

S 钝化 GaAs(100) 表面的电子特性^y

马 丽, 危书义, 汪建广

(河南师范大学物理与信息工程学院, 河南 新乡 453002)

摘要: 用 TB-LMTO 方法研究单层的 S 原子在理想的 GaAs(100) 表面的化学吸附, 对 GaAs(100) 表面是 Ga_r 和 As_r 中断两种情况分别进行考虑. 计算了 S 原子在不同位置的吸附能、吸附体系与清洁的 GaAs(100) 表面的层投影态密度, 以及电子转移情况. 结果表明, 两种情况下 S 原子都是桥位吸附最稳定, S-Ga 相互作用比 S-As 稍强, S 钝化 GaAs(100) 表面可以取得明显的钝化效果.

关键词: 化学吸附; 钝化; 超级原胞; 相互作用

中图分类号: O469 文献标识码: A

1 引言

砷化镓(GaAs) 具有直接能隙、高的电子和空穴迁移率, 以及高饱和漂移速率等优越性, 是一种非常重要的高速和发光半导体器件材料. 但 GaAs 表面非常容易氧化, 形成很高的表面和界面态密度, 从而引起费米能级钉扎和高表面复合速度, 影响了 GaAs 器件的性能和稳定性. 为了解决这个问题, 很多研究者对 GaAs 表面采用各种化学钝化方法, 消除其表面氧化层, 降低表面态密度, 提高 GaAs 材料的电学和光学性能. 如 [NH₄]₂S_x^[1], CH₃CSNH₂^[2] 和 P₂S₅/NH₄OH^[3] 以及 S 气氛辉光放电法^[4] 等处理 GaAs(100) 表面, 其光学和电学性质有明显的提高. 这些方法都取得了显著的钝化效果. 但对

S 与 GaAs 的键合状态仍众说纷纭, 没有取得一致的看法. 本文用 TB-LMTO(紧束缚下的 Muffin-tin 轨道线性组合) 方法, 采用超级原胞近似, 研究了单层的 S 原子在 Ga_r 和 As_r 中断的 GaAs(100) 表面吸附的电子结构和性质.

2 方法和模型

用于计算的超级原胞模型如图 1(a) 所示, 它是 S 在 Ga_r 中断表面吸附的模型, 与文献[5, 6] 中所用的模型相似.

该模型用 7 个 Ga 原子层和 6 个 As 原子层来模拟基底, 在基底的两边各吸附一单层的 S 原子, 同时包含相当于 5 个原子层厚度的真空层, 且模型

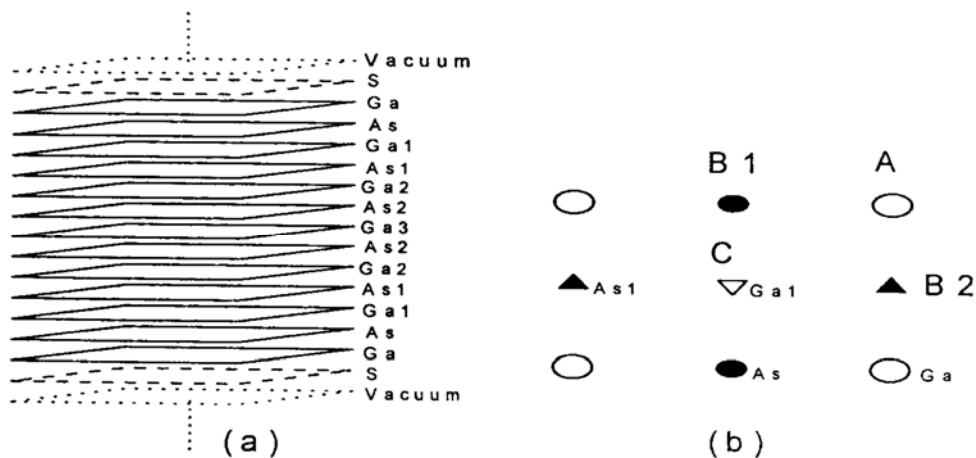


图 1 (a) S 在 Ga_r 中断 GaAs(100) 表面吸附的超级原胞模型, (b) 超级原胞俯视图

^y 收稿日期: 2002 - 03 - 14; 修改日期: 2002 - 03 - 14

* 基金项目: 河南省自然科学基金资助项目(0111051000)

作者简介: 马 丽(1979-), 女(汉族), 河南荥阳人, 硕士研究生, 从事固体表面与界面的研究.

具有镜面对称性. 我们用增加基底厚度的办法与该模型做对比, 结果表明所取模型是合理的. 对于 S 在 As-中断表面的吸附, 超级原胞可用交换图 1(a) 中 Ga 和 As 原子的位置来得到.

S 原子在 GaAs(100) 表面有 4 种可能的吸附位置(图 1(b)), 即顶位 A、桥位 B1、反桥位 B2 和四重位 C. 在计算时, 我们只考虑 $Ga4s^24p^1$, $As4s^24p^3$, $S3s^23p^4$ 的价电子态, 芯态电子被冻结.

3 计算结果、分析和讨论

对 S 原子在 GaAs(100) 表面 4 种不同吸附位置的计算表明. 在 Ga-和 As-中断表面都是桥位吸附最稳定, 因此在下面的分析中我们只考虑桥位吸附.

3.1 吸附能

单个 S 原子的吸附能是由吸附体系的总能量与未吸附体系的能量和孤立原子的能量差求得的^[7]. 对于 S 原子在 Ga-中断表面的吸附, 桥位处的 S 原子位于表面上方 1.08 Å 时最稳定, 吸附能是 -8.67 eV. 而 S 在 As-中断表面吸附时, 桥位处的 S 原子位于表面上方 1.14 Å 时最稳定, 吸附能是 -7.71 eV. 吸附能的不同说明 S 在 Ga 表面比在 As 表面稳定. 而它们的差别并不很大, 说明 S 原子与表面的 Ga 和 As 原子都有较明显的相互作用, 只是 S-Ga 键比 S-As 键稍强, 这与赝势法^[8] 计算得到的结果一致, 与实验上^[7,9] 所得的结论退火处理时

S-As 键不稳定, 在表面上只剩下 S-Ga 键相符.

3.2 态密度

未吸附 GaAs(100) 体系的层投影态密度(LP-DOS)如图 2 所示, 吸附体系的 LPDOS 如图 3 所示, 块材的态密度用虚线做出以示对比. 零点能调整在费米能级处(图中虚线所示).

对 Ga-中断模型, 从图 2(a) 中可以看到, 第一层的投影态密度与块材很不相同, 一个明显的表面态尖峰出现在价带边缘, 它主要是 $Ga4s4p$ 态和 $As4p$ 态的贡献. 第二、第三层的投影态密度与块材基本相同. 当 S 原子吸附在 Ga 表面时(图 3(a)), 第一层的表面态明显消失, 这主要是吸附层 $S3p$ 态与表层 $Ga4s4p$, $As4p$ 态相互作用的结果. 第一、二、三层的投影态密度都与块材基本相同, 说明我们所选模型是合理的.

对 As-中断模型, 从图 2(b) 中可以看到, 表面层在费米能级附近有一尖峰并伴有在能隙中的扩散, 这主要来自 $As4p$, $Ga4p$ 态. S 原子吸附后, 表面态明显降低, 这主要是由于 $S3p$ 态与 $As4p$, $Ga4p$ 态的相互作用. 第三层的态密度仍与块材基本相同, 这也表明我们所选模型是合理的.

从以上分析中可以看出, S 钝化 GaAs(100) 表面可以取得明显的钝化效果. 同时我们也看到, As 表面层能隙中表面态的消除没有 Ga 表面理想^[10].

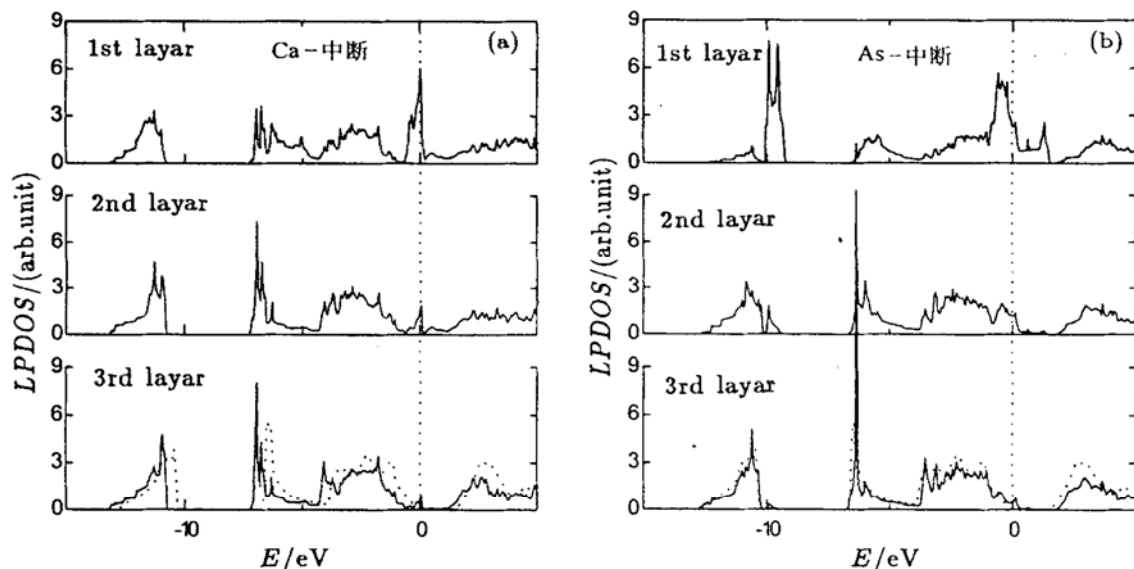


图 2 未吸附 GaAs(100) 体系的表面层状投影态密度
虚线是块材的投影态密度, 垂线标明的是费米能级.

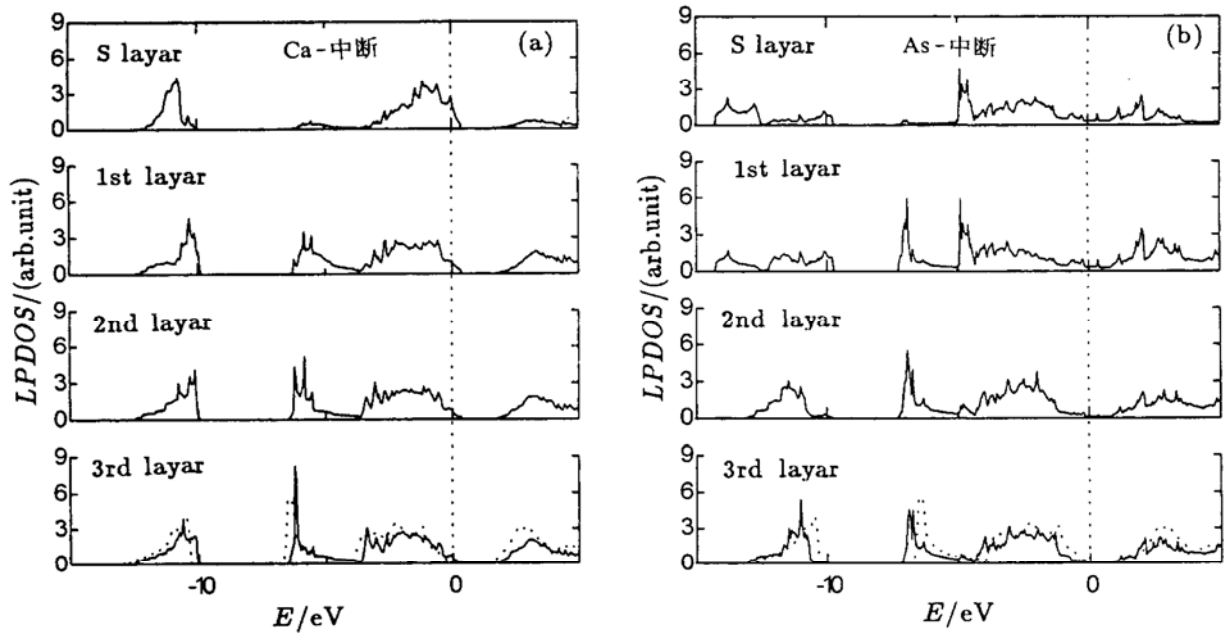


图 3 S 吸附体系的表面层状投影态密度
虚线是块材的投影态密度, 垂线标明的是费米能级.

3.3 电子转移

通常, 化学吸附都伴随着吸附层和基底之间的电子转移. 表 1 给出的各层的有效电子数包括原胞中相应层的所有原子和空球的总有效电子数.

表 1 原胞中各层的有效电子数(以电子为单位)

S 在 Ga-中断表面的桥位吸附			
原子	第一层	第二层	第三层
Ga	- 0.12 (- 0.65)	- 0.09 (- 0.04)	- 0.09 (- 0.10)
As	0.10(0.15)	0.09(0.09)	0.09(0.10)
S 在 As-中断表面的桥位吸附			
原子	第一层	第二层	第三层
As	- 0.02(- 0.58)	0.10(0.11)	0.10(0.09)
Ga	- 0.06(0.02)	- 0.10(- 0.10)	- 0.10(- 0.09)

这里 Ga(或 As) 指的是在 Ga(或 As) 原子层的所有原子和空球的总有效电子数, 括号中的是相应的未吸附时的电子数.

从表 1 中, 我们可以看到第三层的有效电子数基本上没有受到吸附作用的影响. 对 S 原子在 Ga-中断表面的吸附, 与未吸附表面做比较, 第一层的

Ga 原子得到 0.53 个电子, As 原子失去 0.05 个电子, 第二层的 Ga 原子失去 0.05 个电子. 这样, 共有 0.43 个电子在界面处发生转移. 对 S 原子在 As-中断表面的吸附, 第一层的 As 原子得到 0.56 个电子, 而 Ga 原子失去 0.08 个电子. 因此, 有 0.48 个电子从 S 层转移到表面层. 这说明, S 与 Ga, As 都发生相互作用, 且差别不大. 另外, 还可以看到未吸附 S 原子时表面层的电子数与内层差别很大, S 原子吸附后表面层的电子数与内层基本相同. 这也可以说明 S 对 GaAs 有很好的钝化效果.

4 结论

用 TB-LMTO 方法研究了单层的 S 原子在 GaAs (100) 表面化学吸附的电子结构和性质. 在 Ga-和 As-中断表面都是桥位吸附最稳定, S-Ga 相互作用比 S-As 稍强. S 钝化 GaAs(100) 表面可以取得明显的钝化效果, 但 As 能隙中表面态的消除没有 Ga 理想.

参 考 文 献:

[1] Yuan Z L, Ding X M, Hu H T, *et al.* Investigation of Neutralized (NH₄)₂S Solution Passivation of GaAs(100) Surfaces [J]. Appl Phys Lett, 1997, 71(21): 3 081.

[2] Lu E D, Zhang F P, Xu S H, *et al.* A Sulfur Passivation for GaAs Surface by an Organic Molecular, CH₃CSNH₂ Treatment [J]. Appl Phys Lett, 1996, 69(15): 2 282.

- [3] 钟战天, 罗文哲, 牟善明等. P_2S_5/NH_4OH 处理 GaAs(100) 表面的电子能谱研究[J]. 物理学报, 1992, **41**(4): 683.
- [4] 陈溪莹, 曹 华, 徐前江等. GaAs 表面 S 钝化方法: S 气氛辉光放电法[J]. 半导体学报, 1996, **17**(6): 476.
- [5] Lu Wenchang, Zhang Kaiming, Xie Xide. Adsorption of a Monolayer of Iron on β -SiC(100) Surfaces[J]. Phys Rev, 1993, **B48**(24): 18 159.
- [6] Yang Zongxian, Zhang Kaiming, Ke Sanhuang, *et al.* Electronic Structure of Mn on the GaAs(100) Surface [J]. Phys Rev, 1997, **B56**(11): 6 727.
- [7] Zhang X Y, Lu E D, Xu P S, *et al.* A Novel Sulfur-passivation Method and Magnetic Overlayers on Passivated III V Semiconductor Surface[J]. Vacuum, 2000, **57**(2): 145.
- [8] Takahisa Ohno, Kenji Shiraishi. First-principles Study of Sulfur Passivation of GaAs(001) Surface[J]. Phys Rev, 1990, **B42**(17): 11 194 .
- [9] Ke Y, Wang X W, Tan N, *et al.* Structural Studies of Sulfur-passivated GaAs(100) Surfaces with LEED and AFM[J]. Surface Science, 1998, **415**(1—2): 29.
- [10] Seo J M. Potassium Reaction on Sulfur-passivated GaAs(100) [J]. Journal of Vacuum Science Technology, 2000, **A18**(5): 2 513.

Electronic Structure of Sulfur Passivation GaAs(100) Surface^{*}

MA Li, WEI Shuyi, WANG Jianguang

(College of Physics & Information Engineering, Henan Normal University, Xinxiang 453002, China)

Abstract: The adsorption of one monolayer S atoms on an ideal GaAs(100) surface is studied by using the self-consistent tight-binding linear muffin-tin orbital method. The S atoms chemisorption on Ga-terminated and As-terminated surface are considered respectively. Adsorption energies of a S atom on different sites are calculated. The layer projected density of states for S atoms covered GaAs(100) surface is studied and compared with that of the clean surface. The charge transfer is investigated. It is found that S atoms adsorb on the bridge site on both GaAs surfaces, and S—Ga interaction is a little stronger than S—As interaction, so the effect of S passivation GaAs(100) surface is using obvious.

Key words: chemisorption; passivation; supercell; interaction

* **Foundation item:** National Natural Science Foundation of Henan Province(0111051000)