Uzbek Journal of Physics

Vol.21(№1) 2019 PP.9-13

ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ДИСПЕРСИИ ПЛАЗМЕННЫХ КОЛЕБАНИЙ В КРИСТАЛЛАХ Si И Ge

М.К. Рузибаева, З.А. Исаханов, Б.Е. Умирзаков, З.Э. Мухтаров

Институт ионно-плазменных и лазерных технологий АН РУз им.У.А.Арифова, Дурмон йули 33, Ташкент,Узбекистан; za.isakhanov@gmail.com

(Получена 11.09.2018)

Si(111) ва Ge(111) монокристалл намуналарида плазма тебранишларнинг дисперсияси назарий ва амалий ўрганилди. Ўрганилган материалларда дисперсиянинг кристаллографик йўналишларига боғлиқ эканлиги кўрсатилди.

В работе теоретически и экспериментально изучена дисперсия плазменных колебаний в монокристаллических образцах Si(111) и Ge(111). Показано, что дисперсия зависит от кристаллографической ориентации исследуемых материалов.

In this paper, a dispersion of plasma fluctuations has been theoretically and experimentally studied in monocrystal samples Si(111) and Ge(111). It is shown that the dispersion depends on crystallographic orientations of investigated materials.

Введение. Известно, что структура спектров характеристических потерь энергии электронов (ХПЭЭ) дает богатую информацию не только об электронной структуре кристаллов различных классов, но и об изменении этой структуры в результате воздействия внешних факторов. Современная интерпретация экспериментальных данных по спектроскопии ХПЭЭ основана на теоретических представлениях о свойствах микроскопической диэлектрической проницаемости (ДП) исследуемого вещества. В большинстве экспериментальных работ исследование дисперсии электронных возбуждений проводили для первичных электронов, прошедших через достаточно тонкие (400–1000 Å) пленки [1-3]. Вместе с тем, в литературе отсутствуют данные о наблюдении дисперсии электронных возбуждений (связанных с объемом вещества) при отражении первичных электронов от твердых тел.

В данной работе исследованы дисперсионные эффекты в спектрах ХПЭЭ, проявляющиеся в массивных образцах Si и Ge.

Методы исследования. Потери энергии электронами методом СХПЭЭ при отражении их от Si(111) и Ge(111) изучены при различных углах падения пучка электронов на поверхность. Измерения проводили при давлении остаточных газов не хуже 10^{-8} Торр. Поверхность образцов кремния и германия очищали длительным нагревом (4–5 ч) соответственно до температур 900–1100°С и 800–850°С при вакууме $(2–3)\times10^{-8}$ Торр и кратковременным нагревом (5–10 мин) непосредственно перед снятием спектров ближе к температуре плавления. Контроль за состоянием поверхности в процессе очистки осуществляли методом ЭОС. Энергетические спектры снимали до и после термической обработки. Энергию первичных электронов варьировали в пределах E_p=500–1600 эВ. Ширина

энергетического распределения на полувысоте для первичных электронов в зависимости от энергии составляла $E_{0.5}$=2–3 эВ. Угловая расходимость первичного пучка электронов ~2°. Ток на мишени ~10^{-7} А. Угол падения пучка электронов на поверхность образца (относительно нормали к поверхности) изменяли от φ_2=35° до φ_1=45°, а угол отражения от θ_2=55° до θ_1=45° соответственно. Энергетические спектры рассеянных электронов снимали анализатором типа Юза-Рожанского с разрешающей способностью $\Delta E/E$ = 0.2% и угловой апертурой 0.5° в автоматическом режиме записи.

Нами [1, 2] была усовершенствована программа вычисления абсолютной дисперсии плазмонов в германии и кремнии, так как структурный фактор и атомный формфактор существенно отличаются от благородных металлов. Кроме того, электронная структура этих полупроводников имеет свои особенности. Поэтому при вычислении дисперсии валентных электронов мы использовали следующее дисперсионное уравнение:

$$1-\frac{\omega_p^2}{\omega^2}+\frac{\omega_p^2}{m\omega^4}\sum_g S(g)\frac{(\vec{k}\vec{g})^2}{\left|\vec{k}\right|^2\left|\vec{g}\right|^2}\vec{g}^2\left|V(\vec{g})\right|^2\times\varepsilon_L(q,\omega)\left[1-\frac{\varepsilon(g,\omega)}{\varepsilon_L(g,0)}\right]=0. \qquad (1)$$

Здесь ω_p – плазменная частота. Для Si E_p=17.6 эВ, для Ge E_p=16.6 эВ соответственно, $\varepsilon(\hat{g}, 0)$ – статистическая диэлектрическая проницаемость, $\varepsilon(\check{g}, \omega)$ – высокочастотная диэлектрическая проницаемость [3, 4], g – вектор обратной решетки, $V(g)$ – псевдопотенциал для решетки типа алмаза. При расчете принято приближение $V(g) \leq E_F$ [5], k – волновой вектор, численные значения которого лежат в интервале от 0 до K_F, $S(g)$ – структурный фактор, который для кремния и германия имеет следующий вид:

$$S(\vec{g})=1+\exp[\pi i(k+l)]+\exp[\pi i(k+h)]+\exp[\pi i(h+l)]+\exp[\frac{\pi i}{2}(k+h+l)]$$
$$+\exp[\frac{\pi i}{2}(k+3h+3l)]+\exp[\frac{\pi i}{2}(3k+h+3l)]+\exp[\frac{\pi i}{2}(3k+3h+l)], \qquad (2)$$

здесь h, k, l – индексы Миллера.

Статическую диэлектрическую проницаемость $\varepsilon(\hat{g}, 0)$ вычисляли по формуле, приведенной в [6]:

$$\varepsilon(G,0)=1+\frac{0.9273}{k_F}(\varepsilon_{\mathrm{Al}}(q,0)-1). \qquad (3)$$

При вычислении корней дисперсионного уравнения (1) абсолютная ошибка составляла 0.01 эВ.

Результаты и их обсуждение. Как следует из анализа спектров ХПЭ электронов, модель свободных электронов Бома-Пайнса [7] и учет внутри- и межзонных переходов еще не в состоянии объяснить все особенности структуры спектров ХПЭЭ, в частности, анизотропию потерь энергии на плазменное колебание валентных электронов (ПКВЭ). По-видимому, это связано с пренебрежением реально имеющего место взаимодействия электронов с потенциальным полем кристалла, структурный фактор которого влияет на плотность электронов соответствующих кристаллографических направлений и плоскостей. Исходя из этого, следует, что учет данных факторов даст возможность объяснить наличие ориентационной зависимости потерь энергии на возбуждение ПКВЭ кристалла.

С этой целью для получения выражения ДП вещества выбран квантовомеханический метод. С точки зрения квантовой механики при наличии периодического потенциала в кристалле состояния электронов уже не имеют вид плоских волн, а описываются блоховскими функциями, вследствие чего вместо одной зависимости ДП $\varepsilon(q,\omega)$ появляется тензор ДП $\varepsilon_{qq'}(q,\omega)$. В результате решения уравнения ДП с учетом фактора, связанного с кристаллической структурой монокристалла кремния, с помощью теории возмущения было получено явное выражение для ДП, учитывающее ориентационную зависимость максимумов спектров ХПЭЭ. При этом предполагалось, что значение псевдопотенциала кристаллического поля мало по сравнению с энергией, передаваемой первичным электроном электронной подсистеме кристалла. Это допущение дало возможность получить следующее выражение для определения ДП:

$$\varepsilon(\vec{q},\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} - \frac{e^2 N}{m^2\omega^2}\frac{1}{\varepsilon(q,\omega)}\sum_{q'q}\left(\frac{\vec{q},\vec{k}}{kq}\right)^2[(\vec{q})V_n(\vec{q})], \qquad (4)$$

здесь $\varepsilon(\vec{q},\omega)$ – ДП свободных электронов с $\vec{q}$, $V_n(\vec{q})$ – Фурье-компонента кристаллического поля, $V_n(\vec{q}) = S(\vec{q})V(q)$, где $S(\vec{q})$ – структурный фактор.

Результаты вычислений, проведенных для нескольких значений волнового вектора (100), (110) и (111) кристаллических плоскостей Si и Ge, даны в таблице. Сопоставление значений потерь энергии первичных электронов на возбуждение ПКВЭ кристалла для двух граней (100) и (111), найденных в [2] экспериментально, удовлетворительно совпадают с расчетными данными таблицы.

Таблица. Потери энергии на возбуждение $\hbar\omega_v$ в Si и Ge.

(h k l)	Si (ΔE, эВ)		Ge (ΔE, эВ)	
	Расчет	Эксперимент	Расчет	Эксперимент
(100)	14.89	16.20	13.63	14.20
(110)	15.20		14.20	
(111)	18.23	17.30	17.30	17.50

На рис. 1 и 2 показаны потери энергии первичными электронами на возбуждение плазмонов в кремнии и германии. На этих рисунках значки обозначают экспериментальные значения [7-9], сплошные линии – расчетные значения потерь энергии. Из рис. 1 и 2 видно, что абсолютные дисперсии плазмонов для кремния и германия, вычисленные по различным кристаллографическим направлениям [100], [110], [111], отличаются друг от друга. При расчете потерь энергии по различным направлениям для индексов Миллера взяты только положительные значения.

Абсолютная дисперсия для Si и Ge, вычисленная для различных направлений в кристалле, равна:

Si[100] 19.8–17.6=2.2 эВ;
Si[110] 20.2–17.6=2.6 эВ;
Si[111] 20.6–17.6=3.0 эВ;
Ge[100] 18.7–16.6=2.1 эВ;
Ge[110] 19,6–16.6=3.0 эВ;
Ge[111] 20.3–16.6=3.7 эВ.

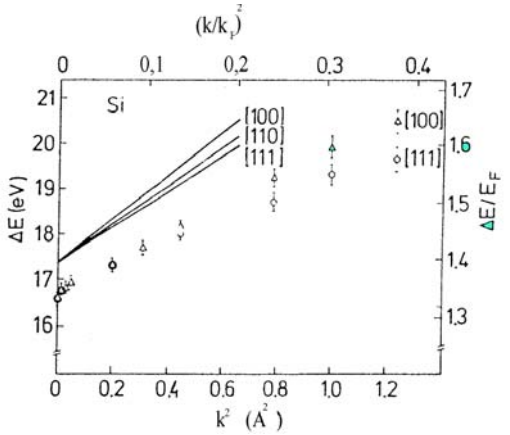


Рис. 1. Дисперсия потерь энергии электронов в кремнии (значки – экспериментальные значения; сплошные линии – расчетные).

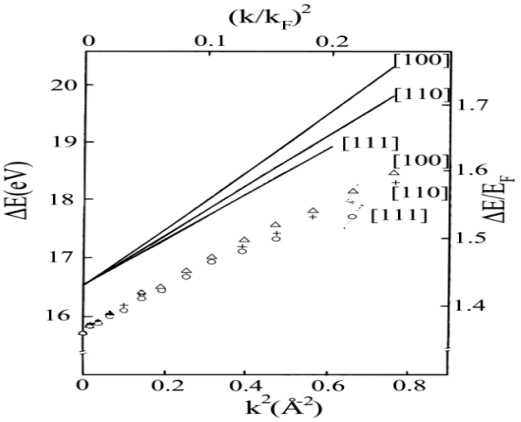


Рис. 2. Дисперсия потери энергии электронов в германии (значки – экспериментальные значения; сплошные линии – расчетные).

Абсолютная дисперсия составляет в среднем для кремния величину 2.6 эВ, для германия – 2.73 эВ, экспериментально полученные данные для кремния – 2.3 эВ, для германия – 2.64 эВ [10-13]. Проведенный анализ геометрической формы поверхности дисперсионной кривой кремния и германия на плоскости (ΔE, g) показывает, что она имеет вид эллипсоида вращения [14] с большой полуосью 3.3 эВ и малой осью 2.2 эВ для кремния; а для германия 3.7 и 2.1 эВ соответственно.

В спектроскопии ХПЭ электронов получаются спектры полных потерь энергии электронов в интервале энергии от ~3 до ~100 эВ. Для анализа и идентификации положения пиков в спектрах ХПЭ электронов получено аналитическое выражение для потерь энергии электронов, затрачиваемых на возбуждение плазменных колебаний, с применением флуктационно-корреляционной теоремы.

Выражение для полной потери энергии первичных электронов на возбуждение плазменных колебаний имеет следующий вид:

$$\frac{dE}{dl}=\frac{2e^2}{\pi v_0^2}\int \omega d\omega \ln\frac{k_c v_0}{\omega}\left[1+\frac{4\pi}{\hbar k^2}\sum\left|\rho(k,\omega\right|_{n,0}\left(\frac{1}{\omega-\omega_{n0}-i\delta}-\frac{1}{\omega+\omega_{n0}-i\delta}\right)\right], \qquad (5)$$

зависящий от электронной плотности вдоль разных кристаллографических направлений ρ(ω, ğ) исследуемого кристалла. Здесь v_0 – скорость первичных электронов, $\hbar k_c$ – максимальный импульс, передаваемый валентным электронам, E_{n0} – энергия перехода электрона из n-зоны в зону проводимости. Расчет полной потери энергии электронов по формуле (5) показывает, что вид спектра ХПЭЭ первичных электронов зависит от характера и величины плотности электронов в данном направлении и находится в удовлетворительном соответствии с экспериментально обнаруженным. Одним из особенностей проявления фактора дисперсии валентных электронов в кремнии и германии является увеличение ее значения в случаях, когда значение волнового вектора электрона приближается к волновому вектору k_F Ферми. Из рис. 1 и 2 следует, что константа дисперсии в

направлении <100> и для кремния, и для германия при значениях $k/k_F \leq 1$ быстро увеличивается.

Таким образом, теоретические и экспериментальные результаты показывают, что в случае монокристаллического Si и Ge с ростом k значения объемного плазменного колебания увеличивается на 2–3 эВ.

ЛИТЕРАТУРА

1. З.А. Исаханов, Т. Кадыров, А.С. Халматов, А.А. Абдуваитов. В материалах XXXXIII Межд. конф. по ФВЗЧК (МГУ, Москва, 28 мая 2013, с. 140).
2. А.А. Алиев, М.К. Рузибаева, З.А. Исаханов, Узбек. физич. журн. **7**, №3, 213 (2005).
3. А.А. Алиев, З.А. Исаханов, С. Худайбердиев, М.К. Рузибаева. В материалах XXIX Межд. конф. по ФВЗЧК (НИИЯФ, МГУ, Москва, 31 мая - 2 июня 2005, с. 47).
4. Н. Ашкрофт, Н. Мермин, ФТТ **2**, 141 (1979); 184 (1979).
5. В.Ю. Ирхин, Ю.П. Ирхин, Изд. Уральское отд. РАН РИСО, 38-47 (2004).
6. Р. Джаббарганов. Дисс. на соискание канд. физ. – мат. наук (Ташкент, Ин–т элекроники АН РУз, 1992), с. 144 – 150.
7. Н.П. Степанов, В.М. Грабов, ФТТ **45**, вып. 9, 1537 (2003).
8. T. Oguri, H. Ishioka, H. Fukuda, and M. Irako, Journal of the Physical Society of Japan **55**, №1, 416 (1986).
9. М.В. Жарников, В.Д. Горобченко, И.Л. Серпученко, ЖЭТФ **92**, вып.1, 228 (1987).
10. А.А. Алиев, М.К. Рузибаева, З.А. Исаханов, Поверхность, рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования №4, 79 (2000).
11. А.С. Паршин, Г.А. Александрова, А.В. Зюганова, Поверхность, рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования № 6, 32 (2007).
12. K. Sturm, Advance in Physics **31**, № 1, 27 (1982)..
13. A.A. Aliev, M.K. Ruzibaeva, A.E. Kim, Vacuum **57**, 243 (2000).
14. В.Я. Алешкин. Современная физика полупроводников, с. 75 – 81 (Нижний Новгород, 2013).