

УДК 548.732

© 1991

## ГЕНЕРАЦИЯ И КИНЕТИКА ВЫХОДА ФОТО- И ОЖЕ-ЭЛЕКТРОНОВ В ПОЛУПРОВОДНИКАХ ПОД ДЕЙСТВИЕМ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ

*В. И. Перегудов, Э. М. Пашаев*

Настоящая работа посвящена теоретическому и экспериментальному анализу механизма непрямого возбуждения мягких Оже-электронов за счет электронной ионизации атомов на примере кристалла Ge, облучаемого  $\text{MoK}_\alpha$ -излучением. Подробно рассмотрен процесс генерации этих Оже-электронов, приведено решение кинетического уравнения для электронов, а также экспериментальные данные, подтверждающие решающую роль не прямых процессов в генерации мягких Оже-электронов.

Фото- и Оже-электроны, образующиеся в кристаллах под действием стоячих рентгеновских волн (СРВ), успешно используются в последнее время в структурной диагностике тончайших приповерхностных слоев [1]. На первый взгляд, для получения более детальной информации о структуре поверхности наиболее привлекательными являются мягкие Оже-электроны, выходящие с глубин 5–10 Å. Например, в кристаллах кремния, широко используемых в микроэлектронике, мягкие LVV Оже-электроны были использованы в работе [2] для определения структурной реконструкции поверхности. Однако, как было впервые показано в теоретической работе [3] и подтверждено затем экспериментально в [4], важную роль в процессе генерации мягких Оже-электронов кремния играют K-фотоэлектроны, выходящие с больших глубин кристалла.

Аналогичная ситуация имеет место и в кристалле германия, в котором возбуждаются мягкие MVV Оже-электроны, также имеющие глубину выхода  $\sim 10$  Å. При этом подавляющее количество MVV Оже-электронов генерируется не в результате фотоионизации рентгеновскими лучами, а под действием вторичных фотоэлектронов и более жестких Оже-электронов.

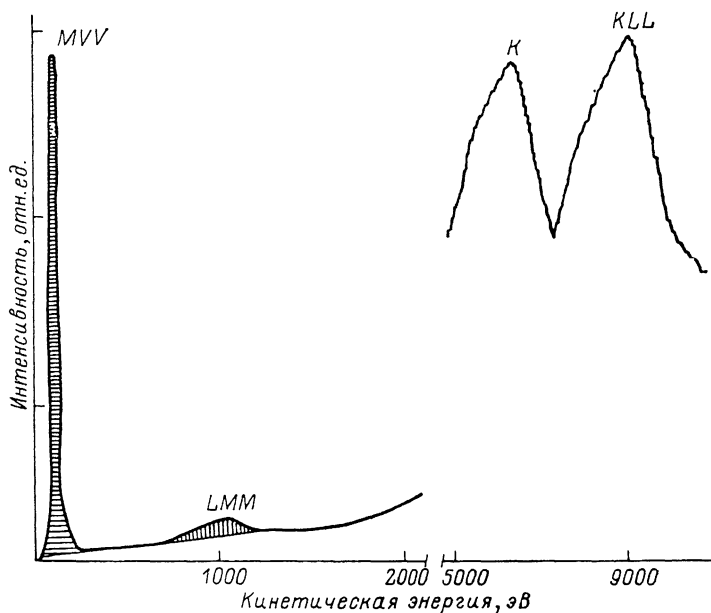
Настоящая работа посвящена тщательному теоретическому и экспериментальному анализу механизма непрямого возбуждения мягких Оже-электронов за счет электронной ионизации атомов на примере кристалла Ge. Подробно рассмотрен процесс генерации мягких Оже-электронов фотоэлектронами, приведено решение кинетического уравнения для электронов, а также экспериментальные данные, которые подтверждают выдвинутые в [3, 5] теоретические представления о роли электронов в процессе генерации мягких Оже-электронов.

### 1. Энергетическая зависимость выхода электронов

При падении рентгеновского излучения на кристалл возникает внешняя электронная эмиссия, энергетический спектр которой несет информацию о механизмах взаимодействия атомов кристалла как с рентгенов-

скими лучами, так и с вторичными электронами. Для экспериментального подтверждения механизма непрямого генерации мягких Оже-электронов за счет электронной ионизации атомов был использован кристалл германия, в котором под воздействием  $MoK_{\alpha}$ -излучения ( $E=17.5$  кэВ) ионизируется  $K$ -оболочка. Ионизация  $K$ -оболочки сопровождается испусканием  $GeK_{\alpha}$ -флуоресценции, а также возникновением KLL, LMM, MVV Оже-электронов. Наличие мощного непрямого механизма генерации мягких Оже-электронов наиболее наглядно проявляется при анализе относительного выхода отдельных групп Оже-электронов, основанном на измерении энергетического спектра электронов.

Такое измерение осуществлялось с использованием ЦЗА, подробно описанного в работе [6]. Максимальный выход вторичных электронов



достигался при угле падения рентгеновского пучка на исследуемый кристалл  $\Phi_0 \sim 0.5^\circ$ . Для обеспечения максимально возможного энергетического разрешения монохроматизированный рентгеновский пучок коллимировался таким образом, чтобы пятно засветки исследуемого кристалла попадало в фокус ЦЗА и не превышало  $1 \times 1$  мм<sup>2</sup>. Угловой размер приемного окна анализатора по азимуту составлял  $120^\circ$ , а угол наклона осевой траектории пучка к оси ЦЗА вне области анализирующего поля  $\alpha=42.3^\circ$ . Размер приемного окна по полярному углу  $\Delta\alpha=\pm 8^\circ$  [6]. При этом разрешающая способность анализатора составляла  $\sim 3\%$ . Регистрация электронных спектров проводилась в режиме счета импульсов.

На рисунке 1 приведен измеренный энергетический спектр электронов Ge. Наличие мощного пика MVV Оже-электронов в спектре несомненно свидетельствует о существовании дополнительного непрямого механизма генерации этих электронов. Качественное рассмотрение механизма взаимодействия  $MoK_{\alpha}$ -излучения с атомами Ge позволяет приблизительно оценить отношение выхода MVV и LMM Оже-электронов без учета не прямых процессов. В результате фотоионизации образуются  $K$ -фотоэлектроны (вероятность фотоионизации  $L$ -оболочки на порядок меньше и поэтому ее можно не учитывать). С вероятностью 55% возбуждение атома снимается за счет испускания  $GeK_{\alpha}$ -флуоресценции, а 45% возбужденных таким образом атомов испускают KLL Оже-электроны. Фотоионизация сопровождается Оже-процессом, в результате чего  $L$ -оболочка атома оказывается дважды, а  $M$ -оболочка — четырежды ионизованной. Таким образом, при прямом процессе на 100 случаев фотоиони-

зации генерируется 100  $K$ -фотоэлектронов, около 45  $KLL$  Оже-электронов, 90  $LMM$  Оже-электронов и 180  $MVV$  Оже-электронов. Следовательно, отношение выхода  $MVV$  и  $LMM$  Оже-электронов без учета непрямых процессов должно равняться удвоенному отношению глубин их выхода. Для оценки глубин выхода  $MVV$  и  $LMM$  Оже-электронов можно использовать данные [7], на основании которых это отношение  $2 (l_{MVV}/l_{LMM}) \sim \sim 1/2$ . С другой стороны, отношение площадей пиков, соответствующих  $MVV$  и  $LMM$  Оже-электронам (заштрихованные области на рис.), оказывается равным 3.6. Таким образом, отношение выхода  $MVV$  и  $LMM$  Оже-электронов в прямом процессе отличается от измеренного более чем в 7 раз. Такое различие однозначно свидетельствует об определяющей роли непрямых процессов в генерации мягких  $MVV$  Оже-электронов.

В непрямом процессе генерации  $MVV$  Оже-электронов участвуют  $K$ -фото-,  $KLL$  и  $LMM$  Оже-электроны, а также  $GeK_{\alpha}$ -флуоресценция. Роль перечисленных групп электронов и  $GeK_{\alpha}$ -флуоресценции в генерации  $MVV$  и  $LMM$  Оже-электронов определяется их ионизационной способностью по отношению к  $M$ - и  $L$ -оболочкам атома  $Ge$ .

Измерения показывают, что поток флуоресцентного излучения  $\varphi_{fl}$  в кристалле составляет не более 20 % потока падающего рентгеновского излучения  $\varphi_x$ . При этом отношение сечения взаимодействия  $GeK_{\alpha}$ -флуоресценции с  $L$ -оболочкой  $Ge$  к сечению взаимодействия падающего рентгеновского излучения с  $K$ -оболочкой  $Ge$  составляет  $\sigma_L/\sigma_K \simeq 0.62$ . Таким образом, вклад  $Ge K_{\alpha}$ -флуоресценции в генерацию  $LMM$  и  $MVV$  Оже-электронов составляет около 10 % и поэтому не может заметно повлиять на интенсивность выхода этих групп Оже-электронов. Поэтому в дальнейшем непрямые процессы, связанные с флуоресцентным излучением, не будут учитываться.

С другой стороны, при торможении фото- и Оже-электронов в кристалле германия значительная часть их энергии затрачивается на ионизацию  $M$ -оболочки.

Число  $MVV$  Оже-электронов, генерируемых при полном торможении электрона с энергией  $E$ , можно оценить по формуле

$$n_{MVV} \simeq (2\pi Z_M e^4 n_0 / EI_M) L(E),$$

где  $L(E)$  — полная длина пробега электрона с энергией  $E$ ,  $Z_M$  и  $I_M$  — число  $M$ -электронов в атоме и их потенциал ионизации, соответственно,  $n_0$  — число атомов в единице объема. Оценка по этой формуле при торможении электронов с энергией  $E \simeq 6$  кэВ в германии дает  $n_{MVV} \simeq 20$ . Таков порядок величины вклада непрямого механизма в генерацию  $MVV$  Оже-электронов.

Ионизационная способность электронов по отношению к  $L$ -оболочке значительно меньше. Так, при полном торможении электрона с энергией  $E$  число  $LMM$  Оже-электронов, образующихся в кристалле, в несколько десятков раз меньше числа  $MVV$  Оже-электронов

$$n_{LMM} \simeq (Z_L/I_L) (I_M/Z_M) n_{MVV}.$$

Здесь  $Z_L$  и  $I_L$  — число  $L$ -электронов в атоме и их потенциал ионизации соответственно. Таким образом, уже простые оценки показывают, что если вклад непрямых процессов в генерацию  $MVV$  Оже-электронов в десятки раз превышает вклад прямого процесса, то для  $LMM$  Оже-электронов вклад непрямых процессов в несколько раз меньше их генерации в прямом процессе.

Для расчета потоков фото- и Оже-электронов, выходящих с поверхности кристалла и регистрируемых анализатором, в следующих разделах статьи приведено подробное решение задачи о движении электронов в полубесконечном кристалле.

Для описания движения электронов, образующихся в кристалле под действием рентгеновских лучей, используется кинетическое уравнение, определяющее поток электронов как внутри кристалла, так и регистрируемый детектором в конкретной экспериментальной установке.

Кинетическое уравнение для стационарной функции распределения электронов  $N(\mathbf{r}, \mathbf{v})$  в отсутствии внешних полей имеет вид

$$v \nabla N = n_0 \int [v' N(\mathbf{r}, \mathbf{v}') d\tau(\mathbf{v}' \rightarrow \mathbf{v}) - v N(\mathbf{r}, \mathbf{v}) d\tau(\mathbf{v} \rightarrow \mathbf{v}')] + S(\mathbf{r}, \mathbf{v}). \quad (1)$$

Здесь  $v$  — скорость электронов,  $S$  — число [электронов, образующихся в единице объема за единицу времени под воздействием рентгеновских лучей  $d\sigma(\mathbf{v} \rightarrow \mathbf{v}')$  — атомное сечение взаимодействия фотоэлектронов ( $\mathbf{v}$  и  $\mathbf{v}'$  — скорости электронов до и после столкновения). В уравнении (1) произведение  $vN = \psi(\mathbf{r}, \mathbf{v})$  определяет поток электронов.

Рассмотрим случай плоского кристалла и неполяризованного рентгеновского излучения, когда решение зависит лишь от глубины выхода  $z$ , энергии электрона  $E = (mv^2)/2$  и угла относительно нормали к поверхности кристалла, т. е.  $\psi(\mathbf{r}, \mathbf{v}) = \psi(z, v, \mu)$ , где  $\mu = \cos \theta$ . В этом случае кинетическое уравнение (1) принимает вид

$$\mu(\partial/\partial z)\psi = n_0 \int [\psi(z, v', \mu') d\tau(\mathbf{v}' \rightarrow \mathbf{v}) - \psi(z, v, \mu) d\tau(\mathbf{v} \rightarrow \mathbf{v}')] + S. \quad (2)$$

Интерес представляет решение  $\psi(z, v, \mu)$ , удовлетворяющее граничному условию, при котором электроны не попадают в кристалл снаружи. Для случая, когда ось  $z$  направлена внутрь кристалла, это условие можно записать в виде  $\psi(0, v, \mu) = 0$  для  $\mu > 0$ .

Для разделения переменных в уравнении (2) представим поток электронов  $\psi(z, v, \mu)$  в виде разложения по полиномам Лежандра

$$\psi(z, v, \mu) = \sum_{m=0}^{\infty} (2m+1) \psi_m(z, v) P_m(\mu). \quad (3)$$

Левая часть уравнения (2) преобразуется с помощью известного соотношения

$$(2m+1)\mu P_m(\mu) = (m+1)P_{m+1}(\mu) + mP_{m-1}(\mu). \quad (4)$$

Для преобразования интеграла столкновений можно считать, что неупругое рассеяние сводится к потере энергии, а изменение направления движения электрона происходит при упругом рассеянии, т. е.

$$(d^2\tau)/(dv d\Omega) = (d\tau)/(d\Omega) \delta(v - v') + (d\tau)/(dv) \delta(\mu - \mu'). \quad (5)$$

Такое представление взаимодействия в виде упругого и неупругого слагаемых можно обосновать при помощи введения эффективных сечений рассеяния  $(d\sigma/d\Omega)_{эф.}$  и торможения  $(d\sigma/dv)_{эф.}$ . Используя соотношения (3)–(5), в результате простых преобразований для потоков  $\psi_m(z, v)$  можно получить следующую систему уравнений

$$(m+1)/(\partial\psi_{m+1})/(\partial z) + m(\partial\psi_{m-1})/(\partial z) = (2m+1)n_0 \int_0^{v_0} dv' \times \\ \times (d\tau)/(dv') \psi_m(z, v') - (2m+1)(\psi_m)/(L_m(v)) + S\delta_{m,0}, \quad (6)$$

$$1/(L_m(v)) = 1/(L_m^{тр}) + 1/(L(v)). \quad (7)$$

Здесь  $1/(L(v)) = n_0 \int_0^v dv' (d\tau)/(dv')$  — обратная длина замедления электрона со скоростью  $v$ ,  $1/L_m^{тр} = n_0 \int d\Omega (d\tau)/(d\Omega) [1 - P_m(\cos \alpha)]$  — обратная транс-

портная длина ( $\alpha$  — угол рассеяния электрона);  $v_0$  в уравнении (6) обозначает начальную скорость группы электронов, образовавшихся в результате фотоэффекта или Оже-процесса.

Для дальнейшего разделения переменных в системе уравнений (6) удобно воспользоваться так называемым многогрупповым методом, который дает возможность представить поток с различными скоростями  $\psi_m(z, v)$  набором усредненных потоков

$$\psi_{j,m}(z) = 1/(v_j - v_{j+1}) \int_{v_{j+1}}^{v_j} dv \psi_m(z, v) \quad (8)$$

внутри интервалов скоростей  $v_{j+1} < v < v_j$  ( $v_0 > v_1 > v_2 > \dots > 0$ ). Этот метод позволяет описать процесс замедления в группе электронов с помощью системы простых дифференциальных уравнений первого порядка

$$(m+1)(\partial\psi_{j,m+1})/(\partial z) + m(\partial\psi_{j,m-1})/(\partial z) + (2m+1)\psi_{j,m}/L_{j,m} = \\ = (2m+1) \sum_{j'=0}^{j-1} \psi_{j',m}/\lambda_{j,j'} + S\delta_{m,0}\delta_{j,0} \quad (9)$$

Здесь введено обозначение  $\lambda_{j,j'}$  для длины замедления электрона от скорости  $v_{j'}$  до скорости  $v_j$

$$1/\lambda_{j,j'} = n_0 \int_{v_{j'+1}}^{v_{j'}} dv' d\sigma/dv' (v' \rightarrow v). \quad (10)$$

Длину замедления электрона со скоростью  $v$  в терминах многогруппового метода следует обозначить  $L_j = L(v_j)$ , а уравнение (7) переписать в виде

$$1/L_{j,m} = 1/L_m^{\text{tr}} + 1/L_j. \quad (11)$$

Решение системы уравнений (9) осуществляется последовательно, начиная с  $j=0$ , т. е. сначала решается система уравнений для электронов с начальной скоростью  $v_0$  и вычисляется поток электронов  $\psi_{0,m}(z)$ . При этом генерация электронов описывается вторым слагаемым правой части уравнения (9), а первое слагаемое, определяющее приток электронов за счет замедления, равно нулю. Потоки электронов  $\psi_{j,m}(z)$  для  $j \neq 0$  определяются системой уравнений (9) при условии, что второе слагаемое в правой части, равно нулю, а первое — отлично от нуля и содержит потоки  $\psi_{j',m}(z)$  ( $j' < j$ ), которые были вычислены на предыдущем этапе. На каждом этапе решается система уравнений ранга  $m+1$ , если ограничиться рассмотрением углового распределения в  $P_m$ -приближении. Точное граничное условие в  $P_m$ -приближении заменяется на приближенное  $\psi(0, v, \mu_K) = 0$ , где  $\mu_K$  — положительные корни полинома  $P_{m+1}(\mu) = 0$ .

Следует отметить, что решения системы уравнений (9) представляют собой набор плоских волн, которые описывают поток электронов на глубине существенно меньшей глубины поглощения рентгеновского излучения. При выводе этих уравнений предполагалось, что число электронов  $S$ , генерируемых в единице объема за единицу времени, не зависит от глубины  $z$ . Такое приближение вполне оправдано тем обстоятельством, что длина поглощения рентгеновского излучения значительно превосходит пробеги фото- и Оже-электронов. В настоящей работе анализируется несколько групп электронов, отличающихся начальной энергией (фото-, KLL, LMM и MVV Оже-электроны). Для описания потока мягких MVV Оже-электронов достаточно ограничиться одногрупповым приближением, так как для этой группы электронов характерные потери составляют  $\sim 10$  эВ. Это подтверждается наличием в энергетическом спектре (рис.) узкого пика MVV Оже-электронов. В то же время, как видно из рисунка, в результате замедления из кристалла выходит заметное количество фото-

KLL и LMM Оже-электронов, потерявших своей начальной энергии. Для расчета потоков этих электронов необходимо использовать многогрупповой метод в полном объеме. Поскольку нас интересует прежде всего относительный выход Оже-электронов, то точность определения их углового распределения не играет существенной роли. Поэтому для оценок потоков электронов можно ограничиться  $P_1$ -приближением. Подробное решение системы уравнений (9) в  $P_1$ -приближении многогрупповым методом дано в Приложении.

### 3. Прямой и непрямой механизмы генерации мягких Оже-электронов в германии

Из изложенного выше следует, что полный поток мягких Оже-электронов  $\varphi_{MVV}(z, v, \mu)$  складывается из потока  $\varphi_{MVV}^{(f)}$  ( $z, v, \mu$ ), генерируемого в прямом процессе, а также из потоков  $\varphi_{MVV}^{(ph)}$  ( $z, v, \mu$ ),  $\varphi_{MVV}^{(KLL)}$  ( $z, v, \mu$ ),  $\varphi_{MVV}^{(LMM)}$  ( $z, v, \mu$ ), генерируемых вторичными излучениями. Для оценки вклада прямого и непрямого механизмов в генерацию мягких Оже-электронов можно воспользоваться одnogрупповым приближением. Это приближение оправдано, поскольку MVV Оже-электроны характеризуются одной средней энергией (разброс энергий в этой группе незначителен, см. рис.).

Полный поток MVV Оже-электронов в  $P_1$ -приближении описывается выражением (см. Приложение)

$$\varphi_{MVV}^{tot}(z, u, \mu) = l_{MVV} S_{MVV}^{tot} [1 - (1 + 3\mu/v_{MVV}) \xi_{MVV} \exp(-v_{MVV} z/l_{MVV})], \quad (12)$$

где  $l_{MVV}$  — длина пробега MVV Оже-электрона со средней скоростью  $v$ ,

$$v_{MVV} = \sqrt{3(l_{MVV}/l_{MVV}^i)}, \quad 1/l_{MVV}^i = 1/l_{MVV}^r + 1/l_{MVV}, \quad \xi_{MVV} = (1 + 3\mu'/v_{MVV})^{-1},$$

$S_{MVV}^{tot}$  — количество MVV Оже-электронов, генерируемых в единице объема в прямом и непрямом процессах

$$S_{MVV}^{tot} = S_{MVV}^{(x)} + S_{MVV}^{(ph)} + S_{MVV}^{(KLL)} + S_{MVV}^{(LMM)}. \quad (13)$$

В прямом процессе, как отмечалось ранее, генерируется  $S_{MVV}^{(x)} = 1.8 S$ . Количество MVV Оже-электронов, генерируемых в непрямом процессе, определяется практически потоками фото-, KLL и LMM Оже-электронов на поверхности кристалла.

Например,

$$S_{MVV}^{(ph)} = 4\pi \sum_{j=0}^{j_{max}} \psi_{j,0}^{(ph)}(0)/L_{j,0}, \quad (14)$$

так как длина пробега фотоэлектрона  $L_{j,0} \gg l_{MVV}$ . Аналогичным образом определяются  $S_{MVV}^{(KLL)}$  и  $S_{MVV}^{(LMM)}$ . Таким образом, выражение для потока Оже-электронов (12) в полубесконечном кристалле показывает, что он пропорционален количеству электронов  $S_{MVV}$ , генерируемых в единице объема за единицу времени, средней длине пробега Оже-электрона  $l_{MVV}$ , а также некоему граничному фактору. Этот фактор на глубинах  $z \gg l_{MVV}$  обращается в единицу и спадает по мере приближения к границе кристалла, определяя долю потока электронов, выходящих из кристалла

$$B_{MVV}(z, u, \mu) = 1 - \left(1 + \frac{3\mu}{v_{MVV}}\right) \xi_{MVV} \exp\left(-v_{MVV} \frac{z}{l_{MVV}}\right). \quad (15)$$

Выражение для полного потока LMM Оже-электронов, учитывающее прямой и непрямой процессы генерации, может быть также представлено в виде (см. (12))

$$\varphi_{LMM}^{(tot)}(z, v, \mu) = l_{LMM} S_{LMM}^{(tot)} B_{LMM}(z, v, \mu). \quad (16)$$

Энергии LMM Оже-электронов распределены в значительном диапазоне  $1/2 E_{LMM}^{(0)} \leq E_{LMM} \leq E_{LMM}^{(0)}$ . Поэтому при сопоставлении с экспериментом нужно учитывать изменение длины  $l_{LMM}$  пробега от скорости  $v$ . Количество LMM Оже-электронов, генерируемых в прямом и непрямом процессах,

$$S_{LMM}^{(tot)} = S_{LMM}^{(x)} + S_{LMM}^{(ph)} + S_{LMM}^{(KLL)}. \quad (17)$$

Для сравнения с экспериментом следует вычислять поток Оже-электронов, выходящих из кристалла

$$Y = \int_{-1}^0 d\mu \varphi(0, v, \mu). \quad (18)$$

Относительный выход MVV и LMM Оже-электронов, определяемый экспериментально как отношение площадей соответствующих пиков (см. рис.), можно оценить из уравнений (12)—(17) следующим образом

$$(Y_{MVV}/Y_{LMM})_{\text{теор.}} \approx (\bar{l}_{MVV}/\bar{l}_{LMM}) (S_{MVV}^{(tot)}/S_{LMM}^{(tot)}) \times \\ \times (B_{MVV}(0, u_{MVV}, \mu)/B_{LMM}(0, u_{LMM}, \mu)), \quad (19)$$

где  $l_{MVV}$  и  $l_{LMM}$  — усредненные глубины выхода MVV и LMM Оже-электронов, отношение которых по данным работы [7] равно  $\approx 0.25$ . Таким образом, очевидно, что вклад не прямых процессов в генерацию мягких Оже-электронов определяется потоками фото- и Оже-электронов в соответствии с формулой (14). Что касается граничных факторов для MVV и LMM Оже-электронов, то их величины определяются средними длинами пробега Оже-электронов  $l_{MVV}$  и  $l_{LMM}$ ,

$$B(0, u, \mu) = \int_{-1}^0 d\mu B(0, u, \mu). \quad (20)$$

#### 4. Анализ результатов

Для сопоставления экспериментальных результатов с теоретическими все расчеты были проделаны в  $P_1$ -приближении. Потоки фото- и Оже-электронов, рассчитанные по методике, описанной в разделе 2 и Приложении, были использованы для определения количества генерируемых MVV и LMM Оже-электронов в единице объема за единицу времени.

В результате были вычислены  $S_{MVV}^{(KLL)} \approx 40$ ,  $S_{MVV}^{(ph)} \approx 37$ ,  $S_{MVV}^{(LMM)} \approx 15$ , а также  $S_{LMM}^{(KLL)} \approx 1.6$ ,  $S_{LMM}^{(ph)} \approx 1.4$ .

Были также вычислены усредненные граничные факторы, определяющие долю Оже-электронов, выходящих из кристалла

$$B(0, u_{MVV}, \mu) \approx 0.4, \quad B(0, u_{LMM}, \mu) \approx 0.6.$$

Подставляя вычисленные значения всех указанных величин в формулу (19), для относительного выхода MVV и LMM Оже-электронов получим

$$(Y_{MVV}/Y_{LMM})_{\text{теор.}} \approx 4,$$

учитывая, что в прямом процессе при фотоионизации атома германия образуется  $S_{MVV}^{(x)} \approx 1.8$  и  $S_{LMM}^{(x)} \approx 0.9$ , а отношение средних длин пробега  $l_{MVV}/l_{LMM} \approx 1/4$  (см. [7]). Экспериментально измеренная величина относительного выхода MVV и LMM Оже-электронов составляет

$$(Y_{MVV}/Y_{LMM})_{\text{эксп.}} \approx 3.6.$$

Таким образом, согласие между экспериментом, и приведенной выше теорией можно считать вполне удовлетворительным. Следовательно, непрямые процессы в генерации MVV и LMM Оже-электронов в кристалле Ge играют более существенную роль, чем в Si.

Расчеты показывают, что всего лишь  $\sim 2\%$  MVV Оже-электронов и  $25\%$  LMM Оже-электронов Ge генерируются в прямом процессе. Поэтому кривые выхода MVV и даже LMM Оже-электронов германия в условиях дифракции дают информацию о структуре кристаллического слоя на глубине выхода фото- и KLL Оже-электронов, которая составляет  $> 300\text{\AA}$ .

За проявленный интерес к полученным результатам авторы выражают благодарность А. М. Афанасьеву и Р. М. Имамову.

## ПРИЛОЖЕНИЕ

В  $P_1$ -приближении для каждого энергетического интервала нужно решать систему уравнений

$$\begin{aligned} (\partial\psi_{j,1})/(\partial z) + \psi_{j,0}/L_{j,0} &= \sum_{j'=0}^{j-1} \psi_{j',0}/\lambda_{j,j'} + S\delta_{j,0}, \\ (\partial\psi_{j,0})/(\partial z) + 3(\psi_{j,1})/L_{j,1} &= 3 \sum_{j'=0}^{j-1} (\psi_{j,1})/(\lambda_{j,j'}). \end{aligned} \quad (\text{П. 1})$$

Решения однородных уравнений (П. 1) имеют вид  $\exp(v_j z/L_{j,0})$ , где  $v_j$  являются корнями дисперсионного уравнения системы (П. 1) и равны

$$v_j = \pm \sqrt{3(L_{j,0}/L_{j,1})}. \quad (\text{П. 2})$$

В результате для потока электронов с начальной скоростью  $v_0$  получаем

$$\psi(z, v_0, \mu) = \psi_{0,0}(z) + 3\mu\psi_{0,1}(z), \quad (\text{П. 3})$$

где

$$\begin{aligned} \psi_{0,0}(z) &= L_{0,0}S[1 - \xi_0 \exp(-v_0 z/L_{0,0})], \\ \psi_{0,1}(z) &= -L_{0,0}S(1/v_0)\xi_0 \exp(-v_0 z/L_{0,0}). \end{aligned} \quad (\text{П. 4})$$

Здесь  $v_0$  — положительный корень дисперсионного уравнения, а

$$\xi_0 = (1 + 3\mu'/v_0) = 0 \quad (\text{П. 5})$$

определяется из приближенного граничного условия

$$\psi(0, v_0, \mu') = 0, \quad (\text{П. 6})$$

где  $\mu'$  — положительный корень  $P_2(\mu) = 0$ .

Решая далее систему уравнений (П. 1) для потока электронов со скоростью  $v_1$  ( $v_1 < v_0$ ) и используя в правой части решения (П. 4) для  $j=0$ , получаем

$$\begin{aligned} \psi_{1,0}(z) &= S(L_{1,0}L_{1,1})/\lambda_{1,0}[1 - \xi_{1,0}^{(0)} \exp(-v_0 z/L_{0,0}) - \xi_{1,0} \exp(-v_1 z/L_{1,0})], \\ \psi_{1,1}(z) &= -S(L_{1,0}L_{1,1})/\lambda_{1,0}v_1 [\xi_{1,0}^{(0)} \exp(-v_0 z/L_{0,0}) + \xi_{1,1} \exp(-v_1 z/L_{1,0})]. \end{aligned} \quad (\text{П. 7})$$

Используя далее метод математической индукции, можно получить решение системы уравнений (П. 1) для любой скорости электронов

$$\begin{aligned} \psi_{j,0}(z) &= SL_{0,0} \left[ \pi_j - \sum_{j'=0}^j \exp(-v_{j'} z/L_{j',0}) \right], \\ \psi_{j,1}(z) &= -SL_{0,0}/v_j \sum_{j'=0}^j \xi_{j,1}^{(j')} \exp(-v_{j'} z/L_{j',0}). \end{aligned} \quad (\text{П. 8})$$



Входящие в выражение (П.8) коэффициенты  $\pi_j$ ,  $\xi_{j,0}^{(j')}$ ,  $\xi_{j,1}^{(j')}$ , вычисляются при помощи рекуррентных соотношений

$$\pi_{j+1} = L_{j+1,0} \sum_{j'=0}^j \pi_{j'} / \lambda_{j+1,j'},$$

$$\xi_{j+1,0}^{(j')} = \sum_{i=j'}^j \frac{1}{\lambda_{j+1,i}} \left( \frac{\xi_{i,0}^{(j')} + L_{j+1,1} \sqrt{L_{i,1} / (L_{j',0} L_{j',1} L_{i,0})} \xi_{i,1}^{(j')}}{1/L_{j+1,1} - L_{j+1,1}/L_{j',0} L_{j',1}} \right),$$

$$\xi_{j+1,1}^{(j')} = \sum_{i=j'}^j \frac{\nu_{j+1}}{\lambda_{j+1,i} \nu_i} \left( \frac{\xi_{i,1}^{(j')} + L_{j+1,0} \sqrt{L_{i,0} / (L_{j',0} L_{j',1} L_{i,1})} \xi_{i,0}^{(j')}}{1/L_{j+1,1} - L_{j',0}/L_{j',0} L_{j',1}} \right),$$

$$\xi_{j+1,0}^{(j+1)} = \xi_{j+1,1}^{(j+1)} = \xi_j \left[ \pi_{j+1} - \sum_{i=0}^j (\xi_{j+1,0}^{(i)} (3\mu' / \nu_{j+1}) \xi_{j+1,1}^{(i)}) \right], \quad \xi_j = (1 + 3\mu' / \nu_j)^{-1}. \quad (\text{П.9})$$

Для практического использования формул (П.8) и (П.9) в многогрупповых расчетах замедления электронов необходимо задать способ определения энергетических групп. Наиболее естественным способом вычисления энергии электронов в следующей группе является определение средних потерь при неупругом столкновении

$$\bar{\epsilon} = \int_{E_{\min}}^{E_{\max}} \epsilon d\epsilon \left/ \int_{E_{\min}}^{E_{\max}} d\epsilon, \right. \quad (\text{П.10})$$

где  $E_{\max}$  и  $E_{\min}$  — максимальная и минимальная энергии, передаваемые электронами при столкновении.

Тогда средняя энергия электрона после  $(j+1)$ -го неупругого столкновения вычисляется по формуле

$$E_{j+1} = E_j - \bar{\epsilon}_j, \quad (\text{П.11})$$

где  $\bar{\epsilon}_j$  — средняя потеря энергии при столкновении электрона с атомом кристалла (П.10).

#### Список литературы

- [1] Афанасьев А. М., Александров П. А., Имамов Р. М. Рентгенодифракционная диагностика субмикронных слоев. М: Наука, 1989. 152 с.
- [2] Афанасьев А. М., Перегудов В. Н. // ДАН СССР. 1988. Т. 301. № 5. С. 1098—1100.
- [3] Пашаев Э. М., Перегудов В. Н., Имамов Р. М. // Тез. докл. XII Европейской кристаллогр. конф. М., 1989. Т. 1. С. 356.
- [4] Durbin S. U., Berman L. E., Batterman B. W. and Blakely J. M. // Phys. Rev. Lett. 1986. V. 56. N 3. P. 236—239.
- [5] Пашаев Э. М., Перегудов В. Н., Имамов Р. М. // ФТТ. 1990. Т. 32. № 7. С. 2094—2099.
- [6] Александров П. А., Зашквара В. В., Пашаев Э. М. и др. // ПТЭ. 1986. № 1. С. 198—202.
- [7] Трейси Д. К., Барстренд Д. М. Новое в исследовании поверхности твердого тела. М: Мир, 1977. Вып. 2. С. 83—103.

Институт кристаллографии  
Москва

Поступило в Редакцию  
18 июня 1990 г.