev. B* **54** 10304 (1996)
91. Gutierrez R, Frauenheim Th *Mat. Res. Soc. Symp.* **423** 427 (1996)
92. Derycke V, Soukiassian P, Mayne A, Dujardin G *Surf. Sci. Lett.* **446** L101 (2000)
93. Derycke V et al. *Phys. Rev. Lett.* **81** 5868 (1998)
94. Catellani A, Galli G, Rigolli P L *Phys. Rev. B* **62** R4794 (2000)

β -SiC(100) surface: atomic structure and electronic properties

V.Yu. Aristov

*Institute of Solid State Physics, Russian Academy of Sciences,
142432, Chernogolovka, Moscow Region, Russian Federation
Tel. (7-095) 993-27 55. Fax (7-096) 524-97 01
E-mail: aristov@issp.ac.ru*

This review organizes and presents the current status of research relating to the composition, atomic and electronic structure, and electronic properties of various superstructures that were recently shown to exist on clean β -SiC(100) surfaces. In the past 10 years, considerable experimental and theoretical progress in clean β -SiC(100) surfaces has been made. In particular, various surface reconstructions have been identified and studied, and the controlled formation of highly stable, very long straight lines of Si dimers self-organizing on a β -SiC(100) surface have been found, with the line separation being determined by the annealing time and temperature. Many aspects of the field (composition, unit cell models, etc.) are still subject to debate, however.

PACS numbers: 68.35.Rh, **68.65.+g**, 71.10.Pm, **73.61.-r**

Bibliography — 94 references

Received 29 March 2001