

08,03

К вопросу о тонкой структуре $2p$ -спектров поверхности (100) кремния

© М.В. Кузьмин, А.А. Монок, С.В. Сорокина

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН,
Санкт-Петербург, Россия

E-mail: m.kuzmin@mail.ioffe.ru

Поступила в Редакцию 22 мая 2024 г.

В окончательной редакции 22 мая 2024 г.

Принята к публикации 24 мая 2024 г.

Используя синхротронное излучение и фотоэлектронную спектроскопию высокого разрешения (56–66 meV), исследована тонкая структура $2p$ -спектров поверхности Si(100) при 100 К в широкой области значений глубины выхода электронов. Показано, что эти спектры включают в себя пять поверхностных компонент. Установлена взаимосвязь их энергетических сдвигов с атомной и электронной структурой реконструкции $c(4 \times 2)$. Определены условия, при которых $2p$ -спектры имеют наибольшую чувствительность к поверхности и объему кремния, и, в частности, получены значения длины свободного пробега электронов в кремниевом кристалле как функции энергии фотонов. Полученные результаты могут быть использованы в качестве справочных данных в исследованиях различных поверхностных структур на подложке Si(100) с помощью фотоэмиссионных методов.

Ключевые слова: поверхность, фотоэлектронная спектроскопия, остоновый уровень, поверхностный сдвиг, кремний, длина свободного пробега.

DOI: 10.61011/FTT.2024.07.58397.132

1. Введение

Фотоэлектронная спектроскопия остоновых уровней (ФЭС-ОУ) является одним из наиболее информативных методов исследования атомной структуры поверхности [1–3]. С ее помощью регистрируют энергетические сдвиги внутренних оболочек поверхностных атомов, или *поверхностные сдвиги*, которые определяют как разность кинетической энергии электронов, выходящих из объема и с поверхности образца. Это различие возникает из-за того, что положения данных оболочек чувствительны к химическому и координационному окружению атома. Поэтому, исследуя тонкую структуру ФЭС-спектров ОУ, можно получать информацию о характере связей и зарядовом состоянии атомов в поверхностных реконструкциях, на границах раздела и в различных тонкопленочных структурах.

В последние десятилетия в литературе появилось большое количество результатов, полученных с помощью ФЭС-ОУ высокого разрешения для пленочных систем металл-полупроводник и диэлектрик-полупроводник. Небольшая часть из них, например, была рассмотрена в обзоре [4]. Очевидно, что для объяснения таких результатов необходимо детальное понимание формы спектральных линий и природы сдвигов ОУ для чистых поверхностей полупроводников. Однако даже в этом случае интерпретация тонкой структуры ФЭС-спектров далека от завершения. В частности, нет согласия в трактовке результатов для грани Si(100), являющейся одной из самых подробно исследованных поверхностей полупроводников. В ранних работах в

ее $2p$ -спектрах была обнаружена поверхностная компонента, смещенная на 0.5 eV в область низких энергий связи [5–9]. Она была интерпретирована как эмиссия из атомов верхнего слоя (поверхностных димеров) реконструкции (2×1) . Позднее применение ФЭС-ОУ высокого разрешения дало возможность установить сразу четыре поверхностные компоненты в $2p$ -спектрах реконструкций Si(100) $c(4 \times 2)$ при 120 К и Si(100) (2×1) при 300 К [10]. Две из них были связаны с атомами асимметричных димеров в первом слое (атомами $1u$ и $1d$ на рис. 1). Их поверхностные сдвиги равны -0.485 и 0.062 eV соответственно. Еще две поверхностные компоненты были приписаны атомам второго слоя (атомам 2 на рис. 1) и половине атомов третьего слоя. Их сдвиги соответственно 0.22 и -0.205 eV.

Альтернативная интерпретация $2p$ -спектров грани Si(100) была представлена в работе [12]. Ее авторы поставили в соответствие атомам $1d$ компоненту с поверхностным сдвигом 0.278 eV. В то же время поверхностные сдвиги 0.138 и -0.200 eV были приписаны соответственно атомам нижележащего слоя и атомам первого слоя, образующим симметричные димеры. Кроме того, в работе [12] были обнаружены еще две дополнительные особенности в $2p$ -спектрах, смещенные в область несколько более высоких энергий. Они были интерпретированы как поверхностные и объемные пики характеристических потерь. Похожие особенности наблюдались и в работе [13]. Авторы этого исследования связали их появление с поверхностными дефектами и характеристическими потерями энергии на межзонные переходы между двумя поверхностными состояниями вблизи запрещенной зоны кремния.

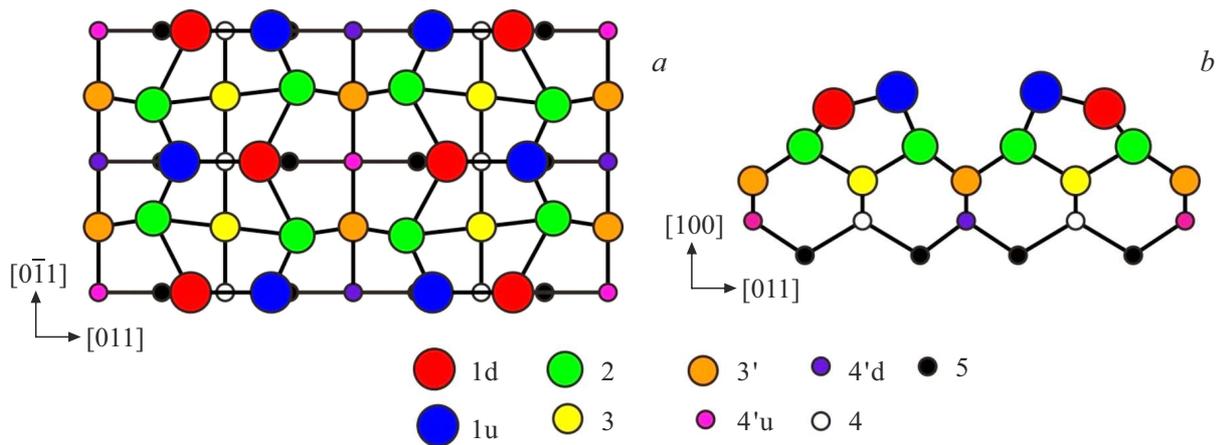


Рис. 1. Атомная структура поверхности Si(100)c(4 × 2): *a* — вид сверху, *b* — вид сбоку. Внизу приведены обозначения атомов в различных слоях. Модель адаптирована из работы [11].

Еще одна трактовка поверхностных сдвигов для Si(100) была предложена в статье [14]. Авторы обнаружили шесть поверхностных компонент, из которых объяснение было дано только четырем. Согласно этой статье, компонента, смещенная на 0.13 eV в область высоких энергий, обусловлена атомами 1*d* и 4'*d* на рис. 1. Компоненты со сдвигами 0.22 и −0.22 eV происходят от атомов третьего и четвертого слоев. В то же время эмиссия из атомов второго слоя не приводит к появлению отдельной поверхностной компоненты в 2*p*-спектрах, но дает вклад в объемную компоненту.

Также необходимо отметить, что в рассмотренных исследованиях имеются и другие разногласия. В частности, в них при разложении 2*p*-спектров были использованы разные величины лоренцевской ширины (ω_L). Она варьируется от 46 meV в работе [14] до 85 meV в [10]. Очевидно, что выбор этого и других параметров разложения оказывает существенное влияние на точность и надежность результатов.

На основании всего изложенного выше была поставлена цель провести в настоящей работе более надежный анализ тонкой структуры 2*p*-спектров для поверхности (100) кремния. Для этого были выполнены несколько условий. Во-первых, измерения были проведены при низкой температуре (100 K) и высоком разрешении по энергии. Во-вторых, 2*p*-спектры были зарегистрированы при разных значениях энергии фотонов ($h\nu$) и углах выхода (θ_e) электронов с поверхности. Это позволило варьировать длину свободного пробега и глубину выхода электронов в широкой области. В-третьих, в процессе экспериментов была обеспечена высокая степень чистоты и структурного совершенства поверхности Si(100). Все это и дало возможность получить детальную информацию о форме спектральной линии чистой поверхности Si(100). Далее в статье кратко описана методика эксперимента и изложены основные результаты исследования.

2. Методика эксперимента

Эксперименты проводились на канале I4 синхротрона MAX-lab (накопительное кольцо MAX-III) в Лунде (Швеция). Спектры 2*p*-уровня кремния регистрировались с помощью анализатора SPECS Phoibos 100 при температуре 100 K и остаточном давлении в вакуумной камере $3 \cdot 10^{-11}$ Torr. Полное энергетическое разрешение составляло 56–66 meV в зависимости от выбранной энергии квантов $h\nu$ (она изменялась в интервале 108–145 eV). Для определения разрешения, а также для калибровки шкалы энергии, использовались ФЭ-спектры края валентной зоны танталовой ленты, которая предварительно была тщательно очищена в кислороде и находилась в электрическом контакте с Si образцом. Угол эмиссии θ_e отсчитывался относительно нормали к поверхности и изменялся от 0° до 80°. Телесный угол сбора электронов составлял $\pm 1^\circ$.

В качестве образцов использовались мишени размером $10 \times 5 \times 0.3$ mm, которые вырезались из пластины монокристаллического кремния с ориентацией поверхности (100), легированной фосфором (*n*-тип), с удельным сопротивлением $\sim 5 \Omega \cdot \text{cm}$. Для очистки их поверхности применялись серии кратковременных прогревов при 1530 K, во время которых давление в вакуумной камере не поднималось выше $1 \cdot 10^{-9}$ Torr. Затем температура образца быстро понижалась до 1250 K и удерживалась при этом значении некоторое время для выглаживания атомных ступеней на поверхности. После охлаждения до комнатной температуры наблюдалась четкая дифракционная картина (2×1) с яркими рефлексами и низким уровнем фона (рис. 2). Далее кристалл охлаждался до 100 K. На его поверхности образовывалась структура c(4 × 2) (рис. 1). После этого производилась регистрация ФЭ-спектров.

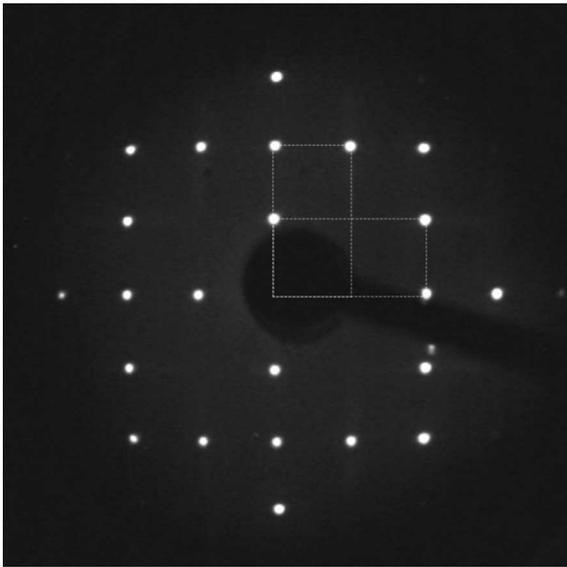


Рис. 2. Дифракционная картина поверхности Si(100) при комнатной температуре. Пунктирными линиями выделены две взаимно ортогональные элементарные ячейки структуры (2 × 1). Энергия электронов 95 eV.

3. Результаты и их обсуждение

На рис. 3 представлена серия нормированных 2p-спектров поверхности Si(100)c(4 × 2), полученная при различных значениях $h\nu$ и θ_e . Даже не проводя разложение, в них можно выделить ряд важных особенностей, указывающих на энергетическое положение некоторых компонент (спин-орбитальных дублетов). Спектр, зарегистрированный при $h\nu = 108$ eV и $\theta_e = 0^\circ$, соответствует наибольшей в данном исследовании глубине выхода электронов (кинетическая энергия ~ 3 eV) из кристалла. Очевидно, что основной вклад в него дают атомы объемной решетки. Это позволяет установить примерное положение дублета *B*, обусловленного эмиссией из объема кремния. Энергии его $2p_{1/2}$ - и $2p_{3/2}$ -подуровней приблизительно равны 100.37 и 99.77 eV.

По мере увеличения значений $h\nu$ и θ_e глубина выхода уменьшается, а в спектрах появляются новые особенности, которые обусловлены атомами поверхностной реконструкции c(4 × 2) и соответствующими спин-орбитальными дублетами, смещенными в область больших или меньших энергий относительно *B*. Так, наиболее очевидной поверхностной компонентой является дублет S_u . Положение его $2p_{3/2}$ -подуровня соответствует максимуму с энергией 99.28 eV. Этот пик практически не перекрывается с остальной частью спектра.

Двумя другими поверхностными компонентами, которые можно на качественном уровне наблюдать в спектрах на рис. 3, являются дублеты S' и *C*. Первый из них наиболее отчетливо виден при энергиях квантов $h\nu = 114$ и 120 eV. Он смещен в сторону больших

энергий относительно *B* примерно на 0.2–0.25 eV. Присутствие же дублета *C* можно обнаружить по появлению небольшого плеча в области энергии 99.56 eV в спектре при $h\nu = 120$ eV и $\theta_e = 60^\circ$. Его сдвиг составляет примерно 0.2 eV.

Для получения более подробной информации 2p-спектры количественно разлагались на компоненты с помощью метода наименьших квадратов. Фон вычитался с помощью метода Ширли (Shirley) [15]. В разложении использовалась линейная комбинация модельных функций Фойгта (Voigt), представляющих собой свертку лоренцевской и гауссовой форм линии. Некоторые подгоночные параметры — лоренцевская ширина ω_L , спин-орбитальное расщепление (0.610 eV) и отношение интенсивностей $2p_{1/2}$ - и $2p_{3/2}$ -подуровней (1:2) — были одинаковыми для всех компонент и не менялись в процессе подгонки. Как известно, величина ω_L (естественное уширение линии) обусловлена конечностью времени жизни атома в фотовозбужденном состоянии с дыркой на ОУ [16]. Она зависит от окружения атомов в кремниевом кристалле

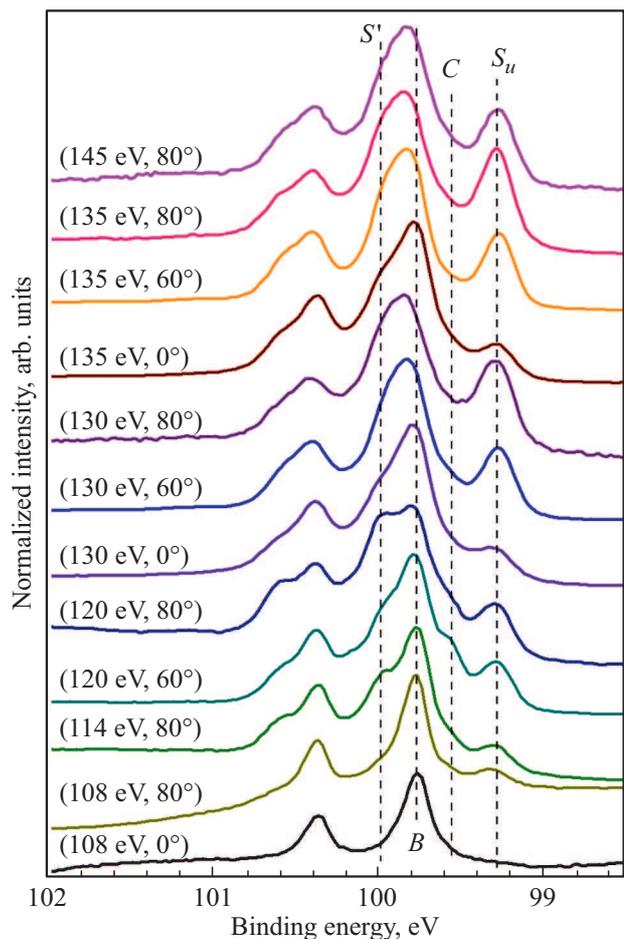


Рис. 3. Нормированные спектры поверхности Si(100)c(4 × 2) при разных экспериментальных условиях ($h\nu$, θ_e). Энергия связи отсчитывается от уровня Ферми. Пунктирными линиями показано положение различных компонент.

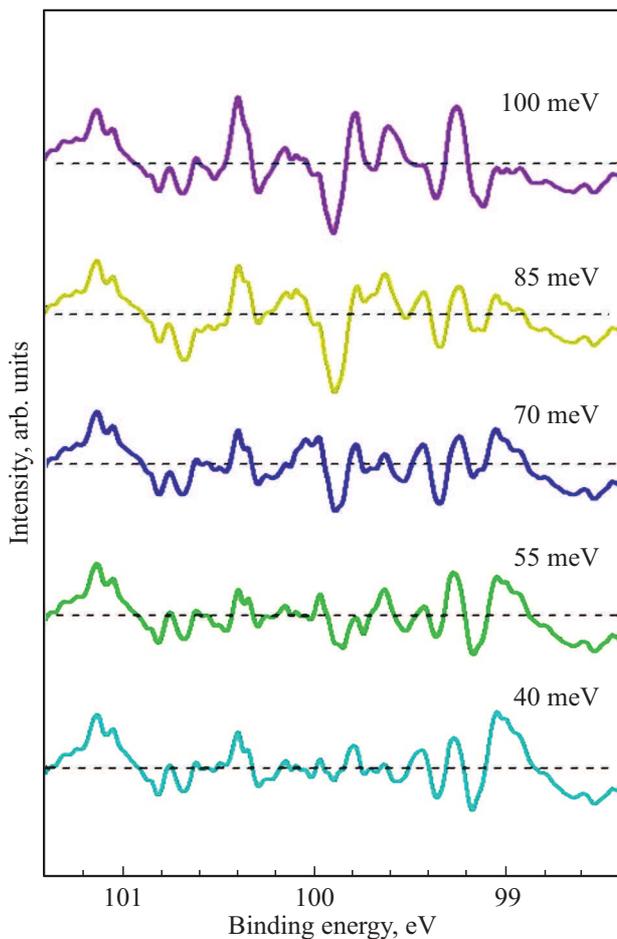


Рис. 4. Разностные спектры для различных значений параметра ω_L . Разложения проводились для $2p$ -линии при $h\nu = 135$ eV и $\theta_e = 80^\circ$. Пунктирными линиями отмечен уровень, где остаток равен нулю.

и должна быть одинаковой для всех компонент в разложении. Однако, в литературе, как уже указывалось в разделе 1, нет консенсуса о том, какое ее значение является оптимальным для $2p$ -спектров Si(100). В настоящей работе авторы постарались разрешить эту проблему. На рис. 4 показано, как лоренциан влияет на качество воспроизведения $2p$ -спектра. На нем для разных значений ω_L представлены разностные спектры, полученные путем вычитания результата подгонки из экспериментальных данных. Видно, что при малых значениях ω_L (40–55 meV) плохо воспроизводится низкоэнергетическая часть спектра вблизи энергии 99 eV. При увеличении значения ω_L качество подгонки в этой области энергий улучшается. Но в то же время ухудшается точность воспроизведения спектра при энергиях 99.3–100.6 eV. Особенно большой остаток в этой области наблюдается при $\omega_L = 85$ –100 meV. Из этих результатов можно заключить, что оптимальным значением лоренцевской ширины для $2p$ -спектров поверхности Si(100) является $\omega_L = 70$ meV. Это

значение и было использовано в описанном далее разложении.

Другие подгоночные параметры были варьируемыми. В их число входят количество компонент, их гауссова ширина (ω_G), интенсивность и положение на шкале энергии. Величина ω_G обусловлена как полным энергетическим разрешением (инструментальное разрешение плюс тепловое уширение линий), так и степенью локального разупорядочения кристаллической структуры образца. Так как локальная неомогенность узлов кристаллической решетки может заметно отличаться для разных слоев атомов, гауссиана наряду с поверхностными сдвигами, содержит важную информацию об атомном строении поверхности.

Результаты разложения представлены на рис. 5. На нем круглыми символами показаны данные эксперимента, а сплошными линиями — результаты подгонки. Спектры состоят из объемной компоненты B и пяти поверхностных компонент S_u , S_d , S' , C и D . Их поверхностные сдвиги и гауссова ширина представлены в таблице 1. Использование в разложении четырех поверхностных компонент (без D) в принципе позволяло удовлетворительно воспроизвести отдельные спектры на рис. 5. Но в этом случае поверхностные сдвиги зависели бы от экспериментальных условий ($h\nu$ и θ_e), что не имеет физического смысла. Кроме того, такая схема разложения не позволяла достаточно точно воспроизвести высокоэнергетическую часть некоторых спектров. Следовательно, она не может быть принята для спектров на рис. 5. С другой стороны, введение дополнительной, шестой, поверхностной компоненты не давало практически никаких улучшений качества подгонки. На этом основании схема разложения с шестью поверхностными компонентами также была отвергнута. Таким образом, полученные в настоящей работе результаты не подтверждают наличие шестой поверхностной компоненты со сдвигом 1.4 eV, наблюдавшейся для Si(100) в работах [12–14]. По-видимому, эта компонента была обусловлена особенностями эксперимента в указанных исследованиях.

Анализ результатов на рис. 5 позволяет сделать ряд выводов, касающихся свойств $2p$ -линии и природы ее компонент. Из него следует, что при изменении глубины выхода вклад разных дублетов в полную интенсивность спектров может варьироваться в очень широких пределах. На рис. 6, *a* представлены такие зависимости для случая $\theta_e = 80^\circ$. На нем приведены в процентном отношении вклады компонент B , S_u , S_d , S' , C и D в полную интенсивность спектров при различных энергиях фотонов $h\nu$. Сверху на графике по оси абсцисс также отложены значения кинетической энергии электронов. Для еще большей наглядности эти кривые могут быть перестроены в зависимости нормированной интенсивности S_u , S_d , S' , C и D (нормировка осуществлялась на величину компоненты B) от энергии фотонов (рис. 6, *b*). Как видно из обоих рисунков, вклад эмиссии из атомов объемной

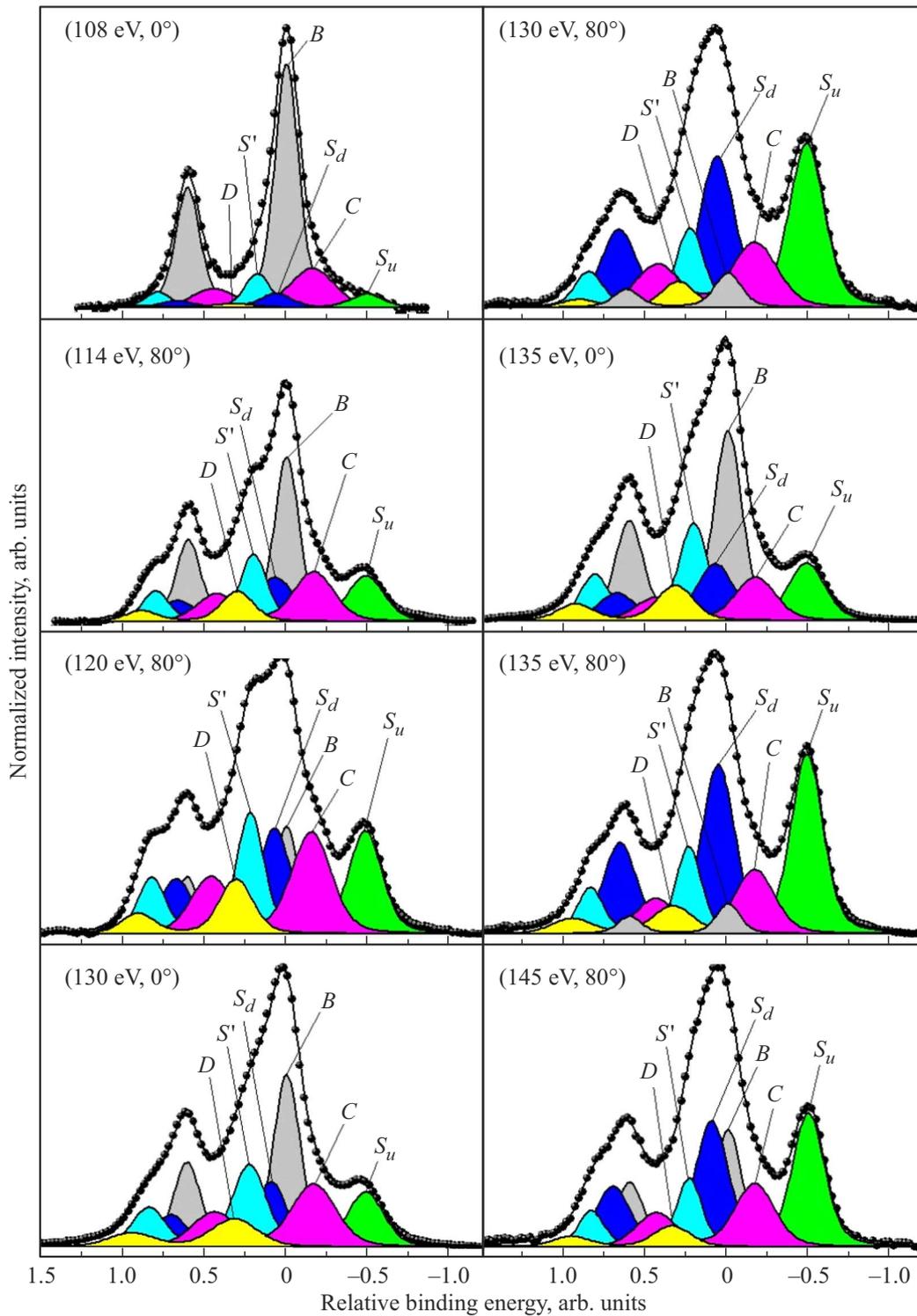


Рис. 5. Разложение нормированных Si 2p-спектров, полученных при разных экспериментальных условиях ($h\nu$, θ_e), на отдельные спин-орбитальные дублеты. Энергия связи по оси абсцисс отсчитывается от положения Si 2p_{3/2}-подуровня объемной компоненты (B). Другие подробности в тексте.

решетки в спектры минимален при $h\nu \cong 135$ eV (кинетическая энергия электронов ≈ 30 eV). При этой энергии фотонов спектры наиболее чувствительны к поверхности. При увеличении или уменьшении значения $h\nu$

чувствительность спектров к поверхности снижается, а их чувствительность к объему возрастает.

Для компонент S_u и S_d наблюдается обратная, почти зеркальная, ситуация. При $h\nu \cong 135$ eV их вклад в ФЭ-

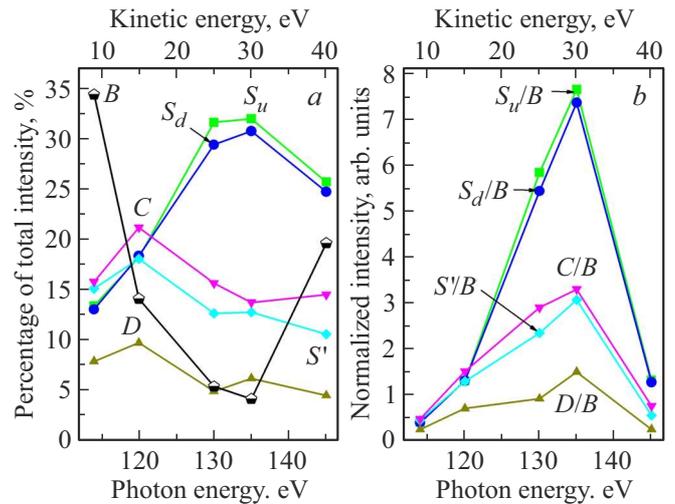
Таблица 1. Поверхностные сдвиги и гауссова ширина для различных компонент в $2p$ -спектрах поверхности $\text{Si}(100)_c(4 \times 2)$.

Компонента	Поверхностный сдвиг (eV)	Гауссова ширина (eV)
B	—	0.143 ± 0.014
S_u	-0.483 ± 0.004	0.208 ± 0.014
S_d	0.078 ± 0.015	0.204 ± 0.016
S'	0.225 ± 0.014	0.159 ± 0.021
C	-0.163 ± 0.005	0.256 ± 0.016
D	0.320 ± 0.016	0.233 ± 0.042

линию максимален. При увеличении или уменьшении энергии фотонов интенсивности S_u и S_d резко снижаются, причем по площади эти дублеты при всех экспериментальных условиях остаются примерно равными друг другу. Такое поведение компонент S_u и S_d объясняется тем, что они обусловлены эмиссией из атомов верхнего слоя ($1u$ и $1d$ на рис. 1 соответственно). Этот слой образован асимметричными, наклоненными к плоскости поверхности, димерами $\text{Si}(1d)\text{-Si}(1u)$, а заряды, локализованные на их нижнем и верхнем концах, неодинаковы [17,18]. Перетекание электронной плотности в таком димере происходит от атома $1d$ к $1u$. Это и обуславливает энергетическое расщепление $2p$ -уровня атомов Si верхнего слоя на два дублета в ФЭ-линии и определяет величины поверхностных сдвигов компонент S_d и S_u .

Также необходимо отметить, что сдвиги рассмотренных компонент хорошо согласуются с результатами *ab initio* расчетов, проводимых на основе теории функционала плотности [11,14,19,20]. Теоретическая величина сдвига для атома $1u$ в разных работах варьируется от -0.35 до -0.24 eV в модели начального состояния и от -0.54 до -0.48 eV в модели конечного состояния. Таким образом, экспериментальное значение этого сдвига (-0.483 eV, табл. 1) может быть очень точно предсказано в модели, в которой предполагается полная экранировка дырки на $2p$ -уровне.

Несколько иная картина обнаружена для атома $1d$. Для него экспериментальное значение сдвига равно 0.078 eV (табл. 1). Теория же предсказывает значения в интервале $0.41 - 0.57$ eV для модели начального состояния и в интервале от -0.15 до 0.10 eV для модели конечного состояния. Это означает, что экранировка дырки на $2p$ -уровне атома $1d$ в процессе испускания электрона в вакуум может быть неполной, или, иными словами, экранировка для атомов $1d$ происходит более медленно, чем для атомов $1u$. Можно предположить, что указанное различие связано с особенностями распределения локальной электронной плотности на атомах наклонных димеров, о чем уже сообщалось выше. Здесь

**Рис. 6.** *a* — Вклад компонент (в процентном отношении) в полную интенсивность $2p$ -спектров как функция энергии фотонов. *b* — Нормированная интенсивность компонент S_u , S_d , S' , C и D в зависимости от энергии фотонов. Нормировка проводилась на величину объемной компоненты. Угол вылета $\theta_e = 80^\circ$.

уместно отметить, что эти результаты дают наглядный пример глубокой взаимосвязи геометрической структуры и электронных свойств твердого тела: димеризация в верхнем атомном слое кремния на рис. 1 сопровождается не только энергетическим расщеплением основного $2p$ -уровня атомов $1u$ и $1d$, но и появлением различий в экранировке дырок на их внутренних оболочках.

Атомная природа компонент S' , C и D менее очевидна. Из рис. 6 следует, что их интенсивность гораздо менее резко зависит от глубины выхода, а наибольший вклад в ФЭ-линию компоненты S' , C и D дают при $h\nu = 120$ eV (рис. 6, *a*). Таким образом, их нельзя приписать ни объемной решетке кремния, ни атомам в его верхнем слое. Можно предполагать, что эти компоненты обусловлены эмиссией из атомов, которые находятся под слоем, образованным атомами $1u$ и $1d$ на рис. 1. Количество таких атомов можно оценить из отношения интенсивностей поверхностных компонент в спектре при $h\nu = 108$ eV и $\theta_e = 0^\circ$ на рис. 5. При данных условиях глубина выхода электронов столь высока, что эффектами затухания сигнала от разных поверхностных слоев на рис. 1 можно пренебречь. В этом спектре отношение площадей дублетов ($S_u + S_d$), S' , C и D равно $1 : 1 : 1.75 : 0.18$. Это означает, что компоненты S' , C и D скорее всего обусловлены атомами второго, третьего и четвертого слоев. На рис. 1 в этих слоях имеется шесть разных атомов: 2 , 3 , $3'$, 4 , $4'u$ и $4'd$. Окружение некоторых из них отличается весьма незначительно. Поэтому поверхностные сдвиги для таких атомов могут быть довольно близки друг к другу и не могут быть полностью разрешены в ФЭ-спектрах при 100 K и текущем энергетическом разрешении. *Ab initio*

Таблица 2. Длина свободного пробега λ и глубина выхода $\lambda \cos \theta_e$, выраженные в Å и монослоях [ML] атомов кремния, при различных значениях $h\nu$ и θ_e

θ_e	$h\nu = 130 \text{ eV}$		$h\nu = 135 \text{ eV}$	
	λ (Å) [ML]	$\lambda \cos \theta_e$ (Å) [ML]	λ (Å) [ML]	$\lambda \cos \theta_e$ (Å) [ML]
0°	3.2 [2.4]	3.2 [2.4]	2.5 [1.8]	2.5 [1.8]
60°	3.2 [2.4]	1.6 [1.2]	2.6 [1.9]	1.3 [1.0]

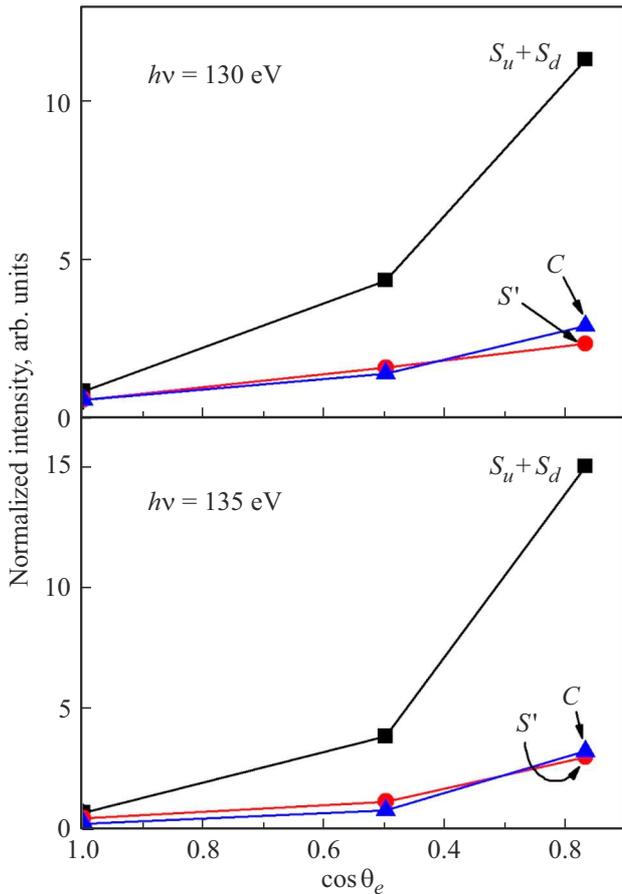


Рис. 7. Зависимости нормированных интенсивностей ($S_u + S_d$), S' и C от косинуса угла выхода θ_e . Энергия фотонов $h\nu$: a — 130 eV, b — 135 eV.

расчеты предсказывают, что атомы второго, третьего и четвертого слоев на рис. 1 дают поверхностные сдвиги в интервале от -0.19 до 0.32 eV в модели начального состояния [14,19,20] и интервале от -0.26 до 0.27 eV в модели конечного состояния [11,14,19,20]. Эти сдвиги находится в разумном согласии с экспериментальными значениями для S' и C в табл. 1.

Из всего сказанного выше логично предположить, что компонента S' происходит от атомов 2 на рис. 1, а компонента C обусловлена атомами третьего и четвертого слоев в этой реконструкции. Такая интерпретация, во-первых, хорошо согласуется с отношением интен-

сивностей этих компонент. Во-вторых, она находится в согласии со значениями их гауссова уширения в табл. 1 (0.159 и 0.256 eV соответственно). Что же касается D , то интенсивность этой компоненты слишком мала, чтобы ее можно было однозначно связать с каким-либо типом атомов в регулярной структуре на рис. 1. Авторы приписывают эту компоненту дефектам на поверхности исследованного кристалла. Как известно, такие дефекты имеют естественное происхождение и всегда образуются на гладких поверхностях (100) кремния для уменьшения поверхностного натяжения [21,22].

Наконец, результаты, полученные в настоящей работе, позволяют оценить длину свободного пробега λ электронов в кремнии. Такие оценки были сделаны для кинетической энергии электронов 25 и 30 eV ($h\nu = 130$ и 135 eV). На рис. 7, a и $7, b$ для приведенных выше энергий фотонов показаны зависимости нормированных интенсивностей ($S_u + S_d$), S' и C от косинуса угла выхода. Предполагалось, что суммарная интенсивность компонент S_u и S_d равна величине ФЭ-сигнала от первого монослоя атомов кремния, а суммарная интенсивность компонент S' и C соответствует величине сигнала от второго, третьего и четвертого монослоев. В качестве толщины одного монослоя атомов кремния было взято значение 1.358 Å , равное высоте моноатомной ступени

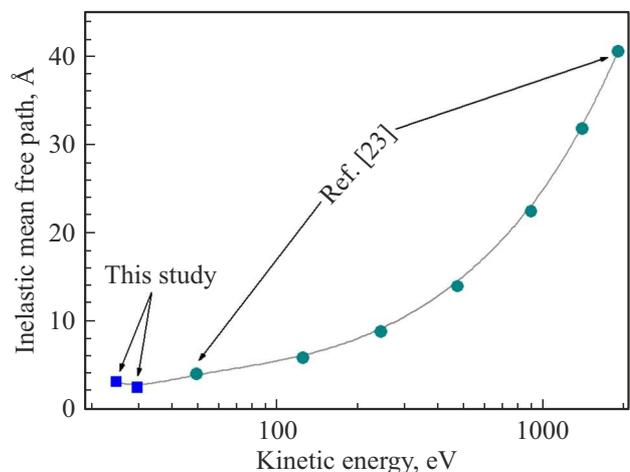


Рис. 8. Зависимость длины свободного пробега электрона от кинетической энергии в кремнии. Данные получены в настоящей работе (квадратные символы) и работе [23] (круглые символы).

на поверхности Si(100). Полученные результаты оценки величины λ и глубины выхода $\lambda \cos \theta_e$ представлены в табл. 2 для случаев $h\nu = 130$ и 135 eV и $\theta_e = 0^\circ$ и 60° . Из нее видно, что при кинетической энергии 30 eV ($h\nu = 135$ eV) длина свободного пробега очень мала и составляет 2.55 \AA (~ 1.9 монослоя атомов кремния). При уменьшении кинетической энергии до 25 eV длина свободного пробега повышается до 3.2 \AA (2.4 монослоя). На рис. 8 полученные данные приведены вместе с результатами из работы [23]. Видно, что они хорошо согласуются и дополняют друг друга. Полученные значения могут быть использованы для анализа формы линии в фотоэлектронной спектроскопии поверхностей кремния.

4. Заключение

Исследована тонкая структура $2p$ -спектров высокого разрешения для поверхности Si(100) при 100 K в широкой области энергий фотонов и углов вылета. Установлено, что спектры включают пять поверхностных компонент, из которых четыре обусловлены эмиссией из атомов первого (энергетические сдвиги -0.483 и 0.078 eV), второго (0.225 eV), третьего и четвертого (-0.163 eV) слоев реконструкции $c(4 \times 2)$. Пятая поверхностная компонента (0.32 eV) связана с образующимися на поверхности дефектами. Получено оптимальное значение лоренцевской ширины ($\omega_L = 70$ meV) для разложения этих спектров. Показано, что они имеют наибольшую чувствительность к поверхности при энергии фотонов 135 eV (кинетической энергии электронов ~ 30 eV). На основе анализа интенсивностей поверхностных компонент проведено определение величины длины свободного пробега электрона в кремниевом кристалле как функции энергии фотонов. При $h\nu = 135$ eV длина свободного пробега составляет 2.55 \AA , а при $h\nu = 130$ eV — 3.2 \AA . Эти значения находятся в хорошем согласии с опубликованными данными.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] C.S. Fadley. Surf. Interface Anal. **40**, 1579 (2008).
- [2] D. Wolverson, B. Smith, E. Como, C. Sayers, G. Wan, L. Pasquali, M. Cattelan. J. Phys. Chem. C **126**, 9135 (2022).
- [3] Y. Kayser, C. Milne, P. Juranic, L. Sala, J. Czaplá-Masztafiak, R. Follath, M. Kavcic, G. Knopp, J. Rehanek, W. Blachucki, M.G. Delcey, M. Lundberg, K. Tyrála, D. Zhu, R. Alonso-Mori, R. Abela, J. Sa, J. Szelachetko. Nature Commun. **10**, 4761 (2019).
- [4] М.В. Гомоюнова, И.И. Пронин. ФТТ **74**, 10, 1 (2004).
- [5] F.J. Himpsel, P. Heimann, T.-C. Chiang, D.E. Eastman. Phys. Rev. Lett. **45**, 1112 (1980).
- [6] G.K. Wertheim, D.M. Riffe, J.E. Rowe, P.H. Citrin. Phys. Rev. Lett. **67**, 120 (1991).
- [7] F.J. Himpsel, F.R. McFeely, A. Taleb-Ibrahimi, J.A. Yarmoff, G. Hollinger. Phys. Rev. B **38**, 6084 (1988).
- [8] D.H. Rich, T. Miller, T.-C. Chiang. Phys. Rev. B **37**, 3124 (1988).
- [9] D.-S. Lin, T. Miller, T.-C. Chiang. Phys. Rev. Lett. **67**, 2187 (1991).
- [10] E. Landemark, C.J. Karlsson, Y.-C. Chao, R.I.G. Uhrberg. Phys. Rev. Lett. **69**, 1588 (1992).
- [11] O.V. Yazyev, A. Pasquarello. Phys. Rev. Lett. **96**, 157601 (2006).
- [12] T.-W. Pi, C.-P. Cheng, I.-H. Hong. Surf. Sci. **418**, 113 (1998).
- [13] H. Koh, J.W. Kim, W.H. Choi, H.W. Yeom. Phys. Rev. B **67**, 073306 (2003).
- [14] P.E.J. Eriksson, R.I.G. Uhrberg. Phys. Rev. B **81**, 125443 (2010).
- [15] D.A. Shirley. Phys. Rev. B **5**, 4709 (1972).
- [16] G.H. Major, N. Farley, P.M.A. Sherwood, M.R. Linford, J. Terry, V. Fernandez, K. Artyushkova. J. Vac. Sci. Technol. A **38**, 061203 (2020).
- [17] R.J. Hamers, R.M. Tromp, J.E. Demuth. Phys. Rev. B **34**, 5343 (1986).
- [18] R.A. Wolkov. Phys. Rev. Lett. **68**, 2636 (1992).
- [19] E. Pehlke, M. Scheffler. Phys. Rev. Lett. **71**, 2338 (1993).
- [20] M.P.J. Punkkinen, K. Kokko, L. Vitos, P. Laukkanen, E. Airiskallio, M. Ropo, M. Ahola-Tuomi, M. Kuzmin, I.J. Vayrynen, B. Johansson. Phys. Rev. B **77**, 245302 (2008).
- [21] R.M. Tromp, R.J. Hamers, J.E. Demuth. Phys. Rev. Lett. **55**, 1303 (1985).
- [22] B.S. Swartzentruber, Y.W. Mo, M.B. Webb, M.G. Lagally. J. Vac. Sci. Technol. A **7**, 2901 (1989).
- [23] C.J. Powell, A. Jablonski. NIST Electron Inelastic-Mean-Free-Path Database. Version 1.2, SRD 71. National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD (2010).

Редактор Ю.Э. Кумаев