

# 表面结构的最新进展

## ——第四届国际表面结构会议简介

蒋平

(复旦大学李政道物理学综合实验室, 复旦大学应用表面物理国家重点实验室)

**[摘要]** 第四届国际表面结构会议(ICSOS-IV)最近在上海举行。与会代表交流了表面和界面结构研究方面的最新成果。本文除介绍了会议概况外,着重介绍在会上引起普遍关注的热点内容。

1993年8月16日至8月19日在上海举行了第四届国际表面结构会议(ICSOS-IV)。ICSOS三年一度,首届会议1984年在美国加州伯克利市举行;第二届1987年在荷兰阿姆斯特丹市举行;第三届又回到美国,于1990年在威斯康星州的密沃基市举行。本届会议是ICSOS第一次在中国,也是第一次在亚洲举行。国际纯粹与应用物理联合会(IUPAP)、香港王宽诚教育基金会、国家教委与国家自然科学基金委员会等对会议提供了赞助。

ICSOS的主题是交流国际上表面和界面结构研究的最新成果,内容涉及:确定表面与界面结构的实验与理论方法,新技术、新材料,表面的原子、电子结构与表面物理、化学性质的关系,以及动力学过程的计算机模拟等。会议偏重于交流基础性课题论文,但也吸纳应用性研究论文。ICSOS是国际上这一领域最高学术水平的专题性会议。本届会议共有来自13个国家和地区的131位代表参加,其中包括许多本领域的知名学者,如美国的S. Y. Tong(唐叔贤,任本届会议主席),C. S. Fadley和Y. R. Shen(沈元壤),德国的M. Henzler和K. Heinz,法国的G. Le Lay和日本的K. Takayanagi等。我国有51位代表与会,其中3位来自台湾,包括著名的郑天佐(T. T. Tsong)教授。本届ICSOS由复旦大学应用表面物理国家重点实验室主办。谢希德教授担任会议副主席兼本地组织委员会主席。

ICSOS-IV是一次成功的国际会议。会议承袭了以往三届会议的传统方式,以大会全体会议和张贴报告两种形式进行,不设分会场。但为了使与会者能更充分地交流各自的研究成果,本届组委会首次从张贴报告中遴选出一批,特意安排其作者在全体会议上作短时间介绍。这一做法也使全体会议与张贴报告之间的联系更为紧密,受到与会者的普遍欢迎。

金属和半导体的表面及其上的化学吸附,历来是结构研究中备受瞩目的重要课题。本届会议一共为元素半导体和金属的表面及其化学吸附安排了六场全体会议,几乎占口头报告的一半。在谢希德教授致开幕辞和复旦大学前任校长华中一教授代表东道主对来宾表示欢迎后开始的首场全体会议的议题即为清洁金属表面。首先由台湾物理研究院的郑天佐教授作题为“Ir表面动力学行为”的邀请报告。他报告了吸附原子自扩散的两种机理,在(001)表面上为

本文于1993年9月25日收到

原子位移,在(113)与 $1\times 2$ 重构的(110)表面为原子跳跃,而在 $1\times 1$ 的(110)表面则两种机理都起作用。作者还发现在(001)表面存在空心原子团与海绵状二维表面层。美国布鲁克海文实验室的D. Gibbs的邀请报告介绍了用高分辨率X射线散射技术对Pt和Au低指数表面的结构和相变行为的表征。在一定的温度范围,表面出现比面心立方(111)面原子排布密度更大的近似六角密集结构的重构层。随着温度变化会出现一系列新的结构和各种相变,诸如公度-非公度、有序-无序、转动及粗糙化等;而在高温时更观察到表面会分成高度台阶化与无台阶的区域。美国加州圣荷塞IBM的S. Chiang(姜秀兰)的报告,用扫描隧道显微镜对氧在W(110)表面吸附的几个有序相的观察,发现氧吸附于三度配位处,而在表面原胞内两个等价吸附位之间的转换会导致稳定畴的形成。依阿华州立大学的K. M. Ho(何启明)指出,近年来第一性原理总能量计算已成为表面结构研究的有效手段。他所作的邀请报告介绍了对吸附Au或Ag的Si(111) $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ 表面结构,以及在Ag(110)表面外延Au的初始阶段形成的结构的理论研究。他们的计算表明,吸附Ag的Si(111) $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ 的结构符合蜂窝链三体(HCT)模型。值得指出的是,ICSOS是系列性学术会议,有一些成为热点的课题仅在一次会议上可能难以达到统一的认识,会后的进一步研究又会使这个课题成为下一届会议讨论的中心。Si(111)表面吸附Ag的结构就是一个典型的例子。关于这种结构的研究已经持续多年,一直争论不休。许多学者提出了各种不同的模型试图解释这种结构,都没有达成一致的结论。就在上一届的ICSOS上,谢希德教授在她的邀请报告中就指出,对这一结构有许多问题依然存在,例如这种吸附表面到底是半导体还是金属,最顶层的原子是硅还是银都有待进一步研究。1988年,日本的T. Takahashi等人提出HCT模型。在ICSOS-III上E. Vlieg等人根据X射线驻波测量的数据支持这一模型。K. Takayanagi根据高分辨率反射电镜的观察,认为银原子形成HCT结构,而硅原子的排列则是在缺顶层(Missing-Top Layer)的硅晶格上形成蜂窝状层。在本届会议上,除去何启明等的理论研究之外,日本好几个研究组提出了有关这一结构的实验性报告。A. Ichimiya等用反射式高能电子衍射(RHEED)方法所得的实验结果也认为,最佳的模型是HCT,下面的硅原子呈三体(Trimer)式排列。S. Ino介绍了有RHEED结合新技术全反射角X射线谱(TRAXS)对Sn在吸附Ag的Si(111) $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ 表面上外延生长的观测。K. Takayanagi的邀请报告“用于表面研究的原位(in situ)超高真空(UHV)电子显微术和原位扫描隧道显微术(STM)”则介绍了用高温STM观察由吸附金属所引致的Si(111) $7\times 7$ 表面的重构过程,还指出,应用透射电镜(TEM)甚至可以看到位于Si(111)表面的单个铋原子。T. Abukawa等人也报告了对Ag/Si(111) $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ 与Ag/Ge/Si(111) $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ 结构的比较性研究。Ag/Ge/Si(111) $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ 结构是在先吸附Ge的Si(111)表面再吸附一个银单层而形成的。他们将俄歇电子衍射(AED)与新发明的掠角入射背散射中能电子衍射(GBMEED)技术结合起来研究结构。AED用于鉴定吸附原子并得出其结构信息;GBMEED则用来探索亚单层的吸附原子与衬底之间的结构关系,从而可以确定吸附原子所处的位置。从本届会议上发表的研究报告来看,金属在Si(111)面吸附形成的结构迄今仍是表面结构的重点研究对象。

吸附半导体表面另一个引人注目而又长期未有定论的课题是碱金属在Si(100)表面的吸附位置。例如对钾在Si(100)表面吸附结构的看法就是众说纷纭。早期有人认为钾吸附在支撑位,而复旦大学叶令等的计算表明吸附在空洞位,Abukawa等人又认为吸附形成面层。在

上届会议上,法国的 P. Soukiassian 等人报告了用 STM 对钾吸附在 Si (100)  $2 \times 1$  表面形成的结构的观察。当复盖度低于半个单层时,吸附的钾原子形成线性链垂直于 Si 二体 (Dimer) 行,并且有各种吸附位置,包括支撑位、空洞位和悬键位,因而没有长程序。但在复盖度达一单层时,钾吸附形成的原子链的方向则变得与 Si 二体行平行。对这一情形,作者虽然倾向于认为吸附于空洞位,但并未排除支撑位的可能。在本届会议上,他报告了用与偏振有关的广延 X 射线吸收精细结构 (PEXAFS),结合同步辐射芯态与价带光电子碱发射谱,以及唐少平等人所作的从头算全电子总能量计算而得到的一个单层碱金属 (Na, K, Cs) 原子吸附在 Si (100)  $2 \times 1$  表面的结构,明确肯定碱金属原子均吸附于空洞位。而且,实验与理论所得到的碱金属-硅原子之间的距离也极相符,从而进一步澄清了在上届 ICSOS 上所作的报告,朝着对这一类结构的结论性认识迈进了一大步。

在确定表面结构的新技术方面,除去上面提到的 TRAXS 与 GBMEED 外,新的成像技术也是比重相当大的讨论内容。以前在夏威夷、现在加州大学劳伦斯伯克利研究所的 C. S. Fadley 教授长期卓有成效地致力于光电子衍射的研究。在本届会议上他作了题为“光电子衍射与全息:若干新方向”的邀请报告,指出新近从光电子衍射技术演变而来的光电子全息术能直接提供发射中心近邻的三维象。他详细评论了这一新技术,使听众对之有相当全面的了解。美国劳伦斯利弗摩尔实验室的 J. G. Tobin 在他的邀请报告“与能量有关的光电子衍射表面结构成像”中介绍了又一种新方法,将实验上得到的与能量有关的光电子衍射数据进行傅里叶变换而产生真实的表面合金象。这种方法能以原子分辨率得到表面原子位置。根据这一方法,先前没有弄清的 C ( $2 \times 2$ ) Au/Cu (001) 的结构得到了澄清,已肯定其为表面合金而非覆层结构。台湾学者 C. M. Wei 也报告了用多重能量相位迭加方法将测量得到的 Kikuchi 图作傅里叶变换能以  $1 \text{ \AA}$  的分辨率直接获得表面结构。他们已成功地得到银单晶 (100) 与 (111) 表面的高质量三维原子象。此外,唐叔贤教授在他的“局部低能电子衍射 (LEED) 和低能质子衍射 (LEPD)”报告中比较了二者的区别。LEED 涉及的电子散射因子中存在强共振,而质子散射因子中则没有。因而对 LEPD 而言,多重散射的影响要弱得多。这样 LEPD 就具有弹性散射弱而非弹性散射强的双重优点,成为表面结构分析中更为理想的工具。另外,近年来越来越发现表面上吸附的原子和分子会使衬底结构畸变,例如在金属表面最外面的几层原子会因此而上下左右位移,只是由于这类结构涉及太多的结构参数,使传统的 LEED 实验和理论难以处理。美国加州大学劳伦斯伯克利研究所的 M. V. Van Hove 博士在“用 LEED 确定吸附物引致的衬底弛豫”一文中介绍了他们最近发展的自动化张量 LEED 技术。这种技术根据 Rous 与 Pendry 新近提出的张量 LEED 理论可以同时确定 30 个以上的结构参数,从而能够利用通常的亮度式或数字式的 LEED 设备测得的 I-V 曲线得到相当复杂的表面结构,诸如 Pt (111)  $-2 \times 2$ -NO, Re (0001)  $-2 \sqrt{3} \times 2 \sqrt{3}$ -R30°-6S, Rh (111)  $-\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ R30°-CO 以及 Rh (111)  $-3 \times 3$ -[C<sub>6</sub>H<sub>6</sub>+2CO] 等。

近年来“表面是一种新材料”的观点已为越来越多的人所接受。在这方面,金刚石膜是大家瞩目的一个焦点,在本届 ICSOS 上也有三篇报告论及。英国诺丁汉特伦特大学的 H. G. Maguire 介绍了用 LEED 与 STM 及原子力显微镜,对用低压化学汽相淀积 (LPCVD) 法同质生长在天然金刚石 (100) 与 (110) 表面的传导性与绝缘性的金刚石膜观察的结果,发现在不同的区域有不同的形貌。中国科学院的冯克安则报道了他们用 DVX 方法对用化学汽相淀

积法在Pt (111) 表面生长金刚石膜初始阶段形成机理的理论探讨。

化合物半导体,特别是Ⅲ-V族的GaAs是科技界长期研究的对象,希望其能作为电子工业的重要材料。但由于表面没有天然氧化层的钝化作用,其实际应用受到很大限制,造成至今人们对硅材料似乎情有独钟的局面,也因此化合物半导体表面有效钝化的方法一直是人们孜孜以求的探索目标。复旦大学王迅教授在本届会议上所作题为“硫钝化的GaAs表面的成份和结构”的邀请报告介绍了复旦大学应用表面物理国家重点实验室发现的一种迄今最为有效而又简便易行的钝化方法,可使表面复合速度下降好几个数量级。他们用电子谱仪对硫钝化的表面成份与结构以及钝化层的形成机理进行了研究。

此外,氧化物表面、合金表面与生长外延也是ICSOS-IV的重要内容,这里不再赘述。

在本届会议上,有好几位是大陆赴海外深造学成的青年学者,他们的研究成果给与会者留下了深刻的印象,也为本届会议增色不少。

ICSOS-IV在上海召开,使国内许多学者特别是更多的年轻人有机会参加,这对促进我国表面科学的研究和发展已经起了、并将继续发挥积极的作用。

第四届国际表面结构会议论文集将于1994年上半年由新加坡World Scientific Publishing Co. Ltd. 出版,有事可与笔者联系。

## RECENT PROGRESS IN STRUCTURE OF SURFACES——A BRIEF REPORT ON THE FOURTH INTERNATIONAL CONFERENCE ON THE STRUCTURE OF SURFACES HELD IN SHANGHAI

Jiang Ping

*(Fudan-T. D. Lee Physics Laboratory, State Key Laboratory of Surface Physics, Fudan University)*

### Abstract

The Fourth International Conference on the Structure of Surfaces (ICSOS-IV) was held in Shanghai on August 16—19, 1993. An introductory report, combined with some highlights of the Conference, will be presented in this paper.