

01;11
©1993 г.

РАСЧЕТ СПЕКТРОВ ПОЛНОГО ТОКА И ВТОРИЧНОЙ ЭЛЕКТРОННОЙ ЭМИССИИ ПРИ ОБЛУЧЕНИИ КРЕМНИЯ МЕДЛЕННЫМИ ЭЛЕКТРОНАМИ

О. Ф. Панченко, В. М. Шаталов

Рассчитаны спектры полного тока (СПТ) и спектры вторичной электронной эмиссии с угловым разрешением (СВЭЭУР) монокристалла Si по нормали к поверхностям (100), (110) и (111). При этом учитывались энергетическая зависимость уширения зонных уровней энергии, электрон-электронный вклад в функцию заполнения состояний, изотропная компонента тока от электронов, рассеянных на поверхности. Показано, что тонкая структура спектров обусловлена главным образом электронным строением конечных состояний, в которые попадают или из которых происходит эмиссия электронов. Развиваемый метод позволяет непосредственно восстанавливать особенности расположения зон в законе дисперсии электронов из экспериментальных данных и отделить объемные эффекты в спектрах от поверхностных.

Введение

Экспериментальные исследования низкоэнергетической вторично-электронной спектроскопии (ВЭС) несут информацию об энергетической структуре и рассеянии электронов в кристалле. Интерпретация опытных данных требует построения теории происходящих при этом процессов. Настоящая работа посвящена развитию теории двух групп методов ВЭС.

I. Интегральные методы основаны на измерении полного тока вторичных электронов в цепи образца в зависимости от энергии первичных электронов E_p . Согласно существующим представлениям [1], наблюдаемая тонкая структура СПТ определяется механизмами взаимодействия электронов с поверхностью твердого тела и в низкоэнергетическом диапазоне ($E_p < 5-8$ эВ) в основном обусловлена энергетической зависимостью упругого отражения, которое становится сравнимым с неупругой компонентой при $E_p \leq 20$ эВ. В области энергий до 100 эВ доля упругого отражения составляет несколько процентов и преобладает электрон-электронное ($e-e$) рассеяние с возбуждением межзонных переходов. Другая возможность энергетической зависимости упругого отражения от монокристаллических поверхностей за счет влияния зонной структуры кристалла при учете условий сшивки падающей электронной

волны с блоховскими функциями в кристалле обсуждалась в работах [2,3]. В предлагаемой работе при интерпретации СПТ граней (100) и (111) монокристалла Si учитывается влияние энергетической зависимости плотности незаполненных электронных состояний, в которые попадают электроны при входе в твердое тело.

II. Дифференциальные методы основаны на энергетическом анализе вторичных электронов. При этом тонкая структура СВЭЭУР отражает границы зон в законе дисперсии электронов, движущихся в направлении регистрации. Накладываясь на фон в виде каскадного максимума от электронов, рассеянных на фононах, шероховатостях поверхности и т.п., эта тонкая структура формирует измеряемое энергетическое распределение тока вторичных электронов вдоль заданного направления [4,5]. При этом тонкая структура появляется в том случае, когда энергетическая структура приповерхностной области кристалла соответствует энергетической структуре его объема. Сравнение результатов расчета с экспериментальными данными затруднено, поскольку на форму, интенсивность и энергетическое положение особенностей экспериментальных СВЭЭУР значительное влияние могут оказывать следующие факторы: а) сильная энергетическая зависимость вероятности заполнения состояний, б) уширение пиков из-за конечного времени жизни электронов, в) наличие фоновой составляющей спектра. Цель настоящей работы — исследование и интерпретация тонкой структуры СВЭЭУР граней (100) и (110) монокристалла Si, а также развитие методики обработки экспериментальных результатов для получения максимума информации о законе дисперсии и кинетических свойствах электронов в интервале энергий от уровня вакуума E_{vac} до $E_{vac} + \hbar\omega_{pl}$ ($\hbar\omega_{pl}$ — плазменная энергия). Модель [5] ниже дополняется учетом энергетической зависимости уширения зонных уровней энергии, учетом $e-e$ -вклада в функцию распределения неравновесных электронов $f(E)$ вместо добавления экспериментально измеренного фона, как это было сделано в [5].

Теоретическая модель и обсуждение результатов

В расчетах СПТ и СВЭЭУР рассматривалось рассеяние электронов с заданным импульсом на кристалле в приближении, когда вероятность рассеяния пропорциональна числу конечных состояний на данном уровне энергии E с заданным направлением квазиимпульса Ω . При этом ток через образец [6]

$$j(E, \Omega) \sim \frac{1}{V} \sum_{nk} [1 - f_F(E_{nk})] \left| \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} E_{nk} \right| \delta(E - E_{nk}) \delta(\Omega - \Omega_{nk}), \quad (1)$$

где E_{nk} — закон дисперсии электронов; Ω_{nk} — единичный вектор вдоль направления $\nabla_{\mathbf{k}} E_{nk}$; $f_F(E_{nk})$ — равновесная функция заполнения Ферми-Дирака, которая при $E > E_F + e\varphi$ равна 0; $e\varphi$ — работа выхода; V — объем кристалла.

Переходя от суммирования по \mathbf{k} к интегрированию по поверхности постоянной энергии $E_{nk} = E$, получаем

$$j(E, \Omega) \sim \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int \frac{dE'}{\pi} N(E, \Omega) \frac{\hbar\Gamma(E')/2}{(E - E')^2 + \hbar^2\Gamma^2(E')/4}, \quad (2)$$

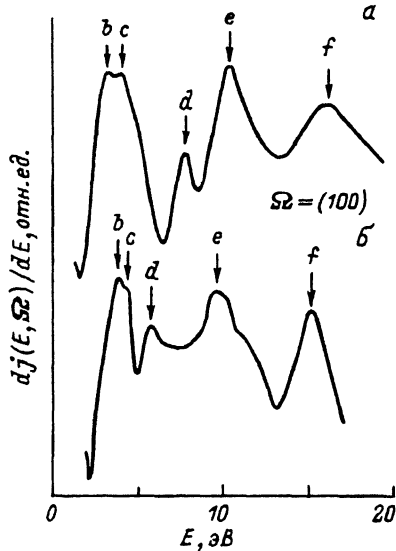


Рис. 1. СПТ грани (100) монокристалла Si.

a — эксперимент [12], *b* — теория. Кривые разнесены по оси ординат произвольным образом. Энергия первичных электронов E отсчитывается от уровня вакуума.

где $N(E, \Omega)$ — число энергетических зон вдоль направления Ω , для которых выполняется равенство $E = E_{nk}$. Здесь учтена конечная ширина $\hbar\Gamma(E) = \hbar/\tau(E)$ электронных уровней путем замены δ -функции по энергии в (1) на соответствующий лоренциан. При этом время жизни возбужденного состояния $\tau(E)$ определялось из интерполяционного выражения [7], полученного в области $E_{vac} < E < E_{vac} + \hbar\omega_{pl}$ с хорошей точностью по данным работы [8],

$$\hbar/\tau(E) \simeq 7.23 \cdot 10^{-4} (E - E_0)^{1/2} (E - E_F)^2 + 0.1 \quad (\text{эВ}), \quad (3)$$

где $E_F = 12.7$ эВ — уровень Ферми (середица запрещенной зоны), $E_0 = 0$ — положение дна валентной зоны.

Распределение электронного тока по энергиям E и углам Ω вне кристалла имеет вид [7] (в пренебрежении эффектами дифракции на поверхности кристалла)

$$j(E, \Omega) = \frac{2m(E - E_{vac})\chi(E)}{(2\pi\hbar)^3} \int \frac{dE'}{\pi} f(E') \cdot N(E', \Omega) \frac{\hbar\Gamma(E')/2}{(E - E')^2 + \hbar^2\Gamma^2(E')/4}, \quad (4)$$

Таблица 1.

Направление	Работа	Энергетическое положение max СПТ, эВ					
		<i>a</i>	<i>b</i>	<i>c</i>	<i>d</i>	<i>e</i>	<i>f</i>
100	Эксперимент [12]	—	3.2	4.0	7.7	10.2	16.0
	Теория	—	3.8	4.3	5.8	9.7	15.0
111	Эксперимент [12]	1.3	2.7	3.5	5.6	6.8	10.5
	Теория	—	2.6	4.0	7.0	7.7	10.5

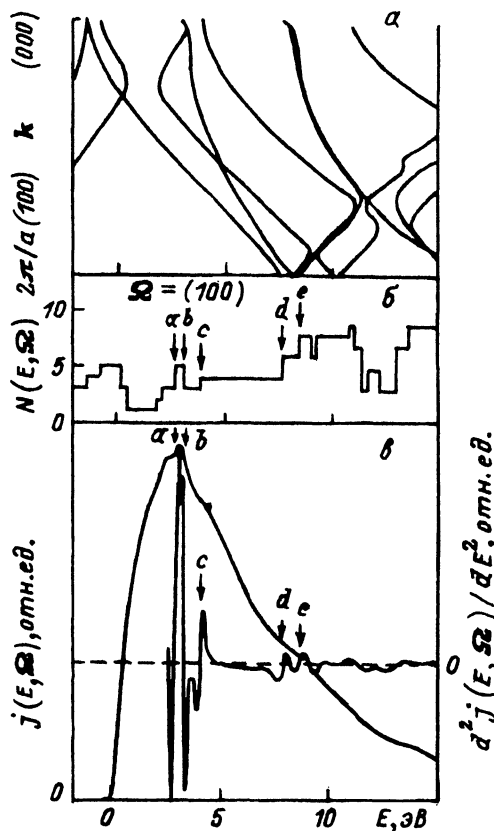


Рис. 2. Расчет СВЭЭУР Si вдоль направления (100).

a — зонная структура вдоль данного направления *k* (*a* — постоянная решетки); *б* — $N(E, \Omega)$ — число зон вдоль данного направления, пересекающих уровень E ; *в* — СВЭЭУР вдоль данного направления и его вторая производная. Вертикальные стрелки с буквенными индексами указывают границы зон на кривой $N(E, \Omega)$ и соответствующие нули второй производной. Энергия E отсчитывается от уровня вакуума.

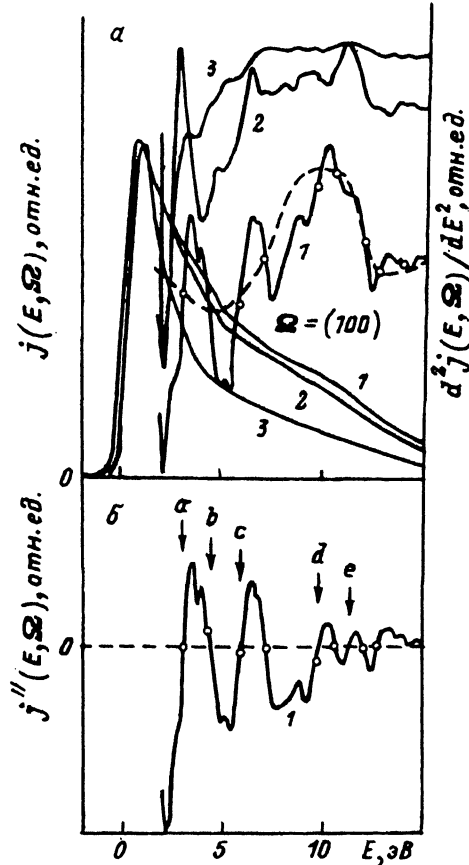


Рис. 3. Измеренный СВЭЭУР Si [7] вдоль направления (100) и его вторая производная.

a — $j(E, \Omega)$ и $d^2j(E, \Omega)/dE^2$ для $E_p = 60$ (1), 200 (2) и 600 эВ (3). Графики вторых производных для различных E_p разнесены по осям ординат произвольным образом. Штриховая линия, проведенная через середины осцилляций, отмечает начало отсчета; *б* — вторая производная СВЭЭУР, построенная с учетом начала отсчета. Вертикальные стрелки с буквенными индексами указывают положения нулей $j''(E, \Omega)$.

где $\chi(E) = 4(E - E_{vac})^{1/2}(E - E_0)^{1/2} / ((E - E_{vac})^{1/2} + (E - E_0)^{1/2})^2$ — коэффициент прохождения барьера кристалл-вакуум для одномерного движения [9], $f(E)$ — функция распределения неравновесных электронов. Из графика зонной структуры Si, полученной методом эмпирического псевдопотенциала (фрагмент для направления Si(100) на рис. 2, *a*), построены ступенчатые функции $N(E, \Omega)$ (рис. 2, *б*). В качестве $f(E)$ использована интерполяционная зависимость в области $E_{vac} < E < E_{vac} + \hbar\omega_{pi}$: $f(E) \simeq |E/E_F - 1|^{-s} \tau(E)$, которая довольно хорошо описывает поведение функции заполнения, полученной путем численных расчетов для реаль-

ной энергетической структуры в приближении статистической модели $e-e$ -рассеяния [10]. При этом $s \approx 2$. Аналогичная величина получена для простых металлов в [11] при $E - E_F \ll E_p$, что является, по-видимому, верхней границей для полупроводников, где наличие запрещенной зоны затрудняет процессы неупругого рассеяния электронов.

На рис. 1,б для примера представлен результат расчета по формуле (2) СПТ $dj(E, \Omega)/dE$ по нормали к плоскости Si(100). Для сравнения на рис. 1,а показан экспериментальный СПТ [12]. Спектры имеют тонкую структуру, существенно зависящую от ориентации монокристалла. В табл. 1 приведены положения характерных максимумов теоретических и экспериментальных СПТ Si. Эти особенности на рис. 1 обозначены буквами a, b, c, \dots по возрастанию их энергии. Различия в положении особенностей на теоретических и экспериментальных кривых связаны, с одной стороны, с приближенным характером зонных расчетов для высоколежащих уровней. С другой стороны, имеются экспериментальные погрешности, связанные с формированием коллимированного пучка электронов в области низких энергий, осуществлением полного сбора вторичных электронов и др. Кроме этого, метод СПТ в области малых энергий E_p обладает высокой поверхностной чувствительностью, определяемой не только малой глубиной анализируемой области, но и сильной зависимостью от физико-химических поверхностных процессов [13,14]. Так, низкоэнергетический максимум с $E \approx 1.3$ эВ в СПТ Si(111) [12] объясняется в [15] наличием полосы поверхностных состояний вблизи края валентной зоны. При этом интенсивность максимума ослабляется при адсорбции кислорода, но исчезает при температурах $T > 200^\circ \text{C}$, что указывает на его связь с поверхностными состояниями.

На рис. 2,в приведены результаты расчета по формуле (4) СВЭЭУР $j(E, \Omega)$ и его второй производной $d^2j(E, \Omega)/dE^2$ для электронов, вылетающих по нормали к плоскости Si(100). Фоновая составляющая тока вторичных электронов, имеющая характерный вид каскадного максимума, моделировалась добавлением к $N(E, \Omega)$ не зависящей от E константы, когда энергетическая структура приповерхностной области описывается моделью почти свободного электронного газа. Скачкам функции $N(E, \Omega)$ отвечают осцилляции на графике $j''(E, \Omega)$ (рис. 2,б и в). Эти особенности обозначены буквами a, b, c, \dots на рис. 2,б и в по возрастанию их энергии. Видно, что пороги $N(E, \Omega)$ образуются на границах

Таблица 2.

Направление	Работа	Энергетическое положение особенностей СВЭЭУР, эВ					
		a	b	c	d	e	f
100	Эксперимент [7]	3.1	4.5	6.0	9.9	11.4	—
	Теория	2.6	3.0	3.8	7.6	8.4	—
110	Эксперимент [7]	3.2	4.4	5.7	7.4	8.0	8.8
	Теория	2.7	3.3	3.9	4.5	5.3	7.7

полос разрозненных значений энергии для каждой из зон. Соответствующие особенности найдены и на экспериментальных кривых [7], приведенных для сравнения на рис. 3,а. На последних имеет место такое же раздвоение пиков $j''(E, \Omega)$, как и на теоретических кривых, что доказывает их "зонное" происхождение. Различия в положении границ энергетических зон на теоретических и экспериментальных кривых $j''(E, \Omega)$ (табл. 2) связаны с приближенным характером зонного расчета. Различия в форме зависимостей $j''(E, \Omega)$ обусловлены прежде всего использованием в расчетах модельной функции распределения $f(E)$, в частности необходим учет вклада в $f(E)$, вносимого распадом плазмонов, генерируемых первичными, а также возбужденными электронами, с рождением электрон-дырочных пар. В настоящем рассмотрении это процесс второго порядка по сравнению с $e-e$ -рассеянием, особенно в области энергий вблизи E_{vac} . Поправки $f(E)$ могут только улучшать форму кривых $j(E, \Omega)$ и $j''(E, \Omega)$, не изменяя в целом положения их основных особенностей, что подтверждается расчетами в рамках изотропного закона дисперсии носителей заряда. Кроме того, сами экспериментальные кривые, снятые в различных условиях облучения с постоянным абсолютным разрешением, равным во всем энергетическом интервале 0.1 эВ, довольно сильно различаются как по форме, так и по положению мелких деталей для разных E_p , что требует дополнительных исследований. Амплитуда осцилляций $j''(E, \Omega)$ (рис. 2,в) убывает в среднем (с точностью до различия амплитуды скачков $N(E, \Omega)$) как $\tau^2(E) = 1/\Gamma^2(E)$. Это позволяет получить зависимость $\tau(E)$, а вместе с ней и длину свободного пробега электронов $l(E)$ в приповерхностной области из обработки данных эксперимента, а перестроенные кривые $j''(E, \Omega)$ (рис. 3,б) дают возможность непосредственно восстанавливать форму $N(E, \Omega)$ и тем самым решать задачу об экспериментальном измерении границ энергетических зон закона дисперсии электронов в кристаллах.

Полученное соответствие между основными особенностями теоретических и экспериментальных СПТ и СВЭЭУР Si свидетельствует о преобладающей роли эффектов зонной структуры в формировании спектров. При этом появляется возможность использования экспериментальных данных в качестве реперных точек для более совершенных зонных расчетов. Развиваемый метод позволяет отделить объемные эффекты в СПТ и СВЭЭУР от поверхностных.

Список литературы

- [1] Комолов С.А. Интегральная вторично-электронная спектроскопия поверхности. Л., 1986. 180 с.
- [2] Строков В.Н., Комолов С.А. // Вестник ЛГУ. Сер. 4. Физ., хим. 1989. Вып. 4 (N 25). С. 81-86.
- [3] Строков В.Н., Штанько А.В., Комолов С.А. // Вестн. ЛГУ. Сер. 4. Физ., хим. 1990. Вып. 1 (N 4). С. 7-13.
- [4] Кораблев В.В., Кудинов Ю.А. // Изв. АН СССР. Сер. физ. 1985. Т. 49. № 9. С. 1775-1778.
- [5] Кораблев В.В., Кудинов Ю.А., Сысоев С.Н. // ФТТ. 1987. Т. 29. Вып. 3. С. 702-705.
- [6] Шаталов В.М., Панченко О.Ф., Перлов А.Я., Силантьев В.И., Шевченко Н.А. // Металлофизика. 1992. Т. 14. № 1. С. 88-93.
- [7] Артамонов О.М., Виноградов А.Г., Панченко О.Ф. и др. // ФТТ. 1989. Т. 31. Вып. 1. С. 57-61.

- [8] *Emerson L.C., Birkhoff R.D., Anderson V.E., Ritchie R.H.* // *Phys. Rev. B.* 1973. Vol. 7. N 5. P. 1798–1811.
- [9] *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Квантовая механика. Нерелятивистская теория. М.: Наука, 1974. 752 с.
- [10] *Shatalov V.M., Panchenko O.F.* // *Sol. St. Commun.* 1989. Vol. 69. N 9. P. 937–940.
- [11] *Панченко О.Ф., Шаталов В.М.* // *ЖЭТФ.* 1987. Т. 93. Вып. 1(7). С. 222–230.
- [12] *Комолов С.А., Панченко О.Ф., Шаталов В.М.* // *ФТТ.* 1992. Т. 34. Вып. 4. С. 1259–1262.
- [13] *Дехтяр И.Я., Меламед Б.Я., Силантьев В.И., Шевченко Н.А.* // *Поверхность. Физ., хим., мех.* 1982. № 8. С. 55–62.
- [14] *Силантьев В.И., Шевченко Н.А., Меламед Б.Я.* // *УФЖ.* 1979. Т. 24. № 8. С. 1227–1229.
- [15] *Комолов С.А.* // *ЖТФ.* 1981. Т. 51. Вып. 9. С. 1909–1913.

Донецкий физико-технический
институт

Поступило в Редакцию
12 ноября 1992 г.