

НИЗКОЭНЕРГЕТИЧЕСКАЯ ВТОРИЧНО-ЭЛЕКТРОННАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ ПОВЕРХНОСТИ Ge(111)

© О.Ф.Панченко, Л.К.Панченко

Донецкий физико-технический институт Академии наук Украины,
340114 Донецк, Украина
(Поступила в Редакцию 2 февраля 1996 г.)

Исследовалась вторично-электронная спектроскопия поверхности Ge (111) при низких энергиях.

Экспериментальные исследования низкоэнергетической вторично-электронной спектроскопии (ВЭС) несут деформацию об энергетической структуре (ЭС) и рассеянии электронов в кристалле. Интерпретация опытных данных требует построения теории происходящих при этом процессов. Настоящая работа посвящена развитию теории дифференциальных методов ВЭС, основанных на энергетическом анализе вторичных электронов. При этом тонкая структура спектров вторичной электронной эмиссии с угловым разрешением (СВЭЭУР) отражает границы зон в законе дисперсии электронов, движущихся в направлении регистрации. Накладываясь на фон, имеющий вид каскадного максимума от электронов, рассеянных на фононах, шероховатостях поверхности и т.п., эта тонкая структура формирует измеряемое энергетическое распределение тока вторичных электронов вдоль заданного направления [1-6]. При этом тонкая структура появляется в том случае, когда ЭС приповерхностной области кристалла соответствует ЭС его объема. Сравнение результатов расчета с экспериментальными данными затруднено, поскольку на форму, интенсивность и энергетическое положение особенностей экспериментальных СВЭЭУР значительное влияние могут оказывать следующие факторы: а) сильная энергетическая зависимость вероятности заполнения состояний; б) уширение пиков из-за конечного времени жизни электронов; в) наличие фоновой составляющей спектра. Целями настоящей работы являются исследование и интерпретация СВЭЭУР грани Ge(111), а также развитие методики обработки экспериментальных результатов для получения максимума информации о законе дисперсии и кинетических свойствах электронов. Модель [5,6] ниже дополняется учетом энергетической зависимости уширения зонных уровней энергии, учетом электрон-электронного ($e-e$) и электрон-плазмонного ($e-pl$) вкладов в функцию распределения неравновесных электронов $f(E)$ вместо добавления экспериментально измеренного фона, как это было сделано в [6].

Распределение электронного тока по энергиям E и углам Ω вне кристалла имеет вид $[\text{7-9}]$ (в пренебрежении эффектами дифракции на поверхности кристалла)

$$J(E, \Omega) = \frac{2m(E - E_{\text{vac}})\kappa(E)}{(2\pi\hbar)^3} \int \frac{dE'}{\pi} f(E') N(E', \Omega) \frac{\frac{\hbar}{2}\Gamma(E')}{(E - E')^2 + \frac{\hbar}{4}\Gamma^2(E')}, \quad (1)$$

где $\kappa(E) = 4(E - E_{\text{vac}})^{1/2}(E - E_0)^{1/2}/[(E - E_{\text{vac}})^{1/2} + (E - E_0)^{1/2}]^2$ — коэффициент прохождения барьера кристалл-вакуум для одномерного движения $[\text{10}]$, $E_0 = 0$ — положение дна валентной зоны, E_{vac} — уровень вакуума, $N(E, \Omega)$ — число ветвей закона дисперсии электронов $E_{\tau k}$ вдоль направления, которое определяется законом сохранения параллельной поверхности кристалла составляющей вектора k при вылете в направлении Ω . Здесь учтена конечная ширина $\hbar\Gamma(E) = \hbar/\tau(E)$ электронных уровней, при этом время жизни возбужденного состояния $\tau(E)$ определялось из интерполяционного выражения $[\text{7}]$, полученного в области $E_{\text{vac}} < E < E_{\text{vac}} + \hbar\omega_{pl}$ с хорошей точностью по данным работы $[\text{11}]$

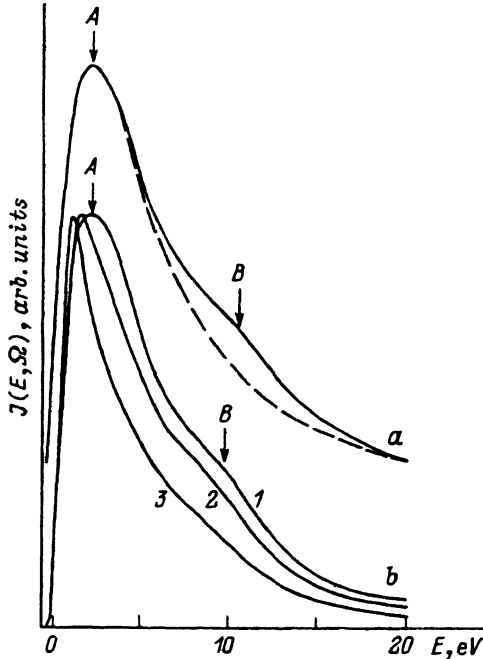
$$\hbar/\tau(E) \simeq 7.23 \cdot 10^{-4}(E - E_0)^{1/2}(E - E_F)^2 + 0.1 \text{ eV}, \quad (2)$$

где $E_F = 12 \text{ eV}$ — энергия Ферми (середина запрещенной зоны).

Согласно общепринятым представлениям $[\text{12}]$, первичные электроны с энергий $E_p \sim 0.1 \text{ keV}$, попадая в кристалл, создают в результате каскада неупругих соударений некоторое стационарное распределение вторичных электронов энергии $f(E)$. В интересующей нас области доминирует e - e - и e - pl -рассеяние. Функция заполнения состояний, отвечающая многократному e - e -рассеянию, представима в виде $f_e(E) \sim |E/E_F - 1|^{-2}\tau(E)$ при $E_{\text{vac}} < E < E_{\text{vac}} + \hbar\omega_{pl}$. Это выражение является интерполяционной зависимостью, которая довольно хорошо описывает поведение зависимости $f_e(E)$, полученной путем численных расчетов для реальной ЭС в приближении статистической модели e - e -рассеяния $[\text{13}]$. Аналогичная величина получена для простых металлов в $[\text{14}]$ при $E - E_F \ll E_p$, что является по-видимому, верхней границей для полупроводников, где наличие запрещенной зоны затрудняет процессы неупругого рассеяния электронов.

Процесс распада плазмонов, генерируемых первичными, а также возбужденными электронами в твердом теле, — процесс второго порядка по сравнению с e - e -рассеянием, особенно в области энергий вблизи E_{vac} . Тем не менее он может оказаться существенным в силу неустойчивости плазмонов в Ge. По данным спектров ХПЭЭ Ge $[\text{15}]$, полуширина плазмонного пика равна $\hbar\Gamma_{pl} \simeq 6 \text{ eV}$ при энергии $\hbar\omega_{pl} = 16.7 \text{ eV}$, что позволяет, пренебрегая дисперсией плазмонов, из закона сохранения энергии получить формулу для энергетической зависимости e - pl -вклада в $f(E)$

$$f_{pl}(E) \sim \tau(E) \int_{E_0}^{E_v} dE' \frac{1}{\pi} \frac{\frac{\hbar}{2}\Gamma_{pl}\rho(E')}{(E - E' - \hbar\omega_{pl})^2 + (\frac{\hbar}{2}\Gamma_{pl})^2}, \quad (3)$$



СВЭЭУР по нормали к поверхности Ge(111).

a — теория (штриховой кривой показан СВЭЭУР без учета e - p -рассеяния), *b* — эксперимент [15] для различных энергий первичных электронов E_p . E_p (eV): 1 — 100, 2 — 500, 3 — 2000. Энергия отсчитывается от E_{vac} . Кривые разнесены по оси ординат произвольным образом.

где E_v — потолок валентной зоны. Основной вклад в интересующую нас область энергий вносят процессы ионизации электронов из последнего широкого максимума в плотности заполненных состояний $\rho(E)$. При большом уширении $\hbar\Gamma_{pl}$ мелкие детали $\rho(E)$ не очень важны, поэтому мы для простоты заменим этот максимум прямоугольником шириной $E_2 - E_1$. Тогда

$$f_{pl}(E) \sim \frac{1}{\pi} \left[\arctg \left(\frac{E - E_1}{\hbar\Gamma_{pl}/2} \right) - \arctg \left(\frac{E - E_2}{\hbar\Gamma_{pl}/2} \right) \right] \tau(E), \quad (4)$$

где $E_1 = 25$ eV, $E_2 = 29$ eV — увеличенные на $\hbar\omega_{pl}$ нижняя и верхняя границы интерполирующего прямоугольника.

В общем случае, как показано в [7,8] на примере Si, $f(E)$ является суммой e - e - и e - p -вкладов с весом p : $f(E) = f_e(E) + pf_{pl}(E)$.

На рисунке, *a* приведены результаты расчета по формуле (1) СВЭЭУР для электронов, вылетающих по нормали к плоскости Ge(111). Для построения ступенчатой функции $\dot{N}(E, \Omega)$ (аналогично [7]) и расчета e - p -вклада в $f(E)$ мы воспользовались расчетом зонной структуры E_{nk} и $\rho(K)$ Ge, полученным методом эмпирического псевдопотенциала с параметрами из [16]. Кривые $J(E < \Omega)$ рассчитаны при учете ($p = 0.7$) и без учета ($p = 0$) e - p -вклада в $f(E)$. Плазмонный вклад в $f(E)$ проявляется в виде широкого пика (*B*) правее каскадного максимума (*A*) (аналогично [17]).

Как показано в [7,18], в СВЭЭУР Si значительный вклад изотропной компоненты, соответствующей упругому рассеянию на поверхности и усреднению по направлениям для части вылетающих электронов. Эта фоновая компонента тока, имеющая характерный вид каскадного максимума, учитывалась добавлением к $N(E, \Omega)$ константы C . Как показано в [7], варьирование C в широких пределах от 0 до 100 практически не меняет вида второй производной $J'(E, \Omega)$. Тем самым оправдывается применение двойного дифференцирования для исключения фона и выявления особенностей такой структуры экспериментальных СВЭЭУР. В расчетах $J(E, \Omega)$ были использованы следующие значения параметров: $C = 100$, $E_{\text{vac}} = 16.1$ eV, которые дают близкую к эксперименту [15] (см. рисунок, б) зависимость тока от E . Экспериментальные спектры меняются в зависимости от E_p , что связано кроме всего прочего с изменением соотношения между $e-e$ - и $e-p$ -вкладами в $f(E)$.

Таким образом, полученное соответствие между экспериментальными и теоретическими данными свидетельствует о том, что основные особенности СВЭЭУР обусловлены главным образом электронным строением конечных состояний, из которых происходит эмиссия электронов.

Работа выполнена при поддержке ГКНТ Украины.

Список литературы

- [1] N.E. Christensen, R.F. Willis. Phys. Rev. **В 18**, 10, 5140 (1978).
- [2] О.М. Артамонов, А.Г. Виноградов, О.М. Смирнов, А.Н. Терехов. ФТТ **27**, 10, 3138 (1985).
- [3] О.М. Артамонов, А.Н. Терехов. ФТТ **28**, 3, 862 (1986).
- [4] В.В. Кораблев, Ю.А. Кудинов. Изв. АН СССР. Сер. физ. **49**, 9, 1775 (1985).
- [5] В.В. Кораблев, Ю.А. Кудинов, С.Н. Сысоев. ФТТ **28**, 9, 2648 (1986).
- [6] В.В. Кораблев, Ю.А. Кудинов, С.Н. Сысоев. ФТТ **29**, 3, 702 (1987).
- [7] О.М. Артамонов, А.Г. Виноградов, О.Ф. Панченко, А.Н. Терехов, В.М. Шаталов. ФТТ **31**, 1, 57 (1989).
- [8] О.Ф. Панченко, В.М. Шаталов. ЖТФ **63**, 10, 144 (1993).
- [9] В.В. Кораблев, Ю.А. Кудинов, О.Ф. Панченко, Л.К. Панченко, В.М. Шаталов. ФТТ **36**, 8, 2373 (1994).
- [10] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Квантовая механика. Нерелятивистская теория. М. (1974). 752 с.
- [11] L.C. Emerson, R.D. Birkhoff, V.E. Anderson, R.H. Ritchie. Phys. Rev. **В 7**, 5, 1798 (1973).
- [12] P.A. Wolff. Phys. Rev. **95**, 1, 56 (1954).
- [13] V.M. Shatalov, O.F. Panchenko. Solid State Commun. **69**, 9, 937 (1989).
- [14] О.Ф. Панченко, В.М. Шаталов. ЖЭТФ **93**, 1 (7), 222 (1987).
- [15] P.W. Palmberg. J. Appl. Phys. **38**, 5, 2137 (1967).
- [16] M.L. Cohen, T.K. Bergstresser. Phys. Rev. **141**, 2, 789 (1966).
- [17] M. Rösler, W. Brauer. Phys. Stat. Sol. (b) **104**, 1, 161 (1981); 2, 575 (1981).
- [18] P.E. Best. Phys. Rev. **В 14**, 2, 606 (1976).