

М.Г. НАХОДКІН, М.І. ФЕДОРЧЕНКО

Київський національний університет імені Тараса Шевченка  
(Вул. Володимирська, 64/13, Київ 01601)

УДК 537.533.2

**ВЗАЄМОДІЯ КИСНЮ ТА ГАДОЛІНІЮ З Si(100)-2 × 1.  
УТВОРЕННЯ СИСТЕМИ З РОБОТОЮ ВИХОДУ 1 eV**

Методами електронної спектроскопії досліджено зміну електронних властивостей поверхні Si(100) при створенні на ній багаточарової структури окислених атомів Gd. Показано, що внаслідок ряду циклів адсорбції атомів Gd та атомарного кисню при кімнатній температурі на поверхню Si(100)-2 × 1 та відпалу отриманої структури при  $\approx 600^\circ\text{C}$  робота виходу поверхні зменшується від 4,8 eV до значень, менших від 1 eV. Встановлено, що зменшення роботи виходу зі збільшенням циклів обробки супроводжується окисленням атомів Gd та Si і поступовим зменшенням концентрації Si в приповерхневій області. Отримані результати пояснюються утворенням на поверхні дипольного шару O-Gd.

Ключові слова: адсорбція, Gd, O, Si(100)-2 × 1, окислення, робота виходу, дипольний шар.

**1. Вступ**

Дослідження взаємодії атомів рідкоземельних елементів з поверхнями напівпровідників стимулюється як необхідністю вдосконалення знань про властивості систем, до складу яких входять елементи з незаповненими  $f$  оболонками, так і подальшим розвитком електроніки і наноелектроніки, де ці системи можуть знайти застосування, наприклад, оксиди та силікати Gd з більшими діелектричними проникностями, ніж у SiO<sub>2</sub> [1] тощо. Викликає інтерес здатність Gd утворювати нанодоти з унікальними властивостями на поверхні Si [2–5] і те, що гексаборид гадолінію (GdB<sub>6</sub>) має малу роботу виходу ( $\varphi \approx 1,5$  eV) й розглядається як матеріал емісійної електроніки [5, 6]. У зв'язку з усім цим взаємодія рідкоземельних елементів і, зокрема, Gd досить інтенсивно вивчається різними групами дослідників [7–19]. У цих роботах було встановлено, що Gd промотує окислення поверхні Si. Ефективність окислення залежить від ступеня покриття атомами Gd поверхні Si, за виключен-

ням випадків, коли внаслідок відпалу на поверхні утворюються упорядковані силіциди Gd [7, 8, 16]. Кoadсорбція Gd та молекулярного кисню на поверхнях Si, а також адсорбція Gd на попередньо окислених поверхнях Si призводить до утворення різноманітних інтерфейсів Si-Gd-O [13, 18]. Останнім часом у зв'язку із розвитком спітроніки було виявлено, що Gd як феромагнетик може знайти застосування ще й для розробки нових пристроїв, у яких використовується спін-поляризоване тунелювання [21], наприклад, спін-польовий транзистор (spin MOSFIT) з напівпровідниковим каналом провідності та керованими феромагнітними витоком та стоком [22]. Його витоки та стоки пропонується виготовляти з Gd, використовуючи його феромагнетизм та здатність утворювати малі значення висот бар'єрів Шотткі на поверхні кремнію, завдяки малій роботі виходу самого Gd [22, 23]. Але в літературі мало уваги приділялось вивченню змін роботи виходу таких систем. Зокрема, в роботі [14] вказано, що шар Pt товщиною близько 1 нм зменшує роботу виходу поверхні системи SiO<sub>2</sub>/Si на 2,7 eV. У наших попередніх роботах [24, 25] було

показано, що пошарова адсорбція атомів Gd та O суттєво зменшує роботу виходу грані (113) слабо легованого *n*-типу кремнію, яка стає значно меншою роботи виходу самого Gd. Шаруваті системи Si-Gd-O на поверхні Si(113) дозволяють отримувати майже стабільні з малою роботою виходу  $\varphi \approx 1$  еВ поверхні інтерфейсу. Робота виходу такої поверхні майже не змінюється при перебуванні її у надвисокому вакуумі, а після перебування в атмосфері повітря відновлюється відпалом при температурах до 600 °С. Ми висловили гіпотезу, що за зменшення  $\varphi$  відповідає утворений біля поверхні дипольний шар O-Gd [25], який спричиняє утворення поверхні з негативною електронною спорідненістю. Але, на жаль, результати проведених досліджень не дали змоги дати чітку відповідь про структуру приповерхневого шару. Не було зрозуміло, яку роль відіграє структура та вид і ступінь легування використаної поверхні Si(113). Також не було зрозуміло, яку роль може відігравати утворення на першому етапі упорядкованого силіциду Gd. Враховуючи те, що для утворення найбільш ефективної системи Si/O/Cs з негативною електронною спорідненістю раніш використовувалась поверхня Si(100) з виродженим *p*-типом легування [28], цікаво було б використати таку саму поверхню Si в системі Si/O/Gd. Виходячи зі всього цього, метою роботи було дослідити пошарову адсорбцію атомарного кисню та гадолінію на поверхні Si(100) з виродженим *p*-типу ступенем легування за допомогою методів спектроскопії фотоелектронів валентних рівнів та оже-електронів, звертаючи особливу увагу на зміни роботи виходу, що відбуваються на поверхні цієї системи.

## 2. Методика експерименту

Дослідження проводились, як і в наших попередніх роботах [24–26], у надвисоковакуумній камері з базовим тиском  $2 \cdot 10^{-10}$  тор, яка була оснащена спеціальними пристроями для вимірювань дифракції повільних електронів (ДПЕ), фотоелектронної спектроскопії з енергією квантів у діапазоні  $h\nu = 7,7\text{--}10,8$  еВ та оже-електронної спектроскопії. У вакуумній камері знаходились іонна гармата для очищення поверхні зразків іонами Ag та системи: (1) – контрольованого нанесення шарів Gd потрібного ступеня покриття  $\Theta_{\text{Gd}}$  та (2) – обробки зразків атомарним киснем з заданою експозицією

$\xi = p(\text{тиск}) \cdot t(\text{час})$ . В камеру надходив молекулярний кисень. Але під час експозиції  $\xi$ , що визначалась у лєнгмюрах (Л) ( $1 \text{ Л} = 10^{-6} \text{ тор} \cdot \text{с}$ ), зразки Si розташовувались на відстані  $\approx 1$  см від розігрітого до  $\approx 2400$  °С вольфрамового дроту, на поверхні якого молекули O<sub>2</sub> дисоціювали на атоми. Отже, на відміну від попередніх дослідників ми використовували грань монокристала Si(100)- $2 \times 1$  як підкладку й замість молекулярного кисню використовували атомарний кисень, виключаючи із розгляду складний процес дисоціації молекулярного кисню на поверхні кремнію. Фотоелектронні спектри (ФЕС) вимірювались за допомогою сферичного аналізатора гальмівного типу з роздільною здатністю  $\approx 0,1$  еВ. Енергії квантів, що збуджують фотоелектрони, були вибрані рівними 7,7 еВ і 10,2 еВ, для того, щоб можна було легше оцінювати роботу виходу. Робота виходу ( $\varphi$ ) визначалась із відомого співвідношення  $\varphi = h\nu - w$ , де  $w$  – енергія електронів, які збуджуються з рівня Фермі ( $E_F$ ). Вона визначається з енергетичної відстані від  $E_F$  до низькоенергетичного краю ФЕС. Оскільки система могла бути острівцевою [9, 10, 17, 23], то низькоенергетичний край ФЕС екстраполювався лінійними функціями [29], як це наведено на рис. 2. Зразки Si(100) вирізались із пластин, легваних бором ( $\rho \approx 0,02$  Ом·см). Після попередньої хімічної обробки зразки очищались у вакуумній камері за допомогою декількох циклів бомбардування іонами аргону та відпалу при температурі  $\approx 600$  °С. Після очистки в умовах надвисокого вакууму на поверхнях Si(100) методом ДПЕ реєструвались чіткі рефлекси надструктури  $2 \times 1$ , а оже-спектри не фіксували помітних забруднень киснем та вуглецем. На очищену поверхню наносився Gd із ступенем покриття  $\approx 6$  моношарів (МШ). Після відпалу системи до 600 °С впродовж 5 хвилин біля поверхні утворювався силіцид Gd з чіткою картиною рефлексів ДПЕ  $2 \times 1$  і відповідними кривими ОЕС та ФЕС (криві *b* на рис. 1, 2). Стартовий ступінь покриття Gd і температура відпалу вибирались такими, щоб отримувати вихідну систему в стаціонарному стані, що витікало із наших попередніх досліджень [24, 25]. Цей стартовий зразок почергово експонували у атомарному кисні з експозиціями, достатніми для насичення окислення Si [7, 9], наносили шари Gd і відпалювали. Температура відпалу вибиралась  $T \approx 600$  °С, при якій ще не спостерігаються істотні зміни скла-

ду інтерфейсу, що встановлювалось за допомогою ОЕС [15], бо згідно з [5] Gd навіть при 1200 °C не випаровується із поверхні Si, лише дифундує в об'єм, а після охолодження сегрегує на поверхню. Після першої експозиції в кисні (250 Л) поверхня силіциду Gd розупорядковувалась і надалі після наступних відпалів та нанесень Gd на поверхні досліджуваних систем не реєструвались будь-які рефлекси ДПЕ.

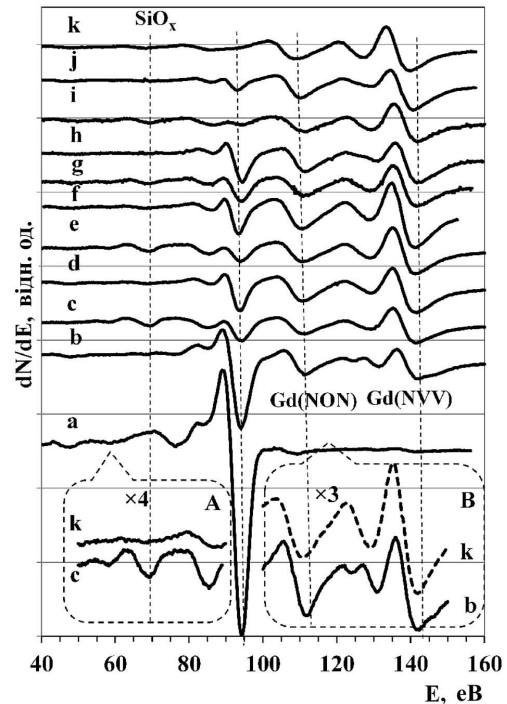
### 3. Результати досліджень

На рис. 1 і 2 наведені типові ОЕС та ФЕС для одного із циклів змін, що відбуваються на поверхні зразка з утвореним силіцидом Gd (криві *b-k*) після кожної чергової експозиції в атомарному кисні, нанесенні додаткових шарів Gd та відпалів. Термінами  $\sum \Theta_{Gd}$  та  $\sum \xi$  позначені, відповідно, сумарні значення товщин нанесених плівок Gd та експозицій зразка в кисні.

Для порівняння на тих же рисунках кривими *a* наведені відповідні спектри для вихідної поверхні Si(100)-2 × 1. Із порівняння кривих *a* і *b* на рис. 1 можна зробити висновок, що після нанесення на Si 6 МШ Gd і відпалу системи до 600 °C, зменшується оже-сигнал Si LVV й з'являються характерні оже-лінії в діапазоні енергій 100–160 еВ, притаманні переходам Gd NON і NVV. Привертає увагу до себе форма Gd NVV переходів. З кривих *b* на рис. 1 та на вставці В рис. 1 видно, що це гребінка трьох піків (125, 130 та 140 еВ). Їх форма відповідає формі, яка приводиться в довідниках оже-спектрів для Gd [16, 27]. ФЕС утвореного силіциду (криві *b* на рис. 2) характеризується помітною густиною станів поблизу  $E_F$ . Робота виходу силіциду виявилась рівною  $\approx 4$  еВ. Появу низькоенергетичного плеча ФЕС на кривих *b* можна пов'язати з утворенням острівцевої структури поверхні.

Після першої експозиції в атомарному кисні (250 Л) оже- та фотоелектронні спектри системи відчутно змінюються (криві *c* на рис. 1 та 2, та на вставці А на рис. 1). В оже-спектрі зменшується оже-лінія чистого Si (92 еВ) та з'являється оже-лінія окисленого Si (68 еВ). Форма Gd NVV лінії змінюється таким чином, що зникає пік при  $\approx 125$  еВ. Це може бути зумовлено окисненням Gd [25].

У подальших циклах нанесення додаткових шарів Gd (криві *d, f*), коли зразок до їх нанесення експонувався у кисні та відпалювався, величина оже-ліній NON і NVV Gd мало змінюється, але форма ліній NVV Gd відповідає формі, яку мають атоми окисленого Gd. Також помітно збільшується інтенсивність оже-ліній Si LVV та зменшується оже-лінія окисленого кремнію (68 еВ). У той самий час в ФЕС після нанесення цих додаткових шарів Gd (криві *d, f*) з'являються стани нижче на 1,8 еВ від  $E_F$  і не з'являються додаткові стани вище до  $E_F$ . Робота виходу в системі з  $\Theta_{Gd} = 10,5$  МШ (криві *f* на рис. 2) становить  $\approx 0,7$  еВ. Однак таке низьке значення роботи виходу не є стабільним і при прогріві збільшується майже до 2 еВ (криві *g* на рис. 2). Всі ці факти дозволяють вважати, що на цих етапах додатково нанесені атоми Gd дифундують у об'єм й розривають зв'язки кисню з



**Рис. 1.** Оже спектри системи Si(100)/Gd/O. Si(100)/Gd/O: *a* – Si(100); *b* – *a* + 6 МШ Gd + 600 °C; *c* – *b* +  $\xi = 250$  Л; *d* – *c* + 2 МШ Gd ( $\sum \Theta_{Gd} = 8$  МШ); *e* – *d* + 100 Л ( $\sum \xi = 350$  Л); *f* – *e* + 2,5 МШ Gd ( $\sum \Theta_{Gd} = 10,5$  МШ); *g* – *f* + 600 °C; *h* – *g* + 2 МШ Gd ( $\sum \Theta_{Gd} = 12,5$  МШ); *i* – *h* +  $\sum \xi = 450$  Л + 600 °C; *j* – після  $\sum \xi = 550$  Л та  $\sum \Theta_{Gd} = 18,5$  МШ; *k* – після  $\sum \xi = 650$  Л,  $\sum \Theta_{Gd} = 19,5$  МШ + 600 °C. На вставці А показані збільшені оже-спектри *c* і *k* в діапазоні 50–90 еВ. На вставці В показані збільшені оже-спектри *b* і *k* в діапазоні 100–150 еВ

понувався у кисні та відпалювався, величина оже-ліній NON і NVV Gd мало змінюється, але форма ліній NVV Gd відповідає формі, яку мають атоми окисленого Gd. Також помітно збільшується інтенсивність оже-ліній Si LVV та зменшується оже-лінія окисленого кремнію (68 еВ). У той самий час в ФЕС після нанесення цих додаткових шарів Gd (криві *d, f*) з'являються стани нижче на 1,8 еВ від  $E_F$  і не з'являються додаткові стани вище до  $E_F$ . Робота виходу в системі з  $\Theta_{Gd} = 10,5$  МШ (криві *f* на рис. 2) становить  $\approx 0,7$  еВ. Однак таке низьке значення роботи виходу не є стабільним і при прогріві збільшується майже до 2 еВ (криві *g* на рис. 2). Всі ці факти дозволяють вважати, що на цих етапах додатково нанесені атоми Gd дифундують у об'єм й розривають зв'язки кисню з

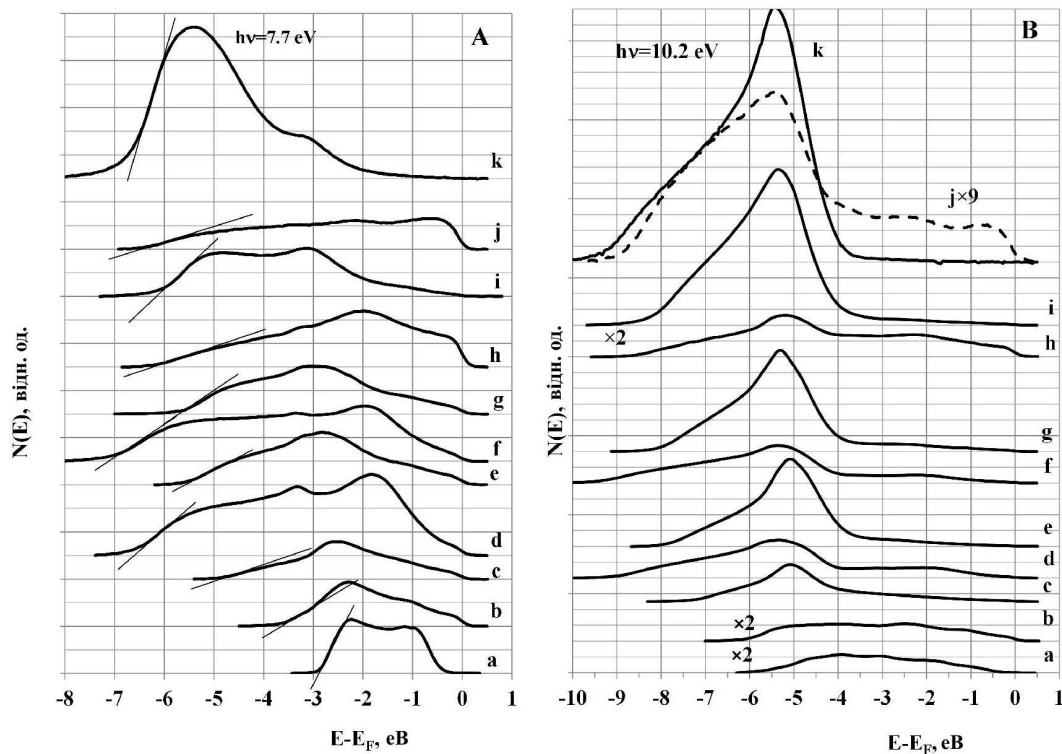


Рис. 2. ФЕС (A –  $h\nu = 7,7 \text{ eV}$ ; B –  $h\nu = 10,2 \text{ eV}$ ) Si(100)/Gd/O: підписи до кривих a, b, c, d, e, f, g, h, i, j, k відповідають підписам до рис. 1

кремнієм, а самі окислюються, що не суперечить літературним даним [7, 9]. Починаючи з сумарної товщини нанесеного шару  $\Theta_{\text{Gd}} = 12,5 \text{ МШ}$  (криві h на рис. 1 і 2), після наплення кожної нової порції атомів Gd в оже-спектрах з'являється особливість в області 125 eV, а в фотоелектронних спектрах з'являється досить значна густина станів поблизу  $E_F$  (криві h, j на рис. 1 і 2). Вказані особливості зникають після експозиції зразків в атомарному кисні. Отже, кожний цикл експозиції досліджуваних зразків в атомарному кисні супроводжується: зменшенням інтенсивності оже-лінії LLV чистого Si при 92 eV, появою лінії окисленого Si в області енергій  $\approx 68 \text{ eV}$ , зникненням піка оже-спектрів в області 125 eV та густини металічних станів поблизу  $E_F$  в ФЕС, що, як було припущено в нашій попередній роботі [25], зумовлено окисленням Gd. Тобто ми маємо всі підстави припустити, що після експозиції системи в атомарному кисні має місце часткове окислення атомів Gd і Si поблизу поверхні та вбудовування атомів кисню під поверхневі атоми Gd. Внаслідок такого вбудовування бі-

ля поверхні утворюється складний дипольний шар O–Gd або Si–O–Gd, який зменшує роботу виходу поверхні такої системи. Під дією кисню в ФЕС також відбуваються значні зміни: зростає густина станів в області енергій  $-5 \text{ eV}$  по відношенню до  $E_F$  та збільшується інтегральна світлочутливість інтерфейсу (площа під кривими ФЕС). Після декількох циклів обробки системи ( $z > 10$ ), що складаються із нанесення додаткових шарів Gd, експозицій в атомарному кисні та відпалів при  $600 \text{ }^\circ\text{C}$ , після сумарної експозиції  $\xi \approx 650 \text{ Л}$  та додаткового відпалу утворюється досить стійка система, ОЕС та ФЕС якої наведені кривими k на рис. 1 і 2. Її оже-спектр характеризується лініями окисленого Gd (порівняння кривих b і k на вставці B на рис. 1), майже відсутнім внеском від оже-лінії чистого Si (92 eV) та незначним внеском окисленого Si (крива k на рис. 1 та на вставці A на рис. 1), який визначається малою інтенсивністю оже-лінії з енергією 68 eV. В ФЕС цієї стійкої системи з'являється інтенсивна спектральна особливість з максимумом при енергії  $-5,3\text{--}5,5 \text{ eV}$ , яку згідно з

літературними даними [9, 10, 19] можна приписати станам, зумовленим  $O2p$  електронами кисню, та значно менш інтенсивна спектральна особливість при 3,2 еВ. Наші дані якісно подібні до отриманих в літературі [10], які були отримані на окисленому в молекулярному кисні інтерфейсі з Si(111)-Gd. Але ми додатково звертаємо увагу на такі факти: 1 – наш фотоелектронний спектр досить широкий, тобто робота виходу такої системи стає майже в п'ять разів меншою роботи виходу кремнію й оцінюється рівною  $\approx 1$  еВ, 2 – зникають стани поблизу  $E_F$  й 3 – збільшується світлочутливість отриманої системи за рахунок збільшення кількості фотоелектронів з малими кінетичними енергіями, що вказує на неметалічний характер системи. Ми, як і автори [10], вважаємо, що повна відсутність станів біля рівня Фермі свідчить, що приповерхнева область стає майже ізолюючою з шириною забороненої зони не менше ніж 4 еВ.

#### 4. Обговорення результатів

Щоб проілюструвати еволюцію досліджуваних зразків, на рис. 3 наведені залежності інтенсивностей оже-ліній Si(LVV) ( $I_{Si(LVV)}$ ), Gd(NON) ( $I_{Gd(NON)}$ ) і O(KLL) ( $I_{O(KLL)}$ ) та роботи виходу ( $\varphi$ ) від  $z$  – номера циклу обробки. Величина  $I_{Si(LVV)}$  нормувалась на величину відповідного оже-сигналу від поверхні чистого Si ( $z = 0$  на рис. 3). Величина  $I_{Gd(NON)}$  нормувалась на відповідний оже-сигнал від першого шару Gd 6 МШ на поверхні Si(100) ( $z = 1$  на рис. 3), а сигнал  $I_{O(KLL)}$  нормувався на відповідний оже-сигнал після першої експозиції в кисні 250 ЛО ( $z = 3$  на рис. 3). Робота виходу  $\varphi$  нормувалась на роботу виходу  $\varphi_0 = 4,8$  еВ атомарно чистої поверхні Si(100)-2 × 1 ( $z = 0$  на рис. 3). Початковим зразком ( $z = 1$ ) був інтерфейс Si(100)+6 МШ Gd, який потім оброблявся  $z$  циклами відпалів при  $\approx 600$  °С, експозиції у атомарному кисні та нанесенням додаткових шарів Gd. І хоча, в межах кожного циклу  $z$ , могла змінюватись черговість відпалів та експозицій у кисні, видно (рис. 3, крива 4), що зі збільшенням  $z$  має місце загальна тенденція зменшення інтенсивності оже-лінії Si(LVV) в межах глибин, які визначаються глибиною виходу оже-електронів  $\approx 1$  нм, що природно, бо на поверхні інтерфейсу на відміну від чистої поверхні Si збільшується кількість гадолінію та кисню. Однак, на фоні зменшення кількості атомів Si мають місце невеликі коливання,

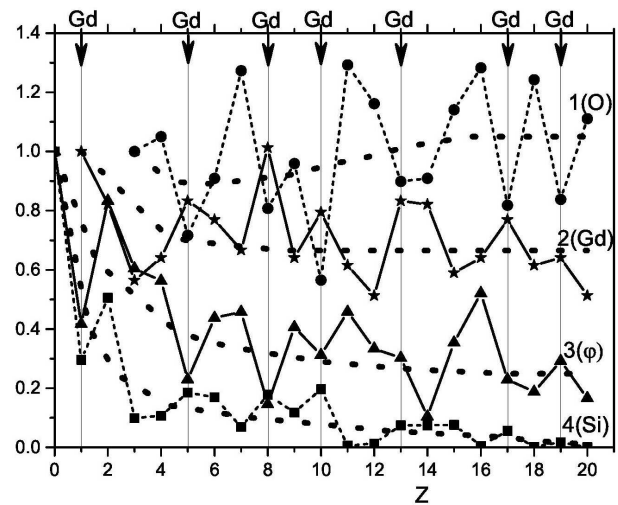


Рис. 3. Залежності нормованих значень інтенсивності оже-ліній O KLL (1), Gd NON (2), Si LVV (4) та роботи виходу  $\varphi$  (3) від  $z$  – номера циклу обробки системи.  $Z = 0$  – атомарно чиста поверхня Si(100); 1 – Si(100) + 6 МШ Gd; 2 – відпал 600 °С; 3 – експозиція  $\xi = 250$  Л; 4 – відпал 600 °С; 5 – (4+2 МШ Gd); 6 – відпал 600 °С; 7 –  $\xi = 100$  Л; 8 – (7+2,5 МШ Gd); 9 – відпал 600 °С; 10 – (9+2 МШ Gd); 11 –  $\xi = 100$  Л; 12 – відпал 600 °С; 13 – (12+3 МШ Gd); 14 – перебування 6 діб у надвисокому вакуумі; 15 – відпал при 600 °С; 16 –  $\xi = 100$  Л; 17 – (16+3 МШ Gd); 18 –  $\xi = 100$  Л та відпал 600 °С; 19 – (18+1 МШ Gd); 20 – відпал 600 °С. Жирними пунктирами для кращого сприйняття зображені криві, що апроксимують відповідні експериментальні залежності

бо в зразку відбуваються процеси окислення кремнію та гадолінію, їх дифузійне перемішування та сегрегація, що не суперечить літературним даним [7].  $I_{Gd(NON)}/I_{Gd(NON)}$  (Gd 6 МШ) (рис. 3, крива 2) коливається зі значним розкидом навколо середнього значення  $\approx 0,65$ , а  $I_{O(KLL)}/I_{O(KLL)}(250 \text{ Л})$  (рис. 3, крива 1) коливається поблизу одиничного значення. Це означає, що при  $z < 10$  інтерфейс збагачується киснем. Кінцевий інтерфейс складається із силіцидів гадолінію, оксидів з домішками Gd і Si. Наші дані узгоджуються із літературними, але новим є залежність роботи виходу інтерфейсу від номера циклу обробки  $z$  (рис. 3, крива 3). Робота виходу в середньому з певним розкидом зменшується майже у 4,8 раза до значення  $\approx 1$  еВ. Видно також, що вона стає меншою середнього значення при даному  $z$  тоді, коли значення  $I_{O(KLL)}/I_{O(KLL)}(250 \text{ Л})$  мінімальні, а значення  $I_{Gd(NON)}/I_{Gd(NON)}$  максимальні (на рис. 3 стрілками вказані номери циклів  $z$ , у яких нано-

сяться додаткові шари Gd). При нанесенні додаткових шарів Gd збільшується інтенсивність ожелітності Si(LVV) відносно середнього значення (крива 4 на рис. 3). Це можна пояснити тим, що частина додаткової кількості гадолінію окислюється й забирає частину кисню у оксиду кремнію. Після експозиції в кисні характер інтерфейсу змінюється від металічного, який має місце кожного разу, коли є надлишок Gd над його середнім значенням, до напівпровідникового чи навіть ізолюючого, коли збільшується кількість кисню. Коли  $z > 15$  утворюється майже стійкий інтерфейс, який складається із силіцидів Gd, оксидів й має на поверхні складний дипольний шар із Gd–O, подібний до такого, який був запропонований для пояснення значного зменшення роботи виходу арсеніду галію за допомогою диполів Cs<sub>2</sub>O [26] й відповідає за значне зменшення роботи виходу до значень <1 еВ. Робота виходу утвореної поверхні при тривалому перебуванні в надвисокому вакуумі збільшується (на  $\approx 0,5$  еВ), але після нетривалого відпалу до 300–600 °C повертається до значення <1 еВ. Перебування в атмосфері повітря підвищує роботу виходу до  $\approx 4$  еВ, але відпал в умовах надвисокого вакууму знову зменшує роботу виходу до значень <1 еВ. Дуже імовірно, що досліджувана система острівцева, що ускладнює її вивчення [7, 9, 15]. Вибираючи для дослідження поверхню Si(100) з виродженим *p*-типом легування ми очікували, що дія Gd та O приведе до утворення поверхні з роботою виходу помітно меншою, ніж отримане нами значення в роботі [25], де в ролі підкладки ми використовували грань (113) слабо легуваного *n*-типу кремнію. Але в обох випадках після обробки киснем та гадолінієм роботи виходу поверхонь виявились практично однаковими. Це може бути пояснено наявністю кисню, який здебільшого є акцептором, відповідає за утворення напівпровідникової структури *p*-типу з закріпленням  $E_F$  поблизу стелі валентної зони. Отже, утворюється структура, подібна до структур, що утворюються на напівпровідниках *p*-типу при адсорбції Cs та O, до структур з від'ємною електронною спорідненістю.

## 5. Висновки

Дослідження циклів взаємодії гадолінію, атомарного кисню при їх пошаровій адсорбції на поверх-

ні Si(100) і відпалів, проведені за допомогою ДПЕ, ОЕС і УФЕС, дозволили прослідкувати за утворенням поверхні з суттєво зменшеною роботою виходу (<1 еВ). До складу приповерхневого інтерфейсу входять Gd, його силіциди та оксиди та ще й Si. Виявилось, що характер інтерфейсу із різною відносною кількістю Gd змінюється від металевого до напівпровідникового. Кожного разу, коли при адсорбції Gd приповерхнева область стає більш металічною, в ній збільшується відносна кількість Gd та Si й зменшується відносна кількість кисню. При окисленні такої системи в приповерхневій області утворюється складний дипольний шар із O–Gd, який ефективно зменшує роботу виходу поверхні. Із збільшенням кількості циклів пошарових адсорбцій і відпалів поступово зменшується відносна кількість Si й інтерфейс стає більш напівпровідниковим, більш стійким та світлочутливим. Робота виходу поверхні поступово зменшується до  $\approx 1$  еВ, що характерно для поверхонь із від'ємною електронною спорідненістю.

1. H.D.B. Gottlob, A. Stefani, and M. Schmidt, *J. Vac. Sci. Technol.* **B27**, 258 (2009).
2. J.L. McChesney, A. Kirakosian, R. Bennewitz, J.N. Crain, J.-L. Lin, and F.J. Himpsel, *Nanotechnology* **13**, 545, (2002).
3. J.H.G. Owen, K. Miki, and D.R. Bowler, *J. Material Sci.* **41**, 4568 (2006).
4. D. Lee, D.K. Lim, S.S. Bae, S. Kim, R. Regan, D.A. Ohlberg, Y. Chen, R. Rangan, and R.S. Willicems, *Appl. Phys. A* **80**, 1311 (2005).
5. E. Morris, J.W. Dickinson, M.L. Willis, and A.A. Baski, in *Clusters and Nano-Assemblies. Physical and Biological Systems*, edited by P. Jena, S.N. Khanna, and B K Rao (World Scientific, Singapore, 2003), p. 175.
6. H. Zhanq, Q. Zhanq, G. Zhao, J. Tang, O. Zhou, and L.C. Qin, *Am. Chem. Soc.* **127**, 13120 (2005).
7. K. Wandelt and C.R. Brundle *Sur. Sci.* **157**, 162 (1985).
8. G. Molnar, G. Peto, and E. Kotai, *Vacuum*, **41**, 1640 (1990).
9. W.A. Henle, M.G. Ramsey, and F.P. Netzer, *Vacuum* **41**, 814 (1990).
10. W.A. Henle, M.G. Ramsey, F.P. Netzer, R. Cimino, W. Braun, and S. Witzel, *Phys. Rev. B* **42**, 11073 (1990).
11. R. Hofmann and F.P. Netzer, *Phys. Rev. B* **43**, 9720 (1991).
12. W.A. Henle, M.G. Ramsey, F.P. Netzer, R. Cimino, S. Witzel, and W. Braun, *Surf. Sci.* **243**, 141 (1991).
13. F.P. Netzer, *J.Phys. Cond. Matter* **7**, 991 (1995).

14. R. Hofmann, W.A. Henle, H. Ofner, M.Cx. Ramsey, F.P. Netzer, W. Braun, and K. Horn, *Phys. Rev. B* **47**, 10407 (1993).
15. L. Ming, L. Grill, M.G. Ramsey, F.P. Netzer, and J.A.D. Matthew, *Surf. Sci.* **375**, 24 (1997).
16. M. Sancrotti, A. Iandelli, G.L. Olcese, and A. Palenzona, *Phys. Rev. B* **44**, 3328 (1991).
17. А.М. Шикин, А.Ю. Григорьев, Г.В. Прудникова, Д.В. Вялых, С.Л. Молодцов, В.К. Адамчук, *ФТТ* **4**, 942 (2000).
18. J.C. Chen, G.H. Shen, and L.J. Chen, *Appl. Surf. Sci.* **142**, 291 (1999).
19. K.B. Chung, Y.K. Choi, M.H. Jang, M. Noh, C.N. Whang, H.K. Jang, and E.J. Jung, *J. Vac. Sci. Technol. B* **23**, 153 (2005).
20. G.L. Molnar, G. Peto, E. Zsoldos, N.Q. Khunh, and Z.E. Hovath, *Thin Solid Films* **317**, 417 (1998).
21. B.C. Min, K. Motohashi, C. Lodder, and R. Jansen, *Nature materials* **5**, 817 (2006).
22. S. Sugahara, *IEE Proc.-Circuit Devices Syst.* **152**, 355 (2005).
23. A.V. Zenkevich, Yu.U. Matveyev, Yu.Yu. Lebedinskii, R. Mantovan, M. Fanciulli *et al.*, *J. Appl. Phys.* **111**, 506 (2012).
24. M.G. Nakhodkin and M.I. Fedorchenko, *Visn. Kyiv. Univ. Ser. Fiz. Mat. Nauky* **4**, 261 (2012).
25. M.G. Nakhodkin, and M.I. Fedorchenko, *Visn. Kyiv. Univ. Ser. Fiz. Mat. Nauky* **1**, 373 (2014).
26. M.G. Nakhodkin and M.I. Fedorchenko, *Visn. Kyiv. Univ. Ser. Fiz. Mat. Nauky* **3**, 323 (2012).
27. L.E. Davis, N.C. MacDonald, P.W. Palmberg, G.E. Piach, and R.E. Weber, *Handbook of Auger Electron Spectroscopy* (Physical Electronic Industries, Eden Prairie, Minnesota, 1976).
28. C.Y. Su, W.E. Spicer, and I. Lindau, *J. Appl. Phys.* **54**, 1413 (1983).
29. G. Park, V. Choong, G. Gao, B.R. Hsieh, and C.W. Tang, *Appl. Phys. Lett.* **68**, 2699 (1996).

Одержано 29.10.14

*Н.Г. Находкин, Н.И. Федорченко*

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ КИСЛОРОДА  
И ГАДОЛИНИЯ С Si(100)-2 × 1. ОБРАЗОВАНИЕ  
СИСТЕМЫ С РАБОТОЙ ВЫХОДА 1 эВ

## Резюме

Методами электронной спектроскопии исследовано изменение электронных свойств поверхности Si (100) при создании на ней многослойной структуры окисленных атомов Gd. Показано, что в результате ряда циклов адсорбции атомов Gd и атомарного кислорода при комнатной температуре на поверхность Si (100)-2 × 1 и отжига полученной структуры при ≈600 °C работа выхода поверхности уменьшается от 4,8 эВ до значений меньших 1 эВ. Установлено, что уменьшение работы выхода с увеличением циклов обработки сопровождается окислением атомов Gd и Si и постепенным уменьшением концентрации Si в приповерхностной области. Полученные результаты объясняются образованием на поверхности дипольного слоя O-Gd.

*M.G. Nakhodkin, M.I. Fedorchenko*

INTERACTION OF OXYGEN  
AND GADOLINIUM WITH Si(100)-2 × 1  
SURFACE. FORMATION OF A SYSTEM  
WITH 1-eV WORK FUNCTION

## Резюме

Changes in the electronic properties of the Si(100) surface, when a multilayer structure of oxidized Gd atoms is created on it, have been studied, by using the electron spectroscopy methods. It is shown that, after a number of adsorption cycles of Gd and oxygen atoms on the Si(100)-2 × 1 surface at room temperature and the annealing of the obtained structure at 600 °C, the work function decreases from 4.8 to less than 1 eV. The work function reduction at larger numbers of processing cycles is shown to be accompanied by the oxidation of Gd and Si atoms and a gradual decrease of the Si concentration in the near-surface region. The obtained results are explained by the formation of an O-Gd dipole layer on the surface.