

УДК 539.1

В.В. Кораблев, В.В. Дубов

Санкт-Петербургский государственный политехнический университет

ВЛИЯНИЕ ЕСТЕСТВЕННЫХ НЕОДНОРОДНОСТЕЙ НА ПРИПОВЕРХНОСТНОЕ РАССЕЯНИЕ ЭЛЕКТРОНОВ

Рассмотрено рассеяние электронов малых и промежуточных энергий в приповерхностной области полупроводникового кристалла с учетом естественных неоднородностей потенциала вблизи поверхности. Проведены оценки влияния таких неоднородностей на угловые зависимости и энергетические спектры различных групп электронов, выходящих из кристалла. Ориентационные и резонансные зависимости оказываются наиболее чувствительными к неоднородностям поверхностного потенциала. Эксперименты с поляризованными электронами повышают чувствительность метода. Показано, что предложенную методику можно использовать для получения информации, связанной как с процессами приповерхностного рассеяния, так и с характеристиками кристалла.

ПОВЕРХНОСТНОЕ РАССЕЯНИЕ ЭЛЕКТРОНОВ, ЕСТЕСТВЕННЫЕ НЕОДНОРОДНОСТИ ПОТЕНЦИАЛА, ПРИПОВЕРХНОСТНАЯ ОБЛАСТЬ ПОЛУПРОВОДНИКА.

Введение

Процессы излучения частиц поверхностью твердого тела, а также их рассеяния как поверхностью, так и в приповерхностной области лежат в основе современной микро- и наноэлектроники. Без детального рассмотрения таких процессов невозможны ни теоретические фундаментальные исследования взаимодействия частиц с кристаллами, ни создание современных микроэлектронных приборов и устройств. В то же время такие процессы взаимодействия в общем виде не поддаются аналитическому описанию, а численные расчеты — детальному анализу, вследствие того, что потенциал взаимодействия частицы с приповерхностной областью твердого тела имеет очень сложную структуру. Поэтому обычно при описании такого рода взаимодействий используют различные приближения. Иногда в общем процессе рассеяния есть возможность выделить одно элементарное взаимодействие и описать его, а в реги-

стрируемых экспериментальных зависимостях отделить вклад этого элементарного процесса; иногда возможно общий процесс с определенной точностью представлять в виде совокупности элементарных. Геометрия рассматриваемых явлений такова, что приповерхностный потенциал, имеющий сложную пространственную структуру как в нормальном, так и в тангенциальном (по отношению к поверхности твердого тела) направлениях, аппроксимируется однородным потенциалом во втором из указанных направлений. Довольно часто в расчетных и теоретических работах поверхности считают двумерными упорядоченными структурами, а атомы, расположенные вблизи поверхностей, аппроксимируют атомными плоскостями, параллельными поверхностям.

В силу вышесказанного, несомненно актуальным является вопрос о точности этих приближений, особенно в тех случаях, когда неоднородности хода потенци-

альных зависимостей вблизи поверхностей неустранимы.

Естественные неоднородности приповерхностного потенциала

Причины, по которым формируются неоднородности потенциала по всем направлениям, многочисленны и разнообразны. К наиболее значимым из них можно отнести, например, непосредственные дефекты приповерхностных слоев атомов; объемные незранированные заряды атомов примесей в обедненных приповерхностных слоях; частицы, адсорбированные поверхностью твердого тела, и т. п. Такие неоднородности могут иметь как индивидуальный, так и систематический характер, в частности изменение решеточных параметров твердых тел вблизи их поверхностей. Проявляться неоднородности будут также по-разному: на энергетических спектрах и на угловых зависимостях частиц или излучений различных групп, взаимодействующих с твердым телом.

Пространственная зависимость потенциала непосредственно вблизи поверхности твердого тела определяет результаты взаимодействия с поверхностью и приповерхностной областью в первую очередь для электронов так называемых малых и промежуточных энергий (от 10 до 1000 эВ). Электроны именно этих энергий и будут рассматриваться в представленной работе. Неоднородность приповерхностного потенциала принято анализировать с помощью функции $dS/(SdU)$, зависящей от величины потенциала U , которая определяет часть поверхности твердого тела dS ; на поверхности dS потенциал изменяется от U до $U + dU$. Тем самым мы определяем, какая доля поверхности имеет потенциал, значение которого совпадает с таковым, рассчитанным в используемой модели приповерхностной области. В случае, когда потенциал твердого тела не имеет неоднородностей (в том числе и естественных), зависимость искомой функции $dS/(SdU)$ от потенциала имеет вид дельта-функции. Наличие на поверхности твердого тела неоднородностей как в тангенциальных по отношению к границе раздела направлениях, так и в нормаль-

ном к поверхности, как показывает анализ, приводит к уширению функции $dS/(SdU)$. Величина уширения определяется флуктуацией поверхностного потенциала и служит количественной характеристикой, которая описывает общий вклад в вероятности процессов рассеяния от неоднородностей приповерхностного потенциала твердого тела.

Ранее в работах авторов [1, 2] было показано, что эффекты, связанные с проявлением естественных неоднородностей потенциальной энергии взаимодействия вблизи поверхности кристаллических твердых тел, выражены более четко на зависимостях рассеяния поляризованных электронов. Для различных групп поляризованных электронов как первичного пучка, так и рассеянного, или в случае вторичных электронов основной интерес при изучении рассеяния поляризованных частиц представляют энергетические зависимости интенсивностей I электронов, рассеянных твердотельной мишенью. Особо чувствительной к процессам рассеяния в приповерхностной области оказывается величина асимметрии рассеяния A [3]:

$$A = \frac{1}{P_0} \frac{I^+ - I^-}{I^+ + I^-}, \quad (1)$$

которая в случае описания рассеяния первичного пучка определяется начальной поляризацией P_0 исходного пучка поляризованных частиц, направленной вдоль нормали к плоскости рассеяния, а также интенсивностями I^+ и I^- пучков рассеянных электронов с различной поляризацией.

Влияние естественных неоднородностей на ориентационные эффекты рассеяния электронов малых и промежуточных энергий, так же как и в случае энергетических зависимостей, ярко проявляется при регистрации асимметрии рассеяния поляризованных частиц. Однако в этом случае, т. е. при регистрации угловых зависимостей, для оценок величины функции $dS/(SdU)$ обычно оказывается достаточно изучения влияния рассеяния на естественных неоднородностях на величины интенсивностей электронов.

Существование различного рода неоднородностей приповерхностного потенциала, о

которых шла речь выше, подтверждают проведенные ранее прямые экспериментальные измерения [4, 5]. Физическая природа неоднородностей, как отмечалось, может быть различной. Для оценок влияния неоднородностей можно вообще абстрагироваться от их физической природы и моделировать их областями твердого тела с различными значениями работы выхода [6].

Особая ситуация возникает в связи с наличием области пространственного заряда вблизи поверхности полупроводникового твердого тела [7]. Эта область характеризуется значительной неоднородностью; она формируется дискретными зарядами примеси, которые являются источниками неоднородного потенциала в приповерхностной области.

Как было показано авторами ранее [7], в случае полупроводниковых кристаллов эффекты, связанные с влиянием естественных неоднородностей на процессы рассеяния электронов в приповерхностной области твердого тела, оказываются более выраженными. Особенно четко это проявляется при наличии области пространственного заряда вблизи поверхности. В представленной работе авторы предлагают и реализуют методику использования различных групп электронов, возникающих при облучении полупроводникового кристалла, в качестве инструментов для независимой оценки как самих характеристик естественных неоднородностей на процессы приповерхностного рассеяния частиц в случае малых и промежуточных энергий, так и влияния этих естественных неоднородностей на рассеяние электронов. Это позволяет получать более точную информацию об особенностях характеристик рассеяния частиц в приповерхностной области полупроводниковых твердых тел, в первую очередь о погрешностях, связанных с естественными неоднородностями.

Влияние естественных неоднородностей приповерхностного потенциала на рассеяние различных групп электронов

Потенциал в приповерхностной области полупроводникового твердого тела может рассчитываться с применением различного

рода приближений и моделей как аналитически, так и численно [8, 9]. Нам необходимо учитывать естественные неоднородности такого потенциала для различных процессов вблизи поверхности, имеющих место при ее облучении электронами малых и промежуточных энергий. В случае компьютерного расчета потенциальная энергия взаимодействия электрона с поверхностью твердого тела может быть записана в виде решения уравнения Пуассона:

$$U(\mathbf{r}) = \sum \frac{e^2}{\varepsilon |\mathbf{r} - \mathbf{r}_a|} + \int_S \frac{e \sigma(\bar{\rho}')}{\varepsilon |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} dS', \quad (2)$$

где плотность заряда, помимо координат \mathbf{r}_a точечных зарядов, в общем случае содержит поверхностную плотность заряда $\sigma(\bar{\rho})$, для которой можно записать:

$$\sigma(\rho) = e D \times \left[\varepsilon + T \ln \frac{1 + \exp\{U(\bar{\rho}) / T\}}{1 + \exp\{(U(\bar{\rho}) + \varepsilon) / T\}} \right], \quad (3)$$

где D — плотность электронных поверхностных состояний.

Методика и детали расчетов представлены в работах [6, 7].

Численный расчет распределений неоднородностей поверхностного потенциала кристаллов, в том числе полупроводниковых, позволяет сделать однозначный вывод о том, что в среднем величина этих неоднородностей может иметь порядок, соизмеримый с изменениями потенциала в приповерхностной области твердого тела; в

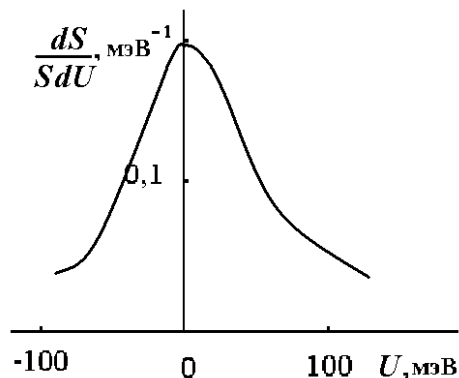


Рис. 1. Рассчитанная энергетическая зависимость функции $dS/(SdU)$; степень легирования полупроводникового кристалла — 10^{17} см^{-3}

отдельных же небольших областях вблизи поверхности твердого тела амплитуда потенциала и величина электрического поля могут даже значительно превосходить свои усредненные значения [7]. При этом относительная доля площади поверхности, где существенны отклонения поверхностного потенциала от значений, рассчитанных без учета наличия естественных неоднородностей поверхности, для отдельных полупроводниковых кристаллов может достигать 30 % от общей площади поверхности твердого тела.

Такие оценки ставят вопрос о необходимости анализировать влияние естественных неоднородностей приповерхностного потенциала твердого тела на эффекты, связанные с рассеянием внешних частиц вблизи полупроводниковой кристаллической поверхности. Сформулированная нами задача анализа влияния естественных неоднородностей на процессы приповерхностного рассеяния требует, в первую очередь, выделить случаи, когда такое влияние наиболее существенно. Оценки, проведенные на основании результатов работы [5], позволяют нам рекомендовать в качестве объекта исследований примесные полупроводниковые кристаллы. Простейшие оценки в любых моделях показывают, что для данных кристаллов значения функции $dS/(SdU)$ больше в несколько раз (а то и на порядок), чем для полупроводниковых кристаллов другого типа. Значения полуширины функции $dS/(SdU)$ достигают величин 150 мэВ для обычных стандартных параметров полупроводникового кристалла со степенью легирования порядка 10^{17} см^{-3} . В качестве примера на рис. 1 графически представлен результат расчета зависимости функции $dS/(SdU)$ от величины U .

Как отмечалось ранее, наиболее отчетливо естественные неоднородности приповерхностного потенциала должны проявляться в ориентационных зависимостях рассеяния частиц и излучений твердыми телами. В свою очередь ориентационные эффекты взаимодействия электронов с веществом оказываются существенными для диагностики поверхности и приповерхностной области твердых тел. Как один из

вариантов использования методики, связанной с влиянием на рассеяние естественных приповерхностных неоднородностей, мы рассмотрим влияние таких неоднородностей потенциала на упругое некогерентное отражение электронов рассматриваемых энергий от твердых тел. При этом, как было сказано ранее, в качестве инструмента исследования можно использовать неполяризованные электроны.

Как известно, коэффициент R упругого отражения электронов от упорядоченных кристаллических твердых тел немонотонно зависит от угла падения электронов на поверхность твердого тела. Существование такой зависимости при упругом рассеянии электронов во всю заднюю полусферу телесных углов обусловлено в основном дифракционным рассеянием первичных электронов в кристаллах. В области промежуточных энергий процессы рассеяния внешних частиц на атомных плоскостях происходят в приповерхностной области кристаллов. Поэтому при наличии в приповерхностной области естественных неоднородностей можно ожидать их влияния на ориентационные эффекты отражения электронов промежуточных энергий. Объектом исследования в описываемых опытах по регистрации энергетических и угловых зависимостей коэффициента R интегрального отражения служит величина глубины модуляции Δ_R угловых зависимостей $R(\theta)$. Величина Δ_R определялась с помощью выражения

$$\Delta_R = (R_{\max} - R_{\min})/R_{\max},$$

где R_{\max} , R_{\min} — значения коэффициента R в максимуме и соседнем минимуме угловой зависимости этого коэффициента.

Поведение энергетической зависимости величины Δ_R от энергии первичной внешней частицы E представляет существенный интерес для физики взаимодействия электронов с поверхностью. Эта зависимость носит немонотонный характер в области промежуточных энергий частиц и является характеристикой ориентационных эффектов в упругом рассеянии. На рис. 2 приведены рассчитанные угловые зависимости коэффициента R для кристалла кремния

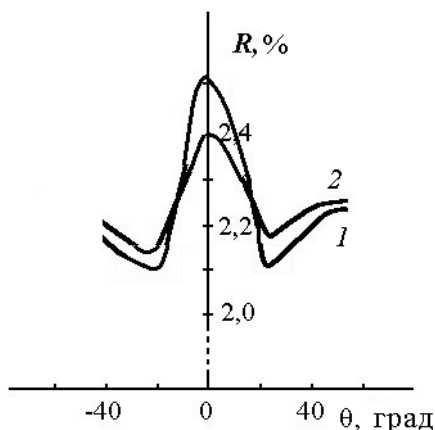


Рис. 2. Угловые зависимости коэффициента R интегрального отражения для кристалла кремния; $E = 400$ эВ.

Расчеты выполнены без учета неоднородностей в приповерхностной области кристалла (кривая 1) и путем усреднения зависимости 1 по естественным неоднородностям приповерхностного потенциала (кривая 2)

при значениях параметров, принятых нами, и энергии первичного электрона, равной 400 эВ. На основании этих угловых зависимостей вычисляется энергетическая зависимость Δ_R .

Кривая 1 на рис. 2 — это результат расчета с использованием параметров, соответствующих экспериментальной угловой зависимости коэффициента упругого отражения, а кривая 2 — результат усреднения зависимости 1 по естественным неоднородностям приповерхностного потенциала на основании развиваемого нами подхода. Видно, что в результате учета естественных неоднородностей приповерхностного потенциала происходит уменьшение величины глубины модуляции Δ_R . Это позволяет объяснить имевшееся ранее противоречие между завышенными значениями величины глубины модуляции, получаемыми при расчетах, и экспериментально регистрируемыми величинами Δ_R . Кроме того, следует вывод о важности учета влияния естественных неоднородностей на процессы приповерхностного упругого рассеяния.

Аналогично можно рассчитать влияние естественных неоднородностей приповерхностного потенциала на угловые зависимости и энергетические спектры других

групп электронов: рассеянных упруго или неупруго, а также генерируемых вторичных. Проведенный анализ показывает, что вследствие наличия естественных неоднородностей поверхностного потенциала существенно модифицируются угловые спектры Оже-эмиссии. Однако это происходит при вылете электронов из кристаллов под большими углами к их поверхности. В то же время следует отметить, что это влияние не слишком велико по абсолютным значениям — (10 – 20) %. Аналогичное влияние при вылете электронов под средними и малыми углами к поверхности приводит лишь к совсем незначительному сглаживанию ориентационных кривых. Это связано с тем, что основной вклад в формирование исследуемых зависимостей дает не область непосредственной поверхности, а приповерхностная область, расположенная в объеме. Как показали расчеты, во всех случаях рассеяния Оже-электронов влияние естественных неоднородностей сказывается менее существенно на формах спектров, чем при рассмотрении упругого отражения или при описании рассеяния поляризованных электронов.

Для поляризованных электронов рассматривалась величина асимметрии A по формуле (1). Ее энергетическая зависимость имеет обычный вид. Учет влияния естественных неоднородностей приповерхностного потенциала на рассеяние поляризованных электронов приводит к заметному сглаживанию немонотонных зависимостей коэффициента A и даже при определенных соотношениях параметров — к незначительному сдвигу экстремумов энергетической зависимости асимметрии A .

Выводы

Проведенный анализ показал, что естественные неоднородности поверхностного потенциала могут существенно влиять на угловые зависимости интенсивностей всех групп электронов, а также излучений, выходящих из твердого тела при облучении его электронами промежуточных энергий. При этом некоторые угловые зависимости или энергетические спектры могут заметно меняться не только количественно



(сглаживаясь), но и изменять, хотя и незначительно, свои качественные характеристики. Например, могут существенно модифицироваться ориентационные зависимости упругого отражения, резонансные спектры, характеристики рассеяния поляризованных электронов. Особо следует отметить, что существует возможность использовать наблюдения влияния естествен-

ных неоднородностей приповерхностного потенциала на рассеяние различных групп электронов на одном образце. Учет этого влияния при обработке экспериментов позволяет извлекать из наблюдаемых зависимостей дополнительную информацию, связанную как с процессами приповерхностного рассеяния, так и с характеристиками твердого тела.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Дубов В.В., Кораблев В.В.** Резонансное рассеяние электронов поверхностью полупроводника с естественными неоднородностями // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2013. № 1(165). С. 101–107.
2. **Дубов В.В., Кораблев В.В.** Рассеяние Оже-электронов на поверхности с естественными неоднородностями // Поверхность. 2002. № 4. С. 27–31.
3. **Kessler J.** Polarized electrons. Berlin, Heidelberg, New York, Tokyo, Springer-Verlag, 1985. 299 p.
4. **Palm H., Arbes M., Schulz M.** Fluctuation of the Au-Si Schottky barrier height. *Phys. Rev. Lett.* 1993. Vol. 71. No. 14, pp. 2224–2229.
5. **Бондаренко В.Б., Кузьмин М.В., Кораблев В.В.** Анализ естественных неоднородностей потенциала у поверхности примесного полупроводника // ФТП. 2001. Т. 35. № 8. С. 964–968.
6. **Дубов В.В.** Взаимодействие электронов промежуточных энергий с приповерхностной областью твердых тел. СПб.: Изд-во Политехнического ун-та, 2002. 157 с.
7. **Бондаренко В.Б., Кораблев В.В., Равич Ю.И.** Естественно неупорядоченный потенциал на поверхности сильно легированного полупроводника // ФТП. 2004. Т. 38. № 3. С. 331–334.
8. **Korablev V.V., Dubov V.V.** The effect of the surface and bulk electrons on the surface potential formation. *Proceedings of SPIE.* 2002. Vol. 4627. No. 2, pp. 34–37.
9. **Дубов В.В., Кораблев В.В.** Рассеяние медленных электронов поверхностью полупроводникового кристалла. СПб.: Изд-во Политехнического ун-та, 1999. 42 с.
10. **Матисов Б.Г., Дубов В.В.** Рассеяние электронов на поверхности полупроводника. СПб.: Изд-во Политехнического ун-та, 2002. 40 с.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ДУБОВ Виктор Викторович — доктор физико-математических наук, профессор кафедры теоретической физики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.
195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
vicvicdub@mail.ru

КОРАБЛЕВ Вадим Васильевич — доктор физико-математических наук, профессор кафедры физической электроники Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.
195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29

Korablev V.V., Dubov V.V. THE INFLUENCE OF NATURAL IRREGULARITIES ON SURFACE ELECTRON SCATTERING.

Theoretical estimations of the influence of potential natural irregularities near semiconductor surface on the angular and energy dependences of different groups of electrons emitted by crystal have been made. The electrons of low and intermediate energies scattered from a crystal were analyzed.

Orientalional and resonance dependences were found to be the most sensitive to irregularity of the surface potential. The sensitivity of experimental methods of studying the effects observed can be significantly improved by using spin-polarized electrons. The proposed method can be effectively applied both to the investigation of electron scattering by semiconductor surface and to getting information on the crystal

properties. Recommendations how to take account of the influence of surface potential natural irregularities on electron scattering in the experimental data processing are given.

SURFACE SCATTERING OF ELECTRONS, NATURAL IRREGULARITY OF POTENTIAL, SURFACE REGION OF SEMICONDUCTORS.

REFERENCES

1. **Dubov V.V., Korablev V.V.** Rezonansnoe rasseyanie elektronov poverkhnost'yu poluprovodnika s estestvennymi neodnorodnostyami. *St. Petersburg Polytechnical University Journal: Physics and Mathematics*, 2013, No. 1(165), pp. 101-107.
2. **Dubov V.V., Korablev V.V.** Rasseyanie Ozhelektronov na poverkhnosti s estestvennymi neodnorodnostyami. *Poverkhnost'*, 2002, No. 4, pp. 27-31.
3. **Kessler J.** *Polarized electrons*. Berlin, Heidelberg, N.Y., Tokio, Springer-Verlag, 1985, 299 p.
4. **Palm H., Arbes M., Schulz M.** Fluctuation of the Au-Si Schottky barrier height. *Phys. Rev. Lett.*, 1993, Vol. 71, No. 14, pp. 2224-2229.
5. **Bondarenko V.B., Kuz'min M.V., Korablev V.V.** Analiz estestvennykh neodnorodnostej potentsiala u poverkhnosti primesnogo poluprovodnika. *FTP*, 2001, Vol. 35, No. 8, pp. 964-968.
6. **Dubov V.V.** *Vzaimodejstvie elektronov promezhutochnykh energij s pripoverkhnostnoj oblast'yu tverdykh tel*. St. Petersburg, Izd. SPbGTU, 2002, 157 p.
7. **Bondarenko V.B., Korablev V.V., Ravich Yu.I.** Estestvenno neuporyadochennyj potentsial na poverkhnosti sil'no legirovannogo poluprovodnika. *FTP*, 2004, Vol. 38, No. 3, pp. 331-334.
8. **Korablev V.V., Dubov V.V.** The effect of the surface and bulk electrons on the surface potential formation. *Proceedings of SPIE*, 2002, Vol. 4627, No. 2, pp. 34-37.
9. **Dubov V.V., Korablev V.V.** *Rasseyanie medlennykh elektronov poverkhnost'yu poluprovodnikovogo kristalla*. St. Petersburg, Izd. SPbGTU, 1999, 42 p.
10. **Matisov B.G., Dubov V.V.** *Rasseyanie elektronov na poverkhnosti poluprovodnika*. St. Petersburg, Izd. SPbGTU, 2002, 40 p.

THE AUTHORS

DUBOV Viktor V.

St. Petersburg Polytechnic University
29 Politekhnikeskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
vicvicdub@mail.ru

KORABLEV Vadim V.

St. Petersburg Polytechnic University
29 Politekhnikeskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia