

## Фокусировка электронов при отражении от монокристалла Si (100)

© И.И. Пронин, Н.С. Фараджев, М.В. Гомоюнова

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук,  
194021 Санкт-Петербург, Россия

(Поступила в Редакцию 15 января 1998 г.)

Исследованы дифракционные картины квазиупругорассеянных электронов, возникающие вследствие их фокусировки в тонком приповерхностном слое монокристалла Si (100)- $2 \times 1$ . Результаты измерений, проведенных в диапазоне энергии 0.6–2 keV, сопоставлены с расчетами, выполненными в кластерном приближении однократного рассеяния. Показано, что данная модель хорошо описывает эксперимент. Проанализирована взаимосвязь дифракционных картин, наблюдаемых для разных граней кремния, и рассмотрено влияние на них ориентации пучка первичных электронов. Установлены закономерности фокусировки квазиупругорассеянных электронов при выходе из кристалла вдоль основных кристаллографических направлений. Изучены особенности эффекта для электронов, испытавших при отражении неупругое взаимодействие с электронной подсистемой кристалла.

В настоящее время в структурном анализе поверхности твердого тела используется большой арсенал мощных методов, включающий, в частности, дифракцию медленных и быстрых электронов, дифракцию фото- и Оже-электронов, электронную микроскопию, сканирующую туннельную и атомно-силовую микроскопии и др. В последние годы к ним добавился метод дифракции электронов средней энергии, идеально подходящий для исследования кристаллической структуры приповерхностного слоя твердого тела толщиной 10–20 Å [1–3]. При этом наибольшую поверхностную чувствительность обеспечивает анализ дифракционных картин, создаваемых лишь квазиупругорассеянными электронами (КУРЭ), претерпевающими при отражении неупругое рассеяние с участием фононов. Этот метод позволяет визуализировать в реальном пространстве атомное строение объектов, не имеющих дальнего порядка, и изучать атомные процессы в приповерхностном слое в режиме реального времени.

Для реализации всех потенциальных возможностей данного метода необходимо детально изучить механизм формирования картин дифракции КУРЭ. Исследования, проведенные нами на ряде модельных объектов с известной структурой поверхности (W (100) [4], Mo (110) [5], Si (111) [6]), показали, что определяющую роль в нем играет эффект фокусировки отраженных электронов. В настоящей работе, продолжающей этот цикл, мы впервые изучили картины дифракции КУРЭ для другой основной грани кремния — Si (100), что позволило не только выявить взаимосвязь между дифракционными картинками, получаемыми для разных граней одного и того же монокристалла, но и понять, как влияет на них изменение ориентации пучка первичных электронов. Сравнительный анализ экспериментальных данных для разных граней интересен также с точки зрения установления закономерностей самого процесса фокусировки электронов в кристаллах. В данной работе таким способом определены зависимости эффективности фокусировки электронов от их энергии, длины фокусирующих цепочек, межатомных расстояний и их ориентации относительно поверхности. Наконец, получена новая ин-

формация о фокусировке электронов, испытавших при отражении потери энергии на возбуждение электронной подсистемы твердого тела (до 300 eV). Эти сведения важны для расширения возможностей метода, так как изменение диапазона потерь энергии регистрируемых электронов может быть использовано для варьирования толщины зондируемого слоя.

### 1. Техника эксперимента

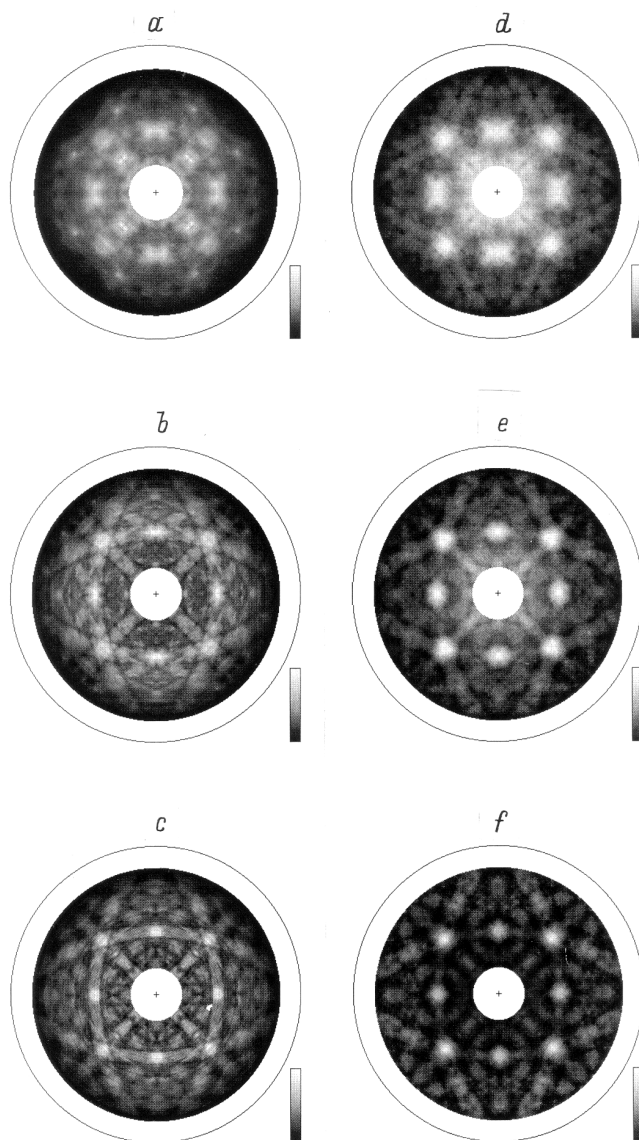
Исследования проводились с помощью вторично-электронного спектрометра с угловым разрешением, описанного в [7]. Регистрация дифракционных картин КУРЭ (Кикучи-картин) осуществлялась подвижным электростатическим энергоанализатором в условиях нормального падения первичного пучка электронов на поверхность кристалла. Энергия первичных электронов варьировалась в диапазоне 0.6–2 keV. В качестве детектора отраженных электронов использовался каналный электронный умножитель. Энергетическое разрешение спектрометра составляло 0.4%, а угловое разрешение — 1°. В процессе измерений для каждого направления регистрации электронов определялась интенсивность пика упруго отраженных электронов [5]. Аналогичным образом снимались и угловые распределения электронов, отраженных с различными потерями энергии. Сбор данных проводился автоматически с помощью системы регистрации, управляемой персональным компьютером. При этом азимутальный угол вылета электронов  $\varphi$  менялся вращением кристалла вокруг оси, перпендикулярной его поверхности, полярный угол  $\theta$  — вращением анализатора вокруг оси, лежащей в плоскости поверхности образца. Измерения проводились в широком диапазоне углов ( $\theta = 18\text{--}86^\circ$ ,  $\varphi = 0\text{--}360^\circ$ ) с шагом 1° по обоим параметрам. Затем с помощью специальной программы эти данные преобразовывались в двумерные карты  $I(\theta, \varphi)$  распределения интенсивности отражения электронов по углам их вылета.

Исследуемые образцы вырезались из монокристаллических пластин КЭФ-1 и имели линейные размеры  $22.0 \times 14.0 \times 0.25$  mm. Точность выведения грани Si(100) была не хуже 10 угловых минут. Для получения атомно-чистой поверхности кристалл кратковременно прогревался в вакууме до температуры  $1200^\circ\text{C}$ . При этом элементный состав поверхности определялся методом электронной Оже-спектроскопии. После очистки содержание примесей не превышало 10% монослоя. Атомная структура поверхности кремния контролировалась методом дифракции медленных электронов. Описанная процедура позволяла получить кристалл со стандартной реконструированной поверхностью типа  $2 \times 1$ . Измерения проводились при комнатной температуре образца в вакууме  $5 \cdot 10^{-10}$  Torr.

## 2. Картины дифракции КУРЭ в диапазоне энергии 0.6–2 keV

Типичные дифракционные картины для грани Si(100), измеренные при разных энергиях, иллюстрируют данные рис. 1. Их сопоставление обнаруживает определенную динамику изменения картин с ростом энергии. Результаты, относящиеся к наименьшей энергии 0.6 keV (рис. 1, *a*), демонстрируют два типа дифракционных максимумов. Первые из них, проявляющиеся в виде ярких точек, — обычные брэгговские рефлексы, обусловленные упругим когерентным рассеянием первичных электронов. Их интенсивность затухает с ростом энергии, и на рис. 1, *b* и *c* они уже не видны.

Максимумы второго типа имеют существенно бóльшую ширину (порядка  $10^\circ$ ), и их интенсивность, наоборот, возрастает с ростом энергии. Основной их отличительной особенностью является неизменность пространственной ориентации при изменении энергии, которая совпадает с ориентацией наиболее плотноупакованных рядов атомов кристалла. В частности, самыми сильными максимумами на всех трех картинах являются пики вдоль плотноупакованных атомных направлений  $\langle 110 \rangle$  и  $\langle 111 \rangle$ , ориентированных под углами  $45^\circ$  и  $55^\circ$  к нормали к поверхности образца. В этом отношении данные, полученные для грани Si(100), хорошо согласуются с нашими прежними результатами для других монокристаллов, подтверждая следующую модель формирования дифракционных картин КУРЭ. В процессе проникновения первичных электронов в кристалл они испытывают неупругие взаимодействия с фононами и рассеиваются в обратную полусферу. Эти акты электрон-фононного рассеяния можно рассматривать как генерацию внутри кристалла источников расходящихся электронных волн. Последующая фокусировка эмитируемых указанными источниками электронов на плотноупакованных цепочках атомов кристалла и приводит к преимущественному их вылету вдоль плотноупакованных направлений. Поэтому картины дифракции КУРЭ непосредственно отображают кристаллическое строение приповерхностной области



**Рис. 1.** *a–c* — картины дифракции КУРЭ, полученные для монокристалла Si(100) при энергиях электронов, равных 0.6, 1.25 и 2 keV соответственно; *d–f* — расчетные дифракционные картины для тех же энергий, полученные в приближении плоских волн кластерной модели однократного рассеяния.

твёрдого тела, и их симметрия полностью соответствует симметрии кристалла, что хорошо видно из данных рис. 1, для которых характерна ось вращения четвертого порядка.

С ростом энергии электронов максимумы фокусировки сужаются, а их число увеличивается за счет появления новых дифракционных пятен, соответствующих атомным рядам с меньшей плотностью упаковки. Еще одной характерной чертой дифракционных картин КУРЭ в области средних энергий является постепенное формирование полос повышенной интенсивности отражения (Кикучи-полос), ориентированных вдоль наиболее плотноупакованных атомных плоскостей кристалла. В случае

кремния ими являются плоскости  $\{110\}$ . Такие полосы только едва намечаются при 0.6 keV, но уже достаточно хорошо видны при энергии 1.25 keV (рис. 1, *b*). Их яркость и четкость становятся еще больше при 2 keV. Ширина же полос, наоборот, с увеличением энергии уменьшается.

### 3. Моделирование дифракционных картин

Рассмотренные дифракционные картины были сопоставлены с результатами численных расчетов, основанных на эффекте фокусировки электронов и подобных проведенным для грани Si(111) [6]. При этом была использована кластерная модель однократного рассеяния, развитая нами для случая квазиупругого отражения электронов. Результаты моделирования представлены на рис. 1, *d-f*.

Видно, что расчетные картины достаточно хорошо описывают эксперимент. Действительно, они правильно воспроизводят все основные максимумы измеренных распределений, а также полосы повышенной интенсивности отражения вдоль плоскостей (110). Хорошо прослеживается на рис. 1, *d-f* и описанная выше динамика изменения картин с ростом энергии электронов. Например, так же как и на экспериментальных картинах,

Кикучи-полосы едва намечаются при энергии 0.6 keV, но хорошо видны при 1.25 и 2 keV, показывая тем самым, что основной вклад в их интенсивность вносят многочисленные максимумы фокусировки электронов на менее плотноупакованных атомных рядах кристалла. Так же как и в случае грани Si(111), расхождения теории и эксперимента связаны главным образом с заметно более высокой интенсивностью максимумов расчетных картин, соответствующих направлениям  $\langle 110 \rangle$  и  $\langle 1\bar{1}1 \rangle$ . Это завышение обусловлено, с одной стороны, недостаточной точностью описания малоуглового рассеяния электронов на атомах кристалла в приближении плоских волн, а с другой — неучетом актов многократного рассеяния электронов, способных играть важную роль в случае наиболее плотноупакованных атомных цепочек [6].

Зрительное восприятие сходства расчетных и экспериментальных картин подтверждается и их количественным сопоставлением с помощью факторов надежности, проведенным по методике, описанной в [6]. Для всех рассмотренных картин получаются вполне удовлетворительные значения фактора  $R_1$ , равные 0.105, 0.101 и 0.109 для энергий 0.6, 1.25 и 2 keV соответственно.

Численное моделирование дифракционных картин позволяет понять механизм формирования целого ряда особенностей их тонкой структуры. Например, расчетная картина при энергии 0.6 keV качественно воспроизводит характерное раздвоение дифракционных максимумов вдоль направления  $\langle 110 \rangle$ , отчетливо наблюдаемое в эксперименте. Поэтому анализ результатов расчета способен пролить свет на причину возникновения тонкой структуры профиля этого максимума. Причина состоит в особенности строения кристаллической решетки кремния, которая представляет собой две вложенные друг в друга ГЦК-решетки, сдвинутые на четверть периода по всем осям. В результате атомные цепочки вдоль направления  $\langle 110 \rangle$  оказываются вдвоенными атомными рядами (рис. 2, *b*), и можно предположить, что наблюдаемый эффект вызывается интерференцией электронных волн между ними. Для проверки этой гипотезы были проведены модельные расчеты для одиночной (рис. 2, *a*) и двойной цепочек (рис. 2, *b*). При этом для простоты эмиттерами считались лишь наиболее удаленные от поверхности атомы, обозначенные на рисунке более темным тоном. Видно, что учет соседнего ряда атомов действительно влияет на профиль рассматриваемого максимума, делая его менее симметричным за счет уширения в плоскости (110). Дальнейшее увеличение числа рассматриваемых цепочек еще больше усложняет форму пятна, приближая ее к наблюдаемой в эксперименте.

### 4. Взаимосвязь картин дифракции от разных граней кремния

Важной особенностью рассматриваемых картин является то, что они, как известно, жестко связаны с кристаллом и при наклоне образца поворачиваются вместе

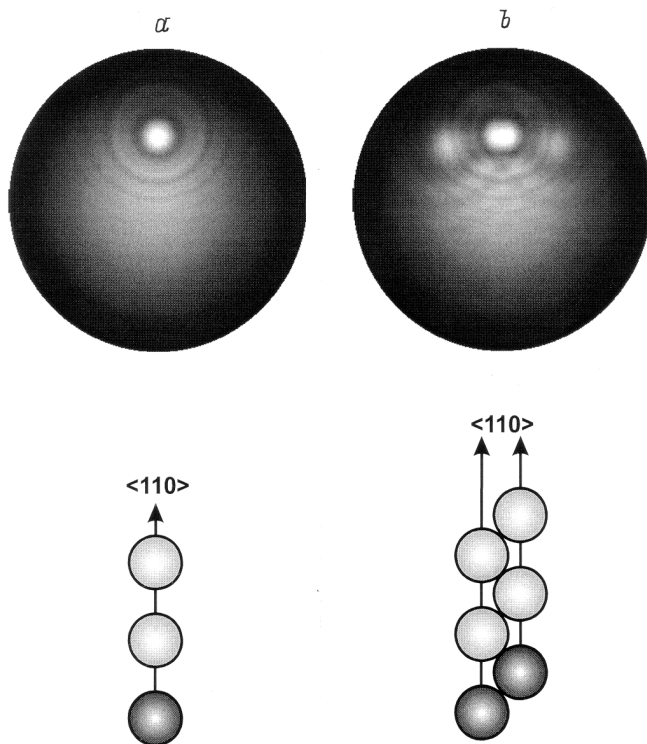
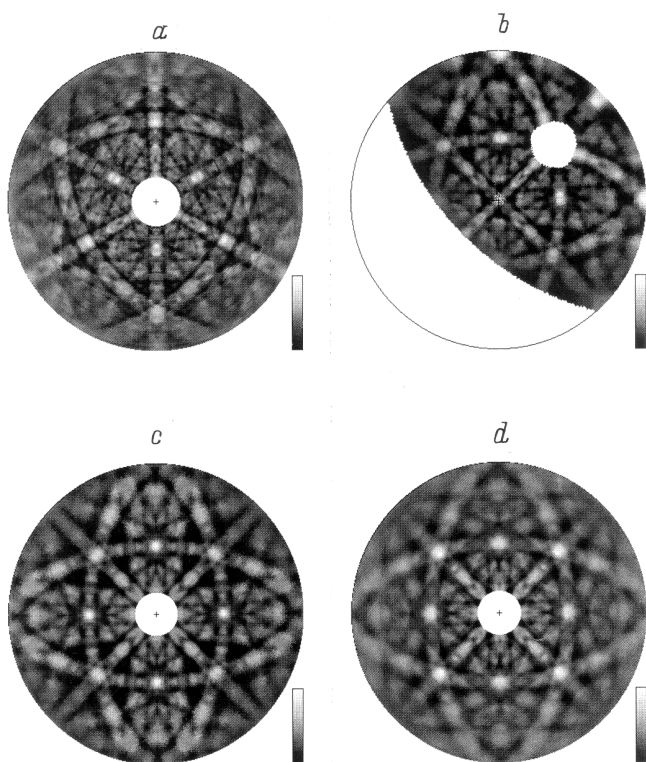


Рис. 2. *a*) Расчетная дифракционная картина от изолированной одиночной цепочки атомов кремния, ориентированной вдоль направления  $\langle 110 \rangle$ . *b*) Аналогичная картина от двух ближайших цепочек, схематически показанных в нижней части рисунка.



**Рис. 3.** *a*) Картина дифракции КУРЭ для грани Si(111), измеренная при 2 keV [6]. *b*) Та же картина, повернутая как целое таким образом, чтобы направление  $\langle 100 \rangle$  оказалось перпендикулярным поверхности образца. *c*) Полная дифракционная картина грани Si(100), полученная из данных рис. 2, *a*. *d*) Дифракционная картина, непосредственно измеренная для Si(100).

с ним. Этот же результат можно получить и другим путем, сопоставив дифракционные картины, измеренные для разных граней кремния. На рис. 3 показаны две такие картины, полученные при энергии 2 keV. Одна из них для грани Si(111) (рис. 3, *a*) взята из работы [6], а другая — только что рассмотренная картина для Si(100) (рис. 3, *d*). На рис. 3, *a* отчетливо проявляются три максимума, возникающие при вылете электронов вдоль направлений  $\langle 100 \rangle$ , ориентированных под углом  $55^\circ$  к нормали к поверхности образца. Если теперь всю картину повернуть как целое так, чтобы одно из этих направлений оказалось перпендикулярным поверхности, то получится результат, показанный на рис. 3, *b*. Вследствие такого поворота в картине возникают две незаполненные области. Однако четко проявляющиеся элементы новой четырехкратной симметрии позволяют восстановить всю картину (рис. 3, *c*). Именно такой вид и должна иметь дифракционная картина для грани (100), если изменение угла падения первичного пучка на  $55^\circ$  не является существенным. Сопоставление данных рис. 3, *c* с результатами непосредственных измерений для грани кремния (100) обнаруживает почти полное их совпадение. Следовательно, изменение ориентации

первичного пучка, действительно, почти не влияет на вид дифракционной картины.

Вместе с тем более тщательное рассмотрение обсуждаемых картин позволяет обнаружить и некоторые их различия. Так, на рис. 3, *c* лучше видна дифракционная структура на периферии картины. Также различаются относительные интенсивности главных максимумов. На рис. 3, *c* наиболее сильные максимумы возникают вдоль направлений  $\langle 110 \rangle$ , тогда как на рис. 3, *d* пики наибольшей интенсивности наблюдаются в направлениях  $\langle 111 \rangle$ . Это означает, что определенное влияние на процессы фокусировки электронов, движущихся в физически эквивалентных направлениях, оказывает ориентация этих направлений относительно поверхности кристалла, а также угол падения первичного пучка.

### 5. Фокусировка КУРЭ

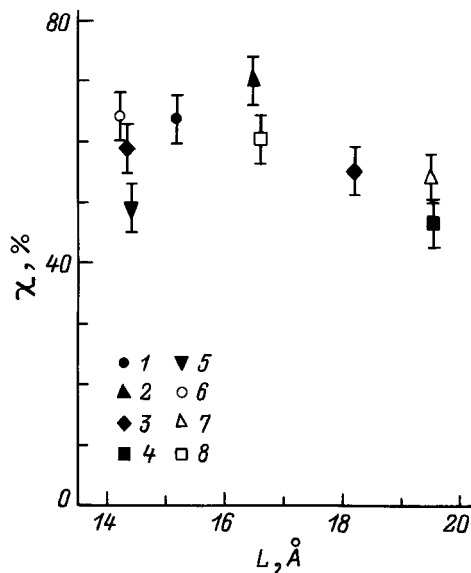
Анализ полученных экспериментальных данных позволяет установить некоторые особенности фокусировки электронов при их движении вдоль разных кристаллографических направлений кремния. Для количественной оценки этого процесса можно воспользоваться параметром  $\chi$ , который описывает эффективность фокусировки вдоль различных цепочек атомов,

$$\chi = [(I_{\max} - I_{\min}) / I_{\max}] \cdot 100\%,$$

где  $I_{\max}$  — измеренная интенсивность квазиупругого рассеяния вдоль данной цепочки атомов, а  $I_{\min}$  — интенсивность рассеяния в минимуме дифракционной картины [6].

Из полученных данных следует, что, так же как и для грани Si(111), с ростом энергии электронов эффективность фокусировки для всех низкоиндексированных направлений усиливается, и это обусловлено удлинением рассеивающих атомных цепочек. Рассмотрим теперь, как влияют на эффективность  $\chi$  длины фокусирующих цепочек  $L$  и межатомные расстояния  $d$ . Длины  $L$ , зависящие от ориентации цепочек атомов относительно нормали к поверхности, определялись в рамках простейшей модели однократного квазиупругого рассеяния электронов на большой угол с использованием средних длин  $\lambda$  свободного пробега электронов до неупругого рассеяния, рекомендуемых в [8].

Эффективность фокусировки электронов вдоль разных кристаллографических направлений была проанализирована при энергии 2 keV. Эта энергия является наибольшей в изученном диапазоне, и для нее реализуется наибольшая глубина зондирования, что позволяет свести к минимуму влияние реконструкции поверхности. Эффект фокусировки проанализирован для кристаллографических направлений  $\langle 123 \rangle$ ,  $\langle 110 \rangle$ ,  $\langle 111 \rangle$  и  $\langle 130 \rangle$ , ориентированных соответственно под углами 37, 45, 55 и  $71^\circ$  к нормали к поверхности, а также для двух физически эквивалентных направлений  $\langle 112 \rangle$ , составляющих разные углы ( $36$  и  $65^\circ$ ) с нормалью к поверхности. Полученные результаты иллюстрируются рис. 4, на котором



**Рис. 4.** Эффективность фокусировки электронов вдоль атомных цепочек кремния как функция их средней длины. Разными символами обозначены точки, относящиеся к цепочкам, ориентированным вдоль следующих направлений: 1 —  $\langle 110 \rangle$ , 2 —  $\langle 111 \rangle$ , 3 —  $\langle 112 \rangle$ , 4 —  $\langle 130 \rangle$ , 5 —  $\langle 123 \rangle$ , 6 —  $\langle 110 \rangle$ , 7 —  $\langle 111 \rangle$ , 8 —  $\langle 100 \rangle$ . Точки 6–8 получены анализом данных для грани Si (111) [6].

данные для разных цепочек представлены в зависимости от их длины. На нем же представлены и данные для грани Si (111) [6]. Первое, что бросается в глаза, это сильное влияние плотности упаковки атомных рядов на величину наблюдаемого эффекта. Действительно, на диаграмме практически при одних и тех же значениях  $L$  можно найти точки с существенно различными ординатами. Например, при длине цепочек около 14 Å эффективность фокусировки составляет 47, 58 и 64% для направлений  $\langle 123 \rangle$ ,  $\langle 112 \rangle$  и  $\langle 110 \rangle$  соответственно. Аналогично разные значения  $\chi$  наблюдаются для различных атомных цепочек при  $L = 16.5$  и  $19.5$  Å. Во всех случаях эффективность фокусировки вдоль цепочек фиксированной длины тем выше, чем больше их плотность упаковки. В целом, это правило подтверждается и сопоставлением данных, полученных для цепочек разной длины. Например, точки, соответствующие направлениям  $\langle 123 \rangle$  и  $\langle 130 \rangle$  с наибольшими межатомными расстояниями (10.2 и 8.5 Å), лежат существенно ниже всех остальных.

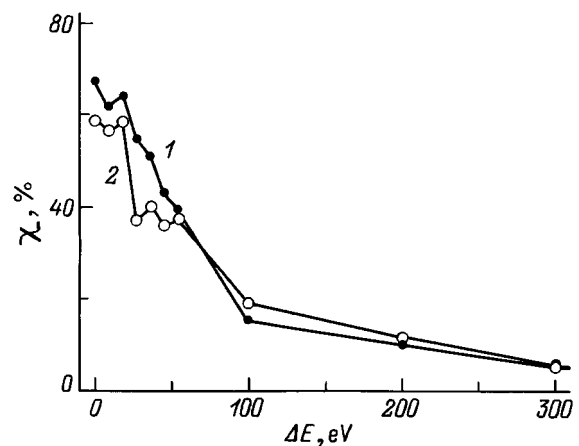
Учитывая сильное влияние рассмотренного фактора, для определения зависимостей  $\chi(L)$  более целесообразно использовать данные, полученные лишь для физически эквивалентных направлений. В нашем случае такую зависимость можно попытаться проанализировать для трех направлений:  $\langle 110 \rangle$ ,  $\langle 111 \rangle$  и  $\langle 112 \rangle$ . Если для первого из них, где  $L$  меняется незначительно, нельзя сделать определенного вывода, то в остальных случаях удлинение цепочки приводит к уменьшению эффективности фокусировки. Особенно это заметно для направления

$\langle 111 \rangle$ , для которого сравнительно небольшое изменение  $L$  приводит к значительному увеличению числа рассеивающих атомов (от трех до пяти), что связано со спецификой ее внутреннего строения. Физической причиной, приводящей к ослаблению эффекта, является влияние процессов дефокусировки, начинающих играть важную роль в случае достаточно длинных атомных цепочек.

## 6. Фокусировка электронов, отраженных с потерями энергии

Эффект фокусировки проявляется и в дифракционных картинах, наблюдаемых при регистрации электронов, отраженных от кристалла с потерями энергии. Мы изучили этот эффект количественно, опираясь на данные по распределениям отраженных электронов по азимутальному углу вылета при разных полярных углах. Для сопоставления их с приведенными выше результатами для КУРЭ основное внимание было уделено данным, относящимся к энергии первичных электронов 2 keV. Все азимутальные сканы, полученные для значений потерь энергии  $\Delta E$ , не превышающих примерно 200 eV, обнаруживают отчетливую дифракционную структуру. При этом самые интенсивные пики, так же как и для КУРЭ, наблюдаются вдоль наиболее плотноупакованных направлений кристалла  $\langle 110 \rangle$  и  $\langle 111 \rangle$ . Форма кривых  $I(\varphi)$ , однако, зависит от величины потерь энергии, испытываемых электронами. С ростом  $\Delta E$  происходит заметное ослабление максимумов фокусировки электронов, особенно вдоль направлений  $\langle 110 \rangle$  и  $\langle 111 \rangle$ . Это позволяет говорить об ослаблении самого эффекта фокусировки с ростом потерь энергии отраженных электронов. Сходное поведение характерно и для менее интенсивных максимумов, например, для пика вдоль направления  $\langle 112 \rangle$ .

Зависимости эффективности фокусировки неупруго отраженных электронов от величины потери энергии,



**Рис. 5.** Зависимости эффективности фокусировки электронов, испытавших при отражении неупругое рассеяние, от величины потерянной ими энергии. Кривая 1 получена для цепочек, ориентированных вдоль направления  $\langle 110 \rangle$ , кривая 2 — вдоль направления  $\langle 112 \rangle$ .

количественно описывающие рассмотренные закономерности, иллюстрируются рис. 5. На нем приведены данные для двух направлений с разной плотностью упаковки. Обе зависимости  $\chi(\Delta E)$  в целом имеют падающий характер. Основной их спад происходит в диапазоне значений  $\Delta E$ , меньших 100 eV. Причем ход кривых в этой области немонотонен, обнаруживая усиление фокусировки в случае потерь, соответствующих одно- и двукратному возбуждению объемных плазмонов кремния. Примечательно, что при отражении электронов с однократным возбуждением плазмона величина  $\chi$  практически такая же как и при квазиупругом рассеянии. В диапазоне величин  $\Delta E > 100$  eV эффективность фокусировки плавно уменьшается до примерно 5% при  $\Delta E = 300$  eV. Падение зависимостей  $\chi(\Delta E)$  можно объяснить усилением процессов дефокусировки электронов с увеличением длины пути, проходимого ими при вылете из кристалла. Действительно, с ростом  $\Delta E$  возрастает средняя глубина выхода отраженных электронов. Следует, однако, отметить, что в данном случае в отличие от рассмотренного выше для КУРЭ, путь, проходимый электроном, существенно длиннее, и поэтому дефокусировка электронов возникает не только из-за многократного упругого рассеяния [9–11], но и за счет неупругих процессов.

Работа выполнена в рамках проекта № 96-02-16909 Российского фонда фундаментальных исследований.

## Список литературы

- [1] S.A. Chambers. Surf. Sci. Rep. **16**, 6, 261 (1992).
- [2] M. Erbudak, M. Hochstrasser, E. Wetli. Mod. Phys. Lett. **B8**, 28, 1759 (1994).
- [3] N.S. Faradzhev, M.V. Gomoynova, I.I. Pronin. Phys. Low-Dim. Struct. **3/4**, 93 (1997).
- [4] N.S. Faradzhev, M.V. Gomoynova, I.I. Pronin. Phys. Low-Dim. Struct. **9**, 11 (1994).
- [5] М.В. Гомоюнова, И.И. Пронин, Н.С. Фараджев. ЖЭТФ **110**, 1(7), 311 (1996).
- [6] И.И. Пронин, Н.С. Фараджев, М.В. Гомоюнова. ФТТ **39**, 4, 752 (1997).
- [7] И.И. Пронин, М.В. Гомоюнова, Д.П. Бернацкий, С.Л. Заславский. ПТЭ, **1**, 175 (1982).
- [8] M.P. Seach. Surf. Interface Anal. **9**, 85 (1986).
- [9] S.Y. Tong, H.C. Poon, D.R. Snider. Phys. Rev. **B32**, 4, 2096 (1985).
- [10] M.-L. Xu, M.A. Van Hove. Surf. Sci. **207**, 2, 215 (1989).
- [11] A.P. Kaduwela, D.J. Friedman, C.S. Fadley. J. Electron. Spectr. Rel. Phen. **57**, 2, 223 (1992).