

УДК 537.533.74

© 1992

## ПРОЯВЛЕНИЕ ЗОННОЙ СТРУКТУРЫ КРЕМНИЯ В НИЗКОЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ СПЕКТРАХ ПОЛНОГО ТОКА ПОВЕРХНОСТЕЙ (100) И (111)

С. А. Комолов, О. Ф. Панченко, В. М. Шаталов

Получены спектры полного тока атомно-чистых поверхностей Si(100) и Si(111). На основе энергетических зонных расчетов дана теоретическая интерпретация тонкой структуры этих спектров при учете конечной ширины электронных уровней. Развиваемый метод позволяет отделить объемные эффекты в спектрах полного тока от поверхностных.

В последние годы интенсивно развивается такой новый метод диагностики поверхности и исследования приповерхностных состояний, как спектроскопия полного тока [1,2]. Он основан на анализе энергетической зависимости тока на образец при его облучении электронным пучком в энергетическом диапазоне 0—20 эВ. Физическая природа тонкой структуры спектра полного тока (СПТ) определяется механизмами взаимодействия электронов с поверхностью твердого тела и в низкоэнергетическом диапазоне в основном обусловлена энергетической зависимостью упругого отражения. В ряде работ [2—4] изменение упругого отражения связывалось с пороговыми изменениями вероятности неупругого рассеяния электронов в твердом теле. 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 [5,6]. 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.

Принципиальная схема измерения СПТ в сверхвысоковакуумных условиях подробно описана в [2]. Полуширина энергетического распределения первичных электронов составляла ~0.5 эВ, энергия электронов модулировалась с частотой ~400 Гц и амплитудой ~0.1 эВ. Выделение сигнала, пропорционального производной от полного тока, осуществлялось с помощью синхронного детектирования. Очистка поверхности осуществлялась ионной бомбардировкой (ионы  $Ag^+$  с энергией 400 эВ) с последующим термическим отжигом. В процессе очистки прослеживалась эволюция СПТ, контролировалось изменение потенциала поверхности и параллельно измерялись оже-электронные спектры. Критерием очистки поверхности служили воспроизводимость СПТ, достижение характерных значений работы выхода  $e\phi$  (4.85 и 4.75 эВ для граней (100) и (111) соответственно) и отсутствие в оже-спектре сигналов кислорода, углерода и других загрязнений. Измеряемый ток в цепи образца  $I = I_p - I_s$ , где  $I_p$  — поток первичных электронов с энергией  $E_p$ ,  $I_s$  — ток уходящих из образца электронов, как упруго, так и неупруго отраженных. К последним относятся неупруго отраженные первичные электроны, высоковозбужденные электроны твердого тела,

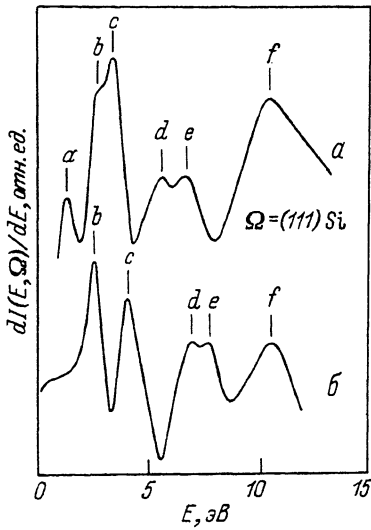


Рис. 1. СПТ грани (100) монокристалла Si: а — эксперимент; б — теория.

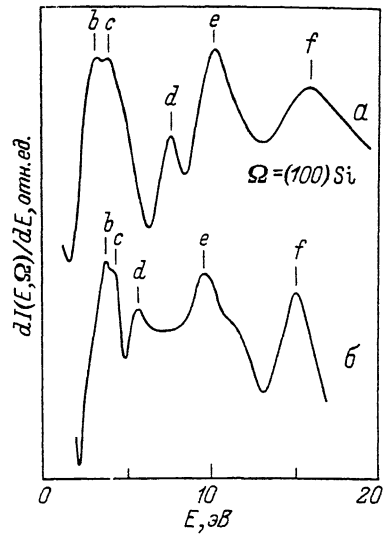


Рис. 2. То же, что и на рис. 1, для грани Si (100).

Кривые разнесены по оси ординат произвольным образом.

оже-электроны и истинно вторичные электроны, появление которых существенно зависит от величины  $E_p$ . При низких энергиях первичных электронов ( $E_p < < 5-8$  эВ) преобладает упругое отражение [2], которое становится сравнимым с неупругой компонентой при  $E_p < 20$  эВ. В области энергий до 100 эВ доля упругого отражения составляет несколько процентов и преобладает электрон-электронное рассеяние с возбуждением межзонных переходов.

На рис. 1, а, 2, а представлены полученные СПТ  $dI(E, \Omega)/dE$  граней Si(100) и Si(111) соответственно. Энергия первичных электронов  $E$  отсчитывается от уровня вакуума. Спектры имеют тонкую структуру, существенно зависящую от ориентации монокристалла.

Для теоретической интерпретации полученных СПТ 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  $\Omega$ . При этом ток через образец имеет вид

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

где  $E_{nk}$  — закон дисперсии электронов,  $\Omega_{nk}$  — 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,  $V$  — объем кристалла. Переходя от суммирования по  $\mathbf{k}$  к интегрированию по поверхности постоянной энергии  $E_{nk} = E$ , получаем

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

где  $N(E, \Omega)$  — число зон вдоль направления  $\Omega$ , для которых выполняется равенство  $E = E_{nk}$ . Здесь учтена конечная ширина  $\hbar\Gamma(E) = \hbar/\tau(E)$  электронных

уровней путем замены  $\delta$ -функции по энергии в (1) на соответствующий лоренциан. При этом время жизни возбужденного состояния  $\tau(E)$  определялось из [7]:

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

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

Выражение (2) справедливо, когда  $\Omega$  совпадает с осью симметрии кристалла (как в нашем случае). Из графика зонной структуры Si, полученной методом эмпирического псевдопотенциала с параметрами из [8], легко построить ступенчатую функцию  $N(E, \Omega)$ . Результаты расчета СПТ представлены на рис. 1, б, 2, б (для граней Si(100) и Si(111) соответственно). В таблице приведены положения характерных максимумов теоретических и экспериментальных СПТ Si. Эти особенности на рис. 1, 2 обозначены буквами  $a, b, c, \dots$  по возрастанию

Положение характерных максимумов в СПТ

Направление	Работа	Энергетическое положение макс, эВ					
		$a$	$b$	$c$	$d$	$e$	$f$
(100)	Эксп.	—	3.2	4.0	7.7	10.2	16.0
	Теор.	—	3.8	4.3	5.8	9.7	15.0
(111)	Эксп.	1.3	2.7	3.5	5.6	6.8	10.5
	Теор.	—	2.6	4.0	7.0	7.7	10.5

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 [9,10]. Так, низкоэнергетический максимум с  $E \approx 1.3$  эВ в СПТ Si(111) (рис. 2,  $a$ , пик  $a$ ) объясняется в [3] наличием полосы поверхностных состояний вблизи края валентной зоны. При этом интенсивность максимума ослабляется при адсорбции кислорода, и он исчезает при температурах  $T > 200$  °С, что указывает на его связи с поверхностными состояниями.

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

#### Список литературы

- [1] Schafer I., Schluter M., Skibowski M. // Phys. Rev. B. 1987. V. 35. N 14. P. 7663—7670.
- [2] Комолов С. А. Интегральная вторично-электронная спектроскопия поверхности. Л.: Изд-во ЛГУ, 1986. 180 с.
- [3] Комолов С. А. // ЖТФ. 1981. Т. 51, № 9. С. 1909—1913.
- [4] Комолов С. А. // ЖТФ. 1980. Т. 50. № 5. С. 1020—1024.
- [5] Строков В. Н., Комолов С. А. // Вестн. ЛГУ. Сер. 4: Физ., хим. 1989. Вып. 4 (№ 25). С. 81—86.

- [6] Строков В. Н., Штанько А. В., Комолов С. А. // Вестн. ЛГУ. Сер. 4: Физ., хим. 1990. Вып. 1. (№ 4). С. 7—13.
- [7] Артамонов О. М., Виноградов А. Г., Панченко О. Ф., Терехов А. Н., Шаталов В. М. // ФТТ. 1989. Т. 31. № 1. С. 57—61.
- [8] Cohen M. L., Bergstresser T. K. // Phys. Rev. 1966. V. 141. N 2. P. 789—796.
- [9] Дехтяр И. Я., Меламед Б. Я., Силантьев В. И., Шевченко Н. А. // Поверхность. Физ., хим., мех. 1982. № 8. С. 55—62.
- [10] Силантьев В. И., Шевченко Н. А., Меламед Б. Я. // УФЖ. 1979. Т. 24. № 8. С. 1227—1229.

Донецкий  
Физико-технический институт  
АН Украины

Поступило в Редакцию  
2 декабря 1991 г.

---