

УДК 548.732

©1995

ПОЛЯРИЗАЦИОННЫЙ ЭФФЕКТ В МЕТОДЕ СТОЯЧИХ РЕНТГЕНОВСКИХ ВОЛН

Э.М.Пашаев, А.Б.Вавилов

Институт кристаллографии Российской академии наук,
117333, Москва, Россия
(Поступила в Редакцию 31 мая 1994 г.
В окончательной редакции 27 января 1995 г.)

Исследовано влияние поляризационного эффекта рентгеновских фотоэлектронов на их глубину выхода и величину оценки толщины нарушенного приповерхностного слоя. Получены кривые угловой зависимости K -фотоэлектронов модельного образца кремния при использовании поляризованного и неполяризованного рентгеновского излучения. В случае поляризованного излучения эффективная глубина выхода фотоэлектронов существенно уменьшается. Показано, что при учете поляризации рентгеновских фотоэлектронов, оценка толщины нарушенного слоя изменяется на десятки процентов.

Известно, что при поглощении рентгеновского излучения в кристалле образуются вторичные излучения, которые можно использовать для получения информации о структуре кристалла и тонких приповерхностных слоев. Метод, основанный на регистрации угловых зависимостей вторичных излучений вблизи точного угла Брэгга, получил название метода стоячих рентгеновских волн (СРВ) [1].

Полный выход электронов в условиях дифракции рентгеновских лучей определяется выражением [2]

$$\kappa(\theta) = \int P(z)\kappa(\theta, z)dz, \quad (1)$$

где

$$\kappa(\theta, z) = \mu_0 \left\{ |E_0(z, \theta)|^2 + |E_h(z, \theta)|^2 + 2\text{Re}[(\kappa_{ih}/\kappa_{i0})E_0(z, \theta)E_h(z, \theta)\exp(i\phi(z) - w(z))] \right\}. \quad (2)$$

Здесь все обозначения соответствуют таковым в [2]. При условии, что экстинкционная длина $L_{\text{ex}} > L_e > L_d$ (L_d — толщина нарушенного слоя, L_e — глубина выхода электронов), становится возможным определить характер нарушений в структуре приповерхностных слоев кристаллов, включая как средние смещения атомных плоскостей, так и среднеквадратичные разбросы по фазе, описываемые фактором Дебая-Валлера $\exp[-w(z)]$.

В случае использования фотоэлектронов, глубина выхода которых для электронов различных групп энергий составляет от нескольких нанометров до долей микрона, можно исследовать структурные изменения в тончайших приповерхностных слоях. Так, например, электростатические энергоанализаторы (см. [3,4]) позволяют использовать в методе СРВ электроны, глубина выхода которых составляет от 2 до 200 нм.

Для интерпретации кривых фотоэмиссии $\chi(\theta)$ требуется знание функции вероятности $P(z)$ выхода электронов с различных глубин z кристалла. Однако, как было показано в [5], для фотоэлектронов с малыми энергетическими потерями в функции $P(z)$ следует учитывать поляризационный фактор, заключающийся в сильной зависимости выхода электронов от угла между вектором поляризации σ и направлением регистрации n фотоэлектронов. До настоящего времени влиянию поляризационного эффекта (ПЭ) на глубину выхода фотоэлектронов в методе СРВ не уделялось должного внимания. Впервые этот вопрос был поднят в [6], где на образцах титана и хрома был зафиксирован слабый ПЭ (порядка 10%). Эти измерения, так же как и измерения в [7,8] (ПЭ $\sim 12\%$), проводились без разделения электронов по энергиям. Поэтому рассчитанная методом Монте-Карло функция вероятности выхода фотоэлектронов, генерированных СРВ, предполагает слабое ($\sim 15\%$) различие между случаями $\sigma \parallel n$ и $\sigma \perp n$ [9].

Исследования влияния угловой симметрии атомного состояния на выход фотоэлектронов с малой потерей энергии из твердого тела показали [10,11], что в зависимости от атомного состояния величина поляризационного фактора η изменяется от 30% для d -состояния до 93% для сферически-симметричного s -состояния.

$$\eta = \frac{S(0^\circ) - S(90^\circ)}{S(0^\circ) + S(90^\circ)}. \quad (3)$$

Здесь $S(0^\circ)$ и $S(90^\circ)$ — выход фотоэлектронов при угле Φ между σ и n 0 и 90° соответственно. Результаты измерений спектров K -фотоэлектронов Si при $\Phi = 0$ и 90° приведены на рис. 1, а, где вертикальной линией показана область максимального ПЭ, составляющая $\sim 93\%$.

Для экспериментального исследования специфики выхода фотоэлектронов в случае полностью поляризованного рентгеновского излучения был использован энергоанализатор типа цилиндрического зеркала (ЦЗА) [4]. При облучении образца CuK_α -излучением в качестве поляризатора был использован кристалл-монокроматор Ge(333)-отражения, у которого $2\vartheta_B \simeq 90^\circ$. Для определения максимального значения величины ПЭ были получены спектры фотоэлектронов при $\Phi = 0$ и 90° . Для этого был использован специально сконструированный механизм поворота блока монокроматоров, позволяющий плавно изменять угол Φ в пределах $0 \div 100^\circ$. При этом связка «исследуемый кристалл-ЦЗА» в вакуумном объеме остается в неизменном положении и меняется положение σ относительно поверхности образца. Другим важным преимуществом используемого механизма поворота является то, что при $\Phi = 0$ и 90° засветка на кристалле остается неизменной.

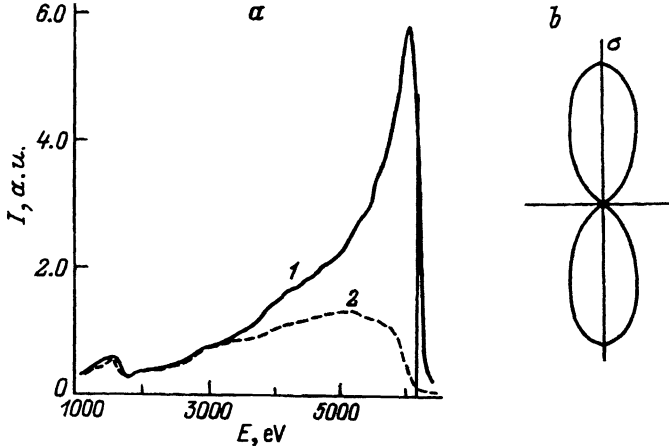


Рис. 1. а) Спектры K -фотоэлектронов Si при $\Phi = 0$ (1) и 90° (2); излучение $\text{CuK}\alpha$. б) Угловое распределение рентгеновских фотоэлектронов, возбуждаемых в кремнии из s -состояния.

Измерения спектров проводились в автоматическом режиме. Программа управления экспериментом позволяла регистрировать спектры электронов при многократном прохождении в выбранном энергетическом интервале. Количество проходов подбиралось с таким расчетом, чтобы статистическая ошибка в минимуме спектра не превышала величины $3 \div 5\%$. Размер пятна засветки на образце составлял $2 \times 2 \text{ mm}$, угол падения рентгеновского излучения — 1° , интенсивность падающего рентгеновского излучения была $\sim 10^4 \text{ p/s}$.

Остановимся несколько подробнее на самом механизме ПЭ. В рентгеновском диапазоне энергий процесс фотоэффекта носит в основном дипольный характер, что приводит к угловому распределению вида

$$S(n, \sigma) = A(n, \sigma) + B. \quad (4)$$

Степень анизотропии углового распределения (4) определяется соотношением между коэффициентами A и B и зависит от энергетического и орбитального состояний возбуждаемых в атоме электронов. Анизотропия фотоэффекта максимальна в случае возбуждения сферически-симметричного s -состояния атома. При этом коэффициент $B = 0$, и в направлении, перпендикулярном σ , электроны не генерируются. По этой причине отличие максимальной величины η от 100% для незамедленных электронов вызвано только приборными возможностями (энергетическая и угловая разрешающие способности) используемого энергоанализатора [4]. Угловое распределение на выходе из кристалла электронов, потерявших энергию, определяется процессом их замедления. Расчеты углового распределения фотоэффекта и коэффициентов кинетического уравнения приведены в [12], а угловая диаграмма на рис. 1, б. Фотоэлектроны, выходящие из глубины кристалла, превышающей путь порядка транспортной длины l_{tr} , полностью «забывают» исходное направление [13]

$$1/l_{tr} = (\pi z^2 e^4 \rho / 2E^2) \ln(E/u). \quad (5)$$

Здесь e — заряд электрона, ρ — концентрация атомов в кристалле, E — энергия фотоэлектрона, u — эффективный атомный потенциал. Отсюда требование к разрешающей способности энергоанализатора определяется условием

$$\Delta E \leq l_{tr} dE/dl = \Delta E_{\tau}, \quad (6)$$

где

$$\frac{dE}{dl} = \frac{2\pi ze^4 \rho}{E} \ln \frac{E}{u} \quad (7)$$

— эффективное торможение электронов [12].

При $\Delta E_{\tau} = 4E/z$ и в случае K -фотоэлектронов относительное разрешение должно быть не хуже $4/z$, что для Si составляет 30%. Всем этим требованиям удовлетворяет как используемый в экспериментах ЦЗА с разрешающей способностью $\sim 3\%$, так и газовые пропорциональные счетчики [14].

Для выяснения влияния ПЭ рентгеновских фотоэлектронов на глубину выхода в методе СРВ необходимо было сравнить фотоэмиссионные кривые от модельного кристалла с известной толщиной нарушенного слоя при различных углах Φ между σ и n . При этом направление n должно быть строго фиксированным, чтобы изменение угла вылета фотоэлектронов не влияло на их глубину выхода.

ЦЗА в экспериментах располагался под углом 5° относительно поверхности кристалла-образца и в случае использования поляризованного излучения (кристалл-монокроматор Si(333)-отражения) угол $\Phi = 5^\circ$ (рис. 2).

Технические возможности используемого спектрометра [15] не позволяли осуществлять поворот σ относительно n , как это было описано в [11], так как в условиях дифракции в этом случае происходит поворот отражающих плоскостей кристалл-монокроматора относительно плоскостей образца. Поэтому тот же кристалл Si исследовался при

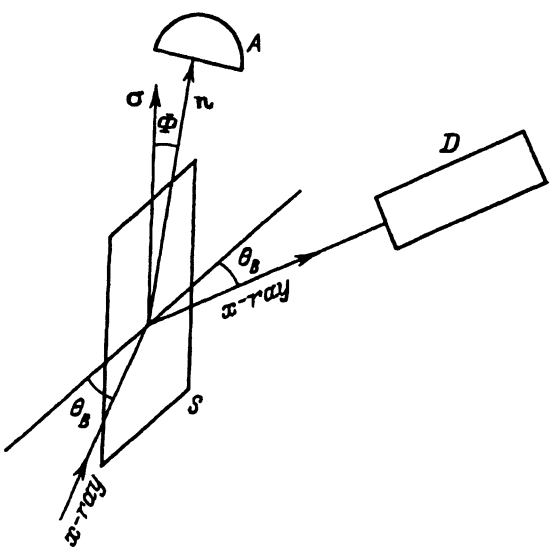


Рис. 2. Схема эксперимента при использовании поляризованного рентгеновского излучения.

A — энергоанализатор, D — рентгеновский счетчик, S — исследуемый кристалл.

отражении (111), когда параллельная плоскости дифракции составляющая поляризации подавлялась кристаллом-монокроматором Si(111) на 12%.

Исследовались совершенные кристаллы Si с естественным окисным слоем на поверхности толщиной $20 \div 25 \text{ \AA}$, вырезанные параллельно плоскости (111), при облучении CuK_α -излучением. Измерения фотоэмиссионных кривых проводились в стандартной брэгговской бездисперсионной схеме дифракции.

Измерения спектров K -фотоэлектронов Si при указанном положении ПЗА для полностью и частично поляризованного рентгеновского излучения дали максимальную величину поляризационного фактора $\eta = 52\%$ для электронов с энергией $E = 6200 \text{ eV}$. Электроны этой группы энергий использовались и в дальнейшем в экспериментах методом СРВ.

Необходимо отметить, что предварительные исследования данного кристалла в интегральном режиме (без разделения электронов по энергиям) не позволили установить наличия на поверхности кристалла нарушенного слоя. Измерения проводились с помощью электронного умножителя ВЭУ-6, который располагался как почти параллельно поверхности кристалла, так и перпендикулярно ей. Средняя глубина выхода фотоэлектронов $L_e \sim 1500 \text{ \AA}$ в этом случае намного превосходила толщину нарушенного слоя L_d .

Как видно из рис. 3, в случае практически неполяризованного излучения экспериментальная кривая совпадает с теоретической, рассчитанной при $L_e = 270 \pm 25 \text{ \AA}$ и $L_d = 25 \text{ \AA}$. Глубина выхода в этом случае соответствует полученному ранее значению глубины выхода K -фотоэлектронов кремния с $E = 6200 \text{ eV}$ [16].

Иная картина наблюдается при использовании поляризованного излучения, когда направления σ и π практически совпадают. В этом случае совпадение экспериментальной и расчетной кривых фотоэмиссии достигается при значении $L_e = 160 \pm 15 \text{ \AA}$ (рис. 4).

Сравнение экспериментальных результатов с теоретическими, рассчитанными по формулам (1), (2), проводилось по программе «Дельта». Эта программа позволяла варьировать как параметры расчетной кривой L_e , L_d , величину фактора Дебая–Валлера $\exp[-w(z)]$, так и число нарушенных слоев различной природы на поверхности кристалла и др. При получении расчетных кривых были использованы модельные представления, согласно которым на поверхности идеального кристалла Si имеется один разупорядоченный (аморфный) слой ($\exp[-w(z)] \simeq 0$) толщиной $L_e = 25 \text{ \AA}$. В этом случае единственной варьируемой величиной является глубина выхода фотоэлектрона L_e с $E = 6200 \text{ eV}$. Относительно большая погрешность в определении L_e связана в первую очередь с малой интенсивностью регистрируемых фотоэлектронов, несмотря на то что измерения проводились в автоматическом режиме с накоплением сигнала.

Данные результаты свидетельствуют о том, что в методе СРВ, когда монохроматизированное рентгеновское излучение поляризовано в той или иной мере, при изучении структурного совершенства тонких приповерхностных слоев кристаллов с применением энергоанализаторов, влияние поляризационного фактора на глубину выхода электронов может достигать десятков процентов. Пренебрежение этим об-

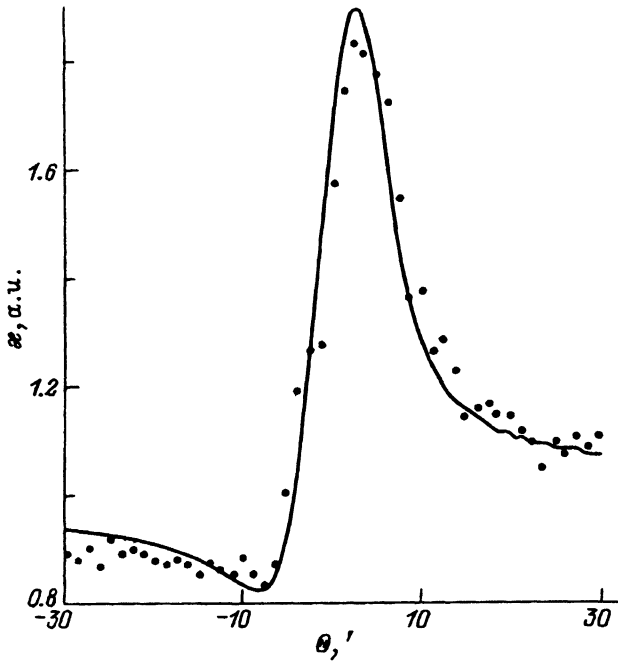


Рис. 3. Экспериментальная (темные кружки) и расчетная (сплошная линия) фотоэмиссионные кривые Si(111). Монохроматор Si(111). CuK_α -излучение.

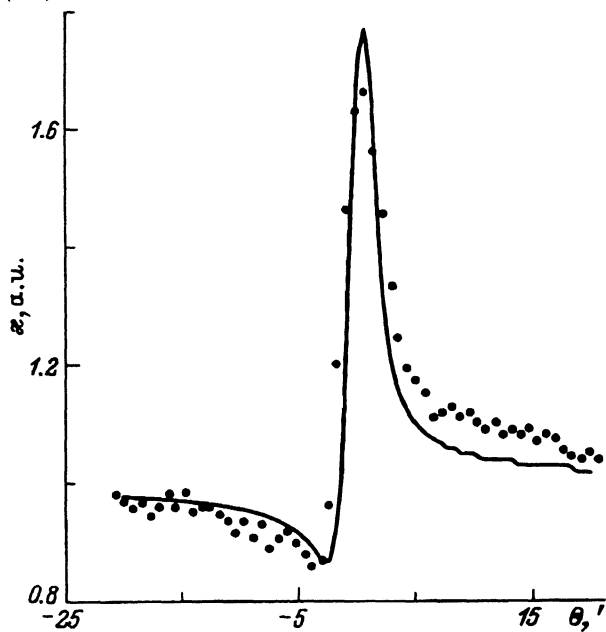


Рис. 4. Экспериментальная (темные кружки) и расчетная (сплошная линия) фотоэмиссионные кривые Si(333). Монохроматор Si(333), CuK_α -излучение.

стоятельством может привести к ошибочным результатам. Так, при обработке кривых фотоэмиссии поляризованного излучения использование величины $L_e = 270 \text{ \AA}$ дает значение толщины аморфного слоя $L_d = 40 \pm 4 \text{ \AA}$. Различие в величинах L_d составляет около 60%.

Поскольку величина ПЭ для электронов различных энергетических групп неодинакова, различным будет и влияние поляризационных поправок на глубину выхода фотоэлектронов. Детальные экспериментальные и теоретические исследования этого вопроса должны привести к установлению характера зависимости функции $P(z)$ от степени поляризации рентгеновского пучка и угла Φ между σ и n для электронов с различными энергетическими потерями. Это позволит повысить прецизионность и достоверность данных, получаемых методом СРВ.

Авторы выражают благодарность Р.М.Имамову за полезные обсуждения результатов работы и А.В.Маслову за предоставленную программу «Дельта».

Список литературы

- [1] Афанасьев А.М., Александров П.А., Имамов Р.М. Рентгеновская структурная диагностика. М. (1986). 95 с.
- [2] Афанасьев А.М., Кон В.Г. ЖТФ **74**, 1, 300 (1978).
- [3] Takahashi T., Kikuta S. J. Phys. Soc. Jap. **47**, 2, 620 (1979).
- [4] Александров П.А., Бреслер Е.Е., Бугров Д.А., Зашквара В.В., Имамов Р.М., Пашаев Э.М., Редькин В.С. ПТЭ, **1**, 198 (1986).
- [5] Афанасьев А.М., Имамов Р.М., Пашаев Э.М., Перегудов В.Н., Абдуллаев М.И. ФТТ **30**, 6, 1745 (1988).
- [6] Румп М.А., Шемелев В.Н. ФТТ **4**, 8, 2050 (1962).
- [7] Shaw P.S., Church E.D., Nanany S. Columbia Astrophysics Laboratory Contribution, **429**, 1 (1989).
- [8] Kaaret P., Novick R., Martin C. Columbia Astrophysics Laboratory Contribution, **424**, 1 (1989).
- [9] Ковальчук М.В., Лилъеквист Д., Кон В.Г. ФТТ **28**, 11, 3406 (1986).
- [10] Афанасьев А.М., Абдуллаев М.И., Имамов Р.М., Пашаев Э.М., Перегудов В.Н. ДАН СССР **304**, 4, 875 (1989).
- [11] Пашаев Э.М., Вавилов А.Б., Имамов Р.М. Кристаллография **38**, 3, 36 (1993).
- [12] Афанасьев А.М., Имамов Р.М., Пашаев Э.М., Протопопов В.В. Труды ФТИ АН **5** 84 (1993).
- [13] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика. М. (1974). 752.
- [14] Мухамеджанов Э.Х. Труды ФТИ АН **5**, 34 (1993).
- [15] Бугров Д.А., Пашаев Э.М. ПТЭ, **1**, 199 (1989).
- [16] Абдуллаев М.И., Маслов А.В., Пашаев Э.М. ДАН АзССР XLIV, **12**, 6.