

УДК 538.971 + 543.428

СПЕКТРОСКОПИЯ СЕЧЕНИЯ НЕУПРУГОГО РАССЕЯНИЯ ЭЛЕКТРОНОВ В СЛОИСТЫХ СИСТЕМАХ SiO₂/Si(100)*

А. С. Паршин¹, С. А. Кущенко¹, О. П. Пчеляков²,
Ю. Л. Михлин³, Т. Хасанов²

¹Сибирский государственный аэрокосмический университет
им. академика М. Ф. Решетнева,
660014, г. Красноярск, просп. им. газеты «Красноярский рабочий», 31
E-mail: aparshin@sibsau.ru

²Институт физики полупроводников им. А. В. Ржанова СО РАН,
630090, г. Новосибирск, просп. Академика Лаврентьева, 13

³Институт химии и химической технологии СО РАН,
660036, г. Красноярск, Академгородок, 50, стр. 24

Для слоистых структур SiO₂/Si(100) из экспериментальных спектров потерь энергии отражённых электронов при разных энергиях первичных электронов получены спектры сечения неупругого рассеяния электронов — произведение средней длины неупругого рассеяния и его дифференциального сечения. Проведено компьютерное моделирование спектров сечения неупругого рассеяния отражённых электронов для слоистых структур с использованием диэлектрической функции материалов плёнки и подложки. Установлено, что толщина слоя SiO₂, определённая при сравнении экспериментальных и модельных спектров, согласуется с результатами эллипсометрических измерений.

Ключевые слова: электронная спектроскопия, сечение неупругого рассеяния электронов, длина свободного пробега электрона.

Введение. Количественная информация о связанном с потерями энергии сечении неупругого рассеяния электронов в твёрдом теле играет важную роль в поверхностно-чувствительных методах исследования, таких как электронная оже-спектроскопия, фотоэлектронная спектроскопия, спектроскопия характеристических потерь энергии электронов и др. Этот параметр определяет среднюю длину неупругого пробега электронов в веществе, фон электронных спектров, вклад поверхностных возбуждений в электронный спектр.

В работе [1] предложен алгоритм вычисления из экспериментальных спектров потерь энергии отражённых электронов произведения средней длины неупругого пробега электронов λ и дифференциального сечения неупругого рассеяния $K(E_0, E_0 - E)$, где E_0 — энергия упруго отражённых электронов:

$$\lambda K(E_0, E_0 - E) = \frac{1}{c} \left[j(E) - \int_E^{E_0} \lambda K(E_0, E' - E) j(E') dE' \right] \quad (1)$$

($j(E)$ — экспериментальный спектр, c — площадь упругого пика). На основе этого алгоритма был разработан программный пакет QUASESTM XS REELS (Quantitative Analysis

*Работа выполнена в рамках проекта Аналитической ведомственной целевой программы «Развитие научного потенциала высшей школы 2009–2011 годы» (№ 2.1.1/11963), Федеральной целевой программы «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России на 2009–2013 годы» (ГК № 02.740.11.0517).

of Surfaces by Electron Spectroscopy Cross Section Determined by REELS) [2]. Достоинством метода является возможность вычисления указанных зависимостей в абсолютных величинах без дополнительных калибровок или нормировок экспериментальных спектров. В [3] показана возможность количественного анализа элементного состава для однородной композитной структуры $\text{Fe}_x\text{Si}_{1-x}$.

В данной работе приводится экспериментальное обоснование использования спектров сечения неупругого рассеяния электронов для определения толщины плёнки диоксида кремния на монокристаллической кремниевой подложке.

Методика эксперимента. В настоящее время разработаны технологии изготовления плёнок двуоксида кремния на поверхности чистого кремния с резкой границей раздела между плёнкой и подложкой [4]. Толщина плёнки SiO_2 может быть определена как подгоночный параметр при сравнении экспериментальных и расчётных спектров сечения неупругого рассеяния электронов в двухслойной системе. В этих целях нами разработан ряд компьютерных программ для моделирования сечения неупругого рассеяния электронов в слоистых системах на основе модифицированной модели диэлектрической функции среды [5]. За основу модели были взяты результаты работы [6], в которой предложен метод расчёта сечения неупругого рассеяния для электрона, нормально падающего из бесконечности на поверхность материала, затем упруго отражённого на некоторой глубине в противоположную сторону и при этом испытавшего за время своего движения внутри твёрдого тела одно неупругое столкновение. Данная модель опирается на теорию диэлектрического отклика, которая предполагает, что все свойства твёрдого тела, отвечающие за его взаимодействие с внешними электронами, описываются диэлектрической функцией этого же тела.

Комплексная диэлектрическая функция среды согласно модели Друде — Линдхарда может быть представлена в виде суперпозиции лоренцовых осцилляторов, каждый из которых имеет свою собственную частоту, силу и коэффициент затухания [7]. Число осцилляторов и их параметры обычно находятся из оптических данных или экспериментов по неупругому рассеянию электронов.

Вклад электронов, достигших разных глубин x внутри твёрдого тела, в итоговое однократное сечение неупругого рассеяния электронов с энергией E по потерям энергии $\hbar\omega$ вычисляется в соответствии с соотношением Пуассона:

$$\lambda K_{sc}(E, \hbar\omega) = \frac{1}{\lambda} \int_0^{\infty} x \exp(-x/\lambda) K_{eff}(E, \hbar\omega, x, \varepsilon) dx, \quad (2)$$

где K_{sc} — итоговое однократное сечение неупругого рассеяния электронов; K_{eff} — сечение неупругого рассеяния электронов, прошедших расстояние x ; ε — диэлектрическая функция материала.

Весовая функция $(x/\lambda) \exp(-x/\lambda)$ для разных значений λ и энергии электронов приведена на рис. 1. Сплошная кривая соответствует длине неупругого пробега в SiO_2 при энергии электронов 300 эВ (1,26 нм), штриховая кривая — в чистом кремнии при энергии 3000 эВ (5,8 нм) [8]. Основной вклад в сечение неупругого рассеяния отражённых электронов по потерям энергии вносят электроны, испытавшие потери на глубине от поверхности, равной половине длины свободного неупругого пробега электронов (вертикальная прямая). Максимум спектра сечения неупругого рассеяния электронов существенно меняется с энергией электронов, поэтому, изменяя энергию первичных электронов в спектроскопии сечения неупругого рассеяния электронов, можно получать информацию о распределении элементов по глубине.

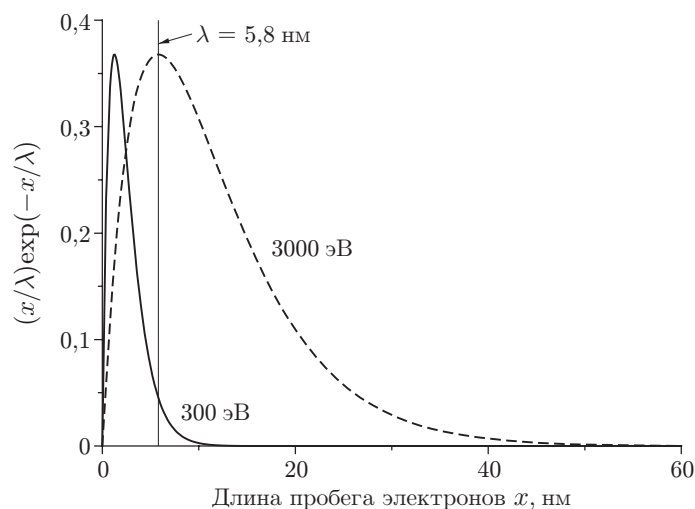


Рис. 1

Образец для экспериментов представлял собой промышленную кремниевую пластину ориентации (100) с естественным слоем окисла, толщина которого по результатам лазерной эллипсометрии составляла 1,8 нм. Для вычисления спектров сечения неупругого рассеяния электронов при различных энергиях первичных электронов (от 300 до 3000 эВ) регистрировались интегральные спектры потерь энергии отражённых электронов с помощью сверхвысоковакуумного электронного спектрометра SPECS. Были зарегистрированы также экспериментальные спектры при тех же самых энергиях первичных электронов для эталонных образцов чистого кремния и слоя окисла толщиной приблизительно 100 нм, полученного термическим способом на кремниевой подложке.

Экспериментальные результаты. На рис. 2 представлены спектры сечения неупругого рассеяния электронов эталонных образцов чистого кремния (сплошная и штриховая кривые) и диоксида кремния (штрихпунктирная и пунктирная кривые) для энергии первичных электронов 300 и 1900 эВ. Обращает на себя внимание то, что максимальные значения этих спектров существенно различаются, и это может быть использовано для количественного анализа вклада плёнки и подложки в спектры.

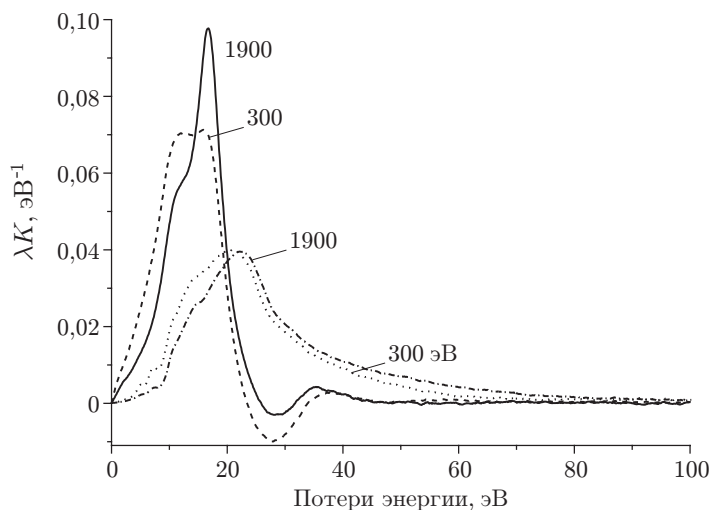


Рис. 2

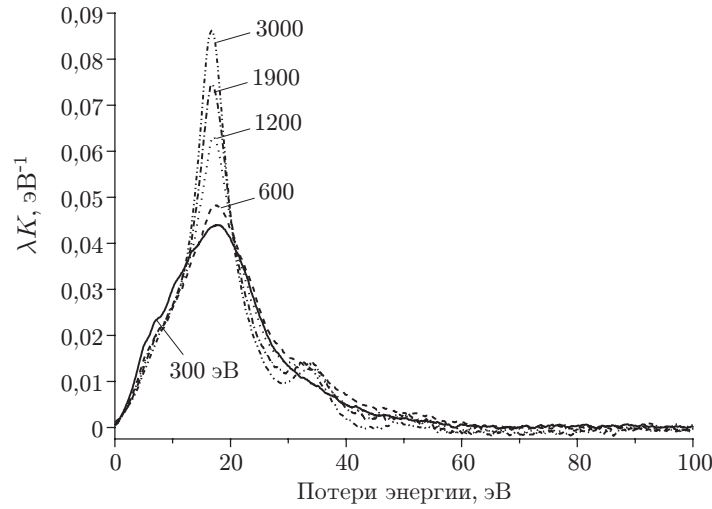


Рис. 3

На рис. 3 приведены экспериментальные спектры сечения неупругого рассеяния электронов для слоя окисла кремния толщиной 1,8 нм при разных энергиях первичных электронов после снятия поверхностного слоя примесей ионным травлением. Спектр при энергии первичных электронов 300 эВ незначительно отличается от спектра эталонного образца диоксида кремния (см. рис. 2). Это свидетельствует о том, что основной вклад в сечение неупругого рассеяния вносят электроны, испытавшие потери энергии в поверхностном слое окисла кремния. При увеличении энергии первичных электронов интенсивность спектров сечения неупругого рассеяния повышается, что указывает на возрастающий вклад подложки Si(100) в спектр.

В соответствии с предложенной моделью [5] вклад в сечение неупругого рассеяния электронов, рассеянных на глубине a от поверхности двухслойной структуры плёнка—подложка, определяется выражением

$$K_{sc}(E_0, \hbar\omega) = \frac{1}{\lambda_f^2} \int_0^d 2a \exp(-2a/\lambda_f) K_{eff}^f(E_0, \hbar\omega, a) da + \frac{1}{\lambda_s^2} \int_d^\infty 2a \exp(-2a/\lambda_s) K_{eff}^s(E_0, \hbar\omega, a) da. \quad (3)$$

Здесь d — толщина плёнки; K_{eff}^f и K_{eff}^s — эффективные сечения неупругого рассеяния, учитывающие вклады в итоговое сечение электронов, рассеянных на глубине a в материа-

Энергия электронов, эВ	λK_{\max} , эВ ⁻¹	Толщина SiO ₂ , нм
600	0,0482	1,80
1200	0,0635	2,00
1900	0,0744	2,25
3000	0,0862	2,35
Среднее значение		2,1 ± 0,1

ле плёнки или подложки, и рассчитанные в соответствии с формулой (15) в работе [6]; λ_f и λ_s — средняя длина неупругого пробега электронов в плёнке и подложке соответственно.

В таблице приведены результаты определения толщины слоя SiO₂ путём сравнения максимальных значений экспериментальных и расчётных спектров сечения неупругого рассеяния отражённых электронов при разных энергиях первичных электронов. Измерения толщины плёнки диоксида кремния, проведённые по предложенной методике и стандартным методом лазерной эллипсометрии [9], который обеспечивает точность определения толщины слоёв до 0,3 нм, согласуются между собой.

Заключение. В предлагаемой работе представлена методика определения толщины плёнки диоксида кремния на кремниевой подложке из данных компьютерного моделирования сечения неупругого рассеяния электронов в рамках диэлектрической теории и вычисления произведения средней длины неупругого пробега и сечения неупругого рассеяния электронов из экспериментальных спектров потерь энергии отражённых электронов. Полученные результаты хорошо согласуются с измерениями толщины плёнки диоксида стандартным методом лазерной эллипсометрии. Это свидетельствует о применимости использованной нами модели и принятых допущений при расчёте сечения неупругого рассеяния отражённых электронов в слоистых структурах.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Tougaard S., Chorkendorff I.** Differential inelastic electron scattering cross sections from experimental reflection electron-energy-loss spectra: Application to background removal in electron spectroscopy // *Phys. Rev. B.* 1987. **35**, N 13. P. 6570–6577.
2. **QUASES** — Software packages to characterize surface nano-structures by analysis of electron spectra. URL: <http://quases.com> (дата обращения: 10.02.2012).
3. **Паршин А. С., Александрова Г. А., Долбак А. Е. и др.** Спектроскопия характеристических потерь энергии отраженных электронов в тонких пленках системы Fe_xSi_{1-x} // *Письма в ЖТФ.* 2008. **34**, вып. 9. С. 41–48.
4. **Атомные структуры полупроводниковых систем** / Отв. ред. А. Л. Асеев. Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2006. 292 с.
5. **Куценков С. А., Паршин А. С., Александрова Г. А., Ходенков С. А.** Компьютерное моделирование сечения неупругого рассеяния в трехслойных структурах типа «пленка—интерфейс—подложка» // *Вестн. Сиб. гос. аэрокосмического ун-та им. академика М. Ф. Решетнева.* 2009. Вып. 4(25). С. 129–134.
6. **Yubero F., Tougaard S.** Model for quantitative analysis of reflection-electron-energy-loss spectra // *Phys. Rev. B.* 1992. **46**, N 4. P. 2486–2497.
7. **Raether H.** Excitation of Plasmons and Interband Transitions by Electrons. Berlin — Heidelberg — New York: Springer Verlag, 1980. Ser. Springer Tracts in Modern Physics. Vol. 88. 193 p.
8. **Tanuma S., Powell C. J., Penn D. R.** Calculations of electron inelastic mean free paths. V. Data for 14 organic compounds over the 50–2000 eV range // *Surf. Interface Anal.* 1994. **21**, Is. 3. P. 165–176.
9. **Швец В. А., Чикичев С. И., Прокопьев В. Ю. и др.** Эллипсометрический комплекс для исследования быстропротекающих высокотемпературных процессов // *Автометрия.* 2004. **40**, № 6. С. 61–69.

Поступила в редакцию 18 января 2012 г.