

## К Р А Т К И Е С О О Б Щ Е Н И Я

УДК 537.533.7

© 1995

ТОНКАЯ СТРУКТУРА СПЕКТРА  
ПОЛНОГО ТОКА ПОВЕРХНОСТИ Fe(001)

О.Ф.Панченко, Л.К.Панченко

Донецкий физико-технический институт АН Украины  
Поступило в Редакцию 16 мая 1994 г.

Экспериментальные исследования низкоэнергетической вторично-электронной спектроскопии (ВЭС), отличающейся отсутствием разрушающего воздействия на образец, несут информацию об энергетической структуре и рассеянию электронов в кристалле и являются эффективным методом контроля чистоты поверхности в процессе очистки от примесей. Интерпретация опытных данных требует построения теории происходящих при этом процессов. Настоящая работа посвящена развитию теории интегральных методов ВЭС, основанных на измерении полного тока вторичных электронов в цепи образца  $I(E_p) = I_p - I_s$  (где  $I_p$  — поток первичных электронов с энергией  $E_p \leq 100$  eV,  $I_s$  — ток уходящих из образца электронов, как упруго-, так и неупругоотраженных). Согласно существующим представлениям [1-6], наблюдаемая тонкая структура спектров полного тока (СПТ) определяется механизмами электрон-электронного рассеяния с возбуждением межзонных переходов.

Цель настоящей работы — исследование и интерпретация тонкой структуры СПТ монокристалла Fe по нормали к поверхности (001) и развитие методики обработки экспериментальных результатов для получения максимума информации о законе дисперсии электронов выше уровня вакуума  $E_{vac}$ .

Как и в [7-9], в расчетах 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

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

где  $E_{nk}$  — закон дисперсии электронов,  $\Omega_{nk}$  — единичный вектор вдоль направления  $\nabla_k / \dot{E}_{nk}$ ,  $f_F(E_{nk})$  — равновесная функция заполнения Ферми-Дирака, которая при  $E > E_F + e\varphi$  равна нулю,  $e\varphi$  — работа выхода,  $E_F = 8.8$  eV — уровень Ферми,  $V$  — объем кристалла.

Переходя от суммирования по  $k$  к интегрированию по поверхности постоянной энергии  $E_{nk} = E$ , получаем (в пренебрежении эффектами дифракции на поверхности кристалла)

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

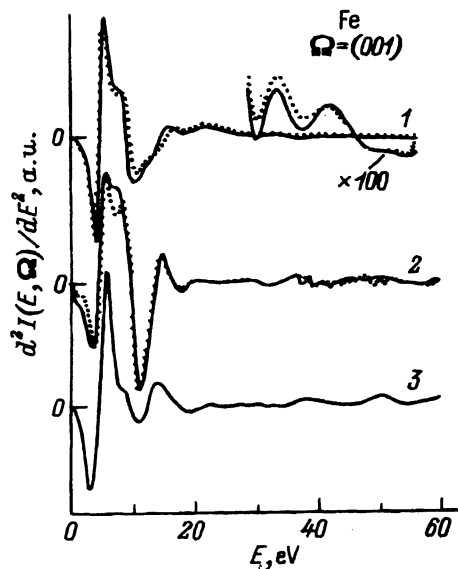
где  $N(E, \Omega)$  — число энергетических зон вдоль направления  $\Omega$ , для которых выполняется равенство  $E = E_{nk}$ . Здесь учтена конечная ширина  $\hbar\Gamma(E) = \hbar/\tau(E)$  электронных уровней путем замены  $\delta$ -функции по энергии в (1) на соответствующий лоренциан. При этом время жизни возбужденного состояния  $\tau(E)$  вблизи поверхности Ферми определялось из [10]

$$\hbar/\tau(E) = \pi^2 z^{1/2} E_{pl}(E/E_F - 1)^2/128,$$

где  $E_{pl}$  — параметр экранирования, зависящий от концентрации  $s$ - и  $d$ -электронов в электронной оболочке атома. Расчет из общей теории металлов дает для Fe  $E_{pl} \approx 6.4$  eV.

Выражение (2) справедливо, когда  $\Omega$  совпадает с осью симметрии кристалла (при нормальном падении потока электронов на образец). Для построения ступенчатой функции  $N(E, \Omega)$  аналогично [11–13] мы воспользовались расчетом зонной структуры  $E_{nk}$  Fe, полученной в [14] для электронов со спином «вверх» и «вниз».

Результаты расчета СПТ  $d^2I(E, \Omega)/dE^2$  по формуле (2) представлены на рисунке (кривые 1) по нормали к поверхности Fe(001). Для сравнения с расчетами там же (кривая 2) представлен экспериментальный СПТ [14]. Различия в положении особенностей на теоретических и экспериментальных кривых связаны как с приближенным характером зонных расчетов, так и с экспериментальными погрешностями, связанными с формированием коллимированного пучка электронов в области низких энергий, осуществлением полного сбора вторичных электронов и др. Кроме того, метод СПТ в области малых  $E_p$  обладает вы-



СПТ  $d^2I(E, \Omega)/dE^2$  по нормали к поверхности Fe(001).

1 — теория, 2 — теория [14]. Сплошные кривые — для электронов со спином «вверх», пунктирные — со спином «вниз», 3 — эксперимент [14]. Кривые разнесены по оси ординат произвольным образом. Энергия отсчитывается от  $E_{vac}$ .

сокой поверхностной чувствительностью, определяемой не только малой глубиной анализируемой области, но и сильной зависимостью от физико-химических поверхностных процессов. Так, низкоэнергетический максимум с  $E \simeq 1.3\text{eV}$  в СПТ  $dI(E, \Omega)/dE$  Si(111) объясняется в [6] наличием полосы поверхностных состояний вблизи края валентной зоны. При этом интенсивность максимума ослабляется при адсорбции кислорода, и он исчезает при  $T > 200^\circ\text{C}$ , что указывает на его связь с поверхностными состояниями. Адсорбция окиси углерода на поверхности поликристалла Pt [7] сопровождается некоторым ослаблением структуры, соответствующей очищенному образцу, и в СПТ  $dI(E, \Omega)/dE$  постепенно проявляется дополнительная волнообразная компонента в виде чередования слабых максимумов и минимумов. Наличие адсорбата приводит к упругому рассеянию на большие углы, тем самым открываются новые каналы проникновения электронов в кристалл. Тем не менее правильность развиваемой теории СПТ подтверждает сравнение с расчетом (на рисунке, кривые 1) расчета [14] (рисунок, кривые 2), но проделанного в рамках динамической теории дифракции медленных электронов (LEED).

Полученное соответствие между основными особенностями теоретических и экспериментального СПТ свидетельствует о преобладающей роли эффектов объемной зонной структуры в формировании спектра. При этом можно использовать экспериментальные данные в качестве реперных точек для более совершенных зонных расчетов, указывая, какие именно зоны производят те или иные особенности в спектре. Развиваемый метод позволяет описать и особенности тонкой структуры экспериментальных зависимостей коэффициента вторичной электронной эмиссии  $\sigma(E_p) = I_s/I_p$ , как это, например, было проделано в работе [15], не прибегая к громоздкому формализму динамической LEED-теории [16].

### Список литературы

- [1] Komolov S.A., Chadderton L.T. // Radiat. Eff. 1976. V. 31. N 1. P. 1-6; 1977. V. 31. N 4. P. 193-196.
- [2] Komolov S.A., Chadderton L.T. // Surface Sci. 1979. V. 90. N 2. P. 359-380.
- [3] Möller P.J., Mohamed M.H. // J. Phys. C: Solid State Phys. 1982. V. 15. N 31. P. 6457-6462.
- [4] Möller P.J., He J.W. // Surface Sci. 1985. V. 162. N 1-3. P. 209-216.
- [5] Schäfer I., Schlüter M., Skibowski M. // Phys. Rev. B. 1987. V. 35. N 14. P. 7663-7670.
- [6] Комолов С.А. Интегральная вторично-электронная спектроскопия поверхности. Л.: Изд-во ЛГУ, 1986. 180 с.
- [7] Комолов С.А., Панченко О.Ф., Шаталов В.М. // ФТТ. 1992. Т. 34. № 4. С. 1259-1262; № 11. С. 3489-3492.
- [8] Комолов С.А., Панченко О.Ф., Панченко Л.К., Шаталов В.М. // Письма в ЖТФ. 1993. Т. 19. № 3. С. 17-22.
- [9] Панченко О.Ф., Панченко Л.К., Шаталов В.М. и др. // Письма в ЖТФ. 1994. Т. 20. № 6. С. 79-83.
- [10] Пайнс Д., Нозьер Ф. Теория квантовых жидкостей. М.: Мир, 1967. 382 с.
- [11] Shatalov V.M., Panchenko O.F., Artamonov O.M. et al. // Solid State Commun. 1988. V. 68. N 8. P. 719-722.
- [12] Панченко О.Ф., Шаталов В.М. // ЖТФ. 1993. Т. 63. № 10. С. 144-150.
- [13] Panchenko O.F., Panchenko L.K. // Solid State Commun. 1994. V. 89. N 10. P. 849-853.
- [14] Tamura E., Feder R., Krewer J. et al. // Solid State Commun. 1985. V. 55. N 6. P. 543-547.
- [15] Панченко О.Ф., Панченко Л.К. // ФТТ. 1993. Т. 35. № 11. С. 3164-3166.
- [16] Pendry J.V. Low-Energy Electron Diffraction. London: Acad. Press, 1974.