

05;11

Методы расчета зонной структуры и низкоэнергетическая вторично-электронная спектроскопия иридия

© О.Ф. Панченко

Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина НАН Украины,
340114 Донецк, Украина

(Поступило в Редакцию 29 января 1998 г.)

Дана теоретическая интерпретация тонкой структуры (ТС) спектра вторично-электронной эмиссии (СВЭЭ) Ir по нормали к поверхности (111) и спектра полного тока (СПТ) поликристалла Ir. В расчетах учитывались энергетическая зависимость уширения зонных уровней энергии, электрон-электронный и электрон-плазмонный вклады в функцию распределения неравновесных электронов, изотропная компонента тока от электронов, рассеянных на поверхности. Показано, что ТС СВЭЭ и СПТ обусловлена главным образом электронным строением конечных состояний, в которые попадают электроны или из которых происходит их эмиссия, что позволяет непосредственно восстанавливать особенности расположения зон в энергетической зонной структуре из данных эксперимента. Развиваемый метод позволяет отделить объемные эффекты в СВЭЭ и СПТ от поверхностных. Подтверждена зависимость ТС СВЭЭ и СПТ от геометрической структуры и степени упорядоченности кристаллов. При этом ослабление интенсивности ТС служит мерой дефектности в приповерхностной области образца, что может успешно применяться для контроля состояния поверхности в процессе обработки.

Низкоэнергетическая вторично-электронная спектроскопия, основанная на изучении явлений, сопровождающих процесс взаимодействия потока медленных первичных электронов (ПЭ) I_p (с энергией $E_p \leq 1 \text{ keV}$) с поверхностью кристалла, включает в себя два метода [1,2]: дифференциальный и интегральный. Первый метод дает кривую распределения по энергиям вторичных электронов (ВЭ) вне кристалла или спектр вторично-электронной эмиссии (СВЭЭ), второй — кривую интегрального (или полного) тока ВЭ в образце или спектр полного тока (СПТ). Оба метода наряду с традиционным применением для анализа элементарных возбуждений и приповерхностных состояний твердого тела в настоящее время используются для контроля чистоты поверхности и технологии создания электродных материалов.

Основные особенности тонкой структуры (ТС) СВЭЭ и СПТ в основном связаны с объемной зонной структурой (ОЗС) кристалла [3,4]. Эмиссия ВЭ экспериментально исследована многими авторами: объектом изучения в большинстве случаев являлись поликристаллы. Существует сравнительно малое число работ, в которых использовались монокристаллические мишени. ТС на фоне каскадного максимума (КМ) СВЭЭ наблюдалась, например, в энергетическом распределении ВЭ монокристаллов Ir [5], Ag [6], Si [7], Pt [8], W [3,9] и Cu [10]. Теоретический анализ СВЭЭ оказался весьма затруднительным в связи с необходимостью учета многообразия физических процессов, происходящих при взаимодействии потока ПЭ с кристаллом. Теории ВЭЭ из металлов (см., например, [11–14]), в большинстве основанные на модели Зоммерфельда, отличаются главным образом способом аппроксимации каскадных процессов для различных моделей поверхности. При этом для энергетического распределения ВЭ (КМ) получены формулы, которые имеют следующий вид: $J(E) \sim \chi(E) \cdot (E + E_i)^{-s}$, где

$\chi(E)$ — коэффициент прохождения барьера кристалл-вакуум для ВЭ; второй множитель пропорционален числу ВЭ с энергией E или функции распределения неравновесных ВЭ $f(E)$. Параметры s и E_i в разных теориях различны. В работе [11], например, $s \approx 2$, E_i — разность энергий между уровнем вакуума E_{vac} и дном зоны проводимости. На практике E_i заменяется подгоночным значением [6]. Наблюдаемая в экспериментах ТС СВЭЭ не может быть объяснена теориями в модели свободных электронов без учета влияния зонной структуры (ЗС). Расчеты СВЭЭ, выполненные в [3], показали связь ТС с объемной плотностью состояний $\rho(E)$; при этом в пренебрежении уширением энергетических уровней проанализировано только положение линий в спектре, а не их форма и интенсивность. В работе [10] дана интерпретация ТС СВЭЭ на основе теории дифракции медленных электронов (ДМЭ). Результаты этой работы расходятся с результатами [3], хотя и удовлетворительно описывают ТС экспериментальных кривых. В работах [15,16] показано, что ТС СВЭЭ определяется энергетической дисперсией высоких электронных состояний (расположенных выше E_{vac}) и отражает границы зон в законе дисперсии электронов (ЗДЭ), движущихся в направлении регистрации.

Сравнительно меньшее число работ (см., например, [2,4,17,18]) посвящено исследованию СПТ — производной по E_p от полного тока в цепи образца $I = I_p - I_s$ (I_s — ток уходящих из образца электронов) при условии полного отбора ВЭ. Результаты этих работ указывают на существенную связь ТС СПТ с фундаментальными свойствами рассматриваемого материала. Согласно [2], в области энергий до 100 eV преобладает электрон-электронное ($e-e$) рассеяние с возбуждением межзонных переходов и основные структуры в СПТ отражают особенности $\rho(E)$. Связь ТС СПТ с ОЗС подтверждают

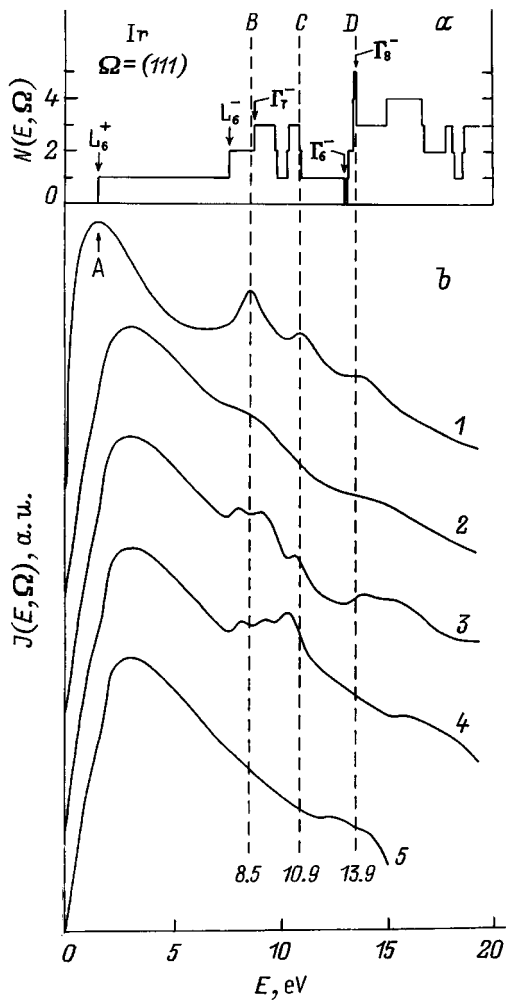


Рис. 1. *a* — число ветвей ЗДЭ Ir [23] (L_{6+} , L_{6-} , Γ_{6-} , Γ_{7-} , Γ_{8-} — его точки симметрии), пересекающих уровень E , вдоль направления (111); *b* — СВЭЭ по нормали к поверхности (111): 1 — эксперимент (из работы [5]) для $E_p = 40$ eV; 2 — теория на основе расчетов ЗС [23] при $E_{pl} \approx 0.96$ eV; 3–5 — теория на основе расчетов ЗС [23], [21] и [22] соответственно при $E_{pl} \approx 0.27$ eV; энергия E отсчитывается от E_{vac} ; кривые разнесены по оси ординат произвольным образом. Вертикальные штриховые линии A–D указывают основные особенности экспериментального СВЭЭ.

и расчеты, проделанные в [18] с привлечением динамической теории ДМЭ.

Цель настоящей работы — исследование и интерпретация ТС СВЭЭ и СПТ Ir на основе ОЗС и развитие методики обработки экспериментальных результатов для получения максимума информации о ЗДЭ выше E_{vac} . Как и ранее (см., например, [7,9,19,20]), в расчетах СВЭЭ и СПТ рассматривалось рассеяние электронов с заданным импульсом на кристалле в приближении, когда вероятность рассеяния пропорциональна числу конечных состояний на данном уровне E с заданным направлением квазиимпульса Ω . При этом учитывались

энергетическая зависимость уширения зонных уровней энергии $\hbar\Gamma(E) = \hbar/\tau(E)$, $e-e$ - и электрон-плазмонный вклады в $f(E)$, изотропная компонента тока от электронов, рассеянных на поверхности.

Работа опирается на реальную зонную структуру E_{nk} и $\rho(E)$ Ir; E_{nk} входит в расчеты спектров через $N(E, \Omega)$ (рис. 1, *a*) — число энергетических зон вдоль направления Ω , для которых выполняется равенство $E = E_{nk}$. Структура энергетических зон Ir (как и других $5d$ -переходных металлов), полученная различными авторами с применением различных методов, как правило, отличается друг от друга в области энергий выше уровня Ферми E_F . ОЗС Ir вычислялась в [21] с применением релятивистского обобщения метода присоединенных плоских волн (ППВ); в [22] — релятивистского метода Корринга–Кона–Ростокера (ККР); в [23] — самосогласованного метода релятивистских линейных “маффин-тин” орбиталей (РЛМТО). В последней работе энергетические зоны, полученные в широком интервале энергий, согласуются с экспериментальными значениями фотоэмиссионных спектров (ФЭС) с угловым разрешением [24].

На рис. 1, *b* представлены результаты расчета СВЭЭ по нормали к поверхности Ir (111) с привлечением ОЗС различных авторов. Фоновая компонента тока — бесструктурный КМ (пик A) учитывалась добавлением к $N(E, \Omega)$ константы C, когда энергетическая структура приповерхностной области описывается моделью почти свободного электронного газа. В расчетах $J(E, \Omega)$ были использованы следующие значения параметров: $C = 4$ (дает близкую к эксперименту форму и ширину КМ); $E_{vac} = E_F + e\varphi$, где $E_F = 10.8$ eV и $e\varphi = 5.8$ eV. Время жизни возбужденного состояния $\tau(E)$ определялось из [25]: $\hbar/\tau(E) = E_{pl} \cdot (E/E_F - 1)^2$, где E_{pl} — параметр экранирования; коэффициент $\varkappa(E)$ для одномерного движения — из [26]. Функция заполнения состояний $f(E)$, отвечающая многократному $e-e$ -рассеянию, получена при $E - E_F \ll E_p$ путем решения транспортного уравнения в приближении статистической модели $e-e$ -рассеяния [27]. Распад плазмонов, генерируемых ПЭ, а также возбужденными электронами в твердом теле, дает свой вклад в $f(E)$, который, если пренебречь дисперсией плазмонов, получен из закона сохранения энергии.

Наилучшее согласие с ТС (пики B, C и D) экспериментального спектра (кривая 1) наблюдается у кривой 3, когда параметр уширения E_{pl} , зависящий от концентрации s - и d -электронов в электронной оболочке атома, рассчитывался не из общей теории металлов (как для кривой 2), а являлся подгоночным. Это обусловлено тем, что $\tau(E)$, ответственное за уширение пиков и использованное в расчетах, получено в [25] вблизи ферми-поверхности, а не в области высоколежащих возбужденных состояний. Положение и интенсивность максимумов ТС C и D на кривой 4 существенно различается с аналогичными особенностями экспериментального спектра, что связано с приближенным характером зонных расчетов [21] в рамках метода ППВ для $E \geq 15$ eV

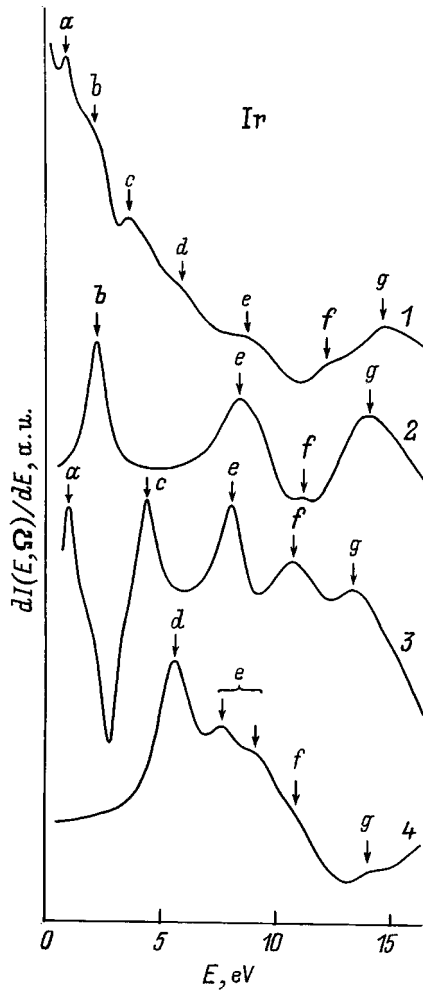


Рис. 2. СПТ Ir: 1 — эксперимент для поликристалла (из работы [17]); 2–4 — теория для граней (111), (110) и (100) соответственно при $E_{pl} \approx 0.96$ eV. Энергия E отсчитывается от E_{vac} . Кривые разнесены по оси ординат произвольным образом. Стрелки $a-g$ указывают основные особенности экспериментального СПТ.

выше E_F . А основываясь на расчетах ЗС [22] в рамках метода ККР, вообще не удалось (кривая 5) отождествить ТС экспериментального спектра.

Исходя из этого расчеты СПТ проводились на основе ОЗС [23]; при этом параметр уширения E_{pl} рассчитывался из общей теории металлов, что не влияло на характер особенностей ТС производной от полного тока. Результаты расчета $dI(E, \Omega)/dE$ (рис. 2, кривые 2–4) демонстрируют (аналогично [28] для Pt) вклады различных кристаллографических плоскостей в СПТ поликристаллического образца (кривая 1).

Таким образом, вышеуказанные методы могут служить способом экспериментального определения границ энергетических зон $N(E, \Omega)$ в области энергий значительно выше E_{vac} , дополняя данные ФЭС.

Работа выполнена при поддержке ГФФИ Украины.

Список литературы

- [1] Шульман А.Р., Фридрихов С.А. Вторично-эмиссионные методы исследования твердого тела. М.: Наука, 1977. 552 с.
- [2] Комолов С.А. Интегральная вторично-электронная спектроскопия поверхности. Л.: Изд-во ЛГУ, 1986. 180 с.
- [3] Christensen N.E., Willis R.F. // J. Phys. C. 1979. Vol. 12. N 1. P. 167–207.
- [4] Schäfer I., Schlüter M., Skibowski M. // Phys. Rev. B. 1987. Vol. 35. N 14. P. 7663–7670.
- [5] Mack J.U., Bertel E., Netzer F.P., Lloyd D.R. // Z. Phys. B. 1986. Vol. 63. N 1. P. 97–108.
- [6] Seah M.P. // Surf. Sci. 1969. Vol. 17. N 1. P. 132–160.
- [7] Артамонов О.М., Виноградов А.Г., Панченко О.Ф. и др. // ФТТ. 1989. Т. 31. Вып. 1. С. 57–61.
- [8] Lang B. // Surf. Sci. 1977. Vol. 66. N 2. P. 527–541.
- [9] Кораблев В.В., Кудинов Ю.А., Панченко О.Ф. и др. // ФТТ. 1994. Т. 36. Вып. 8. С. 2373–2380.
- [10] Kleinherrbers K.K., Goldmann A., Tamura E., Feder R. // Sol. St. Commun. 1984. Vol. 49. N 7. P. 735–738.
- [11] Wolff P.A. // Phys. Rev. 1954. Vol. 95. N 1. P. 56–66.
- [12] Amelio G.F. // J. Vac. Sci. Techn. 1970. Vol. 7. N 6. P. 593–604.
- [13] Chung M.S., Everhart T.E. // Phys. Rev. B. 1977. Vol. 15. N 10. P. 4699–4715.
- [14] Rösler M., Brauer W. // Phys. St. Sol. (b). 1981. Vol. 104. N 1. P. 161–175. N 2. P. 575–587.
- [15] Артамонов О.М., Терехов А.Н. // ФТТ. 1986. Т. 28. Вып. 3. С. 862–866.
- [16] Кораблев В.В., Кудинов Ю.А., Сысоев С.Н. // ФТТ. 1987. Т. 29. Вып. 3. С. 702–705.
- [17] Комолов С.А. // Изв. АН СССР. Сер. физ. 1982. Т. 46. № 7. С. 1377–1382.
- [18] Tamura E., Feder R., Krewer J. et al. // Sol. St. Commun. 1985. Vol. 55. N 6. P. 543–547.
- [19] Комолов С.А., Панченко О.Ф., Панченко Л.К. // ФТТ. 1996. Т. 38. Вып. 10. С. 3172–3179.
- [20] Панченко О.Ф., Шаталов В.М. // ЖТФ. 1993. Т. 63. Вып. 10. С. 144–150.
- [21] Немошкаленко В.В., Антонов В.Н., Антонов В.Н. // Металлофизика. 1981. Т. 3. № 4. С. 39–58.
- [22] Ray P.N., Chowdhuri J., Chatterjee S. // J. Phys. F. 1983. Vol. 13. N 12. P. 2569–2580.
- [23] Noffke J., Fritsche L. // J. Phys. F. 1982. Vol. 12. N 5. P. 921–933.
- [24] Van der Veen J.F., Himpsel F.J., Eastman D.E. // Phys. Rev. B. 1980. Vol. 22. N 9. P. 4223–4226.
- [25] Лайнс Д., Нозьер Ф. Теория квантовых жидкостей. М.: Мир, 1967. 384 с.
- [26] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика. Нерелятивистская теория. М.: Наука, 1974. 752 с.
- [27] Panchenko O.F., Panchenko L.K. // J. Electr. Spectr. 1997. Vol. 83. N 1. P. 21–30.
- [28] Комолов С.А., Панченко О.Ф., Шаталов В.М. // ФТТ. 1992. Т. 34. Вып. 11. С. 3489–3492.