

УДК 548.732

©1994

ПОЛЯРИЗАЦИОННЫЙ ЭФФЕКТ И ГЛУБИНА ВЫХОДА ФОТОЭЛЕКТРОНОВ В КРИСТАЛЛАХ

Э.Х.Мухамеджанов

Рассмотрено влияние поляризации рентгеновских лучей на глубину выхода фотоэлектронов в кристаллах. В качестве детектора электронов использовался газопроточный пропорциональный счетчик. Параллельное и перпендикулярное положение вектора поляризации рентгеновских лучей относительно поверхности образца были реализованы с помощью различных геометрий дифракции — стандартной брэгговской и Брэгг–Лауэ. Глубины выхода фотоэлектронов определялись с помощью техники стоячих рентгеновских волн на модельных объектах — кристаллах с аморфными пленками различной толщины. Для кристаллов кремния восстановлены функции вероятности выхода фотоэлектронов при различной поляризации рентгеновских лучей.

Исследованию физических закономерностей выхода рентгеновских фотоэлектронов из кристалла в последние годы было посвящено значительное количество работ. Интерес к этому вопросу обусловлен в первую очередь тем, что фотоэлектроны наряду с другими вторичными излучениями — флуоресценцией, оже-электронами, выходящими из кристалла в условиях дифракции рентгеновских лучей, — несут информацию о его структуре. Осознание этой особенности вторично-эмиссионных явлений, сопровождающих дифракционный процесс, привело в свое время к созданию эффективного метода исследования тонких приповерхностных слоев кристаллов — метода стоячих рентгеновских волн (СРВ) [1–3].

Отличительная особенность фотоэлектронной эмиссии — малая глубина выхода электронов (доли микрона и меньше) обусловила рамки применения этого вторичного излучения в методе СРВ. Наиболее эффективно фотоэлектроны использовались для анализа объектов, имеющих протяженные (от сотен ангстрем до долей микрона) приповерхностные области сискаженной кристаллической структурой, — кристаллов с поверхностными аморфными пленками [4], эпитаксиальными структурами [5], кристаллов подвергнутых ионной имплантации [6], и др. Другая особенность фотоэлектронной эмиссии — зависимость глубины выхода фотоэлектронов от их энергии — позволила трансформировать энергетический анализ в послойный, т.е. непосредственно по кривым выхода электронов различных энергий восстанавливать профили деформации и разупорядочения (аморфизацию) кристаллической решетки по глубине [6]. Использование энергоанализаторов электронов с высоким разрешением позволяет существенно повы-

сить пространственное разрешение метода СРВ и исследовать нарушенные слои толщиной в десятки ангстрем [7].

Естественно, что для получения количественной информации о структурных искажениях необходимо знать толщины в кристалле, с которых выходят электроны различных энергий. К настоящему времени многое в этом направлении уже сделано. Разработан ряд экспериментальных методов определения функций вероятности выхода электронов $P(z)$ с различных глубин z в кристалле [8–10] и получены функции $P(z)$ для некоторых полупроводниковых кристаллов [10, 11]. Показано, что при определенных условиях в поведении функций $P(z)$ могут возникать резкие аномалии, связанные с процессами непрямого возбуждения, когда регистрируемые электроны рожденны не в результате поглощения атомами квантов из СРВ, а вследствие возбуждения атома другим вторичным излучением, например фото- и оже-электронами [12] или флуоресцентным излучением [13].

Недавно в работе [14] была обнаружена резкая трансформация энергетических спектров фотоэлектронов в зависимости от поляризации рентгеновского излучения. В настоящей работе рассматривается вопрос о влиянии поляризации рентгеновских лучей на глубину формирования фотоэффекта в кристаллах.

1. Поляризационный эффект

Как известно, процесс фотоэффекта в рентгеновском диапазоне энергий носит преимущественно дипольный характер, что приводит к угловому распределению выбитых фотоэлектронов следующего вида [15]:

$$S(\mathbf{k}, \sigma) = A(\mathbf{k}\sigma)^2 + B, \quad (1)$$

где \mathbf{k} — направление вылета фотоэлектронов, σ — вектор поляризации рентгеновского излучения; A и B — коэффициенты, зависящие от исходного состояния электронов в атоме и энергии рентгеновского излучения.

Угловое распределение (1) обладает максимальной анизотропией в случае возбуждения сферически-симметричного s -состояния атома, например k -обложки кремния. При этом $B = 0$ и в направлении, перпендикулярном вектору поляризации σ , генерация фотоэлектронов не происходит (рис. 1). Для состояний с отличным от нуля орбитальным моментом, например при возбуждении L -обложки германия (p -состояние в атоме), коэффициент $B \neq 0$ и анизотропия распределения (1) значительно ослабляется. В процессе торможения фотоэлектронов в кристалле происходит изотропизация их углового распределения. Характерным параметром этого процесса является транспортная длина l_{tr} — путь, на котором фотоэлектрон полностью «забывает» исходное направление движения [15]

$$\frac{1}{l_{tr}} = \frac{\pi Z^2 e^4 n_0}{2E^2} \ln \frac{E}{I_{ef}}, \quad (2)$$

где E — энергия электрона, I_{ef} — эффективный атомный потенциал, n_0 — плотность атомов в кристалле, Z — атомный номер. По-

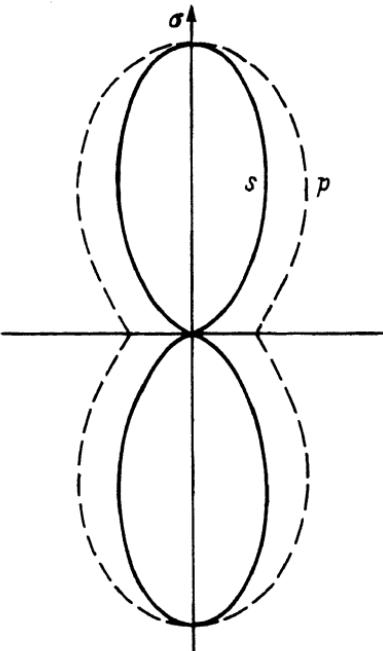


Рис. 1. Угловое распределение s - и p -фотоэлектронов, генерируемых под действием поляризованного рентгеновского излучения.

скольку движение электронов в кристалле носит диффузионный характер, реальный размер, на котором происходит изотропизация углового распределения, оказывается меньше и составляет величину порядка $l_{is} = l_{tr}/\sqrt{\nu}$, где ν — число столкновений на транспортной длине (для кристалла кремния и CuK_α -излучения $\nu \approx 15$ [14]).

Потерю энергии фотоэлектроном на транспортной длине можно приближенно оценить по простой формуле

$$\Delta E_{tr} \approx \frac{4}{Z} E. \quad (3)$$

Для кремния и CuK_α -излучения $\Delta E_{tr} \sim 2$ keV, т.е. фотоэлектроны, потерявшие в столкновениях энергию $\Delta E > 2$ keV, полностью или частично утратили первоначальное направление движения. Иными словами, в достаточно мягкой области форм спектра не зависит от направления вектора поляризации падающего рентгеновского излучения, а максимальный поляризационный эффект наблюдается для фотоэлектронов с минимальными потерями энергии. Как следует из формулы (1), для наблюдения максимального поляризационного эффекта необходимо регистрировать фотоэлектроны, вылетающие из кристалла в двух различных направлениях — параллельном или перпендикулярном вектору поляризации σ — или в направлениях, близких к ним. Кроме того, энергетическое разрешение детектора должно быть существенно меньше ΔE_{tr} .

В настоящей работе детектором фотоэлектронов служил газопроточенный пропорциональный счетчик специальной конструкции [16]. Энергетическое разрешение счетчика 18% (при энергии электронов 8 keV). Выбор пропорционального счетчика в данном эксперименте не

случаен. В силу своей простоты, компактности и высокой ($\sim 100\%$) эффективности регистрации электронов он активно применяется в методе СРВ для послойного исследования структуры приповерхностных слоев кристаллов [6], и именно с его помощью были определены для ряда кристаллов функции вероятности выхода фотоэлектронов с различных глубин, вид которых зависит от параметров конкретного детектора. В пропорциональном счетчике регистрация фотоэлектронов осуществляется практически изотропно, т.е. вне зависимости от угла вылета из образца. В этом случае трудно ожидать ярко выраженного поляризационного эффекта, так как анизотропия распределения (1) сильно ослабляется в результате усреднения по углам вылета. Однако целью настоящего исследования являлось не наблюдение поляризационного эффекта, имеющего тривиальную природу, а связь между поляризационным эффектом и глубинами формирования фотоэффекта в кристаллах.

Источником $\text{Cu}K_{\alpha}$ -излучения служила рентгеновская трубка мощностью 2 kW. В качестве поляризатора использовался совершенный кристалл кремния с (422)-отражением, для которого $2\Theta_B \approx 90^\circ$ (Θ_B — угол Брэгга). При этом отраженный пучок представлял собой практически 100%-ное поляризованное излучение с вертикально ориентированным вектором σ .

Для наблюдения поляризационного эффекта проводились измерения энергетических спектров фотоэмиссии при двух различных положениях, когда вектор поляризации рентгеновского излучения параллелен и перпендикулярен поверхности образца. Изменение геометрии эксперимента осуществлялось поворотом пропорционального счетчи-

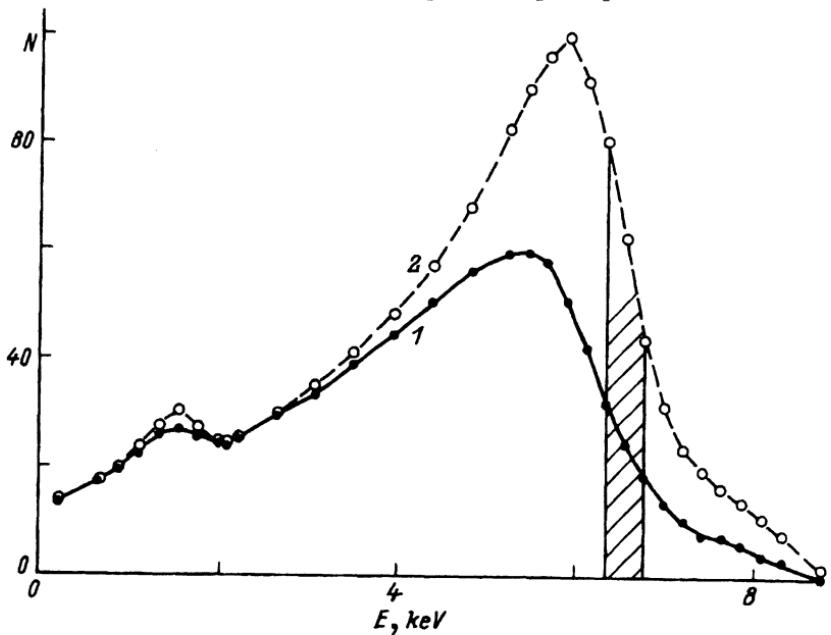


Рис. 2. Энергетические спектры фотоэлектронов из кристалла кремния, полученные при различных положениях вектора поляризации рентгеновских лучей σ (отмечена область с максимальным поляризационным эффектом).

1 — $\sigma \perp n$, 2 — $\sigma \parallel n$.

ка с помещенным внутри кристаллом на 90° . С помощью коллимационных щелей обеспечивалась идентичность засветки поверхности образца в обоих случаях. Угол падения рентгеновского излучения составлял 1.5° .

На рис. 2 представлены энергетические спектры фотоэлектронов, полученные на кристалле кремния. В мягкой области при энергии ~ 2 keV спектры приравнивались, чтобы исключить погрешности, связанные с возможными различиями в геометрии обоих измерений. В этой части спектра находятся k -фотоэлектроны, потерявшие в кристалле значительную часть своей энергии (> 4 keV) и претерпевшие, согласно (3), полную изотропизацию направления своего движения. Из рис. 2 видно, что даже после интегрирования по углам вылета из кристалла, происходящего в пропорциональном счетчике, поляризационный эффект для k -фотоэлектронов в кремнии ($E_0 = 6.2$ keV) остается значительным. Для электронов с минимальными потерями энергии интенсивность спектра при генерации преимущественно в направлении, перпендикулярном поверхности кристалла ($\sigma \parallel n$, где n — нормаль к поверхности), существенно выше, чем в случае генерации в параллельном направлении ($\sigma \perp n$). Из-за относительного уменьшения числа «быстрых» электронов пик спектра для случая $\sigma \perp n$ смешен в область меньших энергий. Максимальная величина поляризационного эффекта наблюдается в заштрихованной области на рис. 2, т.е. для фотоэлектронов с минимальными (с учетом энергетического разрешения счетчика) потерями энергии, и составляет $P_{\max} = 2.5$.

На рис. 3 представлены результаты аналогичных измерений на кристалле германия. В этом случае возбуждается p -состояние в атоме, т.е. генерируются L -фотоэлектроны ($E_0 \approx 6.8$ keV), для которых анизотро-

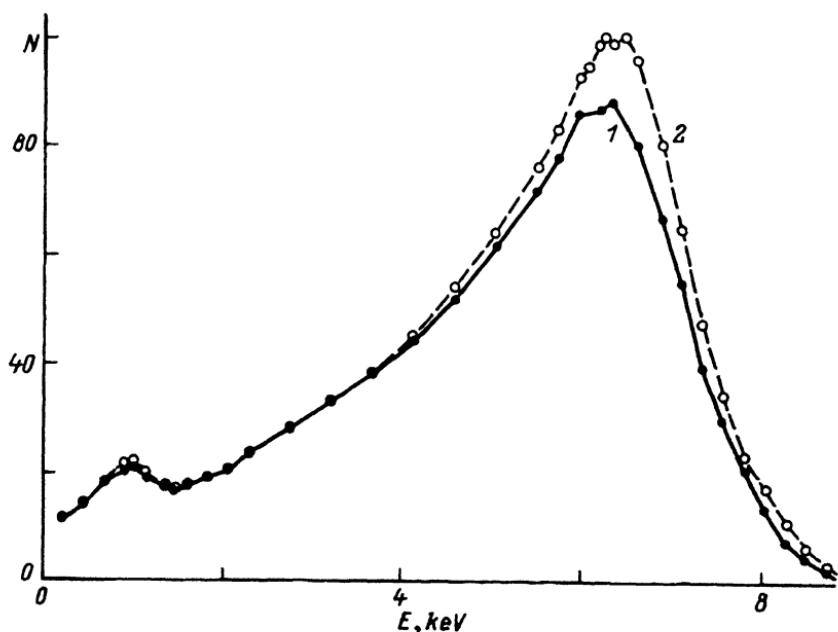


Рис. 3. Энергетические спектры фотоэлектронов из кристалла германия.
1 — $\sigma \perp n$, 2 — $\sigma \parallel n$.

ния углового распределения заметно ослаблена (рис. 1). Как следствие этого, поляризационный эффект проявляется значительно слабее, чем в кремнии, и максимальная величина составляет $P_{\max} = 1.2$.

2. Глубина выхода фотоэлектронов

Для определения глубин выхода фотоэлектронов был проведен специальный дифракционный эксперимент по измерению угловых зависимостей фотоэмиссии с использованием модельных объектов — кристаллов с аморфными пленками известной толщины на поверхности. Такая методика применялась ранее для оценки глубины формирования фотоэффекта в кристаллах в методе СРВ [8]. Поясним выбор объектов такого рода. В случае дифракции на совершенном кристалле наличие в приповерхностном слое жестких фазовых соотношений для атомных плоскостей в поле СРВ определяет дисперсионную форму фотоэмиссионной кривой [3]

$$\kappa_{id}(\Delta\Theta) = \left\{ 1 + |R(\Delta\Theta)|^2 + 2 \operatorname{Re}[e_h R(\Delta\Theta)] \right\} \int_0^\infty dz \exp[-\mu(\Delta\Theta)z] P(z), \quad (4)$$

где $R(\Delta\Theta)$ — амплитуда дифракционного рассеяния; $e_h = \chi_{ih}/\chi_{i0}$ — отношение мнимых частей Фурье-компоненты поляризуемости кристалла; $\mu(\Delta\Theta)$ — интерференционный коэффициент затухания; $P(z)$ — функция вероятности выхода фотоэлектронов с глубины z ; $\Delta\Theta = \Theta - \Theta_B$ — отклонение от точного угла Брэгга Θ_B .

Интеграл в (4) учитывает поглощение рентгеновских лучей на глубине выхода фотоэлектронов L_e . Если на поверхности кристалла имеется полностью разупорядоченный (аморфный) слой, то структура поля, сформированного в подложке, сохраняется и в нарушенном слое, однако неупорядоченное положение атомов приводит к усреднению фазовых соотношений и, как следствие, к исчезновению интерференционного члена в выражении для фотовыхода. Если толщина аморфной пленки $L_{am} > L_e$, то выход фотоэлектронов пропорционален сумме интенсивностей падающей и дифрагированной волн, т.е. фотоэмиссионная кривая повторяет форму кривой рентгеновского отражения

$$\kappa_{am}(\Delta\Theta) = 1 + P_R(\Delta\Theta), \quad (5)$$

где $P_R = |R(\Delta\Theta)|^2$ — коэффициент отражения.

Если $L_{am} < L_e$, кривая выхода фотоэлектронов представляет собой суперпозицию кривых от «идеального» и «аморфного» образцов. «Вес», с которым эти кривые будут входить в сумму, зависит от соотношения между L_{am} и L_e . Угловую зависимость выхода фотоэлектронов от такого образца можно представить в следующем виде:

$$\kappa(\Delta\Theta) = \kappa_{am}(\Delta\Theta)W_{am} + \kappa_{id}(\Delta\Theta)(1 - W_{am}) - \mu(\Delta\Theta)\kappa_{id}(\Delta\Theta)\langle\hat{z}\rangle, \quad (6)$$

где

$$\langle\hat{z}\rangle = (1/A) \int_{L_{am}}^\infty dz \exp[-\mu_0 z/\gamma_0] z P(z) \quad (7)$$

— средняя глубина выхода фотоэлектронов из идеальной части кристалла,

$$W_{\text{am}} = (1/A) \int_0^{L_{\text{am}}} dz \exp[-\mu_0 z/\gamma_0] P(z) \quad (8)$$

— доля электронов, вышедших из аморфного слоя,

$$A = \int_0^{\infty} dz \exp[-\mu_0 z/\gamma_0] P(z) \quad (9)$$

— нормировочный множитель, μ_0 — коэффициент поглощения рентгеновских лучей, $\gamma = \sin \Phi_0$, Φ_0 — угол падения.

Из выражения (6) видно, что подгонку расчетной кривой под экспериментальные данные можно производить путем вариации двух параметров — W_{am} и $\langle \hat{z} \rangle$. Определив таким образом «вес» аморфной части кристалла W_{am} и зная толщину пленки L_{am} , из (8) можно извлечь информацию о функции $P(z)$.

В качестве образцов были взяты кристаллы кремния с аморфными пленками толщиной $L_{\text{am}} = 0.04$ и $0.12 \mu\text{m}$. Согласно данным по глубинам выхода электронов [10], в первом случае большая доля фотоэлектронов выходит из идеальной части кристалла, а во втором случае — из аморфной. Отражающие плоскости (111) составляли угол $\varphi \approx 3.6^\circ$ с поверхностью образцов. Для того чтобы реализовать две различные ориентации поляризационного вектора σ относительно поверхности образца — параллельную и перпендикулярную, — измерения проводились в двух различных геометриях дифракции — стандартной Брэгговской и Брэгг–Лауэ (рис. 4). В первом случае (рис. 4, a) использовалось симметричное (333)-отражение и вектор σ составлял с поверхностью малый угол φ . Си K_α -излучение рентгеновской трубки коллимировалось с помощью асимметричного (333)-отражения от кристалла кремния (фактор асимметрии $\beta \approx 0.1$), выполнившего роль одновременно монохроматора и поляризатора ($2\Theta_B \approx 90^\circ$).

Во втором случае (рис. 4, b) симметричная Брэгг–Лауэ-дифракция была реализована на плоскостях (224), почти перпендикулярных поверхности образца (угол разориентации $\varphi \approx 3.6^\circ$). Эффективный угол

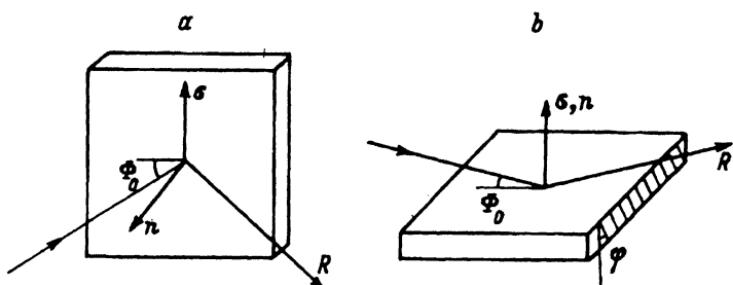


Рис. 4. Схемы дифракции рентгеновских лучей (R — дифрагированный пучок).
a — Брэгг-геометрия, b — Брэгг–Лауэ-геометрия.

Таблица 1

Относительные доли фотоэлектронов, выходящих из аморфной пленки толщиной $L_{\text{ам}}$, при различных направлениях вектора поляризации σ

$L_{\text{ам}}, \mu\text{m}$	$W_{\text{ам}}$	
	Брэгг-геометрия ($\sigma \perp n$)	Брэгг-Лауз-геометрия ($\sigma \parallel n$)
0.04	0.36 ± 0.02	0.3 ± 0.02
0.12	0.75 ± 0.02	0.65 ± 0.02

скоса для выбранных отражающих плоскостей $\psi = 2\varphi \sin \Theta_B \approx 5^\circ$, угол падения рентгеновского пучка в симметричном случае дифракции $\Phi_0 = \psi/2 \approx 2.5^\circ$. В этой схеме вектор поляризации σ составлял с поверхностью угол $\pi/2 - \Phi_0 \approx 87.5^\circ$. Для коллимации и поляризации пучка использовалось асимметричное (224)-отражение от кристалла кремния (фактор асимметрии $\beta \approx 0.1$).

Измерения проводились для фотоэлектронов энергетического интервала, отмеченного на рис. 2, для которого поляризационный эффект имел максимальную величину. Регистрация угловых зависимостей выхода фотоэлектронов осуществлялась с помощью автоматической системы динамического контроля углового положения кристалла [17], которая позволяет накапливать информацию в течение длительного времени путем многократного сканирования образца через отражающее положение и обеспечивает при этом угловую стабильность кристалла не хуже $0.03''$. Время накопления одной кривой составляло примерно 1.5 h.

На рис. 5, a, b представлены угловые зависимости выхода фотоэлектронов, полученные от обоих образцов в двух указанных геометриях дифракции. Видно, что изменение толщины аморфной пленки приводит к значительному изменению формы фотоэмиссионных кривых. Для каждой экспериментальной угловой зависимости проводилась подгонка расчетной кривой в соответствии с формулой (6) и определялся параметр $W_{\text{ам}}$. Результаты обработки приведены в табл. 1. Обращает на себя внимание то, что величина $W_{\text{ам}}$, полученная из эксперимента в Брэгг-геометрии дифракции, больше аналогичного параметра, полученного в Брэгг-Лауз-геометрии, для обоих образцов. Это значит, что в случае, когда $\sigma \perp n$, глубина выхода регистрируемых фотоэлектронов меньше, хотя и незначительно, чем в случае генерации в параллельном направлении ($\sigma \parallel n$). Рассмотрим этот результат подробнее.

Как следует из [10], функцию вероятности выхода фотоэлектронов с минимальными потерями энергии в первом приближении можно описать экспоненциальной функцией

$$P(z) = e^{-Z/L}. \quad (10)$$

Пренебрегая поглощением рентгеновских лучей на глубине выхода фотоэлектронов, из (8) легко находим

$$L = \frac{L_{\text{ам}}}{\ln(1 - W_{\text{ам}})}. \quad (11)$$

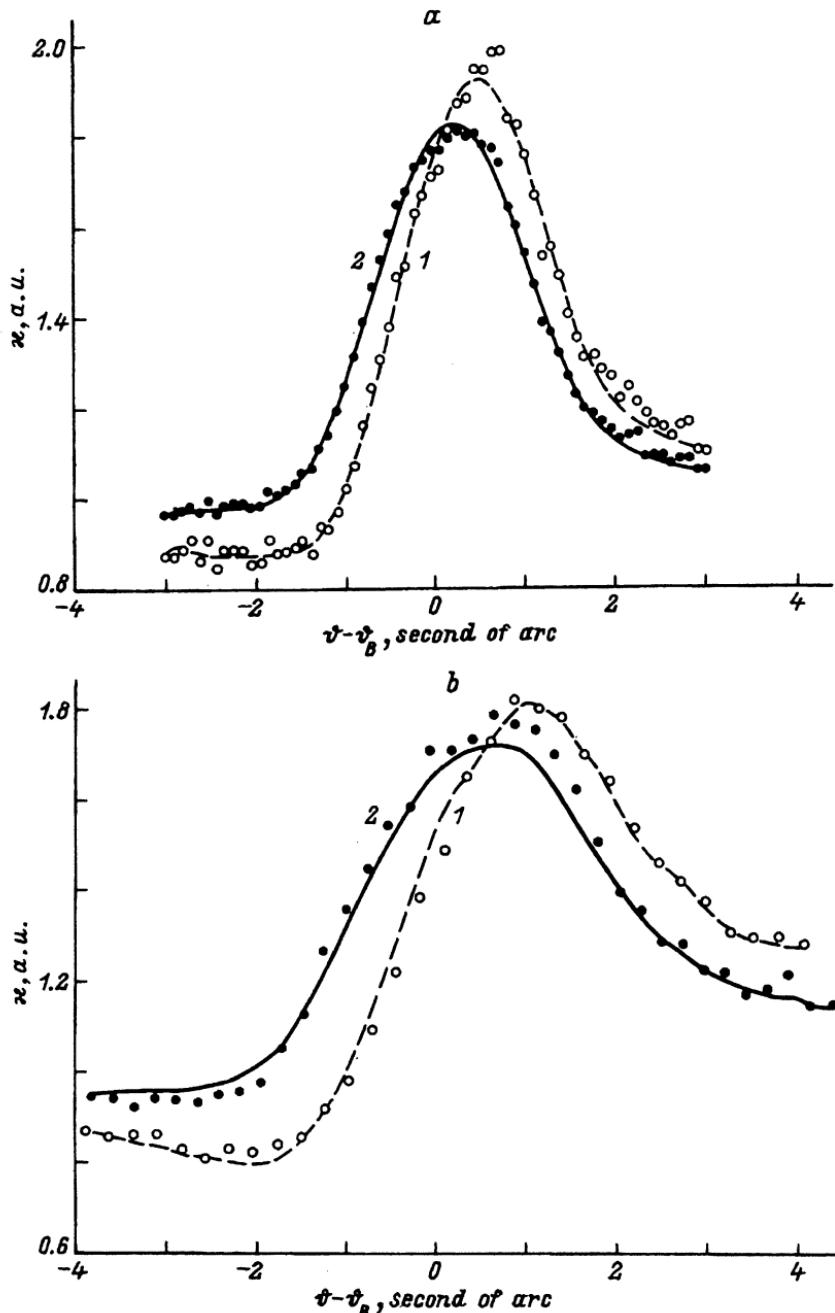


Рис. 5. Угловые зависимости выхода фотоэлектронов с минимальными потерями энергии из кристаллов кремния с аморфными пленками толщиной $L_{am} = 0.04$ (1) и $0.12 \mu m$ (2), полученные в условиях симметричной (333) Брэгг-дифракции (a) и симметричной (224) Брэгг-Лауэ-дифракции (b).

a: штриховая линия — расчет по формуле (6) с $W_{am} = 0.36$, сплошная линия — расчет с $W_{am} = 0.75$; b: штриховая линия — расчет с $W_{am} = 0.3$, сплошная линия — с $W_{am} = 0.65$.

Значения параметра L для двух различных направлений вектора поляризации (в скобках даны значения L в приближении (12))

$L_{am}, \mu m$	$L_{\perp}, \mu m$	$L_{ }, \mu m$
0.04	0.089	0.112
	(0.2)	(0.245)
0.12	0.086	0.114
	(0.24)	(0.294)

Значения L_1 и $L_{||}$, полученные при различных толщинах L_{am} , близки по величине (табл. 2). Для сравнения в табл. 2 в скобках даны значения параметра L , вычисленные согласно (8) в предположении, что $P(z)$ описывается линейной функцией

$$P(z) = 1 - z/L. \quad (12)$$

В этом случае наблюдается заметное различие в величинах L , полученных при разных L_{am} . Это подтверждает предположение о том, что форма функции $P(z)$ значительно ближе к экспоненциальной, чем к линейной.

На рис. 6 представлены функции вероятности выхода фотоэлектронов $P(z)$ в экспоненциальном приближении (10) со средними параметрами L_{\perp} и $L_{||}$, полученными из экспериментальных данных. В случае, когда $\sigma \perp n$, средняя глубина выхода регистрируемых пропорциональным счетчиком фотоэлектронов с минимальными потерями энергии на 20% меньше, чем при ориентации поляризационного вектора перпендикулярно поверхности кристалла ($\sigma \parallel n$). С уменьшением энергии электронов и соответственно величины поляризационного эффекта различия

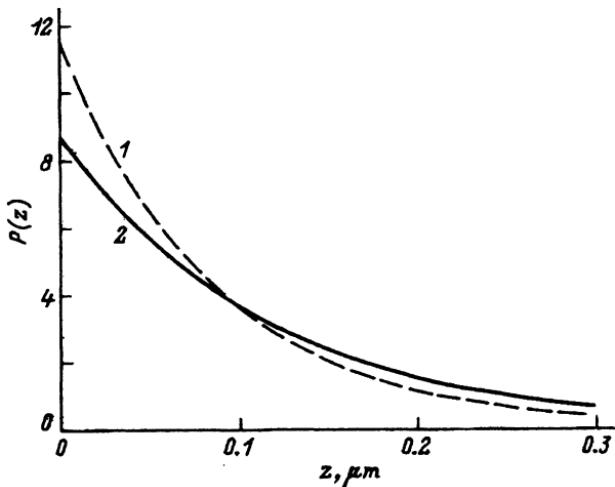


Рис. 6. Функции вероятности выхода фотоэлектронов $P(z)$ при различных положениях вектора поляризации рентгеновских лучей σ .
1 — $\sigma \perp n$, 2 — $\sigma \parallel n$.

чие в глубинах выхода L_{\perp} и L_{\parallel} будет уменьшаться. Полученные данные позволяют вносить соответствующие поправки в глубины выхода электронов и в тех случаях, когда используется частично поляризованное излучение.

В заключение отметим, что при использовании детекторов с высоким энергетическим и пространственным разрешением влияние поляризации рентгеновских лучей на глубину выхода фотоэлектронов возрастает. В этом случае необходимо учитывать поляризационный фактор при получении количественной информации в методе СРВ.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (код проекта 93-02-16236).

Список литературы

- [1] Andersen S.K., Golovchenko J.A., Mair G. // Phys. Rev. Lett. 1976. V. 37. P. 1141-1146.
- [2] Cowan P.L., Golovchenko J.A., Robbins M.F. // Phys. Rev. Lett. 1980. V. 44. P. 1680-1683.
- [3] Афанасьев А.М., Кон В.Г. // ЖЭТФ. 1978. Т. 74. № 1. С. 300-313.
- [4] Круглов М.В., Созонтов Е.А., Щемелев В.Н., Захаров Б.Г. // Кристаллография. 1977. Т. 22. № 4. С. 693-697.
- [5] Sozontov E.A., Kruglov M.V., Zakharov B.G. // Phys. Status Solidi (a). 1981. V. 66. P. 303-309.
- [6] Маслов А.В., Мухамеджанов Э.Х., Ле Конг Куи и др. // Кристаллография. 1987. Т. 32. № 3. С. 723-729.
- [7] Александров П.А., Бреслер Е.Е., Бугров Д.А. // ПТЭ. 1986. № 1. С. 198-202.
- [8] Мухамеджанов Э.Х., Маслов А.В., Чузо А.Н., Имамов Р.М. // Поверхность. 1984. № 3. С. 54-59.
- [9] Соломин И.К., Круглов М.В. // ФТТ. 1984. Т. 26. № 2. С. 519-523.
- [10] Afanasev A.M., Imamov R.M., Mukhamedzhanov E.Kh., Chuzo A.N. // Acta Cryst. 1986. V. A42. P. 24-29.
- [11] Афанасьев А.М., Имамов Р.М., Мухамеджанов Э.Х., Игамкулов З.А. // Кристаллография. 1994. Т. 39. № 2 (в печати).
- [12] Афанасьев А.М., Имамов Р.М., Маслов А.В., Мухамеджанов Э.Х., Бжеумихов А.А. // ДАН СССР. 1989. Т. 309. № 1. С. 78-81.
- [13] Mukhamedzhanov E.Kh., Maslov A.V., Imamov R.M. et al. // J. Appl. Cryst. 1991. V. 24. P. 6-13.
- [14] Афанасьев А.М., Абдуллаев М.И., Имамов Р.М., Пашаев Э.М., Перегудов В.Н. // ДАН СССР. 1989. Т. 304. № 4. С. 875-878.
- [15] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика. Т. 3. М.: Наука, 1963. С. 702.
- [16] Мухамеджанов Э.Х., Ле Конг Куи // ПТЭ. 1985. № 3. С. 183-185.
- [17] Мухамеджанов Э.Х., Бжеумихов А.А., Бугров Д.А. // ПТЭ. 1988. № 6. С. 175-178.

Институт кристаллографии РАН
Москва

Поступило в Редакцию
4 января 1994 г.