

УДК 537.533.8 : 537

СВЯЗЬ ТОНКОЙ СТРУКТУРЫ СПЕКТРОВ ВТОРИЧНОЙ ЭЛЕКТРОННОЙ ЭМИССИИ КРЕМНИЯ С ЗАКОНОМ ДИСПЕРСИИ И ДЛИНОЙ СВОБОДНОГО ПРОБЕГА ЭЛЕКТРОНОВ

О. М. Артамонов, А. Г. Виноградов, О. Ф. Панченко, А. Н. Терехов,
В. М. Шаталов

Экспериментально измерены и теоретически рассчитаны спектры вторичной электронной эмиссии (ВЭЭ) кремния с угловым разрешением. Спектры имеют характерную форму каскадных максимумов, возникающих в результате неупругого рассеяния электронов с возбуждением плазмонов, межзонных и внутризонных переходов, а также в результате распада генерируемых плазмонов на электрон-дырочные пары. Вторая производная спектров по энергии характеризуется осцилляциями, обусловленными особенностями электронной зонной структуры. Показано, что конечность времени жизни электрона $\tau(E)$ в состояниях с энергией E приводит к убыванию амплитуды этих осцилляций с ростом E пропорционально $\tau^2(E)$, что позволяет получить экспериментальную зависимость длины свободного пробега электронов в кристалле относительно неупругих соударений в области энергий 2—15 эВ. В работе используется псевдопотенциальный расчет зонной структуры кремния, интерполированные энергетические зависимости заполнения и уширения уровней, учитывается в среднем упругое рассеяние электронов при вылете из кристалла, что дает некоторую бесструктурную добавку к спектру.

Кремний явился одним из первых объектов, для исследования которых была применена методика вторично-электронной спектроскопии с угловым разрешением [1]. Однако полученные в этой работе энергетические распределения вторичных электронов имели необычную форму и зависели от условий эксперимента. Проведенные недавно исследования [2] показали, что при энергии падающих электронов $E_p \geq 60$ эВ энергетические спектры вторичных электронов, регистрируемые в узком телесном угле, характеризуются традиционным каскадным распределением и слабой тонкой структурой на его фоне. При этом было отмечено, что в формировании энергетического распределения вторичных электронов в области малых энергий значительную роль играют процессы распада объемных и поверхностных плазмонов, генерируемых электронами первичного пучка. Тем самым теоретическое описание формирования спектров возбужденных электронов в кремнии должно включать процессы как электрон-электронного рассеяния, так и распада плазмонов [3].

Процессы формирования тонкой структуры на спектрах вторичных электронов кристаллов в области малых энергий рассматривались в работах [4—7]. В [7] было показано, что энергетическое распределение вторичных электронов кристалла, измеренное в узком телесном угле, пропорционально количеству дисперсионных ветвей с данной энергией и волновым вектором k , удовлетворяющим условию сохранения k на поверхности кристалла. В настоящей работе этот подход применен к описанию спектров вторичной электронной эмиссии (ВЭЭ) кремния и одновременно рассмотрена связь между интенсивностью наблюдаемой тонкой структуры и временем жизни возбужденных электронов в кристалле, в свою очередь связанным с длиной свободного пробега возбужденных электронов относительно процессов неупругого рассеяния.

Измерение спектров вторичных электронов монокристаллических поверхностей Si (100) и Si (110) было выполнено на спектрометре медленных электронов с угловым разрешением [8]. Анализатор энергий электронов типа сферический дефлектор работает в режиме постоянного абсолютного разрешения, равного во всем энергетическом интервале 0.1 эВ. Угловое разрешение анализатора равно 0.5°. Взаимная ориентация образца, электронной пушки и анализатора контролируется с точностью 0.3°.

В качестве образцов использовались полированные пластины кремния марки КДБ-7.5 различных ориентаций размерами 10×10×0.38 мм. После химической обработки, включающей травление в растворе плавиковой кислоты и кипячение в концентрированной азотной кислоте, на поверхности кристалла образовывался защитный слой окисла. Очистка поверхности производилась в вакууме 1·10⁻¹⁰ Тор методом высокотемпературного прогрева образца. Контроль состояния поверхности осуществлялся методом электронной оже-спектроскопии и дифракции медленных электронов. Регистрация полезного сигнала производилась в режиме счета электронов с накоплением информации и ее последующей обработкой сглаживанием и двойным дифференцированием. Результаты измерений тока ВЭЭ вдоль нормалей к граням (100) и (110) Si представлены на рис. 1, 2 соответственно.

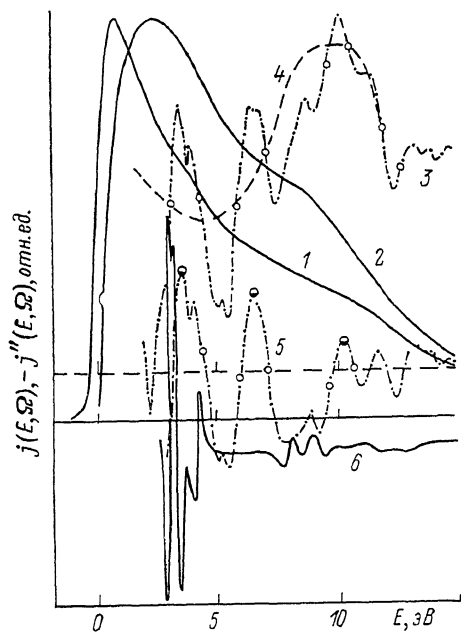


Рис. 1. Энергетические распределения вторичных электронов грани Si (100).

1 — экспериментальный спектр $j(E)$, $E_F=60$ эВ; 2 — расчет, $\varphi=2$; 3 — $(-j''(E))$; 4 — «плазменный» вклад в производную; 5 — $(-j''(E))$ за вычетом «плазменного» вклада; 6 — расчетная зависимость $-j''(E)$, $\varphi=0$. Энергия отсчитывается от уровня вакуума. Графики вторых производных смещены произвольным образом по оси ординат.

сти энергий доминируют электрон-электронное и электрон-плазмонное рассеяние [3, 9].

Как следует из [9], функцию заполнения при электрон-электронном рассеянии можно приближенно представить в виде

$$f_e(E) \sim |E/E_F - 1|^{-S} \tau(E). \quad (1)$$

Для простых металлов при $E - E_F \ll E_p$ имеем $S \sim 2$ [9], что является, по-видимому, верхней границей для полупроводников, где наличие запрещенной зоны затрудняет процессы неупругого рассеяния. Здесь $\tau(E)$ — время жизни возбужденного электрона в состояниях с энергией E .

Другим конкурирующим источником возбужденных электронов, как показано в [3], является распад плазмонов, генерируемых первичными, а также возбужденными электронами в твердом теле.

При большой величине уширения плазмонного пика в спектре характеристических потерь $\hbar\Gamma_{pl} \ll \hbar\omega_{pl}$ в интересующей нас области энергий

2. Функция заполнения

Первичные электроны с энергией E_p , попадая в кристалл, создают в результате каскада неупругих соударений некоторое равновесное распределение возбужденных электронов по энергии. В интересующей нас области

можно получить простую интерполяционную формулу для $f_{pl}(E)$, основанную лишь на законе сохранения энергии

$$f_{pl}(E) \sim \left(\arctg \frac{E - E_1}{\hbar \Gamma_{pl}/2} - \arctg \frac{E - E_2}{\hbar \Gamma_{pl}/2} \right) \tau(E) / \pi, \quad (2)$$

где $E_1=25$, $E_2=28$ эВ — это увеличенные на $\hbar \omega_p$ нижняя и верхняя границы последнего широкого максимума в плотности заполненных состояний кремния [10], представленного в виде прямоугольника.

Время жизни $\tau(E)$, входящее в (1) и (2), можно пересчитать через длину свободного пробега $l(E)$, построенную на рис. 3 по данным [9, 11], если взять скорость, например, в модели свободных электронов. В области $0 < E - U < 20$ эВ, где $U=17$ эВ — уровень вакуума, интерполирующая функция на рис. 3 дает для уширения

$$\begin{aligned} \hbar \Gamma(E) &= \frac{\hbar}{\tau(E)} = \\ &= 7.23 \cdot 10^{-4} \sqrt{E - E_0} (E - E_F)^2 + 0.1. \end{aligned} \quad (3)$$

Здесь $E_0=0$ — положение дна валентной зоны, $E_F=13$ эВ — середина запрещенной зоны.

В общем случае функция заполнения $f(E)$ должна быть представлена в виде суммы вкладов (1) и (2): $f(E) = f_e(E) + p f_{pl}(E)$, причем коэффициент p будет зависеть как от энергии, так и от угла падения первичных электронов на поверхность образца. Вид зависимостей тока ВЭЭ и его второй производной по энергии для различных p представлен в [9], для случая $p=2$ и $E_p=60$ эВ — на рис. 1.

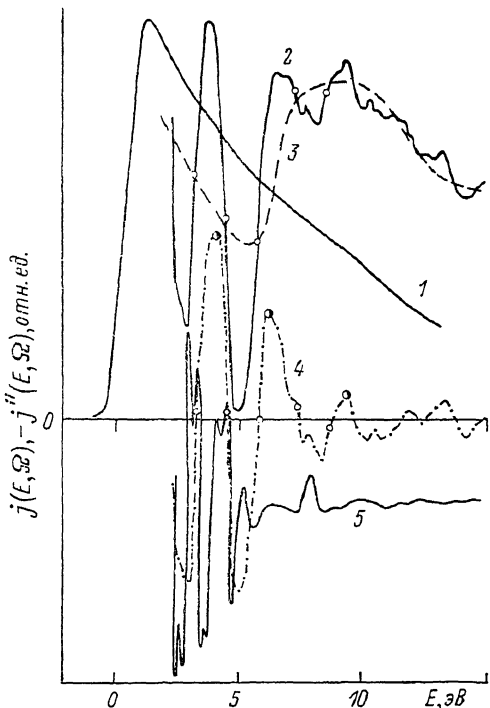


Рис. 2. Энергетические распределения вторичных электронов грани Si (110).

1 — экспериментальный спектр $j(E)$, $E_p=60$ эВ; 2 — $(-j''(E))$; 3 — «плазменный» вклад в $j''(E)$; 4 — $(-j''(E))$ за вычетом «плазменного» вклада; 5 — расчетная зависимость $-j''(E)$, $p=0$. Энергия отсчитывается от уровня вакуума. Графики вторых производных смещены произвольным образом по оси ординат.

3. Расчет тока вторичной эмиссии, вдоль направлений (100) и (110) кремния

Распределение электронного тока по энергиям и углам в вакууме в соответствии с [7] имеет вид

$$j_0(E, \Omega) = \frac{2m_e(E - U) \chi(E)}{(2\pi\hbar)^3} f(E) \cdot N(E, \Omega), \quad (4)$$

где $N(E, \Omega)$ — число дисперсионных ветвей с k заданным через Ω , $\chi(E)$ — коэффициент прозрачности границы кристалл—вакуум для одномерного движения [12]. Учтем конечную ширину $\hbar \Gamma(E) = \hbar / \tau(E)$ электронных уровней путем свертки $N(E, \Omega)$ в (4) с соответствующим лоренцианом

$$j(E, \Omega) = \frac{2m_e(E - U) \chi(E)}{(2\pi\hbar)^3} \int \frac{dE'}{2\pi} \frac{\hbar \Gamma(E') N(E', \Omega)}{(E - E')^2 + \hbar^2 \Gamma^2(E')/4}. \quad (5)$$

На рис. 1, 2 приведены результаты расчета по этой формуле вторых производных тока ВЭД по энергии $-j''(E)$ для электронов, вылетающих по нормали к плоскости (100) и (110) Si соответственно. Зонная структура кремния вдоль направлений (100) и (110) рассчитывалась методом эмпирического псевдопотенциала [10].

Как и в [7], соответствующие $N(E, \Omega)$ имеют вид ступенчатых функций. Амплитуда осцилляций $-j''(E)$, как легко убедиться из (5), пропорциональна $1/\Gamma^2 = \tau^2(E)$. Бесструктурная (изотропная) компонента тока может быть введена добавлением некоторой константы C к $N(E, \Omega)$. В нашем случае наилучшее соответствие расчетов экспериментальным данным достигалось при $C \approx 20$.

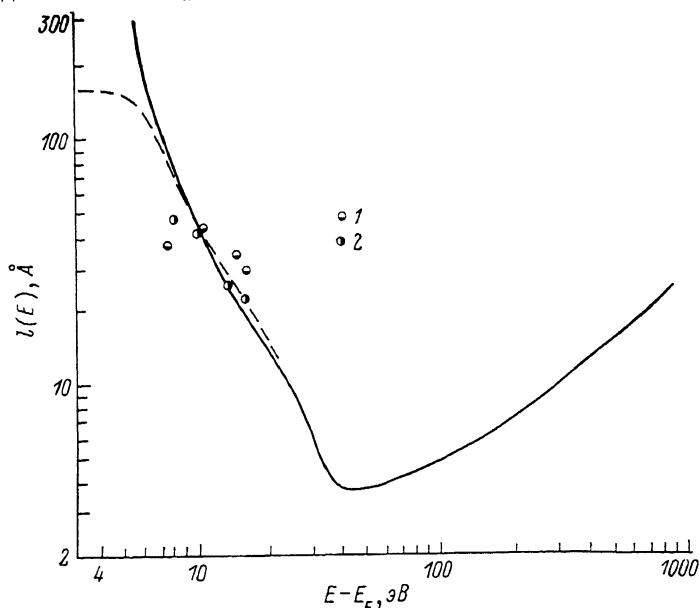


Рис. 3. Длина свободного пробега электронов в кремнии $l(E)$ из [9] (штриховая линия) и [10] (сплошная линия).

1 — экспериментальные точки, пересчитанные с кривой $-j''(E)$ на рис. 1, 2 — то же для рис. 2.

4. Обсуждение результатов

Экспериментальные спектры (рис. 1, 2) показывают, что энергетическое распределение вторичных электронов граней (100) и (110) кремния имеет форму, близкую к традиционному каскадному максимуму с довольно слабо выраженной тонкой структурой. Иными словами, в спектрах значителен вклад изотропной компоненты, соответствующей усреднению по направлениям для части вылетающих электронов. Вычитание этой неизвестной фоновой составляющей может быть заменено двойным дифференцированием тока по энергии. При этом скачкам функции $N(E, \Omega)$ отвечают осцилляции на графике второй производной $-j''(E)$. Как следует из (5), скачки или пороги функции $N(E, \Omega)$ образуются на границах полос разрешенных значений энергии для каждой из зон. Соответствующие особенности можно найти на экспериментальных кривых рис. 1, 2. В то же время имеются заметные различия как в положении некоторых особенностей, так и в форме теоретических и экспериментальных кривых. Отличия в положении границ зон связаны, очевидно, с приближенным характером зонного расчета, являющегося экстраполяцией на область $E > U$ зонной структуры, подогнанной по спектрам оптического поглощения [10]. Отметим, что на грани Si (100) в [2] наблюдался пик при энергии 6.0 эВ, обусловленный распадом поверхностного плазмона с ионизацией электрона из зоны заполненных поверхностных состояний грани (100) со сверхрешеткой 2×1 . Полученное соответствие между теоретическими и экспериментальными данными

позволяет использовать последние в качестве реперных точек для более совершенных зонных расчетов.

Бытчем плазмонный вклад из экспериментальных кривых, для чего на графиках $-j''(E)$ (рис. 1, 2) отметим светлыми кружками середины осцилляций и проведем через них плавную кривую. Форма получающихся кривых (штриховые линии) близка к форме второй производной от плазмонного вклада в функцию распределения (2). В рамках нашей модели можно оценить вес p , с которым входит эта плазмонная составляющая в $f(E)$. В частности, для $E_p = 60$ эВ, $p \approx 2$. Как отмечалось выше, этот вес должен зависеть от энергии первичных электронов E_p , что подтверждается экспериментом.

Перестроенные таким образом кривые $-j''(E)$ приведены на рис. 1, 2. Форма полученных кривых в целом близка к теоретической. Амплитуда осцилляций второй производной убывает в среднем как $\tau^2(E) \cdot j(E)$, что позволяет восстановить с точностью до множителя экспериментальную зависимость длины свободного пробега $l(E)$. Полученные точки нанесены на графике $\lg l(E)$ (рис. 3). Как видно, они хорошо соответствуют расчетным значениям. Кроме того, перестроенные вышеописанным способом кривые $-j''(E)$ (рис. 1, 2) позволяют непосредственно восстановить форму $N(E, \Omega)$ и тем самым решить задачу об экспериментальном измерении границ энергетических зон закона дисперсии электрона в кристаллах.

Л и т е р а т у р а

- [1] Best P. E. // Phys. Rev. B. 1976. V. 14. N 2. P. 606—619.
- [2] Артамонов О. М., Виноградов А. Г., Терехов А. Н. // ФТТ. 1987. Т. 29. № 9. С. 2817—2819.
- [3] Chung M. S., Everhart T. E. // Phys. Rev. B. 1977. V. 15. N 10. P. 4699—4715.
- [4] Willis R. F., Christensen N. E. // Phys. Rev. B. 1978. V. 18. N 10. P. 5140—5161.
- [5] Feder R., Pendry J. B. // Sol. St. Commun. 1978. V. 26. P. 519—521.
- [6] Артамонов О. М., Терехов А. Н. // ФТТ. 1979. Т. 21. № 4. С. 1102—1108.
- [7] Кораблев В. В., Кудинюв Ю. А., Сысоев С. М. // ФТТ. 1986. Т. 28. № 9. С. 2648—2654.
- [8] Артамонов О. М., Виноградов А. Г., Смирнов О. М., Терехов А. Н. // Деп. в ВИНТИ, N 6319-85 деп. 18 с.
- [9] Шаталов В. М., Панченко О. Ф. Препринт ДонФТИ-88-14 (150). Донецк, 1988. 33 с.
- [10] Cohen M. L., Bergstresser T. K. // Phys. Rev. B. 1966. V. 141. N 2. P. 789—796.
- [11] Emerson L. C., Birkhoff R. D., Anderson V. E., Ritchie R. H. // Phys. Rev. B. 1973. V. 7. N 5. P. 1798—1811.
- [12] Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика. Нерелятивистская теория. М., 1974. 752 с.

Ленинградский государственный
университет
Ленинград
Донецкий физико-технический
институт АН УССР
Донецк

Поступило в Редакцию
24 июня 1988 г.