

УДК 548.732

ПОЛЯРИЗАЦИОННЫЙ ЭФФЕКТ ПРИ ГЕНЕРАЦИИ РЕНТГЕНОВСКИХ ФОТОЭЛЕКТРОНОВ ИЗ СОСТОЯНИЙ С РАЗЛИЧНОЙ УГЛОВОЙ СИММЕТРИЕЙ

А. М. Афанасьев, Р. М. Имамов, Э. М. Пашаев,
В. Н. Перегудов, М. И. Абдуллаев

Исследовано влияние угловой симметрии возбуждаемого атомного состояния на выход фотоэлектронов с малой потерей энергии. Получены энергетические спектры s - и p -электронов Si и Ge соответственно. Показано, что величина поляризационного эффекта при возбуждении p -состояния значительно уменьшается по сравнению со случаем возбуждения s -состояния. Результаты измерений хорошо согласуются с теоретическими представлениями о генерации и транспорте фотоэлектронов.

Энергетические спектры рентгеновских фотоэлектронов эффективно используются в методе стоячих рентгеновских волн (СРВ) для исследования структурного совершенства тончайших приповерхностных слоев полупроводниковых монокристаллов [1-5]. Предельные возможности такого анализа определяются точностью теоретического описания генерации и выхода фотоэлектронов из кристалла и прежде всего знанием функции вероятности выхода электронов $P(z, \Delta E)$ с глубины z для различных энергетических групп. Экспериментальному определению $P(z, \Delta E)$ был посвящен ряд работ [2, 3, 6, 7]. Эти исследования проводились с использованием энергоанализаторов с разрешающей способностью $\sim 20\%$ и без разделения выхода электронов по углам.

Энергоанализаторы типа цилиндрического зеркала (ЦЗА) [8] позволяют измерять распределение электронов по ΔE и углам. Использование энергоанализатора подобного типа в случае поляризованного рентгеновского излучения позволяет наблюдать анизотропию углового распределения фотоэлектронов, которые в силу дипольного характера фотоэффекта генерируются преимущественно вдоль направления поляризации. В этом случае для описания выхода фотоэлектронов из кристалла следует использовать функцию $P(z, p_0, p)$, которая учитывает не только потерю энергии электронами, но и деформацию их углового распределения (p_0 и p — импульсы электрона при генерации и на выходе из кристалла). В экспериментах [2, 3, 6, 7] наличие поляризации рентгеновского излучения не учитывалось, и это обстоятельство ограничивает возможность анализа искажения структуры слоев глубинами z порядка глубины изотропизации углового распределения фотоэлектронов l_{is} . Естественно, что поляризация падающего излучения влияет прежде всего на выход фотоэлектронов с малой потерей энергии, которые сохраняют первоначальное направление движения, а такие электроны могут выходить лишь с малых глубин.

В [9] на примере фотоэлектронных спектров кремния с использованием CuK_α -излучения было продемонстрировано сильное влияние направления поляризации на выход фотоэлектронов с относительно малой потерей энергии. Большая величина поляризационного эффекта (ПЭ), экспериментально продемонстрированного в [9], обусловлена возбуждением k -оболочки, т. е. сферически симметричного электронного состояния. В этом случае угловое распределение генерируемых фотоэлектронов является

наиболее анизотропным. Степень анизотропии углового распределения фотоэлектронов зависит от угловой симметрии возбуждаемого атомного состояния. Поэтому в данной работе проведено сравнительное исследование фотоэлектронных спектров германия и кремния с возбуждением L - и K -оболочки соответственно.

1. Постановка эксперимента

В рентгеновском диапазоне энергии процесс фотоэффекта носит преимущественно дипольный характер, который приводит к угловому распределению вида

$$S(n, \sigma) = A(n\sigma)^2 + B, \quad (1)$$

где n — направление импульса фотоэлектрона, σ — направление поляризации рентгеновского излучения, A и B — коэффициенты, зависящие от энергии падающих рентгеновских лучей и исходного состояния электрона в атоме.

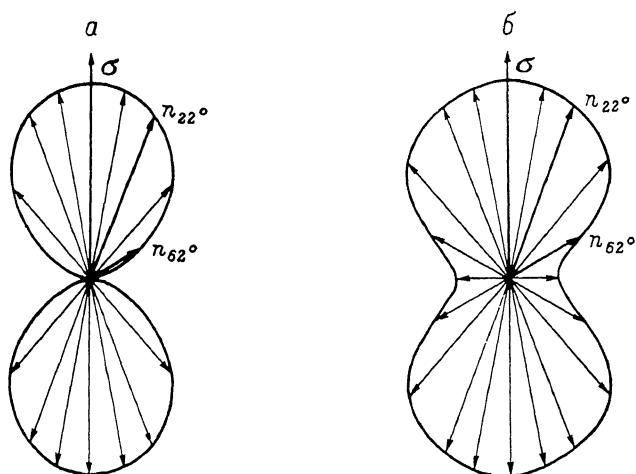


Рис. 1. Угловое распределение генерируемых фотоэлектронов под действием поляризованного рентгеновского излучения.

a — угловое распределение s -электронов, b — угловое распределение $2p$ -электронов.

Анизотропия углового распределения фотоэлектронов (1) максимальна в случае возбуждения сферически симметричного s -состояния атома. При этом коэффициент $B=0$, и в направлении, перпендикулярном поляризации, электроны не генерируются. В случае состояния с $l \neq 0$ коэффициент $B \neq 0$, и в направлении, перпендикулярном поляризации, имеется отличная от нуля генерация электронов. Например, при возбуждении $2p$ -состояния атома зависимость коэффициентов A и B от длины волны рентгеновского излучения, рассчитанную с использованием кулоновских волновых функций электрона, удобно представить в следующем виде

$$A/B = \frac{8\xi^2}{4 + \xi^2}, \quad (2)$$

где $\xi = \frac{Ze^2}{\hbar c} \sqrt{\frac{mc^2}{2(E_0 - I)}}$, m и e — масса и заряд электрона, Z — атомный номер, E_0 — энергия рентгеновского излучения, I — энергия связи возбуждаемых электронов.

В измерениях, проделанных в данной работе, использовалось FeK_{α} -излучение с энергией $E_0 = 6403$ эВ, которое в соответствии с (2) генерирует в германии при возбуждении $2p$ -состояния ($I_{L_{II}L_{III}} = 1232$ эВ — потенциал ионизации $2p$ -состояния Ge) угловое распределение фотоэлектронов

с $A/B=1/3$. Наряду с этим возбуждается $2s$ -состояние (потенциал ионизации $2s$ -состояния $I_{L1}=1414$ эВ), которое дает угловое распределение элект-

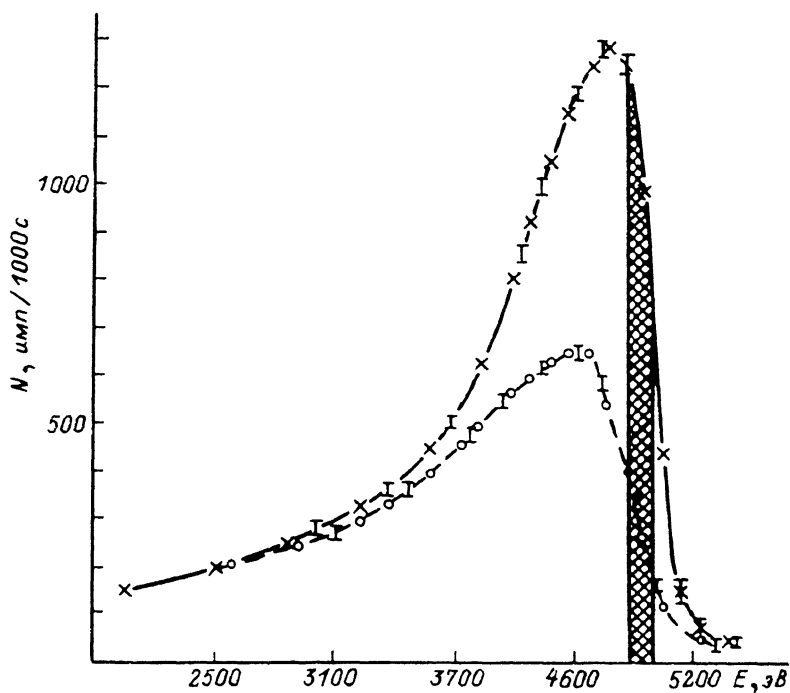


Рис. 2. Фрагменты спектров K -фотоэлектронов Si.

Сплошная линия — спектр при $\varphi=22.3^\circ$, штриховая — $\varphi=62.3^\circ$.

тронов с $B=0$. Однако энергия $2s$ -электронов почти на 200 эВ меньше энергии $2p$ -электронов, и энергоанализатор [8] позволяет разделить их.

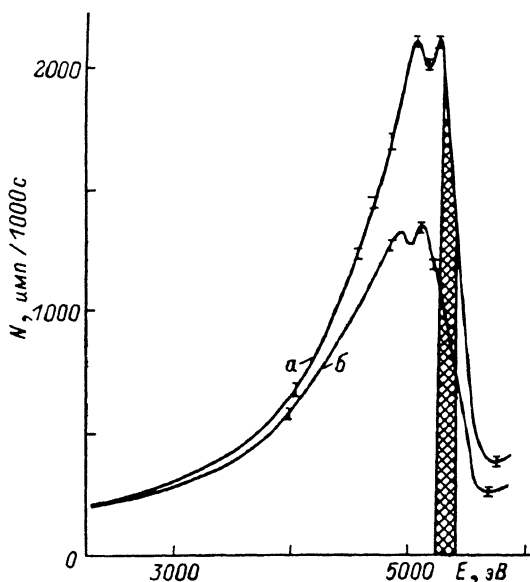


Рис. 3. Фрагменты спектров L -фотоэлектронов Ge.

a — спектр при $\varphi=22.3^\circ$, b — при $\varphi=62.3^\circ$.

Для поляризации излучения использовался высокосовременный кристалл кремния с (400)-отражением. При этом $2\theta_B \approx 90^\circ$, и получается практически 100-процентное поляризованное излучение. Угол падения излуче-

ния на исследуемые образцы германия и кремния выбирался равным $\sim 30'$, что является оптимальным с точки зрения повышения скорости счета.

Максимального различия в энергетических спектрах следует ожидать при регистрации фотоэлектронов, вылетающих из кристалла параллельно и перпендикулярно направлению вектора поляризации σ . Однако конструктивные особенности спектрометра позволяли регистрировать спектры в диапазоне углов φ между \mathbf{n} и σ от $\varphi = 22.3^\circ$ до $\varphi = 72.3^\circ$. Причем одинаковые условия по засветке образцов и пробегу электронов достигаются при $\varphi = 22.3^\circ$ и $\varphi = 62.3^\circ$. На рис. 1 приведены угловые распределения фотоэлектронов для кремния и германия. Результаты измерений представлены на рис. 2 и 3. Видно, что область проявления ПЭ для кремния составляет ~ 1.5 кэВ, однако максимальное различие спектров наблюдается в заштрихованной области, которая соответствует электронам с минимальной потерей энергии.

2. Анализ экспериментальных результатов

Основной характерной чертой фотоэлектронных спектров, измеренных для различных углов между \mathbf{n} и σ ($\varphi = 22.3$ и 62.3°), является то, что, практически совпадая для электронов с большой потерей энергии, они резко отличаются для электронов с малой потерей энергии. Ясно, что по мере замедления фотоэлектронов в кристалле их угловое распределение изотропизуется. Электроны, прошедшие в кристалле путь порядка транспортной длины [10],

$$l/l_{\text{тр}} = \frac{\pi Z^2 e^4 n_0}{2E^2} \ln \frac{E}{I_{\text{эф}}} \quad (3)$$

полностью «забывают» исходное направление (n_0 — плотность атомов в кристалле, E — энергия электрона, $I_{\text{эф}}$ — эффективный атомный потенциал). Траектория фотоэлектрона представляет собой в силу диффузионного характера движения ломаную линию. Поэтому реальный размер, на котором происходит изотропизация, составляет величину порядка

$$l_{is} = l_{\text{тр}}/\sqrt{\nu}, \quad (4)$$

где ν — число столкновений на транспортной длине. Потеря энергии фотоэлектроном на транспортной длине составляет

$$\Delta E_{\text{тр}} \approx l_{\text{тр}} \frac{dE}{dl}, \quad (5)$$

$$\frac{dE}{dl} = \frac{2\pi Z e^4 n_0}{E} \ln \frac{E}{I_{\text{эф}}} \quad (6)$$

— эффективное торможение фотоэлектрона в кристалле [10]. С учетом (3) потерю энергии на транспортной длине можно приближенно оценить по простой формуле

$$\Delta E_{\text{тр}} \approx \frac{4}{Z} E. \quad (7)$$

Ясно, что формула (7) дает приближенную, грубую оценку энергетической области, в которой на фотоэлектронном спектре должен наблюдаться поляризационный эффект. Таким образом, в мягкой области $E < E_0 - E_{\text{тр}}$ спектры, зарегистрированные для различных углов φ между \mathbf{n} и σ , практически совпадают, и по мере продвижения в жесткую область $E_0 - E_{\text{тр}} < E < E_0$ различие между ними становится все более существенным. Это различие и определяет величину ПЭ, которая максимальна для электронов, покидающих кристалл практически без потери энергии. Из формулы (7) вытекает и требование к энергетическому разрешению анализатора в простейшем случае возбуждения K -оболочки. Для наблюдения большого поляризационного эффекта на K -электронах достаточно, чтобы

энергетическое разрешение было в 2—3 раза меньше $\Delta E_{\text{тр}}$. Однако при возбуждении L - и M -оболочек атома, когда существенно уменьшается величина ПЭ за счет наличия изотропной составляющей в исходном угловом распределении (1) и необходимо разделить ПЭ для электронных состояний с различной угловой симметрией, требование к энергетическому разрешению может быть более сильным, т. е. в случае оболочек с $l \neq 0$ энергетическое разрешение должно обеспечить разделение электронов, возбуждаемых из состояний с различными орбитальными моментами.

	N_{220}/N_{620}	
	эксперимент	теория
1s-состояние	3.7	3.9
2p-состояние	2	2.2

В таблице приведены относительные величины ПЭ, полученные в результате измерения выхода фотоэлектронов в заштрихованных областях. Здесь же для сравнения приведены теоретические оценки ПЭ, полученные по формуле (1). Приведенные в таблице данные для 2p-электронов получены с учетом замедленных фотоэлектронов, выбитых с M -оболочки. Их вклад в заштрихованную область можно легко экстраполировать, поскольку в этом энергетическом интервале M -фотоэлектроны имеют полностью изотропное угловое распределение (рис. 3) и не меняют наблюдаемую величину ПЭ от 2p-электронов.

Аналогичная ситуация имеет место и в случае кремния с той лишь разницей, что для Si вклад L -фотоэлектронов в заштрихованную область не превышает статистическую ошибку измерений. Это является следствием малости сечения возбуждения L -оболочки в Si по сравнению с K -оболочкой. Именно по этой причине для демонстрации ПЭ на p -электронах был использован германий.

Сравнение результатов измерений с теоретическими оценками показывает удовлетворительное согласие между ними. Такое согласие подтверждает естественное предположение о том, что с малых глубин электроны выходят без столкновений. Как и следовало ожидать, величина ПЭ для 2p-электронов существенно меньше величины ПЭ для s -состояния.

Таким образом, как показано выше, поляризационный эффект для электронов с малыми потерями энергии может достигать очень большой величины. Кроме того, ясно, что в этой области энергии функция вероятности выхода электронов будет в значительной степени зависеть как от поляризации падающего излучения, так и от направления вылета регистрируемых электронов. Это обстоятельство необходимо учитывать при анализе структурных искажений в тончайших приповерхностных слоях.

Л и т е р а т у р а

- [1] Афанасьев А. М., Александров А. П., Имамов Р. М. Рентгеновская структурная диагностика в исследовании приповерхностных слоев монокристаллов. М.: Наука, 1986. 96 с.
- [2] Мухамеджанов Э. Х., Маслов А. В., Чузо А. Н., Имамов Р. М. Поверхность, 1984, № 3, с. 54—59.
- [3] Чумаков А. И., Смирнов Г. В., Круглов М. В., Соломин И. К. ФТТ, 1984, т. 26, № 3, с. 746—753.
- [4] Maslov A. V., Kh E., Mukhamedzhanov R. M., Imatov L. I., Man and Le Cong Qui. Phys. St. Sol. (a), 1985, vol. 90, N 2, p. 439—444.
- [5] Маслов А. В., Мухамеджанов Э. Х., Ле Конг Куи, Имамов Р. М. Кристаллография, 1987, т. 32, № 3, с. 723—729.
- [6] Афанасьев А. М., Имамов Р. М., Мухамеджанов Э. Х. ФТТ, 1984, т. 26, № 7, с. 1976—1980; Afanas'ev A. M., Imatov R. M., Mukhamedzhanov E. Kh. Phys. St. Sol. (a), 1984, vol. 83, N 1, p. K5—K9; Afanas'ev A. M., Imatov R. M., Mukhamedzhanov E. Kh., Chuzo A. N. Acta Cryst., 1986, vol. A42, p. 24—29.

- [7] Соломин И. К., Круглов М. В. ФТТ, 1984, т. 26, № 2, с. 519—523.
- [8] Александров П. А., Бреслер Е. Е., Бугров Д. А. и др. ПТЭ, 1986, № 1, с. 198—202.
- [9] Афанасьев А. М., Абдуллаев М. И., Имамов Р. М., Пашаев Э. М., Перегудов В. Н. ДАН СССР, 1988 (в печати).
- [10] Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика. Т. 3, М.: Наука, 1963. 702 с.

Институт кристаллографии
АН СССР
Москва

Поступило в Редакцию
1 февраля 1988 г.
